

UNIVERZITET U BEOGRADU

FIZIČKI FAKULTET

Ilija B. Simonović

**KINETIČKI I FLUIDNI MODELI
NERAVNOTEŽNOG TRANSPORTA
ELEKTRONA U GASOVIMA I
TEČNOSTIMA**

doktorska disertacija

Beograd, 2020.

UNIVERSITY OF BELGRADE

FACULTY OF PHYSICS

Ilija B. Simonović

**KINETIC AND FLUID MODELS OF
NON-EQUILIBRIUM TRANSPORT OF
ELECTRONS IN GASES AND LIQUIDS**

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2020.

Mentor:

- dr Saša Dujko, naučni savetnik,
Institut za fiziku, Univerzitet u Beogradu

Članovi komisije:

- akademik Zoran Lj. Petrović,
Srpska akademija nauka i umetnosti
- prof. dr Srđan Bukvić, redovni profesor,
Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu
- prof. dr Đorđe Spasojević, redovni profesor,
Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu

Datum odbrane: 30.09.2020.

Zahvalnica

Doktorska disertacija pod nazivom "Kinetički i fluidni modeli neravnotežnog transporta elektrona u gasovima i tečnostima" urađena je u Laboratoriji za neravnotežne procese i primenu plazme Instituta za fiziku u Beogradu, pod rukovodstvom naučnog savetnika dr Saše Dujka. Ova disertacija je najvećim delom realizovana u okviru projekta OI171037 Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije, čiji je rukovodilac bio akademik Zoran Lj. Petrović. Kako svaki naučni rad podrazumeva višestruku komunikaciju sa kolegama, profesorima i istaknutim stručnjacima u datoj oblasti, tako posebnu zahvalnost dugujem onima koji su doprineli tome da ova disertacija dobije konačni oblik. Najpre bih se zahvalio svom mentoru, dr Saši Dujku, na dragocenim savetima, podršci i nesebičnoj pomoći koje mi je pružao u svim fazama rada na ovoj doktorskoj disertaciji. Dr Saša Dujko pomogao mi je pri definisanju teme, razvoju metodoloških pristupa za istraživanje i tumačenju rezultata. Bez strpljenja i entuzijazma koje je uložio, ova disertacija i rezultati istraživanja koji su prikazani u njoj ne bi bili mogući.

Veliku zahvalnost dugujem i akademiku Zoranu Lj. Petroviću, vrhunskom stručnjaku iz oblasti istraživanja, na izuzetno korisnim sugestijama i podršci u radu. Posebno sam zahvalan dr Danku Bošnjakoviću na pomoći vezanoj za razvoj numeričkih kodova i korišćenje računarskih resursa, kao i na korisnim diskusijama i kolegijalnoj saradnji. Želeo bih da se zahvalim i koleginići Jasmini Atić na pomoći oko optimizacije korišćenih procedura za izračunavanje transportnih koeficijenata i na velikom broju korisnih sugestija. Zahvaljujem se kolegama sa James Cook Univerziteta u Australiji, prof. Ronald-u White-u, dr Peter-u Stokes-u i dr Greg-u Boyle-u na dragocenoj pomoći vezanoj za razumevanje teorije rasejanja elektrona kako u gasnoj, tako i u tečnoj fazi, kao i na velikom broju korisnih saveta i sugestija koji su omogućili implementaciju preseka za rasejanje elektrona u atomskim tečnostima visoke mobilnosti u naše numeričke kodove.

Na ovom mestu želim da se zahvalim svim kolegama iz Laboratorije za neravnotežne procese i primenu plazme Instituta za fiziku ne samo na korisnim i konstruktivnim diskusijama vezanim za naučni rad, već i na zajedničkom druženju tokom poslednjih nekoliko godina.

Na kraju bih želeo da se zahvalim svojim roditeljima na bezrezervnoj ljubavi i podršci koju su mi pružali tokom celokupnog školovanja, a naročito na njihovoj podršci tokom rada na doktorskoj tezi.

Kinetički i fluidni modeli neravnotežnog transporta elektrona u gasovima i tečnostima

Sažetak

Ova doktorska disertacija sadrži dve celine. U prvoj celini su proučavani transportni koeficijenti trećeg reda za rojeve naelektrisanih čestica u gasovima. Struktura transportnog tenzora trećeg reda u svim konfiguracijama električnog i magnetskog polja određena je primenom metoda grupnih projektora. Fizička interpretacija individualnih komponenti ovog tenzora je analizirana na osnovu fluks gradijentne relacije i generalisane difuzione jednačine. Zavisnost transportnih koeficijenata trećeg reda od redukovanoeg električnog polja i njihova osetljivost na elementarne sudarne procese ispitane su za veliki broj modelnih i realnih gasova u Monte Carlo simulacijama i na osnovu numeričkih rešenja Boltzmann-ove jednačine. U drugoj celini je razmatran transport elektrona u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu primenom Monte Carlo simulacija. Proučavani su uticaji efekata koherentnog rasejanja i različitih načina za aproksimaciju neelastičnih sudara u tečnoj fazi na izračunate vrednosti transportnih koeficijenata u ovim tečnostima. Poseban akcenat je stavljen na proučavanje strukturno indukovane negativne diferencijalne provodnosti u tečnom ksenonu na osnovu prostorno razloženih karakteristika roja i funkcija raspodele elektrona. Transportni koeficijenti za rojeve elektrona u atomskim tečnostima su iskorišćeni kao ulazni podaci u 1.5-dimenzionom klasičnom fluidnom modelu prvog reda i u fluidnom modelu zasnovanom na razvoju izvornog člana u jednačini kontinuiteta po gradijentima koncentracije. Ovi fluidni modeli upotrebljeni su za ispitivanje tranzicije lavina elektrona u strimere i propagacije negativnih strimera u atomskim tečnostima visoke mobilnosti. Pored toga, na osnovu ovih modela je razmatrano na koji način različit tretman neelastičnih sudara, priroda transportnih koeficijenata i rekombinacija kvazislobodnih elektrona i pozitivnih šupljina utiču na dinamiku i osobine strimerske plazme.

Ključne reči: Transportni koeficijenti trećeg reda, transport elektrona u gasovima i nepolarnim tečnostima, strimeri u nepolarnim tečnostima, Boltzmann-ova jednačina, fluidni model, Monte Carlo simulacije

Naučna oblast: Fizika

Uža naučna oblast: Fizika plazme

Kinetic and fluid models of non-equilibrium transport of electrons in gases and liquids

Abstract

The present doctoral dissertation contains two parts. The first part deals with the study of the third-order transport coefficients of charged-particle swarms in gases. The structure of the third-order transport tensor has been determined by employing the group projector technique in all configurations of electric and magnetic fields. The physical interpretation of the individual components of this tensor has been analyzed by employing the flux gradient relation and the generalized diffusion equation. The variation of the third-order transport coefficients with the reduced electric field and their sensitivity to elementary scattering processes have been determined for a wide range of model and real gases by using Monte Carlo simulations and the numerical solutions of the Boltzmann equation. The second part of this thesis deals with the transport of electrons in liquid argon, liquid krypton and liquid xenon by employing Monte Carlo simulations. The sensitivity of the calculated values of the transport properties in these liquids to coherent scattering effects and different approximations of inelastic scattering in the liquid phase has been investigated. A special emphasis has been placed on the study of the kinetic phenomenon of negative differential conductivity in liquid xenon by using spatially resolved swarm data and electron energy distribution functions. Transport coefficients of electron swarms in atomic liquids are used as input data in 1.5 dimensional classical first order fluid model, as well as in the fluid model which is based on the density gradient expansion of the source term in the equation of continuity. Both fluid models are employed in investigating the transition of electron avalanches into streamers and the propagation of negative streamers in high-mobility atomic liquids. In addition, the presented models are used for investigating how the dynamics and properties of the streamer plasma are influenced by the different treatment of inelastic collisions, nature of transport coefficients and the recombination of quasi-free electrons and positive holes.

Key words: Third-order transport coefficients, transport of electrons in gases and non-polar liquids, streamers in non-polar liquids, the Boltzmann equation, fluid model, Monte Carlo simulations

Scientific field: Physics

Scientific subfield: Physics of plasma

Sadržaj

1	Uvod	1
2	Teorija rojeva naelektrisanih čestica u gasovima i tečnostima	10
2.1	Uvod	10
2.2	Roj naelektrisanih čestica	10
2.3	Teorija rasejanja elektrona u gasovima i tečnostima	11
2.4	Hidrodinamički režim i definicija transportnih koeficijenata	15
2.5	Struktura transportnog tenzora trećeg reda	17
2.6	Zaključak	21
3	Metodi za izračunavanje transportnih koeficijenata	24
3.1	Uvod	24
3.2	Kinetička teorija za rešavanje Boltzmann-ove jednačine	24
3.3	Fluidne jednačine i teorija prenosa impulsa za rojeve elektrona u atomskim tečnostima	30
3.4	Monte Carlo simulacije rojeva elektrona u gasovima i atomskim tečnostima	41
3.4.1	Benčmark proračuni za Percus-Yevick-ovu modelnu tečnost	48
3.5	Zaključak	50
4	Transportni koeficijenti trećeg reda za naelektrisane čestice u modelnim gasovima	53
4.1	Uvod	53
4.2	Fizička interpretacija komponenti transportnog tenzora trećeg reda	54
4.3	Uslovi simulacija	61
4.4	Transportni koeficijenti trećeg reda za roj elektrona u Maxwell-ovom modelnom gasu	62
4.5	Transportni koeficijenti trećeg reda za roj naelektrisanih čestica u modelu krutih sfera	64
4.6	Transportni koeficijenti trećeg reda za roj elektrona u Reid-ovom modelnom gasu	67

4.7	Transportni koeficijenti trećeg reda za roj elektrona u Lucas-Saelee-evom modelnom gasu	73
4.8	Transportni koeficijenti trećeg reda za roj elektrona u modifikovanom Ness–Robsonovom modelnom gasu	78
4.8.1	Transportni koeficijenti trećeg reda za roj elektrona u modelu grejanja zahvatom	80
4.8.2	Transportni koeficijenti trećeg reda za roj elektrona u modelu hlađenja zahvatom	87
4.9	Zaključak	93
5	Transportni koeficijenti trećeg reda za elektrone i pozitronu u realnim gasovima	97
5.1	Uvod	97
5.2	Korelacija longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda i longitudinalne difuzije	97
5.3	Transportni koeficijenti trećeg reda za rojeve elektrona u atomskim gasovima bez Ramsauer-Townsend-ovog minimuma	99
5.3.1	Preliminarije	99
5.3.2	Rezultati	100
5.4	Transportni koeficijenti trećeg reda za rojeve elektrona u atomskim gasovima sa Ramsauer-Townsend-ovim minimumom	105
5.4.1	Preliminarije	105
5.4.2	Rezultati	105
5.5	Transportni koeficijenti trećeg reda za rojeve elektrona u molekularnim gasovima	112
5.5.1	Preliminarije	112
5.5.2	Rezultati	112
5.6	Praktična razmatranja značajna za eksperimentalno određivanje transportnih koeficijenata trećeg reda	124
5.7	Transportni koeficijenti trećeg reda za pozitronu u molekularnim gasovima . . .	128
5.7.1	Preliminarije	128
5.7.2	Rezultati	130
5.8	Zaključak	137

6	Transport elektrona u atomskim tečnostima visoke mobilnosti	140
6.1	Uvod	140
6.1.1	Motivacija za istraživanje	140
6.1.2	Postojanje provodne zone u tečnom Ar, tečnom Kr i tečnom Xe.	141
6.2	Transport elektrona u tečnom ksenonu	142
6.2.1	Korišćeni setovi preseka i uslovi simulacije za elektrone u tečnom ksenonu	142
6.2.2	Rezultati vezani za transport elektrona u tečnom ksenonu	147
6.3	Transport elektrona u tečnom argonu i tečnom kriptonu	158
6.3.1	Korišćeni preseki i uslovi simulacije za elektrone u tečnom argonu i tečnom kriptonu	158
6.3.2	Rezultati vezani za transport elektrona u tečnom argonu i tečnom kriptonu	160
6.4	Zaključak	169
7	Negativni strimeri u atomskim tečnostima visoke mobilnosti	172
7.1	Uvod	172
7.2	Fluidni modeli strimera	172
7.3	Negativni strimeri u tečnom ksenonu	176
7.4	Negativni strimeri u tečnom argonu i tečnom kriptonu	181
7.5	Zaključak	186
8	Zaključak	189
A	Metod grupnih projektora	200
B	EksPLICITNI IZRAZI ZA IZRAČUNAVANJE POJEDINAČNIH KOMPONENTI TRANSPORTNOG TENZORA TREĆEG REDA NA OSNOVU KINETIČKE TEORIJE ZA REŠAVANJE Boltzmann-ove jednačine	202
C	EksPLICITNI IZRAZI ZA IZRAČUNAVANJE TRANSPORTNIH KOEFICIJENATA TREĆEG REDA U Monte Carlo simulacijama	206
D	Literatura	209

1 Uvod

Ova doktorska disertacija sadrži u sebi dve globalne celine, koje su međusobno koherentne i komplementarne. Prva celina se odnosi na kinetičku teoriju neravnotežnog transporta rojeva elektrona i pozitrona u gasovima i tečnostima, sa posebnim akcentom na transportnim koeficijentima trećeg reda. Druga se globalna celina zasniva na transportu elektrona i propagaciji pozitivnih i negativnih strimera u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu.

Transportna teorija rojeva naelektrisanih čestica obezbeđuje vezu između mikroskopskih sudarnih procesa naelektrisanih čestica sa atomima ili molekulima pozadinske sredine i makroskopskih karakteristika sistema poput brzine drifta, difuzionog tenzora i brzinskih koeficijenata za reakcije [1–4]. Pored toga, transportna teorija omogućava izučavanje kompleksnih kinetičkih fenomena, kao što su grejanje i hlađenje difuzijom [5], grejanje i hlađenje zahvatom elektrona [6], anizotropna difuzija [7, 8], anomalna longitudinalna difuzija [9, 10], razlika između balk i fluks transportnih koeficijenata [11], pojačana provodnost elektrona [12], negativna diferencijalna provodnost [13, 14], negativna apsolutna mobilnost [16, 17, 22–24] i tranzijentna negativna difuzija [19, 20]. Ovi fenomeni se ne mogu objasniti na osnovu dinamike pojedinačne naelektrisane čestice. Uz to, transportna teorija obezbeđuje osnovu za modelovanje eksperimenata sa rojevima [31–33], neravnotežnih plazmi [26] i gasnih detektora čestica visokih energija [27–30].

Modelovanje neravnotežnih plazmi zahteva precizan opis dinamike naelektrisanih čestica i njihove interakcije sa pozadinskim fluidom, zbog toga što karakteristike neravnotežnih plazmi snažno zavise od prirode pozadinskog fluida i preseka za sudare naelektrisanih čestica sa neutralnim česticama pozadinske sredine [26]. Neravnotežne plazme se mogu podeliti na različite načine, imajući u vidu pritisak (plazma na niskom pritisku, plazma na atmosferskom pritisku, plazma u tečnosti) i sile koje se koriste za održavanje samog pražnjenja (kapacitivno spregnuta pražnjenja i induktivno spregnuta pražnjenja). Velika raznovrsnost tipova neravnotežnih plazmi omogućava njihovu primenu u raznim oblastima tehnologije i primenjene fizike. Neke od ovih oblasti su izvori svetlosti [34, 35], proizvodnja mikročipova [26], [36, 37], nanošenje tankih filmova na površine zarad promene njihovih karakteristika [38, 39], primena plazme u medicini [40, 41], i poljoprivredi [42, 43], pročišćavanje vode plazmom [44, 45]. Temeljno razumevanje neravnotežnih plazmi i elementarnih sudarnih procesa koji određuju njihove karakteristike omogućava dalji razvoj i optimizaciju pobrojanih primena. Ovo je veliki podstrek za razvoj teorijskih i eksperimentalnih metoda za izučavanje električnih gasnih pražnjenja i neravnotežnih plazmi.

Za opisivanje neravnotežnih plazmi koristi se širok spektar teorijskih metoda, koji se mogu podeliti na: a) kinetičke modele bazirane na rešavanju Boltzmann-ove jednačine [47], b) fluidne modele, c) čestične modele i d) hibridne modele. U ovoj doktorskoj disertaciji korišćeni su svi pobrojani modeli, izuzev hibridnih modela.

U fluidnim modelima se ansamblu čestica (poput elektrona, jona, ekscitovanih neutrala i radikala) reprezentuju makroskopskim fizičkim veličinama poput koncentracije čestica, rezultujućeg vektora impulsa, srednje energije i vektora energijskog fluksa [47–52]. Prostorne varijacije i vremenska evolucija ovih veličina određuju se na osnovu jednačina balansa ovih veličina, ili,

jednostavnije govoreći, na osnovu fluidnih jednačina. Oblik fluidnih jednačina može biti određen empirijski. Međutim, ove jednačine se mogu odrediti i na osnovu brzinskih momenata Boltzmann-ove jednačine [47, 52]. Na taj način se dobija beskonačna hijerarhija fluidnih jednačina, čije bi rešavanje bilo ekvivalentno rešavanju Boltzmann-ove jednačine. U praksi se ova hijerarhija odseca na nekoj jednačini konačnog reda, uz reprezentovanje određenog podskupa nepoznatih veličina aproksimativnim izrazima zasnovanim na fizičkim argumentima ili na momentima nižeg reda. Fluidne jednačine mogu biti spregnute sa Maxwell-ovim jednačinama i Poisson-ovom jednačinom da bi se opisao uticaj naelektrisanih čestica na rezultujuća električna i magnetska polja [47]. Jedna od prednosti fluidnih modela je to što rešavanje fluidnih jednačina zahteva manje računarskog vremena od primene čestičnih modela i numeričkog rešavanja Boltzmann-ove jednačine. Dodatnu prednost predstavljaju analitički izrazi, koji mogu pružiti uvid u veze između različitih fizičkih veličina. Međutim, fluidni modeli u sebi sadrže mnoge implicitne i eksplicitne aproksimacije [47], te su rezultati dobijeni na osnovu fluidnih modela znatno neprecizniji od rezultata čestičnih modela i metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine [47].

U čestičnim modelima se prate putanje naelektrisanih čestica koje se kreću u neutralnom pozadinskom fluidu pod uticajem spoljašnjeg električnog i spoljašnjeg magnetskog polja [26, 47, 53–56]. Sudari naelektrisanih čestica sa atomima ili molekulima pozadinskog fluida reprezentuju se uz pomoć slučajnih brojeva. Zbog toga se čestični modeli zovu i Monte Carlo modeli [26, 47]. Kada se čestični modeli koriste za ispitivanje sistema u kojima je koncentracija naelektrisanih čestica dovoljno mala da se njihove međusobne interakcije kao i njihov uticaj na rezultujuće električno polje mogu u potpunosti zanemariti, u simulacijama se kretanje svake naelektrisane čestice može pratiti nezavisno od ostalih naelektrisanih čestica u sistemu [26, 47]. Međutim, kada se modeluju sistemi u kojima je koncentracija naelektrisanih čestica dovoljno velika da se njihov uticaj na rezultujuće električno polje ne može zanemariti, neophodno je da kretanje naelektrisanih čestica i dinamika rezultujućeg električnog polja budu računati samousaglašeno. Ovo se obično postiže korišćenjem komplikovane tehnike čestice u ćeliji (eng. *particle in cell technique*) [26, 47, 53–56]. U okviru ove tehnike veliki se broj pojedinačnih čestica reprezentuje znatno manjim brojem superčestica. Pritom, broj superčestica koje se prate u simulaciji mora biti dovoljno veliki da obezbedi pouzdane rezultate [26]. Korišćenje ove reprezentacije je neophodno kada je broj naelektrisanih čestica previše veliki da bi praćenje svake od njih pojedinačno bilo praktično izvodljivo. Na osnovu kretanja superčestica mogu se odrediti makroskopske fizičke veličine, poput koncentracije naelektrisanih čestica, njihovog fluksa i njihove srednje energije. Jednu od najvećih prednosti čestičnih modela predstavlja njihova primenljivost u širokom opsegu uslova simulacija [26]. Pored toga, čestični modeli najčešće daju preciznije rezultate od fluidnih modela, ali su, s druge strane, računarski jako zahtevni i za njihovu implementaciju obično je potrebna velika količina računarskog vremena.

Fluidni i čestični modeli mogu se spojiti u objedinjene hibridne modele [47]. U hibridnim modelima se za praćenje brzih neravnotežnih elektrona i prostornih raspodela jonizacije koristi čestični model, dok se niskoenergijske čestice opisuju fluidnim jednačinama [47, 57–61]. Cilj ovih modela je da obezbede kompletan konzistentan opis sistema uz malu cenu računarskog vremena.

Međutim, njihov razvoj zahteva uspešno povezivanje simulacija, čija je uloga opisivanje brzih neravnotežnih čestica, sa fluidnim jednačinama, kojima se opisuje ostatak sistema. Ovo uopšte nije jednostavan zadatak, te se hibridni modeli još uvek nalaze u fazi razvoja.

Metodi za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine predstavljaju teorijske pristupe koji mogu biti korišćeni za opisivanje balka plazme i prielektrodnih oblasti [62–65]. Ovi metodi daju jako pouzdane rezultate, a naročito su efikasni u slučaju kada su koncentracije naelektrisanih čestica dovoljno niske da se uticaj prostornog naelektrisanja može zanemariti [47]. No, oni se mogu koristiti i u slučaju u kome se uticaj naelektrisanih čestica na rezultujuće električno i rezultujuće magnetsko polje ne može zanemariti ako je Boltzmann-ova jednačina na adekvatan način spregnuta sa Maxwell-ovim jednačinama.

Boltzmann-ovu jednačinu formulisao je Ludwig Eduard Boltzmann ne bi li opisao dinamiku idealnog gasa, čije čestice interaguju samo putem elastičnih sudara [66]. Ovo je složena integro-diferencijalna jednačina u kojoj kao nepoznata funkcija figuriše funkcija raspodele u faznom prostoru. Iako je Boltzmann-ova jednačina zadržala svoj prvobitni oblik, njena primenljivost je proširena na rojeve naelektrisanih čestica u gasovima [47,67] i tečnostima [68–70] koje učestvuju u elastičnim, neelastičnim i nekonzervativnim sudarima sa česticama pozadinskog fluida. Uz to su pristupi u rešavanju Boltzmann-ove jednačine značajno uznapredovali u poslednjih nekoliko decenija.

Teorijski metodi za rešavanje Boltzmann-ove jednačine mogu se podeliti u dve grupe [71]. Prvu čine metodi integracije, u kojima se Boltzmann-ova jednačina rešava direktnom numeričkom integracijom [71–75], dok drugu grupu čine metodi razvoja, u kojima se funkcija raspodele u faznom prostoru razvija po skupu bazisnih funkcija, nakon čega se Boltzmann-ova jednačina rešava po koeficijentima u razvoju [47,71,76]. Prvi rigorozni metod razvoja je metod Chapman-Enskog, koji su detaljno opisali Chapman i Cowling (1939) [76]. U ovom se metodi funkcija raspodele razvija u faznom prostoru oko Maxwellian-a na temperaturi pozadinskog gasa. S obzirom na to, ovaj je metod primenjiv samo na jako niskim poljima, na kojima energije naelektrisanih čestica ne odstupaju značajno od termalnih energija [77]. Zato je bilo neophodno razviti složenije metode za rešavanje Boltzmann-ove jednačine u uslovima koji značajnije odstupaju od termodinamičke ravnoteže. Istorijski razvoj transportne teorije za elektrone je predstavljen u knjizi Huxley-a i Crompton-a [3], dok je razvoj transportne teorije za jone prikazan u knjizi Mason-a i McDaniel-a [77].

Jedan od najčešćih metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine, koji se nalazi u osnovi klasične teorije transporta elektrona u gasovima, jeste metod aproksimacije dva člana (eng. *two term approximation*), koji je razvio Lorentz [78]. U ovom metodi se funkcija raspodele u faznom prostoru reprezentuje kao zbir dva člana, od kojih je prvi izotropan u brzinskom prostoru, dok drugi član opisuje odstupanje od izotropije u prostoru brzina. Ova aproksimacija je validna za lake naelektrisane čestice kakvi su elektroni i pozitroni u energijskoj oblasti u kojoj se neelastični sudari mogu zanemariti [62,79]. Aproksimacija dva člana se pak ne može primeniti u uslovima u kojima neelastični sudari proizvode snažnu anizotropiju u brzinskom prostoru [62,79]. U opsegu polja u kome postoji izražena anizotropija u brzinskom prostoru mora se koristiti

momentni metod više članova (eng. *multi term method*), u kome se zavisnost funkcije raspodele u faznom prostoru od brzinskih koordinata reprezentuje razvojem u red po sfernim harmonicima u brzinskom prostoru – pritom se ovaj red odseca na nekom konačnom članu nakon postizanja konvergencije rezultata [47]. Razvoj metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine trajao je više decenija. Wilhem i Winkler su razvili aproksimaciju tri člana u stacionarnom i prostorno homogenom slučaju [80]. Razvoj funkcije raspodele u faznom prostoru u četiri člana razmatrali su Cavalleri (1981) [81] i Braglia i saradnici (1984) [82]. Prvi precizan i sistematičan metod više članova, upotrebljiv za proizvoljnu vrednost električnog polja i proizvoljan skup konzervativnih sudarnih procesa, razvili su Lin, Robson i Mason [83]. Njega su Ness i Robson naknadno proširili na slučaj nekonzervativnog transporta naelektrisanih čestica u neutralnim gasovima pod uticajem električnog polja [62,84,85]. U okviru ove teorije se prostorna zavisnost funkcije raspodele u faznom prostoru reprezentuje primenom hidrodinamičke aproksimacije [86]. Hidrodinamička aproksimacija podrazumeva da je roj dostigao stanje u kome se zavisnost funkcije raspodele u faznom prostoru od koordinata u konfiguracionom prostoru i eksplicitna zavisnost od vremena mogu izraziti preko linearnih funkcionala koncentracije naelektrisanih čestica [84,85,89,90]. Ekstenziju hidrodinamičke aproksimacije na slučaj vremenski promenljivih uslova razmatrali su mnogi autori [86,90–97]. Ness je proširio metodu više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine na slučaj rojeva naelektrisanih čestica koje se kreću pod uticajem električnog i magnetskog polja koja su međusobno ortogonalna [87,88,98]. Dodatnu ekstenziju metoda više članova na konfiguraciju u kojoj električno i magnetsko polje zaklapaju proizvoljan ugao razvio je White [89]. Dujko dalje generalizuje metodu više članova na nekonzervativni transport naelektrisanih čestica: a) u prisustvu vremenski zavisnog električnog polja i vremenski zavisnog magnetskog polja, pri čemu ova polja zaklapaju proizvoljan ugao a između njih postoji proizvoljna fazna razlika, ukoliko su polja harmonijska, b) u slučaju proizvoljne vremenske zavisnosti električnog i magnetskog polja [47,67].

Iako je metodologija za istraživanje transporta naelektrisanih čestica u gasovima sazrela i dostigla visok nivo sofisticiranosti, odgovarajuća metodologija za transport u tečnostima i dalje je u fazi razvoja. Ovo je pre svega posledica velike složenosti interakcije naelektrisanih čestica sa pozadinskom tečnošću. Naime, u tačnoj fazi je rastojanje između susednih atoma (ili molekula) znatno manje od rastojanja na kome se njihova interakcija sa naelektrisanim česticama može zanemariti. Zbog toga je potencijal u kome se rasejava naelektrisana čestica određen velikim brojem atoma (ili molekula) pozadinske sredine [68,99,100]. Pored toga, talasna funkcija lakih naelektrisanih čestica (poput elektrona i pozitrona) zahvata više susednih atoma (ili molekula) u tečnosti. Zato se rasejanje elektrona i pozitrona u tačnoj fazi mora reprezentovati kao superpozicija pojedinačnih rasejanja na više susednih čestica pozadinske sredine [68,100]. To za posledicu ima snažnu zavisnost dinamike rasejanja lakih naelektrisanih čestica u tačnoj fazi od prostornih korelacija atoma (ili molekula) u tečnosti. Konačno, naelektrisane čestice mogu biti zarobljene u fluktuacijama gustine ili solvatirane u klasterima polarnih molekula [101].

Zbog velike složenosti interakcije naelektrisanih čestica sa pozadinskom tečnošću, efekti koji menjaju dinamiku rasejanja u tačnoj fazi u odnosu na gasnu fazu zanemareni su u mnogim ranijim pokušajima modelovanja transporta naelektrisanih čestica u tečnostima – obično je tačna

faza modelovana kao gasna faza sa povećanom gustinom. Jedan od prvih egzaktnih pristupa rasejanju u tečnoj fazi razvio je Van Hove, koji je primenio vremenski zavisnu generalizaciju parne korelacione funkcije na rasejanje neutrona u tečnostima i gustim gasovima u okviru Born-ove aproksimacije [99]. Lekner je uveo *ab initio* metod za određivanje efektivnog potencijala i odgovarajućeg efektivnog preseka za rasejanje elektrona na fokus atomu u tečnoj fazi [100]. Ovaj efektivni potencijal se određuje na osnovu potencijala pojedinačnog atoma i parne korelacione funkcije tečnosti. Pored toga, Cohen i Lekner su pokazali da se koherentno elastično rasejanje može predstaviti pomoću efektivnog preseka za rasejanje elektrona u tečnoj fazi i statičkog strukturnog faktora pozadinske tečnosti [70]. Atrazhev i saradnici su pojednostavili Lekner-ove argumente i pokazali da su efektivni preseki za elastično rasejanje u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu konstantni za niskoenergijske elektrone [102, 103]. Nakon toga, primenili su metod parcijalnih talasa kako bi odredili efektivne preseke za rasejanje elektrona u tečnom argonu i tečnom ksenonu [104–107]. Na osnovu ovih rezultata, oni su izračunali mobilnost, srednju energiju i karakterističnu energiju elektrona u tečnom argonu i tečnom ksenonu u okviru Cohen-Lekner-ove teorije [106, 107]. Sakai i saradnici su takođe proučavali transport elektrona u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu, koristeći Cohen-Lekner-ovu teoriju [108, 109]. U tom poduhvatu empirijski su modifikovali preseke za rasejanje elektrona ne bi li popravili slaganje između teorijskih i eksperimentalnih vrednosti brzine drifta. Uz to, pokazali su da se saturacija brzine drifta na visokim vrednostima električnog polja, koja je uočena u eksperimentima, može adekvatno opisati ako se u set preseka uključi efektivni presek za vibracionu ekscitaciju. Ova vibraciona ekscitacija odgovara promeni relativnog kretanja pojedinačnih atoma unutar istog atomskog klastera. Boyle i saradnici odredili su diferencijalne preseke za rasejanje elektrona u tečnom argonu i tečnom ksenonu koristeći Dirac-Fock-ovu jednačinu rasejanja [68, 69]. Proširili su Lekner-ovu teoriju, uzimajući u obzir multipolnu polarizabilnost i nelokalan opis izmenske interakcije [68, 69], a onda su izračunali transportne koeficijente za elektrone u tečnom argonu i tečnom ksenonu, koristeći ove preseke i metod više članova za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

Uprkos tome što je većina teorijskih istraživanja vezanih za transport elektrona u atomskim tečnostima ograničena na energijsku oblast koja je ispod praga za ekscitacije, nekoliko autora je razmatralo transport elektrona u tečnim plemenitim gasovima na višim električnim poljima, na kojima se neelastični sudari i jonizacija ne mogu zanemariti. Atrazhev i saradnici su ispitivali uticaj efekata koji su zavisni od gustine na prvi Townsend-ov koeficijent za jonizaciju u tečnom ksenonu [110]. Oni su napravili dve procene prvog Townsend-ovog koeficijenta, koje su zasnovane na dva različita načina reprezentovanja energijskih gubitaka elektrona u elektronskim ekscitacijama. Kunhardt je proučavao transport elektrona u tečnom argonu primenom Monte Carlo simulacija [111] u kojima je interakcija elektrona sa pozadinskom tečnošću opisana u okviru Van Hove-ove teorije [99]. Isti metod koristili su Jones i Kunhardt za proučavanje transporta elektrona u tečnom ksenonu [112]. Grupa sa Univerziteta Hokaido ispitala je jonizaciju u tečnom ksenonu, kao i zahvat elektrona u smešama tečnog argona i elektronegativnih nečistoća poput O_2 , SF_6 i N_2O [113]. Boyle i saradnici su razvili model zasnovan na fluidnim jednačinama za pozitronu i elektrone u tečnostima, koristeći preseke iz gasne faze i statički strukturni faktor

tečnosti [114–117].

Postoji znatno manji broj teorijskih istraživanja u kojima se modeluje propagacija strimera u tečnostima od odgovarajućih istraživanja u gasnoj fazi. Naidis i saradnici su ispitivali strimere u tečnim hidrokarbonatima, koristeći jednoipodimenzioni fluidni model prvog reda [118, 119]. U okviru ovog pravca istraživanja oni su razmatrali uticaj formiranja gasnog filameta i njegovog daljeg širenja na dinamiku propagacije strimera u tečnoj fazi. Babaeva i Naidis bavili su se dinamikom strimera u tečnom argonu i tečnom ksenonu primenom numeričkih modela [120–122]. Oni su pratili formiranje pozitivnog strimera u snažnom nehomogenom polju i njegovu kasniju propagaciju u slabom homogenom polju [120–122]. U njihovim radovima je pokazano kako je dinamika propagacije strimera u tečnoj fazi jako osetljiva na rekombinaciju elektrona i pozitivnih jona [120–122]. Pored toga, ustanovljeno je da izračunate vrednosti brzine strimera imaju isti red veličine kao izmerena brzina probojnog talasa u tečnom argonu [120–122]. Propagacija strimera u gasnim mehurovima je ispitivana u okviru brojnih eksperimenata i numeričkih proračuna [123, 124] čija je zajednička karakteristika korišćenje aproksimativnih vrednosti transportnih koeficijenata u tečnoj fazi, bez uzimanja u obzir svih efekata koji utiču na dinamiku rasejanja naelektrisanih čestica u tečnosti.

Jedna od centralnih tema u ovoj disertaciji je ispitivanje transportnih koeficijenata trećeg reda u gasovima i atomskim tečnostima. Iako se u literaturi može naći velika količina informacija vezanih za transportne koeficijente nižeg reda, poput brzine drifta, difuzionog tenzora i brzinskih koeficijenata za reakcije za elektrone, jone i pozitrone, jako malo se zna o transportnim koeficijentima višeg reda [31, 125]. Ovo je posledica toga što je transportne koeficijente višeg reda teško izmeriti u eksperimentima i teško izračunati na osnovu teorijskih metoda. Eksperimenti sa rojevima su prilagođeni uslovima u kojima se transportni koeficijenti nižeg reda mogu izmeriti sa što većom tačnošću. Međutim, u tim uslovima je doprinos transportnih koeficijenata višeg reda prostornim profilima naelektrisanih čestica zanemariv [126, 127]. Prvi pokušaj merenja transportnih koeficijenata trećeg reda načinili su Hunter i saradnici [128, 129] u eksperimentu sa vremenom preleta (eng. *time-of-flight experiment*) u čistom vodoniku. Ipak, pouzdanost rezultata u vezi sa transportnim koeficijentima višeg reda bila je dovedena u pitanje, te ovi rezultati nikada nisu publikovani. Drugi pokušaj merenja transportnih koeficijenata trećeg reda vezuje se za rad Denman-a i Schile-a [130]. Rezultati ovog eksperimenta takođe su bili nepouzdati zbog nehidrodinamičke zavisnosti izmerenih transportnih koeficijenata od pritiska [126, 130]. Kasnije je objašnjeno da je gubitak visokoenergijskih elektrona na bočnim zidovima suda usled velike dužine komore koja je korišćena u eksperimentu i intenzivne bočne difuzije doveo do promene energijske raspodele elektrona u toku trajanja eksperimenta [126]. Uprkos ovome, više autora je procenilo da transportni koeficijenti trećeg reda mogu biti izmereni u savremenim eksperimentima [126, 131].

Transportni koeficijenti trećeg reda mogu imati više značajnih primena. Naime, pokazano je da su transportni koeficijenti višeg reda potrebni pri konverziji hidrodinamičkih transportnih koeficijenata u transportne podatke koji se mere u stacionarnom Townsend-ovom eksperimentu (eng. *steady state Townsend experiment*) [31] i u eksperimentu sa spektrima pristizućih čestica

(eng. *arrival time spectra experiment*) [32]. Pored toga, poznato je da su transportni koeficijenti trećeg reda osetljiviji na energijsku zavisnost preseka za elementarne sudarne procese od transportnih koeficijenata nižeg reda [126,132]. Ovo ukazuje da bi transportni koeficijenti trećeg reda mogli da doprinesu poboljšanju procedure za određivanje setova preseka za sudare naelektrisanih čestica sa atomima ili molekulima na osnovu metode rojeva (eng. *swarm analysis*) ako bi ovi transportni koeficijenti bili računati i mereni sa dovoljnom preciznošću. Uz to, transportni koeficijenti višeg reda su potrebni za bolji opis prostornih raspodela rojeva naelektrisanih čestica u prisustvu električnog polja. Zapravo, u ranijim Monte Carlo istraživanjima [29,133] je pokazano da prostorne raspodele naelektrisanih čestica odstupaju od idealnog Gaussian-a, koji bi reprezentovao prostornu raspodelu roja u uslovima u kojima su transportni koeficijenti višeg reda zanemarljivi. Pored toga se oblici profila roja koji su primećeni u nekim simulacijama na kvalitativnom nivou dobro slažu sa aproksimativnim rešenjem generalisane difuzione jednačine u kojoj je doprinos transportnog tenzora trećeg reda uzet u obzir [29]. Još jedna motivacija za izučavanje transportnih koeficijenata trećeg reda je to što numerički proračuni komponenti transportnog tenzora trećeg reda u modelnim gasovima mogu da se koriste za proveru novih kompjuterskih kodova koji su namenjeni za proračun transportnih koeficijenata naelektrisanih čestica u gasovima ili tečnostima, imajući u vidu njihovu veliku osetljivost na energijske promene preseka.

Whealton i Mason su prvi odredili strukturu transportnog tenzora trećeg reda u odsustvu magnetskog polja [134]. Tom prilikom ustanovljeno je da ovaj tenzor ima sedam nenultih elemenata od kojih su tri međusobno nezavisna. Ovi autori su takođe pokazali da su u odsustvu električnog polja sve komponente transportnog tenzora trećeg reda jednake nuli. Izračunali su longitudinalnu komponentu transportnog tenzora trećeg reda za elektrone u Maxwell-ovom modelnom gasu, koristeći analitičko rešenje Boltzmann-ove jednačine. Penetrante i Bardsley [126] su proučavali transportne koeficijente trećeg reda za elektrone u helijumu, neonu i argonu primenom Monte Carlo simulacija i numeričkog rešavanja Boltzmann-ove jednačine u okviru aproksimacije dva člana. Oni su se u svojim proračunima ograničili na niske vrednosti redukovnog električnog polja na kojima elektroni učestvuju samo u elastičnim sudarima sa atomima pozadinskog gasa. Izračunali su spektre pristizućih čestica (eng. *arrival time spectra*) u tipičnim uslovima drift cevi (eng. *drift tube*) s ciljem procene da li se transportni koeficijenti trećeg reda mogu izmeriti [126]. Njihov zaključak svodi se na to da transportni koeficijenti trećeg reda mogu biti izmereni u savremenim eksperimentima. Sličnu proceduru za određivanje transportnih koeficijenata nižeg i višeg reda na osnovu spektra pristizućih čestica ranije su predložili Kondo i Tagashira [32]. Koutselos je proučavao transportne koeficijente trećeg reda za K^+ jone u argonu primenom molekularno dinamičkih simulacija [135,136], nakon čega je primenio trotemperaturski razvoj Boltzmann-ove jednačine da bi odredio transportne koeficijente trećeg reda za Li^+ jone u argonu i helijumu i K^+ jone u argonu [137,138]. Na osnovu ovog metoda on je ispitao uticaj odnosa masa jona i neutralnih čestica na transportne koeficijente trećeg reda u R^{-8} potencijalu u limesu hladnog gasa. Vrhovac i saradnici su odredili generalisane Einstein-ove jednačine za transportni koeficijent n -tog reda u okviru teorije prenosa impulsa (eng. *momentum transfer theory*) [132,139]. U ovim jednačinama se transportni koeficijent n -

tog reda izražava preko $(n - 1)$ -og izvoda brzine drifta i n -tog izvoda brzinskog koeficijenta za reakcije. Na osnovu ove teorije i odgovarajućeg kompjuterskog koda Vrhovac i saradnici su odredili transportne koeficijente trećeg reda za elektrone u helijumu, neonu i argonu na niskim vrednostima redukovano električnog polja [132, 139]. Kawaguchi i saradnici su odredili vezu između longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda i α -parametara (koeficijenta koji se mere u eksperimentima sa spektrima pristizućih čestica) primenom teorije koju su razvili Kondo i Tagashira [131]. Njihovi rezultati ukazuju da se transportni koeficijenti trećeg reda mogu izmeriti u savremenim eksperimentima sa spektrima pristizućih čestica. Kawaguchi i saradnici su izračunali longitudinalnu komponentu transportnog tenzora trećeg reda i α -parametre za elektrone u CH_4 i SF_6 primenom Monte Carlo simulacija.

U poglavlju 2 biće predstavljena transportna teorija na kojoj su zasnovani proračuni urađeni u okviru ove disertacije. Na početku ovog poglavlja biće definisan roj naelektrisanih čestica. Zatim će biti prikazane osnove teorije rasejanja elektrona u gasovima i tečnostima. Nakon toga će biti date definicije hidrodinamičkog režima i dve različite familije transportnih koeficijenata. Na kraju ovog poglavlja predstavimo rezultate istraživanja u vidu strukture vektorskih i tenzorskih veličina, za različite konfiguracije električnog i magnetskog polja, a poseban akcenat biće stavljen na strukturu transportnog tenzora trećeg reda.

Poglavlje 3 donosi prikaz metoda koji su korišćeni za izračunavanje transportnih veličina u okviru ove disertacije. Prvo navodimo osnovne elemente kinetičke teorije za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine. Potom su razmatrani fluidni modeli i teorija prenosa impulsa za rojeve naelektrisanih čestica u nepolarnim tečnostima. Nakon toga biće predstavljen Monte Carlo metod, kao i najvažniji elementi odgovarajućeg kompjuterskog koda koji je korišćen u ovoj disertaciji.

U poglavlju 4 detaljno je analiziran fizički smisao transportnih koeficijenata trećeg reda. Slede rezultati benčmark proračuna ovih transportnih koeficijenata za naelektrisane čestice u modelnim gasovima, pri čemu će analizi biti podvrgnut uticaj elastičnih, neelastičnih i nekonzervativnih sudara, kao i odnos masa naelektrisanih čestica roja i neutralnih čestica pozadinske sredine, na transportne koeficijente trećeg reda.

U poglavlju 5 biće prikazani rezultati proračuna transportnih koeficijenata trećeg reda za elektrone u realnim gasovima. Prvo se diskutuje o korelaciji između longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda i longitudinalne komponente difuzionog tenzora. Zatim će biti razmatrani transportni koeficijenti trećeg reda za elektrone u atomskim i molekularnim gasovima. Nakon toga ispituju se ovi transportni koeficijenti za pozitronu u molekularnim gasovima.

U narednom, 6. poglavlju dati su proračuni transportnih koeficijenata za elektrone u atomskim tečnostima velike mobilnosti. Na početku obrazložimo motivacione faktore za ispitivanje transporta elektrona u tečnoj fazi. Nakon toga raspravlja se o prisustvu provodne zone u atomskim tečnostima velike mobilnosti, te se izlažu setovi preseka za rasejanje elektrona u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu (koji su korišćeni u izradi ove disertacije), kao i rezultati proračuna transportnih koeficijenata i drugih transportnih veličina u ovim tečnostima.

Poglavlje 7 sadrži prikaz fluidnih modela strimera u tečnoj fazi, kao i njihove numeričke implementacije, korišćene u ovoj disertaciji. Nakon toga, u ovom poglavlju biće predloženi rezultati simulacija koje prate formiranje i propagaciju negativnih strimera u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu u prisustvu stacionarnog i prostorno homogenog spoljašnjeg električnog polja.

Osmo, i poslednje, poglavlje sumira ključne rezultate i originalne doprinose ove disertacije. Na ovom mestu biće naznačeni i novi pravci budućih istraživanja. U dodacima A, B i C prikazaćemo metod grupnih projektora, eksplicitne izraze za izračunavanje transportnih koeficijenata trećeg reda na osnovu numeričkih rešenja Boltzmann-ove jednačine, kao i eksplicitne izraze za izračunavanje ovih transportnih koeficijenata u kompjuterskom kodu baziranom na Monte Carlo metodi.

2 Teorija rojeva naelektrisanih čestica u gasovima i tečnostima

2.1 Uvod

U ovom poglavlju predstavljeni su osnovni elementi teorije uzete za osnovu ove disertacije. U potpoglavlju 2.2 definisan je roj naelektrisanih čestica. U potpoglavlju 2.3 prikazana je teorija rasejanja naelektrisanih čestica u gasovima i tečnostima, na osnovu koje su Boyle i saradnici [68, 69] odredili preseke za elastično rasejanje niskoenergijskih elektrona u tečnom argonu i tečnom ksenonu, koji su korišćeni u izradi ove disertacije. Ovu teoriju razvili su McEachran i saradnici [140] i Boyle i saradnici [68,69]. U potpoglavlju 2.4 izložene su definicije hidrodinamičkog režima i transportnih koeficijenata, dok potpoglavlje 2.5 prikazuje strukturu vektorskih i tenzorskih veličina u svim konfiguracijama električnog i magnetskog polja.

2.2 Roj naelektrisanih čestica

Osnovni fizički objekat koji se razmatra u ovoj disertaciji je roj naelektrisanih čestica, koji je u fizici plazme poznat kao limit probnih čestica ili limit slobodne difuzije. Pod pojmom roj podrazumeva se ansambl naelektrisanih čestica koji se kreće u neutralnom pozadinskom fluidu koji se nalazi u stanju termodinamičke ravnoteže i u kome su u opštem slučaju prisutni homogeno električno i homogeno magnetsko polje [26, 47, 52]. Pritom je pretpostavljeno da je koncentracija naelektrisanih čestica dovoljno mala da se njihove međusobne interakcije, kao i njihov uticaj na neutralni pozadinski fluid i na vrednosti rezultujućeg električnog i magnetskog polja mogu zanemariti. Iako se pozadinski fluid nalazi u stanju termodinamičke ravnoteže, roj naelektrisanih čestica ne mora biti u termodinamičkoj ravnoteži sa svojim okruženjem. Ako je srednja energija naelektrisanih čestica viša od termalne energije, koja odgovara temperaturi pozadinskog fluida, može se očekivati da funkcija raspodele naelektrisanih čestica po energijama snažno odstupa od ravnotežnog Maxwellian-a .

Dinamika roja je određena uticajem spoljašnjih polja i sudarima naelektrisanih čestica sa neutralnim česticama pozadinskog fluida [26, 47, 52]. Pri tome roj dobija energiju od električnog polja a gubi je u sudarima. Zanimljivo je pomenuti da postoje uslovi u radio-frekventnim (RF) električnim i magnetskim poljima u kojima roj dobija energiju i porastom magnetskog polja [141]. Ako u slučaju konstantnih spoljašnjih polja dođe do ravnoteže između dobitaka i gubitaka energije u jedinici vremena, roj dostiže stacionarno stanje u kome se njegova funkcija raspodele po energiji ne menja u vremenu. Ova funkcija raspodele zavisi od spoljašnjeg električnog i magnetskog polja, od prirode neutralnog pozadinskog fluida (od mase čestica pozadinskog fluida i od odgovarajućih preseka za sudare čestica roja sa ovim česticama), kao i od njegove temperature. Na dovoljno visokim poljima se funkcija raspodele po energiji koja opisuje roj naelektrisanih čestica može značajno razlikovati od Maxwell-Boltzmann-ove raspodele [26, 47, 52].

U gasnoj fazi je rastojanje na kome deluje potencijal pojedinačne neutralne čestice pozadinske sredine znatno manje od rastojanja između neutralnih čestica, kao i od srednjeg slobodnog puta naelektrisanih čestica. Zbog toga je interakcija roja i pozadinskog gasa u potpunosti određena binarnim sudarima. Međutim, u tečnoj fazi je rastojanje između neutralnih čestica pozadinske sredine uporedivo sa rastojanjem na kome deluje potencijal pojedinačne neutralne čestice. Pri tome talasna funkcija lakih naelektrisanih čestica (poput elektrona i pozitrona) zahvata veliki broj susednih neutralnih čestica u tečnosti. Zbog toga se u tečnoj fazi interakcija roja i pozadinske sredine ne može u potpunosti opisati binarnim sudarima, pa je pri određivanju dinamike rasejanja lakih naelektrisanih čestica neophodno uzeti u obzir prostorne korelacije između neutralnih čestica pozadinske tečnosti.

2.3 Teorija rasejanja elektrona u gasovima i tečnostima

Karakteristike rojeva naelektrisanih čestica i neravnotežnih plazmi snažno zavise od prirode pozadinskog fluida. Zbog toga je ispravan opis sudara naelektrisanih čestica sa atomima (ili molekulima) pozadinske sredine od ključnog značaja u transportnim proračunima. U ovom potpoglavlju je ukratko prikazana teorija rasejanja elektrona u gasovima i tečnostima. Ovu teoriju razvili su McEachran i saradnici za slučaj rasejanja elektrona i pozitrona na izolovanom atomu [140, 142–144]. Za generalizaciju pomenute teorije na slučaj rasejanja elektrona u atomskim tečnostima zaslužan je G. Boyle sa svojim saradnicima [68, 69, 145]. Detaljan prikaz teorije rasejanja, o kojoj raspravljamo u ovom potpoglavlju, može se naći u disertaciji Grega Boyle-a [145]. Ovde se ograničavamo na slučaj rasejanja elektrona na izolovanim atomima i u atomskim tečnostima, ali treba imati u vidu da se analiza koju sprovodimo može generalizovati na slučaj nepolarnih molekula.

U razređenim gasovima rastojanje između atoma je znatno veće od rastojanja na kome elektron oseća potencijal pojedinačnog atoma. Zbog toga se rasejanje elektrona u razređenim gasovima može reprezentovati binarnim sudarima. Uticaj potencijala ostalih čestica pozadinske sredine i uticaj spoljašnjih polja mogu se u potpunosti zanemariti u toku binarnog sudara, te se može smatrati kako je dinamika elektrona za vreme sudara u potpunosti određena potencijalom atoma.

Potencijal za rasejanje elektrona na pojedinačnom atomu može se razložiti na statički deo, koji odgovara elektrostatičkoj interakciji, polarizacioni deo, koji odgovara interakciji elektrona sa indukovanim dipolom i indukovanim višim multipolnim članovima atoma, i izmzenski deo koji odgovara izmzenskoj interakciji elektrona koji se rasejava sa elektronima iz omotača atoma [100, 145]. Polarizaciona interakcija se može predstaviti dugodometnim članovima koji figurišu u razvoju potencijala za rasejanje po multipolima [145]. Izmzenska interakcija se opisuje kratkodometnim nelokalnim potencijalom, koji se dobija antisimetrizacijom totalne talasne funkcije sistema [145].

Rasejanje upadnog elektrona sa talasnim brojem k na izolovanom atomu u gasnoj fazi

moguće je opisati pomoću Dirac-Fock-ove jednačine [144, 145]

$$\begin{pmatrix} f_\kappa(r) \\ g_\kappa(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1(kr) \\ v_2(kr) \end{pmatrix} + \frac{1}{k} \int_0^r dx G(r, x) \left[V(x) \begin{pmatrix} f_\kappa(x) \\ g_\kappa(x) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \overline{W}_Q(\kappa; x) \\ \overline{W}_P(\kappa; x) \end{pmatrix} \right], \quad (2.1)$$

gde je $G(r, x)$ Green-ova funkcija slobodne čestice, $V(r)$ je potencijal koji je određen sumom statičkog i polarizacionog dela $V(r) = V_s(r) + V_p(r)$, dok $\overline{W}_P(\kappa; r)$ i $\overline{W}_Q(\kappa; r)$ reprezentuju veliku i malu komponentu izmenske interakcije. Slično tome $f_\kappa(r)$ i $g_\kappa(r)$ predstavljaju veliku i malu komponentu talasne funkcije rasejanja (eng. scattering wave function) [144, 145]. Kvantni broj κ se može izraziti preko ukupnog ugaonog momenta j i orbitalnog angularnog momenta l kao [144, 145]

$$j = |\kappa| - \frac{1}{2}, \quad \text{gde je } l = \begin{cases} \kappa, & \kappa > 0 \\ -\kappa - 1, & \kappa < 0 \end{cases}. \quad (2.2)$$

Statički deo potencijala se određuje na osnovu Dirac-Fock-ovih orbitala atoma [144], dok se polarizacioni potencijal određuje primenom metoda polarizovanih orbitala [140, 146, 147]. Eksplicitan izraz za izmenske članove $\overline{W}_P(\kappa; r)$ i $\overline{W}_Q(\kappa; r)$ dat je u referenci [145] i jednačina (2.1) se mora rešavati iterativno zbog zavisnosti izmenskih članova od funkcije rasejanja.

Veliki deo talasne funkcije rasejanja $f_\kappa(r)$ ima sledeći asimptotski oblik

$$f_\kappa(r) \longrightarrow A_\kappa \hat{j}_l(kr) - B_\kappa \hat{n}_l(k, r), \quad r \rightarrow \infty, \quad (2.3)$$

gde su $\hat{j}_l(kr)$ i $\hat{n}_l(kr)$ Bessel-ova i Neumann-ova funkcija, dok su eksplicitni izrazi za koeficijente A_κ i B_κ dati u referenci [145].

Fazni pomeraji parcijalnih talasa pri rasejanju mogu se odrediti na osnovu asimptotskog oblika velike komponente talasne funkcije rasejanja kao

$$\tan \delta_l^\pm(k) = \frac{B_\kappa}{A_\kappa}, \quad (2.4)$$

gde se znaci $+$ i $-$ odnose na orijentaciju spina elektrona nagore i nadole, respektivno. Na osnovu faznih pomeraja parcijalnih talasa diferencijalni presek za rasejanje elektrona određuje se kao

$$\sigma(k, \chi) = |f(k, \chi)|^2 + |g(k, \chi)|^2, \quad (2.5)$$

gde su $f(k, \chi)$ i $g(k, \chi)$ direktna amplituda rasejanja i amplituda rasejanja sa promenom orijentacije spina respektivno [144]. Ove amplitude se mogu odrediti kao [144]

$$f(k, \chi) = \frac{1}{k} \sum_{l_2=0}^{\infty} \left[(l_2 + 1) T_{l_2}^+(k) + l_2 T_{l_2}^-(k) \right] P_{l_2}(\cos \chi), \quad (2.6)$$

$$g(k, \chi) = \frac{1}{k} \sum_{l_2=0}^{\infty} \left[T_{l_2}^-(k) - T_{l_2}^+(k) \right] P_{l_2}^1(\cos \chi), \quad (2.7)$$

gde su P_{l_2} i $P_{l_2}^1$ Legendre-ovi polinomi i asociirani Legendre-ovi polinomi, respektivno, dok su $T_{l_2}^\pm(k)$ elementi T -matrice, koji se mogu odrediti na osnovu jednačine [144]

$$T_{l_2}^\pm(k) = \frac{1}{2i} \left[\exp(2i\delta_{l_2}^\pm(k)) - 1 \right]. \quad (2.8)$$

Kada je poznat diferencijalni presek $\sigma(k, \chi)$, totalni presek za rasejanje $\sigma_T(k)$ i presek za transfer impulsa (eng. momentum transfer cross section) $\sigma_m(k)$ se mogu odrediti kao [145]

$$\begin{aligned} \sigma_T(k) &= 2\pi \int_0^\pi \sigma(k, \chi) \sin \chi d\chi \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \left((l+1) \sin^2(\delta_l^+) + l \sin^2(\delta_l^-) \right), \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\sigma_m(k) = 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos \chi) \sigma(k, \chi) \sin \chi d\chi \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{(l+1)(l+2)}{(2l+3)} \sin^2(\delta_l^+ - \delta_{l+1}^+) + \frac{l(l+1)}{(2l+1)} \sin^2(\delta_l^- - \delta_{l+1}^-) \right. \\ &\quad \left. + \frac{(l+1)}{(2l+1)(2l+3)} \sin^2(\delta_l^+ - \delta_{l+1}^-) \right). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Kada se u jednačinama (2.9) i (2.11) zanemari orijentacija spina upadnog elektrona $\delta_l^+ = \delta_l^- \equiv \delta^l$, dobiju se nerelativistički izrazi za $\sigma_T(k)$ i $\sigma_m(k)$.

Pri rasejanju elektrona na izolovanom atomu, prisustvo elektrona dovodi do indukovanja električnog dipola i viših članova u multipolnom razvoju na datom atomu. U razređenom gasu je domet polarizacionog potencijala znatno manji od međuatomskog rastojanja, pa ostali atomi ne utiču na polarizacioni potencijal pojedinačnog atoma. Međutim, u tečnoj fazi mnogi atomi mogu imati značajnu vrednost indukovanih multipolnih momenata koji potiču od elektrona koji se rasejava i od svih ostalih atoma u okolini [68, 69, 100, 145]. Efektivni polarizacioni potencijal koji oseća elektron u datoj tački prostora je superpozicija polarizacionih potencijala svih atoma koji se nalaze u okolini elektrona. Ovaj efektivni polarizacioni potencijal se može napisati u obliku $f(r)\alpha_d(r)e/r^2$, gde je r rastojanje između atoma i elektrona, dok je $\alpha_d(r)$ polarizabilnost atoma [145]. Član $f(r)$ opisuje ekraniranje polarizacionog potencijala fokus atoma polarizacionim potencijalima okolnih atoma. U slučaju razređenog gasa važi $f(r) = 1$, dok se u slučaju tečne faze $f(r)$ mora odrediti samousaglašeno [145].

Za fokus atom i koji se nalazi u položaju \mathbf{r}_i koeficijent ekraniranja $f_i(r)$ može se odrediti na osnovu jednačine

$$f_i(r) = 1 - \pi n_0 \int_0^\infty ds \frac{g(s)}{s^2} \int_{|r-s|}^{r+s} dt \Theta(r, s, t) \frac{\alpha_d(t) f_{\text{balk}}(t)}{t^2}, \quad (2.12)$$

gde je \mathbf{r} radijus vektor između elektrona i fokus atoma, f_{balk} je koeficijent ekraniranja ostalih atoma, pri čemu su n_0 i $g(s)$, koncentracija i parna korelaciona funkcija pozadinske tečnosti,

respektivno, dok su s i t rastojanje između atoma u balku i fokus atoma i i rastojanje između elektrona i atoma u balku, respektivno, uz šta se Θ može napisati u obliku [145]

$$\Theta(r, s, t) = \frac{3(s^2 + t^2 - r^2)(s^2 + r^2 - t^2)}{2s^2} + r^2 + t^2 - s^2. \quad (2.13)$$

Samousaglašeno rešavanje jednačine (2.12) postiže se postavljanjem $f_i(r) = f_{balk}(r)$ i daljim iterativnim rešavanjem ove jednačine [145]. Ekranirani polarizacioni potencijal fokus atoma $\tilde{V}_p(r)$ može se napisati u obliku $\tilde{V}_p(r) = f(r)V_p(r)$, gde je $V_p(r)$ polarizacioni potencijal izolovanog atoma, koji u sebi sadrži doprinos indukovnog dipola i indukovanih viših članova u razvoju potencijala po multipolima [145].

U tečnoj fazi je interakcija okolnih atoma sa elektronom značajna čak i kada je elektron jako blizu fokus atoma. Pored toga što polarizacioni potencijali ovih atoma ekraniraju polarizacioni potencijal fokus atoma, dinamika rasejanja elektrona je određena kombinovanim uticajem potencijala fokus atoma i potencijala svih okolnih atoma. Zbog toga je za opis rasejanja elektrona u tečnoj fazi potrebno odrediti efektivni potencijal koji u sebi sadrži informaciju o interakciji elektrona sa okolnim atomima pri rasejanju na fokus atomu. Ovaj efektivni potencijal se može napisati u obliku $V_{\text{eff}} = V_1 + V_2$, gde je V_1 potencijal za direktnu interakciju elektrona i fokus atoma, dok V_2 odgovara interakciji elektrona sa ostatkom tečnosti. Potencijal V_2 se određuje usrednjavanjem potencijala V_1 po ansamblu atoma [68, 100, 145]

$$V_2(r) = \frac{2\pi n_0}{r} \int_0^\infty dt V_1(t) \int_{|r-t|}^{r+t} sg(s) ds. \quad (2.14)$$

Na sličan način se efektivna izmenska interakcija može napisati u obliku

$$\overline{W}_{(PVQ),\text{eff}} = \overline{W}_{(PVQ)} + \overline{W}_{(PVQ),2}, \quad (2.15)$$

gde se $\overline{W}_{(PVQ),2}$ određuje usrednjavanjem $\overline{W}_{(PVQ)}$ po ansamblu atoma [145]. Pošto \overline{W} zavisi od talasne funkcije $\overline{W}_{(PVQ),2}$ se mora ponovo računati pri svakoj iteraciji jednačine (2.1).

Uzimajući u obzir to što se u tečnostima menja efektivni potencijal u kome se rasejava elektron u odnosu na razređeni gas, treba naglasiti kako je u tečnoj fazi potrebno da se pojedinačni sudarni događaj definiše drugačije nego u gasnoj fazi. Naime, u razređenom gasu se može smatrati da se elektron rasejava na izolovanom atomu (ili molekulu), kao i da je pojedinačni sudarni događaj završen kada se elektron beskonačno udalji od datog atoma. U tom slučaju se fazni pomeraji parcijalnih talasa računaju na beskonačnoj udaljenosti od centra rasejanja. U tečnoj se fazi pak elektron nakon konačnog udaljavanja od fokus atoma već nalazi u bliskoj okolini nekog drugog atoma. Rastojanje nakon koga je V_1 zanemarljivo u odnosu na V_2 označeno je sa r_m i ovo rastojanje određuje deo prostora u kome je elektron pod dominantnim uticajem fokus atoma. Na osnovu toga se smatra da se rasejanje na fokus atomu odvija dok je rastojanje elektrona i fokus atoma manje od r_m [68, 145]. Rastojanje r_m se razlikuje od minimalnog rastejanja na kome mogu da se nađu dva atoma, σ_{core} . Pri tome važi $r_m \approx \frac{2}{3}\sigma_{core} > \sigma_{core}/2$ [145]. U radu Boyle-a i saradnika fazni pomeraji parcijalnih talasa se računaju na položaju r_m umesto u beskonačnosti [68, 145].

Pored toga što je u tečnoj fazi potencijal za rasejanje elektrona na fokus atomu drugačiji nego u razređenim gasovima, efektivno rasejanje elektrona u tečnosti se mora predstaviti kao superpozicija pojedinačnih rasejanja na više fokus atoma, i to zbog toga što talasna funkcija elektrona zahvata veliki broj susednih atoma u tečnoj fazi [70, 100]. Tako se dvostruki diferencijalni presek za rasejanje elektrona u tečnosti može napisati u obliku

$$\frac{d^2\sigma}{d\mathbf{k}'d\omega'} = \left(\frac{d\sigma}{d\omega'}\right)^{(lab)} S(\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega), \quad (2.16)$$

gde je $\left(\frac{d\sigma}{d\omega'}\right)^{(lab)}$ presek za rasejanje elektrona na jednom fokus atomu (ili molekulu) pozadinske sredine u laboratorijskom sistemu reference, $S(\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega)$ je dinamički strukturni faktor, dok su $\Delta\mathbf{k} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ i $\omega \equiv \omega - \omega'$ promene talasnog vektora i ugaone frekvence elektrona pri sudaru, respektivno. Dinamički strukturni faktor je Furijeov transform Van Hoveove generalisane vremenski zavisne parne korelacione funkcije po prostornim koordinatama i vremenu [99, 114, 114]. Dvostruki diferencijalni presek u jednačini (2.16) je faktorisan na dva člana od kojih jedan zavisi samo od interakcije elektrona i fokus atoma (ili molekula) pozadinske sredine, dok drugi zavisi samo od prostornih i vremenskih korelacija neutralnih čestica pozadinske sredine [114].

2.4 Hidrodinamički režim i definicija transportnih koeficijenata

Ako se roj naelektrisanih čestica, koje se kreću kroz neutralan pozadinski fluid, nalazi u oblasti prostorno homogenog električnog i magnetskog polja, pri čemu su čestice roja daleko od granica sistema kao i od izvora i ponora čestica, zavisnost fazne funkcije raspodele roja (funkcije raspodele u faznom prostoru) od prostornih koordinata \mathbf{r} može se izraziti preko funkcionala koncentracije čestica roja [26, 47, 52]

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{f}^{(k)}(\mathbf{c}, t) \odot (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t), \quad (2.17)$$

gde su $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$ i $n(\mathbf{r}, t)$ fazna funkcija raspodele i koncentracija čestica roja, respektivno, dok \odot označava tenzorsku kontrakciju reda k . Tenzori $\mathbf{f}^{(k)}(\mathbf{c}, t)$ u opštem slučaju zavise od brzinske koordinate \mathbf{c} i vremena t , pri čemu zavisnost od vremena nestaje u slučaju vremenski konstantnih spoljašnjih polja. Razvoj funkcije raspodele po gradijentima koncentracije, koji je prikazan u jednačini (2.17), naziva se hidrodinamički razvoj fazne funkcije raspodele. Uslovi u kojima je zadovoljena jednačina (2.17) jesu hidrodinamički uslovi (ili hidrodinamički režim). Hidrodinamički razvoj nije primenjiv u uslovima u kojima se spoljašnja polja naglo menjaju u prostoru ili vremenu, kao ni u uslovima u kojima su gradijenti koncentracije veliki [47, 52]. U hidrodinamičkom režimu se mogu definisati dve familije transportnih koeficijenata (balk i fluks transportni koeficijenti) koji kvantitativno opisuju kretanje roja [47, 52].

Veza između teorije i eksperimenta može se uspostaviti uz pomoć jednačine kontinuiteta, zato što su koncentracija naelektrisanih čestica i električna struja eksperimentalno merljive veličine [27]. Ova jednačina se može napisati u obliku

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = S(\mathbf{r}, t), \quad (2.18)$$

gde su $\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t)$ i $S(\mathbf{r}, t)$ fluks naelektrisanih čestica i izvorni član, respektivno. U hidrodinamičkom režimu se ove dve veličine mogu razviti po gradijentima koncentracije na sledeći način

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{\Gamma}^{(k+1)}(t) \odot (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t), \quad (2.19)$$

$$S(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{S}^{(k)}(t) \odot (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t), \quad (2.20)$$

gde su $\mathbf{\Gamma}^{(k+1)}(t)$ fluks transportni koeficijenti, dok su $\mathbf{S}^{(k)}(t)$ koeficijenti u razvoju izvornog člana [27, 47]. Brojevi u superskriptu, $k+1$ i k , označavaju rang odgovarajućih tenzora. Ovi koeficijenti u razvoju su vremenski nezavisni u slučaju stacionarnih spoljašnjih polja. Odsecanjem hidrodinamičkog razvoja fluksa čestica na $k = 2$ dobija se jednačina

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{W}^*(t)n(\mathbf{r}, t) - \hat{\mathbf{D}}^*(t) \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) + \hat{\mathbf{Q}}^*(t)(\nabla \otimes \nabla)n(\mathbf{r}, t) + \dots, \quad (2.21)$$

u kojoj su $\mathbf{W}^*(t)$, $\hat{\mathbf{D}}^*(t)$ i $\hat{\mathbf{Q}}^*(t)$ fluks brzina drifta, fluks difuzioni tenzor i fluks transportni tenzor trećeg reda, respektivno, dok \cdot , $:$ i \otimes označavaju skalarni proizvod, tenzorsku kontrakciju drugog reda i (spoljašnji) tenzorski proizvod, respektivno. Primenom hidrodinamičkih razvoja fluksa čestica i izvornog člana (jednačine 2.19 i 2.20) u jednačini kontinuiteta (jednačina 2.18) dobija se vremenski zavisna generalisana difuziona jednačina. Ova jednačina se može napisati u obliku

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \sum_{k=0}^{\infty} \omega^{(k)}(t) \odot (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t), \quad (2.22)$$

gde su $\omega^{(k)}(t)$ tenzori k -tog reda, koji su vremenski zavisni u slučaju vremenski promenljivih spoljašnjih polja. Ovi tenzori se mogu izraziti kao

$$\omega^{(k)}(t) = \mathbf{\Gamma}^{(k)}(t) + \mathbf{S}^{(k)}(t), \quad (2.23)$$

i za $k > 0$ oni reprezentuju balk transportne koeficijente. Kada se vremenski zavisna generalisana difuziona jednačina odseče na $k = 3$, dobije se jednačina oblika

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{W}(t) \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) - \hat{\mathbf{D}}(t) : (\nabla \otimes \nabla)n(\mathbf{r}, t) \\ + \hat{\mathbf{Q}}(t) : (\nabla \otimes \nabla \otimes \nabla)n(\mathbf{r}, t) = -R_a(t)n(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.24)$$

gde su $\mathbf{W}(t)$, $\hat{\mathbf{D}}(t)$, $\hat{\mathbf{Q}}(t)$ i R_a balk brzina drifta, balk difuzioni tenzor, balk transportni tenzor trećeg reda i ukupni brzinski koeficijent za reakcije, respektivno, dok $:$ označava tenzorsku kontrakciju trećeg reda. Pri tome važi

$$R_a(t) = -\omega^{(0)}(t) = S^{(0)}(t), \quad (2.25)$$

$$\mathbf{W}(t) = \omega^{(1)}(t) = \mathbf{W}^*(t) + \mathbf{S}^{(1)}(t), \quad (2.26)$$

$$\hat{\mathbf{D}}(t) = \omega^{(2)}(t) = \hat{\mathbf{D}}^*(t) + \mathbf{S}^{(2)}(t), \quad (2.27)$$

$$\hat{\mathbf{Q}}(t) = \omega^{(3)}(t) = \hat{\mathbf{Q}}^*(t) + \mathbf{S}^{(3)}(t). \quad (2.28)$$

Množenjem vremenski zavisne generalisane difuzione jednačine (2.22) sa 1, \mathbf{r} , $\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}$ i $\mathbf{r} \otimes \mathbf{r} \otimes \mathbf{r}$ i integracijom po konfiguracionom prostoru, dobiju se eksplicitni izrazi za $R_a(t)$, $\mathbf{W}(t)$, $\hat{\mathbf{D}}(t)$ i $\hat{\mathbf{Q}}(t)$, respektivno. Ovi izrazi su dati jednačinama

$$R_a(t) = -\omega^{(0)}(t) = \frac{d}{dt}(\ln N_e(t)), \quad (2.29)$$

$$\mathbf{W}(t) = \omega^{(1)}(t) = \frac{d}{dt}\langle \mathbf{r}(t) \rangle, \quad (2.30)$$

$$\hat{\mathbf{D}}(t) = \omega^{(2)}(t) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left\langle (\mathbf{r}(t) - \langle \mathbf{r}(t) \rangle) \otimes (\mathbf{r}(t) - \langle \mathbf{r}(t) \rangle) \right\rangle, \quad (2.31)$$

$$\hat{\mathbf{Q}}(t) = \omega^{(3)}(t) = \frac{1}{3!} \frac{d}{dt} \left\langle (\mathbf{r}(t) - \langle \mathbf{r}(t) \rangle) \otimes (\mathbf{r}(t) - \langle \mathbf{r}(t) \rangle) \otimes (\mathbf{r}(t) - \langle \mathbf{r}(t) \rangle) \right\rangle, \quad (2.32)$$

gde su

$$N_e = \int n(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}, \quad (2.33)$$

$$\langle \psi(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{N_e(t)} \int \psi(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}, \quad (2.34)$$

pri čemu je $\psi(\mathbf{r})$ proizvoljna funkcija koordinate. Važno je naglasiti da srednja vrednost $\langle \psi(\mathbf{r}) \rangle$ zavisi od vremena, zbog vremenske zavisnosti $n(\mathbf{r}, t)$. Na sličan način se mogu dobiti eksplicitni izrazi za transportne koeficijente višeg reda.

Na osnovu jednačine (2.30) vidi se da balk brzina drifta predstavlja brzinu centra mase roja. Njena vrednost je određena zajedničkim uticajem fluks brzine drifta i vektora $\mathbf{S}^{(1)}(t)$. Fluks brzina drifta je jednaka srednjoj vrednosti vektora brzine elektrona. Vrednosti balk i fluks brzina drifta su međusobno jednake u odsustvu nekonzervativnih sudara, kao i u slučaju u kome je koliziona frekvencija za nekonzervativne sudare nezavisna od energije. Vektor $\mathbf{S}^{(1)}(t)$ predstavlja koeficijent u hidrodinamičkom razvoju izvornog člana $S(\mathbf{r}, t)$, koji stoji uz prvi gradijent koncentracije naelektrisanih čestica $\nabla n(\mathbf{r}, t)$. Ovaj koeficijent je određen energijskom zavisnošću kolizione frekvencije za nekonzervativne sudare i porastom srednje energije naelektrisanih čestica u smeru u kome deluje sila spoljašnjeg električnog polja.

Balk difuzioni tenzor opisuje širenje roja, kao što se može videti iz jednačine (2.31). Ovaj tenzor u sebe uključuje doprinos širenju roja usled kretanja naelektrisanih čestica pod uticajem gradijenta njihove koncentracije, kao i doprinos promene broja čestica roja pod uticajem nekonzervativnih sudara. Prvi od ovih doprinosa je opisan fluks difuzionim tenzorom, dok je drugi opisan tenzorom $\mathbf{S}^{(2)}(t)$. Fizička interpretacija transportnih koeficijenata trećeg reda je nešto složenija i nije lako uočljiva na osnovu jednačine (2.32). Zbog toga će fizička interpretacija ovih transportnih koeficijenata biti detaljno razmatrana u potpoglavlju 4.2.

2.5 Struktura transportnog tenzora trećeg reda

U ovom potpoglavlju je struktura vektorskih i tenzorskih veličina (brzine drifta, difuzionog tenzora i transportnog tenzora trećeg reda) određena primenom metode grupnih projektora.

Sistem koji razmatramo sastoji se iz neutralnog pozadinskog fluida, roja naelektrisanih čestica i spoljašnjeg električnog i spoljašnjeg magnetskog polja. Dinamika roja je u potpunosti određena uticajem spoljašnjih polja i sudarima sa česticama pozadinskog fluida. U našem slučaju je pozadinski fluid makroskopski homogen i izotropan, zbog čega je on invarijantan u odnosu na sve transformacije iz ortogonalne $O(3)$ grupe (grupa simetrije sfere). Na osnovu toga je grupa simetrije celog razmatranog sistema jednaka grupi simetrije konfiguracije električnog i magnetskog polja.

U konfiguraciji bez magnetskog polja je grupa simetrije sistema $C_{\infty V}$ (grupa simetrije električnog polja). Ovo je jednoparametarska Lijeva grupa, koja ima dve komponente povezanosti. Prva komponenta povezanosti opisuje rotacije oko ose električnog polja (koje je u našem slučaju duž z-ose) za proizvoljan ugao α i njih označavamo sa $R_z(\alpha)$. Druga komponenta povezanosti opisuje kompoziciju refleksije u ravni koja sadrži električno polje i rotacije iz prve komponente povezanosti. Ove transformacije biće označene sa $\sigma_v R_z(\alpha)$. Polarno vektorske reprezentacije proizvoljnih transformacija iz prve i druge komponente povezanosti se mogu napisati kao

$$D^{pv}(R_z(\alpha)) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.35)$$

$$D^{pv}(\sigma_v R_z(\alpha)) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & -\cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

U ovoj konfiguraciji polja brzina drifta i difuzioni tenzor imaju sledeću strukturu [27, 47]

$$W = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ W_z \end{pmatrix}, \quad (2.37)$$

$$D = \begin{pmatrix} D_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & D_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & D_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

Struktura transportnog tenzora trećeg reda je u ovoj konfiguraciji polja data na sledeći način

$$Q_{xab} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & Q_{xxz} \\ 0 & 0 & 0 \\ Q_{xxz} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad Q_{yab} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Q_{xxz} \\ 0 & Q_{xxz} & 0 \end{pmatrix},$$

$$Q_{zab} = \begin{pmatrix} Q_{zxx} & 0 & 0 \\ 0 & Q_{zxx} & 0 \\ 0 & 0 & Q_{zzz} \end{pmatrix}, \quad (2.39)$$

gde su $a, b \in \{x, y, z\}$. U odsustvu magnetskog polja transportni tenzor trećeg reda ima sedam nenultih komponenti, od kojih su tri međusobno nezavisne (Q_{zzz} , Q_{zxx} i Q_{xxz}). Ostale

komponente se mogu izraziti preko nezavisnih komponenti kao

$$Q_{xxz} = Q_{xzx} = Q_{yyz} = Q_{yzy}, \quad Q_{zxx} = Q_{zyy}. \quad (2.40)$$

Strukturu transportnog tenzora trećeg reda u odsustvu magnetskog polja prvi put su odredili Whealton i Mason [134], a kasnije su je potvrdili Vrhovac i saradnici [132, 139] i Koutselos [137, 138].

Grupa simetrije paralelne konfiguracije polja je C_∞ . Ovo je jednoparametarska Lijeva grupa što ima samo jednu komponentu povezanosti koja opisuje rotacije oko ose električnog i magnetskog polja (oko z-ose) $R_z(\alpha)$. Polarno vektorska reprezentacija $R_z(\alpha)$ prikazana je u jednačini (2.35). U ovoj konfiguraciji polja brzina drifta i difuzioni tenzor imaju sledeću strukturu [27, 47]

$$W = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ W_z \end{pmatrix}, \quad (2.41)$$

$$D = \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} & 0 \\ -D_{xy} & D_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & D_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2.42)$$

Struktura transportnog tenzora trećeg reda u paralelnoj konfiguraciji električnog i magnetskog polja je data na sledeći način

$$\begin{aligned} Q_{xab} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & Q_{xxz} \\ 0 & 0 & Q_{xyz} \\ Q_{xxz} & Q_{xyz} & 0 \end{pmatrix}, \\ Q_{yab} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -Q_{xyz} \\ 0 & 0 & Q_{xxz} \\ -Q_{xyz} & Q_{xxz} & 0 \end{pmatrix}, \\ Q_{zab} &= \begin{pmatrix} Q_{zxx} & 0 & 0 \\ 0 & Q_{zxx} & 0 \\ 0 & 0 & Q_{zzz} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

U paralelnoj konfiguraciji polja transportni tenzor trećeg reda ima 11 nenulatih komponenti od kojih su četiri međusobno nezavisne (Q_{zzz} , Q_{zxx} , Q_{xxz} i Q_{xyz}). Ostale komponente ovog tenzora se mogu izraziti preko nezavisnih komponenti na sledeći način

$$\begin{aligned} Q_{xxz} &= Q_{xzx} = Q_{yyz} = Q_{yzy}, \quad Q_{zxx} = Q_{zyy}, \\ Q_{xyz} &= Q_{xzy} = -Q_{yxz} = -Q_{yzx}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Grupa simetrije ortogonalne konfiguracije polja je C_{1V} . Ovo je konačna grupa koja ima samo dva elementa, jedinični element e i refleksiju u odnosu na ravan koja je ortogonalna na pravac magnetskog polja σ_v . Polarno vektorske reprezentacije ovih elemenata su date jednačinama

$$D^{pv}(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D^{pv}(\sigma_v) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

Strukture brzine drifta, difuzionog tenzora i transportnog tenzora trećeg reda u ortogonalnoj konfiguraciji polja su date na sledeći način

$$W = \begin{pmatrix} W_x \\ 0 \\ W_z \end{pmatrix}, \quad (2.46)$$

$$D = \begin{pmatrix} D_{xx} & 0 & D_{xz} \\ 0 & D_{yy} & 0 \\ D_{zx} & 0 & D_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2.47)$$

$$\begin{aligned} Q_{xab} &= \begin{pmatrix} Q_{xxx} & 0 & Q_{xxz} \\ 0 & Q_{xyy} & 0 \\ Q_{xxz} & 0 & Q_{zzz} \end{pmatrix}, \\ Q_{yab} &= \begin{pmatrix} 0 & Q_{yyx} & 0 \\ Q_{yyx} & 0 & Q_{yyz} \\ 0 & Q_{yyz} & 0 \end{pmatrix}, \\ Q_{zab} &= \begin{pmatrix} Q_{zxx} & 0 & Q_{zzx} \\ 0 & Q_{zyy} & 0 \\ Q_{zzx} & 0 & Q_{zzz} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

U ortogonalnoj konfiguraciji polja transportni tenzor trećeg reda ima 14 nenultih komponenti od kojih je 10 međusobno nezavisno. Ostale komponente se mogu izraziti preko nezavisnih komponenti na sledeći način

$$Q_{xxz} = Q_{xzx}, Q_{yyz} = Q_{zyy}, Q_{yyx} = Q_{yxy}, Q_{zzx} = Q_{zxx}. \quad (2.49)$$

Kada električno i magnetsko polje zaklapaju proizvoljan ugao, grupa simetrije sistema je trivijalna grupa, koja sadrži samo jedinični element. U ovoj konfiguraciji polja su brzina drifta, difuzioni tenzor i transportni tenzor trećeg reda potpuno popunjeni (nemaju nenultih elemenata). Uz to su svi elementi brzine drifta i difuzionog tenzora međusobno nezavisni, pa je struktura ovih transportnih koeficijenata data na sledeći način

$$W = \begin{pmatrix} W_x \\ W_y \\ W_z \end{pmatrix}, \quad (2.50)$$

$$D = \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2.51)$$

Međutim, iako transportni tenzor trećeg reda ima 27 nenultih komponenti u ovoj konfiguraciji polja, samo 18 komponenti je međusobno nezavisno, zbog toga što poslednja dva indeksa transportnog tenzora trećeg reda komutiraju $Q_{abc} = Q_{acb}$, za svako $a, b, c \in x, y, z$. Na osnovu toga je struktura transportnog tenzora trećeg reda u ovoj konfiguraciji polja data jednačinama

$$\begin{aligned}
Q_{xab} &= \begin{pmatrix} Q_{xxx} & Q_{xxy} & Q_{xxz} \\ Q_{xxy} & Q_{xyy} & Q_{xyz} \\ Q_{xxz} & Q_{xyz} & Q_{zzz} \end{pmatrix}, \\
Q_{yab} &= \begin{pmatrix} Q_{yxx} & Q_{yxy} & Q_{yxz} \\ Q_{yxy} & Q_{yyy} & Q_{yyz} \\ Q_{yxz} & Q_{yyz} & Q_{yzz} \end{pmatrix}, \\
Q_{zab} &= \begin{pmatrix} Q_{zxx} & Q_{zxy} & Q_{zxx} \\ Q_{zxy} & Q_{zyy} & Q_{zyz} \\ Q_{zxx} & Q_{zyz} & Q_{zzz} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.52}$$

2.6 Zaključak

U ovom poglavlju je prikazana teorija rojeva naelektrisanih čestica u gasovima i tečnostima. U potpoglavlju 2.2 definisan je roj kao skup naelektrisanih čestica čija je koncentracija toliko mala da se njihova međusobna interakcija, kao i sudari između njih mogu zanemariti. Potom su identifikovani efekti koji utiču na dinamiku roja, poput spoljašnjih električnih i magnetskih polja i sudara čestica roja sa neutralnim česticama pozadinske sredine. Zatim je ukazano na to da roj dostiže stacionarno stanje u kome funkcija raspodele naelektrisanih čestica po energijama ne zavisi od vremena kada se energija koju roj dobije od spoljašnjeg električnog polja u jedinici vremena izjednači sa energijom koju on izgubi u sudarima. Ova funkcija raspodele je određena intenzitetom spoljašnjih polja i prirodom pozadinskog fluida. Na kraju ovog potpoglavlja razmatrana je razlika između rojeva naelektrisanih čestica u gasnoj fazi, u kojoj se interakcija čestica roja sa pozadinskom sredinom može opisati binarnim sudarima, i rojeva u tečnoj fazi, u kojoj je ova interakcija složenija.

Potpoglavlje 2.3 nosi osnove teorije rasejanja elektrona u gasovima i tečnostima. Prvo su navedeni efekti koji određuju potencijal za rasejanje elektrona na izolovanom atomu. Oni uključuju statički potencijal, polarizacioni potencijal i izmehski efekat. Potom je prikazana Dirac-Fock-ova jednačina, na osnovu koje se može odrediti diferencijalni presek za rasejanje naelektrisane čestice za zadati potencijal. Nakon toga su dati izrazi za određivanje diferencijalnog preseka, totalnog preseka i preseka za transfer impulsa na osnovu faznih pomeraja parcijalnih talasa, koji se određuju rešavanjem Dirac-Fock-ove jednačine. Posebnu pažnju polazemo na efekte koji modifikuju potencijal za rasejanje elektrona na pojedinačnom fokus atomu unutar tečnosti. Ovi efekti uključuju polarizaciju indukovano dipola fokus atoma indukovanim dipolima okolnih atoma, kao i direktni uticaj potencija svih okolnih atoma na dinamiku rasejanja elektrona na fokus atomu. Na kraju ovog potpoglavlja se uvodi dvostruki diferencijalni presek, koji se može izraziti kao proizvod dva člana. Prvi od ovih članova odgovara diferencijalnom preseku

za rasejanje elektrona na pojedinačnom fokus atomu unutar tečnosti, dok drugi član odgovara dinamičkom strukturnom faktoru tečnosti. Pri tome prvi član zavisi isključivo od modifikovanog potencijala za rasejanje, dok drugi zavisi jedino od prostornih i vremenskih korelacija između pojedinačnih atoma unutar tečnosti.

U potpoglavlju 2.4 je uveden hidrodinamički režim i definisane su dve različite familije transportnih koeficijenata. Na početku ovog potpoglavlja govori se o hidrodinamičkim uslovima koji su uspostavljeni kada se roj kreće u homogenom pozadinskom fluidu pod uticajem spoljašnjeg električnog i magnetskog polja, koja su prostorno homogena i kada se roj nalazi daleko od izvora i ponora čestica. Uz to je data formalna definicija hidrodinamičkog režima, koja podrazumeva reprezentovanje prostorne zavisnosti funkcije raspodele roja u faznom prostoru na osnovu razvoja ove funkcije u red po gradijentima koncentracije čestica u konfiguracionom prostoru. Potom su prikazani: jednačina kontinuiteta koja uspostavlja vezu između teorije i eksperimenta, te fluks gradijentna relacija i hidrodinamički razvoj izvornog člana. Primenom ove dve jednačine u jednačini kontinuiteta može se izvesti generalisana difuziona jednačina. Dalje se definišu fluks transportni koeficijenti na osnovu fluks gradijentne relacije i balk transportni koeficijenti na osnovu generalisane difuzione jednačine. Ove dve familije transportnih koeficijenata su međusobno jednake u odsustvu nekonzervativnih procesa (poput zahvata elektrona i jonizacije), kao i u uslovima u kojima koliziona frekvenca za nekonzervativne sudare ne zavisi od energije naelektrisanih čestica. Međutim, u opštem slučaju se ove dve familije transportnih koeficijenata međusobno razlikuju, a njihova razlika je određena koeficijentima u hidrodinamičkom razvoju izvornog člana. Na kraju ovog potpoglavlja su date jednačine na osnovu kojih se mogu odrediti balk transportni koeficijenti.

U narednom 2.5 potpoglavlju predočena je struktura vektorskih i tenzorskih veličina koje su od značaja za ovu disertaciju u svim konfiguracijama električnog i magnetskog polja. Za svaku konfiguraciju polja je prvo određena grupa simetrije sistema, a potom je prikazana polarno-vektorska reprezentacija odgovarajućih elemenata grupe. Dalje je prikazana struktura brzine drifta, difuzionog tenzora i transportnog tenzora trećeg reda za odgovarajuću konfiguraciju polja. U okviru ove disertacije je struktura vektorskih i tenzorskih veličina određena primenom metode grupnih projektora. Pritom se strukture vektora brzine drifta i difuzionog tenzora, koje su određene u ovoj disertaciji, slažu sa rezultatima koji su već prisutni u literaturi za sve konfiguracije električnog i magnetskog polja. Slaganje je postignuto i za strukturu transportnog tenzora trećeg reda u odsustvu magnetskog polja. Treba pak istaći da je struktura transportnog tenzora trećeg reda u prisustvu magnetskog polja prvi put određena u okviru ove disertacije, i to tako da su u obzir uzeti slučajevi u kojima su električno i magnetsko polje međusobno paralelni, međusobno ortogonalni, kao i kada su ova polja ukrštena pod proizvoljnim uglom koji je između 0 i 90 stepeni. Ovi rezultati su dodatno provereni tako što je struktura transportnog tenzora trećeg reda u svim konfiguracijama električnog i magnetskog polja još jednom određena na osnovu simetrija momenata Boltzmann-ove jednačine i fizičkih argumenata. U odsustvu magnetskog polja transportni tenzor trećeg reda ima sedam nenultih komponenti od kojih je tri međusobno nezavisno. Međutim, u slučaju paralelne konfiguracije polja transportni tenzor trećeg reda ima jedanaest nenultih komponenti od kojih je četiri međusobno nezavisno, dok u

slučaju ortogonalne konfiguracije polja ovaj tenzor ima četrnaest nenulatih komponenti od kojih je deset međusobno nezavisno. Kada su električno i magnetsko polje ukršteni pod proizvoljnim uglom između 0 i 90 stepeni, transportni tenzor trećeg reda ima dvadeset sedam nenulatih komponenti od kojih je osamnaest međusobno nezavisno.

3 Metodi za izračunavanje transportnih koeficijenata

3.1 Uvod

Treće poglavlje bazira se na metodima za izračunavanje transportnih koeficijenata i drugih transportnih karakteristika za rojeve naelektrisanih čestica u gasovima i tečnostima. U potpoglavlju 3.2 prikazani su osnovni elementi momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine, u kome se funkcija raspodele razvija u red po skupu bazisnih funkcija. Na ovaj način se Boltzmann-ova jednačina svodi na hijerarhiju kinetičkih jednačina koja se potom rešava numerički. U potpoglavlju 3.3, diskutovani su razvoj fluidnog modela i osnovni elementi hidrodinamičke teorije prenosa impulsa za rojeve lakih naelektrisanih čestica u nepolarnim tečnostima, koji se mogu izvesti množenjem Boltzmann-ove jednačine funkcijama brzinskih koordinata i integracijom ovih jednačina po brzinskom prostoru. U potpoglavlju 3.4 su prikazane osnovne procedure Monte Carlo metoda u fizici rojeva naelektrisanih čestica, kao i implementacija ovih procedura u okviru Monte Carlo koda koji je korišćen u ovoj disertaciji. Zasebni odeljak (3.4.1) predstavlja rezultate benčmark proračuna transportnih veličina za elektrone u Percus–Yevick-ovoj modelnoj tečnosti, a koji su zasnovani na primeni Monte Carlo metoda. Ova modelna tečnost istovremeno je upotrebljena za ilustraciju efekata koherentnog rasejanja i pojavu strukturno indukovane negativne diferencijalne provodnosti.

3.2 Kinetička teorija za rešavanje Boltzmann-ove jednačine

Boltzmann-ova jednačina predstavlja jednačinu kontinuiteta za funkciju raspodele u šestodimenzionom faznom prostoru [47, 52]. U slučaju roja naelektrisanih čestica, koje se kreću u homogenom i makroskopski neutralnom pozadinskom fluidu pod uticajem spoljašnjeg električnog i spoljašnjeg magnetskog polja, Boltzmann-ova jednačina se može napisati u obliku [47, 52, 173, 174]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{q}{m}(\mathbf{E} + \mathbf{c} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} = -J(f, f_0), \quad (3.1)$$

gde je $f = f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$ funkcija raspodele naelektrisanih čestica roja u faznom prostoru, \mathbf{E} , \mathbf{B} , q i m su spoljašnje električno polje, spoljašnje magnetsko polje, naelektrisanje i masa naelektrisanih čestica, respektivno, dok je $J(f, f_0)$ kolizioni operator, koji zavisi od faznih funkcija raspodele naelektrisanih čestica i neutralnih čestica, respektivno. U ovoj disertaciji se smatra se da su spoljašnja električna i magnetska polja prostorno homogena. Za razliku od naelektrisanih čestica roja, koje nemaju unutrašnju strukturu [173, 174], smatra se da neutralne čestice pozadinskog fluida imaju unutrašnju strukturu kao i da se one nalaze u stanju termodinamičke ravnoteže na temperaturi T_0 . Na osnovu toga se njihova fazna funkcija raspodele može napisati u obliku [173, 174]:

$$f_0(\mathbf{c}_0) = \sum_j f_{0j}(\mathbf{c}_0), \quad (3.2)$$

gde je \mathbf{c}_0 brzinska koordinata neutralnih čestica, dok se sumacija vrši po svim unutrašnjim stanjima neutralnih čestica. Fazna funkcija raspodele neutralnih čestica za pojedinačno unutrašnje stanje predstavljena je Maxwell-Boltzmann-ovom raspodelom:

$$f_{0j}(\mathbf{c}_0) = n_{0j} \left(\frac{m_0}{2\pi k T_0} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{m_0 c_0^2}{2k T_0} \right), \quad (3.3)$$

gde su m_0 i k masa neutralnih čestica i Boltzmann-ova konstanta, respektivno, dok je

$$n_{0j} = \frac{n_0}{Z_0} \exp \left(- \frac{\epsilon_j}{k T_0} \right), \quad (3.4)$$

gde je n_0 koncentracija neutralnih čestica, dok je ϵ_j energija koja odgovara diskretnom stanju j . Particiona funkcija neutralnih čestica Z_0 data je jednačinom:

$$Z_0 = \sum_j \exp \left(- \frac{\epsilon_j}{k T_0} \right). \quad (3.5)$$

Boltzmann-ova jednačina je komplikovana integro-diferencijalna jednačina, dok fazna funkcija raspodele u opštem slučaju zavisi od 6 koordinata faznog prostora i jedne vremenske koordinate [26, 47]. Zbog toga je Boltzmann-ovu jednačinu veoma teško rešiti direktnom numeričkom integracijom. U ovoj disertaciji se za rešavanje Boltzmann-ove jednačine koristi brzinski momentni metod, ili kraće momentni metod [174], u okviru kog se funkcija raspodele razvija u red po skupu bazisnih funkcija u faznom prostoru. Nakon toga, primenom relacija ortogonalnosti ovih bazisnih funkcija, Boltzmann-ova jednačina se svodi na hijerarhiju kinetičkih jednačina po koeficijentima u razvoju fazne funkcije raspodele [173, 174]. Ova hijerarhija kinetičkih jednačina se nakon diskretizacije izvoda po vremenu svodi na skup matričnih jednačina, koji se potom rešava numerički primenom matrične inverzije.

Fazna funkcija raspodele se u brzinskom prostoru razvija po Burnett-ovim funkcijama [173, 174], koje čine bazis u ovom prostoru. Burnett-ove funkcije su međusobno ortogonalne sa Maxwellian-om kao težinskom funkcijom [76]. Ako se sistem nalazi u hidrodinamičkom režimu, fazna funkcija raspodele se u konfiguracionom prostoru razvija po gradijentima koncentracije naelektrisanih čestica roja $n(\mathbf{r}, t)$. Normirane Burnett-ove funkcije $\Phi_m^{[\nu l]}(\alpha(t)\mathbf{c})$ se definišu kao:

$$\Phi_m^{[\nu l]}(\alpha(t)\mathbf{c}) = N_{\nu l} \left(\frac{\alpha(t)c}{\sqrt{2}} \right)^l S_{l+1/2}^{(\nu)} \left(\frac{\alpha(t)^2 c^2}{2} \right) Y_m^{[l]}(\hat{\mathbf{c}}) \quad (3.6)$$

$$= R_{\nu l}(\alpha(t)c) Y_m^{[l]}(\hat{\mathbf{c}}), \quad (3.7)$$

gde je $Y_m^{[l]}$ sferni harmonik, dok je $S_{l+1/2}^{(\nu)}$ Sonine polinom, $\alpha(t)$ je parametar a $\hat{\mathbf{c}}$ je jedinični vektor u brzinskom prostoru koji nosi informaciju o smeru vektora brzine. Konstanta $N_{\nu l}$ je data jednačinom:

$$N_{\nu l}^2 = \frac{2\pi^{3/2}\nu!}{\Gamma(\nu + l + 3/2)}, \quad (3.8)$$

gde je $\Gamma(\nu + l + 3/2)$ gama funkcija, dok

$$R_{\nu l}(\alpha(t)c) = N_{\nu l} \left(\frac{\alpha(t)c}{\sqrt{2}} \right)^l S_{l+1/2}^{(\nu)}(\alpha(t)^2 c^2 / 2), \quad (3.9)$$

određuje radijalni deo Burnett-ove funkcije. Sferni harmonici $Y_m^{[l]}$ se definišu kao [47]:

$$Y_m^{[l]}(\theta, \phi) = i^l (-1)^{m/2+|m|/2} \left(\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!} \right)^{1/2} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (3.10)$$

gde su

$$P_l^{|m|}(\cos \theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} (\sin \theta)^{|m|} \frac{d^{l+|m|}}{(d \cos \theta)^{l+|m|}} (1 - \cos^2 \theta)^l, \quad (3.11)$$

asocirani Legendre-ovi polinomi. Za sferne harmonike važi relacija ortogonalnosti:

$$\int Y_m^{[l]}(\theta, \phi) Y_{m'}^{[l']}(\theta, \phi) d(\cos \theta) d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (3.12)$$

gde okrugla zagrada u superskriptu predstavlja kompleksnu konjugaciju dok su $\delta_{ll'}$ i $\delta_{mm'}$ Kronecker-ove delte. Burnett-ove funkcije zadovoljavaju relaciju ortogonalnosti [173]:

$$\int \omega(\alpha(t), c) \Phi_m^{(\nu l)}(\alpha(t) \mathbf{c}) \Phi_{m'}^{[\nu' l']}(\alpha(t) \mathbf{c}) d\mathbf{c} = \delta_{\nu' \nu} \delta_{l' l} \delta_{m' m}, \quad (3.13)$$

gde je

$$\omega(\alpha(t), c) = \left(\frac{\alpha(t)^2}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-\alpha(t)^2 c^2 / 2}, \quad (3.14)$$

težinska funkcija. Ortogonalnost Burnett-ovih funkcija je posledica ortogonalnosti Sonine polinoma i sfernih harmonika. Primenom Burnett-ovih funkcija se fazna funkcija raspodele može razviti u brzinskom prostoru kao:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \omega(\alpha(t), c) \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \mathbf{f}_m^{(\nu l)}(\alpha(t), \mathbf{r}, t) \Phi_m^{[\nu l]}(\alpha(t) \mathbf{c}), \quad (3.15)$$

gde su $\mathbf{f}_m^{(\nu l)}(\alpha(t), \mathbf{r}, t)$ koeficijenti u razvoju, koji zavise od koordinata u konfiguracionom prostoru i od vremena.

U hidrodinamičkom režimu se fazna funkcija raspodele u konfiguracionom prostoru može razviti po gradijentima koncentracije čestica roja [27, 47]. Tada se fazna funkcija raspodele može napisati u obliku:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \omega(\alpha(t), c) \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{\lambda=0}^s \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l F(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha(t), t) R_{\nu l}(\alpha(t), c) Y_m^{[l]}(\hat{\mathbf{c}}) G_{\mu}^{(s \lambda)} n(\mathbf{r}, t), \quad (3.16)$$

gde su $F(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha(t), t)$ momenti funkcije raspodele, dok je $G_{\mu}^{(s \lambda)}$ operator prostornog gradijenta u ireducibilnoj formi [47]. Ovaj operator odgovara prostornom izvodu s -tog reda, koji se pri rotacijama transformiše kao sferni harmonik $Y_{\mu}^{(\lambda)}$. Ireducibilna forma operatora prostornog diferenciranja se koristi da bi se obezbedio najkompaktniji zapis ovog operatora. Momenti funkcije raspodele $F(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha(t), t)$ predstavljaju koeficijente u razvoju po Burnett-ovim funkcijama u brzinskom prostoru i gradijentima koncentracije u konfiguracionom prostoru. Kada se Boltzmann-ova jednačina pomnoži sa proizvoljnim momentom $F(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha(t), t)$, nakon čega se primeni razvoj fazne funkcije raspodele iz jednačine (3.16) i Boltzmann-ova jednačina se prointegrirala po celom brzinskom prostoru, dobije se hijerarhija kinetičkih jednačina koja

predstavlja beskonačan sistem nehomogenih diferencijalnih jednačina prvog reda [47]. Ova hierarhija se može reprezentovati jednačinom:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\nu'=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \left\{ \partial_t \delta_{\nu\nu'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} + \omega(000; t) \delta_{\nu\nu'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} + n_0 J_{\nu\nu'}^l \delta_{ll'} \delta_{mm'} \right. \\
& + ia(t) (l'm10|lm) \alpha(t) \langle \nu l || K^{[1]} || \nu' l' \rangle \delta_{mm'} \\
& + \frac{q}{m} B(t) \left\{ \frac{\sin \psi}{2} \left[\sqrt{(l-m)(l+m+1)} \delta_{m'm+1} - \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \delta_{m'm-1} \right. \right. \\
& \left. \left. - im \cos \psi \delta_{mm'} \right] \right\} \delta_{\nu\nu'} \delta_{ll'} \\
& \left. - n_0 J_{0\nu'}^0 F(\nu l m | 000; \alpha(t), t) (1 - \delta_{s_0} \delta_{\lambda_0} \delta_{\mu_0}) \delta_{\nu'0} \delta_{m'0} \right\} F(\nu' l' m' | s \lambda \mu; \alpha(t), t) = \bar{X}(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha(t), t).
\end{aligned} \tag{3.17}$$

U jednačini (3.17) $J_{\nu\nu'}^l$ predstavlja element kolizijske matrice, koji je dat jednačinom:

$$J_{\nu\nu'}^l = \frac{1}{n_0} \int_0^\infty R_{\nu l}(\alpha(t)c) J^l[\omega(\alpha(t), c) R_{\nu' l}(\alpha(t)c)] c^2 dc, \tag{3.18}$$

dok je $(l'm10|lm)$ Clebsch–Gordan-ov koeficijent. Član $\langle \nu l || K^{[1]} || \nu' l' \rangle$ je dat jednačinom:

$$\langle \nu l || K^{[1]} || \nu' l' \rangle = -\frac{1}{\alpha(t)} \int_0^\infty R_{\nu l}(\alpha(t)c) \left[\langle l || \partial_c^{[1]} || l' \rangle \omega(\alpha(t), c) R_{\nu' l'}(\alpha(t)c) \right] c^2 dc, \tag{3.19}$$

gde je $\langle l || \partial_c^{[1]} || l' \rangle$ redukovani matrični element. Može se pokazati da važi:

$$\langle \nu l || K^{[1]} || \nu' l' \rangle = \sqrt{\frac{2}{2l+1}} \left[\sqrt{l(\nu+l+1/2)} \delta_{\nu\nu'} \delta_{ll'+1} - \sqrt{\nu(l+1)} \delta_{\nu\nu'+1} \delta_{ll'-1} \right]. \tag{3.20}$$

Član $\omega(000; t)$ predstavlja $\omega(s\lambda\mu; t)$ za $s = \lambda = \mu = 0$, pri čemu je $\omega(s\lambda\mu; t)$ definisano kao:

$$\begin{aligned}
\omega(s\lambda\mu; t) &= \frac{1}{\alpha(t)} \sum_{\mu'=-1}^1 \sum_{\lambda_1=0}^{s-1} (-1)^{\mu'} (1\mu' \lambda_1 \mu - \mu' | \lambda \mu) F(01 - \mu' | s - 1 \lambda_1 \mu - \mu'; \alpha(t), t) \\
& - n_0 \sum_{\nu'=0}^{\infty} J_{0\nu'}^0(\alpha(t)) F(\nu' 00 | s \lambda \mu; \alpha(t), t).
\end{aligned} \tag{3.21}$$

Desna strana jednačine (3.17) se može izraziti kao:

$$\begin{aligned}
\bar{X}(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha(t), t) &= \sum_{\nu'=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \left\{ -\frac{1}{\alpha(t)} \sum_{\lambda_1=0}^{s-1} \sum_{\mu'=-1}^1 (l' m' 1 \mu' | l m) \right. \\
& (l' m' 1 \mu' | l m) (1 \mu' \lambda_1 \mu - \mu' | \lambda \mu) \langle \nu l || \alpha(t) c^{[1]} || \nu' l' \rangle F(\nu' l' m' | s - 1 \lambda_1 \mu - \mu'; \alpha(t), t) \\
& - \sum_{s_1=0}^s \sum_{\lambda_1=0}^{s_1} \sum_{\mu_1=-\lambda_1}^{\lambda_1} \sum_{\lambda_2=0}^{s-s_1} \sum_{\mu_2=-\lambda_2}^{\lambda_2} (\lambda_1 \mu_1 \lambda_2 \mu_2 | \lambda \mu) \omega(s - s_1 \lambda_2 \mu_2; t) (1 - \delta_{s s_1} \delta_{\lambda_2 0} \delta_{\mu_2 0}) \\
& \left. (1 - \delta_{s_1 0} \delta_{\lambda_1 0} \delta_{\mu_1 0}) F(\nu' l' m' | s_1 \lambda_1 \mu_1; \alpha(t), t) \delta_{\nu\nu'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{\lambda_1=0}^{s-1} \sum_{\mu'=-1}^1 \frac{(-1)^{\mu'}}{\alpha(t)} (1\mu'\lambda_1\mu - \mu'|\lambda\mu) F(01 - \mu'|s - 1\lambda_1\mu - \mu'; \alpha(t), t) F(\nu'l'm'|000; \alpha(t), t) \\
& (1 - \delta_{s0}\delta_{\lambda0}\delta_{\mu0}) \delta_{\nu\nu'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \Big\}. \tag{3.22}
\end{aligned}$$

U jednačini (3.22) je $\langle \nu l | | \alpha(t) c^{[1]} | | \nu' l' \rangle$ definisano kao:

$$\langle \nu l | | \alpha(t) c^{[1]} | | \nu' l' \rangle = \frac{1}{\alpha(t)} \int_0^\infty R_{\nu l}(\alpha(t)c) \langle l | | c^{[1]} | | l' \rangle \omega(\alpha(t)c) R_{\nu' l'}(\alpha(t)c) c^2 dc, \tag{3.23}$$

gde je $\langle l | | c^{[1]} | | l' \rangle$ redukovan matricni element. Može se pokazati da važi:

$$\begin{aligned}
\langle \nu l | | \alpha(t) c^{[1]} | | \nu' l' \rangle &= \sqrt{\frac{2}{2l+1}} \left[\sqrt{l(\nu+l+1/2)} \delta_{\nu\nu'} \delta_{ll'+1} - \sqrt{\nu(l+1)} \delta_{\nu\nu'+1} \delta_{ll'-1} \right. \\
& \left. - \sqrt{l(\nu+1)} \delta_{\nu\nu'-1} \delta_{ll'+1} + \sqrt{(l+1)(\nu+l+3/2)} \delta_{\nu\nu'} \delta_{ll'-1} \right]. \tag{3.24}
\end{aligned}$$

Pri izvođenju ove hijerarhije primenjene su relacije ortogonalnosti Burnett-ovih funkcija i izjednačeni su koeficijenti koji stoje uz operator $G_\mu^{(s\lambda)}$ za iste vrednosti (s, λ, μ) . Ova hijerarhija jednačina se diskretizuje u vremenu sa vremenskim korakom Δt , kako bi se omogućilo njeno numeričko rešavanje [90, 97]. Pri ovoj diskretizaciji se u svakom trenutku t_n svi elementi hijerarhije određuju pri istoj bazisnoj temperaturi T_b^n . Parcijalni izvod po vremenu se u n -tom vremenskom trenutku može aproksimirati kao:

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} F(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha(t), t) \right|_{\alpha=\alpha_n, t=t_n} = \frac{F_n(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha_n) - F_{n-1}(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha_n)}{\Delta t}. \tag{3.25}$$

U jednačini (3.25) se nepoznata veličina $F_{n-1}(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha_n)$ može izraziti preko poznatih veličina $F_{n-1}(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha_{n-1})$ kao:

$$F_{n-1}(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha_n) = \sum_{\nu'=0}^{\nu} A_{\nu\nu'}^l(\mu_{nn-1}) F_{n-1}(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha_{n-1}), \tag{3.26}$$

gde su

$$A_{\nu\nu'}^l(\mu_{ij}) = \frac{\bar{N}_{\nu l}}{\bar{N}_{\nu l}} \mu_{ij}^{\nu'+\frac{1}{2}l} \frac{(1 - \mu_{ij})^{\nu-\nu'}}{(\nu - \nu')!}, \tag{3.27}$$

$$\mu_{ij} = \left(\frac{\alpha_i}{\alpha_j} \right)^2, \tag{3.28}$$

$$\bar{N}_{\nu l}^2 = \frac{2\pi^{3/2}}{\nu! \Gamma(\nu + l + 3/2)} = \frac{1}{(\nu!)^2} N_{\nu l}^2, \tag{3.29}$$

i

$$A_{\nu\nu'}^l(1) = \delta_{\nu\nu'}. \tag{3.30}$$

Jednačina (3.26) je posledica veze između modifikovanih Sonine polinoma na različitim bazisnim temperaturama:

$$R_{\nu l}(\alpha_i c) = \sum_{\nu'=0}^{\nu} A_{\nu\nu'}^l(\mu_{ij}) R_{\nu' l}(\alpha_j c). \tag{3.31}$$

Hijerarhija jednačina (3.17) za n -ti vremenski korak se može napisati u obliku:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\nu'=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \left\{ \delta_{\nu\nu'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} + \Delta t \left[\omega_n(000) \delta_{\nu\nu'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} + n_0 J_{\nu\nu'}^l \delta_{ll'} \delta_{mm'} \right. \right. \\
& + i a_n \alpha_n (l' m' 10 | l m) \langle \nu l || K^{[1]} || \nu' l' \rangle \delta_{mm'} \\
& \left. \left. \frac{q}{m} B_n \left\{ \frac{\sin \psi}{2} \left[\sqrt{(l-m)(l+m+1)} \delta_{m'm+1} - \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \delta_{m'm-1} \right. \right. \right. \right. \\
& \left. \left. \left. - i m \cos \psi \delta_{mm'} \right] \right\} \delta_{\nu\nu'} \delta_{ll'} \right. \\
& \left. \left. - n_0 J_{0\nu'}^0(\alpha_n) F(\nu l m | 000; \alpha_n) (1 - \delta_{s0} \delta_{\lambda 0} \delta_{\mu 0}) \delta_{l'0} \delta_{m'0} \right] \right\} F(\nu' l' m' | s \lambda \mu; \alpha_n) = X_n(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha_n),
\end{aligned} \tag{3.32}$$

gde je

$$X_n(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha_n) = \sum_{\nu'=0}^{\nu} A_{\nu\nu'}^l(\mu_{n n-1}) F_{n-1}(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha_{n-1}) + \Delta t \bar{X}_n(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha_n). \tag{3.33}$$

Jednačine (3.32) i (3.33) predstavljaju hijerarhiju matričnih jednačina koje se rešavaju primenom numeričke matrične inverzije.

Na osnovu momenata funkcije raspodele se mogu odrediti balk i fluks transportni koeficijenti. Eksplicitni izrazi za fluks transportne koeficijente se mogu odrediti na osnovu razvoja fluksa brzine čestica $\Gamma(\mathbf{r}, t)$ po Burnett-ovim funkcijama i gradijentima koncentracije, kada se za svaku Dekartovu komponentu fluksa čestica izdvoje članovi koji stoje uz odgovarajuće izvode po prostornim koordinatama. Razvoj fluksa brzine čestica se može napisati kao:

$$\begin{aligned}
\Gamma_m^{[1]}(\mathbf{r}, t) &= \int c_m^{[1]} f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c} = \\
&= \int c_m^{[1]} \omega(\alpha, c) \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{\lambda=0}^s \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m'=-l}^l F(\nu l m' | s \lambda \mu; \alpha, t) R_{\nu l}(\alpha, c) \times \\
& Y_{m'}^{[l]}(\hat{\mathbf{c}}) G_{\mu}^{(s \lambda)} n(\mathbf{r}, t) d\mathbf{c}.
\end{aligned} \tag{3.34}$$

Dekartove komponente vektora, čija je sferna forma data izrazom:

$$c_m^{[1]} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} c Y_m^{[1]}(\hat{\mathbf{c}}), \tag{3.35}$$

mogu se odrediti na osnovu jednačina

$$c_x = \frac{i}{\sqrt{2}} (c_1^{[1]} - c_{-1}^{[1]}), \tag{3.36}$$

$$c_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_1^{[1]} + c_{-1}^{[1]}), \tag{3.37}$$

$$c_z = -i c_0^{[1]}. \tag{3.38}$$

U okviru ove disertacije su određeni eksplicitni izrazi u kojima su komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda izražene na osnovu momenata funkcije raspodele $F(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha, t)$. Izrazi za

komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda, koje su nezavisne u odsustvu magnetskog polja, dati su sledećim jednačinama:

$$Q_{xxz} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\text{Im}\{F(011|221)\} - \text{Im}\{F(01-1|221)\} \right), \quad (3.39)$$

$$Q_{zxx} = -\frac{1}{\alpha} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \text{Im}\{F(010|200)\} + \frac{1}{\sqrt{6}} \text{Im}\{F(010|220)\} \right) + \frac{1}{\alpha} \text{Im}\{F(010|222)\}, \quad (3.40)$$

$$Q_{zzz} = \frac{1}{\alpha} \left(\sqrt{\frac{2}{3}} \text{Im}\{F(010|220)\} - \frac{1}{\sqrt{3}} \text{Im}\{F(010|200)\} \right), \quad (3.41)$$

gde $\text{Re}\{\}$ i $\text{Im}\{\}$ označavaju realni i imaginarni deo momentata $F(\nu lm|s\lambda\mu; \alpha, t)$, respektivno. Preostali eksplicitni izrazi za izračunavanje transportnih koeficijenata u okviru prikazanog formalizma za rešavanje Boltzmann-ove jednačine su dati u Appendixu 2.

3.3 Fluidne jednačine i teorija prenosa impulsa za rojeve elektrona u atomskim tečnostima

Rešavanje Boltzmann-ove jednačine primenom momentnog metoda je u najvećem broju slučajeve veoma težak numerički problem. Ovo je naročito izraženo kada spoljašnja polja nisu prostorno homogena ili kada je koncentracija naelektrisanih čestica dovoljno velika da njihove međusobne interakcije i njihov uticaj na rezultujuća polja postanu značajni. Jedna od alternativa numeričkom rešavanju Boltzmann-ove jednačine je razvoj i primena fluidnih jednačina. Fluidne jednačine se mogu izvesti množenjem Boltzmann-ove jednačine veličinama koje su funkcije brzine i integracijom ovih jednačina po brzinskom prostoru. Time se dobiju jednačine oblika [114]

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (n\langle\Phi(\mathbf{c})\rangle) + \nabla \cdot (n\langle\mathbf{c}\Phi(\mathbf{c})\rangle) - n\frac{q}{m}\langle\mathbf{E} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}}\Phi(\mathbf{c})\rangle &= - \int \Phi(\mathbf{c})J(f)d\mathbf{c} \\ &= C_{\Phi}, \end{aligned} \quad (3.42)$$

gde je $\Phi(\mathbf{c})$ proizvoljna funkcija brzine, $J(f)$ je kolizioni operator, dok ugaone zagrade $\langle \rangle$ predstavljaju usrednjavanje po brzinskom prostoru. Na ovaj način se Boltzmann-ova jednačina zamenjuje beskonačnim nizom fluidnih (ili momentnih) jednačina [52]. Sistem fluidnih jednačina, međutim, nije zatvoren zbog toga što u jednačinama nižeg reda figurišu veličine koje je potrebno odrediti na osnovu jednačina višeg reda. Zato je neopodno da ovaj niz bude odsečen na nekoj konkretnoj jednačini uz zanemarivanje svih jednačina višeg reda i reprezentovanje određenih nepoznatih veličina aproksimativnim izrazima [52, 114, 139]. Izjednačavanjem $\Phi(\mathbf{c})$ sa 1, $m\mathbf{c}$ i $\frac{1}{2}mv^2$ u jednačini (3.42) dobiju se jednačine za balans broja čestica, balans impulsa i balans energije, respektivno [114]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\langle\mathbf{c}\rangle) = C_1, \quad (3.43)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (nm\langle\mathbf{c}\rangle) + \nabla \cdot (nm\langle\mathbf{c} \otimes \mathbf{c}\rangle) - nq\mathbf{E} = C_{m\mathbf{c}} \quad (3.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (n\langle\frac{1}{2}mc^2\rangle) + \nabla \cdot (n\langle\frac{1}{2}mc^2\mathbf{c}\rangle) - nq\mathbf{E} \cdot \langle\mathbf{c}\rangle = C_{\frac{1}{2}mc^2}, \quad (3.45)$$

gde \otimes predstavlja tenzorski proizvod. Na desnoj strani jednačina (3.43)-(3.45) figurišu kolizionni članovi koji reprezentuju brzinu promene odgovarajućih veličina u sudarima čestice roja sa atomima (ili molekulima) pozadinske sredine.

U ostatku ovog poglavlja, analiza fluidnih jednačina biće ograničena na slučaj rojeva elektrona, budući da oblik kolizionnih članova zavisi od tipa čestice roja. Fluidne jednačine za rojeve pozitrona u nepolarnim tečnostima analizirane su u radu Boyle-a i saradnika [114], u kojima sudarni procesi koji vode ka formiranju pozitronijuma i jonizacije nemaju istu reprezentaciju kao u slučaju koji se ovde razmatra.

Brzina promena veličine Ψ u sudarima u slučaju koherentnog rasejanja jednaka je [114]

$$\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)_{coll}^{(coh)} = n_0 \int d\mathbf{c} c f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) \int d\omega' \int d\Omega_{\mathbf{k}'} (\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) - \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t)) \frac{d^2\sigma}{d\mathbf{k}'d\omega'}, \quad (3.46)$$

gde ω i \mathbf{k} označavaju ugaonu frekvencu i talasni broj elektrona, respektivno, a $d\Omega_{\mathbf{k}}$ je prostorni ugao koji je centriran oko pravca duž koga se kreće elektron, dok je n_0 koncentracija pozadinskih atoma (ili molekula). Primovane i neprimovane veličine se odnose na stanje elektrona pre i posle sudara, respektivno [114]. Dvostruki diferencijalni presek se može izraziti kao

$$\frac{d^2\sigma}{d\mathbf{k}'d\omega'} = \left(\frac{d\sigma}{d\omega'}\right)^{(lab)} S(\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega), \quad (3.47)$$

gde je $\left(\frac{d\sigma}{d\omega'}\right)^{(lab)}$ presek za rasejanje elektrona na jednom fokus atomu (ili molekulu) pozadinske sredine u laboratorijskom sistemu reference, $S(\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega)$ je dinamički strukturni faktor, dok su $\Delta\mathbf{k} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ i $\omega \equiv \omega - \omega'$ promene talasnog vektora i ugaone frekvence elektrona pri sudaru, respektivno. Dinamički strukturni faktor je Furijeov transform Van Hoveove generalisane vremenski zavisne parne korelacione funkcije po prostornim koordinatama i vremenu [99, 114]. Može se uočiti da je dvostruki diferencijalni presek u jednačini (3.47) faktorisan na dva člana od kojih jedan zavisi samo od interakcije elektrona i fokus atoma (ili molekula) pozadinske sredine pri datoj vrednosti energije, dok drugi zavisi samo od prostornih i vremenskih korelacija neutralnih čestica pozadinske sredine [114].

Brzina promena veličine Ψ u sudarima je u slučaju nekoherentnog rasejanja (binarnih sudara) jednaka [52, 139]

$$\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)_{coll}^{(noncoh)} = \int d\mathbf{c} \int d\mathbf{c}_0 g f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) f(\mathbf{c}_0) \int d\Omega_{\mathbf{k}'} (\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) - \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t)) \frac{d\sigma}{d\mathbf{k}'}, \quad (3.48)$$

gde je $f(\mathbf{c}_0)$ funkcija raspodele čestica pozadinske sredine, dok su g i $\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}'}$ intenzitet relativne brzine i diferencijalni presek, respektivno. Sada će biti razmatrani kolizionni članovi C_1 , C_{mc} i $C_{\frac{1}{2}mc^2}$. Kolizionni operator se može napisati kao [52, 114]

$$J(f) = J_{elast}(f) + J_{inel}(f) + J_{ioniz}(f) + J_{attach}(f), \quad (3.49)$$

gde $J_{elast}(f)$, $J_{inel}(f)$, $J_{ioniz}(f)$ i $J_{attach}(f)$ predstavljaju doprinose elastičnih sudara, neelastičnih sudara, jonizacije i zahvata elektrona, respektivno, ukupnom kolizionom operatoru. Na

osnovu toga svaki od kolizionih članova iz jednačina (3.43)-(3.45) može da se odredi kao zbir članova koji reprezentuju doprinose elastičnih, neelastičnih i reaktivnih sudara. U razređenom gasu se svi tipovi sudara mogu reprezentovati binarnim sudarima. Ovo je posledica toga što se pri rasejanju elektrona na fokus atomu (ili molekulu) pozadinske sredine u ovom slučaju efekat okolnih atoma (ili molekula) može zanemariti [100]. Uz to je dinamički strukturni faktor u razređenom gasu identički jednak jedinici. U gustim gasovima i tečnostima je rastojanje između susednih atoma (ili molekula) pozadinske sredine jako malo u poređenju sa srednjim slobodnim putem elektrona, pa se koherentni efekti moraju uzeti u obzir [100]. Pri izradi ove disertacije su elastični sudari u tečnoj fazi reprezentovani koherentnim rasejanjem, dok su ostali tipovi sudara reprezentovani binarnim sudarima. Ovo je opravdano time što u neelastičnim sudarima i jonizaciji dolazi do velike promene impulsa, a strukturni faktor je u slučaju velike promene impulsa praktično jednak jedinici, dok u zahvatu elektrona dolazi do gubitka elektrona iz roja.

Prvo će biti razmotren doprinos elastičnog rasejanja kolizionim članovima C_1 , C_{mc} i $C_{\frac{1}{2}mc^2}$. Pri tome će biti korišćene sledeće osobine dinamičkog strukturnog faktora [70]

$$\int d\omega S(\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega) = S(\Delta\mathbf{k}), \quad (3.50)$$

$$\int d\omega \Delta\omega S(\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega) = \frac{m}{2}(v^2 - v'^2), \quad (3.51)$$

gde je $S(\Delta\mathbf{k})$ statički strukturni faktor pozadinskog fluida, dok su m , v i v' masa čestice roja i intenziteti brzine čestice roja pre i posle sudara, respektivno. Statički strukturni faktor je Furijeov transform vremenski nezavisne parne korelacione funkcije [68]. Jednačina (3.50) ima fizički smisao da je ukupna verovatnoća za rasejanje naelektrisane čestice u određeni pravac u prostoru uz određenu promenu impulsa direktno srazmerna statičkom strukturnom faktoru date sredine [70]. Slično tome, jednačina (3.51) ima fizički smisao da je srednja razmena energije naelektrisane čestice roja i pozadinskog fluida za datu vrednost impulsa jednaka energiji uzmarka izolovanog atoma (ili molekula) pozadinskog fluida pri datom transferu impulsa [70]. Zbog kraćeg zapisa biće korišćena oznaka

$$\Sigma(c, \chi) \equiv \sigma(c, \chi) S\left(\frac{2mc}{\hbar} \sin(\chi/2)\right), \quad (3.52)$$

gde je $\frac{2mc}{\hbar} = \Delta k$, dok je \hbar redukovana Plankova konstanta. Pri određivanju vrednosti integrala u kolizionim članovima su korišćene veličine

$$\mathbf{G} = \frac{m\mathbf{c} + m_0\mathbf{c}_0}{m + m_0}, \quad (3.53)$$

$$\mathbf{g} = \mathbf{c} - \mathbf{c}_0, \quad (3.54)$$

$$\mu = \frac{mm_0}{m + m_0}, \quad (3.55)$$

$$M_0 = \frac{m_0}{m + m_0}, \quad (3.56)$$

$$M = \frac{m}{m + m_0}, \quad (3.57)$$

gde su \mathbf{c} , \mathbf{c}_0 , \mathbf{G} , \mathbf{g} i μ brzina čestice roja, brzina čestice pozadinske sredine, brzina centra mase, brzina relativne čestice i redukovana masa, respektivno. Primenom ovih veličina se brzine čestice roja i čestice pozadinske sredine mogu napisati kao

$$\mathbf{c} = \mathbf{G} + M_0\mathbf{g}, \quad (3.58)$$

$$\mathbf{c}_0 = \mathbf{G} - M\mathbf{g}. \quad (3.59)$$

Lako se pokazuje da važi

$$C_1^{(coh)} = 0. \quad (3.60)$$

Transfer impulsa u elastičnim sudarima se može odrediti kao

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial(m\mathbf{c})}{\partial t}\right)_{coll}^{(coh)} &= -\mu n_0 \int d\mathbf{c} f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) \mathbf{c} c 2\pi \int (1 - \cos \chi) \sin \chi d\chi \Sigma(c, \chi) \\ &= -\mu \int d\mathbf{c} f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) \mathbf{c} \tilde{\nu}_m^{(elast)}(\epsilon) \\ &= -\mu n \langle \langle \tilde{\nu}_m^{(elast)}(\epsilon) \mathbf{c} \rangle_0 \rangle, \end{aligned} \quad (3.61)$$

gde je koliziona frekvencija za transfer impulsa pri koherentnom rasejanju definisana kao

$$\tilde{\nu}_m^{(elast)}(\epsilon) = n_0 c 2\pi \int (1 - \cos \chi) \sin \chi d\chi \Sigma(c, \chi). \quad (3.62)$$

Pri izvođenju jednačine (3.61) je primenjena osobina (3.50) dinamičkog strukturnog faktora. Pored toga je pri izvođenju jednačine (3.61) i u definiciji (3.62) iskorišćena približna jednakost $c \approx g$, koja je zadovoljena u slučaju rojeva elektrona u hladnim tečnostima (poput tečnog argona, tečnog kriptona i tečnog ksenona). Transfer energije u elastičnim sudarima se može odrediti kao

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial(\frac{1}{2}mc^2)}{\partial t}\right)_{coll}^{(coh)} &= n_0 \int d\mathbf{c} c f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) \int d\omega' \\ &\times \int d\Omega_{\mathbf{k}'} \left(\frac{1}{2}mc^2 - \frac{1}{2}m\omega'^2\right) \left(\frac{d\sigma}{d\omega'}\right)^{(lab)} S(\Delta\mathbf{k}, \Delta\omega). \end{aligned} \quad (3.63)$$

Na osnovu jednakosti $\frac{1}{2}mc^2 - \frac{1}{2}m\omega'^2 = \omega - \omega' = -\Delta\omega$ i osobine (3.51) dinamičkog strukturnog faktora, transfer energije u elastičnim sudarima se može napisati u obliku [52, 114, 139]

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial(\frac{1}{2}mc^2)}{\partial t}\right)_{coll}^{(coh)} &= -\mu n \langle \langle \nu_m^{(elast)}(\epsilon) \mathbf{G} \cdot \mathbf{g} \rangle_0 \rangle = \\ &= -n \frac{\mu}{m + m_0} \langle \langle (mc^2 - m_0 c_0^2 - (m - m_0) \mathbf{c} \cdot \mathbf{c}_0) \nu_m^{(elast)}(\epsilon) \rangle_0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Na osnovu jednačina (3.61) i (3.64) može se uočiti da iako strukturni efekti utiču na brzinu transfera impulsa u elastičnim sudarima, oni ne utiču na brzinu transfera energije [114]. Stoga su vrednosti srednjeg slobodnog puta, koje odgovaraju transferu impulsa i transferu energije

u elastičnim sudarima međusobno različite za niskoenergijske elektrone (i pozitrone) u tečnoj fazi. Ovi srednji slobodni putevi su dati jednačinama

$$\Lambda_0(c) = \left(n_0 2\pi \int_0^\pi d\chi \sin \chi (1 - \cos \chi) \sigma(c, \chi) \right)^{-1}, \quad (3.65)$$

$$\Lambda_1(c) = \left(n_0 2\pi \int_0^\pi d\chi \sin \chi (1 - \cos \chi) \Sigma(c, \chi) \right)^{-1}, \quad (3.66)$$

gde su Λ_0 i Λ_1 srednji slobodni put za transfer energije i srednji slobodni put za transfer impulsa, respektivno.

Da bi se odredio doprinos neelastičnih sudara u fluidnim jednačinama, potrebno je uzeti u obzir populaciju pojedinačnih stanja atoma (ili molekula) pozadinske sredine. Populacija stanja j se može reprezentovati kao [52]

$$f_{0j}(\mathbf{c}_0) = n_{0j} \omega(\alpha_0, c_0) = n_{0j} \left(\frac{m_0}{2\pi k T_0} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m_0 c_0^2}{2k T_0} \right), \quad (3.67)$$

gde je

$$n_{0j} = \frac{n_0}{Z_0} \exp \left(-\frac{\epsilon_j}{k T_0} \right), \quad (3.68)$$

pri čemu je Z_0 particiona funkcija čestica pozadinske sredine. U slučaju neelastičnih sudara važi [52]

$$\mathbf{G}' = \mathbf{G}, \quad (3.69)$$

i

$$\frac{1}{2} \mu g^2 + \epsilon_j = \frac{1}{2} \mu g'^2 + \epsilon_{j'}, \quad (3.70)$$

gde su ϵ_j i $\epsilon_{j'}$ energije diskretnih stanja j i j' , respektivno. Neelastični sudari ne menjaju jednačinu kontinuiteta [52]

$$C_1^{(inel)} = 0. \quad (3.71)$$

Transfer impulsa u neelastičnim sudarima se može izraziti kao [52]

$$\left(\frac{\partial(m\mathbf{c})}{\partial t} \right)_{coll}^{(inel)} = -m \sum_{j,j'} \int d\mathbf{c} d\mathbf{c}_0 g f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) f_{0j}(\mathbf{c}_0) \int d^2\Omega_{\mathbf{g}'} \sigma(j, j'; g, \chi) (\mathbf{c} - \mathbf{c}'), \quad (3.72)$$

gde se sumacija vrši po svim diskretnim stanjima čestica pozadinske sredine, dok je $\sigma(j, j'; g, \chi)$ diferencijalni presek za neelastični sudar u kome se čestica pozadinske sredine ekscituje iz stanja j u stanje j' . Može se pokazati da važi [52, 139]

$$\left(\frac{\partial(m\mathbf{c})}{\partial t} \right)_{coll}^{(inel)} = -n\mu \langle \nu_m^{(inel)}(\epsilon) (\mathbf{c} - \mathbf{c}_0) \rangle_0, \quad (3.73)$$

gde je koliziona frekvencija za transfer impulsa u neelastičnim sudarima predstavljena jednačinom

$$\nu_m^{(inel)}(\epsilon) \equiv \sum_{j,j'} n_{0j} \sqrt{\frac{2\epsilon}{\mu}} \sigma_m(j, j'; g) = \sum_{j,j'} n_{0j} g \sigma_m(j, j', g), \quad (3.74)$$

dok je presek $\sigma_m(j, j', g)$ definisan kao

$$\sigma_m(j, j'; g) = 2\pi \int_0^\pi d\chi \sin \chi \sigma(j, j'; g, \chi) \left(1 - \frac{g'}{g} \cos \chi\right). \quad (3.75)$$

Transfer energije u neelastičnim sudarima se može izraziti kao [52]

$$\left(\frac{\partial(\frac{1}{2}mc^2)}{\partial t}\right)_{coll}^{(inel)} = - \sum_{j,j'} \int d\mathbf{c} \int d\mathbf{c}_0 g f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) f_{0j}(\mathbf{c}_0) \frac{1}{2} m \int d^2\Omega_{\mathbf{g}'} \sigma(j, j'; g, \chi) (c^2 - c'^2). \quad (3.76)$$

Može se pokazati da važi [52]

$$\left(\frac{\partial(\frac{1}{2}mc^2)}{\partial t}\right)_{coll}^{(inel)} = -n \frac{2\mu}{m+m_0} \langle \langle \nu_m^{(inel)}(\epsilon) \delta\epsilon \rangle_0 \rangle - n \frac{m_0}{m+m_0} \sum_{j,j'} \langle \langle \nu_T^{(inel)}(j, j'; g) \rangle_0 \rangle (\epsilon_{j'} - \epsilon_j), \quad (3.77)$$

gde je

$$\delta\epsilon \equiv \frac{1}{2}mc^2 - \frac{1}{2}m_0c_0^2 - \frac{1}{2}(m-m_0)\mathbf{c} \cdot \mathbf{c}_0, \quad (3.78)$$

a veličina

$$\nu_T^{(inel)}(j, j'; g) \equiv n_{0j} g \sigma_T(j, j'; g), \quad (3.79)$$

predstavlja totalnu kolizionu frekvencu za neelastični prelaz iz j u j' , dok je $\sigma_T(j, j'; g)$ totalni presek za ovaj prelaz. Drugi član u jednačini (3.77) se može napisati u obliku [52]

$$\begin{aligned} & \sum_{j,j'} \langle \langle \nu_T^{(inel)}(j, j'; g) \rangle_0 \rangle (\epsilon_{j'} - \epsilon_j) = \\ & \sum_{j < j'} \langle \langle \nu_T^{(inel)}(j, j'; g) \rangle_0 \rangle (\epsilon_{j'} - \epsilon_j) + \sum_{j > j'} \langle \langle \nu_T^{(inel)}(j, j'; g) \rangle_0 \rangle (\epsilon_{j'} - \epsilon_j) = \\ & \sum_{j < j'} (\langle \langle \nu_T^{(inel)}(j, j'; g) \rangle_0 \rangle - \langle \langle \nu_T^{(inel)}(j', j; g) \rangle_0 \rangle) (\epsilon_{j'} - \epsilon_j) \equiv \sum_{\Delta j} (\langle \nu_{\Delta j}^\uparrow(\epsilon) \rangle - \langle \nu_{\Delta j}^\downarrow(\epsilon) \rangle) \epsilon_{\Delta j}. \end{aligned} \quad (3.80)$$

Doprinos zahvata elektrona u jednačini za balans broja čestica je dat izrazom [52, 139]

$$C_1^{(A)} = -n \langle \langle \nu^{(A)}(\epsilon) \rangle_0 \rangle, \quad (3.81)$$

gde je $\nu^{(A)}(\epsilon)$ koliziona frekvencija za zahvat elektrona, koja je definisana kao

$$\nu^{(A)}(\epsilon) \equiv \sum_{j,j'} n_{0j} g \sigma_A(j, j'; g). \quad (3.82)$$

U jednačini (3.82) je $\sigma_A(j, j'; g)$ totalni presek za zahvat elektrona u kome neutralna čestica pređe iz stanja j u stanje j' . Može se pokazati da su transfer impulsa i transfer energije u zahvatu elektrona dati jednačinama [52, 139]

$$\left(\frac{\partial(m\mathbf{c})}{\partial t}\right)_{coll}^{(A)} = -n \langle \langle m\mathbf{c}\nu^{(A)}(\epsilon) \rangle_0 \rangle, \quad (3.83)$$

i

$$\left(\frac{\partial(\frac{1}{2}mc^2)}{\partial t}\right)_{coll}^{(A)} = -n\langle\langle\frac{1}{2}mc^2\nu^{(A)}(\epsilon)\rangle\rangle_0, \quad (3.84)$$

respektivno.

Doprinos jonizacije jednačini za balans broja čestica je predstavljen izrazom

$$C_1^{(I)} = n\langle\langle\nu^{(I)}(\epsilon)\rangle\rangle_0, \quad (3.85)$$

gde je $\nu^{(I)}(\epsilon)$ koliziona frekvencija za jonizaciju. Elektronska sudarna jonizacija je složeniji proces od zahvata elektrona, zbog toga što u tom procesu učestvuju tri tela. Međutim, može se smatrati da se ukupan impuls početnog elektrona, kao i sva raspoloživa kinetička energija nakon jonizacije raspodeljuju između primarnog i sekundarnog elektrona [139], zbog toga što su atomi (ili molekuli) pozadinske sredine znatno masivniji od elektrona. Ako se nakon jonizacije pozitivan jon nalazi u ekscitovanom stanju, u ovom procesu je utrošena energija jednaka zbiru praga za jonizaciju i praga za ekscitaciju pozitivnog jona u dato ekscitovano stanje. Pri ovim pretpostavkama se transfer impulsa i transfer energije u jonizaciji mogu izraziti kao [139]

$$\left(\frac{\partial(m\mathbf{c})}{\partial t}\right)_{coll}^{(I)} = 0, \quad (3.86)$$

i

$$\left(\frac{\partial(\frac{1}{2}mc^2)}{\partial t}\right)_{coll}^{(I)} = -n\langle\langle\nu^{(I)}(\epsilon)\rangle\rangle_0\epsilon^{(I)} - n\sum_{s\in I}\langle\langle\nu_s^{(I)}(\epsilon)\rangle\rangle_0\Delta\epsilon_s^{(I)}, \quad (3.87)$$

gde su $\epsilon^{(I)}$ i $\epsilon_s^{(I)}$ prag za jonizaciju i prag za ekscitaciju pozitivnog jona u ekscitovano stanje s , respektivno. Ukupna koliziona frekvencija za jonizaciju $\nu^{(I)}(\epsilon)$ je jednaka zbiru kolizionih frekvencija za pojedinačne jonizacione kanale

$$\nu^{(I)} = \sum_{s\in I}\nu_s^{(I)}(\epsilon), \quad (3.88)$$

dok je koliziona frekvencija za jonizacioni kanal u kome nastaje pojedinačno finalno stanje s predstavljena jednačinom

$$\nu_s^{(I)}(\epsilon) = n_0g\sigma_s^{(I)}(\epsilon), \quad (3.89)$$

gde je $\sigma_s^{(I)}(\epsilon)$ totalni presek za jonizacioni kanal s .

Ukupni kolizionni članovi su jednaki zbiru kolizionih članova koji odgovaraju elastičnim sudarima, neelastičnim sudarima, zahvatu elektrona i jonizaciji

$$C_\Phi = C_\Phi^{(elast)} + C_\Phi^{(inel)} + C_\Phi^{(A)} + C_\Phi^{(I)}, \quad (3.90)$$

gde je $\Phi \in \{1, m\mathbf{c}, \frac{1}{2}mc^2\}$.

Kada se primene izrazi za kolizionne članove, jednačine za balans broja čestica, impulsa i energije mogu se napisati u obliku [52, 139]

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\langle\mathbf{c}\rangle) = -n\langle\langle\nu^{(A)}(\epsilon)\rangle\rangle_0 + n\langle\langle\nu^{(I)}(\epsilon)\rangle\rangle_0, \quad (3.91)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(nm\langle\mathbf{c}\rangle) + \nabla \cdot (nm\langle\mathbf{c} \otimes \mathbf{c}\rangle) - nq\mathbf{E} = & -\mu n\langle\langle\tilde{\nu}_m^{(elast)}(\epsilon)\mathbf{c}\rangle\rangle_0 - n\mu\langle\langle\nu_m^{(inel)}(\epsilon)(\mathbf{c} - \mathbf{c}_0)\rangle\rangle_0 \\ & - n\langle\langle m\mathbf{c}\nu^{(A)}(\epsilon)\rangle\rangle_0, \end{aligned} \quad (3.92)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(n\langle\frac{1}{2}mc^2\rangle) + \nabla \cdot (n\langle\frac{1}{2}mc^2\mathbf{c}\rangle) - nq\mathbf{E} \cdot \langle\mathbf{c}\rangle = & -n\frac{\mu}{m+m_0}\langle\langle\nu_m^{(elast)}(\epsilon)(mc^2 - m_0c_0^2 - (m-m_0)\mathbf{c} \cdot \mathbf{c}_0)\rangle\rangle_0 \\ & -n\frac{\mu}{m+m_0}\langle\langle\nu_m^{(inel)}(\epsilon)(mc^2 - m_0c_0^2 - (m-m_0)\mathbf{c} \cdot \mathbf{c}_0)\rangle\rangle_0 \\ & -n\frac{m_0}{m+m_0}\sum_{j,j'}\langle\langle\nu_T^{(inel)}(j,j';g)\rangle\rangle_0(\epsilon_{j'} - \epsilon_j) - n\langle\langle\frac{1}{2}mc^2\nu^{(A)}(\epsilon)\rangle\rangle_0 \\ & -n\langle\langle\nu^{(I)}(\epsilon)\rangle\rangle_0\epsilon^{(I)} - n\sum_{s\in I}\langle\langle\nu_s^{(I)}(\epsilon)\rangle\rangle_0\Delta\epsilon_s^{(I)}. \end{aligned} \quad (3.93)$$

Desna strana jednačina (3.91)-(3.93) se može pojednostaviti uvođenjem aproksimacije transfera impulsa (eng. momentum transfer approximation), (skraćeno MT aproksimacija). U ovoj aproksimaciji se kolizione frekvence reprezentuju Tejlorovim razvojem oko srednje energije $\bar{\epsilon}$

$$\nu(\epsilon) = \nu(\bar{\epsilon}) + \nu'(\bar{\epsilon})(\epsilon - \bar{\epsilon}) + \dots, \quad (3.94)$$

gde su $\nu(\epsilon)$ i $\nu'(\epsilon)$ kolizijska frekvencija za proizvoljan tip sudarnog procesa i njen prvi izvod po energiji, respektivno. Pri tome se za sve sudarne procese osim zahvata elektrona uzima u obzir samo nulti član u razvoju. U slučaju zahvata elektrona nije dovoljno da bude uzet u obzir samo nulti član u razvoju (3.94) jer je uticaj ovog procesa na transportne osobine roja određen energijskom zavisnošću odgovarajuće kolizijske frekvencije [52]. Zato se prilikom zahvata elektrona uzimaju u obzir nulti i prvi član u razvoju (3.94).

U okviru MT aproksimacije transfer impulsa u elastičnim sudarima može se izraziti kao

$$\left(\frac{\partial(m\mathbf{c})}{\partial t}\right)_{coll,MT}^{(coh)} = n\mu\tilde{\nu}_m^{(elast)}(\bar{\epsilon})\langle\mathbf{c}\rangle. \quad (3.95)$$

Transfer energije u elastičnim sudarima je u okviru MT aproksimacije jednak

$$\left(\frac{\partial(\frac{1}{2}mc^2)}{\partial t}\right)_{coll,MT}^{(coh)} = n\frac{2m}{m_0}\nu_m^{(elast)}(\bar{\epsilon})\left(\frac{\langle\mu c^2\rangle}{2} - \frac{m_0}{m_0+m}\frac{3}{2}kT_0\right) \quad (3.96)$$

$$\approx n\frac{2m}{m_0}\nu_m^{(elast)}(\bar{\epsilon})\left(\frac{m}{2}\langle c^2\rangle - \frac{3}{2}kT_0\right), \quad (3.97)$$

gde približna jednakost važi za elektrone i ostale čestice čija je masa znatno manja od mase čestica pozadinske sredine. Transfer impulsa i transfer energije u neelastičnim sudarima su u okviru MT aproksimacije dati jednačinama

$$\left(\frac{\partial(m\mathbf{c})}{\partial t}\right)_{coll,MT}^{(inel)} = -n\mu\nu_m^{(inel)}(\bar{\epsilon})\langle\mathbf{c}\rangle, \quad (3.98)$$

i

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial(\frac{1}{2}mc^2)}{\partial t} \right)_{coll,MT}^{(inel)} &= -n \frac{2\mu}{m+m_0} \nu_m^{(inel)}(\bar{\epsilon}) \left(\langle \frac{1}{2}mc^2 \rangle - \frac{3}{2}kT_0 \right) \\ &\quad - n \frac{m_0}{m+m_0} \sum_{\Delta_j} (\nu_{\Delta_j}^\uparrow(\bar{\epsilon}) - \nu_{\Delta_j}^\downarrow(\bar{\epsilon})) \epsilon_{\Delta_j}. \end{aligned} \quad (3.99)$$

Zbog kraćeg zapisa, biće uvedena sledeća oznaka

$$\Omega(\bar{\epsilon}) \equiv \frac{m_0}{m_0+m} \sum_{\Delta_j} (\nu_{\Delta_j}^\uparrow(\bar{\epsilon}) - \nu_{\Delta_j}^\downarrow(\bar{\epsilon})) \epsilon_{\Delta_j}. \quad (3.100)$$

Može se pokazati da su u okviru MT aproksimacije transfer impulsa i energije u zahvatu elektrona dati u vidu izraza [52]

$$\left(\frac{\partial(m\mathbf{c})}{\partial t} \right)_{coll}^{(A)} \approx -nm(\nu^{(A)}(\bar{\epsilon}) + \xi\nu_1^{(A)}(\bar{\epsilon}))\langle \mathbf{c} \rangle, \quad (3.101)$$

i

$$\left(\frac{\partial(\frac{1}{2}mc^2)}{\partial t} \right)_{coll}^{(A)} \approx -nm\frac{1}{2} \left(\xi\nu_1^{(A)}(\bar{\epsilon})\langle \mathbf{c} \rangle^2 + (\nu^{(A)}(\bar{\epsilon}) + \xi\nu_1^{(A)}(\bar{\epsilon}))\langle c^2 \rangle \right), \quad (3.102)$$

gde je $\nu_1^{(A)} = \frac{d\nu^{(A)}}{dc}$ i ξ je definisano kao

$$\xi \equiv \frac{2}{3} \frac{m_0}{m+m_0} \left(\frac{1}{2}m\langle c^2 \rangle - \frac{1}{2}m\langle \mathbf{c} \rangle^2 \right). \quad (3.103)$$

Unutar MT aproksimacije jednačine za balans broja čestica, balans impulsa i balans energije se mogu napisati u obliku [52, 139]

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\langle \mathbf{c} \rangle) = n(\nu^{(I)}(\bar{\epsilon}) - \nu^{(A)}(\bar{\epsilon})), \quad (3.104)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (nm\langle \mathbf{c} \rangle) + \nabla \cdot (nm\langle \mathbf{c} \otimes \mathbf{c} \rangle) - nq\mathbf{E} = nm(\tilde{\nu}_m(\bar{\epsilon}) + \nu^{(A)}(\bar{\epsilon}) + \xi\nu_1^{(A)}(\bar{\epsilon}))\langle \mathbf{c} \rangle, \quad (3.105)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (nm\frac{1}{2}\langle c^2 \rangle) + \nabla \cdot (\frac{1}{2}nm\langle c^2 \mathbf{c} \rangle) - nq\mathbf{E} \cdot \langle \mathbf{c} \rangle &= -n\frac{2m}{m_0}\nu_m(\bar{\epsilon}) \left(\frac{1}{2}m\langle c^2 \rangle - \frac{3}{2}kT_0 \right) - n\Omega(\bar{\epsilon}) \\ &\quad - n \sum_b \nu_b^{(I)}(\bar{\epsilon})\epsilon_b^{(I)} - \frac{1}{2}nm\nu^{(A)}(\bar{\epsilon})\langle c^2 \rangle - \frac{1}{2}nm\nu_1^{(A)}(\bar{\epsilon})(\langle c^2 \rangle + \langle \mathbf{c} \rangle^2). \end{aligned} \quad (3.106)$$

U jednačinama (3.105) i (3.106) su $\tilde{\nu}_m(\bar{\epsilon})$ i $\nu_m(\bar{\epsilon})$ definisani kao

$$\tilde{\nu}_m(\bar{\epsilon}) = \tilde{\nu}_m^{(elast)}(\bar{\epsilon}) + \nu_m^{(inel)}(\bar{\epsilon}) \quad (3.107)$$

$$\nu_m(\bar{\epsilon}) = \nu_m^{(elast)}(\bar{\epsilon}) + \nu_m^{(inel)}(\bar{\epsilon}). \quad (3.108)$$

Uz to je u jednačini (3.106) zbog kraćeg zapisa uvedena oznaka

$$\sum_b \nu_b^{(I)}(\bar{\epsilon})\epsilon_b^{(I)} \equiv \nu^{(I)}(\bar{\epsilon})\epsilon^{(I)} + \sum_{s \in I} \nu_s^{(I)}(\bar{\epsilon})\Delta\epsilon_s^{(I)}. \quad (3.109)$$

Kada se jednačina (3.104) pomnoži sa $m\langle\mathbf{c}\rangle$ i oduzme od jednačine (3.105), dobije se jednačina oblika

$$mn\left(\frac{\partial}{\partial t} + \langle\mathbf{c}\rangle \cdot \nabla\right)\langle\mathbf{c}\rangle + \nabla \cdot (nk\hat{\mathbf{T}}) - nq\mathbf{E} = -nm(\tilde{\nu}_m(\bar{\epsilon}) + \nu^{(I)}(\bar{\epsilon}) + \xi\nu_1^{(A)}(\bar{\epsilon}))\langle\mathbf{c}\rangle, \quad (3.110)$$

gde je $\hat{\mathbf{T}}$ temperaturski tenzor. Ukoliko se jednačina (3.104) pomnoži sa $\frac{1}{2}m\langle c^2\rangle$ i oduzme od jednačine (3.106), dobije se jednačina

$$\begin{aligned} n\left(\frac{\partial}{\partial t} + \langle\mathbf{c}\rangle \cdot \nabla\right)\left(\frac{m\langle c^2\rangle}{2}\right) + \nabla \cdot \left(n\mathbf{Q} + \hat{\mathbf{P}} \cdot \langle\mathbf{c}\rangle\right) - nq\mathbf{E} \cdot \langle\mathbf{c}\rangle = \\ -n\frac{2m}{m_0}\nu_m(\bar{\epsilon})\left(\frac{m\langle c^2\rangle}{2} - \frac{3}{2}kT_0\right) - n\Omega(\bar{\epsilon}) - n\sum_b \nu_b^{(I)}(\bar{\epsilon})\epsilon_b^{(I)} \\ - \frac{1}{2}nm\langle c^2\rangle\nu^{(I)}(\bar{\epsilon}) - \frac{1}{2}nm\xi\nu_1^{(A)}(\bar{\epsilon})\left(\langle c^2\rangle + \langle\mathbf{c}\rangle^2\right), \end{aligned} \quad (3.111)$$

pri čemu su \mathbf{Q} i $\hat{\mathbf{P}}$ vektor toplotnog provođenja i tenzor pritiska, respektivno. Tenzor pritiska i temperaturski tenzor definisani su kao

$$\hat{\mathbf{P}} = nk\hat{\mathbf{T}} = mn\langle\delta\mathbf{c} \otimes \delta\mathbf{c}\rangle, \quad (3.112)$$

gde je $\delta\mathbf{c} = \mathbf{c} - \langle\mathbf{c}\rangle$ haotična komponenta brzine čestice. Vektor toplotnog provođenja je određen kao

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{2}m\langle(\delta\mathbf{c} \cdot \delta\mathbf{c})\delta\mathbf{c}\rangle. \quad (3.113)$$

Radi jednostavnosti nadalje će biti uvedeno nekoliko hipoteza. Biće pretpostavljeno da je haotična komponenta brzine elektrona znatno veća od usmerene komponente $\langle\mathbf{c}\rangle^2 \ll \langle c^2\rangle$. Na osnovu toga važi $\langle c^2\rangle + \langle\mathbf{c}\rangle^2 \approx \langle c^2\rangle$, odakle sledi $\xi = \frac{2}{3}\bar{\epsilon}$ i $k\hat{\mathbf{T}} = \frac{2}{3}\bar{\epsilon}\hat{\mathbf{I}}$, gde je $\hat{\mathbf{I}}$ jedinični operator. Pored toga, pretpostavlja se kako se sistem nalazi u stacionarnom stanju. Odatle sledi $\frac{\partial}{\partial t}\langle\mathbf{c}\rangle = 0$ i $\frac{\partial}{\partial t}\langle c^2\rangle = 0$. Pretpostavka je i da se sistem nalazi u hidrodinamičkom režimu, kao i to da se svi članovi u kojima figurišu parcijalni izvodi drugog i višeg reda po prostornim kordinatama mogu zanemariti. Da bi se reprezentovala prostorna nehomogenost srednje energije roja, srednja energija će biti napisana u obliku

$$\bar{\epsilon} = \epsilon_0 + \frac{1}{n}\gamma \cdot \nabla n + \dots, \quad (3.114)$$

gde su ϵ_0 i γ vrednost energije roja, koja je usrednjena po prostornim koordinatama i prostorni gradijent srednje energije, respektivno. Uz to će i kolizione frekvence za sve tipove sudarnih procesa biti napisane u obliku

$$\nu(\bar{\epsilon}) = \nu(\epsilon_0) + \frac{1}{n}\nu'(\epsilon_0)\gamma \cdot \nabla n + \dots, \quad (3.115)$$

gde su ν i ν' kolizijska frekvencija za proizvoljan tip sudarnog procesa i njen prvi izvod po energiji, respektivno. Pored toga se u hidrodinamičkom režimu srednja brzina čestica roja može napisati u obliku

$$\langle\mathbf{c}\rangle = \mathbf{W} - \frac{1}{n}\hat{\mathbf{D}} \cdot \nabla n + \dots \quad (3.116)$$

u kom su \mathbf{W} i $\hat{\mathbf{D}}$ bzina drifta i difuzioni tenzor, respektivno.

Kada su zadovoljene ove pretpostavke, jednačina (3.110) može se napisati u obliku

$$\begin{aligned} & \nabla \cdot \left(n \frac{2}{3} (\epsilon_0 + \frac{1}{n} \gamma \cdot \nabla n) \hat{\mathbf{I}} \right) - nq\mathbf{E} = \\ & -nm \left(\tilde{\nu}_m(\epsilon_0) + \frac{1}{n} \tilde{\nu}'_m(\epsilon_0) \gamma \cdot \nabla n + \nu^{(I)}(\epsilon_0) + \frac{1}{n} \nu'^{(I)}(\epsilon_0) \gamma \cdot \nabla n \right) \\ & + \frac{2}{3} (\epsilon_0 + \frac{1}{n} \gamma \cdot \nabla n) \cdot \left(\nu_1^{(A)}(\epsilon_0) + \frac{1}{n} \nu_1'^{(A)}(\epsilon_0) \gamma \cdot \nabla n \right) \cdot \left(\mathbf{W} - \frac{1}{n} \hat{\mathbf{D}} \cdot \nabla n \right). \end{aligned} \quad (3.117)$$

Ukoliko u jednačini (3.117) uzmemo u obzir samo članove u kojima ne figurišu prostorni gradijenti koncentracije, dobije se jednačina

$$\mathbf{W} = \frac{q\mathbf{E}}{m \left(\tilde{\nu}_m(\epsilon_0) + \nu^{(I)}(\epsilon_0) + \frac{2}{3} \epsilon_0 \nu_1^{(A)}(\epsilon_0) \right)}. \quad (3.118)$$

Slično tome, kada se u jednačini (3.117) uzmu u razmatranje samo članovi koji stoje uz prvi stepen prostornog gradijenta koncentracije, proizlazi jednačina

$$\begin{aligned} & \left(\tilde{\nu}_m(\epsilon_0) + \nu^{(I)}(\epsilon_0) + \frac{2}{3} \epsilon_0 \nu_1^{(A)}(\epsilon_0) \right) \hat{\mathbf{D}} = \frac{2\epsilon_0}{3m} \hat{\mathbf{I}} \\ & + \frac{d}{d\epsilon} \left(\tilde{\nu}_m(\epsilon) + \nu^{(I)}(\epsilon) + \frac{2}{3} \epsilon \nu_1^{(A)}(\epsilon) \right) \Big|_{\epsilon=\epsilon_0} \gamma \otimes \mathbf{W}. \end{aligned} \quad (3.119)$$

Ako su zadovoljene pomenute pretpostavke (stacionarno stanje, hidrodinamički režim i zanemarljivost usmerene komponente brzine elektrona u odnosu na haotičnu komponentu brzine) jednačina (3.111) se može napisati u obliku

$$\begin{aligned} & \mathbf{Q} \cdot \nabla n - mn \left(\tilde{\nu}_m(\epsilon_0) + \frac{1}{n} \tilde{\nu}'_m(\epsilon_0) \gamma \cdot \nabla n \right) \left(W^2 - \frac{2}{n} \mathbf{W} \cdot \hat{\mathbf{D}} \cdot \nabla n \right) = \\ & = -n \frac{2m}{m_0} \left(\nu_m(\epsilon_0) + \nu'_m(\epsilon_0) \frac{1}{n} \gamma \cdot \nabla n \right) \left(\epsilon_0 + \frac{1}{n} \gamma \cdot \nabla n - \frac{3}{2} kT_0 \right) \\ & - n \Omega(\epsilon_0) - \Omega'(\epsilon_0) \gamma \cdot \nabla n - n \sum_b \nu_b^{(I)}(\epsilon_0) \epsilon_b - \sum_b \nu_b'^{(I)}(\epsilon_0) \epsilon_b \gamma \cdot \nabla n \\ & - n \left(\epsilon_0 + \frac{1}{n} \gamma \cdot \nabla n \right) \left(\nu^{(I)}(\epsilon_0) + \frac{1}{n} \nu'^{(I)}(\epsilon_0) \gamma \cdot \nabla n \right) \\ & - n \left(\nu_1^{(A)}(\epsilon_0) + \frac{1}{n} \nu_1'^{(A)}(\epsilon_0) \gamma \cdot \nabla n \right) \frac{2}{3} \left(\epsilon_0^2 + \frac{2}{n} \epsilon_0 \gamma \cdot \nabla n \right). \end{aligned} \quad (3.120)$$

Pri izvođenju jednačine (3.120) je iskorišćena približna jednakost $q\mathbf{E} \cdot \langle \mathbf{c} \rangle \approx m \tilde{\nu}_m(\bar{\epsilon}) \langle \mathbf{c} \rangle^2$. Kada se u jednačini (3.120) uzmu u obzir samo članovi u kojima ne figurišu prostorni gradijenti koncentracije, dobije se jednačina

$$\begin{aligned} \epsilon_0 = & \frac{m_0 W^2}{2} \cdot \frac{\tilde{\nu}_m(\epsilon_0)}{\nu_m(\epsilon_0)} \cdot \frac{\nu_e(\epsilon_0)}{\nu_e(\epsilon_0) + \nu^{(I)}(\epsilon_0)} + \frac{3}{2} kT_0 \frac{\nu_e(\epsilon_0)}{\nu_e(\epsilon_0) + \nu^{(I)}(\epsilon_0)} \\ & - \frac{1}{\nu_e(\epsilon_0) + \nu^{(I)}(\epsilon_0)} \left(\Omega(\epsilon_0) + \sum_b \nu_b^{(I)}(\epsilon_0) \epsilon_b + \frac{2}{3} \nu_1^{(A)}(\epsilon_0) \epsilon_0^2 \right). \end{aligned} \quad (3.121)$$

Slično tome, ako se u jednačini (3.120) uzmu u obzir samo članovi koji stoje uz prvi stepen prostornog gradijenta koncentracije, dobije se jednačina

$$\begin{aligned} \frac{1}{\nu_e(\epsilon_0)} \mathbf{Q} + m_0 \frac{\tilde{\nu}_m(\epsilon_0)}{\nu_m(\epsilon_0)} \mathbf{W} \cdot \hat{\mathbf{D}} = \\ - \left(1 + \frac{\nu'_m(\epsilon_0)}{\nu_m(\epsilon_0)} \left(\epsilon_0 - \frac{3}{2} kT_0 - \frac{\tilde{\nu}'_m(\epsilon_0)}{\nu'_m(\epsilon_0)} \frac{m_0 W^2}{2} \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{\nu_e(\epsilon_0)} \frac{d}{d\epsilon} \left(\Omega(\epsilon) + \sum_b \nu_b^{(I)}(\epsilon) \epsilon_b^{(I)} + \epsilon \nu^{(I)}(\epsilon) + \frac{2}{3} \epsilon^2 \nu_1^{(A)}(\epsilon) \right) \Big|_{\epsilon=\epsilon_0} \right) \gamma. \end{aligned} \quad (3.122)$$

Sistem koji čine jednačine (3.118), (3.119), (3.121) i (3.122) može se rešiti numerički ukoliko su poznate sve kolizione frekvence u funkciji energije, i to ako se jedna od veličina (ϵ_0 , \mathbf{W} , γ , \mathbf{Q} ili $\hat{\mathbf{D}}$) može odrediti na neki drugi način. Vektor toplotnog provođenja se u slučaju elektrona često može zanemariti, pa se preostale četiri veličine mogu odrediti numeričkim rešavanjem ovog sistema jednačina, kada su poznate kolizione frekvence za pojedinačne sudarne procese u funkciji srednje energije elektrona.

3.4 Monte Carlo simulacije rojeva elektrona u gasovima i atomskim tečnostima

Kompjuterski kod baziran na Monte Carlo metodi, koji je korišćen u ovoj disretaciji, razvijen je u Laboratoriji za neravnotežne procese i primenu plazme Instituta za fiziku u Beogradu. Numerički integritet ovog kompjuterskog koda je verifikovan u benčmak proračunima za rojeve naelektrisanih čestica u vremenski konstantnim i vremenski promenljivim električnim i magnetskim poljima, kako za modelne tako i za realne gasove [67, 148–151]. Monte Carlo kod je korišćen za testiranje različitih metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine [67, 148–151], ali i za proučavanje implicitnih i eksplicitnih efekata nekonzervativnih sudara na transportne osobine rojeva elektrona [67, 148–152] i pozitrona [153–155]. Isti kod je korišćen za proučavanje prostorno-vremenske evolucije roja elektrona [133, 152], transporta elektrona i pozitrona u ukrštenim električnim i magnetskim poljima [153, 156–158], zatim transporta elektrona u živinim parama [159], transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima [160] i u modelovanju gasnih detektora sa ravnim pločastim elektrodama, koji se koriste u fizici visokih energija [28–30]. U domenu vremenski promenljivih električnih i magnetskih polja, Monte Carlo kod je upotrebljavan za istraživanje velikog broja kinetičkih fenomena, uključujući vremenski razloženu negativnu diferencijalnu provodnost [47, 161, 162], anomalnu anizotropnu difuziju [47, 163], tranzijentnu negativnu difuzivnost [164, 165], apsolutnu negativnu mobilnost [166], i mehanizme za grejanje elektrona [141].

Iako je naš Monte Carlo kod razvijen za ispitivanje rojeva naelektrisanih čestica u neutralnim gasovima, njegova primenljivost se uz izvesne modifikacije može proširiti na proučavanje rojeva elektrona u nepolarnim atomskim tečnostima, i to ukoliko je gustina tečnosti homogena. U tečnom argonu, kriptonu i ksenonu koji su predmet istraživanja u ovoj disertaciji, postoji

provodna zona u kojoj su elektroni kvazislobodni [101, 112, 175]. Uz to se disperziona relacija u ove tri tečnosti može smatrati paraboličnom i izotropnom ako se nijedan deo potencijala za rasejanje ne uključi u definiciju slobodnih elektronskih stanja, već se ceo potencijal za rasejanje uzima u obzir pri računanju preseka za elementarne sudarne procese [111]. Tada je uticaj tečnosti na kretanje elektrona u potpunosti određen sudarima. Na osnovu toga se naš Monte Carlo kod može primeniti za ispitivanje rojeva elektrona u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu ukoliko se na validan način reprezentuje dinamika rasejanja u ovim tečnostima. Ovo je postignuto uvođenjem tri dodatna efektivna sudarna procesa koji zajedno obezbeđuju dobru reprezentaciju srednjeg transfera energije i impulsa pri koherentnom rasejanju elektrona za svaku vrednost početne energije [176].

U našem Monte Carlo kodu se prati prostorno-vremenska evolucija roja elektrona koji se kreće u homogenom pozadinskom fluidu (koji se nalazi u gasnoj ili u tečnoj fazi) pod uticajem prostorno homogenog električnog polja \mathbf{E} koje je orijentisano duž x -ose. Pri tome je u nekim simulacijama uz električno polje prisutno i prostorno homogeno magnetsko polje \mathbf{B} , koje se nalazi u $x - z$ ravni i sa električnim poljem zaklapa ugao ψ . U početnom trenutku simulacije svi se elektroni nalaze u koordinatnom početku i nasumično su im dodeljeni vektori brzine na osnovu Maxwell-Boltzmann-ove raspodele, koja odgovara srednjoj energiji od 1 eV. Nakon tog trenutka se kretanje svakog elektrona prati nezavisno od ostalih elektrona. Pri praćenju pojedinačnog elektrona neophodno je odrediti kretanje elektrona između dva sudara, trenutak i tip narednog sudara, kao i promenu vektora brzine nakon sudara.

Kretanje elektrona između dva sudara određeno je Lorentz-ovom silom. Pritom je vremenska zavisnost brzine elektrona opisana drugim Newton-ovim zakonom

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = e\mathbf{E} + e\mathbf{v} \times \mathbf{B}, \quad (3.123)$$

gde su m , e , \mathbf{v} , i t masa elektrona, naelektrisanje elektrona, trenutna brzina i vremenska koordinata, respektivno. Jednačina 3.123 u skalarnom obliku glasi

$$\frac{dv_x}{dt} = \frac{e}{m}E + \frac{eB}{m}v_y \sin(\psi), \quad (3.124)$$

$$\frac{dv_y}{dt} = \frac{eB}{m}(v_z \cos(\psi) - v_x \sin(\psi)), \quad (3.125)$$

$$\frac{dv_z}{dt} = -\frac{eB}{m}v_y \cos(\psi), \quad (3.126)$$

pri čemu je $\frac{eB}{m}$ ciklotronska frekvencija elektrona. Ovaj sistem jednačina se može rešiti analitički ako su električno i magnetsko polje vremenski konstantni [177]. Na osnovu ovog analitičnog rešenja mogu se odrediti vremenske zavisnosti koordinata i brzina elektrona u intervalu između dva sudara. Alternativni način za reprezentovanje kretanja elektrona između dva sudara je primena Borisove rotacije [178]. Mnogobrojna testiranja Borisove rotacije pokazala su da je ova numerička procedura veoma precizna i efikasna u pogledu trošenja procesorskog vremena i da se jednako uspešno može primeniti kako za vremenski konstantna, tako i za vremenski promenljiva električna i magnetska polja, pod uslovom da su vektori električnog i magnetskog polja međusobno ortogonalni [pitajRef]. Prvi korak u ovom algoritmu je izračunavanje ubrzavanja

elektrona pod uticajem električnog polja za vreme polovine vremenskog koraka Δt

$$v_x := v_x + \frac{eE}{m} \frac{\Delta t}{2}. \quad (3.127)$$

Nakon toga se uzima u obzir rotacija vektora brzine pod dejstvom magnetskog polja

$$v_x := v_x + sv'_y, \quad (3.128)$$

$$v_y := v_y - sv'_x, \quad (3.129)$$

pri čemu je

$$s := -\frac{2 \tan\left(\frac{\theta}{2}\right)}{1 + \tan\left(\frac{\theta}{2}\right)^2} \quad (3.130)$$

dok su brzine v'_x i v'_y date izrazima

$$v'_x := v_x + \tan\left(-\frac{\theta}{2}\right) v_y, \quad (3.131)$$

$$v'_y := v_y - \tan\left(-\frac{\theta}{2}\right) v_x, \quad (3.132)$$

gde je θ ugao rotacije pod uticajem magnetskog polja, koji iznosi $\theta = \frac{eB}{m} \Delta t$. Nakon rotacije vektora brzine uračunava se ubrzavanje elektrona pod uticajem električnog polja za vreme druge polovine vremenskog koraka Δt

$$v_x := v_x + \frac{eE}{m} \frac{\Delta t}{2}. \quad (3.133)$$

Vrednosti koordinata elektrona nakon vremenskog koraka Δt su date u izrazima

$$x := x_0 + \frac{1}{2}(v_{x0} + v_x(t))\Delta t, \quad (3.134)$$

$$y := y_0 + \frac{1}{2}(v_{y0} + v_y(t))\Delta t, \quad (3.135)$$

$$z := z_0 + v_z(t)\Delta t, \quad (3.136)$$

gde su x_0 , y_0 , z_0 , v_{x0} i v_{y0} vrednosti x , y i z koordinata i vrednosti x i y komponenti brzine pre vremenskog koraka Δt , respektivno. Pokazano je kako u slučaju kretanja elektrona u konstantnom magnetskom polju (u odsustvu električnog polja) primena Borisove rotacije daje isti rezultat kao primena analitičkog rešenja [47]. Dok se vrednosti koordinata i brzina između dva sudara menjaju postepeno pod uticajem spoljašnjih polja, promena vektora brzine u sudaru se smatra trenutnom, zbog toga što je vreme trajanja sudara znatno kraće od vremenskog koraka Δt .

Trenutak i tip narednog sudara se određuju primenom slučajnih brojeva, uzimajući u obzir totalnu kolizionu frekvencu i parcijalne verovatnoće za pojedinačne sudarne procese. Verovatnoća da elektron neće učestvovati u sudaru u vremenskom intervalu između t_0 i t može se izraziti kao

$$P(t) = \exp\left(-\int_{t_0}^t \nu_T(\epsilon(t')) dt'\right), \quad (3.137)$$

gde je $\nu_T(\epsilon)$ totalna koliziona frekvencija elektrona koji ima energiju ϵ . Ova koliziona frekvencija se može izraziti kao

$$\nu_T(\epsilon) = n_0 \sqrt{\frac{2\epsilon}{m}} \sum_k \sigma_k(\epsilon), \quad (3.138)$$

gde se sumiranje vrši po svim tipovima sudara, $\sigma_k(\epsilon)$ je vrednost preseka za k -ti sudarni proces na energiji ϵ i n_0 je koncentracija molekula (ili atoma) pozadinske sredine. Gustina verovatnoće da će elektron učestvovati u sudaru u toku vremenskog intervala $(t, \Delta t)$ može se izraziti kao

$$p(t) = \frac{P(t) - P(t + \Delta t)}{\Delta t} = \nu_T(\epsilon(t)) \exp\left(-\int_{t_0}^t \nu_T(\epsilon(t')) dt'\right). \quad (3.139)$$

Slučajan trenutak sudara t_c , kome odgovara gustina verovatnoće $p(t)$, prikazana u jednačini (3.139), može se dobiti na osnovu jednačine

$$-\ln(1 - \xi_1) = \int_{t_0}^{t_c} \nu_T(\epsilon(t)) dt, \quad (3.140)$$

gde je ξ slučajan broj koji uzima vrednosti iz uniformne raspodele verovatnoće na intervalu $(0, 1)$. Jednačina (3.140) nema analitičko rešenje za realne gasove. Jedan od načina za određivanje trenutka t_c jeste primena metode nultih sudara (engl. null-collision method) [179], tako što se uvodi dodatni sudarni proces (nulti sudar), u kome vektor brzine elektrona ostaje nepromenjen. Koliziona frekvencija za ovaj dodatni sudarni proces izabrana je na takav način da totalna koliziona frekvencija ne zavisi od energije, već je jednaka maksimalnoj vrednosti totalne koliziona frekvencije u odsustvu nultog sudara. U okvirima null-collision metode jednačina (3.140) se može rešiti analitički. Međutim, u našem kodu se ne koristi ovaj metod, već se jednačina (3.140) rešava numeričkom integracijom, zbog toga što null-collision metoda može biti neefikasna u slučaju vremenski promenljivih polja [27, 47]. U metodi integracije se jednačina (3.140) može aproksimirati kao

$$\ln(1 - \xi_1) \leq \sum_i \nu_T(\epsilon(t_i)) \Delta t_i, \quad (3.141)$$

uz šta se kao trenutak sudara uzima $\sum_{i=1}^k \Delta t_i$, gde je k vrednost indeksa i , pri kojoj nejednakost (3.141) prestaje da važi. Da bi određivanje trenutka sudara na osnovu nejednakosti (3.141) bilo dobra aproksimacija rešavanja jednačine (3.140), neophodno je da vremenski korak za vremensku integraciju bude dovoljno mali. U našem kodu je ovaj vremenski korak izabran kao minimum tri važne vremenske konstante (koliziona frekvencija, ciklotronska frekvencija i period polja u slučaju prostorno promenljivih polja), koji je podeljen sa velikim brojem (između 20 i 100).

Nakon određivanja trenutka narednog sudara, tip narednog sudara k se određuje na osnovu uslova

$$\sum_{j=1}^{k-1} P_j < \xi_2 < \sum_{j=1}^k P_j, \quad (3.142)$$

gde je ξ_2 još jedan slučajan broj koji uzima vrednosti iz uniformne raspodele na intervalu $(0, 1)$. U nejednačini (3.142) su P_j parcijalne verovatnoće, koje su definisane kao

$$P_j = \frac{\sigma_j(\epsilon)}{\sigma_T(\epsilon)}, \quad (3.143)$$

gde je $\sigma_T(\epsilon)$ totalni presek na energiji ϵ , koji se određuje kao $\sigma_T(\epsilon) = \sum_j \sigma_j(\epsilon)$, pri čemu se sumiranje vrši po svim sudarnim procesima (uključujući i nulti sudar ako se koristi null-collision metoda).

Promena pravca i smera brzine elektrona nakon sudara je reprezentovana uglom rasejanja χ i azimutalnim uglom ϕ . Uz to je izotropno rasejanje pretpostavljeno za sve sudarne procese, osim za efektivni sudarni proces koji je opisan σ_{energy} presekom, u kome se elektroni rasejavaju ka napred ($\chi = 0$) (videti potpoglavlje 6.2.1). Nakon sudara se vrednost azimutalnog ugla određuje na osnovu jednačine

$$\phi = 2\pi\xi_3, \quad (3.144)$$

gde je ξ_3 slučajan broj koji uzima vrednosti iz uniformne raspodele na intervalu $(0, 1)$. U slučaju izotropnog rasejanja ugao rasejanja χ se određuje na osnovu jednačine

$$\chi = \arccos(1 - 2\xi_4). \quad (3.145)$$

Ako se pri određivanju promene ugla χ nakon sudara pretpostavi izotropno rasejanje, neophodno je da koliziona frekvencija za elastične sudare bude izračunata na osnovu momentum transfer preseka umesto totalnog preseka za elastično rasejanje, a sve to da bi se dobro opisala razmena impulsa i energije u elastičnim sudarima. Na visokim vrednostima redukovano električnog polja, na kojima rasejanje ka napred postaje dominantno, potrebno je da ugaona zavisnost verovatnoće za rasejanje bude uzeta u obzir [177, 180]. Nakon elastičnog rasejanja i efektivnih sudarnih procesa koji su reprezentovani σ_{both} i σ_{energy} presecima energija elektrona se smanjuje za faktor $\frac{2m\epsilon}{M}(1 - \cos\chi)$, gde je m masa elektrona, M je masa molekula (ili atoma) pozadinskog fluida, ϵ je vrednost energije elektrona pre sudara, a χ je ugao rasejanja. Nakon neelastičnog rasejanja i/ili jonizacije, energija elektrona se umanjuje za iznos koji odgovara energijskom pragu za taj proces, dok se energija koja je preostala nakon jonizacije raspoređuje između primarnog i sekundarnog elektrona. Udeo preostale energije koji se dodeli primarnom i sekundarnom elektronu određuje se primenom još jednog slučajnog broja koji uzima vrednosti iz uniformne raspodele na intervalu $(0, 1)$.

Monomi prostornih koordinata i komponenti brzina se sampluju i usrednjavaju po ansamblu elektrona u diskretnim vremenskim trenucima. Na osnovu ovih monoma mogu se izračunati transportne veličine u trenucima samplovanja.

Srednja energija se izračunava kao

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle. \quad (3.146)$$

Balk brzina drifta $\mathbf{W}^{(b)}$, balk difuzioni tenzor $\mathbf{D}^{(b)}$ i balk transportni tenzor trećeg reda $\mathbf{Q}^{(b)}$ se računaju na osnovu jednačina

$$\mathbf{W}^{(b)} = \frac{d}{dt}\langle \mathbf{r} \rangle, \quad (3.147)$$

$$\mathbf{D}^{(b)} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle \mathbf{r}^{**} \rangle, \quad (3.148)$$

$$\mathbf{Q}^{(b)} = \frac{1}{3!} \frac{d}{dt} \langle \mathbf{r}^* \mathbf{r}^* \mathbf{r}^* \rangle, \quad (3.149)$$

gde je $\mathbf{r}^* = \mathbf{r} - \langle \mathbf{r} \rangle$, dok ugaone zagrade $\langle \rangle$ označavaju usrednjavanje po ansamblu. Fluks brzina drifta $\mathbf{W}^{(f)}$, fluks difuzioni tenzor $\mathbf{D}^{(f)}$ i fluks transportni tenzor trećeg reda se određuju na osnovu jednačina

$$\mathbf{W}^{(b)} = \left\langle \frac{d}{dt} \mathbf{r} \right\rangle, \quad (3.150)$$

$$\mathbf{D}^{(b)} = \frac{1}{2} \left\langle \frac{d}{dt} (\mathbf{r}^{**}) \right\rangle, \quad (3.151)$$

$$\mathbf{Q}^{(b)} = \frac{1}{3!} \left\langle \frac{d}{dt} (\mathbf{r}^* \mathbf{r}^* \mathbf{r}^*) \right\rangle. \quad (3.152)$$

U odsustvu magnetskog polja jednačine za određivanje komponenti balk difuzionog tenzora se mogu napisati kao

$$D_L^{(b)} = \frac{1}{2} n_0 \frac{d}{dt} (\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle \langle x \rangle), \quad (3.153)$$

$$D_T^{(b)} = \frac{1}{2} n_0 \frac{d}{dt} (\langle y^2 \rangle), \quad (3.154)$$

dok se odgovarajuće jednačine za komponente fluks difuzionog tenzora mogu predstaviti u obliku

$$D_L^{(f)} = n_0 (\langle x v_x \rangle - \langle x \rangle \langle v_x \rangle), \quad (3.155)$$

$$D_T^{(f)} = n_0 (\langle y v_y \rangle - \langle y \rangle \langle v_y \rangle). \quad (3.156)$$

Slično tome, komponente balk transportnog tenzora trećeg reda je u odsustvu magnetskog polja moguće izračunati na osnovu jednačina

$$Q_L^{(b)} = n_0^2 \frac{1}{6} \frac{d}{dt} (\langle x^3 \rangle - 3 \langle x \rangle \langle x^2 \rangle + 2 (\langle x \rangle)^3), \quad (3.157)$$

$$Q_T^{(b)} = \frac{1}{6} n_0^2 \frac{d}{dt} (\langle x y^2 \rangle - \langle x \rangle \langle y^2 \rangle), \quad (3.158)$$

dok se komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda mogu odrediti kao

$$Q_L^{(f)} = \frac{1}{6} n_0^2 (3 \langle x^2 v_x \rangle - 3 \langle v_x \rangle \langle x^2 \rangle - 6 \langle x \rangle \langle x v_x \rangle + 6 \langle x \rangle \langle x \rangle \langle v_x \rangle), \quad (3.159)$$

$$Q_T^{(f)} = \frac{1}{6} n_0^2 (\langle y^2 v_x \rangle + 2 \langle x y v_y \rangle - \langle v_x \rangle \langle y^2 \rangle - 2 \langle x \rangle \langle y v_y \rangle). \quad (3.160)$$

Pri tome se longitudinalne i transverzalne komponente difuzionog tenzora i transportnog tenzora trećeg reda, u slučaju kada je električno polje duž x -ose, definišu kao

$$D_L = D_{xx}, \quad (3.161)$$

$$D_T = D_{yy}, \quad (3.162)$$

$$Q_L = Q_{xxx}, \quad (3.163)$$

$$Q_T = \frac{1}{3}(Q_{xyy} + Q_{yxy} + Q_{yyx}) = \frac{1}{3}(Q_{xyy} + 2Q_{yyx}). \quad (3.164)$$

Ovde je važno naglasiti da se pri proračunu balk komponenti transportnog tenzora trećeg reda ne koristi numeričko diferenciranje, nego se izraz koji stoji pod izvodom aproksimira linearnom funkcijom. Izvod tog izraza se potom određuje kao koeficijent pravca ove linearne funkcije. Ovaj način određivanja prvog izvoda po vremenu je validan zbog toga što su transportni koeficijenti nezavisni od vremena nakon relaksacije roja (ako su spoljašnja polja vremenski nezavisna), pa je izraz u zagradi (koji stoji pod izvodom) linearna funkcija vremena. Uz to je koeficijent pravca ove linearne funkcije jednak prvom izvodu te funkcije po vremenu. Balk vrednosti transportnih koeficijenata trećeg reda se određuju na ovaj način zato što u slučaju transportnih koeficijenata višeg reda numeričko diferenciranje značajno povećava fluktuacije rezultata. Validnost ovog načina određivanja balk komponenti transportnih koeficijenata trećeg reda je proverena poređenjem sa rezultatima koji su izračunati primenom numeričkog diferenciranja, kao i poređenjem sa fluks vrednostima ovih transportnih koeficijenata u odsustvu nekonzervativnih procesa.

Statistička greška transportnih veličina se procenjuje kao standardna greška. Naime, statistička greška ovih veličina je jednaka kvadratnom korenu njihovog srednjeg kvadratnog odstupanja od srednje vrednosti, koji je podeljen sa kvadratnim korenom broja čestica u ansamblu. Da bi se smanjila statistička greška veličina koje su izračunate uz pomoć Monte Carlo simulacija, neophodno je da u simulacijama bude praćen veliki broj čestica. Pri tome je za proračun komponenti difuzionog tenzora i transportnog tenzora trećeg reda potrebno da u simulacijama bude praćeno između 10^6 i 10^7 čestica, respektivno. Praćenje velikog broja čestica dovodi do toga da su naše Monte Carlo simulacije jako vremenski zahtevne. Vreme trajanja simulacija je naročito dugo u oblasti niskih redukovanih električnih polja, na kojima su brzinski koeficijenti za neelastične sudare i jonizaciju zanemarljivi. Ovo je posledica toga što je transfer energije u elastičnim sudarima znatno manji nego u neelastičnim sudarima i jonizaciji što dovodi do jako spore relaksacija energije u ovom opsegu polja. Da bi se skratilo vreme trajanja simulacija, u opsegu polja u kome je relaksacija energije neefikasna, koristi se multiplikacija roja. U ovom opsegu polja simulacije počnu sa manjim brojem naelektrisanih čestica (oko 10^4), koje se prate do trenutka relaksacije. Nakon trenutka relaksacije broj naelektrisanih čestica se postepeno povećava do željenog broja tako što se u fiksним vremenskim trenucima duplira svaka naelektrisana čestica iz ansambla. Posle trenutka dupliranja svaka naelektrisana čestica se prati nezavisno i ima svoju putanju, koja je određena delovanjem spoljašnjih polja i sudarima sa molekulima (ili atomima) pozadinske sredine. Transportne veličine se računaju tek kada prođe nekoliko perioda od završetka multiplikacije. Ova numerička procedura dupliranja elektrona nakon relaksacije u stacionarni režim je detaljno testirana [pitajRef].

Pored multiplikacije roja, koja se koristi u limitu malih električnih polja gde je otežan transfer energije u sudarima čestica roja i atoma ili molekula pozadinskog gasa, u našem kodu se, s ciljem skraćivanja vremena trajanja simulacija, koriste i tehnike reskaliranja koje obezbeđuju da broj čestica roja ostane u okolini unapred zadate vrednosti. Ove tehnike su neophodne u uslovima u kojima nekonzervativni procesi poput jonizacije i zahvata elektrona u slučaju

transporta elektrona i formiranja pozitronijuma pri transportu pozitrona dovode do značajne promene broja čestica u toku trajanja simulacije. Značajno povećanje broja čestica dovodi do porasta trošenja računarskih resursa koji su potrebni za izvršavanje simulacije, dok značajno smanjenje broja čestica povećava statističke fluktuacije i smanjuje preciznost rezultata, a može dovesti i do potpunog prekida simulacije. U našem kodu mogu se koristiti tehnike diskretnog i kontinualnog reskaliranja [160]. Tehnika diskretnog reskaliranja u fiksnim vremenskim trenucima izbacuje nekoliko čestica iz roja ukoliko broj čestica premašuje željenu vrednost, ili duplira nekoliko čestica ukoliko je broj čestica u roju manji od željene vrednosti. Tehnika kontinualnog reskaliranja izbacuje višak čestica ili duplira postojeće čestice, u zavisnosti od broja čestica u roju, u bilo kom trenutku trajanja simulacije u kome se ukaže potreba za korekcijom broja čestica u roju, a ne samo u unapred određenim vremenskim trenucima. Jako je značajno da ove tehnike reskaliranja ne menjaju funkciju raspodele čestica po energijama. Ove tehnike reskaliranja su detaljno opisane i temeljno testirane u referenci [160].

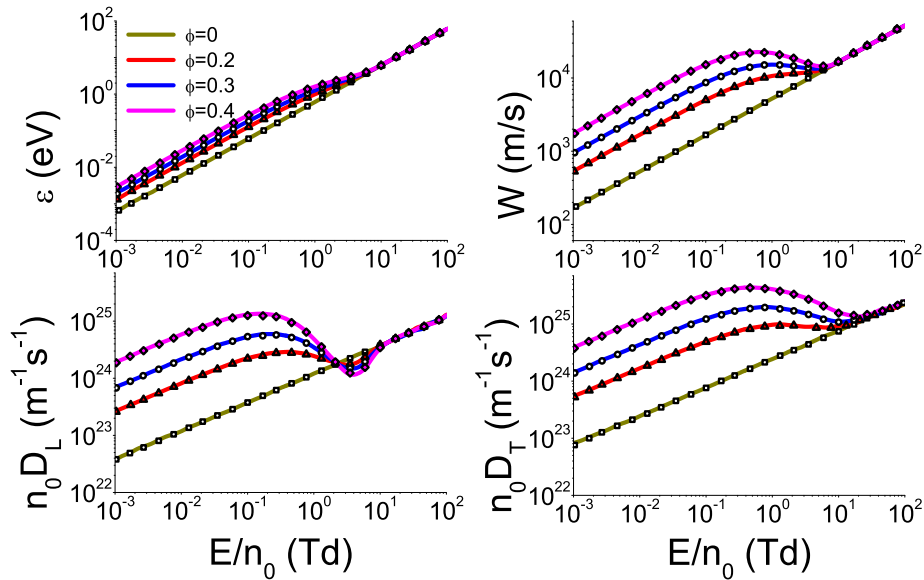
3.4.1 Benčmark proračuni za Percus-Yevick-ovu modelnu tečnost

U ovom potpoglavlju su prikazani naši proračuni transportnih veličina u Percus-Yevick-ovoj modelnoj tečnosti. Ovi proračuni su urađeni da bi se testirala implementacija koherentnog rasejanja u našem Monte Carlo kodu. Percus-Yevick-ova modelna tečnost je varijanta modela krutih sfera, u kojoj krute sfere zauzimaju konačan udeo zapremine prostora, pa u ovom modelu strukturni efekti imaju značajan uticaj na dinamiku rasejanja elektrona [176]. Radijalna parna korelaciona funkcija koja odgovara Percus-Yevick-ovom modelu dobija se zatvaranjem Ornstein–Zernike jednačine primenom Percus-Yevickove aproksimacije uz reprezentovanje interakcije između pozadinskih atoma potencijalom krutih sfera [176, 181]. Statički strukturni faktor koji odgovara Percus-Yevickovom modelu dobija se kao Fourier-ov transform ove parne korelacione funkcije [176]. U našim proračunima se koristi modifikovani Verlet-Weis-ov statički strukturni faktor [182], koji je upotrebljen i u radu Tattersall-a i saradnika [176]. Ovaj strukturni faktor je dat u vidu izraza

$$S(\Delta k) = \left(1 + \frac{24\eta}{\Delta k^2} \left[\frac{2}{\Delta k^2} \left(\frac{12\zeta}{\Delta k^2} - \beta \right) + \frac{\sin(\Delta k)}{\Delta k} \left(\alpha + 2\beta + 4\zeta - \frac{24\zeta}{\Delta k^2} \right) + \cos(\Delta k) \left(\frac{2}{\Delta k^2} \left(\beta + 6\zeta - \frac{12}{\Delta k^2} \right) - \alpha - \beta - \zeta \right) \right] \right)^{-1}, \quad (3.165)$$

gde je $\eta = \phi - \frac{\phi^2}{16}$, $\alpha = \frac{(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4}$, $\beta = \frac{-6\eta(1+\frac{\eta}{2})^2}{(1-\eta)^4}$ i $\zeta = \frac{\eta\alpha}{2}$ [176]. Količnik pakovanja ϕ određuje udeo zapremine prostora koji je popunjen krutim sferama. Ovaj količnik se može izraziti kao $\phi = \frac{4}{3}\pi r^3 n_0$, gde su r i n_0 radijus krutih sfera i njihova koncentracija, respektivno [176].

Na grafiku 1 su prikazane vrednosti srednje energije, brzine drifta i komponenti difuzionog tenzora za elektrone u Percus Yevickov-om modelu, koje su određene u našim Monte Carlo simulacijama, u funkciji redukovanog električnog polja E/n_0 i količnika pakovanja ϕ . Vrednosti ovih transportnih veličina, koje su odredili Tattersall i saradnici, primenom svog Monte Carlo



Slika 1: Poređenje vrednosti srednje energije, brzine drifta W , longitudinalne komponente difuzionog tenzora $n_0 D_L$ i transverzalne komponente difuzionog tenzora $n_0 D_T$ za roj elektrona u Percus-Yevick-ovoj modelnoj tečnosti, koje su dobijene u našim proračunima sa rezultatima Tattersall-a i saradnika [176]. Transportne veličine su prikazane kao funkcija redukovanoeg električnog polja E/n_0 i količnika pakovanja ϕ . Naši rezultati su reprezentovani linijama, dok su rezultati Tattersall-a i saradnika [176] dati u vidu simbola - i jedni i drugi su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

koda i numeričkim rešavanjem Boltzmann-ove jednačine, prikazane su na istom grafiku radi poređenja [176]. Naši rezultati su predstavljeni linijama, dok su rezultati Tattersall-a i saradnika predstavljeni simbolima. Na ovom grafiku se uočava da se naši rezultati za sve transportne koeficijente i za sve vrednosti E/n_0 i ϕ odlično slažu sa rezultatima grupe autora, što je pokazatelj toga da su efekti koherentnog rasejanja dobro reprezentovani u našem Monte Carlo kodu.

Sa grafika 1 se vidi da srednja energija, brzina drifta i komponente difuzionog tenzora snažno zavise od ϕ na niskim poljima. Uzrok tome je što su efekti koherentnog rasejanja najintenzivniji na niskim energijama. Međutim, zavisnost transportnih veličina od ϕ opada sa porastom E/n_0 i praktično je zanemarljiva na poljima višim od 40 Td, zbog slabog uticaja efekata koherentnog rasejanja na dinamiku visokoenergijskih elektrona. Srednja energija i brzina drifta se povećavaju sa porastom ϕ u celom opsegu polja do oko 10 Td, dok se transverzalna komponenta difuzionog tenzora povećava sa porastom ϕ do oko 35 Td. Zavisnost longitudinalne komponente difuzionog tenzora od ϕ je nešto složenija. Naime, ova komponenta se povećava sa porastom ϕ do oko 2.1 Td, posle čega opada sa porastom ϕ do oko 13 Td, pritom je na višim poljima zavisnost ove komponente od ϕ praktično zanemarljiva. Srednja energija elektrona se monotono povećava sa porastom E/n_0 za sve vrednosti ϕ . No, u profilu brzine drifta je prisutna negativna diferencijalna provodnost za $\phi \geq 0.3$ u opsegu polja od 0.5 Td do 6 Td, a za niže se vrednosti ϕ brzina drifta monotono povećava sa porastom E/n_0 u celom opsegu polja. Pod negativnom diferencijalnom provodnošću podrazumeva se opadanje brzine drifta sa porastom E/n_0 . U gasnoj fazi je ovaj efekat posledica specifične energijske zavisnosti preseka

za elastične i neelastične sudare ili prisustva nekonzervativnih sudara [13, 14, 21]. U ovom pak slučaju negativna diferencijalna provodnost posledica je isključivo strukturnih efekata [68–70]. Kvantitativni kriterijum za pojavu strukturno indukovane negativne diferencijalne provodnosti je razmatran u radu White-a i Robson-a [183]. Opadanje brzine drifta sa porastom E/n_0 u ovom slučaju se može pripisati smanjenju uticaja koherentnih efekata na dinamiku rasejanja elektrona sa povećanjem energije elektrona, jer koherentni efekti dovode do povećanja brzine drifta. Sa grafika se vidi kako $n_0 D_L$ opada sa porastom E/n_0 od oko 0.1 Td do oko 4 Td, dok $n_0 D_T$ opada sa porastom E/n_0 od oko 0.35 do oko 25 Td. Na najvišim poljima se grafici srednje energije, brzine drifta i komponenti difuzionog tenzora za $\phi > 0$ približavaju odgovarajućim graficima za $\phi = 0$. Pri tome odgovarajuća vrednost E/n_0 , na kojoj uticaj koherentnih efekata počne da se smanjuje, opada sa porastom ϕ .

3.5 Zaključak

U ovom poglavlju su predstavljeni metodi za izračunavanje transportnih koeficijenata rojeva naelektrisanih čestica. Potpoglavlje 3.2 prikazuje metod više članova za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine, u okviru kog se funkcija raspodele u faznom prostoru razvija u red po skupu bazisnih funkcija. Funkcija raspodele se pritom razvija po Burnett-ovim funkcijama u brzinskom prostoru. Pokazuje se da se kada su zadovoljeni hidrodinamički uslovi, funkcija raspodele razvija po gradijentima koncentracije u konfiguracionom prostoru. Koeficijenti u razvoju funkcije raspodele po ovom skupu bazisnih funkcija se zovu momenti funkcije raspodele. Na osnovu relacija ortogonalnosti korišćenih bazisnih funkcija, Boltzmann-ova jednačina se svodi na hijerarhiju kinetičkih jednačina po momentima funkcije raspodele, koja se potom rešava numerički. Transportne veličine koje su od interesa za ovu disertaciju se mogu izračunati na osnovu momenata funkcije raspodele. U okviru ove disertacije je korišćen metod za rešavanje Boltzmann-ove jednačine proširen razvojem fluks gradijentne relacije u ireducibilnoj formi do izvoda drugog reda, da bi se omogućilo izračunavanje komponenti fluks transportnog tenzora trećeg reda.

U potpoglavlju 3.3 uvedena je hijerarhija momentnih jednačina koja se može izvesti množenjem Boltzmann-ove jednačine proizvoljnom funkcijom brzine i njenom integracijom po celom brzinskom prostoru. Prikazan je sistem jednačina koji čine jednačine za balans broja čestica, impulsa i energije, respektivno. Nakon toga je pokazan oblik kolizionog člana za proizvoljnu momentnu jednačinu u slučaju koherentnog i nekoherentnog rasejanja. Kolizioni član se može odrediti integracijom kolizionog operatora po brzinskom prostoru. Uzimanjem u obzir efekata koherentnog rasejanja pri elastičnim sudarima, momentne jednačine za rojeve naelektrisanih čestica u gasnoj fazi su generalizovane na slučaj rojeva naelektrisanih čestica u nepolarnim tečnostima. Potom je uvedena aproksimacija transfera impulsa koja značajno pojednostavljuje oblik odgovarajućih kolizionih članova. Prikazani sistem jednačina je zatim dodatno pojednostavljen uvođenjem nekoliko pretpostavki, koje su zadovoljene za rojeve lakih naelektrisanih čestica, ukoliko je uspostavljen hidrodinamički režim i ukoliko su spoljašnja polja stacionarna. Na osnovu toga je dobijen sistem od četiri jednačine (jedne tenzorske, dve vektorske i jedne

skalarne), koji povezuje srednju energiju, brzinu drifta, vektor energijskog gradijenta, vektor toplotnog provođenja i difuzioni tenzor. U slučaju lakih naelektrisanih čestica poput elektrona i pozitrona vektor toplotnog provođenja može se zanemariti. Nakon toga se dobijeni sistem jednačina može rešiti numerički, ako su poznate kolizione frekvence u funkciji srednje energije .

Monte Carlo kod koji je korišćen u izradi ove disertacije centralna je tema potpoglavlja 3.4. Ovaj kod prati roj naelektrisanih čestica koje se kreću u homogenom i neutralnom pozadinskom fluidu, pod uticajem spoljašnjeg električnog i eventualno magnetskog polja. Na početku ovog potpoglavlja je dat kratak osvrt na razvoj i ranije primene razmatranog Monte Carlo koda. Potom su prikazani početni uslovi simulacije, kao i jednačine kretanja koje opisuju dinamiku pojedinačnih naelektrisanih čestica između dva sudara u slučaju proizvoljne konfiguracije električnog i magnetskog polja. Usledio je prikaz algoritma Borisove rotacije, koji se koristi da opiše kretanje naelektrisanih čestica između dva sudara kada su električno i magnetsko polje međusobno ortogonalna, kao i u odsustvu magnetskog polja, a zatim se govorilo o načinu na koji se određuju trenutak i tip narednog sudara naelektrisane čestice sa neutralnim česticama pozadinske sredine, na osnovu slučajnih brojeva. Objasnjeno je zatim kako se određuju pravac i smer brzine naelektrisane čestice nakon sudara. U slučaju rojeva naelektrisanih čestica u gasovima se pretpostavlja izotropno rasejanje. Zbog toga se elastični sudari opisuju pomoću preseka za transfer impulsa, dok se neelastični sudari opisuju primenom totalnog preseka za rasejanje. Međutim, u slučaju rojeva naelektrisanih čestica u tečnoj fazi ne može se koristiti izotropno rasejanje, budući da je anizotropija koherentnog rasejanja vrlo izražena. Pored toga, efektivni srednji slobodni putevi za transfer impulsa i energije u tečnoj fazi su međusobno različiti. Zbog toga je u okviru ove disertacije postojeći Monte Carlo kod, koji je razvijen u Laboratoriji za neravnotežne procese i primenu plazme, proširen na domen rojeva naelektrisanih čestica u nepolarnim tečnostima uvođenjem tri efektivna sudarna procesa, koji dobro opisuju srednji transfer impulsa i energije pri koherentnom rasejanju. Ovi efektivni sudarni procesi su detaljno opisani u potpoglavlju 6.2.1.

Nakon razmatranja implementacije sudara naelektrisanih čestica roja sa neutralnim česticama pozadinske sredine u potpoglavlju 3.4 su prikazane jednačine za izračunavanje transportnih veličina, koje su od značaja za ovu disertaciju, a koje se mogu odrediti direktno na osnovu dinamičkih promenljivih koje se računaju u Monte Carlo simulacijama. Za potrebe našeg istraživanja bilo je neophodno dodatno proširiti postojeći Monte Carlo kod, uvođenjem procedura za uzorkovanje monoma trećeg stepena po koordinatama, kao i monoma drugog stepena po koordinatama i prvog stepena po komponentama vektora brzine. Navedeni monomi su neophodni za izračunavanje vrednosti balk i fluks transportnog tenzora trećeg reda, respektivno. Iako u eksplicitnim izrazima za balk transportne koeficijente trećeg reda stoji diferenciranje po vremenu, poželjno je izbeći numeričko diferenciranje odgovarajućeg izraza u zagradi, zato što bi male fluktuacije ovog izraza dovele do velikih fluktuacija njegovog izvoda. Zbog toga se u okviru ove disertacije vrednost prvog izvoda po vremenu određuje na osnovu koeficijenta pravca linearizovanog izraza u zagradi. U ovoj je tezi statistička greška rezultata koji su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija procenjena kao standardna greška. Na kraju potpoglavlja opisane su tehnike za multiplikaciju roja koje se koriste za smanjenje trajanja vremenski zahtevnih

simulacija, kao i tehnike za reskaliranje roja što se koriste za održavanje konstantnog broja čestica roja u prisustvu intenzivnih nekonzervativnih efekata. Ovi efekti uključuju jonizaciju i elektronski zahvat u slučaju elektrona i formiranje pozitronijuma u slučaju pozitrona.

U potpoglavlju 3.4.1 primenom Monte Carlo metoda proučavan je transport elektrona u Percus-Yevick-ovom modelu za nekoliko različitih vrednosti parametra popunjenosti. Pri tome su određeni srednja energija, brzina drifta i komponente difuzionog tenzora za elektrone u ovom modelu, a njihove vrednosti su upoređene sa rezultatima ranijih autora, koji su dobijeni primenom Monte Carlo metoda i metoda više članova za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine. Odlično slaganje naših rezultata sa rezultatima koje su odredili raniji autori potvrđuje korektnost implementacije efekata koherentnog rasejanja i numerički integritet Monte Carlo koda, koji je korišćen u ovoj disertaciji.

4 Transportni koeficijenti trećeg reda za naelektrisane čestice u modelnim gasovima

4.1 Uvod

U ovom odeljku su predstavljene proračuni transportnih koeficijenata trećeg reda (TKIII) u modelnim gasovima. Oni su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija i kompjuterskog koda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine na osnovu momentnog metoda. Ova dva kompjuterska koda su do sada detaljno testirana u ranijim publikacijama [31, 47, 156, 157, 184]. Sistematski proračuni TKIII upotrebom ove dve nezavisne tehnike predstavljaju istovremeno proveru validnosti izraza na osnovu kojih se računaju komponente transportnog tenzora trećeg reda (TTIII) u momentnoj metodi za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine i Monte Carlo simulacijama, kao i proveru ispravne implementacije procedura za izračunavanje ovih komponenti u korišćenim kompjuterskim kodovima.

Jedna od prednosti izučavanja transporta naelektrisanih čestica u modelnim gasovima je ta što jednostavna energijska zavisnost preseka za sudare naelektrisane čestice roja sa neutralnim molekulima u ovim gasovima omogućava izolovanje uticaja pojedinačnih sudarnih procesa na trendove zavisnosti transportnih koeficijenata od električnog i magnetskog polja. Ovo je naročito značajno u slučaju TKIII jer su oni znatno osetljivi na energijsku zavisnost preseka za sudarne procese od transportnih koeficijenata nižeg reda (brzine drifta i difuzionog tenzora), a do sada nisu bili temeljno istraženi u literaturi [126, 127, 132]. Pored toga su trendovi zavisnosti TKIII od električnog i magnetskog polja teži za razumevanje od odgovarajućih trendova transportnih koeficijenata nižeg reda zbog komplikovanije fizičke interpretacije TKIII. Još jedna prednost proračuna TKIII u modelnim gasovima, koji su dobijeni na osnovu ove dve nezavisne tehnike, jeste to što oni mogu poslužiti kao benčmark proračuni za proveru ispravnosti novih kompjuterskih kodova za određivanje TKIII.

U potpoglavlju 4.2 diskutovano je o fizičkoj interpretaciji TKIII. Interpretacija i fizički smisao TKIII su razmatrani na formalan način sa ciljem njihovog boljeg razumevanja u konkretnim fizičkim situacijama. Sledi potpoglavlje 4.4, gde su prikazani rezultati proračuna TKIII u Maxwell-ovom modelu, dobijeni rešavanjem Boltzmann-ove jednačine momentnom metodom. Odeljak 4.5 daje rezultate proračuna TKIII u modelu krutih sfera, koji su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija. U potpoglavljima 4.6, 4.7 i 4.8 su predstavljene rezultati proračuna TKIII u Reid-ovom modelu, Lucas-Saelee-evom modelu i modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu respektivno, koji su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija i korišćenjem momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine. Korišćenjem Reid-ov modelnog gasa, izračunata su odstupanja TKIII, dobijenih aproksimacijom dva člana za rešavanje Boltzmann-ove jednačine, od rezultata koji su u potpunosti konvergirali. Reid-ov modelni gas je upotrebljen i za proračune i analizu ponašanja TKIII u ukrštenim električnim i magnetskim poljima. Implicitne i eksplicitne efekte jonizacije na TKIII proučavali smo koristeći Lucas-Saelee-ev modelni gas, a ovi isti efekti prouzrokovani zahvatom elektrona analizirani su uz korišćenje modelnog

gasa koji su predložili Ness i Robson.

4.2 Fizička interpretacija komponenti transportnog tenzora trećeg reda

Na ovom mestu se razmatra fizički smisao transportnih koeficijenata trećeg reda. Ako se transportni koeficijenti trećeg (i višeg) reda mogu zanemariti, evolucija koncentracije naelektrisanih čestica $n(\mathbf{r}, t)$ u vremenu je opisana jednačinom

$$\begin{aligned} \frac{\partial n^{(0)}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{W}^{(b)} \cdot \nabla n^{(0)}(\mathbf{r}, t) - \hat{\mathbf{D}}^{(b)} : (\nabla \otimes \nabla) n^{(0)}(\mathbf{r}, t) \\ = -R_a n^{(0)}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (4.1)$$

gde su $n^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ i R_a koncentracija naelektrisanih čestica roja u uslovima u kojima transportni koeficijenti trećeg i višeg reda mogu da se zanemare i brzinski koeficijent za nestajanje i nastajanje čestica roja, respektivno. Zbog jednostavnosti će biti razmatran slučaj u kome je spoljašnje električno polje orijentisano duž z -ose, dok je magnetsko polje jednako nuli. Množenjem jednačine (4.1) sa $e^{-i(px+qy+kz)} dx dy dz$ i integracijom po konfiguracionom prostoru dobija se Furijeov transform ove jednačine po prostornim koordinatama, koji se može napisati u obliku

$$\frac{\partial \hat{n}^{(0)}}{\partial t} = -(ikW_z + k^2 D_{zz} + (p^2 + q^2) D_{xx} - R_a) \hat{n}^{(0)}, \quad (4.2)$$

gde je $\hat{n}^{(0)}$ Furijeov transform koncentracije čestica roja $n^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ po prostornim koordinatama. Ako je N broj čestica roja u početnom trenutku ($t = 0$), rešenje jednačine (4.2) se može napisati u obliku

$$\hat{n}^{(0)} = N \exp \left(- (ikW_z + k^2 D_{zz} + (p^2 + q^2) D_{xx} - R_a) t \right). \quad (4.3)$$

Radi jednostavnosti, biće uvedene oznake $W \equiv W_z$, $D_T \equiv D_{xx}$ i $D_L \equiv D_{zz}$. Ukoliko se jednačina (4.3) pomnoži sa $\frac{1}{(2\pi)^3} e^{i(px+qy+kz)} dp dq dk$ i prointegrali po p, q, k (primena inverznog Furijeovog transform), dobije se izraz za koncentraciju

$$n^{(0)}(\mathbf{r}, t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi D_L t} (4\pi D_T t)} e^{-\frac{(z-W)^2}{4D_L t}} e^{-\frac{x^2+y^2}{4D_T t}} e^{-R_a t}. \quad (4.4)$$

Kada se transportni koeficijenti trećeg reda ne mogu zanemariti, vremenska evolucija koncentracije čestica roja $n(\mathbf{r}, t)$ je opisana jednačinom

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{W}(t) \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) - \hat{\mathbf{D}}(t) : (\nabla \otimes \nabla) n(\mathbf{r}, t) \\ + \hat{\mathbf{Q}}(t) : (\nabla \otimes \nabla \otimes \nabla) n(\mathbf{r}, t) = -R_a(t) n(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Radi jednostavnosti ponovo je pretpostavljeno da je spoljašnje električno polje duž z -ose, dok je spoljašnje magnetsko polje jednako nuli. U ovom slučaju se jednačina (4.5) može napisati u obliku

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -R_a n(\mathbf{r}, t) - W \frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (4.6)$$

$$+D_L \frac{\partial^2 n(\mathbf{r}, t)}{\partial z^2} + D_T \left(\frac{\partial^2 n(\mathbf{r}, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n(\mathbf{r}, t)}{\partial y^2} \right) \quad (4.7)$$

$$-Q_{zzz} \frac{\partial^3 n(\mathbf{r}, t)}{\partial z^3} - (Q_{zxx} + 2Q_{xxz}) \left(\frac{\partial^3 n(\mathbf{r}, t)}{\partial z \partial x^2} + \frac{\partial^3 n(\mathbf{r}, t)}{\partial z \partial y^2} \right), \quad (4.8)$$

gde su iskorišćene jednakosti $Q_{xxz} = Q_{xzx} = Q_{yyz} = Q_{yzy}$. Množenjem jednačine (4.8) sa $e^{-i(px+qy+kz)} dx dy dz$ i integracijom po konfiguracionom prostoru dobija se Furijeov transform ove jednačine po prostornim koordinatama, koji se može napisati u obliku

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{n}_Q}{\partial t} &= -(ikW_z + k^2 D_L + (p^2 + q^2) D_T - R_a) \hat{n}_Q \\ &- (-ik^3 Q_{zzz} - 3ik(p^2 + q^2) Q_T) \hat{n}_Q, \end{aligned} \quad (4.9)$$

gde je uvedena oznaka $3Q_T \equiv Q_{zxx} + Q_{xzx} + Q_{xxz}$, dok je \hat{n}_Q oznaka za Furijeov transform koncentracije $n(\mathbf{r}, t)$ u slučaju u kome se transportni koeficijenti trećeg reda ne mogu zanemariti. Rešenje jednačine (4.9) dobija oblik

$$\begin{aligned} \hat{n}_Q &= N \exp \left(- (R_a + ikW + k^2 D_L + (p^2 + q^2) D_T) t \right) \times \\ &\exp \left((ik^3 Q_L + 3ik(p^2 + q^2) Q_T) t \right). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Na osnovu jednačine (4.10) trebalo bi da se $n(\mathbf{r}, t)$ odredi kao inverzni Furijeov transform od \hat{n} . Ipak, integral $\int e^{i(px+qy+kz)} \hat{n}_Q dp dq dk$ nije analitički rešiv. Jedan način za približno utvrđivanje vrednosti koncentracije $n(\mathbf{r}, t)$, u slučaju kada transportni koeficijenti trećeg reda nisu zanemarljivi, jeste razvoj \hat{n}_Q u Tejlorov red po komponentama Q_L i Q_T i određivanje inverznog Furijeovog transformata odgovarajućih koeficijenata u razvoju. Ovaj Tejlorov razvoj se može napisati na sledeći način

$$\begin{aligned} \hat{n}_Q &= \hat{n}_Q \Big|_{Q=0} + \frac{\partial \hat{n}_Q}{\partial Q_L} \Big|_{Q=0} Q_L + \frac{\partial \hat{n}_Q}{\partial Q_T} \Big|_{Q=0} Q_T \\ &\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \hat{n}_Q}{\partial Q_L^2} \Big|_{Q=0} Q_L^2 + 2 \frac{\partial^2 \hat{n}_Q}{\partial Q_L \partial Q_T} \Big|_{Q=0} Q_L Q_T + \frac{\partial^2 \hat{n}_Q}{\partial Q_T^2} \Big|_{Q=0} Q_T^2 \right) + \dots \end{aligned} \quad (4.11)$$

Kada se primeni inverzni Furijeov transform na jednačinu (4.11) i kada se zanemare svi članovi drugog i višeg stepena po komponentama transportnog tenzora trećeg reda, dobije se sledeći aproksimativan izraz za koncentraciju naelektrisanih čestica roja

$$\begin{aligned} n^{(1)}(\mathbf{r}, t) &= \frac{N e^{-R_a t}}{\sqrt{4\pi D_L t} (4\pi D_T t)} \exp \left(- \frac{(z - Wt)^2}{4D_L t} - \frac{x^2 + y^2}{4D_T t} \right) \times \\ &\left[1 + Q_L \frac{t(z - Wt)^3 - 6D_L t^2(z - Wt)}{8(D_L t)^3} \right. \\ &\left. + 3Q_T \frac{(z - Wt)(x^2 + y^2 - 4D_T t)}{8D_L t (D_T t)^2} \right] \end{aligned} \quad (4.12)$$

gde superskript (1) označava da su u izrazu za koncentraciju (4.12) uzete u obzir samo popravke prvog stepena po komponentama transportnog tenzora trećeg reda. Projekcija jednačine (4.12)

na longitudinalni (z)-pravac ranije je određena u radu Penetrante-a i Bardsley-a (Penetrante i Bardsley 1990).

Na osnovu fluks gradijentne relacije (2.21) vidi se da se doprinos transportnih koeficijenata trećeg reda ukupnom fluksu čestica može izraziti kao

$$\begin{aligned}\Gamma_{Q,z} &= Q_{zzz} \frac{\partial^2 n(\mathbf{r}, t)}{\partial z^2} + Q_{zxx} \left[\frac{\partial^2 n(\mathbf{r}, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n(\mathbf{r}, t)}{\partial y^2} \right], \\ \Gamma_{Q,x} &= 2Q_{xxz} \frac{\partial^2 n(\mathbf{r}, t)}{\partial x \partial z}.\end{aligned}\quad (4.13)$$

Iz jednačine (4.13) je jasno da je smer kretanja, opisanog transportnim tenzorom trećeg reda, određen kombinacijom znaka komponenti ovog tenzora i znaka odgovarajućih parcijalnih izvoda koncentracije. Uz to je znak parcijalnih izvoda koncentracije određen znakom odgovarajućih parcijalnih izvoda vodećeg člana u razvoju koncentracije čestica po komponentama transportnog tenzora trećeg reda iz jednačine (4.12), $n^{(0)}(\mathbf{r}, t)$. Zbog toga je analiza parcijalnih izvoda Gaussian-a dovoljna za razmatranje doprinosa transportnog tenzora trećeg reda ukupnom fluksu čestica, koji je prikazan u jednačini (4.13). Ovi parcijalni izvodi Gaussian-a su dati u jednačinama

$$\frac{\partial^2 n^{(0)}(\mathbf{r}, t)}{(\partial z)^2} = (z^2 - \sigma_z^2) \frac{n^{(0)}(\mathbf{r}, t)}{\sigma_z^4}, \quad (4.14)$$

$$\frac{\partial^2 n^{(0)}(\mathbf{r}, t)}{(\partial x)^2} = (x^2 - \sigma_x^2) \frac{n^{(0)}(\mathbf{r}, t)}{\sigma_x^4}, \quad (4.15)$$

$$\frac{\partial^2 n^{(0)}(\mathbf{r}, t)}{(\partial x \partial z)} = xz \frac{n^{(0)}(\mathbf{r}, t)}{\sigma_x^2 \sigma_z^2}, \quad (4.16)$$

gde su

$$\sigma_x^2 = 2D_T t, \quad \sigma_z^2 = 2D_L t. \quad (4.17)$$

Zbog jednostavnosti su izvodi u gornjim jednačinama napisani u referentnom sistemu koji je postavljen u centar Gaussian-a, pa je član $z - Wt$ zamenjen članom z . Da bi se olakšala vizuelizacija ovih parcijalnih izvoda, uvodi se novi set koordinata $x/\sigma_x = \chi_x$, $y/\sigma_y = \chi_y$ i $z/\sigma_z = \chi_z$. Primenom novih koordinata gornji skup jednačina (4.14)-(4.16) svodi se na

$$\frac{\partial^2 n^{(0)}}{\partial \chi_z^2} = (\chi_z^2 - 1) n^{(0)}, \quad (4.18)$$

$$\frac{\partial^2 n^{(0)}}{\partial \chi_x^2} = (\chi_x^2 - 1) n^{(0)}, \quad (4.19)$$

$$\frac{\partial^2 n^{(0)}}{\partial \chi_x \partial \chi_z} = \chi_x \chi_z n^{(0)}, \quad (4.20)$$

pri čemu je

$$n^{(0)}(\chi, t) = C_\chi \exp \left[-\frac{1}{2} (\chi_z^2 + \chi_x^2 + \chi_y^2) \right], \quad (4.21)$$

i

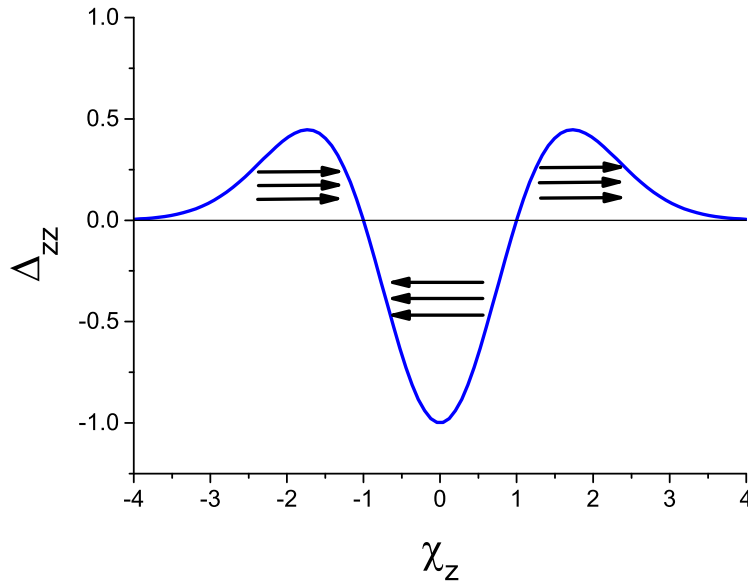
$$C_\chi = \frac{N_0 e^{R_{net} t}}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x^2 \sigma_z}. \quad (4.22)$$

Normirani parcijalni izvodi drugog reda mogu se kombinovanjem jednačina (4.18)-(4.22) napisati u obliku

$$\Delta_{zz} \equiv \frac{1}{C_\chi} \frac{\partial^2 n^{(0)}}{\partial \chi_z^2} = (\chi_z^2 - 1) e^{-\frac{1}{2}(\chi_z^2 + \chi_x^2 + \chi_y^2)}, \quad (4.23)$$

$$\Delta_{xx} \equiv \frac{1}{C_\chi} \frac{\partial^2 n^{(0)}}{\partial \chi_x^2} = (\chi_x^2 - 1) e^{-\frac{1}{2}(\chi_z^2 + \chi_x^2 + \chi_y^2)}, \quad (4.24)$$

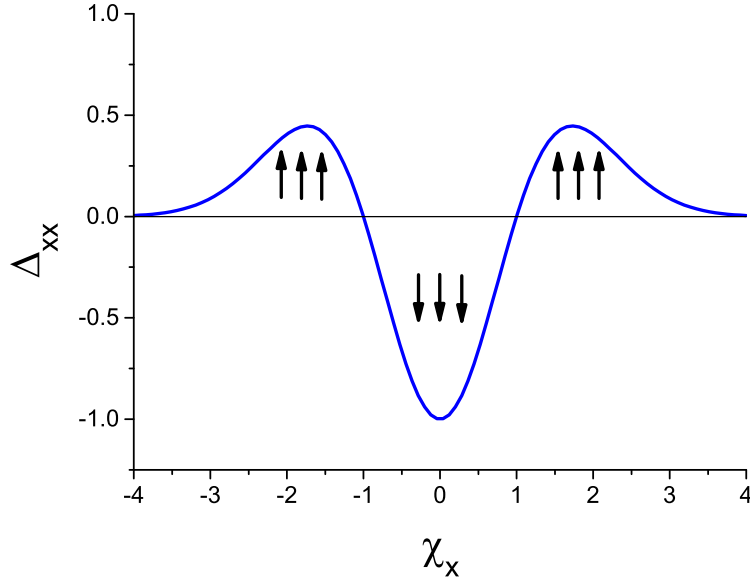
$$\Delta_{xz} \equiv \frac{1}{C_\chi} \frac{\partial^2 n^{(0)}}{\partial \chi_x \partial \chi_z} = \chi_x \chi_z e^{-\frac{1}{2}(\chi_z^2 + \chi_x^2 + \chi_y^2)}. \quad (4.25)$$



Slika 2: Normirani izvod Δ_{zz} koncentracije naelektrisanih čestica u funkciji relativne koordinate χ_z . Strelice označavaju smer kretanja koje je reprezentovano Q_{zzz} komponentom transportnog tenzora trećeg reda ako je ova komponenta pozitivna. Sila kojom električno polje deluje na naelektrisane čestice je usmerena u pozitivnom χ_z smeru.

Na slici 2 se nalazi normirani parcijalni izvod Δ_{zz} u funkciji χ_z . Može se videti da je odgovarajuća kriva simetrična u odnosu na koordinatni početak u kome ima minimum. Kada je Q_{zzz} pozitivno, smer kretanja koje je reprezentovano ovom komponentom na sledeći način zavisi od znaka Δ_{zz} . Ukoliko je Δ_{zz} pozitivno, smer kretanja koje je opisano Q_{zzz} komponentom usmeren je duž pozitivnog z -smera, što je reprezentovano strelicama koje su orijentisane nadesno. Ako je Δ_{zz} negativno, kretanje koje je opisano Q_{zzz} komponentom usmereno je u negativnom z -smeru, što je reprezentovano strelicama koje su orijentisane nalevo. Na osnovu toga se vidi da je prednja strana roja izdužena dok je zadnja strana roja skupljena, kada je $Q_{zzz} > 0$. Situacija je suprotna kada je $Q_{zzz} < 0$. Tada je prednja strana roja skupljena, dok je zadnja strana roja izdužena.

Slika 3 prikazuje normirani parcijalni izvod Δ_{xx} u funkciji χ_x . Ova funkcija ima identičan oblik kao Δ_{zz} . Kada je Q_{zxx} pozitivno, kretanje koje je opisano ovom komponentom je usmereno duž pozitivnog z -smera na transverzalnim ivicama roja, što je ilustrovano strelicama koje



Slika 3: Normirani izvod Δ_{xx} koncentracije naelektrisanih čestica u funkciji relativne koordinate χ_x . Strelice označavaju smer kretanja koje je reprezentovano Q_{zxx} komponentom transportnog tenzora trećeg reda ako je ova komponenta pozitivna. Ovde strelice usmerene naviše (naniže) reprezentuju kretanje u pozitivnom (negativnom) z -smeru.

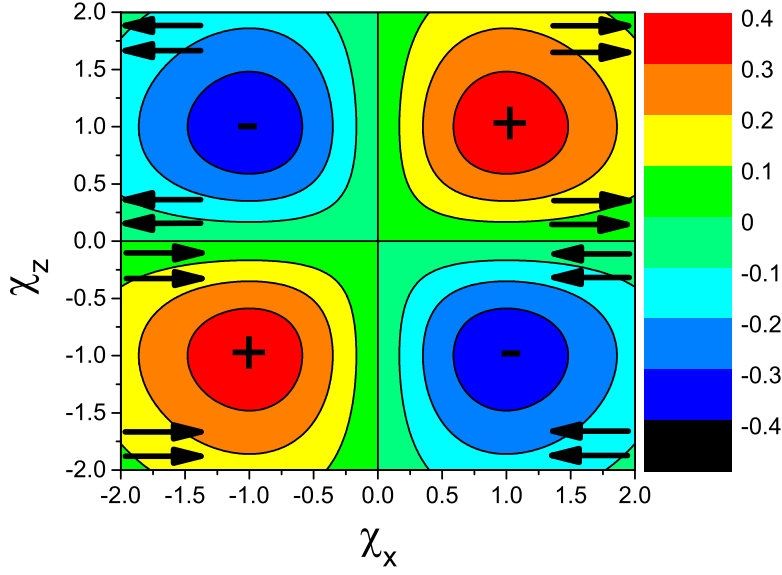
su usmerene naviše. Međutim, u centru roja je kretanje, koje je opisano Q_{zxx} komponentom, usmereno u negativnom z -smeru, što je reprezentovano strelicama koje su usmerene naniže. Slično tome, ako je Q_{zxx} komponenta negativna, kretanje opisano ovom komponentom je usmereno duž negativnog z -smera na transverzalnim ivicama roja i duž pozitivnog z -smera u centru roja.

Na slici 4 je prikazan normirani parcijalni izvod Δ_{xz} u funkciji χ_x i χ_z . Ovaj izvod je pozitivan u prvom i trećem kvadrantu, a negativan u drugom i četvrtom kvadrantu. Ako je Q_{xxz} pozitivno, smer kretanja koji je opisan ovom komponentom na sledeći način zavisi od znaka Δ_{xz} . Kada je Δ_{xz} pozitivno, kretanje koje je opisano Q_{xxz} komponentom usmereno je duž pozitivnog x -smera, što je ilustrovano strelicama usmerenim nadesno. Kada je Δ_{xz} negativno, kretanje opisano Q_{xxz} komponentom je usmereno duž negativnog x -smera, što je ilustrovano strelicama koje su usmerene nalevo. Kada je $Q_{xxz} < 0$, smer kretanja, koje je opisano ovom komponentom, jeste obrnut. Zajednički doprinos Q_{zxx} i Q_{xxz} komponenti dovodi do kruškastog oblika prostorne raspodele roja. Koncentracija naelektrisanih čestica iz jednačine (4.12) u novim koordinatama ima oblik

$$n^{(1)}(\mathbf{r}, t) = n^{(0)}(\mathbf{r}, t) \times \quad (4.26)$$

$$\left(1 + \frac{tQ_L}{\sigma_z^3} \chi_z(\chi_z^2 - 3) + \frac{3tQ_T}{\sigma_x^2 \sigma_z} \chi_z(\chi_x^2 + \chi_y^2 - 2) \right). \quad (4.27)$$

Na osnovu jednačine (4.27) se može analizirati doprinos transportnih koeficijenata trećeg reda prostornom profilu naelektrisanih čestica roja. Iz ove jednačine se vidi da je za $Q_L > 0$ koncentracija naelektrisanih čestica povećana u odnosu na $n^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ u opsegu koordinata u kome



Slika 4: Normirani izvod Δ_{xz} koncentracije naelektrisanih čestica u funkciji relativnih koordinata χ_x i χ_z . Strelice označavaju smer kretanja koje je reprezentovano Q_{xxz} komponentom ako je ova komponenta pozitivna.

je $\chi_z > \sqrt{3}$, kao i u opsegu koordinata u kome je $-\sqrt{3} < \chi_z < 0$. Međutim, koncentracija naelektrisanih čestica je smanjena u odnosu na $n^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ u ostatku prostora. Ispostavlja se da je za $Q_L > 0$ prostorna raspodela naelektrisanih čestica razvučena duž longitudinalnog pravca na frontu roja, dok je skupljena duž longitudinalnog pravca na začelju roja. Situacija je obrnuta za $Q_L < 0$. Tada je prostorna raspodela naelektrisanih čestica skupljena duž longitudinalnog pravca na frontu roja, dok je razvučena duž longitudinalnog pravca na začelju roja. Slično tome, za $Q_T > 0$ koncentracija naelektrisanih čestica je povećana u odnosu na $n^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ u opsegu koordinata u kome su zadovoljene nejednakosti $\chi_z > 0$ i $\sqrt{\chi_x^2 + \chi_y^2} > \sqrt{2}$, kao i u opsegu koordinata u kome su zadovoljene nejednakosti $\chi_z < 0$ i $\sqrt{\chi_x^2 + \chi_y^2} < \sqrt{2}$. No, u ostatku prostora je koncentracija naelektrisanih čestica smanjena u odnosu na $n^{(0)}(\mathbf{r}, t)$. Iz ovoga sledi da je za $Q_T > 0$ prostorna raspodela naelektrisanih čestica razvučena duž transverznog pravca na frontu roja, dok je skupljena duž transverznog pravca na začelju roja. Situacija je obrnuta za $Q_T < 0$, kada je prostorna raspodela naelektrisanih čestica razvučena duž transverznog pravca na začelju roja, a skupljena duž transverznog pravca na frontu roja. Analiza uticaja transportnih koeficijenata trećeg reda na prostorni profil roja, koja je zasnovana na jednačini (4.27) u saglasnosti je sa analizom baziranom na doprinosu transportnih koeficijenata trećeg reda fluksu naelektrisanih čestica, koji je prikazan u jednačini (4.13).

Iz jednačine (4.27) se vidi da uticaj transportnih koeficijenata trećeg reda na prostorni profil roja opada sa povećanjem koncentracije neutralnih čestica pozadinske sredine n_0 . Ovo je posledica toga što sa porastom n_0 komponente Q_L i Q_T opadaju kao $1/n_0^2$, dok σ_x i σ_z opadaju kao $1/\sqrt{n_0}$. Na osnovu toga tQ_L/σ_z^3 i $3tQ_T/\sigma_x^2\sigma_z$ opadaju kao $1/\sqrt{n_0}$ sa porastom n_0 . Jednačina (4.27) takođe ukazuje na to da uticaj transportnog tenzora trećeg reda na prostorni profil naelektrisanih čestica opada u vremenu kao $1/\sqrt{t}$, zbog vremenske zavisnosti članova tQ_L/σ_z^3 i

$3tQ_T/\sigma_x^2\sigma_z$. Pošto transportni koeficijenti trećeg reda imaju značajniji uticaj na prostorni profil roja pri niskoj vrednosti n_0 , ovi koeficijenti bi najlakše mogli da budu izmereni na niskom n_0 . Međutim, pri opadanju n_0 se smanjuje koliziona frekvencija pojedinačnih elektrona i usporava se relaksacija energije roja. Ovo može da dovede do smanjenja pouzdanosti eksperimenata zbog uporedivosti vremena energijske relaksacije roja i vremena koje je potrebno za dolazak elektrona do granica sistema, a zatim i zbog difuzionog hlađenja roja kroz gubitke najenergičnijih elektrona na bočnim zidovima suda. Zbog toga bi za merenje transportnih koeficijenata trećeg reda bilo potrebno da se dizajniraju eksperimenti koji bi koristili veliku zapreminu gasa na malom pritisku, što je u skladu sa preporukama koje su dali Penetrante i Bardsley [126].

U ostatku ovog potpoglavlja biće razmatrani fizički uslovi od kojih zavisi znak komponenti transportnog tenzora trećeg reda. Kada je $Q_{zzz} > 0$, prednja strana roja je izdužena, dok je zadnja strana skupljena. Ali, kada je $Q_{zzz} < 0$, prednja je strana roja skupljena, a zadnja je izdužena. Efekti koji mogu doprineti širenju ili skupljanju roja u određenom delu prostora jesu sila kojom deluje spoljašnje električno polje i razlike u srednjoj energiji i kolizionoj frekvenciji elektrona u različitim delovima prostora. Sila kojom deluje električno polje teži da izduži prostornu raspodelu naelektrisanih čestica na frontu roja i da je sabije na začelju roja. Uzrok tome je što se elektroni na frontu roja, koji se udaljavaju od centra roja duž longitudinalnog pravca, kreću u smeru sile kojom deluje polje (pozitivan smer), dok se elektroni na začelju, koji se udaljavaju od centra roja duž istog pravca, kreću suprotno od smera sile kojom deluje polje (negativan smer). Pored toga, srednja energija elektrona se povećava u smeru u kome deluje sila električnog polja. Smer sile kojom deluje električno polje i povećanje srednje energije elektrona u ovom smeru teže da izduže prostornu raspodelu elektrona na frontu roja i da je sabiju na začelju roja. U slučaju kada je koliziona frekvencija elektrona nezavisna od energije, ovi efekti u potpunosti određuju znak komponenti transportnog tenzora trećeg reda i Q_{zzz} komponenta je pozitivna. Kada koliziona frekvencija opada sa porastom energije, otpor kretanju elektrona, koji je izazvan sudarima, opada u smeru delovanja sile električnog polja, što je još jedan efekat koji doprinosi pozitivnom znaku Q_{zzz} komponente. Međutim, kada se koliziona frekvencija povećava sa porastom energije, otpor kretanju naelektrisanih čestica se povećava u smeru u kome deluje sila električnog polja. Ako uticaj povećanja kolizionog frekvencije u smeru delovanja sile spoljašnjeg električnog polja na širenje ili skupljanje roja nije dovoljno intenzivan da nadjača efekat sile spoljašnjeg polja i povećanje srednje energije elektrona u smeru delovanja ove sile, Q_{zzz} komponenta je pozitivna. Ovaj uslov je najčešće zadovoljen. S druge strane, ukoliko je uticaj povećanja kolizionog frekvencije u smeru delovanja sile spoljašnjeg polja na širenje ili skupljanje roja dovoljno intenzivan da nadjača preostala dva efekta, Q_{zzz} komponenta je negativna.

Kada je $Q_{xxz} > 0$, prostorna raspodela naelektrisanih čestica je proširena duž transverznog pravca na frontu roja i skupljena duž transverznog pravca na začelju roja. Istovremeno važi i to da ako je $Q_{xxz} < 0$, prostorna raspodela naelektrisanih čestica je proširena duž transverznog pravca na začelju roja i skupljena duž transverznog pravca na frontu roja. Pošto duž transverznog pravca ne deluju spoljašnje sile (u odsustvu magnetskog polja), efekti koji utiču na znak Q_{xxz} komponente su povećanje srednje energije naelektrisanih čestica u smeru u kome

deluje sila spoljašnjeg električnog polja i zavisnost kolizione frekvence od energije naelektrisanih čestica. Povećanje srednje energije naelektrisanih čestica u smeru u kome deluje sila polja doprinosi većem transverzalnog širenju na frontu roja nego na začelju roja. U situaciji kada je koliziona frekvencija nezavisna od energije, ovo je jedini efekat koji određuje znak Q_{xxz} komponente i ova komponenta je pozitivna. Opadanje kolizione frekvencija uz porast energije dodatno doprinosi pozitivnom znaku Q_{xxz} komponente. Međutim, kada se koliziona frekvencija povećava sa porastom energije, otpor transverzalnog širenju naelektrisanih čestica, koji je izazvan sudarima, veći je na frontu roja nego na začelju roja. Ako uticaj porasta kolizione frekvencija na širenje ili skupljanje roja nije dovoljno intenzivan da nadjača uticaj veće pokretljivosti elektrona na frontu roja, Q_{xxz} komponenta je pozitivna. Ukoliko je pak uticaj porasta kolizione frekvencija na širenje ili skupljanje roja dovoljno intenzivan da nadjača uticaj veće pokretljivosti naelektrisanih čestica na frontu roja, Q_{xxz} komponenta je negativna.

Komponenta Q_{zxx} opisuje razliku u longitudinalnom širenju naelektrisanih čestica u centru roja i duž transverzalnih ivica. Ako važi $Q_{zxx} > 0$, longitudinalno širenje je brže na transverzalnim ivicama nego u centru roja, i suprotno – ukoliko je $Q_{zxx} < 0$, longitudinalno širenje je izraženije u centru roja nego na transverzalnim ivicama. Parabolični porast srednje energije ka transverzalnim ivicama pogoduje bržem longitudinalnom širenju naelektrisanih čestica na transverzalnim ivicama nego u centru roja. Ovaj parabolični porast srednje energije duž transverzalnog pravca je posledica toga što najenergičniji elektroni mogu brzo da pređu distancu između centra roja i njegovih ivica, ako porast kolizione frekvencija sa energijom nije dovoljno intenzivan da kompenzuje ovaj efekat. Kada je koliziona frekvencija nezavisna od energije, ovo je jedini efekat koji utiče na znak Q_{zxx} komponente i ova komponenta je pozitivna. Međutim, pošto je ovaj efekat jako mali, Q_{zxx} komponenta je znatno manja od preostale dve komponente u slučaju konstantne kolizione frekvencija, kao što je pokazano na primeru Maxwell-ovog modela (v. potpoglavlje 4.4). Ako koliziona frekvencija opada sa porastom energije, Q_{zxx} komponenta je pozitivna, uz šta je bliža po intenzitetu ostalim nenultim komponentama nego u prilikom konstantne kolizione frekvencija. U slučaju kada koliziona frekvencija raste sa porastom energije a Q_{xxz} komponenta je pozitivna, Q_{zxx} komponenta je negativna zbog većeg otpora longitudinalnom širenju roja na transverzalnim ivicama nego u centru roja. Međutim, kada koliziona frekvencija raste sa porastom energije a Q_{xxz} komponenta je negativna, Q_{zxx} komponenta je pozitivna. Moguće objašnjenje za ovakav efekat je da je u ovom slučaju porast kolizione frekvencija sa energijom toliko intenzivan te da uslovljava manju srednju energiju na bočnim ivicama roja nego u centru roja. Ovo bi moglo da bude posledica toga što intenzivna koliziona frekvencija otežava visokoenergijskim elektronima da stignu do transverzalnih ivica roja.

4.3 Uslovi simulacija

U nastavku ovog poglavlja biće prikazani rezultati naših proračuna u modelnim gasovima. Posmatrani sistem se sastoji od roja elektrona koji se kreću u homogenom i neutralnom pozadinskom gasu u prisustvu stacionarnog i prostorno homogenog električnog polja. U Monte Carlo simulacijama se prati veliki broj elektrona (bar 10^7) kako bi se smanjile statističke fluktu-

acije rezultata. Praćenje ovako velikog broja elektrona je neophodno za proračun TKIII jer su statističke fluktuacije monoma trećeg reda, na osnovu kojih se računaju TKIII, znatno veće od fluktuacija monoma nižeg reda. Pored praćenja velikog broja elektrona u Monte Carlo simulacijama neophodno je i pažljivo izabrati interval za usrednjavanje rezultata simulacija u vremenu, zbog toga što se statističke fluktuacije monoma višeg reda povećavaju sa širenjem roja. Zato je potrebno da se rezultati simulacija usrednjavaju u intervalu od trenutka kada je energija roja dostigla stacionarnu vrednost do trenutka kada statističke fluktuacije rezultata postanu veće od prihvatljive statističke greške. Zbog intenzivnih fluktuacija monoma trećeg stepena, balk vrednosti TKIII se ne računaju primenom numeričkog diferenciranja, koje bi značajno povećalo fluktuacije rezultata, već se izraz koji stoji iza izvoda aproksimira linearnom funkcijom. Ovo je ekvivalentno numeričkom diferenciranju, budući da je koeficijent pravca izraza koji stoji posle izvoda jednak prvom izvodu tog izraza po vremenu, nakon relaksacije energije roja, kada su transportni koeficijenti nezavisni od vremena. Validnost ovog načina izračunavanja balk vrednosti TKIII je proverena poređenjem sa rezultatima koji su dobijeni primenom numeričkog diferenciranja, kao i poređenjem sa odgovarajućim fluks vrednostima u odsustvu nekonzervativnih procesa.

Pri proračunu fluks komponenti TTIII primenom momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine, često je potrebno uzeti u obzir veliki broj članova u razvoju funkcije raspodele po sfernim harmonicima i Sonine polinomima. Ovo je naročito izraženo u situacijama u kojima intenzivni neelastični sudari izazivaju snažnu anizotropiju funkcije raspodele u brzinskom prostoru, kao i u uslovima u kojima kombinacija neelastičnih i nekonzervativnih procesa dovodi do značajnog odstupanja funkcije raspodele po energijama od Maxwell-ove raspodele. U slučaju modelnih gasova koji se razmatraju u ovom poglavlju, ovakve situacije se mogu sresti u modelu krutih sfera kada je odnos masa čestica projektila i mete približno jednak jedinici, kao i u Reid-ovom, Lucas–Saelee-evom i Ness–Robson-ovom modelnim gasovima na visokim vrednostima E/n_0 . Pri okolnostima u kojima su preseki za neelastične sudare uporedivi sa presekom za elastične sudare nekada je potrebno uzeti u obzir više od 5 članova u razvoju funkcije raspodele po sfernim harmonicima. Takođe je potrebno uzeti i preko 100 članova u razvoju funkcije raspodele po Sonine polinomima kada ova funkcija snažno odstupa od ravnotežnog Maxwellian-a. Pošto je elastično rasejanje elektrona, po svojoj prirodi anizotropno, u našim proračunima se za opis elastičnog rasejanja koristi presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima. Korišćenje ovog preseka omogućava dobru reprezentaciju srednjeg transfera impulsa u elastičnim sudarima pri svakoj vrednosti energije elektrona, bez uzimanja u obzir ugaone zavisnosti diferencijalnog preseka za elastično rasejanje. Za neelastične sudare i jonizaciju se koriste totalni preseki, pri čemu je pretpostavljeno izotropno rasejanje.

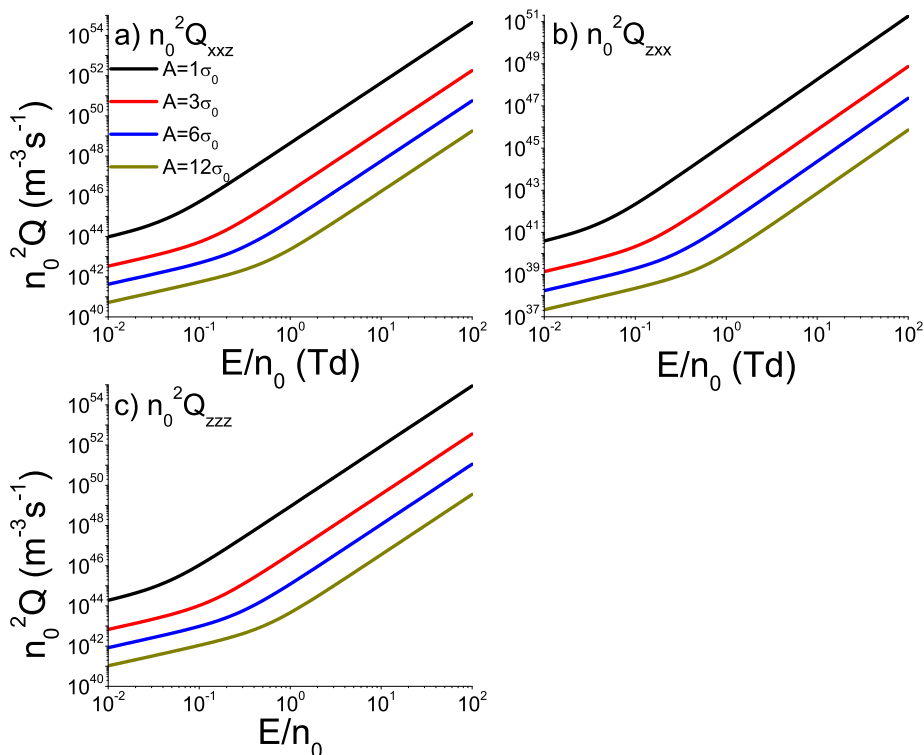
4.4 Transportni koeficijenti trećeg reda za roj elektrona u Maxwell-ovom modelnom gasu

Maxwell-ov model je modelni gas u kome je interakcija elektrona sa neutralnim molekulima opisana elastičnim sudarima, pri čemu je koliziona frekvencija nezavisna od energije elektrona.

Transport elektrona u Maxwell-ovom modelu u ortogonalnoj konfiguraciji električnog i magnet-skog polja ispitati su Ness i Robson primenom momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine [88, 186]. Rezultati do kojih su došli naknadno su provereni primenom Monte Carlo simulacija [187]. Zavisnost transportnih osobina elektrona u Maxwell-ovom modelu od ugla koji zaklapaju električno i magnetsko polje je kasnije određena primenom momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine [89]. Detalji modela su zadati na sledeći način

$$\begin{aligned}\sigma_m &= A\epsilon^{-1/2}(\text{elastični sudar}), \\ m_0 &= 4\text{amu}, m = 5.486 \times 10^{-4}\text{amu}, \\ T_0 &= 293\text{K}\end{aligned}\tag{4.28}$$

gde je σ_m presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, A je konstanta, ϵ je energija upadne čestice, amu je atomska jedinica mase, T_0 je apsolutna temperatura pozadinskog gasa, dok su m_0 i m mase neutralnih i naelektrisanih čestica respektivno. Proračuni su urađeni u opsegu polja od 10^{-4} do 100 Td. Pomoću Maksvelovog modela se može ispitati zavisnost TKIII od jačine spoljašnjeg električnog polja i veličine preseka za elastične sudare, pri konstantnoj kolizionoj frekvenciji.



Slika 5: $n_0^2 Q_{xxz}$, $n_0^2 Q_{zxx}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ komponente transportnog tenzora trećeg reda za roj elektrona u Maxwell-ovom modelu u funkciji redukovano električnog polja E/n_0 i veličine preseka za elastične sudare A . Ovi rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

Na slici 5 su prikazani rezultati proračuna TKIII u Maxwell-ovom modelu, koji su dobijeni na osnovu numeričkog rešavanja Boltzmann-ove jednačine. Sa ovog grafika se može videti da se sve tri komponente TIII monotono povećavaju sa povećanjem redukovano električnog

polja E/n_0 . Takođe se uočava da komponente TTIII naglo opadaju sa povećanjem preseka za elastične sudare.

Kada se komponente TTIII prikažu na grafiku u kome su obe koordinatne ose predstavljene logaritamskom skalom, njihova zavisnost od E/n_0 je praktično linearna na jako visokim i na jako niskim vrednostima E/n_0 , ali ove linearne zavisnosti imaju različite koeficijente pravca. Pri tome je koeficijent pravca veći na visokim, nego na niskim poljima. Između ova dva široka opsega, u okviru kojih je koeficijent pravca na logaritamskoj skali praktično konstantan, postoji uži opseg polja u kome se prvi izvod zavisnosti komponenti TTIII od E/n_0 monotono povećava. Ovaj opseg polja odgovara rasponu u kome komponente difuzionog tenzora počinju da odstupaju od termalnih vrednosti. U pitanju je promena koja se dešava na višim poljima za veću vrednost preseka za elastične sudare.

Sa slike 5 se može uočiti da komponenta $n_0^2 Q_{zxx}$ ima znatno niže vrednosti od preostale dve komponente, što se može razumeti na osnovu fizičke interpretacije TKIII, razmatrane u potpoglavlju 4.2. Naime, $n_0^2 Q_{zxx}$ komponenta opisuje razliku u intenzitetu fluksa čestica duž z -ose u centru roja i na transversalnim ivicama. Pozitivnost ove komponente implicira da je fluks duž z -ose intenzivniji na transversalnim ivicama nego u centru roja. Ovo je očekivano zato što koliziorna frekvenca ne zavisi od energije u Maksvelovom modelu, a čestice na transversalnim ivicama imaju nešto višu energiju nego čestice u centru roja, zbog parabolične zavisnosti srednje energije naelektrisanih čestica od transversalnih koordinata. Međutim pošto je promena srednje energije duž transversalnog pravca manja od promene duž longitudinalnog pravca, $n_0^2 Q_{zxx}$ ima znatno nižu vrednost od $n_0^2 Q_{xxz}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ u celom opsegu redukovanog električnog polja.

Slika 5 pokazuje kako je $n_0^2 Q_{xxz}$ komponenta dvostruko manja od $n_0^2 Q_{zzz}$ komponente. Uz to važi $n_0^2 Q_{xxz} = n_0^2 Q_{zxx}$ i $n_0^2 Q_{zzz} \approx n_0^2 (Q_{xxz} + Q_{zxx})$. Odnos $n_0^2 Q_{xxz}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ komponenti TTIII je analogan odnosu komponenti difuzionog tenzora u Maxwell-ovom modelu za koje važi $n_0 D_{xx} = n_0 D_{zz}$. Ovo se može zaključiti na osnovu toga što zbir $n_0^2 (Q_{xxz} + Q_{zxx})$ određuje doprinos fluksu koji odgovara TKIII duž transversalnog pravca, dok je odgovarajući doprinos fluksu duž longitudinalnog pravca praktično određen $n_0^2 Q_{zzz}$ komponentom, pošto je $n_0^2 Q_{zxx}$ komponenta zanemarljiva u poređenju sa $n_0^2 Q_{xxz}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ komponentama.

4.5 Transportni koeficijenti trećeg reda za roj naelektrisanih čestica u modelu krutih sfera

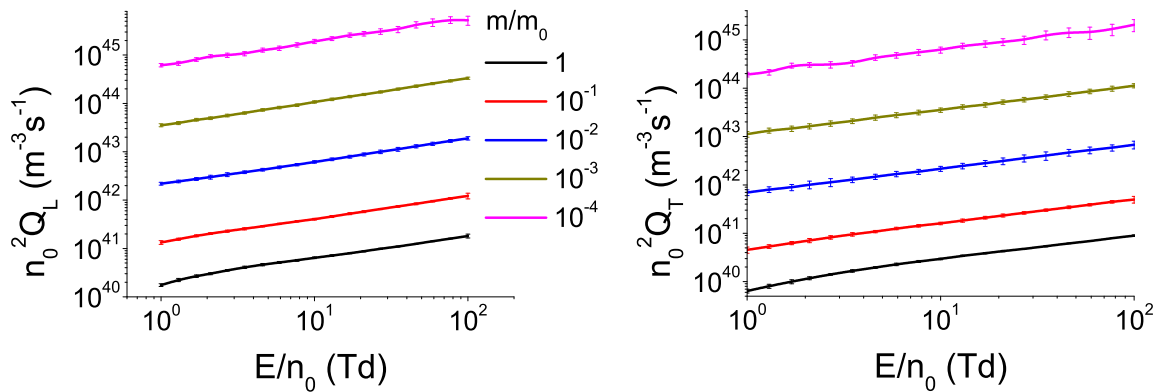
Model krutih sfera je modelni gas u kome je interakcija naelektrisane čestice roja sa molekulima pozadinskog gasa opisana elastičnim sudarima, pri čemu je presek za sudare nezavisan od energije. Na osnovu toga je u ovom modelu koliziorna frekvenca srazmerna kvadratnom korenu energije. Transport elektrona u modelu krutih sfera u konstantnom i homogenom električnom polju je izučavan primenom momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine [83]. Nakon toga je transport elektrona u ovom modelu u ortogonalnoj konfiguraciji električnog i magnetskog polja ispitivan primenom momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine [88, 186] i Monte Carlo simulacija [187]. Pored toga, analizirana je zavisnost anizotropije

funkcije raspodele u brzinskom prostoru od odnosa masa m/m_0 u prisustvu električnog polja, kao i zavisnost ove anizotropije od intenziteta magnetskog polja u ortogonalnoj konfiguraciji električnog i magnetskog polja primenom momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine [189]. Uz to je razmatran i transport lakih jona u prisustvu vremenski promenljivog električnog polja, primenom vremenski zavisnog momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine [190]. Detalji modela su zadati na sledeći način:

$$\sigma_m(\epsilon) = 6\text{\AA}^2(\text{elastični sudar}), m_0 = 4\text{amu}, T_0 = 293\text{K},$$

gde je σ_m presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, m_0 je masa molekula pozadinskog gasa a T_0 je apsolutna temperatura. U našim proračunima u obzir su uzeti odnosi masa u opsegu od 10^{-4} do 1. Proračuni su urađeni primenom Monte Carlo simulacija u opsegu redukovanih električnih polja E/n_0 od 1 do 100 Td.

Korišćenjem ovog modela, može se ispitati uticaj elastičnih sudara sa rastućom kolizionom frekvencom na TKIII. Model je takođe pogodan za ispitivanje uticaja odnosa masa m/m_0 na TKIII zbog jednostavnosti preseka za elastične sudare.



Slika 6: $n_0^2 Q_L$ i $n_0^2 Q_T$ komponente transportnog tenzora trećeg reda u funkciji redukovanog električnog polja E/n_0 i odnosa masa m/m_0 za roj naelektrisanih čestica u modelu krutih sfera. Ovi rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

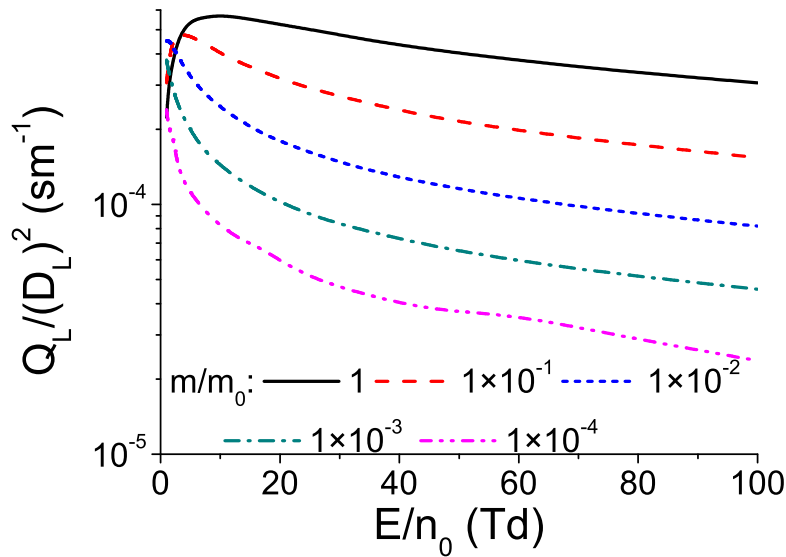
Na grafiku 6 je prikazana zavisnost $n_0^2 Q_L$ i $n_0^2 Q_T$ od E/n_0 i odnosa masa m/m_0 . U Monte Carlo simulacijama ne možemo da razdvojimo pojedinačne vandijagonalne komponente transportnog tenzora trećeg reda $n_0^2 Q_{xxz}$ i $n_0^2 Q_{zxx}$, zato što su izrazi koji se koriste za izračunavanje TKIII u Monte Carlo simulacijama izvedeni iz generalisane difuzione jednačine u kojoj su svi indeksi TKIII kontrakovani sa parcijalnim izvodima koncentracije naelektrisanih čestica.

Komponente $n_0^2 Q_L$ i $n_0^2 Q_T$ se monotono povećavaju sa opadanjem odnosa masa m/m_0 za svaku vrednost redukovanog električnog polja E/n_0 . Zavisnost komponenti TKIII od odnosa masa m/m_0 je posledica smanjenja transfera energije u elastičnim sudarima pri opadanju m/m_0 , što olakšava difuziono širenje roja. Može se primetiti da se statistička greška Monte Carlo rezultata povećava sa smanjenjem m/m_0 . Razlog za ovo je povećanje statističkih fluktuacija monoma trećeg stepena sa porastom vremena relaksacije energije, koje se povećava pri opadanju m/m_0 .

Komponente $n_0^2 Q_L$ i $n_0^2 Q_T$ se monotono povećavaju sa porastom E/n_0 za svaku vrednost odnosa masa m/m_0 . Sa porastom E/n_0 se povećava pokretljivost naelektrisanih čestica, zbog porasta njihove srednje energije, i pojačava se sila koja usmerava njihovo kretanje duž pravca polja. Ovo dovodi do monotonog povećanja $n_0^2 Q_L$ i $n_0^2 Q_T$ sa porastom E/n_0 , uprkos porastu kolizijske frekvence za elastične sudare, koja je srazmerna kvadratnom korenu energije.

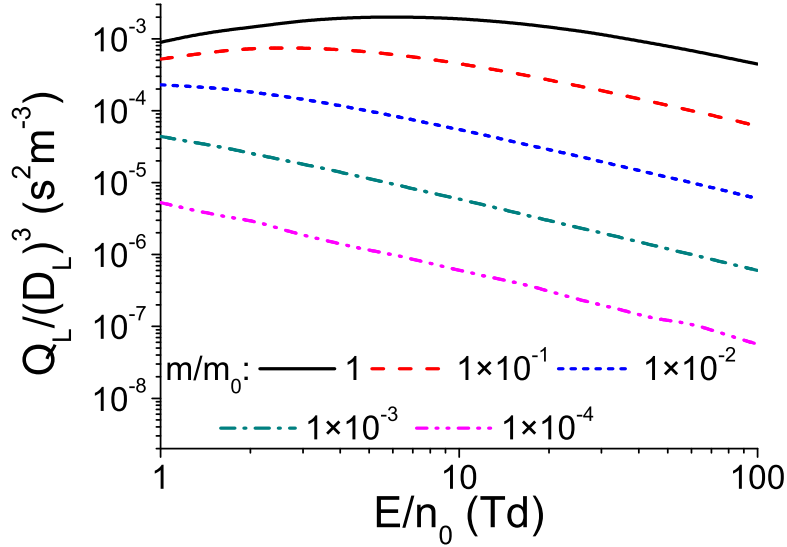
Takođe se vidi da je $n_0^2 Q_T$ komponenta pozitivna u celom opsegu polja. Pošto je kolizijska frekvencija za elastične sudare srazmerna kvadratnom korenu energije, $n_0^2 Q_{zxx}$, komponenta je negativna u ovom modelu. Međutim, pozitivne vrednosti $n_0^2 Q_T$ ukazuju na to da je zbir $n_0^2(Q_{xxz} + Q_{zxx})$ veći od $n_0^2 Q_{zxx}$ komponente.

Na osnovu opadanja TKIII sa porastom m/m_0 može se steći utisak da su TKIII značajniji za lake čestice poput elektrona i pozitrona, nego za teške čestice poput jona. Doprinos TKIII prostornom profilu roja duž longitudinalnog pravca je izražen (u prvoj aproksimaciji) pomoću dva člana koji su srazmerni članovima $Q_L/(D_L)^2$ i $Q_L/(D_L)^3$, respektivno. Ovo zapravo znači da doprinos TKIII prostornom profilu roja zavisi od odnosa komponenti TTIII i komponenti difuzionog tenzora.



Slika 7: Količnik $Q_L/(D_L)^2$ u funkciji E/n_0 i m/m_0 za roj naelektrisanih čestica u modelu krutih sfera. Ovi rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

Na slikama 7 i 8 je prikazana zavisnost količnika $Q_L/(D_L)^2$ i $Q_L/(D_L)^3$ od E/n_0 i odnosa masa m/m_0 za naelektrisane čestice u modelu krutih sfera. Ove veličine opadaju sa opadanjem m/m_0 , što ukazuje na to da su TKIII značajniji za teške čestice poput jona nego za lake čestice poput elektrona i pozitrona.



Slika 8: Količnik $Q_L/(D_L)^3$ u funkciji E/n_0 i m/m_0 za roj naelektrisanih čestica u modelu krutih sfera. Ovi rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

4.6 Transportni koeficijenti trećeg reda za roj elektrona u Reid-ovom modelnom gasu

Reid-ov model je modelni gas u kome je interakcija naelektrisanih čestica sa molekulima pozadinskog gasa reprezentovana elastičnim i neelastičnim sudarima. U njemu važi da je presek za elastične sudare konstantan, dok je presek za neelastične sudare linearna funkcija energije naelektrisane čestice [47,191].

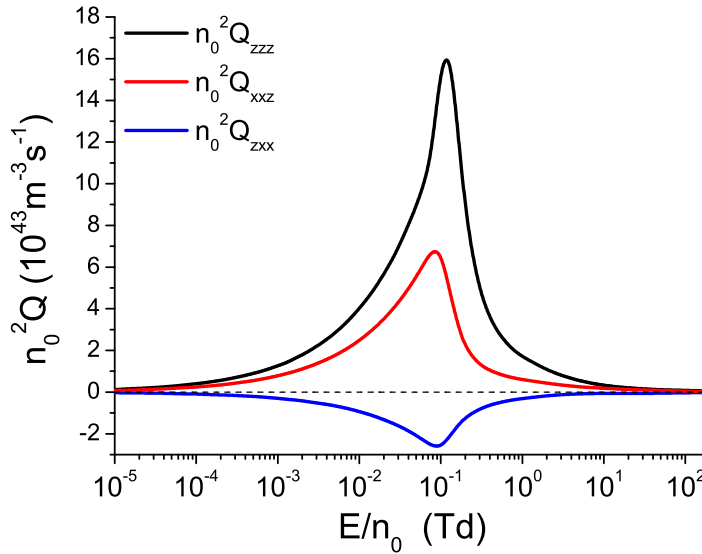
Ovaj modelni gas je uveden da bi se testirala validnost aproksimacije dva člana, koja se često koristi pri numeričkom rešavanju Boltzmann-ove jednačine [191]. Pokazano je da u njemu postoje značajna odstupanja između vrednosti transportnih koeficijenata koje su dobijene primenom Monte Carlo simulacija i vrednosti koje su određene korišćenjem aproksimacije dva člana. Procentualne razlike između vrednosti dobijenih primenom ove dve metode dostižu oko 7% i oko 50% za brzinu drifta i transverzalnu komponentu difuzionog tenzora, respektivno [191]. Transport elektrona u Reid-ovom modelnom gasu je izučavan u konstantnom i homogenom električnom polju [84], u ortogonalnoj konfiguraciji električnog i magnetskog polja [88], kao i u promenljivoj konfiguraciji u kojoj ugao između električnog i magnetskog polja varira između 0 i $\pi/2$ [89], primenom momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine. Pored toga, rezultati koji odgovaraju ortogonalnoj konfiguraciji električnog i magnetskog polja su provereni poređenjem sa rezultatima Monte Carlo simulacija [187]. U ovom modelu su analizirane tranzijentne negativne vrednosti dijagonalnih komponenti difuzionog tenzora, u ortogonalnoj konfiguraciji vremenski zavisnog električnog polja i vremenski zavisnog magnetskog polja, na osnovu vremenski razloženih Monte Carlo rezultata i primenom vremenski zavisnog momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine [164,165].

Detalji modela su zadati na sledeći način:

$$\begin{aligned}
\sigma_m(\epsilon) &= 6\text{\AA}^2 \quad (\text{elastični sudari}) \\
\sigma_{inel}(\epsilon) &= \begin{cases} 10(\epsilon - 0.2)\text{\AA}^2, & \epsilon \geq 0.2\text{ eV} \\ 0, & \epsilon < 0.2\text{ eV} \end{cases} \quad (\text{neelastični sudar}) \\
m_0 &= 4\text{ amu} \\
T_0 &= 0\text{ K},
\end{aligned} \tag{4.29}$$

gde su $\sigma_m(\epsilon)$ i $\sigma_{inel}(\epsilon)$ preseki za transfer impulsa u elastičnim i neelastičnim sudarima u funkciji energije naelektrisane čestice, respektivno, dok su m_0 i T_0 masa i temperatura molekula pozadinskog gasa.

Uz pomoć Reid-ovog modela mogu se ispitati trendovi zavisnosti komponenti TTIII od električnog i magnetskog polja u prisustvu elastičnih i neelastičnih sudara sa rastućom kolizionom frekvencom. Može se proveriti i to da li je prikladno koristiti aproksimaciju dva člana za određivanje komponenti TTIII. Očekivano je da će TKIII biti osetljiviji na način rešavanja Boltzmann-ove jednačine od brzine drifta i difuzionog tenzora.

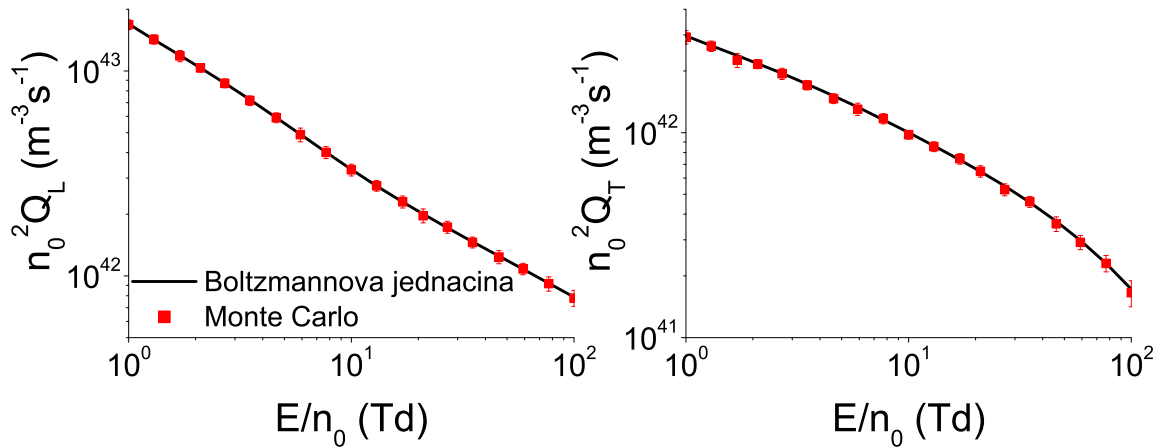


Slika 9: $n_0^2 Q_{xxz}$, $n_0^2 Q_{zxx}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ komponente transportnog tenzora trećeg reda u funkciji redukovano električnog polja E/n_0 za roj elektrona u Reid-ovom modelnom gasu. Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

Slika 9 daje uvid u zavisnost komponenti TTIII od E/n_0 . Primećeno je da je $n_0^2 Q_{zxx}$ komponenta negativna u celom opsegu polja. Negativnost ove komponente ukazuje na to da je doprinos TKIII longitudinalnom fluksu elektrona veći u centru roja nego na transverzalnim ivicama. Ovo je posledica paraboličnog trenda srednje energije elektrona duž transverzalnog pravca i povećanja kolizione frekvence sa porastom energije. Komponente $n_0^2 Q_{xxz}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ su pozitivne u celom opsegu polja. Uticaj porasta kolizione frekvence sa porastom energije nije

dovoljno intenzivan da nadjača uticaj pojačanja sile i povećanja srednje pokretljivosti čestica sa porastom E/n_0 na ove dve komponente.

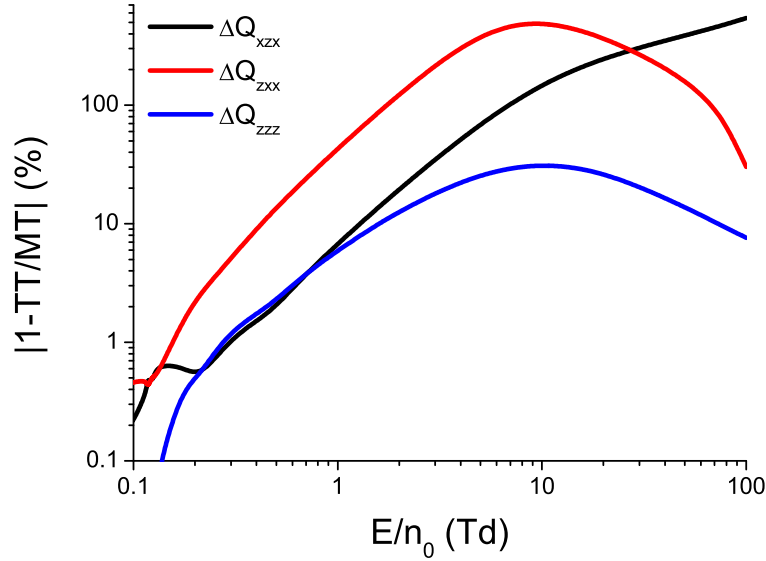
Sve tri komponente TIII se po apsolutnoj vrednosti monotono povećavaju sa porastom E/n_0 do približno 0.1 Td, posle čega njihove apsolutne vrednosti naglo opadaju. Na 0.1 Td je srednja energija elektrona oko $5.6 \cdot 10^{-2}$ eV, što je oko 3.6 puta manje od praga za neelastični sudar u Reid-ovom modelu. Na poljima nižim od 0.1 Td većina elektrona nema dovoljno energije da učestvuje u neelastičnom sudaru, pa porast E/n_0 dovodi do pojačanja difuzionog širenja roja, koje je reprezentovano transportnim koeficijentima trećeg reda. Međutim, na poljima višim od 0.1 Td visokoenergijski elektroni mogu da učestvuju u neelastičnim sudarima. Uticaj neelastičnih sudara na transport elektrona postaje sve značajniji sa porastom E/n_0 zbog povećanja srednje energije roja i povećanja kolizione frekvence za neelastične sudare sa porastom energije. Povećanje kolizione frekvence za neelastične sudare dovodi do većeg otpora difuzionom širenju roja, koje je reprezentovano transportnim koeficijentima trećeg reda.



Slika 10: Poređenje vrednosti $n_0^2 Q_L$ i $n_0^2 Q_T$ komponenti transportnog tenzora trećeg reda za roj elektrona u Reid-ovom modelnom gasu, koje su dobijene primenom Monte Carlo simulacija i metoda više članova za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

Na slici 10 upoređene su vrednosti TKIII dobijene primenom momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine i Monte Carlo simulacija. Uočava se da postoji odlično slaganje među ovim dvema metodama, što potvrđuje i validnost izraza na osnovu kojih se računaju komponente TIII u momentnom metodu za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine i Monte Carlo simulacijama, kao i ispravnost odgovarajućih procedura za izračunavanje TKIII u ovim kompjuterskim kodovima. Na ovim slikama nisu prikazani Monte Carlo rezultati na nižim poljima, zato što mali transfer energije u elastičnim sudarima dovodi do spore relaksacije i značajnog povećavanja statističkih fluktuacija dinamičkih promenljivih na osnovu kojih se računaju komponente TIII.

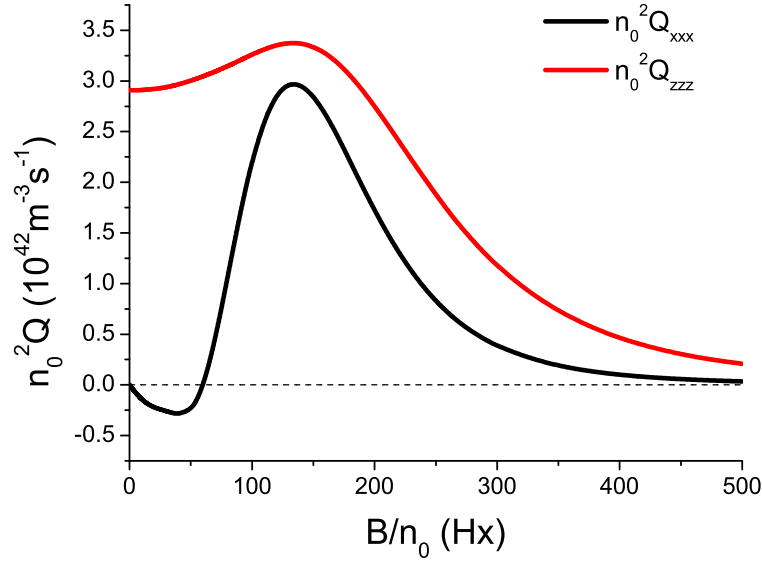
Slika 11 prikazuje procentualne razlike vrednosti komponenti TIII koje su izračunate primenom aproksimacije dva člana za rešavanje Boltzmann-ove jednačine, u kojoj je razvoj po sfernim harmonicima odsečen na drugom članu, i vrednosti komponenti TIII koje su izračunate primenom momentnog metoda, u kome je broj sfernih harmonika određen uslovom



Slika 11: Procentualne razlike između vrednosti komponenti transportnog tenzora trećeg reda koje su određene primenom aproksimacije dva člana (TT) za rešavanje Boltzmann-ove jednačine i primenom metoda više članova (MT) za roj elektrona u Reid-ovom modelnom gasu.

konvergencije transportnih koeficijenata. Uočava se da odstupanje aproksimacije dva člana od momentnog metoda dostiže lokalni maksimum na oko 10 Td za $n_0^2 Q_{xxx}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ komponente TTIII, dok se ovo odstupanje monotono povećava za $n_0^2 Q_{xxx}$ komponentu u celom opsegu E/n_0 . U oblasti polja oko 10 Td je srednja energija elektrona oko 0.24 eV, što je blisko pragu za neelastične sudare u Reid-ovom modelu. Komponenta $n_0^2 Q_{xxx}$ je najosetljivija na primenu aproksimacije dva člana na niskim poljima, dok je komponenta $n_0^2 Q_{zzz}$ najosetljivija na visokim poljima. Sa ove slike se može videti da procentualne razlike između vrednosti TKIII koje su dobijene na osnovu ove dve metode za rešavanje Boltzmann-ove jednačine mogu da iznose i do 500%. Ovo jasno pokazuje da su TKIII osetljiviji na način rešavanja Boltzmann-ove jednačine od brzine drifta i difuzionog tenzora. Iz toga sledi da aproksimacija dva člana nije adekvatna za proračun TKIII kada su prisutni neelastični sudari.

U ovom radu je ispitana i zavisnost komponenti TTIII od redukovanog magnetskog polja B/n_0 u Reid-ovom modelnom gasu, pri ortogonalnoj konfiguraciji električnog i magnetskog polja za fiksiranu vrednost redukovanog električnog polja $E/n_0 = 12$ Td. U ortogonalnoj konfiguraciji polja TTIII ima 14 nenultih komponenti od kojih je 10 nezavisno (videti poglavlje 2.5). Na slici 12 je prikazana zavisnost $n_0^2 Q_{xxx}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ od B/n_0 pri redukovanom električnom polju $E/n_0 = 12$ Td. Kao što je pokazano u potpoglavlju 4.2, $n_0^2 Q_{zzz}$, komponenta TTIII opisuje asimetrično odstupanje prostornog profila roja od Gaussian-a duž z -pravca. Analogno tome, u ortogonalnoj konfiguraciji polja $n_0^2 Q_{xxx}$ komponenta opisuje odstupanje od Gaussian-a duž $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ pravca. Za B/n_0 veće od 150 Hx $n_0^2 Q_{xxx}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ monotono opadaju sa povećanjem B/n_0 . Ovaj trend zavisnosti transportnih koeficijenata od B/n_0 ukazuje na režim kontrolisan magnetskim poljem, u kome ciklotronska frekvencija nadmašuje kolizionu frekvenciju i naelektrisane čestice orbitiraju oko linija magnetskog polja [88]. Na nižim vrednostima B/n_0 , ponašanje



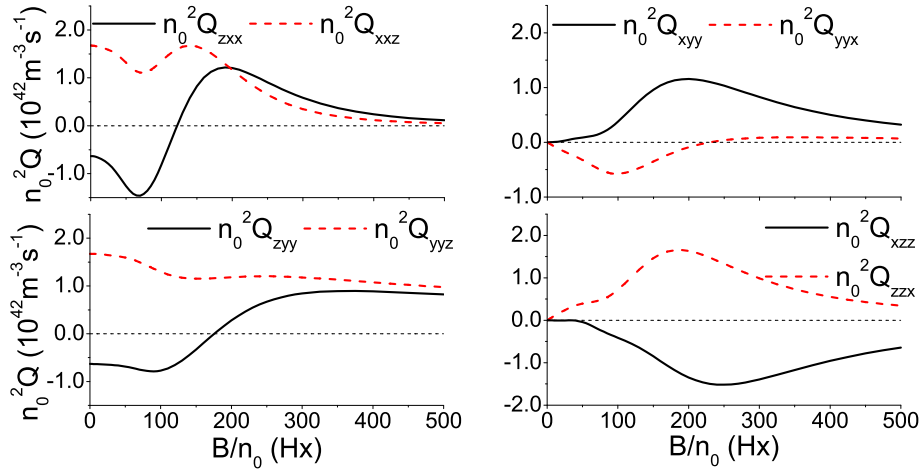
Slika 12: $n_0^2 Q_{xxx}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ komponente transportnog tenzora trećeg reda u funkciji redukovano magetskog polja B/n_0 za elektrone u Reid-ovom modelnom gasu, pri redukovano električnom polju od $E/n_0 = 12$ Td. Ovi rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

TKIII je manje intuitivno. U većem delu ovog opsega, koliziorna frekvencija je veća od ciklotronske [88]. Međutim, sa povećanjem B/n_0 naelektrisane čestice u proseku završavaju sve veći procenat orbite između dva sudara, pa koliziorna frekvencija opada, što dovodi do povećanja $n_0^2 Q_{zzz}$.

Ponašanje $n_0^2 Q_{xxx}$ komponente je nešto složenije. Za najniže vrednosti B/n_0 , ova komponenta je negativna zbog smera Lorencove sile, koja u proizvodi efektivni drift elektrona u negativnom smeru x -ose [88]. Sa povećanjem B/n_0 uticaj neelastičnih sudara na prostorni profil roja postaje sve značajniji, što dovodi do kompresovanja/širenja roja duž negativnog/pozitivnog smera x -ose. Zbog ovoga $n_0^2 Q_{xxx}$ komponenta postaje pozitivna za B/n_0 veće od približno 60 Hx i povećava se sa porastom B/n_0 do oko 150 Hx.

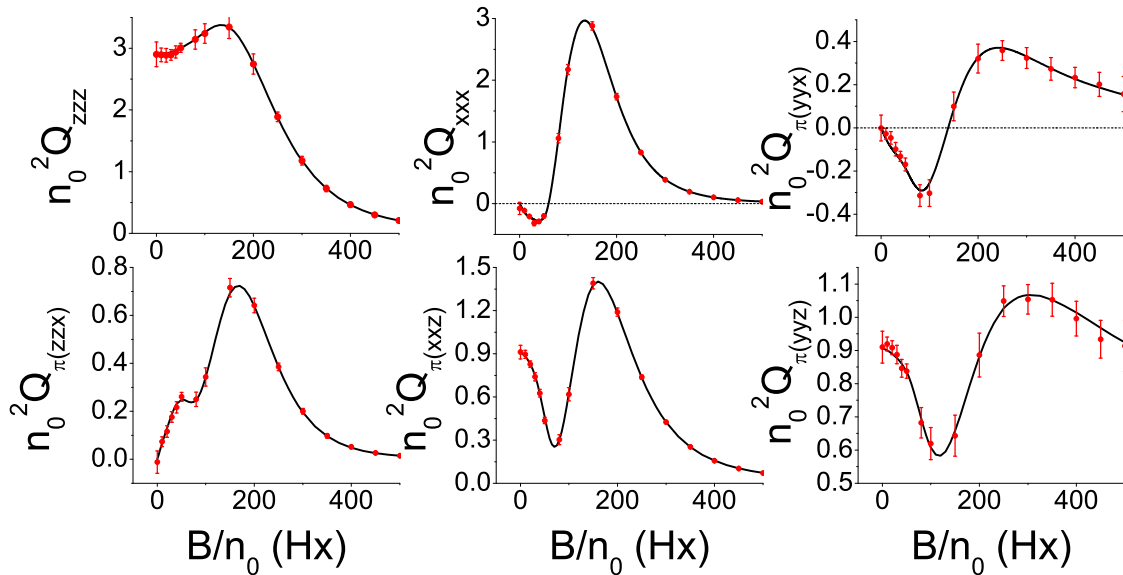
Na slici 13 je prikazana zavisnost vandijagonalnih komponenti TTIII od B/n_0 pri redukovano električnom polju $E/n_0 = 12$ Td. Na najvišim vrednostima B/n_0 sve komponente TTIII opadaju sa porastom B/n_0 , zato što za više vrednosti B/n_0 naelektrisane čestice između dva sudara u proseku završe veći procenat orbite oko linija magnetskog polja [88]. Ponašanje ovih komponenti je složenije na nižim vrednostima B/n_0 . U ovom rasponu polja mnogi faktori istovremeno utiču na TKIII. Među ovim faktorima su termalna anizotropija, magnetska anizotropija i prostorna varijacija srednje brzine i srednje energije duž longitudinalnog i transverznog pravca [89]. Termalna anizotropija opisuje razliku u haotičnom kretanju naelektrisanih čestica duž različitih pravaca, dok magnetska anizotropija opisuje orijentaciju orbita naelektrisanih čestica oko linija magnetskog polja.

Dodatne komponente TTIII, koje su nezavisne u ortogonalnoj konfiguraciji polja, imaju



Slika 13: Vandijagonalne komponente transportnog tenzora trećeg reda u funkciji redukovano magnetnog polja B/n_0 za roj elektrona u Reidovom modelnom gasu pri redukovanom električnom polju od $E/n_0 = 12$ Td. Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

sličnu fizičku interpretaciju kao komponente koje su nezavisne u odsustvu magnetnog polja. Na primer, $n_0^2 Q_{zyy}$ komponenta opisuje razliku u fluksu naelektrisanih čestica duž longitudinalnog pravca u centru roja i na transverzalnim ivicama duž y -ose. Komponenta $n_0^2 Q_{yyz}$ opisuje razliku u transverzalnom širenju duž y -pravca na frontu (u $q\mathbf{E}$ smeru) i na zadnjem delu roja (u $-q\mathbf{E}$ smeru). I preostale vandijagonalne komponente TTIII se mogu predstaviti na sličan način.



Slika 14: Poređenje vrednosti komponenti transportnog tenzora trećeg reda za roj elektrona u Reid-ovom modelnom gasu, koje su određene primenom Monte Carlo simulacija i metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

Poređenje vrednosti komponenti transportnog tenzora trećeg reda, koje su dobijene primenom Monte Carlo simulacija i momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine izloženo je na slici 14. Pošto se u Monte Carlo simulacijama komponente TTIII raču-

naju na osnovu izraza koji su izvedeni iz generalisane difuzione jednačine, nije moguće izdvojiti pojedinačne vandijagonalne elemente TTIII u našim Monte Carlo simulacijama. To je posledica toga što su u generalisanoj difuzionoj jednačini svi indeksi TKIII kontrakovani sa parcijalnim izvodima koncentracije elektrona, čime se gubi deo informacije o strukturi tenzora. U našim Monte Carlo simulacijama je jedino moguće izračunati zbir onih komponenti TTIII koje imaju istu kombinaciju indeksa, poput $n_0^2 Q_{\pi(xxz)} = \frac{1}{3} n_0^2 (Q_{xxz} + Q_{xzx} + Q_{zxx})$, gde $\pi(xxz)$ označava srednju vrednost komponenti sa svim permutacijama indeksa x , y i z . Ovo znači da su na slici 14 prikazani Monte Carlo proračuni dijagonalnih komponenti TTIII i srednjih vrednosti onih vandijagonalnih komponenti koje imaju istu kombinaciju indeksa, kao i proračuni istih tih veličina primenom momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine. Rezultati dobijeni na osnovu ove dve metode se jako dobro slažu. Može se uočiti da različite komponente TTIII imaju statističke fluktuacije različitog intenziteta (što je reprezentovano veličinom error barova). To je posledica razlika u intenzitetu statističkih fluktuacija pojedinačnih dinamičkih promenljivih, na osnovu kojih se računaju TTIII u Monte Carlo simulacijama.

4.7 Transportni koeficijenti trećeg reda za roj elektrona u Lucas-Saelee-evom modelnom gasu

Lucas-Saelee-ev model je modelni gas u kome je interakcija naelektrisanih čestica sa molekulima pozadinskog gasa opisana elastičnim sudarima, neelastičnim sudarima i jonizacijom [192]. Pri tome je koliziorna frekvencija za elastične sudare nezavisna od energije, dok su preseki za neelastične sudare i jonizaciju direktno srazmerni energiji, za vrednosti energije iznad praga od 15.6 eV. Ovaj model su uveli Lucas i Saelee ne bi li ispitali uticaj jonizacije na transport elektrona, primenom Monte Carlo simulacija [192]. Ness i Robson su izučavali transport elektrona u ovom modelu da bi testirali ispravnost svog kompjuterskog koda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine primenom momentnog metoda u prisustvu nekonzervativnih procesa [84]. Transport elektrona u Lucas-Saelee-evom modelu u prisustvu vremenski promenljivog električnog polja ispitivan je primenom vremenski zavisnog momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine [193]. Zavisnosti transportnih osobina elektrona od ugla koji zaklapaju električno i magnetsko polje i od intenziteta magnetskog polja u promenljivoj konfiguraciji električnog i magnetskog polja razmatrane su primenom momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine i Monte Carlo simulacija [67]. Prostorna relaksacija i prostorno razloženi nekonzervativni transport elektrona u uslovima stacionarnog Townsend-ovog eksperimenta (eng. steady state Townsend experiment) u Lucas-Saelee-evom modelu analizirani su primenom Monte Carlo simulacija [31].

Detalji modela su zadati na sledeći način:

$$\sigma_m(\epsilon) = 4\epsilon^{-1/2} \text{Å}^2 \quad (\text{elastični sudar})$$

$$\sigma_{inel}(\epsilon) = \begin{cases} 0.1(1 - F)(\epsilon - 15.6) \text{Å}^2, & \epsilon \geq 15.6 \text{ eV} \\ 0, & \epsilon < 15.6 \text{ eV} \end{cases} \quad (\text{neelastični sudar})$$

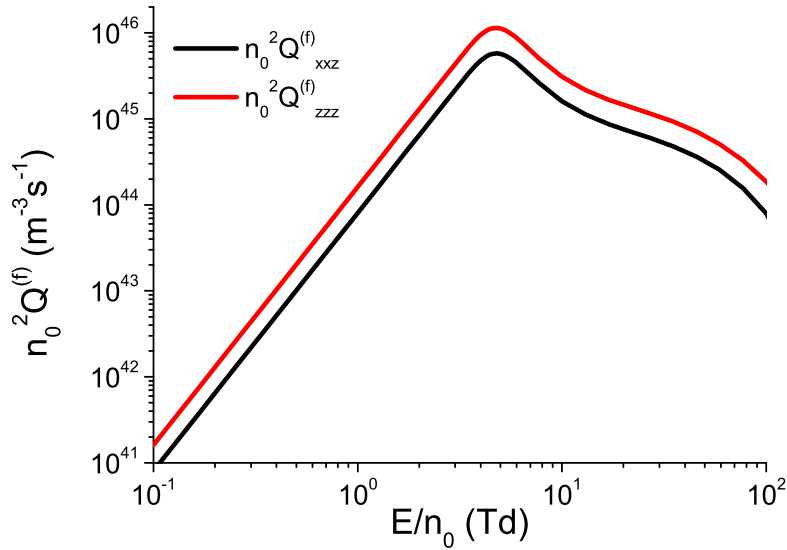
$$\begin{aligned}
\sigma_{ion}(\epsilon) &= \begin{cases} 0.1F(\epsilon - 15.6) \text{ \AA}^2, & \epsilon \geq 15.6 \text{ eV} \\ 0, & \epsilon < 15.6 \text{ eV} \end{cases} \\
&\quad \text{(jonizacija)} \\
P(q, \epsilon') &= 1, m/m_0 = 10^{-3}, \\
T_0 &= 0 \text{ K},
\end{aligned} \tag{4.30}$$

Ovde su $\sigma_{el}(\epsilon)$, $\sigma_{ex}(\epsilon)$, i $\sigma_I(\epsilon)$ preseki za elastične sudare, neelastične sudare i jonizaciju respektivno, $P(q, \epsilon')$ je jonizaciona particiona funkcija, T_0 je temperatura pozadinskog gasa, F je parametar koji određuje odnos preseka za jonizaciju i neelastične sudare, a m i m_0 su mase naelektrisanih čestica i molekula pozadinskog gasa respektivno. U ovim definicijama preseka energija je data u elektronvoltima. Pošto je u ovom modelu rasejanje izotropno, $\sigma_{el}(\epsilon)$, $\sigma_{ex}(\epsilon)$, i $\sigma_I(\epsilon)$ predstavljaju totalne preseke. Argumenti jonizacione particione funkcije $P(q, \epsilon')$, q i ϵ' , jesu udeo ukupne energije nakon jonizacije koja je predata izbačenom elektronu i početna energija primarnog elektrona pre jonizacije, respektivno. U ovom modelu je jonizaciona particiona funkcija izjednačena sa jedinicom, što znači da su sve vrednosti $0 \leq q \leq 1$ podjednako verovatne. Na niskim poljima na kojima je brzinski koeficijent za jonizaciju mali, transportne osobine naelektrisanih čestica nisu osetljive na jonizacionu particionu funkciju [84], međutim poznavanje $P(q, \epsilon')$ u realnim gasovima može biti potrebno na visokim poljima [47, 194, 195].

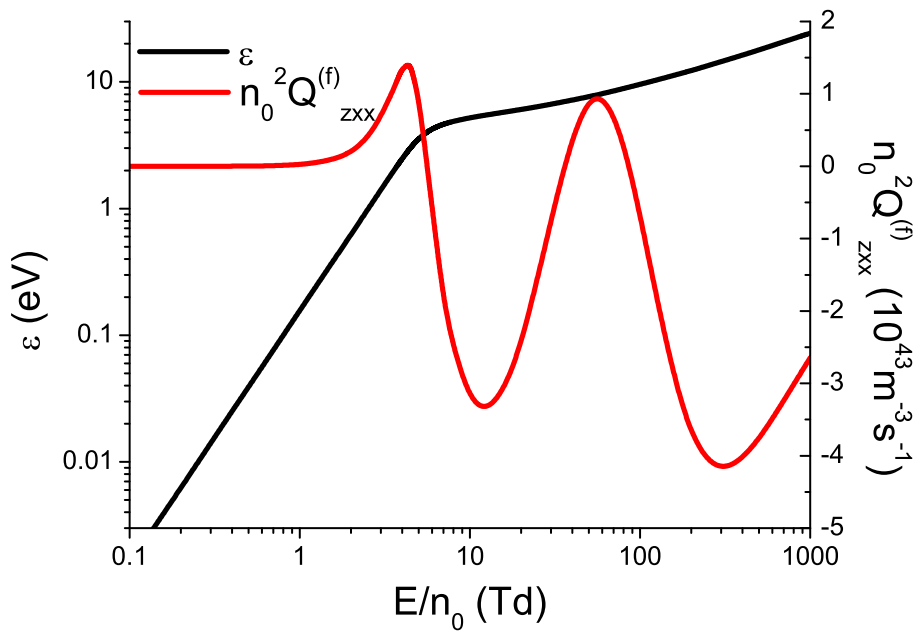
Uz pomoć Lucas-Saelee-evog modelnog gasa moguće je ispitati uticaj implicitnih i eksplicitnih efekata jonizacije na TKIII, što je posebno značajno s obzirom na to da uticaj nekonzervativnih procesa na TKIII nije detaljno istražen u literaturi, kao i zbog toga što se može očekivati da su TKIII u odnosu na brzinu drifta i difuzioni tenzor osetljiviji na prisustvo nekonzervativnih procesa. Zbog prisustva jonizacije u Lucas-Saelee-evom modelu fluks i balk vrednosti TKIII se međusobno razlikuju. Zato su u ovom potpoglavlju fluks i balk vrednosti TKIII označene superskriptima (f) i (b) respektivno.

Na slici 15 predstavljena je međuzavisnost $n_0^2 Q_{xxx}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ od E/n_0 za $F = 0.5$. Na poljima nižim od oko 5 Td $n_0^2 Q_{xxx}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ monotono rastu sa porastom E/n_0 . U ovom opsegu polja je srednja energija elektrona niža od 4 eV (videti sliku 16), pa većina elektrona nema dovoljno energije za neelastični sudar ili jonizaciju. U ovom opsegu polja takođe važi $Q_{zzz} \approx 2Q_{xxx}$, zato što je koliziorna frekvencija za elastične sudare u Lucas Saelee-evom modelu nezavisna od energije, kao u Maxwell-ovom modelu. Na višim poljima $n_0^2 Q_{xxx}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ monotono opadaju sa porastom E/n_0 . Uzrok tome je što neelastični sudari i jonizacija pružaju snažan otpor difuzionom širenju naelektrisanih čestica u ovom opsegu polja.

Zavisnosti $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i srednje energije naelektrisanih čestica od E/n_0 očitavaju se na slici 16. Primetno je da $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponenta ispoljava složeniji trend ponašanja od $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{xxx}^{(f)}$. Na poljima nižim od približno 5 Td ova komponenta je pozitivna i monotono raste sa porastom E/n_0 . Zbog uticaja neelastičnih sudara i jonizacije na višim poljima do oko 13 Td $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ opada i postaje negativna na oko 5.9 Td. Na poljima između približno 13 Td i 59 Td $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ ponovo raste postajući pozitivna na oko 40 Td. U opsegu polja između 59 Td i 300 Td $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ opada sa porastom E/n_0 . Zbog složenosti fizičke interpretacije TKIII nije lako objasniti zavisnost $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ od E/n_0 . Međutim, može se uočiti da je u opsegu između 13 Td i 59 Td, gde $n_0^2 Q_{xxx}^{(f)}$



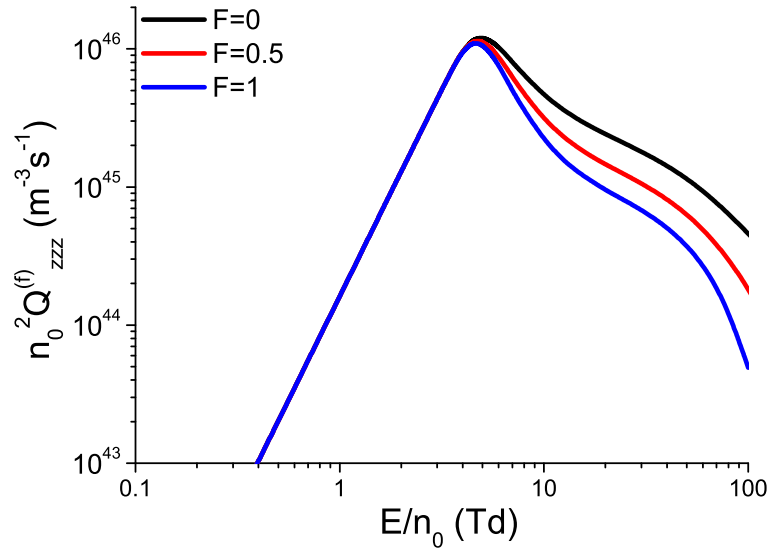
Slika 15: $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda u funkciji redukovanog električnog polja E/n_0 za roj elektrona u Lucas-Saelee-evom modelnom gasu, pri vrednosti parametra $F = 0.5$. Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.



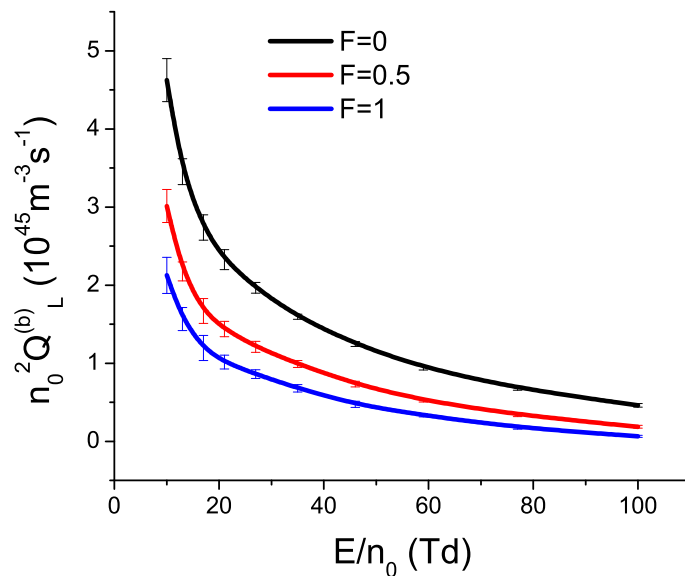
Slika 16: $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta fluks transportnog tenzora trećeg reda i srednja energija u funkciji redukovanog električnog polja E/n_0 za roj elektrona u Lucas-Saelee-evom modelnom gasu pri vrednosti parametra $F = 0.5$. Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

raste sa porastom E/n_0 , porast srednje energije znatno sporiji nego na nižim poljima. Takođe se ispostavlja da je u opsegu polja iznad 59 Td, gde $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ opada sa porastom E/n_0 , porast srednje energije brži nego u opsegu između 13 Td i 59 Td. Ovo bi moglo ukazivati na to da $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ opada

sa porastom E/n_0 u onom opsegu polja u kome se kolizione frekvence za neelastične sudare i jonizaciju povećavaju dovoljno brzo sa porastom polja da nadjačaju efekat pojačanja usmerene komponente kretanja na $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponentu TTIII.

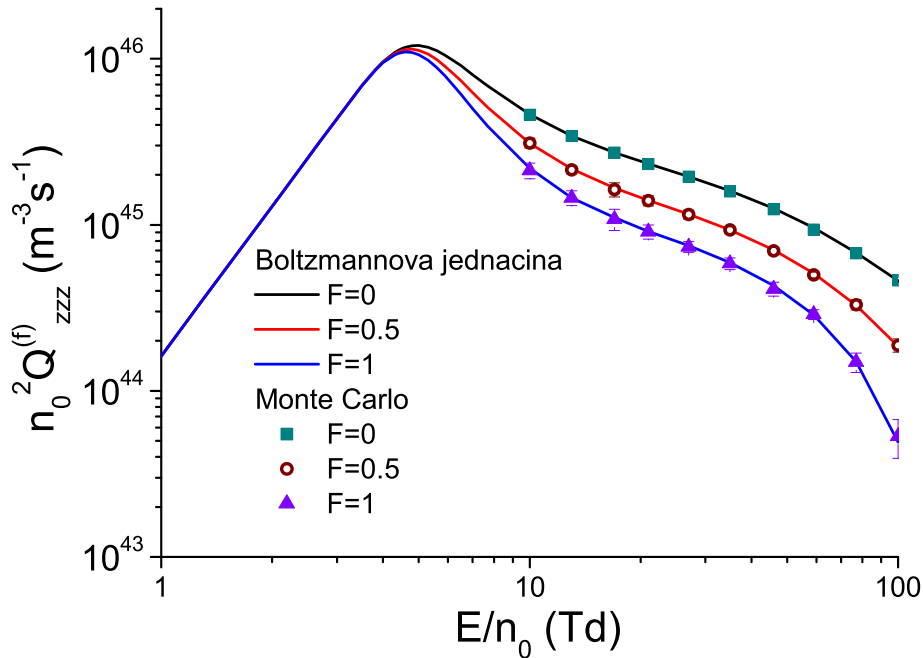


Slika 17: Longitudinalna komponenta fluks transportnog tenzora trećeg reda $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ u funkciji redukovanoeg električnog polja E/n_0 i vrednosti parametra F za roj elektrona u Lucas-Saelee-evom modelnom gasu. Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.



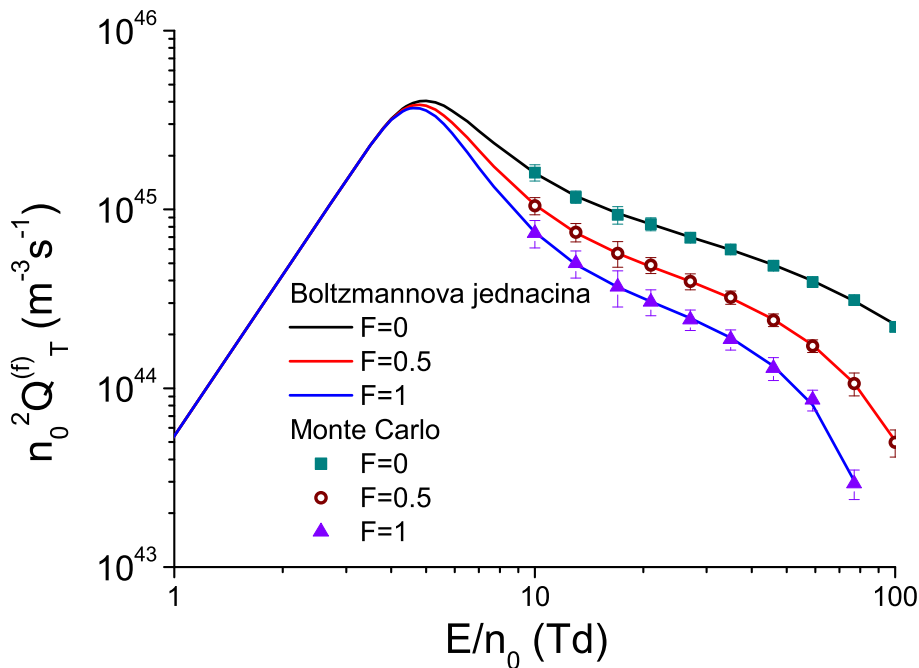
Slika 18: Longitudinalna komponenta balk transportnog tenzora trećeg reda $n_0^2 Q_{zzz}^{(b)}$ u funkciji redukovanoeg električnog polja E/n_0 i vrednosti parametra F za roj elektrona u Lucas-Saelee-evom modelnom gasu. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

Na slikama 17 i 18 su prikazane zavisnosti $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zzz}^{(b)}$ od E/n_0 , respektivno, za tri različite vrednosti parametra F . Sa slike 17 se može uočiti da $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ opada sa porastom F . Ovo je posledica implicitnih efekata jonizacije na TKIII, koji su posledica uticaja nekonzerватivnih procesa na funkciju raspodele elektrona po energijama. Pri tome $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ opada sa porastom parametra F zbog hlađenja jonizacijom. Slika 18 pokazuje da i $n_0^2 Q_{zzz}^{(b)}$ opada sa porastom parametra F . Implicitni efekti utiču na isti način na fluks i balk komponente transportnih koeficijenata. Međutim, na vrednosti balk transportnih koeficijenata utiču i koeficijenti u hidrodinamičkom razvoju izvornog člana. Ovi koeficijenti u slučaju jonizacije povećavaju balk transportne koeficijente u odnosu na fluks transportne koeficijente, zato što se jonizacija uglavnom dešava na frontu roja, gde postoji veći broj visokoenergijskih elektrona. Opadanje $n_0^2 Q_{zzz}^{(b)}$ sa porastom F ukazuje na to da su implicitni efekti jonizacije na TKIII intenzivniji od eksplicitnih efekata. Eksplicitni efekti dovode do toga da je opadanje $n_0^2 Q_{zzz}^{(b)}$ sa porastom F manje intenzivno nego u slučaju $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$.



Slika 19: Poređenje vrednosti $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda koje su dobijene primenom Monte Carlo simulacija i metoda više članova za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine za roj elektrona u Lucas-Saelee-evom modelnom gasu.

Na slikama 19 i 20 je pokazano poređenje rezultata dobijenih na osnovu Monte Carlo simulacija i momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine za komponente $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_T^{(f)}$ respektivno. Može se videti da se rezultati dobijeni primenom ove dve nezavisne tehnike dobro slažu.



Slika 20: Poređenje vrednosti $n_0^2 Q_T^{(f)}$ komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda koje su dobijene primenom Monte Carlo simulacija i metoda više članova za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine za roj elektrona u Lucas-Saelee-evom modelnom gasu.

4.8 Transportni koeficijenti trećeg reda za roj elektrona u modifikovanom Ness–Robsonovom modelnom gasu

Ness-Robson-ov model je uveden da bi se testirala momentna metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine u prisustvu zahvata elektrona [84]. U Ness-Robson-ovom modelu je funkcionalna zavisnost preseka za zahvat elektrona od energije određena parametrom p . Nolan i saradnici su uveli novi modelni gas, koji je baziran na Ness-Robson-ovom modelu i Lucas-Saelee-evom modelu [196]. U njihovom modelnom gasu koliziona frekvenca za elastične sudare nezavisna je od energije, kao i u Ness-Robson-ovom modelu i Lucas-Saelee-evom modelu, dok su neelastični sudari uvedeni na isti način kao i u Lucas-Saelee-evom modelu. Presek za jonizaciju je isti kao u Lucas-Saelee-evom modelnom gasu i srazmeran je parametru F , dok je presek za zahvat elektrona isti kao u Ness-Robson-ovom modelu i srazmeran je parametru a . Nolanov model se svodi na Lucas-Saelee-ev model kada je $a = 0$. Ukoliko je $F = 0$ Nolanov model se svodi na modifikovani Ness-Robson-ov model, koji se razlikuje od Ness-Robson-ovog originalnog modela po veličini preseka za elastične sudare i po prisustvu neelastičnih sudara.

Nolan i saradnici su odredili transportne osobine elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu primenom Monte Carlo simulacija i momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine [196]. Transport elektrona u originalnom Ness-Robson-ovom modelu u vremenski promenljivom električnom polju je ispitan primenom vremenski zavisnog momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine [193]. Zavisnosti transportnih osobina elektrona od ugla koji zaklapaju električno i magnetsko polje i od intenziteta magnetskog polja u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu ispitane su primenom momentnog metoda za rešavanje

Boltzmann-ove jednačine i Monte Carlo simulacija [67]. Prostorna relaksacija i prostorno razloženi transport elektrona u uslovima stacionarnog Townsend-ovog eksperimenta (eng. steady state Townsend experiment) u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu su ispitani primenom Monte Carlo simulacija [31].

U ovom radu je razmatran transport elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu. Prednost modifikovanog Ness-Robson-ovog modela u odnosu na originalni model leži u mogućnosti ispitivanja kombinovanog uticaja zahvata elektrona i neelastičnih sudara. Detalji modifikovanog Ness-Robson-ovog modela su zadati na sledeći način:

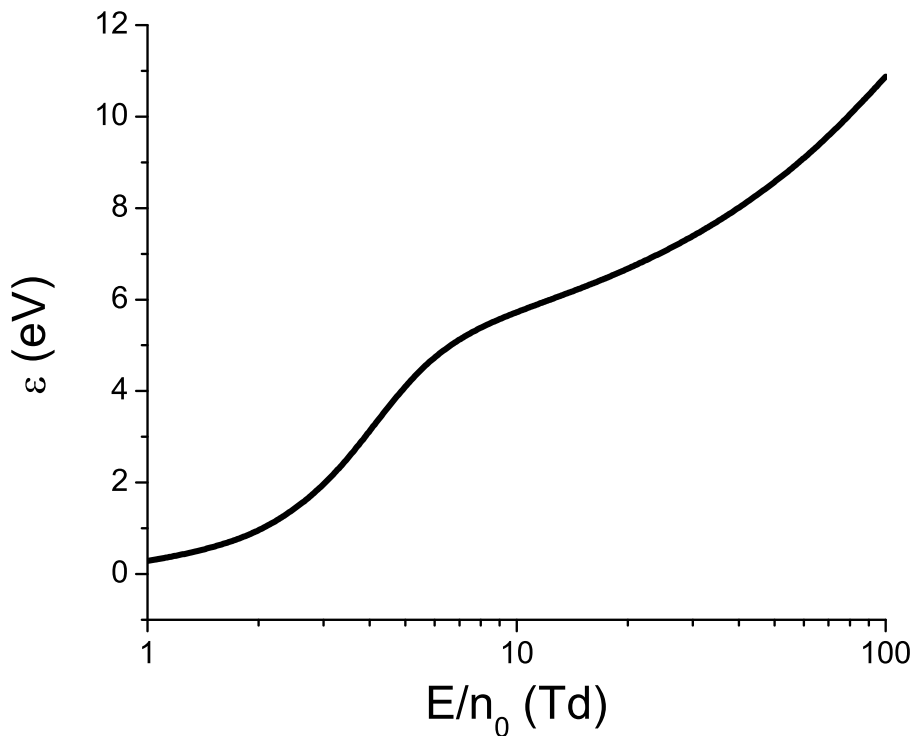
$$\begin{aligned}
\sigma_m(\epsilon) &= 4\epsilon^{-1/2}\text{\AA}^2 \text{ (elastični sudar)} \\
\sigma_{inel}(\epsilon) &= \begin{cases} 0.1(1-F)(\epsilon - 15.6)\text{\AA}^2, & \epsilon \geq 15.6 \text{ eV} \\ 0, & \epsilon < 15.6 \text{ eV} \end{cases} \text{ (neelastični sudar)} \\
\sigma_a(\epsilon) &= a\epsilon^p \text{ (zahvat elektrona)} \\
m/m_0 &= 10^{-3}, \\
T_0 &= 0 \text{ K},
\end{aligned} \tag{4.31}$$

gde su $\sigma_{el}(\epsilon)$, $\sigma_{ex}(\epsilon)$, $\sigma_a(\epsilon)$ preseki za elastične sudare, neelastične sudare i zahvat elektrona, respektivno u funkciji energije elektrona ϵ , T_0 je temperatura pozadinskog gasa, a m i m_0 su mase elektrona i molekula pozadinskog gasa, respektivno. Vrednosti energije u gornjim definicijama preseka su date u eV. Parametri a i p određuju veličinu i funkcionalnu zavisnost preseka za zahvat elektrona, respektivno. Vrednosti parametra p , koje su razmatrane u radu Ness-a i Robson-a, u kome je prvi put korišćen ovaj model [84], kao i u našim proračunima, iznose -1 , $-\frac{1}{2}$ i $\frac{1}{2}$. Ove tri vrednosti parametra p odgovaraju modelu grejanja zahvatom, modelu sa konstantnom kolizionom frekvencom za zahvat i modelu hlađenja zahvatom, respektivno. Za ova tri modela vrednosti parametra a koje su izabrane u našim proračunima iznose $8 \cdot 10^{-3}$, $2 \cdot 10^{-3}$, i $5 \cdot 10^{-4}$, respektivno.

Uz pomoć modifikovanog Ness Robson-ovog modela moguće je ispitati uticaj implicitnih i eksplicitnih efekata zahvata elektrona na TKIII. Ovo je važno zbog nedovoljne istraženosti uticaja nekonzervativnih procesa na TKIII u literaturi i zbog složenosti fizičke interpretacije ovih transportnih koeficijenata. U ovom potpoglavlju su prikazani rezultati proračuna TKIII u modelu grejanja roja zahvatom elektrona i modelu hlađenja roja zahvatom elektrona. Rezultati proračuna u modelu u kome je koliziona frekvenca za zahvat elektrona nezavisna od energije podudaraju se sa rezultatima dobijenim u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu (kada je parametar F jednak 0), za sve transportne parametre osim brzinskog koeficijenta za zahvat elektrona [196]. Ovo je posledica toga što je elektronski zahvat sa konstantnom kolizionom frekvencom ravnomerno raspoređen duž celog roja, pa ne utiče na transportne osobine elektrona. Ovde iznosimo i procentualne razlike rezultata dobijenih u modelima grejanja i hlađenja roja elektrona sa rezultatima dobijenim u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu, radi dodatnog ilustrovanja implicitnih i eksplicitnih efekata zahvata elektrona na TKIII.

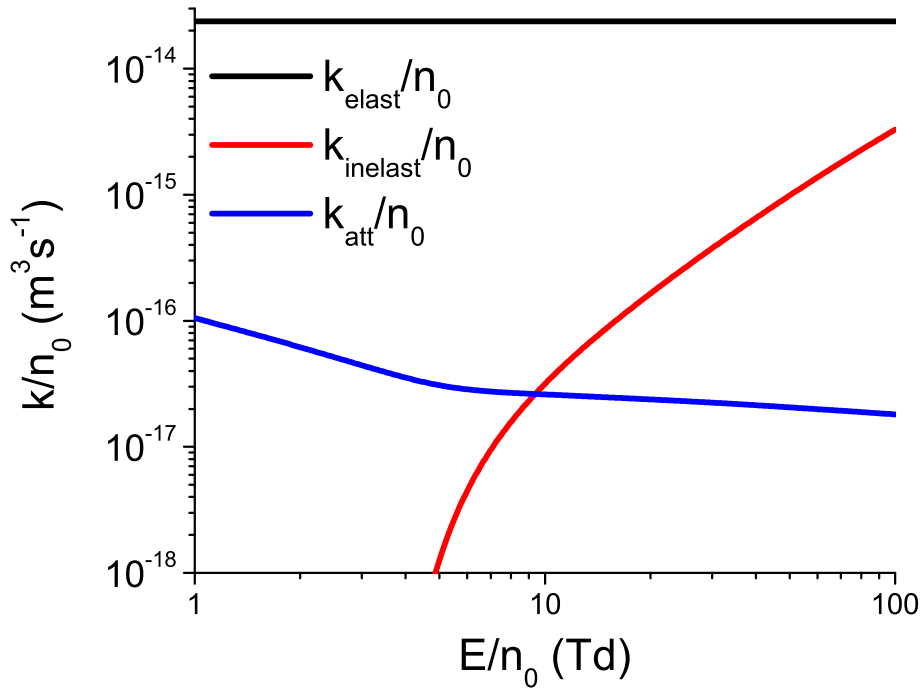
4.8.1 Transportni koeficijenti trećeg reda za roj elektrona u modelu grejanja zahvatom

Ovo potpoglavlje donosi rezultate proračuna transportnih koeficijenata rojeva elektrona u modelu grejanja roja zahvatom elektrona. Vrednosti parametara iz definicije preseka za zahvat a i p u našim proračunima iznose $8 \cdot 10^{-3}$ i -1 , respektivno. Većina rezultata, koji su prikazani u ovom potpoglavlju, dobijena je primenom Monte Carlo simulacija. Rezultati dobijeni primenom momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine su prikazani samo na kraju potpoglavlja, radi poređenja sa Monte Carlo rezultatima, zbog nemogućnosti postizanja konvergencije rezultata u našem kompjuterskom kodu za rešavanje Boltzmann-ove jednačine na redukovanim električnim poljima nižim od 2 Td. Ova nemogućnost postizanja konvergencije na niskim poljima je posledica intenzivnog uticaja zahvata elektrona na funkciju raspodele u ovom modelu. Naime, veliki broj Sonine polinoma je potreban u razvoju funkcije raspodele radi ispravnog reprezentovanja njene energijske zavisnosti, zbog intenzivnog grejanja roja zahvatom elektrona na niskim poljima, a ovo značajno otežava postizanje numeričke konvergencije rezultata [84].



Slika 21: Srednja energija u funkciji E/n_0 za roj elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu za vrednosti parametara $a = 8 \cdot 10^{-3}$ i $p = -1$. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

Na slici 21 je prikazana zavisnost srednje energije elektrona od E/n_0 . Ovi rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija. Može se videti da srednja energija elektrona monotno raste sa porastom E/n_0 . Srednja energija elektrona u ovom modelu je veća od srednje energije u modelu hlađenja zahvatom, kao i od srednje energije u modelu sa konstantnom kolizijom

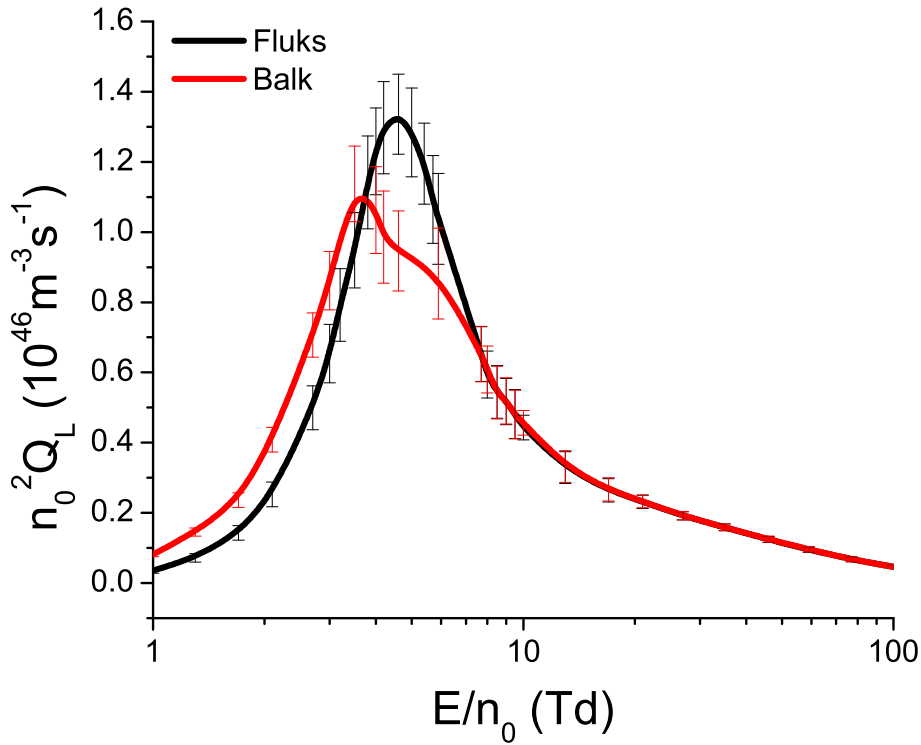


Slika 22: Brzinski koeficijenti za elastične sudare, neelastične sudare i zahvat elektrona u funkciji E/n_0 za roj elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu za vrednosti parametara $a = 8 \cdot 10^{-3}$ i $p = -1$. Rezultati su dobijeni na osnovu Monte Carlo simulacija.

frekvencom za zahvat elektrona. Slika 22 pokazuje zavisnosti brzinskih koeficijenata za elastične sudare, neelastične sudare i zahvat elektrona od E/n_0 . Brzinski koeficijent za elastične sudare je nezavisan od E/n_0 , zato što je u ovom modelu koliziona frekvenca za elastične sudare nezavisna od energije elektrona. Brzinski koeficijent za zahvat elektrona opada sa porastom E/n_0 , dok brzinski koeficijent za neelastične sudare raste sa porastom polja u celom opsegu E/n_0 . Na poljima nižim od oko 10 Td brzinski koeficijent za zahvat elektrona viši je od brzinskog koeficijenta za neelastične sudare. Međutim, brzinski koeficijent za neelastične sudare se naglo povećava u opsegu E/n_0 od 4 Td do 10 Td i viši je od brzinskog koeficijenta za zahvat elektrona na poljima iznad 10 Td.

Zavisnosti fluks i balk vrednosti longitudinalne komponente TTIII $n_0^{(2)}Q_L$ od E/n_0 predstavljene su na slici 23. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija. Na poljima nižim od oko 4 Td, $n_0^{(2)}Q_L^{(b)}$ je veće od $n_0^{(2)}Q_L^{(f)}$. Ali je zato $n_0^{(2)}Q_L^{(b)}$ manje od $n_0^{(2)}Q_L^{(f)}$ u opsegu polja između 4 Td i 8 Td. Na poljima iznad 8 Td su $n_0^{(2)}Q_L^{(b)}$ i $n_0^{(2)}Q_L^{(f)}$ praktično jednaki.

Srednja energija elektrona je manja od 3.1 eV na poljima nižim od 4 Td, pa u ovom opsegu polja većina elektrona nema dovoljno energije za neelastični sudar. U ovom opsegu polja brzinski koeficijent za zahvat elektrona je preko 40 puta veći od brzinskog koeficijenta za neelastične sudare. Pored toga je energija izgubljena u elastičnim sudarima preko 4 puta veća od energije izgubljene u neelastičnim sudarima za vrednosti E/n_0 niže od 4 Td. Zato je u ovom opsegu polja transport elektrona pretežno određen elastičnim sudarima i zahvatom elektrona. Zbog porasta srednje energije elektrona duž longitudinalnog pravca, na zadnjem delu roja ima više niskoenergijskih elektrona, koji imaju veću kolizionu frekvencu za zahvat elektrona nego na

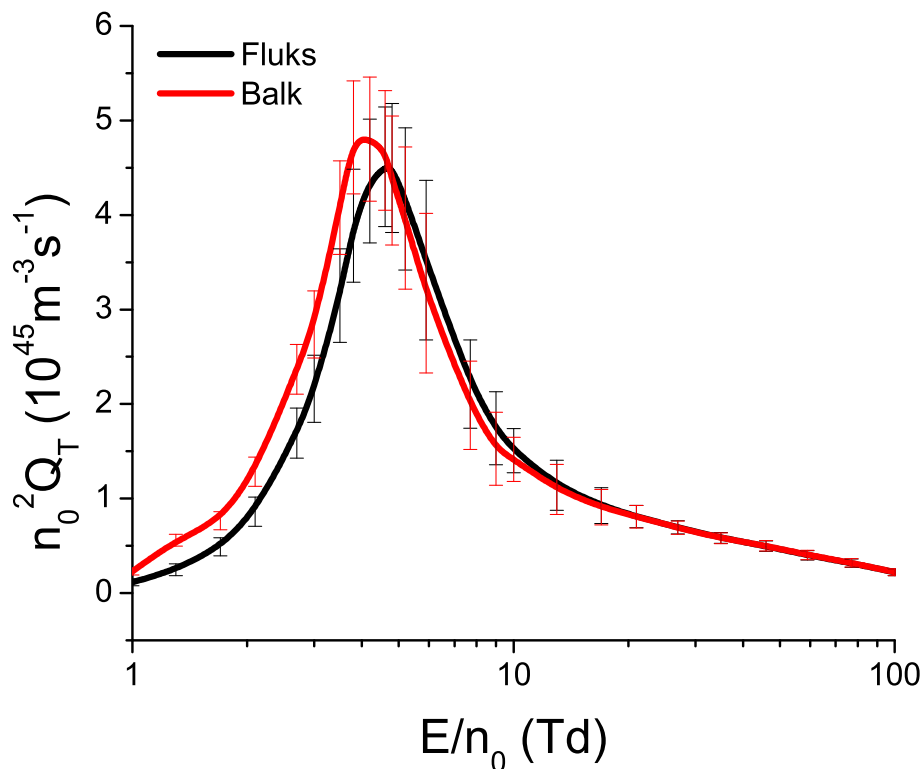


Slika 23: Balk i fluks longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda u funkciji E/n_0 za roj elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu za vrednosti parametara $a = 8 \cdot 10^{-3}$ i $p = -1$. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

frontu roja. To znači kako u ovom opsegu polja, zahvat elektrona pojačava krivljenje prostornog profila roja ka prednjoj strani, u smeru drifta elektrona, zbog čega je $n_0^{(2)}Q_L^{(b)}$ veće od $n_0^{(2)}Q_L^{(f)}$.

Međutim, u opsegu polja između 5.9 Td i 7.7 Td je srednja energija elektrona između 4.75 eV i 5.4 eV, pa veliki procenat visokoenergijskih elektrona ima dovoljno energije za neelastični sudar. U ovom opsegu polja je brzinski koeficijent za zahvat elektrona približno između 6 i 2 puta veći od brzinskog koeficijenta za neelastične sudare. Uz to je energija izgubljena u neelastičnim sudarima približno između 1.5 i 5 puta veća od energije izgubljene u elastičnim sudarima. Upravo zbog ovih razloga mnogi visokoenergijski elektroni na frontu roja izgube energiju u neelastičnom sudaru, nakon čega imaju veliku kolizionu frekvencu za zahvat elektrona. Pored toga, u ovom opsegu polja elektroni na zadnjoj strani roja imaju manju kolizionu frekvencu za elektronski zahvat nego što je to slučaj na nižim poljima, i to zbog porasta ukupne srednje energije sa povećanjem polja. Ovo dovodi do smanjenja krivljenja prostornog profila roja ka prednjoj strani, zbog čega je $n_0^{(2)}Q_L^{(b)}$ manje od $n_0^{(2)}Q_L^{(f)}$ u ovom opsegu polja. Na poljima višim od 8 Td, brzinski koeficijent za zahvat elektrona znatno je manji nego na nižim poljima. Pored toga, neelastični sudari su sve češći na visokim poljima, što dovodi do ravnomernije raspodele niskoenergijskih elektrona, koji imaju veliku kolizionu frekvencu za zahvat, duž prostornog profila roja. Zbog toga su fluks i balk vrednosti longitudinalne komponente TIII praktično jednake na poljima višim od 8 Td.

Na slici 24 su prikazane zavisnosti $n_0^{(2)}Q_T^{(f)}$ i $n_0^{(2)}Q_T^{(b)}$ od E/n_0 . Ovi rezultati su dobijeni na osnovu Monte Carlo simulacija. Na poljima nižim od približno 5 Td $n_0^{(2)}Q_T^{(b)}$ je veće od $n_0^{(2)}Q_T^{(f)}$.



Slika 24: Balk i fluks transverzalne komponente transportnog tenzora trećeg reda u funkciji E/n_0 za roj elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu za vrednosti parametara $a = 8 \cdot 10^{-3}$ i $p = -1$. Rezultati su dobijeni na osnovu Monte Carlo simulacija.

Međutim, u opsegu polja između 5 Td i 10 Td $n_0^{(2)}Q_T^{(b)}$ je manje od $n_0^{(2)}Q_T^{(f)}$, ali je ova razlika u okviru statističke nesigurnosti Monte Carlo simulacija. Za električna polja veća od 10 Td, balk i fluks vrednosti $n_0^{(2)}Q_T$ su praktično jednake.

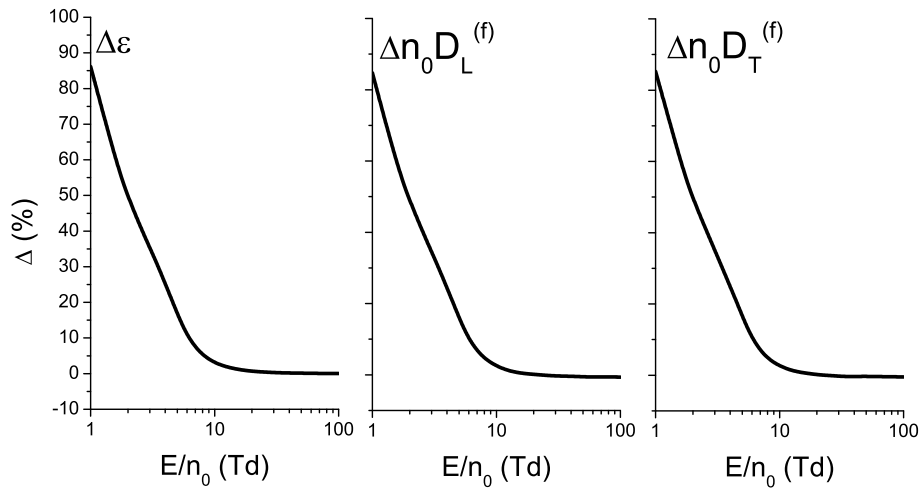
Na poljima nižim od 5 Td elektroni češće učestvuju u zahvatu na zadnjoj strani roja, što dodatno povećava transverzalno širenje na prednjoj strani roja u odnosu na transverzalno širenje na zadnjoj strani roja. Zbog toga je u ovom opsegu polja $n_0^{(2)}Q_T^{(b)}$ veće od $n_0^{(2)}Q_T^{(f)}$. Na višim poljima pak mnogi visokoenergijski elektroni na frontu roja izgube energiju u neelastičnim sudarima pa budu zahvaćeni, što dovodi do smanjenja transverzalnog širenja na prednjoj strani roja i promene odnosa $n_0^{(2)}Q_T^{(f)}$ i $n_0^{(2)}Q_T^{(b)}$. Na poljima iznad 10 Td, fluks i balk vrednosti $n_0^{(2)}Q_T$ su praktično jednake. Ovo je posledica znatno manjih vrednosti brzinskog koeficijenta za zahvat elektrona u ovom opsegu polja u odnosu na niža polja, kao i ravnomernije raspodele niskoenergijskih elektrona duž prostornog profila roja zbog velike učestalosti neelastičnih sudara na visokim poljima.

Na slikama 25-28 navode se procentualne razlike transportnih veličina za rojeve elektrona u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu i modelu grejanja zahvatom elektrona. Ove procentualne razlike su određene kao

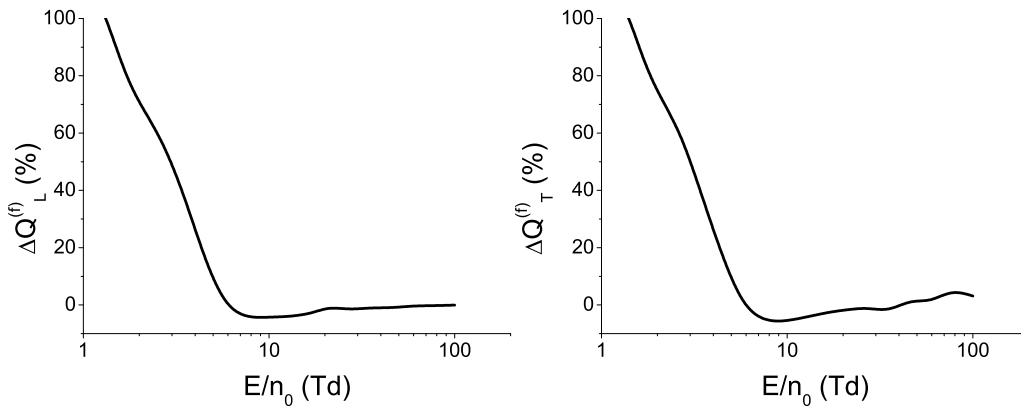
$$\frac{X(\text{NR})}{X(\text{LS})} - 1, \quad (4.32)$$

gde su $X(\text{NR})$ i $X(\text{LS})$ vrednosti proizvoljne transportne veličine u modelu grejanja zahvatom

i u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu, respektivno. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija, pošto je u momentnoj metodi za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine teško postići konvergenciju rezultata na poljima nižim od 2 Td zbog velikog brzinskog koeficijenta za zahvat elektrona na niskim poljima.

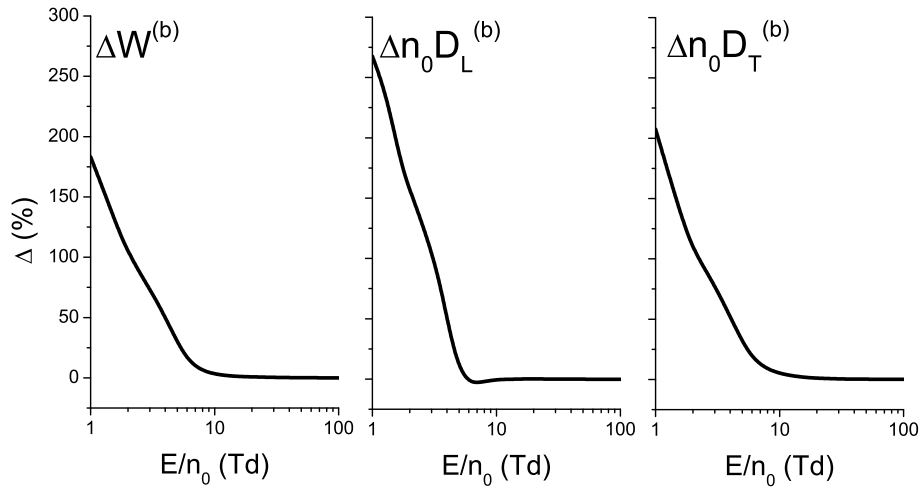


Slika 25: Procentualne razlike između vrednosti transportnih veličina za rojeve elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelnom gasu (za vrednosti parametara $a = 8 \cdot 10^{-3}$ i $p = -1$) i u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu (za $F=0$). Na ovom grafiku su prikazane procentualne razlike srednje energije, longitudinalne komponente fluks difuzionog tenzora $D_L^{(f)}$ i transverzalne komponente fluks difuzionog tenzora $D_T^{(f)}$. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

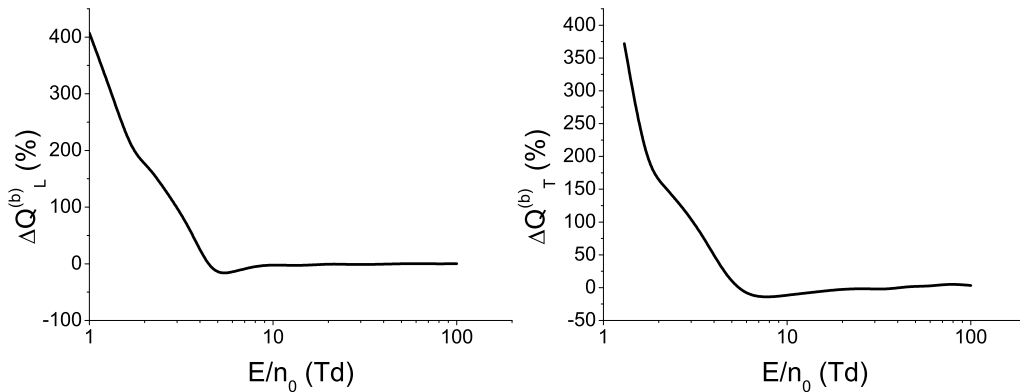


Slika 26: Procentualne razlike između vrednosti transportnih veličina za rojeve elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelnom gasu (za vrednosti parametara $a = 8 \cdot 10^{-3}$ i $p = -1$) i u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu (za $F=0$). Na ovom grafiku su prikazane procentualne razlike longitudinalne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda $Q_L^{(f)}$ i transverzalne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda $Q_T^{(f)}$. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

Slika 25 prikazuje procentualne razlike između vrednosti srednje energije, longitudinalne komponente fluks difuzionog tenzora $D_L^{(f)}$ i transverzalne komponente fluks difuzionog tenzora



Slika 27: Procentualne razlike između vrednosti transportnih veličina za rojeve elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelnom gasu (za vrednosti parametara $a = 8 \cdot 10^{-3}$ i $p = -1$) i u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu (za $F=0$). Na ovom grafiku date su procentualne razlike balk brzine drifta $W^{(b)}$, longitudinalne komponente balk difuzionog tenzora $D_L^{(b)}$ i transverzalne komponente balk difuzionog tenzora $D_T^{(b)}$. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.



Slika 28: Procentualne razlike između vrednosti transportnih veličina za rojeve elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelnom gasu (za vrednosti parametara $a = 8 \cdot 10^{-3}$ i $p = -1$) i u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu (za $F=0$). Na grafiku su prikazane procentualne razlike longitudinalne komponente balk transportnog tenzora trećeg reda $Q_L^{(b)}$ i transverzalne komponente balk transportnog tenzora trećeg reda $Q_T^{(b)}$. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

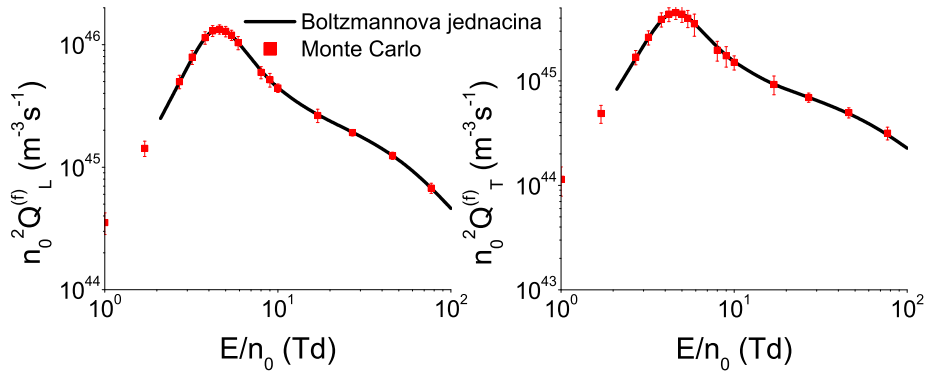
$D_T^{(f)}$ za rojeve elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu (za vrednosti parametara $a = 8 \cdot 10^{-3}$ i $p = -1$) i u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu (za $F=0$). Procentualne razlike između vrednosti ove tri veličine u ova dva modelna gasa imaju vrlo slične brojne vrednosti u celom razmatranom opsegu redukovanoeg električnog polja E/n_0 . Može se videti da su ove razlike najveće na niskim poljima. Na oko 1 Td su ove tri veličine za oko 85% veće u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu nego u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu. Ove procentualne razlike opadaju sa povećanjem polja i dostižu plato na oko 10 Td, posle čega teže nuli na visokim poljima.

Na slici 26 se navode procentualne razlike, između vrednosti $Q_L^{(f)}$ i $Q_T^{(f)}$ za rojeve elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu (za $a = 8 \cdot 10^{-3}$ i $p = -1$) i konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu ($F=0$). Komponente $Q_L^{(f)}$ i $Q_T^{(f)}$ su veće za oko 110% u modelu grejanja zahvatom elektrona nego u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu na oko 1 Td. Sa povećanjem polja ova razlika prvo opada, a onda na oko 6 Td postane zanemarljiva. U opsegu polja između 6 Td i 20 Td su obe komponente fluks TTIII veće u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu nego u modelu grejanja zahvatom, ali je ova razlika u okviru statističke nesigurnosti Monte Carlo simulacija. Razlozi za promenu odnosa između vrednosti fluks komponenti TTIII u ova dva modela bi mogli da budu isti kao razlozi za promenu odnosa fluks i balk vrednosti TKIII u modelu grejanja zahvatom. Na višim poljima razlika između rezultata koji su dobijeni u ova dva modela opada ka nuli.

Na slici 27 su prikazane procentualne razlike između vrednosti balk brzine drifta $W^{(b)}$, longitudinalne komponente balk difuzionog tenzora $D_L^{(b)}$ i transverzalne komponente balk difuzionog tenzora $D_T^{(b)}$ u ova dva modela. Profili zavisnosti ovih procentualnih razlika od E/n_0 su na kvalitativnom nivou vrlo slični. Vrednosti balk brzine drifta su na niskim poljima (oko 1 Td) za oko 175% veće u modelu grejanja zahvatom nego u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu. Ova razlika opada sa povećanjem polja i dostiže plato na oko 10 Td, posle čega teži nuli. Na poljima od oko 1 Td je $D_L^{(b)}$ veće za približno 275% u modelu grejanja zahvatom nego u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu, dok u ovom opsegu polja odgovarajuća razlika za $D_T^{(b)}$ iznosi oko 250%. Ove procentualne razlike dostižu plato na oko 6 Td i 10 Td za $D_L^{(b)}$ i $D_T^{(b)}$, respektivno, posle čega teže nuli.

Dalje, slika 28 predstavlja procentualne razlike između vrednosti $Q_L^{(b)}$ i $Q_T^{(b)}$ u ova dva modela. Na niskim poljima (oko 1 Td), $Q_L^{(b)}$ je veće u modelu grejanja zahvatom nego u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu za oko 400%. Odgovarajuća razlika između vrednosti $Q_T^{(b)}$ u ova dva modela i u ovom opsegu polja iznosi oko 350%. Procentualna razlika između vrednosti $Q_L^{(b)}$ i $Q_T^{(b)}$ u ova dva modelna gasa opada sa povećanjem polja. U opsegu polja između 4.5 Td i 10 Td je $Q_L^{(b)}$ veće u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu nego u modelu grejanja zahvatom, ali je ova razlika u okviru statističke nesigurnosti Monte Carlo simulacija. Slično tome, $Q_T^{(b)}$ komponenta je veća u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu nego u modelu grejanja zahvatom u opsegu polja između 5.5 Td i 20 Td, no i ova razlika ulazi u raspon statističke nesigurnosti. Razlozi za promenu odnosa balk komponenti TTIII u ova dva modela mogli bi da budu isti kao razlozi za promenu odnosa fluks i balk vrednosti TKIII u modelu grejanja zahvatom. Na poljima višim od 20 Td razlike između vrednosti $Q_L^{(b)}$ i $Q_T^{(b)}$ komponenti u ova dva modela opadaju ka nuli.

Na slici 29 je prikazano poređenje vrednosti $Q_L^{(f)}$ i $Q_T^{(f)}$ koje su dobijene na osnovu Monte Carlo simulacija i momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu za slučaj grejanja zahvatom elektrona. Rezultati koji su dobijeni primenom ove dve metode veoma se dobro slažu.



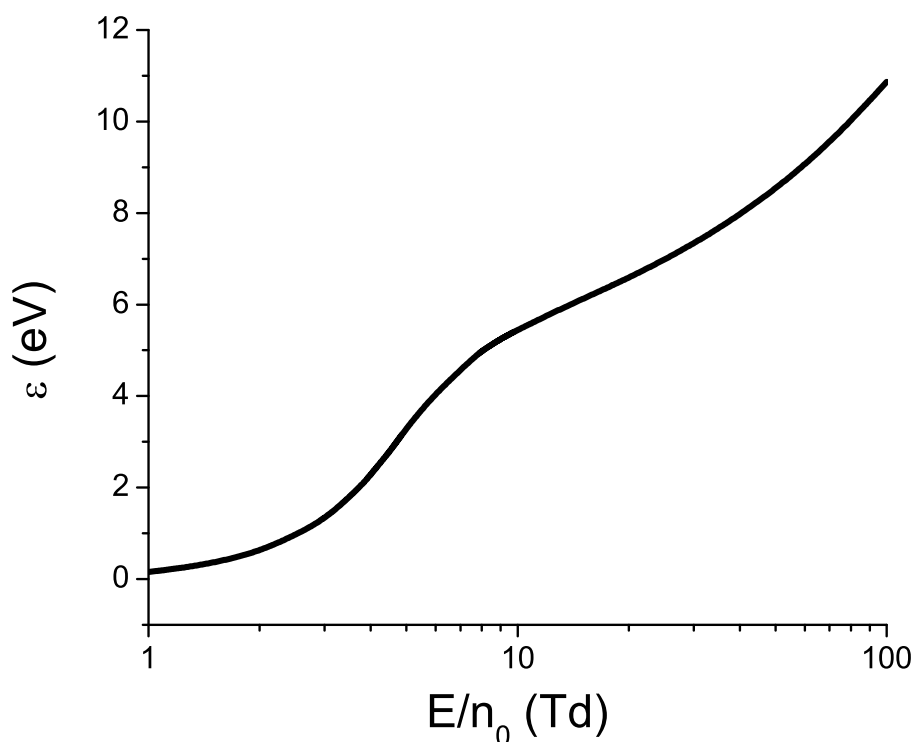
Slika 29: Poređenje vrednosti longitudinalne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda $Q_L^{(f)}$ i transverzalne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda $Q_T^{(f)}$ koje su dobijene primenom Monte Carlo simulacija i metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine za elektrone u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu za vrednosti parametara $a = 8 \cdot 10^{-3}$ i $p = -1$.

4.8.2 Transportni koeficijenti trećeg reda za roj elektrona u modelu hlađenja zahvatom

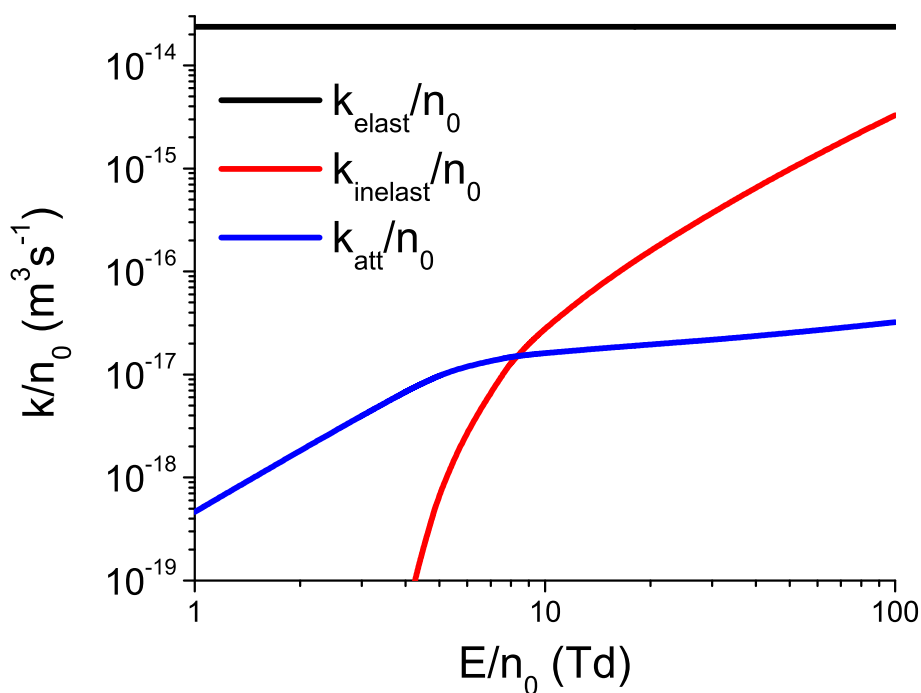
Ovo potpoglavlje donosi rezultate proračuna transportnih osobina rojeva elektrona u modelu hlađenja roja zahvatom elektrona. Vrednosti parametara iz definicije preseka za zahvat a i p u našim proračunima iznose $5 \cdot 10^{-4}$ i $\frac{1}{2}$, respektivno. Većina rezultata koji su prikazani u ovom potpoglavlju je dobijena primenom momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine. Rezultati Monte Carlo simulacija su prikazani samo na kraju poglavlja radi poređenja sa rezultatima momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine, kao i na graficima na kojima su prikazane balk vrednosti TKIII. Balk vrednosti TKIII ne mogu biti određene primenom trenutne verzije našeg kompjuterskog koda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine momentnom metodom.

Na slici 30 je prikazana zavisnost srednje energije elektrona od E/n_0 . Srednja energija monotonno raste sa povećanjem polja. Primećuje se da su vrednosti srednje energije u modelu hlađenja zahvatom niže nego vrednosti srednje energije u modelu grejanja zahvatom i vrednosti u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu. Grafik 31 pokazuje zavisnosti brzinskih koeficijenata za elastične sudare, neelastične sudare i zahvat elektrona od E/n_0 . Brzinski koeficijent za elastične sudare je nezavisan od E/n_0 zato što je koliziona frekvencija za elastične sudare nezavisna od energije u ovom modelu. S druge strane, brzinski koeficijenti za neelastične sudare i zahvat elektrona monotonno rastu sa porastom E/n_0 . Pri tome je brzinski koeficijent za zahvat elektrona viši od brzinskog koeficijenta za neelastične sudare na poljima nižim od oko 8.5 Td. Na višim poljima je brzinski koeficijent za neelastične sudare viši od brzinskog koeficijenta za zahvat elektrona.

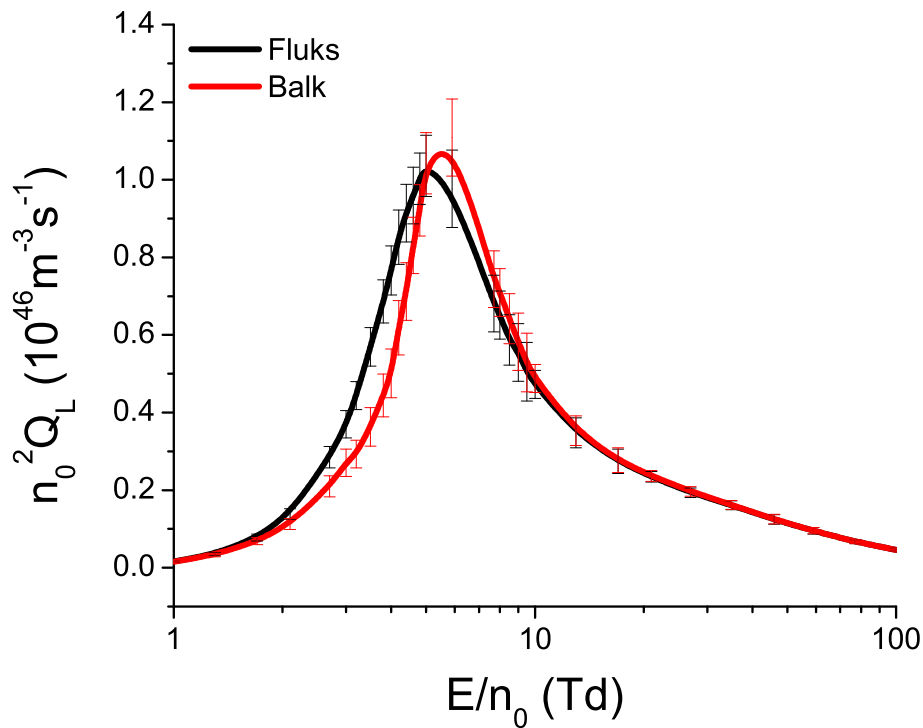
Prikaz zavisnosti $n_0^2 Q_L^{(f)}$ i $n_0^2 Q_L^{(b)}$ od E/n_0 dat je na slici 32. Ovi rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija. U opsegu polja između 1 Td i 5 Td je $n_0^2 Q_L^{(f)}$ veće od $n_0^2 Q_L^{(b)}$. Međutim, u opsegu polja između 5 Td i 21 Td je $n_0^2 Q_L^{(f)}$ manje od $n_0^2 Q_L^{(b)}$. Na višim poljima su



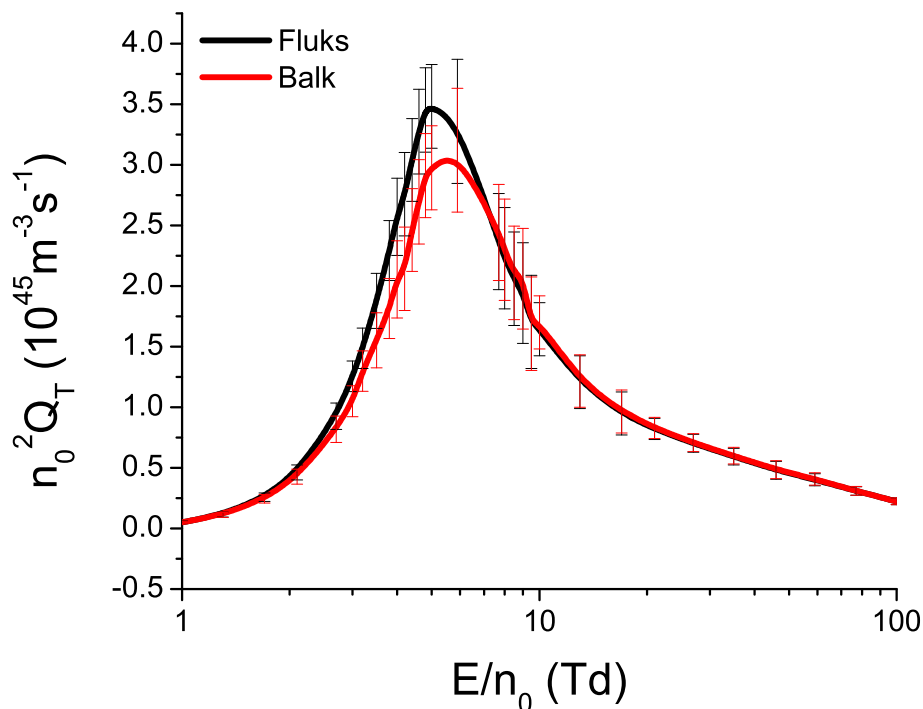
Slika 30: Srednja energija u funkciji E/n_0 za roj elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu za vrednosti parametara $a = 5 \cdot 10^{-4}$ i $p = \frac{1}{2}$. Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.



Slika 31: Brzinski koeficijenti za elastične sudare, neelastične sudare i zahvat elektrona u funkciji E/n_0 za roj elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu za vrednosti parametara $a = 5 \cdot 10^{-4}$ i $p = \frac{1}{2}$. Ovi rezultati su dobijeni na osnovu metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.



Slika 32: Balk i fluks longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda u funkciji E/n_0 za roj elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu za vrednosti parametara $a = 5 \cdot 10^{-4}$ i $p = \frac{1}{2}$. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.



Slika 33: Balk i fluks transverzalne komponente transportnog tenzora trećeg reda u funkciji E/n_0 za roj elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu za vrednosti parametara $a = 5 \cdot 10^{-4}$ i $p = \frac{1}{2}$. Rezultati su dobijeni uz pomoć Monte Carlo simulacija.

$n_0^2 Q_L^{(f)}$ i $n_0^2 Q_L^{(b)}$ praktično jednaki.

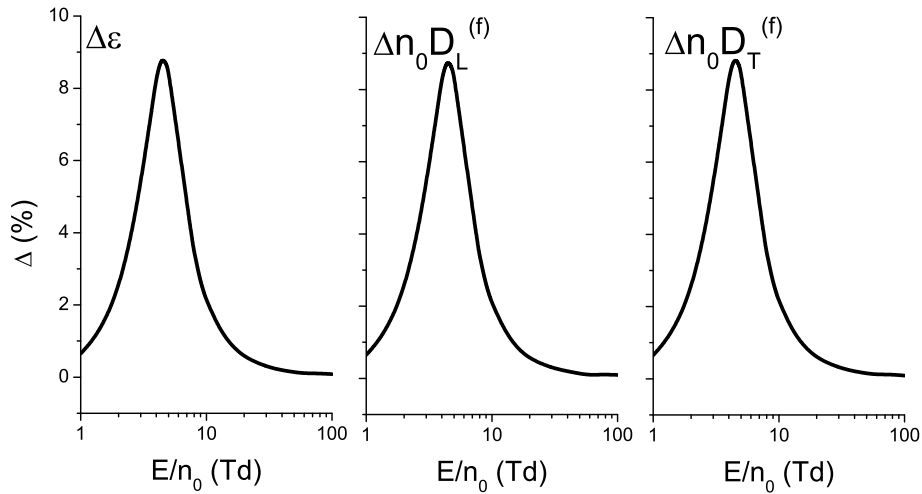
Na poljima nižim od 5 Td je srednja energija elektrona ispod 3.29 eV, pa većina elektrona nema dovoljno energije za neelastični sudar. Zato je u ovom opsegu polja brzinski koeficijent za neelastične sudare preko 14 puta manji od brzinskog koeficijenta za zahvat elektrona, dok je energija izgubljena u neelastičnim sudarima preko 4.4 puta manja od energije izgubljene u elastičnim sudarima. Zbog toga je transport elektrona u ovom opsegu polja pretežno određen elastičnim sudarima i zahvatom elektrona. U modelu hlađenja zahvatom elektrona se zahvat na niskim poljima dominantno dešava na frontu roja, gde je veći broj visokoenergijskih elektrona. Na tim osnovama, zahvat elektrona dovodi do smanjenja iskrivljenosti prostornog profila roja, u smeru drifta elektrona. Zato je u ovom opsegu polja $n_0^2 Q_L^{(f)}$ veće od $n_0^2 Q_L^{(b)}$.

Međutim, u opsegu polja između 5 Td i 21 Td srednja energija elektrona ima vrednost između 3.29 eV i 6.7 eV, pa znatno veći broj elektrona ima dovoljno energije za neelastični sudar. Zbog toga u ovom opsegu polja odnos brzinskih koeficijenata za neelastične sudare i zahvat elektrona uzima vrednosti iz opsega između 0.07 i 8.9. Uz to i odnos energije izgubljene u neelastičnim sudarima i elastičnim sudarima uzima vrednosti iz opsega između 0.22 i 58. Značajno povećanje brzinskog koeficijenta za neelastične sudare, u ovom opsegu polja, dovodi do toga da mnogi visokoenergijski elektroni na frontu roja izgube energiju u neelastičnom sudaru, nakon čega im se smanji koliziona frekvencija za zahvat elektrona. Pored toga, na poljima višim od 5 Td, zbog porasta ukupne srednje energije, postoji više elektrona sa visokom kolizionom frekvencom za zahvat u zadnjem delu roja, nego što je to slučaj na nižim poljima. Zato je u ovom opsegu polja promenjen uticaj zahvata elektrona na iskrivljenost prostornog profila roja, u odnosu na niža polja, što dovodi do promene odnosa $n_0^2 Q_L^{(f)}$ i $n_0^2 Q_L^{(b)}$. U opsegu polja iznad 21 Td brzinski koeficijent za neelastične sudare je preko 8.9 puta veći od brzinskog koeficijenta za zahvat, uz šta je energija izgubljena u neelastičnim sudarima preko 58 puta veća od energije izgubljene u elastičnim sudarima. Dominantan uticaj neelastičnih sudara na transport elektrona u ovom opsegu polja značajno smanjuje uticaj zahvata elektrona na prostorni profil roja, što dovodi do toga da su $n_0^2 Q_L^{(f)}$ i $n_0^2 Q_L^{(b)}$ praktično jednaki u ovom opsegu polja.

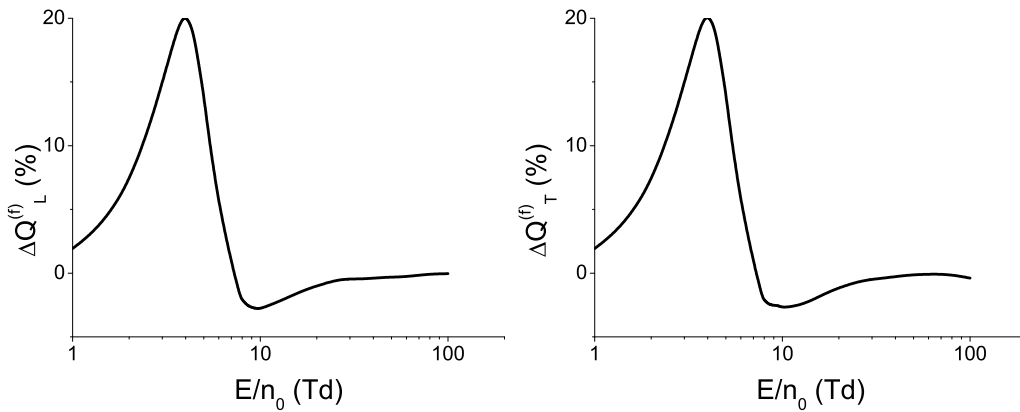
Na slici 33 su prikazane zavisnosti $n_0^2 Q_T^{(f)}$ i $n_0^2 Q_T^{(b)}$ od E/n_0 . Ovi rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija. U opsegu polja između 1 Td i 7 Td je $n_0^2 Q_T^{(f)}$ veće od $n_0^2 Q_T^{(b)}$ (ali je razlika u okviru statističke nesigurnosti Monte Carlo simulacija), dok su na višim poljima ove veličine praktično jednake.

Na poljima nižim od 7 Td je brzinski koeficijent za zahvat elektrona preko dva puta veći od brzinskog koeficijenta za neelastične sudare. Na nižim poljima se zahvat elektrona dominantno dešava na frontu roja, gde ima više visokoenergijskih elektrona. Zato je transverzalno širenje elektrona na frontu roja umanjeno pod uticajem zahvata elektrona. Zbog toga je $n_0^2 Q_T^{(f)}$ nešto veće od $n_0^2 Q_T^{(b)}$ u ovom opsegu polja. Na poljima višim od 7 Td uticaj neelastičnih sudara na frontu roja i povećanje srednje energije na zadnjem delu roja smanjuju uticaj zahvata elektrona na transverzalnu komponentu TTIII, što dovodi do izjednačavanja $n_0^2 Q_T^{(f)}$ i $n_0^2 Q_T^{(b)}$ u ovom opsegu polja.

Slike 34-37 prikazuju procentualne razlike između vrednosti transportnih veličina za roje-



Slika 34: Procentualne razlike između vrednosti transportnih veličina za rojeve elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelnom gasu (za vrednosti parametara $a = 5 \cdot 10^{-4}$ i $p = \frac{1}{2}$) i u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu (za $F=0$). Na ovom grafiku su prikazane procentualne razlike srednje energije, longitudinalne komponente fluks difuzionog tenzora $D_L^{(f)}$ i transverzalne komponente fluks difuzionog tenzora $D_T^{(f)}$. Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.



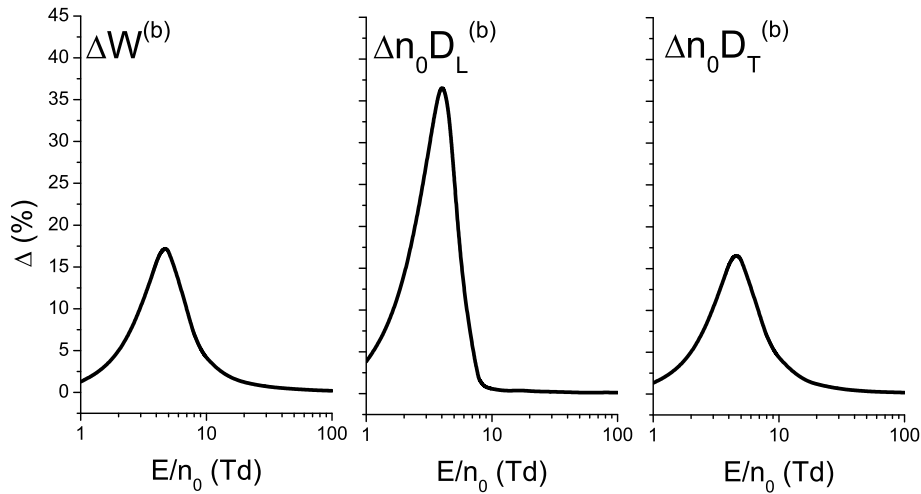
Slika 35: Procentualne razlike između vrednosti transportnih veličina za rojeve elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelnom gasu (za vrednosti parametara $a = 5 \cdot 10^{-4}$ i $p = \frac{1}{2}$) i u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu (za $F=0$). Na ovom grafiku su prikazane procentualne razlike longitudinalne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda $Q_L^{(f)}$ i transverzalne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda $Q_T^{(f)}$. Rezultati su dobijeni na osnovu metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

ve elektrona u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu i modelu hlađenja zahvatom. Ove procentualne razlike su određene kao

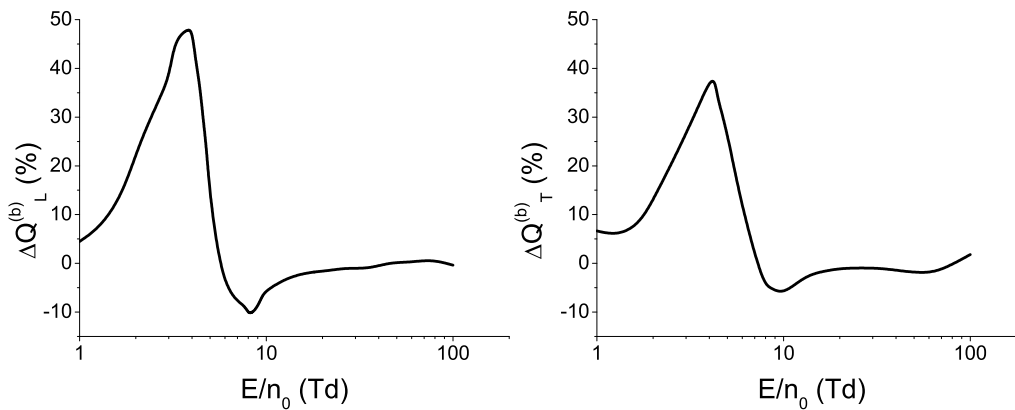
$$1 - \frac{X(\text{NR})}{X(\text{LS})}, \quad (4.33)$$

gde su $X(\text{NR})$ i $X(\text{LS})$ vrednosti proizvoljne transportne veličine u modelu hlađenja zahvatom i u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu, respektivno.

Na slici 34 se iznose procentualne razlike između vrednosti srednje energije, longitudinal-



Slika 36: Procentualne razlike između vrednosti transportnih veličina za rojeve elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelnom gasu (za vrednosti parametara $a = 5 \cdot 10^{-4}$ i $p = \frac{1}{2}$) i u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu (za $F=0$). Na ovom grafiku su prikazane procentualne razlike balk brzine drifta $W^{(b)}$, longitudinalne komponente balk difuzionog tenzora $D_L^{(b)}$ i transverzalne komponente balk difuzionog tenzora $D_T^{(b)}$. Rezultati su dobijeni na osnovu Monte Carlo simulacija.



Slika 37: Procentualne razlike između vrednosti transportnih veličina za rojeve elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelnom gasu (za vrednosti parametara $a = 5 \cdot 10^{-4}$ i $p = \frac{1}{2}$) i u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu (za $F=0$). Na ovom grafiku su prikazane procentualne razlike longitudinalne komponente balk transportnog tenzora trećeg reda $Q_L^{(b)}$ i transverzalne komponente balk transportnog tenzora trećeg reda $Q_T^{(b)}$. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

ne komponente fluks difuzionog tenzora $n_0 D_L^{(f)}$ i transverzalne komponente fluks difuzionog tenzora $n_0 D_T^{(f)}$ za rojeve elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu (za vrednosti parametara $a = 5 \cdot 10^{-4}$ i $p = \frac{1}{2}$) i konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu ($F=0$) u funkciji redukovano električnog polja E/n_0 . Ove procentualne razlike imaju vrlo slične brojne vrednosti za sve tri veličine, koje su veće u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu nego u modelu hlađenja zahvatom elektrona u celom razmatranom opsegu E/n_0 . Procentualne razlike između vrednosti ovih veličina u ova dva modela dostižu lokalne maksimume na oko 4.5 Td, koji iznose

oko 9%.

Na slikama 35 izložene su procentualne razlike između vrednosti $Q_L^{(f)}$ i $Q_T^{(f)}$ u ova dva modela. Obe komponente fluks TTIII su veće u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu nego u modelu hlađenja zahvatom elektrona na poljima između 1 Td i 7 Td. Pri tome, procentualne razlike obe komponente TTIII dostižu lokalni maksimum na oko 4 Td koji iznosi oko 20%. Na poljima višim od 7 Td ove dve komponente TTIII su manje u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu nego u modelu hlađenja zahvatom. Razlozi za promenu odnosa fluks komponenti TTIII u ova dva modela mogli bi biti isti kao razlozi za promenu odnosa fluks i balk vrednosti TKIII u modelu hlađenja zahvatom. Na poljima višim od 30 Td vrednosti komponenti fluks TTIII u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu su praktično jednake odgovarajućim vrednostima u modelu hlađenja zahvatom elektrona.

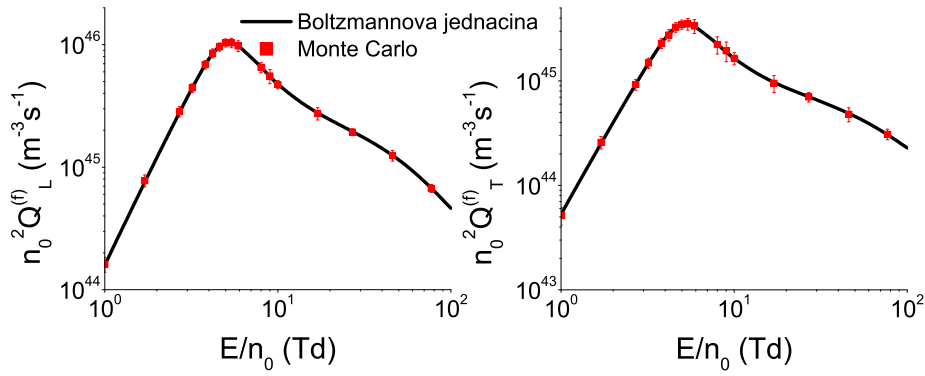
Procentualne razlike između vrednosti balk brzine drifta $W^{(b)}$, longitudinalne komponente balk difuzionog tenzora $n_0 D_L^{(b)}$ i transverzalne komponente balk difuzionog tenzora $n_0 D_T^{(b)}$ u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu i modelu hlađenja zahvatom elektrona nalaze se na slici 36. U celom opsegu E/n_0 su vrednosti ove tri veličine veće u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu nego u modelu hlađenja zahvatom. Procentualna razlika $W^{(b)}$ u ova dva modela dostiže lokalni maksimum na oko 4.5 Td koji iznosi oko 17%. Slično tome, procentualna razlika $n_0 D_L^{(b)}$ dostiže lokalni maksimum na oko 4 Td koji iznosi oko 37%, dok procentualna razlika $n_0 D_T^{(b)}$ dostiže lokalni maksimum na oko 4.5 Td koji iznosi oko 17%.

Na slici 37 su prikazane procentualne razlike $n_0^2 Q_L^{(b)}$ i $n_0^2 Q_T^{(b)}$ u ova dva modela. Obe komponente balk TTIII su veće u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu nego u modelu hlađenja zahvatom u opsegu E/n_0 između 1 Td i 7 Td. Na višim poljima su obe komponente balk TKIII veće u modelu hlađenja zahvatom nego u konzervativnom Lucas-Saelee-evom modelu, ali je ova razlika u okviru statističke nesigurnosti Monte Carlo simulacija. Razlozi za promenu odnosa balk komponenti TTIII u ova dva modela mogli bi biti isti kao razlozi za promenu odnosa fluks i balk vrednosti TKIII u modelu hlađenja zahvatom. Na poljima preko 100 Td je procentualna razlika između balk vrednosti TKIII u ova dva modela manja od statističke nesigurnosti rezultata koji su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

Slika 38 daje poredjenja vrednosti $n_0^2 Q_L^{(f)}$ i $n_0^2 Q_T^{(f)}$, koje su dobijene primenom momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine i Monte Carlo simulacija. Vidi se da se vrednosti dobijene primenom ove dve metode jako dobro slažu.

4.9 Zaključak

Nakon kratkog uvoda u potpoglavlju 4.1, potpoglavlje 4.2 razmatra fizičku interpretaciju komponenti transportnog tenzora trećeg reda. Na početku je određeno aproksimativno rešenje generalisane difuzione jednačine u kojoj su uzete u obzir komponente ovog transportnog tenzora. Ovo rešenje je određeno primenom razvoja Furijeovog transformacija koncentracije čestica roja u Tejlorov red po komponentama transportnog tenzora trećeg reda. Potom je izračunat domi-



Slika 38: Poređenje vrednosti longitudinalne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda $Q_L^{(f)}$ i transverzalne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda $Q_T^{(f)}$ koje su dobijene primenom Monte Carlo simulacija i metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine za elektrone u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu za vrednosti parametara $a = 5 \cdot 10^{-4}$ i $p = \frac{1}{2}$.

nantan doprinos transportnih koeficijenata fluksu brzine čestica. Pokazano je da longitudinalna komponenta transportnog tenzora trećeg reda opisuje elongaciju ili kontrakciju prostornog profila roja duž longitudinalnog pravca. Slično tome dokazano je da vandijagonalne komponente ovog tenzora opisuju longitudinalnu varijaciju elongacije ili kontrakcije prostornog profila roja duž transverzalnog pravca. Na kraju ovog potpoglavlja tumači se znak komponenti transportnog tenzora trećeg reda. Ovaj znak zavisi od spoljašnjih električnih i magnetskih polja, od prostorne varijacije srednje energije čestica roja, kao i od energijske zavisnosti kolizionih frekvenci za elastične, neelastične i nekonzervativne sudare.

U potpoglavlju 4.3 su kratko se govori o uslovima korišćenim u Monte Carlo simulacijama. Ukazano je na neophodnost korišćenja velikog broja čestica (bar 10^7) u ovim simulacijama zbog smanjivanja statističke greške rezultata. U domenu numeričkog rešavanja Boltzmann-ove jednačine, razmotrena je potreba za korišćenje velikog broja sfernih harmonika (ponekad više od 5) i velikog broja Sonine polinoma (ponekad više od 100) u razvoju funkcije raspodele čestica roja, da bi se omogućilo precizno izračunavanje komponenti transportnog tenzora trećeg reda.

Centralna tema potpoglavlja 4.4 jesu transportni koeficijenti trećeg reda za rojeve elektrona u Maksvelovom modelu. Ovaj model je korišćen da bi se ispitala zavisnost komponenti transportnog tenzora trećeg reda od redukovanoeg električnog polja u prisustvu elastičnih sudara, čija koliziona frekvenca ne zavisi od energije. Uz pomoć ovog modela je takođe ispitan uticaj veličine preseka za elastične sudare na transportne koeficijente trećeg reda. Uočeno je da se ovi transportni koeficijenti monotono povećavaju sa porastom redukovanoeg električnog polja u ovom modelu, dok povećanje preseka za sudare dovodi do značajnog smanjenja ovih transportnih koeficijenata. Pored toga je uočeno da u ovom modelu važi približna jednakost $Q_{zzz} \approx 2Q_{xxz}$.

U potpoglavlju 4.5 su proučavani transportni koeficijenti trećeg reda za rojeve naelektrisanih čestica u modelu krutih sfera. Pomoću ovog modela je ispitan uticaj odnosa masa naelektrisanih čestica roja i neutralnih čestica pozadinske sredine na ove transportne koeficijente. Uočeno je

da apsolutna vrednost komponenti transportnog tenzora trećeg reda opada kada se masa naelektrisanih čestica približava masi neutralnih čestica pozadinske sredine. Međutim, doprinos komponenti ovog transportnog tenzora prostornom profilu roja se povećava kada se masa naelektrisanih čestica približava masi neutralnih čestica pozadinske sredine zbog porasta količnika Q_L/D_L^2 i Q_L/D_L^3 .

Transportni tenzor trećeg reda za rojeve elektrona u Reid-ovom modelnom gasu tumači se u odeljku 4.6. Na osnovu ovog modela je proučen uticaj elastičnih i neelastičnih sudara sa rastućom kolizionom frekvencom na komponente ovog tenzora. Pored toga je ispitan uticaj magnetskog polja na transportne koeficijente trećeg reda. Primećeno je da je u odsustvu magnetskog polja Q_{zxx} komponenta negativna, dok su Q_{xxz} i Q_{zzz} komponente pozitivne u celom razmatranom opsegu redukovanoeg električnog polja. Takođe je uočeno da se apsolutne vrednosti sve tri komponente ovog tenzora, koje su međusobno nezavisne u odsustvu magnetskog polja, povećavaju sa porastom redukovanoeg električnog polja na najnižim poljima gde se neelastični sudari mogu zanemariti. Suprotno tome, apsolutne vrednosti ovih komponenti naglo opadaju sa porastom redukovanoeg električnog polja na višim poljima. Zavisnost komponenti transportnog tenzora trećeg reda od redukovanoeg magnetskog polja je složena, naročito u slučaju vandijagonalnih komponenti. Međutim, i komponente transportnog tenzora trećeg reda, koje postoje samo u prisustvu magnetskog polja, mogu se interpretirati na sličan način kao komponente koje postoje i u odsustvu magnetskog polja.

U potpoglavlju 4.7 su izučavani transportni koeficijenti trećeg reda za elektrone u Lucas-Saelee-ovom modelnom gasu. Ovaj je model poslužio za utvrđivanje toga kako implicitni i eksplicitni efekti jonizacije utiču na transportne koeficijente trećeg reda. Pokazano je da eksplicitni efekti jonizacije povećavaju balk vrednosti transportnih koeficijenata trećeg reda, dok implicitni efekti dovode do snižavanja i balk i fluks vrednosti ovih transportnih koeficijenata. Pri tome balk vrednosti transportnih koeficijenata trećeg reda opadaju sa porastom parametra F , koji određuje parcijalnu verovatnoću za jonizaciju, što ukazuje na to da su u slučaju ovih transportnih koeficijenata implicitni efekti jonizacije izraženiji nego eksplicitni efekti.

Odeljak 4.8.1 razmatra transportne koeficijente trećeg reda za roj elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu grejanja roja zahvatom elektrona. Na osnovu ovog modela je ispitan uticaj eksplicitnih i implicitnih efekata zahvata elektrona, kome koliziona frekvencija opada sa porastom energije, na transportne koeficijente trećeg reda. Uočeno je da su na najnižim poljima balk vrednosti ovih transportnih koeficijenata više od odgovarajućih fluks vrednosti, zbog grejanja roja zahvatom elektrona. No na srednjim poljima su fluks vrednosti više od balk vrednosti zbog kombinovanog efekta zahvata elektrona i neelastičnih sudara, dok su na najvišim poljima razlike između balk i fluks vrednosti zanemarljive. Na nižim poljima su fluks transportni koeficijenti trećeg reda viši u modelu grejanja zahvatom nego u modelu sa konstantnom kolizionom frekvencom za zahvat elektrona, dok je na višim poljima razlika između fluks vrednosti transportnih koeficijenata trećeg reda u ova dva modela jako mala.

U potpoglavlju 4.8.2 analizirani su transportni koeficijenti trećeg reda za roj elektrona u modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu hlađenja roja zahvatom elektrona. Pomoću ovog

modela su ispitani eksplicitni i implicitni efekti zahvata elektrona, čija kolizijska frekvencija se povećava sa porastom energije, na transportne koeficijente trećeg reda. U ovom slučaju je uticaj eksplicitnih efekata zahvata suprotan u odnosu na model koji je razmatran u potpoglavlju 4.8.1. Naime, na najnižim poljima su fluks vrednosti transportnih koeficijenata trećeg reda više od odgovarajućih balk vrednosti zbog eksplicitnih efekata hlađenja roja zahvatom elektrona. Međutim, na srednjim poljima su u slučaju longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda balk vrednosti više od odgovarajućih fluks vrednosti, ali je ova razlika u okviru statističke nesigurnosti Monte Carlo simulacija, dok ovaj efekat nije uočen za transverzalnu komponentu transportnog tenzora trećeg reda. Na višim poljima je razlika između balk i fluks vrednosti transportnog tenzora trećeg reda zanemarljiva. Fluks vrednosti transportnih koeficijenata trećeg reda su na nižim poljima više u modelu zahvata sa konstantnom kolizijskom frekvencom nego u modelu hlađenja roja zahvatom elektrona, zbog implicitnih efekata zahvata elektrona u ovom modelu. Na oko 10 Td su pak fluks vrednosti više u modelu hlađenja roja zahvatom elektrona, ali je u ovoj oblasti polja razlika između ova dva modela znatno manje izražena nego na nižim poljima. Na još višim poljima razlika između fluks vrednosti transportnih koeficijenata trećeg reda u ova dva modela je zanemarljiva.

5 Transportni koeficijenti trećeg reda za elektrone i pozitrone u realnim gasovima

5.1 Uvod

Peto poglavlje donosi rezultate naših proračuna transportnih koeficijenata trećeg reda (TKI-II) za elektrone i pozitrone u realnim gasovima. Ovi proračuni su urađeni primenom momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine i Monte Carlo simulacija.

U potpoglavljju 5.2 opisana je korelacija između profila zavisnosti longitudinalne difuzije i longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda (TTIII) od redukovanog električnog polja. Odeljak 5.3 posvećen je rezultatima naših proračuna transportnih koeficijenata trećeg reda za elektrone u atomskim gasovima u kojima nije prisutan Ramsauer-Townsend-ov minimum (helijum i neon), dok su u potpoglavljju 5.4 prikazani rezultati naših proračuna transportnih koeficijenata trećeg reda za elektrone u atomskim gasovima u kojima je prisutan Ramsauer-Townsend-ov minimum (argon, kripton i ksenon). Rezultati naših proračuna transportnih koeficijenata trećeg reda za elektrone u molekularnim gasovima (N_2 , CH_4 , CF_4 i C_3F_8) tumače se u potpoglavljju 5.5. Odeljak 5.6 prezentuje značaj doprinosa transportnih koeficijenata trećeg reda prostornom profilu roja za elektrone u devet različitih gasova, a zatim i uticaj efekata, koji zavise od pritiska, na transportne koeficijente trećeg reda na primeru elektrona u molekularnom kiseoniku. U potpoglavljju 5.7 prikazani su naši rezultati vezani za transportne koeficijente trećeg reda za rojeve pozitrona u molekularnim gasovima (H_2 , N_2 i CF_4).

5.2 Korelacija longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda i longitudinalne difuzije

Pri ispitivanju transportnih koeficijenata trećeg reda (TKIII) za elektrone i pozitrone u realnim gasovima primećeno je da postoji snažna korelacija između profila zavisnosti longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda TTIII, $n_0^2 Q_{zzz}$, od E/n_0 i odgovarajućih profila longitudinalne difuzije, $n_0 D_{zz}$. Naime, uočava se da kada $n_0 D_{zz}$ opada sa porastom E/n_0 , $n_0^2 Q_{zzz}$ naglo opada. Međutim, $n_0^2 Q_{zzz}$ opada sa porastom E/n_0 i kada se $n_0 D_{zz}$ povećava, ako je porast $n_0 D_{zz}$ usporen (kada je $n_0 D_{zz}$ konkavna funkcija redukovanog električnog polja), ali je u ovom slučaju opadanje $n_0^2 Q_{zzz}$ manje intenzivno nego kada $n_0 D_{zz}$ opada. Longitudinalna komponenta TTIII se povećava sa porastom E/n_0 ako je porast $n_0 D_{zz}$ ubrzan (kada je $n_0 D_{zz}$ konveksna funkcija polja). Ova korelacija je primećena u svim atomskim i molekularnim gasovima koji su do sada razmatrani. Pri tome važi da je longitudinalna komponenta balk TTIII korelisana sa balk longitudinalnom difuzijom, dok je longitudinalna komponenta fluks TTIII korelisana sa fluks longitudinalnom difuzijom u uslovima u kojima se trendovi zavisnosti balk i fluks TKIII od E/n_0 razlikuju, poput transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima i transporta pozitrona u opsegu polja u kome postoji značajno formiranje pozitronijuma. Važno je pak naglasiti da ova korelacija ne postoji na jako niskim poljima zato što komponente

TTIII za razliku od komponenti difuzionog tenzora reprezentuju usmereno kretanje, pa sve komponente TTIII teže nuli kada E/n_0 teži nuli, a dijagonalne komponente difuzionog tenzora teže termalnoj vrednosti. Zato na najnižim poljima uvek postoji opseg u kome se komponente TTIII po apsolutnoj vrednosti monotono povećavaju sa porastom E/n_0 , bez obzira na trend zavisnosti difuzionog tenzora od E/n_0 . Takođe je važno naglasiti da se u profilima zavisnosti $n_0^2 Q_{zzz}$ i $n_0 D_{zz}$ od E/n_0 nekada dogodi da $n_0^2 Q_{zzz}$ malo prednjači u odnosu na $n_0 D_{zz}$. Na primer, događa se da $n_0^2 Q_{zzz}$ počne da se povećava na vrednostima E/n_0 na kojima $n_0 D_{zz}$ još uvek opada, ako na malo višim poljima $n_0 D_{zz}$ počne ubrzano da se povećava sa porastom E/n_0 . Ovakvo ponašanje ukazuje na veću osetljivost TKIII na visokoenergijski deo funkcije raspodele naelektrisanih čestica.

Primećena korelacija longitudinalne komponente TTIII i longitudinalne difuzije može se razumeti na intuitivnom nivou. Zapravo, TKIII reprezentuju asimetrično odstupanje ukupnog difuzionog širenja od kretanja koje je opisano difuzionim tenzorom. Pritom je TKIII mala popravka u odnosu na simetrično difuziono širenje. Ovo znači da TKIII opisuju oblik difuzionog kretanja koje u sebi nosi znatno manju količinu energije i impulsa od kretanja koje je reprezentovano difuzionim tenzorom. Na osnovu toga se može očekivati da su TKIII znatno osetljiviji na elementarne sudarne procese od transportnih koeficijenata nižeg reda. Zbog toga $n_0^2 Q_{zzz}$ opada sa porastom E/n_0 , ako je otpor difuzionom kretanju izazvan sudarima dovoljno intenzivan da uspori porast $n_0 D_{zz}$ sa povećanjem E/n_0 . Sa druge strane, ako je otpor difuzionom kretanju toliko intenzivan da dovede do opadanja $n_0 D_{zz}$ sa porastom polja, to dovodi do intenzivnog opadanja $n_0^2 Q_{zzz}$. Međutim, $n_0^2 Q_{zzz}$ raste sa porastom polja, ako je otpor difuzionom kretanju dovoljno slab da omogući ubrzan porast $n_0 D_{zz}$ sa porastom E/n_0 . Na osnovu primećene korelacije između profila zavisnosti $n_0^2 Q_{zzz}$ i $n_0 D_{zz}$ od E/n_0 može se jasno videti da su TKIII znatno osetljivi na elementarne sudarne procese od transportnih koeficijenata nižeg reda. Ovo ukazuje na to da bi TKIII bili jako korisni u proceduri za određivanje kompletnih skupova preseka na osnovu metode rojeva ako bi bili računati i mereni sa dovoljnom preciznošću.

Prisustvo ove korelacije između $n_0^2 Q_{zzz}$ i $n_0 D_{zz}$ znatno olakšava razumevanje trendova ponašanja $n_0^2 Q_{zzz}$ u funkciji polja – što je korisno u slučaju realnih gasova, koji imaju komplikovan skup preseka, te bi bilo jako teško tumačiti zavisnost $n_0^2 Q_{zzz}$ od E/n_0 direktno na osnovu preseka, zbog složenosti fizičke interpretacije TKIII i zbog njihove osetljivosti na elementarne sudarne procese.

Preostale dve komponente TTIII, koje su nezavisne u odsustvu magnetskog polja ($n_0^2 Q_{xxz}$ i $n_0^2 Q_{zxx}$), najčešće imaju profile zavisnosti od E/n_0 koji su na kvalitativnom nivou slični odgovarajućim profilima longitudinalne komponente TTIII. Uz to je jedna od vandijagonalnih komponenti $n_0^2 Q_{zxx}$ i $n_0^2 Q_{xxz}$ negativna kad god je koliziona frekvencija rastuća funkcija energije, dok je druga najčešće pozitivna. Kada porast koliziona frekvencije sa energijom nije previše intenzivan, $n_0^2 Q_{zxx}$ komponenta je negativna, a $n_0^2 Q_{xxz}$ je pozitivna. Situacija je suprotna kada je porast koliziona frekvencije sa energijom vrlo intenzivan. U tom slučaju je $n_0^2 Q_{xxz}$ negativna, dok je $n_0^2 Q_{zxx}$ najčešće pozitivna. U okolnostima kada je jedna od vandijagonalnih komponenti negativna, njihove apsolutne vrednosti dostižu maksimume i minimume za praktično iste

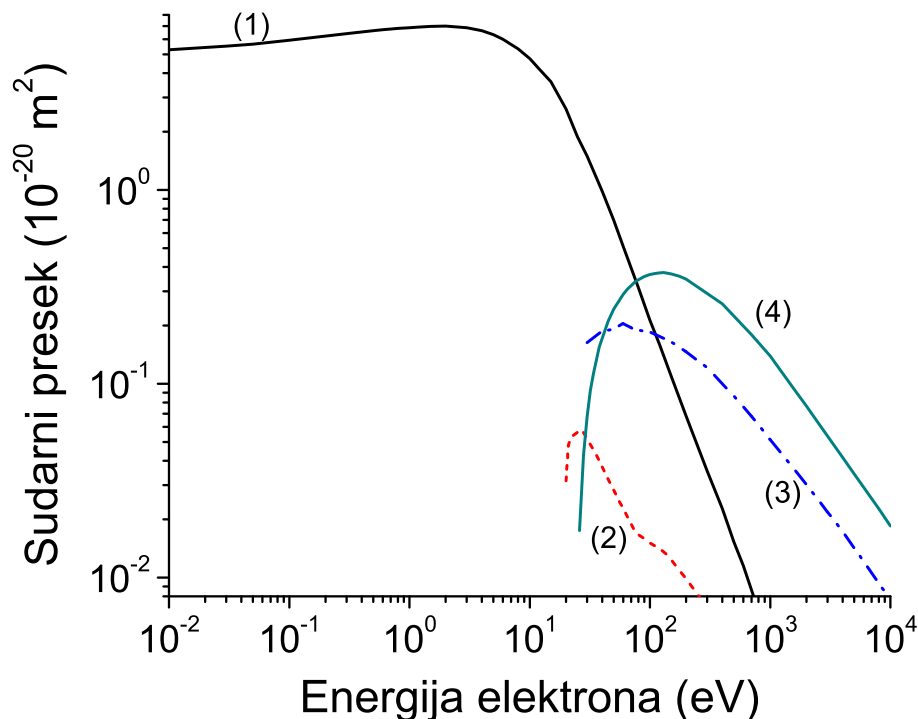
vrednosti polja. Ukoliko su obe komponente istog znaka, najčešće ispoljavaju iste kvalitativne trendove ponašanja. Ovo znači da se na osnovu korelacije longitudinalne komponente T_{III} i longitudinalne difuzije u grubim crtama mogu razumeti trendovi zavisnosti sve tri nezavisne komponente T_{III} od E/n_0 .

5.3 Transportni koeficijenti trećeg reda za rojeve elektrona u atomskim gasovima bez Ramsauer-Townsend-ovog minimuma

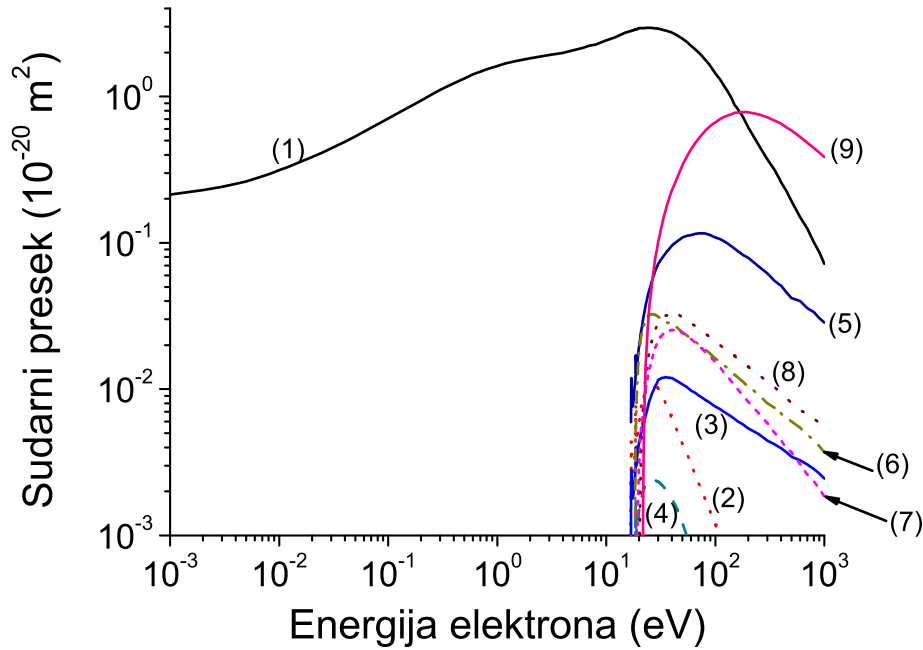
5.3.1 Preliminarije

Na slikama 39 i 40 su prikazani setovi preseka za rasejanje elektrona u helijumu i neonu, respektivno, koji su korišćeni u našim proračunima. Set preseka za elektrone u helijumu, koji je korišćen u našem radu, razvijen je u Laboratoriji za gasnu elektroniku Instituta za fiziku u Beogradu. Ovaj set preseka za elektrone dat je u referenci [197].

Naši proračuni transportnih osobina elektrona u neonu koriste set preseka za elektrone u neonu koji je razvio Hayashi [198] na osnovu postojećeg seta preseka postavljenog u radu [199]. Hayashi-jev set preseka za rasejanje elektrona u neonu je prikazan u radu [200].



Slika 39: Set preseka za rasejanje elektrona u He: (1) transfer impulsa u elastičnim sudarima, elektronske ekscitacije (2), (3) i (4) jonizacija.

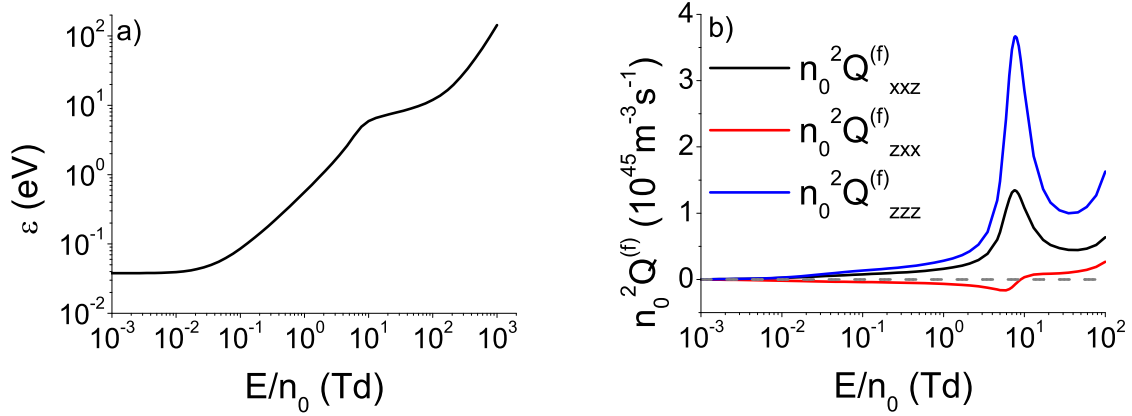


Slika 40: Set preseka za rasejanje elektrona u Ne: (1) transfer impulsa u elastičnim sudarima, elektronske ekscitacije (2) $2p^53s\ ^3P_2$, (3) $2p^53s\ ^3P_1$, (4) $2p^53s\ ^3P_0$, (5) $2p^53s\ ^1P_1$, (6) $2p^53p\ ^3S_1$, (7) $2p^53p\ ^2P$, (8) $2p^54s\ ^2S$ i (9) jonizacija.

5.3.2 Rezultati

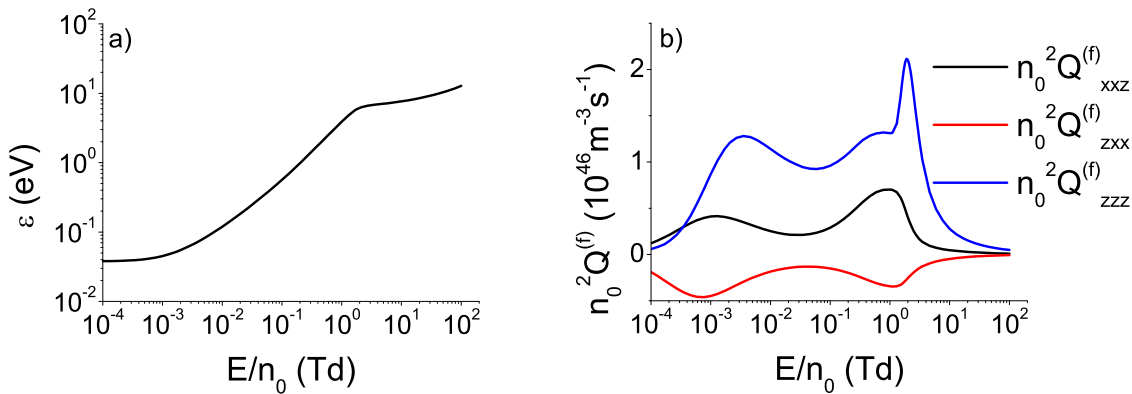
Na slici 41 a) je prikazana srednja energija za elektrone u helijumu, dok su $n_0^2 Q_{xxz}$, $n_0^2 Q_{zxx}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ komponente TTIII za elektrone u helijumu prikazane na slici 41 b). Ovi rezultati su dobijeni na osnovu numeričkih multi term rešenja Boltzmann-ove jednačine. Komponente $n_0^2 Q_{xxz}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ su pozitivne u celom opsegu polja, pri čemu je $n_0^2 Q_{zxx}$ komponenta negativna na poljima nižim od približno 10 Td, dok je na višim poljima pozitivna. Sve tri komponente TTIII se po apsolutnoj vrednosti povećavaju na poljima nižim od oko 8 Td. Istovremeno je ovaj porast najintenzivniji u opsegu polja između približno 2 Td i 8 Td. Na poljima između približno 8 Td i 50 Td $n_0^2 Q_{xxz}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ naglo opadaju sa porastom polja, dok se $n_0^2 Q_{zxx}$ komponenta povećava, ali je ovaj porast sporiji u opsegu polja između približno 10 Td i 50 Td. U opsegu polja između približno 50 Td i 100 Td se sve tri komponente TTIII naglo povećavaju sa porastom polja.

Na poljima nižim od približno 2 Td je srednja energija elektrona niža od 1.2 eV, pa je transport elektrona određen elastičnim sudarima. Pri tome se većina elektrona nalazi u energijskoj oblasti u kojoj se presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima povećava sa porastom energije (od 0.01 eV do 3 eV), dok se najenergičniji elektroni nalaze u energijskoj oblasti u kojoj ovaj presek postepeno opada sa porastom energije (između približno 3 eV i 8 eV). Ovo dovodi do postepenog porasta apsolutnih vrednosti komponenti TTIII sa porastom polja. Međutim, u opsegu polja između približno 2 Td i 8 Td je srednja energija elektrona između približno 1 eV i 5 eV, pa se veliki procenat elektrona nalazi u energijskoj oblasti u kojoj presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima opada sa porastom energije, dok se najenergičniji elektroni nalaze u energijskoj oblasti između 5 eV i 20 eV, u kojoj je opadanje preseka za elastične sudare sa porastom energije vrlo intenzivno. Zbog toga se u ovom opsegu polja $n_0^2 Q_{xxz}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ naglo



Slika 41: Srednja energija i $n_0^2 Q_{xxz}$, $n_0^2 Q_{zxx}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda za roj elektrona u helijumu u funkciji E/n_0 . Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

povećavaju sa porastom E/n_0 , a $n_0^2 Q_{zxx}$ komponenta se povećava po apsolutnoj vrednosti do približno 6 Td, nakon čega menja trend ponašanja. Na poljima u između približno 8 Td i 50 Td je srednja energija elektrona između 5 eV i 9 eV. U ovom opsegu polja najenergičniji elektroni imaju energiju višu od 20 eV, pa mogu da učestvuju u neelastičnim sudarima. Pošto neelastični sudari pružaju snažan otpor difuzionom kretanju, $n_0^2 Q_{xxz}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ naglo opadaju u ovom opsegu polja, dok je $n_0^2 Q_{zxx}$ komponenta skoro konstantna u opsegu polja između približno 20 Td i 50 Td. Na višim poljima se sve tri komponente TTIII naglo povećavaju sa porastom polja. Razlozi za ovaj porast komponenti TTIII bi mogli da budu povećanje srednje energije elektrona i povećanje usmerene komponente kretanja sa porastom E/n_0 , ako povećanje otpora difuzionom kretanju nije dovoljno intenzivno da nadjača ove efekte.

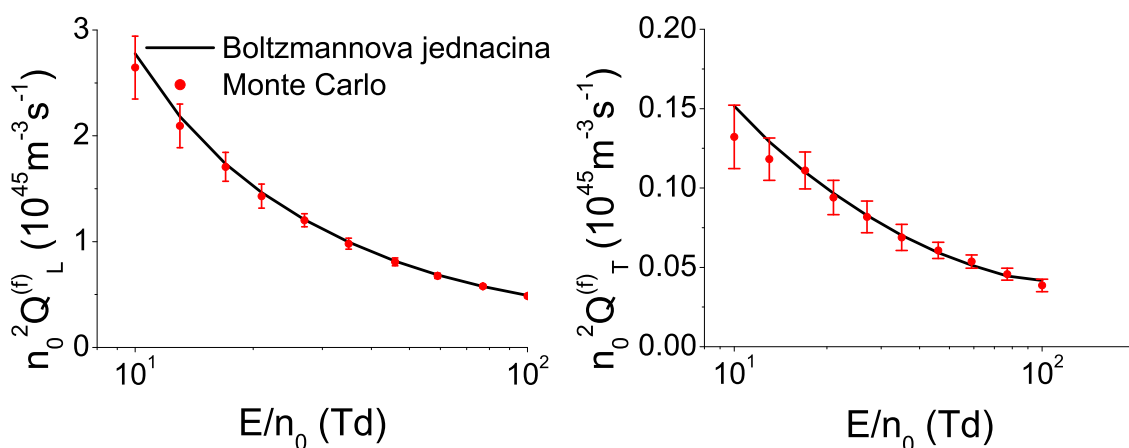


Slika 42: Srednja energija i $n_0^2 Q_{xxz}$, $n_0^2 Q_{zxx}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda za roj elektrona u neonu u funkciji E/n_0 . Ovi rezultati su dobijeni uz pomoć metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

Na slici 42 a) prikazana je srednja energija za elektrone u neonu, dok su $n_0^2 Q_{xxz}$, $n_0^2 Q_{zxx}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ komponente TTIII za elektrone u neonu predstavljene na slici 42 b). Za razliku od komponenti $n_0^2 Q_{xxz}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ koje su pozitivne, komponenta $n_0^2 Q_{zxx}$ je negativna u celom opsegu E/n_0 . Negativnost $n_0^2 Q_{zxx}$ komponente se može pripisati tome što se koliziona frekvencija po-

većava sa porastom energije u širokom energijskom opsegu. Naime, presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima se povećava do oko 30 eV, nakon čega se preseki za neelastične sudare i jonizaciju naglo povećavaju sa porastom energije. Ipak, porast kolizijske frekvence sa porastom energije nije dovoljno intenzivan da $n_0^2 Q_{xxz}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ komponente postanu negativne. Na poljima do oko 1 Td sve tri komponente TTIII ispoljavaju približno oscilatorno ponašanje. Apsolutne vrednosti $n_0^2 Q_{xxz}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ komponenti dostižu dva lokalna maksimuma na približno 10^{-3} Td i 1 Td i lokalni minimum na približno $3.5 \cdot 10^{-2}$ Td. Longitudinalna komponenta TTIII dostiže dva lokalna maksimuma na približno $3.5 \cdot 10^{-3}$ Td i 0.8 Td i lokalni minimum na oko $6 \cdot 10^{-2}$ Td. Na poljima višim od oko 1 Td apsolutne vrednosti $n_0^2 Q_{xxz}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ komponenti monotono opadaju sa porastom E/n_0 , dok se $n_0^2 Q_{zzz}$ komponenta naglo povećava do oko 2 Td, posle čega naglo opada sa porastom redukovanoeg električnog polja.

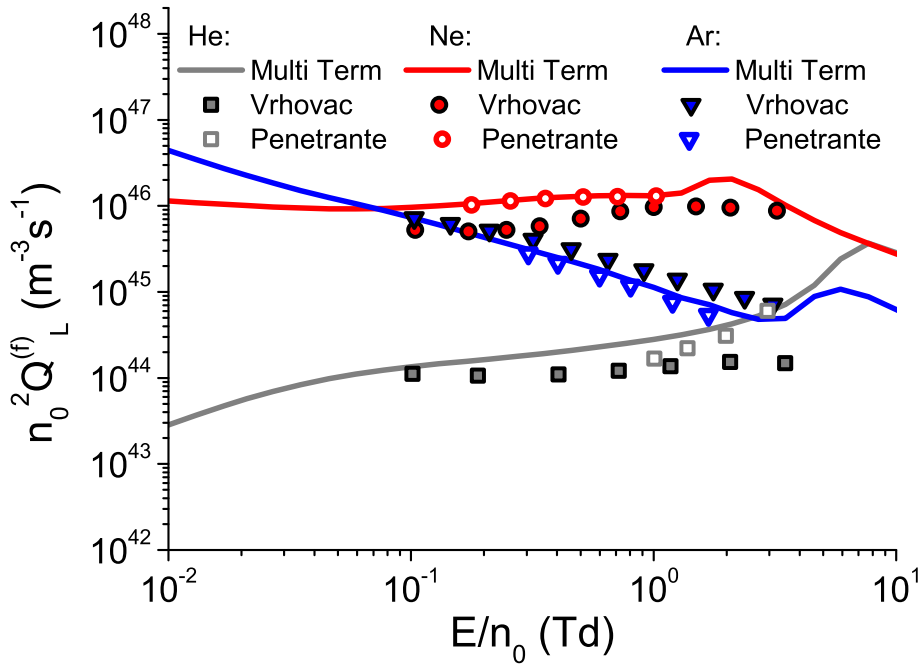
U opsegu polja do približno 0.8 Td srednja energija elektrona je niža od 3.2 eV, pa elektroni nemaju dovoljno energije za neelastične sudare i profili zavisnosti TKIII od E/n_0 su određeni elastičnim sudarima, što ukazuje na to da su oscilatorni profili komponenti TTIII na poljima nižim od 0.8 Td posledica energijske zavisnosti preseka za elastične sudare. Na poljima višim od 2 Td, srednja energija elektrona je preko 6 eV, te svi elektroni čija je energija tri puta veća od srednje energije imaju dovoljno energije za neelastične sudare (16.62 eV), a to dovodi do monotonog opadanja apsolutnih vrednosti sve tri komponente TTIII sa porastom E/n_0 u ovom opsegu polja. U opsegu polja između približno 1 Td i 2 Td, $n_0^2 Q_{zzz}$ komponenta se naglo povećava sa porastom polja, uprkos tome što najenergičniji elektroni imaju dovoljno energije za neelastične sudare u ovom opsegu polja. Ovo bi moglo da bude posledica naglog povećanja pokretljivosti elektrona u ovom opsegu polja, pošto se srednja energija poveća sa oko 3 eV na 0.8 Td do približno 6 eV na 2.1 Td.



Slika 43: Poređenje vrednosti komponenti transportnog tenzora trećeg reda, koje su dobijene primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine i Monte Carlo simulacija, za elektrone u neonu.

Slika 43 prikazuje poređenja vrednosti $n_0^2 Q_L^{(f)}$ i $n_0^2 Q_T^{(f)}$, koje su dobijene primenom momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine i Monte Carlo simulacija, za roj elektrona u neonu. Sa ovih slika se vidi da se rezultati koji su dobijeni na osnovu ova dva metoda jako dobro slažu. Veličine grešaka se povećavaju sa opadanjem E/n_0 zbog spore relaksacije

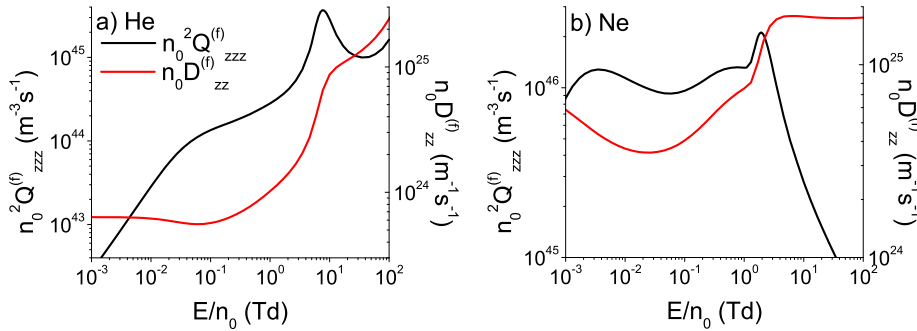
energije elektrona na niskim poljima, što je posledica malog transfera energije u elastičnim sudarima. Međutim, razlika između rezultata koji su dobijeni na osnovu ove dve metode je znatno manja od statističke nesigurnosti Monte Carlo simulacija.



Slika 44: Poređenje vrednosti longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda koje su dobijene u našim proračunima, na osnovu metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine, sa rezultatima Penetrante-a i Bardsley-a [126] i Vrhovca i saradnika [132] za rojeve elektrona u helijumu, neonu i argonu.

Na slici 44 su prikazana poređenja vrednosti $n_0^2 Q_L^{(f)}$ koje su dobijene u našim proračunima sa vrednostima koje su dobili drugi autori [126, 132] za elektrone u helijumu, neonu i argonu. Penetrante i Bardsley [126] su u svojim proračunima koristili aproksimaciju dva člana za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine, dok su Vrhovac i saradnici [132] koristili teoriju prenosa impulsa. Može se videti da se kvalitativno ponašanje naših rezultata dobro slaže sa kvalitativnim ponašanjem rezultata Penetrante-a i Bardsley-a. Pri tome se brojne vrednosti naših rezultata za elektrone u neonu jako dobro slažu sa brojnim vrednostima Penetrante-a i Bardsley-a. Činjenica o slaganju rezultata upućuje na to da je u njihovim proračunima korišćen sličan presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima kao u našim proračunima, kao i da je primena aproksimacije dva člana opravdana za izračunavanje longitudinalne komponente TIII u odsustvu neelastičnih sudara. Razlika između rezultata za elektrone u helijumu i argonu je verovatno posledica razlike u korišćenim presecima za rasejanje elektrona. Trendovi zavisnosti $n_0^2 Q_L^{(f)}$ od E/n_0 u rezultatima Vrhovca i saradnika se nešto slabije slažu sa trendovima naših rezultata nego što je to slučaj sa rezultatima Penetrante-a i Bardsley-a. Na primer, iako se vrednosti komponente $n_0^2 Q_L^{(f)}$, koje su dobijene u našim proračunima za elektrone u helijumu povećavaju sa porastom E/n_0 u opsegu polja od 0.1 Td do približno 8 Td, vrednosti $n_0^2 Q_L^{(f)}$ koje su dobili Vrhovac i saradnici praktično saturiraju sa porastom E/n_0 u opsegu polja između približno 0.1 Td i 0.6 Td i blago opadaju u opsegu polja između 2.5 Td i 4 Td. Pored toga, za

elektrone u neonu vrednosti $n_0^2 Q_L^{(f)}$, koje su dobijene na osnovu proračuna Vrhovca i saradnika, dostižu maksimum na oko 1 Td, dok vrednosti dobijene u našim proračunima dostižu maksimum na približno 2 Td, pri čemu je u rezultatima Vrhovca i saradnika ovaj maksimum znatno manje izražen nego u našim rezultatima. Kvantitativno slaganje naših rezultata sa rezultatima Vrhovca i saradnika je za elektrone u helijumu i neonu slabije od kvantitativnog slaganja naših rezultata sa rezultatima Penetrante-a i Bardsley-a, dok je za elektrone u argonu kvantitativno slaganje naših proračuna jednako dobro sa proračunima Penetrante-a i Bardsley-a i Vrhovca i saradnika. Razlike između naših rezultata i rezultata Vrhovca i saradnika mogu biti posledica aproksimacija korišćenih u fluidnim modelima i razlike u korišćenim presecima.



Slika 45: Korelacija longitudinalne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda sa fluks longitudinalnom difuzijom za elektrone u helijumu i neonu. Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

Korelacije između $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0 D_{zz}^{(f)}$ za elektrone u helijumu i neonu prikazane su na slici 45. Može se videti da se oba u slučaju na najnižim poljima $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ povećava sa porastom E/n_0 uprkos tome što $n_0 D_{zz}^{(f)}$ opada. Ovo je posledica toga što TKIII reprezentuju usmereno kretanje pa teže nuli u limesu niskih polja, za razliku od difuzije koja teži termalnoj vrednosti. Zato se u svim gasovima komponente TTIII po apsolutnoj vrednosti monotono povećavaju sa porastom E/n_0 na dovoljno niskim poljima. No vrednost E/n_0 pri kojoj počinje korelacija između $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0 D_{zz}^{(f)}$ nije ista u svim gasovima.

Za elektrone u helijumu se $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0 D_{zz}^{(f)}$ povećavaju sa porastom polja za E/n_0 između otprilike $6 \cdot 10^{-2}$ i 8 Td. Pri tome se obe veličine naglo povećavaju u opsegu polja između približno 2 Td i 8 Td. Međutim, u opsegu polja između približno 8 Td i 40 Td se porast $n_0 D_{zz}^{(f)}$ sa porastom E/n_0 usporava ($n_0 D_{zz}^{(f)}$ postaje konkavna funkcija polja), pa u ovom opsegu polja $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ opada sa porastom E/n_0 . Na višim poljima se porast $n_0 D_{zz}^{(f)}$ sa porastom E/n_0 ubrzava ($n_0 D_{zz}^{(f)}$ postaje konveksna funkcija polja), pa se i $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ povećava sa porastom E/n_0 u ovom opsegu polja.

Za elektrone u neonu $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0 D_{zz}^{(f)}$ opadaju sa porastom E/n_0 u opsegu polja između otprilike $3 \cdot 10^{-3}$ Td i $4 \cdot 10^{-2}$ Td, pri čemu $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ nastavlja da opada do približno $6 \cdot 10^{-2}$. Na višim poljima se $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0 D_{zz}^{(f)}$ povećavaju sa porastom E/n_0 do oko 2 Td. Uz to je ovaj porast naročito intenzivan u opsegu polja između približno 1 Td i 2 Td. Na višim poljima $n_0 D_{zz}^{(f)}$ postaje konkavna funkcija i počne da opada sa porastom E/n_0 za E/n_0 između približno 6 Td i 50 Td, nakon čega saturira sa porastom E/n_0 . Uz to $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ opada u opsegu polja iznad 2 Td.

U ovom potpoglavlju su razmatrani TKIII za elektrone u helijumu i neonu. Longitudinalna komponenta Q_{zzz} je pozitivna u oba gasa u celom posmatranom opsegu polja. Ipak, Q_{zzx} komponenta je negativna za elektrone u helijumu na poljima nižim od približno 10 Td i za elektrone u neonu u celom razmatranom opsegu polja, zbog porasta kolizijske frekvence za elastične sudare sa porastom energije. Profili zavisnosti komponenti TTIII od redukovanog električnog polja u ova dva gasa su nešto složeniji nego u slučaju modelnih gasova, zbog složenije energijske zavisnosti preseka za sudare u realnim gasovima. Ovi profili su analizirani na osnovu setova preseka i profila zavisnosti srednje energije od redukovanog električnog polja. Na ovom mestu su poređeni naši rezultati za longitudinalnu komponentu TTIII sa rezultatima Penetrante-a i Bardsley-a [126] i Vrhovca i saradnika [132]. Naši rezultati se nešto bolje slažu sa rezultatima Penetrante-a i Bardsley-a nego sa rezultatima Vrhovca i saradnika. Na kraju ovog potpoglavlja je razmatrana korelacija između longitudinalne komponente TTIII i longitudinalne komponente difuzionog tenzora.

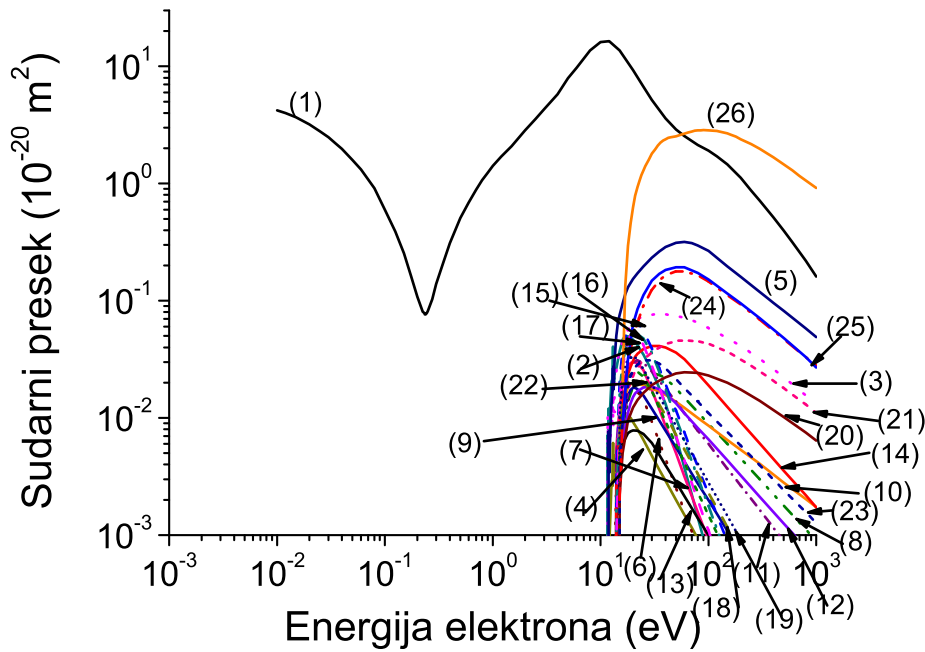
5.4 Transportni koeficijenti trećeg reda za rojeve elektrona u atomskim gasovima sa Ramsauer-Townsend-ovim minimumom

5.4.1 Preliminarije

Na slikama 46, 47 i 48 su prikazani setovi preseka za rasejanje elektrona u argonu, kriptonu i ksenonu, respektivno, koji su korišćeni u našim proračunima. Setovi preseka za rasejanje elektrona u argonu i ksenonu, koji su korišćeni u našem radu, preuzeti su iz Hayashi-jeve baze [201, 202]. U našim proračunima transporta elektrona u kriptonu korišćen je set preseka koji je razvio S. Biagi . Ovaj set preseka je direktno kodiran u MAGBOLTZ kodu (verzija 7.1) [203].

5.4.2 Rezultati

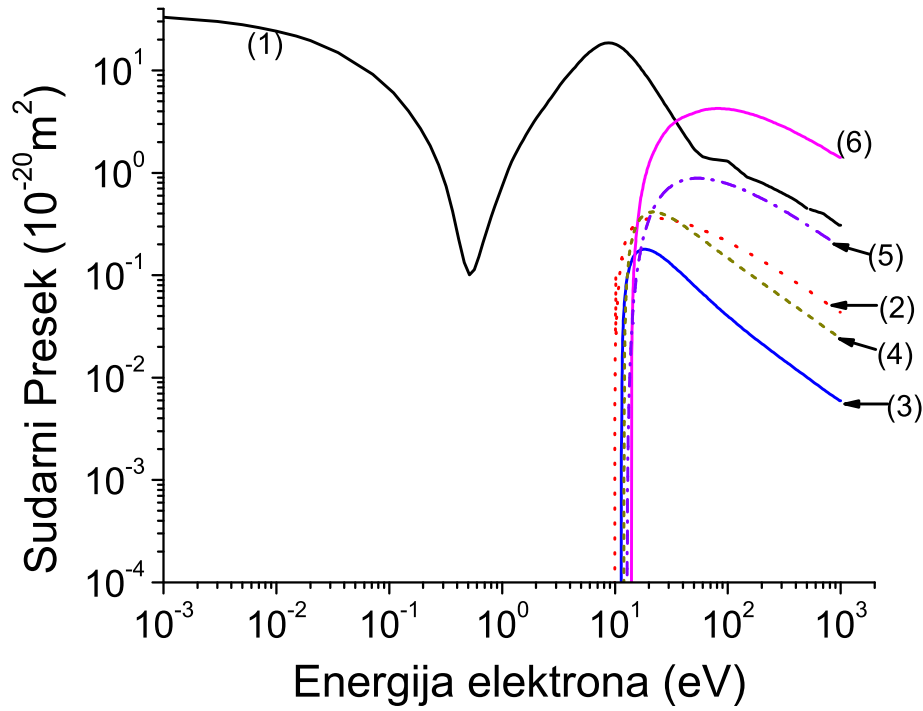
Na slici 49 su predstavljene vrednosti srednje energije elektrona u argonu, kriptonu i ksenonu. Ovi rezultati su dobijeni primenom momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine. U sva tri plemenita gasa je energija termalna na najnižim poljima. Pri tome je srednja energija u argonu blizu termalnih vrednosti do oko 10^{-3} Td, gde iznosi približno $4 \cdot 10^{-2}$ eV. Nakon toga se srednja energija naglo povećava u opsegu polja između približno 10^{-3} Td i $6 \cdot 10^{-3}$ Td i dostiže vrednost od oko 0.2 eV na kraju ovog opsega. Na višim poljima se srednja energija monotono povećava sa porastom E/n_0 , ali je nagib zavisnosti srednje energije od E/n_0 znatno manji nego u opsegu polja između 10^{-3} Td i $6 \cdot 10^{-3}$ Td. Nagib zavisnosti srednje energije od E/n_0 se ponovo smanjuje na približno 6 Td, gde srednja energija iznosi oko 5 eV. U opsegu polja između približno 10^{-3} Td i $6 \cdot 10^{-3}$ Td, srednja energija elektrona se nalazi u intervalu između približno $4 \cdot 10^{-2}$ eV i 0.2 eV. U ovoj energijskoj oblasti presek za transfer impulsa naglo opada sa porastom energije (zbog prisustva Ramsauer-Townsend-ovog minimuma). To dovodi do intenzivnog porasta energije sa porastom E/n_0 u ovom opsegu polja. U opsegu E/n_0 između



Slika 46: Set preseka za rasejanje elektrona u argonu: (1) transfer impulsa u elastičnim sudarima, efektivne elektronske ekscitacije: (2) $4s[3/2]_2$, (3) $4s[3/2]_1$, (4) $4s'[1/2]_0$, (5) $4s'[1/2]_1$, (6) $4p[1/2]_1$, (7) $4p[5/2]_3$, (8) $4p[5/2]_2$, (9) $4p[3/2]_1$, (10) $4p[3/2]_2$, (11) $4p[1/2]_0$ i $4p'[3/2]_1$, (12) $4p'[3/2]_2$, (13) $4p'[1/2]_1$, (14) $4p'[1/2]_0$, (15) $3d[1/2]_0$ i $3d[1/2]_1$, (16) $3d[3/2]_2$, (17) $3d[7/2]_4$, (18) $3d[7/2]_3$, (19) $3d[5/2]_2$ i $5s[3/2]_2$, (20) $3d[5/2]_3$ i $5s[3/2]_1$, (21) $3d[3/2]_1$, (22) $3d'[5/2]_2$ i (23) $3d'[3/2]_2$, $3d'[5/2]_3$, $5s'[1/2]_0$ i $5s'[1/2]_1$, (24) efektivna ekscitacija koja obuhvata stanja sa pragovima između 14.71 eV i 15.20 eV, (25) efektivna ekscitacija koja obuhvata stanja sa pragovima između 15.20 eV i 15.76 eV i (26) jonizacija.

približno $6 \cdot 10^{-3}$ Td i 6 Td srednja energija elektrona se nalazi u intervalu između 0.2 eV i 5 eV, a u ovom energijskom intervalu se presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima naglo povećava sa porastom energije, što dovodi do sporijeg porasta srednje energije sa porastom E/n_0 . Na poljima višim od 6 Td, srednja energija elektrona je preko 5 eV, te najenergičniji elektroni imaju energiju višu od 11.55 eV i mogu da učestvuju u neelastičnim sudarima, što dodatno usporava porast srednje energije sa porastom polja.

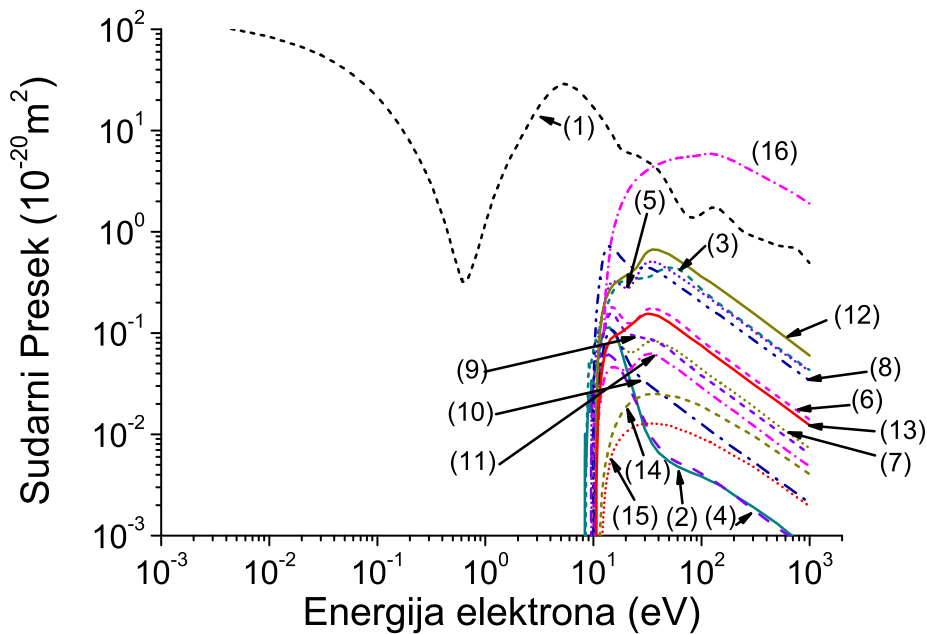
Trendovi zavosnosti srednje energije od E/n_0 u kriptonu i ksenonu su na kvalitativnom nivou vrlo slični odgovarajućem trendu zavisnosti u argonu. Pritom se srednja energija naglo povećava sa porastom E/n_0 u opsegu polja između približno $6 \cdot 10^{-3}$ Td i $3 \cdot 10^{-2}$ za elektrone u kriptonu i u opsegu između $2 \cdot 10^{-2}$ i $6 \cdot 10^{-2}$ za elektrone u ksenonu. U oba slučaja se u ovom opsegu E/n_0 srednja energija elektrona nalazi u energijskoj oblasti u kojoj presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima naglo opada sa porastom energije, zbog Ramsauer-Townsendovog minimuma. Ovaj energijski opseg se nalazi između približno $4 \cdot 10^{-2}$ eV i 0.5 eV za elektrone u kriptonu i ksenonu. Na višim poljima je nagib zavisnosti srednje energije od E/n_0 znatno manji, jer naglo raste presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima u energijskom intervalu koji odgovara ovom opsegu polja. Pri vrednostima polja višim od oko približno 6 Td, nagib zavisnosti srednje energije od E/n_0 se dodatno smanjuje zbog toga što najenergičniji elektroni mogu da učestvuju u neelastičnim sudarima u ovom opsegu polja. Naime, na 6 Td vrednosti



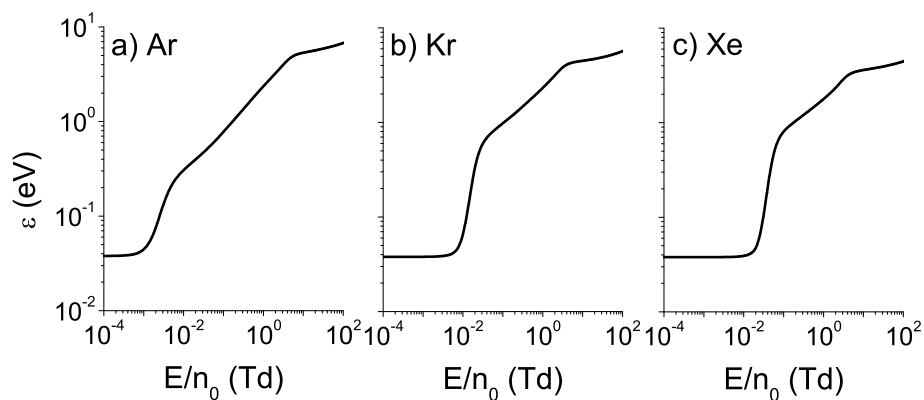
Slika 47: Set preseka za rasejanje elektrona u kriptonu: (1) transfer impulsa u elastičnim sudarima, efektivne elektronske ekscitacije: (2) S nivoi, (3) P nivoi, (4) D i P nivoi, (5) efektivna ekscitacija koja obuhvata stanja sa pragovima između 12.75 eV i 13.996 eV i (6) jonizacija.

srednje energije elektrona iznose približno 4 eV i 3 eV u kriptonu i ksenonu, respektivno, dok vrednosti praga za prvu elektronsku ekscitaciju u kriptonu i ksenonu iznose približno 9.91 eV i 8.31 eV.

Slika 50 predstavlja $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$, $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponente TTIII za elektrone u argonu, kriptonu i ksenonu. Ovi rezultati su dobijeni primenom momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine. Prikazano je i $3Q_T^{(f)} = Q_{xxz}^{(f)} + Q_{zxx}^{(f)} + Q_{zzz}^{(f)}$ (pri čemu je $Q_{xxz} = Q_{zxx}$), te se može videti da je na kvalitativnom nivou trend zavisnosti komponenti TTIII od E/n_0 isti u kriptonu i ksenonu, pri čemu se razlikuju vrednosti polja na kojima ove komponente menjaju trend ponašanja kao i brojne vrednosti komponenti TTIII. Na niskim poljima su sve tri komponente TTIII pozitivne i monotono se povećavaju sa porastom E/n_0 i dostižu maksimum na oko $1.4 \cdot 10^{-2}$ Td i $3.7 \cdot 10^{-2}$ Td za elektrone u kriptonu i ksenonu, respektivno. Nakon toga sve tri komponente TTIII naglo opadaju sa porastom polja do oko $3.5 \cdot 10^{-2}$ Td i 0.1 Td za elektrone u kriptonu i ksenonu respektivno. Na višim poljima se $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta povećava sa porastom E/n_0 i dostiže lokalni maksimum na približno 0.08 Td i 0.2 Td za elektrone u kriptonu i ksenonu respektivno. U ovom opsegu polja $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponenta postaje negativna i dostiže lokalni minimum na optilike istoj vrednosti polja na kojoj $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ dostiže lokalni maksimum. Istovremeno $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponenta ostaje negativna u celom opsegu polja do 100 Td. Komponente $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ po apsolutnoj vrednosti na višim poljima monotono opadaju sa porastom E/n_0 . U kriptonu i ksenonu $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponenta posle prvog maksimuma monotono opada sa porastom polja do oko 2.1 Td, posle čega se povećava, dostižući drugi lokalni maksimum (videti slike sa korelacijom $n_0 D_L$ i $n_0^2 Q_L$). Ovaj drugi maksimum se nalazi na približno 4 Td za elektrone u



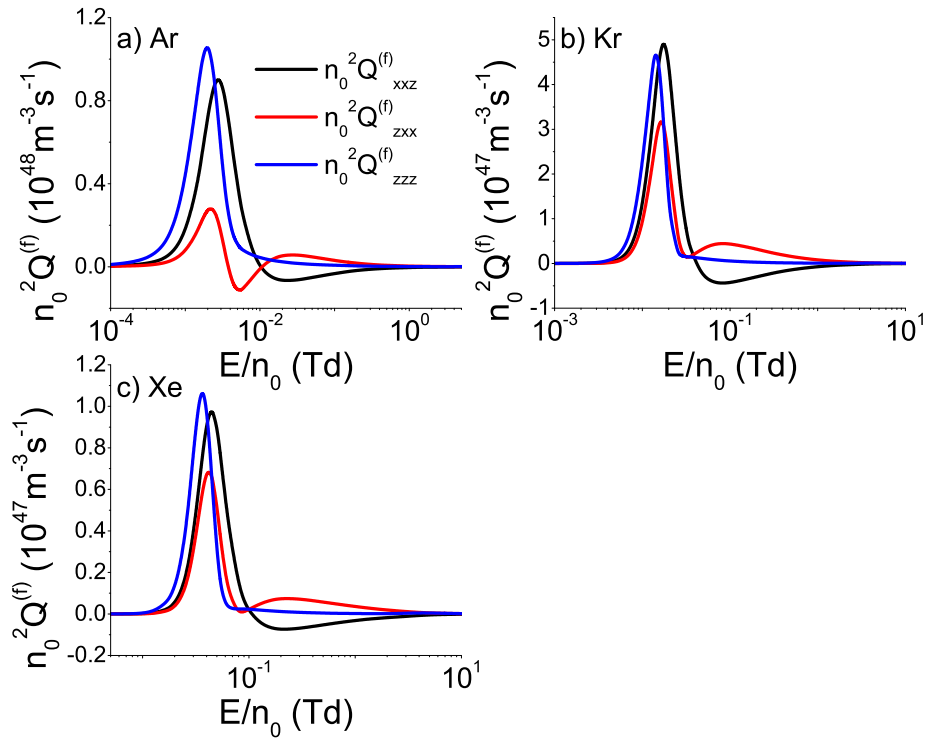
Slika 48: Set preseka za rasejanje elektrona u ksenonu: (1) transfer impulsa u elastičnim sudarima, efektivne elektronske ekscitacije: (2) $6s[3/2]_2$, (3) $6s[3/2]_1$, (4) $6s'[1/2]_0$, (5) $6s'[1/2]_1$ i $6p[1/2]_1$, (6) $6p[5/2]_2$ i $6p[5/2]_3$, (7) $6p[3/2]_1$ i $6p[3/2]_2$, (8) $5d[1/2]_0$, $5d[1/2]_1$, $6p[1/2]_0$, $5d[7/2]_4$ i $5d[3/2]_2$, (9) $5d[7/2]_3$, (10) $5d[5/2]_2$, (11) $5d[5/2]_3$, (12) $5d[3/2]_1$, (13) $7s[3/2]_2$, $7s[3/2]_1$, $7p[1/2]_1$, $7p[5/2]_2$, $6p'[3/2]_1$, $7p[5/2]_3$, $6d[1/2]_0$, $6d[1/2]_1$, $7p[3/2]_2$, $6d[3/2]_2$, $7p[3/2]_1$, $7p[1/2]_0$, $6d[7/2]_4$, $6d[7/2]_3$, $6p'[3/2]_2$, $6d[5/2]_2$, $6p[1/2]_1$, $6d[5/2]_3$, $6p'[1/2]_0$ i $6d[3/2]_1$, (14) $8s[3/2]_2$ (15) $9s[3/2]_2$ i (16) jonizacija.



Slika 49: Srednja energija u funkciji E/n_0 za rojeve elektrona u argonu, kriptonu i ksenonu. Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

kriptonu i ksenonu. Na višim poljima apsolutne vrednosti sve tri komponente TIII monotono opadaju sa porastom E/n_0 .

Trend zavisnosti komponenti TIII od E/n_0 za elektrone u argonu je sličan odgovarajućim trendovima zavisnosti u kriptonu i ksenonu. Naime, sve komponente TIII se monotono povećavaju do oko $2 \cdot 10^{-3}$ Td, gde dostižu maksimum. Nakon toga, sve komponente monotono opadaju sa porastom E/n_0 do približno $5 \cdot 10^{-3}$ Td. Uz to, $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponenta postaje negativna i dostiže lokalni minimum na oko $2.7 \cdot 10^{-2}$, pri čemu $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta dostiže lokalni



Slika 50: $n_0^2 Q_{xxz}$, $n_0^2 Q_{zxx}$ i $n_0^2 Q_{zzz}$ komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda u funkciji E/n_0 za rojeve elektrona u argonu, kriptonu i ksenonu. Rezultati su dobijeni na osnovu metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

maksimum na otprilike istoj vrednosti E/n_0 . Nakon ovog polja $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ po apsolutnoj vrednosti monotono opadaju u celom opsegu polja, dok se $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ povećava u opsegu polja između približno 3.5 Td i 6 Td (videti grafik sa korelacijom QL i DL), nakon čega monotono opada sa porastom E/n_0 . Međutim, kvalitativni trend zavisnosti TKIII od E/n_0 se u argonu razlikuje od trendova zavisnosti u kriptonu i ksenonu po tome što $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta postaje negativna u argonu. Ova komponenta postaje negativna na približno $4 \cdot 10^{-3}$ Td i dostiže lokalni minimum na približno $5.3 \cdot 10^{-3}$ Td, posle čega se povećava sa porastom E/n_0 , postajući pozitivna na oko $1.3 \cdot 10^{-2}$ Td. Vrednosti polja na kojoj $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta postaje pozitivna blizu je vrednosti polja na kojoj $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponenta postaje negativna.

U sva tri gasa se komponente TTIII naglo povećavaju sa porastom E/n_0 na najnižim poljima na kojima se velika većina elektrona nalazi u energijskoj oblasti u kojoj presek za transfer impulsa naglo opada sa porastom energije zbog Ramsauer-Townsend-ovog minimuma. Sve tri komponente TTIII u sva tri gasa dostižu maksimume na vrednostima polja koje se nalaze negde na sredini opsega u kome se srednja energija elektrona naglo povećava sa porastom polja (približno $2 \cdot 10^{-3}$ Td, $1.4 \cdot 10^{-2}$ Td i $3.7 \cdot 10^{-2}$ Td za elektrone u argonu, kriptonu i ksenonu, respektivno). Istovremeno važi da vrednosti srednje energije elektrona na poljima na kojima komponente TTIII dostižu maksimum iznose 0.08 eV, 0.11 eV i 0.14 eV za elektrone u argonu, kriptonu i ksenonu respektivno. Vrednosti energije koje odgovaraju položajima Ramsauer-Townsend-ovog minimuma iznose 0.24 eV, 0.51 eV i 0.64 eV za elektrone u argonu, kriptonu i ksenonu respektivno. Ovo znači da u argonu komponente TTIII dostižu lokalni maksimum na vrednosti

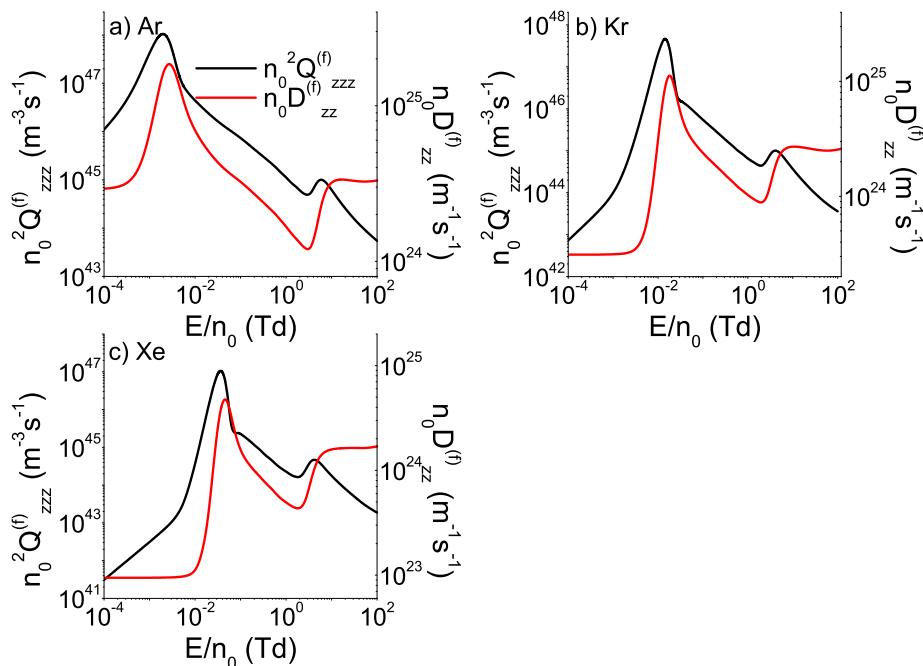
polja na kojoj je srednja energija elektrona 3 puta manja od energije Ramsauer-Townsend-ovog minimuma, dok u kriptonu i ksenonu komponente TTIII dostižu lokalni maksimum na energiji koja je oko 4.5 puta manja od energije Ramsauer-Townsend-ovog minimuma. Izloženi podaci upućuju na to da komponente TTIII počinju da opadaju sa porastom E/n_0 u opsegu polja u kome se najenergičniji elektroni nalaze u energijskoj oblasti u kojoj se presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima naglo povećava sa porastom energije. Veća osetljivost komponenti TTIII na dinamiku visokoenergijskih elektrona u kriptonu i ksenonu nego u argonu verovatno se može pripisati strmijem porastu preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima nakon Ramsauer-Townsend-ovog minimuma u ova dva gasa.

Za elektrone u argonu je $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta negativna u opsegu E/n_0 od $3.9 \cdot 10^{-3}$ Td do 10^{-2} Td. U ovom opsegu polja se srednja energija elektrona nalazi u intervalu između 0.17 eV i 0.3 eV, što je blizu vrednosti Ramsauer-Townsend-ovog minimuma u argonu, pri čemu se porast srednje energije sa porastom E/n_0 primetno usporava na kraju ovog opsega polja. Na poljima višim od 10^{-2} Td $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_T^{(f)}$ imaju negativne vrednosti, što znači da su u argonu $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_T^{(f)}$ negativni počev od polja u kome je srednja energija elektrona 1.25 puta veća od energije Ramsauer-Townsend-ovog minimuma. Negativnost $n_0^2 Q_T^{(f)}$ ukazuje na to da je roj skupljen duž transverzalnog pravca na frontu roja (u $q\mathbf{E}$ pravcu) i proširen duž transverzalnog pravca na zadnjem delu roja (u $-q\mathbf{E}$ pravcu) (videti poglavlje 4.2). Ovo uslovljeno time što se većina elektrona u ovom opsegu polja nalazi u energijskoj oblasti u kojoj se presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima naglo povećava sa porastom energije, što pruža snažan otpor difuzionom širenju roja.

Iako u kriptonu i ksenonu $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta ne postaje negativna, za razliku od njenog ponašanja u argonu, trend ponašanja $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_T^{(f)}$ je sličan kao u argonu. Zapravo, vrednosti $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_T^{(f)}$ su negativne na poljima višim od $4.6 \cdot 10^{-2}$ Td i 0.13 Td za elektrone u kriptonu i ksenonu respektivno. Na ovim vrednostima polja srednja energija iznosi 0.74 eV i 0.9 eV u kriptonu i ksenonu, respektivno, što za posledicu ima to da su $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_T^{(f)}$ negativni počev od polja na kojem je srednja energija preko 1.45 puta veća od energije Ramsauer-Townsend-ovog minimuma u kriptonu i preko 1.4 puta veća od energije Ramsauer-Townsend-ovog minimuma u ksenonu.

Negativnost $n_0^2 Q_T^{(f)}$ se javlja za elektrone u atomskim gasovima sa Ramsauer-Townsend-ovim minimumom. Ovaj efekat se javlja u opsegu polja u kome se većina elektrona nalazi u energijskoj oblasti u kojoj se presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima naglo povećava sa porastom energije, što dovodi do snažnog otpora difuzionom obliku kretanja koji je reprezentovan transportnim koeficijentima trećeg reda. Pri tome je u oba slučaja $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponenta negativna u opsegu polja u kome je $n_0^2 Q_T^{(f)}$ negativno, dok je u ovom opsegu $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta pozitivna. Negativnost $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponente upućuje na to da je difuziono širenje u transverzalnom pravcu manje na frontu roja nego na zadnjem delu roja. Ovo je posledica porasta srednje energija duž longitudinalnog pravca i naglog povećanja kolizione frekvence sa porastom energije. Pozitivnost $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ pak pokazuje da je longitudinalno širenje roja veće na transverzalnim ivicama nego u centru roja. Ovo bi moglo da bude posledica opadanja energije

elektrona (pa time i otpora difuzionom širenju koji je izazvan porastom kolizionalne frekvence na visokim energijama) pri udaljavanju od centra roja duž transverzalnog pravca, zbog toga što je energičnijim elektronima teže da stignu do transverzalnih ivica, budući da je intenzivan porast kolizionalne frekvence sa porastom energije. Mogući razlog za odsustvo opsega E/n_0 , u kome je $n_0^2 Q_{zzx}^{(f)}$ komponenta negativna, u kriptonu i ksenonu jeste strmiji porast preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima u ova dva gasa, koji dovodi do toga da $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponenta postane negativna i da energija elektrona počne da opada pri udaljavanju od centra roja duž transverzalnog pravca, pre nego što $n_0^2 Q_{zzx}^{(f)}$ komponenta postane negativna.



Slika 51: Korelacija između profila zavisnosti longitudinalne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i fluks longitudinalne difuzije $n_0 D_{zz}^{(f)}$ od E/n_0 za rojeve elektrona u argonu, kriptonu i ksenonu. Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

Na slici 51 prikazane su korelacije između profila zavisnosti $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0 D_{zz}^{(f)}$ od E/n_0 za elektrone u argonu, kriptonu i ksenonu. Može se uočiti da postoji snažna korelacija u trendovima ponašanja $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0 D_{zz}^{(f)}$ u sva tri gasa, kao i da su odgovarajući profili na kvalitativnom nivou jako slični. Na niskim poljima se obe veličine povećavaju sa porastom E/n_0 zbog toga što se većina elektrona nalazi u energijskoj oblasti u kojoj presek za transfer impulsa naglo opada sa porastom energije. Pri tome $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponenta TTIII dostiže maksimum na $2.1 \cdot 10^{-3}$ Td, $1.4 \cdot 10^{-2}$ Td i $3.7 \cdot 10^{-2}$ Td za elektrone u argonu, kriptonu i ksenonu, respektivno, dok $n_0 D_{zz}^{(f)}$ dostiže maksimum na $2.7 \cdot 10^{-3}$ Td, $1.7 \cdot 10^{-2}$ Td i $4.6 \cdot 10^{-2}$ Td za elektrone u ova tri gasa. U sva tri slučaja $n_0 D_{zz}^{(f)}$ dostiže maksimum na malo višim poljima od $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$. Nakon maksimuma $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0 D_{zz}^{(f)}$ naglo opadaju do oko $5.9 \cdot 10^{-3}$ Td, $2.9 \cdot 10^{-2}$ i $7.7 \cdot 10^{-2}$ za elektrone u argonu, kriptonu i ksenonu respektivno. Na višim poljima obe veličine nastave da opadaju, ali znatno sporije nego na nižim poljima, do oko 2.7 Td za elektrone u argonu i do oko 2.1 Td za elektrone u kriptonu i ksenonu. Nakon toga se obe veličine naglo povećavaju sa porastom E/n_0 u uskom

opsegu polja. Pri tome $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ dostiže maksimum na oko 5.9 Td, 4Td i 4.2 Td za elektrone u argonu, kriptonu i ksenonu, respektivno. Nakon drugog maksimuma $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponenta TTIII monotono opada sa porastom polja u celom opsegu do 100 Td, u sva tri gasa. U okolini polja na kome $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ dostiže maksimum porast $n_0 D_{zz}^{(f)}$ se sa porastom E/n_0 primetno usporava u odnosu na oblast polja u kojoj se $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ povećava sa E/n_0 . Usporavanje porasta $n_0 D_{zz}^{(f)}$ sa E/n_0 se nastavlja do oko 13 Td, u sva tri gasa, nakon čega $n_0 D_{zz}^{(f)}$ praktično saturira sa porastom E/n_0 . Zanimljivo je uočiti da su vrednosti $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ u okolini prvog maksimuma za više od reda veličine veće od vrednosti ove komponente TTIII na ostalim poljima.

U ovom potpoglavlju posmatrani su TKIII za elektrone u argonu, kriptonu i ksenonu. Profili Q_{xxz} i Q_{zzz} komponenti u argonu su na kvalitativnom nivou vrlo slični odgovarajućim profilima u kriptonu i ksenonu. Profil Q_{zzz} komponente u argonu se ipak razlikuje od odgovarajućih profila u kriptonu i ksenonu po prisustvu negativnih vrednosti u uskom opsegu redukovanoeg električnog polja. Pritom je Q_{zzz} komponenta pozitivna u argonu, kriptonu i ksenonu u celom razmatranom opsegu E/n_0 , dok Q_{xxz} komponenta postaje negativna na višim poljima u sva tri gasa. Profili komponenti TTIII su razmatrani na osnovu setova preseka i vrednosti srednje energije. Sve tri komponente TTIII imaju oštar maksimum u oblasti E/n_0 , u kojoj je srednja energija između 2 i 3 puta niža od energije Ramsauer-Townsend-ovog minimuma u argonu, kriptonu i ksenonu. Na kraju ovog potpoglavlja raspravlja se o korelaciji između profila longitudinalne komponente TTIII i longitudinalne komponente difuzionog tenzora.

5.5 Transportni koeficijenti trećeg reda za rojeve elektrona u molekularnim gasovima

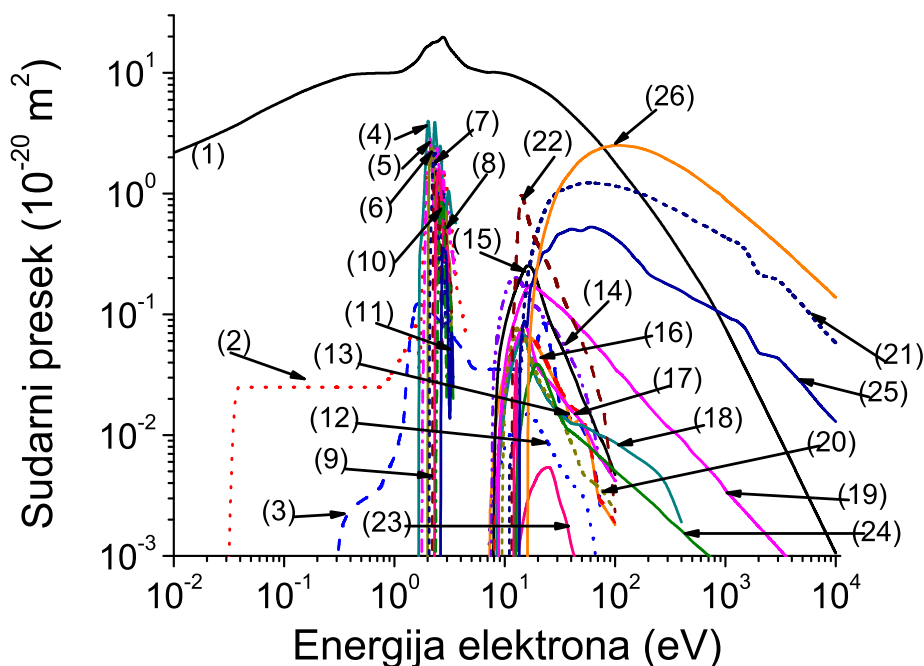
5.5.1 Preliminarije

Na slikama 52, 53, 54 i 55 su prikazani setovi preseka za rasejanje elektrona u N_2 , CH_4 , CF_4 i C_3F_8 , respektivno, koji su korišćeni u našim proračunima. Kolizione frekvence za elastične sudare za pozitronu u ova tri gasa nalaze se na slici 68.

Setovi preseka za rasejanje elektrone u N_2 i CH_4 su razvijeni u Laboratoriji za neravnotežne procese i primenu plazme Instituta za fiziku i prikazani su u radovima [204] i [205], respektivno. Set preseka za elektrone u CF_4 , koji je korišćen u našim proračunima, je prikazan u radu [206], dok je set preseka za elektrone u C_3F_8 preuzet iz reference.

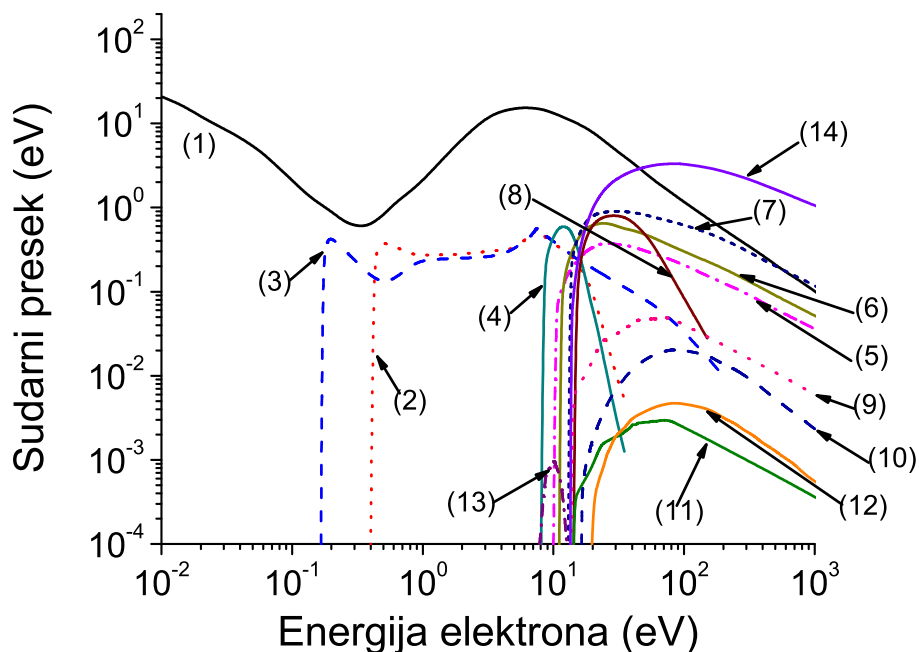
5.5.2 Rezultati

Na slici 56 su prikazani profili srednje energije u funkciji E/n_0 za elektrone u N_2 , CH_4 , CF_4 i C_3F_8 . Ovi rezultati su dobijeni primenom momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine. Profili srednje energije imaju sličan kvalitativni trend ponašanja za elektrone u CH_4 , CF_4 i C_3F_8 . Na najnižim poljima (do oko $2 \cdot 10^{-3}$ Td, $5 \cdot 10^{-2}$ Td i $2 \cdot 10^{-1}$ Td za



Slika 52: Set preseka za rasejanje elektrona u N_2 : (1) presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, (2) rotaciona ekscitacija, vibracione ekscitacije (3) v_1 nerezonantni deo, (4) v_1 rezonantni deo, (5) v_2 , (6) v_3 , (7) v_4 , (8) v_5 , (9) v_6 , (10) v_7 , (11) v_8 , elektronske ekscitacije (12) $A^3\Sigma_u^+$ vibracioni nivoi od 0 do 4, (13) $A^3\Sigma_u^+$ vibracioni nivoi od 5 do 9, (14) $B^3\Pi$, (15) $W^3\Delta_u$, (16) $A^3\Sigma$ vibracioni nivo 10, (17) $B^3\Sigma_u^-$, (18) $a^1\Sigma_u^-$, (19) $a^1\Pi_g$, (20) W^1 , (21) disocijativna ekscitacija, (22) i (23) c^3 , (24) A^{1u} , (25) suma singletnih stanja ne-disocijativan deo i (26) jonizacija.

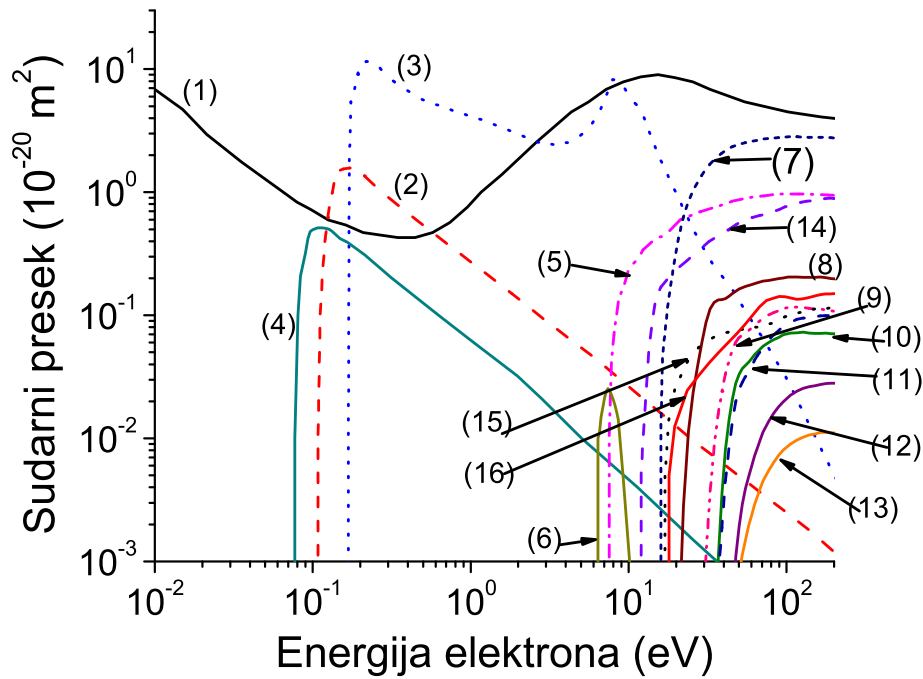
elektrone u CH_4 , CF_4 i C_3F_8 , respektivno), srednja energija ima termalnu vrednost (približno 0.038 eV za temperaturu gasa od 293 K). Niske vrednosti pragova za vibracionu ekscitaciju u ova tri gasa (0.16 eV, 0.077 eV i 0.065 eV za elektrone u CH_4 , CF_4 i C_3F_8 , respektivno) onemogućavaju porast srednje energije (sa porastom polja) na niskom E/n_0 , zbog toga što je energija koju elektroni dobiju od spoljašnjeg polja brzo izgubljena u neelastičnim sudarima. Pri tome preseki za vibracione ekscitacije dostižu lokalne maksimume negde između 0.1 eV i 0.3 eV u ova tri gasa. Zadržavanje termalnih vrednosti srednje energije čak i na relativno visokim poljima je naročito izraženo u CF_4 i C_3F_8 , gde lokalni maksimumi preseka za vibracione ekscitacije iznose oko $10 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$. Na višim poljima se srednja energija u ova tri gasa sporo povećava sa porastom polja (do oko 0.27 Td, 7.7 Td i 17 Td za elektrone u CH_4 , CF_4 i C_3F_8 , respektivno). U ovom opsegu polja se većina elektrona nalazi u energijskoj oblasti u kojoj se preseki za vibracionu ekscitaciju naglo povećavaju sa porastom energije, što dovodi do sporog povećanja energije sa porastom E/n_0 . Pri kraju ovog opsega polja srednja energija iznosi oko 0.057 eV za elektrone u CH_4 i oko 0.1 eV za elektrone u CF_4 i C_3F_8 . To znači da se elektroni u CH_4 čija je energija oko četiri puta veća od srednje energije nalaze u energijskom intervalu u kome presek za prvu vibracionu ekscitaciju opada sa porastom energije, dok se elektroni u CF_4 i C_3F_8 , čija je energija oko tri puta veća od srednje energije, nalaze u energijskom intervalu u kome preseki za sve vibracione ekscitacije opadaju sa porastom energije (ili su znatno manji od 10^{-20} m^2 , u slučaju poslednje dve vibracione ekscitacije u C_3F_8). Na višim poljima, srednja energija se



Slika 53: Set preseka za rasejanje elektrona u CH_4 : (1) presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, vibracione ekscitacije (2) v_{1-3} , (3) v_{1-4} , elektronske ekscitacije (4), (5), (6), (7), (8), disocijacije (9) $\text{CH}(\text{A-X})$, (10) H_α , (11) $\text{CH}(\text{B-X})$, (12) H_β , (13) zahvat elektrona i (14) jonizacija.

znatno brže povećava sa porastom polja (do oko 46 Td za elektrone u CH_4 i CF_4 i do oko 77 Td za elektrone u C_3F_8). Pri kraju ovog opsega polja srednja energija elektrona iznosi 3.2 eV, 2.7 eV i 0.9 eV za elektrone u CH_4 , CF_4 i C_3F_8 , respektivno. Na višim poljima je porast srednje energije u CH_4 i CF_4 znatno sporiji nego u prethodnom opsegu polja, dok je porast srednje energije u C_3F_8 malo sporiji između približno 77 Td i 400 Td, nakon čega se dodatno usporava. Elektroni čija je energija oko tri puta veća od srednje energije na poljima višim od 46 Td u CH_4 i CF_4 mogu da izgube energiju u elektronskim ekscitacijama, što dovodi do sporijeg porasta srednje energije u ovom opsegu polja. Malo sporiji porast srednje energije u C_3F_8 u na poljima višim od 77 Td je verovatno posledica toga što se mnogi elektroni nalaze u energijskoj oblasti u kojoj se preseki za vibracione ekscitacije povećavaju sa porastom energije. Pri tome preseki za prve tri vibracione ekscitacije dostižu drugi i treći lokalni maksimum, dok preseki za poslednje dve vibracione ekscitacije dostižu prvi i drugi lokalni maksimum u energijskom intervalu između 2 eV i 10 eV. U C_3F_8 je srednja energija na 400 Td oko 5.4 eV, pa elektroni čija je energija oko 2.5 puta veća od srednje energije mogu da učestvuju u disocijaciji i jonizaciji molekula C_3F_8 , a to dovodi do značajnih energijskih gubitaka u neelastičnim sudarima i do sporijeg porasta srednje energije sa porastom polja za E/n_0 veće od 400 Td.

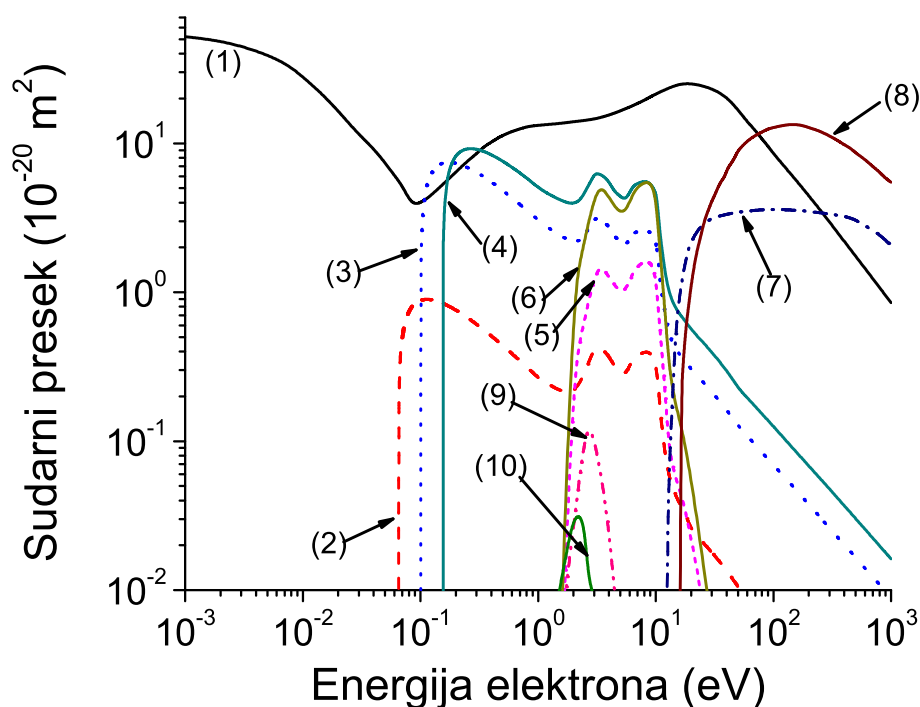
Kvalitativni trend ponašanja srednje energije u N_2 je nešto drugačiji od odgovarajućih trendova u preostala tri gasa. Na poljima do oko 0.01 Td, srednja energija je termalna (oko 0.038 eV). U ovom opsegu polja elektroni gube energiju u elastičnim sudarima i rotacionim ekscitacijama, sa pragom od 0.02 eV. Srednja energija se sporo povećava do oko 0.077 Td, gde iznosi oko 0.056 eV. Nakon toga se srednja energija povećava skoro linearno sa poljem do oko 1.7 Td, gde iznosi oko 0.57 eV. Na početku ovog opsega elektroni čija je energija je oko 4 puta veća od



Slika 54: Set preseka za rasejanje elektrona u CF_4 : (1) presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, vibracione ekscitacije (2) v_1 , (3) v_3 , (4) v_4 , (5) elektronska ekscitacija, (6) disocijativni zahvat elektrona, disocijativne jonizacije (7) $CF_4 + e \rightarrow CF_3^+ + F + 2e$, (8) $CF_4 + e \rightarrow CF_2^+ + 2F + 2e$, (9) $CF_4 + e \rightarrow CF^+ + 3F + 2e$, (10) $CF_4 + e \rightarrow C^+ + 4F + 2e$, (11) $CF_4 + e \rightarrow F^+ + CF_3 + 2e$, (12) $CF_4 + e \rightarrow CF_3^{2+} + F + 3e$, (13) $CF_4 + e \rightarrow CF_2^{2+} + 2F + 3e$, disocijacije molekula na neutralne fragmente (14) $CF_4 + e \rightarrow CF_3 + F + e$, (15) $CF_4 + e \rightarrow CF_2 + 2F + e$, (16) $CF_4 + e \rightarrow CF + 3F + e$

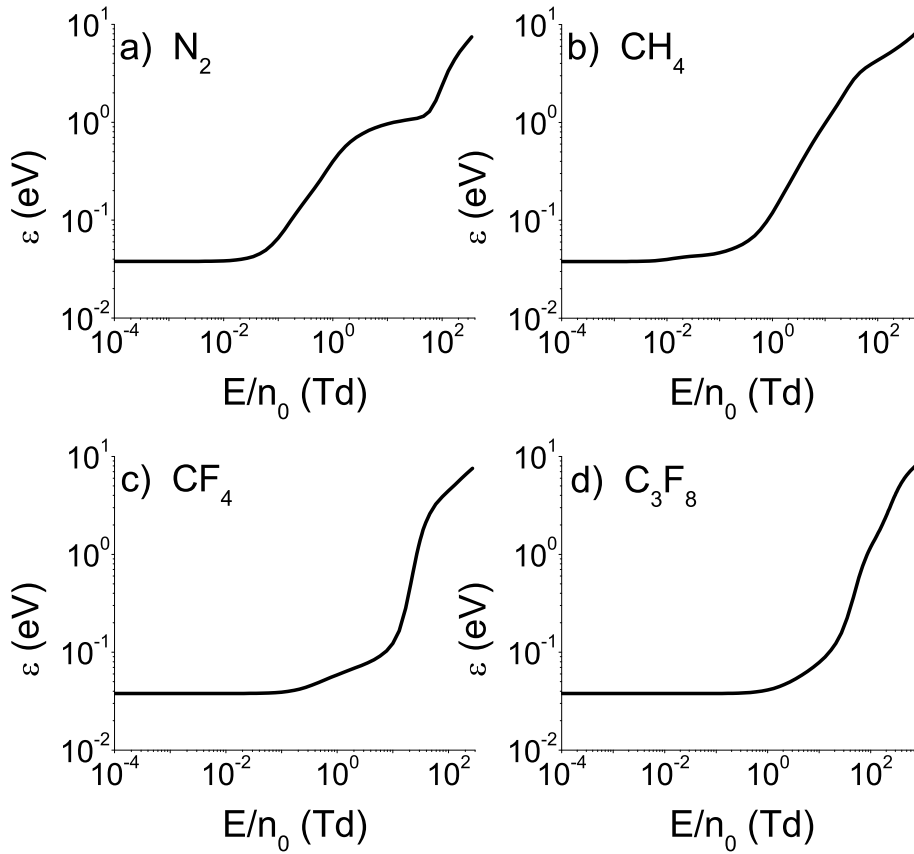
srednje energije mogu da učestvuju u prvoj vibracionoj ekscitaciji, dok na kraju ovog opsega veliki broj elektrona može učestvovati u prve tri vibracione ekscitacije. U opsegu polja između 1.7 Td i 35 Td je porast srednje energije sa porastom polja značajno usporen. Na kraju ovog opsega je srednja energija elektrona oko 1 eV. U N_2 su preseki za vibracionu ekscitaciju najintenzivniji (preko $0.1 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$) u energijskom intervalu između oko 1.5 eV i 4 eV. Ovo znači da se u opsegu polja između 1.7 Td i 35 Td elektroni čija je energija oko dva puta veća od srednje energije nalaze u energijskom intervalu u kome preseki za vibracione ekscitacije dostižu maksimum, pa ovi elektroni imaju veliku verovatnoću da izgube energiju u neelastičnim sudarima, a to značajno usporava porast srednje energije sa porastom E/n_0 u ovom opsegu polja. Porast srednje energije sa porastom E/n_0 je znatno intenzivniji između 35 Td i 130 Td. U ovom opsegu polja srednja energija nalazi se u energijskom intervalu između 1 eV i 3.3 eV. Na početku ovog opsega elektroni čija je energija oko četiri puta veća od srednje energije nalaze se u energijskom intervalu u kome preseki za vibracionu ekscitaciju naglo opadaju sa porastom energije, dok se na kraju ovog opsega polja većina elektrona nalazi u ovom energijskom intervalu. Na kraju ovog opsega polja elektroni čija je energija oko dva puta veća od srednje energije mogu učestvovati u elektronskim ekscitacijama, što dovodi do sporijeg porasta srednje energije sa porastom E/n_0 na višim poljima.

Slika 57 prikazuje profile sve tri fluks komponente TTIII, koje su nezavisne u odsustvu mag-



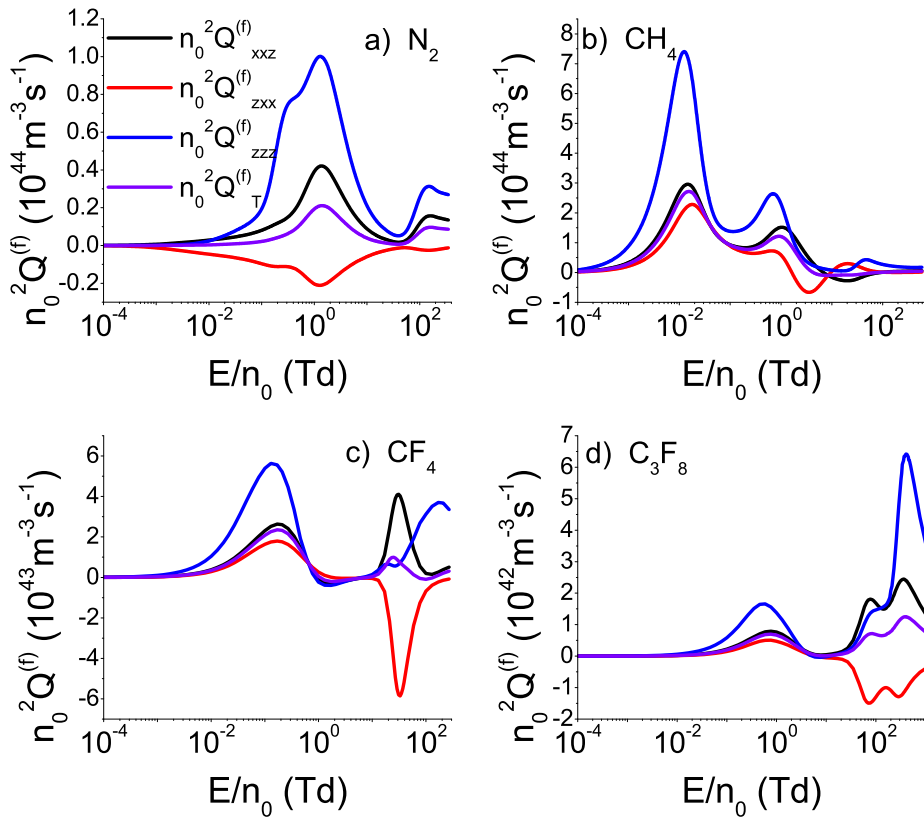
Slika 55: Set preseka za rasejanje elektrona u C_3F_8 : (1) presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, vibracione ekscitacije (2) v_1 , (3) v_2 , (4) v_3 , (5) v_4 , (6) v_5 , (7) disocijacija, (8) jonizacija, (9) disocijativni zahvat elektrona i (10) trojni zahvat elektrona na atmosferskom pritisku i temperaturi od 293 K.

netskog polja, u funkciji E/n_0 za elektrone u N_2 , CH_4 , CF_4 i C_3F_8 . Ovi rezultati su dobijeni primenom momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine. Na kvalitativnom nivou, trendovi zavisnosti sve tri komponente TTIII od E/n_0 su jako slični za elektrone u CF_4 i C_3F_8 , dok se trendovi zavisnosti vandijagonalnih komponenti u CH_4 i ova dva gasa razlikuju na visokim poljima. Naime, Q_{zxx} komponenta je negativna samo u uskom opsegu E/n_0 za elektrone u CH_4 , dok za elektrone u CF_4 i C_3F_8 ova komponenta postane negativna negde na srednini E/n_0 opsega i ostaje negativna do kraja opsega polja. U ova tri gasa na najnižim poljima sve tri komponente TTIII su pozitivne i monotono se povećavaju sa porastom polja do oko 0.013 Td, 0.17 Td i 0.59 Td za elektrone u CH_4 , CF_4 i C_3F_8 , respektivno. Pozitivnost Q_{zxx} komponente je posledica opadanja preseka za transfer impulsa sa porastom energije kao i male vrednosti preseka za vibracionu ekscitaciju u energijskom opsegu koji odgovara termalnim energijama. Sve tri komponente TTIII se povećavaju sa porastom E/n_0 uprkos tome što najenergičniji elektroni mogu da učestvuju u vibracionim ekscitacijama. Uzrok tome je što konstantnost srednje energije u ovom opsegu polja dovodi do konstantnosti brzinskih koeficijenata za neelastične sudare. Ovo znači da se sa porastom E/n_0 povećava usmerena komponenta brzine bez značajnog porasta haotične komponente brzine i otpora kretanju naelektrisanih čestica, koji je izazvan sudarima sa molekulima pozadinskog gasa. Na višim vrednostima E/n_0 energija koja je apsorbovana od strane spoljašnjeg polja je veća od energije koja se izgubi u elastičnim i neelastičnim sudarima pri termalnim energijama. To dovodi do povećanja srednje energije i brzinskih koeficijenata za vibracione ekscitacije sa porastom E/n_0 , ali se srednja energija sporo povećava sa porastom polja zbog velikih energijskih gubitaka u vibracionim ekscitacijama.



Slika 56: Srednja energija u funkciji E/n_0 za rojeve elektrona u N_2 , CH_4 , CF_4 i C_3F_8 . Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

Povećanje brzinskih koeficijenata za neelastične sudare dovodi do naglog opadanja sve tri komponente TTIII u opsegu polja do oko 0.13 Td, 1.7 Td i 10 Td za elektrone u CH_4 , CF_4 i C_3F_8 , respektivno. Može se uočiti da se oblast polja u kojoj se srednja energija sporo povećava sa porastom E/n_0 završava na oko 0.13 Td u CH_4 i blizu 10 Td u C_3F_8 , što odgovara vrednostima polja na kojima neke komponente TTIII prestanu da opadaju sa porastom E/n_0 . Međutim, u CF_4 Q_{zzz} i Q_{xxz} opadaju sa porastom E/n_0 samo do oko 1.7 Td, iako je ova vrednost polja blizu sredine opsega u kojoj se srednja energija sporo povećava sa porastom E/n_0 . Može se uočiti da su Q_{zzz} i Q_{xxz} negativne u CF_4 između približno 1 Td i 7.7 Td. Pri tome su u CF_4 sve tri komponente TTIII negativne u opsegu polja između 2.1 Td i 7.7 Td. Negativnost komponenti TTIII u ovom opsegu polja je posledica intenzivnih energijskih gubitaka u vibracionim ekscitacijama. Naime, srednja energija elektrona se nalazi u intervalu između 0.059 eV i 0.1 eV u opsegu E/n_0 od 1 Td do 7.7 Td, što znači da se svi elektroni u ovom opsegu polja, čija je energija od 2 do 4 puta veća od srednje energije, nalaze u energijskoj zoni u kojoj prve tri vibracione ekscitacije dostižu lokalne maksimume u CF_4 , pošto ove vibracione ekscitacije dostižu maksimume u energijskom intervalu između 0.1 eV i 0.24 eV. Pri tome su preseki za drugu i treću vibracionu ekscitaciju veći od preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima u ovom energijskom intervalu. Primećuje se da Q_{zzz} i Q_{xxz} postaju pozitivne baš u okolini polja od 7.7 Td, gde se porast srednje energije sa porastom E/n_0 ubrzava. U sva tri gasa se apsolutne vrednosti sve tri komponente TTIII povećavaju sa porastom E/n_0 , počev od polja na kome srednja



Slika 57: $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$, $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$, $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_T^{(f)}$ komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda u funkciji E/n_0 za rojeve elektrona u N_2 , CH_4 , CF_4 i C_3F_8 . Rezultati su dobijeni uz pomoć metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

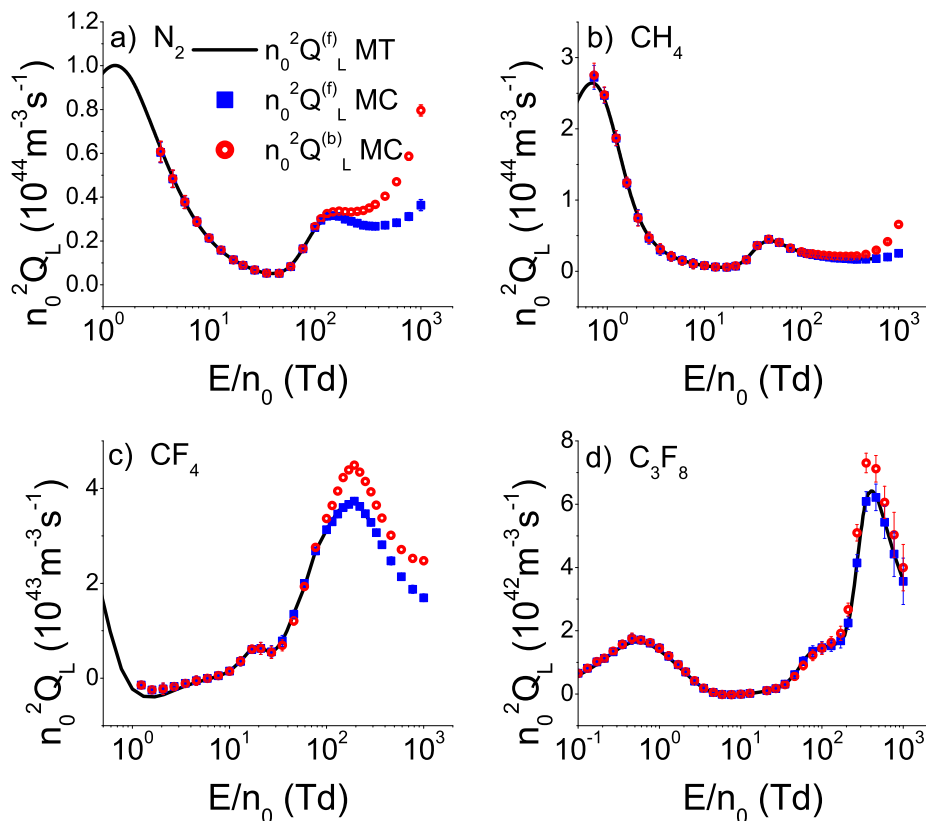
energija počne brže da se povećava sa porastom E/n_0 . Pritom apsolutne vrednosti vandijagonalnih komponenti dostižu lokalni maksimum na oko 1 Td, 31 Td i 77 Td za elektrone u CH_4 , CF_4 i C_3F_8 respektivno. Longitudinalna komponenta TTIII u CH_4 dostiže lokalni maksimum na oko 0.77 Td, posle čega opada. U CF_4 i C_3F_8 se longitudinalna komponenta TTIII naglo povećava sa porastom E/n_0 do oko 21 Td i 85 Td, respektivno.

Ponašanje vandijagonalnih komponenti TTIII i longitudinalne komponente kvalitativno se razlikuju na poljima višim od položaja drugog lokalnog maksimuma vandijagonalnih komponenti TTIII. Zapravo, za elektrone u CH_4 Q_{zzz} komponenta opada posle drugog lokalnog maksimuma na 0.77 Td do oko 17 Td, gde dostiže lokalni minimum. Vandijagonalne komponente Q_{zxx} i Q_{xxy} takođe opadaju nakon 1 Td. Pri tome Q_{zxx} komponenta postaje negativna na oko 1.7 Td i dostiže minimum na oko 3.5 Td. Nakon minimuma ova komponenta se povećava, postajući ponovo pozitivna na oko 10 Td i dostižući lokalni maksimum na oko 21 Td. U ovom opsegu polja Q_{xxz} komponenta opada, postajući negativna na oko 7.7 Td i dostižući lokalni minimum na oko 21 Td. Može se zapaziti da Q_{xxz} komponenta postaje negativna na otprilike istoj vrednosti polja na kojoj Q_{zxx} komponenta postaje pozitivna, kao i da apsolutne vrednosti ove dve komponente TTIII dostižu lokalni maksimum na istoj vrednosti polja (na oko 21 Td). Na poljima višim od 21 Td se Q_{zzz} komponenta povećava do oko 46 Td, posle čega opada do oko 500 Td. Pri tome Q_{zxx} komponenta monotono opada u ovom opsegu polja, dok se Q_{xxz} povećava postajući pozitivna na oko 100 Td, posle čega se povećava sporo, sa porastom E/n_0 .

Kvalitativni trend ponašanja longitudinalne komponente TTIII je sličan za elektrone u CF_4 i C_3F_8 . Naime, longitudinalna komponenta TTIII se nakon uskog opsega saturacije ponovo naglo povećava u opsegu polja od 29 Td do 210 Td za elektrone u CF_4 i od 170 Td do 400 Td za elektrone u C_3F_8 . Na kraju ovih opsega polja vrednosti Q_{zzz} u CF_4 i C_3F_8 dostižu lokalne maksimume, posle čega monotono opadaju sa porastom polja. Apsolutne vrednosti vandijagonalnih komponenti TTIII u CF_4 monotono opadaju posle drugog lokalnog maksimuma do oko 130 Td. Međutim, na poljima višim od 100 Td se Q_{xxz} i Q_{zxx} blago povećavaju sa porastom E/n_0 . Za elektrone u C_3F_8 apsolutne vrednosti Q_{xxz} i Q_{zxx} opadaju posle drugog lokalnog maksimuma na 77 Td, dostižući lokalni minimum na oko 150 Td. Na višim poljima se apsolutne vrednosti ove dve komponente TTIII ponovo povećavaju, dosežući još jedan lokalni maksimum na oko 350 Td i 300 Td za Q_{xxz} i Q_{zxx} , respektivno. Nakon ovog lokalnog maksimuma apsolutne vrednosti Q_{xxz} i Q_{zxx} monotono opadaju sa porastom E/n_0 do kraja razmatranog opsega polja.

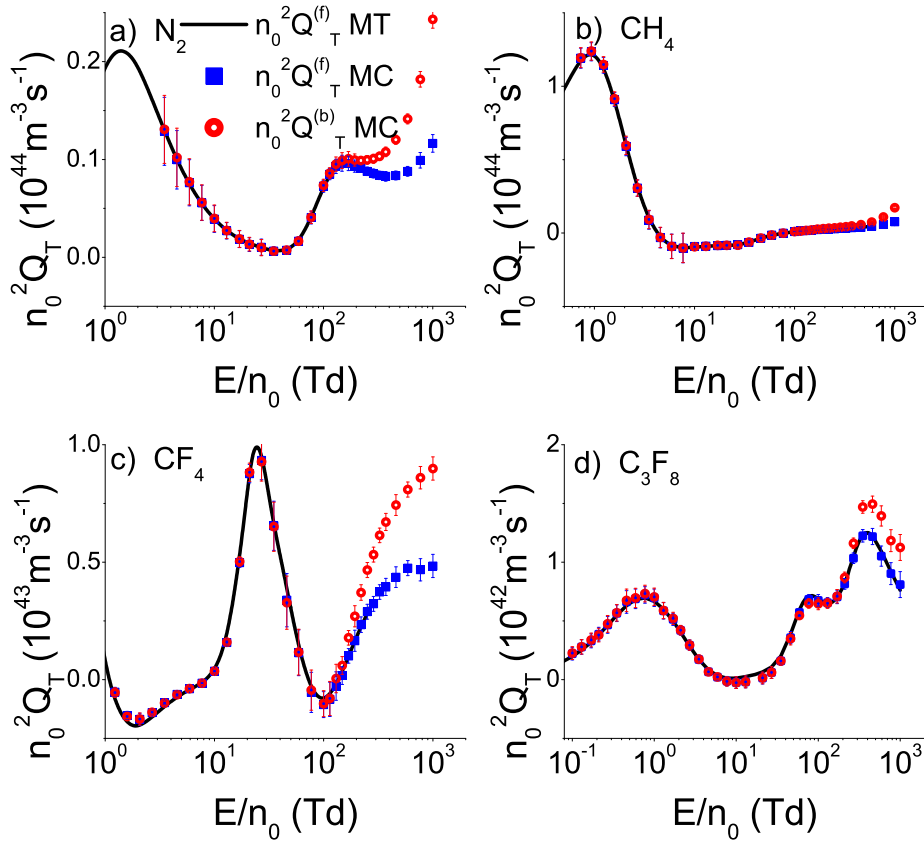
Za elektrone u N_2 je Q_{zxx} komponenta negativna u celom opsegu polja. Ovo je posledica povećanja preseka za transfer impulsa sa porastom energije do 2.8 eV i povećanja preseka za druge sudarne procese na višim energijama. Apsolutne vrednosti sve tri komponente TTIII se monotono povećavaju sa porastom E/n_0 do oko 1.3 Td, gde dostižu lokalni maksimum. U ovom opsegu polja srednja energija ima vrednosti u intervalu od 0.038 eV do 0.48 eV, pri čemu je porast srednje energije sa porastom E/n_0 praktično linearan na poljima višim od 0.077 Td. Sve tri komponente TTIII se, po apsolutnoj vrednosti, povećavaju sa porastom E/n_0 u ovom opsegu polja uprkos tome što na sredini ovog opsega (na oko 0.35 Td) elektroni čija je energija oko dva puta veća od srednje energije mogu da učestvuju u vibracionim ekscitacijama (prag za prvu vibracionu ekscitaciju je 0.29 eV). Ovo je posledica toga što su preseki za vibracione ekscitacije manji od 0.1 angstroma do 1.5 eV, pa većina elektrona u ovom opsegu polja ima malu kolizionu frekvencu za vibracione ekscitacije. Za vrednosti redukovano električnog polja između 1.3 Td i 46 Td apsolutne vrednosti sve tri komponente TTIII monotono opadaju sa porastom E/n_0 . Primećuje se da se upravo u ovom opsegu polja porast srednje energije sa porastom E/n_0 značajno usporava, pri srednjoj energiji elektrona između 0.48 eV i 1.15 eV za E/n_0 između 1.3 Td i 46 Td. Ovo znači da se elektroni čija je energija oko tri puta veća od srednje energije nalaze u energijskom intervalu u kome su preseki za vibracione ekscitacije najintenziviji. To dovodi do opadanja apsolutnih vrednosti komponenti TTIII i do usporavanja porasta srednje energije sa porastom E/n_0 u ovom opsegu polja. Apsolutne vrednosti sve tri komponente TTIII se monotono povećavaju sa porastom E/n_0 od 46 Td do oko 170 Td. Srednja energija se raste sa 1.15 eV na 46 Td do 4.37 eV na 170 Td, pri čemu je povećanje srednje energije sa porastom E/n_0 znatno brže nego na nižim poljima. U ovom E/n_0 opsegu, elektroni čija je energija bar 3.5 puta veća od srednje energije nalaze se u energijskoj oblasti u kojoj su preseki za vibracione ekscitacije manji od 0.1 angstroma i u kojoj presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima opada sa porastom energije. Ovo dovodi do povećanja apsolutnih vrednosti sve tri komponente TTIII i do bržeg porasta srednje energije sa porastom E/n_0 u ovom opsegu polja. Za E/n_0 veće od 170 Td apsolutne vrednosti sve tri komponente TTIII opadaju sa porastom E/n_0 , uz šta se porast srednje energije sa porastom E/n_0 usporava. U ovom opsegu polja je srednja energija

elektrona između 4.37 eV i 7.44 eV, pa elektroni čija je energija oko 1.5 puta veća od srednje energije mogu da učestvuju u elektronskim ekscitacijama (prag za prvu elektronsku ekscitaciju u N_2 je 6.17 eV), što dovodi do opadanja apsolutnih vrednosti sve tri komponente TTIII.



Slika 58: Fluks i balk vrednosti longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda $n_0^2 Q_L$ za elektrone u N_2 , CH_4 , CF_4 i C_3F_8 . Na ovom grafiku su prikazani rezultati koji su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine i Monte Carlo simulacija.

Na slikama 58 i 59 su prikazane fluks i balk vrednosti longitudinalne $n_0^2 Q_L$ i transverzalne $n_0^2 Q_T$ komponente transportnog tenzora trećeg reda, respektivno. Fluks vrednosti TKIII su određene primenom momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine i Monte Carlo simulacija, dok su balk vrednosti ove komponente utvrđene primenom Monte Carlo simulacija. Sa grafika se vidi da se vrednosti fluks TKIII koje su dobijene primenom momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine jako dobro slažu sa rezultatima Monte Carlo simulacija. Dobro slaganje rezultata koji su dobijeni primenom ove dve nezavisne metode potvrđuje validnost procedura za izračunavanje komponenti TTIII u korišćenim kompjuterskim kodovima. Važno je naglasiti da je na niskim poljima, na kojima je srednja energija uporediva sa termalnom energijom, neophodno uzeti u obzir termalno kretanje molekula pozadinskog gasa u Monte Carlo simulacijama da bi se dobilo slaganje sa rezultatima numeričkog rešavanja Boltzmann-ove jednačine. Ovo je naročito izraženo za elektrone u CF_4 i C_3F_8 , zbog toga što je srednja energija praktično termalna do oko $5 \cdot 10^{-2}$ Td u CF_4 i do oko $2 \cdot 10^{-1}$ Td u C_3F_8 . Na primer, ako se pri proračunu komponenti TTIII za elektrone u CF_4 na osnovu Monte Carlo simulacija primeni aproksimacija hladnog gasa, dobijene vrednosti $n_0^2 Q_L$ i $n_0^2 Q_T$ odstupaju za

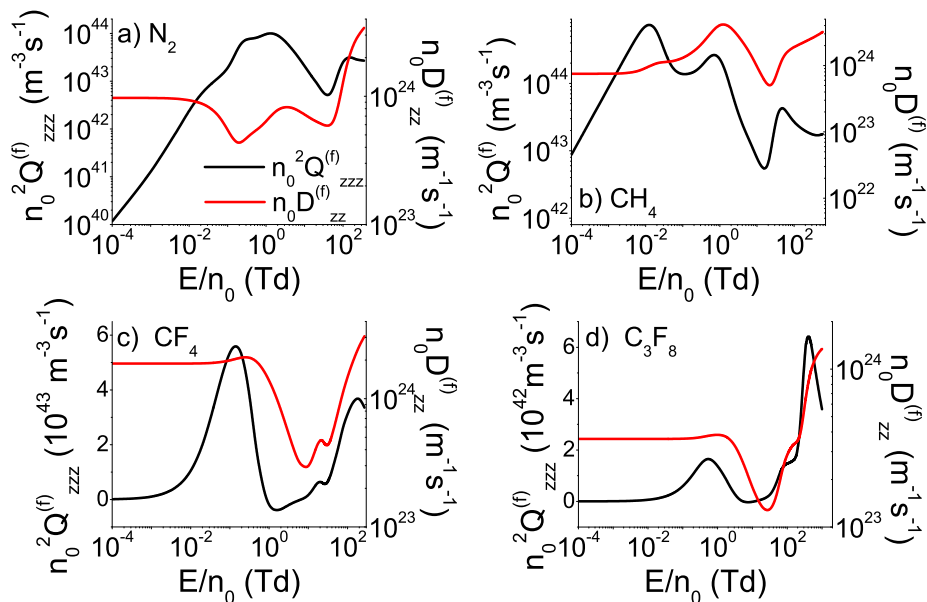


Slika 59: Fluks i balk vrednosti transverzalne komponente transportnog tenzora trećeg reda $n_0^2 Q_T$ za elektrone u N_2 , CH_4 , CF_4 i C_3F_8 . Na ovom grafiku su prikazani rezultati koji su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine i Monte Carlo simulacija.

više od 50% od odgovarajućih vrednosti određenih na osnovu momentnog metoda za rešavanje Boltzmann-ove jednačine, u opsegu polja u kome su komponente TTIII negativne. U ovom opsegu polja je srednja energija elektrona samo oko dva puta veća od termalne energije, te termalno kretanje molekula pozadinskog gasa značajno utiče na rasejanje elektrona.

Fluks i balk profili TKIII imaju istu kvalitativnu zavisnost od E/n_0 u sva četiri gasa u celom razmatranom E/n_0 opsegu. Važi uz to da su za elektrone u N_2 , CH_4 i C_3F_8 fluks i balk vrednosti jednake do visokih polja, na kojima elektroni imaju dovoljno energije da jonizuju molekule pozadinskog gasa. No za elektrone u CF_4 je balk longitudinalna komponenta TTIII manja od fluks komponente u opsegu polja između 27 Td i 59 Td, ali ova razlika pripada okviru statističke nesigurnosti Monte Carlo simulacija. Ova razlika bi mogla biti posledica zahvata elektrona u CF_4 . Naime, u ovom opsegu polja je srednja energija elektrona između 1 eV i 3.2 eV, pri čemu prag za zahvat elektrona u CF_4 iznosi 6.399 eV, uz šta presek za zahvat dostiže maksimum na oko 7.4 eV. Tako u ovom opsegu polja u zahvatu učestvuju najenergičniji elektroni, čija je energija između 6.4 i 2 puta veća od srednje energije, pa ovo može dovesti do smanjenja iskrivljenosti prostornog profila roja u pozitivnom ($q\mathbf{E}$) smeru, pod uticajem eksplicitnih efekata zahvata elektrona, slično kao u Ness-Robson-ovom modelu hlađenja zahvatom elektrona (videti potpoglavlje 4.8.2). Na poljima višim od 130 Td, 350 Td, 77 Td i 400 Td, za elektrone u

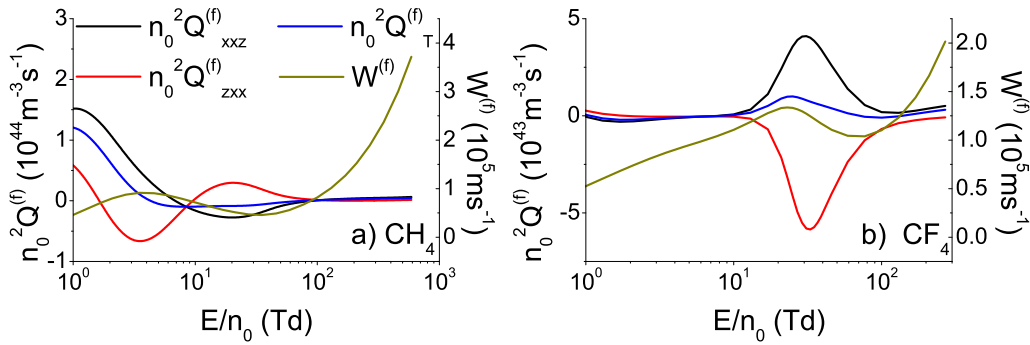
N_2 , CH_4 , CF_4 i C_3F_8 , respektivno su balk vrednosti $n_0^2 Q_L$ i $n_0^2 Q_T$ veće od odgovarajućih fluks vrednosti. Ovo je posledica eksplicitnih efekata jonizacije. Pošto se energija elektrona povećava u smeru kretanja roja, na frontu roja postoji veći broj visokoenergijskih elektrona koji mogu da učestvuju u jonizaciji, nego na začelju roja. Zbog toga elektroni dominantno nastaju na frontu roja, a ovo dovodi do većeg krivljenja roja u pozitivnom ($q\mathbf{E}$) smeru i do bržeg transversalnog širenja u okolini fronta, pa su balk vrednosti $n_0^2 Q_L$ i $n_0^2 Q_T$ veće od odgovarajućih fluks vrednosti na visokim poljima.



Slika 60: Korelacija longitudinalne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda $n_0^2 Q_L^{(f)}$ i fluks longitudinalne difuzije $n_0 D_L^{(f)}$ za rojeve elektrona u N_2 , CH_4 , CF_4 i C_3F_8 . Rezultati su dobijeni na osnovu metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

Na slici 60 dati su profili zavisnosti $n_0^2 Q_L^{(f)}$ i $n_0 D_L^{(f)}$ od E/n_0 za elektrone u N_2 , CH_4 , CF_4 i C_3F_8 . Na niskim poljima (do oko 0.21 Td, 0.0027 Td, 0.017 Td i 0.077 Td u N_2 , CH_4 , CF_4 i C_3F_8 , respektivno) se $n_0^2 Q_L^{(f)}$ povećava sa porastom E/n_0 bez obzira na trend ponašanja $n_0 D_L^{(f)}$. Ovo je posledica toga što $n_0^2 Q_L^{(f)}$ reprezentuje usmereno kretanje i teži nuli u limesu niskih polja, za razliku od $n_0 D_L^{(f)}$ koje teži termalnoj vrednosti. Na višim poljima su profili zavisnosti $n_0^2 Q_L^{(f)}$ i $n_0 D_L^{(f)}$ od E/n_0 snažno koreliisani. Zapravo, $n_0^2 Q_L^{(f)}$ se povećava sa porastom E/n_0 u opsegu polja u kome se $n_0 D_L^{(f)}$ ubzano povećava (kao konveksna funkcija), dok opada u opsegu polja u kome $n_0 D_L^{(f)}$ opada, ili se povećava usporeno (kao konkavna funkcija) (videti potpoglavlje 5.2). Pored toga, u okolini lokalnih minimuma i maksimuma $n_0 D_L^{(f)}$ nalaze se odgovarajući lokalni minimumi i maksimumi $n_0^2 Q_L^{(f)}$. Potrebno je ipak naglasiti da promene trenda ponašanja $n_0^2 Q_L^{(f)}$ pri porastu E/n_0 nekada prednjače u odnosu na odgovarajuće promene $n_0 D_L^{(f)}$. U slučaju opadanja $n_0^2 Q_L^{(f)}$ i $n_0 D_L^{(f)}$ sa porastom E/n_0 je ovo očekivano i može se pripisati većoj osetljivosti TKIII na otpor koji sudari sa molekulima pozadinskog gasa pružaju širenju elektrona. Pri okolnostima porasta $n_0^2 Q_L^{(f)}$ i $n_0 D_L^{(f)}$ bi ovo moglo biti posledica veće osetljivosti TKIII na dinamiku visokoenergijskih elektrona. Za elektrone u CF_4 i C_3F_8 , $n_0^2 Q_L^{(f)}$ dostiže lokalni minimum i počinje da se povećava sa porastom E/n_0 znatno ranije nego $n_0 D_L^{(f)}$,

u opsegu polja u kome $n_0^2 Q_L^{(f)}$ ima negativne vrednosti (od 0.77 Td do 7.7 Td za elektrone u CF_4 i od 4.6 Td do 13 Td za elektrone u C_3F_8). Za elektrone u CF_4 , $n_0^2 Q_L^{(f)}$ dostiže lokalni minimum na oko 1.7 Td dok $n_0 D_L^{(f)}$ dostiže lokalni minimum na oko 10 Td. Slično tome, za elektrone u C_3F_8 $n_0^2 Q_L^{(f)}$ dostiže lokalni minimum na oko 7.7 Td, dok $n_0 D_L^{(f)}$ dostiže lokalni minimum na oko 27 Td. U oba slučaja $n_0^2 Q_L^{(f)}$ postane pozitivno malo pre nego što $n_0 D_L^{(f)}$ dostigne lokalni minimum (na oko 7.7 Td i oko 13 Td za elektrone u CF_4 i C_3D_8 , respektivno). Porast $n_0^2 Q_L^{(f)}$ sa porastom E/n_0 u opsegu polja u kome je $n_0^2 Q_L^{(f)}$ negativno a $n_0 D_L^{(f)}$ opada može se pripisati tome što je $n_0^2 Q_L^{(f)}$ negativno samo kada su sudari dovoljno intenzivni da izazovu krivljenje profila roja u negativnom ($-q\mathbf{E}$) smeru. Pritom je za dalje opadanje $n_0^2 Q_L^{(f)}$ neophodno da se ovo krivljenje dodatno pojačava pod dejstvom sudara. To znači da su u opsegu polja u kome se $n_0^2 Q_L^{(f)}$ počne povećavati znatno pre $n_0 D_L^{(f)}$ sudari dovoljno intenzivni da dovedu do dodatnog opadanja $n_0 D_L^{(f)}$, ali nisu dovoljno intenzivni da pojačaju krivljenje roja u negativnom smeru, pri čemu se sa porastom E/n_0 pojačava efekat sile koji teži da iskrivi roj u pozitivnom ($q\mathbf{E}$) smeru. Zbog toga $n_0^2 Q_L^{(f)}$ dostiže lokalni minimum i počinje se povećavati sa porastom E/n_0 znatno pre $n_0 D_L^{(f)}$ u opsegu polja u kome je $n_0^2 Q_L^{(f)}$ negativno.



Slika 61: $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$, $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$, $n_0^2 Q_T^{(f)}$ komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda i fluks brzina drifta $W^{(f)}$ u funkciji E/n_0 za rojeve elektrona u CH_4 i CF_4 . Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

Na slici 61 su prikazani profili zavisnosti $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$, $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$, $n_0^2 Q_T^{(f)}$ i $W^{(f)}$ od E/n_0 za elektrone u CH_4 i CF_4 . Vidi se da $n_0^2 Q_T^{(f)}$ postaje negativno za elektrone u CH_4 , negde na početku NDC oblasti (na oko 4.6 Td) i da ponovo biva pozitivno posle NDC oblasti, ali pre nego što brzina drifta dostigne vrednost koju je imala pre početka NDC-a (negde na oko 100 Td). Pri tome za elektrone u CH_4 , $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ opadaju sa porastom E/n_0 i pre početka NDC-a. Međutim, $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ dostiže lokalni minimum i promeni trend ponašanja baš u okolini polja na kome počinje NDC (na oko 3.5 Td), dok $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ postaje negativna malo posle početka NDC-a (na oko 7.7 Td). Za elektrone u CH_4 NDC se završava na oko 35 Td, dok apsolutne vrednosti $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ dostignu lokalne maksimume na oko 21 Td, posle čega promene trend ponašanja.

Trendovi ponašanja $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$, $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_T^{(f)}$ su drugačiji u okolini NDC-a za elektrone u CF_4 . U CF_4 se $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$, $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_T^{(f)}$ povećavaju po apsolutnoj vrednosti pre početka NDC-a. NDC počinje na oko 23 Td, a apsolutne vrednosti $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$, $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_T^{(f)}$ dostižu lokalne maksimume na 31 Td, 33 Td i 25 Td, respektivno. Ovo znači da $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$, $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_T^{(f)}$ počinju

da opadaju, po apsolutnoj vrednosti malo posle početka NDC-a. NDC se za elektrone u CF_4 završava na oko 77 Td, uz šta $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ nastavlja da opada po apsolutnoj vrednosti do kraja razmatranog opsega, dok $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ se počinje povećavati malo posle 130 Td, na nešto nižem redukovanom električnom polju od polja na kome brzina drifta dostigne svoju vrednost pre NDC-a. Za elektrone u CF_4 $n_0^2 Q_T^{(f)}$ postane negativno u uskom opsegu polja (između 59 Td i 130 Td) koji se završava u okolini polja na kome se $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ počinje povećavati sa porastom E/n_0 . U CH_4 $n_0^2 Q_T^{(f)}$ ima negativne vrednosti u opsegu NDC-a i malo posle ovog opsega, dok je u CF_4 $n_0^2 Q_T^{(f)}$ negativno u uskom opsegu polja nakon NDC-a, ali pre nego što $W^{(f)}$ dostigne vrednost od pre pocetka NDC-a. Ipak se na osnovu rezultata u ova dva gasa ne može reći da postoji generalna korelacija u trendovima zavisnosti vandijagonalnih komponenti TTIII i $W^{(f)}$ od E/n_0 jer su profili zavisnosti ovih komponenti jako različiti u okolini NDC-a u CH_4 i CF_4 . Jedna zajednička karakteristika profila komponenti TTIII u oblasti NDC-a u ova dva gasa je to što $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta promeni trend ponašanja u okolini polja na kome počinje NDC.

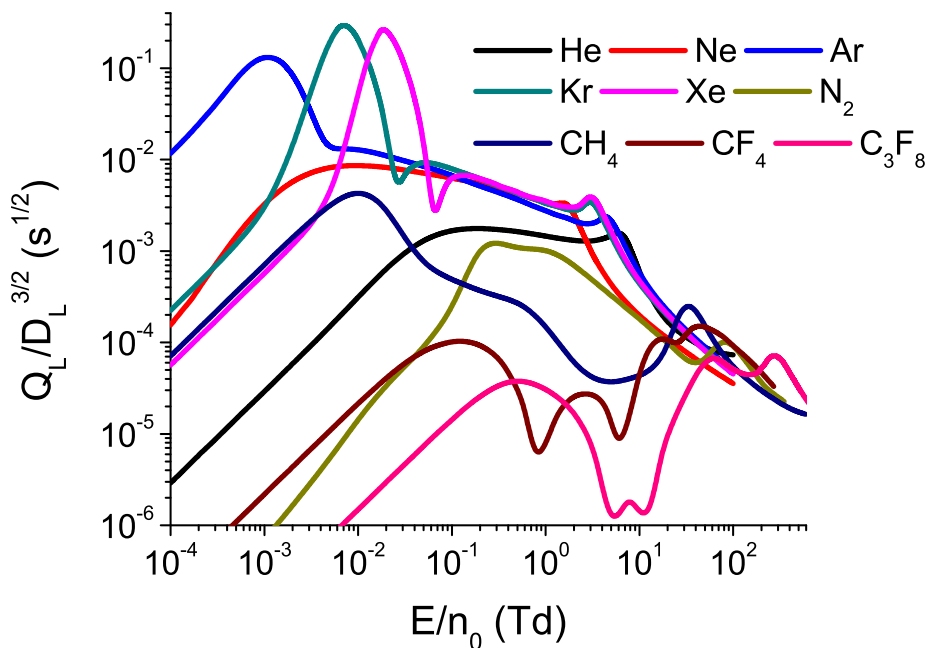
5.6 Praktična razmatranja značajna za eksperimentalno određivanje transportnih koeficijenata trećeg reda

U literaturi se može naći nekoliko pokušaja da se izmere transportni koeficijenti trećeg reda za rojeve naelektrisanih čestica u gasovima [128–130]. Međutim, rezultati ovih eksperimenata su pokazivali snažnu zavisnost od pritiska, koja ukazuje na prisustvo nehidrodinamičkih efekata, što je ove rezultate učinilo nepouzdanim. Kasnije je utvrđeno da se zavisnost od pritiska može pripisati difuzionom hlađenju roja kroz gubitak najenergičnijih čestica na bočnim zidovima komore [126].

Kao što je izloženo u potpoglavlju 4.2, doprinos transportnih koeficijenata trećeg reda prostornom profilu roja povećava se sa smanjenjem koncentracije pozadinskog gasa n_0 . Međutim, smanjenje n_0 dovodi do sporije prostorne relaksacije roja i većeg širenja duž transverzalnog pravca usled bočne difuzije, koje može dovesti do promene energijske raspodele naelektrisanih čestica roja za vreme trajanja eksperimenta. Zbog toga se transportni koeficijenti trećeg reda mogu izmeriti samo u jako velikim komorama pri niskoj koncentraciji pozadinskog gasa. Povećanje zapremine komore kroz koju se kreće roj daje više vremena za relaksaciju srednje energije roja i smanjuje gubitke naelektrisanih čestica kroz bočnu difuziju, ali povećava cenu eksperimenta. Zbog toga je poželjno utvrditi koliki je doprinos transportnih koeficijenata trećeg reda prostornom profilu roja za elektrone u različitim gasovima i pri različitim vrednostima n_0 , ne bi li se utvrdili uslovi u kojima se ovi transportni koeficijenti mogu najefikasnije izmeriti.

U ovom potpoglavlju su izračunate vrednosti količnika $Q_L/D_L^{3/2}$ za elektrone u devet gasova u širokom opsegu redukovano električnog polja, s obzirom na to što je doprinos longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda prostornom profilu roja direktno srazmeran vrednosti ovog količnika. Pored toga je razmatrana osetljivost transportnih koeficijenata trećeg reda na trojni zahvat elektrona u molekularnom kiseoniku, zbog toga što prisustvo ovog procesa dovodi do zavisnosti komponenti tenzora $n_0^2 \hat{Q}$ od koncentracije čestica pozadinskog gasa.

Vrednosti $Q_L/D_L^{3/2}$ koje su određene u okviru ove disertacije su prikazane na grafiku 62. One su izračunate pri koncentraciji čestica pozadinskog gasa od $n_0 = 3.54 \cdot 10^{22} m^{-3}$. Kao što je zaključeno u potpoglavlju 4.2, količnik $Q_L/D_L^{3/2}$ se pri promeni koncentracije čestica pozadinskog gasa skalira kao $\frac{1}{\sqrt{n_0}}$, te se na osnovu ovih rezultata može odrediti doprinos transportnih koeficijenata trećeg reda prostornom profilu roja i na drugim vrednostima n_0 .

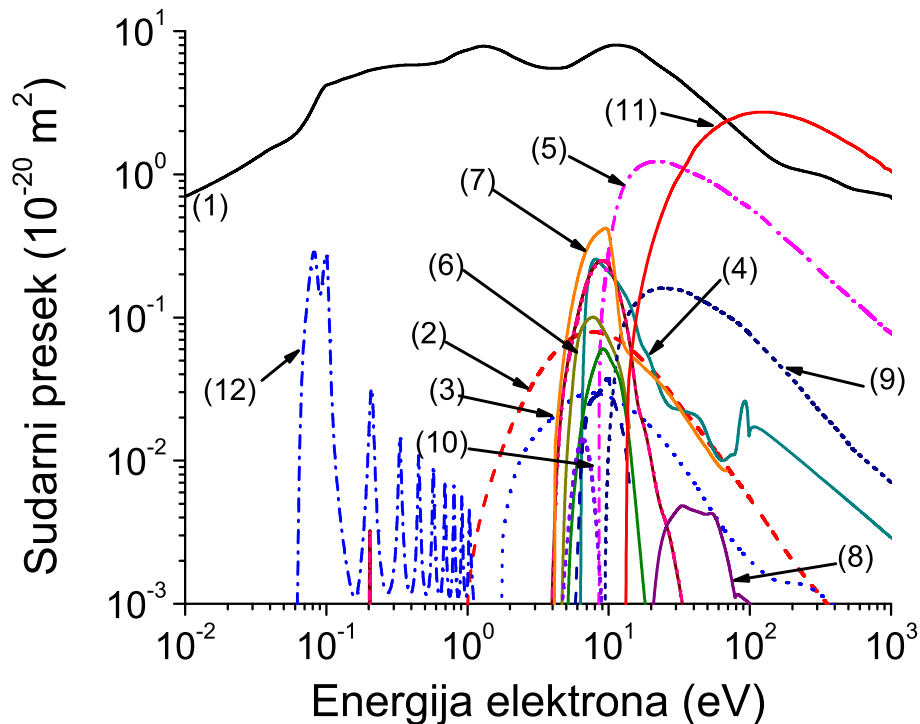


Slika 62: Količnik $Q_L/D_L^{3/2}$ u funkciji E/n_0 za rojeve elektrona u He, Ne, Ar, Kr, Xe, N_2 , CH_4 , CF_4 i C_3F_8 . Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine, pri koncentraciji čestica pozadinskog gasa od $n_0 = 3.54 \cdot 10^{22} m^{-3}$.

Na slici 62 se može videti da se u svim razmatranim gasovima $Q_L/D_L^{3/2}$ na najnižim poljima monotono povećava sa porastom E/n_0 i da monotono opada sa porastom E/n_0 na poljima višim od 300 Td, dok između 10^{-4} Td i 300 Td $Q_L/D_L^{3/2}$ može imati nekoliko lokalnih minimuma i lokalnih maksimuma. Količnik $Q_L/D_L^{3/2}$ ima najvišu vrednosti u okolini prvog lokalnog maksimuma za elektrone u Ar, Kr i Xe na niskim poljima. Prvi lokalni maksimum $Q_L/D_L^{3/2}$ se nalazi na 10^{-3} Td, $7 \cdot 10^{-3}$ Td i $2 \cdot 10^{-2}$ Td za elektrone u Ar, Kr i Xe respektivno. U sva tri gasa je vrednost redukovanoeg električnog polja na kojoj $Q_L/D_L^{3/2}$ dostiže prvi lokalni maksimum oko dva puta niža od vrednosti polja na kojoj Q_L dostiže lokalni maksimum. Ovo je razumljivo budući da količnik $Q_L/D_L^{3/2}$ dostiže prvi lokalni maksimum na vrednosti polja na kojoj je došlo do značajnog porasta Q_L , ali se longitudinalna komponenta difuzionog tenzora nije previše povećala u odnosu na njenu termalnu vrednost.

Na osnovu slike 62 može se proceniti u kom gasu i za koje vrednosti E/n_0 je najlakše da longitudinalna komponenta TTIII bude eksperimentalno određena. Pošto su vrednosti količnika $Q_L/D_L^{3/2}$ u okolini prvog lokalnog maskimuma u argonu, kriptonu i ksenonu znatno veće od vrednosti ovog količnika za ostale gasove u celom razmatranom opsegu polja, longitudinalna komponenta TTIII može najlakše da bude izmerena u ova tri gasa u okolini polja na kojima $Q_L/D_L^{3/2}$ dostiže prvi lokalni maksimum.

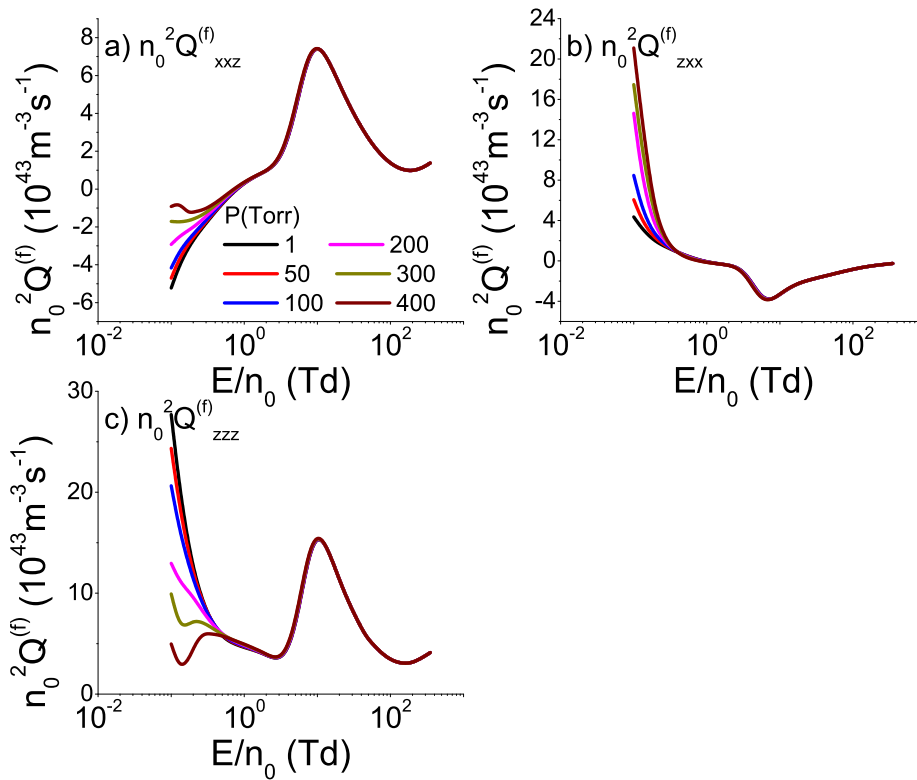
Da bi se ispitali dodatni efekti koji mogu dovesti do zavisnosti rezultata eksperimenta dizajniranih za određivanje TKIII od koncentracije pozadinskog gasa, u ovom potpoglavlju je ispitivan uticaj elementarnih sudarnih procesa, čija je učestanost zavisna od gustine gasa, na TKIII. Kao primer ovog fenomena izabran je uticaj trojnog zahvata (eng. *three body attachment*) elektrona u kiseoniku na transportne koeficijente trećeg reda. Set preseka koji je korišćen za proračune u kiseoniku je prikazan u radu [208] i na slici 63.



Slika 63: Set preseka za rasejanje elektrona u O_2 : (1) transfer impulsa u elastičnim sudarima, (2) $a^1\Delta_g$, (3) Q_p , (4) $A^3\Sigma_u^+$, (5) $B^3\Sigma_u$, (6) $c^1\Sigma_u$ i $C^3\Delta_u$, (7) $Q_{vib}(\Sigma)$, (8) $b^1\Sigma_g^+$, (9) više elektronske ekscitacije, (10) zahvat elektrona, (11) jonizacija i (12) trojni zahvat elektrona na pritisku od 760 Torr i temperaturi od 293 K.

Slika 64 predstavlja profile zavisnosti $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$, $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponenti od E/n_0 za elektrone u kiseoniku, za nekoliko vrednosti pritiska. Ovi rezultati su dobijeni primenom momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

Kvalitativni trendovi zavisnosti TKIII od E/n_0 u O_2 su isti za sve vrednosti pritiska (sa izuzetkom longitudinalne komponente TIII na najnižim poljima, za najviše vrednosti pritiska). Na najnižim poljima (u razmatranom opsegu) $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponente su pozitivne, dok je $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponenta negativna. Uz to, $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponente monotonno opadaju sa porastom E/n_0 , dok se $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponenta monotonno povećava do oko 2.7 Td. Pri tome vandiagonalne komponente $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ menjaju znak na oko 1 Td. Na poljima višim od 2.7 Td $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponente se naglo povećavaju sa porastom E/n_0 do oko 10 Td, gde dostižu lokalni maksimum, a $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta naglo opada do oko 7.7 Td, gde dostiže lokalni minimum. Nakon 10 Td apsolutna vrednost $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponente monotonno opada sa porastom E/n_0 do kraja razmatranog opsega, dok naporedo $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponente monotonno opadaju



Slika 64: $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$, $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda u funkciji E/n_0 i pritiska pozadinskog gasa za elektrone u O_2 . Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

do oko 170 Td, gde dostižu lokalni minimum, nakon čega se povećavaju do kraja razmatranog opsega polja (do 350 Td).

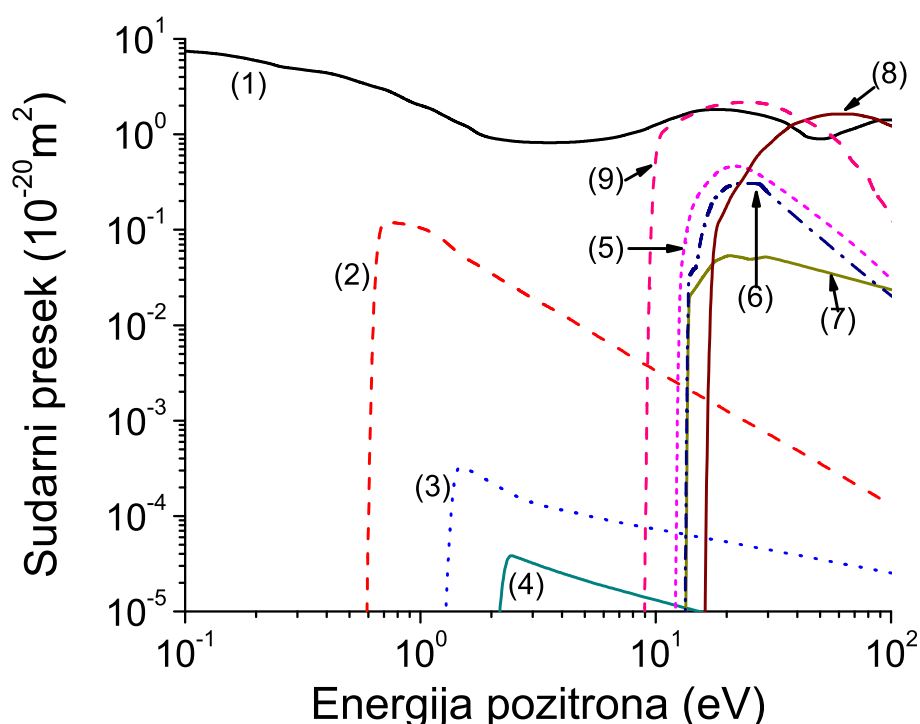
Profili sve tri komponente TIII snažno zavise od pritiska na niskim poljima zbog uticaja trojnog zahvata elektrona, dok je ova zavisnost zanemarljiva na visokim poljima zbog malog intenziteta preseka za trojni zahvat na visokim energijama. Longitudinalna komponenta TIII opada sa porastom pritiska na poljima nižim od 0.59 Td. U profilu zavisnosti ove komponente od E/n_0 uz to postoji još jedan lokalni minimum na oko 0.13 Td za vrednosti pritiska veće od 200 Torr. Opadanje $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponente sa porastom pritiska na niskim poljima i pojava dodatnog lokalnog minimuma jesu posledice hlađenja roja trojnim zahvatom elektrona. U opsegu polja između 0.59 Td i 2.7 Td $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponenta se povećava sa porastom pritiska, ali je ovaj efekat jako slab. Porast $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponente sa porastom pritiska u ovom opsegu polja može se pripisati grejanju roja trojnim zahvatom elektrona.

Apsolutna vrednost $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponente opada sa porastom pritiska u opsegu polja do oko 0.77 Td. Pri tome apsolutna vrednost ove komponente ima dodatni lokalni minimum na oko 0.13 Td za vrednosti pritiska veće od 300 Torr. U opsegu polja između 0.1 Td i 0.35 Td $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta se povećava sa porastom pritiska. Na poljima višim od 1 Td je zavisnost sve tri komponente TIII od pritiska praktično zanemarljiva.

5.7 Transportni koeficijenti trećeg reda za pozitrone u molekularnim gasovima

5.7.1 Preliminarije

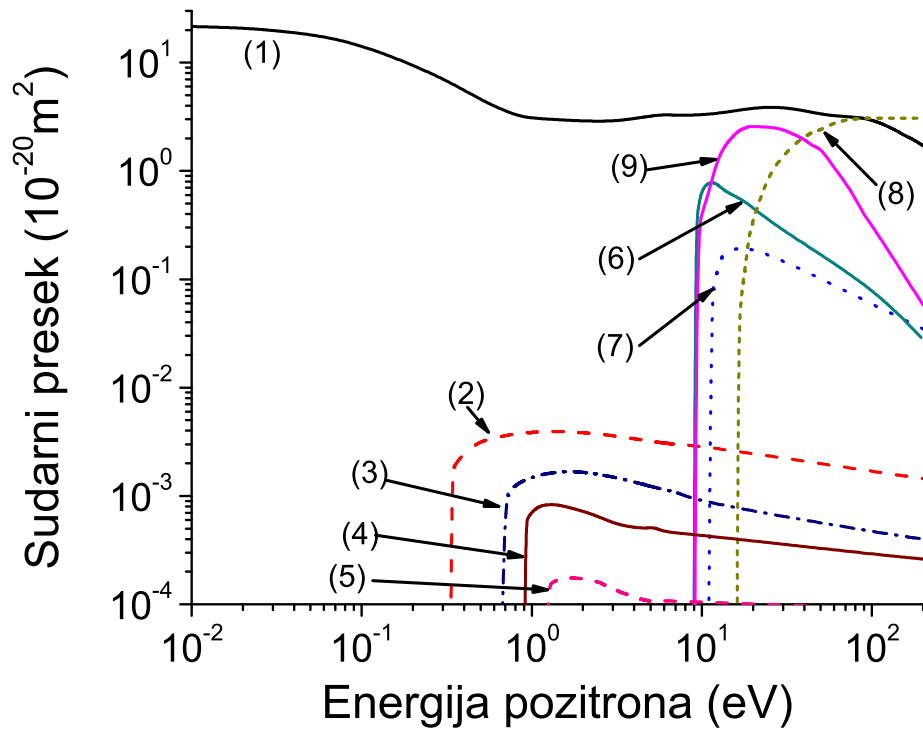
Na slikama 6.7.1.1, 6.7.1.2. i 6.7.1.3. prikazani su setovi preseka za rasejanje pozitrona u H_2 , N_2 i CF_4 , respektivno, koji su korišćeni u našim proračunima. Oni su razvijeni u našoj laboratoriji na osnovu eksperimentalno određenih i teorijski izračunatih preseka za pojedinačne sudarne procese, koji su preuzeti iz literature. Setovi preseka za rasejanje pozitrona u H_2 , N_2 i CF_4 su detaljno tumačeni u radovima [154], [209, 210] i [155], respektivno.



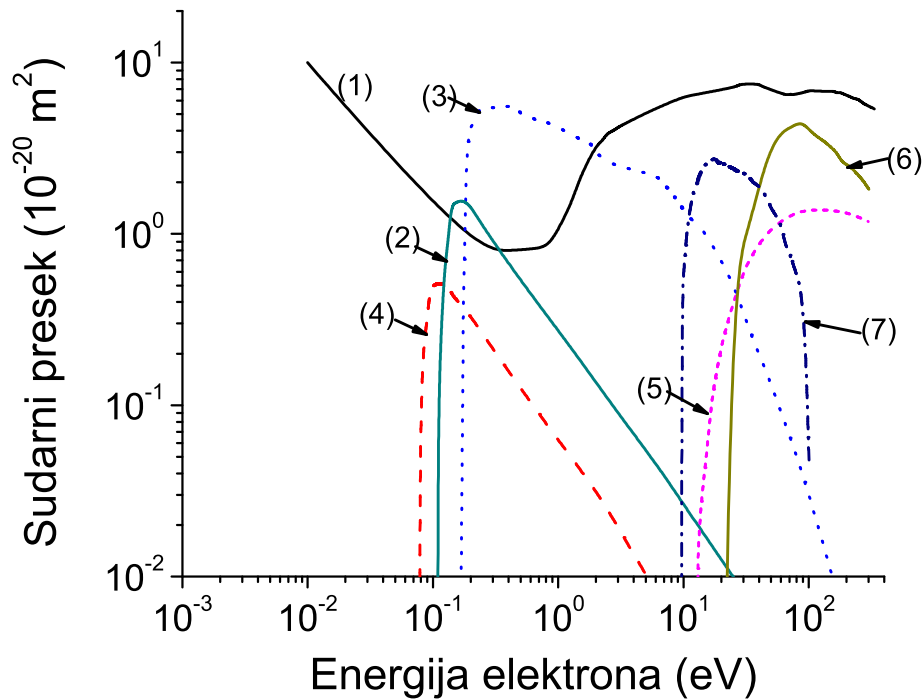
Slika 65: Set preseka za rasejanje pozitrona u H_2 : (1) transfer impulsa u elastičnim sudarima, vibracione ekscitacije (2) v_1 , (3) 0-2, (4) 0-3, elektronske ekscitacije (5) $B1 \Sigma$, (6) X-C, (7) X-E, (8) jonizacija i (9) formiranje pozitronijuma.

Pozitronijum je vezano stanje elektrona i pozitrona [212–214]. Ako su spinovi elektrona i pozitrona antiparalelni/paralelni, ovo stanje se zove parapozitronijum/ortopozitronijum [215–219]. Ono je nestabilno i završava se anihilacijom elektrona i pozitrona [212]. Srednje vreme života pozitronijuma iznosi oko 0.125 ns i 142 ns u slučaju parapozitronijuma i ortopozitronijuma, respektivno [216, 219]. U energijskom opsegu koji je relevantan za naše proračune presek za formiranje pozitronijuma je znatno veći od preseka za direktnu anihilaciju elektrona i pozitrona, te je u našem slučaju formiranje pozitronijuma glavni mehanizam za gubitak pozitrona.

Značajna razlika između rojeva elektrona i rojeva pozitrona, koji se kreću u nekoj materijalnoj sredini, jeste ta što se na dovoljno visokim energijama elektroni koji su izgubljeni u

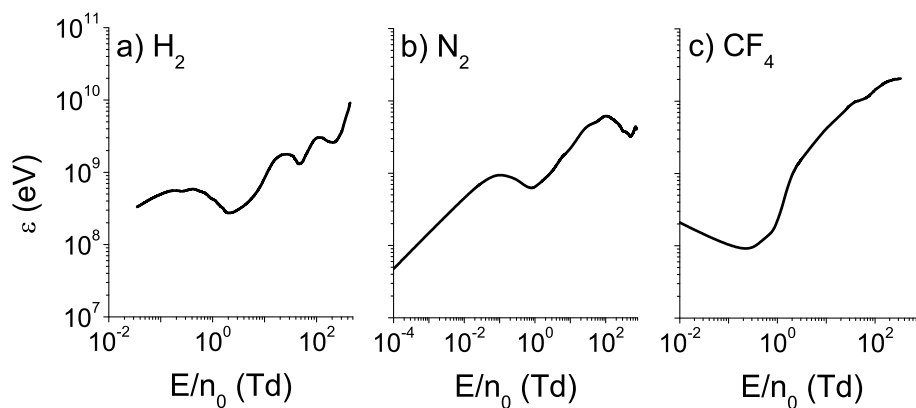


Slika 66: Set preseka za rasejanje pozitrona u N_2 : (1) transfer impulsa u elastičnim sudarima, vibracione ekscitacije (2) 0-1, (3) 0-2, (4) 0-3, (5) 0-4, elektronske ekscitacije (6) $a^1\Pi$, (7) $a^1\Sigma$, (8) jonizacija i (9) formiranje pozitronijuma.



Slika 67: Set preseka za rasejanje pozitrona u CF_4 : (1) transfer impulsa u elastičnim sudarima, vibracione ekscitacije (2) ν_1 , (3) ν_3 , (4) ν_4 , (5) disocijacija, (6) jonizacija i (7) formiranje pozitronijuma.

elektronskom zahvatu (ili nekom drugom procesu) mogu nadoknaditi uz pomoć elektronske sudarne jonizacije atoma ili molekula pozadinske sredine, dok se pozitroni koji su izgubljeni u



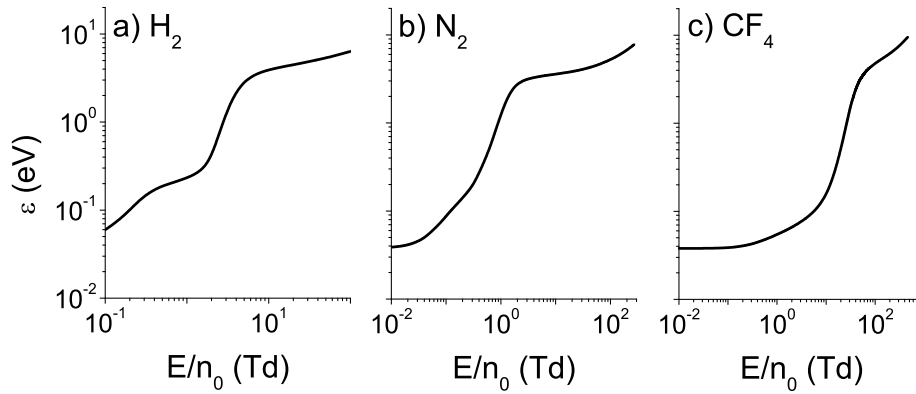
Slika 68: Kolizione frekvence za elastične sudare za pozitrone u H_2 , N_2 i CF_4 , pri koncentraciji pozadinskih molekula koja iznosi $n_0 = 3.54 \cdot 10^{22} \text{m}^{-3}$.

formiranju pozitronijuma ili anihilaciji ne mogu nadoknaditi na osnovu interakcije pozitrona i pozadinske sredine, nego se moraju obezbediti uz pomoć nekog spoljašnjeg izvora pozitrona. Da bi se izbeglo značajno smanjenje broja pozitrona, koji se prate u našim Monte Carlo simulacijama, pod uticajem formiranja pozitronijuma, potrebno je da pozitroni koji su izgubljeni u nekonzervativnim sudarima budu nadoknađeni u toku trajanja simulacije. Zato je u našim Monte Carlo proračunima primenjena tehnika diskretnog reskaliranja roja, koja je opisana u radu [160]. Ova tehnika podrazumeva da se u diskretnim vremenskim trenucima (trenuci relaksiranja) za svaki od pozitrona koji je izgubljen, (u nekonzervativnim sudarima) između dva trenutka reskaliranja, duplira jedan od postojećih pozitrona. Pozitroni koji su duplirani se biraju nasumično, kako reskaliranje ne bi promenilo funkciju raspodele elektrona po brzinama i prostornim koordinatama. Nakon trenutka reskaliranja svaki se od pozitrona prati nezavisno. Ova tehnika ne utiče na srednje vrednosti niti jedne dinamičke promenljive na osnovu kojih se računaju transportni koeficijenti, a obezbeđuje približno konstantan broj pozitrona za vreme trajanja simulacije. Gubitak pozitrona zbog formiranja pozitronijuma utiče na transportne koeficijente kroz promenu funkcije raspodele po energijama (implicitni efekti) i kroz prostornu zavisnost brzinskog koeficijenta za ovaj proces, koja je zasnovana na prostornom gradijentu srednje energije pozitrona (eksplicitni efekti).

5.7.2 Rezultati

Slika 69 ilustruje profile zavisnosti srednje energije od E/n_0 za pozitrone u H_2 , N_2 i CF_4 . Ovi su rezultati dobijeni primenom momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine. Na najnižim poljima su vrednosti srednje energije praktično termalne (oko 0.038 eV) do 0.0077 Td, 0.0046 Td i 0.046 Td za elektrone u H_2 , N_2 i CF_4 , respektivno. Nakon toga se srednja energija sporo povećava sa porastom polja (do oko 0.059 Td, 0.035 Td i 0.27 Td za elektrone u H_2 , N_2 i CF_4 , respektivno).

Na višim poljima se profil zavisnosti srednje energije od E/n_0 u H_2 kvalitativno razlikuje od odgovarajućih profila zavisnosti u N_2 i CF_4 . Srednja energija za pozitrone u H_2 se zapravo



Slika 69: Srednja energija u funkciji E/n_0 za pozitivne u H_2 , N_2 i CF_4 . Rezultati su dobijeni na osnovu metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

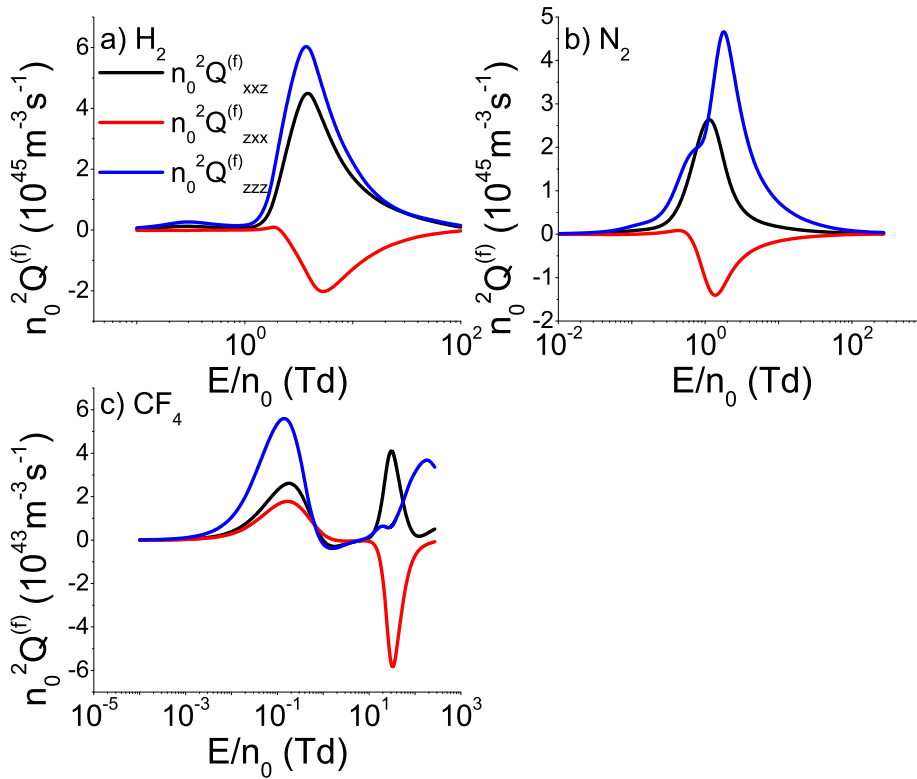
približno linearno povećava sa porastom E/n_0 u dva susedna intervala polja, pri čemu je nagib srednje energije znatno manji u drugom intervalu. Ova dva E/n_0 intervala se nalaze između opsega polja u kome je srednja energija još uvek blizu termalnih vrednosti i opsega u kome se srednja energija naglo povećava sa porastom polja. Nasuprot tome, porast srednje energije za pozitivne u N_2 i CF_4 ima praktično konstantan nagib između opsega polja u kome je srednja energija približno termalna i opsega polja u kome je porast srednje energije sa porastom E/n_0 najintenzivniji. Jedan od razloga za različit trend zavisnosti srednje energije u H_2 i preostala dva gasa jeste visoka vrednost praga za prvu vibracionu ekscitaciju u H_2 .

Naime, prvi opseg polja u kome se srednja energija pozitrona u H_2 linearno povećava sa porastom E/n_0 nalazi se između 0.059 Td i 0.27 Td. U ovom opsegu polja srednja energija ima vrednosti između 0.047 eV i 0.138 eV. Pošto je prag za prvu vibracionu ekscitaciju oko 0.516 eV, većina pozitrona u ovom opsegu polja nema dovoljno energije da učestvuje u neelastičnim sudarima. Međutim, u opsegu polja od 0.35 Td do 1.3 Td srednja energija ima vrednosti u intervalu između 0.158 eV i 0.256 eV, pa pozitivni čija je energija između 3.3 i 2 puta veća od srednje energije mogu da učestvuju u vibracionim ekscitacijama. Ovo dovodi do sporijeg porasta srednje energije sa porastom E/n_0 .

Srednja energija pozitrona u N_2 i CF_4 se linearno povećava sa porastom E/n_0 u intervalima od 0.035 Td do 0.27 Td i od 0.21 Td do 4.6 Td, respektivno. Pri tome se srednja energija pozitrona u N_2 nalazi u intervalu između 0.047 eV i 0.18 eV, dok je srednja energija pozitrona u CF_4 između 0.04 eV i 0.09 eV. Pošto su pragovi za prve vibracione ekscitacije u N_2 i CF_4 oko 0.29 eV i 0.077 eV, respektivno, najenergičniji pozitivni u ovom opsegu polja mogu da izgube energiju u vibracionim ekscitacijama, što dovodi do sporijeg porasta srednje energije sa porastom E/n_0 .

Srednja energija se na višim poljima naglo povećava sa porastom E/n_0 . Na početku opsega polja, koji odgovara naglom porastu srednje energije, najenergičniji pozitivni (čija je energija bar 4 puta veća od srednje energije) nalaze se u energijskom intervalu u kome preseki za vibracione ekscitacije opadaju sa porastom energije. Porast srednje energije sa porastom E/n_0 se značajno usporava na poljima višim od oko 5.9 Td, 1.9 Td i 57 Td za pozitivne u H_2 , N_2 i

CF₄, respektivno. Pri tome su vrednosti srednje energije na kraju opsega polja u kome se ona naglo povećava sa porastom E/n_0 oko 3.2 eV, 2.7 eV i 3.5 eV za pozitrone u H₂, N₂ i CF₄, respektivno. Pragovi za prvu elektronsku ekscitaciju za pozitrone u H₂, N₂ i CF₄ su 11.3 eV, 10.0 eV i 12.49, respektivno. Tako se u sva tri gasa nagli porast srednje energije sa porastom E/n_0 završava u okolini polja na kome elektroni čija je energija oko 4 puta veća od srednje energije mogu učestvovati u elektronskim ekscitacijama.



Slika 70: $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$, $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda u funkciji E/n_0 za rojeve pozitrona u H₂, N₂ i CF₄. Rezultati su dobijeni primenom metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

Prikaz profila TKIII u funkciji E/n_0 za pozitrone u H₂, N₂ i CF₄ dat je na slici 70. Ovi rezultati su dobijeni primenom momentnog metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine. Komponente $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ su pozitivne u celom razmatranom opsegu polja, dok $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta menja znak unutar ovog opsega u sva tri gasa. Istovremeno $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponente imaju dva lokalna maksimuma i jedan lokalni minimum za pozitrone u H₂ i CF₄, a ove dve komponente imaju pak samo jedan lokalni maksimum za pozitrone u N₂.

Komponente $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ se monotono povećavaju sa porastom E/n_0 do 0.27 Td i 0.35 Td, nakon čega opadaju sa rastom E/n_0 do 1Td i 4 Td za pozitrone u H₂ i CF₄, respektivno. Opseg polja u kome $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ opadaju sa porastom E/n_0 , odgovara opsegu polja u kome se srednja energija linearno povećava sa porastom E/n_0 i u kome je dinamika visokoenergijskih pozitrona pod snažnim uticajem vibracionih ekscitacija. Međutim, $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponente za pozitrone u N₂ se monotono povećavaju sa porastom E/n_0 u opsegu polja u kome je porast srednje energije linearan, zbog toga što je presek za vibracione ekscitacije u N₂ znatno manji

od preseka za vibracione ekscitacije u H_2 i CF_4 .

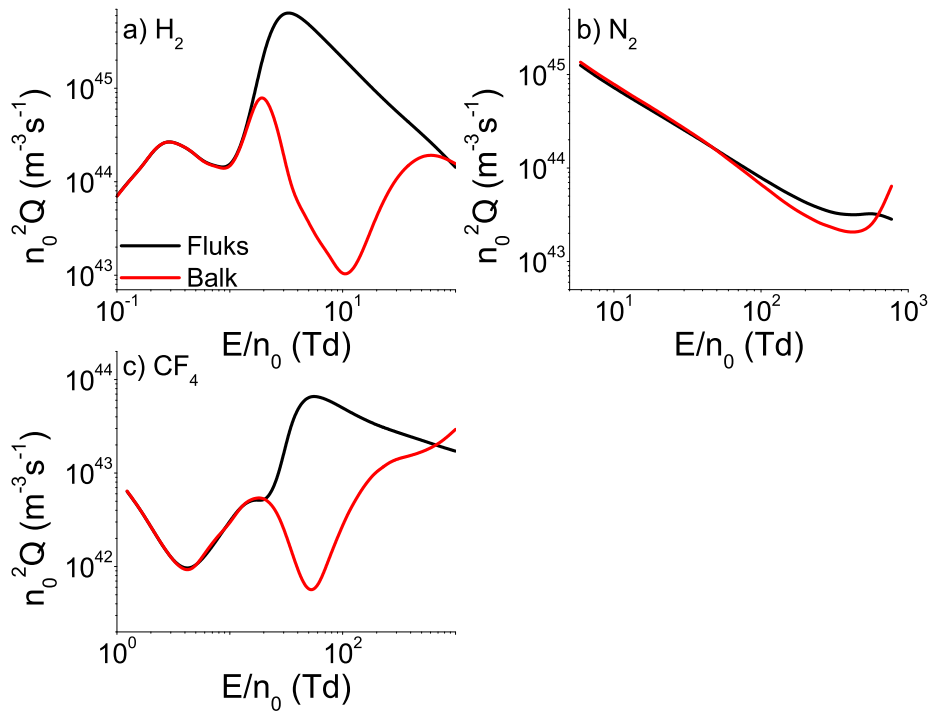
Na višim poljima se komponenta $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ monotono povećava sa porastom E/n_0 i dostiže lokalni maksimum na oko 3.3 Td, 1.1 Td i 39 Td za pozitrone u H_2 , N_2 i CF_4 , respektivno. Longitudinalna komponenta, $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$, monotono se povećava sa porastom E/n_0 do 3.3 Td za pozitrone u H_2 , dok se za pozitrone u N_2 i CF_4 monotono povećava do oko 0.7 Td i 17 Td, respektivno, nakon čega saturira do oko 0.9 Td i 23 Td respektivno, pa se ponovo monotono povećava sa porastom E/n_0 i dostiže lokalni maksimum na 1.7 Td i 53 Td, respektivno. Nakon lokalnog maksimuma $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ i $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponente monotono opadaju sa porastom E/n_0 do kraja razmatranog opsega polja. Za pozitrone u H_2 srednja energija na 3.3 Td iznosi oko 1.5 eV, te se pozitroni čija je energija oko 3 puta veća od srednje energije nalaze u energijskom intervalu u kome se presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima povećava sa porastom energije, a za pozitrone čija je energija oko 7.5 puta veća od srednje energije važi to da mogu učestvovati u prvoj elektronskoj ekscitaciji. Na 4 Td je srednja energija pozitrona u H_2 oko 2.2 eV, pa pozitroni čija je energija oko 5 puta veća od srednje energije mogu participirati u elektronskim ekscitacijama. Za pozitrone u N_2 i CF_4 su vrednosti srednje energije na poljima na kojima $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponenta doseže poslednji lokalni maksimum: 1.5 eV i 2.3 eV, respektivno. Ove se vrednosti srednje energije nalaze u energijskim intervalima u kojima se koliziona frekvencija za elastične sudare povećava sa porastom energije. Treba dodati kako na poljima na kojima $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponenta dostiže poslednji lokalni maksimum u ova dva gasa elektroni čija je energija oko 6 puta veća od srednje energije mogu učestvovati u prvoj elektronskoj ekscitaciji. Vrednosti srednje energije na poljima na kojima $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ dostiže poslednji lokalni maksimum za pozitrone u N_2 i CF_4 iznose 2.5 eV i 3.4 eV, respektivno. Sledi da na ovim poljima u prvoj elektronskoj ekscitaciji mogu participirati elektroni čija je energija oko 4 puta veća od srednje energije.

Za pozitrone u H_2 i N_2 , $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ je negativno na najnižim poljima, uz šta ova komponenta opada sa porastom E/n_0 , uprkos tome što presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima opada sa porastom energije do energija koje su znatno više od termalnih vrednosti. Ovo je uzrokovano time što se koliziona frekvencija za elastične sudare povećava sa porastom energije do oko 0.18 eV i 0.1 eV za pozitrone u H_2 i N_2 , respektivno. Komponenta $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ doseže lokalni minimum na 0.21 Td i 0.059 Td za pozitrone u H_2 i N_2 respektivno. Pritom su vrednosti srednje energije u H_2 i N_2 , u okolini lokalnog minimuma $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponente, približno 0.1 eV i 0.06 eV, respektivno. Na poljima koja odgovaraju položajima ovog lokalnog minimuma pozitroni se u H_2 , čija je energija oko 4 puta veća od srednje energije, i pozitroni u N_2 , čija je energija 1.7 puta veća od srednje energije, nalaze u energijskom intervalu u kome koliziona frekvencija za elastične sudare opada sa porastom energije. Ovo dovodi do porasta $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponente sa porastom E/n_0 na višim poljima. Komponenta $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ dostiže lokalni maksimum na 2.1 Td i 0.46 Td, postajući pozitivna na 1.3 Td i 0.13 Td za pozitrone u H_2 i N_2 , respektivno. Na poljima na kojima $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta postaje pozitivna u H_2 i N_2 vrednosti srednje energije su oko 0.26 eV i 0.1 eV, respektivno, pa se pozitroni čija je energija oko 1.6 puta veća od srednje energije u H_2 i pozitroni čija je energija veća od srednje energije u N_2 nalaze u energijskoj oblasti u kojoj koliziona frekvencija za elastične sudare opada sa porastom energije. U okolini lokalnog maksimuma $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponente su vrednosti srednje energije oko 0.46 eV i 0.31 eV za

pozitroni u H_2 i N_2 , respektivno, pa se pozitroni u H_2 čija je energija oko 4.3 puta veća od srednje energije i pozitroni u N_2 čija je energija 1.7 puta veća od srednje energije nalaze u energijskom intervalu u kome se koliziona frekvencija za elastične sudare povećava sa porastom energije. Ovo dovodi do opadanja $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponente sa porastom E/n_0 na višim poljima. Komponenta $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ postaje negativna na 2.7 Td i 0.63 Td za pozitroni u H_2 i N_2 , respektivno, ostajući negativna do kraja razmatranog opsega polja u oba gasa. Komponenta $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ dostiže lokalni minimum na oko 5.3 Td i 1.4 Td za pozitroni u H_2 i N_2 , respektivno, uz šta je položaj lokalnog minimuma $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponente blizu položaja lokalnog maksimuma $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponente. Nakon lokalnog minimuma, apsolutna vrednost $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponente opada sa porastom E/n_0 do kraja razmatranog opsega polja.

Za pozitroni u CF_4 je $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta pozitivna na najnižim poljima jer koliziona frekvencija opada sa porastom energije na najnižim energijama. Ova komponenta se monotono povećava sa porastom E/n_0 do oko 0.1 Td, gde dostiže lokalni maksimum. Na 0.1 Td je srednja energija pozitrona u CF_4 blizu termalne vrednosti (oko 0.039 eV), ali u okolini ovog polja srednja se energija počinje primetno povećavati sa porastom E/n_0 , što dovodi do porasta koliziona frekvencije za vibracione ekscitacije i opadanja $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponente sa porastom polja. Ova komponenta dostiže lokalni minimum na oko 0.27 Td, uz šta u ovom minimumu ima negativnu vrednost. Vrednost polja od 0.27 Td uslovljava srednju energiju pozitrona od oko 0.042 eV, te se pozitroni čija je energija oko 5.5 puta veća od srednje energije nalaze u energijskoj oblasti u kojoj se koliziona frekvencija za elastične sudare povećava sa porastom energije. S druge strane, pozitroni čija je energija oko 6 puta veća od srednje energije nalaze se u energijskoj oblasti u kojoj preseki za vibracionu ekscitaciju naglo opadaju sa porastom energije. Nakon lokalnog minimuma se $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta monotono povećava do oko 1.3 Td, dosežući lokalni maksimum. Na 1.3 Td je srednja energija oko 0.058 eV, pa se pozitroni čija je energija oko 4 puta veća od srednje energije nalaze u energijskom intervalu u kome se koliziona frekvencija za elastične sudare naglo povećava sa porastom energije. Ovo dovodi do opadanja $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponente sa porastom E/n_0 , koja postaje negativna na 5.9 Td, gde je srednja energija oko 0.1 eV. Na ovoj vrednosti polja pozitroni čija je energija oko 2.5 puta veća od srednje energije se nalaze u energijskom intervalu u kome se koliziona frekvencija za elastične sudare povećava sa porastom energije. Nakon 5.9 Td $n_0^2 Q_{zxx}^{(f)}$ komponenta ostaje negativna do kraja razmatranog opsega polja. Ova komponenta opada sa porastom E/n_0 do oko 37 Td, na tom mestu dostižući lokalni minimum, pri čemu je položaj ovog minimuma jako blizu položaja lokalnog maksimuma $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponente. Za ovim lokalnim minimumom apsolutna vrednost $n_0^2 Q_{xxz}^{(f)}$ komponente monotono opada sa porastom E/n_0 do kraja razmatranog opsega polja.

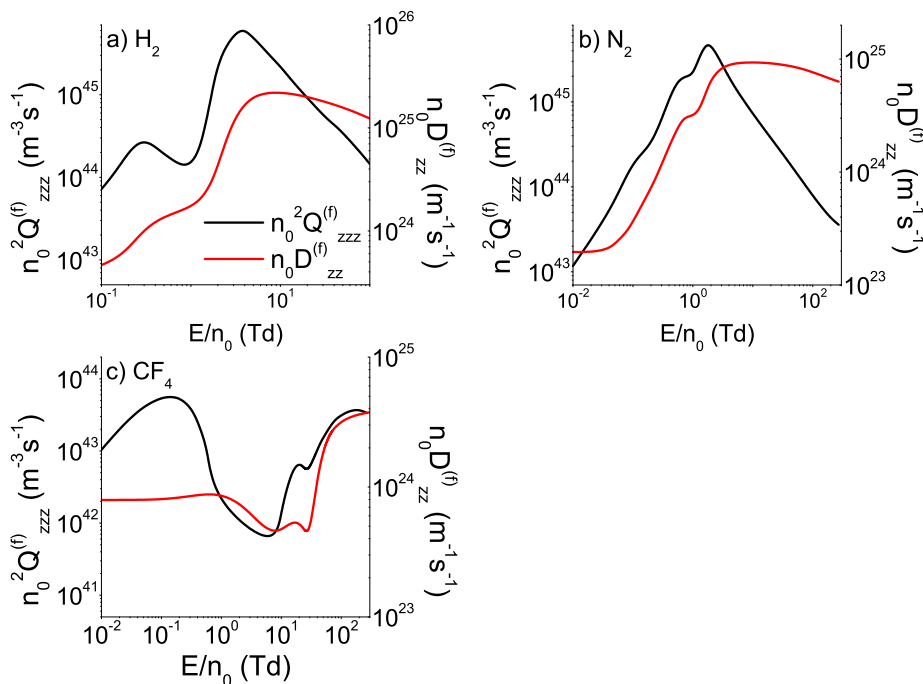
Na slici 71 su prikazani profili zavisnosti fluks i balk longitudinalne komponente TTIII u funkciji E/n_0 za pozitroni u H_2 , N_2 i CF_4 . Ovi rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija. Na najnižim poljima (do 1.5 Td, 77 Td i 27 Td za pozitroni u H_2 , N_2 i CF_4 , respektivno) su razlike između fluks i balk vrednosti longitudinalne komponente TTIII male, budući da većina pozitrona nema dovoljno energije da učestvuje u formiranju pozitronijuma. Na višim poljima su balk vrednosti longitudinalne komponente TTIII manje od odgovarajućih fluks vrednosti, što je posledica hlađenja roja formiranjem pozitronijuma. Naime, vrednosti



Slika 71: Fluks i balk longitudinalna komponenta transportnog tenzora trećeg reda $n_0^2 Q_L$ u funkciji E/n_0 za rojeve pozitrona u H_2 , N_2 i CF_4 . Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

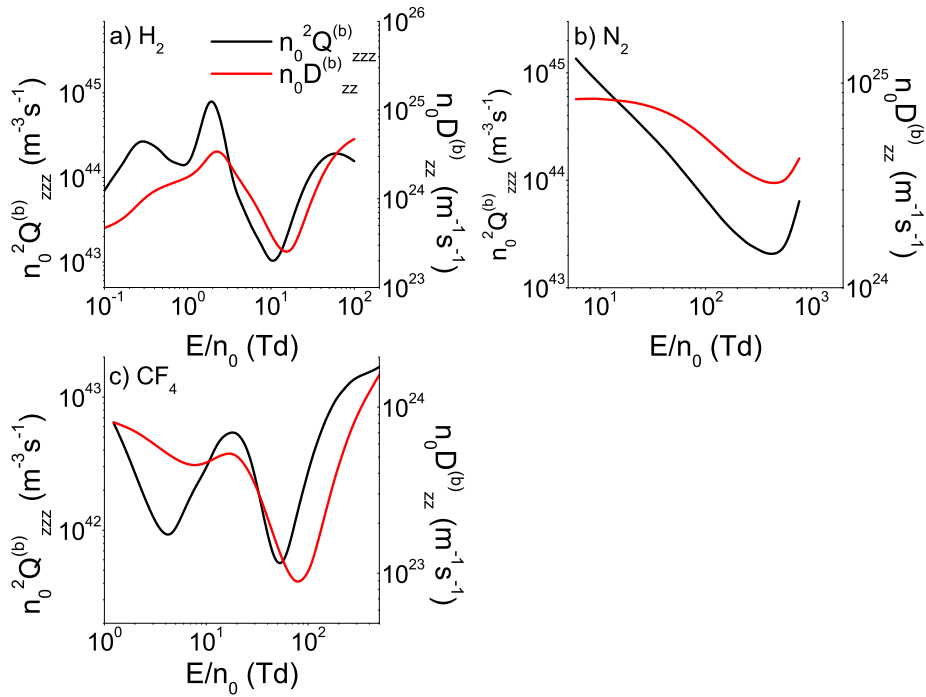
srednje energije pozitrona u H_2 na 3.5 Td, u N_2 na 77 Td i u CF_4 na 27 Td iznose 1.77 eV, 4.87 eV i 1.08 eV, respektivno, dok su vrednosti praga za formiranje pozitronijuma u ova tri gasa 8.6 eV, 8.78 eV i 9.45 eV, respektivno. Tako u ovom opsegu polja samo najenergičniji pozitroni mogu participirati u formiranju pozitronijuma. Na višim poljima se razlika između balk i fluks vrednosti longitudinalne komponente TIII povećava sa porastom E/n_0 , zbog porasta srednje energije i povećanja broja pozitrona koji mogu učestvovati u formiranju pozitronijuma. Međutim, ova razlika dostiže lokalni maksimum na oko 10 Td, 530 Td i 59 Td za pozitronu u H_2 , N_2 i CF_4 , respektivno. Pri tome su odgovarajuće vrednosti srednje energije 3.9 eV, 12.9 eV i 3.64 eV za pozitronu u H_2 , N_2 i CF_4 , respektivno. Posledice ovih vrednosti i uslovljenosti svode se na to da u okolini polja na kome eksplicitni efekti formiranja pozitronijuma na longitudinalnu komponentu TIII dostižu maksimum, u formiranju pozitronijuma mogu učestvovati pozitroni čija je energija oko 2.2, 1.94 i 2.7 puta veća od srednje energije za pozitronu u H_2 , N_2 i CF_4 , respektivno. Ali, s obzirom na to da presek za formiranje pozitronijuma u H_2 , N_2 i CF_4 dostiže lokalni maksimum na 24 eV, 25 eV i 16.5 eV, respektivno, najenergičniji se pozitroni u sva tri gasa nalaze u energijskoj oblasti u kojoj presek za formiranje pozitronijuma opada sa porastom energije. Procenat pozitrona koji se nalaze u ovoj energijskoj oblasti se povećava sa porastom polja, što dovodi do opadanja eksplicitnih efekata formiranja pozitronijuma na longitudinalnu komponentu TIII sa porastom E/n_0 . Razlike između balk i fluks vrednosti longitudinalne komponente TIII su zanemarljive na oko 77 Td, 650 Td i 670 Td za pozitronu u H_2 , N_2 i CF_4 , respektivno. Vrednosti srednje energije za pozitronu u H_2 na 770 Td, u N_2 na 650 Td i u CF_4 na 670 Td iznose 5.92 eV, 14.2 eV i 12.5 eV, respektivno. Na ovim vrednostima polja pozitroni u H_2 čija je energija oko 1.45 puta veća od srednje energije, kao i pozitroni u N_2 i CF_4 čija je

energija oko 1.6 i 1.3 puta manja od srednje energije mogu da učestvuju u formiranju pozitronijuma. Uz to se na ovim vrednostima polja pozitroni sa energijom od oko 4, 1.8 i 1.32 puta većom od srednje energije, za H_2 , N_2 i CF_4 , respektivno, nalaze u energijskom intervalu u kome presek za formiranje pozitronijuma opada sa porastom polja. Za pozitroni u N_2 i CF_4 balk vrednost longitudinalne komponente TIII je veća od odgovarajuće fluks vrednosti, na poljima višim od 770 Td i 1000 Td, respektivno. Ovo je posledica grejanja roja formiranjem pozitronijuma. Srednja energija pozitrona u N_2 zapravo iznosi 16.95 eV na 770 Td, te se pozitroni čija je energija oko 3.5 puta veća od srednje energije nalaze u energijskoj oblasti u kojoj je presek za formiranje pozitronijuma oko 2.5 puta manji od njegove vrednosti u okolini maksimuma, dok pozitroni čija je energija oko dva puta manja od srednje energije mogu učestvovati u formiranju pozitronijuma. Nalik tome je srednja energija pozitrona u CF_4 na 1000 Td oko 17.58 eV, što pozicionira pozitroni sa energijom oko 3.4 puta većom od srednje energije u energijsku oblast u kojoj je presek za formiranje pozitronijuma oko 2.7 puta manji od njegove vrednosti u okolini maksimuma, s tim da u formiranju pozitronijuma mogu participirati pozitroni čija je energija oko 1.86 puta manja od srednje energije.



Slika 72: Korelacija fluks longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda i fluks longitudinalne difuzije. Rezultati su dobijeni na osnovu metoda više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine.

Slike 72 i 73 prikazuju korelaciju profila zavisnosti longitudinalne komponente TIII i longitudinalne difuzije od E/n_0 u slučaju fluks i balk vrednosti, respektivno. Može se primetiti da je trend zavisnosti $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ od E/n_0 u korelaciji sa odgovarajućim trendom $n_0 D_{zz}^{(f)}$, dok se trend ponašanja $n_0^2 Q_{zzz}^{(b)}$ saodnosi sa odgovarajućim trendom $n_0 D_{zz}^{(b)}$. U oba slučaja se, međutim, lokalni minimumi longitudinalne komponente TIII nalaze na nižim vrednostima E/n_0 u odnosu na lokalne minimume longitudinalne difuzije. Na primer, za roj pozitrona u CF_4 , $n_0^2 Q_{zzz}^{(f)}$ dostiže lokalni minimum i prevojnu tačku na oko 4.6 Td i 20 Td, respektivno, dok $n_0 D_{zz}^{(f)}$ dostiže



Slika 73: Korelacija balk longitudinalne komponente transportng tenzora trećeg reda i balk longitudinalne difuzije. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

dva lokalna minimuma na oko 7.7 Td i 27 Td, uz šta obe veličine dosežu lokalni maksimum na oko 17 Td. Slično tome, $n_0^2 Q_{zzz}^{(b)}$ dostiže dva lokalna minimuma na oko 4.3 Td i 54 Td, a $n_0 D_{zz}^{(b)}$ dostiže dva lokalna minimuma na oko 7.7 Td i 77 Td, pri čemu obe veličine dosežu lokalni maksimum na oko 17 Td. Razlog za pojavu lokalnih minimuma longitudinalne komponente TIII na poljima koja su niža od polja na kojima se pojavljuju odgovarajući lokalni minimumi longitudinalne difuzije mogla bi biti veća osetljivost komponenti TIII na dinamiku visokoenergijskih elektrona.

5.8 Zaključak

Centralna tema ovog poglavlja bili su transportni koeficijenti trećeg reda za elektrone u realnim gasovima. U potpoglavlju 5.2 tumačena je korelacija između longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda Q_{zzz} i longitudinalne komponente difuzionog tenzora D_{zz} . Ova korelacija je uočena za elektrone u svim razmatranim gasovima na dovoljno visokim vrednostima redukovanoeg električnog polja. Uočeno je naime da na dovoljno visokim poljima Q_{zzz} opada sa porastom redukovanoeg električnog polja ako D_{zz} opada, ili ukoliko se D_{zz} povećava kao konkavna funkcija u log-log skali. Takođe je primećeno da se Q_{zzz} povećava sa porastom polja ako se D_{zz} povećava kao konveksna funkcija u log-log skali. Međutim, ova korelacija je odsutna na najnižim poljima, zbog toga što transportni koeficijenti trećeg reda predstavljaju asimetrično odstupanje od difuzionog širenja (koje je reprezentovano difuzionim tenzorom), težeći nuli u limesu niskih polja, za razliku od dijagonalnih komponenti difuzionog tenzora koje, imaju nenulte termalne vrednosti.

Potpoglavlje 5.3 bazirano je na izučavanju transportnih koeficijenata trećeg reda u helijumu i neonu. Zaključeno je da su u ovim gasovima profili zavisnosti komponenti transportnog tenzora trećeg reda od redukovanoeg električnog polja složeniji nego u slučaju modelnih gasova. Pri tome je Q_{zzz} komponenta pozitivna za elektrone u ova tri gasa u celom razmatranom opsegu polja. Međutim, u opsegu polja u kome je koliziorna frekvencija za veliki procenat elektrona rastuća funkcija energije, jedna od vandijagonalnih komponenti (Q_{xxz} ili Q_{zxx}) je negativna, dok je druga od ovih komponenti pozitivna, u istom opsegu redukovanoeg električnog polja. U potpoglavlju 5.4 su razmatrani transportni koeficijenti trećeg reda za elektrone u argonu, kriptonu i ksenonu. Primećeno je da su na kvalitativnom nivou profili zavisnosti komponenti transportnog tenzora trećeg reda od redukovanoeg električnog polja jako slični u ova tri gasa. Naime, na najnižim poljima su u sva tri gasa sve komponente transportnog tenzora trećeg reda pozitivne i monotonno se povećavaju sa porastom polja, dok ne dostignu oštar maksimum. Ovaj maksimum je posledica Ramsauer-Townsend-ovog minimuma. U sva tri gasa je komponenta Q_{zzz} pozitivna u celom razmatranom opsegu polja, dok je Q_{xxz} komponenta negativna na višim poljima. Za elektrone u argonu Q_{zxx} komponenta ima negativne vrednosti u jako uskom opsegu polja i postaje pozitivna na otprilike istoj vrednosti redukovanoeg električnog polja, gde Q_{xxz} komponenta postaje negativna.

U odeljku 5.5 proučavan je transportni tenzor trećeg reda za elektrone u N_2 , CH_4 , CF_4 i C_3F_8 , te je zapaženo kako su profili zavisnosti transportnih koeficijenata trećeg reda od redukovanoeg električnog polja složeniji u slučaju molekularnih gasova nego kod atomskih gasova. Longitudinalna komponenta transportnog tenzora trećeg reda Q_{zzz} ima negativne vrednosti u uskom opsegu polja za elektrone u CF_4 i C_3F_8 , dok je ova komponenta pozitivna u celom razmatranom opsegu polja za elektrone u N_2 i CH_4 . Pored toga, Q_{xxz} i Q_{zxx} komponente imaju negativne vrednosti u uskom opsegu polja za elektrone u CF_4 i CH_4 , a komponenta Q_{zxx} je negativna u celom razmatranom opsegu polja za elektrone u N_2 i na poljima višim od 5 Td za elektrone u C_3F_8 . Uočeno je da Q_T ima negativne vrednosti za elektrone u CH_4 i CF_4 u opsegu polja u kome postoji negativna diferencijalna provodnost. Međutim, Q_T je negativno u većini oblasti negativne diferencijalne provodnosti za elektrone u CH_4 , za razliku od elektrona u CF_4 Q_T , gde je negativno samo u uskom opsegu polja, pred kraj opsega polja u kome postoji negativna diferencijalna provodnost. Pored toga je ponašanje vandijagonalnih komponenti transportnog tenzora trećeg reda Q_{xxz} i Q_{zxx} drugačije u oblasti negativne diferencijalne provodnosti za elektrone u CH_4 i CF_4 .

Potpoglavlje 5.6 posvećeno je tumačenju doprinosa longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda Q_{zzz} prostornom profilu roja za elektrone u atomskim i molekularnim gasovima. Ovaj doprinos zavisi od količnika $Q_L/D_L^{3/2}$. Doprinos Q_{zzz} prostornom profilu roja je najizraženiji za elektrone u argonu, kriptonu i ksenonu na niskim poljima, zbog prisustva Ramsauer-Townsend-ovog minimuma. Izražen je takođe u kriptonu i ksenonu na oko 1 Td.

U ovom potpoglavlju je izučavan i uticaj sudarnih procesa, čija učestanost zavisi od koncentracije pozadinskog gasa, na transportne koeficijente trećeg reda. Pri tome je razmatran uticaj trojnog zahvata elektrona u molekularnom kiseoniku na komponente transportnog tenzora trećeg reda.

ćeg reda. Primećeno je da transportni koeficijenti trećeg reda snažno zavise od koncentracije pozadinskog gasa na niskim poljima, na kojima trojni zahvat snažno utiče na dinamiku elektrona.

Transportni koeficijenti trećeg reda za pozitrone u H_2 , N_2 i CF_4 izučavani su u potpoglavlju 5.7. Uočeno je da eksplicitni efekti formiranja pozitronijuma dovode do velike razlike između balk i fluks vrednosti transportnih koeficijenata trećeg reda za pozitrone u ova tri gasa. Balk vrednosti su znatno niže od odgovarajućih fluks vrednosti na srednjim poljima, zbog hlađenja roja formiranjem pozitronijuma. Međutim, fluks vrednosti su više od odgovarajućih balk vrednosti na najvišim poljima zbog efekta grejanja roja formiranjem pozitronijuma. Na ovom mestu primećeno je i to da je balk vrednost longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda Q_{zzz} u korelaciji sa balk vrednošću longitudinalne komponente difuzionog tenzora D_{zz} , dok se fluks vrednost Q_{zzz} saodnosi sa fluks vrednošću D_{zz} .

6 Transport elektrona u atomskim tečnostima visoke mobilnosti

6.1 Uvod

Ovo poglavlje bavi se transportom elektrona u atomskim tečnostima visoke mobilnosti, uključujući tečni argon, tečni kripton i tečni ksenon. Svi rezultati prikazani u ovom poglavlju dobijeni su primenom Monte Carlo simulacija. U potpoglavlju 6.1.1 u kratkim crtama su obrazloženi motivacioni faktori za proučavanje transporta naelektrisanih čestica u tečnoj fazi. Odeljak 6.1.2 prikazuje argumente koji ukazuju na postojanje provodne zone u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu, nakon čega govorimo o korišćenim setovima preseka i uslovima simulacije za ispitivanje transporta elektrona u tečnom ksenonu u potpoglavlju 6.2.1. U segmentu 6.2.2 prikazani su rezultati vezani za transport elektrona u tečnom ksenonu, potpoglavlje 6.3.1 obrazlaže setove preseka i uslove simulacije koji su korišćeni za proučavanje transporta elektrona u tečnom argonu i tečnom kriptonu, dok odeljak 6.3.2 predstavlja rezultate u vezi sa transportom elektrona u tečnom argonu i tečnom kriptonu.

6.1.1 Motivacija za istraživanje

Transport naelektrisanih čestica u tečnoj fazi je oblast istraživanja koja ima veliki značaj i sa teorijskog i sa praktičnog aspekta. Sa teorijske tačke gledišta značajno je razumeti način na koji velika gustina i kratkodometno uređenje pozadinskih atoma i/ili molekula u tečnoj fazi utiču na dinamiku naelektrisanih čestica [68–70]. Sa praktičnog aspekta, razumevanje transporta naelektrisanih čestica u tečnoj fazi je od ključnog značaja za mnoge važne primene poput detektora elementarnih čestica sa tečnim argonom i tečnim ksenonom, transformatorskih ulja, kao i upotrebe plazme u medicini, poljoprivredi i tretmanima za prečišćavanje vode. Neravnotežne plazme imaju širok spekar primene u medicini, poput dezinfekcije, podsticanja zarastanja rana, lečenja gljivičnih infekcija i tretmana tumora [40, 41]. Upotreba plazme u poljoprivredi ima potencijal da poveća prinos useva i suzbije bolesti biljaka na način koji je povoljniji po životnu sredinu, kao i da eliminiše patogene koji se mogu naći u hrani [42]. Primena neravnotežnih plazmi može obezbediti efikasan, jeftin i ekološki prihvatljiv proces za razgradnju organskih zagađivača u vodi [45]. Međutim za dalji razvoj ovih primena potrebno je razumeti kako pojedinačne naelektrisane čestice i njihovi produkti, poput radikala i metastabila, interaguju sa složenim organskim molekulima u tečnoj vodi. Detektori elementarnih čestica sa tečnim argonom i tečnim ksenonom su veoma pogodni za lociranje slabo interagujućih čestica poput neutrina i teorijski pretpostavljenih masivnih slabo interagujućih čestica (eng. *weak interacting massive particles*), i to zbog velike gustine ovih tečnosti i velike mobilnosti elektrona na niskim električnim poljima (u slučaju argona i ksenona), te velikog broja stabilnih izotopa od kojih su neki spinski singleti dok drugi imaju nenulti spin (u slučaju ksenona) [220–222]. U ovim detektorima je za rekonstrukciju trajektorije detektovanih čestica neophodno odrediti putanju primarnog i/ili sekundarnog naelektrisanja kroz tečnu sredinu od tačke formiranja ovih

naelektrisanja do tačke njihove detekcije. Transformatorska ulja se koriste u nekim tipovima transformatora i visokonaponskih prekidača za izolaciju i hlađenje transformatora, kao i za sprečavanje nastanka korone [223, 224]. Za pronalaženje novih transformatorskih ulja, koja imaju bolje inženjerske i/ili ekološke karakteristike, važno je razumeti pri kojim uslovima dolazi do lavinske multiplikacije elektrona i električnih pražnjenja u ovim tečnostima.

Uprkos značaju transporta naelektrisanih čestica u tečnoj fazi, u okviru ove oblasti postoji veliki broj poteškoća i u teorijskim i u eksperimentalnim ispitivanjima. Mnoge su vezane za raznovrsnost brojnih procesa koji se dešavaju u tečnostima u širokom rasponu vremenskih i prostornih skala. Naime, u tečnoj fazi je potencijal za rasejanje naelektrisane čestice na pojedinačnom atomu ili molekulu snažno perturbovan od strane okolnih atoma ili molekula [68, 69, 100]. Pored toga, talasna funkcija lakih naelektrisanih čestica poput elektrona i pozitrona zahvata veliki broj susednih atoma ili molekula. S tim razlogom se rasejanje u tečnoj fazi mora opisati kao superpozicija pojedinačnih rasejanja na više susednih atoma ili molekula pozadinske sredine (koherentni efekti) [68–70]. Iz toga sledi da je rasejanje ovih čestica u tečnoj fazi pod snažnim uticajem kratkodometnog uređenja neutralnih čestica pozadinske tečnosti. Značajan uticaj na dinamiku naelektrisanih čestica u tečnoj fazi imaju i interakcija sa fluktuacijama gustine pozadinske tečnosti i zarobljavanje u rastvorenim mehurovima gasa [101]. U slučaju tečnosti sa polarnim molekulima (poput vode) naelektrisane čestice bivaju solvatirane u klasterima polarnih molekula [225–228]. Osetljivost transportnih osobina naelektrisanih čestica na ove procese znatno otežava razvoj teorijskih modela i kontrolu eksperimentalnih uslova. Pošto tečni plemeniti gasovi predstavljaju najjednostavnije tečnosti, oni su dobra polazna tačka za razvoj modela transporta naelektrisanih čestica u tečnoj fazi.

6.1.2 Postojanje provodne zone u tečnom Ar, tečnom Kr i tečnom Xe.

U tečnim plemenitim gasovima sa visokom mobilnošću niskoenergijskih elektrona (tečni argon, tečni kripton i tečni ksenon) dolazi do formiranja valentne i provodne zone [101]. Postojanje zonske strukture u ove tri tečnosti je utvrđeno na osnovu više nezavisnih eksperimenata. Promena mobilnosti elektrona pri topljenju može se pripisati promeni kompresibilnosti i gustine pri faznom prelazu [175, 229]. Pored toga su u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu uočene ekscitonske linije u refleksionim spektrima. Ovi spektri su veoma slični odgovarajućim refleksionim spektrima u čvrstoj fazi, pri čemu su spektralne linije u tečnoj fazi pomerene i proširene [175, 230–232]. Istovremeno su u refleksionom spektru tečnog ksenona uočene spektralne linije koje odgovaraju Wannier -ovim ekscitonima višeg reda (za $n=2$). Ovo je značajno zbog toga što Wannier-ovi ekscitoni višeg reda nemaju poreklo u pojedinačnim ekscitacijama izolovanog atoma, već se mogu opisati kao superpozicija stanja u provodnoj zoni [175, 230–232]. Treba dodati da je u tečnom ksenonu (u blizini trojne tačke) prag za fotoprovodnost jako blizu odgovarajućem pragu u čvrstom ksenonu, uz šta je položaj ovog praga u tečnoj fazi u saglasnosti sa predviđanjima vezanim za promenu zonskog procepa u čvrstom ksenonu na osnovu promene gustine pri topljenju [175, 233]. Zonski procep $\Gamma(3/2)$ u tečnom ksenonu je određen na osnovu Wannier-ovog $\Gamma(3/2)$ niza i na osnovu praga za fotoprovodnost. Vrednosti dobijene

na ova dva načina se međusobno dobro slažu i bliske su vrednosti zonskog procepa u čvrstom ksenonu [233]. Pored toga je u tečnom ksenonu uočena šupljinska provodnost [234, 235].

6.2 Transport elektrona u tečnom ksenonu

6.2.1 Korišćeni setovi preseka i uslovi simulacije za elektrone u tečnom ksenonu

Elastično rasejanje niskoenergijskih elektrona u atomskim tečnostima je pod intenzivnim uticajem ekraniranja polarizacionog potencijala fokus atoma polarizacionim potencijalima okolnih atoma i efekata koherentnog rasejanja [68, 69, 100, 102]. Pri tome snažna anizotropija koherentnog rasejanja dovodi do toga da su efektivni srednji slobodni putevi za transfer impulsa i energije u tečnosti međusobno različiti [100, 176]. Ovi srednji slobodni putevi su dati jednačinama

$$\Lambda_0 = (n_0\sigma_m)^{-1} = (n_02\pi \int_0^\pi d\chi \sin \chi (1 - \cos \chi) \sigma_{sp}(\epsilon, \chi))^{-1}, \quad (6.1)$$

$$\Lambda_1 = (n_0\tilde{\sigma}_m)^{-1} = (n_02\pi \int_0^\pi d\chi \sin \chi (1 - \cos \chi) \sigma_{sp}(\epsilon, \chi) S(\Delta k))^{-1}, \quad (6.2)$$

gde je n_0 koncentracija atoma u tečnosti, $\sigma_{sp}(\epsilon, \chi)$ je diferencijalni presek za elastično rasejanje elektrona na fokus atomu u tečnoj fazi, ϵ je relativna energija u sistemu centra mase, χ je ugao rasejanja i $S(\Delta k)$ je statički strukturni faktor, kao funkcija razmenjenog impulsa. U ovim jednačinama $\tilde{\sigma}_m$ i σ_m reprezentuju preseke za transfer impulsa u elastičnim sudarima sa strukturnim modifikacijama i bez strukturnih modifikacija, respektivno. Kao što je predložio Tattersall sa saradnicima, količnik $\gamma(\epsilon) = \frac{\Lambda_0}{\Lambda_1}$ reprezentuje merilo anizotropije koherentnog rasejanja [176].

U Monte Carlo simulacijama koherentno rasejanje se može modelovati uvođenjem tri različita efektivna sudarna procesa, koji zajedno dobro reprezentuju srednje transfere impulsa i energije u elastičnim sudarima [176]. U prvom od ovih sudarnih procesa, koji je reprezentovan sa σ_{oba} presekom, u sudaru se razmenjuju i energija i impuls, kao u običnom binarnom sudaru. U drugom procesu, koji je reprezentovan σ_{impuls} presekom, elektron se rasejava u nasumičnom pravcu, ali intenzitet brzine elektrona ostaje nepromenjen. Ovo dovodi do transfera impulsa, bez odgovarajućeg transfera energije [176]. U trećem procesu – koji je predstavljen $\sigma_{energija}$ presekom, energija elektrona je smanjena kao u običnom binarnom sudaru, ali smer kretanja elektrona ostaje nepromenjen, što dovodi do promene energije elektrona uz minimalnu promenu impulsa [176]. Važno je naglasiti da ovi efektivni sudarni procesi ne reprezentuju pojedinačne mikroskopske sudare, već samo obezbeđuju dobru reprezentaciju srednjeg transfera impulsa i energije u elastičnim sudarima u jedinici vremena u sredinama sa kratkodometnim prostornim uređenjem atoma. Preseci za ove efektivne sudarne procese se određuju na osnovu količnika $\gamma(\epsilon)$ i preseka za transfer impulsa u elastičnom rasejanju elektrona na fokus atomu u tečnoj fazi $\sigma_m(\epsilon)$ [176]. Vrednosti $\sigma_m(\epsilon)$ i $\gamma(\epsilon)$, koje su korišćene u našem radu, odredio je Boyle sa saradnicima [69].

Za $\gamma(\epsilon) < 1$ ovi efektivni preseci su definisani u sledećim jednačinama.

$$\sigma_{oba}^{\gamma < 1} = \gamma(\epsilon) \cdot \sigma_m(\epsilon)$$

$$\begin{aligned}\sigma_{energija}^{\gamma < 1} &= (1 - \gamma(\epsilon)) \cdot \sigma_m(\epsilon) \\ \sigma_{impuls}^{\gamma < 1} &= 0.\end{aligned}\tag{6.3}$$

Za $\gamma(\epsilon) > 1$ su ovi efektivni preseći definisani na sledeći način.

$$\begin{aligned}\sigma_{oba}^{\gamma > 1} &= \sigma_m(\epsilon) \\ \sigma_{energija}^{\gamma > 1} &= 0 \\ \sigma_{impuls}^{\gamma > 1} &= (\gamma(\epsilon) - 1) \cdot \sigma_m(\epsilon).\end{aligned}\tag{6.4}$$

U našim Monte Carlo simulacijama elastično rasejanje elektrona, čija je energija niža od oko 10 eV, predstavljeno je primenom ova tri efektivna sudarna procesa, kojima odgovaraju preseći iz jednačina (6.3) i (6.4). Na višim energijama se efektivni preseći σ_{impuls} i $\sigma_{energija}$ mogu zanemariti, dok je presek σ_{oba} aproksimiran presekom za elastično rasejanje elektrona u gasnoj fazi [202]. Ovo je dobra aproksimacija, pošto efekti koji modifikuju potencijal za rasejanje elektrona na fokus atomu i efekti koherentnog rasejanja imaju zanemarljiv uticaj na rasejanje visokoenergijskih elektrona [110, 176]. Presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima za elektrone u gasnom ksenonu, koji koristimo za reprezentovanje elastičnog rasejanja visokoenergijskih elektrona u tečnom ksenonu, preuzet je iz Hayashi-jeve baze [202]. Presek za ekscitaciju elektrona iz valentne zone u provodnu zonu je aproksimiran presekom za jonizaciju iz Hayashi-jevog seta preseka, koji je pomećen na niže energije za 2.91 eV kako bi mu prag bio snižen na 9.22 eV. Ova vrednost praga odgovara $\Gamma(\frac{3}{2})$ zonskom procepu u tečnom ksenonu, koji predstavlja energijsku razliku između vrha valentne zone i dna provodne zone [233]. Korišćenje ovog preseka daje dobar energijski balans budući da velika gustina stanja u provodnoj zoni omogućuje da se energijski nivoi kvazislobodnih elektrona reprezentuju kontinualnim energijskim spektrom [111].

U ovoj disertaciji su korišćena četiri različita slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu s ciljem ispitivanja uticaja neelastičnih sudara na transport elektrona i dinamiku formiranja, kao i na propagaciju strimera u atomskim tečnostima.

Prvi slučaj (Scenario 1): Zanemarivanje ekscitacija

U prvom slučaju koji razmatramo energijski gubici u ekscitacijama su u potpunosti zanemareni. Atrazhev i saradnici su pokazali da zanemarivanje energijskih gubitaka u ekscitacijama dovodi do precenjivanja prvog Townsend-ovog koeficijenta u tečnom ksenonu [110]. Međutim, ovaj slučaj je razmatran u našem radu da bi se bolje utvrdio uticaj elektronskih ekscitacija na prvi Townsend-ov koeficijent.

Drugi slučaj (Scenario 2): Samo ekscitacije $6s[3/2]_2$ i $6s[3/2]_1$ su uzete u obzir

U preostala tri slučaja su energijski gubici u neelastičnim sudarima uzeti u obzir, pošto je pokazano u eksperimentima da u tečnom ksenonu postoje ekscitoni i perturbovane atomske ekscitacije [231, 232]. Utvrđeno da je i to da je pobuđivanje ovih elektronskih stanja glavni kanal energijskih gubitaka kvazislobodnih elektrona u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu na električnim poljima srednje jačine [236–238]. U literaturi se ipak trenutno ne mogu naći preseći za pobuđivanje ovih elektronskih stanja pri neelastičnom rasejanju elektrona u atomskim tečnostima.

Poznato je da *intermediate* ekscitoni vode poreklo iz pojedinačnih ekscitovanih stanja atoma [231, 232, 239]. Na osnovu toga mi aproksimiramo preseke za *intermediate* ekscitone i perturbovane atomske ekscitacije u tačnoj fazi preseca za odgovarajuće ekscitacije izolovanog atoma, koristeći se preseca za ekscitacije iz Hayashi-jevog seta preseka za elektrone u gasnom ksenonu [202]. U našem radu ne menjamo vrednosti pragova za ekscitacije, pošto se u literaturi mogu naći samo pragovi za optički dozvoljene ekscitone [239], dok je za naš set preseka neophodno da budu uzeta u obzir i optički zabranjena stanja. Stoga bi bilo nekonzistentno da modifikujemo pragove za optički dozvoljene prelaze a ostavimo pragove za optički zabranjene prelaze nepromenjenim. Pokazuje se da u refleksionom spektru tačnog ksenona pored $n = 1$ $[\Gamma(\frac{3}{2})]$ ekscitonske linije postoji i jedna dodatna linija [231, 232], koja odgovara perturbovanom atomskom $6s[3/2]_1$ stanju [231, 232]. Laporte i saradnici su ustanovili da se u oko 10% atomskih klastera pojavljuje perturbovana atomska linija, umesto odgovarajuće ekscitonske linije [231]. Ovo je posledica toga što ovi klasteri nemaju dovoljan broj atoma za formiranje ekscitronskog stanja unutar zapremine koja odgovara ekscitonskom radijusu [231, 232]. Zato bi za konstruisanje modela u kome se razlikuju *intermediate* ekscitoni od odgovarajućih perturbovanih atomskih stanja, moralo da bude poznato u kom procentu atomskih klastera se formiraju perturbovane atomska stanja umesto odgovarajućih ekscitonskih stanja, za svaku atomsku ekscitaciju. Morale bi biti poznate i vrednosti pragova za sve ekscitone i sva perturbovana atomska stanja, uključujući i optički zabranjena stanja. Ovo prevazilazi okvire našeg rada i zato su *intermediate* ekscitone i perturbovane atomske ekscitacije reprezentovane odgovarajućim ekscitacijama izolovanog atoma. Međutim, razlika između ovih pragova je manja od 5% za sve primećene ekscitone [231, 232, 239]. Na osnovu toga smo procenili da korišćenje pragova za ekscitacije izolovanih atoma dovodi do male greške. Zanimarili smo $n = 2$ $\Gamma(\frac{3}{2})$ eksciton, koji je primećen u eksperimentima, u sva četiri slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara, pošto on nema poreklo u pojedinačnim stanjima izolovanog atoma. Ni jedan drugi Wannier-ov eksciton višeg reda (za $n > 1$) nije primećen u refleksionom spektru tačnog ksenona [230–232, 239]. Zbog jednostavnosti, u ostatku ove disertacije ekscitacija elektrona iz valentne u provodnu zonu i ekscitoni biće označeni kao jonizacija i ekscitacije, respektivno. Sudarni procesi koji dovode do pobuđivanja ekscitonskih stanja se razlikuju od binarnih sudara, jer se svaki atom nalazi unutar klastera okolnih atoma. Stoga su atomske ekscitacije zamenjene ekscitonima ili perturbovanim atomskim ekscitacijama, zavisno od veličine atomskog klastera [231, 232].

U drugom slučaju su u korišćenom setu preseka uzete u obzir samo ekscitacije čiji su pragovi niži od praga za jonizaciju u tačnom ksenonu, što uključuje $6s[3/2]_2$ i $6s[3/2]_1$ stanja. Ove dve ekscitacije odgovaraju prvoj i drugoj ekscitaciji iz Hayashi-jevog seta preseka [202]. Prvo stanje je optički zabranjeno, dok je drugo optički dozvoljeno. Pri tome $n = 1$ $[\Gamma(\frac{3}{2})]$ eksciton i odgovarajuće perturbovano atomsko stanje vuku poreklo iz $6s[3/2]_1$ ekscitacije.

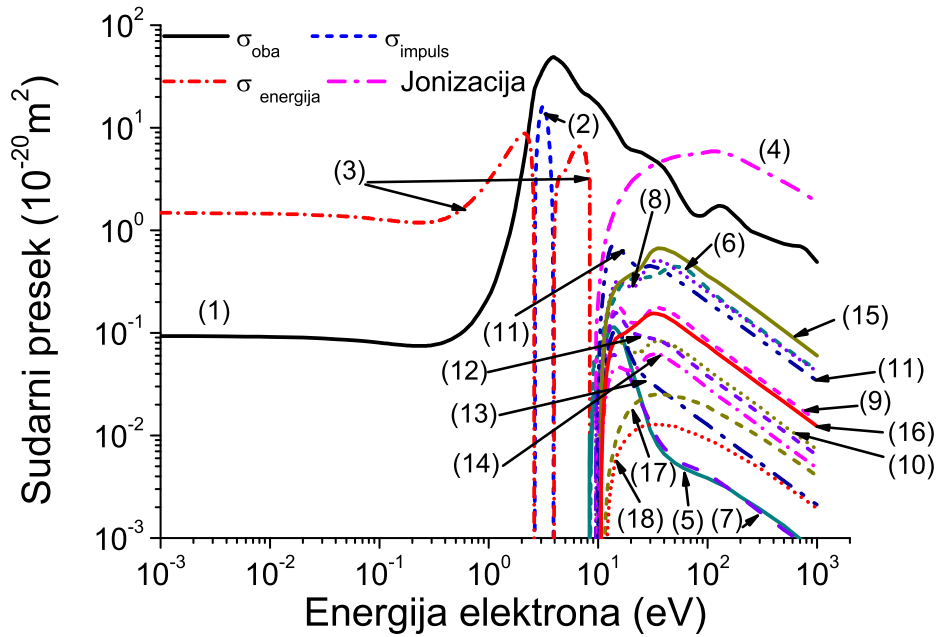
Treći slučaj (Scenario 3): Prve četiri ekscitacije iz Hayashi-jevog seta preseka su uzete u obzir

Ranijim eksperimentima sa fotoprovodnošću u tačnom ksenonu pokazano je da postoje i ekscitonska stanja čiji su pragovi viši od zonskog procepa i koja se sa nekom učestalošću deekscituju i ne vode u disocijaciju. Naime, u spektru fotoprovodnosti u tačnom ksenonu na oko 9.45 eV [233]

primećen je lokalni minimum, kao posledica prisustva diskretnog $n' = 1$ [$\Gamma(\frac{1}{2})$] ekscitona, koji je konkurentan procesu ekscitovanja atoma u provodnu zonu. Primećeni minimum u spektru fotoprovodnosti tečnog ksenona ukazuje na to da ovo diskretno stanje ima kanale koji su alternativni disocijaciji, poput luminiscencije [175]. Pri tome $n' = 1$ [$\Gamma(\frac{1}{2})$] eksciton ima poreklo u atomskom $6s'[1/2]_1$ stanju [231, 232]. Između optički dozvoljenih $6s[3/2]_1$ i $6s'[1/2]_1$ atomskih stanja postoji i optički zabranjeno $6s'[1/2]_0$ atomsko stanje. Ovi ekscitoni, čiji je prag viši od praga za ekscitaciju elektrona iz valentne zone u provodnu zonu, doprinose energijskim gubicima elektrona u neelastičnim sudarima i predstavljaju konkurentan proces ekscitovanju elektrona u provodnu zonu. Zato je potrebno da i ova dva dodatna stanja $6s'[1/2]_0$ i $6s'[1/2]_1$ budu uključena u set preseka za rasejanje elektrona u tečnom ksenonu. Prvo od ova dva stanja odgovara trećoj elektronskoj ekscitaciji iz Hayashi-jevog seta preseka [202]. Četvrta elektronska ekscitacija iz Hayashi-jevog seta odgovara kombinaciji $6s'[1/2]_1$ i $6p[1/2]_1$ stanja [202]. Zato u ovom slučaju uzimamo u obzir prve četiri ekscitacije iz Hayashi-jevog seta preseka.

Slučaj 4 (Scenario 4): Sve ekscitacije iz Hayashi-jevog seta preseka su uzete u obzir

U četvrtom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu uzete su u obzir sve ekscitacije iz Hayashi-jevog seta preseka. Ovaj slučaj predstavlja gornju granicu energijskih gubitaka u ekscitacijama ako se preseki za neelastične sudare i ekscitaciju elektrona u provodnu zonu aproksimiraju odgovarajućim presecima za rasejanje elektrona na izolovanom atomu ksenona i ako se zanemare Wannier-ovi ekscitoni višeg reda (za $n > 1$). Na osnovu dostupnih eksperimentalnih podataka nije moguće sa sigurnošću proceniti da li ekscitoni u tečnom ksenonu, čiji su pragovi viši od 10 eV, u potpunosti disosuju na kvazislobodan elektron u provodnoj zoni i pozitivnu šupljinu u valentnoj zoni (u kojim okolnostima ne bi doprineli dodatnim neelastičnim energijskim gubicima, koji su konkurentan proces ekscitaciji elektrona u provodnu zonu) ili se sa nekom učestalošću deekscituju uz emisiju fotona. U eksperimentu sa fotoprovodnošću u tečnom ksenonu pak nije uočena dodatna struktura u spektru fotoprovodnosti na energijama višim od 9.45 eV [233]. Pritom, u radu u kome su predstavljeni ovi rezultati nije prikazan spektar fotoprovodnosti na energijama višim od 10 eV. Međutim, dva dodatna minimuma su uočena u spektru fotoprovodnosti u fluidnom ksenonu na gustinama koje iznose oko 77.86% gustine tečnog ksenona u blizini trojne tačke, u kasnijem eksperimentu Reininger-a i saradnika [175]. Dodajemo da u ovom eksperimentu nisu razmatrani spektri fotoprovodnosti na višim gustinama. Prvi minimum se formira ekscitovanjem dva susedna stanja ($5d[3/2]_1$ i $7s[3/2]_1$) pri apsorpciji fotona i on se nalazi na energiji od oko 10.32 eV. Drugi minimum se formira ekscitovanjem perturbovanog $5d'[3/2]_1$ stanja i nalazi se na energiji od oko 11.6 eV [175]. Jasno je da u tečnom ksenonu postoje ekscitoni čija je energija viša od 10 eV, pošto je u refleksionom spektru tečnog ksenona uočena spektralna linija na oko 10.32 eV [231, 232, 240], kao i da ova stanja dovode do formiranja minimuma u profilima fotoprovodnosti fluidnog ksenona na gustinama koje su bliske gustini trojne tačke [175]. Ipak ne možemo sa sigurnošću da tvrdimo da li bi ova stanja trebalo uzeti u obzir pri reprezentovanju energijskih gubitaka elektrona u neelastičnim sudarima, pošto ne znamo sa kojom će učestalošću ovi ekscitoni disosovati na kvazislobodan elektron i pozitivnu šupljinu. U ovom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom

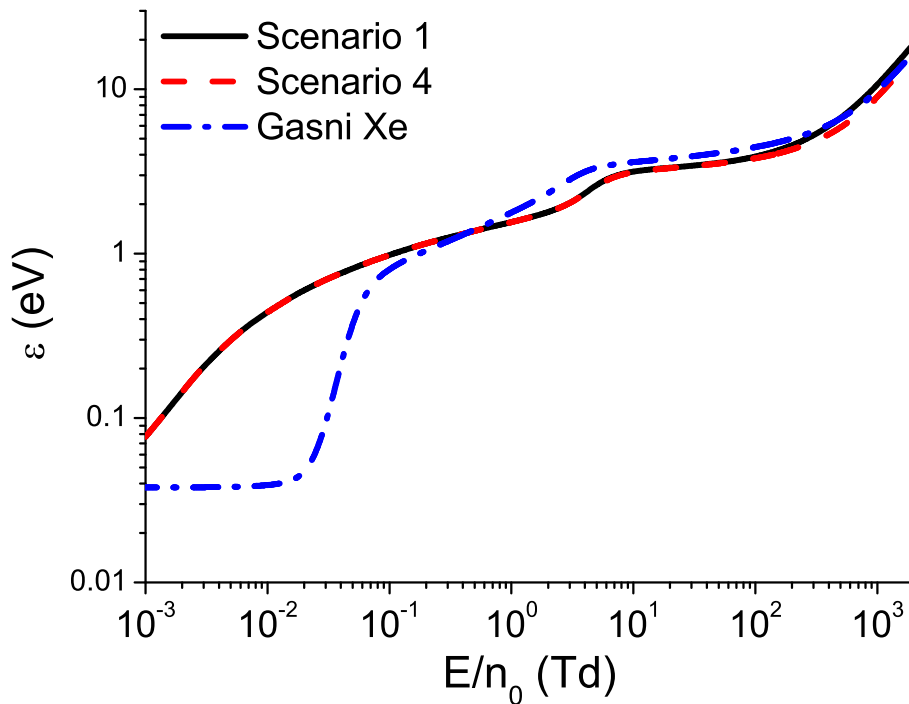


Slika 74: Set preseka za rasejanje elektrona u tečnom ksenonu: (1) σ_{oba} , (2) σ_{impuls} , (3) $\sigma_{energija}$, (4) jonizacija (zonski prelaz), efektivne elektronske ekscitacije: (5) $6s[3/2]_2$, (6) $6s[3/2]_1$, (7) $6s'[1/2]_0$, (8) $6s'[1/2]_1$ i $6p[1/2]_1$, (9) $6p[5/2]_2$ i $6p[5/2]_3$, (10) $6p[3/2]_1$ i $6p[3/2]_2$, (11) $5d[1/2]_0$, $5d[1/2]_1$, $6p[1/2]_0$, $5d[7/2]_4$ i $5d[3/2]_2$, (12) $5d[7/2]_3$, (13) $5d[5/2]_2$, (14) $5d[5/2]_3$, (15) $5d[3/2]_1$, (16) $7s[3/2]_2$, $7s[3/2]_1$, $7p[1/2]_1$, $7p[5/2]_2$, $6p'[3/2]_1$, $7p[5/2]_3$, $6d[1/2]_0$, $6d[1/2]_1$, $7p[3/2]_2$, $6d[3/2]_2$, $7p[3/2]_1$, $7p[1/2]_0$, $6d[7/2]_4$, $6d[7/2]_3$, $6p'[3/2]_2$, $6d[5/2]_2$, $6p[1/2]_1$, $6d[5/2]_3$, $6p'[1/2]_0$ i $6d[3/2]_1$, (17) $8s[3/2]_2$ i (18) $9s[3/2]_2$.

kseonu je pretpostavljeno da se ovi ekscitoni uvek rekombinuju uz emitovanje fotona (ili neki drugi oblik oslobađanja energije bez disocijacije), pri čemu u potpunosti doprinose neelastičnim gubicima elektrona kao proces koji je konkurentan ekscitovanju elektrona iz valentne u provodnu zonu. Ekscitacija $5d[3/2]_1$ odgovara jedanaestoj ekscitaciji iz Hayashi-jevog skupa preseka, dok je $7s[3/2]_1$ ekscitacija uključena u dvanaestu Hayashi-jevu ekscitaciju [202]. Iako ekscitacija $5d'[3/2]_1$, koja dovodi do formiranja minimuma u profilu fotoprovodnosti fluidnog ksenona na oko 11.6 eV, nije uključena u Hayashi-jev set preseka, četrnaesta Hayashi-jeva ekscitacija odgovara $9s[3/2]_2$ stanju koje ima prag na 11.58 eV. Pri tome četrnaesta Hayashi-jeva ekscitacija dobro reprezentuje energijske gubitke u svim neelastičnim procesima čiji su pragovi blizu 11.58 eV u gasnom ksenonu. Sve ostale efektivne ekscitacije iz Hayashi-jevog seta preseka sadrže u sebi doprinose optički zabranjenih prelaza. Zbog toga je potrebno uključiti i ove ekscitacije u naš set preseka, budući da se, na osnovu odsustva linija koje odgovaraju optički zabranjenim stanjima, u refleksionom spektru ne može zaključiti da ova stanja ne doprinose neelastičnim energijskim gubicima kvazislobodnih elektrona. S tim su razlogom u našem četvrtom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara uzete u obzir sve efektivne ekscitacije iz Hayashi-jevog seta preseka. Na slici 74 prikazan je set preseka za elektrone u tečnom ksenonu, koji odgovara četvrtom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara.

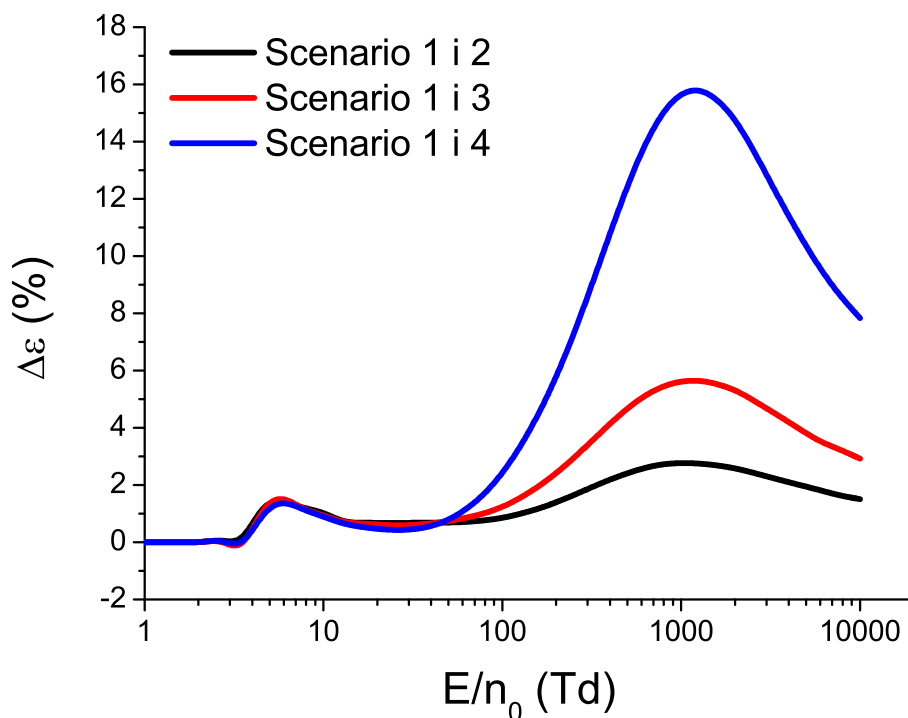
6.2.2 Rezultati vezani za transport elektrona u tečnom ksenonu

Na slici 75 je prikazano poređenje vrednosti srednje energije elektrona u gasnom ksenonu sa vrednostima srednje energije elektrona u tečnom ksenonu – srednje energije koje se porede dobijene su primenom prvog i četvrtog slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnoj fazi. Na poljima nižim od oko 0.5 Td srednja energija u tečnom ksenonu viša je od srednje energije u gasnom ksenonu, jer je na niskim energijama presek za elastično rasejanje elektrona znatno manji u tečnom nego u gasnom ksenonu. Ovaj trend se menja na višim poljima, na kojima je vrednost srednje energije blizu 1 eV, zbog toga što je dinamika rasejanja elektrona, čija je energija viša od 1 eV, u atomskim tečnostima slična kao u gasnoj fazi. Srednja energija je niža u tečnom ksenonu nego u gasnom ksenonu u opsegu polja između 0.5 Td i 350 Td. Na poljima nižim od 3 Td ova je razlika između vrednosti srednje energije u gasnoj i tečnoj fazi posledica toga što je presek za transfer energije u tečnom ksenonu veći od preseka za elastične sudare u gasnom ksenonu u energijskom intervalu između oko 0.4 eV i 5 eV [68]. Za opseg polja između 3 Td i 350 Td ova razlika posledica intenzivnog hlađenja roja jonizacijom u tečnoj fazi. Hlađenje roja jonizacijom u gasnoj fazi je diskutovano u radu [241]. Na poljima višim od 350 Td je srednja energija u tečnom ksenonu, koja je dobijena na osnovu prvog/četvrtog slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara, jeste viša/niža od srednje energije u gasnom ksenonu.



Slika 75: Poređenje vrednosti srednje energije za rojeve elektrona u gasnom i tečnom ksenonu. Vrednosti srednje energije u tečnom ksenonu su određene u dva različita slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara. U prvom slučaju (Scenario 1) su sve ekscitacije zanemarene, dok su u četvrtom slučaju (Scenario 4) uzete u obzir sve ekscitacije iz Hayashi-jevog seta preseka za elektrone u gasnom ksenonu [202]. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

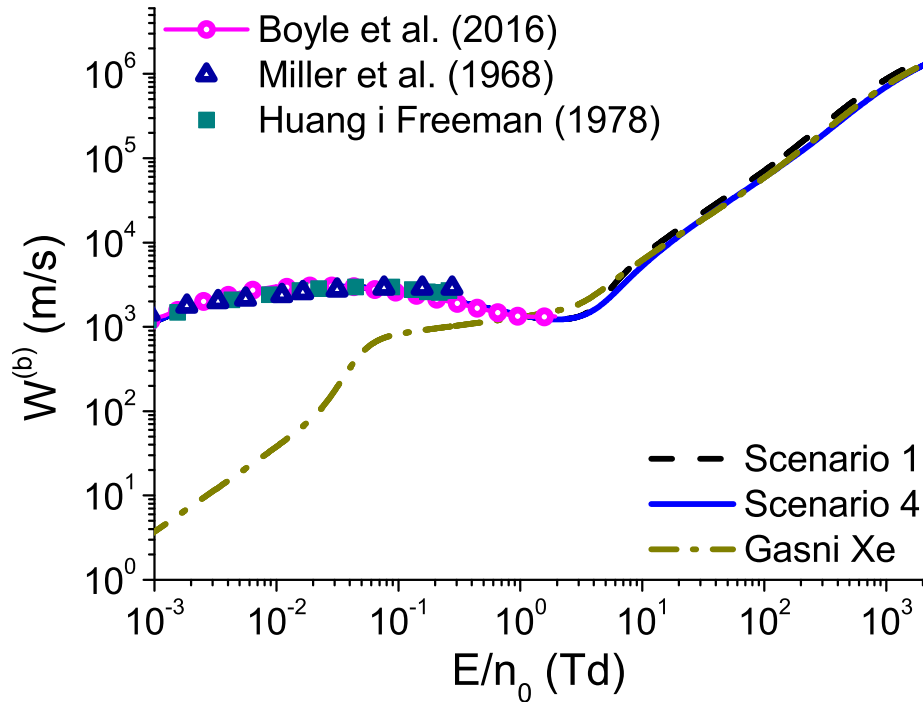
Slika 76 ilustruje procentualne razlike između vrednosti srednje energije koja je određena



Slika 76: Procentualne razlike između vrednosti srednje energije, za elektrone u tečnom ksenonu, koje su određene u različitim slučajevima za reprezentovanje neelastičnih gubitaka energije. Sve ekscitacije su zanemarene u prvom slučaju (Scenario 1). U drugom i tećem slučaju (Scenario 2 i Scenario 3) su uzete u obzir samo prve dve ($6s[3/2]_2$ i $6s[3/2]_1$) i prve četiri ($6s[3/2]_2$, $6s[3/2]_1$, $6s'[1/2]_0$ i efektivna ekscitacija koja reprezentuje $6s'[1/2]_1$ i $6p[1/2]_1$) ekscitacije iz Hayashi-jevog seta preseka za elektrone u gasnom ksenonu [202], respektivno. Sve ekscitacije iz Hayashi-jevog seta su uzete u obzir u četvrtom slučaju (Scenario 4). Rezultati su dobijeni na osnovu Monte Carlo simulacija.

primenom prvog slućaja i vrednosti srednje energije koje su dobijene na osnovu preostala tri slućaja za reprezentovanje neelastićnih sudara. Ove su razlike zanemarljive na poljima nižim od oko 2 Td zato što elektroni učestvuju samo u elastićnim sudarima na niskim poljima. Na višim poljima je srednja energija najviša u prvom slućaju, i to zbog odsustva energijskih gubitaka u ekscitacijama. Procentualne razlike između vrednosti srednje energije, koje su dobijene na osnovu različitićh reprezentacija neelastićnih sudara u tećnom ksenonu, dostižu dva lokalna maksimuma na oko 5.9 Td i 1300 Td i lokalni minimum na oko 27 Td. Prvi lokalni maksimum je posledica odsustva neelastićnih gubitaka na energijama nižim od praga za jonizaciju u prvom slućaju za reprezentovanje neelastićnih sudara. Lokalni minimum se nalazi u opsegu polja u kome energijski gubici u jonizaciji postaju uporedivi sa energijskim gubicima u ekscitacijama. U opsegu polja između 10 Td i 50 Td ove su procentualne razlike jako male i nalaze se u okviru statistićeke nesigurnosti Monte Carlo simulacija. Na poljima višim od 50 Td, srednja energija primento opada sa porastom broja ekscitacija, što je posledica znaćajnog porasta brzinskićh koeficijenata za ekscitacije na visokim poljima. Procentualne razlike između vrednosti srednje energije u prvom slućaju i u preostala tri slućaja ne prevazilaze 3%, 6% i 16% za drugi, treći i četvrti slućaj, respektivno. Iako procentualne razlike između vrednosti srednje energije, koje su

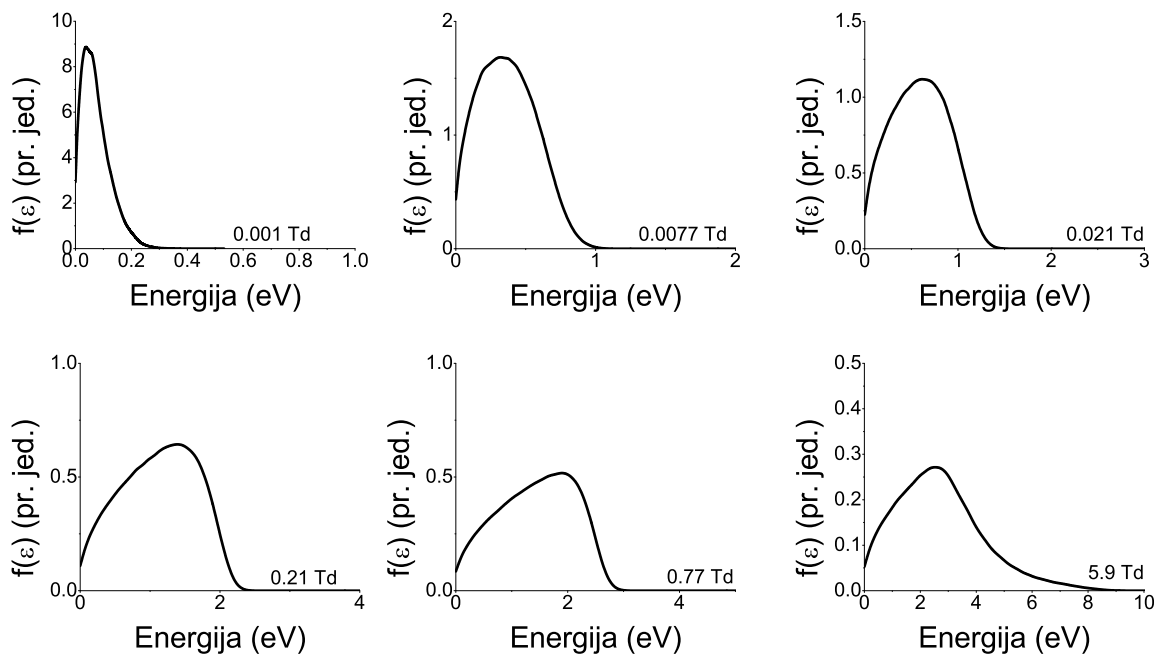
dobijene u različitim slučajevima za reprezentovanje neelastičnih sudara, opadaju sa porastom E/n_0 nakon drugog lokalnog maksimuma, apsolutne razlike između ovih vrednosti se monotono povećavaju sa porastom E/n_0 do kraja razmatranog opsega polja.



Slika 77: Poređenje eksperimentalno određene brzine drifta za roj elektrona u tečnom ksenonu (Miller *et al.* [229] i Huang i Freeman [242]) sa teorijskim proračunima. Među teorijskim rezultatima su prikazani proračuni Boyle-a i saradnika [69], kao i vrednosti balk brzine drifta koje su određene u okviru ovog rada a primenom dva različita metoda za reprezentovanje neelastičnih sudara. Na ovom grafiku je prikazana i balk brzina drifta za roj elektrona u gasnom ksenonu, radi poređenja. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

Na slici 77 date su vrednosti balk brzine drifta, koje su dobijene u prvom i četvrtom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu, u funkciji E/n_0 . Radi poređenja su na istom grafiku prikazane teorijske i eksperimentalne vrednosti brzine drifta u tečnom ksenonu, koje su utvrdili prethodni autori, kao i vrednosti balk brzine drifta u gasnom ksenonu. Na poljima nižim od 1 Td brzina drifta je veća u tečnoj nego u gasnoj fazi. Pritom je ova razlika najintenzivnija na niskim poljima (na oko 10^{-3} Td), gde je brzina drifta u tečnom ksenonu za preko dva reda veličine veća od brzine drifta u gasnom ksenonu. Razlika između vrednosti brzine drifta u tečnoj i gasnoj fazi na niskim poljima je posledica znatno manjeg preseka za transfer impulsa u tečnom ksenonu na niskim energijama, zbog kombinovanog uticaja modifikacije potencijala u kome se rasejavaju pojedinačni elektroni u tečnoj fazi i strukturno indukovanih koherentnih efekata. Niža vrednost preseka za transfer impulsa omogućava električnom polju da ubrzava elektrone znatno efikasnije u tečnom ksenonu nego u gasnoj fazi. Ovaj je efekat značajno smanjen na višim poljima, imajući u vidu to da se rasejanje visokoenergijskog elektrona u atomskim tečnostima ne razlikuje značajno od rasejanja na izolovanom atomu. Zbog toga u opsegu polja između 0.02 Td i 2 Td brzina drifta u tečnom ksenonu opada sa porastom E/n_0

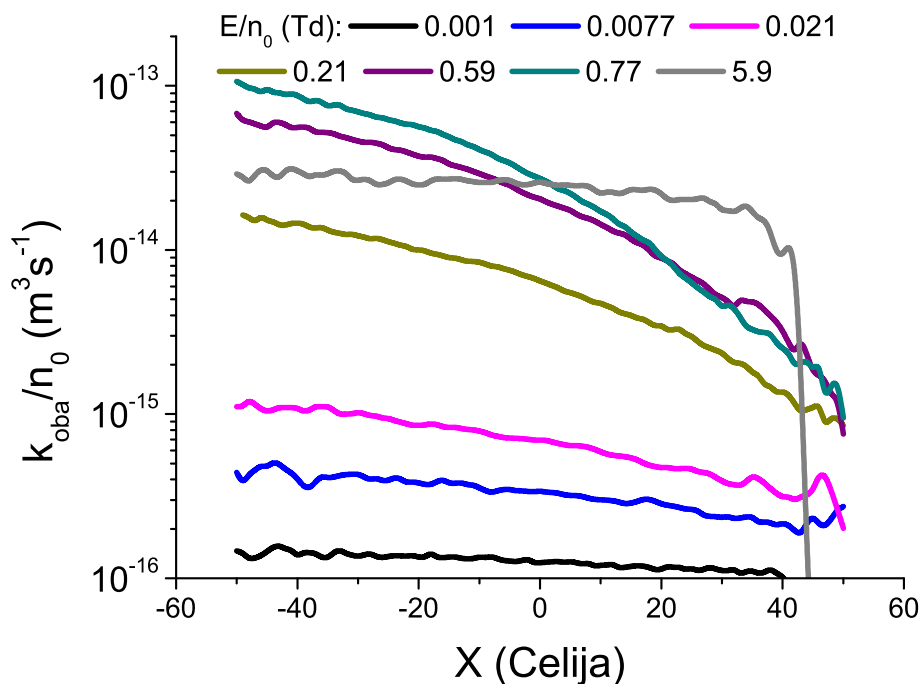
sve dok ne dostigne vrednosti koje su bliske brzini drifta u gasnom ksenonu. Opadanje brzine drifta sa porastom E/n_0 je fenomen u literaturi poznat kao negativna diferencijalna provodnost (eng. negative differential conductivity, skraćeno NDC) [13, 14, 243]. Dok je u gasnoj fazi ovaj efekat izazvan kombinacijom energijske zavisnosti elastičnih i neelastičnih sudara ili prisustvom nekonzervativnih procesa [13, 243], u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu je negativna diferencijalna provodnost u potpunosti indukovana strukturnim efektima (zbog smanjenja koherentnih efekata na rasejanje elektrona sa porastom energije) [68, 69, 244]. Kvantitativne kriterijume za pojavu strukturno indukovane negativne diferencijalne provodnosti podrobno su tumačili White i Robson [244].



Slika 78: Funkcije raspodele elektrona po energijama prikazane u proizvoljnim jedinicama, za različite vrednosti redukovanoeg električnog polja E/n_0 . Ove funkcije raspodele su određene u drugom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara, u kome su uzete u obzir samo prve dve ekscitacije ($6s[3/2]_2$ i $6s[3/2]_1$) iz Hayashi-jevog seta preseka. Rezultati su dobijeni uz pomoć Monte Carlo simulacija.

Slika 78 prikazuje funkcije raspodele po energijama za elektrone u tečnom ksenonu na nekoliko vrednosti redukovanoeg električnog polja, s ciljem detaljnije analize strukturno indukovane negativne diferencijalne provodnosti u tečnom ksenonu. Prikazani rezultati su dobijeni primenom drugog slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu, pošto su brzinski koeficijenti za ekscitacije, koje nisu uzete u obzir u ovom slučaju, zanemarljivi u ovom opsegu polja. Na poljima nižim od oko $7.7 \cdot 10^{-3}$ Td većina elektrona ima energiju nižu od oko 0.7 eV. Presek za transfer impulsa je u energijskom intervalu nižem od 0.7 eV znatno manji u tečnom nego u gasnom ksenonu, pa je brzina drifta u tečnoj fazi znatno veća nego u gasnoj fazi. Međutim, na poljima višim od oko $2 \cdot 10^{-2}$ Td (na ovoj vrednosti polja počinje negativna diferencijalna provodnost) veliki broj elektrona ima vrednost energije u intervalu između 0.7 i 2 eV. U ovom opsegu polja se preseki σ_{oba} i $\sigma_{energija}$ naglo povećavaju sa porastom energije i

približavaju se preseku za elastične sudare u gasnoj fazi. Nagli porast ova dva preseka sa porastom energije dovodi do opadanja brzine drifta sa porastom E/n_0 . Na poljima višim od oko 5 Td veliki procenat elektrona ima energiju višu od 4 eV i nalazi se u energijskom opsegu u kome presek za elastično rasejanje naglo opada sa porastom energije. U ovom rasponu polja se brzina drifta monotono povećava sa porastom E/n_0 . Za vrednosti E/n_0 na kojima se dešava negativna diferencijalna provodnost visokoenergijski rep funkcije raspodele po energijama naglo opada sa porastom energije. Ovo je posledica naglog povećanja brzine transvera energije, koji je opisan efektivnim presecima σ_{oba} i $\sigma_{energija}$, sa porastom energije elektrona u energijskom intervalu između oko 0.7 eV i 4 eV. Na poljima nižim od $7.7 \cdot 10^{-3}$ Td i višim od 4 Td visokoenergijski rep funkcije raspodele sporije opada sa porastom energije.

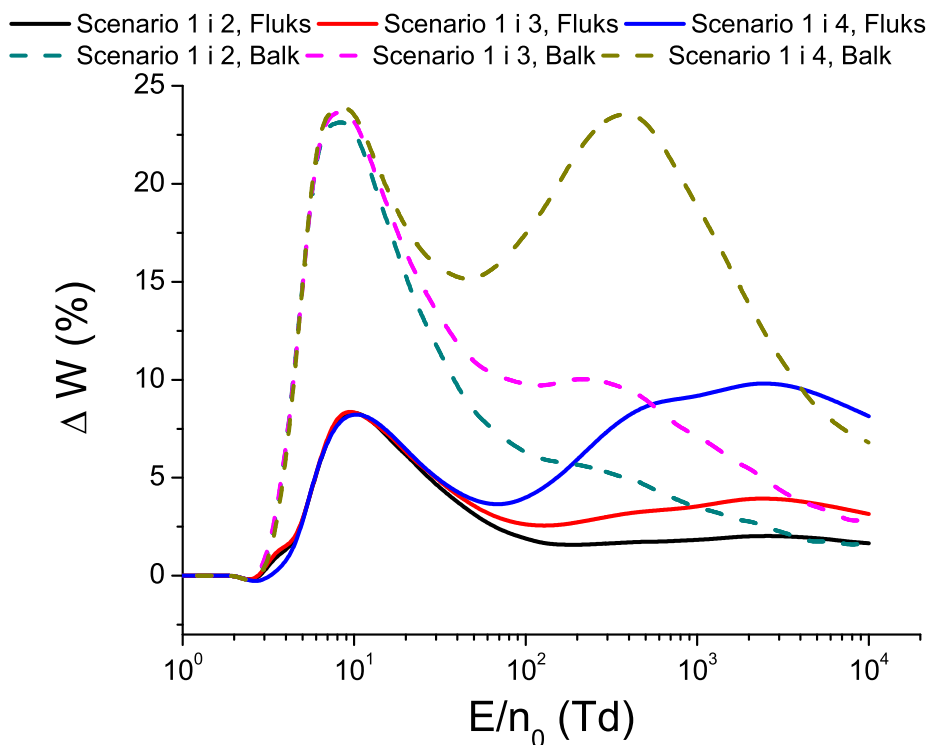


Slika 79: Prostorno razloženi brzinski koeficijent za σ_{oba} proces. Ovaj brzinski koeficijent je određen u drugom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara, u kome su samo prve dve ekscitacije ($6s[3/2]_2$ i $6s[3/2]_1$) iz Hayashi-jevog seta preseka uzete u obzir. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

Na slici 79 je prikazan prostorno razloženi brzinski koeficijent za efektivni sudarni proces koji je reprezentovan σ_{oba} presekom. Zarad samplovanja prostorno razloženih veličina konfiguracioni prostor je podeljen u 100 ćelija, na takav način da ćelije sa indeksima (-50, +50) odgovaraju prostornim koordinatama ($x_{cm} \pm 3\sigma$), gde je x_{cm} x -koordinata centra mase roja, a σ je standardna devijacija x -koordinate elektrona [31]. Brzinski koeficijent za ovaj efektivni sudarni proces je veći na frontu nego na začelju roja, zbog porasta srednje energije u smeru kretanja elektrona. Nagib ovog prostorno razloženog brzinskog koeficijenta je najveći u opsegu polja u kome se javlja negativna diferencijalna provodnost. Uz to su maksimalne vrednosti ovog brzinskog koeficijenta veće na 0.59 Td i 0.77 Td nego na 5.9 Td. Sličan trend ponašanja se javlja za prostorno razloženi brzinski koeficijent za efektivni sudarni proces, koji je reprezentovan σ_{impuls} presekom u opsegu polja prikazanom na slici 79.

Drift brzina koja je određena u našem radu se odlično slaže sa teorijskim rezultatima Boyle-a i saradnika [69]. Naše vrednosti brzine drifta su bliske vrednostima koje su određene u eksperimentima Miller-a i saradnika [229] i Huang-a i Freeman-a [242]. Međutim, iako većina teorijskih proračuna brzine drifta u tečnom ksenonu predviđa strukturno indukovanu negativnu diferencijalnu provodnost, ovaj efekat nije primećen u eksperimentima. U opsegu polja u kome teorijske vrednosti predviđaju početak strukturno indukovane negativne diferencijalne provodnosti, eksperimentalna brzina drifta saturira sa porastom polja, a na višim poljima nema dostupnih eksperimentalnih rezultata. Sakai i saradnici [108] su ovo neslaganje između teorijskih i eksperimentalnih vrednosti brzine drifta pripisali dodatnim kanalima za neelastične gubitke energije, koji nisu uključeni u postojeće teorijske modele. Ovi energijski gubitci odgovaraju promeni u translacionim stanjima parova i tripleta atoma ksenona pri sudaru sa elektronom. Energijski pragovi za ove procese su znatno niži od prvog praga za ekscitacije [101,108]. Sakai i saradnici su empirijski odredili setove preseka za rasejanje elektrona u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu, koji u sebi sadrže efektivne preseke za reprezentovanje ovih dodatnih gubitaka energije [101,108]. Alternativno objašnjenje za ovo neslaganje između teorije i eksperimenta moglo bi biti prisustvo molekularnih nečistoća u tečnim plemenitim gasovima koji su korišćeni u eksperimentu. Sakai i saradnici su pokazali da čak i male koncentracije molekularnih nečistoća u tečnim plemenitim gasovima dovode do značajnog povećanja brzine drifta [108]. Takođe nije isključeno da bi se strukturno indukovana negativna diferencijalna provodnost pojavila u eksperimentalnim profilima brzine drifta na višim vrednostima redukovano električnog polja. Dodatna teorijska i eksperimentalna ispitivanja su potrebna da bi se našao uzrok ovog neslaganja. Zato su neophodna merenja brzine drifta u tečnom ksenonu na višim poljima. U svakom slučaju, u naš model ne uključujemo efektivni presek Sakai-a i saradnika [108], jer on nije prilagođen našem preseku za elastično rasejanje.

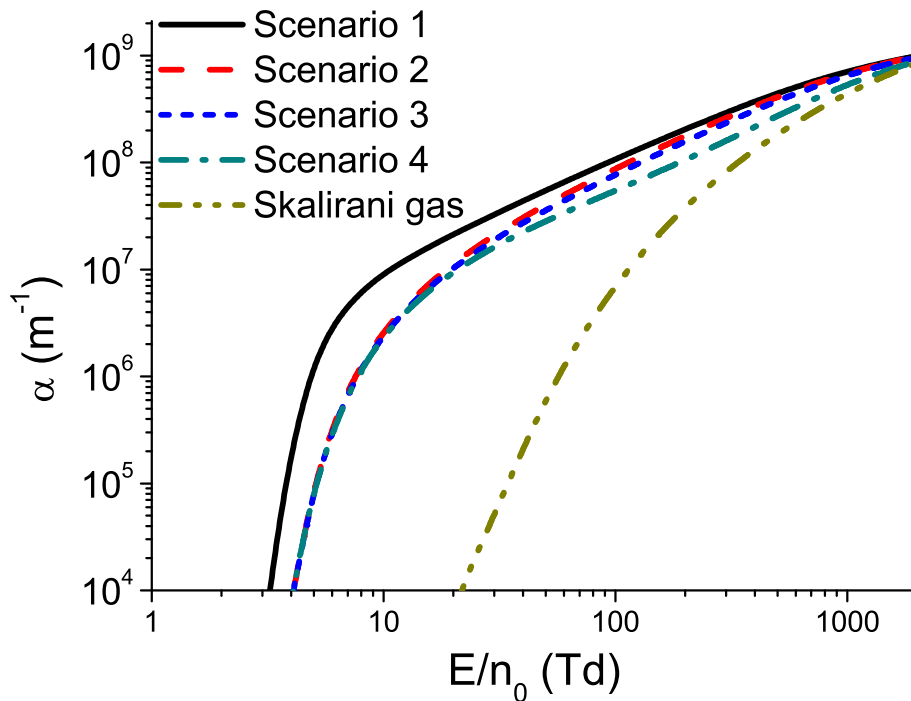
Slika 80 prikazuje procentualne razlike između vrednosti brzine drifta koja je izračunata primenom prvog slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara elektrona u tečnom ksenonu sa vrednostima brzine drifta koje su određene primenom preostala tri slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara. Fluks brzina drifta se povećava sa smanjenjem broja ekscitacija koje su uključene u model. Ovo je posledica smanjenja haotične komponente brzine elektrona, zbog intenzivnijeg hlađenja roja jonizacijom sa smanjenjem energijskih gubitaka u ekscitacijama [241]. Balk brzina drifta se sa smanjenjem broja ekscitacija povećava još intenzivnije od fluks brzine drifta, zbog eksplicitnih efekata jonizacije. Procentualne razlike između vrednosti brzine drifta koje su određene u prvom slučaju i vrednosti brzine drifta koje su određene u preostala tri slučaja imaju lokalne maksimume na oko 8 Td, pošto su relativne razlike između brzinskih koeficijenata za jonizaciju u prvom i preostala tri slučaja najintenzivnije na niskim poljima. Ovi lokalni maksimumi iznose oko 8% i 24% za fluks i balk brzinu drifta, respektivno. Na poljima višim od 100 Td procentualne razlike između fluks brzine drifta u prvom slučaju i poslednja dva slučaja monotono se povećavaju sa porastom E/n_0 , kao posledica brzinskih koeficijenata za ekscitacije, čiji je prag preko 9.22 eV u ovom opsegu polja. Procentualne razlike između odgovarajućih vrednosti balk brzine drifta dostižu još jedan lokalni maksimum na oko 200 Td i 400 Td za treći i četvrti slučaj, respektivno. Iako procentualne razlike između vrednosti balk



Slika 80: Procentualne razlike između vrednosti brzine drifta za elektrone u tečnom ksenonu, koje su određene u različitim slučajevima za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnoj fazi. Ovi slučajevi su opisani u zaglavlju grafika 76. Fluks i balk rezultati su reprezentovani punim i isprekidanim linijama, respektivno. Rezultati su dobijeni na osnovu Monte Carlo simulacija.

brzine drifta, koje su dobijene u različitim slučajevima za reprezentovanje neelastičnih sudara, monotono opadaju sa porastom E/n_0 nakon poslednjeg lokalnog maksimuma, apsolutne razlike između ovih vrednosti brzine drifta se monotono povećavaju do kraja razmatranog opsega polja (do 2000 Td).

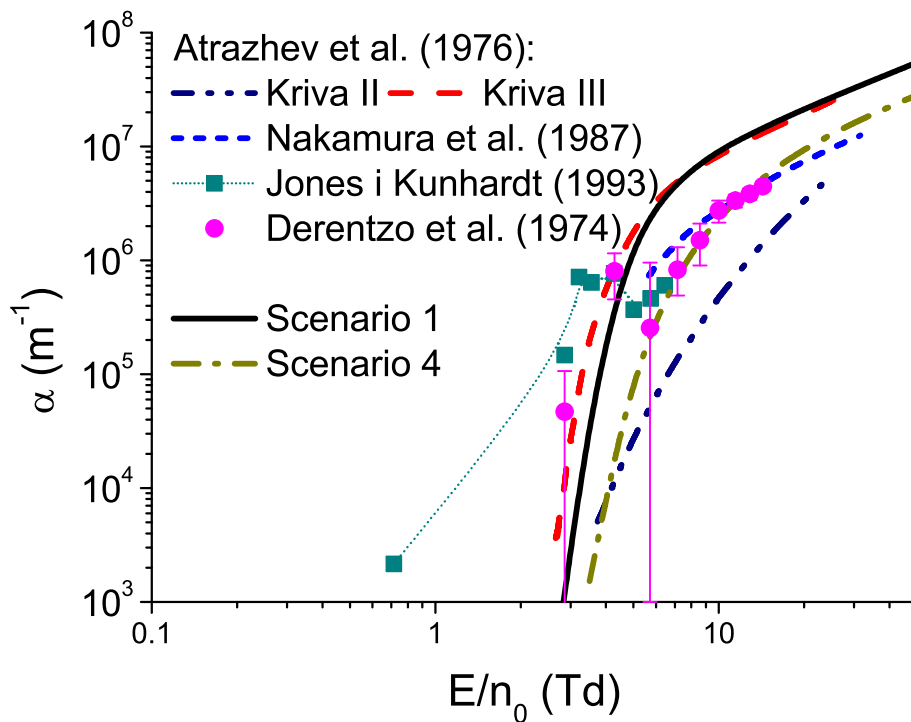
Prvi Townsend-ov koeficijent, α , opisuje broj jonskih parova koje proizvede jedan elektron po jedinici dužine. Ukoliko zanemarimo efekte difuzije, ovaj koeficijent je jednak brzinskom koeficijentu za jonizaciju koji je pomnožen sa koncentracijom atoma pozadinske sredine i podeljen sa brzinom drifta elektrona. Vrednosti prvog Townsend-ovog koeficijenta koje su dobijene u našim proračunima u različitim slučajevima za reprezentovanje neelastičnih sudara prikazane su na slici 81. Na njoj je, poređenja radi, prikazan i prvi Townsend-ov koeficijent u gasnom ksenonu, koji je skaliran na gustinu tečnog ksenona. Može se videti da se α monotono povećava sa porastom E/n_0 u sva četiri slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu. Prvi Townsend-ov koeficijent ima najveću vrednost u prvom slučaju, u kome su sve ekscitacije zanemarene u celom opsegu polja. Iako se apsolutne razlike između vrednosti α koje su određene u različitim slučajevima za reprezentovanje neelastičnih sudara monotono povećavaju u celom razmatranom opsegu, relativne razlike su najveće na poljima nižim od 20 Td. Na poljima višim od 20 Td je prvi Townsend-ov koeficijent u četvrtom slučaju, u kome su sve ekscitacije uzete u obzir, znatno niži nego u ostala tri slučaja. Ovo je posledica povećanja brzinskih koeficijenata za neelastične sudare čiji su pragovi viši od 9.22 eV sa porastom E/n_0 u četvrtom slučaju.



Slika 81: Zavisnost prvog Townsend-ovog koeficijenta od redukovanog električnog polja E/n_0 za roj elektrona u tečnom ksenonu. Ove vrednosti su određene primenom sva četiri različita metoda za reprezentovanje neelastičnih sudara. Ovi metodi su opisani u zaglavlju grafika 76. Na grafiku je, radi poređenja, prikazan i prvi Townsend-ov koeficijent za roj elektrona u gasnom ksenonu, koji je skaliran na gustinu tečnog ksenona. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

Prvi Townsend-ov koeficijent u tečnom ksenonu je znatno viši od prvog Townsend-ovog koeficijenta u gasnom ksenonu, koji je skaliran na gustinu tečnosti, na poljima nižim od 100 Td. Na višim poljima je, međutim, ova razlika znatno manja. Jedan od glavnih razloga za veliku razliku između vrednosti brzinskih koeficijenata za jonizaciju u tečnom i gasnom ksenonu jeste sniženje praga za jonizaciju u tečnoj fazi. Elektron u gasnom ksenonu može učestvovati u elektronskoj sudarnoj jonizaciji samo na energijama višim od 12.13 eV. Uz to, u gasnoj fazi elektron može izgubiti značajnu količinu energije u velikom broju elektronskih ekscitacija, čiji su pragovi niži od praga za jonizaciju. No u tečnom ksenonu svaki elektron čija je energija viša od 9.22 eV može da ekscituje elektron iz valentne zone u provodnu zonu. Pored toga, u tečnom ksenonu postoji znatno manji broj ekscitacija čiji prag je niži od praga za jonizaciju nego u gasnom ksenonu.

Na slici 82 su predstavljene eksperimentalne vrednosti prvog Townsend-ovog koeficijenta koje su odredili Derentzo i saradnici [245], zajedno sa teorijskim vrednostima koje su utvrdili raniji autori [110, 112, 113]. S ciljem poređenja su na ovom grafiku prikazane i vrednosti prvog Townsend-ovog koeficijenta koje smo odredili u našem radu, pretpostavljajući prvi i četvrti slučaj za reprezentovanje neelastičnih sudara. Eksperimentalne vrednosti Derentzo-a i saradnika [245] su znatno više od vrednosti α za elektrone u gasnom ksenonu. Neobična osobina rezultata Derentzo-a i saradnika je nemonotono ponašanje sa porastom E/n_0 . Ova nemonoto-

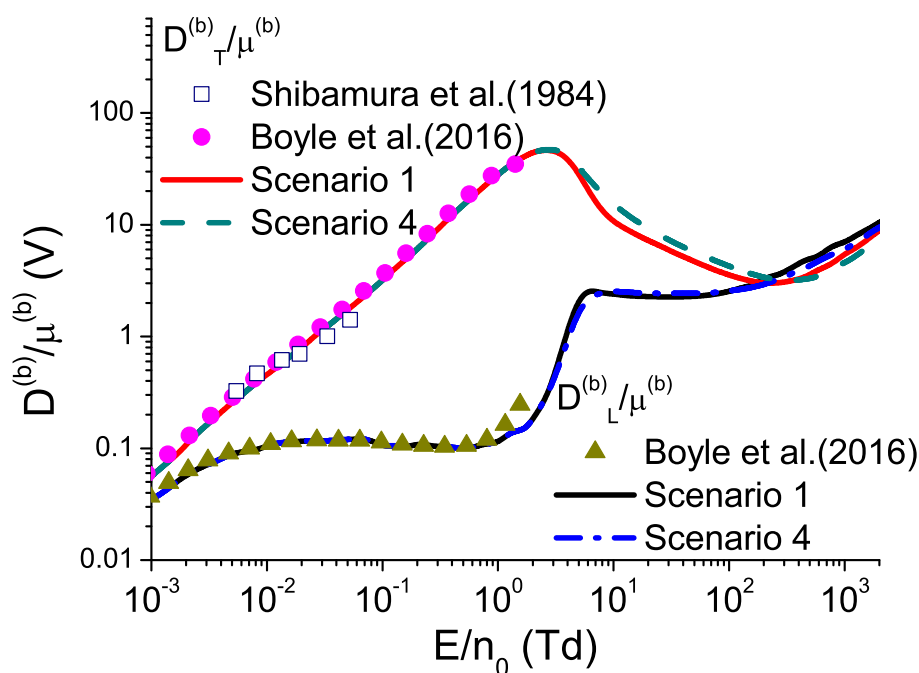


Slika 82: Poređenje vrednosti prvog Townsend-ovog koeficijenta α , koje su određene u ovom radu, sa rezultatima prethodnih autora. Među ovim rezultatima su uključeni eksperimentalni rezultati Derentzo-a i saradnika [245], kao i proračuni Atrazhev-a i saradnika [110], Jones-a i Kunhardt-a [112] i Nakamura-e i saradnika [113].

nost je u granicama eksperimentalne nesigurnosti. Dva seta rezultata koje su odredili Atrazhev i saradnici su izračunata, uz pretpostavku dva različita metoda za reprezentovanje neelastičnih sudara [110]. Vrednosti prvog Townsend-ovog koeficijenta, koje su reprezentovane krivom II, određene su pod pretpostavkom da je udeo energijskih gubitaka u tečnoj fazi isti kao u gasnoj fazi [110]. Ova kriva je znatno ispod svih ostalih krivih sa slike 82. Snažno odstupanje vrednosti α koje su reprezentovane krivom II od vrednosti koje su reprezentovane ostalim krivama ukazuje na značajno smanjenje neelastičnih energijskih gubitaka u ekscitacijama u tečnom ksenonu u poređenju sa gasnim ksenonom, kao što su приметili Atrazhev i saradnici [110]. Pri određivanju vrednosti α , koje su reprezentovane krivom III, neelastični gubici energije u ekscitacijama su u potpunosti zanemareni [110]. Ova kriva se najbolje slaže sa prve dve eksperimentalne vrednosti Derentzo-a i saradnika [245] i sa našom krivom 1. Vrednosti prvog Townsend-ovog koeficijenta, koje su odredili Jones i Kunhardt [112], su za sada jedini teorijski rezultat koji predviđa nemonotono ponašanje α sa porastom E/n_0 . Njihovi se rezultati jako dobro slažu sa prve četiri eksperimentalne tačke Derentzo-a i saradnika, ali vrednosti α na višim poljima nisu prikazane u njihovom radu. Rezultati Nakamure i saradnika [113] se dobro slažu sa poslednjim segmentom eksperimentalnih tačaka Derentzo-a i saradnika [245], ali u njihovom radu nisu prikazane vrednosti α na nižim poljima.

Dok se naše vrednosti dobijene u prvom slučaju reprezentovanja neelastičnih sudara najbolje slažu sa prve dve eksperimentalne tačke Derentzo-a i saradnika, sve ostale eksperimentalne tačke se odlično slažu sa naša preostala tri slučaja [245]. Nisu dostupni eksperimentalni podaci za prvi

Townsend-ov koeficijent α u opsegu polja u kome se vrednosti α , koje su određene u poslednja tri slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara, značajno međusobno razlikuju. Međutim, poslednje dve tačke Derentzo-a i saradnika se nešto bolje slažu sa našim četvrtim slučajem nego sa ostala tri slučaja [245]. Moguće objašnjenje za visoke vrednosti prve dve eksperimentalne tačke Derentzo-a i saradnika jeste prisustvo nekog drugog mehanizma za populisanje provodne zone, koji je značajniji od elektronske sudarne jonizacije na niskim poljima. Jedan primer takvog mehanizma je disosovanje Wannier-ovih ekscitona višeg reda ($n > 1$), pri rasejanju na zidovima sistema, ili u prisustvu neke druge perturbacije. Drugo moguće objašnjenje je redukcija neelastičnih gubitaka energije u procesima čiji su pragovi niži od 9.22 eV, zbog nekih drugih efekata koji nisu uzeti u obzir u našem modelu.

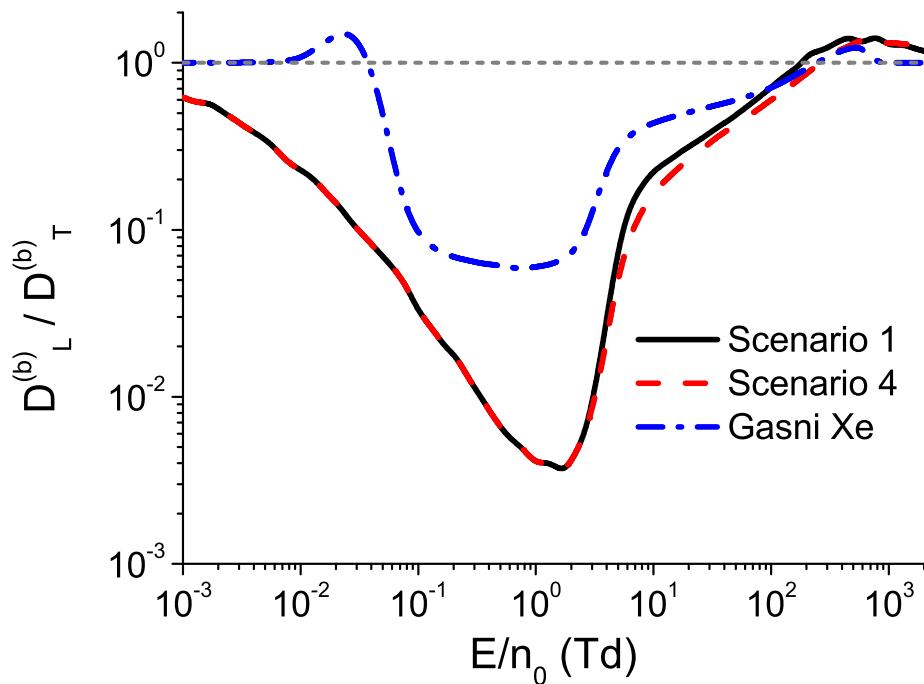


Slika 83: Poređenje vrednosti balk longitudinalne karakteristične energije D_L/μ i balk transverzalne karakteristične energije D_T/μ , koje su određene u ovom radu, sa teorijskim rezultatima Boyle-a i saradnika [69] i eksperimentalnim rezultatima Shibamura-e i saradnika [246] za roj elektrona u tečnom ksenonu. Naši rezultati su dobijeni na osnovu Monte Carlo simulacija uz primenu scenarija 1 i 4 za reprezentovanje neelastičnih sudara.

Zavisnosti D_L/μ i D_T/μ od E/n_0 u prvom i četvrtom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu prikazane su na slici 83. Vrednosti ovih veličina koje su izračunali Boyle i saradnici [69] prikazane su na istom grafiku radi poređenja, zajedno sa eksperimentalnim vrednostima karakteristične energije Shibamura-e i saradnika [246]. Ovde D_L i D_T označavaju longitudinalnu i transverzalnu komponentu balk difuzionog tenzora, dok μ označava balk mobilnost elektrona. Karakteristična energija D_T/μ na početku se povećava sa porastom E/n_0 i dostiže lokalni maksimum na oko 2 Td, nakon čega opada sa porastom E/n_0 . Na poljima višim od 300 Td se D_T/μ ponovo povećava sa porastom E/n_0 . Zavisnost D_L/μ od E/n_0 je složenija od odgovarajuće zavisnosti D_T/μ . Na najnižim poljima se D_L/μ polako povećava sa porastom E/n_0 , zbog male vrednosti preseka za transfer impulsa niskoenergijskih elektrona u tečnom

ksenonu. Nakon toga D_L/μ postepeno opada sa porastom E/n_0 između oko 0.05 Td i 0.4 Td, posle čega se ova veličina naglo povećava sa porastom polja do oko 6 Td. U opsegu polja između 6 Td i 30 Td D_L/μ opada sa porastom E/n_0 kao posledica energijskih gubitaka u neelastičnim sudarima. Na višim poljima se D_L/μ ponovo povećava sa porastom E/n_0 , pošto u ovom opsegu polja elektroni dobijaju veliku količinu energije od električnog polja. Složeno ponašanje D_L/μ u tečnom ksenonu odslikava osetljivost ove veličine na detalje energijske zavisnosti preseka za sudare.

Sa slike 83 se vidi da se naše vrednosti D_L/μ jako dobro slažu sa vrednostima Boyle-a i saradnika na poljima nižim od 0.7 Td. Međutim, naši rezultati su niži od njihovih rezultata na višim poljima. Ova razlika se može pripisati razlici u korišćenim presecima pošto su Boyle i saradnici u potpunosti zanemarili neelastične sudare i jonizaciju u svojim proračunima. Kako je srednja energija elektrona oko 1.8 eV na 1 Td, najenergijijski elektroni imaju dovoljno energije za neelastične sudare. Vrednosti D_T/μ koje su dobijene u našim proračunima se dobro slažu sa rezultatima Boyle-a i saradnika [69] i Shibamura-e i saradnika [246].



Slika 84: Poređenje vrednosti količnika balk longitudinalne difuzije i balk transverzalne difuzije, koje su određene u prvom i četvrtom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu, sa odgovarajućim količnikom u gasnom ksenonu. Ovi slučajevi za reprezentovanje neelastičnih sudara su opisani u zaglavlju grafika 77. Rezultati koji su prikazani na ovom grafiku su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

Na slici 84 su prikazane vrednosti količnika longitudinalne i transverzalne komponente difuzionog tenzora, D_L/D_T , za elektrone u tečnom ksenonu u prvom i četvrtom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnosti. Ovaj količnik je kvantitativni pokazatelj anizotropije difuzije. Vrednosti D_L/D_T za elektrone u gasnom ksenonu su prikazane na istom grafiku, radi poređenja. Za elektrone u tečnom ksenonu ovaj količnik opada sa porastom E/n_0 do oko 1

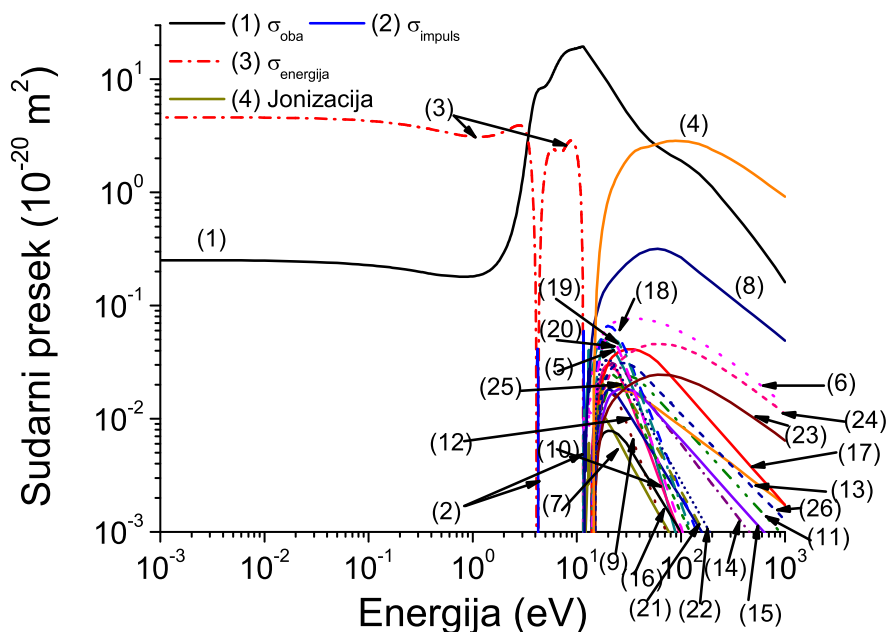
Td, zbog povećanja brzinskog koeficijenta za elastične sudare u ovom opsegu polja. Međutim, ovaj količnik se povećava sa porastom E/n_0 , na višim poljima, kao posledica opadanja kolizione frekvence za elastične sudare na višim energijama. Zavisnost D_L/D_T od E/n_0 je drugačija za elektrone u gasnom ksenonu na niskim poljima. Na poljima nižim od 10^{-2} Td je ovaj količnik konstantan, jer je srednja energija elektrona u gasnoj fazi jako blizu termalnih vrednosti. U opsegu polja između 10^{-2} Td i $2 \cdot 10^{-2}$ Td se D_L/D_T za elektrone u gasnom ksenonu povećava sa porastom E/n_0 zbog uticaja Ramsauer-Townsend-ovog minimuma. Na višim poljima je kvalitativni trend zavisnosti D_L/D_T od E/n_0 isti za elektrone u gasnom i tečnom ksenonu, ali je minimum izraženiji u tečnoj fazi. U svakom slučaju, razlike od preko dva reda veličine između D_L i D_T u tečnom ksenonu su jasan pokazatelj veoma jakog efekta anizotropije difuzije. Ovako velike razlike između D_L i D_T do sada nikada nisu zabeležene za elektrone u gasovima.

6.3 Transport elektrona u tečnom argonu i tečnom kriptonu

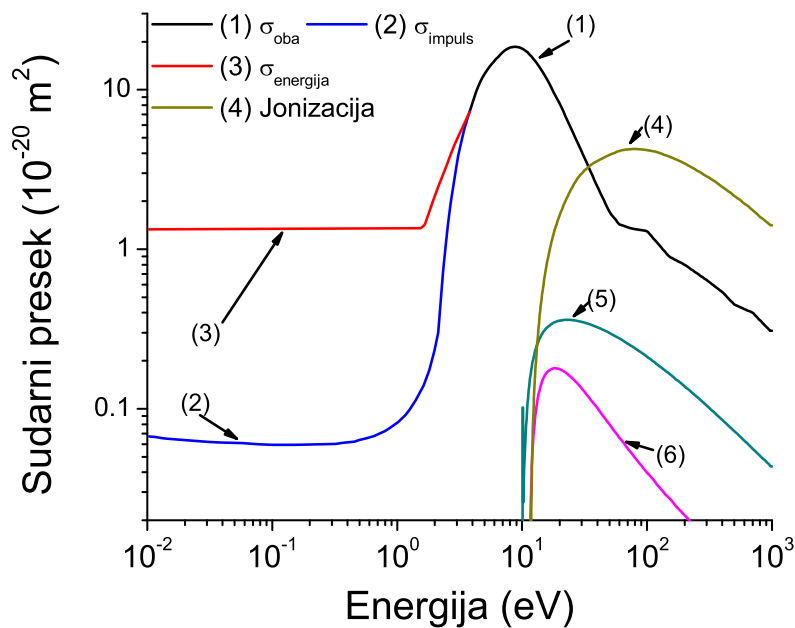
6.3.1 Korišćeni preseki i uslovi simulacije za elektrone u tečnom argonu i tečnom kriptonu

Za reprezentovanje elastičnih sudara u tečnom argonu se na energijama nižim od oko 10 eV koriste tri efektivna sudarna procesa, kao i u tečnom ksenonu. Pri tome su presek za rasejanje elektrona na fokus atomu u tečnom argonu i γ količnik (videti potpoglavlje 6.2.1) preuzeti iz rada Boyle-a i saradnika [68]. Na energijama višim od oko 10 eV su efektivni procesi, koji su opisani presecima σ_{impuls} i $\sigma_{energija}$ zanemareni, dok je efektivni presek za σ_{oba} proces aproksimiran presekom za transfer impulsa u elastičnim sudarima iz Hayashi-jevog seta preseka [201]. Presek za ekscitaciju elektrona iz valentne zone u provodnu zonu (efektivnu jonizaciju) je aproksimiran presekom za jonizaciju iz Hayashi-jevog seta [201], kome je prag pomenen na 14.3 eV, što odgovara zonskom procepu u tečnom argonu [247].

U našim proračunima transportnih osobina elektrona u tečnom argonu razmatrana su dva slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara. U prvom (Scenario 1) su ekscitacije u potpunosti zanemarene, dok su u drugom slučaju (Scenario 2) uzete u obzir one ekscitacije iz Hayashi-jevog seta preseka čiji su pragovi niži od zonskog procepa u tečnom argonu. Pri tome su zanemarene tri poslednje ekscitacije iz Hayashi-jevog seta, čiji su pragovi 14.3 eV, 14.71 eV i 15.2 eV. U literaturi nisu dostupni podaci vezani za minimume u spektrima fotoprovodnosti tečnog argona, kao ni refleksioni spektri tečnog argona na energijama višim od 14 eV. Zbog toga za tečni argon ne razmatramo dodatne slučajeve za reprezentovanje neelastičnih sudara, u kojima su uzete u obzir ekscitacije čiji su pragovi viši od zonskog procepa. Pored toga smo utvrdili da uključivanje ekscitacije, čiji je prag iznosi 14.3 eV, u set preseka ima zanemarljiv uticaj na transportne osobine elektrona u tečnom argonu. Set preseka za rasejanje elektrona u tečnom argonu, koji je korišćen u našim proračunima, prikazan je na slici 85. Koncentracija pozadinskih atoma i temperatura u tečnom argonu, korišćeni u našim simulacijama, iznose $2.1 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$ i 85 K, respektivno.



Slika 85: Set preseka za rasejanje elektrona u tečnom argonu: (1) σ_{oba} , (2) σ_{impuls} , (3) $\sigma_{energija}$, (4) jonizacija (zonski prelaz), efektivne elektronske ekscitacije: (5) $4s[3/2]_2$, (6) $4s[3/2]_1$, (7) $4s'[1/2]_0$, (8) $4s'[1/2]_1$, (9) $4p[1/2]_1$, (10) $4p[5/2]_3$, (11) $4p[5/2]_2$, (12) $4p[3/2]_1$, (13) $4p[3/2]_2$, (14) $4p[1/2]_0$ i $4p'[3/2]_1$, (15) $4p'[3/2]_2$, (16) $4p'[1/2]_1$, (17) $4p'[1/2]_0$, (18) $3d[1/2]_0$ i $3d[1/2]_1$, (19) $3d[3/2]_2$, (20) $3d[7/2]_4$, (21) $3d[7/2]_3$, (22) $3d[5/2]_2$ i $5s[3/2]_2$, (23) $3d[5/2]_3$ i $5s[3/2]_1$, (24) $3d[3/2]_1$, (25) $3d'[5/2]_2$ i (26) $3d'[3/2]_2$, $3d'[5/2]_3$, $5s'[1/2]_0$ i $5s'[1/2]_1$.



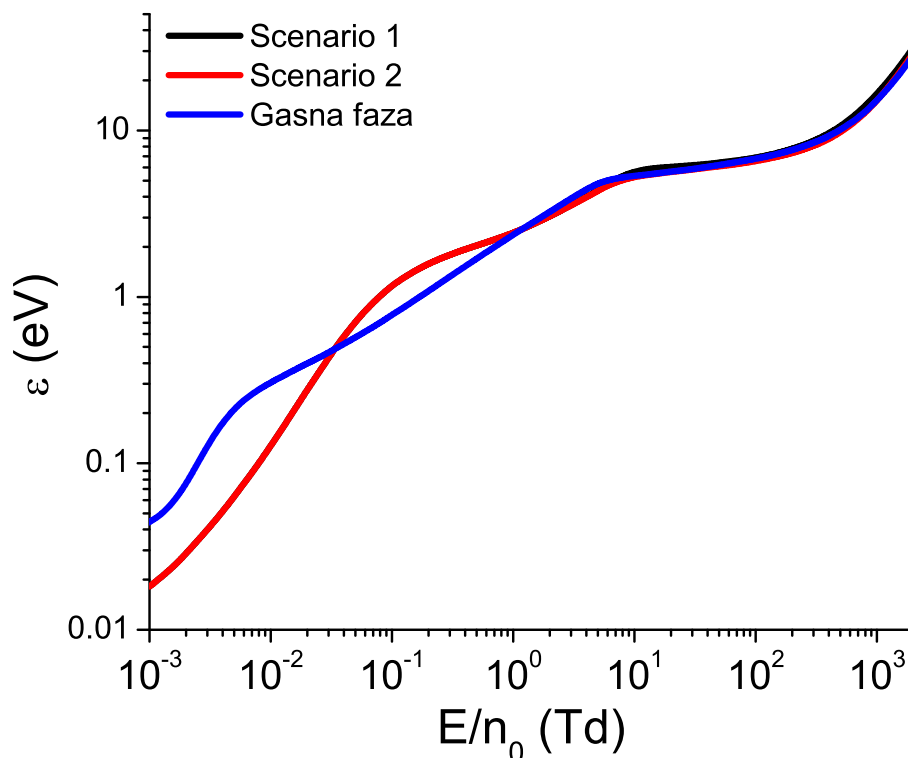
Slika 86: Set preseka za rasejanje elektrona u tečnom kriptonu: (1) σ_{oba} , (2) σ_{impuls} , (3) $\sigma_{energija}$, (4) jonizacija (zonski prelaz), efektivne elektronske ekscitacije: (5) S nivoi i (6) P nivoi.

Za reprezentovanje elastičnih sudara niskoenergijskih elektrona u tečnom kriptonu se koriste dva efektivna sudarna procesa, koje su koristili Atrazhev i saradnici u svojim proračunima [102]. Ovi efektivni sudarni procesi su ekvivalentni procesima korišćenim u našem radu za reprezentovanje elastičnog rasejanja u tečnom argonu i tečnom ksenonu, a kojima odgovaraju preseći σ_{impuls} i $\sigma_{energija}$. Preseći za ova dva efektivna sudarna procesa su preuzeti iz rada Atrazheva i saradnika [102]. Na energijama višim od oko 4.24 eV, preseći za ova dva efektivna sudarna procesa postaju jednaki nuli, dok njihovu vrednost u poslednjoj nenultoj tački preuzima presek za treći efektivni sudarni proces, u kome se razmenjuju energija i impuls kao u običnom binarnom sudaru. Ovaj efektivni sudarni proces je ekvivalentan efektivnom procesu koji je reprezentovan sa σ_{oba} presekom u našim proračunima u tečnom argonu i tečnom ksenonu. Presek za ovaj efektivni sudarni proces ima nenultu vrednost na energijama višim od 4.24 eV, i u tom enerijskom opsegu je jednak preseku za transfer impulsa u elastičnim sudarima u gasnom kriptonu, koji je preuzet iz Biagi-jeve MAGBOLTZ baze [203]. Presek za ekscitaciju u provodnu zonu (efektivnu jonizaciju) je dobijen pomeranjem Biagi-jevog preseka za jonizaciju ka nižim energijama, pri čemu je prag spušten na 11.7 eV, što odgovara vrednosti zonskog procepa u tečnom kriptonu [247]. U tečnom kriptonu se razmatraju dva slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara, isto kao i u tečnom argonu. U prvom slučaju su ekscitacije u potpunosti zanemarene (Scenario 1), dok su u drugom slučaju uzete u obzir sve ekscitacije iz Biagi-jevog seta preseka čiji su pragovi niži od zonskog procepa u tečnom kriptonu (Scenario 2). U tečnom kriptonu ne razmatramo dodatne slučajeve za reprezentovanje energijskih gubitaka u neelastičnim sudarima iz sličnog razloga kao u slučaju tečnog argona. Koncentracija pozadinskih atoma i temperatura u tečnom kriptonu koji su korišćeni u našim simulacijama iznose $1.76 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$ i 117 K, respektivno.

6.3.2 Rezultati vezani za transport elektrona u tečnom argonu i tečnom kriptonu

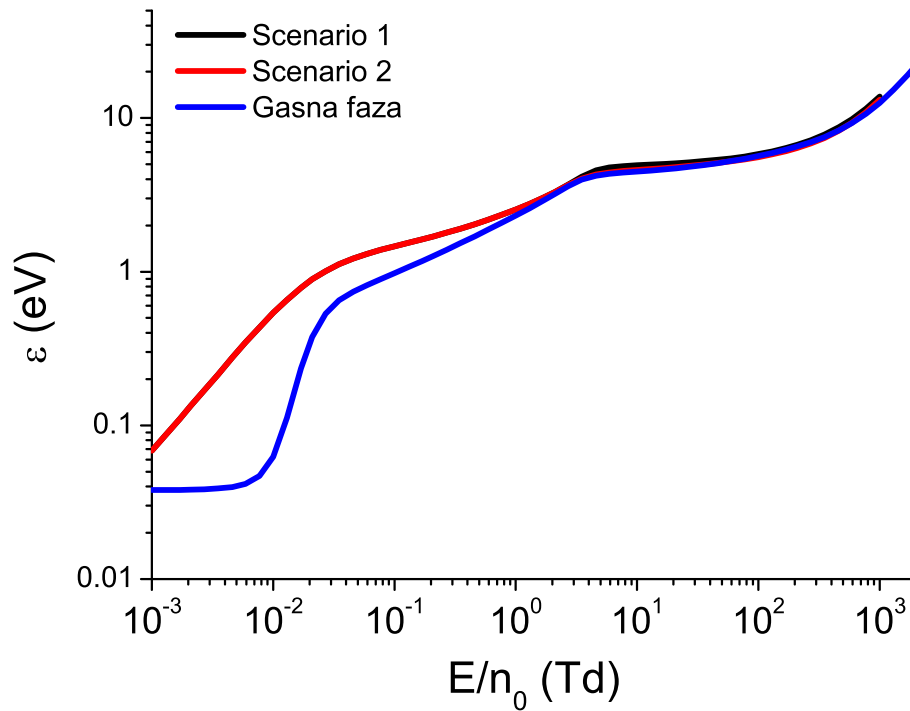
Na slici 87 su date vrednosti srednje energije za elektrone u tečnom i gasnom argonu u funkciji E/n_0 . Odnos vrednosti srednje energije u gasnom i tečnom argonu se razlikuje od odgovarajućeg odnosa u ksenonu. Naime, u opsegu polja između oko 10^{-3} Td i 0.035 Td je srednja energija elektrona viša u gasnom nego u tečnom argonu. Ovo je posledica toga što je efektivni presek za transfer energije u tečnom argonu veći od preseka za elastično rasejanje u gasnom argonu u energijskom intervalu između $7 \cdot 10^{-3}$ eV i 10 eV. Međutim, u opsegu polja između 0.035 Td i 1.3 Td srednja energija elektrona u tečnom argonu je viša od srednje energije u gasnom argonu. Srednja energija elektrona ima vrednosti između oko 0.5 eV i 2.7 eV u ovom opsegu polja. U ovom energijskom intervalu se presek za elastično rasejanje u gasnoj fazi naglo povećava sa porastom energije i približava se efektivnom preseku za transfer energije u tečnom argonu, dok je efektivni presek za transfer energije praktično konstantan do oko 2 eV. Uz to je u ovom energijskom intervalu presek za elastično rasejanje u gasnom argonu veći od efektivnog preseka za transfer impulsa u tečnom argonu, što omogućava efikasnije ubrzavanje elektrona od strane električnog polja u tečnoj nego u gasnoj fazi. Srednja energija u gasnom argonu je viša nego u tečnom argonu u opsegu polja između 1.3 Td i 7.7 Td, gde je u intervalu između 2.7 eV i 5.2 eV, pa se visokoenergijski elektroni nalaze u energijskom intervalu u kome su efektivni preseći za transfer energije i impulsa u tečnom argonu veći od preseka za elastično rasejanje u

gasnom argonu (između oko 4 eV i 10 eV). Na poljima višim od 7.7 Td srednja energija je u prvom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom argonu viša od srednje energije u gasnom argonu, zbog odsustva energijskih gubitaka u ekscitacijama u ovom slučaju. Srednja energija je pak u drugom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom argonu niža od srednje energije u gasnom argonu do oko 1000 Td. Ovo se može pripisati intenzivnijem hlađenju jonizacijom u tečnoj fazi, zbog nižeg praga za jonizaciju u tečnom argonu, u odnosu na gasni argon. Vrednosti srednje energije u tečnom i gasnom argonu su međusobno jako bliske na poljima višim od 10 Td, zbog male razlike u dinamici rasejanja visokoenergijskih elektrona u tečnom i gasnom argonu.



Slika 87: Poređenje vrednosti srednje energije za rojeve elektrona u gasnom i tečnom argonu. Vrednosti srednje energije u tečnom argonu su određene u dva različita slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara. U prvom slučaju (Scenario 1) sve ekscitacije su zanemarene, dok su u drugom slučaju (Scenario 2) uzete u obzir one ekscitacije iz Hayashi-jevog seta preseka za elektrone u gasnom argonu čiji prag je ispod 14.3 eV [201]. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

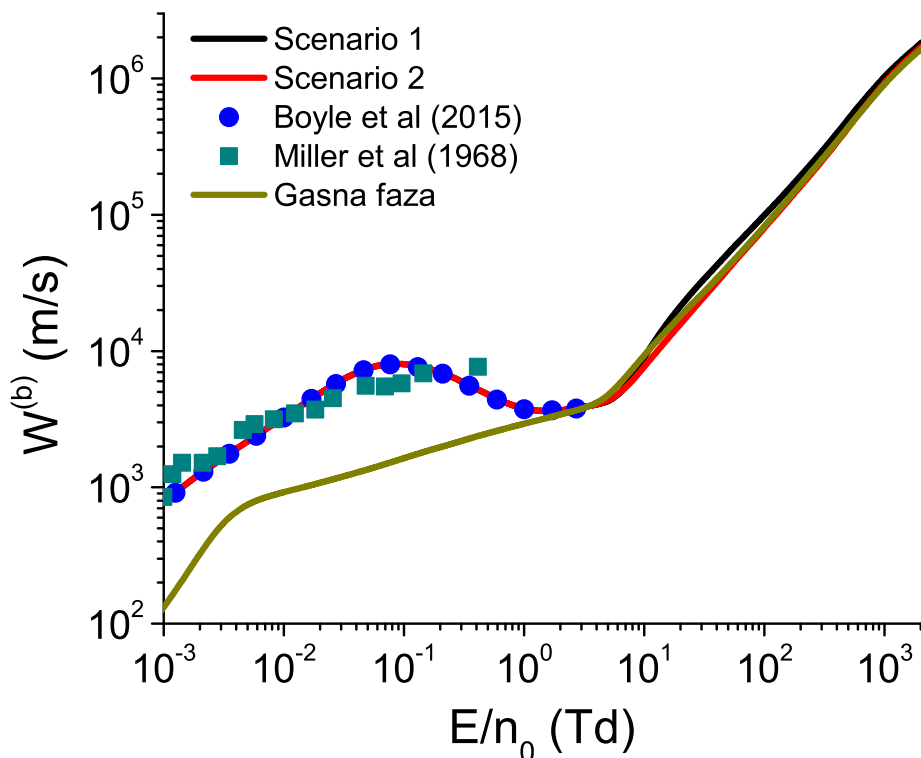
Slika 88 prikazuje vrednosti srednje energije za elektrone u tečnom i gasnom kriptonu u funkciji E/n_0 . Na niskim poljima su trendovi zavisnosti srednje energije od E/n_0 u gasnoj i tečnoj fazi, kao i međusobni odnos njihove vrednosti jako slični u kriptonu i ksenonu. Srednja energija je na najnižim poljima viša u tečnoj nego u gasnoj fazi. Pritom se srednja energija u tečnoj fazi prvo linearno povećava sa porastom E/n_0 (do oko 0.0059 Td i 0.01 Td za elektrone u kriptonu i ksenonu, respektivno), nakon čega je srednja energija konkavna funkcija redukovanog električnog polja (do oko 0.077 Td i 0.1 Td za elektrone u kriptonu i ksenonu, respektivno), posle čega se srednja energija približno linearno povećava sa porastom E/n_0 , ali sa znatno manjim



Slika 88: Poređenje vrednosti srednje energije za rojeve elektrona u gasnom i tečnom kriptonu. Vrednosti srednje energije u tečnom argonu su određene u dva različita slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara. U prvom slučaju (Scenario 1) sve ekscitacije su zanemarene, dok su u drugom slučaju (Scenario 2) uzete u obzir one ekscitacije iz Biagi-jevog seta preseka za elektrone u gasnom kriptonu čiji prag je ispod 11.7 eV. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

nagibom nego na najnižim poljima. Srednja energija u gasnoj fazi se prvo sporo povećava sa porastom E/n_0 (do oko 0.0059 Td u oba gasa), nakon čega se naglo povećava sa porastom E/n_0 otprilike do kraja opsega polja u kome je energija u tečnoj fazi konkavna funkcija redukovano električnog polja, posle čega se linearno povećava sa porastom E/n_0 . Uz to je u oba slučaja srednja energija viša u tečnoj nego u gasnoj fazi na niskim poljima (do 3.5 Td i 0.46 Td za elektrone u kriptonu i ksenonu, respektivno). Sličnost u trendovima zavisnosti srednje energije u kriptonu i ksenonu od E/n_0 u obe faze, na niskim poljima, je posledica toga što je odnos preseka za elastične sudare u gasnoj fazi i efektivnih preseka za transfer energije i impulsa u tečnoj fazi jako sličan u kriptonu i ksenonu, na niskim energijama. Međutim, srednja energija u gasnoj fazi je viša od srednje energije u tečnoj fazi za elektrone u tečnom ksenonu, u svim slučajevima za reprezentovanje neelastičnih sudara, u opsegu polja između oko 0.46 Td i 350 Td, dok je u kriptonu srednja energija u gasnoj fazi niža od srednje energije u tečnoj fazi u oba slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara od početka razmatranog opsega (10^{-3} Td) do oko 59 Td. Ova razlika je posledica razlike u korišćenim presecima u kriptonu i ksenonu. Zapravo, u presecima koji su korišćeni za proračune u ksenonu efektivni preseki za transfer impulsa i transfer energije veći su od preseka za elastično rasejanje u gasnoj fazi na energijama između 2.5 eV i 5 eV. Nasuprot tome, u presecima koji su korišćeni u kriptonu efektivni presek za transfer impulsa u tečnoj fazi nikada nije veći od preseka za elastično rasejanje u gasnoj fazi, dok je efektivni presek za transfer energije u tečnoj fazi veći od preseka za elastično rasejanje

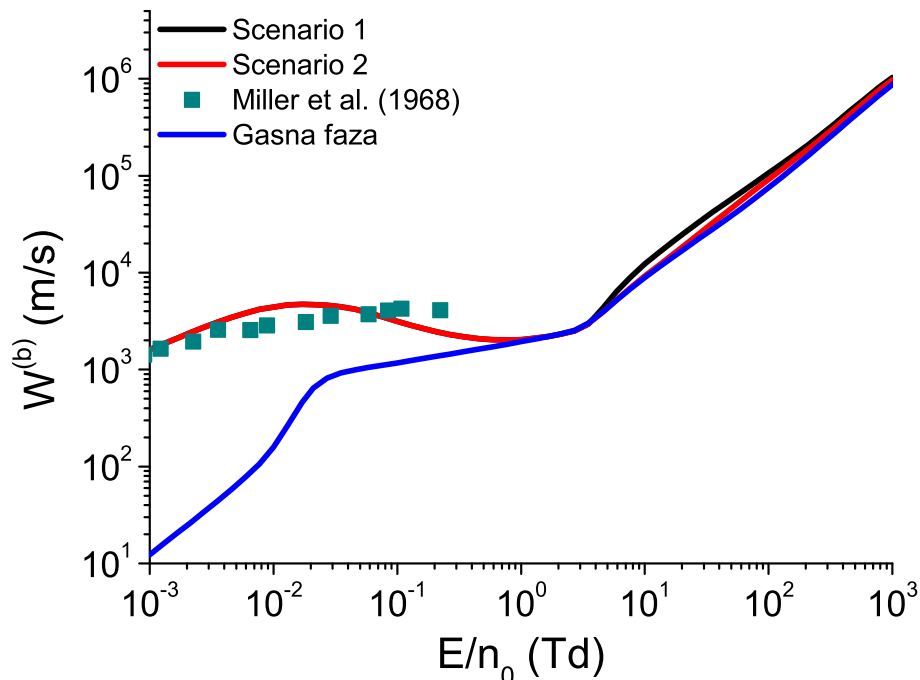
u gasnoj fazi samo u uskoj okolini Ramsauer-Townsend-ovog minimum – pri višim energijama ovi su preseki jednaki. Na poljima višim od 59 Td je srednja energija u gasnom kriptonu niža od srednje energije u tečnom kriptonu u prvom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara, zbog odsustva energijskih gubitaka u ekscitacijama u ovom slučaju. U ovom opsegu polja je razlika između vrednosti srednje energije u gasnom kriptonu i tečnom kriptonu, u drugom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara, jako mala, zbog toga što je dinamika rasejanja visokoenergijskih elektrona veoma slična u gasnoj fazi i atomskim tečnostima.



Slika 89: Poređenje eksperimentalno određene brzine drifta za roj elektrona u tečnom argonu (Miller *et al.* [229]) sa teorijskim proračunima. Među teorijskim rezultatima su prikazani proračuni Boyle-a i saradnika [69], kao i vrednosti balk brzine drifta koje su određene u okviru ovog rada na osnovu Monte Carlo simulacija, primenom dva različita metoda za reprezentovanje neelastičnih sudara. Ovi metodi su navedeni u zaglavlju grafika 87. Na grafiku je prikazana i balk brzina drifta za roj elektrona u gasnom argonu, radi poređenja.

Na slici 89 su predstavljeni profili balk brzine drifta u tečnom argonu u prvom i drugom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnoj fazi, zajedno sa profilom balk brzine drifta u gasnom argonu. Eksperimentalne [229] i teorijske [68] vrednosti brzine drifta u tečnom argonu, koje su odredili raniji autori, prikazane su na istom grafiku radi poređenja. Sa slike se vidi da je u argonu na najnižim poljima brzina drifta znatno veća u tečnoj nego u gasnoj fazi. Ipak, razlika u brzini drifta elektrona u tečnoj i gasnoj fazi je na najnižim poljima manja u argonu nego u ksenonu, jer je efektivni presek za transfer impulsa u tečnom argonu oko dvadeset puta manji od preseka za elastično rasejanje u gasnom argonu, dok razlika između ova dva preseka u ksenonu iznosi oko tri reda veličine. Strukturno indukovana negativna diferencijalna provodnost se javlja u profilu brzine drifta za elektrone u tečnom argonu, kao i u tečnom ksenonu. Ovaj se

efekat pak javlja samo u uskom opsegu polja između 0.77 Td i 2.7 Td, u kom je srednja energija elektrona u tečnom argonu između 2.26 eV i 3.40 eV. Ovaj energijski interval se nalazi unutar raspona između 2 eV i 5 eV, gde se efektivni presek za transfer impulsa u tečnom argonu naglo povećava sa porastom energije. Ovo znači da se u tečnom argonu strukturno indukovana negativna diferencijalna provodnost javlja u opsegu polja u kome se vrednosti srednje energije nalaze unutar energijskog intervala u kome se efektivni presek za transfer impulsa naglo povećava sa porastom energije. U tečnom ksenonu se efektivni presek za transfer impulsa povećava od 0.4 eV do oko 3.5 eV, pri čemu je srednja energija elektrona viša od 0.4 eV na poljima višim od 10^{-2} Td zbog manje vrednosti efektivnog preseka za transfer energije u tečnom ksenonu u odnosu na argon. Iz svega sledi da se strukturno indukovana negativna diferencijalna provodnost u tečnom ksenonu javlja na znatno nižim poljima i pokriva znatno širi opseg polja u odnosu na tečni argon. Drift brzina za elektrone u tečnom argonu, koja je određena u našim proračunima se odlično slaže sa brzinom drifta koja je izračunata u radu Boyle-a i saradnika [68].

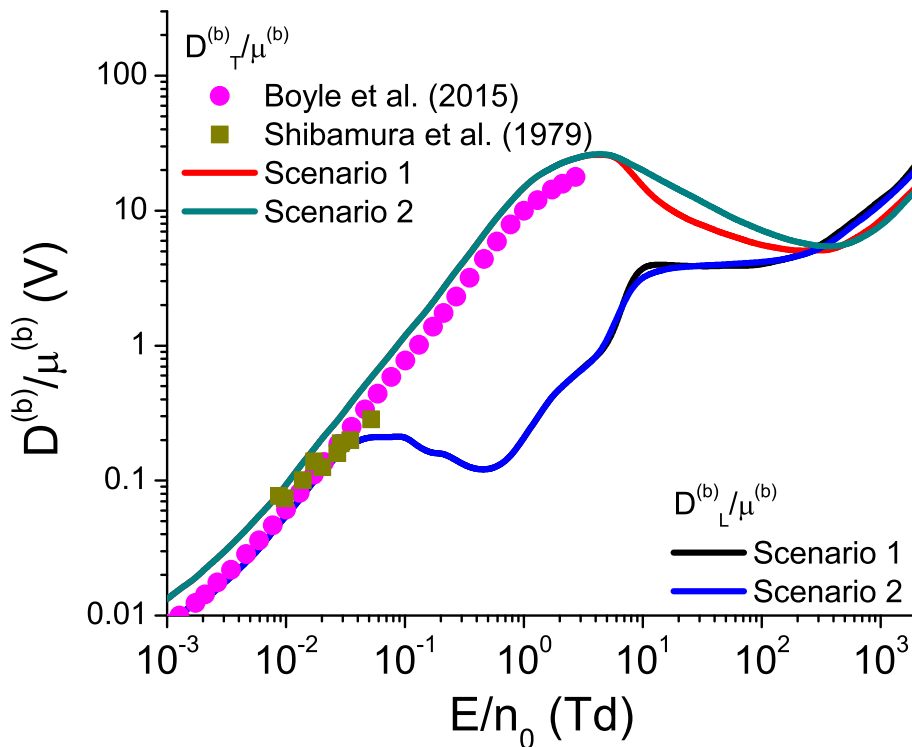


Slika 90: Poređenje eksperimentalno određene brzine drifta za roj elektrona u tečnom kriptonu (Miller *et al.* [229]) sa teorijskim proračunim vrednostima balk brzine drifta, koje su određene u okviru ovog rada primenom Monte Carlo simulacija, u dva različita slučaja reprezentovanja neelastičnih sudara. U prvom slučaju (Scenario 1) su sve ekscitacije zanemarene. U drugom slučaju su uzete u obzir one ekscitacije iz Biagi-jevog seta preseka čiji prag je ispod 11.7 eV. Na ovom grafiku je, radi poređenja, data i balk brzina drifta za roj elektrona u gasnom kriptonu.

Na slici 90 su prikazani profili balk brzine drifta u tečnom kriptonu u prvom i drugom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnoj fazi, zajedno sa profilom balk brzine drifta u gasnom kriptonu. Eksperimentalne vrednosti Miller-a i saradnika [229] prikazane su na istom grafiku, radi poređenja. Sa slike se može videti da je u kriptonu na najnižim poljima brzina drifta oko 130 puta veća u tečnoj nego u gasnoj fazi. Ova razlika je znatno intenzivnija od odgovarajuće razlike u argonu, ali je nešto manja od razlike između vrednosti brzine drifta

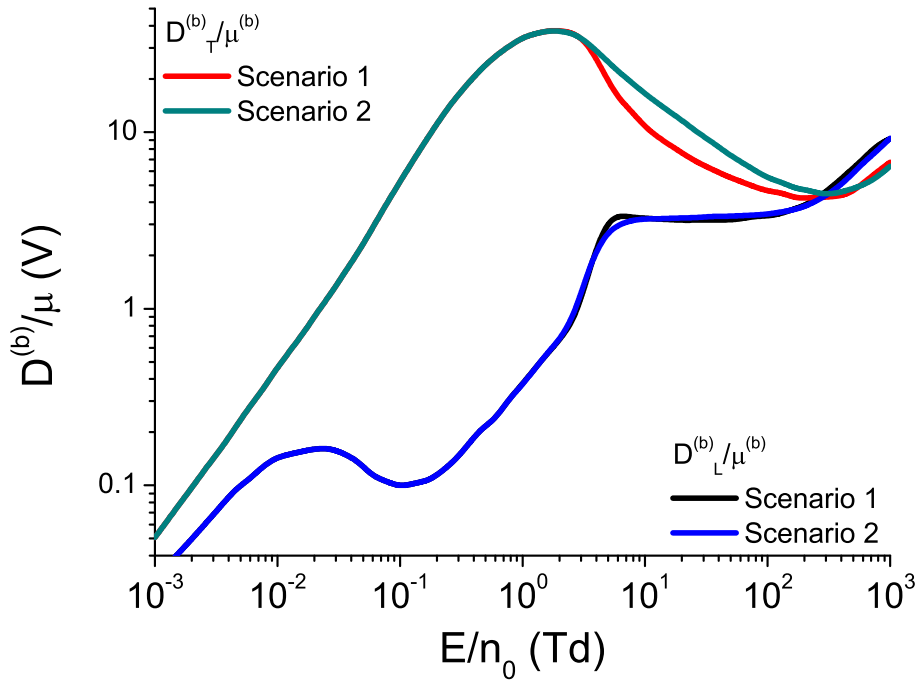
u tečnom i gasnom ksenonu, što je posledica efektivnog preseka za transfer impulsa u tečnom kriptonu koji je za preko dva reda veličine manji od preseka za elastične sudare u gasnom kriptonu, dok razlika između ovih preseka u ksenonu iznosi oko tri reda veličine. Strukturno indukovana negativna diferencijalna provodnost se u tečnom kriptonu javlja u opsegu polja od 0.017 Td do 1Td. U datom rasponu polja srednja energija elektrona u tečnom kriptonu je između 0.786 eV i 2.32 eV, što odgovara energijskom intervalu u kome se efektivni presek za transfer impulsa u tečnom kriptonu naglo povećava sa porastom energije. Ovaj se presek najintenzivnije povećava sa porastom energije u energijskom intervalu između 1 eV i 3eV. Opseg polja u kome se javlja strukturno indukovana negativna diferencijalna provodnost u tečnom kriptonu je sličan odgovarajućem opsegu polja u tečnom ksenonu zbog toga što se efektivni presek za transfer impulsa naglo povećava sa porastom energije u skoro istom energijskom intervalu u ovim dvema tečnostima i zbog bliskih vrednosti efektivnog preseka za transfer energije (oko 2^2) u njima.

Naše vrednosti brzine drifta u tečnom argonu i tečnom kriptonu su bliske eksperimentalnim vrednostima Millera i saradnika [229], ali u njihovim profilima brzine drifta nije prisutna negativna diferencijalna provodnost. Razlozi za ovo neslaganje između teorijskih i eksperimentalnih rezultata u tečnom argonu i tečnom kriptonu su verovatno isti kao i razlog za odgovarajuće neslaganje u tečnom ksenonu.



Slika 91: Poređenje vrednosti balk longitudinalne karakteristične energije D_L/μ i balk transverzalne karakteristične energije D_T/μ , koje su određene u ovom radu, sa teorijskim rezultatima Boyle-a i saradnika [68] za roj elektrona u tečnom argonu. Naši rezultati su dobijeni na osnovu Monte Carlo simulacija primenom prvog i drugog scenarija za reprezentovanje neelastičnih sudara.

Slika 91 prikazuje balk vrednosti longitudinalne i transverzalne karakteristične energije D_L/μ

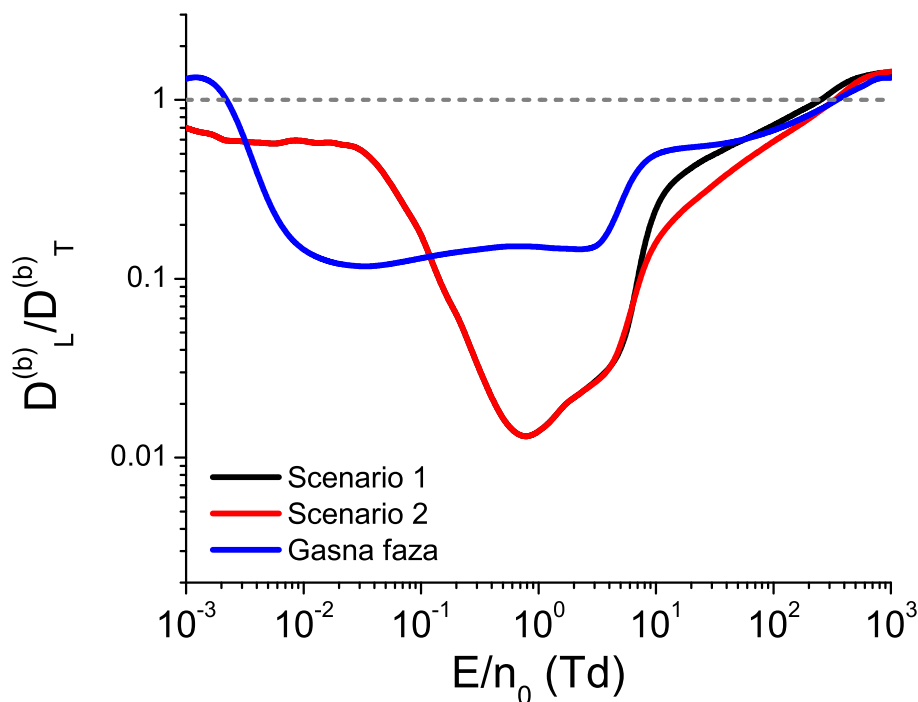


Slika 92: Poređenje vrednosti balk longitudinalne karakteristične energije D_L/μ i balk transverzalne karakteristične energije D_T/μ za roj elektrona u tečnom kriptonu. Ovi rezultati su dobijeni na osnovu Monte Carlo simulacija primenom prvog i drugog scenarija za reprezentovanje neelastičnih sudara.

i D_T/μ za elektrone u tečnom argonu zajedno sa vrednostima koje su odredili prethodni autori [68], dok su na slici 92 prikazane balk vrednosti D_L/μ i D_T/μ za elektrone u tečnom kriptonu u funkciji E/n_0 . Dok je u ksenonu D_L/μ približno konstantno između 10^{-2} Td i 1Td u argonu i kriptonu je ponašanje ove veličine složenije. Longitudinalna karakteristična energija ima lokalni maksimum na 0.059 Td i 0.021 Td u tečnom argonu i tečnom kriptonu, respektivno, te lokalni minimum na 0.46 Td i 0.1 Td u tečnom argonu i tečnom kriptonu, respektivno. Ove dodatne strukture su u okviru statističke nesigurnosti Monte Carlo simulacija. U tečnom argonu longitudinalna karakteristična energija dostiže plato u opsegu polja od 10 Td do 77 Td, dok u tečnom kriptonu i tečnom ksenonu ova veličina dostiže plato u opsegu polja od 5.9 Td do 77 Td. Može se uočiti da je u tečnom argonu i tečnom kriptonu srednja energija oko 5 eV na polju na kome počinje plato longitudinalne karakteristične energije, a plato ove veličine počinje na polju na kome je srednja energija oko 3 eV u tečnom ksenonu. Ove su vrednosti energije između 2 i 3 puta manje od praga za prvu elektronsku ekscitaciju, pa na poljima na kojima počinje plato longitudinalne karakteristične energije najenergičniji elektroni mogu učestvovati u neelastičnim sudarima u sve tri tečnosti. Između strukture na niskim poljima i platoa na visokim poljima se D_L/μ naglo povećava sa porastom E/n_0 u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu. Na visokim poljima (nakon završetka platoa) se D_L/μ monotono povećava sa porastom E/n_0 u sve tri tečnosti.

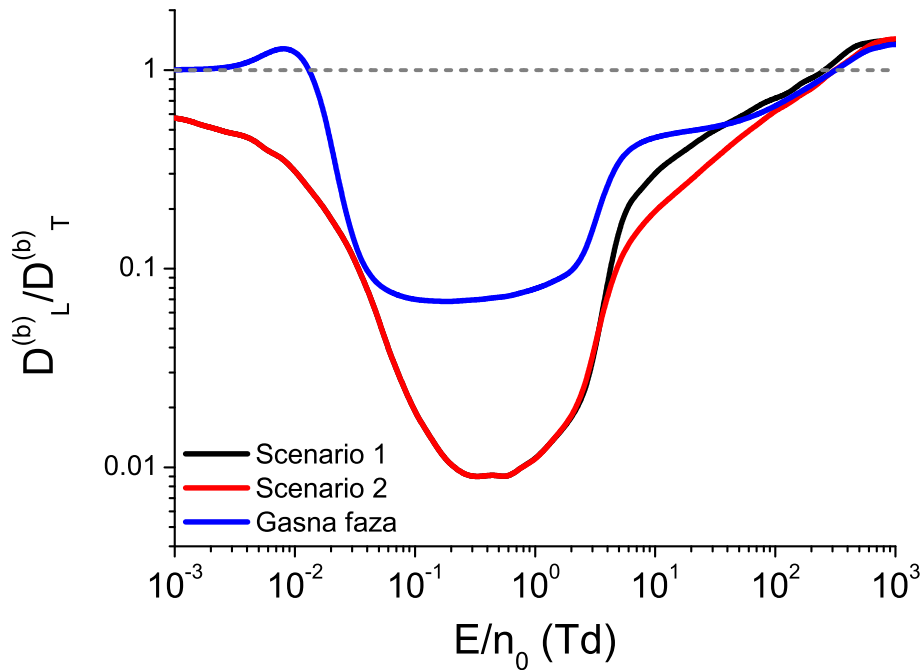
Transverzalna karakteristična energija D_T/μ ima sličan trend ponašanja u sve tri tečnosti. Na niskim poljima se D_T/μ monotono povećava sa porastom E/n_0 i dostiže lokalni maksimum na oko 4.6 Td, 2.1 Td i 2.7 Td u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu, respektivno.

Na višim poljima D_T/μ monotono opada sa porastom E/n_0 do lokalnog minimuma koji se nalazi na oko 350 Td u tečnom ksenonu i kriptonu i na oko 460 Td u tečnom argonu. Nakon lokalnog minimuma se D_T/μ monotono povećava sa porastom E/n_0 do kraja razmatranog opsega polja.



Slika 93: Poređenje vrednosti količnika balk longitudinalne difuzije i balk transverzalne difuzije, koje su određene u prvom i drugom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom argonu, sa odgovarajućim količnikom u gasnom argonu. Ovi slučajevi za reprezentovanje neelastičnih sudara su opisani u zaglavlju grafika 87. Rezultati koji su prikazani na ovom grafiku su dobijeni na osnovu Monte Carlo simulacija.

Na slikama 93 i 94 su prikazane vrednosti D_L/D_T u funkciji E/n_0 za elektrone u tečnom argonu i tečnom kriptonu, respektivno, u prvom i drugom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u ovim tečnostima. Vrednosti D_L/D_T za elektrone u gasnoj fazi su takođe prikazane na ovim graficima, zarad poređenja. U tečnom kriptonu i tečnom ksenonu D_L/D_T opada sa porastom E/n_0 od početka razmatranog opsega polja (koji se nalazi na 10^{-3} Td), dok je ova veličina u tečnom argonu približno konstantna do oko 0.027 Td, posle čega počinje da opada sa porastom E/n_0 . Ovo se može pripisati tome što srednja energija u tečnom argonu ima niže vrednosti od srednje energije u tečnom ksenonu i tečnom kriptonu na najnižim poljima (na 10^{-3} Td srednja energija iznosi oko 0.018 eV, 0.068 eV i 0.077 eV za elektrone u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu, respektivno), uz šta se efektivni preseki za transfer energije i impulsa u tečnom argonu počinju povećavati sa porastom energije tek na energijama višim od 1 eV, dok u tečnom ksenonu i tečnom kriptonu efektivni presek za transfer impulsa počinje da raste na nižim energijama (na oko 0.6 eV). U tečnom argonu i tečnom ksenonu D_L/D_T dostiže minimum na oko 1 Td, a u tečnom kriptonu doseže minimum na oko 0.46 Td. Minimalna vrednost D_L/D_T iznosi oko 10^{-2} u tečnom argonu i tečnom kriptonu, dok u tečnom ksenonu

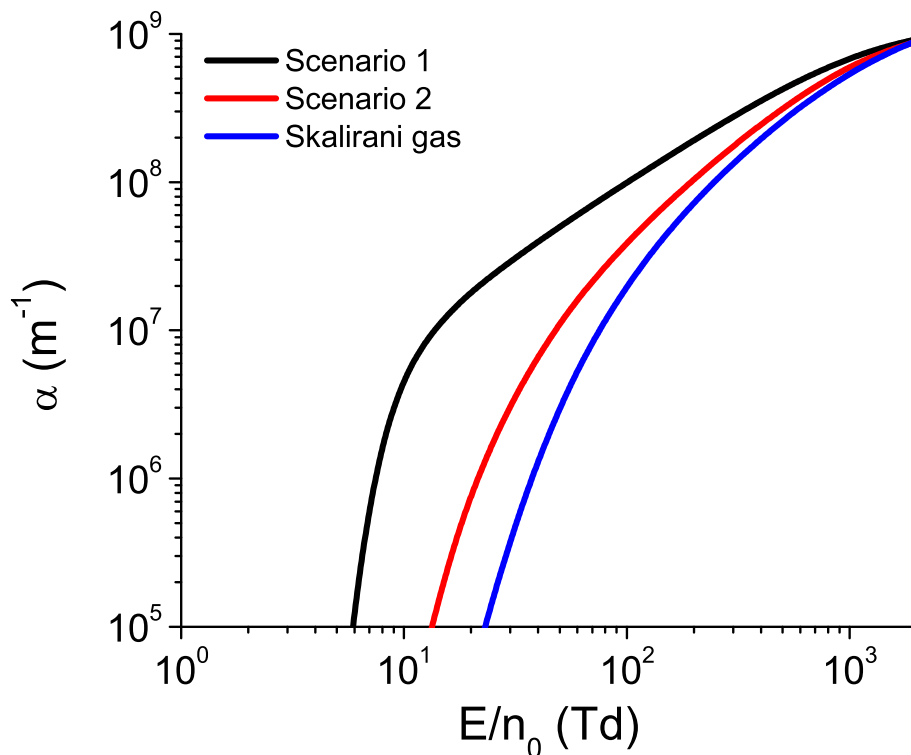


Slika 94: Poređenje vrednosti količnika balk longitudinalne difuzije i balk transverzalne difuzije, koje su određene u prvom i drugom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom kriptonu, sa odgovarajućim količnikom u gasnom kriptonu. Ovi slučajevi za reprezentovanje neelastičnih sudara su opisani u zaglavlju grafika 88. Rezultati koji su prikazani na ovom grafiku su dobijeni na uz pomoć Monte Carlo simulacija.

minimum ove veličine ima vrednost približnu $4 \cdot 10^{-3}$.

Količnik D_L/D_T ima sličan trend ponašanja, na kvalitativnom nivou, u gasnom argonu, gasnom kriptonu i gasnom ksenonu, ali ovaj količnik dostiže prvi lokalni maksimum na nižem polju u gasnom argonu nego u gasnom kriptonu i gasnom ksenonu. Razlog za ovakvo ponašanje količnika D_L/D_T treba potražiti u činjenici da se Ramsauer–Townsend-ov minimum javlja na nižim energijama u gasnom argonu nego u preostala dva gasa.

Slika 95 prikazuje vrednosti prvog Townsend-ovog koeficijenta u prvom i drugom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom argonu, dok su odgovarajuće vrednosti prvog Townsend-ovog koeficijenta u tečnom kriptonu pokazane na slici 96. Vrednosti prvog Townsend-ovog koeficijenta u gasnoj fazi, koje su skalirane na gustinu tečnosti, takođe su predstavljene na ovim graficima, zarad poređenja. Razlika između koeficijenta za jonizaciju, dobijenog na osnovu scenarija u koji su uključene sve ekscitacije, i koeficijenta za jonizaciju iz gasne faze, koji je skaliran na gustinu tečnosti je veća u ksenonu nego u argonu i kriptonu zbog veće razlike između praga za ekscitaciju u provodnu zonu u tečnoj fazi i praga za jonizaciju u gasnoj fazi. Međutim, razlika između koeficijenta za jonizaciju dobijenog primenom scenarija u kome su uzete u obzir one ekscitacije čiji je prag niži od praga za zonski prelaz u tečnoj fazi i scenarija u kome su sve ekscitacije zanemarene najmanja je u tečnom ksenonu, zbog toga što su u tečnom ksenonu pragovi samo prve dve ekscitacije niži od praga za efektivnu jonizaciju, dok je presek za jonizaciju znatno veći od preseka za pojedinačne ekscitacije.

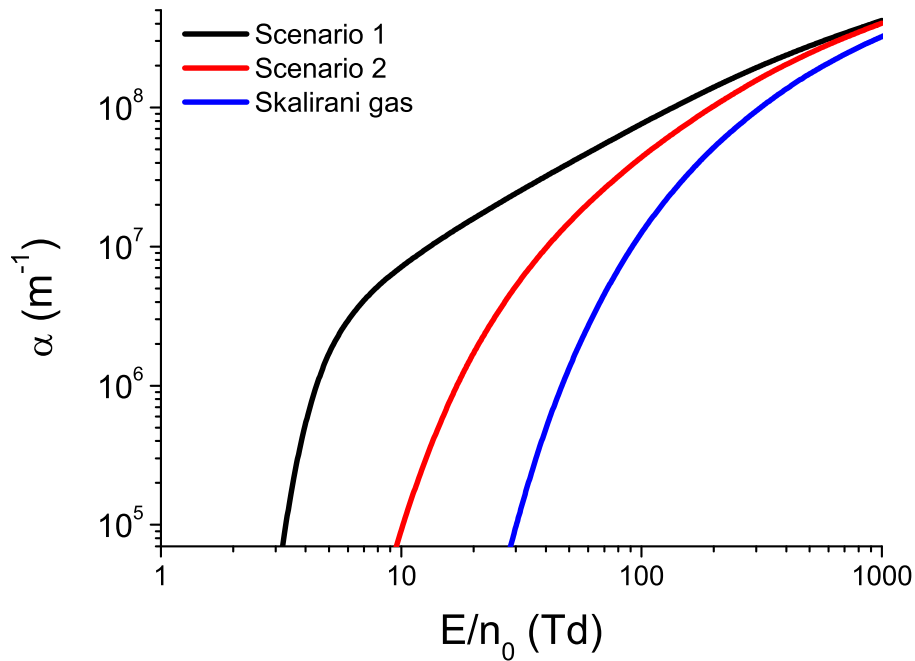


Slika 95: Zavisnost prvog Townsend-ovog koeficijenta od redukovanog električnog polja E/n_0 za roj elektrona u tečnom argonu. Ove vrednosti su određene primenom dva različita scenarija za reprezentovanje neelastičnih sudara. Metodi su opisani u zaglavlju grafika 87. Na grafiku je, radi poređenja, prikazan i prvi Townsend-ov koeficijent za roj elektrona u gasnom argonu, koji je skaliran na gustinu tečnog argona. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

6.4 Zaključak

U ovom poglavlju je razmatran transport elektrona u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu. Potpoglavljje 6.1.1 govori o motivaciji za izučavanje transporta naelektrisanih čestica u tečnoj fazi. Sa teorijske tačke gledišta je značajno razumeti dinamiku naelektrisanih čestica u gustim sredinama sa kratkodometnim uređenjem. Sa praktičnog aspekta su transport naelektrisanih čestica u tečnoj fazi i električna pražnjenja u tečnostima od velikog značaja za mnoge važne primene poput detektora čestica sa tečnim argonom ili tečnim ksenonom, transformatorskih ulja, kao i za upotrebu plazme u medicini, poljoprivredi i tehnikama za pročišćavanje vode.

U odeljku 6.1.2 su izloženi argumenti za postojanje provodne zone u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu, koji se mogu naći u literaturi. Naime, promena mobilnosti elektrona pri topljenju argona, kriptona i ksenona u čvrstoj fazi može se pripisati promeni kompresibilnosti i gustine pri ovom faznom prelazu. Pored toga, u refleksionim spektrima tečnog argona, tečnog kriptona i tečnog ksenona uočene su ekscitonske linije koje su vrlo slične odgovarajućim linijama u čvrstoj fazi. Uz to je vrednost praga za fotoprovodnost u tečnom ksenonu vrlo bliska odgovarajućoj vrednosti u čvrstom ksenonu. Vrednost zonskog procepa u tečnom ksenonu koja je određena na osnovu Wannier-ovog niza odlično se slaže sa vrednošću zonskog procepa koja



Slika 96: Zavisnost prvog Townsend-ovog koeficijenta od redukovanog električnog polja E/n_0 za roj elektrona u tečnom kriptonu. Ove vrednosti su određene primenom dva različita scenarija za reprezentovanje neelastičnih sudara. Metodi su opisani u zaglavlju grafika 88, gde je, poredjenja radi, prikazan i prvi Townsend-ov koeficijent za roj elektrona u gasnom kriptonu, koji je skaliran na gustinu tečnog kriptona. Rezultati su dobijeni na osnovu Monte Carlo simulacija.

je određena na osnovu praga za fotoprovodnost. Šupljinska provodnost u tečnom ksenonu je jasno identifikovana u eksperimentima.

U potpoglavlju 6.2.1 su prikazani uslovi simulacije i korišćeni setovi preseka za rasejanje elektrona u tečnom ksenonu, dok su odgovarajući uslovi simulacije i setovi preseka u slučaju tečnog argona i tečnog kriptona izloženi u potpoglavlju 6.3.1. Koherentno rasejanje je reprezentovano primenom tri efektivna sudarna procesa koji dobro reprezentuju srednji transfer impulsa i energije pri elastičnim sudarima u ovim tečnostima. Presek za zonski prelaz u tečnoj fazi je aproksimiran presekom za jonizaciju izolovanog atoma, kome je prag snižen na vrednost zonskog procepa u odgovarajućoj tečnosti. U slučaju tečnog ksenona su razmatrana četiri različita scenarija za reprezentovanje neelastičnih sudara. Ovi scenariji su zasnovani na eksperimentalnim podacima vezanim za refleksione spektre i fotoprovodnost tečnog ksenona. U slučaju tečnog argona i tečnog kriptona su uzeta u obzir samo dva scenarija. Pri tome su u prvom od ova dva scenarija neelastični sudari u potpunosti zanemareni, dok su u drugom scenariju uzeti u obzir samo oni procesi čiji je prag niži od zonskog procepa u odgovarajućoj tečnosti.

Potpoglavlje 6.2.2 sumira rezultate transportnih proračuna za rojeve elektrona u tečnom ksenonu. Odgovarajući rezultati za rojeve elektrona u tečnom argonu i tečnom kriptonu su prikazani u potpoglavlju 6.3.2. U ovim odeljcima su upoređeni profili zavisnosti srednje energije i drift brzine od redukovanog električnog polja u tečnoj fazi sa odgovarajućim profilima u gasnoj fazi. Pri tome je analiziran uticaj koherentnog rasejanja u tečnoj fazi na vrednosti ovih transportnih veličina u oblasti niskih polja. Poseban akcenat je stavljen na izučavanje strukturno

indukovane negativne diferencijalne provodnosti u tečnom ksenonu na osnovu prostorno razloženih karakteristika roja i funkcija raspodele elektrona po energijama. Pored toga je razmatrano u kojoj meri različit tretman neelastičnih sudara utiče na izračunate vrednosti transportnih veličina u tečnoj fazi. Uočeno je da izračunata vrednost prvog Townsend-ovog koeficijenta snažno zavisi od načina na koji su tretirani neelastični sudari u tečnostima. Takođe je uočeno da je prvi Townsend-ov koeficijent iz gasne faze, koji je skaliran na gustinu tečnosti, znatno niži od odgovarajućeg koeficijenta u tečnoj fazi. Vrednosti prvog Townsend-ovog koeficijenta u tečnom ksenonu, koje su izračunate u okviru ove disertacije, upoređene su sa eksperimentalnim rezultatima Derentzo-a i saradnika, kao i sa rezultatima proračuna ranijih autora. Uočeno je da se prve dve eksperimentalne tačke Derentzo-a i saradnika najbolje slažu sa scenarijom u kome su neelastični sudari u potpunosti zanemareni, dok se preostale eksperimentalne tačke bolje slažu sa ostala tri scenarija.

7 Negativni strimeri u atomskim tečnostima visoke mobilnosti

7.1 Uvod

Na ovom mestu su proučavani strimeri u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu. U potpoglavlju 7.2 su predstavljeni fluidni model prvog reda i fluidni model koji je baziran na razvoju izvornog člana po gradijentima koncentracije elektrona, kao i numerička implementacija ovih modela, koja se koristi u našim proračunima. Odeljak 7.3 donosi rezultate naših proračuna za negativne strimere u tečnom ksenonu, dok su u potpoglavlju 7.4 prikazani naši rezultati za negativne strimere u tečnom argonu i tečnom kriptonu.

7.2 Fluidni modeli strimera

Jedan od najčešće korišćenih metodoloških pristupa u modelovanju strimerskih pražnjenja jeste fluidni model prvog reda, ili tzv. klasični fluidni model. Ovaj model je baziran na drift-difuzionoj aproksimaciji za elektrone i jednačinama za balans broja čestica za naelektrisane čestice niže mobilnosti, čije se kretanje može zanemariti na vremenskim skalama na kojima se odvija dinamika elektrona (pozitivni joni i negativni joni u gasnoj fazi i pozitivne šupljine u kondenzovanoj materiji) [27, 30, 139]. Pri tome su ove jednačine primenom aproksimacije lokalnog električnog polja spregnute sa Poisson-ovom jednačinom, ne bi li se opisao uticaj prostornog naelektrisanja [27, 30]. Drift-difuziona jednačina se može izvesti iz Boltzmann-ove jednačine [27, 30], čime se dobija jednačina oblika

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(n(\mathbf{r}, t) \mathbf{W}^{(f)} - \mathbf{D}^{(f)} \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) \right) = C_1, \quad (7.1)$$

gde je $n(\mathbf{r}, t)$ koncentracija elektrona, t je vremenska koordinata, $\mathbf{W}^{(f)}$ i $\mathbf{D}^{(f)}$ su fluks brzina drifta i fluks difuzioni tenzor, respektivno, dok je C_1 izvorni član, čiji je oblik potrebno odrediti.

Prostorno naelektrisanje u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu je određeno kvazislobodnim elektronima iz provodne zone i pozitivnim šupljinama iz valentne zone. Uz to se broj kvazislobodnih elektrona i pozitivnih šupljina povećava pri ekscitaciji elektrona iz valentne zone u provodnu zonu, dok se broj ovih naelektrisanih čestica smanjuje pri njihovoj rekombinaciji. Na osnovu toga je najjednostavniji oblik izvornog člana u našem slučaju

$$C_1 = n(\mathbf{r}, t) (\nu_i(\mathbf{E}) - k_r(\mathbf{E}) n_p(\mathbf{r}, t)), \quad (7.2)$$

gde su $n_p(\mathbf{r}, t)$, $\nu_i(\mathbf{E})$, $k_r(\mathbf{E})$ i \mathbf{E} koncentracija pozitivnih šupljina, brzinski koeficijent za jonizaciju (ekscitaciju elektrona iz valentne zone u provodnu zonu), koeficijent rekombinacije i rezultujuće električno polje, respektivno. Primenom ovog oblika izvornog člana dobija se jednačina

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \left(n \mathbf{W}^{(f)} - \mathbf{D}^{(f)} \cdot \nabla n \right) = n(\nu_i - k_r n_p). \quad (7.3)$$

Ovo je drift-difuziona jednačina u kojoj figurišu fluks transportni koeficijenti. Drugi način da se izvede drift-difuziona jednačina je da se primeni hidrodinamički razvoj fluksa čestica i izvornog člana u jednačini kontinuiteta [27]. Ako se pri hidrodinamičkom razvoju izvornog člana zanemare svi članovi u kojima figurišu gradijenti koncentracije elektrona, dobije se jednačina (7.3). Na osnovu toga je fluidni model prvog reda sa fluks transportnim koeficijentima dat jednačinama

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}^{(f)} \cdot \nabla n) - \nabla \cdot (n \mathbf{W}^{(f)}) + n(\nu_i - k_r n_p), \quad (7.4)$$

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = n\nu_i - k_r n n_p, \quad (7.5)$$

koje su spregnute sa Poisson-ovom jednačinom. Uz to je pretpostavljeno da su vrednosti transportnih koeficijenata $\mathbf{W}^{(f)}$ i $\mathbf{D}^{(f)}$, brzinskog koeficijenta za jonizaciju ν_i i koeficijenta rekombinacije k_r u položaju \mathbf{r} i trenutku t određene lokalnom vrednošću rezultujućeg električnog polja u datom trenutku $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ (aproksimacija lokalnog polja). Kretanje pozitivnih šupljina se može zanemariti u našim proračunima zbog toga što je njihova mobilnost znatno niža od mobilnosti elektrona [234, 235].

Poisson-ova jednačina se može napisati u obliku

$$\Delta \phi(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{\epsilon_0} (n(\mathbf{r}, t) - n_p(\mathbf{r}, t)), \quad (7.6)$$

gde je ϕ električni potencijal prostornog naelektrisanja, dok je Δ Laplasijan. Rezultujuće električno polje \mathbf{E} je superpozicija spošalješnjeg električnog polja \mathbf{E}_0 i električnog polja koje potiče od prostornog naelektrisanja i može se napisati u obliku

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 - \nabla \phi(\mathbf{r}, t), \quad (7.7)$$

gde je ∇ nabla operator.

Fluidni model prvog reda sa fluks transportnim podacima se često koristi u literaturi [27, 248–250]. Međutim, oblik izvornog člana koji je korišćen pri izvođenju jednačine (7.3) u sebi ne sadrži informaciju o prostornim gradijentima brzinskih koeficijenata za nekonzervativne sudarne procese, pri datoj vrednosti lokalnog rezultujućeg električnog polja [27]. Ovi prostorni gradijenti su posledica prostornog gradijenta srednje energije elektrona i energijske zavisnosti preseka za nekonzervativne procese. Prostorni gradijenti brzinskih koeficijenata za nekonzervativne sudarne procese se mogu reprezentovati hidrodinamičkim razvojem izvornog člana $S(\mathbf{r}, t)$ u jednačini kontinuiteta (2.18) [27]. Pri tome se hidrodinamički razvoj primenjuje samo na deo izvornog člana koji se odnosi na jonizaciju, zbog toga što deo koji opisuje rekombinaciju zavisi i od koncentracije pozitivnih jona. U hidrodinamičkim uslovima izvorni član se može napisati u obliku

$$S(\mathbf{r}, t) = S_i^0 n_e(\mathbf{r}, t) - \mathbf{S}_i^{(1)} \cdot \nabla n_e(\mathbf{r}, t) + \mathbf{S}_i^2 : \nabla \nabla n_e(\mathbf{r}, t) - k_r n_p(\mathbf{r}, t) n(\mathbf{r}, t), \quad (7.8)$$

gde su

$$S_i^{(0)} = \langle \nu_i \rangle, \quad (7.9)$$

$$\mathbf{S}_i^{(1)} = \langle \nu_i \mathbf{r}^* \rangle, \quad (7.10)$$

$$\mathbf{S}_i^{(2)} = \frac{1}{2} \langle \nu_i (\mathbf{r}^* \mathbf{r}^* - \langle \mathbf{r}^* \mathbf{r}^* \rangle) \rangle, \quad (7.11)$$

pri čemu je

$$\mathbf{r}^* = \mathbf{r} - \langle \mathbf{r} \rangle. \quad (7.12)$$

Primenom hidrodinamičkog razvoja izvornog člana u drift difuzionoj jednačini dobija se jednačina oblika [27]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(n(\mathbf{r}, t) \mathbf{W}^{(f)} - \mathbf{D}^{(f)} \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) \right) &= S^{(0)} n(\mathbf{r}, t) \\ -\mathbf{S}^{(1)} \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) + \mathbf{S}^{(2)} : \nabla \nabla n(\mathbf{r}, t) - k_r n_p(\mathbf{r}, t) n(\mathbf{r}, t). & \end{aligned} \quad (7.13)$$

Ova jednačina se može napisati u obliku [27]

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(n(\mathbf{r}, t) \mathbf{W}^{(B)} - \mathbf{D}^{(B)} \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) \right) &= S^{(0)} n(\mathbf{r}, t) \\ + (\nabla \cdot \mathbf{S}^{(1)}) n(\mathbf{r}, t) - (\nabla \cdot \mathbf{S}^{(2)}) \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) - k_r n_p(\mathbf{r}, t) n(\mathbf{r}, t). & \end{aligned} \quad (7.14)$$

Fluidni model u kome se koristi ovaj oblik drift-difuzione jednačine, umesto jednačine (7.3), nazvaćemo korigovani fluidni model, po ugledu na Bošnjakovića i saradnike [27]. Jednačina (7.14) se pojednostavljuje kada važi

$$(\nabla \cdot \mathbf{S}^{(1)}) n(\mathbf{r}, t) - (\nabla \cdot \mathbf{S}^{(2)}) \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) \approx 0. \quad (7.15)$$

Ovaj uslov je uvek zadovoljen u slučaju prostorno homogenog električnog polja (na primer u lavinskoj fazi razvoja strimera), ali ima i širu oblast važenja [27].

Kada je zadovoljen uslov (7.15), jednačina (7.14) se svodi na

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(n(\mathbf{r}, t) \mathbf{W}^{(B)} - \mathbf{D}^{(B)} \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) \right) = n(\mathbf{r}, t) (\nu_i - k_r n_p). \quad (7.16)$$

Može se videti da jednačina (7.16) ima isti matematički oblik kao jednačina (7.3), samo što umesto fluks transportnih koeficijenata figurišu balk transportni koeficijenti. Međutim, treba imati u vidu da je za razliku od fluidnog modela prvog reda, u kome se koriste fluks transportni koeficijenti, fluidni model sa balk transportnim koeficijentima dobra aproksimacija korigovanog fluidnog modela i u prisustvu nekonzervativnih sudara, ako je zadovoljen uslov (7.15).

U našim proračunima su korišćeni fluidni model prvog reda sa fluks i balk transportnim koeficijentima i korigovani fluidni model. Ovi proračuni su urađeni u okviru jednoipodimenzionog (1.5D) fluidnog modela [27, 30, 251]. U 1.5D modelu se elektroni i elektronske šupljine nalaze unutar cilindra radijusa R_0 , čija osa je postavljena duž pravca spoljašnjeg električnog polja $\mathbf{E}_0 = E_0 \mathbf{e}_z$, gde je \mathbf{e}_z jedinični vektor duž z -ose. Pri tome vrednosti koncentracije elektrona i elektronskih šupljina ne zavise od radialne koordinate i azimutalnog ugla, već zavise samo od aksijalne koordinate z . Fluidne jednačine u 1.5D fluidnom modelu prvog reda imaju oblik [27]

$$\frac{\partial n(z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(n(z, t) W \operatorname{sgn}(E) + D_L \frac{\partial n(z, t)}{\partial z} \right) + (\nu_i - k_r n_p(z, t)) n(z, t), \quad (7.17)$$

$$\frac{\partial n_p(z, t)}{\partial t} = n(z, t) \left(\nu_i - k_r n_p(z, t) \right), \quad (7.18)$$

gde je $\text{Sgn}(E)$ signum funkcija rezultujućeg električnog polja. Brzina drifta W se ovde definiše kao pozitivna veličina. Rezultujuće električno polje je u ovom modelu dato jednačinom

$$E(z, t) = E_0 + \frac{e}{2\epsilon_0} \int_0^l \left(n_p(z', t) - n(z', t) \right) \quad (7.19)$$

$$\cdot \left(\text{sgn}(z - z') - \frac{z - z'}{\sqrt{(z - z')^2 + R_0^2}} dz' \right), \quad (7.20)$$

gde su l , e i ϵ_0 međuelektrodno rastojanje, naelektrisanje elektrona i dielektrična propustljivost vakuuma, respektivno.

Jednačine (7.17), (7.18) i (7.20) se rešavaju numerički uz granične uslove

$$n(z = 0, t) = 0, n(z = l, t) = 0, \quad (7.21)$$

i početne uslove

$$n(z, 0) = \frac{300}{0.05\pi R_0^2 \frac{l}{3} \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(z - 0.95l)^2}{2(0.05\frac{l}{3})^2} \right), \quad (7.22)$$

$$n_p(z, t = 0) = n(z, t = 0). \quad (7.23)$$

U korišćenoj numeričkoj šemi, prostorni izvodi su diskretizovani primenom centralne konačne razlike drugog reda, a za integraciju u vremenu korišćen je Runge-Kutta 4 metod četvrtog reda [27, 30]. Pri određivanju veličine vremenskog koraka u ovoj numeričkoj šemi, neophodno je da budu zadovoljena dva uslova stabilnosti

$$\Delta t < C_a \delta x / W, \quad (7.24)$$

$$\Delta t < C_d (\delta x)^2 / D_L, \quad (7.25)$$

gde je δx korak prostorne rešetke [27, 30]. Pri tome je C_a maksimalni Courant-ov broj za advektivne jednačine, dok je C_d maksimalni Courant-ov broj za difuzione jednačine. Vremenski korak koji je korišćen u našim proračunima je dovoljno mali da budu zadovoljena oba uslova.

Korigovani fluidni 1.5D model se razlikuje od jednoipodimenzionog modela prvog reda po tome što se umesto jednačine (7.17) koristi jednačina

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(z, t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(n(z, t) W^{(f)} \text{sgn}(E) + D_L^{(f)} \frac{\partial n(z, t)}{\partial z} \right) + \left(\nu_i - k_r n_p(z, t) \right) n(z, t) \\ &- S_z^{(1)} \frac{\partial n(z, t)}{\partial z} + S_{zz}^{(2)} \frac{\partial^2 n(z, t)}{\partial z \partial z}, \end{aligned} \quad (7.26)$$

pri čemu su koeficijenti razvoja izvornog člana koji opisuju jonizaciju dati sa:

$$S_z^{(1)} = \langle \nu_i z^* \rangle, \quad (7.27)$$

$$S_z^{(2)} = \frac{1}{2} \langle \nu_i (z^* z^* - \langle z^* z^* \rangle) \rangle, \quad (7.28)$$

gde je $z^* = z - \langle z \rangle$, uz šta su ostale jednačine iste kao u fluidnom modelu prvog reda [27, 30]. Pošto je u svim našim proračunima korišćena aproksimacija lokalnog polja, uzima se da su

transportni koeficijenti, brzinski koeficijent za jonizaciju i koeficijent za rekombinaciju funkcije trenutne vrednosti intenziteta lokalnog rezultujućeg električnog polja $|E(z, t)|$ [27, 30].

Koeficijent za rekombinaciju kvazislobodnih elektrona i pozitivnih šupljina je u našem radu određen primenom skalirane Debye-ove formule kao

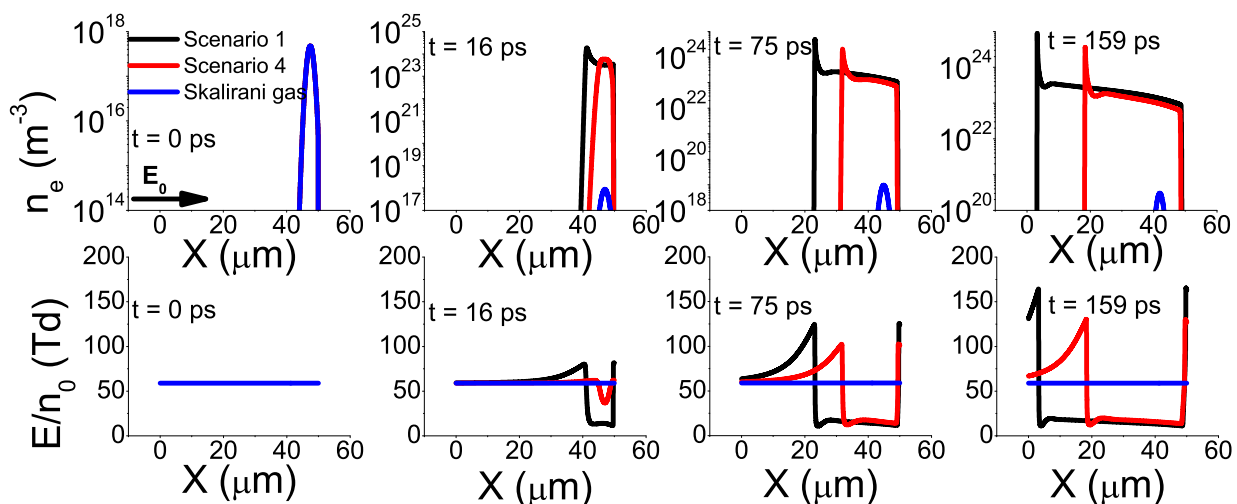
$$k_r = \xi k_{rD} = \xi \frac{4\pi e\mu}{\epsilon_0 \epsilon_r}, \quad (7.29)$$

gde je k_{rD} Debyeov koeficijent za rekombinaciju, μ je mobilnost elektrona, ϵ_r je relativna dielektrična propustljivost sredine, a ξ je faktor skaliranja, koji u našim proračunima iznosi 0.1 [119–121]. Ova formula je dobra aproksimacija koeficijenta za rekombinaciju na redukovanim električnim poljima višim od 1 Td [119–121]. Vrednosti redukovanog električnog polja koje su niže od 1 Td se ne pojavljuju u našim fluidnim simulacijama ni na frontu strimera ni u strimerskom kanalu. Važno je naglasiti da je u ovim proračunima neophodno uzeti u obzir rekombinaciju kvazislobodnih elektrona i pozitivnih šupljina, zbog velikog uticaja ovog procesa na dinamiku strimera u tečnoj fazi. U slučaju strimera u tečnosti koncentracija naelektrisanih čestica je na strimerskom frontu, kao i u strimerskom kanalu, za nekoliko redova veličine viša od odgovajuće koncentracije u slučaju strimera u gasovima. Zbog toga rekombinacija kvazislobodnih elektrona i pozitivnih šupljina ima ključan uticaj na kinetiku naelektrisanih čestica u tečnoj fazi. Ovo se može uočiti i na osnovu oblika strimerskih profila, koji su izučavani u ovom poglavlju i koji jako podsećaju na odgovarajuće profile u elektronegativnim gasovima. Ako se u potpunosti zanemari rekombinacija elektrona i šupljina u korišćenim fluidnim proračunima, to dovodi do nefizičkog efekta intenzivnog nagomilavanja naelektrisanih čestica oba polariteta na početku domena. Ovaj efekat na kraju izaziva numeričke nestabilnosti i pucanje simulacije.

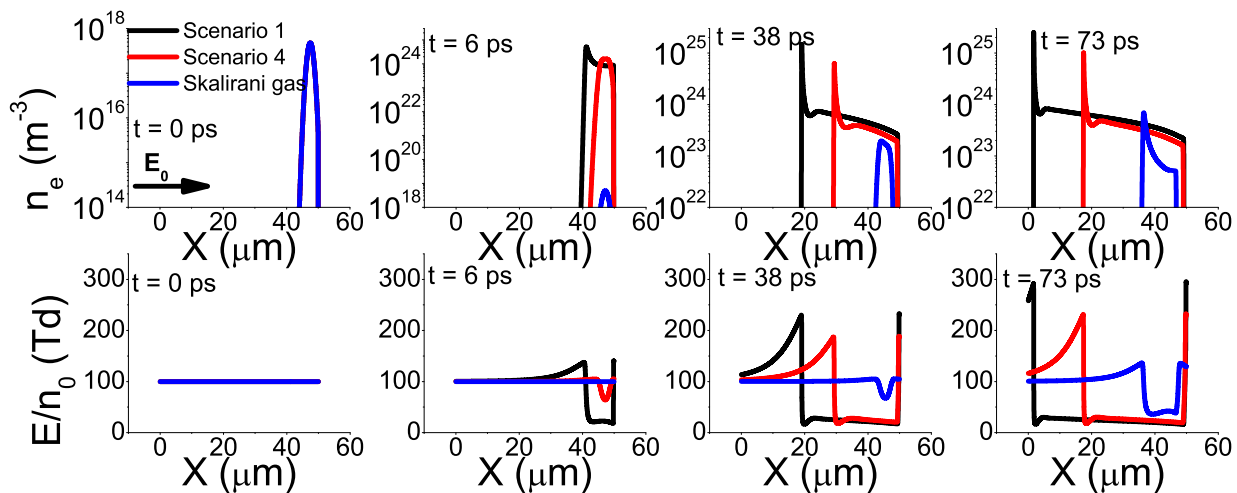
U našim simulacijama l i R_0 imaju vrednosti $5 \cdot 10^{-5} \text{m}$ i 10^{-5}m , respektivno. Vrednost R_0 je procenjena uz uzimanje u obzir širine početne raspodele naelektrisanja i širenja usled transverzalne difuzije u toku trajanja simulacija. Ova vrednost se dobro slaže sa vrednoću R_0 koju su odredili drugi autori [120, 121]. Međuelektrodno rastojanje l je određeno iz uslova da brzina strimera dostigne stacionarnu vrednost. U našim fluidnim simulacijama u tečnom ksenonu prostor je podeljen na 25000 ćelija, dok je u simulacijama u tečnom argonu i tečnom kriptonu prostor podeljen na 12500 ćelija. Utvrđeno je pritom da smanjene broja ćelija sa 25000 na 12500 ne dovodi do primetne razlike u rezultatima naših simulacija.

7.3 Negativni strimeri u tečnom ksenonu

Na slikama 97 i 98 je prikazana tranzicija elektronske lavine u negativan strimer za elektrone u tečnom ksenonu pri vrednosti redukovanog spoljašnjeg električnog polja od 59 Td i 100 Td, respektivno. Rezultati koji su prikazani na ovim slikama su dobijeni primenom balk transportnih podataka koji su izračunati u prvom i četvrtom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu, kao i primenom balk transportnih podataka iz gasnog ksenona koji su skalirani na gustinu tečnog ksenona. Svi rezultati prikazani na slikama 97 i 98 su dobijeni



Slika 97: Formiranje i propagacija negativnog strimera u tečnom ksenonu za $E_0/n_0 = 59$ Td. Ovi rezultati su dobijeni primenom prvog i četvrtog scenarija za reprezentovanje neelastičnih energijskih gubitaka. Na ovom grafiku su, radi usporedbe, prikazani i rezultati strimerskih simulacija u kojima su korišćeni transportni podaci iz gasnog ksenona, skalirani na gustinu tečnog ksenona. Ovde n_e označava koncentraciju elektrona, dok E/n_0 označava redukovano rezultujuće električno polje. Na grafiku je takođe prikazan i smer spoljašnjeg električnog polja. Rezultati su dobijeni na osnovu numeričkih proračuna u okviru fluidnih modela strimera.



Slika 98: Formiranje i propagacija negativnog strimera u tečnom ksenonu za $E_0/n_0 = 100$ Td. Rezultati su dobijeni uz pomoć numeričkih proračuna u okviru fluidnih modela strimera.

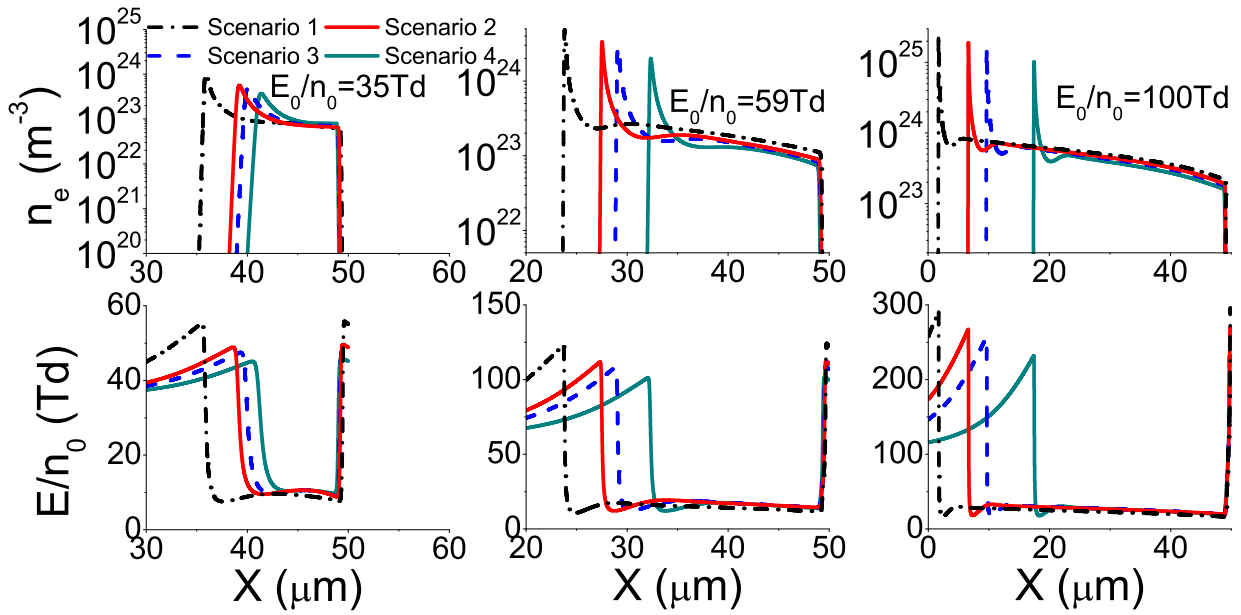
primenom fluidnog modela prvog reda. Sa slika se vidi da su na kvalitativnom nivou prostorni profili strimera i rezultujućeg električnog polja u tečnom ksenonu vrlo slični odgovarajućim prostornim profilima u gasnoj fazi. Koncentracija elektrona ima oštar maksimum na frontu strimera, gde je rezultujuće električno polje znatno pojačano u odnosu na spoljašnje polje, zbog efekata prostornog naelektrisanja. Međutim, koncentracija elektrona i rezultujuće električno polje su znatno smanjeni u strimerskom kanalu gde je pod uticajem prostornog naelektrisanja spoljašnje električno polje značajno zaklonjeno. U strimerskom kanalu koncentracija elektrona opada sa povećanjem rastojanja od glave strimera, zbog rekombinacije elektrona sa pozitivnim

šupljinama [119–121]. Sličan trend opadanja koncentracije elektrona u strimerskom kanalu je primećen u profilima negativnih strimera u elektronegativnim gasovima [120, 121]. Iako su prostorni profili koncentracije elektrona i rezultujućeg električnog polja vrlo slični za strimere u tečnom ksenonu i strimere u gasovima, prostorne i vremenske skale formiranja strimera su za oko tri reda veličine manje u tečnom ksenonu, nego u gasnoj fazi, zbog toga što je koncentracija pozadinskih atoma za oko tri reda veličine veća u tečnosti nego u gasu.

Sa slika 97 i 98 se vidi da su brzine formiranja i propagacije strimera, koje su određene primenom transportnih podataka izračunatih u prvom i četvrtom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu, znatno veće od odgovarajućih brzina koje su određene na osnovu transportnih podataka iz gasnog ksenona, skaliranih na gustinu tečnog ksenona. Uz to su i vrednosti koncentracije elektrona u glavi strimera i u strimerskom kanalu znatno veće u slučaju tečnog ksenona od slučaja skaliranog gasa. Ove razlike su znatno intenzivnije na niskim nego na visokim poljima. Zapravo, na 59 Td je raspodela elektrona koja odgovara skaliranom gasu još uvek u lavinskoj fazi u trenutku u kome strimer u tečnom ksenonu, koji je dobijen u prvom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara, pređe celo rastojanje l . Sa druge strane, na 100 Td je strimer u skaliranom gasu skoro potpuno formiran u trenutku u kome strimer modelovan u prvom slučaju stigne do granice sistema. Čak su i na 100 Td vrednosti brzine strimera i koncentracije elektrona u glavi strimera i u strimerskom kanalu znatno manje u skaliranom gasu nego u tečnom ksenonu. Značajne razlike između naših rezultata koji odgovaraju tečnom ksenonu i skaliranom gasu jesu posledica odgovarajućih razlika u brzinskim koeficijentima za jonizaciju. Slično tome, vrednosti brzine formiranja i propagacije strimera, kao i vrednosti koncentracije elektrona u glavi strimera i u strimerskom kanalu, smanjuju se sa porastom broja ekscitacija koje su uključene u set preseka, zbog opadanja brzinskog koeficijenta za jonizaciju sa povećanjem broja ekscitacija koje su uključene u model.

Slika 99 prikazuje prostorne profile strimera i rezultujućih električnih polja u sva četiri slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu za vrednosti redukovanog spoljašnjeg električnog polja od 35 Td, 59 Td i 100 Td, respektivno u trenutku $t = 73$ ps. Ovaj vremenski trenutak je izabran budući da tada najbrži strimer stigne do granice sistema. Generalni trendovi zavisnosti strimerskog profila od koordinate su isti u sva četiri slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara i za sve četiri vrednosti redukovanog spoljašnjeg električnog polja. Međutim, sa ovog grafika se vidi da se vrednosti brzine strimera, kao i vrednosti koncentracije elektrona u glavi strimera i u strimerskom kanalu, povećavaju sa porastom redukovanog spoljašnjeg električnog polja E_0/n_0 . Takođe se vidi da ove vrednosti opadaju sa povećanjem broja ekscitacija koje su uključene u model.

Na slici 100 se daju vrednosti brzine strimera u sva četiri slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu, u funkciji E_0/n_0 . Radi usporedbe su na istom grafiku prikazane i vrednosti brzine strimera u skaliranom gasnom ksenonu i vrednosti balk brzine drifta u prvom slučaju. Ovi rezultati su dobijeni primenom klasičnog fluidnog modela u kome su korišćeni balk transportni podaci. Sa grafika se vidi da je brzina strimera u svakom od razmatranih slučajeva za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnosti znatno veća od balk brzine drifta. Ovo je

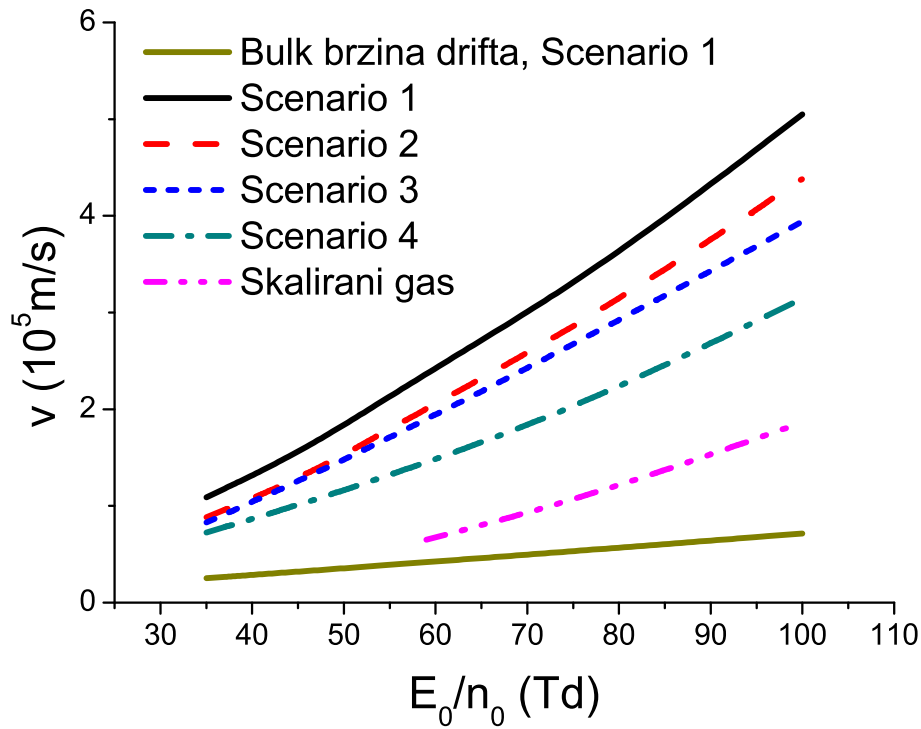


Slika 99: Prostorni profili koncentracije elektrona n_e i redukovanoeg električnog polja E/n_0 za tri različite vrednosti spoljašnjeg električnog polja E_0 . Prikazani profili su određeni primenom četiri različita scenarija za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu. Svi profili su prikazani u trenutku $t = 73$ ps. Rezultati su dobijeni na osnovu numeričkih proračuna u okviru fluidnih modela strimera.

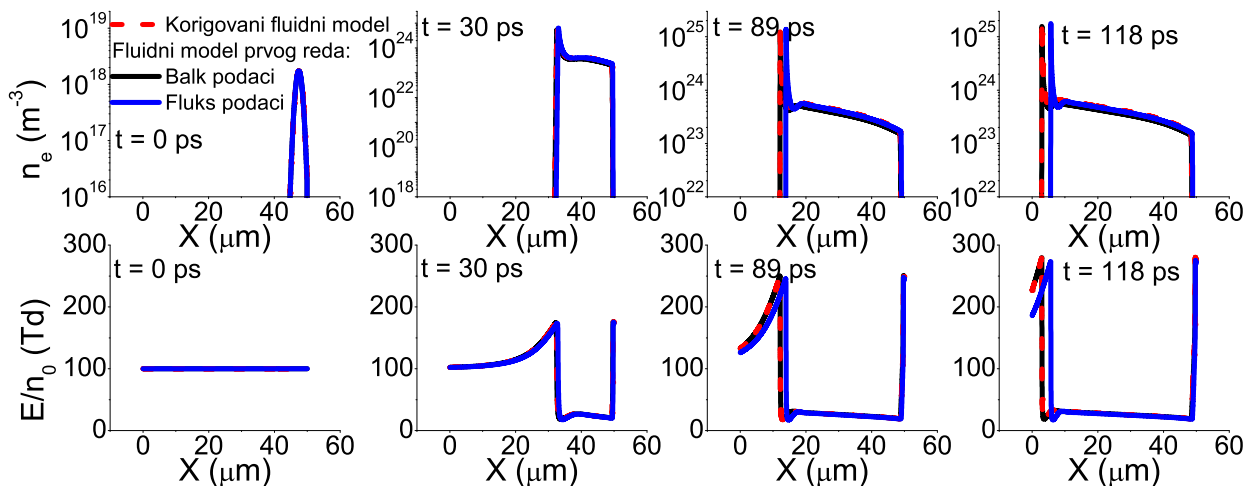
očekivano zbog toga što je brzina strimera određena kombinacijom balk brzine drifta elektrona i jonizacije u glavi strimera, u kojoj je rezultujuće električno polje znatno veće od spoljašnjeg električnog polja, kao i snažnim difuzionim fluksom na frontu strimera. Takođe se može videti da brzina strimera naglo opada sa povećanjem broja ekscitacija koje su uključene u model. Na primer, na redukovanom električnom polju od 100 Td brzina strimera je u četvrtom slučaju za oko 40% manja od brzine strimera u prvom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara. Pored toga je na 100 Td brzina strimera u skaliranom gasu oko 2.5 puta manja od brzine strimera u prvom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara, dok je ova razlika još intenzivnija na nižim poljima. Razlike u vrednostima brzine strimera u svim razmatranim slučajevima su posledica razlika između odgovarajućih brzinskih koeficijenata za jonizaciju u ovim slučajevima.

Na slici 101 su prikazani prostorni profili koncentracije elektrona i rezultujućeg električnog polja, koji su određeni u četvrtom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu, pri redukovanom spoljašnjem električnom polju od 100 Td. Rezultati koji su prikazani na ovom grafiku su dobijeni primenom fluidnog modela prvog reda sa fluks i balk transportnim podacima, kao i primenom korigovanog fluidnog modela. Uočava se da se rezultati fluidnog modela prvog reda u kome su korišćeni balk transportni podaci jako dobro slažu sa rezultatima korigovanog fluidnog modela u okolini fronta strimera. Nasuprot tome, fluidni model prvog reda u kome su korišćeni fluks transportni podaci predviđa nešto sporiju propagaciju strimera nego preostala dva modela.

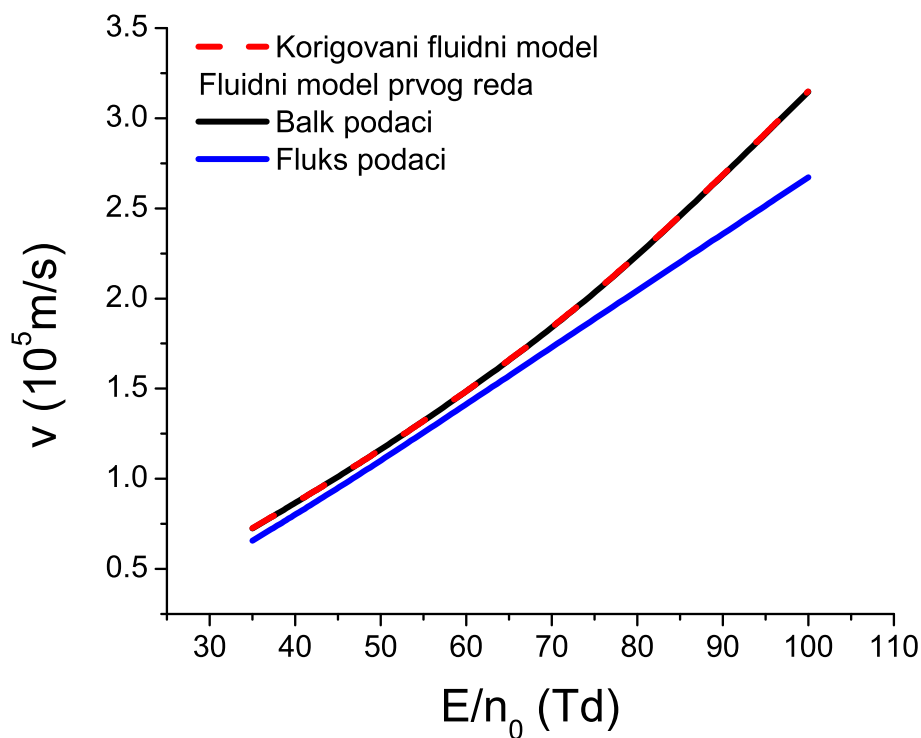
Vrednosti brzine strimera u funkciji redukovanoeg spoljašnjeg električnog polja E_0/n_0 , koje



Slika 100: Vrednosti brzine strimera za elektrone u tečnom ksenonu u funkciji redukovano­g spoljašnjeg polja E_0/n_0 u sva četiri scenarija za reprezentovanje neelastičnih gubitaka energije. Ovi rezultati su dobijeni primenom fluidnog modela prvog reda sa balk transportnim podacima. Brzina strimera koja je određena primenom transportnih podataka za gasni ksenon, koji su skalirani na gustinu tečnog ksenona i balk brzina drifta u tečnom ksenonu, koja je određena u prvom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu, takođe su prikazane na ovom grafiku radi poređenja. Rezultati su dobijeni na osnovu numeričkih proračuna u okviru fluidnih modela strimera.



Slika 101: Formiranje i propagacija negativnog strimera u tečnom ksenonu u redukovano­m spoljašnjem električnom polju $E/n_0 = 100\text{Td}$. Ovi rezultati su dobijeni na osnovu numeričkih proračuna u okviru korigovanog fluidnog modela i fluidnog modela prvog reda sa fluks i balk podacima, uz primenu četvrtog slučaja za reprezentovanje neelastičnih sudara.



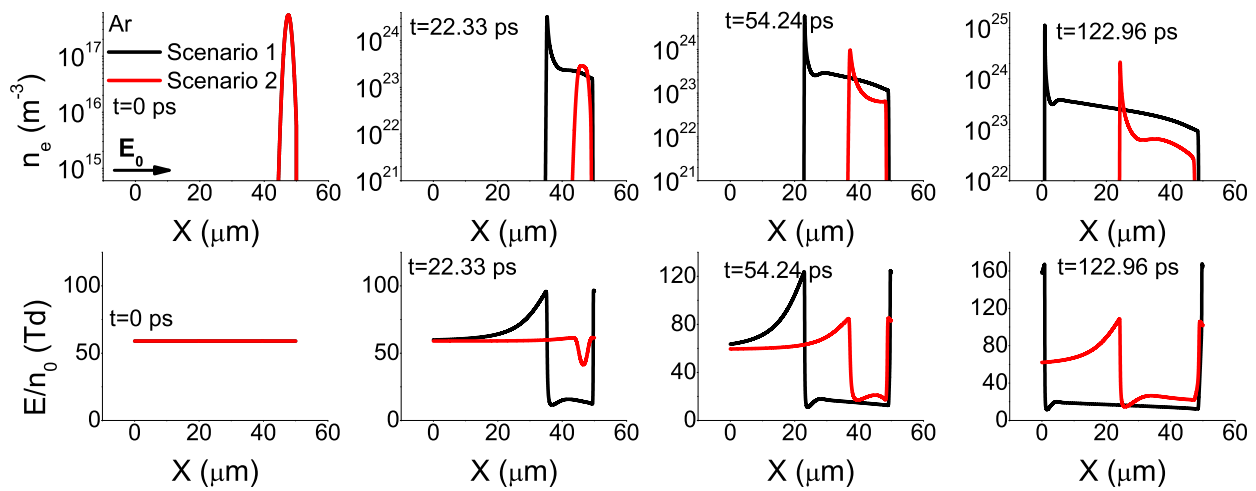
Slika 102: Vrednosti brzine strimera koje su određene primenom korigovanog fluidnog modela i fluidnog modela prvog reda sa fluks i balk podacima. Ovi proračuni su urađeni u okviru četvrtog scenarija za reprezentovanje neelastičnih gubitaka energije.

su određene u četvrtom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu prikazane su na slici 102. Ovi rezultati su dobijeni primenom fluidnog modela prvog reda sa fluks i balk transportnim podacima, kao i primenom korigovanog fluidnog modela. Grafik pokazuje kako je slaganje između vrednosti brzine strimera, koje su određene u ova tri modela, slično kao slaganje odgovarajućih prostornih profila strimera. Naime, vrednosti brzine strimera koje su određene primenom fluidnog modela prvog reda u kome su korišćeni balk transportni podaci gotovo se podudaraju sa odgovarajućim vrednostima brzine koje su određene primenom korigovanog fluidnog modela. Međutim, brzina strimera koja je određena primenom fluidnog modela prvog reda u kome su korišćeni fluks transportni podaci je niža od brzine koja je određena u preostala dva modela. Ove razlike su najizraženije na visokim vrednostima redukovano spoljašnjeg električnog polja.

7.4 Negativni strimeri u tečnom argonu i tečnom kriptonu

Na slikama 103 i 104 je ilustrovana tranzicija elektronske lavine u negativan strimer za elektrone u tečnom argonu pri vrednosti redukovano spoljašnjeg električnog polja od 59 Td i 100 Td, respektivno, dok je tranzicija elektronske lavine u negativan strimer u tečnom kriptonu pri ove dve vrednosti redukovano spoljašnjeg električnog polja prikazana na graficima 105 i 106 respektivno. Rezultati na graficima dobijeni su primenom fluidnog modela prvog reda, u kome su korišćeni balk transportni podaci, izračunati u prvom i drugom slučaju za reprezentova-

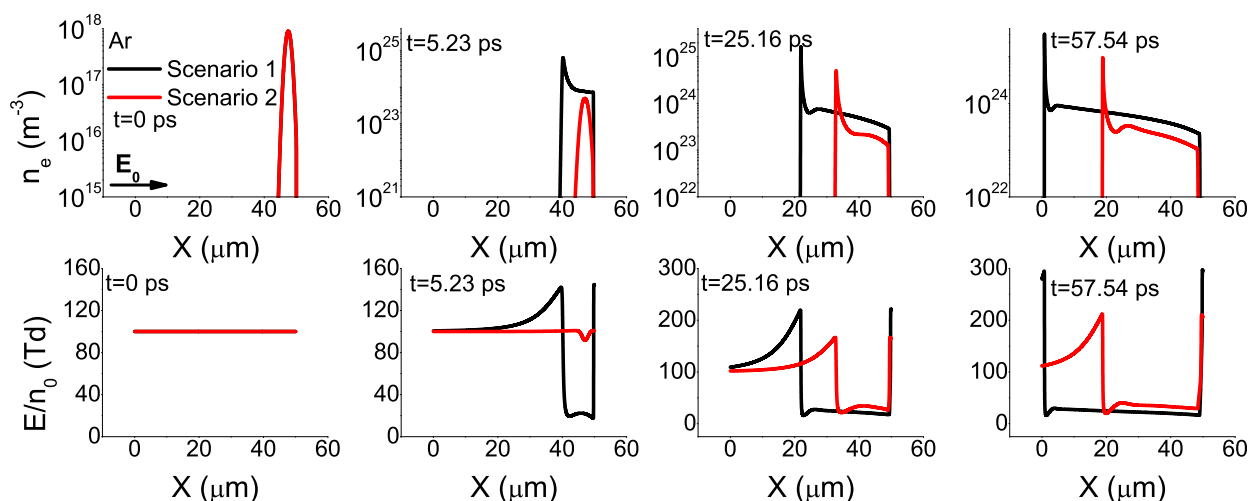
nje neelastičnih sudara u tečnosti. Za razliku od prvog slučaja za reprezentovanje neelastičnih energijskih gubitaka u tečnoj fazi gde su sve ekscitacije zanemarene, u drugom slučaju su uzete u obzir sve ekscitacije, čiji je prag niži od praga za zonski prelaz. Sa slika se vidi da su, kao i u tečnom ksenonu, prostorni profili koncentracije elektrona i rezultujućeg električnog polja u tečnom argonu i tečnom kriptonu na kvalitativnom nivou slični kao odgovarajući prostorni profili u gasnoj fazi, pri čemu su prostorne i vremenske skale formiranja strimera u tečnosti manje za oko tri reda veličine, zbog znatno veće koncentracije pozadinskih atoma u tečnosti nego u gasu. Takođe se vidi da vrednosti brzine formiranja i propagacije strimera, vrednosti koncentracije elektrona u glavi strimera i u strimerskom kanalu, kao i intenzitet efekata prostornog naelektrisanja opadaju sa porastom broja ekscitacija koje su uključene u set preseka za elektrone u tečnom argonu i tečnom kriptonu. Ovo je, kao i u tečnom ksenonu, posledica opadanja koeficijenta za jonizaciju sa povećanjem broja ekscitacija.



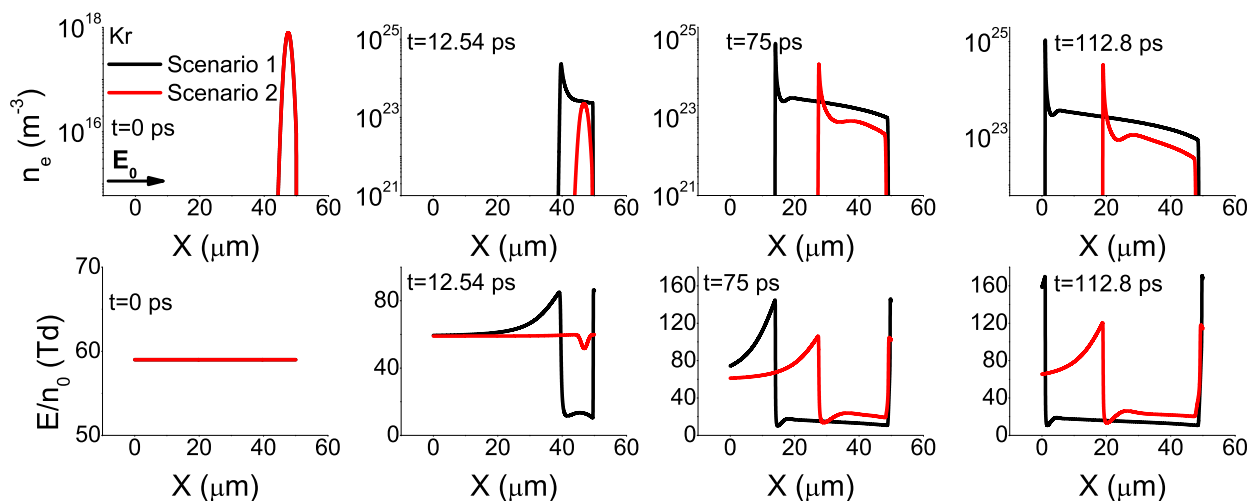
Slika 103: Formiranje i propagacija negativnog strimera u tečnom argonu za $E_0/n_0 = 59$ Td. Ovi rezultati su dobijeni primenom prvog i drugog scenarija za reprezentovanje neelastičnih energijskih gubitaka. Ovdje n_e označava koncentraciju elektrona, dok E/n_0 označava redukovano rezultujuće električno polje. Na ovom je grafiku prikazan i smer spoljašnjeg električnog polja. Rezultati su dobijeni na osnovu numeričkih proračuna u okviru fluidnih modela strimera.

Slika 107 prikazuje poređenja vrednosti balk brzine strimera u prvom i drugom slučaju za reprezentovanje neelastičnih sudara, za elektrone u tečnom argonu i tečnom kriptonu. U obe tečnosti balk brzina strimera značajno opada sa povećanjem broja ekscitacija koje su uključene u model, zbog smanjenja koeficijenta za jonizaciju sa porastom broja ekscitacija.

Na slici 108 su predstavljene vrednosti brzinskih koeficijenata za jonizaciju za elektrone u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu, kao i u odgovarajućim gasovima, u funkciji E/n_0 . Uz to, slika 109 reprezentuje vrednosti ovih brzinskih koeficijenata koje su pomnožene sa odgovarajućom koncentracijom pozadinskih atoma u tečnoj fazi. U gasnoj fazi je do oko 700 Td brzinski koeficijent za jonizaciju u ksenonu niži od brzinskog koeficijenta u preostala dva gasa. Pored toga je brzinski koeficijent za jonizaciju u kriptonu niži od odgovarajućeg brzinskog koeficijenta u argonu do oko 400 Td. No u tečnoj fazi je brzinski koeficijent za jonizaciju u

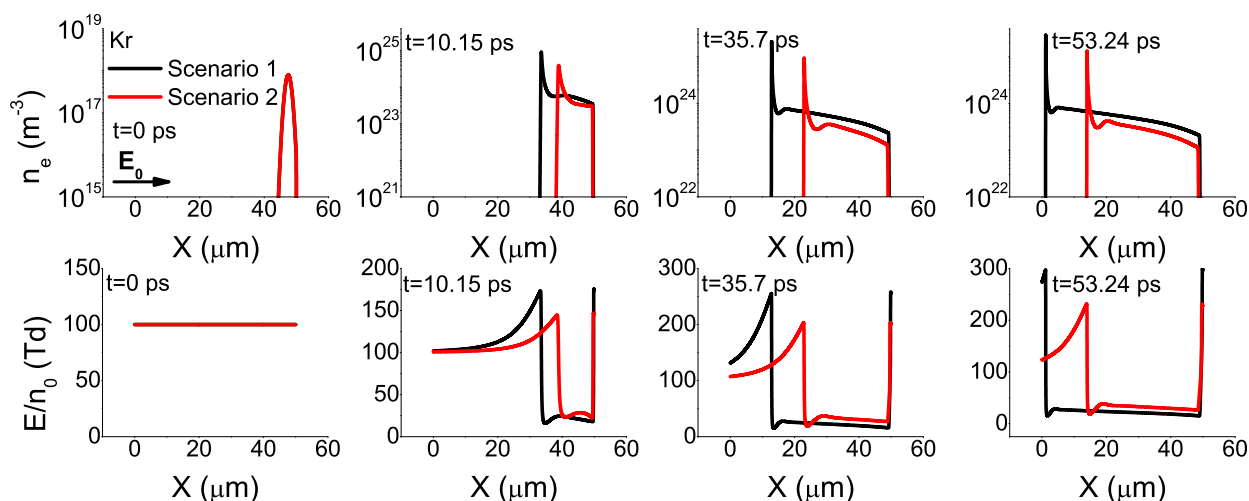


Slika 104: Formiranje i propagacija negativnog strimera u tečnom argonu za $E_0/n_0 = 100$ Td. Rezultati su dobijeni uz pomoć numeričkih proračuna u okviru fluidnih modela strimera.

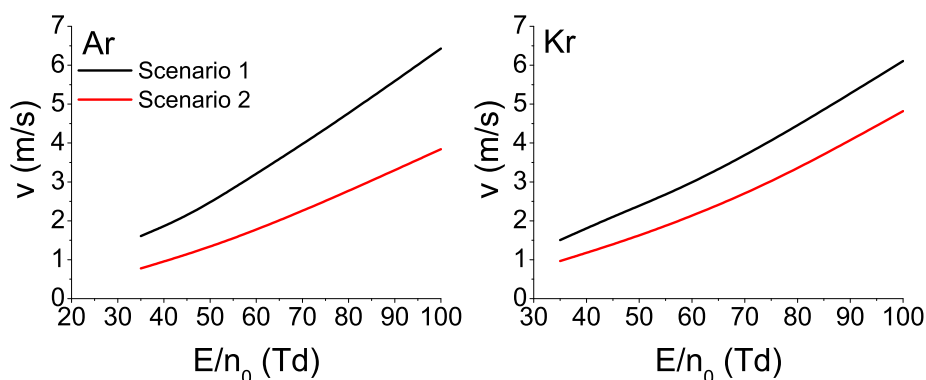


Slika 105: Formiranje i propagacija negativnog strimera u tečnom kriptonu za $E_0/n_0 = 59$ Td. Ovi rezultati su dobijeni primenom prvog i drugog scenarija za reprezentovanje neelastičnih energijskih gubitaka. Ovde n_e označava koncentraciju elektrona, a E/n_0 označava redukovano rezultujuće električno polje. Na grafiku je takođe prikazan smer spoljašnjeg električnog polja. Rezultati su dobijeni primenom numeričkih proračuna u okviru fluidnih modela strimera.

ksenonu viši od brzinskih koeficijenata u argonu i kriptonu do oko 77 Td. Na poljima višim od 77 Td brzinski koeficijent za jonizaciju u tečnom kriptonu viši je od odgovarajućeg koeficijenta u tečnom ksenonu. Brzinski koeficijent za jonizaciju u tečnom argonu je niži od odgovarajućih koeficijenata u preostale dve tečnosti do 1000 Td. Faktori koji utiču na razliku između brzinskih koeficijenata za jonizaciju u tečnoj i gasnoj fazi jesu sniženje praga za jonizaciju u tečnoj fazi u odnosu na gasnu fazu i broj ekscitacija u tečnoj fazi, jer ekscitacije predstavljaju konkurentan proces jonizaciji. Pritom su naročito značajne ekscitacije čiji su pragovi niži od praga za jonizaciju u tečnoj fazi. Jedan od razloga zbog kojih je brzinski koeficijent za jonizaciju u tečnom argonu niži nego u preostale dve tečnosti je prisustvo većeg broja ekscitacija u argonu, čiji su pragovi niži od praga za jonizaciju u tečnoj fazi. Drugi uzročnik je manje sniženje praga



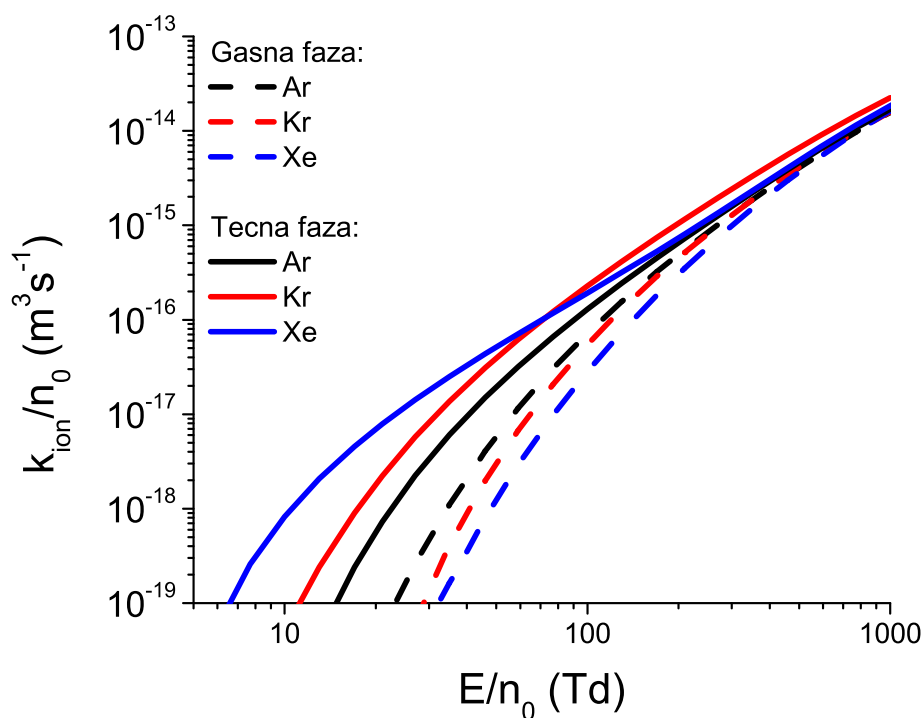
Slika 106: Formiranje i propagacija negativnog strimera u tečnom kriptonu za $E_0/n_0 = 100$ Td. Rezultati su dobijeni na osnovu numeričkih proračuna u okviru fluidnih modela strimera.



Slika 107: Vrednosti brzine strimera koje su određene primenom prvog i drugog scenarija za reprezentovanje neelastičnih gubitaka energije za elektrone u tečnom argonu i tečnom kriptonu. Rezultati su dobijeni uz pomoć numeričkih proračuna u okviru fluidnih modela strimera.

za jonizaciju u tečnoj fazi (u odnosu na gasnu fazu) u tečnom argonu nego u preostale dve tečnosti. Brzinski koeficijent u tečnom ksenonu je viši od odgovarajućeg koeficijenta u tečnom kriptonu do oko 77 Td zbog većeg sniženja praga za jonizaciju u tečnoj fazi. Međutim, sniženje praga za jonizaciju ima manji uticaj na brzinski koeficijent za jonizaciju na višim poljima, pa brzinski koeficijent za jonizaciju u tečnom kriptonu nadmašuje odgovarajući koeficijent u tečnom ksenonu.

Iako je brzinski koeficijent za jonizaciju u tečnom argonu niži nego u preostale dve tečnosti do oko 1000 Td, koncentracija pozadinskih atoma je najveća u tečnom argonu ($2.1 \cdot 10^{28} m^{-3}$), a najmanja u tečnom ksenonu ($1.4 \cdot 10^{28} m^{-3}$). Zato je brzinski koeficijent za jonizaciju u tečnom argonu, koji je pomnožen sa odgovarajućom koncentracijom pozadinskih atoma (skalirani brzinski koeficijent), viši od odgovarajućeg koeficijenta u tečnom ksenonu na poljima višim od 100 Td. Slično tome, skalirani brzinski koeficijent za jonizaciju u tečnom kriptonu viši je od odgovarajućeg koeficijenta u tečnom ksenonu na poljima višim od oko 50 Td. Skalirani brzinski koeficijent u tečnom kriptonu veći je od odgovarajućeg brzinskog koeficijenta u tečnom argonu

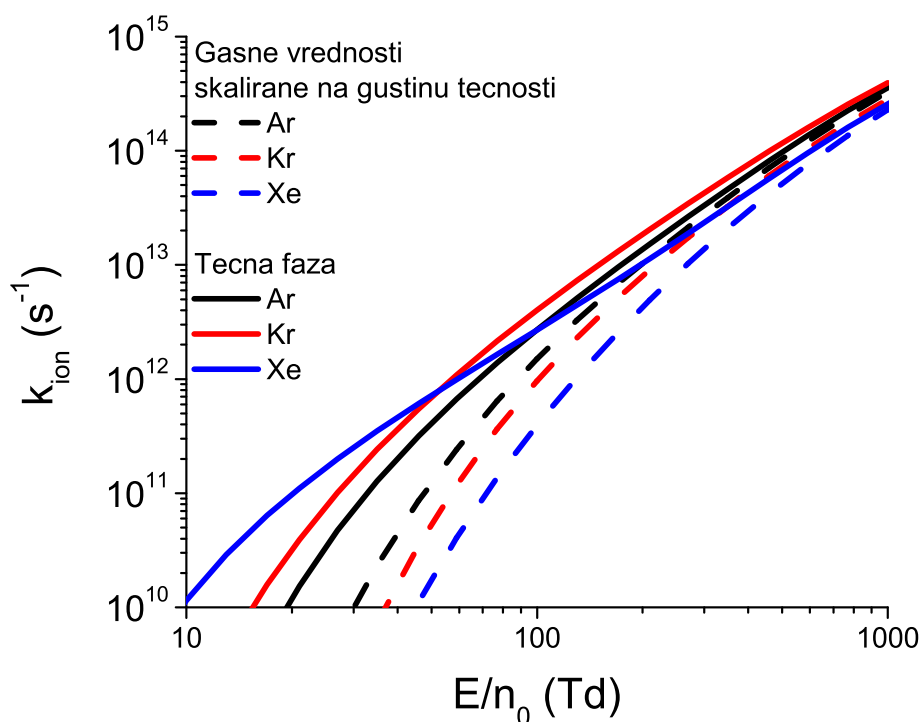


Slika 108: Brzinski koeficijenti za jonizaciju u funkciji redukovanoeg električnog polja E/n_0 za elektrone u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu. Zarad poređenja, na grafiku su prikazani i brzinski koeficijenti za jonizaciju u odgovarajućim gasovima. Rezultati su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija.

do 1000 Td. Pošto intenzitet lavinske multiplikacije elektrona zavisi od proizvoda brzinskog koeficijenta za jonizaciju i koncentracije pozadinskih atoma, lavinska multiplikacija je najveća u tečnom kriptonu na poljima višim od oko 50 Td, dok je na poljima višim od 100 Td lavinska multiplikacija u tečnom ksenonu manja nego u preostale dve tečnosti.

Na slici 110 je prikazano poređenje vrednosti brzine strimera u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu, u funkciji redukovanoeg spoljašnjeg električnog polja E_0/n_0 . Ovi rezultati su dobijeni primenom fluidnog modela prvog reda, u kome su korišćene balk vrednosti transportnih koeficijenata. Vrednosti brzine strimera koje su dobijene primenom korigovanog fluidnog modela gotovo su jednake odgovarajućim vrednostima koje su dobijene primenom fluidnog modela prvog reda u kome su korišćeni balk transportni podaci za sve tri tečnosti, u razmatranom opsegu redukovanoeg spoljašnjeg električnog polja (razlike su uvek manje od 5% u ovom opsegu polja). Sa grafika se vidi da je brzina strimera u tečnom kriptonu primetno veća od brzine strimera u preostale dve tečnosti u celom razmatranom opsegu redukovanoeg spoljašnjeg električnog polja, pri čemu su ove razlike najizraženije na visokim poljima. Istovremeno važi da je brzina strimera u tečnom argonu viša od odgovarajuće brzine u tečnom ksenonu, uz šta je ova razlika mala na 35 Td, ali je znatno veća na višim poljima.

Razlike između vrednosti brzina negativnih strimera tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu, koje su prikazane na slici 110, u skladu su sa razlikama između vrednosti skaliranih brzinskih koeficijenata za jonizaciju u ove tri tečnosti. Brzina strimera je naime određena

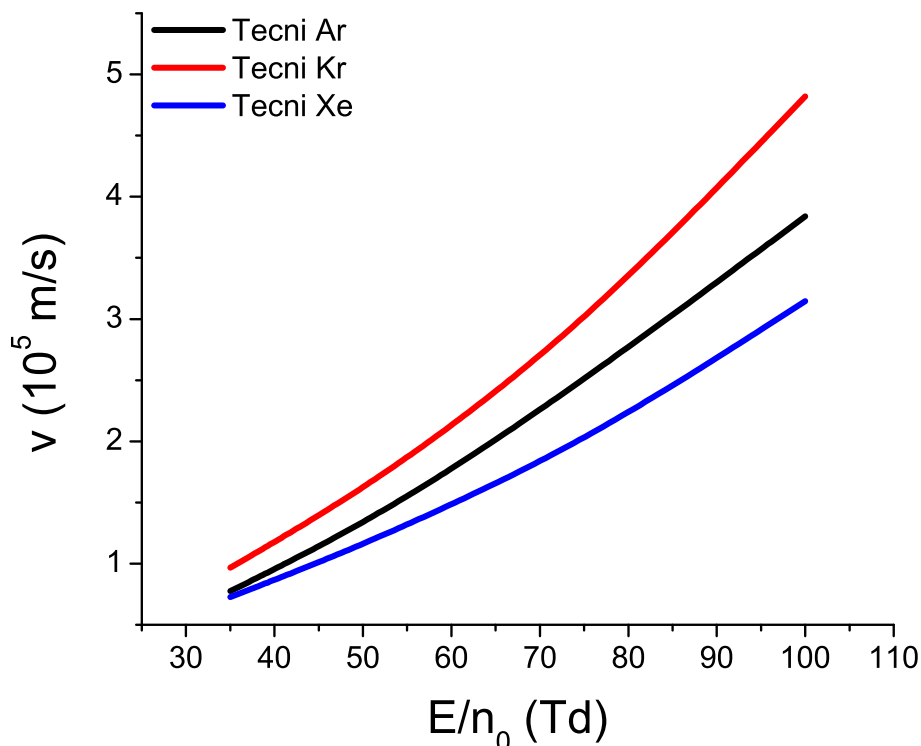


Slika 109: Brzinski koeficijenti za jonizaciju skalirani sa koncentracijom tečnosti u funkciji redukovanog električnog polja E/n_0 za elektrone u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu. Na ovom grafiku su, s ciljem komparacije, prikazani i brzinski koeficijenti za jonizaciju u gasnoj fazi koji su skalirani koncentracijom odgovarajuće tečnosti. Rezultati su dobijeni na osnovu Monte Carlo simulacija.

dinamikom elektrona u glavi strimera, pri čemu je u našim simulacijama rezultujuće električno polje u glavi strimera oko 2.5 puta veće od spoljašnjeg električnog polja. Tako se i na 35 Td rezultujuće električno polje u glavi strimera nalazi u opsegu polja u kome je skalirani brzinski koeficijent za jonizaciju u tečnom kriptonu primetno veći nego u preostale dve tečnosti. Pošto je pak vrednost skaliranog brzinskog koeficijenta u tečnom argonu jako bliska odgovarajućoj vrednosti u tečnom ksenonu u opsegu polja između 77 Td i 130 Td, na najnižim poljima je brzina strimera u tečnom argonu samo malo viša od odgovarajuće brzine u tečnom ksenonu, ali se ova razlika povećava sa porastom polja.

7.5 Zaključak

U ovom poglavlju su proučavani negativni strimeri u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu. Potpoglavlje 7.2 prikazuje fluidne modele strimera. Prvo je prikazan fluidni model prvog reda, koji je zadat drift-difuzionom jednačinom za elektrone i jednačinama za balans broja čestica za naelektrisane čestice niže mobilnosti. Uticaj naelektrisanih čestica na rezultujuće električno polje je određen na osnovu Poisson-ove jednačine, dok su vrednosti transportnih veličina za elektrone u svakoj tački prostora određene primenom aproksimacije lokalnog polja. U posmatranom sistemu se broj slobodnih nosilaca naelektrisanja povećava ekscitovanjem elektrona iz valentne zone u provodnu zonu, dok se njihov broj smanjuje re-



Slika 110: Poređenje brzine negativnih strimera za elektrone u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu u funkciji redukovanoeg spoljašnjeg električnog polja E_0/n_0 . Rezultati su dobijeni primenom fluidnog modela prvog reda sa balk transportnim podacima.

kombinacijom kvazislobodnih elektrona i elektronskih šupljina. Koeficijent za rekombinaciju kvazislobodnih elektrona i elektronskih šupljina je određen primenom skalirane Debye-ove formule. Uticaj nekonzervativnih procesa na promenu koncentracije elektrona opisan je izvornim članom. Ako se pri izvođenju drift-difuzione jednačine iz Boltzmann-ove jednačine pretpostavi najjednostavniji oblik izvornog člana, u kome su zanemareni prostorni gradijenti brzinskih koeficijenata za nekonzervativne sudarne procese, dobije se fluidni model prvog reda sa fluks transportnim koeficijentima. Drift-difuziona jednačina se može izvsti i iz jednačine kontinuiteta, ukoliko se iskoristi hidrodinamički razvoj fluksa čestica i izvornog člana. Na taj se način dobija oblik drift-difuzione jednačine u kome eksplicitno figurišu članovi koji opisuju prostorne gradijente brzinskih koeficijenata za nekonzervativne sudarne procese. Fluidni model u kome figuriše ovaj oblik drift-difuzione jednačine zove se fluidni model baziran na hidrodinamičkoj aproksimaciji ili korigovani fluidni model. Kada se u korigovanom modelu mogu zanemariti prostorni gradijenti koeficijenata u hidrodinamičkom razvoju izvornog člana, ovaj se model svodi na fluidni model prvog reda sa balk transportnim koeficijentima. Na osnovu toga se vidi da je fluidni model prvog reda sa balk transportnim koeficijentima bolja aproksimacija korigovanog fluidnog modela od fluidnog modela prvog reda u kome figurišu fluks transportni koeficijenti.

Numerička implementacija fluidnih modela, koji su korišćeni u ovoj disertaciji, zasnovana je na takozvanom jednoipodimenzionom (1.5D) modelu. U ovom modelu je pretpostavljeno da se naelektrisane čestice nalaze unutar cilindra sa konstantnim poluprečnikom. Pored toga je pretpostavljeno da koncentracija naelektrisanih čestica ne zavisi od radijalne koordinate i ugao

koordinate, već da zavisi samo od aksijalne koordinate. Vrednosti rezultujućeg električnog polja i transportne veličine elektrona se izračunavaju samo na osi cilindra. 1.5D model daje realističniji opis ukupnog električnog polja od jednodimenzionog modela. Na kraju potpoglavlja 7.2 su prikazane vrednosti parametara modela koje su korišćene u okviru ove disertacije.

U potpoglavlju 7.3 razmatrani su formiranje i propagacija negativnih strimera u tečnom ksenonu u konstantnom spoljašnjem električnom polju. Na početku ovog potpoglavlja je upoređena dinamika evolucije strimera u prvom i četvrtom scenariju za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnoj fazi, kao i u scenariju u kome su transportni podaci iz gasne faze skalirani na gustinu tečnosti. Uočeno je da povećanje broja ekscitacija, koje su uključene u model, značajno usporava formiranje i propagaciju strimera. Još značajnije smanjenje brzine formiranja i propagacije strimera se dobije kada se u simulacijama koriste skalirani transportni podaci iz gasne faze. Brzina strimera, koja je određena u simulacijama, znatno je viša od balk brzine drifta, koja odgovara datoj vrednosti spoljašnjeg električnog polja. Na kraju ovog potpoglavlja je prikazano poređenje rezultata koji su dobijeni primenom korigovanog fluidnog modela i fluidnog modela prvog reda sa fluks i balk transportnim podacima. Uočeno je da se brzina strimera u fluidnom modelu prvog reda, u kome su korišćeni balk transportni podaci, odlično slaže sa brzinom strimera koja je određena u korigovanom fluidnom modelu, dok je brzina strimera u fluidnom modelu prvog reda sa fluks transportnim podacima nešto niža od brzine strimera u preostala dva modela.

U odeljku 7.4 predstavili smo formiranje i propagaciju negativnih strimera u tečnom argonu i tečnom kriptonu u konstantnom spoljašnjem električnom polju. Na početku je razmatran uticaj broja ekscitacija koje su uključene u model na dinamiku negativnih strimera u ovim tečnostima. Primećeno je da brzine formiranja i propagacije strimera opadaju sa porastom broja ekscitacija koje su uključene u model, kao i u slučaju ksenona. Takođe su upoređeni profili zavisnosti brzine strimera od redukovanoeg spoljašnjeg električnog polja u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu. Ovi profili su analizirani na osnovu brzinskih koeficijenata za jonizaciju u ovim tečnostima i na osnovu rejtova za jonizaciju (brzinskih koeficijenata skaliranih sa koncentracijom pozadinskih atoma u tečnosti). Brzinski koeficijent za jonizaciju je najviši u tečnom ksenonu do približno 80 Td, zbog najvećeg sniženja praga za jonizaciju u ovoj tečnosti. U opsegu polja između približno 80 Td i 1000 Td brzinski koeficijent za jonizaciju je najviši u tečnom kriptonu. Brzinski koeficijent za jonizaciju u tečnom argonu je niži nego u preostale dve tečnosti u celom razmatranom opsegu polja. Međutim, koncentracija pozadinskih atoma je najviša u tečnom argonu a najniža u tečnom ksenonu. Zbog toga je skalirani brzinski koeficijent za jonizaciju najviši u tečnom kriptonu između približno 50 Td i 1000 Td, a najniži u tečnom ksenonu između približno 100 i 1000 Td. Razlike između vrednosti brzine negativnog strimera u različitim tečnostima na određenom redukovanom električnom polju su u saglasnosti sa vrednostima skaliranog brzinskog koeficijenta za jonizaciju na 2.5 puta većem redukovanom električnom polju, koje odgovara vrednosti rezultujućeg električnog polja u glavi strimera. Na osnovu toga je brzina negativnog strimera najviša u tečnom kriptonu, a najniža u tečnom ksenonu u razmatranom opsegu redukovanoeg spoljašnjeg električnog polja.

8 Zaključak

Ova doktorska disertacija je koncipirana na način da u sebi sadrži dve globalne i međusobno koherentne celine. Prva celina se odnosi na razvoj teorije i metodologije za proučavanje transportnih koeficijenata trećeg reda za rojeve lakih naelektrisanih čestica u gasovima. U drugoj celini ove disertacije razmatrani su problemi transporta elektrona, tranzicije lavina elektrona, formiranja i propagacije negativnih strimera u atomskim tečnostima visoke mobilnosti u uslovima u kojima se ne pojavljuju gasni mehurići i zarobljavanje elektrona u dislokacijama soft-kondenzovane materije.

Transportni koeficijenti trećeg reda su potrebni za konverziju hidrodinamičkih transportnih koeficijenata, koji se mogu direktno izračunati u okviru kinetičke teorije rojeva, u transportne podatke koji se određuju u stacionarnom Townsend-ovom eksperimentu (eng. *steady-state Townsend experiment*) i eksperimentu sa spektrom pristižućih čestica (eng. *arrival-time spectra experiment*). Razlike između transportnih podataka koji se mere u različitim tipovima eksperimenata sa rojevima naelektrisanih čestica mogu biti kako kvantitativno tako i kvalitativno značajne u prisustvu nekonzervativnih sudara. U tom smislu, neophodna je velika pažnja pri interpretaciji transportnih podataka koji su određeni u različitim tipovima eksperimenata, kao i pri primeni ovih podataka u proceduri za određivanje kompletnih setova preseka na osnovu metode rojeva (eng. *swarm procedure*), ili u direktnoj primeni ovih podataka u fluidnim modelima neravnotežne plazme. U literaturi se pak često ne vodi računa o poreklu i interpretaciji korišćenih transportnih podataka, što može značajno smanjiti pouzdanost tako dobijenih rezultata. Zbog toga su sistematično izračunavanje hidrodinamičkih transportnih koeficijenata prvog, drugog i trećeg reda, kao i njihova pažljiva konverzija u željeni tip eksperimentalnih podataka neophodni za otklanjanje ovog izvora nesigurnosti.

Transportni koeficijenti trećeg reda su neophodni za bolji opis prostornih raspodela rojeva naelektrisanih čestica u uslovima u kojima postoji asimetrično odstupanje ovih raspodela od idealnog Gaussian-a. Prostorni profili rojeva naelektrisanih čestica, koji se mogu reprezentovati približnom analitičkom formulom u kojoj figurišu transportni koeficijenti trećeg reda, primećeni su u eksperimentima i u Monte Carlo simulacijama. Odstupanje prostornog profila naelektrisanih čestica od idealnog Gaussian-a je naročito izraženo pri niskim vrednostima koncentracije atoma pozadinskog gasa i u ranim fazama vremenske evolucije roja. Ako bi transportni koeficijenti trećeg reda bili računati i mereni sa dovoljnom preciznošću, oni bi bili jako korisni u proceduri za određivanje kompletnih setova preseka na osnovu metode rojeva. U ovoj disertaciji je pokazano da su transportni koeficijenti trećeg reda osetljiviji na energijsku zavisnost preseka za elementarne sudarne procese od transportnih koeficijenata nižeg reda, uključujući brzinu drifta i komponente difuzionog tenzora. Pored toga, povećanje broja transportnih koeficijenata koji se koriste u ovoj proceduri smanjilo bi problem nejednoznačnosti rezultujućih setova preseka.

U dosadašnjoj literaturi nije bila određena struktura transportnog tenzora trećeg reda u prisustvu magnetskog polja. Pored toga, fizička interpretacija pojedinačnih komponenti ovog

tenzora nije bila pažljivo analizirana, što nije bio slučaj ni sa uticajem energijske zavisnosti preseka za elastične, neelastične i nekonzervativne sudare na ove komponente. Proračuni transportnih koeficijenata trećeg reda za elektrone u atomskim gasovima bili su ograničeni na niska električna polja, na kojima se efekat neelastičnih sudara može zanemariti, dok su proračuni u molekularnim gasovima bili ograničeni isključivo na longitudinalnu komponentu transportnog tenzora trećeg reda za elektrone u gasovima SF₆ i CH₄. Ove činjenice predstavljaju motivacione faktore za istraživanje koje je prikazano u ovoj disertaciji.

U okviru ove disertacije, transportni koeficijenti trećeg reda su sistematski proučavani u Monte Carlo simulacijama i na osnovu metoda više članova za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine. Obe ove tehnike se smatraju egzaktnim u okviru kinetičke teorije rojeva naelektrisanih čestica u neutralnim gasovima i tečnostima. Korektnost teorijskih modela i numerički integritet kompjuterskih kodova su provereni u velikom broju benčmark proračuna, u kojima su rojevi naelektrisanih čestica bili pod uticajem vremenski stacionarnih i vremenski promenljivih električnih i magnetskih polja, u prisustvu kako konzervativnih tako i nekonzervativnih sudara. U ovoj disertaciji, inicijalne verzije kompjuterskih kodova baziranih na Monte Carlo metodu i numeričkom rešavanju Boltzmann-ove jednačine proširene su uvođenjem novih elemenata koji su omogućili sistematsko ispitivanje transportnih koeficijenata trećeg reda u modelnim i realnim gasovima. U našem su istraživanju, gde god je bilo moguće, transportni koeficijenti trećeg reda izračunati uz pomoć obe tehnike i međusobno su upoređeni ne bi li se izbegla svaka sumnja u njihovo ponekad atipično ponašanje u električnim i magnetskim poljima.

Istraživanje transporta naelektrisanih čestica u tečnoj fazi od značaja je za mnoge važne primene, uključujući upotrebu plazme u medicini, detektore čestica visoke energije sa tečnim argonom ili tečnim ksenonom, pročišćavanje vode primenom plazme i transformatorska ulja. Dalji razvoj i optimizacija ovih primena zavise od temeljnog razumevanja efekata koji utiču na dinamiku elektrona, jona i metastabila u tečnoj fazi. Modelovanje transporta naelektrisanih čestica u tečnostima je još uvek u fazi razvoja zbog kompleksnosti razmatranog sistema, kao i zbog velikog broja pojedinačnih procesa koji se dešavaju na različitim prostornim i vremenskim skalama. Dinamika elektrona u tečnoj fazi je pod snažnim uticajem koherentnog rasejanja, zarobljavanja u lokalnim oblastima niže gustine, interakcije sa pojedinačnim atomima i molekulima u tečnosti i solvatacije u polarnim tečnostima.

Uprkos brojnim efektima koji značajno modifikuju dinamiku elektrona u tečnostima, mnogi raniji modeli su aproksimirali transportne podatke iz tečne faze odgovarajućim podacima iz gasne faze, koji su skalirani na koncentraciju pozadinskih atoma u tečnosti. Svi egzaktni proračuni transporta elektrona u atomskim tečnostima, koji se mogu naći u literaturi, ograničeni su na nisku oblast redukovano električnog polja, gde se neelastični i nekonzervativni sudari mogu zanemariti, uprkos tome što su za razvoj lavine elektrona i dinamiku strimera od ključnog značaja upravo vrednosti transportnih veličina na visokim poljima. U nekoliko teorijskih radova koji razmatraju transport elektrona na visokim električnim poljima nije dovoljno pažljivo analiziran uticaj neelastičnih sudara i nije jasno prikazan set preseka za ekscitacije koji je korišćen za određivanje prikazanih rezultata. Pored toga, modeli strimera u tečnoj fazi koji se mogu

naći u literaturi ne koriste transportne podatke koji su izračunati u tečnoj fazi, već ove podatke određuju na osnovu aproksimativnih analitičkih formula sumnjive pouzdanosti. Egzaktni proračuni transporta elektrona i dinamike strimera u tečnoj fazi trenutno nisu mogući, jer tačne vrednosti preseka za neelastične i nekonzervativne sudare u tečnostima još uvek nisu poznate u literaturi. Međutim, pažljivim razmatranjem aproksimativnih modela za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnostima mogu se napraviti preliminarne procene uticaja neelastičnih sudara na transport elektrona i dinamiku strimera u tečnoj fazi. Ovi modeli mogu poslužiti kao značajan motivacioni faktor za izračunavanje preseka za neelastične i nekonzervativne sudare u tečnostima.

U ovoj su disertaciji transportni podaci za elektrone u nepolarnim atomskim tečnostima velike mobilnosti određeni primenom Monte Carlo simulacija. Za naše potrebe je postojeći Monte Carlo kod za rojeve naelektrisanih čestica u neutralnim gasovima proširen uvođenjem novih elemenata koji su omogućili simulacije transporta u nepolarnim atomskim tečnostima. Najvažniji novi element u Monte Carlo kodu su tri efektivna sudarna procesa koji obezbeđuju dobru reprezentaciju srednjeg transfera impulsa i energije pri koherentnom rasejanju. Ispravnost implementacije koherentnog rasejanja u Monte Carlo kodu i numerički integritet odgovarajućih numeričkih procedura potvrđeni su poređenjem rezultata proračuna transportnih podataka za elektrone u Percus-Yevick-ovoj modelnoj tečnosti sa rezultatima koji se mogu pronaći u literaturi, a koji su dobijeni u nezavisnim Monte Carlo simulacijama i na osnovu numeričkih rešenja Boltzmann-ove jednačine.

Numerički proračuni formiranja i propagacije strimera u tečnoj fazi, koji su urađeni u okviru ove disertacije, zasnovani su na fluidnom modelu prvog reda i tzv. korigovanom fluidnom modelu, baziranom na razvoju izvornog člana u jednačini kontinuiteta po gradijentima koncentracije elektrona. Oba modela su numerički realizovana u 1.5 dimenziji. Rezultati fluidnog modela prvog reda u kome su korišćeni fluks i balk transportni podaci upoređeni su sa odgovarajućim rezultatima korigovanog fluidnog modela, kako bi se utvrdila osetljivost rezultata na razlike između ovih modela, kao i na razlike u korišćenom tipu transportnih koeficijenata.

Ova doktorska disertacija organizovana je u osam poglavlja, uključujući uvodno poglavlje i zaključak. U uvodnom poglavlju prikazana je motivacija za proučavanja transportne teorije rojeva naelektrisanih čestica i neravnotežnih plazmi. Zatim smo diskutovali o prednostima i manama fluidnih modela, čestičnih modela i metoda za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine u modelovanju neravnotežnih plazmi. Usledio je kratak istorijski osvrt na razvoj metode više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine. Identifikovane su poteškoće u teorijskom opisu transporta naelektrisanih čestica u tečnoj fazi. Potom je dat pregled stanja u oblasti modelovanja transporta naelektrisanih čestica u tečnostima i soft-kondenzovanoj materiji. Posebnu pažnju posvetili smo motivaciji za izučavanje transportnih koeficijenata trećeg reda za rojeve naelektrisanih čestica u gasovima i tečnostima. Na kraju ovog poglavlja dat je kratak pregled preostalih poglavlja u disertaciji.

U drugom poglavlju su predstavljeni osnovni elementi teorije rojeva naelektrisanih čestica u gasovima i tečnostima. Na početku ovog poglavlja je definisan roj naelektrisanih čestica, a

zatim su prikazane osnove teroje rasejanja elektrona na izolovanom atomu, kao i neophodne modifikacije ove teorije za izračunavanje preseka za rasejanje elektrona u atomskim tečnostima. Nakon toga, u kratkim crtama je predstavljena hidrodinamička teorija transporta naelektrisanih čestica i definisane su dve različite familije transportnih koeficijenata, fluks i balk. Na kraju ovog poglavlja je prikazana struktura vektorskih i tenzorskih transportnih koeficijenata u svim konfiguracijama električnog i magnetskog polja.

Centralna tema trećeg poglavlja jesu metodi za izračunavanje transportnih koeficijenata i drugih transportnih veličina, a koji su predmet ove diertacije. Na početku je predstavljen metod više članova za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine, a zatim su prikazane fluidne jednačine koje se mogu izvesti na osnovu množenja Boltzmann-ove jednačine proizvoljnom funkcijom brzine i integracijom ove jednačine po brzinskom prostoru. Pažnja je zatim posvećena osnovi Monte Carlo simulacija i njihovoj implementaciji u kompjuterskom kodu korišćenom u ovoj disertaciji. Kraj poglavlja prikazuje proračune transportnih veličina u Percus-Yevick-ovoj modelnoj tečnosti, koji su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija i koji služe za proveru implementacije efekata koherentnog rasejanja u našem Monte Carlo kodu.

U četvrtom poglavlju su razmatrani transportni koeficijenti trećeg reda za rojeve naelektrisanih čestica u modelnim gasovima. Prvo je detaljno analizirana fizička interpretacija individualnih komponenti transportnog tenzora trećeg reda, kao i uticaja električnog polja i energijske zavisnosti kolizione frekvence na znak ovih komponenti. Nakon toga su prikazani uslovi simulacija i teorijskih proračuna, te rezultati proračuna transportnih koeficijenata trećeg reda u Maxwell-ovom modelnom gasu, koji su dobijeni primenom metode više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine, rezultati u modelu krutih sfera, koji su dobijeni primenom Monte Carlo simulacija, kao i rezultati u Reid-ovom modelnom gasu, Lucas-Saelee-evom modelnom gasu i modifikovanom Ness-Robson-ovom modelu, koji su dobijeni primenom ove dve metode. U ovom poglavlju je praćen i protumačen uticaj elastičnih, neelastičnih i nekonzervativnih sudara, kao i odnosa masa naelektrisanih čestica roja i neutralnih čestica pozadinske sredine na transportne koeficijente trećeg reda.

Transportni koeficijenti trećeg reda za rojeve elektrona i pozitrona u realnim gasovima obrađuju se u petom poglavlju. Na početku se analizira korelacija između profila zavisnosti longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda i longitudinalne komponente difuzionog tenzora od redukovano električnog polja. Slede rezultati proračuna transportnih koeficijenata trećeg reda za elektrone u atomskim i molekularnim gasovima i za pozitrone u molekularnim gasovima. Pri tome su rezultati u atomskim gasovima dobijeni primenom metode više članova za rešavanje Boltzmann-ove jednačine, dok su rezultati u molekularnim gasovima dobijeni primenom ove metode i Monte Carlo simulacija. Ovi rezultati su analizirani na osnovu setova preseka za elementarne sudarne procese i profila srednje energije.

U šestom smo poglavlju tumačili transport elektrona u atomskim tečnostima visoke mobilnosti. Na početku ovog poglavlja je predstavljena motivacija za izučavanje transporta elektrona u tečnoj fazi. Izneti su argumenti za postojanje provodne zone u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu, na osnovu rezultata koji su dobijeni u eksperimentima. Potom su prikaza-

ni setovi preseka koji su korišćeni za modelovanje rasejanja elektrona u ovim tečnostima. U slučaju elektrona u tečnom argonu i tečnom kriptonu razmatrana su dva različita scenarija za reprezentovanje neelastičnih sudara, dok su u slučaju tečnog ksenona razmatrana četiri različita scenarija. Nakon toga, primenom Monte Carlo simulacija su analizirani profili zavisnosti srednje energije, brzine drifta, brzinskog koeficijenta za jonizaciju i karakteristične energije od redukovanog električnog polja za elektrone u ove tri tečnosti.

Sedmo poglavlje bavilo se formiranjem i propagacijom strimera u atomskim tečnostima sa velikom mobilnošću. Na početku se govorilo o fluidnom modelu prvog reda i fluidnom modelu baziranom na razvoju izvornog člana u jednačini kontinuiteta po gradijentima koncentracije elektrona. Potom su prikazani rezultati fluidnih proračuna formiranja i propagacije negativnih strimera pod uticajem homogenog spoljašnjeg električnog polja u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu. Razmatrano je na koji način priroda transportnih koeficijenata, modeli za tretman elektronskih ekscitacija i rekombinacija kvazislobodnih elektrona i pozitivnih šupljina utiču na osobine strimerske plazme.

U ovoj doktorskoj disertaciji, mogu se izdvojiti sledeći originalni naučni doprinosi, koje ćemo prvo samo pobrojati, a onda u nastavku ovog poglavlja detaljnije obrazložiti.

(1) Struktura transportnog tenzora trećeg reda je određena primenom metode grupnih projektoru u svim konfiguracijama električnog i magnetskog polja. Pri tome, rezultati koji se odnose na konfiguraciju bez magnetskog polja slažu se sa rezultatima ranijih autora, dok je struktura tenzora u slučaju paralelne i ortogonalne konfiguracije polja prvi put određena u okviru ove disertacije. Korišćeni metod se može primeniti na određivanje strukture transportnog tenzora proizvoljnog reda. Struktura transportnog tenzora trećeg reda, koja je određena u ovoj disertaciji, dodatno je proverena na osnovu simetrija momenata funkcije raspodele naelektrisanih čestica u faznom prostoru i fizičkih argumenata.

(2) Fizička interpretacija individualnih komponenti transportnog tenzora trećeg reda je detaljno analizirana u okviru ove disertacije. Doprinos pojedinačnih komponenti transportnog tenzora trećeg reda fluksu čestica roja je razmatran na osnovu fluks gradijentne relacije, dok je uticaj ovih komponenti na prostorni profil roja analiziran primenom generalisane difuzione jednačine. Zavisnost znaka pojedinačnih komponenti transportnog tenzora trećeg reda od spoljašnjeg električnog polja i kolizione frekvence za elementarne sudarne procese je prvi put pažljivo tumačena u okviru ove disertacije.

(3) Transportni koeficijenti trećeg reda za naelektrisane čestice u modelnim gasovima, elektrone u atomskim i molekularnim gasovima, te pozitrone u tri molekularna gasa izračunati su u širokom opsegu redukovanog električnog polja primenom Monte Carlo simulacija i metode više članova za numeričko rešavanje Boltzmann-ove jednačine. Detaljno je analiziran uticaj elastičnih, neelastičnih i nekonzervativnih sudara, kao i odnosa masa naelektrisanih čestica roja i neutralnih čestica pozadinske sredine, na individualne komponente transportnog tenzora trećeg reda. Pored toga je razmatran uticaj transportnih koeficijenata trećeg reda na prostorni profil roja za elektrone u atomskim i molekularnim gasovima. Validnost korišćenih metoda za

izračunavanje transportnih koeficijenata trećeg reda je potvrđena na osnovu odličnog slaganja rezultata koji su dobijeni primenom ova dva metoda.

(4) U ovoj disertaciji je prvi put analiziran uticaj magnetskog polja na transportne koeficijente trećeg reda. Ovaj uticaj je analiziran na primeru elektrona u Reid-ovom modelnom gasu za ortogonalnu konfiguraciju električnog i magnetskog polja. Pri tome se detaljno diskutovalo o profilu zavisnosti dijagonalnih komponenti transportnog tenzora trećeg reda od redukovanoeg magnetskog polja na osnovu uticaja sila koje deluju na elektrone i njihovih sudara sa neutralnim česticama pozadinskog gasa.

(5) Na osnovu rezultata koji se odnose na elektrone u atomskim i molekularnim gasovima i pozitrone u molekularnim gasovima primećeno je da u svakom od ovih gasova postoji snažna korelacija između profila zavisnosti longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda i longitudinalne komponente difuzionog tenzora od redukovanoeg električnog polja. Opaženo je da se longitudinalna komponenta transportnog tenzora trećeg reda povećava sa porastom redukovanoeg električnog polja kada je longitudinalna difuzija konveksna rastuća funkcija u log-log skali, dok ova komponenta transportnog tenzora trećeg reda opada sa porastom redukovanoeg električnog polja ako longitudinalna difuzija opada ili je konkavna rastuća funkcija redukovanoeg električnog polja u log-log skali. Pri tome je fluks/balk vrednost longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda korelisana sa fluks/balk longitudinalnom difuzijom. Ova korelacija je odsutna na najnižim poljima zbog toga što transportni koeficijenti trećeg reda teže nuli u limesu niskih polja, za razliku od dijagonalnih komponenti difuzionog tenzora koji imaju nenulte termalne vrednosti.

(6) U okviru ove disertacije je analizirana strukturno indukovana negativna diferencijalna provodnost za elektrone u tečnom ksenonu na osnovu prostorno razloženih karakteristika roja i funkcija raspodele elektrona po energijama. Uočeno je da su prostorni gradijenti brzinskog koeficijenta za elastične sudare najintenzivniji u oblasti polja u kojoj brzina drifta opada sa porastom redukovanoeg električnog polja, kao i da funkcija raspodele elektrona po energijama ima specifičan oblik u ovom opsegu polja. Na ovaj način je dopunjena već postojeća analiza strukturno indukovane negativne provodnosti koja je zasnovana na fluidnim modelima.

(7) Izvedene su fluidne jednačine za balans broja čestica, balans impulsa i balans energije za elektrone u atomskim tečnostima, pri čemu je uzet u obzir doprinos jonizacije. Na osnovu ovih jednačina je izveden sistem jednačina koji povezuje srednju energiju elektrona, brzinu drifta, vektor energijskog gradijenta i difuzioni tenzor, uz pretpostavku hidrodinamičkog režima i primenu izvesnih aproksimacija. Tako su proširene fluidne jednačine za lake naelektrisane čestice u atomskim tečnostima, koje već postoje u literaturi, a u kojima nisu uzeti u obzir nekonzervativni procesi koji omogućavaju multiplikaciju čestica roja. Ovaj sistem jednačina se može rešavati numerički kada su poznate kolizione frekvence za elementarne sudarne procese u funkciji srednje energije.

(8) Razmatran je uticaj broja ekscitacija koje su uključene u model na koeficijent za jonizaciju u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu primenom Monte Carlo simulacija. Četiri

različita scenarija za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu su tumačena na osnovu refleksionih spektara tečnog ksenona i eksperimenata sa fotoprovodnošću u ovoj tečnosti. Tako određeni brzinski koeficijenti za jonizaciju za elektrone u tečnom ksenonu upoređeni su sa eksperimentalnim rezultatima Derentzo-a i saradnika i sa teorijskim rezultatima ranijih autora.

(9) Analiziran je uticaj implementacije elektronskih ekscitacija koje su uključene u model na dinamiku tranzicije elektronske lavine u negativan strimer i propagaciju negativnog strimera u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu u beskonačnom prostoru primenom fluidnih modela strimera. Pokazano je da rezultati modelovanja dinamike strimera snažno zavise od broja ekscitacija koje su uključene u model, te da su razlike između pojedinačnih scenarija u saglasnosti sa odgovarajućim razlikama između brzinskih koeficijenata za jonizaciju. Takođe je zaključeno kako primena transportnih podataka iz gasne faze nije adekvatna za modelovanje strimera u tečnosti. Ovo je naročito izraženo ukoliko su razlike između brzinskih koeficijenata za jonizaciju u ove dve faze značajne pri vrednosti polja koja odgovara rezultujućem električnom polju na frontu strimera.

(10) Upoređeni su rezultati fluidnog modelovanja dinamike strimera koji su dobijeni primenom korigovanog fluidnog modela i fluidnog modela prvog reda sa fluks i balk transportnim koeficijentima za elektrone u tečnom ksenonu. Pokazano je da se vrednost brzine strimera, koja je određena u fluidnom modelu prvog reda, bolje slaže sa odgovarajućom brzinom koja je određena pomoću korigovanog fluidnog modela – ukoliko se u fluidnom modelu prvog reda koriste balk transportni koeficijenti.

U dosadašnjoj literaturi je bila poznata struktura transportnog tenzora trećeg reda samo u odsustvu magnetskog polja. Zbog toga je u okviru ove disertacije pažljivo razmatrana struktura ovog tenzora u svim konfiguracijama električnog i magnetskog polja primenom dve različite metode. Pri tome je potvrđena struktura transportnog tenzora trećeg reda u odsustvu magnetskog polja, koja je ranije utvrđena u literaturi. Transportni tenzor trećeg reda ima 7 nenulatih komponenti od kojih su 3 nezavisne u ovoj konfiguraciji polja. U paralelnoj konfiguraciji polja transportni tenzor trećeg reda ima 11 nenulatih komponenti od kojih je 4 nezavisno, dok u ortogonalnoj konfiguraciji polja ovaj tenzor ima 14 nenulatih komponenti od kojih je 10 nezavisno. Kada ugao između električnog i magnetskog polja uzima vrednost između 0 i 90 stepeni, transportni tenzor trećeg reda ima 27 nenulatih komponenta od kojih je 18 nezavisno.

Nakon određivanja strukture transportnog tenzora trećeg reda pažljivo je analizirana fizička interpretacija komponenti ovog tenzora na osnovu fluks gradijentne relacije i generalisane difuzione jednačine. Pokazano je da Q_{zzz} komponenta u zavisnosti od znaka opisuje elongaciju ili kontrakciju prostorne raspodele naelektrisanih čestica na frontu roja i suprotnu deformaciju na začelju roja. Slično tome, Q_{xxz} komponenta opisuje razliku u intenzitetu transverzalnog širenja naelektrisanih čestica na frontu i na začelju roja, a Q_{zxx} komponenta opisuje razliku u intenzitetu longitudinalnog širenja naelektrisanih čestica u centru roja i na transverzalnim ivicama. Zajednički efekat Q_{xxz} i Q_{zxx} komponenti u zavisnosti od njihovog znaka dovodi do širenja ili skupljanja prostorne raspodele naelektrisanih čestica duž transverzalnog pravca na frontu roja i suprotne deformacije na začelju roja.

Uticaj transportnih koeficijenata trećeg reda na prostorni profil roja zavisi od količnika $Q_L/D_L^{3/2}$ i $Q_T/(D_T D_L^{1/2})$. Budući da ovi količnici opadaju sa smanjenjem odnosa masa naelektrisanih čestica roja i neutralnih čestica pozadinske sredine, transportni koeficijenti trećeg reda imaju daleko značajniji uticaj na prostorni profil roja teških naelektrisanih čestica poput jona nego na profil lakih naelektrisanih čestica poput elektrona i pozitrona, uprkos tome što apsolutne vrednosti komponenti transportnog tenzora trećeg reda opadaju sa porastom odnosa masa čestica roja i čestica pozadinske sredine. Pored toga, vrednosti količnika $Q_L/D_L^{3/2}$ i $Q_T/(D_T D_L^{1/2})$ opadaju sa povećanjem koncentracije neutralnih čestica pozadinske sredine. Zbog toga je uticaj transportnih koeficijenata trećeg reda na prostorni profil roja najznačajniji u slučaju gasova na niskim pritiscima.

U ovoj disertaciji je uočeno da na dovoljno visokim poljima postoji snažna korelacija između profila zavisnosti longitudinalne komponente transportnog tenzora trećeg reda Q_{zzz} od redukovanog električnog polja E/n_0 i odgovarajućeg profila longitudinalne komponente difuzionog tenzora D_{zz} . Primećeno je da Q_{zzz} komponenta opada sa porastom E/n_0 kad god D_{zz} opada, kao i kad se D_{zz} povećava sa porastom E/n_0 kao konkavna funkcija u log-log skali. Slično tome, Q_{zzz} se povećava sa porastom E/n_0 kada se D_{zz} povećava kao konveksna funkcija E/n_0 u log-log skali. Pri tome je fluks/balk vrednost Q_{zzz} komponente korelisana sa fluks/balk vrednošću D_{zz} komponente u uslovima u kojima fluks i balk vrednosti ovih transportnih veličina imaju međusobno različito kvalitativno ponašanje zbog snažnog uticaja nekonzervativnih sudara. Ove korelacije nema na najnižim poljima jer transportni koeficijenti trećeg reda teže nuli u limesu niskih polja, za razliku od dijagonalnih komponenti difuzionog tenzora koje imaju nenulte termalne vrednosti.

Strukturno indukovana negativna diferencijalna provodnost za elektrone u tečnom ksenonu je ispitana uz pomoć prostorno razloženih karakteristika roja i funkcija raspodele elektrona po energiji. Uočeno je da su nagibi prostornih profila brzinskih koeficijenata za efektivne sudarne procese koji su opisani σ_{oba} i σ_{impuls} presecima najstrmiji u opsegu polja u kome postoji strukturno indukovana negativna diferencijalna provodnost. Ovi su nagibi uz to naročito strmi u opsegu polja u kome je opadanje brzine drifta sa porastom E/n_0 najintenzivnije. Pošto ovi sudarni procesi dovode do transfera impulsa u tačnoj fazi, njihov nagli porast u smeru kretanja centra mase roja značajno otežava ubrzavanje elektrona od strane spoljašnjeg električnog polja. U ovom opsegu polja povećanje srednjeg transfera impulsa u elastičnim sudarima u jedinici vremena sa porastom E/n_0 nadjačava povećanje sile koja ubrzava elektrone, što dovodi do opadanja brzine drifta sa porastom E/n_0 . Funcija raspodele elektrona po energijama ima neobičan oblik u opsegu polja u kome postoji strukturno indukovana negativna diferencijalna provodnost. Naime, visokoenergijski rep funkcije raspodele je odsečen u ovom opsegu polja zbog toga što u energijskom intervalu između približno 1 eV i 3 eV preseki za efektivne sudarne procese u kojima dolazi do transfera energije naglo rastu sa porastom energije. Pored toga, niskoenergijski deo funkcije raspodele je slabo populisan na niskim poljima, zato što je efektivni presek σ_{oba} za niskoenergijske elektrone jako nizak u tečnom ksenonu, što omogućava efikasno ubrzavanje niskoenergijskih elektrona od strane spoljašnjeg električnog polja.

U ovoj doktorskoj tezi je analiziran uticaj broja ekscitacija koje su uključene u model na prvi Townsend-ov koeficijent u tečnoj fazi. Vrednosti prvog Townsend-ovog koeficijenta koje su određene u četiri različita scenarija za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu upoređene su sa eksperimentalnim vrednostima Derentzo-a i saradnika, kao i sa prvim Townsend-ovim koeficijentom iz gasne faze koji je skaliran na gustinu tečnosti. Uočeno je da se prvi Townsend-ov koeficijent značajno smanjuje sa povećanjem broja ekscitacija koje su uključene u model. Iako se prve dve eksperimentalne tačke Derentzo-a i saradnika najbolje slažu sa scenarijom u kome su sve ekscitacije zanemarene, preostale eksperimentalne tačke se znatno bolje slažu sa scenarijima u kojima su ekscitacije uzete u obzir. Istovremeno je slaganje ovih eksperimentalnih tačaka nešto bolje sa scenarijom u kome su sve ekscitacije izolovanog atoma uključene u model, nego sa scenarijima u kojima su neke ekscitacije zanemarene. Pored toga, prvi Townsend-ov koeficijent iz gasne faze, koji je skaliran na gustinu tečnosti, znatno je niži od odgovarajućeg koeficijenta iz tečne faze u slučaju svih scenarija za reprezentovanje neelastičnih sudara u tečnom ksenonu, sve do jako visokih polja. Ovo je posledica značajnog sniženja efektivnog praga za jonizaciju u tečnom ksenonu u odnosu na gasni ksenon i znatno manjeg broja neelastičnih procesa čiji je prag ispod efektivnog praga za jonizaciju u tečnoj fazi. Razlika između skaliranog Townsend-ovog koeficijenta iz gasne faze i odgovarajućih koeficijenata u tečnosti opada sa porastom polja zbog manjeg značaja sniženja efektivnog praga za jonizaciju na visokim poljima.

Pošto je vrednost koeficijenta za jonizaciju od ključnog značaja za dinamiku strimera, broj ekscitacija koje su uključene u model snažno utiče na izračunatu brzinu formiranja i propagacije strimera u tečnoj fazi. U okviru ove disertacije je uočeno da brzina formiranja i propagacije strimera značajno opada sa povećanjem broja ekscitacija koje su uključene u model. Pored toga, primena transportnih podataka iz gasne faze koji su skalirani na gustinu tečnosti predviđa znatno sporiju tranziciju elektronske lavine u negativan strimer i znatno manju brzinu strimera u poređenju sa rezultatima koji su dobijeni na osnovu primene transportnih podataka izračunatih za tečni ksenon.

U našem istraživanju su upoređene brzine propagacije negativnih strimera u tečnom argonu, tečnom kriptonu i tečnom ksenonu, koji se kreću pod uticajem homogenog spoljašnjeg električnog polja. Razlike između vrednosti brzine negativnih strimera u ove tri tečnosti su analizirane na osnovu odgovarajućih razlika između profila zavisnosti brzinskih koeficijenata za jonizaciju od redukovano električnog polja. Brzinski koeficijent za jonizaciju u tečnom ksenonu je viši nego u preostale dve tečnosti do približno 80 Td, dok je odgovarajući koeficijent u tečnom argonu niži nego u preostale dve tečnosti do oko 1000 Td. Koncentracija atoma u tečnoj fazi je najniža u ksenonu a najviša u argonu, zbog čega je brzinski koeficijent za jonizaciju, koji je skaliran sa koncentracijom pozadinskih atoma, najviši u tečnom kriptonu na poljima višim od približno 50 Td a najniži u tečnom ksenonu u opsegu polja iznad približno 100 Td. Pošto brzina propagacije negativnog strimera zavisi od intenziteta rezultujućeg električnog polja na strimerskom frontu, a vrednosti rezultujućeg električnog polja na frontu strimera su u našim simulacijama oko 2.5 puta veće od vrednosti spoljašnjeg električnog polja, brzina negativnog strimera je najviša u tečnom kriptonu, a najniža u tečnom ksenonu u razmatranom opsegu

spoljašnjeg električnog polja.

Ova disertacija otvara mogućnosti za nova istraživanja u bliskoj budućnosti. Analiza transportnih koeficijenata trećeg reda se može proširiti na slučaj vremenski promenljivih električnih i magnetskih polja. Bilo bi zanimljivo ispitati faznu razliku između individualnih komponenti transportnog tenzora trećeg reda i spoljašnjeg električnog polja, imajući u vidu da transportni koeficijenti trećeg reda menjaju znak sa promenom smera električnog polja poput brzine drifta, a imaju relativno sporu vremensku relaksaciju poput srednje energije i difuzionog tenzora. Takođe bi bilo značajno i poučno razmotriti ponašanje transportnih koeficijenata trećeg reda u uslovima u kojima se pojavljuje kinetički fenomen anomalne longitudinalne difuzije u radio frekventnim električnim (i magnetskim) poljima.

Na osnovu Monte Carlo simulacija impulsnog Townsend-ovog eksperimenta i eksperimenta sa spektrima pristižućih čestica, mogu se odrediti eksperimentalni uslovi u kojima je moguće razložiti transportne koeficijente trećeg reda iz strujnih signala. Ove simulacije bi pomogle da se odrede gustina pozadinskog gasa, dimenzije komore (ili driftne cevi) i rezolucija strujnog signala koji su potrebni da bi se izmerili transportni koeficijenti trećeg reda za dati gas i datu vrednost redukovano električnog polja. Na ovaj način bi mogli da se izbegnu nehidrodinamički efekti poput hlađenja roja kroz gubitke najenergičnijih elektrona na bočnim zidovima komore usled transverzalne difuzije, koji su rezultate ranijih eksperimenata za određivanje transportnih koeficijenata trećeg reda učinili nepouzdanim.

Proračun transportnih koeficijenata za elektrone u tečnoj fazi se može unaprediti korišćenjem egzaktnih preseka za neelastične sudare u tečnosti, onda kada ti preseki budu određeni. Ovi proračuni mogu biti prošireni uzimanjem u obzir efekata interakcije elektrona sa fluktuacijama gustine pozadinske tečnosti. Jedan od najvažnijih efekata koje bi trebalo uključiti u model je efekat zarobljavanja elektrona u lokalnim oblastima manje gustine. On je naročito značajan za elektrone i/ili pozitronu u polarnim tečnostima, koje su od posebnog značaja u plazma medicini i radijacionoj fizici. U kontekstu istraživanja prikazanih u ovoj disertaciji, efekat zarobljavanja elektrona je od velike važnosti za tečni helijum i tečni neon, imajući u vidu da ovaj efekat vodi ka lokalizovanim stanjima elektrona, što ima za posledicu smanjenje mobilnosti elektrona u odnosu na gasnu fazu. Još jedan od mogućih budućih pravaca istraživanja tiče se razmatranja transporta elektrona u kombinovanim električnim i magnetskim poljima u tečnom argonu i tečnom ksenonu. Ova istraživanja su od naročitog značaja za budući razvoj, dizajn i optimizaciju detektora čestica koje slabo interaguju sa materijom kao što su neutrini i slabo-interagujuće masivne čestice tamne materije.

Fluidno modelovanje strimera u tečnoj fazi se može unaprediti razvojem sofisticiranih fluidnih modela višeg reda. U ovim se modelima makroskopske osobine strimerske plazme mogu odrediti na osnovu numeričkog rešenja sistema diferencijalnih jednačina koje reprezentuju jednačine balansa za koncentraciju naelektrisanih čestica, impuls, srednju energiju i ukoliko je potrebno, za energijski fluks. Ovaj sistem fluidnih jednačina se može zatvoriti aproksimacijom lokalne srednje energije, prema kojoj je neophodno odrediti kolizione frekvence za sve relevantne sudarne procese u funkciji srednje energije. Ovako koncipiran model mogao bi biti upotrebljen

za proveru nelokalnih efekata, ne samo u oblastima na frontu strimera, već i u strimerskom kanalu gde je spoljašnje električno polje ekranirano električnim poljem prostornog naelektrisanja. Razvoj dvodimenzionalnih modela sa manjim brojem slobodnih parametara u odnosu na jednodimenzionalne modele omogućio bi precizniji opis električnog polja i proučavanje inicijalnog formiranja strimera u realnim geometrijama. Trodimenzionalni fluidni modeli bi omogućili proučavanje efekta bifurkacije odnosno grananja strimera (eng. *branching*), kao i dinamiku strimera u električnom i magnetskom polju.

A Metod grupnih projektora

Struktura transportnih koeficijenata se može odrediti primenom teorije grupa, pošto je njihova struktura određena simetrijom sistema. Razmatrani sistem se sastoji iz roja naelektrisanih čestica, neutralnog pozadinskog fluida i spoljašnjeg električnog i magnetskog polja. Grupa simetrije sistema je grupa svih transformacija u odnosu na koje je sistem invarijantan [167, 168]. Grupe simetrije električnog i magnetskog polja su $C_{\infty V}$ i $C_{\infty h}$ respektivno, zbog toga što je električno polje polarni vektor, a magnetsko polje je aksijalni vektor. Ovo su grupe simetrije nepokretne kuge i rotirajućeg cilindra, respektivno [172]. Kada su električno i magnetsko polje prisutni u sistemu, grupa simetrije sistema je određena grupom simetrije konfiguracije spoljašnjih polja. Grupa simetrije paralelne konfiguracije polja je C_{∞} . Ovo je grupa simetrije rotirajuće kuge [172]. Grupa simetrije ortogonalne konfiguracije polja je C_{1V} , dok je grupa simetrije konfiguracije polja u kojoj električno i magnetsko polje zaklapaju proizvoljan ugao C_1 . Pozadinski fluid je invarijantan u odnosu na sve transformacije iz ortogonalne grupe $O(3)$. Ovo je grupa simetrije sfere. Na osnovu toga je grupa simetrije konfiguracije polja ujedno i grupa simetrije celog razmatranog sistema.

Struktura tenzora se može odrediti na osnovu njegove invarijantnosti na operacije iz grupe simetrije sistema. Delovanje grupe G na vektore iz vektorskog prostora H je reprezentovano grupnim homomorfizmom iz G u generalnu linearnu grupu na H , $GL(H)$ [168, 171]. Polarni vektori, poput brzine drifta, transformišu se na osnovu polarno vektorske reprezentacije grupe simetrije sistema $D^{pv}(G)$ [168, 171]. Ova reprezentacija je reducibilna i za konačne i kompaktne grupe može se razložiti na ireducibilne komponente od $D^{(\mu)}(G)$ kao [168, 170, 171]

$$D^{pv}(G) = \bigoplus_{\mu=1}^r a_{\mu} D^{(\mu)}(G). \quad (\text{A.1})$$

Ovde je a_{μ} broj pojavljivanja ireducibilne reprezentacije $D^{(\mu)}(G)$ pri razlaganju $D^{pv}(G)$, dok je r broj neekvivalentnih ireducibilnih reprezentacija grupe G . Pored toga, za razložive reprezentacije postoji simetrijski adaptirani bazis [170, 171], koji zadovaljava jednačinu

$$D^{pv}(G) |\mu t_{\mu} m\rangle = \sum_{n=1}^{|\mu|} D_{nm}^{(\mu)}(G) |\mu t_{\mu} n\rangle. \quad (\text{A.2})$$

Iz svega prethodnog sledi da za svaku ireducibilnu reprezentaciju $D^{(\mu)}(G)$ iz jednačine (A.1) postoji potprostor u H koji se transformiše na osnovu reprezentacije $D^{(\mu)}(G)$ [170, 171]. Vrlo značajna reprezentacija, koja postoji za svaku grupu G je trivijalna ireducibilna reprezentacija A_0 . Ona se definiše kao $D^{(A_0)}(g) = 1, \forall g \in G$, i ireducibilna je s obzirom na to da je jednodimenziona [171]. Može se videti iz jednačine (A.2) da je vektor invarijantan na delovanje $D^{(pv)}(G)$ ako pripada invarijantnom potprostoru koji odgovara trivijalnoj ireducibilnoj reprezentaciji. Ovaj invarijantan potprostor se može odrediti primenom grupnih projektora. U slučaju trivijalne reprezentacije, grupni projektor se određuje kao [170, 171]:

$$P^{(A_0)}(D^{pv}, G) = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} D^{pv}(g), \quad (\text{A.3})$$

za konačne grupe, gde je $|G|$ red grupe G [168, 170, 171]. Za jednoparametarske Lijeve grupe je grupni projektor na invarijantni potprostor koji odgovara trivijalnoj ireducibilnoj reprezentaciji A_0 dat u vidu jednačine [170, 171]:

$$P^{(A_0)}(D^{pv}, G) = \sum_R \int D^{pv}(R) dR. \quad (\text{A.4})$$

Dok se sumiranje ovde vrši po svim komponentama povezanosti grupe, integracija se dešava u domenu parametra grupe [170, 171]. Svaki vektor iz invarijantnog potprostora $D^{pv}(G)$ koji odgovara trivijalnoj reprezentaciji jeste linearna kombinacija svojstvenih vektora grupnog projektora $P^{(A_0)}(D^{pv}, G)$. Difuzioni tenzor je linearni operator koji preslikava vektor lokalnog gradijenta gustine $\nabla n(\mathbf{r}, t)$ u vektor difuzionog fluksa. Na osnovu toga difuzioni tenzor pripada invarijantnom potprostoru grupnog projektora $P^{(A_0)}(D^{pv \otimes 2}, G)$ gde $D^{pv \otimes 2}(G)$ reprezentuje $D^{pv} \otimes D^{pv}(G) = D^{pv}(G) \otimes D^{pv}(G)$. Nalik tome transportni tenzor trećeg reda preslikava tenzorski kvadrat gradijenta koji deluje na lokalnu koncentraciju čestica roja $\nabla \otimes \nabla n(\mathbf{r}, t)$ na vektor difuzionog fluksa višeg reda. Na osnovu toga transportni tenzor trećeg reda pripada invarijantnom potprostoru grupnog projektora $P^{(A_0)}(D^{pv} \otimes [D^{pv}]^2, G)$, gde $[D^{pv}]^2$ reprezentuje simetrizovani tenzorski kvadrat polarno vektorske reprezentacije. Ova simetrizacija je posledica komutiranja gradijenata.

Strogo govoreći, delovanje grupe na operatore, poput difuzionog tenzora i transportnog tenzora trećeg reda, reprezentovano je primenom grupnih superoperatora [169]. Oni su definisani kao $\widehat{D}(g)\hat{A} = D^{pv}(g)\hat{A}D^{pv}(g^{-1})$. Na osnovu toga bi pravolinijska primena teorije grupa zahtevala primenu grupnih superoperatora. Međutim, ovo nije neophodno zbog toga što je svaki bazisni operator ranga dva $|i\rangle \otimes \langle j|$, koji deluje u vektorskom prostoru H bijektivno povezan sa bazisnim vektorom $|i\rangle \otimes |j\rangle$ iz vektorskog prostora $H \otimes H$. Isto važi i za bazisne operatore ranga 3 $|i\rangle \otimes [\langle j| \otimes \langle k|]$ i bazisne vektore $|i\rangle \otimes [|j\rangle \otimes |k\rangle]$ iz vektorskog prostora $H \otimes [H \otimes H]$. Ovde ugaone zagrade reprezentuju simetrizaciju tenzorskog proizvoda. Ovo znači da se metod grupnih projektora može primeniti na reprezentacije $D^{pv}(G) \otimes D^{pv}(G)$ i $D^{pv} \otimes [D^{pv}]^2$ u odgovarajućim vektorskim prostorima. Onda se svojstveni vektori grupnih projektora mogu preslikati u odgovarajuće bazisne tenzore. Na tim su osnovama difuzioni tenzor i transportni tenzor trećeg reda linearne kombinacije bazisnih tenzora, koji su određeni na osnovu svojstvenih vektora grupnih projektora $P^{(A_0)}(D^{pv} \otimes D^{pv}, G)$ i $P^{(A_0)}(D^{pv} \otimes [D^{pv}]^2, G)$, respektivno. Pored toga, nije neophodno korišćenje reprezentacije $D^{pv} \otimes [D^{pv}]^2$ ne bi li se odredila struktura transportnog tenzora trećeg reda. Umesto toga može se koristiti reprezentacija $D^{pv} \otimes D^{pv} \otimes D^{pv}$, te da se rezultujući tenzori simetrizuju po poslednja dva indeksa.

B Eksplicitni izrazi za izračunavanje pojedinačnih komponenti transportnog tenzora trećeg reda na osnovu kinetičke teorije za rešavanje Boltzmann-ove jednačine

Primenom simetrija momenata funkcije raspodele $F(\nu lm|s\lambda\mu)$, koje su razmatrali White i saradnici [89], mogu se odrediti odgovarajuće simetrije pojedinačnih komponenti transportnog tenzora trećeg reda, koje su prikazane u Tabeli 1. Strukturu ovog tenzora moguće je odrediti na osnovu simetrija prikazanih u Tabli 1 i odgovarajućih fizičkih argumenata koji se odnose na flukseve naelektrisanih čestica, a koje se kreću pod uticajem magnetskog polja. Ovi fizički argumenti su neophodni kako bi se ustanovilo da su za datu konfiguraciju polja određene komponente transportnog tenzora trećeg reda jednake nuli, a onda i to da su određene komponente međusobno jednake. Slična procedura je bila primenjena za vektorske i tenzorske transportne koeficijente nižeg reda [89].

Tabela 1: Simetrije pojedinačnih komponenti transportnog tenzora trećeg reda. Prikazane transformacije reprezentuju A (prostornu inverziju), B (rotaciju za π oko z -ose), C (prostornu inverziju i rotaciju za π oko y -ose), i D (prostornu inverziju i rotaciju za π oko x -ose).

Komponenta	Transformacija			
	$\mathbf{E} \rightarrow -\mathbf{E}$	$B_y \rightarrow -B_y$	$B_z \rightarrow -B_z$	$\mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{B}$
Q_{xxz}, Q_{xzx}	$-Q_{xxz}, -Q_{xzx}$	Q_{xxz}, Q_{xzx}	Q_{xxz}, Q_{xzx}	Q_{xxz}, Q_{xzx}
Q_{yyz}, Q_{yzy}	$-Q_{yyz}, -Q_{yzy}$	Q_{yyz}, Q_{yzy}	Q_{yyz}, Q_{yzy}	Q_{yyz}, Q_{yzy}
Q_{zxx}	$-Q_{zxx}$	Q_{zxx}	Q_{zxx}	Q_{zxx}
Q_{zyy}	$-Q_{zyy}$	Q_{zyy}	Q_{zyy}	Q_{zyy}
Q_{zzz}	$-Q_{zzz}$	Q_{zzz}	Q_{zzz}	Q_{zzz}
Q_{xxx}	$-Q_{xxx}$	$-Q_{xxx}$	Q_{xxx}	$-Q_{xxx}$
Q_{xyy}	$-Q_{xyy}$	$-Q_{xyy}$	Q_{xyy}	$-Q_{xyy}$
Q_{xzz}	$-Q_{xzz}$	$-Q_{xzz}$	Q_{xzz}	$-Q_{xzz}$
Q_{yxy}, Q_{yyx}	$-Q_{yxy}, -Q_{yyx}$	$-Q_{yxy}, -Q_{yyx}$	Q_{yxy}, Q_{yyx}	$-Q_{yxy}, -Q_{yyx}$
Q_{zxx}, Q_{zxx}	$-Q_{zxx}, -Q_{zxx}$	$-Q_{zxx}, -Q_{zxx}$	Q_{zxx}, Q_{zxx}	$-Q_{zxx}, -Q_{zxx}$
Q_{xyz}, Q_{xzy}	$-Q_{xyz}, -Q_{xzy}$	Q_{xyz}, Q_{xzy}	$-Q_{xyz}, -Q_{xzy}$	$-Q_{xyz}, -Q_{xzy}$
Q_{yxz}, Q_{yzx}	$-Q_{yxz}, -Q_{yzx}$	Q_{yxz}, Q_{yzx}	$-Q_{yxz}, -Q_{yzx}$	$-Q_{yxz}, -Q_{yzx}$
Q_{zxy}, Q_{zyx}	$-Q_{zxy}, -Q_{zyx}$	Q_{zxy}, Q_{zyx}	$-Q_{zxy}, -Q_{zyx}$	$-Q_{zxy}, -Q_{zyx}$
Q_{xxy}, Q_{xyx}	$-Q_{xxy}, -Q_{xyx}$	$-Q_{xxy}, -Q_{xyx}$	$-Q_{xxy}, -Q_{xyx}$	Q_{xxy}, Q_{xyx}
Q_{yxx}	$-Q_{yxx}$	$-Q_{yxx}$	$-Q_{yxx}$	Q_{yxx}
Q_{yyy}	$-Q_{yyy}$	$-Q_{yyy}$	$-Q_{yyy}$	Q_{yyy}
Q_{yzz}	$-Q_{yzz}$	$-Q_{yzz}$	$-Q_{yzz}$	Q_{yzz}
Q_{zyz}, Q_{zzy}	$-Q_{zyz}, -Q_{zzy}$	$-Q_{zyz}, -Q_{zzy}$	$-Q_{zyz}, -Q_{zzy}$	Q_{zyz}, Q_{zzy}

U ovom dodatku su prikazani eksplicitni izrazi za pojedinačne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda. Oni su izvedeni na osnovu razvoja fluksa brzine čestica po Burnett-ovim

funkcijama i gradijentima koncentracije, a razvoj je prikazan u jednačini (3.34). Eksplicitni izrazi za diferencijalni operator $G_\mu^{(s\lambda)}$, koji figuriše u ovoj jednačini, dati su u Tabeli 2 [62]. U sledećim izrazima je α izostavljeno iz argumenta momenata F zbog kompaktnosti.

Tabela 2: Eksplicitni izrazi za komponente diferencijalnog operatora $G_\mu^{(s\lambda)}$.

s	λ	μ	$G_\mu^{(s\lambda)}$
0	0	0	1
1	1	0	$-i\partial_z$
1	1	± 1	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\pm i\partial_x + \partial_y)$
2	0	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}\nabla^2$
2	2	0	$\sqrt{\frac{2}{3}}\left(\frac{1}{2}(\partial_x^2 + \partial_y^2) - \partial_z^2\right)$
2	2	± 1	$(\pm\partial_x - i\partial_y)\partial_z$
2	2	± 2	$\frac{1}{2}(\pm i\partial_x + \partial_y)^2$

Za paralelnu konfiguraciju električnog i magnetskog polja pojedinačne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda date su u obliku izraza:

$$Q_{xxz} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\text{Im}(F(011|221)) - \text{Im}(F(01-1|221)) \right), \quad (\text{B.1})$$

$$Q_{xyz} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\text{Re}(F(01-1|221)) - \text{Re}(F(011|221)) \right), \quad (\text{B.2})$$

$$Q_{zxx} = -\frac{1}{\alpha} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \text{Im}(F(010|200)) + \frac{1}{\sqrt{6}} \text{Im}(F(010|220)) \right) + \frac{1}{\alpha} \text{Im}(F(010|222)), \quad (\text{B.3})$$

$$Q_{zzz} = \frac{1}{\alpha} \left(\sqrt{\frac{2}{3}} \text{Im}(F(010|220)) - \frac{1}{\sqrt{3}} \text{Im}(F(010|200)) \right). \quad (\text{B.4})$$

Za ortogonalnu konfiguraciju električnog i magnetskog polja pojedinačne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda su date u vidu izraza:

$$Q_{xxx} = \frac{\sqrt{2}}{\alpha} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \text{Im}(F(011|200)) + \frac{1}{\sqrt{6}} \text{Im}(F(011|220)) \right) + \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(-\text{Im}(F(011|222)) + \text{Im}(F(01-1|222)) \right), \quad (\text{B.5})$$

$$Q_{xyy} = \frac{\sqrt{2}}{\alpha} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \text{Im}(F(011|200)) + \frac{1}{\sqrt{6}} \text{Im}(F(011|220)) \right) + \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\text{Im}(F(011|222)) - \text{Im}(F(01-1|222)) \right), \quad (\text{B.6})$$

$$Q_{xzz} = \frac{\sqrt{2}}{\alpha} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \text{Im}(F(011|200)) - \sqrt{\frac{2}{3}} \text{Im}(F(011|220)) \right), \quad (\text{B.7})$$

$$Q_{xxz} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha(t)} \left(\text{Im}(F(011|221)) - \text{Im}(F(01-1|221)) \right), \quad (\text{B.8})$$

$$Q_{yxy} = -\frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\text{Im}(F(011|222)) + \text{Im}(F(01-1|222)) \right), \quad (\text{B.9})$$

$$Q_{yyz} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\text{Im}(F(011|221)) + \text{Im}(F(01-1|221)) \right), \quad (\text{B.10})$$

$$Q_{zxx} = -\frac{1}{\alpha} \text{Im}(F(010|221)), \quad (\text{B.11})$$

$$Q_{zzx} = -\frac{1}{\alpha} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \text{Im}(F(010|200)) + \frac{1}{\sqrt{6}} \text{Im}(F(010|220)) \right) + \frac{1}{\alpha} \text{Im}(F(010|222)), \quad (\text{B.12})$$

$$Q_{zyy} = -\frac{1}{\alpha} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \text{Im}(F(010|200)) + \frac{1}{\sqrt{6}} \text{Im}(F(010|220)) \right) - \frac{1}{\alpha} \text{Im}(F(010|222)), \quad (\text{B.13})$$

$$Q_{zzz} = \frac{1}{\alpha} \left(\sqrt{\frac{2}{3}} \text{Im}(F(010|220)) - \frac{1}{\sqrt{3}} \text{Im}(F(010|200)) \right). \quad (\text{B.14})$$

Kada su električno i magnetsko polje ukršteni pod proizvoljnim uglom između 0 i π , pojedinačne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda su date u obliku:

$$Q_{xxy} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\text{Re}(F(011|222)) - \text{Re}(F(01-1|222)) \right), \quad (\text{B.15})$$

$$Q_{yxx} = \frac{\sqrt{2}}{\alpha} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \text{Re}(F(011|200)) + \frac{1}{\sqrt{6}} \text{Re}(F(011|220)) \right) + \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(-\text{Re}(F(011|222)) - \text{Re}(F(01-1|222)) \right), \quad (\text{B.16})$$

$$Q_{yyy} = \frac{\sqrt{2}}{\alpha} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \text{Re}(F(011|200)) + \frac{1}{\sqrt{6}} \text{Re}(F(011|220)) \right) + \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\text{Re}(F(011|222)) + \text{Re}(F(01-1|222)) \right), \quad (\text{B.17})$$

$$Q_{yzz} = \frac{\sqrt{2}}{\alpha} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \text{Re}(F(011|200)) - \sqrt{\frac{2}{3}} \text{Re}(F(011|220)) \right), \quad (\text{B.18})$$

$$Q_{zxy} = -\frac{1}{\alpha} \text{Re}(F(010|222)), \quad (\text{B.19})$$

$$Q_{zyz} = \frac{1}{\alpha} \text{Re}(F(010|221)), \quad (\text{B.20})$$

$$Q_{xyx} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\text{Re}(F(01-1|221)) - \text{Re}(F(011|221)) \right), \quad (\text{B.21})$$

$$Q_{yxz} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\text{Re}(F(011|221)) + \text{Re}(F(01-1|221)) \right). \quad (\text{B.22})$$

Komponente transportnog tenzora trećeg reda, koje su međusobno nezavisne u ortogonalnoj konfiguraciji električnog i magnetskog polja, takođe su nezavisne i u konfiguraciji u kojoj su

ova polja ukrštena pod proizvoljnim uglom. Zbog toga su odgovarajući izrazi za izračunavanje ovih komponenti u okviru multi term teorije za rešavanje Boltzmann-ove jednačine isti za obe konfiguracije polja.

C Eksplicitni izrazi za izračunavanje transportnih koeficijenata trećeg reda u Monte Carlo simulacijama

U ovom dodatku su prikazani eksplicitni izrazi za izračunavanje komponenti fluks transportnog tenzora trećeg reda u Monte Carlo simulacijama.

Za paralelnu konfiguraciju električnog i magnetskog polja su eksplicitni izrazi za izračunavanje longitudinalne komponente i transverzalne komponente transportnog tenzora trećeg reda isti kao i u odsustvu magnetskog polja. Ovi izrazi su prikazani u jednačinama (3.159) i (3.160). Nije moguće izdvojiti dodatne komponente ovog tenzora primenom Monte Carlo koda, koji je korišćen u ovoj disertaciji, s obzirom na to da se u ovom kodu mogu izračunati samo srednje vrednosti onih komponenti, koje imaju istu kombinaciju indeksa, pri čemu u paralelnoj konfiguraciji polja važi $Q_{xyz} = -Q_{yxz}$ i $Q_{zxy} = 0$.

U ortogonalnoj konfiguraciji polja se mogu izdvojiti dve dijagonalne komponente fluks transportnog tenzora trećeg reda, kao i četiri srednje vrednosti vandijagonalnih komponenti, koje imaju istu kombinaciju indeksa. Pri tome su dijagonalne komponente označene kao:

$$Q_L \equiv Q_{zzz}, \quad Q_{\mathbf{E} \times \mathbf{B}} \equiv Q_{xxx}, \quad (\text{C.1})$$

dok su preostale četiri srednje vrednosti komponenti označene kao:

$$Q_{\pi(xxz)} \equiv \frac{1}{3} (Q_{xxz} + Q_{xzx} + Q_{zxx}), \quad (\text{C.2})$$

$$Q_{\pi(yyx)} \equiv \frac{1}{3} (Q_{yyx} + Q_{yxy} + Q_{xyy}) \quad (\text{C.3})$$

$$Q_{\pi(yyz)} \equiv \frac{1}{3} (Q_{yyz} + Q_{yzy} + Q_{zyy}), \quad (\text{C.4})$$

$$Q_{\pi(zzx)} \equiv \frac{1}{3} (Q_{zzx} + Q_{zxx} + Q_{xzz}). \quad (\text{C.5})$$

gde vektorski proizvod $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ definiše x -osu, dok $\pi(abc)$ označava sve moguće permutacije (a, b, c) .

Eksplicitni izrazi za ovih šest veličina su dati u formi jednačina:

$$Q_{zzz} = \frac{1}{6} (3\langle z^2 c_z \rangle - 3\langle c_z \rangle \langle z^2 \rangle - 6\langle z \rangle \langle z c_z \rangle + 6\langle z \rangle \langle z \rangle \langle c_z \rangle), \quad (\text{C.6})$$

$$Q_{xxx} = \frac{1}{6} (3\langle x^2 c_x \rangle - 3\langle c_x \rangle \langle x^2 \rangle - 6\langle x \rangle \langle x c_x \rangle + 6\langle x \rangle \langle x \rangle \langle c_x \rangle), \quad (\text{C.7})$$

$$Q_{\pi(zzx)} = \frac{1}{6} (\langle z^2 c_x \rangle + 2\langle z x c_z \rangle - 2\langle c_z \rangle \langle z x \rangle - \langle c_x \rangle \langle z^2 \rangle - 2\langle z \rangle \langle x c_z \rangle - 2\langle z \rangle \langle z c_x \rangle - 2\langle x \rangle \langle z c_z \rangle + 2\langle c_x \rangle \langle z \rangle \langle z \rangle + 4\langle x \rangle \langle z \rangle \langle c_z \rangle), \quad (\text{C.8})$$

$$Q_{\pi(xxz)} = \frac{1}{6} (\langle x^2 c_z \rangle + 2\langle x z c_x \rangle - 2\langle c_x \rangle \langle x z \rangle - \langle c_z \rangle \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle \langle z c_x \rangle - 2\langle x \rangle \langle x c_z \rangle - 2\langle z \rangle \langle x c_x \rangle + 2\langle c_z \rangle \langle x \rangle \langle x \rangle + 4\langle z \rangle \langle x \rangle \langle c_x \rangle), \quad (\text{C.9})$$

$$Q_{\pi(zyy)} = \frac{1}{6} (\langle y^2 c_z \rangle + 2 \langle y z c_y \rangle - \langle c_z \rangle \langle y^2 \rangle - 2 \langle z \rangle \langle y c_y \rangle), \quad (\text{C.10})$$

$$Q_{\pi(xyy)} = \frac{1}{6} (\langle y^2 c_x \rangle + 2 \langle y x c_y \rangle - \langle c_x \rangle \langle y^2 \rangle - 2 \langle x \rangle \langle y c_y \rangle). \quad (\text{C.11})$$

U najopštijem slučaju, kada su električno i magnetsko polje ukršteni pod proizvoljnim uglom između 0 i π , mogu se izdvojiti tri dijagonalne komponente i sedam srednjih vrednosti vandijagonalnih komponenti koje imaju istu kombinaciju indeksa. Prve dve dijagonalne komponente su iste kao i u slučaju ortogonalne konfiguracije polja, dok je treća označena kao:

$$Q_{\mathbf{E} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B})} \equiv Q_{yyy}, \quad (\text{C.12})$$

gde vektorski proizvod $\mathbf{E} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B})$ definiše y -osu. Četiri srednje vrednosti vandijagonalnih komponenti se odnose na iste kombinacije komponenti transportnog tenzora trećeg reda kao i u slučaju ortogonalne konfiguracije polja, dok su preostale tri srednje vrednosti označene kao:

$$Q_{\pi(xxy)} \equiv \frac{1}{3} (Q_{xxy} + Q_{xyx} + Q_{yxx}), \quad (\text{C.13})$$

$$Q_{\pi(zzy)} \equiv \frac{1}{3} (Q_{zzy} + Q_{zyz} + Q_{yzz}), \quad (\text{C.14})$$

$$Q_{\pi(xyz)} \equiv \frac{1}{6} (Q_{xyz} + Q_{yzx} + Q_{zxy} + Q_{xzy} + Q_{yxz} + Q_{zyx}). \quad (\text{C.15})$$

Eksplisitni izrazi za ove veličine su dati kroz jednačine:

$$Q_{yyy} = \frac{1}{6} (3 \langle y^2 c_y \rangle - 3 \langle c_y \rangle \langle y^2 \rangle - 6 \langle y \rangle \langle y c_y \rangle + 6 \langle y \rangle \langle y \rangle \langle c_y \rangle), \quad (\text{C.16})$$

$$Q_{\pi(xyz)} = \frac{1}{6} (\langle y z c_x \rangle + \langle x z c_y \rangle + \langle x y c_z \rangle - \langle c_x \rangle \langle y z \rangle - \langle x \rangle \langle z c_y \rangle - \langle x \rangle \langle y c_z \rangle - \langle c_y \rangle \langle x z \rangle - \langle y \rangle \langle z c_x \rangle - \langle y \rangle \langle x c_z \rangle - \langle c_z \rangle \langle x y \rangle - \langle z \rangle \langle y c_x \rangle - \langle z \rangle \langle x c_y \rangle + 2 \langle c_x \rangle \langle y \rangle \langle z \rangle + 2 \langle c_y \rangle \langle x \rangle \langle z \rangle + 2 \langle c_z \rangle \langle y \rangle \langle x \rangle), \quad (\text{C.17})$$

$$Q_{\pi(yxx)} = \frac{1}{6} (\langle x^2 c_y \rangle + 2 \langle y x c_x \rangle - 2 \langle c_x \rangle \langle y x \rangle - \langle c_y \rangle \langle x^2 \rangle - 2 \langle x \rangle \langle y c_x \rangle - 2 \langle x \rangle \langle x c_y \rangle - 2 \langle y \rangle \langle x c_x \rangle + 2 \langle c_y \rangle \langle x \rangle \langle x \rangle + 4 \langle y \rangle \langle x \rangle \langle c_x \rangle), \quad (\text{C.18})$$

$$Q_{\pi(yzz)} = \frac{1}{6} (\langle z^2 c_y \rangle + 2 \langle y z c_z \rangle - 2 \langle c_z \rangle \langle y z \rangle - \langle c_y \rangle \langle z^2 \rangle - 2 \langle z \rangle \langle y c_z \rangle - 2 \langle z \rangle \langle z c_y \rangle - 2 \langle y \rangle \langle z c_z \rangle + 2 \langle c_y \rangle \langle z \rangle \langle z \rangle + 4 \langle y \rangle \langle z \rangle \langle c_z \rangle), \quad (\text{C.19})$$

$$Q_{zyy} = \frac{1}{6} (\langle y^2 c_z \rangle + 2 \langle y z c_y \rangle - 2 \langle c_y \rangle \langle y z \rangle - \langle c_z \rangle \langle y^2 \rangle - 2 \langle y \rangle \langle z c_y \rangle - 2 \langle y \rangle \langle y c_z \rangle - 2 \langle z \rangle \langle y c_y \rangle + 2 \langle c_z \rangle \langle y \rangle \langle y \rangle + 4 \langle z \rangle \langle y \rangle \langle c_y \rangle), \quad (\text{C.20})$$

$$Q_{\pi(zyy)} = \frac{1}{6} (\langle y^2 c_x \rangle + 2 \langle y x c_y \rangle - 2 \langle c_y \rangle \langle y x \rangle - \langle c_x \rangle \langle y^2 \rangle - 2 \langle y \rangle \langle x c_y \rangle - 2 \langle y \rangle \langle y c_x \rangle - 2 \langle x \rangle \langle y c_y \rangle + 2 \langle c_x \rangle \langle y \rangle \langle y \rangle + 4 \langle x \rangle \langle y \rangle \langle c_y \rangle), \quad (\text{C.21})$$

$$Q_{\pi(zzx)} = \frac{1}{6} (\langle z^2 c_x \rangle + 2 \langle z x c_z \rangle - 2 \langle c_z \rangle \langle z x \rangle - \langle c_x \rangle \langle z^2 \rangle - 2 \langle z \rangle \langle x c_z \rangle - 2 \langle z \rangle \langle z c_x \rangle - 2 \langle x \rangle \langle z c_z \rangle + 2 \langle c_x \rangle \langle z \rangle \langle z \rangle + 4 \langle x \rangle \langle z \rangle \langle c_z \rangle), \quad (\text{C.22})$$

$$Q_{\pi(xxz)} = \frac{1}{6} (\langle x^2 c_z \rangle + 2 \langle x z c_x \rangle - 2 \langle c_x \rangle \langle x z \rangle - \langle c_z \rangle \langle x^2 \rangle - 2 \langle x \rangle \langle z c_x \rangle -$$

$$2\langle x \rangle \langle xc_z \rangle - 2\langle z \rangle \langle xc_x \rangle + 2\langle c_z \rangle \langle x \rangle \langle x \rangle + 4\langle z \rangle \langle x \rangle \langle c_x \rangle. \quad (\text{C.23})$$

Bitno je naglasiti da eksplicitni izrazi za izračunavanje transportnih koeficijenata trećeg reda u Monte Carlo simulacijama nisu isti u različitim konfiguracijama polja. Ovo je posledica toga što su srednje vrednosti nekih monoma koordinata i brzina jednaki nuli na osnovu simetrije u odsustvu magnetskog polja, kao i u konfiguraciji u kojoj su ova polja paralelna ili ukrštena pod pravim uglom. Zato su u tim konfiguracijama polja korišćeni jednostavniji izrazi za transportne koeficijente trećeg reda, u kojima su uzeti u obzir samo oni monomi koji imaju nenultu vrednost u datoj konfiguraciji polja.

D Literatura

- [1] A. V. Phelps, *Rev. Mod. Phys.* **40**, (1968) 399.
- [2] R. W. Crompton, *Adv. At., Mol., Opt. Phys.* **32**, (1994) 97.
- [3] L. G. H. Huxley i R. W. Crompton, *The Diffusion and Drift of Electrons in Gases* (Wiley, London, 1974).
- [4] Z.Lj. Petrović, M. šuvakov, ž. Nikitović, S. Dujko, O. šašić, J. Jovanović, G. Malović i V. Stojanović, *Plasma Sources Sci. Technol.* **16**, (2007) S1-S12.
- [5] R. E. Robson, *Phys. Rev. E* **61**, (2000) 848.
- [6] D. R. A. McMahon i R. W. Crompton, *J. Chem. Phys.* **78**, (1983) 603.
- [7] Jr. J. H. Parker i J. J. Lowke, *Phys. Rev.* **181**, (1969) 290.
- [8] H. R. Skullerud, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **2**, (1969) 696.
- [9] R. D. White, R. E. Robson i K. F. Ness, *Aust. J. Phys.* **48**, (1995) 925.
- [10] K. Maeda, T. Makabe, N. Nakano, S. Bzenić i Z. Lj. Petrović, *Phys. Rev. E* **55**, (1997) 5901.
- [11] R. E. Robson, *Aust. J. Phys.* **44**, (1991) 685.
- [12] A. Garscadden, G. A. Duke i W. F. Bailey, *Bull. Am. Phys. Soc.* **26U**, (1980) 724.
- [13] Z. Lj. Petrović, R. W. Crompton i G. N. Haddad, *Aust. J. Phys.* **37**, (1984) 23.
- [14] R. E. Robson, *Aust. J. Phys.* **37**, (1984) 35.
- [15] S. B. Vrhovac i Z. Lj. Petrović, *Phys. Rev. E* **53**, (1996) 4012.
- [16] D. R. A. McMahon i B. Shizgal, *Phys. Rev. A* **31**, (1985) 1894.
- [17] J. M. Warman, U. Sowada i M. P. De Hass, *Phys. Rev. A* **31**, (1985) 1974.
- [18] N. A. Dyatko, A. P. Napartovich, S. Sakadžić, Z. Lj. Petrović i Z. Raspopović, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33**, (2000) 375.
- [19] Z. Raspopović, S. Sakadžić, Z. Lj. Petrović i T. Makabe, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33**, (2000) 1298.
- [20] R. D. White, S. Dujko, K. F. Ness, R. E. Robson, Z. Raspopović i Z. Lj. Petrović, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41**, (2008) 025206.
- [21] B. Shizgal i D. R. A. MacMahon, *Phys. Rev. A* **32**, (1985) 3669.
- [22] N. A. Dyatko, M. Capitelli, S. Longo i A. P. Napartovich, *Plasma Phys. Rept.* **24**, (1998) 745.

- [23] N. A. Dyatko, A. P. Napartovich, Z. Lj. Petrović, Z. R. Raspopović i S. Sakadžić, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33**, (2000) 375.
- [24] N. A. Dyatko, D. Loffhagen, A. P. Napartovich i R. Winkler, *Plasma Chem. Plasma Process.* **21**, (2001) 421.
- [25] R.D. White, R.E. Robson i K.F. Ness, *Australian Journal of Physics* **48** (1995) 925.
- [26] T. Makabe i Z.Lj. Petrović, *Plasma Electronics: Applications in Microelectronic Device Fabrication* (New York, CRC Press, 2014).
- [27] D. Bošnjakovic, Doktorska disertacija, Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Srbija (2016).
- [28] D. Bošnjakovic, Z. Lj. Petrovic, S. Dujko, *J. Instrum.* **9**, (2014) P09012.
- [29] D. Bošnjakovic, Z. Lj. Petrovic, R. D. White, S. Dujko, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47**, (2014) 435203.
- [30] D. Bošnjaković, Z. Lj. Petrović i S. Dujko, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **49**, (2016) 405201.
- [31] S. Dujko, R.D. White i Z.Lj. Petrović, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41**, (2008) 245205.
- [32] K. Kondo i H. Tagashira, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **23**, (1990) 1175.
- [33] H. Date, K. Kondo i H. Tagashira, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **23**, (1990) 1384.
- [34] D. Uhrlandt, R. Bussiahn, S. Gorchakov, H. Lange, D. Loffhagen i D. Nötzold, *Journal of Physics D: Applied Physics* **38**, (2005) 3318.
- [35] M. L. Bortz i R. H. French, *Appl. Phys. Lett.* **55**, (1989) 1955.
- [36] Z. Wu, N. Xanthopoulos, F. Reymond, J. S. Rossier, H. H. Girault, *Electrophoresis*, **23**, (2002) 782.
- [37] Z. Hao, H. Chen, X. Zhu, J. Li, C. Liu, *Journal of Chromatography A*, **1209**, (2008) 246.
- [38] S. Xu, J. Long, L. Sim, C. H. Diong i K. Ostrikov, *Plasma Processes Polym.*, **2**, (2005) 373.
- [39] P. Brault, A. Caillard, A. L. Thomann, J. Mathias, C. Charles, R. W. Boswell, S. Escrivano, J. Durand i T. Sauvage, *Journal of Physics D: Applied Physics*, **37**, (2004) 3419.
- [40] A. Fridman i G. Friedman *Plasma Medicine*, (John Wiley & Sons, 2012 ISBN 1118437659, 9781118437650).
- [41] M. G. Kong, G. Kroesen, G. Morfill, T. Nosenko, T. Shimizu, J. van Dijk i J. L. Zimmermann *New J. Phys.* **11**, (2009) 115012.
- [42] N. Puač, M. Gherardi i M. Shiratani, *Plasma Process Polym.* **15**, (2018) e1700174.

- [43] M. Ito, T. Ohta i M. Hori, *Journal of the Korean Physical Society* **60**, (2012) 937.
- [44] B. Jiang, J. Zheng, S. Qiu, M. Wu, Q. Zhang, Z. Yan i Q. Xue, *Chemical Engineering Journal* **236**, (2014) 348.
- [45] M. A. Malik, A. Ghaffar i S. A. Malik, *Plasma Sources Sci. Technol.* **10** (2001) 82.
- [46] T. Makabe i K. Maeshige, *Appl. Surf. Sci.* **192**, (2002) 176.
- [47] S. Dujko, Doktorska disertacija, James Cook University, Australia (2009).
- [48] E. T. Meier i U. Shumlak, *Physics of Plasmas* **19**, (2012) 072508.
- [49] P. C. Huang, J. Hebeylein i E. Pfender, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **15**, (1995) 25.
- [50] L. Shenggang, R. J. Barker, Z. Dajun, Y. Yung i G. Hong, *IEEE Transactions on Plasma Science*, **28**, (2000) 2135.
- [51] I. H. Hutchinson, *The Physics of Fluids* **30**, (1987) 3777.
- [52] R. Robson, R. White i M. Hildebrandt, *Fundamentals of Charged Particle Transport in Gases and Condensed Matter* (Boca Raton, CRC Press, 2018).
- [53] V. Vahedi, G. DiPeso, C. K. Birdsall, M. A. Lieberman i T. D. Rognlien, *Plasma Sources Sci. Technol.* **2**, (1993) 261.
- [54] F. H. Harlow, A. A. Amsden, J. R. Nix, *Journal of Computational Physics*, **20**, (1976) 119.
- [55] M. J. Andrews i P. J. O'Rourke, *International Journal of Multiphase Flow*, **22**, (1996) 379.
- [56] G. Joyce, M. Lampe, S. P. Slinker, W. M. Manheimer, *Journal of Computational Physics*, **138**, (1997) 540.
- [57] A. Bogaerts i R. Gijbels, *Journal of Applied Physics* **78**, (1995) 2233.
- [58] Z. Donkó, *Phys. Rev. E*, **57**, (1998) 7126.
- [59] Z. Donkó, *Journal of Applied Physics* **88**, (2000) 2226.
- [60] K. Kutasi i Z. Donkó, *Journal of Physics D: Applied Physics* **33**, (2000) 1081.
- [61] G. K. M. Rao, G. Rangajanardhaa, D. H. Rao, M. S. Rao, *Journal of Materials Processing Technology* **209**, (2009) 1512.
- [62] R. E. Robson i K. F. Ness, *Phys. Rev. A* **33**, (1986) 2068.
- [63] U. Kortshagen, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **26**, (1993) 1691

- [64] C. Busch i U. Kortshagen, *Phys. Rev. E* **51**, (1995) 280
- [65] U. Kortshagen, C. Busch i L. D. Tsendin, *Plasma Sources Sci. Technol.* **5**, (1996) 1
- [66] L. Boltzmann, *Wien. Ber.* **66**, (1872) 275.
- [67] S. Dujko, R. D. White, Z. Lj. Petrović i R. E. Robson, *Phys. Rev. E* **81**, (2010) 046403.
- [68] G. J. Boyle, R. P. McEachran, D. G. Cocks i R. D. White, *The Journal of Chemical Physics* **142**, (2015) 154507.
- [69] G. J. Boyle, R. P. McEachran, D. G. Cocks, M. J. Brunger, S. J. Buckman, S. Dujko i R. D. White, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **49** (2016) 355201.
- [70] M. H. Cohen i J. Lekner, *Phys. Rev.* **158** (1967) 305.
- [71] B. Li, PhD Thesis, James Cook University (1999).
- [72] F. Rogier i J. Schneider, *Transport Theory and Statistical Physics* **23**, (1994) 313.
- [73] V. V. Aristov, *Direct methods for solving the Boltzmann equation and study of nonequilibrium flows*, (Springer, 2012).
- [74] X. He, i L. S. Luo, *Phys. Rev. E* **56**, (1997) 6811.
- [75] D. Grunau, S. Chen i K. Eggert, *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* **5**, (1993) 2557.
- [76] S. Chapman i T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, (Cambridge, London, 1939).
- [77] E. A. Mason i E. W. McDaniel, *Transport Properties of Ions in Gases*, (Wiley, London, 1988).
- [78] H. A. Lorentz, *Proc. Amsterdam Acad.* **74**, (1905) 438.
- [79] R. D. White, R. E. Robson, B. Schmidt i M. A. Morrison, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36**, (2003) 3125.
- [80] J. Wilhem i R. Winkler, *Ann. Phys.* **23**, (1969) 28.
- [81] G. Cavalleri, *Aust. J. Phys.* **34**, (1981) 361.
- [82] G. L. Braglia, J. Wilhelm i R. Winkler, *Nuovo Cimento* **80**, (1984) 21.
- [83] S. L. Lin, R. E. Robson i E. A. Mason, *J. Chem. Phys.* **71**, (1979) 3483.
- [84] K. F. Ness i R. E. Robson, *Phys. Rev. A* **34**, (1986) 2185.
- [85] K. F. Ness i R. E. Robson, *Phys. Rev. A* **39**, (1989) 6596.
- [86] K. Kumar, H. R. Skullerud i R. E. Robson, *Aust. J. Phys.* **33**, (1980) 343.

- [87] K. F. Ness, *Phys. Rev. E* **47**, (1993) 323.
- [88] K. F. Ness, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **27**, (1994) 1848.
- [89] R. D. White, K. F. Ness, R. E. Robson i B. Li, *Phys. Rev. E* **60**, (1999) 2231.
- [90] R. D. White, R. E. Robson i K. F. Ness, *Appl. Surf. Sci.* **192**, (2002) 26.
- [91] S. L. Lin i J. N. Bardsley, *J. Chem. Phys.* **66**, (1977) 435.
- [92] K. Kumar, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **14**, (1981) 2199.
- [93] K. Kondo, *Aust. J. Phys.* **40**, (1987) 367.
- [94] K. Kondo i H. Tagashira, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **11**, (1990) 283.
- [95] K. Kondo i H. Tagashira, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **26**, (1993) 1948.
- [96] K. Kondo, M. Fukutoku, N. Ikuta i H. Tagashira, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **27**, (1994) 1894.
- [97] R. D. White, Doktorska disertacija, James Cook University (1996).
- [98] K. F. Ness i T. Makabe, *Phys. Rev. E* **62**, (2000) 4083.
- [99] L. V. Hove, *Phys. Rev.* **95**, (1954) 249.
- [100] J. Lekner, *Phys. Rev.* **158** (1967) 130.
- [101] Y. Sakai, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40** (2007) R441.
- [102] V. M. Atrazhev i I. T. Iakubov, *J. Phys. C* **14**, (1981) 5139.
- [103] V. M. Atrazhev i E. G. Dmitriev *J. Phys. C* **18**, (1985) 1205.
- [104] V. M. Atrazhev, I. T. Iakubov i V. V. Pogosov, *Phys. Lett. A* **204**, (1995) 393.
- [105] V. M. Atrazhev i I. V. Timoshkin, *Phys. Rev. B* **54**, (1996) 252.
- [106] V. M. Atrazhev i I. V. Timoshkin, *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.* **5**, (1998) 450.
- [107] V. M. Atrazhev, A. V. Berezhnov, D. O. Dunikov, I. V. Chernysheva, V. V. Dmitrenko i G. Kapralova *Proc. IEEE Int. Conf. on Dielectric Liquids (ICDL 2005)*, p 329.
- [108] Y. Sakai, S. Nakamura i H. Tagashira (1985) *IEEE Transactions on Electrical Insulation* **EI-20** 133.
- [109] S. Nakamura, Y. Sakai i H. Tagashira, *Chemical Physics Letters* **130**, (1986) 551.
- [110] V. M. Atrazhev, I. T. Iakubov i V. I. Roldughin, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **9** 1735.
- [111] E. E. Kunhardt, *Physical Review B* **44**, (1991) 4235.

- [112] H. M. Jones i E. E. Kunhardt, *Physical Review B* **48** (1993) 9382.
- [113] S. Nakamura, Y. Sakai i H. Tagashira, *JIEE Japan A* **107**, (1987) 543.
- [114] G. J. Boyle, R. D. White, R. E. Robson, S. Dujko i Z. Lj. Petrović, *New. J. Phys.* **14** (2012) 045011.
- [115] N. A. Garland, D. G. Cocks, G. J. Boyle, S. Dujko i R. D. White, *Plasma Sources Sci. Technol.* **26**, (2017) 075003.
- [116] N. A. Garland, I. Simonović, G. J. Boyle, D. G. Cocks, S. Dujko i R. D. White, *Plasma Sources Sci. Technol.* **27**, (2018) 105004.
- [117] R. D. White, D. Cocks, G. Boyle, M. Casey, N. Garland, D. Konovalov, B. Philippa, P. Stokes, J. de Urquijo, O. Gonzales-Magana, R. P. McEachran, S. J. Buckman, M. J. Brunger, G. Garcia, S. Dujko i Z.Lj. Petrović, *Plasma Sources Sci. Technol.* **27**, (2018) 053001.
- [118] G. V. Naidis, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **49**, (2016) 235208.
- [119] G. V. Naidis *J. Phys. D: Appl. Phys.* **48**, (2015) 195203.
- [120] N. Yu. Babaeva i G. V. Naidis (1999) *Proceedings of 13th International Conference on Dielectric Liquids* (ICDL '99), Nara, Japan, July 20-25 pp 437.
- [121] N. Yu. Babaeva i G. V. Naidis, *Technical Physics Letters* **25**, (1999) 91.
- [122] N. Yu. Babaeva i G. V. Naidis, *J. Electrostat.* **53**, (2001) 123.
- [123] N. Yu. Babaeva, G. V. Naidis, D. V. Tereshonok i B. M. Smirnov, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **50**, (2017) 364001.
- [124] D. V. Tereshonok, N Yu. Babaeva, G. V. Naidis, V. A. Panov, B. M. Smirnov i E. E. Son, *Plasma Sources Sci. Technol.* **27**, (2018) 045005.
- [125] C. Li, W. J. M. Brok, U. Ebert i J. J. A. M. van der Mullen, *J. Appl. Phys.* **101**, (2007) 123305.
- [126] B. M. Penetrante i J. N. Bardsley, in *Non-equilibrium Effects in Ion and Electron Transport*, editovano od strane J. W. Gallagera, D. F. Hudsona, E. E. Kunhardta i R. J. Van Brunta (Plenum, New York, 1990), p. 49.
- [127] Z. Lj. Petrović, I. Simonović, S. Marjanović, D. Bošnjaković, D. Marić, G. Malović i S. Dujko, *Plasma Phys. Contr. Fusion* **59**, (2017) 014026.
- [128] S. R. Hunter, Doktorska disertacija Flinders University, Adelaide, Australia (1977), nepublikovano.
- [129] H. A. Blevin, J. Fletcher i S. R. Hunter, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **9**, (1976) 471.

- [130] C.A. Denman i L.A. Schlie, *Non-equilibrium Effects in Ion and Electron Transport*, Proc. of the 6th Int. Swarm Seminar (Glen Cove, NY, 1989) ed J.W. Gallagher *et al.* (New York: Springer).
- [131] S. Kawaguchi, K. Takahashi i K. Satoh, *Plasma Sources Sci. Technol.* **27**, (2018) 085006.
- [132] S. B. Vrhovac, Z. Lj. Petrović, L. A. Viehland, i T. S. Santhanam, *J. Chem. Phys.* **110**, (1999) 2423.
- [133] S. Dujko, Z. M. Raspopović, R. D. White, T. Makabe i Z. Lj. Petrović, *Eur. Phys. J. D* **68**, (2014) 166.
- [134] J. H. Whealton i E. A. Mason, *Ann. Phys.* **84**, (1974) 8.
- [135] A. D. Koutselos, *J. Chem. Phys.* **104**, (1996) 8442.
- [136] A. D. Koutselos, *J. Chem. Phys.* **106**, (1997) 7117.
- [137] A. D. Koutselos, *Chem. Phys.* **270**, (2001) 165.
- [138] A. D. Koutselos, *Chem. Phys.* **315**, (2005) 193.
- [139] S. B. Vrhovac, doktorska disertacija, Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Srbija (1996).
- [140] R. P. McEachran, D. L. Morgan, A. G. Ryman i A. D. Stauffer, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **10**, (1977) 663.
- [141] S. Dujko, D. Bošnjaković, R. D. White i Z. Lj. Petrović, *Plasma Sources Sci. Technol.* **24**, (2015) 054006.
- [142] R. P. McEachran, D. L. Morgan, A. G. Ryman i A. D. Stauffer, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **11**, (1978) 951.
- [143] R. P. McEachran i A. D. Stauffer, *Aust. J. Phys.* **50**, (1997) 511.
- [144] S. Chen, R. P. McEachran i A. D. Stauffer, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41**, (2008) 025201.
- [145] G. Boyle, doktorska disertacija, James Cook University, Australia (2015).
- [146] R. P. McEachran i A. D. Stauffer, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23**, (1990) 4605.
- [147] D. J. R. Mimmagh, R. P. McEachran i A. D. Stauffer, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26**, (1993) 1727.
- [148] Z. M. Raspopović, S. Sakadžić, S. A. Bzenić, Z. Lj. Petrović, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **27**, (1999) 1241.
- [149] Z.Lj. Petrović, Z.M. Raspopović, S. Dujko i T. Makabe. *Appl.Surf. Sci.* **192**, (2002) 1-25.

- [150] R.D. White, R.E. Robson, S. Dujko, P. Nicoletopoulos i B. Li, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42**, (2009) 194001.
- [151] S. Dujko, R.D. White, Z.Lj. Petrović i R.E. Robson, *Plasma Source Sci. Technol.* **20**, (2011) 024013.
- [152] S. Dujko, R.D. White, Z.M. Raspopović, Z.Lj. Petrović, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **279**, (2012) 84-91.
- [153] A. Banković, S. Dujko, R.D. White, J.P. Marler, S.J. Buckman, S. Marjanović, G. Malović, G. Garcia i Z.Lj. Petrović, *New J. Phys.* **14**, (2012) 035003.
- [154] A. Banković, S. Dujko, R. D. White, S. J. Buckman i Z. Lj. Petrović, *Nuclear Instruments i Methods in Physics Research B* **279** (2012) 92.
- [155] A. Banković, S. Dujko, S. Marjanović, R. D. White, i Z. Lj. Petrović *Eur. Phys. J. D* **68**, (2014) 127.
- [156] S. Dujko, Z. M. Raspopović i Z. Lj. Petrović, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **38**, (2005) 2952.
- [157] S. Dujko, R. D. White, K. F. Ness, Z. Lj. Petrović i R. E. Robson, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39**, (2006) 4788.
- [158] A. Banković, S. Dujko, R. D. White, G. Malović, S. J. Buckman i Z. Lj. Petrović, *J. Phys: Conf. Ser.* **262**, (2011) 012007
- [159] J. Mirić, I. Simonović, Z. Lj. Petrović, R. D. White i S. Dujko, *Eur. Phys. J. D* **71**, (2017) 289.
- [160] J. Mirić, D. Bošnjaković, I. Simonović, Z. Lj. Petrović i S. Dujko, *Plasma Sources Sci. Technol.* **25**, (2016) 065010.
- [161] Z. Lj. Petrović, J.V. Jovanović, Z.M. Raspopović, S. A. Bzenić i S.B. Vrhovac, *Aust. J. Phys.* **50**, (1997) 591.
- [162] S. Bzenić, Z.Lj. Petrović, Z.M. Raspopović i T. Makabe, *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, (1999) 6077.
- [163] K. Maeda, T. Makabe, N. Nakano, S. Bzenić, Z. Lj. Petrović, *Phys. Rev. E* **55**, (1997) 5901.
- [164] Z. Raspopović, S. Sakadžić, Z. Lj. Petrović i T. Makabe, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33**, (2000) 1298.
- [165] R. D. White, S. Dujko, K. F. Ness, R. E. Robson, Z. Raspopović i Z. Lj. Petrović, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41**, (2008) 025206.
- [166] S. Dujko, Z. M. Raspopović, Z. Lj. Petrović, T. Makabe, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **31**, (2003) 711.

- [167] W. K. Tung, *Group Theory in Physics*, (Singapore: WorldScientific Publishing, 1984).
- [168] A.O. Barut i R. Raczka, *Theory of Group Representations i Applications*, (Warszawa, PWN: Polish Scientific Publishers, 1980).
- [169] J. Preskill, Ph219/CS219: Quantum Computation, [Class handout], Caltech CA, USA.
- [170] M. Damnjanović i I. Milošević, *J. Phys. A: Math. Gen.* **28**, (1995) 1669.
- [171] M. Damnjanović, *Hilbert-ovi prostori i grupe* (Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu, 2000).
- [172] L. M. Blinov, *Structure i Properties of Liquid Crystals*, (Springer, 2011).
- [173] K. F. Ness, doktorska disertacija, James Cook University, Australia (1985).
- [174] K. Kumar, *Phys. Rep.* **112**, (1984) 319.
- [175] R. Reininger, U. Asaf, I. T. Steinberger, V. Saile i P. Laporte *Phys. Rev. B* **28**, (1983) 3193.
- [176] W. J. Tattersall, D. G. Cocks, G. J. Boyle, S. J. Buckman, i R. D. White *Phys Rev E* **91**, (2015) 043304.
- [177] S. F. Biagi, *Nucl. Instrum. Meth. A* **421**, (1999) 234.
- [178] C. K. Birdsall, A. B. Langdon, *Plasma Physics Via Computer Simulation*, (McGraw-Hill, New York, 1985).
- [179] H. R. Skullerud, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **1**, (1968) 423.
- [180] S. Longo i M. Capitelli, *Plasma Chem. Plasma Process.* **14**, (1993) 1
- [181] J. W. Perram *Molecular Physics* **30**, (1975) 1505.
- [182] L. Verlet i J. J. Weis, *Phys. Rev. A* **5**, (1972) 939.
- [183] R. D. White i R. E. Robson, *Phys. Rev. Lett.* **102**, (2009) 230602.
- [184] R. D. White, S. Dujko, R. E. Robson, Z. Lj. Petrović i R. P. McEachran, *Plasma Source Sci. Technol.* **19**, (2010) 034001.
- [185] S. Dujko, R. D. White, Z. Lj. Petrović i R. E. Robson, *Plasma Source Sci. Technol.* **20**, 024013 (2011).
- [186] K. F. Ness i R. E. Robson, *Phys. Scr.* **1994**, (1994) 5.
- [187] R. D. White, M. J. Brennan i K. F. Ness, *J. Phys. D Appl. Phys.* **30**, (1997) 810.
- [188] N. Ikuta i Y. Sugai, *J. Phys. Soc. Japan* **58**, (1989) 1228.
- [189] R. D. White, R. E. Robson i K. F. Ness, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **34**, (2001) 2205.

- [190] R. D. White *Phys. Rev E* **64**, (2001) 056409.
- [191] I. Reid, *Aust. J. Phys.* **32**, (1979) 231.
- [192] J. Lucas i H. T. Salee *J. Phys. D: Appl. Phys.* **8**, (1975) 640.
- [193] R. D. White, R. E. Robson i K. F. Ness, *Phys Rev E* **60**, (1999) 7457.
- [194] Y. Tzeng i E. E. Kunhardt, *Phys. Rev. A* **34**, (1986) 2148.
- [195] K. F. Ness i A. M. Nolan, *Aust. J. Phys.* **53**, (2000) 437.
- [196] A. M. Nolan, M. J. Brennan, K. F. Ness i A. B. Wedding, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **30**, (1997) 2865.
- [197] O. šašić, J. Jovanović i Z Lj. Petrović, *Phys. Rev. E* **71**, (2005) 046408.
- [198] Hayashi, privatna komunikacija (2000).
- [199] V. Puech i S. Mizzi, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **24**, (1991) 1974.
- [200] R. D. White, R. E. Robson, P. Nicoletopoulos i S. Dujko, *Eur. Phys. J. D* **66**, (2012) 117.
- [201] M. Hayashi *Bibliography of Electron and Photon Cross Sections with Atoms and Molecules Published in the 20th Century - Argon (NIFS-DATA-72)* (2003).
- [202] M. Hayashi *Bibliography of Electron and Photon Cross Sections with Atoms and Molecules Published in the 20th Century - Xenon (NIFS-DATA-79)* (2003).
- [203] S. Biagi, MAGBoLTZ kod, verzija7.1.
- [204] V. D. Stojanović i Z. Lj. Petrović, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **31**, (1998) 834.
- [205] O. Šašić, G. Malović, A. Strinić, Z. Nikitović i Z. Lj. Petrović, *New Journal Of Physics*, **6**, (2004) 74.
- [206] M. Kurihara, Z. Lj. Petrović i T. Makabe, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33**, (2000) 2146.
- [207] J. P. England, M. T. Elford, *Aust. J. Phys.* **44**, (1991) 647.
- [208] S. Dujko, R. D. White, Z. Lj. Petrović i R. E. Robson, *Plasma Source Sci. Technol.* **20**, (2011) 024013.
- [209] A. Banković, J. P. Marler, M. šuvakov, G. Malović i Z. Lj. Petrović, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **266**, (2008) 462.
- [210] Z. Lj. Petrović, A. Banković, S. Dujko, S. Marjanović, G. Malović, J. P. Sullivan i S. J. Buckman, *AIP Conf. Proc.* **1545**, (2013) 115.
- [211] A. E. Ruark, *Phys. Rev.* **68**, (1945) 278.

- [212] A. E. Ruark, *Phys. Rev.* **68**, (1945) 278.
- [213] M. Deutsch, *Phys. Rev.* **82**, (1951) 455.
- [214] R. A. Ferrell, *Phys. Rev.* **110**, (1958) 1355.
- [215] A. Czarnecki, K. Melnikov, i A. Yelkhovsky, *Phys. Rev. Lett.* **85**, (2000) 2221.
- [216] H. Saito i T. Hyodo, *Phys. Rev. Lett.* **90**, (2003) 193401.
- [217] W. E. Caswell, G. P. Lepage, i J. Sapirstein, *Phys. Rev. Lett.* **38**, (1977) 488.
- [218] S. Asai, S. Orito, N. Shinohara, *Physics Letters B* **357**, (1995) 475.
- [219] R. S. Vallery, P. W. Zitzewitz, i D. W. Gidley, *Phys. Rev. Lett.* **90**, (2003) 203402.
- [220] C. Regenfus i ArDM Kolaboracija, *J. Phys.: Conf.Ser.* **203**, (2010) 012024.
- [221] E. Aprile, R. Mukherjee, i M. Suzuki, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **37**, (1990) 553.
- [222] E. Aprile i T. Doke, *Rev. Mod. Phys.* **82**, (2010) 2053.
- [223] R. Sarathi, A. J. Reid, M. D. Judd, *Electric Power Systems Research* **78**, (2008) 1819.
- [224] M. Rafi, Y. Z. Lv, Y. Zhou, K. B. Ma, W. Wang, C. R. Li, Q. Wang, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **52**, (2015) 308.
- [225] K. R. Siefermann, Y. Liu, E. Lugovoy, O. Link, M. Faubel, U. Buck, B. Winter i B. Abel, *Nature Chemistry* **2**, (2010) 274.
- [226] R. Laenen, T. Roth, i A. Laubereau, *Phys. Rev. Lett.* **85**, (2000) 50.
- [227] B. Abel, U. Buck, A. L. Sobolewski i W. Domcke, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14**, (2012) 22.
- [228] M. Assel R. Laenen A. Laubereau, *Chemical Physics Letters* **317**, (2000) 13.
- [229] L. S. Miller, S. Howe, i W. E. Spear, *Phys. Rev.* **166**, (1968) 871.
- [230] U. Asaf i I. T. Steinberger, *Phys. Lett.* **34A**, (1971) 207.
- [231] P. Laporte i I. T. Steinberger, *Phys. Rev. A* **15**, (1977) 2538.
- [232] P. Laporte, J. L. Subtil, U. Asaf, I. T. Steinberger i S. Wind, *Phys. Rev. Lett.* **45**, (1980) 2138.
- [233] U. Asaf i I. T. Steinberger, *Phys. Rev. B* **10**, (1974) 4464.
- [234] O. Hilt i W. F. Schmidt, *Chem. Phys.* **183**, (1994) 147.
- [235] O. Hilt i W. F. Schmidt, *J. Phys. Candens. Matter* **6**, (1994) L735
- [236] E. B. Gordon, V. V. Khmelenko, O. S. Rzhevsky, *Chem. Phys. Lett.* **217**, (1994) 605.

- [237] A. S. Schüssler, J. Burghorn, P. Wyder, i B. I. Lembrikov, *Appl. Phys. Lett.* **77**, (2000) 2786.
- [238] E. B. Gordon i A. F. Shestakov, *Low Temp. Phys.* **27**, (2001) 883.
- [239] E. E. Kunhardt, L. G. Christophorou i L. H. Luessen, *The Liquid State and Its Electrical Properties* (Plenum, New York 1988) p. 235.
- [240] D. Beaglehole, *Phys. Rev. Lett.* **15**, (1965) 551.
- [241] R. E. Robson i K. F. Ness, *J. Chem. Phys.* **89**, (1988) 4815.
- [242] S. S. S. Huang i G. R. Freeman, *J. Chem. Phys.* **47**, (1978) 1355.
- [243] S. B. Vrhovac i Z. Lj. Petrović, *Phys. Rev. E* **53**, (1996) 4012.
- [244] R. D. White i R. E. Robson, *Phys. Rev. Lett.* **102**, (2009) 230602.
- [245] S. E. Derenzo, T. S. Mast, i B. Zaklad, *Phys. Rev. A* **9**, (1974) 2582.
- [246] E. Shibamura, K. Masuda i T. Doke, *Proceedings of the 8th Workshop on Electron Swarms* (1984).
- [247] M. Miyajima, T. Takahashi, S. Konno, T. Hamada, S. Kubota, H. Shibamura i T. Doke, *Phys. Rev. A* **9**, (1974) 1438.
- [248] P. Fonte, *J. Instrum.* **8**, (2013) P11001.
- [249] L. Khosravi Khorashad, A. Moshaii, S. Hosseini, *Europhysics Lett.* **96**, (2011) 45002.
- [250] A. Moshaii, L. Khosravi Khorashad, M. Eskandari, S. Hosseini, *Nucl. Instrum. Meth. A* **661** (2012) S168.
- [251] A. J. Davies, C. J. Evans i F. L. Jones, *Proc. R. Soc. A* **281**, (1964) 164.

Biografija

Obrazovanje: Ilija Simonović rođen je 31. jula 1989. godine u Kragujevcu, gde je završio osnovnu i srednju školu. Školske 2008/2009. godine je upisao osnovne studije na Fizičkom fakultetu Univerziteta u Beogradu, smer Teorijska i eksperimentalna fizika. Završio je osnovne studije školske 2011/2012. godine sa prosečnom ocenom 9.85. Studentski projekat pod nazivom Gradijentne teorije na nekomutativnom prostoru uradio je na Fizičkom fakultetu pod mentorstvom prof. dr Marije Dimitrijević. Master studije je upisao školske 2012/2013. i završio ih je sa prosečnom ocenom 10.0. Master rad pod naslovom Nekomutativna gravitacija na Mojalovom prostoru odbranio je 1. oktobra 2013. godine, pod mentorstvom prof. dr Voje Radovanovića. Doktorske studije na Fizičkom fakultetu Univerziteta u Beogradu upisao je školske 2013/2014. godine na smeru Fizika jonizovanog gasa, plazme i tehnologija plazme.

Radno iskustvo: Školske 2012/2013. godine držao je računske vežbe, kao saradnik u nastavi na predmetu Elektrodinamika 1 i Elektrodinamika 2 kod prof. dr Voje Radovanovića na Fizičkom fakultetu, Univerziteta u Beogradu. Od 1. oktobra 2013. godine zaposlen je kao istraživač-pripravnik u Laboratoriji za gasnu elektroniku Instituta za fiziku u Beogradu. Pod mentorstvom dr Saše Dujka, angažovan je na projektu Fundamentalni procesi i primene transporta čestica u neravnotežnim plazmama, trapovima i nanostrukturama Ministarstva nauke, prosvete i tehnološkog razvoja (br. OI171037). Rukovodilac projekta je akademik dr Zoran Lj. Petrović.

Spisak publikacija

- [1] J.Mirić, D. Bošnjaković, **I. Simonović**, Z.Lj. Petrović and S. Dujko
“Electron swarm properties under the influence of a very strong attachment in SF₆ and CF₃I obtained by Monte Carlo rescaling procedures”
Plasma Sources Sci. Technol. **25** (2016) 065010, IF2016=3.302
- [2] N.A. Garland, **I. Simonović**, G.J. Boyle, D.G. Cocks, S. Dujko and R.D. White
“Electron swarm and streamer transport across the gas–liquid interface: a comparative fluid model study”
Plasma Sources Sci. Technol. **27** (2018) 105004, IF2018=4.128
- [3] * **I. Simonović**, N.A. Garland, D. Bošnjaković, Z.Lj. Petrović, R.D. White and S. Dujko
“Electron transport and negative streamers in liquid xenon”
Plasma Sources Sci. Technol. **28** (2019) 015006, IF2018=4.128
- [4] * Z.Lj. Petrović, **I. Simonović**, S. Marjanović, D. Bošnjaković, D. Marić, G. Malović and S. Dujko
“Non-equilibrium of charged particles in swarms and plasmas- from binary collisions to plasma effects”
Plasma Phys. Control. Fusion **59** (2017) 014026, IF2017=3.032
- [5] P.W. Stokes, **I. Simonović**, B. Philippa, D. Cocks, S. Dujko and R.D. White
“Third-order transport coefficients for localised and delocalised charged-particle transport”
Scientific Reports **8** (2018) 2226, IF2018=4.011
- [6] * **I. Simonović**, D. Bošnjaković, Z.Lj. Petrović, P. Stokes, R.D. White and S. Dujko
“Third-order transport coefficient tensor of charged-particle swarms in electric and magnetic fields”
Phys. Rev. E **101** (2020) 023203, IF2018=2.353
- [7] J. Mirić, **I. Simonović**, Z.Lj. Petrović, R.D. White and S. Dujko
“Electron transport in mercury vapor: cross sections, pressure and temperature dependence of transport coefficients and NDC effects”
Eur. Phys. J. D **71** (2017) 289, IF2017=1.393
- [8] * **I. Simonović**, D. Bošnjaković, Z.Lj. Petrović, R.D. White and S. Dujko
“Third-order transport coefficient tensor of electron swarms in noble gases”
Eur. Phys. J. D **74** (2020) 63, IF2018=1.331

*iz disertacije

Изјава о ауторству

Име и презиме аутора ИЛИЈА СИМОНОВИЋ

Број индекса 8008/2013

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

КИНЕТИЧКИ И ФЛУИДНИ МОДЕЛИ НЕРАВНОТЕЖНОГ
ТРАНСПОРТА ЕЛЕКТРОНА У ГАСОВИМА И ТЕЧНОСТИМА

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

Потпис аутора

У Београду, 22.03.2020.

Илија Симоновић

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора Илија Симоновић

Број индекса 8008/2013

Студијски програм ФИЗИКА ЈОНИЗОВАНОГ ГАСА, ПЛАЗМЕ И ТЕХНОЛОГИЈА ПЛАЗМЕ

Наслов рада КИНЕТИЧКИ И ФЛУИДНИ МОДЕЛИ НЕРАВНОТЕЖЕНОГ ТРАНСПОРТА ЕЛЕКТРОНА У ГАСОВИМА И ТЕЧНОСТИМА

Ментор НАУЧНИ САВЕТАЧК ДР САША ПУЏКО

Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла ради похрањивања у **Дигиталном репозиторијуму Универзитета у Београду**.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског назива 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, 22.03.2020.

Илија Симоновић

Изјава о коришћењу

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

КИНЕТИЧКИ И ФЛУИДНИ МОДЕЛИ НЕРАВНОТЕЖНОГ ТРАНСПОРТА
ЕЛЕКТРОНА У ГАСОВИМА И ТЕЧНОСТИМА

која је моје ауторско дело.

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

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

1. Ауторство (CC BY)
2. Ауторство – некомерцијално (CC BY-NC)
3. Ауторство – некомерцијално – без прерада (CC BY-NC-ND)
4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима (CC BY-NC-SA)
5. Ауторство – без прерада (CC BY-ND)
6. Ауторство – делити под истим условима (CC BY-SA)

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

Потпис аутора

У Београду, 22. 03. 2020.

Миља Симићковић

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

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

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

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

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

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