

**UNIVERZITET U BEOGRADU**  
**FIZIČKI FAKULTET**

Doktorska disertacija

**SUDARI I TRANSPORT POZITRONA U  
GASOVIMA: KINETIČKI FENOMENI I  
MOGUĆNOST PRIMENA U BIOMEDICINI**

Ana Banković

Beograd, 2012.

Mentori:

akademik dr Zoran Lj. Petrović, naučni savetnik, Institut za Fiziku, Zemun  
dr Saša Dujko, viši naučni saradnik, Institut za Fiziku, Zemun

Članovi komisije:

akademik dr Zoran Lj. Petrović, naučni savetnik, Institut za Fiziku, Zemun  
dr Saša Dujko, viši naučni saradnik, Institut za Fiziku, Zemun  
dr Srđan Bukvić, redovni profesor, Fizički Fakultet, Univerzitet u Beogradu  
dr Goran Poparić, docent, Fizički Fakultet, Univerzitet u Beogradu  
dr Đorđe Spasojević, docent, Fizički Fakultet, Univerzitet u Beogradu

Datum odbrane:

Doktorska disertacija pod nazivom „**Sudari i transport pozitrona u gasovima: Kinetički fenomeni i mogućnost primena u biomedicini**” je urađena u Laboratoriji za gasnu elektroniku Instituta za fiziku u Beogradu, pod rukovodstvom mentora prof. dr Zorana Lj. Petrovića i dr Saše Dujka. Prof. Petrović je vodio Monte Carlo simulacije, opštu koncepciju disertacije i fizička tumačenja ovih simulacija, kao i odabir preseka i predmeta izučavanja. Dr Dujko je vodio sve proračune na bazi rešavanja Boltzmannove jednačine kao i tematiku kretanja pozitrona u ukrštenim električnim i magnetskim poljima.

Sa najvećim zadovoljstvom želim da se zahvalim prof. dr Zoranu Petroviću na izuzetnoj pomoći pruženoj pri definisanju teme istraživanja i uvođenju u svet pozitronske fizike, na obezbeđivanju uslova za rad, brojnim korisnim savetima, konstantnom praćenju mog rada i prenetom znanju.

Dr Saši Dujku dugujem neizmernu zahvalnost na strpljenju, idejama i inspiraciji, nebrojenim satima konstruktivnih razgovora, nesebičnoj podršci koju mi je pružio pri svakom koraku izrade ove disertacije, kao i na svom prenetom znanju.

Zahvaljujem se i

dr Stephenu Buckmanu i dr Jamesu Sullivanu iz Centra za proučavanje materije i antimaterije Australijskog Nacionalnog Univerziteta u Canberri, koji su otvorili vrata svoje Laboratorije i omogućili mi merenje totalnog preseka za rasejanje pozitrona na vodenoj pari kao i preseka za formiranje pozitronijuma, koji su bili kritični za kompletiranje skupa preseka za interakciju pozitrona sa vodenom parom.

dr Milovanu Šuvakovu i Srđanu Marjanoviću na savetima i saradnji na pojedinim aspektima ove disertacije, pre svega primeni Monte Carlo koda.

dr Ronaldu Whiteu i dr Robertu Robsonu na saradnji koja nam je donela niz zanimljivih rezultata i zajedničkih publikacija, posebno u domenu tumačenja efekta NDC za balk brzinu drifta.

dr Joan Marler i dr Gordani Malović na pomoći i savetima pri kompletiranju skupova preseka za pozitrone u proučavanim gasovima.

dr Castenu Makochekanwi, dr Peteru Caradonni i dr Adricu Jonesu, i ostalim kolegama iz Canberre, čija podrška i saveti su učinili da rad u Laboratoriji Centra za proučavanje materije i antimaterije Australijskog Nacionalnog Univerziteta u Canberri bude izuzetno korisno i prijatno iskustvo.

dr Nikoli Škoru na savetima vezanim za jezičko-stilske aspekte ove disertacije.

Svim kolegama iz Laboratorije za Gasnu Elektroniku na podršci i druženju.

Porodici i prijateljima na velikoj podršci, strpljenju i razumevanju.

Beograd, 2012.

Ana Banković

Naslov disertacije: "Sudari i transport pozitrona u gasovima: Kinetički fenomeni i mogućnost primena u biomedicini"

Rezime:

Sa sve bržim razvojem tehnologije za akumulaciju i čuvanje antimaterije raste broj primena pozitrona u nauci, industriji i svakodnevnom životu, pa je sve veća potreba za modelovanjem različitih aspekata interakcije materije i antimaterije. Modelovanje realnih situacija u kojima pozitroni nalaze primenu zahteva poznavanje dva tipa fundamentalnih podataka. Prvi tip su sudarni preseki za sve bitne sudarne procese pozitrona i atoma/molekula materije. Drugi tip, koji se oslanja na preseke, su podaci o transportu pozitrona u neutralnim gasovima. Transportne osobine su izvor informacija o grupi (ansamblu) naelektrisanih čestica koje se kreću kroz sredinu i u njih spadaju između ostalih srednja energija, brzina drifta i difuzioni tenzor. Osnovni cilj disertacije je sistematsko izučavanje transportnih parametara rojeva pozitrona u gasovima. Izučavani gasovi su odabrani imajući u vidu realne primene pozitrona. Ispitivani gasovi su Ar, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> i vodena para, a za proračun transportnih parametara korišćene su Monte Carlo simulacija i teorija za rešavanje Boltzmannove jednačine. Ove dve suštinski različite tehnike za opis transporta pozitrona u gasovima, bile su neophodne usled nepostojanja eksperimentalnih rezultata za transportne koeficijente. Dobro slaganje ove dve tehnike daje verodostojnost rezultatima prikazanim u disertaciji i reflektuje numerički integritet ove tehnike.

Za modelovanje transporta roja pozitrona kroz neutralni gas potrebno je poznavanje preseka za sve procese relevantne za konkretan gas, odnosno potreban je kompletan skup preseka koji obezbeđuje balans broja čestica, impulsa i ukupne energije čestica roja. U ovoj doktorskoj disertaciji kompletirani su i preporučeni skupovi preseka za sudarne procese pozitrona u Ar, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CF<sub>4</sub> i H<sub>2</sub>O. U saradnji sa Centrom za proučavanje interakcija antimaterije i materije u Australiji izmereni su totalni presek za rasejanje pozitrona na molekulu vodene pare i presek za formiranje pozitronijuma. Ovi preseki su iskorišćeni kao ulazni podaci za Monte Carlo simulaciju i Boltzmannovu jednačinu, kojima su sistematski proučavani trendovi u ponašanju transportnih koeficijenata rojeva pozitrona koji se kreću pod uticajem električnih i magnetskih polja. Proučavana je osetljivost transportnih koeficijenata na proces formiranja pozitronijuma i identifikovan je veći broj kinetičkih fenomena indukovanih nekonzervativnom prirodom ovog procesa. Jedan od najdrastičnijih primera ovih fenomena je negativna diferencijalna provodnost koja se pojavljuje samo u balk komponenti brzine drifta, a ne i u odgovarajućoj flaks komponenti. Fenomen je detaljno objašnjen razmatranjem prostorno razloženih karakteristika roja pozitrona i korišćenjem teorije za prenos impulsa. Posebna pažnja

posvećena je zajedničkim efektima magnetskog polja i formiranja pozitronijuma u uslovima kada ciklotronska frekvencija značajno prevazilazi kolizionu frekvenciju. Utvrđeno je da magnetsko polje ukida efekat negativne diferencijalne provodnosti. Ispitivan je domen važenja aproksimacije dva člana za rešavanje Boltzmannove jednačine i pokazano je da su koeficijenti difuzije naročito osetljivi na broj članova u sferno-harmonijskoj dekompoziciji Boltzmannove jednačine. Važno mesto u disertaciji imaju testovi Tonksove teoreme primenjene na transport pozitrona u ortogonalnoj konfiguraciji električnog i magnetskog polja. Ilustrovana je neadekvatnost primene ove metode u situacijama kada je formiranje pozitronijuma izolovan i dominantan sudarni proces.

Jedna od najbitnijih primena pozitrona je ona u medicini u okviru PET dijagnostičke tehnike. U ovoj disertaciji je pokazano kako osnovna fenomenologija rojeva naelektrisanih čestica može da se primeni u razmatranjima interakcije pozitrona sa biološki relevantnim molekulima. U tom smislu, rezultati prikazani u ovoj disertaciji predstavljaju prvi važan korak u pravcu primena transporta pozitrona u biomedicini.

Ključne reči: Pozitroni, Monte Carlo, Boltzmannova jednačina, Transportni koeficijenti, Formiranje pozitronijuma, Argon, Vodoničnik, Azot, Vodena para, Ne-konzervativni sudari

Naučna oblast: Fizika

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

UDK broj: 533.7 (043.3)

Title: "Collisions and transport of positrons in gases: Kinetic phenomena and possible applications in biomedicine"

Abstract:

Along with the fast development of technology for accumulation and storage of antimatter the number of positron applications in science, industry and everyday life is rapidly increasing and therefore there is a growing necessity for modeling of different aspects of antimatter-matter interactions. The modeling of positron-based technologies and experimental situations involving positrons requires the knowledge of two types of fundamental data. The first type is the collisional data, i.e. the cross-sections for every possible channel of interaction between the positron and the atom/molecule of matter. The second type relying on the cross-section data is the data associated with the transport of positrons in neutral gases. Transport properties are a source of information about a group or ensemble of charged particles travelling through the medium, such as their mean energy, drift velocity and diffusion tensor. The main goal of this Thesis is to systematically study transport properties of positron swarms in Ar, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> and water vapour. Gases are chosen having in mind real positron applications. A Monte Carlo simulation code has been applied and our new sets of cross-sections for positron scattering in gases are used as an input. Since there are no experimental data for positron transport in these gases, a multi-term theory for solving the Boltzmann equation has been used to validate the results obtained by a Monte Carlo simulation technique.

Modeling of positron transport in neutral gas requires the knowledge of cross section set which has to be complete in the sense that it covers all important processes and therefore provides a good particle, momentum and energy balance. In this Thesis we have undertaken a programme to compile, evaluate, recommend and disseminate collision data for positrons in Ar, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CF<sub>4</sub> and water vapour. In collaboration with our colleagues from the Centre for Antimatter Matter Studies at the Australian National University, the total cross section for positron scattering in water vapour and cross section for positronium formation have been measured. Using these cross section sets as an input in both Monte Carlo simulation and Boltzmann equation theory, we have investigated the basic trends in behaviour of transport coefficients of positron swarms under the influence of electric and magnetic fields. The sensitivity of transport coefficients on Ps formation has been studied and a number of kinetic phenomena induced by non-conservative nature of this process have been identified. One of the most striking phenomena is negative differential conductivity (NDC) which is present in the bulk component of the drift velocity only, with no sign of it in flux component. The

phenomenon is explained in details by calculating the spatially resolved characteristics of the swarm and also by using the momentum transfer theory. Special attention has been paid to the synergistic effects of magnetic fields and Ps formation on positron transport in crossed electric and magnetic fields when the cyclotron frequency is much greater than the collision frequency. When a magnetic field is applied, a new level of complexity is introduced. It is shown that the longitudinal and transverse drift velocity components behave in an entirely different manner. The bulk component of the longitudinal drift velocity is more affected than the corresponding transverse component, which unexpectedly removes NDC from the profiles of the drift speed. The domain of validity of the two-term approximation for solving the Boltzmann equation has been investigated and this study has revealed that diffusion coefficients are more sensitive on way of solving the Boltzmann's equation than the drift velocity. The important results of this Thesis are those associated with the tests of Tonks' theorem applied to positron transport in an orthogonal configuration of electric and magnetic field. The inadequacies of this approach in situations when Ps formation is isolated and dominant process are illustrated.

One of the most important applications of positrons is the one in medicine, particularly for the PET diagnostic technique. It is shown in this Thesis how the basic phenomenology of charge particle swarms can be applied to study the interaction of positrons with biologically relevant molecules. The strategy and benchmark for direct comparisons of the various positron simulation and modelling techniques are proposed, and the data required for such a comparison are highlighted. These results represent the first important step in applying positron transport in biomedicine.

Key words: Positrons, Monte Carlo, Boltzmann equation, Transport coefficients, Positronium formation, Argon, Hydrogen, Nitrogen, Water vapour, Non-conservative collisions

Major field: Physics

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

UDK number: 533.7 (043.3)

## SADRŽAJ

<b>Uvod</b>	1	<b>3.1. Argon (Ar)</b>	41
<b>1. Teorijske osnove transporta pozitrona u gasovima</b>	10	<b>3.2. Azot (N<sub>2</sub>)</b>	43
<b>1.1. Roj naelektrisanih čestica i funkcija raspodele</b>	12	<b>3.3. Vodonik (H<sub>2</sub>)</b>	45
<b>1.2. Hidrodinamički režim i definicija transportnih koeficijenata</b>	13	<b>3.4. CF<sub>4</sub></b>	46
<b>1.3. Tehnike za rešavanje Boltzmannove jednačine</b>	16	<b>3.5. Vodena para (H<sub>2</sub>O)</b>	48
<b>1.4. Dobijanje transportnih koeficijenata iz Boltzmannove jednačine</b>	19	<b>4. Merenje totalnog preseka i preseka za formiranje Ps u interakciji pozitrona sa vodenom parom</b>	51
<b>1.5. Struktura i simetrije transportnih koeficijenata u električnom i magnetskom polju</b>	24	<b>4.1. Razvoj eksperimenata sa niskoenergijskim snopovima pozitrona</b>	56
<b>2. Monte Carlo tehnika</b>	26	<b>4.2. Opis aparature</b>	59
<b>2.1. Generator slučajnih brojeva</b>	28	4.2.1. Izvor i moderator	60
<b>2.2. Rešavanje jednačina kretanja</b>	29	4.2.2. Pozitronska zamka	60
<b>2.3. Određivanje verovatnoće i prirode sudara</b>	30	4.2.3. Komora za rasejanje i sistem za detekciju signala	64
<b>2.4. Određivanje parametara rasejanja</b>	32	<b>4.3. Način određivanja preseka i rezultati merenja</b>	66
<b>2.5. Samplovanje fizičkih veličina</b>	34	4.3.1. Postupak određivanja preseka	67
<b>2.6. Transportni koeficijenti u Monte Carlo simulaciji</b>	34	4.3.2. Rezultati merenja preseka	70
<b>2.7. Testiranje simulacije</b>	37	Totalni presek	70
<b>3. Predloženi kompletni skupovi preseka za interakciju pozitrona sa atomima i molekulima</b>	38	Presek za formiranje pozitronijuma	72
		Potraga za rezonancama	74
		Korekcija za rasejanje na malim uglovima	76
		<b>4.4. Zaključak</b>	77
		<b>5. Transport pozitrona u električnom polju</b>	79
		<b>5.1. Transportni koeficijenti i parametri</b>	80
		5.1.1. Srednja energija	80
		5.1.2. Brzina drifta i negativna diferencijalna provodnost (NDC)	83
		NDC efekat u transportu elektrona	86
		Poreklo NDC efekta u transportu pozitrona	89
		5.1.3. Difuzija	95
		5.1.4. Prostorno razložene karakteristike roja i vektor gradijenta energije	99
		5.1.5. Brzinski koeficijenti	104
		5.1.6. Smeša N <sub>2</sub> – CF <sub>4</sub>	105
		5.1.7. Termalizacija pozitrona u H <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> i smeši N <sub>2</sub> sa 10% CF <sub>4</sub>	107

<b>6. Transport pozitrona u ukrštenim električnim i magnetskim poljima</b>	110
<b>6.1. Transportni koeficijenti i parametri</b>	114
6.1.1. Srednja energija	114
6.1.2. Brzina drifta	116
6.1.3. Difuzija	123
6.1.4. Brzinski koeficijent za formiranje Ps	127
6.1.5. Zaključak	129
<b>6.2. Uticaj termalnih sudara na transportne koeficijente</b>	129
<b>6.3. Anizotropija rasejanja</b>	134
<b>6.4. Testiranje domena primenljivosti aproksimativnih metoda</b>	143
6.4.1. Domen primenljivosti aproksimacije dva člana	145
6.5.2. Koncept efektivnog polja – Tonksova teorema	149
<b>7. Pozitroni u biomedicini</b>	156
<b>7.1. Uloga pozitrona u medicini</b>	158
<b>7.2. Uloga Monte Carlo simulacija u biomedicini</b>	161
7.2.1. Opšte Monte Carlo simulacije	162
7.2.2. Monte Carlo simulacije specijalizovane za planiranje doze	167
7.2.3. Monte Carlo simulacije specijalizovane za rekonstrukciju slike u domenu dijagnostike u nuklearnoj medicini	169
7.2.4. Modelovanje niskoenergijskih elektrona	170
<b>7.3. Diskusija i rezultati</b>	173
7.3.1. Problem testiranja kodova	173
7.3.2. Poređenje transportnih koeficijenata pozitrona i elektrona u H <sub>2</sub> O	174
7.3.3. Termalizacija i simuliranje putanja pozitrona u vodenoj pari	178
<b>7.4. Zaključak</b>	180
<b>8. Zaključak</b>	183
<b>9. Literatura</b>	188

## UVOD

Začetnik ideje o pozitronima je Paul Dirac (1902 - 1984), koji je tridesetih godina prošlog veka postulirao postojanje ove egzotične čestice da bi objasnio rešenja Diracove jednačine sa negativnom energijom (Dirac, 1928; 1930; 1931). Prema njegovoj teoriji, čestice koje predstavljaju rešenja sa negativnom energijom imaju iste osobine kao elektroni, izuzev pozitivnog naelektrisanja. Iako je ove čestice pogrešno povezo sa protonima, jedinim pozitivno naelektrisanim česticama poznatim u to doba, on je ispravno zaključio da elektron može da "upadne" u stanje sa negativnom energijom i proizvede zračenje energije  $2m_e c^2$ , gde je  $m_e$  masa elektrona, a  $c$  brzina svetlosti. Pun značaj Dirakovog otkrića postao je jasan tek nakon što je Anderson 1933. eksperimentalno detektovao laku česticu sa pozitivnim naelektrisanjem (Anderson, 1933). Danas se zna da su pozitroni antičestice elektrona i da imaju masu jednaku masi elektrona i pozitivno naelektrisanje. Nakon otkrića pozitrona otkrivene su i druge fundamentalne antičestice, što je potvrdilo pretpostavku da svaka čestica ima odgovarajuću antičesticu, koja ima istu masu i naelektrisanje suprotnog znaka.

Otkriće pozitrona otvorilo je nova pitanja. Jedno od najzanimljivijih, a koje je i danas bez zadovoljavajućeg odgovora, je pitanje zašto u svetu u kome živimo ima tako malo antimaterije. Prema aktuelnim teorijama simetrija između čestica i antičestica ukazuje da su obe vrste čestica morale biti stvorene u jednakim količinama nakon velikog praska. Pitanje zašto je naš univerzum sastavljen skoro potpuno od materije, a ne od materije i antimaterije u jednakim količinama je i dalje bez odgovora. Asimetrijom u količini materije i antimaterije se na različite načine bavi veliki broj istraživačkih grupa u svetu. Na primer, ovo je jedno od

osnovnih pitanja u eksperimentima fizike visokih energija u velikim svetskim akceleratorima kao što su SLAC, Fermilab, CERN i KEK. Takođe postoje pokušaji da se na ovo pitanje odgovori u istraživanjima na niskim energijama kolaboracija ATHENA i ATRAP, koje su nedavno napravile niskoenergijske atome anti-vodonika i čije dalje istraživanje je usmereno i ka spektroskopiji anti-atoma (Amoretti *et al.*, 2002; Gabrielse *et al.*, 2002).

Otkriće pozitrona inspirisalo je rad na istraživanju fundamentalnih osobina interakcije materije i antimaterije. Pri susretu pozitrona sa regularnom materijom dolazi do anihilacije sa elektronom nakon vremena koje je inverzno proporcionalno lokalnoj gustini elektrona. Međutim, istraživanja velikog broja naučnika su pokazala da pri kontaktu materije i antimaterije neće odmah nužno doći do anihilacije, već da mogu da se formiraju i kratkoživeća vezana stanja (Charlton i Humberston, 2000). Mohorovičić (1934) je 1934. godine u svojim proračunima pokazao postojanje vezanog stanja elektrona i pozitrona, koje je kasnije dobilo ime pozitronijum (Ps). 1946. godine Wheeler (1946) je teorijski predvideo da dva elektrona i pozitron takođe mogu da formiraju vezano stanje, takozvani negativni jon pozitronijuma,  $Ps^-$ , a 1947. Hylleraas i Ore (Charlton i Humberston, 2000) su zaključili da i dva pozitronijuma formiraju vezano stanje nalik molekulu,  $Ps_2$ . Ova teorijska otkrića su decenijama kasnije eksperimentalno potvrđena: Deutch je 1951. otkrio  $Ps$  (Deutch, 1951), a Mills 1981. godine  $Ps^-$  (Mills, 1981). Najduže se čekalo na eksperimentalnu potvrdu postojanja  $Ps_2$ , koji su 2005. godine konačno detektovali Cassidy i Mills (Cassidy *et al.*, 2005; Cassidy i Mills, 2007).

Jedno od fundamentalnih pitanja pozitronske fizike je i dalje priroda interakcije materije i antimaterije. Interakcija pozitrona sa materijom igra značajnu ulogu u mnogim fizičkim procesima od interesa. Među brojnim primerima su astrofizički izvori anihilacionog zračenja (Guessoum *et al.*, 1991), primena pozitrona u medicini (pre svega pozitronska emisiona tomografija (PET)) (Muehlechner i Karp, 2006; Wahl, 2002), karakterizacija materijala pozitronskim snopovima (Hulett *et al.*, 1993), izučavanje plazme sačinjene od antimaterije (Jørgensen *et al.*, 2005; Surko i Greaves, 2004; Greaves *et al.*, 1994) i mnogi drugi. Interakcije pozitrona i elektrona sa atomima i molekulima se fundamentalno razlikuju (Charlton i Humberston, 2000). Prvo, odsustvo rezonanci kod pozitrona daje veoma male nerezonantne vibracione ekscitacije. Drugo, kod pozitrona nema interakcije izmene, što vodi do manjeg broja elektronskih stanja koja mogu da se pobude u sudaru sa pozitronima (Sullivan *et al.*, 2001a; 2002; 2008a). Konačno, formiranje pozitronijuma ( $Ps$ ),

nekonzervativni proces (u smislu održanja broja čestica) karakterističan za interakciju pozitrona sa materijom, često ima presek čija je magnituda uporediva sa magnitudom preseka ostalih relevantnih procesa, što potvrđuju i dva nezavisna skorašnja eksperimentalna (benchmark) merenja (Marler *et al.*, 2005; Laricchia *et al.*, 2002).

Istorijski gledano, i teorijsko i eksperimentalno proučavanje pozitrona je bilo suočeno sa velikim poteškoćama (Charlton, 2009). Od kada je pozitron eksperimentalno otkriven glavni problem u daljim istraživanjima bila je činjenica da je pozitrone moguće dobiti samo radioaktivnim raspadom određenih atomskih jezgara, odnosno da ne mogu kao elektroni da se umnožavaju u sudarima sa atomima i molekulima. Iz tog razloga bilo je teško napraviti dovoljno jak snop pozitrona za korišćenje u eksperimentima, što je jedan od razloga zašto ima mnogo više eksperimentalnih podataka o elektronima nego o pozitronima. Od najranijih dana pozitronske fizike istraživači su se bavili eksperimentalnim izučavanjem anihilacije pozitrona i transporta pozitrona u gasovima. Prvi pozitronski eksperimenti su bili bazirani na tehnicima merenja vremena života pozitrona i oni su dali prva vremena termalizacije za pozitrone u neutralnim gasovima (Charlton, 1985a; Paul i Leung, 1968). Prvi zapaženiji rad sa rasejanjem pozitrona je rad Mardera i saradnika (Marder *et al.*, 1956) koji su pratili kako se menja frakcija pozitrona koji formiraju  $Ps$  sa porastom jačine električnog polja u komori. U isto vreme, Teutch i Hughes su razvili detaljni pristup računanju elastičnog preseka baziran na rešavanju Boltzmannove jednačine za pozitrone u helijumu, argonu i neonu (Teutsch i Hughes, 1956) i glavni rezultat ovog istraživanja bio je zaključak da prinos  $Ps$  u plemenitim gasovima raste sa povećanjem električnog polja, tipično do saturacije. Bilo je pokušaja da se izmere transportni koeficijenti pozitrona u takozvanim pozitronskim "drift" eksperimentima (Paul i Tsai, 1979; Bose *et al.*, 1981; Charlton, 1985b), kao i pokušaja da se izračunaju (Campeanu, 1982), ali teorija još uvek nije bila na adekvatnom nivou za tretman nekonzervativnih procesa. Robson (1986) je bio prvi koji je diskutovao značaj uticaja nekonzervativne prirode anihilacije na transportne osobine pozitrona koristeći modernu fenomenologiju i moderne teorijske tehnike, ali se nije osvrnuo na nekonzervativnu prirodu formiranja  $Ps$ . Početkom sedamdesetih godina prošlog veka razvijeni su prvi eksperimenti sa pozitronskim snopovima niskih energija (Shultz i Lynn, 1988). Revolucionarni pomak u ovom smeru bila je Surkova modifikacija Penning-Malmberg zamke za pozitrone zahvaljujući kojoj je konačno postalo moguće dobiti dovoljno jake pozitronske snopove veoma niskih energija (Surko *et al.*, 1988; Murphy i Surko, 1992).

Fokus moderne pozitronske fizike (Gribakin *et al.*, 2004; Bromley *et al.*, 2006a) je i dalje na izučavanju interakcija materije i antimaterije – određivanju pouzdanih preseka za rasejanje pozitrona i Ps na različitim metama, kako eksperimentalno, tako i teorijski. S tim u vezi je i rad na razvoju i usavršavanju zamki za zarobljavanje antimaterije, pomoću kojih bi se dobili snopovi antimaterije (pozitrona, Ps, anti-vodonika,...) čije osobine mogu da se lako kontrolišu i koji bi mogli dalje da se upotrebe u različitim istraživanjima. Produkcija anti-vodonika (Amoretti *et al.*, 2002) i dalje privlači veliku pažnju. Savremena istraživanja na ovom polju se odnose na spektroskopiju anti-atoma, kao i na testiranje CPT invarijantnosti (Gabrielse, 2005; D'Urso *et al.*, 2005; Jørgensen, 2005). Vezana stanja pozitrona/Ps i atoma/molekula se i dalje proučavaju i teorijski (Mitroy *et al.*, 2002; Mitroy i Bromley, 2006; Bromley i Mitroy, 2006b; Saito, 2005; Sanchez *et al.*, 2006) i eksperimentalno (Bromley i Mitroy, 2002; Barnes *et al.*, 2006;), a takođe se dosta ulaže i u ispitivanje karakteristika materijala korišćenjem pozitronskih snopova (Shultz i Lynn, 1988; Dupasquier i Mills, 1995; Coleman, 2000; Gidley *et al.*, 2006; David *et al.*, 2001). Poslednjih godina raste i interesovanje za interakcije pozitrona sa biološki relevantnim molekulima (Makochekeka *et al.*, 2009) i bolje razumevanje uloge koju pozitroni imaju u medicini, posebno u okviru PET tehnike (Sanz *et al.*, 2011; Garcia *et al.*, 2011; Banković *et al.*, 2012c).

Iako trenutno nije u centru pažnje naučne javnosti, sve je veća potreba za bavljenjem transportom pozitrona. Prva motivacija je na fundamentalnom nivou: novi pouzdani preseki za interakciju pozitrona sa materijom omogućavaju da se transportna teorija razvijena za elektrone primeni na pozitrone i da se detaljno prouče osobine transportnih koeficijenata. Kako su eksperimenti sa rojevima pozitrona (*engl.* positron swarm experiments) zbog velikih poteškoća sa kojima su se suočavali potisnuti razvojem tehnologije pozitronskih snopova (Charlton, 2009; Petrović *et al.*, 2010), transportni koeficijenti dobijeni teorijski i korišćenjem simulacija su prvi, novi rezultati koji bacaju svetlost na osobine grupe ili ansambla čestica koje se kreću kroz neku sredinu. Veliki presek za formiranje pozitronijuma, nekonzervativni proces jedinstven za pozitrone, ukazuje na to da će nekonzervativni fenomeni biti izraženiji u transportu pozitrona nego kod elektrona. I zaista, naša skorašnja istraživanja otkrila su sasvim nove nekonzervativne efekte u transportu pozitrona (Šuvakov *et al.*, 2008; Banković *et al.*, 2008a; Banković *et al.*, 2009; Marler *et al.*, 2009; Banković *et al.*, 2012a; Banković *et al.*, 2012c). Očekuje se da bi ovi rezultati mogli da pokrenu obnavljanje swarm eksperimenata za pozitronima, pogotovo što bi danas korišćenjem moderne tehnologije pozitronskih snopova

ovi eksperimenti mogli da dostignu nivo elektronskih swarm eksperimenata (Charlton, 2009). Druga motivacija je mogućnost modelovanja realnih eksperimentalnih situacija u kojima se pozitroni nalaze u uslovima koji odgovaraju rojevima. Jedan takav primer je Penning-Malmberg-Surko pozitronska zamka (Marjanović *et al.*, 2011), koja je sastavni deo najmodernijih eksperimentalnih postavki za izučavanje različitih aspekata interakcije pozitrona sa materijom (Sullivan *et al.*, 2008a; Amoretti *et al.*, 2002; Cassidy *et al.*, 2006; Clarke *et al.*, 2006). Teorija rojeva može da se iskoristi za optimizaciju rada ove zamke, gde se problemi povezani sa gubicima do kojih dolazi usled formiranja Ps i sa izborom gasa koji hladi pozitrone direktno mogu izbeći analizom roja pozitrona u datim eksperimentalnim uslovima, a takođe i za objašnjenje funkcionisanja rotirajućeg električnog polja, koje primenjeno u ovoj zamci dodatno kontrahuje zarobljeni oblak pozitrona (Charlton, 2009; Greaves i Moxom, 2008). Rojevi naelektrisanih čestica u opštem slučaju predstavljaju most između atomske i molekularne sudarne fizike i fenomenologije jonizovanih gasova, i kao takvi mogu da se iskoriste kao benčmark (*engl.* benchmark) testovi teorija koje važe u znatno kompleksnijim situacijama. Benčmark proračuni usrednjenih transportnih osobina rojeva elektrona u hidrodinamičkim i nehidrodinamičkim uslovima su dobro zasnovani i provereni (Dujko *et al.*, 2010; Raspopović *et al.*, 1999; White *et al.*, 1997; Ness, 1994). Ista strategija bi danas, kada su preseki za interakciju pozitrona sa atomima i molekulima sve pouzdaniji, mogla da se primeni na kodove koji služe za modelovanje različitih praktičnih primena pozitrona. Ovo je posebno bitno u slučaju PET tehnike, za čije modelovanje je razvijen veliki broj Monte Carlo kodova za koje ne postoje standardni testovi (Kawrakow, 2000a; Brown, 2003; Agostinelli *et al.*, 2003; Barro *et al.*, 1995; Zaidi, 1999). Jedan od motiva ove disertacije je da ponudi strategiju i benchmark testove za direktno poređenje različitih simulacija i tehnika modelovanja pozitrona, stavljajući akcenat na tip podataka potrebnih za ovakvo poređenje.

U ovoj disertaciji prikazani su transportni parametri pozitrona u Ar, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub> i vodenoj pari. Argon, kao plemeniti gas, je među prvim gasovima za koje je kompletan skup preseka za interakciju sa pozitronima postao dostupan (Šuvakov *et al.*, 2008). Takođe, presek za formiranje Ps izrazito dominira nad presecima za ostale procese, pa su kinetički efekti koji potiču od nekonzervativne prirode ovog procesa najizraženiji baš u argonu. Molekulski vodonik je zanimljiv zbog značaja koji ima u astrofizici (Guessoum *et al.*, 1991), ali pre svega jer se nekada koristio kao “buffer” gas u pozitronskim zamkama (Surko i Greaves,



2004). Vremenom se pokazalo da iako ima izuzetno kratko vreme termalizacije pozitrona (Al-Qaradawi *et al.*, 2000) ovaj gas nije efikasan za hlađenje pozitrona. To je posledica velikog preseka za formiranje Ps, zahvaljujući kome se javljaju veliki gubici u intenzitetu snopa, što se jasno vidi i iz rezultata prikazanih u disertaciji. Za razliku od  $H_2$ ,  $N_2$  se jako dobro pokazao u pozitronskim zamkama i to je razlog zašto smo se bavili transportom pozitrona u ovom gasu. Takođe smo ispitali i transport u smeši  $CF_4$  i  $N_2$ , jer dodavanje  $CF_4$  azotu dodatno pospešuje hlađenje i zarobljavanje pozitrona u zamci. Transport pozitrona u vodenoj pari smo ispitali jer je molekul vode osnovni gradivni element svih živih organizama. Ovi proračuni su prvi korak ka modelovanju primena pozitrona u medicini.

Za dobijanje rezultata u ovoj disertaciji koristili smo i Monte Carlo pristup i deterministički pristup modelovanja, korišćenjem teorije za rešavanje Boltzmannove jednačine razvojem funkcije raspodele u red od više članova po gradijentima koncentracije čestica. Dve suštinski različite tehnike su bile neophodne, jer usled nepostojanja eksperimentalno izmerenih transportnih parametara pozitrona, nismo imali sa čime da uporedimo dobijene rezultate. Istovremeno, netipično i ponekad paradoksalno ponašanje drifta i difuzije pozitrona u pojedinim uslovima zahtevalo je poželjivu analizu baziranu na dve različite tehnike. Generalno govoreći, dobijeno je izuzetno dobro slaganje između rezultata koje su dale dve tehnike.

Ova disertacija je koncipirana na sledeći način:

U prvom poglavlju date su teorijske osnove transporta pozitrona. Pre svega, definisan je pojam roja (*engl.* swarm) naelektrisanih čestica i uvedena je Boltzmannova jednačina, koja opisuje kretanje roja. Dalje je prikazana funkcija raspodele roja, koja se u opštem slučaju dobija kao rešenje Boltzmannove jednačine. Uveli smo pojam hidrodinamičkog režima i definisali transportne parametre roja (srednju energiju, brzinu drifta, tenzor difuzije). Transportni koeficijenti imaju dualnu prirodu, javljaju se u fluks i balk varijanti. U okviru ovog poglavlja objasnili smo suštinsku razliku između ova dva tipa transportnih koeficijenata. U osnovnim crtama je objašnjeno kako se rešava Boltzmannova jednačina i kako se iz nje u hidrodinamičkom režimu dobijaju transportni koeficijenti. Na kraju smo ukazali na simetrije koje postoje među transportnim koeficijentima u različitim konfiguracijama spoljašnjeg električnog i magnetskog polja.

Drugo poglavlje se bavi tehnikom Monte Carlo simulacije, koja je osnovni alat za dobijanje rezultata u ovom radu. Na početku ovog poglavlja zadržali smo se na definiciji i osnovnim karakteristikama Monte Carlo simulacije. Pokazali smo kako se u Monte Carlo simulaciji korišćenoj u ovom radu rešavaju jednačine kretanja čestica roja u električnom i magnetskom polju, kako se određuje trenutak i vrsta sudara sa česticama okolnog gasa, kako se dobija brzina čestice nakon sudara i kako se na osnovu ovoga sampluju odgovarajuće makroskopske fizičke veličine koje karakterišu dinamičko stanje roja. Konkretno, pokazali smo kako se transportni koeficijenti roja naelektrisanih čestica računaju primenom Monte Carlo metoda. Ova simulacija je prošla niz standardnih testova koji su ukratko nabrojani na kraju ovog poglavlja.

Za modelovanje transporta roja pozitrona kroz neutralni gas potrebno je poznavanje preseka za sve procese relevantne za konkretan gas, odnosno potreban je kompletan skup preseka koji obezbeđuje balans broja čestica, impulsa i ukupne energije čestica roja. Treće poglavlje posvećeno je preseccima kao ulaznim parametrima za izračunavanje transportnih koeficijenata i u Monte Carlo simulaciji i u kodu koji rešava Boltzmannovu jednačinu. Definisani su različiti tipovi binarnih sudara između čestice roja i atoma/molekula neutralnog pozadinskog gasa i pri tome je velika pažnja posvećena definiciji i identifikaciji takozvanih nekonzervativnih, ili reaktivnih, sudara u slučaju elektrona i pozitrona. Ukazali smo na različitu prirodu interakcije elektrona i pozitrona sa atomima i molekulima materije. Na kraju smo za svaki gas u posebnom pod-poglavlju prikazali i prodiskutovali korišćeni set preseka za pozitrone.

U četvrtom poglavlju dat je kratak istorijski pregled eksperimentalnog bavljenja pozitronima do otkrića Surko-Penning-Malmberg pozitronske zamke. Detaljno je opisana eksperimentalna postavka za merenje preseka pozitrona sa gasovima Centra za proučavanje interakcije materije i antimaterije u Canberri, jer su na ovom eksperimentu izmereni totalni presek i presek za formiranje Ps u interakciji pozitrona sa vodenom parom. Ova dva preseka su inkorporirana u set preseka korišćen kao ulazni podatak u Monte Carlo simulaciji i u kodu za rešavanje Boltzmannove jednačine, kojima su dobijeni transportni koeficijenti za pozitrone u vodenoj pari.

Rezultate proračuna transportnih parametara roja pozitrona koji se kreću kroz  $H_2$ ,  $N_2$ , vodenu paru i argon pod uticajem spoljašnjeg električnog polja prikazali smo u petom

poglavlju. Kad god je to bilo moguće, transportne parametre pozitrona smo uporedili sa odgovarajućim transportnim parametrima elektrona u istom gasu. Za sva četiri gasa prikazali smo srednju energiju čestica roja, brzinu drifta, transversalnu i longitudinalnu difuziju i brzinski koeficijent za formiranje Ps, a sve u funkciji redukovanoeg električnog polja. Akcenat je u ovom istraživanju stavljen na uticaj nekonzervativnih sudara (proces formiranja Ps) na transportne koeficijente i na dualnu prirodu brzine drifta i koeficijenata difuzije. Posebna pažnja je posvećena tumačenju efekta negativne diferencijalne provodnosti (NDC) u balk brzini drifta pozitrona, koji je primećen kod svih ispitivanih gasova osim kod  $N_2$ . U cilju boljeg razumevanja ovog fenomena u transportu pozitrona, napravili smo i osvrt na NDC u transportu elektrona. Utvrdili smo da se i manifestacija i poreklo NDC efekta razlikuje u transportu pozitrona i elektrona i dali smo objašnjenje njegovog porekla u slučaju pozitrona. Ovo objašnjenje smo potvrdili korišćenjem teorije za prenos impulsa (Vrhovac i Petrović, 1996; Robson, 1986; Banković *et al.*, 2009) i samplovanjem prostorno razloženih karakteristika roja kao što su broj čestica, srednja energija roja i frekvencija formiranja Ps (Šuvakov *et al.*, 2008; Banković *et al.*, 2012a). Objasnili smo odsustvo NDCa u slučaju transporta u  $N_2$  i ovo objašnjenje povezali sa činjenicom da je  $N_2$  dobar izbor za hlađenje i zarobljavanje pozitrona u pozitronskim zamkama. Analizirajući transportne koeficijente smeše  $N_2$  i 10%  $CF_4$  utvrdili smo zašto se dodavanjem  $CF_4$  azotu postiže još efikasnija termalizacija i zarobljavanje pozitrona u zamci. Izračunata vremena termalizacije za pozitrona u  $H_2$ ,  $N_2$  i smeši  $N_2$  i 10%  $CF_4$  su upoređena sa eksperimentalnim merenjima (Al-Qaradawi *et al.*, 2000) i dobijeno je jako dobro slaganje.

U šestom poglavlju opisan je transport pozitrona u argonu, molekulskom vodoniku i azotu i u vodenoj pari pod uticajem ukrštenog spoljašnjeg, homogenog i stacionarnog, električnog i magnetskog polja ( $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ ). Vrednosti redukovanoeg magnetskog polja za svaki gas odabrane su tako da u istraživanju budu obuhvaćeni režim u kome transportom dominiraju sudari, režim u kome dominira magnetsko polje, kao i prelazni režim između prethodna dva. Izbor je potkrepljen analizom odnosa ciklotronske i kolizione frekvence u funkciji redukovanoeg električnog polja za odabrane vrednosti redukovanoeg magnetskog polja za svaki gas. Magnetsko polje u priču uvodi nove transportne koeficijente. U  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  konfiguraciji postoje dve komponente brzine drifta, jedna u pravcu električnog polja  $\mathbf{E}$  i druga u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu, dok tenzor difuzije ima tri nenulte dijagonalne komponente,  $D_E$ ,  $D_{E \times B}$  i  $D_B$  koje opisuju difuziju u  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  i  $\mathbf{B}$  pravcu. Prema tome, za svaki gas smo prikazali ukupnu brzinu

drifta, kao i longitudinalnu i transversalnu komponentu, a takođe i dijagonalne elemente tenzora difuzije. Pored ovih koeficijenata prikazali smo još i srednju energiju čestica roja i brzinski koeficijent za formiranje Ps. Tumačeći dobijene rezultate zaključili smo da se u transportu pozitrona u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  konfiguraciji polja javlja fenomen magnetskog hlađenja roja, a odsustvo NDC efekta iz profila balk komponente ukupne brzine drifta smo objasnili posmatrajući zavisnost magnetskog ugla skretanja od redukovanoeg električnog polja za odabrane vrednosti redukovanoeg magnetskog polja, kao i samplovanjem vektora gradijenta energije. Na kraju smo se pozabavili termalnim efektima pozadinskog gasa na primeru transporta pozitrona u vodenoj pari, kao i testiranjem aproksimativnih metoda, kao što su aproksimacija dva člana pri rešavanju Boltzmannove jednačine i aproksimacija efektivnog polja.

Šesto poglavlje se odnosi na primene pozitrona u (bio)medicini. Dat je kratak osvrt na različite primene pozitrona u medicini, a zatim je data kratka kritička analiza Monte Carlo kodova koji su u širokoj upotrebi za modelovanje različitih aspekata PET tehnike. Kako se većina ovih kodova ne bavi niskoenergijskim česticama, osvrnuli smo se na rad istraživača koji nastoje da simulaciju transporta niskoenergijskih čestica inkorporiraju u ove kodove. Na kraju ovog poglavlja istakli smo zašto je modelovanje transportnih koeficijenata pozitrona bitno za medicinsku fiziku i ukazali na potencijalne pravce u kojima ovo istraživanje može da se nastavi.

U zaključku su sumirani osnovni rezultati ove disertacije i date smernice za budući rad.

Verujemo da još mnogo toga preostaje da se kaže o kinetičkoj teoriji rojeva naelektrisanih čestica u neutralnim gasovima. Potencijalne primene teorije pozitronskih rojeva su izuzetno brojne, što ovu temu čini veoma aktuelnom. Nadamo se da će ovaj rad probuditi i novo interesovanje za razvoj moderne verzije pozitronskih swarm eksperimenata.

## 1. TEORIJSKE OSNOVE TRANSPORTA POZITRONA U GASOVIMA

Fizički objekat koji proučavamo u ovoj disertaciji je roj lakih naelektrisanih čestica u beskonačnom prostoru na koji deluju električno i magnetsko polje. U ovom radu se bavimo pozitronima, ali se ovo poglavlje odnosi i na elektrone. Čestice roja interaguju sa molekulima/atomima prostorno homogenog neutralnog pozadinskog gasa, za koje se pretpostavlja da su u termodinamičkoj ravnoteži (imaju Maxwellovu raspodelu brzina i Boltzmannovu raspodelu unutrašnjih stanja). Jedna od osnovnih pretpostavki koje definišu roj je da je koncentracija čestica roja tako mala da međusobna interakcija naelektrisanih čestica kao i uticaj čestica roja na molekule pozadinskog gasa mogu da se zanemare. Prema tome, čestice dobijaju energiju od spoljašnjih polja, a gube je u binarnim sudarima sa neutralnim česticama pozadinskog gasa. Vreme trajanja sudara je zanemarljivo u poređenju sa vremenom koje u srednjem protekne između dva sudara. Posledica je da svi kvantno-mehanički efekti mogu da se zanemare i kretanje naelektrisanih čestica između sudara može da se opiše zakonima klasične fizike.

Dve osnovne tehnike za proučavanje kinetike rojeva naelektrisanih čestica u neutralnim gasovima su rešavanje Boltzmannove jednačine i tehnika Monte Carlo simulacije. Primarna tehnika u ovom radu je Monte Carlo simulacija. Teorija za rešavanje Boltzmannove jednačine je iskorišćena za verifikaciju rezultata dobijenih Monte Carlo simulacijom.

Rojevi mogu da se interpretiraju kao granični slučaj slabo jonizovane niskotemperaturske neravnotežne plazme. Pretpostavka da je koncentracija naelektrisanih čestica jako mala vodi nas u limit rojeva ili “*free diffusion plasma limit*” (White, 1996). Za potpuno jonizovanu plazmu, niskotemperaturnu plazmu i roj kolizioni integrali i način rešavanja Boltzmannove jednačine su identični.

Jedan od osnovnih motivacionih faktora za razvoj eksperimentalne i teorijske fizike rojeva naelektrisanih čestica sastojao se u određivanju preseka za sudare elektrona i neutrala na niskim energijama. Eksperimenti sa rojevima (*engl. swarm experiments*) su pažljivo dizajnirani s ciljem smanjivanja nehidrodinamičkih efekata usled međusobnih interakcija naelektrisanih čestica, efekata prostornih naelektrisanja, velikih gradijenata koncentracije naelektrisanih čestica i efekata graničnih površina. Rezultati ovih eksperimenata su, u konačnoj instanci, transportni koeficijenti. Oni se koriste u takozvanoj inverznoj proceduri za nalaženje sudarnih preseka elektrona na niskim energijama (Phelps, 1968; Crompton, 1994; Petrović *et al.*, 2007; Dujko *et al.*, 2008). Ukratko, ova procedura počinje nekim probnim setom preseka koji se koristi za rešavanje Boltzmannove jednačine, čime se dobijaju transportni koeficijenti. Dobijeni transportni koeficijenti se upoređuju sa rezultatima eksperimenta i ukoliko nije postignuto unapred definisano slaganje, preseci se modifikuju i procedura se ponavlja. Kada se dostigne traženo slaganje između izračunatih i izmerenih transportnih koeficijenata procedura je završena, dobijen je normalizovan set preseka koji može da se koristi kao ulazni podatak u kinetičkim modelima plazme. Da bi ova procedura bila pouzdana, greška eksperimentalnih rezultata mora da bude manja od 2%, a za rešenja Boltzmannove jednačine potrebna preciznost je čak 0.5%, a u nekim slučajevima čak i 0.1%. Ova metoda je bila u širokoj upotrebi sedamdesetih godina prošlog veka i davala je relativno pouzdane preseke za sudare elektrona sa različitim gasovima na niskim energijama koje eksperimenti sa snopovima elektrona tada nisu mogli da dosegnu. Još jedna prednost ove procedure je činjenica da set preseka dobijen iz izmerenih transportnih parametara inverznom procedurom obezbeđuje balans broja čestica, impulsa i energije.

Ako posmatramo roj elektrona, jasno je da čestice roja nisu nikada u termalnoj ravnoteži sa neutralima. Spoljašnje električno polje elektronima daje energiju i u zavisnosti od prirode interakcije sa česticama pozadinskog gasa, jačine polja i koncentracije neutrala, raspodela čestica roja može značajno da odstupa od Maxwellove. Pritom je Coulombova interakcija između elektrona nedovoljno efikasna u rekonstrukciji Maxwellove raspodele

usled malog stepena jonizacije niskotemperaturnih plazmi. Zbog svega ovoga, ako se traži korektan opis procesa zagrevanja elektrona, transporta kao i mehanizama koji dovode do jonizacije i ekscitacija, neophodan je kinetički tretman elektrona. Kinetički fenomeni su povezani sa ponašanjem celog ansambla naelektrisanih čestica i ne mogu trivijalno da se predvide i opišu poznavanjem detalja individualnih sudara i uticaja spoljašnjeg polja.

## 1.1. ROJ NAELEKTRISANIH ČESTICA I FUNKCIJA RASPODELE

Sa stanovišta kinetičke teorije, roj predstavlja statistički ansambl nezavisnih naelektrisanih test-čestica koje se kreću u neutralnom pozadinskom gasu. Kretanje čestica je određeno silama kojima na njih deluju električno i magnetsko polje i sudarima sa pozadinskim gasom. Jedan ansambl zapravo sačinjava veliki broj identično prepariranih sistema od kojih se svaki sastoji od pozadinskog gasa i jedne test-čestice. Prema tome, matematički, roj može da se opiše pomoću jednočestične šestodimenzionone funkcije raspodele u faznom prostoru,  $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$ , gde  $\mathbf{r}$  i  $\mathbf{c}$  označavaju koordinate u konfiguracionom prostoru i prostoru brzina.

Roj naelektrisanih čestica koji se kreće pod uticajem prostorno homogenog i vremenski nezavisnog električnog i magnetskog polja u proizvoljnoj prostornoj konfiguraciji opisuje se Boltzmannovom jednačinom:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{q}{m} [\mathbf{E} + \mathbf{c} \times \mathbf{B}] \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} = -J(f, f_0). \quad (1.1.1)$$

Veličine  $q$  i  $m$  predstavljaju naelektrisanje i masu čestice roja, dok je  $t$  označeno vreme. Boltzmannova jednačina je zapravo jednačina kontinuiteta za šestodimenzionu funkciju raspodele. Prvi član u Boltzmannovoj jednačini izražava eksplicitne promene faze funkcije raspodele u vremenu, dok je drugi član posledica postojanja gradijenata u konfiguracionom prostoru. Treći član se javlja usled postojanja gradijenata u brzinskom prostoru, koji su posledica delovanja Lorentzove sile. Celokupna leva strana Boltzmannove jednačine je izbalansirana sudarima. Na desnoj strani jednačine član  $J(f, f_0)$  označava linearni kolizionni operator, koji opisuje elastične, neelastične i nekonzervativne (u smislu održanja broja čestica roja) sudare između naelektrisanih čestica roja i neutralnih molekula (atoma) pozadinskog gasa.  $f_0$  predstavlja funkciju raspodele čestica pozadinskog gasa. U kolizionnom operatoru

zanemareni su međusobni sudari naelektrisanih čestica. Rešiti Boltzmannovu jednačinu znači naći faznu funkciju raspodele  $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$ .

Jednočestična šestodimenziona funkcija raspodele u faznom prostoru,  $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$  sadrži sve informacije o ponašanju roja, ali nije direktno merljiva. Ono što se u velikoj većini eksperimenata meri je struja naelektrisanih čestica koja dolazi na elektrodu. Drugim rečima, gustina naelektrisanja, odnosno funkcija raspodele u konfiguracionom prostoru, je zapravo veličina koja je eksperimentalno merljiva. Definiše se kao:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}. \quad (1.1.2)$$

Nakon merenja gustine naelektrisanja,  $n(\mathbf{r}, t)$  svaka dalja analiza počinje uvođenjem određenih pretpostavki o prirodi ove funkcije. Na bazi uvedenih pretpostavki obrađuju se eksperimentalni rezultati i dolazi se do ostalih veličina od interesa, pre svega transportnih koeficijenata, koji su i sami u velikom broju slučajeva eksperimentalno merljive veličine. S druge strane, teorijska analiza bazirana na istim pretpostavkama, povezuje ove veličine sa funkcijom raspodele u faznom prostoru  $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$ , obično kao srednje vrednosti po nekim delovima funkcije raspodele. Prema tome, poznavanje funkcije raspodele preko preseka za sudarne procese povezuje preseke sa direktno merljivim veličinama.

## 1.2. HIDRODINAMIČKI REŽIM I DEFINICIJA TRANSPORTNIH KOEFICIJENATA

Polazna tačka kinetičke teorije rojeva i spona između teorije i eksperimenta je *jednačina kontinuiteta gustine naelektrisanja* (u daljem tekstu jednačina kontinuiteta):

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = S(\mathbf{r}, t), \quad (1.2.1)$$

gde je  $\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = n\langle \mathbf{c} \rangle$  fluks čestica roja, a  $S(\mathbf{r}, t)$  predstavlja frekvencu dešavanja nekonzervativnih procesa po jedinici površine u jedinici vremena, ili jednostavnije rečeno, izvorni (reaktivni) član. Jednačina kontinuiteta opisuje promene koncentracije čestica usled fluksa čestica i promene broja čestica pri nekonzervativnim sudarima. Eksplicitne vremenske promene koncentracije su balansirane divergencijom fluksa i izvornim članom. Ova

jednačina podjednako važi i u hidrodinamičkom i u nehidrodinamičkom režimu, mada ćemo se u ovoj disertaciji ograničiti na razmatranje isključivo hidrodinamičkog režima.

Za roj naelektrisanih čestica koji se kreće u beskonačnom prostoru (ili daleko od elektroda i zidova), daleko od izvora čestica i zona u kojima one intenzivno nestaju, kada se uspostavi ravnoteža između energije koju roj dobija od električnog polja i energije koju gubi u sudarima, transportne osobine mogu da se okarakterišu prostorno i vremenski nezavisnim transportnim koeficijentima – roj se nalazi u *hidrodinamičkom režimu*. Pojam *transportni koeficijent* ima smisla samo u ovom režimu, dok u nehidrodinamičkom režimu ključna veličina koja opisuje transport ostaje funkcija raspodele čestica roja\*. Pretpostavka o hidrodinamičkom režimu uvodi se jednačinom:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} f^{(k)}(\mathbf{c}, t) \otimes (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t), \quad (1.2.2)$$

gde su  $f^{(k)}(\mathbf{c}, t)$  vremenski zavisi tenzori  $k$ -tog reda, a simbol  $\otimes$  predstavlja skalarni proizvod tenzora (kontraktija po svim indeksima). U slučaju statičkih polja (Kumar *et al.*, 1980) hidrodinamički režim važi kada je sistem evoluirao u stanje koje ne zavisi od početnog stanja sistema i prostorno – vremenska zavisnost funkcije raspodele i njenih momenata može da se izrazi preko linearnih funkcionala koncentracije  $n(\mathbf{r}, t)$ . U proučavanju tranzijentnih efekata u vremenskoj relaksaciji roja i/ili proučavanju kinetike roja pod uticajem vremenski zavisnih polja, postoji još jedan dodatni eksplicitni izvor vremenske zavisnosti, pored implicitne zavisnosti koncentracije čestica (White *et al.*, 1999a). Hidrodinamički razvoj (1.2.2) podrazumeva da je sva prostorna zavisnost funkcije raspodele u datom trenutku određena prostornom zavisnošću koncentracije čestica i njenih prostornih izvoda.

Ako funkcija raspodele može da se razvije u stepeni red po gradijentima koncentracije naelektrisanih čestica, to znači da svaka veličina koja opisuje dinamiku roja takođe može da se razvije po ovim gradijentima. U skladu s tim razvijamo vektor fluksa čestica i izvorni član:

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{\Gamma}^{(k+1)}(t) \otimes (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t), \quad (1.2.3)$$

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{S}^{(k)}(t) \otimes (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t). \quad (1.2.4)$$

Jednačina (1.2.3) predstavlja *generalisanu vremenski zavisnu fluks – gradijentnu relaciju* koja služi za identifikaciju transportnih koeficijenata. Ovu relaciju ćemo zapisati u obliku pogodnijem za definisanje transportnih koeficijenata:

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{\Gamma}^{(k)}(t) \otimes (-\nabla)^{k-1} n(\mathbf{r}, t). \quad (1.2.5)$$

Zadržavanjem samo prva dva člana u razvoju vektora fluksa čestica (1.2.5) dobijamo približnu relaciju:

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{W}^{(*)}(t) n(\mathbf{r}, t) - \mathbf{D}^{(*)}(t) \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t), \quad (1.2.6)$$

gde su  $\mathbf{W}^{(*)}(t)$  i  $\mathbf{D}^{(*)}(t)$  fluks brzina drifta i fluks tenzor difuzije. Zamenom (1.2.3) i (1.2.4) u jednačinu kontinuiteta (1.2.1) dobija se *generalisana vremenski zavisna difuziona jednačina*:

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \boldsymbol{\omega}^{(k)}(t) \otimes (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t), \quad (1.2.7)$$

gde su

$$\boldsymbol{\omega}^{(k)}(t) = \mathbf{\Gamma}^{(k)}(t) - \mathbf{S}^{(k)}(t) \quad (1.2.8)$$

*balk* transportni koeficijenti. Odsecanjem (1.2.7) na  $k = 2$  dobija se *vremenski zavisna difuziona jednačina*:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{W}(t) \cdot \nabla n - \mathbf{D}(t) : \nabla \nabla n = -R_a(t) n, \quad (1.2.9)$$

koja definiše balk transportne koeficijente:

$$R_a(t) = -\boldsymbol{\omega}^{(0)}(t) = \mathbf{S}^{(0)}(t), \quad (1.2.10)$$

$$\mathbf{W}(t) = \boldsymbol{\omega}^{(1)}(t) = \mathbf{W}^{(*)}(t) - \mathbf{S}^{(1)}(t), \quad (1.2.11)$$

$$\mathbf{D}(t) = \boldsymbol{\omega}^{(2)}(t) = \mathbf{D}^{(*)}(t) + \mathbf{S}^{(2)}(t). \quad (1.2.12)$$

Izrazom (1.2.10) dat je efektivni koeficijent jonizacije (sumiran doprinos svih novonastalih i nestalih čestica), izraz (1.2.11) daje balk brzinu drifta, a (1.2.12) balk tenzor difuzije.

Dualna priroda transportnih koeficijenata je činjenica koja je godinama sistematski ignorisana od strane plazma modelara. Na suštinsku razliku između fluksa i balk transportnih koeficijenata prvi su ukazali Tagashira i saradnici sa Hokaido Univerziteta (Tagashira *et al.*,

1977) na osnovu pionirskih radova (Thomas, 1969; Thomas i Thomas, 1969) i iz tog razloga profesor Robert Robson sa James Cook Univerziteta u Australiji je predložio da se ova razlika još nazove i TSS efekat, prema početnim slovima prezimena autora ovog rada (White *et al.*, 2009). U fluidnim modelima plazme rešavaju se fluidne jednačine u kojima figurišu flaks vrednosti transportnih koeficijenata. Modelari svoje ulazne podatke obično uzimaju iz rezultata eksperimentalnih merenja, a u eksperimentima sa rojevima mere se balk transportni koeficijenti. Oni su povezani sa transportom centra mase roja (i širenjem roja oko centra mase). U izrazima (1.2.11) i (1.2.12) eksplicitni uticaj nekonzervativnih sudara na transport centra mase roja opisan je članovima  $S^{(1)}(t)$  i  $S^{(2)}(t)$ . Očigledno je da su u odsustvu nekonzervativnih interakcija fluks i balk transportni koeficijenti jednaki. Tada rezultati merenja mogu bez bojazni da se koriste u fluidnim modelima plazme, ali u situaciji kada postoje nekonzervativni sudari posebna pažnja treba da se posveti razlici između dva tipa transportnih koeficijenata koja iz nje proizilazi, posebno u slučajevima kada su modeli jako osetljivi na transportne koeficijente.

### 1.3. TEHNIKE ZA REŠAVANJE BOLTZMANNOVE JEDNAČINE

Boltzmannovu jednačinu je formulisao slavni austrijski fizičar Ludwig Eduard Boltzmann (1844 – 1906.) sa ciljem da opiše dinamiku idealnog gasa pod pretpostavkom postojanja isključivo elastičnih sudara (Boltzmann, 1872) između molekula. Forma same jednačine je do danas ostala nepromenjena, ali su metode rešavanja Boltzmannove jednačine bile predmet mnogih istraživanja u poslednjih nekoliko decenija. Sa tačke gledišta čiste fizike, Boltzmannova jednačina se koristila kao osnovna jednačina u analizi rezultata *swarm* eksperimenata. S druge strane, istraživanja u pravcu nalaženja tačnog rešenja Boltzmannove jednačine motivisana su potrebom za pouzdanim transportnim koeficijentima i transportnim osobinama u gasovima i gasnim smešama koje su korišćene za različite primene, počev od tehnologije obrade materijala plazmom (Makabe i Petrović, 2006), preko primene u žičanim komorama u detektorima čestica visokih energija (Blum i Rolandi, 1993), pa do gasnih lasera (Cherrington, 1979). Teorijska i eksperimentalna istraživanja na temu rojeva elektrona pod delovanjem električnog i magnetskog polja do 1980. godine sumirana su u knjizi Huxleya i Cromptona (1974) i u preglednom radu Heylena (1980). Skoriji prikaz istorijskog razvoja kinetičke teorije naelektrisanih čestica koje se kreću kroz neutralne gasove pod uticajem

električnog polja dali su Robson i Ness (1986), White (White i Robson, 2002) i Dujko (2009). U ovom radu, motivacija za računanje transportnih osobina roja pozitrona teorijskim putem, rešavanjem Boltzmannove jednačine, bila je nedostatak eksperimentalnih rezultata sa kojima bi transportni koeficijenti dobijeni Monte Carlo metodom mogli da se uporede. Iz tog razloga ćemo bez ulaženja u detalje proračuna, opisati osnovne ideje i principe pojedinih metoda rešavanja ove jednačine.

Kao što je već napomenuto, rešiti Boltzmannovu jednačinu zapravo znači naći jednočestičnu šestodimenzionu funkciju raspodele  $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$ . Istorijski gledano, razvijen je veliki broj metoda za rešavanje Boltzmannove jednačine, ali generalno govoreći, postoje dva bitno različita pristupa: integralni (metod path integrala) i momentni metod. Za ovu disertaciju bitne su ideje koje leže u pozadini savremenih momentnih metoda (Dujko, 2009; Dujko *et al.*, 2010; 2011b).

Prvi korak u momentnom pristupu rešavanju Boltzmannove jednačine obično je razvoj funkcije raspodele  $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$  u prostoru brzina po sfernim harmonicima:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_m^{(l)}(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) Y_m^{[l]}(\hat{\mathbf{c}}), \quad (1.3.1)$$

gde su  $Y_m^{[l]}$  sferni harmonici, a  $\hat{\mathbf{c}}$  označava uglove brzine  $\mathbf{c}$ . U (1.3.1) nikakvo ograničenje nije postavljeno na broj sfernih harmonika niti je pretpostavljen konkretan oblik vremenske zavisnosti koeficijenata razvoja. Na ovaj način je opisana ugaona zavisnost funkcije raspodele u prostoru brzina. Razvoj (1.3.1) je podjednako validan kako za hidrodinamički tako i za nehidrodinamičke slučajeve, jer se odnosi samo na prostor brzina. Alternativa ovom razvoju je razvoj po Legendreovim polinomima koji je striktno govoreći validan jedino u slučaju kada su sve prostorne nehomogenosti sistema orijentisane samo duž principijelne ose (obično z osa). Odsecanje ovog razvoja na  $l=1$  daje dobro poznatu aproksimaciju dva člana (*engl.* two term approximation). Strogo govoreći, aproksimacija dva člana je validna isključivo za rojeve lakih naelektrisanih čestica koje se isključivo elastično sudaraju sa molekulima pozadinskog gasa. U ovoj fizičkoj situaciji transfer energije u elastičnim sudarima je mali, ali je veliki transfer impulsa što vodi ka randomizaciji pravaca brzina nakon sudara, odnosno funkcija raspodele postaje skoro idealno izotropna u prostoru brzina. U tom smislu dovoljna su samo dva člana u razvoju za opis ugaone zavisnosti u prostoru brzina. Međutim, kada neelastični sudari počnu da igraju važnu ulogu ova aproksimacija više nije adekvatna. Tada energijski transfer u sudarima više nije mali, sudari nemaju jasan efekat randomizacije

pravaca brzine nakon sudara uz istovremeno male promene intenziteta brzine. U ovim činjenicama treba potražiti razloge zašto se transportna teorija za elektrone i jone razvijala na dva potpuno različita koloseka. Čak i u elastičnim sudarima jona i neutrala transfer energije je veliki, funkcija raspodele je jako anizotropna i u prostoru brzina, tako da aproksimacija dva člana za funkciju raspodele jona nikada nije adekvatna (Dujko, 2009).

Sledeći korak je tretman prostorne zavisnosti funkcije raspodele. Na ovom mestu postaje jako bitno da li govorimo o hidrodinamičkom ili nehidrodinamičkom režimu. U hidrodinamičkom režimu sve prostorne zavisnosti i eksplicitne vremenske zavisnosti funkcije raspodele nose gradijenti koncentracije (razvoj (1.2.2)):

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} f^{(k)}(\mathbf{c}, t) \otimes (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t). \quad (1.3.2)$$

U nehidrodinamičkom režimu, međutim, sve prostorne zavisnosti funkcije raspodele se u okviru momentnog metoda ostavljaju netaknute tokom dekompozicije Boltzmannove jednačine. Tek se na kraju ovog procesa prostorne zavisnosti funkcije raspodele i njenih momenata tretiraju numeričkim tehnikama poput metode konačnih razlika i pseudo-spektralne metode.

Konačno, zavisnost funkcije raspodele od brzine može da se opiše na više načina. Koriste se razni numerički tretmani (npr. metod konačnih razlika, pseudo-spektralni metod, splajnovi). U ovom radu korišćen je kompjuterski kod za rešavanje Boltzmannove jednačine u kome se zavisnost od brzine opisuje razvojem momenata funkcije raspodele po Sonine polinomima (generalisani Laguerreovi polinomi) oko Maxwelliana:

$$f(lm | s\lambda\mu; c, t) = \omega(\alpha, c) \sum_{\nu=0}^{\infty} F(\nu lm | s\lambda\mu; \alpha, t) R_{\nu}(\alpha c). \quad (1.3.3)$$

$f(lm | s\lambda\mu; c, t)$  je moment funkcije raspodele,  $\omega(\alpha, c)$  je Maxwellian,  $R_{\nu}(\alpha c)$  su tzv. R-polinomi koji u sebi sadrže Sonine polinome, a  $F(\nu lm | s\lambda\mu; \alpha, t)$  predstavlja koeficijent u razvoju.  $l$  i  $m$  su indeksi koji potiču od sfernog harmonika, dok  $s$ ,  $\lambda$  i  $\mu$  određuju red jednačina koje treba da se reše da bi se dobili željeni transportni koeficijenti. Na primer, za roj u prostorno homogenoj situaciji (nema gradijenata naelektrisanih čestica)  $s = \lambda = \mu = 0$ , kinetičke jednačine koje slede omogućavaju dobijanje prostorno homogene srednje energije i fluks komponenti brzine drifta. Momenti funkcije raspodele se razvijaju baš po Sonine polinomima jer oni čine ortonormirani bazu u prostoru brzina u sfernom koordinatnom sistemu sa Maxwellianom kao

težinskom funkcijom. Drugim rečima, funkcija raspodele se razvija oko ravnotežnog rešenja Boltzmannove jednačine u prostoru brzina. Jako je važno istaći da temperatura ovog Maxwellijana nije jednaka temperaturi pozadinskog gasa, već je ostavljena kao fleksibilni parametar za optimizaciju konvergencije ovog razvoja. Ovo je suština dobro poznate dvotemperaturske teorije. Pri dekompoziciji Boltzmannove jednačine za jone, zbog jake anizotropije funkcije raspodele neophodan je veći stepen fleksibilnosti, pa se koriste trotemperaturske i višetemperaturske teorije (Viehland i Goeringer, 2005). Konačno, postoji još jedan razlog koji ide u prilog korišćenju Sonine polinoma – oni su svojstvene funkcije kolizionog operatora za Maxwellovu interakciju – model sa konstantnom kolizionom frekvencijom (*engl.* constant collision frequency model) u prostoru brzina. Za ovaj model Boltzmannova jednačina može da se reši analitički.

Kada razvoje (1.3.1), (1.3.2) i (1.3.3) zamenimo u Boltzmannovu jednačinu, izvršimo integraciju po svim uglovima i brzinama, pa nakon toga i odgovarajuće algebarske operacije sa matričnim elementima kolizionog operatora, brzine, izvoda po brzinama i drugih članova koji se pojavljuju, Boltzmannova jednačina se konvertuje u sistem beskonačnih spregnutih nehomogenih parcijalnih diferencijalnih jednačina za momente funkcije raspodele. Numeričkom diskretizacijom vremenskog izvoda i odgovarajućim odsecanjem ovih razvoja dobijeni beskonačni sistem diferencijalnih jednačina prelazi u konačan sistem kompleksnih algebarskih jednačina za momente funkcije raspodele. Drugim rečima, dobija se jedna jako velika matrična jednačina za momente funkcije raspodele. Momenti funkcije raspodele se nalaze numeričkim rešavanjem ovog sistema. Poznavanje momenata funkcije raspodele omogućava određivanje svih transportnih parametara roja uključujući i samu funkciju raspodele. Detalji moderne hidrodinamičke momentne teorije za rešavanje Boltzmannove jednačine i njeno numeričko rešavanje prikazani su u doktorskoj disertaciji (Dujko, 2009).

## 1.4. DOBIJANJE TRANSPORTNIH KOEFICIJENATA IZ BOLTZMANNOVE JEDNAČINE

U ovom odeljku pokazaćemo ukratko i u najosnovnijim crtama kako se transportni koeficijenti formalno izvode iz Boltzmannove jednačine (1.1.1). Pretpostavićemo da se roj kreće u beskonačnom gasu pod uticajem električnog i magnetskog polja koja nisu funkcije prostornih koordinata i vremena. Iz pretpostavke da su sudari trenutni i lokalni sledi

zaključak da kolizijski operator deluje na funkciju raspodele samo u prostoru brzina. Hidrodinamički razvoj funkcije raspodele ima sledeći oblik:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \sum_{j=0}^{\infty} f^{(j)}(\mathbf{c}) \otimes (-\nabla)^{(j)} n(\mathbf{r}, t), \quad (1.4.1)$$

gde je prostorno vremenska zavisnost data kroz koncentraciju  $n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}$ , a  $f^{(j)}(\mathbf{c})$  predstavljaju parcijalne funkcije raspodele u prostoru brzina. Za parcijalne funkcije raspodele važe uslovi normiranja (Kumar *et al.*, 1980):

$$\begin{aligned} \int f^{(0)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c} &= 1, \\ \int f^{(j)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c} &= 0, \quad j \geq 1. \end{aligned} \quad (1.4.2)$$

Zamenom funkcije raspodele  $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$  (1.4.1) u Boltzmannovu jednačinu i izjednačavanjem članova uz isti stepen gradijenta koncentracije dobija se hijerarhija kinetičkih jednačina za parcijalne funkcije raspodele:

$$\left( \frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{c} \times \mathbf{B}) \partial_{\mathbf{c}} + J \right) f^{(0)}(\mathbf{c}) = -\omega^{(0)} f^{(0)}(\mathbf{c}), \quad (1.4.3a)$$

$$\left( \frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{c} \times \mathbf{B}) \partial_{\mathbf{c}} + J \right) f^{(j)}(\mathbf{c}) = \mathbf{c} f^{(j-1)}(\mathbf{c}) - \sum_{k=0}^j \omega^{(k)} f^{(j-k)}(\mathbf{c}), \quad j \neq 0. \quad (1.4.3b)$$

Dobijene su parcijalne diferencijalne jednačine koje se sukcesivno rešavaju. U *steady-state* uslovima, jednačina (1.4.3a) predstavlja svojstveni problem, dok kod promenljivih polja to više nije slučaj, već ovaj sistem postaje spregnut sistem parcijalnih diferencijalnih jednačina.

Transportni koeficijenti se dobijaju iz hijerarhije kinetičkih jednačina (1.4.3a) i (1.4.3b) integracijom po prostoru brzina. Pri tome se uvodi pretpostavka da je svaka parcijalna funkcija raspodele  $f^{(k)}$  jednaka nuli na granicama integracije. Kolizijski operator može da se rastavi na konzervativni i nekonzervativni (reaktivni) deo:

$$J = J^C + J^R. \quad (1.4.4)$$

Uz malo matematike dobija se da je integral od konzervativnog dela kolizionog operatora u prostoru brzina jednak nuli. Kada jednačinu (1.4.3a) prointegralimo po prostoru brzina dobijamo:

$$\int (\mathbf{a} \partial_{\mathbf{c}} + J^C + J^R) f^{(0)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c} = -\omega^{(0)} \int f^{(0)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}, \quad (1.4.5)$$

gde je  $\mathbf{a} = \frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{c} \times \mathbf{B})$ . Znajući da je:

$$\int \mathbf{a} \partial_{\mathbf{c}} \mathbf{c} f^{(k)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c} = \mathbf{a} \int \partial_{\mathbf{c}} \mathbf{c} f^{(k)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c} = \mathbf{a} f^{(k)}(\mathbf{c}) \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0, \quad (1.4.6)$$

kao i da je integral od konzervativnog dela kolizionog operatora u prostoru brzina jednak nuli, dobija se transportni koeficijent:

$$\omega^{(0)} = -\int J^R f^{(0)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}. \quad (1.4.7)$$

Slično, integraljenjem jednačine (1.4.3b) po prostoru brzina dobijaju se balk transportni koeficijenti višeg reda:

$$\omega^{(k)} = \int \mathbf{c} f^{(k-1)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c} - \int J^R f^{(k)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}. \quad (1.4.8)$$

Transportni koeficijenti dati izrazima (1.4.7) i (1.4.8) otkrivaju nam oblik i smisao prvih nekoliko transportnih koeficijenata, najbitnijih za modelovanje realnih eksperimentalnih situacija. Tako efektivni koeficijent jonizacije, balk brzina drifta i balk tenzor difuzije mogu da se prikažu redom kao:

$$R_a = \omega^{(0)} = -\int J^R f^{(0)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}, \quad (1.4.9)$$

$$\mathbf{W} = \int \mathbf{c} f^{(0)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c} - \int J^R f^{(1)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}, \quad (1.4.10)$$

$$\mathbf{D} = \int \mathbf{c} f^{(1)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c} - \int J^R f^{(2)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}. \quad (1.4.11)$$

Opšti oblik balk transportnih koeficijenata dat je izrazom (1.2.8), odnosno:

$$\omega^{(k)}(t) = \mathbf{\Gamma}^{(k)}(t) - \mathbf{S}^{(k)}(t),$$

gde  $\mathbf{\Gamma}^{(k)}(t)$  predstavlja fluks transportni koeficijent  $k$ -tog reda, a  $\mathbf{S}$  korekciju zbog prisustva nekonzervativnih sudara. Poređenjem (1.2.8) i (1.4.8) može da se zaključi da se flaks vrednosti transportnih koeficijenata u opštem slučaju zapravo definišu kao:

$$\mathbf{\Gamma}^{(k)} = \int \mathbf{c} f^{(k-1)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}, \quad k \geq 1, \quad (1.4.12)$$

a korekcija u prisustvu nekonzervativnih sudara kao:



$$S^{(k)} = \int J^R f^{(k)}(c) dc. \quad (1.4.13)$$

Na osnovu ovoga, fluks brzina drifta i fluks difuzioni tenzor imaju oblik, redom:

$$W^* = \int c f^{(0)}(c) dc, \quad (1.4.14)$$

$$D^* = \int c f^{(1)}(c) dc. \quad (1.4.15)$$

Konačno može da se kaže da su fluks transportni koeficijenti prvi momenti brzine koeficijenata u hidrodinamičkom razvoju funkcije raspodele čestica roja. Kada nema nekonzervativnih sudara, odnosno kada je reaktivni deo kolizionog operatora jednak nuli ( $J^R = 0$ ) fluks brzina drifta i fluks tenzor difuzije imaju isti oblik kao odgovarajuće balk veličine, tj. u odsustvu nekonzervativnih sudara fluks i balk transportni koeficijenti su jednaki. Odavde još može da se zaključi da je za određivanje efektivnog koeficijenta jonizacije dovoljno da znamo prvi prostorno homogeni član u hidrodinamičkom razvoju, tj. tenzor nultog reda  $f^{(0)}$ , dok je za brzinu drifta potreban i koeficijent  $f^{(1)}$ , a za difuziju i  $f^{(2)}$  i tako redom.

Vratimo se sada na opšti oblik balk transportnih koeficijenata (1.4.8). Transportni koeficijenti na dva načina zavise od nekonzervativnih sudara, tj. postoje dva tipa nekonzervativnih efekata. Prvi su implicitni efekti, koji se ogledaju u zavisnosti same parcijalne funkcije raspodele u prostoru brzina  $f^{(k)}(c)$  od nekonzervativnih sudara - funkcija raspodele ne izgleda isto kada se održava i kada se ne održava broj čestica u roju. Drugi tip efekata su eksplicitni efekti, koji se ispoljavaju preko zavisnosti transportnog koeficijenta od samog reaktivnog dela kolizionog operatora  $J^R$ . Tako na primer u izrazu za balk brzinu drifta (1.4.10) prvi član, koji je ujedno i fluks brzina drifta, predstavlja brzinu centra mase roja koja je rezultat kretanja čestica pod dejstvom spoljašnjeg polja. Fluks koeficijenti samo implicitno zavise od nekonzervativnih sudara. Drugi član opisuje modifikaciju kretanja centra mase roja usled kreiranja i nestajanja čestica u nekonzervativnim sudarima. Do ovoga dolazi samo ako reaktivni deo kolizionog operatora zavisi od energije,  $J^R = J^R(\varepsilon)$ , jer ako ne zavisi onda nekonzervativni procesi neselektivno uklanjaju čestice iz sistema, pa nema kretanja koje bi bilo eksplicitni rezultat ovog tipa sudara.

Razmotrimo sada efekte odsecanja odgovarajućih razvoja. Polazna tačka za dobijanje transportnih koeficijenata je hidrodinamički razvoj funkcije raspodele (1.4.1), tj. razvoj po gradijentima koncentracije čestica roja. Transportni koeficijenti su dobijeni tako što je ovim

razvojem zamenjena funkcija raspodele u Boltzmannovoj jednačini (1.1.1) da bi se dobila hijerarhija kinetičkih jednačina (1.4.3a i b) za parcijalne funkcije raspodele u prostoru brzina i zatim izvršena integracije po prostoru brzina. Iz oblika dobijene hijerarhije kinetičkih jednačina vidi se da odsecanjem razvoja na nekoj vrednosti  $k$  ne unosimo nikakvu grešku u računanje parcijalne funkcije raspodele  $f^{(k)}$  jer ona zavisi samo od rešenja nižeg reda od  $k$ . Međutim, pri računanju transportnih koeficijenata u prisustvu nekonzervativnih sudara odsecanje razvoja na određenoj vrednosti  $k$  onemogućava izračunavanje balk transportnih koeficijenata višeg reda od  $k$ . Na primer, ako odsečemo razvoj na vrednosti  $k = 1$  možemo da izračunamo efektivnu koeficijent jonizacije, brzinu drifta i flaks tenzor difuzije, ali ne i balk difuziju, jer je za nju potrebno poznavanje parcijalne funkcije raspodele drugog reda u prostoru brzina  $f^{(2)}(c)$ , koja je po pretpostavci jednaka nuli. Još ostaje da se proveri da li odsecanje hidrodinamičkog razvoja unosi grešku u izračunavanje srednjih vrednosti veličina koje karakterišu ceo roj. Pogledajmo kako izgledaju srednja brzina:

$$\begin{aligned} \langle c \rangle(r, t) &= \frac{1}{\int f(r, c, t) dc} \int c f(r, c, t) dc \\ &= \int c f^{(0)}(c) dc - \int c f^{(1)}(c) dc \cdot \frac{\nabla n}{n} + \int c f^{(2)}(c) dc \cdot \frac{\nabla \nabla n}{n} + \dots \\ &= W - D \cdot \frac{\nabla n}{n} + Q : \frac{\nabla \nabla n}{n} + K : \frac{\nabla \nabla \nabla n}{n} + \dots \end{aligned} \quad (1.4.16)$$

i srednja energija roja:

$$\langle \varepsilon \rangle(r, t) = \varepsilon - \gamma \cdot \frac{\nabla n}{n} + L : \frac{\nabla \nabla n}{n} + \dots \quad (1.4.17)$$

gde su  $Q$  i  $K$  tenzori trećeg i četvrtog reda koji označavaju transportne koeficijente trećeg i četvrtog reda (Vrhovac *et al.*, 1999). U izrazu za srednju energiju roja javljaju se prostorno homogena srednja energija:

$$\varepsilon = \int \frac{1}{2} m c^2 f^{(0)}(c) dc, \quad (1.4.18)$$

vektor gradijenta energije koji određuje nagib srednje energije duž roja:

$$\gamma = \int \frac{1}{2} m c^2 f^{(1)}(c) dc, \quad (1.4.19)$$

i difuzivni tenzor energije:

$$L = \int \frac{1}{2} mc^2 f^{(2)}(c) dc, \quad (1.4.17)$$

čije je poznavanje neophodno za razumevanje eksplicitnih efekata nekonzervativnih sudara na tenzor difuzije (Dujko *et al.*, 2010).

Srednje vrednosti brzine i energije mogu se dobiti fluidnim razmatranjem roja i ovde vidimo koliko je zapravo koncept roja naelektrisanih čestica i kinetički tretman superioran. Transportni koeficijenti se principijelno mogu izračunati bez greške što nije slučaj za srednju brzinu i srednju energiju koje se moraju dobiti rešavanjem odgovarajućih fluidnih jednačina. Za rešavanje fluidnih jednačina baziranih na brzinskim momentima Boltzmannove jednačine potrebno je uvesti dodatne pretpostavke koje se odnose na prirodu sudarnih procesa i pretpostavke povezane sa problemom zatvaranja fluidnih jednačina (Robson *et al.*, 2005; White *et al.*, 2009). Sa druge strane, izrazi (1.4.16) i (1.4.17) nam omogućavaju da povežemo transportne koeficijente u hidrodinamičkim uslovima i transportne parametre roja u proizvoljnim nehidrodinamičkim uslovima. Primer kako ova procedura treba biti sprovedena za tzv. steady-state Townsend eksperiment opisana je u radu (Dujko *et al.*, 2008).

## 1.5. STRUKTURA I SIMETRIJE TRANSPORTNIH

### KOEFICIJENATA U ELEKTRIČNOM I MAGNETSKOM POLJU

U ovom paragrafu se bavimo strukturom transportnih koeficijenata u električnom i magnetskom polju. Brzina drifta je vektorska veličina, dok je difuzija opisana tenzorom. Razmotrićemo kako ovi vektori i tenzori izgledaju u specifičnim konfiguracijama polja. Posmatramo koordinatni sistem u kome je  $z$  – osa definisana pravcem električnog polja, dok magnetsko polje zaklapa proizvoljan ugao  $\varphi$  sa  $\mathbf{E}$  i leži u  $y - z$  ravni. U ovom najopštijem slučaju vektorski i tenzorski transportni koeficijenti su generalno u potpunosti popunjeni i nema simetrija između pojedinačnih komponenti (White *et al.*, 1999b; 2002). Ovo znači da postoje tri nezavisne komponente brzine drifta i devet nezavisnih komponenti tenzora difuzije i oni imaju sledeći oblik:

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} W_x \\ W_y \\ W_z \end{pmatrix}; \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{pmatrix}. \quad (1.5.1)$$

Za razliku od slučaja arbitrarne konfiguracije polja, kod paralelne i ortogonalne konfiguracije tenzori nisu popunjeni i postoje simetrije između pojedinih elemenata ovih tenzora. Tako u slučaju kada su pravci električnog i magnetskog polja paralelni, parnost i invarijantnost na rotacije funkcije raspodele za posledicu imaju sledeći oblik vektora brzine drifta i tenzora difuzije:

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ W_z \end{pmatrix}; \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} & 0 \\ D_{yx} & D_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & D_{zz} \end{pmatrix}, \quad (1.5.2)$$

dok u ortogonalnoj konfiguraciji imaju oblik (Ness, 1993):

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} W_x \\ 0 \\ W_z \end{pmatrix}; \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_{xx} & 0 & D_{xz} \\ 0 & D_{yy} & 0 \\ D_{zx} & 0 & D_{zz} \end{pmatrix}. \quad (1.5.3)$$

Treba istaći da i ostale veličine koje su po prirodi tenzori istog reda imaju sličnu strukturu kao brzina drifta i difuzija.

## 2. MONTE CARLO TEHNIKA

Osnovna tehnika za računanje transportnih koeficijenata rojeva pozitrona u ovom radu je Monte Carlo simulacija. Rešavanje problema transporta naelektrisanih čestica bazira se na numeričkoj simulaciji kretanja velikog ansabla čestica, pri čemu se sudarni procesi uvode generisanjem slučajnih brojeva iz odgovarajućih raspodela. Ovo je rigorozan, ali i fleksibilan metod simulacije transportnih procesa roja naelektrisanih čestica i primenljiv je kako u hidrodinamičkim tako i u nehidrodinamičkim uslovima. Prednost Monte Carlo simulacija nad numeričkim rešavanjem Boltzmannove jednačine je njihova veća fleksibilnost u komplikovanim situacijama. Veoma lako se generišu u slučaju složenih geometrija, pri opisivanju vremenski zavisnih pojava, u raznim situacijama kada prostor nije homogen i u situacijama kada postoje složeni granični uslovi zadati eksperimentom. Opis transporta naelektrisanih čestica primenom Monte Carlo simulacije bazirane na klasičnim trajektorijama čestica može se smatrati egzaktnim ako su poznati preseki za sudarne procese. Ovo se da opravdati činjenicom da je vreme koje protekne između dva sudara mnogo duže od vremena trajanja samog sudara, pa se kvantni fenomeni mogu opisati preko sudarnih preseka. U principu, Monte Carlo tehnike zaostaju za numeričkim rešavanjima Boltzmannove jednačine zbog relativno većih numeričkih zahteva u jednodimenzionim sistemima i u neizvesnosti koje gruba mreža ili preveliki koraci mogu da izazovu.

Monte Carlo metod je najzastupljeni metod kompjuterskih simulacija u statističkoj fizici i fizici plazme. Od ostalih metoda simulacije razlikuje se po svojoj stohastičkoj prirodi. Najopštije rečeno, Monte Carlo simulacije su sve simulacije fizičkog sistema koje koriste

slučajne brojeve. Koriste se kada simuliramo složene sisteme koje egzaktnim numeričkim metodama ne možemo da rešimo usled nedostatka računarskih resursa, ali i kada je fizički sistem po svojoj prirodi stohastičan, odnosno kada se u sistemu odvijaju slučajni procesi. Transport roja naelektrisanih čestica je jedan takav primer. Iz kvantne mehanike ili eksperimenta možemo dobiti jedino raspodelu verovatnoće određenih fizičkih veličina vezanih za te procese i jedini način da ih simuliramo jeste da koristimo slučajne brojeve generisane iz odgovarajuće raspodele. Greška koja se pravi pri stohastičkom računu opada sa vremenom računanja, tako da sa bilo kakvim računarskim resursima imamo neki rezultat. Povećanjem resursa smanjuje se greška. Dobra strana metode je i ta da ne uključuje dodatne aproksimacije.

Nezavisno od prirode naelektrisanih čestica (elektroni, pozitroni ili joni), Monte Carlo simulacija transporta se sastoji od nekoliko bitnih koraka. Na početku simulacije čestice imaju određenu energiju i preferentni pravac kretanja. Kretanje jedne čestice, tačnije njene fazne koordinate, se prate do trenutka sudara sa atomom ili molekulom pozadinskog gasa. Priroda sudara se bira slučajno uzimajući u obzir međusobne odnose preseka za sve moguće sudarne procese na energiji jednakoj energiji čestice. Tip sudara određuje parametre rasejanja nakon sudara, uključujući brzinu čestice i pravac kretanja. Finalni korak je računanje transportnih osobina roja na osnovu karakteristika kretanja naelektrisanih čestica. Sam način samplinga transportnih svojstava zavisi od realnih eksperimentalnih uslova u kojima se nalazi roj koji simuliramo.

U ovoj glavi je opisana Monte Carlo simulacija korišćena u ovom radu (Šuvakov, 2004), koja je nastala po uzoru na prethodne Monte Carlo kodove razvijene u Laboratoriji za Gasnu Elektroniku Instituta za Fiziku. Prethodni kodovi su korišćeni za tretman različitih fizičkih situacija među kojima su negativna mobilnost elektrona u dc (Dyatko *et al.*, 2000) i rf (Dujko *et al.*, 2003) poljima, kinetički fenomeni poput anomalne anizotropije difuzije (Maeda *et al.*, 1997; Raspopović *et al.*, 2000) i vremenski razložene negativne diferencijalne provodnosti (Bzenić *et al.*, 1999a; 1999b) kao i za razvoj testova (*engl. benchmarks*) za rojeve elektrona u dc i rf poljima (Raspopović *et al.*, 1999) i razne druge primene u oblasti modelovanja plazmi. Pregled rezultata ranijih verzija koda dat je u (Petrović *et al.*, 2002; Dujko *et al.*, 2005). Novi elementi u ovom kodu su korektan tretman anizotropnog rasejanja i termalnih sudara. Program je napisan u programskom jeziku C++, a kompajliran i izvršavan pod operativnim sistemom *Linux*. Njegova prvobitna namena bila je proučavanje uticaja

anizotropnog rasejanja i termalnih sudara na transportne osobine elektrona. U ovom radu je primenjen na izučavanje transporta pozitrona.

U ovom radu, simulirana je vremenska evolucija koordinata i brzina velikog broja pozitrona (oko  $10^6$ ), koji se kreću kroz beskonačan prostor ispunjen neutralnim gasom, pod uticajem spoljašnjeg statičkog električnog i magnetskog polja. Pozitroni dobijaju energiju od polja i rasipaju je u sudarima sa molekulima pozadinskog gasa. Sudari mogu biti elastični i neelastični, a gustina čestica je dovoljno mala da Coulombova interakcija između naelektrisanih čestica kao i ekraniranje polja mogu da se zanemare. U svim simulacijama korišćena je koncentracija pozadinskog gasa  $n_0 = 3.54 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ , što odgovara pritisku od 1 Torr na temperaturi od 273 K. Makroskopske veličine su dobijene usrednjavanjem mikroskopskih veličina po česticama i po vremenu. Oslanjajući se na ergodičku hipotezu očekujemo da se ovako dobijeni transportni koeficijenti slažu sa rezultatima usrednjavanja po funkciji raspodele dobijene numeričkim rešavanjem Boltzmannove jednačine. Transportni koeficijenti su određivani nakon dostizanja ravnotežnog stanja.

## 2.1. GENERATOR SLUČAJNIH BROJEVA

Kao što je već rečeno, Monte Carlo simulacije karakteriše korišćenje slučajnih brojeva. Slučajni brojevi se dobijaju korišćenjem generatora slučajnih brojeva. Pravi generatori slučajnih brojeva su skupi i nisu dovoljno brzi, tako da se često koriste takozvani generatori pseudo-slučajnih brojeva. Oni predstavljaju aritmetički algoritam generisanja brojeva koji u određenom smislu dobro zamenjuju slučajne brojeve.

U Monte Carlo simulaciji korišćenoj u ovom radu primenjen je generator pseudo-slučajnih brojeva *ran3* koji je predložio Knuth 1992, a dat je u drugom izdanju knjige *Numerical Recipes* (Press *et al.*, 1994). Generator je podvrgnut opsežnim testovima, a zasnovan je na subtraktivnom metodu, veoma je brz i koristi male računarske resurse. Negativni efekti korelacije petog reda primećene kod ovog generatora, efikasno se otklanjaju razdvajanjem generatora za različite procese (određivanje vremena sudara, vrste sudarnog procesa, ...). Uticaj korelacije pseudo-slučajnih brojeva dobijenih *ran3* generatorom na transportne koeficijente u Monte Carlo simulaciji detaljno su obrađeni u (Sakadžić, 2000).

## 2.2. REŠAVANJE JEDNAČINA KRETANJA

U ovom kodu jednačine kretanja svake čestice rešavane su analitički. Koordinatni sistem je odabran tako da je x-osa usmerena duž pravca konstantnog homogenog električnog polja, a z-osa duž pravca konstantnog homogenog magnetskog polja. Kretanje elektrona određeno je silama koje na njega deluju. U slučaju sila koje potiču od električnog i magnetskog polja, drugi Newtonov zakon ima oblik:

$$\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (2.2.1)$$

odnosno, raspisane po komponentama:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = e(E + v_y B), \quad (2.2.2)$$

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = -e v_x B, \quad (2.2.3)$$

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = 0, \quad (2.2.4)$$

gde je  $e$  specifično naelektrisanje elektrona ( $e < 0$ ,  $e = q/m$ ,  $q$  je naelektrisanje elektrona, a  $m$  masa), a  $\mathbf{r}$  i  $\mathbf{v}$  vektori položaja i brzine elektrona. U slučaju kada je  $\mathbf{B} \neq 0$  rešenje ima oblik:

$$x = x_0 + \left( \frac{E}{eB^2} + \frac{v_{y0}}{eB} \right) (1 - \cos(eBt)) + \frac{v_{x0}}{eB} \sin(eBt), \quad (2.2.5)$$

$$y = y_0 + \left( \frac{E}{eB^2} + \frac{v_{y0}}{eB} \right) \sin(eBt) - \frac{v_{x0}}{eB} (1 - \cos(eBt)) - \frac{E}{eB^2} t, \quad (2.2.6)$$

$$z = z_0 + v_{z0} t, \quad (2.2.7)$$

$$v_x = v_{x0} + \left( \frac{E}{B} + v_{y0} \right) \sin(eBt) - v_{x0} (1 - \cos(eBt)), \quad (2.2.8)$$

$$v_y = v_{y0} - \left( \frac{E}{B} + v_{y0} \right) (1 - \cos(eBt)) - v_{x0} \sin(eBt), \quad (2.2.9)$$

$$v_z = v_{z0}, \quad (2.2.10)$$

gde su  $x_0, y_0$  i  $z_0$  koordinate elektrona u početnom trenutku, a  $v_{x0}, v_{y0}$  i  $v_{z0}$  komponente brzine elektrona u početnom trenutku. Elektron se između sudara kreće po zakonu datom ovim jednačinama. U većini simulacija ovog tipa jednačine kretanja se ne rešavaju analitički već numerički. Kako se primenom Eulerovog metoda za numeričko rešavanje jednačina kretanja za putanju ne dobija cikloida, analitičko rešavanje je bolji izbor. Problem kod Eulerovog metoda se kod vremenski zavisnih polja prevazilazi korišćenjem Borisove rotacije (Birdsall i Langdon, 1974).

### 2.3. ODREĐIVANJE VEROVATNOĆE I PRIRODE SUDARA

Osnovni aspekti Monte Carlo metode su praćenje čestice na precizno određenoj putanji između sudara i određivanje trenutka i vrste sledećeg sudara. Posmatrajmo proizvoljni elektron koji se nalazi na proizvoljnoj poziciji u roju u trenutku  $t = t_0$ . Verovatnoća da elektron neće doživeti sudar pre vremena  $t$  data je jednačinom:

$$P(t) = \exp\left(-\int_{t_0}^t v_T(\varepsilon(t')) dt'\right), \quad (2.3.1)$$

gde je  $t_0$  ili trenutak u kome elektron ulazi u sredinu ispunjenu gasom ili trenutak prethodnog sudara. Vremenski zavisna totalna koliziorna frekvencija  $v_T$  ima oblik:

$$v_T = n_0 \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}} \sum_k \sigma_k(\varepsilon), \quad (2.3.2)$$

gde sumiranje ide po svim mogućim sudarnim procesima  $k$ ,  $\sigma_k$  je presek za  $k$ -tu vrstu sudara,  $\varepsilon$  je energija elektrona, a  $n_0$  koncentracija pozadinskog gasa. Gustina verovatnoće da do sudara dođe u vremenskom intervalu  $(t, t+\Delta t)$  data je izrazom:

$$p(t)dt = P(t) - P(t + \Delta t), \quad (2.3.3)$$

pa prema tome integralna jednačina za verovatnoću sudara ima oblik:

$$p(t) = v_T(\varepsilon(t)) \exp\left(-\int_{t_0}^t v(\varepsilon(t')) dt'\right). \quad (2.3.4)$$

Slučajni trenutak sudara  $t_c$  može da se odredi izjednačavanjem verovatnoće da se slučajni broj  $\xi_j$  izabere iz uniformne raspodele na intervalu  $(0, 1)$  i verovatnoće da slučajno vreme sudara  $t_c$  pripada intervalu  $[t_0, t_c]$ , pa se dobija:

$$-\ln(1 - \xi_1) = \int_{t_0}^{t_c} v_T(\varepsilon(t)) dt. \quad (2.3.5)$$

Poslednja jednačina u opštem slučaju nije analitički rešiva po  $t_c$  jer zavisi od jednačina kretanja koje same nisu uvek analitički rešive. To je razlog za primenu numeričkog metoda. U kodu koji je korišćen u ovom radu vreme je podeljeno na male intervale  $\Delta t$ , integral u jednačini (2.3.5) je aproksimiran sumom po ovim vremenskim intervalima pa je rešenje  $t_c$  dobijeno metodom polovljenja intervala:

$$-\ln(1 - \xi_1) \leq \sum_i v_T(\varepsilon(t_i)) \Delta t_i. \quad (2.3.6)$$

Suma u nejednakosti (2.3.6) predstavlja kolizionu sumu. Suština metoda je da se proveri da li je koliziorna suma veća od logaritma slučajnog broja. Ako nejednakost (2.3.6) ne važi za neku vrednost  $\Delta t_c$ , može da se kaže da dolazi do sudara i  $\Sigma \Delta t_c$  predstavlja rešenje.

Kritični momenat u integracionom metodu je određivanje koliki treba da bude vremenski korak za numeričku integraciju. U našem kodu ovaj korak je određen kao minimalna od dve relevantne vremenske konstante (srednje vreme sudara i ciklotronski period za  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ ) podeljena sa velikim brojem. Variranje pomenutog velikog broja kojim se deli vremenska konstanta daje test konvergencije metode.

Vrstu sudarnog procesa do kog je došlo u trenutku  $t_c$  određujemo takođe Monte Carlo metodom, izvlačenjem novog slučajnog broja  $\xi_2$  iz uniformne raspodele na intervalu  $(0, 1)$ . Verovatnoća da je na energiji  $\varepsilon$  došlo do  $j$ -tog sudarnog procesa data je sa

$$P_j(\varepsilon) = \frac{v_j(\varepsilon)}{v_s(\varepsilon)}, \quad (2.3.7)$$

pa zaključujemo da je do  $k$ -tog sudarnog procesa došlo ako je zadovoljena relacija:

$$\sum_{j=1}^{k-1} P_j < r < \sum_{j=1}^k P_j. \quad (2.3.8)$$

## 2.4. ODREĐIVANJE PARAMETARA RASEJANJA

Sledeći korak u Monte Carlo simulaciji je određivanje karakteristika elektrona nakon rasejanja. Da bi odredili brzinu koju elektron dobija nakon elastičnog sudara potrebno je da generišemo još dva slučajna broja, jedan za azimutalni ugao  $\varphi$ , a drugi za polarni ugao  $\theta$ . Gustina verovatnoće za azimutalni ugao je uniformna na intervalu  $(0, 2\pi)$ , pa za azimutalni ugao dobijamo:

$$\varphi = 2\pi \xi_3, \quad (2.4.1)$$

gde je  $\xi_3$  slučajni broj iz uniformne raspodele na intervalu  $(0, 1)$ . Gustina verovatnoće za polarni ugao se dobija iz diferencijalnog preseka:

$$f(\theta) = \frac{\sin(\theta)\sigma_\Omega(\varepsilon, \theta)}{\int_0^\pi \sin(\theta)\sigma_\Omega(\varepsilon, \theta)d\theta}, \quad (2.4.2)$$

gde je  $\varepsilon$  energija koju je elektron imao pre sudara. Ako je ugaona zavisnost diferencijalnog preseka ista za sve energije možemo da pišemo:

$$\sigma_\Omega(\varepsilon, \theta) = \sigma_\Omega(\varepsilon)I(\theta), \quad (2.4.3)$$

gde je  $I(\theta)$  ugaona zavisnost diferencijalnog preseka, iz čega se zamenom u (2.4.2) dobija:

$$f(\theta) = \frac{\sin(\theta)I(\theta)}{\int_0^\pi \sin(\theta)I(\theta)d\theta}. \quad (2.4.4)$$

Generisanje slučajnog broja iz ove raspodele ekvivalentno je rešavanju sledeće jednačine po  $\theta_c$ :

$$\xi_4 = \int_0^{\theta_c} f(\theta)d\theta = F(\theta_c). \quad (2.4.5)$$

Ovde je  $\xi_4$  novi slučajni broj iz uniformne raspodele na intervalu  $(0, 1)$ . Jednačina (2.4.5) je rešavana po sledećem algoritmu. Na početku rada simulacije učitaju se vrednosti diferencijalnog preseka u više tačaka po  $\theta$ . Zatim se vrši linearna interpolacija diferencijalnog

preseka da bi se dobila vrednost ove funkcije u onoliko tačaka koliko zadajemo na ulazu, pa se potom uz korišćenje izraza (2.4.2) i (2.4.5) računa funkcija  $F(\theta)$ . Njena inverzna funkcija od generisanog slučajnog broja  $\xi_4$  daje azimutalni ugao  $\theta_c$ . U slučaju izotropnog rasejanja (tu je  $\sigma_\Omega(\varepsilon, \theta) = \sigma_\Omega(\theta)$ ) rešenje jednačine (2.4.5) je:

$$\cos(\theta_c) = 1 - 2\xi_4. \quad (2.4.6)$$

Kada imamo dat presek za prenos impulsa i ugaonu zavisnost diferencijalnog preseka, totalni presek računamo koristeći sledeći izraz:

$$\sigma_0(\varepsilon) = \sigma_m(\varepsilon) \frac{\int_0^\pi I(\theta)\sin(\theta)d\theta}{\int_0^\pi I(\theta)\sin(\theta)(1 - \cos(\theta))d\theta}. \quad (2.4.7)$$

Nakon što je određen pravac pod kojim se elektron rasejava, treba odrediti i intenzitet brzine nakon sudara, odnosno energiju elektrona. U slučaju elastičnog sudara sa česticom gasa koja se nalazi u stanju mirovanja, gubitak energije se dobija iz zakona održanja i jednak je:

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon_0 \left( 1 - 2 \frac{mM}{(m+M)^2} (1 - \cos(\theta)) \right), \quad (2.4.8)$$

gde su  $m$  i  $M$  mase elektrona i čestice gasa, a  $\varepsilon_0$  energija elektrona pre sudara. Sada je moguće izračunati komponente brzine nakon sudara.

U slučaju da se radi o neelastičnom procesu, pre navedenog postupka elektronu treba oduzeti energijski gubitak usled takvog sudara. U slučaju jonizacije, energija upadnog elektrona se umanjuje za vrednost energije praga jonizacije, a nakon toga raspodeljuje na dva elektrona u skladu sa zakonima održanja. Kako egzaktno rešavanje jednačina održanja znatno usporava rad simulacije, generiše se slučajni broj  $\xi_5$  koji daje odnos energija dva elektrona nakon sudara.

## 2.5. SAMPLOVANJE FIZIČKIH VELIČINA

Na početku simulacije svaki od  $N$  elektrona dobija energiju odabranu slučajnim brojem generisanim iz Maxwellove raspodele. Nakon svakog vremenskog intervala  $\Delta t$  samplujemo makroskopske veličine usrednjavanjem odgovarajućih mikroskopskih veličina po svim elektronima:

$$\langle A(t_i) \rangle = \frac{1}{N \sum_{j=1}^N A_j(t_i)}, \quad (2.5.1)$$

gde  $A_j(t_i)$  predstavlja odgovarajuće fizičke veličine za  $j$ -ti elektron u trenutku  $t_i = i\Delta t$ , a  $N$  je broj elektrona.

Dalje, po potrebi, dobijenu veličinu usrednjavamo po vremenu, ali samo u slučaju da smo sigurni da je sistem izrelaksirao u stanje u kome je posmatrana veličina konstantna u vremenu. Roj elektrona u konstantnom spoljašnjem elektromagnetnom polju posle određenog vremena ulazi u hidrodinamički režim u kome su transportni koeficijenti konstante, pa mogu da se usrednjavaju po vremenu.

Ovaj kod takođe može da se koristi za samplovanje prostorno razloženih karakteristika roja. Prostorne raspodele se sampluju tako što prostorne koordinate od minimalne do maksimalne vrednosti izdelfimo u  $n$  intervala i za svaki pojedinačno vršimo usrednjavanje po svim elektronima koji se u njemu nalaze. Nakon toga, takođe, može da se vrši usrednjavanje po vremenu.

## 2.6. TRANSPORTNI KOEFICIJENTI U MONTE CARLO

### SIMULACIJI

Osnovna tehnika za dobijanje transportnih koeficijenata u ovom radu je tehnika Monte Carlo simulacije. U sledećem poglavlju će biti više reči o samoj tehnici kao i o kompjuterskom kodu koji je korišćen, a sada ćemo se zadržati samo na konkretnim izrazima za transportne koeficijente koje koristi Monte Carlo procedura i njihovom vezom sa prethodnim izlaganjem.

Transportni koeficijenti mogu da se izraze kao vremenski izvodi momenata koncentracije čestica (Kumar *et al.*, 1980). Ova činjenica je od velike pomoći za sagledavanje

fizičkog smisla transportnih koeficijenata. Množenjem generalisane vremenski zavisne difuzione jednačine (1.2.7) s leve strane proizvoljnom funkcijom  $\Psi(\mathbf{r})$  i integraljenjem po celom konfiguracionom prostoru, vremenski zavisni transportni koeficijenti mogu da se izraze kao vremenski zavisni vremenski izvodi ovih momenata:

$$R_a(t) = -\omega^{(0)}(t) = \frac{d}{dt} \langle \log N(t) \rangle(t), \quad (2.6.1)$$

$$\mathbf{W}(t) = \omega^{(1)}(t) = \frac{d}{dt} \langle \mathbf{r}(t) \rangle(t), \quad (2.6.2)$$

$$\mathbf{D}(t) = \omega^{(2)}(t) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle (\mathbf{r}(t) - \langle \mathbf{r} \rangle(t)) (\mathbf{r}(t) - \langle \mathbf{r} \rangle(t)) \rangle(t), \quad (2.6.3)$$

gde su

$$N(t) = \int n(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}, \quad (2.6.4)$$

$$\langle \Psi(\mathbf{r}) \rangle(t) = \frac{1}{N(t)} \int \Psi(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}. \quad (2.6.5)$$

Veličina  $R_a(t)$  je vremenski zavisan efektivni koeficijent jonizacije. Balk brzinu drifta  $\mathbf{W}(t)$  možemo fizički da interpretiramo kao vremenski zavisnu brzinu centra mase roja. Tenzor  $\mathbf{D}(t)$  u izrazu (1.3.15) predstavlja vremenski zavisnu brzinu promene srednjeg kvadrata širine roja ili vremenski zavisnu brzinu širenja roja.

Iz ovako izraženih transportnih koeficijenata može da se vidi u čemu je suštinska razlika između fluks i balk transportnih koeficijenata. Iz jednačine (2.6.2) sledi da je balk brzina drifta u vezi sa pomeranjem srednje prostorne koordinate roja i karakteriše kretanje celog ansambla naelektrisanih čestica. U prisustvu električnog polja dolazi do prostorne preraspodele energije duž roja (White, 1996). U takvoj situaciji, prisustvo nekonzervativnih sudara (jonizacija i zahvat kod elektrona, formiranje Ps i anihilacija kod pozitrona, ...) može da dovede do promene položaja centra mase roja. Ovaj efekat na balk brzinu drifta opisan je članom  $\mathcal{S}^{(1)}(t)$  u jednačini (1.2.11). S druge strane, fluks brzina drifta  $\mathbf{W}^{(*)}(t)$  u vezi je sa promenom položaja centra mase roja isključivo usled delovanja električnog polja. Prema tome, može da se interpretira kao srednja brzina čestica roja:

$$\mathbf{W}^{(*)}(t) = \frac{d}{dt} \langle \mathbf{v}(t) \rangle(t). \quad (2.6.6)$$

Slično, fluks vrednost tenzora difuzije  $\mathbf{D}^{(n)}(t)$  predstavlja širenje roja pod dejstvom električnog polja  $\mathbf{E}$  i gradijenta koncentracije čestica  $\nabla n$ :

$$\mathbf{D}^{(n)}(t) = \frac{1}{2} \left\langle \frac{d}{dt} ((\mathbf{r}(t) - \langle \mathbf{r} \rangle(t))(\mathbf{r}(t) - \langle \mathbf{r} \rangle(t))) \right\rangle(t). \quad (2.6.7)$$

U prisustvu nekonzervativnih sudara  $\nabla n$  može da se menja duž roja, što rezultuje promenom u srednjoj širini roja. Ovi efekti su računati kroz tenzor drugog reda  $\mathbf{S}^{(2)}(t)$  u izrazu (1.2.12) za balk koeficijent difuzije. Očigledno, i odsustvu nekonzervativnih sudara članovi  $\mathbf{S}^{(k)}(t)$  koji opisuju nestajanje, odnosno nastajanje čestica nestaju i balk i fluks transportni koeficijenti postaju jednaki.

Evo još jedne ilustracije da se balk i fluks transportni koeficijenti razlikuju samo u prisustvu nekonzervativnih sudara. Izrazi za fluks i balk brzinu drifta, (2.6.6) i (2.6.2) redom, na prvi pogled izgledaju isto. Definišimo sada  $\langle \mathbf{r} \rangle$  kao:

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \mathbf{r}_i, \quad (2.6.8)$$

gde je  $N$  broj naelektrisanih čestica u roju, a  $\mathbf{r}_i$  koordinate čestica roja. Tada srednja brzina čestica roja može da se zapiše kao:

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \mathbf{v}_i, \quad (2.6.9)$$

pri čemu je

$$\mathbf{v}_i = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}. \quad (2.6.10)$$

Tada se jednakost fluks i balk brzine drifta svodi na jednakost:

$$\frac{d}{dt} \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \mathbf{r}_i = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \frac{d}{dt} \mathbf{r}_i, \quad (2.6.11)$$

odnosno na komutiranje izvoda po vremenu sa sumom. Ovaj uslov nije zadovoljen kada postoje nekonzervativni procesi u sistemu, jer je tada broj čestica prekidna funkcija vremena.

## 2.7. TESTIRANJE SIMULACIJE

Da bi se proverila ispravnost i primenljivost neke numeričke metode, vrše se upoređivanja sa ranijim dobro proverenim rezultatima. Tek kada se ustanovi zadovoljavajuće slaganje moguće je metodu koristiti za simuliranje novog problema, gde ne postoji standardni provereni rezultat. Generalno, testiranje elektronskih kodova koji se koriste za modelovanje plazmi kao i pozitronskih kodova za modelovanje medicinskih primena je krucijalan korak pre nego što se primene na rešavanje problema vezanih za realne sisteme. Kod korišćen u ovom radu je sistematski testiran (Šuvakov, 2004) na dobro proučenim modelima transporta elektrona kroz gasove i ispostavilo se da daje jako dobre rezultate. Za testiranje ove Monte Carlo simulacije korišćeni su Reidov izotropni model, Lucas – Saelee jonizacioni model i modifikovani model Nessa i Robsona.

Monte Carlo kod korišćen u ovom radu je jako dobro reprodukovao transportne parametre (srednja energije, brzinski koeficijent reakcije  $\alpha$ , fluks i balk brzina drifta i dijagonalne komponente tenzora difuzije) za tri navedena standardna testa. Korišćenje jednostavnih formi preseka za određene sudare omogućava da se izoluju i objasne fundamentalni fizički procesi koji određuju specifično ponašanje roja elektrona u datim uslovima simulacije i to je najbitnija uloga modelnih gasova. Preseci zadati analitički ne sadrže neodređenosti koje generiše komplikovana struktura realnih preseka. Imajući ovo u vidu bili smo motivisani da testiramo nas kod za roj elektrona koji se kreće pod dejstvom električnog i magnetskog polja u cilju razumevanja razlika između fluks i balk vrednosti brzine drifta i difuzije. Ovo je bio neophodan korak jer je transport pozitrona pod izrazito jakim uticajem formiranja Ps, procesa koji indukuje široki spektar kinetičkih fenomena. Manifestacija ovih fenomena je ponekad paradoksalna i teška za razumevanje bez detaljne analize bazirane na modelnim gasovima.

Kako se ovaj rad bavi rojem pozitrona a ne elektrona, vodilo se računa o tome da sada postoji samo jedan nekonzervativni sudarni proces, stvaranje pozitronijuma, koji je ekvivalentan elektronskom zahvatu u transportu elektrona. Što se jonizacije tiče, ona neće dovesti do povećanja broja pozitrona, kao što je bio slučaj za elektrone, pa prema tome ne može da se tretira kao nekonzervativan proces, već kao neelastičan, konzervativan proces. Takođe, u ovom slučaju Lorentzova sila deluje na suprotnu stranu.



### 3. PREDLOŽENI KOMPLETNI SKUPOVI PRESEKA ZA INTERAKCIJU POZITRONA SA ATOMIMA I MOLEKULIMA

Dominantan uticaj na dinamiku čestica roja imaju binarni sudari sa česticama neutralnog pozadinskog gasa, u kojima pozitroni gube energiju dobijenu od elektromagnetnog polja. Za modelovanje transporta pozitrona kroz neutralni gas potrebno je poznavanje preseka za sve procese relevantne za konkretan gas, odnosno potreban je kompletan skup preseka koji obezbeđuje balans broja čestica, impulsa i ukupne energije roja (Petrović *et al.*, 2007).

U principu, binarne sudarne procese delimo na elastične, neelastične i nekonzervativne (reaktivne). Pri elastičnim sudarima ne dolazi do promene ukupne kinetičke energije čestica učesnica sudara, dok pri neelastičnom sudaru čestica roja gubi energiju jednaku energiji praga za odgovarajući neelastični proces. Čestice gasa imaju kvantno mehaničku strukturu i nalaze se u nekom kvantnom stanju. Pri neelastičnom sudaru njihovo stanje se menja u skladu sa mogućim promenama kvantnih brojeva, odnosno dinamikom sudara. Posledica toga je promena ukupne kinetičke energije čestica koje učestvuju u sudaru. Pod nekonzervativnim (reaktivnim) sudarima podrazumevamo sudarne procese prilikom kojih dolazi do promene broja čestica u roju. U transportu elektrona primeri takvih sudara su

jonizacija, koja uvećava broj elektrona, i elektronski zahvat, koji isti broj smanjuje. U slučaju pozitrona kao nekonzervativni sudari javljaju se formiranje Ps i anihilacija.

Osnovne karakteristike sudarnog procesa su sadržane u diferencijalnom preseku  $\sigma_{\Omega}(g, \gamma)$ , koji daje verovatnoću da čestica bude rasejana u jedinični prostorni ugao oko pravca određenog uglom rasejanja  $\gamma$ . Pri tome je ugao rasejanja ugao između vektora brzine čestice projektila pre i posle rasejanja, meren iz sistema centra mase i isti je za obe čestice koje učestvuju u sudaru. Diferencijalni presek je funkcija relativne brzine čestica  $g$  koje učestvuju u sudaru. Pomoću diferencijalnog preseka definišu se integralni preseki:

$$\sigma_0(g) = 2\pi \int_0^{2\pi} \sigma_{\Omega}(g, \gamma) \sin \gamma d\gamma, \quad (3.2)$$

$$\sigma_1(g) = 2\pi \int_0^{2\pi} \sigma_{\Omega}(g, \gamma) \cos \gamma \sin \gamma d\gamma, \quad (3.2)$$

$$\sigma_m(g) = \sigma_0(g) - \frac{g'}{g} \sigma_1(g), \quad (3.3)$$

gde je  $\gamma$  ugao rasejanja, a  $g$  i  $g'$  relativne brzine projektila i čestice gasa pre i posle sudara. S obzirom na mali odnos mase čestice roja i čestice gasa,  $m/M \ll 1$ , uobičajeno je da se  $\gamma$  zameni sa  $\theta$ ,  $g$  sa  $v$ , a  $g'$  sa  $v'$ , gde su  $\theta$ ,  $v$  i  $v'$  veličine merene iz laboratorijskog sistema. Veličina definisana izrazom (3.2) je **totalni presek**, a veličina definisana izrazom (3.3) **presek za prenos impulsa**. U slučaju elastičnog sudara  $v'/v \approx 1$  i tada presek za prenos impulsa ima oblik:

$$\sigma_{m,e} = 2\pi \int_0^{2\pi} \sigma_{\Omega,e}(v, \theta) \sin \theta (1 - \cos \theta) d\theta. \quad (3.4)$$

Interakcije pozitrona sa atomima i molekulima se fundamentalno razlikuju od interakcija u kojima učestvuju elektroni (Charlton i Humberston, 2000). Naelektrisanje pozitrona je suprotnog znaka od naelektrisanja elektrona, tako da se pozitron uvek razlikuje od elektrona u meti (atomu ili molekulu), pa nema interakcije izmene. Takođe, statička interakcija pozitrona i atoma je istog intenziteta kao i statička interakcija elektrona, ali suprotnog znaka (odbojna), dok je polarizacioni potencijal privlačan i iste jačine i za pozitrona i za elektrone. Ova dva tipa interakcije teže da se međusobno ponište, tako da je u slučaju pozitrona ukupna interakcija sa atomom manje privlačna. Iz tog razloga, na niskim energijama, kada dominira efekat polarizacije, totalni preseki za rasejanje pozitrona su bitno

manji nego za elektrone (Hoffman *et al.*, 1982). Izuzetak su alkalni atomi gde totalni presek za rasejanje pozitrona na niskim energijama u dobroj meri uključuje i presek za formiranje pozitronijuma (Ps), koji je kod ovakvih atoma moguć i kad je energija pozitrona nula. Na dovoljno visokim energijama, polarizaciona interakcija i interakcija izmene postaju zanemarljive. Tu je dominantan statički potencijal koji je isti i za elektrone i za pozitrone, pa preseki za rasejanje ove dve čestice postaju jednaki, sa vrednošću određenom prvom Bornovom aproksimacijom (Makochekanwa *et al.*, 2007). Još jedna posledica delimičnog poništavanja statičkog i polarizacionog potencijala je smanjena mogućnost pozitrona da sa atomom formira vezano stanje. Tako je Armour (1982; 1983) dao rigorozan dokaz da pozitron ne može da se veže za vodonik i helijum, dok su druga istraživanja (Charlton i Humberston, 2000) pokazala da su moguća vezana stanja pozitrona i jako polarnih atoma (npr. alkalnih metala), s tim što je energija veze jako mala. Interesantno je napomenuti da pozitron može da se veže i za pozitronijum. Nepostojanje interakcije izmene na prvi pogled pojednostavljuje teorijski tretman procesa rasejanja pozitrona, ali pažljivija analiza pokazuje da postoji jaka korelacija između elektrona i pozitrona koja mora da se uzme u obzir. Ove korelacije proizilaze iz privlačne elektrostatičke interakcije između pozitrona i elektrona iz mete i mogu da se posmatraju kao realna ili virtuelna stanja pozitronijuma. Njihova uloga je mnogo veće nego uloga elektron-elektron korelacija u rasejanju elektrona.

Na dovoljno niskim energijama, pored anihilacije, jedini otvoreni kanal interakcije su elastična rasejanja. Kako raste kinetička energija pozitrona, neelastični kanali počinju da se otvaraju: formiranje pozitronijuma, ekscitacije atomskih nivoa i jonizacija. Pozitronijum može da se formira u osnovnom ili u bilo kom energijski dozvoljenom pobuđenom stanju, dok su ekscitacije mete zbog odsustva interakcije izmene ograničene na one nivoe koji ne podrazumevaju promenu spina. Direktna anihilacija je moguća na svim energijama pozitrona, ali je njen presek znatno manji od preseka za sve ostale procese.

Uslov za formiranje pozitronijuma je da je energija pozitrona veća od razlike između praga za jonizaciju i energije veze pozitronijuma koja iznosi 6.8 eV. Ukoliko je energija jonizacije atoma mete manja od 6.8 eV, pozitronijum može da se formira i za nulte vrednosti energije pozitrona. Posmatrano iz ugla rojeva, formiranje pozitronijuma je nekonzervativan proces koji vodi do gubitka pozitrona iz roja, pa je u neku ruku analogni proces elektronskom zahvatu u transportu elektrona. S druge strane, jonizacija ne povećava broj čestica roja pa može da se tretira kao neelastični konzervativni proces. Pri interakciji pozitrona sa atomom

do jonizacije može doći na dva načina: direktno, tako što u sudaru pozitrona sa atomom elektron biva oslobođen iz atoma i nastavlja da se kreće kao slobodan elektron ili kroz proces formiranja pozitronijuma. Nadalje u ovom radu termin jonizacija se odnosi na direktnu jonizaciju.

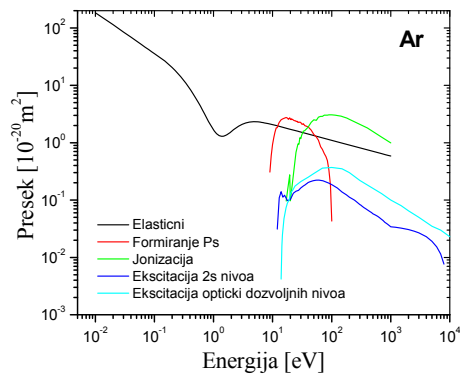
U tekstu koji sledi prikazaćemo skupove preseka za interakciju pozitrona sa argonom, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, CF<sub>4</sub> i vodenom parom. Ovu skupovi preseka su korišćenu kao ulazni podaci za računanje transportnih parametara pozitrona u kodu za rešavanje Boltzmannove jednačine i u Monte Carlo simulaciji.

### 3.1. ARGON (AR)

Skup preseka za interakciju pozitrona sa argonom sastavljen je od pažljivo odabranih rezultata eksperimentalnih merenja i teorijskih proračuna preseka dostupnih u literaturi i prikazan je na Slici 3.1.

Elastično rasejanje opisano je presekom za prenos impulsa (McEachran, 2006) i samim tim je uvedena pretpostavka o izotropnoj prirodi sudara. Monte Carlo kod korišćen u radu može kao ulazni podatak da koristi i totalni presek, ali tada mora da se vodi računa o anizotropiji, odnosno moraju da se poznaju i diferencijalni preseki. U nekim slučajevima nas nepostojanje i eksperimentalnih i teorijskih podataka primorava da presek za prenos impulsa aproksimiramo totalnim sudarnim presekom. U svakom slučaju, izabrani presek za prenos impulsa mora da bude usklađen sa podacima za totalni presek iz literature. Generalno, u literaturi ima jako malo podataka o presecima za prenos impulsa, dok je s druge strane jako puno podataka o totalnom preseku u funkciji energije. Najskorije merenje totalnog preseka za rasejanje pozitrona na argonu je merenje Karwasza i saradnika (2006), koji su takođe dali prikaz ranijih radova i kritički osvrt na slaganje eksperimenta i teorije. Kako je nama potrebna energijska zavisnost preseka za prenos impulsa, izabrali smo da elastično rasejanje predstavimo pomoću teorijskog proračuna ovog preseka (McEachran, 2006), koji je poboljšan i dopunjen u odnosu na presek prikazan u (Karwasz *et al.*, 2006). Za totalni presek ovaj proračun se dobro slaže sa eksperimentalnim rezultatima prikazanim u (Karwasz *et al.*, 2006) i pokazuje sličnu energijsku zavisnost kao ostali teorijski proračuni (npr. (Gianturco *et al.*, 1993)).

Eksperimentalna merenja preseka za elektronsku ekscitaciju dva najniža  $3p5s$   $J=1$  nivoa argona su onedavno dostupna u literaturi (Sullivan *et al.*, 2001b). Treba istaći da su ovo jedina dva nivoa iz skupa  $4s$  nivoa koje zbog prirode interakcije pozitroni mogu da ekscituju. Parcell i saradnici su objavili proračune preseka ovih nivoa (Parcell *et al.*, 2000), tako da su i teorijski i eksperimentalni preseki iskorišćeni za konstruisanje jednog efektivnog preseka za elektronske ekscitacije. Takođe, skupu preseka je dodat i presek za pobuđivanje viših optički dozvoljenih singletnih nivoa u sudaru sa pozitronima, koji se bazira na preseku za ekscitaciju argona u sudarima sa elektronima (Phelps i Tachibana, 1985).



Slika 3.1 Kompletan skup preseka za interakciju pozitrona sa argonom. Detalji su dati u tekstu.

Presek za formiranje pozitronijuma i presek za direktnu jonizaciju eksperimentalno su izmerili Marler i saradnici (Marler *et al.*, 2005). Preseci su dobijeni tehnikom kojom se presek za formiranje pozitronijuma meri direktno i kvantitativno se dobro slažu sa rezultatima dobijenim alternativnom metodom Laricchiaie i saradnika (Laricchia *et al.*, 2002). Pri konstruisanju finalnog skupa preseka zanemarena je direktna anihilacija, jer je poznato da je kod plemenitih gasova odgovarajući presek nekoliko redova veličine manji od preseka za formiranje pozitronijuma (Barnes, 2005).

### 3.2. AZOT ( $N_2$ )

Skup preseka korišćen za proračun transportnih osobina roja pozitrona u molekulskom azotu prikazan je na Slici 3.2.

Totalni presek je preuzet iz eksperimenta Hoffmana i saradnika (Hoffman *et al.*, 1982). U sklopu njihove eksperimentalne postavke nalazi se Van de Graafov akcelerator koji daje izvor pozitrona, radioaktivni izotop  $^{11}C$ . Snop pozitrona koji se dobija iz ovog izvora je energijski dobro definisan (energijska širina je manja od 0.1 eV) i on se dalje propušta kroz zonu ispunjenu gasom, gde dolazi do rasejanja. Na izlazu uređaja se nalazi detektor signala. Totalni presek je izmeren u opsegu od 0.5 do 750 eV. Kod ovakvog tipa eksperimenata javlja se greška usled gubitaka na malim uglovima (nemogućnosti detektovanja čestica koje su se rasejale unapred za male vrednosti ugla). Teorijski dobijeni diferencijalni preseki (Gillespe i Thompson, 1975) su iskorišćeni za procenu greške. Presek je ekstrapoliran ka nultoj energiji prema teorijskim proračunima (de Carvalho *et al.*, 2000).

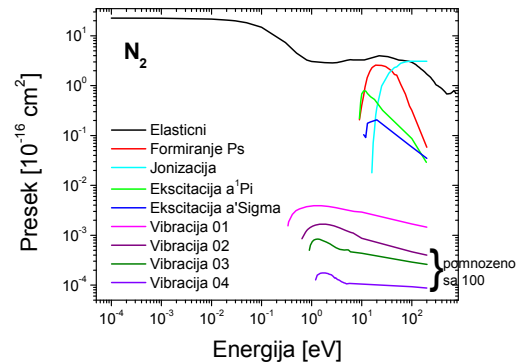
Preseci za formiranje pozitronijuma, direktnu jonizaciju i ekscitacije elektronskih nivoa  $a^1\Pi$  i  $a^1\Sigma$  molekula azota izmereni su u laboratoriji Kalifornijskog Univerziteta u San Diegu (University of California San Diego) (Marler i Surko, 2005). Ovdje se nećemo zadržavati na opisu eksperimenta, jer je sledeće poglavlje posvećeno eksperimentu koji funkcioniše na sličnom principu. Bitno je, međutim, da se istakne da se radi o apsolutnim merenjima preseka, od energije praga za odgovarajući proces do 90 eV. Prag za formiranje pozitronijuma je na energiji od  $E_{Ps} = 8.78$  eV, za direktnu jonizaciju  $E_I = 15.58$  eV i za elektronske ekscitacije  $E_{a^1\Pi} = 8.549$  eV i  $E_{a^1\Sigma} = 8.399$  eV. Interesantno je napomenuti da je presek za ekscitaciju  $a^1\Pi$  uporedivog intenziteta kao presek za formiranje pozitronijuma, kao i da se ovaj neelastični kanal interakcije otvara nešto ranije ( $E_{a^1\Pi} < E_{Ps}$ ). Pokazaće se da je ovo razlog za veliku efikasnost azota kao „bafer“ gasa u pozitronskim trapovima. U sudaru pozitrona i molekula azota mogu da se pobude samo singletna stanja, jer je osnovno stanje azota singletno. Isto važi i za molekul vodonika.

U konačni skup preseka uključeni su i preseki za vibracione prelaze između stanja  $0 \rightarrow 1$ ,  $0 \rightarrow 2$ ,  $0 \rightarrow 3$  i  $0 \rightarrow 4$ . Pragovi za ove procese nalaze se na jako niskim energijama, tako da je još uvek praktično nemoguće eksperimentalno izmeriti vibracione preseke. U ovom radu iskorišćeni su preseki izračunati *ab initio* (Gianturco i Mukherjee, 1997) korišćenjem BF-VCC (Body-Fixed Vibrational-Clouse-Coupling) aproksimacije. Ova aproksimacija daje

dobro slaganje sa eksperimentalnim rezultatima za  $N_2$  i  $H_2$  kada se primeni za računanje totalnog preseka (Gianturco i Mukherjee, 1997). Na Slici 3.2 se vidi da je presek za vibracioni prelaz  $0 \rightarrow 1$  daleko veći od preseka za ostale vibracione prelaze (preseci za prelaze  $0 \rightarrow 2$ ,  $0 \rightarrow 3$  i  $0 \rightarrow 4$  su pomnoženi sa 100 da bi se videli na Slici 3.2).

Presek za elastično rasejanje je dobijen tako što su od totalnog preseka oduzeti preseci za neelastična rasejanja (jonizacija, elektronske i vibracione ekscitacije) i presek za formiranje pozitronijuma.

Svi preseci su linearno ekstrapolirani do energije od 200 eV kako bi se pokrio opseg energija potreban za simulacije, ali za preciznije razmatranje procesa iznad 150 eV potrebna je bolja evaluacija preseka. U ovaj skup preseka nisu uključeni preseci za rotacione ekscitacije, pre svega jer imaju jako mali energijski gubitak. Još jedan razlog je nepostojanje merenih vrednosti ovih preseka, koji su inače indirektno uključeni u presek za prenos impulsa. Tek pri razmatranju termalizacije pozitrona rotacione ekscitacije su eksplicitno uključene u igru, a preseci su izračunati prema teoriji Gerjuoya i Steina (1955).



Slika 3.2 Kompletan skup preseka za interakciju pozitrona sa molekulskim azotom. Detalji su dati u tekstu.

### 3.3. VODONIK ( $H_2$ )

Skup preseka za transport pozitrona u molekulskom vodoniku nalazi se na Slici 3.3.

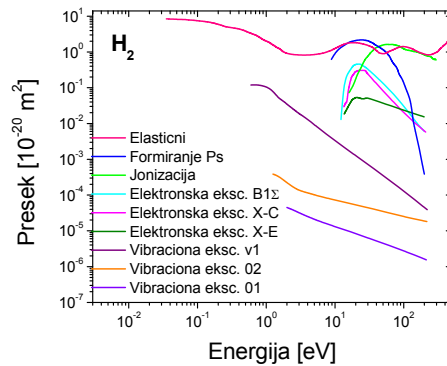
Totalni presek je izmeren na isti način kao i totalni presek za rasejanje pozitrona na molekulu azota (Hoffman *et al.*, 1982). Energijski opseg u kome su izvršena merenja je od 0.5 do 500 eV. Postignuto je dobro slaganje sa prethodnim eksperimentalnim (Coleman *et al.*, 1978; Charlton *et al.*, 1980) i teorijskim (Baille *et al.*, 1974; Hara, 1974) rezultatima. Procena greške usled gubitaka za rasejanje na malim uglovima je izvršena na osnovu proračuna diferencijalnih preseka (Hara, 1974).

Preseci za direktnu jonizaciju i formiranje pozitronijuma uzeti su iz eksperimenta Frommea i saradnika (Fromme *et al.*, 1988). Njihov metod se zasniva na detekciji jona  $H_2^+$  u korelaciji sa rasejanim pozitronima u *Time-Of-Flight* eksperimentu. Broj svih detektovanih jona je mera ukupnog preseka za jonizaciju (direktna jonizacija + formiranje pozitronijuma, a zanemarena je direktna anihilacija kao i disocijativna jonizacija), dok je broj jona koji su vremenski korelisani sa rasejanim pozitronima mera preseka za direktnu jonizaciju. Naime, prilikom formiranja pozitronijuma nastaje jon  $H_2^+$  i jedan pozitron nestaje iz sistema, tako da nastali jon nema sa čime da bude vremenski korelisani. Dobijeni preseci su relativni, a apsolutne vrednosti su dobijene tako što su merenja izvršena i na visokim energijama, na kojima je presek za formiranje pozitronijuma zanemarljiv. Tu je ukupan presek za jonizaciju molekula u sudarima sa pozitronima jednak preseku za jonizaciju u sudarima sa elektronima, a o ovom drugom preseku ima dosta podataka u literaturi, pa može da se iskoristi za normalizaciju rezultata.

Presek za elektronski prelaz molekula vodonika u sudarima sa pozitronima iz osnovnog u energijski najniže pobuđeno stanje,  $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow B^1\Sigma_u^+$  (X-B ekscitacija), izmeren je u laboratoriji u San Diegu (Sullivan *et al.*, 2001b). Moderna aparatura u kojoj se Penning-Malmberg-Surko zamka koristi za termalizaciju pozitrona i dobijanje uskog niskoenergijskog snopa pozitrona koristi karakteristike rasejanja pozitrona u jakom magnetskom polju za merenje apsolutnih vrednosti preseka za neelastično rasejanje pozitrona. Presek je izmeren u energijskom opsegu od 11.19 eV (prag za X-B ekscitaciju) do 30 eV. Preseci za dva naredna pobuđena stanja,  $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow E,F^1\Sigma_g^+$  i  $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow C^1\Pi_u$  (prelazi X-E i X-C) su preuzeti iz teorije (Arretche i Lima, 2006) jer nema pouzdanih eksperimentalnih rezultata.

Preseci za vibracione ekscitacije molekula vodonika u sudarima sa pozitronima takođe su dobijeni kombinovanjem eksperimentalnih i teorijskih rezultata. Presek za v1 vibracionu modu preuzet je iz eksperimenta laboratorije u San Diegu (Sullivan *et al.*, 2001a), dok su preseci za vibracione prelaze 02 i 03 preuzeti iz teorijskog rada Gianturca i Mukherjeea (2001).

Presek za elastične sudare je i u slučaju molekula vodonika dobijen oduzimanjem neelastičnih (jonizacija, elektronske i vibracione ekscitacije) i preseka za formiranje pozitronijuma od totalnog preseka.

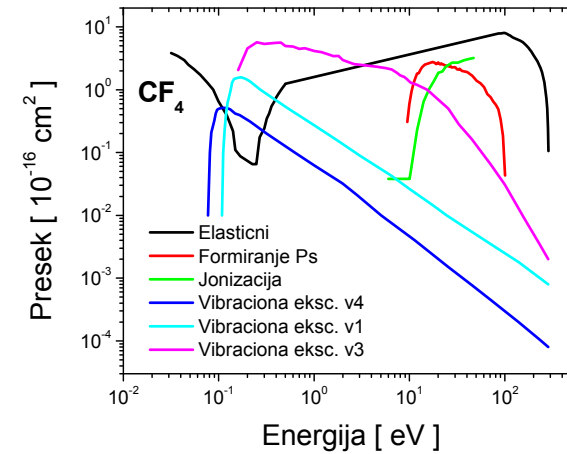


Slika 3.3 Kompletan skup preseka za interakciju pozitrona sa molekulskim vodonikom. Detalji su dati u tekstu.

Slično kao u slučaju azota, svi preseci su ekstrapolirani do 200 eV i preseci za rotacione ekscitacije nisu uključeni u osnovni skup.

### 3.4. CF<sub>4</sub>

Kompletan skup preseka za rasejanje pozitrona na molekulu CF<sub>4</sub> dat je na Slici 3.4. U skup su uključeni preseci za elastično rasejanje, neelastične procese (jonizacija i ekscitacije vibracionih nivoa) i presek za formiranje pozitronijuma.



Slika 3.4 Kompletan skup preseka za interakciju pozitrona sa molekulom CF<sub>4</sub>. Detalji su dati u tekstu.

Totalni presek je preuzet iz eksperimenta Makochekanwe i saradnika (2007). Presek je izmeren u opsegu energija od 0.2 do 1000 eV u *Time-of-Flight* eksperimentu. Ekstrapoliran je do 0 eV korišćenjem teorijskih proračuna (Nishimura i Gianturco, 2004).

Presek za formiranje pozitronijuma pri interakciji pozitrona sa molekulom CF<sub>4</sub> ne postoji u literaturi i iz tog razloga bili smo prinuđeni da koristimo presek za formiranje pozitronijuma kod Ar (Marler *et al.*, 2005), pomenen za razliku energija praga. Opravdanje smo našli u sličnosti preseka za direktnu jonizaciju kod ova dva gasa. Prag za formiranje pozitronijuma za CF<sub>4</sub> je na energiji  $E_{Ps} = 9.45$  eV (Makochekanwa *et al.*, 2007), dok je prag za isti proces kod Ar  $E_{Ps} = 8.955$  eV (Marler *et al.*, 2005), tako da smo na presek u Ar dodali razliku  $\Delta = 0.495$  eV.

Presek za jonizaciju molekula CF<sub>4</sub> u sudaru sa pozitronima uzet je iz eksperimenta Moxoma i saradnika (2000). U ovom eksperimentu prećena je šema fragmentacije molekula CF<sub>4</sub> na jone CF<sub>3</sub><sup>+</sup>, CF<sub>2</sub><sup>+</sup>, C<sup>+</sup> i CF<sub>3</sub><sup>2+</sup>. Utvrđeno je da je najzastupljeniji jon CF<sub>3</sub><sup>+</sup> (čak 70% na energiji od 47 eV), tako da smo presek za formiranje ovog jona iskoristili kao presek za

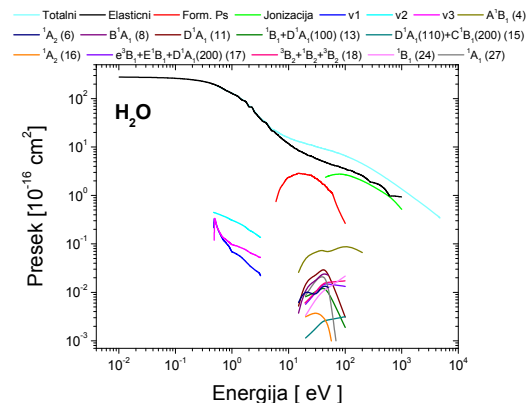
jonizaciju CF<sub>4</sub>. Presek je dat od energije praga do 50 eV. Interesantno je da pri sudarima sa pozitronima uopšte ne dolazi do formiranja CF<sub>4</sub><sup>+</sup> jona na posmatranim energijama.

U skup preseka koji opisuju interakciju pozitrona sa molekulima CF<sub>4</sub> gasa uključeni su još i preseki za tri od ukupno četiri vibraciona prelaza (Marler i Surko, 2005): v1 (E<sub>exc</sub> = 0,113 eV), v3 (E<sub>exc</sub> = 0,159 eV) i v4 (E<sub>exc</sub> = 0,078 eV). Vibraciona ekscitacija v2 (E<sub>exc</sub> = 0,054 eV) je izostavljena jer za nju nema eksperimentalnih, a ni teorijskih podataka. Ova vibraciona moda se nalazi na veoma niskim energijama koje su još uvek izvan dometa modernih eksperimenata (Marler i Surko, 2005). Presek za vibracionu ekscitaciju v3 uzet je iz eksperimenta laboratorije u San Diegu. Ista eksperimentalna postavka je iskorišćena za merenje vibracione mode v3 u sudarima molekula CF<sub>4</sub> i sa pozitronima i sa elektronima, sa neophodnim izmenama u delu za detekciju, čime je utvrđeno je da se preseki za elektrone i pozitrone jako malo razlikuju u posmatranom opsegu energija. Ovo su potvrdili i proračini bazirani na Bornovoj aproksimaciji. Preseci su izmereni u energijskom opsegu od 0.1 do 2 eV, pa je ekstrapolacija ka višim energijama izvršena pomoću preseka za ekscitaciju v3 mode u sudarima sa elektronima dobijenog „swarm“ analizom (Kurihara *et al.*, 2000). Interesantno je da je ovaj presek najveći do sada izmereni presek za vibracionu ekscitaciju indukovanu pozitronima. Upravo ovako veliki presek objašnjava činjenicu da je CF<sub>4</sub> veoma efikasan u hlađenju pozitrona u gasnim zamkama (*engl.* gas traps). Usled nedostatka eksperimentalnih rezultata za pozitrone, iz pomenutog rada Kuriharae i saradnika (2000) preuzeti su i preseki za elektronske ekscitacije v1 i v4 mode s tim što su uklonjene rezonance.

Elastični presek je dobijen kao i u slučaju vodonika i azota, oduzimanjem preseka za sve ostale procese od totalnog preseka.

### 3.5. VODENA PARA (H<sub>2</sub>O)

Na slici Slika 3.5 prikazan je skup preseka za interakciju pozitrona sa molekulima vode u vodenoj pari. Ponovo se radi o pažljivo sastavljenoj kompilaciji teorijskih i eksperimentalnih rezultata dostupnih u literaturi. Skup preseka je kompletan u smislu da obezbeđuje balans broja čestica, ukupne energije, impulsa.

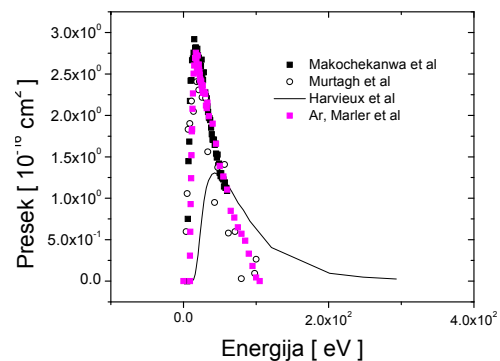


Slika 3.5 Kompletan skup preseka za interakciju pozitrona sa vodenom parom. Detalji su dati u tekstu.

Totalni presek za elastično rasejanje dobijen je oduzimanjem preseka za formiranje pozitronijuma, jonizacije, vibracionih i elektronskih ekscitacija od totalnog preseka za rasejanje pozitrona na molekulima vode u vodenoj pari. Totalni presek i presek za formiranje pozitronijuma su izmereni u laboratoriji Centra za proučavanje materije i antimaterije Australijskog Nacionalnog Univerziteta u Canberri, Australija (*engl.* Centre for Antimatter-Matter Studies, Australian National University, Canberra, Australia) (Makochekanwa *et al.*, 2009). Više detalja o ovom eksperimentu i o samim rezultatima biće dato u narednom poglavlju. Totalni presek je izmeren u intervalu energija od 0.5 do 60 eV, pa je ekstrapoliran ka višim energijama korišćenjem teorijskih rezultata (Baluja i Jain, 1992) normalizovanih na australijska merenja. Izmereni presek je korigovan za gubitke na malim uglovima korišćenjem teorijski proračunatih diferencijalnih preseka za rasejanje pozitrona na molekulu vode (Tennyson, 2009). Presek za formiranje pozitronijuma je izmeren od energije praga za ovaj proces (5.821 eV) do 60 eV, pa je ekstrapoliran ka višim energijama korišćenjem rezultata Murtagha i saradnika (Murtagh *et al.*, 2006).

Presek za direktnu jonizaciju je preuzet iz teorijskog rada Tótha i saradnika (2010). Ovo je jedini publikovani rezultat za presek za jonizaciju u vodi trenutno dostupan. Presek je izračunat korišćenjem tri modela, pa je bilo neophodno na neki način odabrati jedan od njih. Prvi pristup (CPE) koristi Coulombovske i ravne talase u celom opsegu energija, a druga dva

spadaju u modele sa *distorted wave* Born aproksimacijom (DWBA), s tim što jedan koristi electron screening (ES) a drugi total screening (TS) pristup. U prethodnim radovima istih autora (Tóth et al, 2009; 2006; Campeanu, 2009) sve tri teorije su korišćene za proračun preseka za jonizaciju za spektar drugih molekula i najbolje slaganje sa eksperimentom u većini slučajeva dao je ES model, tako da smo se i ovde odlučili za korišćenje tog modela. Još jedan argument u prilog ES modela je činjenica da je presek za jonizaciju molekula vode u sudaru sa pozitronima dobijen pomoću ovog modela jako sličan po obliku, veličini i položaju maksimuma sa presekom za jonizaciju u argonu (Marler et al., 2005). Ovo je u skladu sa očekivanjima jer su preseci za formiranje pozitronijuma u vodi i argonu takode jako slični po obliku i veličini (Slika 3.6).



Slika 3.6 Poređenje između preseka za formiranje Ps u argonu (Marler et al., 2005) i vodi (Makochekanwa et al., 2009; Murtagh et al., 2006; Harvieux et al., 2006).

Preseci za vibracione ekscitacije su dobijeni teorijski korišćenjem BF-VCC modela (Nishimura i Gianturco, 2005). U literaturi nema podataka za preseke za ekscitacije elektronskih nivoa molekula vode u sudaru sa pozitronima, tako da smo bili prinuđeni da koristimo rezultate za elektrone. Kako je osnovno stanje molekula vode singletno, pozitroni ne mogu da pobude tripletne nivoe, pa su uzeti eksperimentalno dobijeni preseci za ekscitaciju singletnih nivoa u interakciji sa elektronima (Thorn et al., 2009), pri čemu su „ispeglane“ rezonance.

## 4. MERENJE TOTALNOG PRESEKA I PRESEKA ZA FORMIRANJE PS U INTERAKCIJI POZITRONA SA VODENOM PAROM

Priča o pozitronima počinje 1928. godine kada je Dirac, pokušavajući da objasni Zeemanov efekat, formulisao jednačinu, danas poznatu kao Dirakova jednačina, objedinivši kvantnu mehaniku, specijalnu relativnost i koncept spina (Dirac, 1928). Rešenja ove jednačine dozvoljavaju elektronima da imaju i pozitivnu i negativnu kinetičku energiju. Rešenja jednačine sa pozitivnom energijom su dobro opisala eksperimentalne rezultate, ali je Dirac ostao zbunjen pred činjenicom da matematički model podjednako dozvoljava postojanje rešenja sa negativnom energijom. Ova rešenja nisu mogla jednostavno da se zanemare kao u klasičnoj mehanici i implicirala su mogućnost da elektron spontano prelazi iz stanja pozitivne u stanje negativne energije, što eksperimentalno nikada nije primećeno. U decembru 1929. godine Dirac objavljuje još jedan rad (Dirac, 1930) u kome predlaže objašnjenje prirode neizbežnih rešenja sa negativnom energijom za relativistički elektron. On kaže da se elektron sa negativom energijom kreće u spoljašnjem elektromagnetskom polju kao da nosi pozitivno naelektrisanje. Dalje ukazuje da prostor može da se shvati kao “more” stanja sa negativnom energijom koja su popunjena, tako da elektroni ne mogu spontano da prelaze iz stanja sa pozitivnom energijom (negativno naelektrisanje) u stanja sa negativnom energijom (pozitivno naelektrisanje). Takođe, uveo je pretpostavku da je elektron sa pozitivnim naelektrisanjem i

negativnim energijskim rešenjem zapravo proton, koji bi u "moru" negativno-energijskih stanja predstavljao ostrvo. Naglasio je, ipak, da mnogo veća masa protona u odnosu na elektron predstavlja problem u njegovoj teoriji, ali je izrazio nadu da će neka buduća detaljnija teorija razrešiti ovu poteškoću. Jedan od najvećih protivnika Diracove ideje da je proton elektron sa negativnom energijom bio je Oppenheimer, koji je istakao da bi, u slučaju da je Dirac u pravu, srednje vreme života postojeće materije bilo  $\sim 10^{10}$  s (Oppenheimer, 1930a; 1930b). Podstaknut Oppenheimerovim argumentima, 1931. godine Dirac publikuje rad (Dirac, 1931) u kome postulira postojanje još neotkrivene čestice koju naziva "anti - elektron" koja ima masu elektrona i koja se zajedno sa elektronom anihilira u međusobnom kontaktu.

Pozitron je prvi put zvanično eksperimentalno detektovan 2. avgusta 1932. godine (Anderson, 1933) i za ovo otkriće Carl D. Anderson je 1936. godine dobio Nobelovu nagradu za fiziku. Anderson je otkrio pozitron snimajući tragove kosmičkih zraka koji prolaze kroz Wilsonovu komoru. Komora se nalazila u magnetskom polju tako da su čestice različitog znaka naelektrisanja skretale u suprotnim pravcima. Krivina jonskih tragova koje su pozitroni ostavljali odgovarala je odnosu mase i naelektrisanja elektrona, ali je pravac skretanja govorio da se radi o čestici sa pozitivnim naelektrisanjem. Kasnije se ispostavilo da je pozitron zapravo primećen još 1929. godine od strane Dmitrija Skobeltsyna, koji je koristeći Wilsonovu komoru pokušavao da detektuje gama zrake u kosmičkom zračenju. Iste godine je i Chung – Yao Chao, student sa Caltecha primetio čudne rezultate koji su ukazivali na prisustvo čestice koja se ponaša kao elektron sa naelektrisanjem suprotnog znaka, ali ti rezultati nisu bili pouzdani, pa istraživanje u tom pravcu nije nastavljeno.

U ovom poglavlju ćemo navesti neke bitne momente u istoriji eksperimentalnog izučavanja interakcije pozitrona sa gasovima. Počev od prvih dana pozitronske fizike, veliku prepreku eksperimentalnom izučavanju interakcija pozitrona sa materijom predstavljala je činjenica da se u laboratoriji oni mogu dobiti samo radioaktivnim raspadom određenih jezgara ili u akceleratorima elektrona kreiranjem parova. Istraživači su morali da budu izuzetno kreativni da bi korišćenjem jako ograničenih eksperimentalnih tehnika i uz podršku teorije izvukli što više informacija o proučavanom sistemu. Tako je jedini način da se dođe do eksperimentalnih informacija o detaljima interakcije pozitrona sa materijom bio korišćenje sistema u kojima se pozitroni emitovani iz radioaktivnog izvora zaustavljaju direktno u gasu koji se izučava. Tipične gustine gasa bile su reda Amagata ( $1 \text{ Amagat} = 2.69 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$ ) i to je

bilo dovoljno za dobijanje merljivog signala usled zaustavljanja i anihilacije pozitrona u gasu. Uglavnom je praćena anihilacija pa su odatle dobijani podaci od interesa. Neke od proučavanih problema treba posebno istaći (Charlton, 2009).

**Određivanje vremena života pozitrona u gasovima:** Spektar vremena života pozitrona određuje se merenjem vremenskog intervala između emisije pozitrona iz radioaktivnog izvora i njegove anihilacije u gasu. Detektuju se dva gama zraka, prvi koji prati beta raspad  $^{22}\text{Na}$  i potiče iz jezgra natrijuma (energije 1.274 MeV) i drugi, koji nastaje u anihilaciji pozitrona u gasu (511 keV) i koji predstavlja stop – signal za merenje vremena. Gama zraci se detektuju pomoću para scintilacionih brojača pravilno postavljenih izvan komore sa gasom i radioaktivnim izvorom. U spektru vremena života od interesa je samo komponenta koja potiče od anihilacije slobodnih pozitrona (bez prethodnog formiranja Ps),  $S_f(t)$ . Iz ove komponente spektra vremena života može da se dobije frekvencija anihilacije slobodnih pozitrona,  $\lambda_f(t)$  kao:

$$\lambda_f(t) = \frac{S_f(t)}{\int_0^t S_f(t) dt} = \omega \rho Z_{eff}(t), \quad (4.1.1)$$

gde je  $\omega \rho$  Dirakova frekvencija anihilacije za gas slobodnih elektrona koncentracije  $\rho$ , a  $Z_{eff}(t)$  vremenski zavisani efektivni broj elektrona po atomu/molekulu gasa koji mogu da se anihiliraju sa pozitronom. Ovaj parametar je povezan sa brzinom čestica, odnosno može se reći da  $Z_{eff}$  zavisi od energije,  $\varepsilon$ :

$$Z_{eff}(t) = \frac{\int_0^\infty Z_{eff}(\varepsilon) f(\varepsilon, t) dt}{\int_0^\infty f(\varepsilon, t) dt}, \quad (4.1.2)$$

gde je  $f(\varepsilon, t)$  vremenski zavisna raspodela pozitrona po energijama. U stanju ravnoteže  $Z_{eff}$  je konstanta usrednjena po energijskoj raspodeli pozitrona tako da je izmerena frekvencija anihilacije:

$$\lambda_f = \omega \rho Z_{eff} = 0.201 \rho Z_{eff} (\mu\text{s}^{-1}) \quad (4.1.3)$$

Gustina gasa je data u Amagatima.

Analiza spektra vremena života pozitrona je dugo vremena bila jedini način za određivanje preseka za interakciju pozitrona sa materijom. Konkretno, ponašanje  $Z_{eff}(t)$  kod



plemenitih gasova je bilo predmet mnogih istraživanja. Primer je interesantna studija (Canter i Heyland, 1974), gde je poređenjem spektra vremena života pozitrona u argonu na sobnoj temperaturi i znatno nižoj temperaturi (~ 100 K) utvrđeno da presek za prenos impulsa na niskim energijama poseduje Ramsauerov minimum. Ovo je kasnije potvrđeno korišćenjem niskoenergijskih pozitronskih snopova (Kauppila *et al.*, 1976). Kod molekulskih gasova prisustvo ekscitovanih rotacionih i vibracionih nivoa na energijama ispod 1 eV znatno komplikuje situaciju. Karakteristična vremena za pozitrone u molekulskim gasovima su suviše kratka, pa je u spektru života teško uočiti netermalne efekte. Izuzetak predstavlja N<sub>2</sub> koji je detaljno proučen (Coleman *et al.*, 1981). Paul i Leung (1968) su predložili metod određivanja vremena termalizacije za molekulske gasove u kome se u smeši argona i male količine gasa od interesa prati ponašanje karakterističnog dela spektra koji potiče od interakcije sa argonom. Najskorija studija koja koristi ovu tehniku (Al-Qaradawi *et al.*, 2000) dala je vremena termalizacije za veliki broj molekula, među kojima je i SF<sub>6</sub>, sa jednim od najkraćih vremena termalizacije pozitrona.

**Tehnike za merenje Dopplerovog širenja:** U sistemu reference u kome centar mase pozitron – elektron para miruje, dva gama zraka koja nastaju u anihilaciji imaju energiju od po 511 keV i emituju se u suprotnim pravcima, tj. ugao između njihovih pravaca je  $\pi$  radijana. Međutim, kako se posmatrano iz laboratorijskog sistema reference centar mase kreće, u energijama gama zraka izmerenih u laboratoriji detektuje se Dopplerov pomak i ugao između ova dva zraka više nije  $\pi$ . Kako pri usporavanju u materiji većina pozitrona termalizuje pre nego što dođe do anihilacije, impuls koji ima centar mase para elektron – pozitron je pre svega određen impulsom elektrona. Ovo su prvi primetili DeBenedetti i saradnici (1949). Pomeraj u odnosu na energiju od 511 keV je dat kao:

$$\Delta E_\gamma = mc v_{cm} \cos \varphi, \quad (4.1.4)$$

gde je  $v_{cm}$  brzina centra mase a  $\varphi$  predstavlja ugao između pravca kretanja centra mase para elektron – pozitron i jednog od emitovanih gama zraka. Tipična vrednost  $\Delta E_\gamma \approx 1.2$  keV, što je uporedivo sa energijskom rezolucijom komercijalnih germanijumskih detektora gama zračenja koji se samim tim koriste za merenje Dopplerovog širenja gama zraka nastalih anihilacijom elektrona i pozitrona. Više o detaljima tipičnih eksperimentalnih postavki može da se nađe u (Charlton i Humberston, 2000) i tamo navedenim referencama. Ova tehnika je u širokoj upotrebi u fizici čvrstog stanja, gde u većini slučajeva geometrija eksperimenta i

slučajna raspodela pravaca kretanja elektron – pozitron parova daju kontinualnu raspodelu ugla  $\varphi$ .

**Ekperimenti sa rojevima (engl. swarm experiments):** Istorijski, bilo je nekoliko pokušaja da se direktno izmere brzine drifta pozitrona u različitim gasovima. Najveći problem u ovim eksperimentima bio je da se korišćenjem sistema u kojima su pozitroni dobijeni direktno iz radioaktivnih izvora dobiju dovoljne velike dužine drifta i dovoljna vremena za računanje brzine drifta  $w$ . U principu, korišćena su dva pristupa, takozvani Paulov metod (Paul i Tsai, 1979; Paul i Böse, 1982) i Charltonov metod (Charlton, 1985b; Charlton i Laricchia, 1986).

U tipičnoj eksperimentalnoj postavci koja koristi Paulov metod pozitroni nastaju raspadom <sup>58</sup>Co i konfiriraju se pomoću magnetskog polja jačine 0.12T duž ose driftne cevi dužine 4 cm. Mali deo pozitrona iz izvora termalizuje u sudarima sa gasom na pritisku od 100 Torr ili nižem (gustina gasa je reda 0.1 Amagat) i njihovo kretanje kroz gas se zaustavlja na polovini cevi ( $l_{max} = 2$  cm) postavljanjem tanke folije na kojoj se pozitroni anihiliraju, a anihilacija se prati pomoću dva detektora gama zraka u koincidenciji. Kao rezultat ovog eksperimenta dobija se onaj deo pozitrona  $F_d$  koji se nakon termalizacije u gasu zaustavlja na foliji, u funkciji redukovanog električnog polja. Ova veličina je funkcija brzine drifta pozitrona  $w$  i efektivnog naelektrisanja atoma (molekula)  $Z_{eff}$  ( $F_d \sim w/Z_{eff}$ ), tako da iz nje može da se izvuče informacija o brzini drifta  $w$ . Izmerena brzina drifta pozitrona u vodoniku opada sa porastom električnog polja u energijskoj zoni u kojoj je formiranje Ps dozvoljen proces (Paul i Tsai, 1979). Ovaj efekat opadanja brzine drifta sa porastom električnog polja poznat je kao negativna diferencijalna provodnost ili NDC i o njemu će biti više reči u poglavljima 5 i 6.

U eksperimentu Charltonovog tipa koristi se tanki plastični scintilator zajedno sa driftnom cevi dužine ~ 1 cm, koja ujedno predstavlja i komoru sa gasom. Detektor gama zračenja se koristi za praćenje anihilacije pozitrona u komori. Kada se uključi električno polje, neki pozitroni se anihiliraju ranije u odnosu na slučaj kada nema polja, driftujući ka jednoj od elektroda. Komponenta spektra vremena života pozitrona koja potiče od direktne anihilacije slobodnih pozitrona (bez prethodnog formiranja Ps) će samim tim zavisiti od primenjenog polja, i izgubiće se posle karakterističnog vremena  $\tau_{md}$ , koje predstavlja maksimalno vreme drifta. Vreme  $\tau_{md}$  može da se odredi iz spektra života pozitrona. Ako je dužina  $l_d$  dužina komore, brzina drifta pozitrona može da se dobije kao  $w = l_d/\tau_{md}$ , pa se

mobilnost pozitrona dobija kao  $\mu_+ = l_d/\tau_{md}E$ , gde je  $E$  intenzitet primenjenog električnog polja.

Jedan od najvećih problema sa kojima su se suočavali eksperimentalci pri proučavanju interakcija pozitrona sa gasom bio je nemogućnost kontrolisanja pojedinačnih sudarnih procesa, pre svega energije sudara i kanala interakcije, odnosno izbora produkta interakcije. Ove poteškoće su od sedamdesetih godina prošlog veka, pa na ovamo polako prevazilazene razvojem tehnika sa niskoenergijskim pozitronskim snopovima. Ove tehnike su otkrivale sve više detalja o interakciji pozitrona sa različitim atomima i molekulima na sve nižim energijama i kao posledica toga interesovanje za fiziku rojeva pozitrona počelo je da bleđi. Danas je svega par grupa u svetu kompetentno u ovoj oblasti. Tehnike koje koriste snopove niskoenergijskih pozitrona primenjuju se u mnogim oblastima, počev od fundamentalne atomske fizike, pa do fizike materijala. Poglavlje 4.1 ove disertacije bavi se detaljnije razvojem ovih tehnika, dok je u poglavlju 4.2 opisana eksperimentalna postavka u Laboratoriji Centra za izučavanje materije i antimaterije Australijskog nacionalnog univerziteta u Canberri (*engl.* Centre for Antimatter – Matter Studies, Australian National University, Canberra, u daljem tekstu CAMS) na kojoj su izmereni totalni presek i presek za formiranje pozitronijuma pri interakciji pozitrona sa vodenom parom. Rezultati kao i opis metode određivanja preseka dati su u poglavlju 4.3.

## 4.1. RAZVOJ EKSPERIMENATA SA NISKOENERGIJSKIM

### SNOPOVIMA POZITRONA

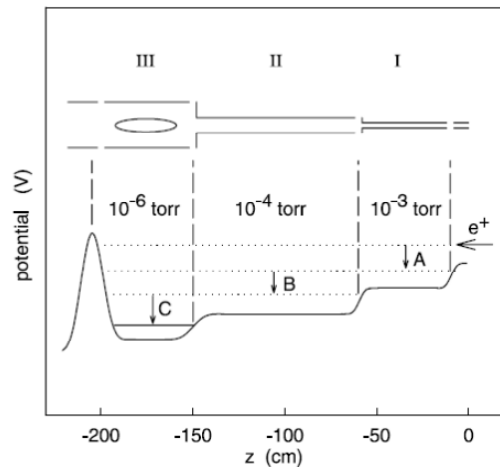
Prvi korak ka pozitronskim snopovima bilo je otkriće moderatora (Canter *et al.*, 1972), materijala koji kada se adekvatno tretiraju reemituju pozitrone energije reda eV. Mehanizmi koji su odgovorni za ovaj efekat (Shultz i Lynn, 1988) su ili emisija sa površine materijala nakon termalizacije kao kod metalnih moderatora (npr. volframa) koji imaju negativnu radnu funkciju za pozitrone ili emisija pozitrona sa epitermalnim energijama iz materijala sa pozitivnom radnom funkcijom, kao što je smrznuti (kristalni) neon. Smrznuti neon je trenutno najefikasniji moderator pozitrona, a otkrili su ga Mills i saradnici (Mills, 1983; Mills i Gullikson, 1986) sistematskim izučavanjem emisije i reemisije pozitrona sa različitim površina pažljivo pripremljenih u uslovima visokog vakuuma. Efikasnost konverzije  $\beta^+$  čestica u spore pozitrone u vakuumu je oko 1%, što znači da je sa  $^{22}\text{Na}$  kao izvorom

tipične aktivnosti reda GBq, korišćenjem čvrstog neona kao moderatora, moguće dobiti pozitronski snop intenziteta reda nekoliko miliona čestica u sekundi.

Kada se spori pozitroni emituju u vakuum koji okružuje moderator, njima lako može da se manipuliše, odnosno da se formira snop i transportuje dalje iz zone u kojoj se nalazi izvor. U tom cilju je razvijeno više metoda, ali u osnovi one mogu da se podele u dve grupe: one u kojima se koristi magnetsko polje (Zafar *et al.*, 1992) i one koje koriste električno polje (Canter, 1986; Canter *et al.*, 1986; 1987). Takođe postoje i snopovi kod kojih se koristi i električno i magnetsko polje: električno polje služi za ekstrakciju i fokusiranje snopa, dok se on dalje transportuje pomoću magnetskog polja. Postoji više metoda za sakupljanje pozitrona u visokom vakuumu (detaljnije u (Holzscheiter *et al.*, 2004)), ali ćemo se ovde zadržati na opisu pozitronske zamke ispunjene gasom (*engl.* buffer gas trap). Korišćenje zamke sa gasom u magnetskom polju za skladištenje i hlađenje pozitrona, a zatim pravljenje pulsnih pozitronskih snopova dovelo je do revolucije u polju pozitronske atomske fizike. Ovu tehniku za zarobljavanje pozitrona razvio je Surko sa saradnicima (Surko *et al.*, 1988; Greaves *et al.*, 1994; Murphy i Surko, 1992). Po prvi put je postalo moguće detaljno proučavanje pojedinačnih kanala interakcije pri rasejanju pozitrona. Inetresantan istorijski prikaz ovog otkrića dat je u (Surko, 2006).

Na slici 4.1 prikazana je elementarna šema Surkove pozitronske zamke. Ova zamka je zapravo modifikovana Penning – Malmberg pozitronska zamka, sastavljena iz tri dela koja čine elektrode različitih prečnika. Pozitroni emitovani iz radioaktivnog izvora prolaze kroz moderator i vodeni magnetskim poljem ulaze u zamku. Magnetsko polje u kome se nalazi izvor je 6 puta manje od magnetskog polja u zamci, tako da je pozitronski snop koji ulazi u zamku uži od snopa koji izlazi iz moderatora. Pozitroni prolaze kroz zonu visokog pritiska (I na slici 4.1) u prvom delu zamke, koji se održava konstantnim upumpavanjem azota u zamku. U ovom delu zamke pozitroni gube deo svoje kinetičke energije u neelastičnim sudarima (A na slici 4.1) sa molekulima azota, nastavljaju da se sudaraju sa molekulima gasa u zonama I i II, gube kinetičku energiju i konačno bivaju zarobljeni u zoni III u kojoj se diferencijalnim pumpanjem održava znatno niži pritisak. Pritisaci u zamci su tako odabrani da B–prelazi traju manje od 100  $\mu\text{s}$ , a C–prelazi svega nekoliko ms. U zamci se za zarobljavanje pozitrona koristi azot jer je presek za elektronsku ekscitaciju stanja  $a^1\Pi$  jako veliki u okolini praga. Dodatno, prag za ekscitaciju  $a^1\Pi$  stanja je na nižoj energiji od praga za formiranje Ps, tako da manje pozitrona ima šansu da formira Ps i nestane iz zamke. U poslednjem delu zamke

pozitroni se dodatno hlade, vibraciono i rotaciono ekscitujući molekule CF<sub>4</sub> i N<sub>2</sub>. Mala količina CF<sub>4</sub> se dodaje u poslednji deo zamke jer N<sub>2</sub> ispod određene energije više ne može sam dovoljno da ohladi pozitrone, dok CF<sub>4</sub> ima velike preseke za vibracione ekscitacije baš na potrebnim energijama.



Slika 4.1 Šematski dijagram pozitronske zamke sa gasom na kome je dat elektrostatički potencijal i tri faze diferencijalnog pumpanja.

Dodatno poboljšanje pozitronskog snopa koji se dobija korišćenjem Surkove pozitronske zamke sa gasom može da se ostvari korišćenjem rotirajućeg polja (Greaves i Surko, 2002). Jedna od elektroda u trećem delu zamke je segmentirana i rotirajuće polje se generiše primenom fazno pomeranih sinusnih talasa na ovu elektrodu. Ovaj metod koji služi za dodatno konfiniranje zarobljenog oblaka pozitrona preuzet je iz eksperimenata sa čisto elektronskom plazmom. Kompletно fizičko objašnjenje koje stoji u pozadini ovog procesa za konfiniranje pozitrona još uvek nije sasvim jasno, ali se zna da je neophodno da u zoni primenjenog polja postoji dodatni mehanizam hlađenja. U tu svrhu se u zamku dodaju gasovi koji imaju velike preseke za vibracione ekscitacije na niskim energijama, kao što su CF<sub>4</sub>, SF<sub>6</sub> ili CO.

Danas se u više laboratorija širom sveta u različitim eksperimentima sa pozitronima koriste zamke razvijene na bazi Surkove zamke. Tako se na primer Surkova trodelna zamka

koristi u CERNu u okviru ATHENA/ALPHA kolaboracije za formiranje antivodonika (Amoretti *et al.*, 2002; Jørgensen *et al.*, 2001; 2005). Cassidy i Mills sa Kalifornijskog univerziteta u Riversideu (*engl.* University of California, Riverside) u svojim eksperimentima koriste modifikovanu Surkovu zamku u kojoj se treća faza nalazi u odvojenoj vakuumskoj komori (Cassidy *et al.*, 2006). U upotrebi su i zamke sastavljene iz samo dve faze. Jednu od njih koriste van der Werf i Charlton sa Swansea Univerziteta (*engl.* Swansea University) (Clarke *et al.*, 2006), dok grupa profesora Buckmana sa Australijskog Nacionalnog Univerziteta (*engl.* Australian National University) takođe koristi zamku iz dve faze u sklopu aparature specijalizovane za merenje preseka za sudare pozitrona sa materijom za potrebe atomske fizike (Sullivan *et al.*, 2008a).

U narednom poglavlju detaljno je opisana aparatura za merenje preseka Centra za proučavanje materije i antimaterije Australijskog nacionalnog Univerziteta u Canberri, jer su korišćenjem te eksperimentalne postavke izmereni totalni presek i presek za formiranje Ps pri interakciji pozitrona sa vodenom parom (Makochekanwa *et al.*, 2009). Ovi preseki su kasnije inkorporirani u set preseka korišćen za računanje transportnih koeficijenata pozitrona u vodenoj pari.

## 4.2. OPIS APARATURE

Totalni presek i presek za formiranje pozitronijuma pri sudaru pozitrona sa molekulima vode u stanju vodene pare izmereni su u Laboratoriji Centra za proučavanje materije i antimaterije Australijskog Nacionalnog Univerziteta u Canberri, Australia (*engl.* Centre for Antimatter Matter Studies, Australian National University, Canberra, Australia, u daljem tekstu CAMS). Ovaj eksperimentalna postavka predstavlja jedan od više eksperimenata izgrađenih na bazi seme razvijene u Laboratoriji u San Diegu, ali je prvi koji je specijalizovan za merenje preseka i ima nekoliko novih elemenata u dizajnu i načinu funkcionisanja uvedenih radi optimizacije baš za ovu svrhu.

Eksperiment je dizajniran da iskoristi prednosti tehnike prikupljanja i rasejanja pozitrona u jakom magnetskom polju i da ih primeni za fundamentalna merenja preseka za rasejanja (Sullivan *et al.*, 2008a). Modernisani <sup>22</sup>Na izvor pozitrona daje inicijalni snop niskoenergijskih pozitrona koji su magnetskim poljem konfinirani u radialnom pravcu i

usmereni u zamku (*engl.* trap) Surko tipa (Murphy i Surko, 1992). Pozitroni se u zamci hlade do sobne temperature pre nego što se oslobode kao pozitronski snop velike rezolucije. Nakon interakcije sa ispitivanim gasom analizira se energijska raspodela snopa i računaju preseki za rasejanja. Eksperimentalna postavka se sastoji iz više delova. Prvi celinu čine izvor i moderator, zatim sledi zamka za pozitrone, komora za rasejanja i konačno sistem za detekciju (Sullivan *et al.*, 2008a).

#### 4.2.1. IZVOR I MODERATOR

Izvor pozitrona je radioaktivni  $^{22}\text{Na}$  koji je smešten na specijalnom postolju (*engl.* cold head) koje se nalazi na temperaturi od oko 6 K, a kao moderator se koristi neon u čvrstom stanju. Oko izvora se nalazi primarna zaštita od visoko energijskih gama zraka (1.27 MeV) napravljena od elkonita (vrsta legure volframa i bakra). Ova zaštita čini deo postolja na kome se nalazi izvor. Izvor i njegovo postolje se nalaze izolovani u vakuumu u cilindričnoj posudi obloženoj olovom, koje obezbeđuje dodatnu zaštitu od gama zračenja. Vakuum se ostvaruje pomoću turbo molekularne pumpe (60 l/s) i jonske pumpe (100 l/s). Indikator stanja moderatora je struja niskoenergijskih pozitrona ( $\sim 0.5 - 1$  pA, energijska širina snopa iznosi oko 1.5 eV), koja u uslovima visokog vakuuma opada frekvencom od 10% na dan, tako da s vremena na vreme moderator mora da se obnavlja. Duž vakuumske komore sa izvorom nalazi se solenoid koji daje magnetsko polje od približno 80 G i koji usmerava moderisane pozitrone ka sledećem delu aparature. Inicijalna energija pozitronskog snopa se definiše spolja tako što se moderatoru daje proizvoljni potencijal maksimalne vrednosti 100 eV. Izvor jačine 50 mCi u kombinaciji sa neonskim moderatorom daje fluks od  $10 \cdot 10^{16}$  pozitrona u sekundi (snaga izvora pri kojoj su obavljena merenja na vodenoj pari bila je 25 mCi).

#### 4.2.2. POZITRONSKA ZAMKA

Pozitroni se iz moderatora usmeravaju dalje ka zamci. Zamka se nalazi u uniformnom magnetskom polju od  $\sim 500$  G (greška manja od 5%) i sastoji se od devet elektroda različitih dužina i dijametara. Šematski prikaz dat je na Slici 4.2. Prve tri elektrode imaju unutrašnje prečnike od 1 cm i dužine 2, 6 i 6 cm, respektivno. Ove elektrode su razdvojene izolatorom koji čini deo spoljašnjeg cilindra. Elektrode 4 – 8 su geometrijski identične, imaju unutrašnji

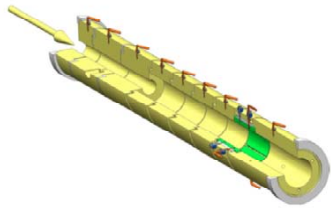
dijametar od 2 cm i svaka je dužine 3 cm. Jedna od ovih elektroda je segmentirana da bi kasnije moglo da se implementira rotirajuće električno polje (*engl.* rotating wall), koje treba da radialno kompresuje ohlađeni oblak pozitrona (Greaves i Moxom, 2008). Položaj segmentirane elektrode u zamci može da se menja u zavisnosti od željene konfiguracije. Poslednja, deveta elektroda, ima unutrašnji prečnik 2 cm i dužinu 6 cm. Poslednjih šest elektroda su takođe međusobno razdvojene izolatorom, ali za razliku od prve tri ne čine kompaktnu celinu već mogu da se razdvoje. Ceo sistem elektroda se nalazi u cilindričnoj komori.

Azot se upumpava direktno u užu deo zamke (elektrode 1 - 3) pod pritiskom od oko 1 mTorr i difunduje u širi deo (elektrode 4 - 9). Pritisak u širem delu zamke je otprilike za red veličine niži od pritiska u užem delu.  $\text{CF}_4$  se upumpava sa suprotne strane, u širi deo cilindra, pod pritiskom od oko 0.01 mTorr. Pozitroni se u sudarima sa molekulima ova dva gasa hlade i ostaju zarobljeni u krajnjem delu zamke. Pritisak u poslednjem segmentu zamke je dosta viši od pritiska u tipičnoj zamci Surko tipa koja se sastoji iz tri faze i to za rezultat ima dosta kraće vreme života zarobljenih pozitrona. Ovo ne predstavlja poteškoću, jer cilj ove eksperimentalne postavke nije da se pozitroni zadrže što duže u zamci, već da se akumuliraju i odmah iskoriste za merenje sudarnih procesa u gasu od interesa. Prema tome, ova eksperimentalna postavka radi u modu brzih ciklusa, o čemu će još biti reči.

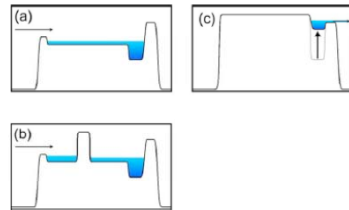
Upumpavanje gasa se vrši pomoću dve turbo molekularne pumpe (520 l/s), koje se nalaze na suprotnim krajevima zamke. Kada je zamka u radnom režimu, cevi za diferencijalno pumpanje koje se nalaze između zamke i pumpi, redukuju pritisak na krajevima zamke. Na ovaj način se na ulazu u zamku redukuje kontaminacija Ne moderatora azotom iz zamke. Pritisak u zamci bez gasa je manji od  $3 \cdot 10^{-10}$  Torr, a kada je eksperiment u radnom režimu i zamka ispunjena gasom, ovaj pritisak je  $8.5 \cdot 10^{-7}$  Torr na ulazu i  $7.9 \cdot 10^{-6}$  Torr na izlazu iz zamke. Električni potencijal se na elektrode dovodi kombinacijom 16-to bitnog digitalno-analognog konvertera i brzih visokonaponskih pojačavača, što omogućava da ceo eksperiment bude pod kontrolom računara.

Zamka radi u modu brzih ciklusa (frekvencija  $\sim 300$  Hz) da bi se kompenzovalo kratko vreme života zarobljenih pozitrona i da bi broj pozitrona ( $\sim 10^3$ ) u svakom ciklusu ostao relativno nizak u cilju izbegavanja saturacije uređaja za detekciju. Jedan tipičan ciklus se sastoji iz tri faze: faza punjenja, faza hlađenja u kojoj se pozitroni interaguju sa gasom u

zamci i faza izbacivanja pozitrona iz zamke pre početka novog ciklusa. Ove tri faze su ilustrovane na slici 4.3 (a) – (c), redom. Zamka funkcioniše tako da je u fazi hlađenja i izbacivanja i dalje dozvoljeno da se pozitroni skupljaju u prvoj zoni zamke, čime je povećana efikasnost.



**Slika 4.2:** Šematski prikaz elektroda u zamci. Strelica pokazuje smer kretanja pozitronskog snopa.



**Slika 4.3:** Šematski prikaz potencijala na elektrodama za tri režima rada zamke: a) faza zarobljavanja, b) faza hlađenja i c) faza izbacivanja pozitrona iz zamke. Horizontalne strelice pokazuju smer pozitronskog snopa u zamci a, dok je punim linijama prikazan potencijal na elektrodama. Plavom bojom prikazani zarobljeni pozitroni.

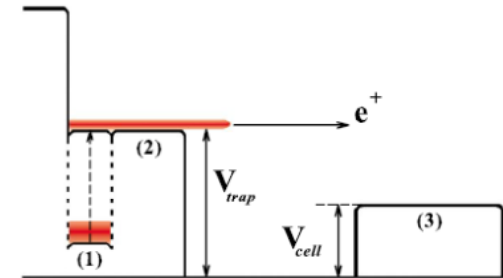
Tok pozitrona kroz zamku određuju dva ključna parametra: broj pozitrona sa željenom energijom iz moderisanog snopa koji dolaze u zamku (oni mogu da budu zarobljeni) i efikasnost zarobljavanja. Broj pozitrona koji mogu da se zarobe određen je odnosom magnetskog polja moderatora i polja na prvoj elektrodi zamke. Ovo je posledica činjenice da se energija naelektrisanih čestica u magnetskom polju deli na perpendikularnu i paralelnu komponentu,  $E_{\perp}$  i  $E_{\parallel}$ , respektivno. Cilindrične elektrode sa osama paralelnim pravcu magnetskog polja utičaće samo na paralelnu komponentu energije pozitrona. Kako se magnetski moment ( $E_{\perp}/B$ ) održava, povećanje magnetskog polja takođe povećava energijsku širinu paralelne komponente snopa. Ovaj efekat je iskorišćen za merenje preseka za neelastične procese rasejanja.

Efikasnost zarobljavanja može da se definiše kao verovatnoća zarobljavanja pozitrona iz moderisanog snopa tokom jednog ciklusa. Većina pozitrona biva zarobljeno u fazi punjenja zamke (~90% pozitrona tokom 75% ciklusa). Efikasnost je maksimizirana postavljanjem potencijala zamke na ekscitacioni potencijal  $a^1\Pi$  stanja  $N_2$ , koje igra ključnu ulogu u hlađenju

pozitrona pri interakciji sa molekulima azota. Pomoću ove aparature postignuta je maksimalna efikasnost zarobljavanja od 10%.

Do hlađenja pozitrona na temperaturu gasa dolazi u elektrodi 8 gde pozitroni gube energiju ekscitujući vibracione i rotacione nivoe  $N_2$  i  $CF_4$ . Tok pozitrona kroz uređaj zavisi od odnosa vremena hlađenja i vremena punjenja zamke. Duže vreme hlađenja za rezultat ima slabiji signal jer pozitroni nestaju iz zamke (ili anihilacijom u gasu ili skrećući u magnetskom polju i anihilirajući se na zidovima elektrode), ali takođe i bolju energijsku rezoluciju. Prema tome, u zavisnosti od toga koji preseki i na kojim energijama se mere u eksperimentu, ova dva faktora moraju da se balansiraju.

Iako se na osnovu profila pritiska može reći da zamka ima dve faze, ceo eksperiment zapravo radi u režimu tri faze (kao što je sugerisano na slici 4.3). Korišćenje samo dve faze zamke bitno smanjuje vreme života pozitrona, što dodatno otežava hlađenje pozitrona na dovoljno niske temperature. Prelazak na konfiguraciju zamke od tri faze bi značajno produžio vreme života pozitrona u zamci, ali kao što je već napomenuto, to nije relevantno u eksperimentima čiji je jedini cilj da se odrede karakteristike rasejanja pozitrona na gasovima.



**Slika 4.4:** Šematski prikaz potencijala primenjenog na poslednje elektrode u zamci i komoru za rasejanja: (1) elektroda pomoću koje se pozitroni izbacuju iz zamke, (2) poslednja elektroda u zamci ( $V_{trap}$ ) i (3) potencijal komore za rasejanja ( $V_{cell}$ ).

Podizanjem konfinirajućeg potencijala u zamci zarobljeni i ohlađeni pozitroni se prelivaju preko potencijalne barijere koju pravi poslednja elektroda u zamci (slika 4.4) i formiraju impulsni snop. Ovaj impulsni snop pozitrona se dalje usmerava ka komori za rasejanje, napunjenog gasom koji se izučava, u ovom slučaju vodenom parom.

### 4.2.3. KOMORA ZA RASEJANJA I SISTEM ZA DETEKCIJU SIGNALA

Na trap se nadovezuju vakuumska komora za rasejanja i vakuumska komora u koju je smešten sistem za detekciju signala - uređaj za detekciju i analizu usporavajućeg potencijala (*engl.* retarding potential analyzer, u daljem tekstu RPA) i višekanalni detektor struje pozitrona (*engl.* multichannel plate detector, u daljem tekstu MCP).

Diferencijalno pumpanje između zamke i komore za rasejanja vrši se pomoću molekulske turbo pumpe od 520 l/s, a između komore za rasejanje i sistema za detekciju pomoću molekulske turbo pumpe od 210 l/s. Komora za rasejanje je dužine 200 mm sa unutrašnjim prečnikom od 70 mm i aperturama od po 5 mm na ulazu i izlazu. Smeštena je unutar solenoida koji daje magnetsko polje jednako polju na kom se nalazi pozitronska zamka. Mala cilindrična mreža nalazi se na oba kraja komore, obezbeđujući da potencijal u uskoj zoni izvan komore bude isti kao u komori. Zahvaljujući tome, rasejanje u uskoj zoni većeg pritiska (u odnosu na vakuum) na izlazu iz komore se odvija na istoj energiji kao i u komori odnosno, drugim rečima, efekti krajeva postaju zanemarljivi.

Neposredno ispred komore za rasejanje nalazi se još jedna cilindrična mreža, dijametra 15 mm i dužine 45 mm, koja može da bude na proizvoljnom potencijalu, nezavisnom od potencijala u komori. Ova elektroda se ponaša kao RPA i služi da detektuje sva eventualna rasejanja do kojih dolazi u zoni između izlaza iz zamke i gasne komore usled curenja gasa iz zamke. Ovako se odbacuju svi oni pozitroni koji su u sudarima sa pozadinskim gasom izgubili makar i delić paralelne komponente energije na putu do komore za rasejanja i na taj način se eliminiše njihov uticaj na rezultate merenja preseka. Šematski prikaz komore za rasejanja dat je na slici 4.5.

Aperture od 5 mm na komori sa gasom su jako male da bi prošao ceo snop pozitrona, ali se gubitak minimizira tako što se cela komora postavlja u odnosu na trap tako da centar snopa gde je najveći fluks čestica sigurno prolazi. Transmisija se procenjuje na 40% - 50%.



Slika 4.5: Šematski prikaz komore sa gasom: a) prvi RPA i b) zaštitna mreža koja onemogućava da se napon zamke prelije na zonu transporta pozitrona.

Gas se pušta u komoru pomoću ručno kontrolisanog ventila, a pritisak se kontroliše kapacitivnim meračem pritiska (radi u opsegu 1 Torr sa preciznošću od  $\pm 0.05\%$ ). Merač pritiska je fabrički kalibrisan na temperaturi od 45 °C, dok se gasna komora nalazi na temperaturi od  $\sim 30$  °C, tako da očitavanje pritiska mora da se skalira. Korekcija iznosi oko 2% izmerene vrednosti.

Poslednja komora u kojoj se nalazi RPA, dužine 230 mm i unutrašnjeg prečnika 70 mm, je obavijena solenoidom, tako da polje može da se podešava nezavisno od ostatka aparature. RPA služi da analizira paralelnu komponentu energije,  $E_{||}$ , pozitronskog snopa nakon prolaska kroz komoru sa gasom u kojoj se pozitroni rasejavaju i na osnovu toga omogućujući merenje preseka za sudarne procese.

Pozitroni se detektuju pomoću dva MCPa u kombinaciji sa kapacitivno spregnutim transimpedansnim pojačavačem. Ovako se pojačava struja pozitrona koja dolazi do MCPa, a pojačavač konvertuje strujni signal u naponski koji se čuva na računaru za kontrolu eksperimenta. Zatim se vrši integracija da bi se dobio intenzitet signala koji je proporcionalan sa brojem pozitrona u svakom impulsu. Radi bolje statistike signali se usrednjavaju za više pozitronskih impulsa. U sklopu MCPa nalazi se i anoda u obliku fosfornog ekrana koja služi za vizualizaciju snopa u cilju optimizacije rada uređaja.

Pozitronski snop može da se analizira na više načina. Prvo, korišćenjem fosfornog ekrana snop može da se vizualizuje, što daje informacije o veličini i prostornoj raspodeli pozitronskog oblaka. Na približno 40 cm iza zamke nalazi se bakarni disk obložen zlatom prečnika 72 mm. Ako se pozitronski snop usmeri ka ovom disku može da se izmeri efektivna struja pozitrona i da se uporedi sa strujom od ulaznog moderisanog snopa. Ako se zna frekvencija ciklusa zamke može da se izračuna broj pozitrona u jednom impulsu. Vremenska

raspodela čestica jednog pozitronskog impulsa takođe može da se odredi korišćenjem signala sa MCPa i transimpedansnog pojačavača. Na izvestan način ova vremenska raspodela može da se posmatra kao indikator energijske rezolucije snopa jer širi opseg energija pozitrona u trapu vodi do šireg opsega vremena dolazaka pozitrona iz jednog impulsa. Konačno, energijska širina snopa može da se analizira pomoću RPA koji detektuje samo paralelnu komponentu energije snopa. Transmitovana struja pozitrona u funkciji paralelne energije snopa može da se poveže sa diferencijalnim presekom za rasejanje (Sullivan *et al.*, 2008b).

Sa izvorom jačine 50 mCi celokupan tok kroz sistem može biti i  $5 \cdot 10^5$  ohlađenih pozitrona u sekundi. Jedan impuls obično sadrži 100 – 500 pozitrona, sa frekvencama impulsa od 100 do 300 Hz. Ova aparatura je uspešno iskorišćena za benchmark merenja preseka za rasejanje pozitrona na atomima He (Sullivan *et al.*, 2008b; 2008c).

### 4.3. NAČIN ODREĐIVANJA PRESEKA I REZULTATI MERENJA

Sa tačke gledišta praktične primene, najznačajnija uloga pozitrona je uloga koju imaju u medicini u dijagnostici tumora i opšte metaboličke aktivnosti organizma putem pozitronske tomografije (*engl.* positron emission tomography, u daljem tekstu PET). U poslednje vreme se takođe priča o njihovoj potencijalnoj ulozi u tretmanu tumora (Menichetti *et al.*, 2009; Moadel *et al.*, 2005). U cilju boljeg razumevanja i unapređenja i dijagnostike i potencijalne pozitronske terapije, neophodno je razumeti fundamentalne osobine interakcije pozitrona sa molekulima u ljudskom organizmu. Osnovni sastavni deo svih živih organizama je voda. Ona je medijum u kome se dešavaju svi bitni hemijski i biohemijski procesi. Poznavanje preseka za sudare pozitrona sa molekulom vode otvara put ka fundamentalnom razumevanju ponašanja pozitrona u kompleksnom živom tkivu.

Totalni presek i presek za formiranje Ps u interakciji pozitrona sa vodenom parom (Makochekanwa *et al.*, 2009) izmereni su korišćenjem opisane eksperimentalne postavke u Canberri. Dobijene su apsolutne vrednosti preseka i upoređene sa sledećim eksperimentalnim i teorijskim rezultatima dostupnim u literaturi. Totalni presek za interakciju pozitrona sa vodom izmeren je na Yamaguchi univerzitetu u Japanu (Kimura *et al.*, 2000; Sueoka *et al.*, 1986; 1987), korišćenjem namagnetisanog snopa pozitrona u *time-of-flight* eksperimentu u opsegu energija od 1 eV do 400 eV. Grupa sa Trento Univerziteta (Zecca *et al.*, 2006) izmerila je totalni presek od 0.1 – 20 eV pomoću elektrostatičke aparature, dok je grupa sa

University College London (UCL) pomoću namagnetisanog pozitronskog snopa izmerila totalni presek od 7 - 417 eV (Beale *et al.*, 2006) i presek za formiranje Ps od 10 -100 eV (Murtagh *et al.*, 2006), a pomoću elektrostatičke aparature analizirala energijsku raspodelu pozitrona rasejanih na  $0^\circ$  u koincidenciji sa jonima  $\text{H}_2\text{O}^+$ ,  $\text{OH}^+$  i  $\text{H}^+$  na 100 eV i 153 eV (Arcidiacono *et al.*, 2009).

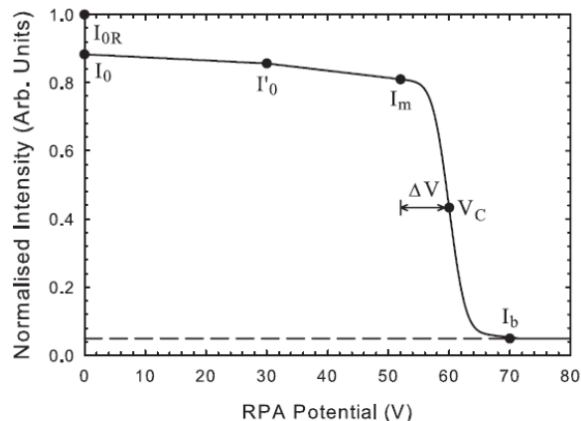
#### 4.3.1. POSTUPAK ODREĐIVANJA PRESEKA

Pozitroni koji dolaze iz  $^{22}\text{Na}$  izvora jačine 25 mCi moderisani su pomoću kristala Ne tako da je energijska širina ulaznog snopa  $\sim 1.5$  eV. Energijska rezolucija tokom merenja bila je 60 meV što je omogućilo detaljna merenja preseka u okolini praga za formiranje pozitronijuma ( $E_{\text{Ps}} = 5.821$  eV).

Snop pozitrona koji izlazi iz komore sa gasom prolazi kroz RPA, koji je osetljiv samo na paralelnu komponentu energije snopa,  $E_{\parallel}$ , a zatim dolazi do MCP detektora koji meri struju. Kroz RPA mogu da prođu samo oni pozitroni kod kojih je  $E_{\parallel}/e$  iznad vrednosti potencijala na kom se nalazi RPA i oni mogu da budu detektovani pomoću MCPa. Podaci se čuvaju na računaru koji kontroliše rad eksperimenta. Da bi se odredili totalni presek i presek za formiranje Ps, potreban je veliki broj merenja intenziteta transmitovanog snopa.

Sve informacije neophodne za određivanje totalnog preseka ( $\sigma_{\text{GT}}$ ) i preseka za formiranje Ps ( $\sigma_{\text{Ps}}$ ) nalaze se na transmisionoj krivoj RPA, čiji je šematski prikaz dat na slici 4.6. Svaka tačka na ovoj krivoj predstavlja broj transmitovanih pozitrona u funkciji potencijala RPA. Specifične tačke istaknute na slici 4.6 daju nam neophodne preseke.  $I_{0\text{R}}$  predstavlja meru ukupne struje čestica koja dolazi u RPA kada je energija u komori za rasejanje postavljena ispod praga za formiranje Ps, a potencijal RPA postavljen na 0V tako da propušta sve pozitrone, rasejane i nerasejane.  $I_0$  predstavlja transmitovanu struju čestica za određenu željenu vrednost energije i razlika između  $I_0$  i  $I_{0\text{R}}$  proporcionalna je broju pozitrona koji su učestvovali u procesu formiranja Ps unutar ćelije za rasejanje.  $I_0'$  je intenzitet koji se meri neposredno pre tačke koja odgovara početku nekog procesa rasejanja (uključujući i neelastična rasejanja). Ako postoji razlika između  $I_0$  i  $I_0'$ , ona nam ukazuje da su se procesi rasejanja dešavali i van komore za rasejanja i ova razlika mora pažljivo da se uračuna u grešku pri određivanju preseka.  $I_m$  se određuje tako što se potencijal RPA postavi na vrednost

malo ispred potencijala Vc i srazmeran je broju nerasejanih pozitrona. Vc je vrednost potencijala komore za rasejanja koja odseca pozitronski snop, ne dozvoljava mu da uđe u komoru (engl. cut off potential). Ib je mera pozadinskog signala iznad potencijala Vc, kada RPA više ne propušta pozitrone.



Slika 4.6: Šematski prikaz transmisione krive RPA (detalji u tekstu).

Preseci za odgovarajuće sudarne procese se dobijaju iz Beer – Lambertovog zakona prigušenja, tako da je totalni presek:

$$\sigma_{GT} = \frac{1}{nl} \ln \left( \frac{I_{0R}}{I_m} \right), \quad (4.3.1)$$

gde je  $n$  koncentracija čestica gasa, a  $l$  dužina putanje snopa pozitrona kroz gas. Uzeto je da je  $l$  jednako geometrijskoj dužini komore za rasejanja, što je opravdano u uslovima kada se gustina čestica gasa u komori održava, tako da je broj pozitrona iz snopa koji dožive rasejanje manji ili jednak 10% od ukupnog broja čestica u snopu (Sullivan *et al.*, 2008c). Parcijalni preseci se dobijaju iz totalnog preseka skaliranjem odnosom merenih intenziteta snopa koji odgovara datom rasejanju. Tako procesu formiranja pozitronijuma odgovara odnos:

$$R_{Ps} = \frac{I_{0R} - I_0}{I_{0R} - I_m} \quad (4.3.2)$$

i presek se dobija kao:

$$\sigma_{Ps} = R_{Ps} \sigma_{GT}, \quad (4.3.3)$$

dok razlici totalnog preseka i preseka za formiranje Ps odgovara odnos:

$$R_{GT-Ps} = \frac{I_0 - I_m}{I_{0R} - I_m}, \quad (4.3.4)$$

pa je odgovarajući presek:

$$\sigma_{GT-Ps} = R_{GT-Ps} \sigma_{GT}. \quad (4.3.5)$$

Kod ovakvog tipa istraživanja jako je bitno da se energijska skala precizno kalibriše. Energija interakcije pozitrona definisana je razlikom potencijala poslednje elektrode u zamci i potencijala na kom se nalazi komora za rasejanje (slika 4.4):

$$E_{in} = e(V_{trap} - V_{cell}). \quad (4.3.6)$$

U našem eksperimentu, nula energijske skale je određena u odsustvu gasa u komori za rasejanja pomoću RPA analize snopa, postavljanjem nule na vrednost potencijala Vc (cut off potencijal). Dobijena greška pri merenju energije je iznosila  $\Delta V \sim 10$  meV (vidi sliku 4.6).

Molekul H<sub>2</sub>O je jako polaran, pa se očekuje da u elastičnom diferencijalnom preseku ( $\sigma_{DCS}$ ) dominira dugodometna dipolna interakcija što rezultira u velikim presecima za rasejanje unapred (mali ugao rasejanja) na niskim energijama, tipično ispod 10 eV. Zbog neizbežne ugaone ograničenosti aparature javlja se problem: izmereni preseci su vrlo verovatno potcenjeni u odnosu na pravu vrednost na energijama ispod nekoliko eV. Opisana tehnika merenja preseka zasniva se na detekciji struje pozitrona na vrednosti napona Vc na naponskoj skali RPA (vidi sliku 4.6). U praksi nije moguće vršiti merenja na samoj vrednosti Vc jer ona koincidira sa naponom na kome se gubi nerasejani snop, pa se merenja vrše na naponu koji se razlikuje za neku malu vrednost  $\delta E$  od Vc. Pri merenju preseka za rasejanje pozitrona na molekulima vode ova razlika je iznosila  $\delta E = 150$  meV (više od tri standardne devijacije), odnosno merenje je vršeno na energijama  $E - \delta E$ . Ovo znači da izmereni totalni presek ne uključuje doprinos diferencijalnog preseka iz nedostupne  $\delta E$  oblasti. Na osnovu jednačina iz (Sullivan *et al.*, 2002) izračunat je izgubljeni opseg uglova,  $\theta^\circ - \theta_{max}$ , za energiju snopa E kao:



$$\theta_{\max} = \sin^{-1} \sqrt{\left( \frac{\delta E}{E} \right)} \quad (4.3.7)$$

i rezultati su prikazani u Tabeli 1. Takođe je bitno da se napomene da pozitroni rasejani unazad, tj. na uglovima ( $90^\circ < \theta < 180^\circ$ ) izlaze iz komore za rasejanja, reflektuju se o potencijal poslednje elektrode zamke i još jednom prolaze kroz komoru. Prema tome, deo raspodele koji nedostaje odgovara rasejanju na uglovima od  $0^\circ$  do  $\theta_{\max}$  i ( $180^\circ - \theta_{\max}$ ) do  $180^\circ$ . U svakom slučaju, i jednačina (4.3.7) i Tabela 1 govore da se ugaona rezolucija poboljšava sa povećanjem energije pozitrona. Međutim, dok precizna merenja  $\sigma_{\text{DCS}}$  ne budu bila izvršena neće moći pouzdano da se utvrdi u kojoj meri su  $\sigma_{\text{GT}}$  i  $\sigma_{\text{GT} - \text{Ps}}$  potcenzani. Ipak, proračuni  $\sigma_{\text{DCS}}$  za vodu korišćenjem metoda R – matrica (Tennyson, 2009) omogućili su da utvrdimo da je  $\sigma_{\text{GT}}$  potcenzan za oko 67% na energiji od 0.5 eV i 53% na 5 eV. Drugim rečima, očekuje se da sistematska greška u  $\sigma_{\text{GT}}$  rezultatima na niskim energijama ne može da se zanemari. Sa porastom energije pozitrona preko 10 eV na osnovu jednačine (4.3.7) očekujemo da ova sistematska greška postane zanemarljiva. Bitno je da se napomene da ovaj problem jedino utiče na elastičnu komponentu totalnog preseka, tako da su samo  $\sigma_{\text{GT}}$  i  $\sigma_{\text{GT} - \text{Ps}}$  potcenzani, ne i  $\sigma_{\text{Ps}}$ .

Tabela 1: Procena izgubljenog opsega uglova  $\theta^\circ - \theta_{\max}$  za odabrane vrednosti energije.

Energija (eV)	$\theta_{\max}$ (°)
0.5	33
1.0	23
2.5	16
5.0	10
15.0	6
30.0	4
60.0	3

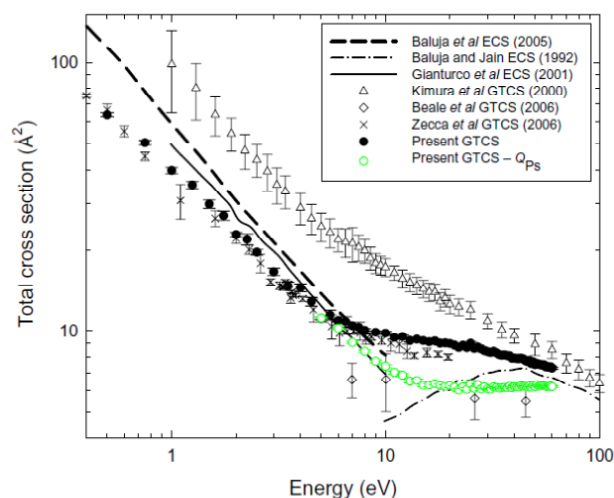
U eksperimentu je korišćena voda visoke čistoće. Uzorak je u laboratoriju stigao u tečnom stanju, pa je preveden u gasovito stanje ponavljanjem tri koraka: zamrzavanje, ispušavanje i topljenje.

## 4.3.2. REZULTATI MERENJA PRESEKA

### 4.3.2.a. Totalni presek

Na slici 4.7 prikazani su rezultati merenja totalnog preseka,  $\sigma_{\text{GT}}$  i razlike totalnog i preseka za formiranje Ps,  $\sigma_{\text{GT} - \text{Ps}}$  pri rasejanju pozitrona na vodenoj pari, zajedno sa ranijim eksperimentalnim rezultatima (Kimura *et al.*, 2000; Zecca *et al.*, 2006; Beale *et al.*, 2006) i teorijskim proračunima za elastični presek (Gianturco *et al.*, 2001; Baluja *et al.*, 2007; Baluja i Jain, 1992). Treba napomenuti da su rezultati Kimure i saradnika (Kimura *et al.*, 2000) dati na slici 4.7 zapravo rezultati Sueoke i saradnika (Sueoka *et al.*, 1986; 1987) korigovani za rasejanje na malim uglovima korišćenjem diferencijalnih preseka za rasejanje elektrona, jer nije bilo podataka o diferencijalnim presecima za pozitrone. Prema tome, rezultati Kimure i saradnika (Kimura *et al.*, 2000) su najbolji rezultati grupe sa Yamaguchi Univerziteta, pa ćemo nadalje samo njih koristiti za poređenje sa našim rezultatima. Na slici 4.7 se vidi da izmereni totalni presek monotono opada od 0.5 eV, menja nagib na  $\sim 6$  eV i iznad ove energije nastavlja da raste do najviše energije u eksperimentu, 60 eV. Slično,  $\sigma_{\text{GT} - \text{Ps}}$  ima glatku energijsku zavisnost, opada do 5 eV i postaje potpuno ravan oko 15 eV. I naš i totalni presek Zecca i saradnika (2006) bitno raste sa smanjenjem energije pozitrona ka 0 eV što pokazuje koliko su veliki efekti dugodometne polarizacije i/ili stalni dipolni moment H<sub>2</sub>O na niskim energijama. Ovi rezultati se jako dobro slažu na energijama do  $\sim 8$  eV. Iznad ove energije naš presek je veći i razlika raste sa povećanjem energije do  $\sim 12\%$  na njihovoj maksimalnoj energiji. O ovoj razlici ne može ništa više da se kaže dok se i jedni i drugi rezultati ne koriguju za gubitke pri rasejanju na malim uglovima. Koliko je nama poznato, ugaona rezolucija eksperimenta u Trentu je određena samom geometrijom uređaja i ne menja se u celom energijskom opsegu, dok u našoj eksperimentalnoj tehnici ugaona rezolucija postaje bolja sa povećanjem energije. Naš  $\sigma_{\text{GT}}$  se razlikuje od merenja Bealea i saradnika (Beale *et al.*, 2006) za faktor 2 na svim energijama. Ispod 5 eV naši rezultati su niži i od teorijskih rezultata Gianturca i saradnika (Gianturco *et al.*, 2001) dobijenih korišćenjem bezparametarskog kvantnodinamičkog modela za korelacije elektrona i pozitrona, a takođe i od rezultata Balujae i saradnika (Baluja *et al.*, 2007), koji su primenili aproksimaciju fiksnih jezgara zajedno sa standardnom Bornovom formulom. Naši rezultati se i kvalitativno i kvantitativno razlikuju od teorijskih proračuna Balujae i Jaina (1992) koji su koristili model sfernog optičkog potencijala. Sa grafikama su izostavljeni teorijski proračuni De – Henga i saradnika (2004) koji dosta dobro reprodukuju trend eksperimentalnih rezultata grupe sa

University Colledge u Londonu (UCL) (Beale *et al.*, 2006), ali koji se razlikuju od naših rezultata. Ovi autori su koristili pristup koji uključuje kompleksni optički potencijal i izračunali presek za molekul H<sub>2</sub>O primenom aditivnog pravila na preseke za pojedinačne atome. Interesantno je pomenuti da se iznad 12 eV naš  $\sigma_{GT - Ps}$  presek dobro slaže i po magnitudi i po energijskoj zavisnosti sa merenjima sa UCLA (Beale *et al.*, 2006), što može biti i slučajnost s obzirom na činjenicu da oba seta rezultata nisu korigovana za gubitke na malim uglovima.

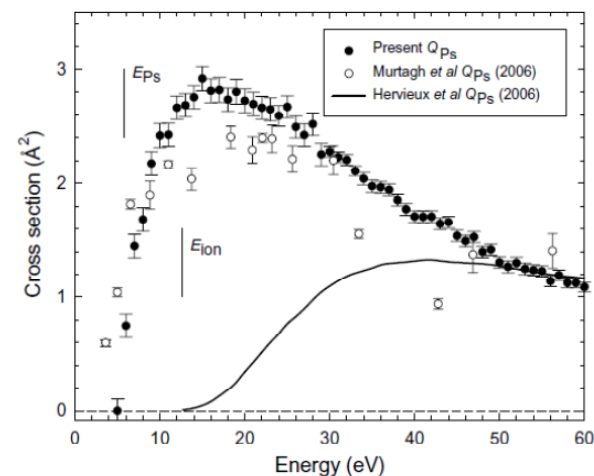


**Slika 4.7.** Rezultati merjenja totalnog preseka ( $\sigma_{GT}$ ) i razlike totalnog preseka i preseka za formiranje pozitronijuma ( $\sigma_{GT - Ps}$ ) u sudarima pozitrona sa H<sub>2</sub>O upoređeni sa rezultatima iz literature za  $\sigma_{GT}$  i elastični presek (ECS).

#### 4.3.2.b. Presek za formiranje pozitronijuma

Na slici 4.8 prikazani su rezultati merjenja preseka za formiranje pozitronijuma  $\sigma_{Ps}$  zajedno sa preliminarnim rezultatima Murtagha i saradnika (Murtagh *et al.*, 2006) i teorijskim rezultatima Hervieux i saradnika (2006). U svojim teorijskim proračunima Hervieux i saradnici (2006) su primenili model nezavisnih elektrona u kome je talasna funkcija molekula vode opisana kao linearna kombinacija atomskih orbitala centrirana na vodonikovom atomu.

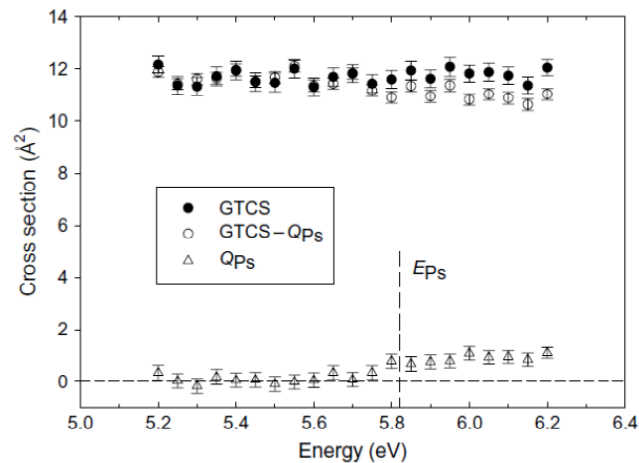
Presek za formiranje pozitronijuma  $\sigma_{Ps}$  su opisali pomoću nezavisnih doprinosa različitih početnih molekulskih orbitala – odvojeno su prikazali presek za formiranje Ps u osnovnom stanju (Ps(1s)) i u 2s pobuđenom stanju (Ps(2s)). Njihovi rezultati prikazani na slici 4.8 predstavljaju ukupni presek za formiranje Ps, tj presek za Ps(1s) + Ps(2s). Naši eksperimentalni rezultati za  $\sigma_{Ps}$  i rezultati Murtagha i saradnika (2006) obuhvataju doprinos svih mogućih kanala za formiranje Ps.



**Slika 4.8.** Rezultati merjenja preseka za formiranje pozitronijuma  $\sigma_{Ps}$  u sudarima pozitrona sa H<sub>2</sub>O upoređeni sa eksperimentalnim i teorijskim rezultatima iz literature.

Postoji generalno slaganje između naših rezultata i rezultata sa UCLA (Murtagh *et al.*, 2006) za energijsku zavisnost preseka ispod 45 eV, sa nekim suptilnim kvalitativnim i kvantitativnim razlikama. Prag za formiranje pozitronijuma za H<sub>2</sub>O je na energiji  $E_{Ps} = 5.821$  eV. UCL rezultati pokazuju nenultu vrednost preseka na 4 eV, dok naša merjenja daju nulti presek na 5eV. I UCL i CAMS presek ima širok maksimum koji pokriva energijski opseg od ~ 10 – 30 eV, ali razlika u brojnim vrednostima jednog i drugog preseka varira od ~ 30% na 14 eV do čak ~ 70% na 43 eV. Iznad ove energije i oblik energijskih zavisnosti ova dva preseka počinju da se znatno razlikuju. Razlika između naših rezultata i teorijskih proračuna Hervieux i saradnika (2006) je očigledna ispod 50 eV. Iznad ove energije slaganje je znatno bolje. Interesantno je da ovi teorijski proračuni daju  $E_{Ps} \sim 12.7$  eV, tj. teorijski  $E_{Ps}$  je skoro

jednak energiji praga za direktnu jonizaciju  $E_{ion}$  (12.621 eV). Ovo odslkava poznati problem sa kojim se teorija susreće pri računanju preseka za formiranje Ps ispod praga za jonizaciju – to je zona gde dolazi do “takmičenja” između procesa formiranja Ps i elastičnih i neelastičnih procesa, koje teoretičarima stvara poteškoće. U svakom slučaju čak i iznad  $E_{ion}$  teorijske vrednosti preseka su nekoliko redova veličine niže od izmerenih ispod 50 eV.

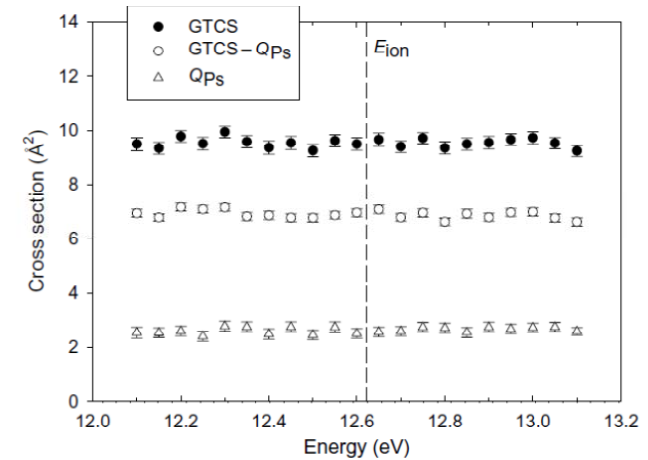


Slika 4.9. Totalni presek, razlika totalnog i preseka za formiranje Ps i presek za formiranje Ps za pozitronu u H2O u blizini praga za formiranje Ps ( $E_{Ps} = 5.821$  eV).

#### 4.3.2.c. Potraga za rezonancama

Na slikama 4.9 i 4.10 prikazani su  $\sigma_{GT}$ ,  $\sigma_{GT-Ps}$  i  $\sigma_{Ps}$  za vodu u blizini pragova za formiranje pozitronijuma,  $E_{Ps}$  i direktnu jonizaciju,  $E_{ion}$ . Posebno je zanimljiva zona između  $E_{Ps}$  i prve ekscitacione energije, takozvani Orov procep (*engl.* Ore gap). U ovoj zoni u He (Campeanu *et al.*, 1987) i Ar i Xe (Coleman *et al.*, 2009) nađeni su dokazi o efektima kuplovanja različitih kanala interakcije. U principu, postoji verovatnoća da do ovakvih efekata dođe u okolini praga za bilo koji neelastičan proces. Ovde smo se odlučili za ispitivanje okoline pragova za formiranje Ps i direktnu jonizaciju, jer ovi procesi jako doprinose totalnom preseku. Kod He (Campeanu *et al.*, 1987) primećen je pad u  $\sigma_{GT-Ps}$  od ~25% u Orovom procepu koji gradi specifičnu strukturu, dok je za Ar i Xe (Coleman *et al.*,

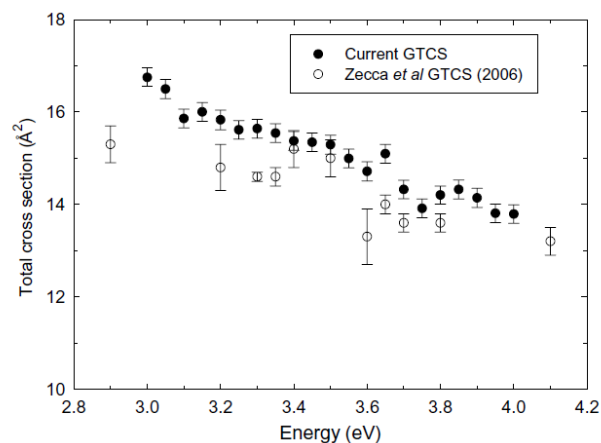
2009) primećen nagli porast (~50%) u  $\sigma_{GT-Ps}$ , što je pripisano formiranju virtuelnog Ps. Virtuelni Ps olakšava formiranje vezanih stanja pozitrona, a očekuje se da je voda zbog svog velikog dipolnog momenta dobar kandidat za ispitivanje ovog efekta (Surko *et al.*, 2005). Na slici 4.9 se vidi da presek za formiranje pozitronijuma raste glatko od energije praga, a u skladu s tim  $\sigma_{GT-Ps}$  postepeno postaje manji od  $\sigma_{GT}$ . Nikakve iznenadne promene nagiba koje bi bile indikacija efekata kuplovanja kanala interakcije kao kod He (Campeanu *et al.*, 1987) Ar i Xe (Coleman *et al.*, 2009) nisu uočene. Sa slike 4.10 se vidi da ni u blizini  $E_{ion}$  nisu uočeni slični efekti. Takođe,  $\sigma_{GT-Ps}$  i  $\sigma_{GT}$  ne pokazuju izražene maksimume, pa nema indikacija o postojanju rezonanci.



Slika 4.10. Isto kao slika 4.9 samo u blizini praga za direktnu jonizaciju ( $E_{ion} = 12.621$  eV).

Na slici 4.11 upoređeni su naš totalni presek ( $\sigma_{GT}$ ) i presek Zecca i saradnika (2006), na energiji ispod praga za formiranje Ps u vodi, tačnije od 3 – 4 eV. Razlog za detaljnije ispitivanje ove zone je nagli porast totalnog preseka od ~10% na 3.5 eV koji su приметили Zecca i saradnici (2006), a za koji tvrde da je izvan granica greške njihove tehnike i da je reproducibilan. Ovo bi bio važan dokaz postojanja vezanog stanja pozitrona i/ili rezonance u rasejanju pozitrona na molekulima vode. Izvršili smo nekoliko merenja sa energijskim korakom od 50 meV i dobili reproducibilne rezultate sa greškama prikazanim na slici 4.11.

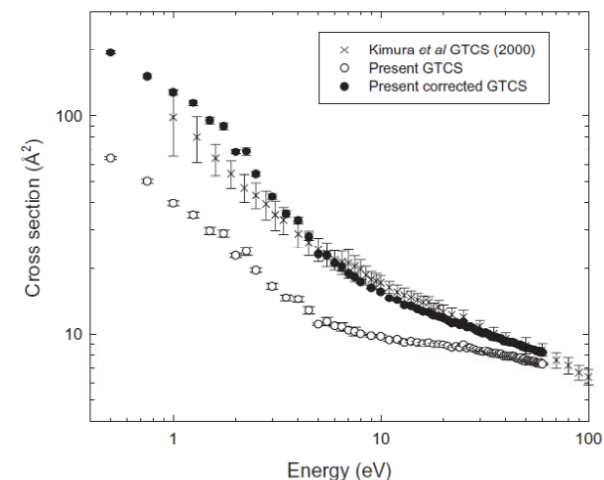
Na osnovu ovih rezultata zaključujemo da nema dokaza o postojanju bilo kakvih struktura u  $\sigma_{GT}$  u ovom opsegu energija.



Slika 4.11. Totalni presek (GTCS) upoređen sa rezultatima Zeccae i saradnika (2006) ispod energije praga za formiranje Ps,  $E_{Ps}$ .

#### 4.3.2.d. Korekcija za rasejanje na malim uglovima

Na slici 4.12 prikazan je  $\sigma_{GT}$  pre i posle uključivanja korekcije za rasejanje na malim uglovima. Usled nemogućnosti eksperimentalne aparature da registruje pozitroni koji su skrenuli pod uglovima od  $0^\circ - \theta_{max}$  presek za elastično rasejanje je potcenjen na niskim energijama. Na osnovu Tabele 1 napravljena je procena greške i korigovan totalni presek. Sa slike se vidi da nakon korigovanja rezultata dobijamo veće vrednosti preseka i ovaj porast opada sa povećanjem energije. Na 60 eV ovaj porast iznosi ~ 12%, što znači da i dalje nije zanemarljiv. Na slici su takođe prikazani rezultati Kimure i saradnika (2000) koji su takođe korigovani za gubitke na malim uglovima, ali koristeći diferencijalne preseke za rasejanje elektrona. Vidimo da između dva seta korigovanih rezultata postoji dobro i kvalitativno i kvantitativno slaganje. Ovo ne iznenađuje previše jer su diferencijalni preseki za elektrone koje su Kimura i saradnici (2000) koristili da koriguju svoje rezultate slični po obliku i veličini izračunatim elastičnim diferencijalnim presecima za pozitroni (Tennyson, 2009) koje smo mi koristili.



Slika 4.12. GTCS pre i posle korekcije za gubitke na malim uglovima. Takođe je prikazan i GTCS Kimure i saradnika (2000).

## 4.4. ZAKLJUČAK

Surkova modifikacija Penning – Malmberg gasne zamke za pozitroni dovela je do prave revolucije na polju pozitronske atomske i molekulske fizike. Pozitronski snopovi koji se dobijaju korišćenjem ove zamke su ohlađeni do jako niskih temperatura (Gilbert *et al.*, 1997) i zahvaljujući tome po prvi put omogućavaju detaljno izučavanje interakcija pozitrona sa materijom na veoma niskim energijama (Gilbert *et al.*, 1999; Sullivan *et al.*, 2001a). Takođe, pozitroni zarobljeni u zamci mogu da formiraju ultra kratke pozitronske pulseve koji su neophodni za pročišćavanje anihilacione spektroskopije vremena života pozitrona i takođe za eksperimente koji koriste tehniku vremena preleta (*engl.* time – of – flight technique). Primenom rotirajućeg polja oblak pozitrona u poslednjoj fazi zamke se kompresuje i postiže se izuzetno dobra definisanost energije snopa (Greaves i Surko, 2000; 2001).

U ovom poglavlju opisan je princip rada Surkove pozitronske zamke, gde ključnu ulogu u hlađenju i zarobljavanju pozitrona igraju interakcije pozitrona sa azotom i CF<sub>4</sub>. Ova zamka se u originalnoj ili malo modifikovanoj verziji koristi u više laboratorija širom sveta za

različite primene u oblasti pozitronske fizike. Detaljnije smo opisali eksperimentalnu postavku Centra za izučavanje materije i antimaterije u Canberri, u kojoj je bitan deo modifikovana Surkova pozitronska zamka, a koja je specijalizovana za merenje preseka interakcije pozitrona sa materijom na niskim energijama. U kontekstu ovog rada, ovaj eksperiment je bitan jer su totalni presek za interakciju pozitrona sa molekulima vode u stanju pare i presek za formiranje Ps izmereni na ovoj aparaturi u svrhu kompletiranja skupa preseka za interakciju pozitrona sa vodom. Ovaj set preseka bio je neophodan kao ulazni parametar u našem Monte Carlo kodu, kao i u kodu koji rešava Boltzmannovu jednačinu, u cilju izračunavanja transportnih svojstava pozitrona u vodenoj pari. Voda predstavlja preko 70% ljudskog organizma, tako da je prvi korak u modelovanju medicinskih aplikacija pozitrona, tj. interakcije pozitrona sa ljudskim organizmom zapravo modelovanje ponašanja pozitrona u vodenoj pari.

U naredna dva poglavlja prikazani su transportni parametri pozitrona koji se kreću pod uticajem električnog polja i u konfiguraciji ukrštenog električnog i magnetskog polja u argonu, azotu, vodoniku i vodenoj pari. Kasnije će rezultati dobijeni za vodenu paru biti povezani sa mogućnošću dalje primene u biomedicini.

## 5. TRANSPORT POZITRONA U ELEKTRIČNOM POLJU

U ovom poglavlju prikazani su rezultati proračuna transportnih koeficijenata i parametara za roj pozitrona u molekulsom vodoniku, molekulsom azotu i vodenoj pari, kao i, poređenja radi, transportni parametri roja u argonu (Šuvakov *et al.*, 2008), pod dejstvom spoljašnjeg električnog polja. Rezultati su dobijeni na bazi preseka prikazanih u prethodne dve glave, korišćenjem Monte Carlo simulacije, a verifikovani su korišćenjem teorije za rešavanje Boltzmannove jednačine, bazirane na razvoju funkcije raspodele u red sa proizvoljnim brojem članova (Dujko, 2009). Kao što je već rečeno u Uvodu, eksperimentalna merenja transportnih parametara pozitrona su izuzetno retka u literaturi, jer pozitronskih “swarm” eksperimenata danas gotovo i da nema (Charlton, 2009). Iz tog razloga smo bili prinuđeni da koristimo drugu, suštinski drugačiju tehniku za verifikaciju rezultata dobijenih Monte Carlo simulacijom. Rezultati dobijeni pomoću dve potpuno nezavisne tehnike se izuzetno dobro slažu, na osnovu čega možemo da tvrdimo da svi fenomeni otkriveni proučavanjem transportnih parametara pozitrona u ovom radu imaju fizički smisao, pa možemo da se upustimo u njihovo tumačenje. Gde god je bilo moguće rezultati su upoređeni sa transportnim osobinama elektrona u istom gasu.

Transportni parametri koje smo proučavali su srednja energija roja, brzina drifta, transverzalna i longitudinalna difuzija i brzinski (rejt) koeficijenti. Akcenat je stavljen na uticaj nekonzervativnih sudara, konkretno formiranja Ps, na transportne osobine. Istaknuta je dualna priroda pojedinih transportnih koeficijenata i detaljno su ispitane razlike koje postoje između fluksa i balk komponenti. Posebna pažnja je posvećena analizi i tumačenju porekla efekta negativne diferencijalne provodnosti (NDC) koji se vidi u balk brzini drifta pozitrona u svim gasovima osim u azotu. Ovaj efekat je upoređen sa NDC efektom koji se javlja u

transportu elektrona i izvršena je provera u kojoj meri važeća teorija za elektrone može da se primeni na slučaj pozitrona. U cilju boljeg razumevanja fenomena NDCa kod pozitrona sprovedene su prostorno razložene karakteristike roja (broj čestica, srednja energija i frekvencija formiranja Ps).

Azot je kao pozadinski gas u širokoj upotrebi u sudarnim zamkama za pozitrone, jer se ispostavilo da, zbog zgodnog relativnog položaja energijskih pragova kao i magnituda određenih procesa, veoma efikasno termalizuje pozitrone. S tim na umu, istakli smo neke specifične karakteristike transporta pozitrona u ovom gasu i objasnili zašto se dodavanjem male količine  $\text{CF}_4$  gasa molekulsom azotu dobija još efikasnija termalizacija. U posebnom podpoglavlju prikazali smo transportne koeficijente za pozitrone u smeši  $\text{N}_2$  sa 10%  $\text{CF}_4$ .

Logičan nastavak ovog istraživanja je bilo određivanje vremena termalizacije pozitrona u ispitivanim gasovima. Dobijeno je dobro slaganje sa eksperimentom (Al-Qaradawi et al., 2000) i objašnjeno zašto se neki gasovi ne koriste u sudarnim zamkama za termalizaciju pozitrona, iako su zbog kratkog vremena termalizacije dobri kandidati.

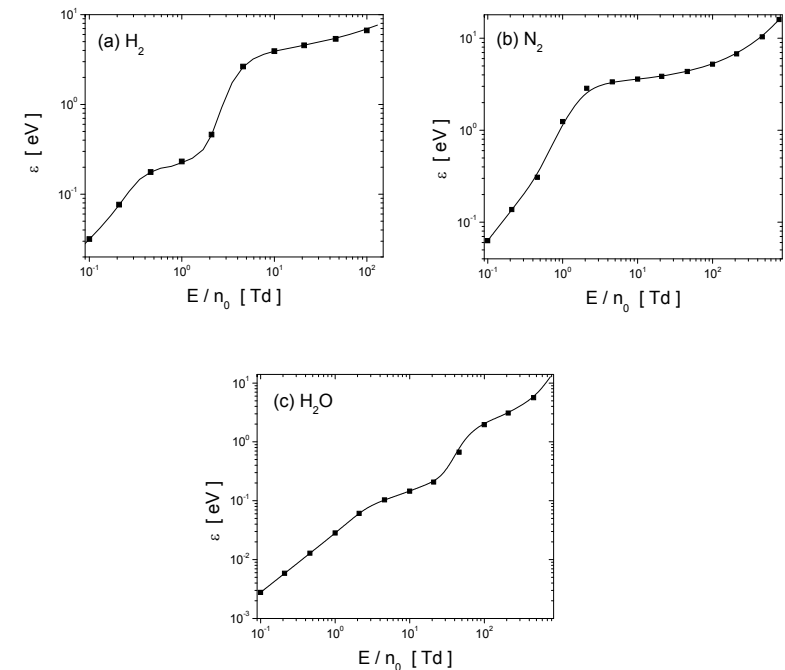
Monte Carlo simulacijom i kompjuterskim kodom za rešavanje Boltzmannove jednačine praćena je interakcija roja od  $\sim 10^6$  pozitrona sa odgovarajućim pozadinskim gasom. Svi transportni parametri dati su u funkciji redukovano električnog polja,  $E/n_0$ . Polje je menjano u opsegu 0.1 – 130 Td za  $\text{H}_2$ , 0.1 – 700 Td za  $\text{N}_2$ , 0.1 – 700 Td za  $\text{H}_2\text{O}$  i 0.01 – 1000 Td za Ar. Za smešu  $\text{N}_2$  i  $\text{CF}_4$  polje je uzimalo vrednosti u opsegu 0.01 – 1000 Td. Transport je izučavan na temperaturi od 0K, što je nije od presudne važnosti, jer se razlike u ponašanju transportnih koeficijenata na različitim temperaturama ne vide iznad 100 meV.

## 5.1. TRANSPORTNI KOEFICIJENTI I PARAMETRI

### 5.1.1. SREDNJA ENERGIJA

Na slici 5.1 prikazana je srednja energija roja pozitrona u funkciji redukovano električnog polja  $E/n_0$  za (a) vodonik, (b) azot i (c) vodu. Sa slike se vidi da je u slučaju sva tri gasa energija roja monotono rastuća funkcija redukovano električnog polja. Profili srednje energije reflektuju energijsku zavisnost preseka za sudarne procese. Kod sva tri gasa uočljive su promene nagiba, čak i platoi koji su odraz eksplicitnog uticaja vibracionih i elektronskih ekscitacija. Detalje zavisnosti srednje energije od redukovano električnog polja prodiskutovaćemo na primeru vodonika (Slika 5.1a). Sa slike se vidi da se sa porastom  $E/n_0$  izdvajaju četiri zone

različitih transportnih osobina. Na najnižim vrednostima  $E/n_0$  srednja energija brzo raste i u ovoj zoni pozitroni gube energiju u elastičnim sudarima sa molekulima vodonika, čiji presek opada sa energijom. Sledeća zona je zona sporog porasta energije – pozitroni ekscituju vibracione nivoe molekula i gube značajan deo svoje energije. Preseci za vibracione ekscitacije opadaju sa porastom energije, tako da u trećoj zoni energija pozitrona ponovo jako brzo raste do one vrednosti na kojoj se otvaraju kanali za elektronske ekscitacije, formiranje pozitronijuma i jonizaciju. Tu se nagib srednje energije ponovo menja – energija sporije raste

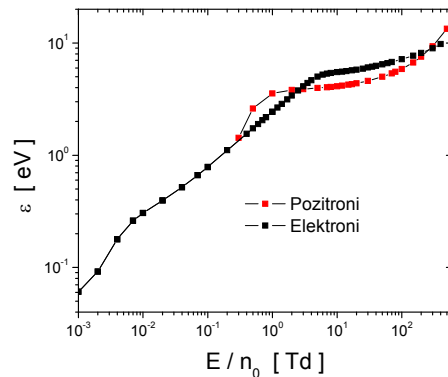


**Slika 5.1** Zavisnost srednje energije od redukovano električnog polja  $E/n_0$  za roj pozitrona u (a) azotu, (b) vodoniku i (c) vodi. Punom linijom su označeni rezultati dobijeni korišćenjem multi-term teorije za rešavanje Boltzmannove jednačine, a simbolima rezultati dobijeni Monte Carlo simulacijom.

sa povećanjem polja. Slično je i za azot i vodu. Plato koji se jasno vidi u profilu srednje energije pozitrona u azotu odgovara dostizanju energije praga za elektronske ekscitacije. Kod

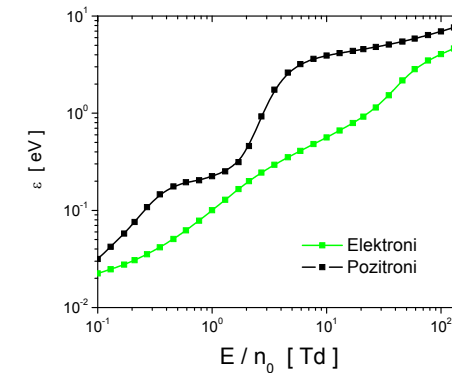
vodene pare uočljive su dve blaže promene nagiba u odnosu na azot i vodonik. Prva odgovara dostizanju praga za pobuđivanje vibracionih nivoa, a druga je u vezi sa elektronskim ekscitacijama molekula vode u sudaru sa pozitronima.

Poređenja radi, na slici 5.2 data je srednja energija roja pozitrona u argonu (Šuvakov *et al.*, 2008). Vidi se da situacija nije bitno različita u poređenju sa molekulskim gasovima. I u ovom slučaju, energija je monotono rastuća funkcija redukovanog električnog polja i ponovo odražava energijsku zavisnost preseka za sudarne procese. Na istoj slici data je srednja energija roja elektrona u argonu. Profili srednje energije se kvalitativno razlikuju za elektrone i pozitrone, ali su kvantitativno veoma bliski. Vidi se da su energije elektrona i pozitrona jednake do  $E/n_0 \sim 0.3$  Td, što odgovara energiji od  $\sim 1$  eV. Na ovoj energiji presek za prenos impulsa pozitrona ima minimum (McEachran, 2006) (vidi sliku Slika 3.1) i tu se smanjuje nagib srednje energije. Presek za prenos impulsa elektrona u argonu ima minimum na energiji  $\sim 0.3$  eV (Phelps), ali je taj minimum (iako izraženiji) manje primetan u profilu srednje energije elektronskog roja. Nakon sasvim blage promene nagiba, srednja energija elektrona nastavlja eksponencijalno da raste do  $\sim 5$  eV gde dolazi do prve veće promene nagiba (približno na toj energiji presek za prenos impulsa elektrona ima maksimum). Može da se zaključi da je srednja energija roja pozitrona mnogo osetljivija na detalje preseka nego srednja energija elektrona.



Slika 5.2 Zavisnost srednje energije roja pozitrona (crveno) i elektrona (crno) od redukovanog električnog polja  $E/n_0$  u argonu.

U principu, za očekivati je da je srednja energija pozitrona u čitavom razmatranom opsegu redukovanog električnog polja veća od srednje energije elektrona, zbog manjeg broja neelastičnih procesa u kojima učestvuju pozitroni. Međutim, jasno se vidi da kod argona to nije slučaj. U zoni gde je formiranje pozitronijuma moguć proces ( $E_{Ps} = 8.955$  eV za Ar) energija pozitrona je niža, jer je ovaj proces selektivan: čestice sa najvećim energijama će formirati Ps sa elektronima iz gasa i nestati iz roja. Kod molekulskog vodonika (Slika 5.3) srednja energija pozitrona zaista jeste veća od energije elektrona u čitavom opsegu, uključujući i zonu gde je jak uticaj formiranja pozitronijuma. To je posledica većeg broja mogućih elektronskih ekscitacija molekulskog u odnosu na atomski gas, tako da uticaj formiranja pozitronijuma kod  $H_2$  ne dolazi u istoj meri do izražaja kao kod Ar.



Slika 5.3 Zavisnost srednje energije roja pozitrona (crno) i elektrona (zeleno) od redukovanog električnog polja  $E/n_0$  u vodoniku.

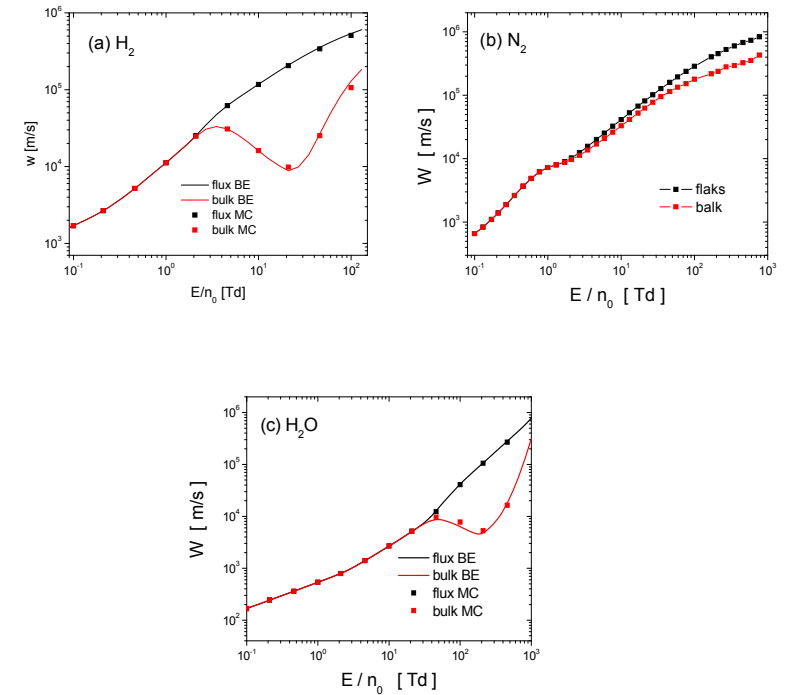
### 5.1.2. BRZINA DRIFTA I NEGATIVNA DIFERENCIJALNA PROVODNOST (NDC)

Ovo poglavlje je posvećeno analizi brzine drifta roja pozitrona. Kao što je već rečeno, brzina drifta ima fluks i balk komponentu. Fluks brzina drifta je zapravo srednja brzina čestica roja, dok balk brzina drifta predstavlja brzinu centra mase roja i samo je balk brzina merljiva u

eksperimentima. Ove dve brzine su jednake ukoliko nema nekonzervativnih procesa (procesa koji ne održavaju broj čestica u sistemu - roju). Već je rečeno da je u smislu održavanja broja pozitrona formiranje pozitronijuma nekonzervativni proces. U poglavlju 3, konstruišući kompletne skupove preseka za interakciju pozitrona sa izučavanim gasovima, ustanovili smo da presek za formiranje Ps ima velike vrednosti, uporedive sa vrednostima ostalih preseka za sudarne procese. U slučaju Ar (a u uskoj oblasti energija i H<sub>2</sub>) ovaj presek po veličini čak nadmašuje presek za elastične procese. Takođe, presek za formiranje pozitronijuma jako zavisi od energije pozitrona. Odatle očekujemo različito ponašanje fluks i balk komponenti brzine.

Na slici 5.4 prikazane su fluks i balk komponente brzine drifta roja pozitrona u funkciji redukovanoeg električnog polja  $E/n_0$  za (a) vodonik, (b) azot i (c) vodu. Na prvi pogled je uočljivo da kod vodonika i vode postoji veliki interval  $E/n_0$  za koji se fluks i balk brzine drifta drastično razlikuju, dok je kod azota ova razlika znatno manja. Razlog za to je relativni položaj praga za formiranje pozitronijuma, pre svega u odnosu na pragove za elektronske ekscitacije. Prag za formiranje pozitronijuma kod azota nalazi se na nešto višoj energiji nego pragovi za elektronske ekscitacije  $a^2\Sigma$  i  $a^1\Pi$ , s tim što je presek za  $a^1\Pi$  uporedivog intenziteta kao presek za formiranje pozitronijuma. Elektronske ekscitacije termalizuju pozitronu pre nego što presek za formiranje Ps dostigne svoju maksimalnu vrednost, tako da najveći broj njih nikada ne dostigne energije na kojima može sa elektronom da formira pozitronijum i nestane iz roja. Upravo to je razlog zašto se N<sub>2</sub> koristi kao „buffer“ gas u pozitronskim sudarnim zamkama.

Kod vodonika i vodene pare vidi se jako izražen efekat negativne diferencijalne provodnosti (NDC), ali samo u balk brzini drifta. NDC predstavlja smanjenje brzine drifta (pa samim tim i provodnosti) sa povećanjem spoljašnjeg polja. Ovaj efekat je jako važan i vrat ćemo se na njegovo detaljnije tumačenje nakon poređenja profila fluks i balk brzine drifta za elektrone i pozitronu na primeru vodonika.

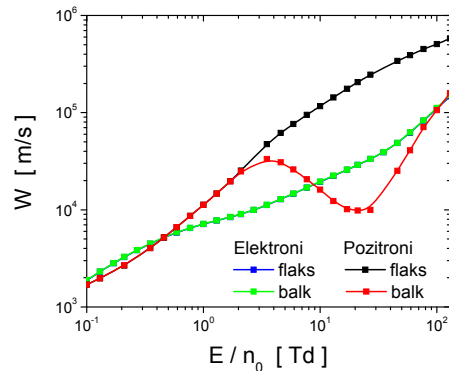


Slika 5.4. Zavisnost fluks i balk komponente brzine drifta od redukovanoeg električnog polja  $E/n_0$  za roj pozitrona u (a) azotu, (b) vodoniku i (c) vodi. Punom linijom su označeni rezultati dobijeni korišćenjem multi-term teorije za rešavanje Boltzmannove jednačine a simbolima rezultati dobijeni Monte Carlo simulacijom.

Na slici 5.5 uporedene su fluks i balk brzina drifta za rojeve pozitrona i elektrona u vodoniku. Vidi se da je njihovo ponašanje potpuno različito. Fluks brzine drifta i pozitrona i elektrona su rastuće funkcije redukovanoeg električnog polja. Razlika između fluks i balk komponenti postoji kod obe vrste čestica, što je očekivano jer su u oba slučaja prisutni nekonzervativni procesi, ali je ova razlika drastično veća za pozitronu. Balk brzina drifta elektrona je rastuća funkcija  $E/n_0$  i za  $E/n_0 > 100$  Td prevazilazi fluks komponentu. To je eksplicitni efekat jonizacije kao nekonzervativnog procesa, koji uvećava broj elektrona nižih energija u roju. U balk brzini drifta pozitrona vidi se jako izražen NDC efekat, dok ga u fluks



brzini nema ni u naznakama. Ovakav rezultat je jako zanimljiv jer nikada do sada nije primećen u transportu elektrona, tako da ćemo se sada detaljnije zadržati na efektu NDC, potsetićemo se kako ovaj efekat izgleda kod elektrona i objasniti njegovo poreklo u transportu pozitrona.



Slika 5.5. Poređenje zavisnosti fluks i balk brzina drifta za roj pozitrona (crno i crveno) i roj elektrona (plavo i zeleno) od redukovano električnog polja u vodoniku.

### 5.1.2.a. NDC efekat u transportu elektrona

Negativna diferencijalna provodnost (NDC) koja se javlja u transportu elektrona kroz gasove je detaljno izučavana u poslednjih nekoliko decenija (Petrović *et al.*, 1984; Petrović, 1985; Robson, 1984; Vrhovac i Petrović, 1996). Ovaj efekat je bitan jer s jedne strane postoji veliki broj njegovih primena, a s druge strane NDC može da izazove velike nestabilnosti u sistemu u kome se javlja. Jedan od prvih radova koji se bavio ulogom NDCa u gasnim pražnjenjima je rad Lopantsevae i saradnika (1979), koji su i eksperimentalno i teorijski proučavali nestabilnosti pražnjenja koja se održavaju pomoću spoljašnjih izvora u smešama Ar – N<sub>2</sub> i Ar – CO, kao i u čistom argonu. Istraživanje fenomena NDC je značajano i za rad Ar – N<sub>2</sub> i CO lasera i ovom temom su se bavili brojni istraživači sedamdesetih godina prošlog veka (za reference pogledati (Petrović *et al.*, 1984)), a takode, jako utiče na energiju koja se predaje plazmi u procesu Jouleovog zagrevanja. Provodnost generalno predstavlja proizvod brzine drifta i koncentracije čestica. Koncentracija zavisi od velikog broja parametara, među kojima

dominiraju gubici koji uglavnom jako zavise od geometrije sistema. S druge strane, brzina drifta je određena funkcijom raspodele elektrona, ne zavisi od geometrije sistema i samim tim je fundamentalna veličina. Iz tog razloga smo NDC efekat vezali za zavisnost brzine drifta od redukovano električnog polja,  $E/n_0$ .

NDC može da nastane iz mnogo različitih razloga. U ranim danima izučavanja ovog fenomena smatralo se da je neophodno da presek za prenos impulsa ima Ramsauer Townsendov minimum u zoni nastanka NDC, kao i da u istom regionu postoji bar jedan neelastični proces (Petrović *et al.*, 1984). Na primer, u slučaju metana (CH<sub>4</sub>) prag za vibracione ekscitacije koincidira sa Ramsauer Townsendovim minimumom. Kasnije je utvrđeno da ovo nisu neophodni uslovi, ali su se sva dalja istraživanja bavila specijalnim slučajevima u kojima dolazi do NDCa, bez postavljanja generalne teorije. Tek su detaljnim teorijskim razmatranjima Petrović i saradnici (Petrović *et al.*, 1984) sumirali uslove za nastanak NDCa pri transportu elektrona kroz gasove. Uslovi za nastanak NDCa koji se baziraju na rezultatima njihovih modela i Robsonovoj teoriji (Robson, 1984) nabrojani su ovde:

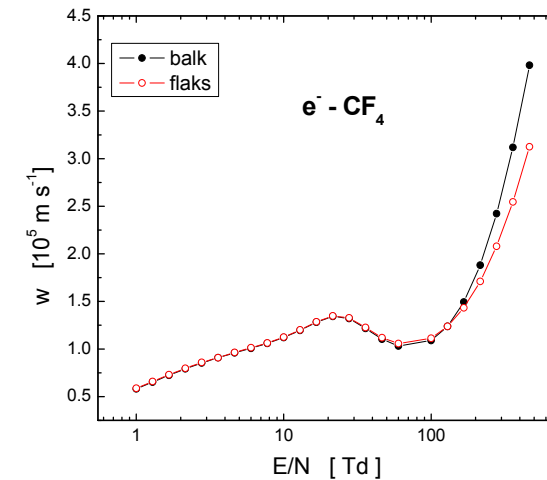
1. Neophodni su neelastični procesi.
2. Rastući presek za prenos impulsa ide u prilog efektu.
3. Opadajući presek za neelastične procese ide u prilog NDCa.
4. Pojava NDCa zavisi od relativnog odnosa faktora 2. i 3., pri čemu je precizan kriterijum dat jednačinom (19) Robsona (1984).
5. Superelastični procesi redukuju NDC.

Bitno je napomenuti da ni jedan od navedenih uslova sam po sebi nije neophodan za razvoj NDC efekta. Interesantno je prokomentarisati prvi uslov, jer se u literaturi mogu naći primeri koji na prvi pogled ukazuju da NDC može da se javi i kada nema neelastičnih procesa (Shizgal, 1990). Naime, primer je transport elektrona u smeši koja se sastoji od nekog plemenitog gasa i male količine helijuma, gde se NDC javlja na energijama na kojima nema neelastičnih procesa. Objasnjenje leži u odnosu masa elektrona i He koji je mali, tako da mala količina He u smeši kontroliše srednju energiju roja putem elastičnih sudara na niskim energijama. Elastični sudari sa atomima He na taj način igraju ulogu neelastičnih sudara iz teorije Robsona (1984) i Petrovića i saradnika (1984), tako da uslov 1. i dalje ostaje na snazi.

U literaturi takođe mogu da se nadju primeri iz kojih se vidi da ni drugi uslov nije neophodan (Petrović *et al.*, 1984; Petrović, 1985). Primer je jedan od modela koji su izučavali Petrović i saradnici (Petrović *et al.*, 1984) u kome ne samo da presek za prenos impulsa ne raste, već opada. Bitno je da u tom slučaju u zoni u kojoj se javlja NDC postoji presek za neelastične procese koji takođe opada sa energijom. Realni primer ove situacije je NDC u CO.

Nabrojani uslovi za nastanak NDCa odnose se na fluks brzinu drifta,  $w$ , koja, kao što je ranije pomenuto, pripada klasi transpornih koeficijenata koji se definišu preko fluks – gradijentne relacije, koja se u ovom slučaju svodi na Fickov zakon. To je zapravo prostorno uniformna srednja brzina čestica roja. Potsetimo se da je drugi tip brzine drifta, balk brzina,  $W$ , vremenski izvod položaja centra mase roja, tj. brzina centra mase. Ona se definiše preko difuzione jednačine i ove dve brzine se razlikuju ukoliko postoje nekonzervativni (reaktivni) procesi, tj. procesi koji menjaju broj čestica roja (na primer jonizacija i zahvat u slučaju elektrona ili formiranje Ps i anihilacija u slučaju pozitrona). Brzina koja može da se izmeri u eksperimentima je balk brzina drifta, ne i fluks. Vrhovac i Petrović (1996) su ukazali da postoje neke situacije u kojima se efekat NDC vidi u balk brzini drifta, ali ne i u fluks komponenti. Ovo istraživanje se odnosilo na zahvat elektrona i utvrđeno je da se NDC efekat vidi u balk brzini drifta samo ako fluks brzina skoro zadovoljava kriterijume za NDC ili ako je uočljiv makar plato u profilu brzine.

Na slici 5.6 prikazana je zavisnost fluks i balk brzine drifta od redukovanoeg električnog polja za roj elektrona koji se kreće kroz  $CF_4$  gas. Na prvi pogled se uočava jak NDC efekat, koji se istovremeno javlja i u fluks i u balk brzini drifta. Sa povećanjem polja povećava se i razlika između ove dve komponente brzine i ta razlika može ići i do 25% (Dujko *et al.*, 2005). I dalje, to je bitno manja razlika od one koju uočavamo u transportu pozitrona.



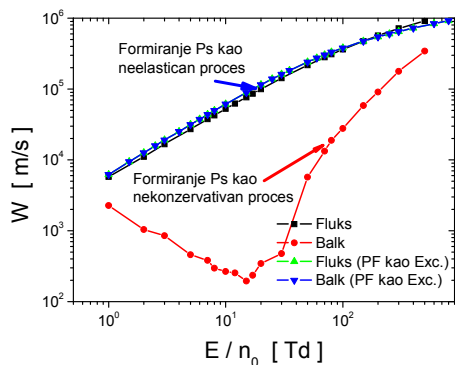
Slika 5.6. Zavisnost fluks (crveno) i balk (crno) komponente brzine drifta za roj elektrona od redukovanoeg električnog polja u  $CF_4$  (preuzeto iz (Dujko *et al.*, 2005)).

### 5.1.2.b. Poreklo NDC efekta u transportu pozitrona

Vratimo se na roj pozitrona i NDC. Iako je za rojeve elektrona NDC efekat intenzivno izučavan i detaljno objašnjen, njegova pojava u transportu pozitrona ipak predstavlja najzanimljiviji fenomen otkriven u ovoj oblasti pozitronske fizike. Do sada je primećen samo u balk brzini drifta, pri čemu fluks komponenta ne pokazuje ni naznake postojanja ovog fenomena, makar u vidu platoa u profilu brzine, kao što to zahteva teorija razvijena za elektrone (Vrhovac i Petrović, 1996). Takođe, u transportu elektrona nikada nisu uočene tako velike razlike između fluks i balk brzine drifta kao kod pozitrona. Najjače izražen NDC primećen je u transportu pozitrona u Ar (Šuvakov *et al.*, 2008), slika 5.7, i tu je maksimalna razlika između fluks i balk komponente skoro tri reda veličine.

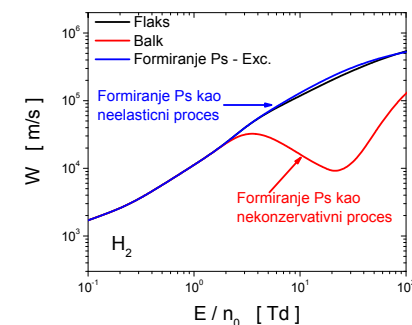
Kako se u opštem slučaju razlika između dva tipa transportnih koeficijenata javlja kao posledica prisustva nekonzervativnih procesa, ispitali smo uticaj formiranja Ps na pojavu NDC na primeru argona, tako što smo ovaj proces u jednom slučaju tretirali kao

neKonzervativan, a u drugom kao konzervativan neelastičan proces. U drugom slučaju smo pozitronu oduzimali energiju praga za formiranje Ps (8.955 eV), ali je čestica ostajala u roju i nastavljala da se kreće sa smanjenom energijom. Poređenje je dato na slici 5.7 i vidi se da kada se formiranju Ps “ukine” njegova neKonzervativna priroda NDC efekat nestaje, a skoro potpuno i razlika između fluks i balk komponenti brzine drifta. Zaključak ove jednostavne analize je da se NDC efekat u transportu pozitrona javlja kao posledica uticaja neKonzervativne prirode formiranja Ps na funkciju raspodele pozitrona, a ne kao posledica veličine ili energijske zavisnosti preseka za ovaj proces.



**Slika 5.7.** Poređenje balk brzine drifta pozitrona u Ar (crveno) sa balk brzinom drifta izračunatom u slučaju kada je formiranje Ps tretirano kao neelastičan proces (plavo). Na slici su date i fluks brzina drifta pozitrona (crno i zeleno).

Slični rezultati dati su za H<sub>2</sub> na slici 5.8 i vidi se da oni samo potvrđuju zaključak dobijen analizom NDC efekta u Ar.



**Slika 5.8.** Fluks i balk komponenta brzine drifta za pozitronu u H<sub>2</sub> u zavisnosti od E/n<sub>0</sub> u slučaju kada je formiranje Ps tretirano kao neKonzervativni i kao konzervativni neelastični proces.

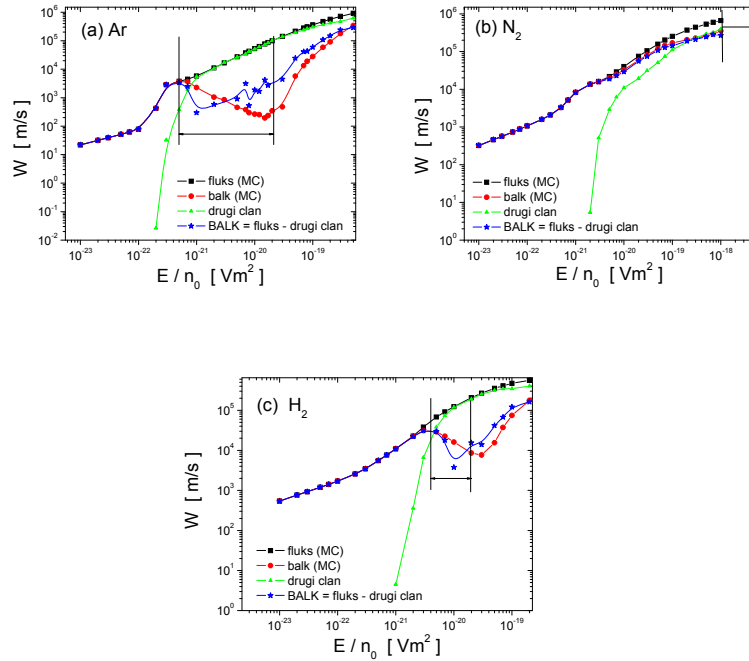
Sledeći korak u analizi NDC efekta u transportu pozitrona je provera da li standardna formula koja definiše razliku između fluks i balk brzine drifta (Robson, 1986) može da se primeni na pozitronu. Formula glasi:

$$W = w - \frac{2\varepsilon}{3e} \frac{dv_{PF}}{dE}, \quad (5.1)$$

gde je  $v_{PF}$  frekvencija formiranja Ps,  $\varepsilon$  srednja energija,  $e$  elementarno naelektrisanje i  $E$  električno polje izraženo u V/m. Naš Monte Carlo kod daje frekvencije za svaki sudarni proces, tako da smo koristeći izračunatu frekvenciju za formiranje Ps dobili drugi član desne strane jednačine 5.1 i oduzeli ga od fluks brzine drifta koju daje Monte Carlo simulacija, čime smo dobili novu balk brzinu drifta (leva strana jednakosti 5.1). Poređenje između ovako dobijene balk brzine i one dobijene Monte Carlo kodom dato je na slici 5.9 za (a) Ar, (b) N<sub>2</sub> i (c) H<sub>2</sub> (Banković *et al.*, 2009). Sa slike se vidi da postoji dobro kvalitativno slaganje između teorije i Monte Carlo rezultata za sva tri gasa, pogotovo u zoni E/n<sub>0</sub> gde počinje da se vidi NDC. Postoji vidljivo kvantitativno neslaganje između teorijske i Monte Carlo brzine drifta čija veličina varira od gasa do gasa. Najbolje slaganje je zapaženo u slučaju N<sub>2</sub> što je i očekivano jer je tu uticaj formiranja Ps najmanji. Treba istaći da teorija koja daje jednačinu 5.1 ne uzima u obzir prostorne promene profila broja čestica roja i to je najverovatniji razlog uočenih kvantitativnih razlika. O prostornim profilima roja biće više reči nešto kasnije.

Vrhovac i Petrović (1996) su postavili kriterijum za pojavu NDCa u transportu elektrona koji uključuje reaktivne (nekonzervativne) sudare, konkretno elektronski zahvat. Kako smo već utvrdili da je za pojavu NDCa odgovorna nekonzervativna priroda formiranja Ps, interesantno je proveriti da li je kriterijum Vrhovca i Petrovića zadovoljen u transportu pozitrona. Kriterijum je modifikovan tako da je umesto elektronskog zahvata uključen proces formiranja Ps i dat je izrazom:

$$\frac{dW}{dE} = \frac{dw}{dE} - \frac{1}{e} \frac{2}{3} \left[ \frac{d\varepsilon}{dE} \frac{dv_{PF}}{dE} + \varepsilon \frac{d^2 v_{PF}}{dE^2} \right] < 0. \quad (5.2)$$



**Slika 5.9** Poređenje između balk brzina drifta izračunatih Monte Carlo kodom i pomoću jednačine 5.1 za transport pozitrona u (a) Ar, (b) N<sub>2</sub> i (c) H<sub>2</sub>. Prikazane su i fluks brzine drifta kao i drugi član desne strane jednačine 5.1. Vertikalne linije predstavljaju granice zone u kojoj se javlja NDC na osnovu uslova datog jednačinom 5.2

Ovaj kriterijum određuje granice oblasti u kojoj se javlja NDC. Na slici 5.9 su ove granice označene vertikalnim linijama i vidi se da se oblast  $E/n_0$  u kojoj balk brzina drifta dobijena Monte Carlo simulacijom ima pad odgovara oblasti ograničenoj ovim dvema linijama, pri čemu je slaganje ponovo nešto bolje za početak NDCa.

U cilju boljeg razumevanja fizike koja stoji iza NDC efekta za pozitrone primenili smo fluidni pristup za analizu formiranja Ps. Na bazi Robsonovog rada (Robson, 1986) napravili smo jednostavni model koji ne pretenduje da da kvantitativnu analizu fenomena, već samo kvalitativnu sliku. Zanemarili smo neelastične sudare, pretpostavili konstantnu kolizionu frekvencu  $\nu_m$  za prenos impulsa u elastičnim sudarima, a za frekvencu formiranja Ps,  $\nu^*$  pretpostavili smo da je jednaka konstanti  $b$  na energijama iznad praga za proces ( $\varepsilon^*$ ), a nula na nižim energijama.

Za model sa konstantnom kolizionom frekvencom za elastične sudare i uz pretpostavku da važi:

$$\frac{2\varepsilon}{3} \frac{\nu^*}{\nu_m} \ll 1 \ll \frac{2\varepsilon}{3} \frac{\nu_e^*}{\nu_e}, \quad (5.3)$$

gde je  $\nu^*$  izvod srednje frekvence za formiranje Ps po srednjoj energiji pozitrona  $\varepsilon$ , a  $\nu_e = \frac{2m}{m_0} \nu_m$  koliziona frekvencija za transfer energije u sudarima, fluks brzina drifta prema Robsonu (1986) data je kao:

$$w = \frac{eE}{m\nu_m}. \quad (5.4)$$

Kako je u ovom modelu  $w \sim E$ , često je zgodnije umesto  $E$  koristiti  $w$  kao nezavisnu promenljivu. Jednačina za balans energije u prisustvu nekonzervativnih sudara, na nultoj temperaturi i sa zanemarenim neelastičnim sudarima glasi (Robson, 1986):

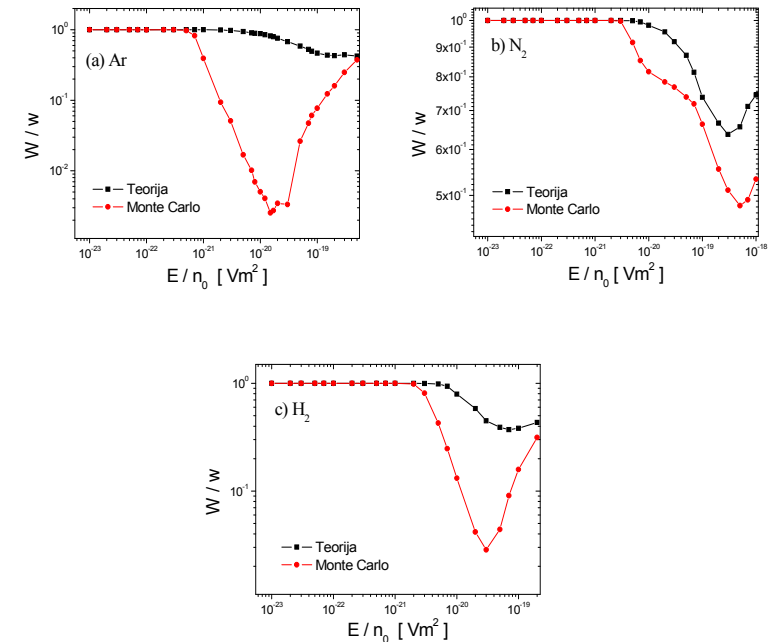
$$\frac{1}{2} mw^2 = \varepsilon + \frac{2\varepsilon^2}{3} \frac{\nu_e^*}{\nu_e}. \quad (5.5)$$

Ova jednačina i standardna formula koja definiše razliku između fluks i balk brzine drifta (jednačina 5.1) zajedno daju odnos balk i fluks brzine drifta u sledećoj formi:

$$\frac{W}{w} \approx \frac{d\varepsilon}{d\left(\frac{1}{2}m_0w^2\right)} \approx \left(1 + \frac{4\varepsilon v_e'}{3 v_e}\right)^{-1}. \quad (5.6)$$

Na slici 5.10 prikazan je odnos balk i fluks brzina drifta izračunatih Monte Carlo simulacijom i pomoću teorijskog izraza (5.6). Kolizione frekvence i srednja energija koje se pojavljuju sa desne strane izraza (5.6) dobijene su takođe Monte Carlo simulacijom. Na prvi pogled slaganje je jako loše, pogotovo za Ar i H<sub>2</sub>. Međutim, ono što treba imati u vidu je da je teorija za cilj imala kvalitativni, a ne kvantitativni opis fenomena, pa je posmatrano u tom svetlu slaganje zapravo dobro, jer teorija ispravno predviđa početak NDC efekta. Odatle može da se zaključi da prikazani jednostavan model uključuje osnovne faktore koji dovode do NDCa. Teorija i Monte Carlo bi se i kvantitativno bolje slagali kada bi u teoriju mogle da se uključe prostorne promene profila roja, na koje formiranje Ps kao nekonzervativni proces ima jak uticaj. To upravo i jeste razlog zašto je najmanje odstupanje Monte Carlo i teorijskih rezultata u slučaju N<sub>2</sub> – formiranje Ps tu ima najmanji uticaj.

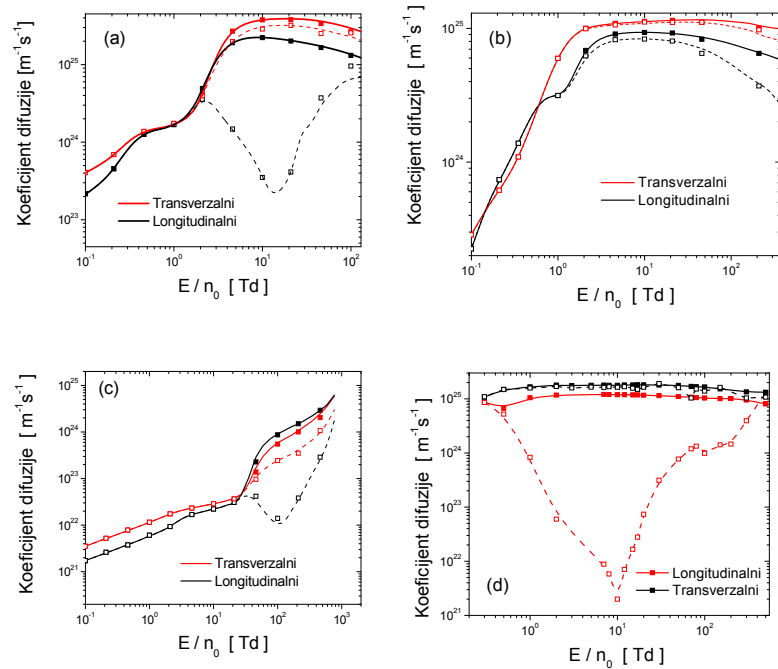
Sve do sada rečeno vodi do zaključka da se NDC efekat u transportu pozitrona javlja kao posledica nestajanja pozitrona sa fronta roja pri formiranju Ps. Takođe, za razliku od elektrona, neelastični sudari ne igraju bitnu ulogu.



Slika 5.10. Odnos balk i fluks brzina drifta: poređenje Monte Carlo rezultata i teorije (jednačina 5.6) za pozitronu u (a) Ar, (b) N<sub>2</sub> i (c) H<sub>2</sub>.

### 5.1.3. DIFUZIJA

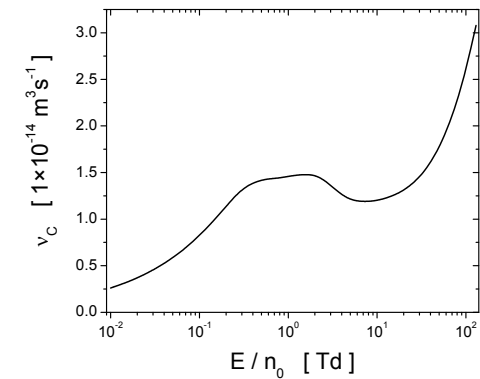
Kada se roj pozitrona kreće pod uticajem spoljašnjeg električnog polja, tenzor difuzije ima tri nenulta dijagonalna elementa: longitudinalnu difuziju i dve transverzalne, koje su po simetriji jednake. Difuzija isto kao brzina drifta ima dualnu prirodu i očekujemo da će postojati razlika između fluks i balk komponenti longitudinalne i transverzalne difuzije usled formiranja Ps.



**Slika 5.11.** Zavisnost fluks i balk komponenti transverzalne i longitudinalne difuzije od redukovanog električnog polja za pozitronu u (a) vodoniku, (b) azotu, (c) vodenoj pari i (d) argonu. Crvenom bojom data je transverzalna a crnom longitudinalna difuzija, dok su punom linijom predstavljene fluks, a isprekidanom balk vrednosti.

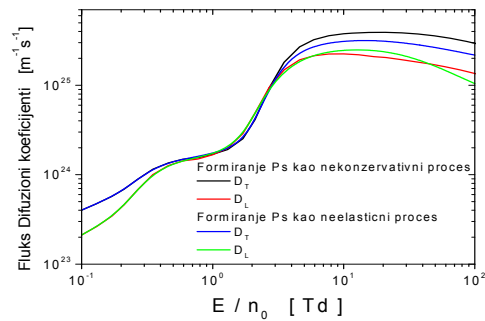
Na slici 5.11 date su zavisnosti fluks i balk komponenti longitudinalne i transverzalne difuzije za pozitronu u (a) vodoniku, (b) azotu, (c) vodenoj pari (Banković *et al.*, 2010) i (d) argonu. Sa slike se jasno vide velike razlike između fluks i balk longitudinalne difuzije, posebno izražene kod argona, vodonika i vode. Ovakve velike razlike nikada nisu primećene u transportu elektrona (Dujko, 2009). Anizotropna priroda tenzora difuzije je takođe očigledna i, kao i kod elektrona, razlike između longitudinalnog i transverznog koeficijenta difuzije su indukovane zavisnošću koliziona frekvence od energije. Prodiskutovaćemo slučaj vodonika, dat na slici 5.11 (a). Na onim vrednostima  $E/n_0$  na kojima transverzalna komponenta fluks koeficijenta difuzije dominira nad longitudinalnom, električno polje ubrzava pozitronu u

pravcu polja. Ako je koliziona frekvencija (slika 5.12) rastuća funkcija energije onda pozitroni na čelu roja imaju veću verovatnoću za sudar sa molekulima gasa nego oni sa začelja roja, što smanjuje difuziju pozitrona u pravcu polja – efekat električne anizotropije. U isto vreme u pravcu transverzalnom u odnosu na polje nema ovakve asimetrije lokalne srednje energije i efekat električne anizotropije se ne javlja. U uskoj zoni  $E/n_0$ , između 1 i 3 Td, koliziona frekvencija je opadajuća funkcija energije i longitudinalni koeficijent difuzije je veći od transverznog. Slično, ali ne identično ponašanje koeficijenta difuzije vidi se u slučaju vodene pare (slika 5.11 (b)) i argona (slika 5.11 (d)). Kod azota (slika 5.11 (c)) razlika između fluks i balk komponenti difuzije je drastično manja usled drugačijih relativnih položaja pragova za elektronske ekscitacije i formiranje Ps.



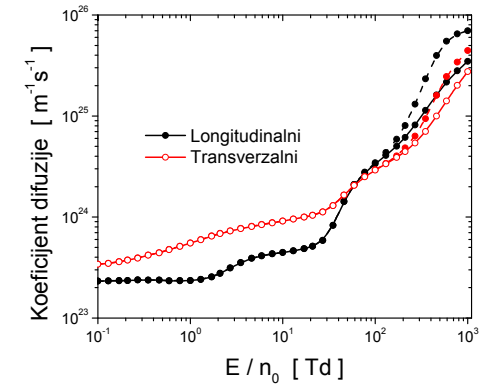
**Slika 5.12.** Zavisnost totalne koliziona frekvencije pozitrona u vodoniku u funkciji redukovanog električnog polja.

Da bi bolje razumeli uticaj nekonzervativnih sudara na difuziju tretirali smo formiranje Ps kao neelastični proces. Na slici 5.13 date su fluks i balk komponenta longitudinalne i transverzne difuzije izračunate za slučaj nekonzervative i konzervativne prirode formiranja Ps. Razlike između dobijenih fluks koeficijenta difuzije su jasan znak implicitnih efekata formiranja Ps, tj. direktnih efekata formiranja Ps na funkciju raspodele roja. Sa Slike 5.13 su radi jasnijeg prikaza izostavljeni rezultati Monte Carlo simulacije.



**Slika 5.13.** Transverzalni i longitudinalni fluks koeficijenti difuzije za pozitronu u  $H_2$  upoređeni sa istim koeficijentima izračunatim u slučaju kada je formiranje Ps tretirano kao konzervativni neelastični proces.

Poređenja radi, na slici 5.14 prikazane su fluks i balk komponente transverzne i longitudinalne difuzije za elektrone u molekulskom vodoniku. Razlike koje postoje između fluks i balk komponenti su mnogo manje nego u transportu pozitrona u  $H_2$  (slika 5.11 (a)), što je rezultat slabijeg uticaja jonizacije i zahvata elektrona na funkciju raspodele elektrona, nego formiranja Ps na funkciju raspodele pozitrona. Takođe, vidi se da je u zoni gde postoje razlike, fluks komponenta veća od balk komponente i longitudinalne i transverzne difuzije u celom razmatranom opsegu  $E/n_0$ , što ukazuje da jonizacija, kao proces koji uvećava broj elektrona u roju, dominira nad zahvatom. Slično kao kod pozitrona, uočljiv je efekat električne anizotropije.



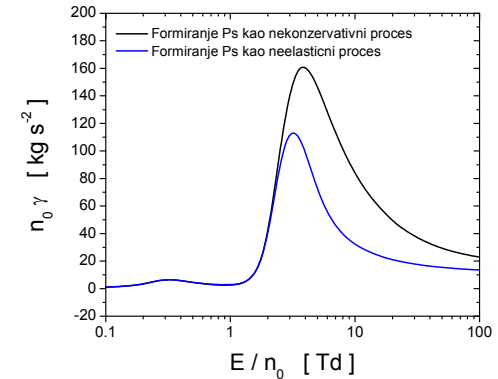
**Slika 5.14.** Zavisnost fluks i balk komponenti transverzne i longitudinalne difuzije od redukovanog električnog polja za elektrone u  $H_2$ . Crvenom bojom data je transverzalna a crnom longitudinalna difuzija, dok su punom linijom predstavljene fluks, a isprekidanom balk vrednosti.

#### 5.1.4. PROSTORNO RAZLOŽENE KARAKTERISTIKE ROJA I VEKTOR GRADIJENTA ENERGIJE

Postavlja se pitanje koje je fizičko tumačenje razlike između fluks i balk komponenti brzine drifta i difuzije. Transportna teorija elektrona nam govori da je najbolji način za razumevanje efekata nekonzervativnih sudara tumačenje prostorno razloženih profila srednje energije roja (Dujko, 2009). Iskristili smo isti pristup i za slučaj pozitrona i rezultate ćemo prodiskutovati za slučaj  $H_2$  kao pozadinskog gasa. Na slici 5.15 prikazan je vektor gradijenta energije,  $\gamma$ , za pozitronu u  $H_2$  u funkciji  $E/n_0$ . Crna kriva odgovara slučaju kada je formiranje Ps tretirano kao nekonzervativan proces, a plava slučaju kada je isti proces tretiran kao neelastični uz održavanje broja pozitrona u roju. Vektor gradijenta energije predstavlja prostorne varijacije prvog reda srednje energije duž roja. Na jeziku Monte Carlo simulacija ova transportna osobina predstavlja nagib srednje energije duž roja. Vidimo da između 0.1 i 2 Td nema razlike između crne i plave krive, što je i očekivano. Od 0.1 do 0.3 Td  $\gamma$  je rastuća funkcija  $E/n_0$ , ima lokalni maksimum na 0.3 Td i od 0.3 do 1 Td opada. Ovakvo ponašanje može lako da se objasni. U oblasti u kojoj je  $\gamma$  rastuća funkcija  $E/n_0$  presek za elastične procese je opadajuća funkcija energije, pozitroni se ubrzavaju duž pravca polja, njihova srednja energija

raste i, kao što je za očekivati, nagib srednje energije  $\gamma$  takođe raste. U zoni između 0.3 i 1 Td preseki za pobuđivanje vibracionih nivoa počinju da rastu, pozitroni gube energiju u sudarima i nagib srednje energije počinje da opada. Od 1 do 4 Td preseki za vibracione ekscitacije imaju nagli pad, pozitroni se ponovo ubrzavaju i nagib srednje energije naglo raste. Crna i plava kriva se u potpunosti poklapaju sve do  $E/n_0 = 2$  Td. Šta je razlog njihovog razdvajanja na vrednostima polja većim od 2 Td? Potsetimo se da plava linija predstavlja nagib srednje energije roja izračunat u modelu u kome formiranje Ps tretiramo kao konzervativan neelastični proces. Pozitroni u ovom slučaju nakon „formiranja Ps“ ne nestaju iz roja već samo gube deo svoje energije, pa se lokalno povećava broj pozitrona sa nižim energijama. Nagli pad plave krive je rezultat dejstva formiranja Ps kao neelastičnog konzervativnog procesa.  $\gamma$  ima maksimum na vrednosti polja na kojoj formiranje Ps postaje dominantan proces, što znači da, lokalno, na čelu roja ima više onih pozitrona koji gube energiju kroz ovaj kanal interakcije nego pozitrona koji bivaju dalje ubrzani poljem. Kao rezultat ove lokalne preraspodele pozitrona po energijama, nagib srednje energije roja počinje da opada. Ovaj trend se nastavlja kako  $E/n_0$  raste sve do momenta kada ostali neelastični procesi počnu da ulaze u igru i tada nagib srednje energije još više opada.

Crna kriva je identična plavoj krivi za niske vrednosti  $E/n_0$  sve do  $E/n_0 = 2$  Td kada efekti nekonzervativne prirode formiranja Ps postaju vidljivi. Prilikom formiranja Ps iz roja nestaju pozitroni sa najvećim energijama, dok na čestice sa nižim energijama ovaj proces nema nikakav uticaj. Ovo zapravo znači da crna kriva na slici 5.15 odgovara pozitronima sa niskim energijama (pozitroni sa višim energijama su nestali iz roja). Niskoenergijske pozitroni dalje ubrzava električno polje i nagib srednje energije roja nastavlja da raste. U jednom trenutku, lokalno, na čelu roja, broj pozitrona koji su formiranjem Ps nestali iz roja premašuje broj onih pozitrona koji u tu tačku dolaze ubrzanjem polja i u toj tački nagib srednje energije počinje da pada. Brzina centra mase roja menja pravac, centar mase počinje da se kreće u smeru suprotnom od smera ubrzavajućeg polja i NDC efekat počinje da se vidi.



Slika 5.15. Vektor gradijenta energije roja pozitrona u  $H_2$ ; crna kriva –formiranje Ps tretirano kao nekonzervativan proces; plava kriva –formiranje Ps tretirano kao konzervativni neelastičan proces.

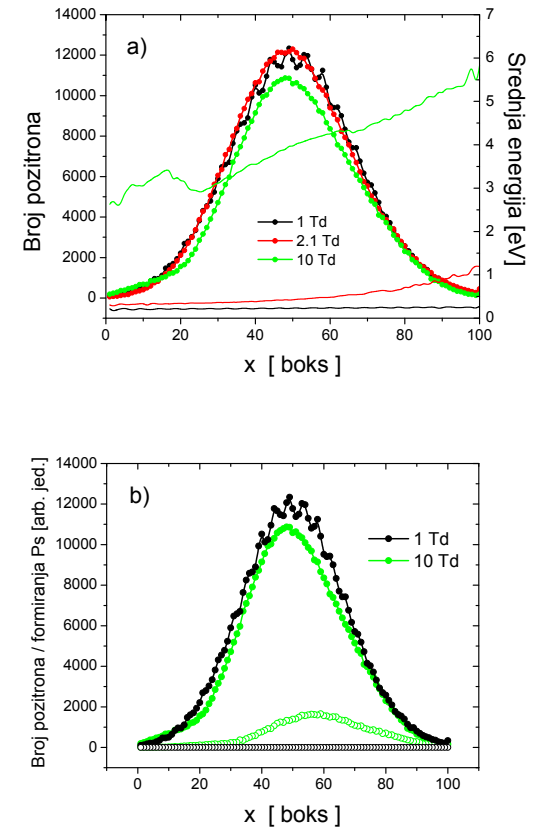
Pogledajmo sada kako izgleda prostorni profil roja pozitrona u  $H_2$  (slika 5.16). Kada ansambl naelektrisanih čestica uvedemo u neutralni gas vrlo brzo njegov oblik postaje sličan Gaussianu. Usled difuzije ansambl se postepeno širi. Spoljašnje polje deformiše ovaj profil u prostoru i čestice se usmeravaju u pravcu polja. Dolazi do pregrupisanja čestica po energijama u pravcu polja, najbrže čestice se nalaza na frontu roja, a najsporije na začelju.

Na slici 5.16 prikazan je prostorni profil roja za tri različite vrednosti redukovanoeg električnog polja. Za  $E/n_0 = 1$  Td roj je u zoni energija ispod praga za formiranje Ps i na profilu brzine drifta (slika 5.4 (a)) vidimo da su fluks i balk komponenta jednake.  $E/n_0 = 2.1$  Td je vrednost polja na kojoj balk komponenta počinje da opada, tj. počinje NDC, a za  $E/n_0 = 10$  Td nalazimo se na sredini zone NDC efekta. Na slici 5.16 (a) je takođe prikazana prostorna zavisnost srednje energije roja u sva tri slučaja, a na slici 5.16 (b) prostorno razložena frekvencija formiranja Ps. Na x – osi su prikazani prostorni boksevi u pravcu spoljašnjeg polja u kojima se vrši samplovanje u Monte Carlo kodu. Simulacija je urađena za  $10^6$  čestica.

Prostorni profil roja za  $E/n_0 = 1$  Td na slici 5.16 (a) ima simetričan oblik koji jako liči na Gaussian. Mali lokalni maksimumi i minimumi mogu da se vide duž prostornog profila roja. Ovaj tranzijentni fenomen je rezultat činjenice da je srednja energija roja blizu praga za vibracione ekscitacije. Prema tome, najbrži pozitroni u roju imaju dovoljno energije da



vibraciono pobude molekula vodonika i pošto u sudaru izgube deo energije bivaju potisnuti u niskoenergijski deo roja. Polje ponovo ubrzava ove pozitrone i oni ponovo pobuđuju molekula  $H_2$ . Priroda ovih tranzijentnih prostornih struktura je slična strukturama koje se javljaju u Franck Hertzovom eksperimentu (Robson *et al.*, 2000). Crna kriva bez simbola na slici 5.16 (a) predstavlja prostorno razloženu srednju energiju roja na  $E/n_0 = 1$  Td i vidimo da je njen nagib tako mali da se ni ne vidi na ovoj slici. Crveni profil na slici odgovara samom početku NDC efekta na vrednosti polja  $E/n_0 = 2.1$  Td. Profil je takođe skoro simetričan i u odnosu na profil na 1 Td vrlo malo pomeren na levu stranu. Lokalni maksimumi i minimumi su skoro sasvim nestali. Došlo je do preraspodele čestica unutar roja po energijama, najbrže se nalaze na frontu roja (desna strana slike), dok su najsporije na začelju (leva strana), što se da videti i iz nagiba srednje energije duž roja koji je znatno uvećan ka frontu (crvena kriva). Zeleni profil odgovara zoni jakog NDC efekta, na vrednosti polja  $E/n_0 = 10$  Td. Profil roja je manje simetričan, nagnut je na levu stranu i izgleda kao da je front roja (desna strana) odsečen. Srednja energija ima mnogo veći nagib, vrednost je u zoni iznad praga za formiranje Ps i ponovo raste ka frontu roja. Da bi bolje razumeli šta se ovde dešava samplovali smo i prostorno razloženu frekvencu formiranja Ps (slika 5.16 (b) otvoreni simboli) za vrednosti polja  $E/n_0$  od 1 Td i 10 Td. Vidimo da je na  $E/n_0 = 1$  Td frekvencija formiranja Ps duž celog roja jednaka nuli. To je u skladu sa očekivanjima, jer je u toj zoni energija roja daleko ispod praga za formiranje Ps i sve čestice početnog roja su i dalje tu. Međutim, za  $E/n_0 = 10$  Td, vidimo da frekvencija formiranja Ps ima oblik koji donekle podseća na oblik samog roja. Maksimum ovog profila je pomeren ka frontu roja, tačno ka onom delu gde nedostaju čestice da bi profil roja bio simetričan. Ovo je još jedan dokaz da je NDC efekat u balk brzini drifta, kao i velika razlika između flaks i balk longitudinalne komponente tenzora difuzije posledica nekonzervativne prirode formiranja Ps. Formiranje Ps je proces koji selektivno uklanja čestice najvećih energija iz roja.

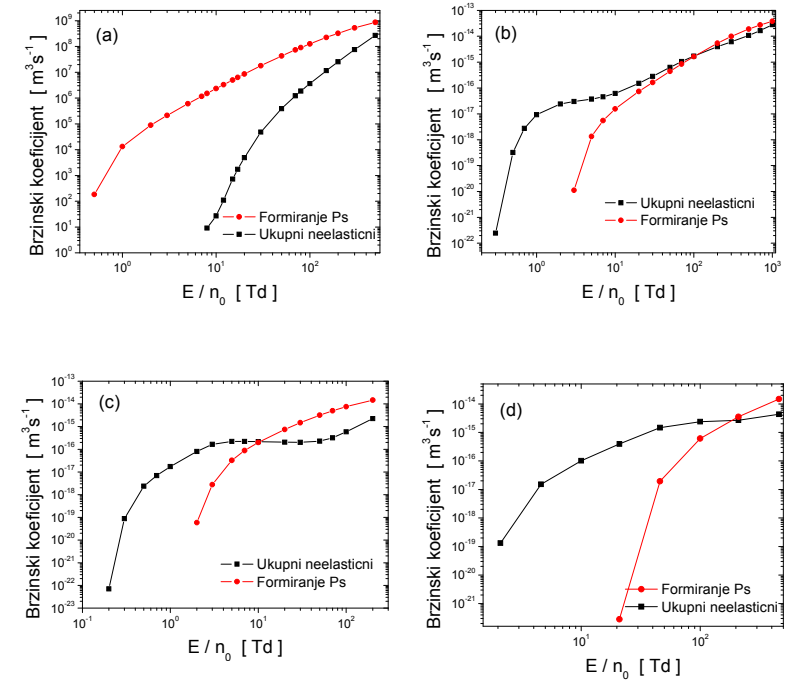


**Slika 5.16.** Pozitroni u vodoniku: (a) Prostorni profil roja i prostorno razložena srednja energija za  $E/n_0$  od 1, 2.1 i 10 Td; (b) Poređenje prostorno razloženog broja pozitrona u roju i broj događaja formiranja Ps za  $E/n_0$  od 1 i 10 Td.

### 5.1.5. BRZINSKI KOEFICIJENTI

Na slici 5.17 dati su brzinski koeficijent za formiranje Ps i zbir brzinskih koeficijenata za sve ostale neelastične procese za roj pozitrona u (a) argonu, (b) azotu, (c) vodoniku i (d) vodenoj pari.

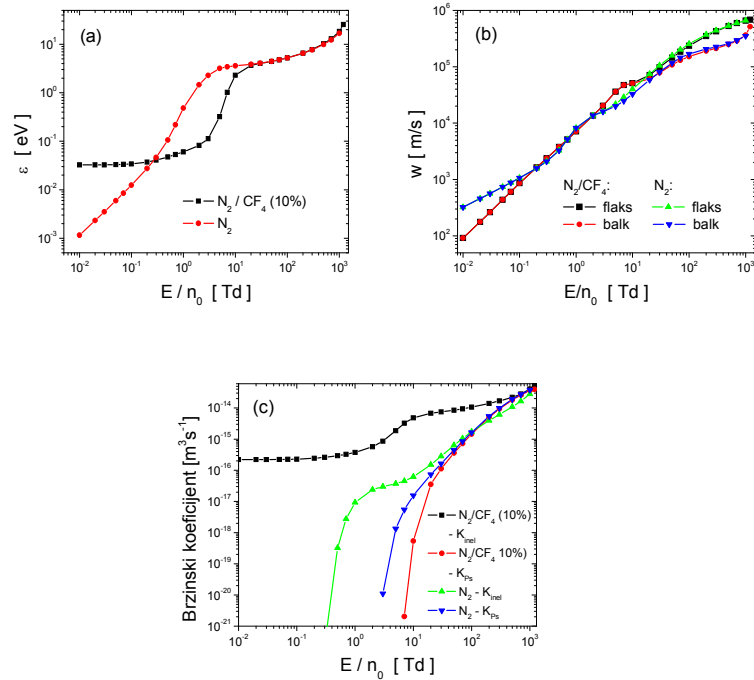
Na prvi pogled je uočljivo da brzinski koeficijent za formiranje Ps u argonu značajno veći od sume svih ostalih brzinskih koeficijenata za neelastične procese u celom razmatranom domenu  $E/n_0$ . Ovo je još jedna potvrda koliko je efekat formiranja pozitronijuma u argonu dominantan i bitan za transport pozitrona. Brzinski koeficijent za formiranje pozitronijuma je takođe rastuća funkcija energije. Za sve tipove naelektrisanih čestica generalno važi da ukoliko je proces koji dovodi do nestajanja čestica iz roja rastuća funkcija energije, to vodi do hladjenja roja, tj. do smanjenja srednje energije i smanjenja merljive brzine drifta – balk brzine drifta (Robson, 1986; Robson, 2006; Robson *et al.*, 2003; Robson, 1991; Makabe i Petrović, 2006). Formiranje Ps dominira u zoni  $E/n_0$  u kojoj se javlja NDC, što je indirektni dokaz da je NDC efekat posledica formiranja Ps, a ne ostalih neelastičnih procesa. Slični argumenti važe za brzinske koeficijente pozitrona u  $H_2$  i  $H_2O$ . Što se tiče azota, situacija je nešto drugačija. Sa slike 5.17 (b) može da se vidi da je na nižim vrednostima  $E/n_0$  brzinski koeficijent za formiranje Ps niži od koeficijenta za ostale neelastične procese. Ovo je u skladu sa činjenicom da je azot dobar izbor za termalizaciju pozitrona. Pozitroni se lako termalizuju u gasu koji ima istovremeno niske pragove i veliki brzinski koeficijent za neelastične procese koji može da se takmiči sa brzinskim koeficijentom za formiranje Ps i na taj način smanji energiju pozitrona ispod praga za formiranje Ps i omogući im da ostanu u roju.



Slika 5.17. Brzinski koeficijent za formiranje Ps i sumarni brzinski koeficijent za neelastične procese za pozitronu u (a) Ar, (b)  $N_2$ , (c)  $H_2$  i (d)  $H_2O$  u funkciji redukovanog električnog polja  $E/n_0$ .

### 5.1.6. SMEŠA $N_2 - CF_4$

Na slici 5.18 upoređene su (a) srednja energija, (b) brzina drifta i (c) brzinski koeficijenti za roj pozitrona u čistom azotu i smeši azota sa 10%  $CF_4$ . Ovo poređenje je bitno jer se u sudarnim zamkama jako često azotu dodaje mala količina  $CF_4$ , jer se empirijski pokazalo da se na taj način povećava efikasnost zamke. U ovom paragrafu se bavimo osnovnim aspektima transporta pozitrona u smeši, a u sledećem ćemo pokazati kako mala količina  $CF_4$  utiče na vreme termalizacije pozitrona u azotu.



Slika 5.18. Poređenje (a) srednje energije, (b) brzine drifta i (c) brzinskog koeficijenta za pozitronu u čistom  $N_2$  i u smeši  $N_2$  i 10%  $CF_4$ .

Dodavanjem  $CF_4$  srednja energija roja se značajno menja, kao što se može videti sa slike 5.18 (a). Na niskim vrednostima redukovanog električnog polja srednju energiju pozitrona uglavnom određuju gubici u sudarima koji vode do ekscitacija rotacionih nivoa  $N_2$ . Sa porastom  $E/n_0$  na srednju energiju sve više utiču vibracione ekscitacije  $CF_4$ , pa je prema tome u zoni srednjih vrednosti  $E/n_0$  srednja energija pozitrona u smeši manja nego u slučaju čistog  $N_2$ .

Za očekivati je i da se brzina drifta menja dodavanjem  $CF_4$  čistom  $N_2$  (Slika 5.18 (b)). Slični argumenti kao za srednju energiju važe i za brzinu drifta. Na niskim vrednostima  $E/n_0$  vidi se uticaj preseka za rotacione ekscitacije  $N_2$ , dok se u zoni srednjih vrednosti  $E/n_0$  vidi

mali lokalni maksimum u profilu i fluks i balk brzine drifta koji je posledica smanjenja uticaja vibracionih ekscitacija  $CF_4$  molekula na tim energijama. Konačno, na visokim  $E/n_0$  nestaju razlike u brzini drifta za smešu i za čisto  $N_2$ , što je očekivano jer na visokim energijama vibracione ekscitacije molekula  $CF_4$  ne utiču na pozitronu u roju.

Brzinski koeficijenti nedvosmisleno pokazuju da će se pozitroni brže termalizovati ako azotu dodamo malu količinu  $CF_4$ . Brzinski koeficijent za sve neelastične procese je značajno veći nego u slučaju čistog azota, dok je brzinski koeficijent za formiranje pozitronijuma na nižim  $E/n_0$  manji, što je idealna situacija, jer bi i samo jedan od ova dva faktora bio dovoljan za poboljšanje termalizacije.

### 5.1.7. TERMALIZACIJA POZITRONA U $H_2$ , $N_2$ I SMEŠI $N_2$ SA 10% $CF_4$

U ovom odeljku prikazaćemo profile vremenske relaksacije energije i proračune vremena termalizacije za pozitronu u  $H_2$ ,  $N_2$  i smeši  $N_2$  sa  $CF_4$  (Banković *et al.*, 2008b). Koristili smo Monte Carlo simulaciju u opsegu energija relevantnih za Penning – Malmberg – Surko pozitronske zamke, na sobnoj temperaturi (293 K). Motivacija za ove proračune je, pored procene vremena termalizacije za pozitronu u različitim gasovima, mogućnost da se optimizuje sastav gasa koji se koristi u pomenutom tipu pozitronskih zamki, a samim tim i njihov rad.

Vreme termalizacije definiše se kao vreme koje pozitronima treba da dostignu energije 50% iznad termalne energije u datom gasu, ali iz praktičnih razloga mi smo pod vremenom termalizacije podrazumevali vreme za koje pozitroni dostignu energiju jednaku dvostrukoj vrednosti termalne energije. Rezultati su upoređeni sa vremenima termalizacije koje su dobili Al-Qaradawi i saradnici (Al-Qaradawi *et al.*, 2000) u eksperimentu koji koristi spektroskopiju vremena života pozitrona (*engl.* positron lifetime spectroscopy). Kada se prave poređenja poput ovog, treba imati u vidu da se vreme određuje na potpuno različite načine, tako da je jako teško na istu način definisati početak termalizacije.

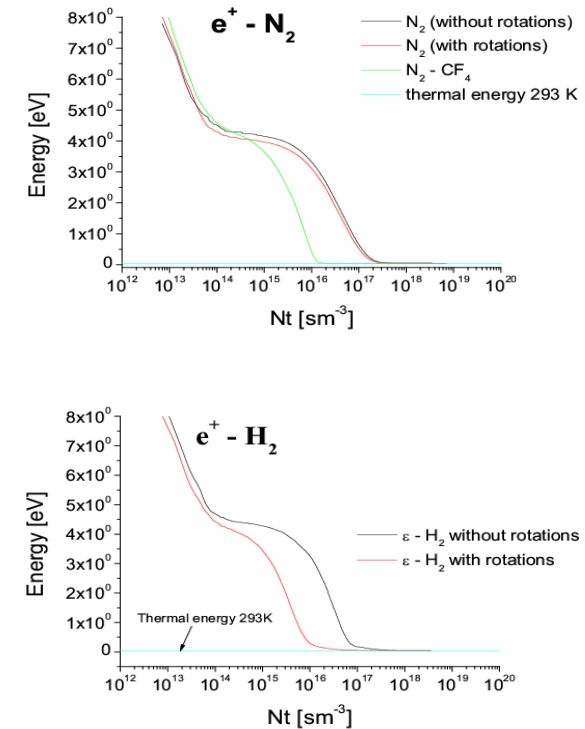
Vremenska relaksacija roja pozitrona iz Maxwelliana srednje početne energije 10 eV u azotu prikazana je na slici 5.19 (a). Na istoj slici data je relaksacija energije roja kada se u proračun uključe i rotacione ekscitacije molekula azota. Preseci za rotacione ekscitacije molekula azota su jako mali i njihov doprinos termalizaciji je neznatan čak i ispod 100 meV. Pretpostavili smo da su rotacione ekscitacije molekula pozitronima iste kao rotacione ekscitacije u sudarima sa elektronima, samo bez rezonanci. Dodavanjem drugog molekulskeg

gasu koji, kao na primer  $\text{CF}_4$ , ima velike preseke za vibracione ekscitacije, ubrzava se termalizacija dok se ukupni gubici usled formiranja Ps ne povećavaju značajno. Na slici 5.19 (a) prikazana je i termalizacija roja u smeši  $\text{N}_2$  sa 10%  $\text{CF}_4$ . Vidi se da se dodavanjem  $\text{CF}_4$  molekulsom azotu vreme termalizacije pozitrona skraćuje za red veličine.

Na slici 5.19 (b) prikazana je vremenska relaksacija energije roja pozitrona u  $\text{H}_2$  gasu. Preseci za rotacione ekscitacije vodonika su mnogo veće nego u slučaju azota i ispod energije od 100 meV postaju ključni mehanizam termalizacije, čineći vodonik skoro isto tako efikasnim u termalizaciji pozitrona kao smeša  $\text{N}_2$  i  $\text{CF}_4$ . Glavni razlog zašto se u sudarnim zamkama ipak koristi smeša  $\text{N}_2$  i  $\text{CF}_4$  a ne  $\text{H}_2$  je relativni položaj preseka za formiranje Ps u odnosu na pragove za elektronske ekscitacije. U slučaju  $\text{H}_2$  prag za formiranje Ps je na nižoj energiji nego pragovi za elektronske ekscitacije, pa je broj pozitrona koji nestaju iz roja formiranjem Ps mnogo veći nego pri transportu kroz  $\text{N}_2$ .

Sa slika 5.19 (a) i (b) može da se odredi vreme termalizacije roja. Trenutak kad pozitroni dostižu termalnu ravnotežu sa okolnim gasom definisan je kao trenutak kada je energija pozitrona jednaka polovini vrednosti termalne energije iznad  $3kT/2$ . Vremena termalizacije koje su izmerili Al-Qaradawi i saradnici (2000) data su u jedinicama  $\text{ns} \cdot \text{Amagat}$  ( $1 \text{ Amagat} = 2.69 \cdot 10^{25} \text{ sm}^{-3}$ ), a ovde su te jedinice konvertovane u  $\text{sm}^{-3}$ . Poređenje naših Monte Carlo rezultata i eksperimenta je prikazano u Tabeli 5.1. Treba imati u vidu da je u eksperimentu vreme limitirano energijskom rezolucijom. Iz tabele se vidi da se naši rezultati dobro slažu sa eksperimentom.

Iako je dobijeno dobro slaganje između naših Monte Carlo rezultata i merenja Al-Qaradawija i saradnika (2000), treba imati u vidu da za proračun vremena termalizacije u konkretnoj pozitronskoj zamci Surko tipa nije adekvatno polaziti od Maxwelliana kao početne raspodele, već treba koristiti raspodele koje više odgovaraju situaciji u trapu. Ovde je data gruba procena vremena termalizacije i slaganje sa eksperimentom pre svega treba shvatiti kao argument za validnost korišćenih preseka. Modelovanje same zamke je izvan okvira ove disertacije.



Slika 5.19. Termalizacija srednje energije roja pozitrona sa Maxwellianom kao početnom raspodelom i početnom energijom od 10 eV u (a)  $\text{N}_2$  i (b)  $\text{H}_2$ .

Tabela 5.1 Poređenje vremena termalizacije pozitrona dobijenih Monte Carlo kodom sa eksperimentalnim rezultatima (Al-Qaradawi et al., 2000).

Gas	$n_{0t} (\text{sm}^{-3})$	$n_{0t} (\text{sm}^{-3})$
	Monte Carlo rezultati	Al-Qaradawi i saradnici
$\text{N}_2$	$2.5 \cdot 10^{17}$	$3.8 \cdot 10^{17}$
$\text{N}_2 - \text{CF}_4$	$1.4 \cdot 10^{16}$	X
$\text{H}_2$	$4.5 \cdot 10^{16}$	$6.5 \cdot 10^{16}$

## 6. TRANSPORT POZITRONA U UKRŠTENIM ELEKTRIČNIM I MAGNETSKIM POLJIMA

U ovom poglavlju opisan je transport pozitrona u argonu, molekulskom vodoniku i azotu i u vodenoj pari pod uticajem ukrštenog spoljašnjeg, homogenog i stacionarnog, električnog i magnetskog polja ( $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ ). Koordinatni sistem uvodimo tako da je  $x$  osa određena pravcem i smerom električnog polja, dok je magnetsko polje usmereno duž  $z$  ose. Motivaciju za bavljenje transportom pozitrona u ovoj specifičnoj konfiguraciji polja pronašli smo u transportu elektrona u namagnetisanim plazmama. Detaljne studije rojeva elektrona otkrivaju da magnetsko polje ima jak uticaj na transportne osobine elektrona, pogotovo u uslovima kada ciklotronska frekvencija dominira nad kolizijom (Dujko *et al.*, 2005). U sklopu neke buduće primene pozitrona, ukršteno električno i magnetsko polje bi moglo da obezbedi bolju kontrolu nad transportnim osobinama pozitrona u neutralnim gasovima.

Kada se kreću pod uticajem spoljašnjeg električnog polja, pozitroni bivaju ubrzani duž pravca polja. Magnetsko polje ne menja kinetičku energiju pozitrona već ih samo dodatno zavrti oko linija sile, tako da se u zbiru kreću po spiralnoj orbiti u pravcu električnog polja. Veličine koje karakterišu kretanje pozitrona oko linija sile su Larmorov radijus,  $r_L$  i ciklotronska frekvencija,  $\Omega$  i definišu se kao:

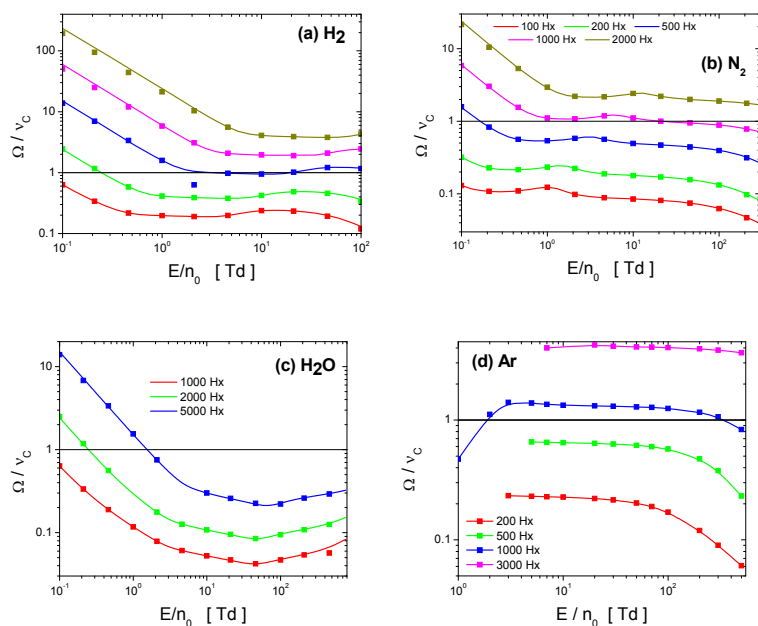
$$r_L = \frac{mv_r}{eB}, \quad \Omega = \frac{eB}{m}, \quad (6.1)$$

gde je  $m$  masa,  $e$  naelektrisanje pozitrona,  $B$  intenzitet magnetskog polja i  $v_r$  komponenta brzine tangencijalna na orbitu pozitrona.

Osnovni aspekti transporta naelektrisanih čestica u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  polju određeni su odnosom ciklotronske i kolizijne frekvencije (White *et al.*, 1997; 2005; Dujko *et al.*, 2005; 2006). Izdvajaju se tri bitne oblasti određene vrednostima  $\mathbf{E}$  i  $\mathbf{B}$  polja. U prvoj je ciklotronska frekvencija mnogo manja od kolizijne ( $\Omega \ll \nu_c$ ) i uticaj magnetskog polja na pozitrone je slab. Pozitroni u srednjem između dva sudara kompletiraju samo deo svoje kružne orbite i u ovom režimu transportne osobine roja kontrolišu sudari. Druga zona je zona u kojoj magnetsko polje kontrolišu sudari, kolizijna frekvencija je mnogo manja od ciklotronske ( $\nu_c \ll \Omega$ ) i pozitroni u srednjem kompletiraju veliki broj kružnih orbita pre nego što se sudare sa molekulom/atomom pozadinskog gasa. Između ove dve zone nalazi se zona magnetskog polja srednje jačine u kojoj su ciklotronska i kolizijna frekvencija približno jednake ( $\Omega \approx \nu_c$ ). U prelaznoj zoni transportne osobine pozitrona na komplikovan način zajedno određuju sudari i magnetsko polje.

Na slici 6.1 prikazan je odnos ciklotronske i kolizijne frekvencije,  $\Omega/\nu_c$  u funkciji redukovane električne polja za roj pozitrona u (a)  $\text{H}_2$ , (b)  $\text{N}_2$ , (c)  $\text{H}_2\text{O}$  i (d)  $\text{Ar}$ , za odabrane vrednosti redukovane magnetske polja,  $B/n_0$ . Za svaki pojedinačni gas magnetsko polje je izabrano tako da budu obuhvaćena sva tri režima transporta, dok je opseg  $E/n_0$  za svaki gas isti kao i u slučaju transporta u čistom električnom polju. Sa slike 6.1 (a) vidi se da za vrednosti redukovane magnetske polja 100 i 200 Hx (osim za niske vrednosti  $E/n_0$ ) transport pozitrona u molekulskom vodoniku određuju sudari, dok je za  $B/n_0 = 500, 1000$  i  $2000$  Hx transport pod kontrolom magnetskog polja. Za  $B/n_0 = 500$  Hx u zoni od  $E/n_0 \sim 2$  Td do  $E/n_0 \sim 20$  Td pozitroni se nalaze u prelaznom režimu gde sudari i magnetsko polje ravnopravno kontrolišu transport. Kod azota (slika 6.1 (b)) sudari dominiraju i na 500 Hx kao i na visokim  $E/n_0$  za  $B/n_0 = 1000$  Hx, a uska zona prelaznog režima se javlja oko 20 Td za  $B/n_0 = 1000$  Hx. Za magnetska polja iznad 1000 Hx transportom dominira magnetsko polje. U slučaju vodene pare (slika 6.1 (c)) potrebna su znatno veća magnetska polja da bi se roj našao u režimu u kome magnetsko polje kontrolišu njegove osobine, jer na  $B/n_0 = 1000$  Hx transport i dalje određuju sudari. Za 2000 Hx samo na niskim vrednostima  $E/n_0$  magnetsko polje kontrolišu sudari, dok za 5000 Hx ta oblast ide do  $\sim 2$  Td. Prelaznog režima nema. Ako ponovo pogledamo preseke za sudare pozitrona sa molekulom vode (slika 3.5) i uporedimo ih sa presecima za sudare pozitrona sa ostalim proučavanim gasovima vidimo da su preseki za

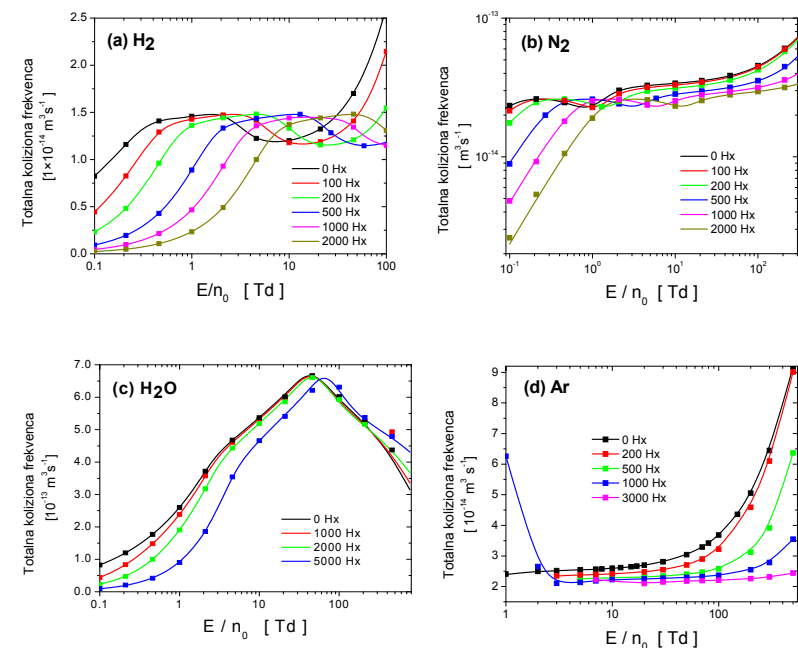
vodu znatno veći, pa je za očekivati da će biti potrebne znatno veće vrednosti magnetskog polja da bi se prešlo u režim u kome sudari više ne kontrolišu dominantno osobine roja. Kod argona (slika 6.1 (d)) za vrednosti magnetskog polja od 200 i 500 Hx roj je u sudarnom režimu, dok za 1000 i 3000 Hx ponašanje roja određuje magnetsko polje. Za  $B/n_0 = 1000$  Hx i  $E/n_0 < 2$  Td roj je pod velikim uticajem sudara. Prelaznog režima, slično kao kod vodene pare, nema.



**Slika 6.1.** Odnos ciklotronske i kolizivne frekvence u funkciji redukovanog električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovanog magnetskog polja za roj pozitrona u (a)  $H_2$  i (b)  $N_2$ , (c)  $H_2O$  i (d)  $Ar$ .

Na slici 6.2 prikazana je zavisnost totalne kolizivne frekvence od redukovanog električnog polja za pozitrona u (a)  $H_2$ , (b)  $N_2$ , (c)  $H_2O$  i (d)  $Ar$  za različite vrednosti redukovanog magnetskog polja. Za sva četiri gasa za sve vrednosti magnetskog polja profili totalne kolizivne frekvence imaju isti oblik kao u slučaju transporta u električnom polju, ali sa povećanjem magnetskog polja za fiksno  $E/n_0$  imaju niže vrednosti i pomeraju se u desnu stranu.

Kao što je već naglašeno u poglavlju 2. u  $E \times B$  konfiguraciji polja magnetsko polje uvodi u igru nove transportne koeficijente. Naime, u  $E \times B$  konfiguraciji postoje dve brzine drifta, jedna u pravcu električnog polja  $E$  i druga u  $E \times B$  pravcu i očekuje se da njihovo ponašanje bude različito. Tensor difuzije ima tri nenulte dijagonalne komponente,  $D_E$ ,  $D_{E \times B}$  i  $D_B$  u  $E$ ,  $E \times B$  i  $B$  pravcu. Takođe, postoje i dve nenulte vandijagonalne komponente koje pojedinačno ne mogu eksperimentalno da se detektuju. One formiraju takozvanu Hallovu struju koja je eksperimentalno merljiva veličina. U ovom poglavlju ćemo se detaljnije pozabaviti ovim transportnim koeficijentima i fenomenima do kojih dovodi uvođenje magnetskog polja.



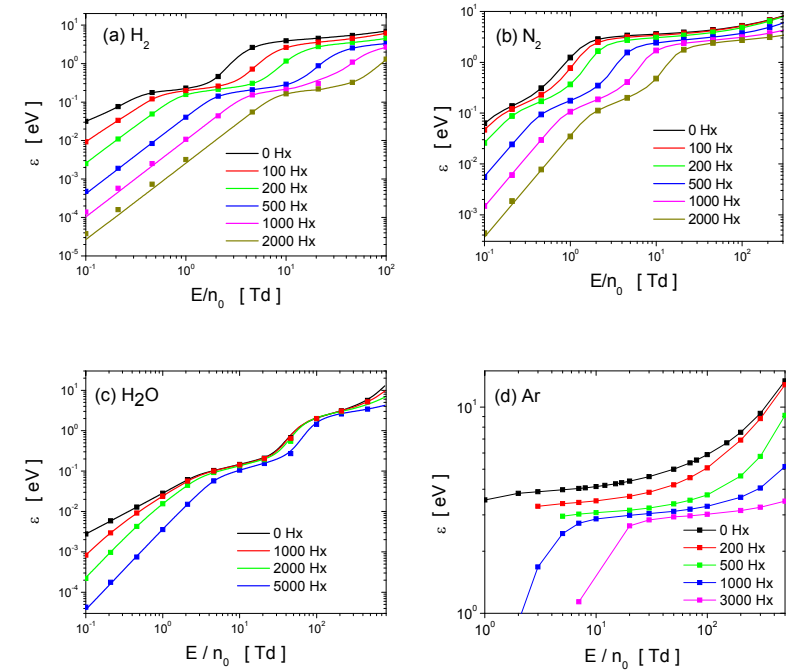
**Slika 6.2.** Zavisnost totalne kolizivne frekvence od redukovanog električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovanog magnetskog polja za roj pozitrona u (a)  $H_2$  i (b)  $N_2$ , (c)  $H_2O$  i (d)  $Ar$ .

## 6.1. TRANSPORTNI KOEFICIJENTI I PARAMETRI

### 6.1.1. SREDNJA ENERGIJA

Na slici 6.3 dati su profili srednje energije roja pozitrona u zavisnosti od redukovanog električnog polja za razne vrednosti redukovanog magnetskog polja za (a)  $H_2$ , (b)  $N_2$ , (c)  $H_2O$  i (d) Ar. Pod uticajem isključivo električnog polja, oblik zavisnosti srednje energije od spoljašnjeg polja reflektuje energijsku zavisnost preseka za pojedinačne procese. U  $E \times B$  konfiguraciji srednja energija takođe reflektuje energijsku zavisnost preseka, ali sve slabije kako ulazimo u režim u kome uticaj magnetskog polja na roj dominira nad uticajem sudara (npr. srednja energija roja u  $H_2$  i  $N_2$  za 2000 Hx). Takođe se kod sva četiri gasa jasno vidi efekat magnetskog hlađenja roja - sa povećanjem magnetskog polja za fiksiranu vrednost  $E/n_0$  srednja energija roja opada. Ovo je posebno izraženo na niskim  $E/n_0$  gde magnetsko polje ima dominantan uticaj na transportne osobine roja. Fenomen magnetskog hlađenja roja je dobro poznat iz transporta elektrona (Dujko et al., 2005; 2006; White et al., 2005; Ness, 1994). Sa porastom  $B/n_0$  profili srednje energije se pomeraju na desnu stranu, ka višim vrednostima  $E/n_0$ . Kao što se iz odnosa ciklotronske i kolizione frekvence može očekivati, magnetsko polje najjači uticaj ima na pozitrone u  $H_2$ , a najslabiji na pozitrone u vodenoj pari.

Opadanje srednje energije roja pozitrona sa porastom intenziteta magnetskog polja tumači se indirektnim dejstvom sile  $v \times B$ . Usled rotacije pozitrona u prisustvu magnetskog polja, povećava se u srednjem broj pozitrona koji se kreću nasuprot pravca ubrzavajućeg polja. Drugim rečima otežava se pomeranje pozitrona u smeru suprotnom od smeru dejstva polja. Na taj način dolazi do opadanja srednje energije pozitrona na fiksiranoj vrednosti  $E/n_0$ , sa povećanjem  $B/n_0$ . Na visokim vrednostima  $B/n_0$ , na kojima je ciklotronska frekvencija mnogo veća od kolizione, električno polje ne može više efikasno da pumpa energiju u sistem.

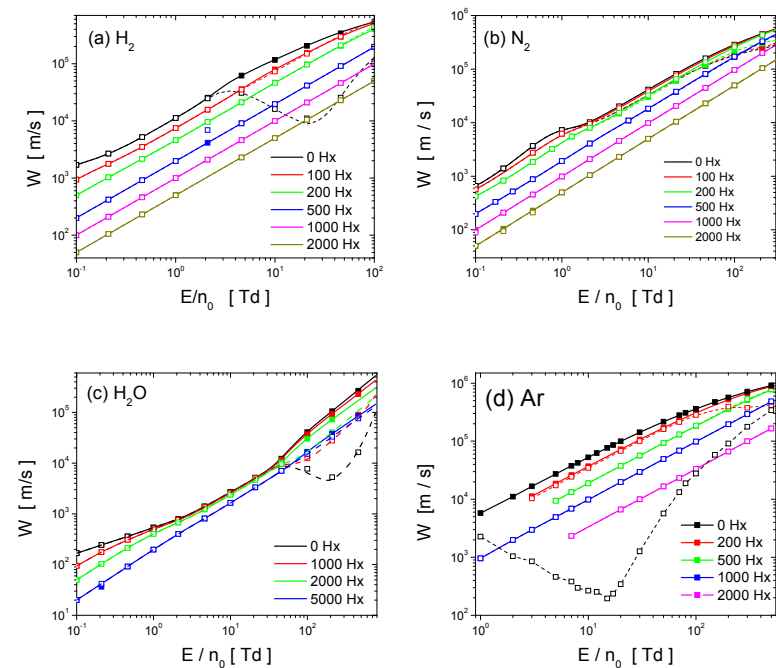


Slika 6.3. Zavisnost srednje energije od redukovanog električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovanog magnetskog polja za roj pozitrona u (a)  $H_2$  i (b)  $N_2$ , (c)  $H_2O$  i (d) Ar.

### 6.1.2. BRZINA DRIFTA

Kada se pozitroni kreću samo pod uticajem spoljašnjeg električnog polja brzina drifta je usmerena duž pravca polja. Usled nekonzervativne prirode formiranja Ps razdvajaju se fluks i balk komponenta brzine i u balk komponenti se javlja NDC efekat. Kada transport posmatramo u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  konfiguraciji, pored komponente brzine u pravcu električnog polja, pojavljuje se i komponenta u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu. Ove dve komponente daju ukupnu brzinu drifta, čija je apsolutna vrednost data na slici 6.4 za različite vrednosti magnetskog polja, u funkciji redukovano električnog polja za (a)  $\text{H}_2$ , (b)  $\text{N}_2$ , (c)  $\text{H}_2\text{O}$  i (d) Ar. Postavlja se pitanje da li i u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  konfiguraciji možemo da očekujemo pojavu NDC efekta i kakav je uticaj magnetskog polja na njegov razvoj.

Sa slike 6.4 se vidi da je brzina drifta za fiksirano  $E/n_0$  opadajuća funkcija redukovano magnetskog polja i da sa uvođenjem magnetskog polja nestaje NDC efekat i u vodoniku i u vodi. NDC efekat je u argonu još uvek prisutan, mada znatno slabije izražen, za  $B/n_0 = 200$  Hx, dok se za 500 Hx već u potpunosti gubi. Razlika između fluks i balk komponente ukupne brzine drifta i dalje postoji, ali se sa povećanjem magnetskog polja za fiksiranu vrednost  $E/n_0$  smanjuje. Ovo važi i za pozitronu u azotu gde, kao što je objašnjeno u prethodnom poglavlju, nema NDC efekta. Za pozitronu u vodoniku razlika između komponenti brzine drifta se već na 200 Hx ne vidi, kod argona se gubi na 500 Hx, dok je u slučaju vodene pare prisutna za sve razmatrane vrednosti magnetskog polja. Zaključak koji odavde može da se izvede je da uvođenje magnetskog polja u pravcu normalnom na pravac električnog polja ukida NDC efekat i generalno smanjuje razliku između fluks i balk komponente brzine drifta. Međutim, ostaje otvoreno pitanje koje je fizičko objašnjenje u pozadini ovog zaključka. Na koji način magnetsko polje ukida NDC? Odgovor ćemo naći analizirajući pojedinačne komponente brzine drifta: longitudinalnu komponentu u pravcu električnog polja,  $w_E$  i komponentu u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu,  $w_{E \times B}$ .

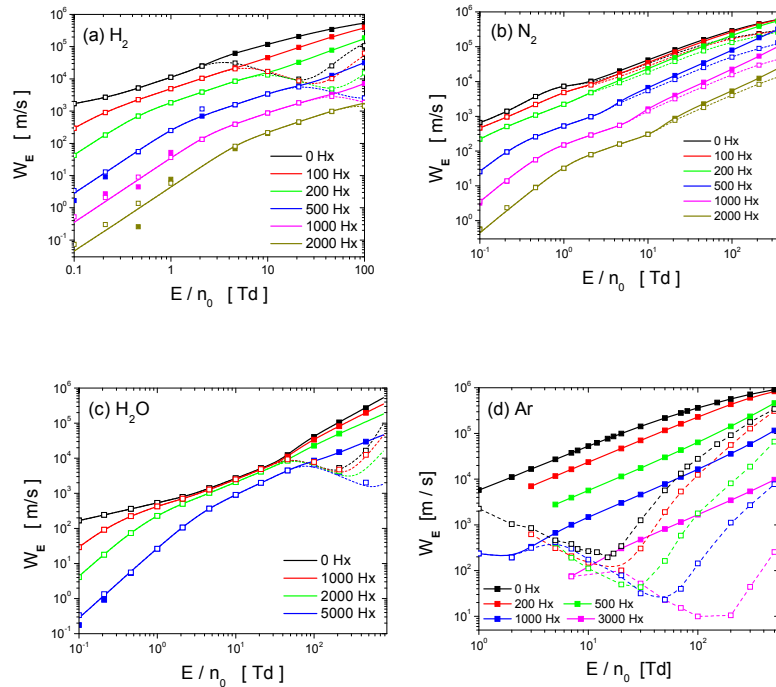


Slika 6.4. Zavisnost intenziteta vektora ukupne brzine drifta od redukovano električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovano magnetskog polja za roj pozitrona u (a)  $\text{H}_2$ , (b)  $\text{N}_2$ , (c)  $\text{H}_2\text{O}$  i (d) Ar.

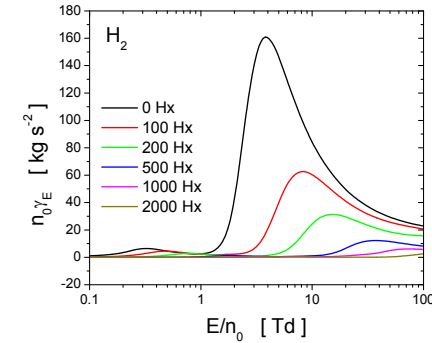
Zavisnost komponente brzine drifta u pravcu električnog polja od redukovano električnog polja,  $E/n_0$ , za razne vrednosti redukovano magnetskog polja,  $B/n_0$ , data je na slici 6.5 u (a) vodoniku, (b) azotu, (c) vodenoj pari i (d) argonu. Generalno za sva četiri gasa važi da je i fluks i balk komponenta  $w_E$  za fiksirano  $E/n_0$  opadajuća funkcija  $B/n_0$ , kao i da za fiksirano  $E/n_0$  sa povećanjem  $B/n_0$  opada razlika između fluks i balk komponente. Takođe, za svaku fiksiranu vrednost  $B/n_0$  fluks komponenta  $w_E$  je monotono rastuća funkcija  $E/n_0$ , dok balk komponenta ima složeniju zavisnost. Za transport pozitrona u vodoniku, vodi i argonu postoji oblast  $E/n_0$  u kojoj balk komponenta  $w_E$  opada sa porastom spoljašnjeg električnog polja, tj. balk profili liče na balk brzinu drifta u slučaju kada nema magnetskog polja. Na slici 6.6 ilustracije radi prikazan je vektor gradijenta energije  $\gamma$  za pozitronu u  $\text{H}_2$ , za odgovarajuće



vrednosti redukovanog magnetskog polja, u funkciji redukovanog električnog polja. Oblik zavisnosti  $\gamma$  od redukovanog električnog polja za svaku pojedinačnu vrednost  $B/n_0$  objašnjava se na isti način kao i za slučaj transporta u električnom polju. Maksimalne vrednosti  $\gamma$  se za svako  $B/n_0$  nalaze na onoj vrednosti  $E/n_0$  na kojoj balk komponenta  $w_E$  počinje da opada i vidimo da za fiksiranu vrednost  $E/n_0$  magnetsko polje smanjuje nagib srednje energije duž roja. Ovdje ipak ne možemo govoriti o NDC efektu, jer se po svojoj definiciji on odnosi na ukupnu brzinu drifta, dok se ovde govorimo samo o komponenti u pravcu električnog polja. Pogledajmo kako izgleda komponenta brzine drifta u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu.



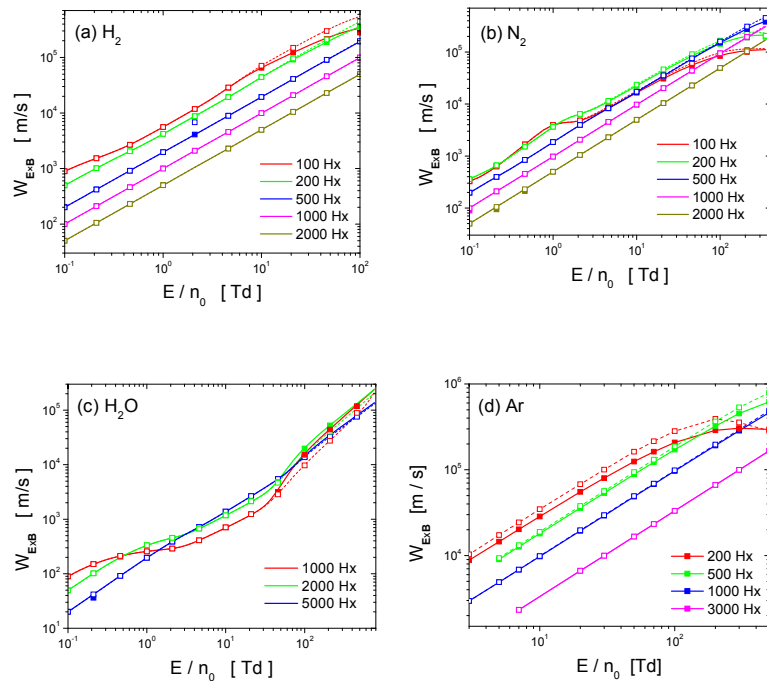
Slika 6.5. Komponenta brzine drifta u pravcu električnog polja u funkciji redukovanog električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovanog magnetskog polja za roj pozitrona u (a)  $H_2$ , (b)  $N_2$ , (c)  $H_2O$  i (d)  $Ar$ .



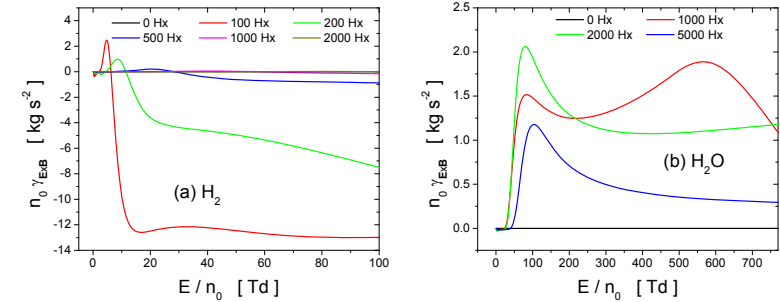
Slika 6.6. Zavisnost vektora gradijenta energije  $\gamma$  u pravcu električnog polja od redukovanog električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovanog magnetskog polja za roj pozitrona u  $H_2$ .

Komponenta brzine drifta u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu prikazana je na slici 6.7 za pozitrona u (a) vodoniku, (b) azotu, (c) vodenoj pari i (d) argonu. Za razmatrane vrednosti električnog polja kod sva četiri gasa razlika između fluks i balk komponente ove brzine drifta postoji na nižim vrednostima  $B/n_0$  (100 i 200 Hx u slučaju  $H_2$ , 100, 200 i 500 Hx za  $N_2$ , 1000 i 2000 Hx za vodu i 200 i 500 Hx za argon). Za najviše vrednosti  $B/n_0$  profili brzine ne reflektuju energijsku zavisnost preseka za sudare. U slučaju vodonika (slika 6.7 (a)), za fiksiranu vrednost redukovanog električnog polja  $E/n_0$  profili  $w_{E \times B}$  komponente brzine drifta su opadajuće funkcije  $B/n_0$ . Ovo takođe važi za pozitrona u azotu (slika 6.7 (b)) i u argonu (slika 6.7 (c)), dok je za pozitrona u vodi  $w_{E \times B}$  brzina drifta rastuća funkcija  $B/n_0$  za vrednosti redukovanog električnog polja između 2 Td i 100 Td. Za  $B/n_0 = 100$  i 200 Hx kod vodonika i kod azota, kao i za 200 i 500 Hx kod argona, balk komponenta ima veće vrednosti od fluks komponente, što je suprotno u odnosu na  $w_E$  komponentu. Ova razlika se kod azota vidi na visokim  $E/n_0$  i za  $B/n_0 = 500$  Hx. Činjenica da je balk komponenta veća od fluks komponente govori da se u ovom pravcu centar mase roja kreće unapred. S druge strane, u slučaju vodene pare fluks komponenta je veća od balk komponente, što znači da se u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu, isto kao i u  $\mathbf{E}$  pravcu, centar mase roja pozitrona u vodenoj pari kreće unazad. Razlika između fluks i balk komponenti brzine drifta  $w_{E \times B}$  ukazuje da profil srednje energije duž roja u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu nije simetričan. Drugim rečima, pozitroni sa različitim energijama su prostorno razdvojeni

duž ovog pravca. Ovako velike razlike između fluks i balk komponente brzine drifta duž  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravca do sada nisu primjećene u transportu elektrona u električnim i magnetskim poljima, ni u skorijim Monte Carlo studijama (Dujko *et al.*, 2005; 2006; Petrović *et al.*, 2009), ni u studijama u kojima je za računanje transportnih koeficijenata korišćena teorija prenosa impulsa (*engl.* momentum transfer theory) (Li *et al.*, 2006) ili teorija za rešavanje Boltzmannove jednačine metodom razvoja u red od više članova (Dujko *et al.*, 2010; White *et al.*, 2009; White *et al.*, 1999b).

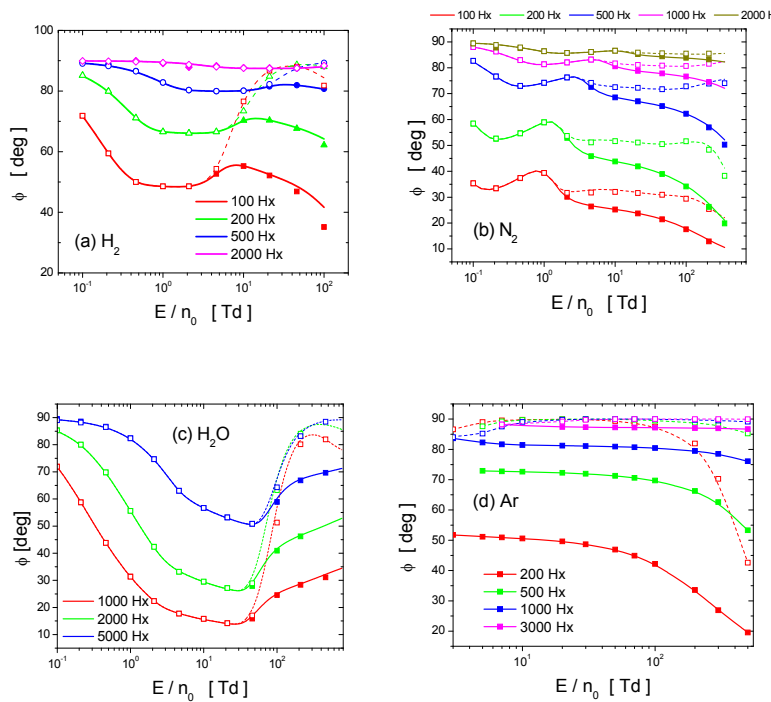


Slika 6.7. Komponenta brzine drifta u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu u funkciji redukovano električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovano magnetskog polja za roj pozitrona u (a)  $H_2$ , (b)  $N_2$ , (c)  $H_2O$  i (d) Ar.



Slika 6.8. Zavisnost vektora gradijenta energije  $\gamma$  u pravcu normalnom na električno i magnetsko polje od redukovano električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovano magnetskog polja za roj pozitrona. (a)  $H_2$  i (b)  $H_2O$ .

Osvrnimo se sada na vektor gradijenta energije roja pozitrona u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu,  $\gamma_{E \times B}$  za slučaj vodonika (slika 6.8a) i vode (slika 6.8b). Na prvi pogled se vidi da je nagib srednje energije duž roja u ovom pravcu različitog znaka za ova dva gasa: negativan je za vodonik a pozitivan za vodu. To objašnjava činjenicu da je kod vodonika balk komponenta  $w_{E \times B}$  veća od flaks komponente, dok je kod vodene pare manja. Takođe se vidi da je intenzitet vektora gradijenta energije u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu za oba gasa značajno manji nego u  $\mathbf{E}$  pravcu i da opada sa povećanjem magnetskog polja za fiksiranu vrednost  $E/n_0$ . Prostorna diferencijacija čestica roja po energijama je znatno manja u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  nego u  $\mathbf{E}$  pravcu, a primena magnetskog polja homogenizuje roj, tj. smanjuje prostornu diferencijaciju.



**Slika 6.9.** Ugao skretanja roja pozitrona u magnetskom polju u funkciji redukovanog električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovanog magnetskog polja  $B/n_0$  za roj pozitrona u (a)  $H_2$  i (b)  $N_2$ , (c)  $H_2O$  i (d)  $Ar$ .

Formiranje Ps i istovremeno prisustvo magnetskog polja mnogo izraženiji uticaj imaju na balk komponentu longitudinalne brzine drifta  $w_E$ , nego na balk komponentu u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu,  $w_{E \times B}$  kod sva četiri gasa. Shodno tome, veći doprinos balk komponenti ukupne brzine drifta dolazi od transverzalne komponente,  $w_{E \times B}$ . Razlike između fluks komponenti  $w_E$  i  $w_{E \times B}$  su mnogo manje u poređenju sa razlikama balk komponenti. Ovo se može videti i iz profila ugla skretanja roja u magnetskom polju. Ugao skretanja u magnetskom polju (*engl.* magnetic deflection angle),  $\varphi$  predstavlja ugao između pravca ukupne brzine drifta i električnog polja i definisan je kao:

$$\varphi = \arctg \frac{w_{E \times B}}{w_E} \quad (6.2)$$

Razmatranje zavisnosti ovog ugla od električnog i magnetskog polja je od velike važnosti za razumevanje nestanka NDCa iz balk komponente ukupne brzine drifta pri povećanju magnetskog polja. Na slici 6.9 prikazan je ugao skretanja pozitrona u magnetskom polju u (a)  $H_2$ , (b)  $N_2$ , (c)  $H_2O$  i (d)  $Ar$  za različite vrednosti magnetskog polja u funkciji redukovanog električnog polja. Ugao  $\varphi$  isto kao i brzina drifta ima fluks i balk komponentu. Fenomen nestanka NDCa iz balk brzine drifta objasnićemo na primeru vodonika (slika 6.9 (a)). Za  $B/n_0 = 100$  Hx fluks komponenta ugla skretanja ostaje približno jednaka  $45^\circ$  u celom posmatranom opsegu  $E/n_0$ , dok balk vrednost ugla skretanja ide i do  $90^\circ$  u zoni energija u kojoj dolazi do formiranja Ps. Ovo je jedinstvena situacija u prirodi, gde se usled prirode sudara (nekonzervativno formiranje Ps) fluks i balk brzina drifta razlikuju ne samo po intenzitetu već i po pravcu. U zoni u kojoj se za nulto magnetsko polje javlja NDC, profili ukupne brzine drifta za vrednosti magnetskog polja veće od nule određeni ponašanjem komponente brzine u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu. U principu, sve što je rečeno za ugao skretanja pozitrona u magnetskom polju kod vodonika važi i za vodu i argon (slika 6.9 (b) i (d), respektivno). Kod azota (slika 6.9 (c)) situacija je, kao što se može očekivati značajno drugačija. Razlika između fluks i balk komponente ugla skretanja je drastično manja i maksimalno iznosi  $20^\circ$  za najniže vrednosti magnetskog polja u energijskoj zoni formiranja Ps.

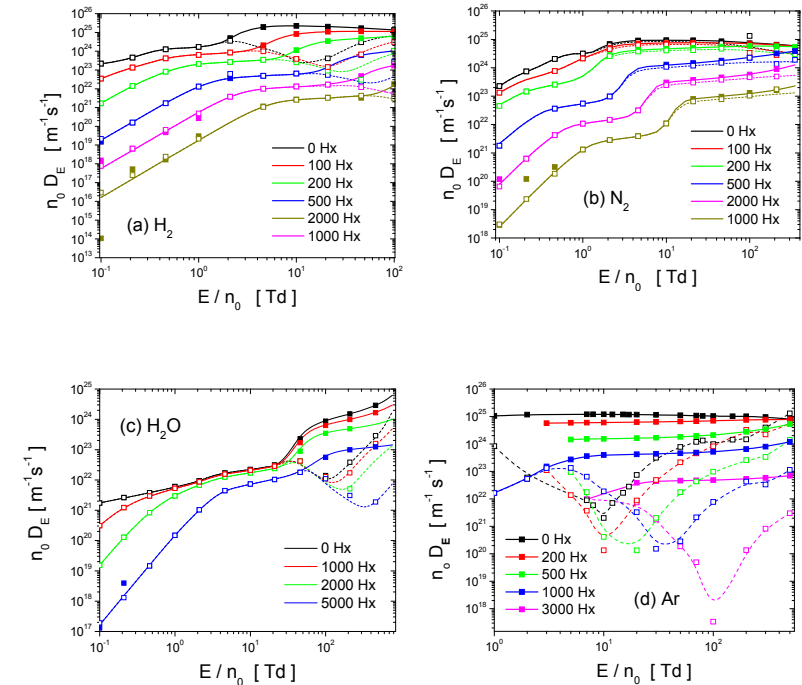
### 6.1.3. DIFUZIJA

Uvođenjem magnetskog polja izgled tenzora difuzije se komplikuje: pojavljuju se tri nenulta različita dijagonalna elementa i dva vandijagonalna elementa. U ovom poglavlju ispitujemo zajednički uticaj nekonzervativnih sudara i magnetskog polja na dijagonalne elemente tenzora difuzije. Generalno, jako je teško u potpunosti razumeti ponašanje difuzionih koeficijenata u električnom i magnetskom polju jer na njih paralelno utiče veliki broj faktora. Među njima su efekti termalne anizotropije (dispersija pozitrona usled termalnog kretanja nije ista u svim pravcima), magnetske anizotropije (usled eksplicitnog uticaja na orbite čestica, magnetsko polje uvek deluje tako da otežava difuziju u ravni normalnoj na svojoj pravcu) i električne anizotropije (prostorne varijacije srednje energije zajedno sa energijskom zavisnošću kolizione frekvence dovode do razlika u srednjoj lokalnoj brzini u datom pravcu,

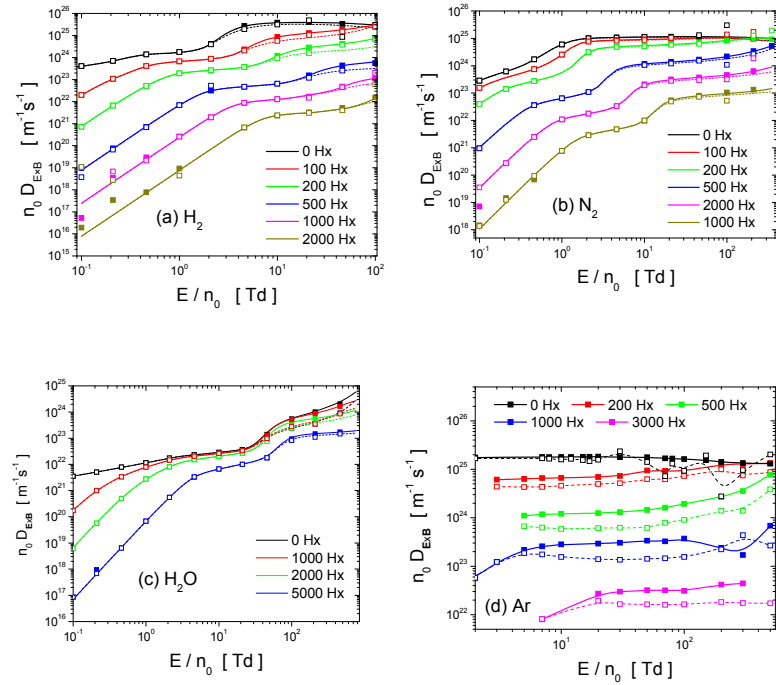
što za rezultat ima olakšanu (ili otežanu) difuziju čestica u tom pravcu) (Dujko *et al.*, 2010; Ness, 1994; Dujko, 2009; White *et al.*, 1999b). Sudari i kompleksna energijska zavisnost kolizione frekvence dodatno komplikuju problem.

Dijagonalni elementi tenzora difuzije nisu podjednako osjetljivi na prisustvo magnetskog polja, kao ni na oblik zavisnosti preseka za sudarne procese od energije. Na slici 6.10 prikazan je koeficijent difuzije u pravcu električnog polja,  $D_E$  za roj pozitrona u (a)  $H_2$ , (b)  $N_2$ , (c)  $H_2O$  i (d) Ar, dok su na slikama 6.11 i 6.12 redom prikazani dijagonalni elementi tenzora difuzije u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu ( $D_{E \times B}$ ) i pravcu magnetskog polja  $\mathbf{B}$  ( $D_B$ ) za sva četiri navedena gasa. Nekoliko generalnih zaključaka može da se izvede za sva četiri gasa. Koeficijenti difuzije u  $\mathbf{E}$  i  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu za razmatrane vrednosti redukovanog magnetskog polja variraju od četiri do šest redova veličine za male vrednosti  $E/n_0$  gde magnetsko polje dominantno kontroliše roj. Vidi se da jako magnetsko polje onemogućava difuziju u pravcima normalnim na samo magnetsko polje, zadržavajući pozitrone u njihovim kružnim orbitama. Razlika između fluks i balk komponente je drastično veća kod longitudinalnog koeficijenta difuzije  $D_E$  (slika 6.10) nego kod  $D_{E \times B}$  i  $D_B$  komponente. To znači da formiranje Ps kao nekonzervativni proces najveći uticaj ima na difuziju pozitrona u pravcu primenjenog električnog polja. Za sva tri gasa, koeficijent difuzije u pravcu magnetskog polja  $D_B$  najmanje varira sa promenom magnetskog polja. Ovaj koeficijent zapravo prati zavisnost srednje energije roja od  $E/n_0$  i  $B/n_0$ , odnosno osjetljiv je na energijsku zavisnost preseka za sudarne procese.

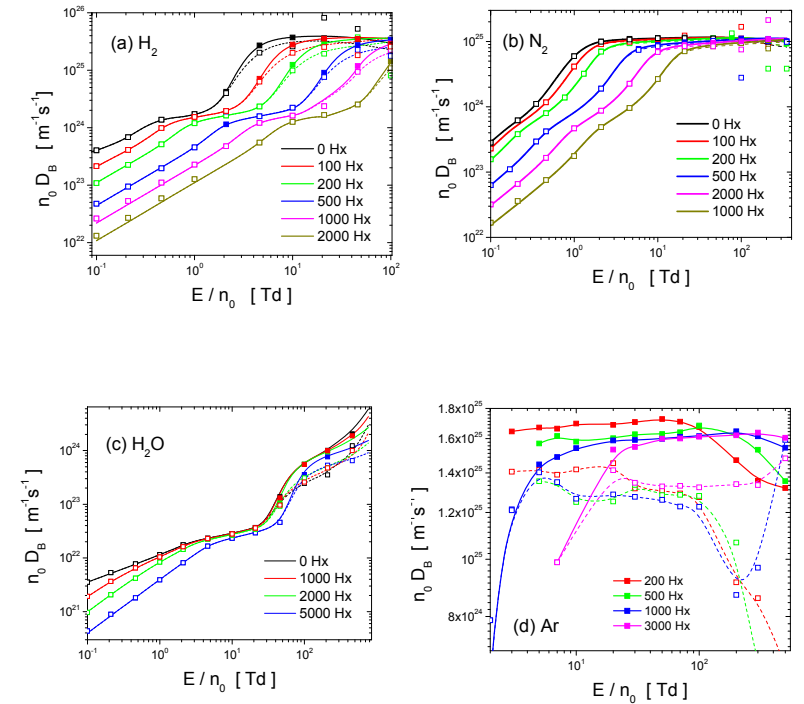
Da bi u potpunosti razumeli zajednički uticaj magnetskog polja i nekonzervativnih sudara na difuziju u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  konfiguraciji polja potrebno je ispitati ponašanje prostorno razloženih osobina roja, kao što je urađeno u slučaju transporta u električnom polju. Međutim, ovde nije dovoljno zadržati se na analizi prostorno razloženog vektora gradijenta srednje energije već moramo razmotriti i prostorno razložene varijacije srednje energije drugog reda. Ovo je komplikovan zadatak za Monte Carlo simulacije i izlazi van domena ove disertacije.



**Slika 6.10.** Dijagonalna komponenta tenzora difuzije u longitudinalnom pravcu,  $n_0 D_E$  u funkciji redukovanog električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovanog magnetskog polja  $B/n_0$  za roj pozitrona u (a)  $H_2$  i (b)  $N_2$ , (c)  $H_2O$  i (d) Ar.



Slika 6.11. Dijagonalna komponenta tenzora difuzije u  $E \times B$  pravcu,  $n_0 D_{E \times B}$  u funkciji redukovanog električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovanog magnetskog polja  $B/n_0$  za roj pozitrona u (a)  $\text{H}_2$  i (b)  $\text{N}_2$ , (c)  $\text{H}_2\text{O}$  i (d) Ar.

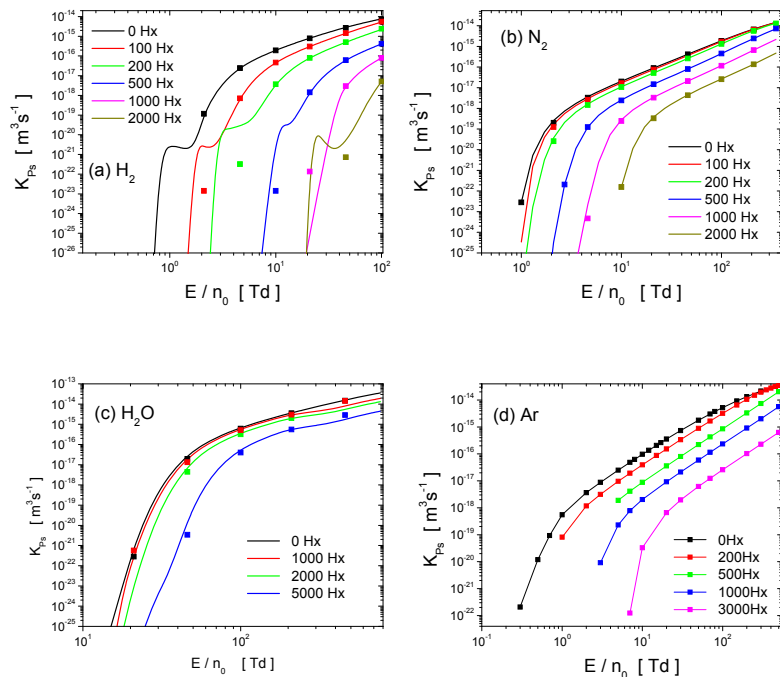


Slika 6.12. Dijagonalna komponenta tenzora difuzije u B pravcu,  $n_0 D_B$  u funkciji redukovanog električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovanog magnetskog polja  $B/n_0$  za roj pozitrona u (a)  $\text{H}_2$  i (b)  $\text{N}_2$ , (c)  $\text{H}_2\text{O}$  i (d) Ar.

#### 6.1.4. BRZINSKI KOEFICIJENT ZA FORMIRANJE PS

Na slici 6.13 prikazani su brzinski koeficijenti za formiranje Ps u funkciji redukovanog električnog polja za više različitih vrednosti intenziteta magnetskog polja za transport pozitrona u (a)  $\text{H}_2$ , (b)  $\text{N}_2$ , (c)  $\text{H}_2\text{O}$  i (d) Ar. Kao što se sa slike za sva četiri gasa vidi, magnetsko polje za datu vrednost  $E/n_0$  smanjuje koeficijent za formiranje Ps usled smanjenja

srednje energije i opadanja broja visokoenergijskih pozitrona iz repa funkcije raspodele. Za svaku vrednost magnetskog polja, brzinski koeficijent za formiranje Ps ima istu zavisnost od  $E/n_0$  kao i u slučaju transporta u čisto električnom polju, s tom razlikom što su profili pomereni na desnu stranu. Za sva četiri gasa i za sve vrednosti magnetskog polja nagib profila koeficijenta za formiranje Ps se smanjuje na višim vrednostima  $E/n_0$ . To je rezultat delovanja neelastičnih procesa koji smanjuju energiju pozitrona, pa proces formiranja Ps nije tako efikasan.



**Slika 6.13.** Brzinski koeficijent za formiranje Ps u funkciji redukovano električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovano magnetskog polja  $B/n_0$  za roj pozitrona u (a)  $H_2$  i (b)  $N_2$ , (c)  $H_2O$  i (d) Ar.

### 6.1.5. ZAKLJUČAK

U paragrafu 6.1 prikazani su rezultati sistematskog proučavanja transportnih koeficijenata pozitrona u uslovima ukrštenih polja u  $H_2$ ,  $N_2$ ,  $H_2O$  i Ar. Pod pojmom sistematski podrazumevamo široki opseg redukovanih električnih i magnetskih polja. Slični rezultati postoje za elektrone u raznim gasovima (npr. Ar (Ness i Makabe, 2000),  $CF_4$  (Dujko et al., 2005), ...), dok su ovo prvi rezultati sistematskog izučavanja transporta pozitrona.

Rezultati pokazuju da magnetsko polje ima jak uticaj na transportne koeficijente. Jedan od najbitnijih zaključaka je da magnetsko polje normalno na električno polje ukida negativnu diferencijalnu provodnost (NDC), koja je jako izražena u balk brzini drifta pozitrona u  $H_2$ , Ar i  $H_2O$  u čisto električnom polju. Na ovaj način magnetsko polje olakšava drift pozitrona na višim vrednostima redukovanog električnog polja. Generalno, magnetsko polje hladi roj i smanjuje razliku između flaks i balk komponenti transportnih koeficijenata. Još jedan zanimljiv zaključak je da magnetsko polje ne utiče podjednako na različite komponente tenzora difuzije, pri čemu najjači uticaj ima na difuziju u pravcu električnog polja, a najmanji na difuziju u pravcu magnetskog polja.

U tri paragrafa koja slede ispitaćemo kako na transportne koeficijente utiču termalni sudari, anizotropija rasejanja, kao i da li pri proučavanju transporta pozitrona mogu da se koriste aproksimativne metode koje se koriste za proračune transportnih parametara elektrona u slučaju nekih gasova.

## 6.2. UTICAJ TERMALNIH SUDARA NA TRANSPORTNE

### KOEFICIJENTE POZITRONA U VODENOJ PARI

Transportni koeficijenti roja pozitrona koji su prikazani u poglavljima 5 i 6.1 izračunati su uz pretpostavku da je temperatura pozadinskog gasa 0K. Na ovoj temperaturi čestice gasa miruju i nalaze se u svojim osnovnim stanjima. Ukoliko je temperatura gasa veća od 0K molekuli (atomi) gasa nisu u stanju mirovanja pre sudara sa česticom roja, tako da se pri određivanju brzine čestice mora uzeti u obzir i brzina molekula gasa. Takođe, ako je temperatura dovoljno velika, čestice gasa se više ne nalaze isključivo u svom osnovnom stanju, već su zastupljena i pobuđena stanja (rotaciona ili vibraciona). U sudaru pozitrona sa ekscitovanim molekulom gasa postoji šansa da se molekul deekscituje, a da pozitron dobije energiju jednaku energiji ekscitacije molekula. Ovakvi sudari se nazivaju superelastični

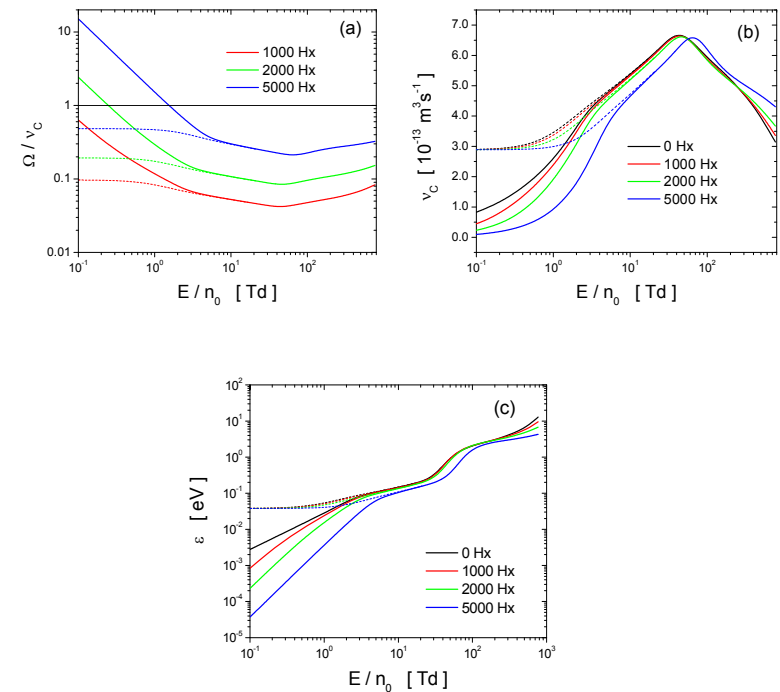
sudari. Pri jednom superelastičnom sudaru pozitron može da dobije relativno veliku količinu energije i da se time prebaci u visokoenergijski rep raspodele roja.

U ovom poglavlju ispitati smo uticaj termalnih sudara na transportne koeficijente pozitrona u vodenoj pari u uslovima ukrštenih polja. Samplovali smo transportne koeficijente pozitrona u vodenoj pari na sobnoj temperaturi,  $T = 300\text{K}$ , u funkciji redukovanoog električnog polja,  $E/n_0$  za više različitih vrednosti redukovanoog magnetskog polja,  $B/n_0$  i uporedili ih sa rezultatima dobijenim na temperaturi gasa  $T = 0\text{K}$ . Za oba slučaja dati su rezultati dobijeni korišćenjem teorije za rešavanje Boltzmannove jednačine. Pod terminom termalni sudari podrazumevamo sudare koji se dešavaju na energijama bliskim termalnoj energiji pozadinskog gasa,  $\varepsilon_T = 3kT/2$ , gde je  $T$  temperatura gasa izražena u kelvinima, a  $k$  Boltzmannova konstanta. Na velikim vrednostima električnog polja termalna energija je znatno manja od srednje energije pozitrona i može da se očekuje da će njen uticaj na transportne koeficijente biti zanemarljiv. Međutim, na nižim energijama  $\varepsilon < 10kT$  uticaj termalne energije čestica gasa ne može da se zanemari, pa se razlike između dva seta rezultata očekuju na nižim vrednostima  $E/n_0$ .

Na slici 6.14 (a) upoređen je odnos ciklotronske i kolizione frekvence roja pozitrona u vodenoj pari u funkciji redukovanoog električnog polja  $E/n_0$  za više različitih vrednosti redukovanoog magnetskog polja  $B/n_0$  na temperaturama 0K i 300K. Na niskim vrednostima  $E/n_0$  za sve vrednosti magnetskog polja termalni sudari smanjuju odnos ciklotronske i kolizione frekvence, što je u skladu sa očekivanjima. Za sve tri odabrane vrednosti magnetskog polja na sobnoj temperaturi roj se u čitavom opsegu redukovanoog električnog polja nalazi u sudarno dominantnom režimu. Iznad 5 Td odnos ciklotronske i kolizione frekvence na sobnoj temperaturi ostaje isti kao na 0K, tako da očekujemo da se transportni koeficijenti na sobnoj temperaturi razlikuju od rezultata dobijenih na 0K samo na nižim vrednostima  $E/n_0$ , ispod 5Td. Očekuje se da u ovoj zoni bude smanjen uticaj magnetskog polja na sve transportne koeficijente. Kako svi transportni koeficijenti nisu podjednako osetljivi na promene magnetskog polja, očekujemo da i osetljivost na termalne sudare bude različita.

Totalna koliziona frekvencija i srednja energija roja prikazane su redom na slikama 6.14 (b) i (c). Ove dve veličine su jako osetljive na prisustvo termalnih sudara. Sa slika se vidi da na temperaturi  $T = 300\text{K}$  i srednja energija roja i ukupna koliziona frekvencija na niskim vrednostima  $E/n_0$  konvergiraju jednoj termalnoj vrednosti ( $2.8989 \cdot 10^{-13} \text{ m}^3\text{s}^{-1}$  za

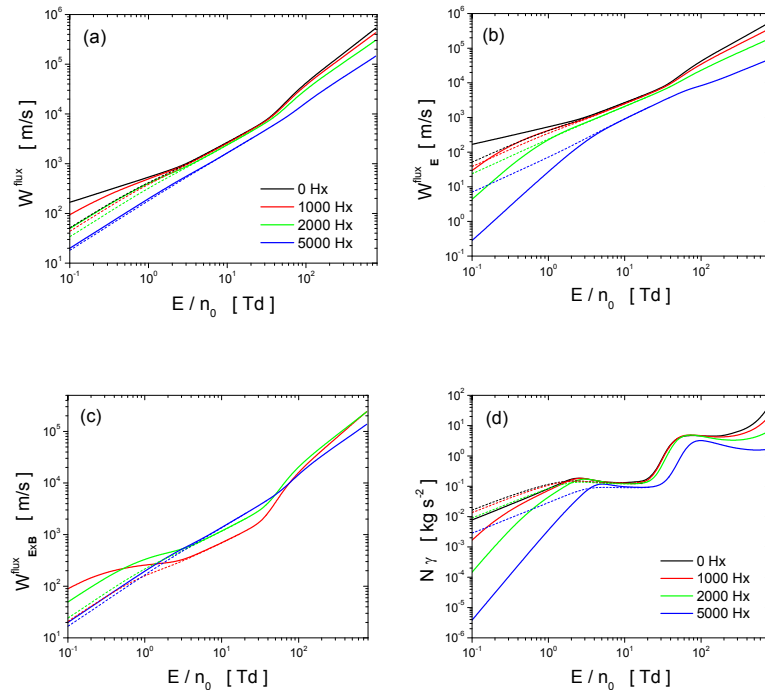
kolizionu frekvenciju i  $0.0038 \text{ eV}$  za energiju) za sva primenjena magnetska polja. Termalna vrednost je i za srednju energiju i za ukupnu kolizionu frekvenciju viša od vrednosti koje se dobijaju u zoni niskih vrednosti redukovanoog električnog polja na 0K za sve vrednosti magnetskog polja. Kako povećavamo  $E/n_0$  uticaj magnetskog polja raste, krive za različite vrednosti magnetskog polja počinju da se razilaze na  $E/n_0 \sim 0.3 \text{ Td}$ .



**Slika 6.14.** (a) Odnos ciklotronske i kolizione frekvence, (b) totalna koliziona frekvencija i (c) srednja energija roja pozitrona u vodenoj pari izračunati za temperaturu  $T = 0\text{K}$  (puna linija) i  $T = 300\text{K}$  (isprekidana linija) u funkciji redukovanoog električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovanoog magnetskog polja.

Na slici 6.15 (a), (b) i (c) prikazane su fluks vrednosti ukupne brzine drifta i komponenti u  $\mathbf{E}$  i  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu, redom, u funkciji redukovanoog električnog polja za različite vrednosti redukovanoog magnetskog polja na temperaturama 0K i 300K. Termalni sudari

smanjuju vrednost fluks komponenti ukupne brzine drifta za sve vrednosti magnetskog polja na niskim vrednostima  $E/n_0$ , kao i fluks vrednosti njenih pojedinačnih komponenti. Najjači uticaj imaju na  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  komponentu brzine drifta, koja je manje osetljiva na promene magnetskog polja, ali zato jako osetljiva na energijsku zavisnost preseka za sudare. Na slikama su prikazane samo fluks komponente brzina jer se na niskim vrednostima  $E/n_0$  nalazimo u energijskoj zoni u kojoj formiranje Ps još uvek nije moguć proces, pa se fluks i balk komponenta brzine ne razlikuju.



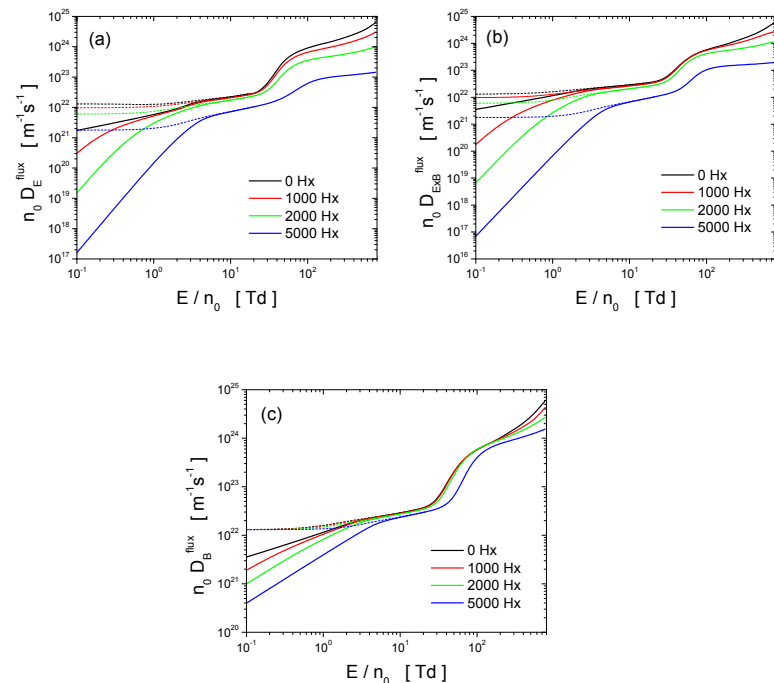
**Slika 6.15.** Fluks vrednosti (a) ukupne brzine drifta, (b) komponente brzine drifta uE pravcu, (c)komponente brzine drifta  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu i (d)ukupni vektor gradijenta energije duž roja u funkciji redukovano električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovano magnetskog polja za roj pozitrona u vodenoj pari. Puna linija –  $T = 0K$ , isprekidana linija –  $T = 300K$ .

Ukupni vektor gradijenta energije  $\gamma$  roja pozitrona u vodenoj pari prikazan je na slici 6.15 (d) u funkciji redukovano električnog polja za više različitih intenziteta redukovano magnetskog polja na temperaturi 0K i 300K. Sa slike se vidi da termalni sudari na 300K povećavaju intenzitet ovog vektora na niskim vrednostima  $E/n_0$  za sve ispitane vrednosti magnetskog polja. Takođe se u istoj oblasti  $E/n_0$  menja nagib krive  $\gamma$ , smanjuje se pod dejstvom termalnih sudara, što znači da nagib srednje energije duž roja sada sporije raste. Ovaj rezultat je očekivan, jer se u ovoj zoni energija javljaju novi sudarni procesi koji otežavaju upumpavanje energije u sistem od strane električnog polja. Za  $B/n_0 = 0$  Hx razlike između  $\gamma$  za temperaturu  $T = 0K$  i  $T = 300K$  nestaju na  $\sim 2Td$ , za  $B/n_0 = 1000Hx$  na  $\sim 5Td$ , za magnetsko polje od 2000Hx na  $\sim 6Td$  i za 5000Hx na  $\sim 9Td$ .

Na slici 6.16 prikazane su dijagonalne komponente tenzora difuzije. Slično kao što pokazuju različitu osetljivost na promene intenziteta magnetskog polja i energijsku zavisnost sudarnih procesa na 0K, dijagonalni elementi tenzora difuzije su takođe različito osetljivi na termalne sudare. Kao što je očekivano, najveću osetljivost pokazuje komponenta difuzije u pravcu magnetskog polja,  $D_B$ , slika 6.16 (c), koja je najosetljivija na energijsku zavisnost sudarnih procesa. Ovaj transportni koeficijent ima jednu termalnu vrednost za sve vrednosti magnetskog polja, slično kao srednja energija i totalna koliziona frekvencija.

Na osnovu rezultata prikazanih u ovom paragrafu možemo da zaključimo da model hladnog gasa (pretpostavka da se pozadinski gas nalazi na temperaturi  $T = 0K$  ili zanemarivanje termalnih sudara) može da se koristi za računanje transportnih koeficijenata roja pozitrona na višim vrednostima  $E/n_0$  za temperature pozadinskog gasa  $T > 0K$ , bez bojazni od pravljenja velike greške. Međutim, na nižim vrednostima redukovano električnog polja, kada roj ima energiju blisku termalnoj energiji, termalni sudari značajno utiču na transportne osobine pozitrona. Na primeru vodene pare videli smo da se transportni koeficijenti dobijeni na nultoj i sobnoj temperaturi za sve ispitane vrednosti magnetskog polja iznad  $E/n_0 = 5Td$  više ne razlikuju. S druge strane, pri samplovanju prostorno razloženih osobina roja treba biti oprezniji jer i na višim vrednostima električnog polja termalni sudari utiču na roj.





**Slika 6.16.** Fluks vrednosti dijagonalnih komponenti tenzora difuzije: (a)  $n_0 D_E$ , (b)  $n_0 D_{E>B}$  i (c)  $n_0 D_B$  za pozitrone u vodenoj pari u funkciji redukovanog električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovanog magnetskog polja. Puna linija –  $T = 0K$ , isprekidana linija –  $T = 300K$ .

### 6.3. ANIZOTROPIJA RASEJANJA

U poglavlju 3 ove disertacije detaljnije smo se bavili skupovima preseka koji su za svaki gas sastavljeni na osnovu dostupnih podataka iz literature i koji su iskorišćeni kao ulazni podaci za računanje transportnih koeficijenata pozitrona i u Monte Carlo simulaciji i u kodu za rešavanje Boltzmannove jednačine. Jedan od problema koji se javio pri sastavljanju skupova preseka bio je nepostojanje podataka o diferencijalnim presecima za rasejanje pozitrona u literaturi, kao i o presecima za prenos impulsa. To nas je primoralo da pri proračunu transporta pozitrona u  $H_2$ ,  $N_2$  i  $H_2O$  umesto preseka za prenos impulsa koristimo totalni

presek, a da pri tome rasejanje tretiramo izotropno, što mora da unese neku grešku u dobijene rezultate. Kako među pomenutim molekulima jedino voda ima permanentni dipolni moment (1.8 D) očekujemo da će tu da se javi najveća greška, jer u tom slučaju rasejanje najviše odstupa od izotropnog.

U vreme kada je započet rad na izračunavanju transportnih koeficijenata pozitrona u vodenoj pari nisu nam bili dostupni diferencijalni preseci za rasejanje pozitrona na molekulu vode. Iz tog razloga, mogli smo samo da pretpostavimo da je rasejanje izotropno i da u kodu koristimo totalni presek za elastično rasejanje, dobijen tako što je suma svih preseka za neelastična rasejanja i formiranje Ps oduzeta od totalnog preseka izmerenog u eksperimentu. Nazovimo ovaj pristup za potrebe dalje priče “Model A”. Kasnije smo došli do diferencijalnih preseka za pozitrone, koje je J. Tennyson izračunao primenom metode R matrica (Tennyson, 2009), pa smo bili u prilici da napravimo novu seriju proračuna, u takozvanom “Modelu B”. Model B podrazumeva korišćenje preseka za prenos impulsa, dobijenog na osnovu teorijskih diferencijalnih preseka i totalnog preseka, izmerenog u eksperimentu (Makochekanwa *et al.*, 2009). U ovom odeljku upoređićemo transportne koeficijente pozitrona u vodenoj pari dobijene u modelima A i B za vrednosti redukovanog magnetskog polja  $B/n_0$  od 0 i 2000 Hx.

Na slici 6.17 prikazan je skup preseka za rasejanje pozitrona u vodenoj pari korišćen u modelima A i B. Detalji o presecima uključenim u ovaj skup dati su u odeljku 3.5. Presek (2), označen još i slovom A, je korišćen u modelu A i predstavlja presek za elastično rasejanje, dobijen oduzimanjem preseka za sve ostale procese od totalnog preseka ( $TCS_{exp}$ ), označen brojem (1). Presek označen brojem (3) i slovom B je presek za transfer impulsa (MT) korišćen u modelu B i dobijen je pomoću teorijskog diferencijalnog preseka (DCS) (Tennyson, 2009) i eksperimentalnog totalnog preseka ( $TOT_{exp}$ ) (Makochekanwa *et al.*, 2009) kao:

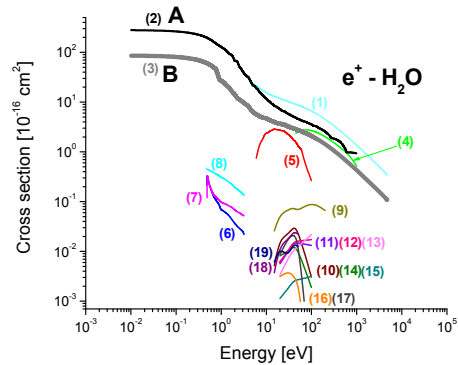
$$MT = \frac{TOT_{DCS}}{MT_{DCS}} TOT_{exp}, \quad (6.3)$$

gde su  $MT_{DCS}$  i  $TOT_{DCS}$  presek za prenos impulsa i totalni presek, respektivno, izračunati na osnovu diferencijalnih preseka:

$$MT_{DCS} = 2\pi \int_0^{2\pi} DCS \sin \theta (1 - \cos \theta) d\theta, \quad (6.4)$$

$$TOT_{DCS} = 2\pi \int_0^{2\pi} DCS \sin \theta d\theta. \quad (6.5)$$

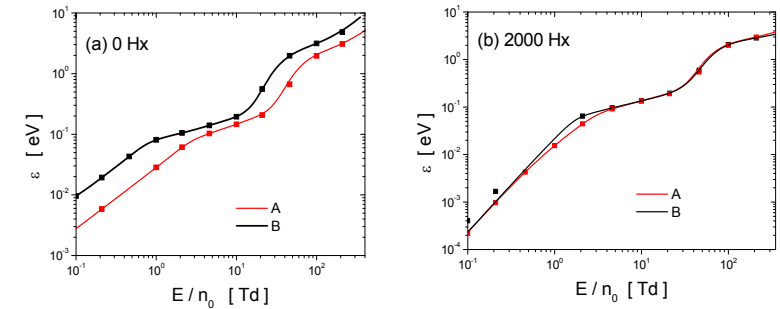
Sa slike 6.17 se vidi da je energijska zavisnost preseka A i B skoro potpuno ista, kao i da je presek A nešto veći od preseka B. Samo na osnovu ovoga možemo očekivati kvantitativne, ali ne i kvalitativne razlike između transportnih parametara dobijenih u dva modela. Kvalitativne razlike se mogu javiti usled drugačijeg relativnog odnosa magnituda elastičnog preseka, odnosno preseka za prenos impulsa i preseka za ostale sudarne procese. Zbog manje vrednosti preseka za prenos impulsa koji koristimo u modelu B od preseka za elastične sudare iz modela A, možemo očekivati da će uticaj nekonzervativne prirode formiranja Ps biti nešto jači u modelu B, ili će se bar efekat nekonzervativnih sudara primećivati na nešto nižim vrednostima  $E/n_0$ .



**Slika 6.17.** Skup preseka za rasejanje pozitrona na vodenoj pari: model A – presek za elastične sudare (2) i model B – presek za prenos impulsa (3).

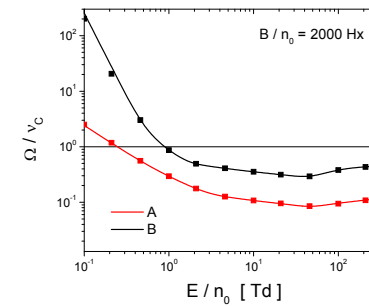
Srednju energiju roja pozitrona u vodenoj pari smo izračunali u uslovima modela A i B i poređenje je prikazano na slici 6.18. Vidi se da se u oba slučaja dobija ista kvalitativna zavisnost srednje energije od redukovano električnog polja,  $E/n_0$ . Pri transportu pozitrona u čisto električnom polju (slika 6.18 (a)) model B daje nešto veće vrednosti srednje energije za fiksiranu vrednost  $E/n_0$ , što je za očekivati, jer je presek za prenos impulsa u modelu B manji od preseka za elastične sudare, koji koristi model A (vidi sliku 6.17). S druge strane, za  $B/n_0$

= 2000 Hx (slika 6.18 (b)), delovanje magnetskog polja hladi roj i maskira razliku u presecima modela A i B, tako da se dobijene srednje energije praktično poklapaju.



**Slika 6.18.** Poređenje srednje energije roja pozitrona u vodenoj pari dobijene u uslovima modela A (crvena kriva) i modela B (crna kriva) za vrednost redukovano magnetnog polja  $B/n_0$  od (a) 0 Hx i (b) 2000 Hx.

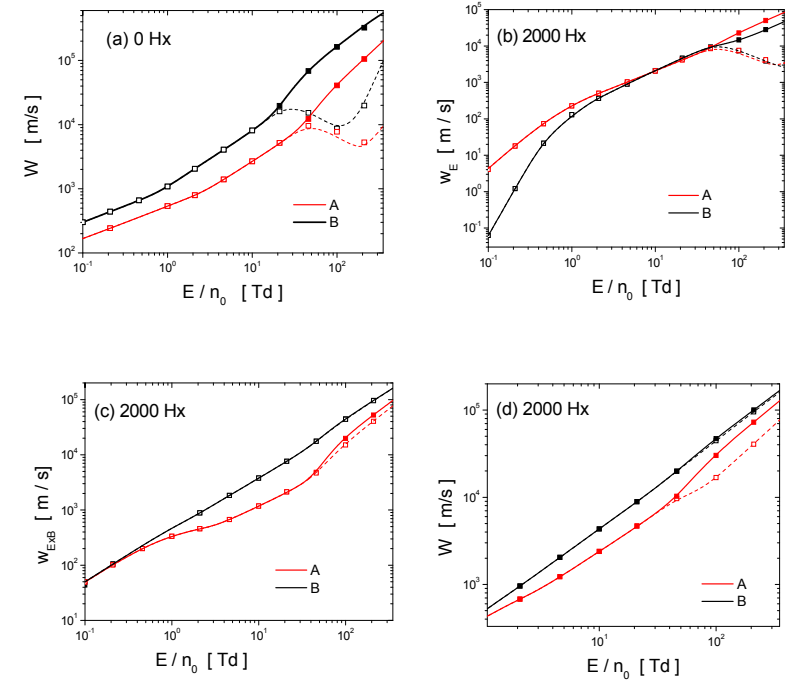
Odnos ciklotronske i kolizione frekvence za vrednost redukovano magnetnog polja 2000 Hx u modelima A i B dat je na slici 6.19. Vidi se da je u modelu B roj pod znatno većim uticajem magnetskog polja nego u slučaju A, što je specijalno izraženo na niskim vrednostima  $E/n_0$ . Očekuje se da se ovaj uticaj vidi i u profilima transportnih koeficijenata izračunatih korišćenjem preseka za prenos impulsa (model B).



**Slika 6.19.** Odnos ciklotronske i kolizione frekvence u funkciji redukovano električnog polja  $E/n_0$  izračunat u uslovima modela A (crvena kriva) i B (crna kriva) za vrednost redukovano magnetnog polja od  $B/n_0 = 2000$  Hx.

Na slici 6.20 upoređene su brzine drifta izračunate za dva modela. U odsustvu magnetskog polja, slično kao kod srednje energije, kvalitativna zavisnost i fluks i balk brzine drifta od redukovano električnog polja ostaje nepromenjena u modelu B u odnosu na model A (slika 6.20 (a)). S druge strane, brojne vrednosti ovih brzina za dato  $E/n_0$  su veće u modelu B, koji koristi presek za prenos impulsa, i to za faktor 2 – 3. Zapravo se može reći da su profili brzina u modelu A (model sa elastičnim presekom) pomereni na dole i na desno u odnosu na profile dobijene za model B. Ako pogledamo profile balk komponente brzine drifta, vidimo da se uticaj formiranja Ps kao nekonzervativnog procesa primećuje na nešto nižoj vrednosti  $E/n_0$  ( $\sim 10.5$  Td) ako u proračunu transporta koristimo presek za prenos impulsa (model B) umesto elastičnog preseka (model A). Tako i NDC efekat počinje da se vidi na nižoj vrednosti  $E/n_0$  u modelu B nego u modelu A, u kome se razlika između fluks i balk komponente brzine drifta vidi na  $E/n_0 \sim 12$  Td. S druge strane, maksimalna razlika koja se javlja između fluks i balk komponente ostaje ista u oba modela.

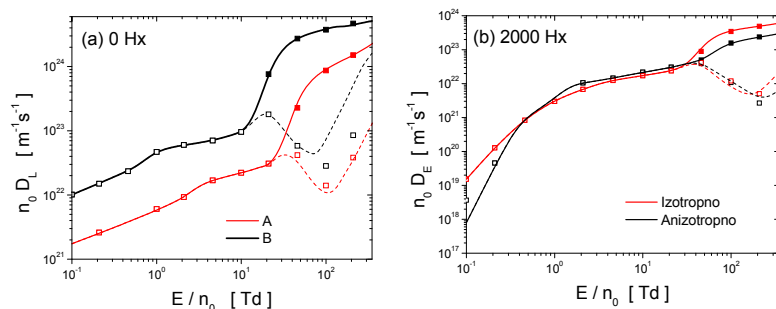
Poređenje između brzina drifta dobijenih u modelima A i B za magnetsko polje od 2000 Hx dato je na slikama 6.20 (b), (c) i (d). Na slici 6.20 (b) prikazane su fluks i balk komponente brzine drifta u pravcu električnog polja,  $W_E$ . Za  $E/n_0 > 13$  Td nema ni kvalitativnih ni kvantitativnih razlika između brzina koje daju modeli A i B. Ovo se objašnjava jačim uticajem koje magnetsko polje ima na roj u modelu B, jer je presek za prenos impulsa koji se koristi u ovom modelu manji od elastičnog preseka korišćenog u modelu A. U zoni  $E/n_0 < 13$  Td, brzina drifta u  $\mathbf{E}$  pravcu u modelu B je znatno manja od brzine koju daje model A. Ovo je rezultat znatno jačeg dejstva magnetskog polja na roj pozitrona na niskim  $E/n_0$  u modelu B (slika 6.19). Za razliku od brzine drifta u pravcu električnog polja, brzina drifta u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu se bitno kvalitativno razlikuje u zavisnosti od toga da li se kao ulazni parametar koristi elastični presek (model A) ili presek za prenos impulsa (model B) (slika 6.20 (c)). Profil brzine  $W_{E \times B}$  je linearan u log – log skali u modelu B i razlika između fluks i balk komponente, koja se u modelu A javlja na  $\sim 13$  Td, u modelu B ne postoji. Razliku između fluks i balk komponente je anuliralo magnetsko polje koje u modelu B ima znatno jači uticaj i homogenizuje roj u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu, tako da čestice više nisu razdvojene po energijama. Oblik profila ukupne brzine drifta za  $B/n_0 = 2000$  Hx posledica je činjenice da je  $W_{E \times B}$  dominantna komponenta. Odatle je logično da je razlika između fluks i balk komponente ukupne brzine drifta u modelu B znatno manja nego u modelu A, kao i da je ukupna brzina većeg intenziteta u modelu B.



**Slika 6.20.** Poređenje brzina drifta dobijenih u uslovima modela A (crvena kriva i simboli) i B (crna kriva i simboli): (a) brzina drifta za  $B/n_0 = 0$  Hx, (b)  $W_E$  za  $B/n_0 = 2000$  Hx, (c)  $W_{E \times B}$  za  $B/n_0 = 2000$  Hx i (d) ukupna brzina drifta  $W$  za  $B/n_0 = 2000$  Hx.

Pogledajmo sada kako se menjaju elementi tenzora difuzije kada elastični presek u izotropnom modelu (A) zamenimo presekom za prenos impulsa (B). Na slici 6.21 prikazan je dijagonalni element tenzora difuzije u pravcu električnog polja za roj pozitrona kada je (a)  $B/n_0 = 0$  Hx i (b) 2000 Hx. Kada nema magnetskog polja, longitudinalna difuzija izračunata u modelima A i B pokazuje istu kvalitativnu zavisnost od redukovano električnog polja. Presek za prenos impulsa u modelu B daje nešto više vrednosti ovog elementa tenzora difuzije za fiksirano  $E/n_0$  i uticaj formiranja Ps, odnosno razdvajanje fluks i balk komponente, počinje da se vidi na nižim  $E/n_0$  nego kada u proračunima koristimo presek za elastične sudare. Sve ovo važi i za transverzalnu komponentu tenzora difuzije (slika 6.22 (a)). U

prisustvu magnetskog polja (slika 6.21 (b)) profili longitudinalne difuzije za modele A i B se ponašaju slično kao brzina drifta. Veće razlike se javljaju na niskim  $E/n_0$ , gde je  $n_0 D_E$  dobijena u modelu B manja nego difuzija koju daje model A.

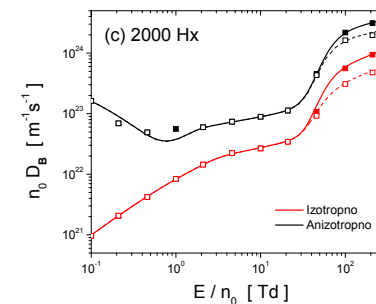
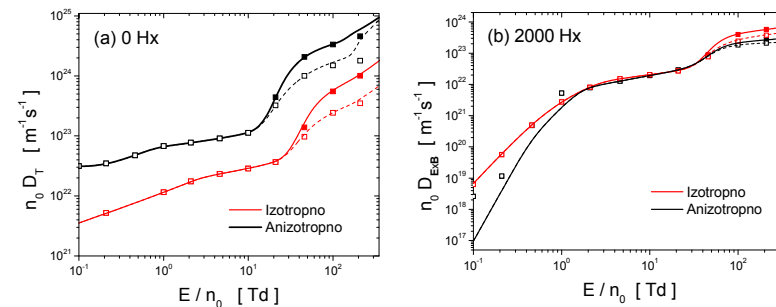


**Slika 6.21.** Poređenje longitudinalnog koeficijenta difuzije dobijenog u uslovima modela A (crvena kriva i simboli) i B (crna kriva i simboli): (a)  $n_0 D_L$  za  $B/n_0 = 0$  Hx i (b)  $n_0 D_E$  za  $B/n_0 = 2000$  Hx.

Na slici 6.22 (b) i (c) prikazani su dijagonalni elementi tenzora difuzije u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  i  $\mathbf{B}$  pravcu, respektivno, za vrednost redukovanog magnetskog polja 2000 Hx. Generalno govoreći, koeficijent difuzije u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu je veoma osetljiv na prisustvo magnetskog polja. Iz tog razloga se vidi značajna razlika između vrednosti ovog koeficijenta dobijenih u modelima A i B na niskim vrednostima  $E/n_0$ , gde je uticaj magnetskog polja na kretanje roja pozitrona kroz vodenu paru značajno veći u uslovima modela B. Vidi se da koeficijent  $n_0 D_{E \times B}$  ima niže vrednosti na niskim  $E/n_0$  ukoliko se za njegovo izračunavanje koristi presek za prenos impulsa umesto preseka za elastično rasejanje. Na vrednostima redukovanog električnog polja većim od 40 Td takođe se vidi razlika između  $n_0 D_{E \times B}$  u modelima A i B i ova razlika je ponovo u korist difuzije izračunate korišćenjem elastičnog preseka (model A). Takođe se na osnovu razlike koja postoji između fluksa i balk komponenti može reći da uticaj formiranja Ps više dolazi do izražaja u modelu A, što je zanimljivo, s obzirom da je presek za elastično rasejanje koji koristimo u modelu A veći od preseka za prenos impulsa iz modela B u onoj zoni energija u kojoj se vidi dejstvo formiranja Ps. Ovo je posledica jačeg uticaja koji magnetsko polje ima u modelu B. U modelu A transportom pozitrona dominiraju sudari.

Pogledajmo sada koeficijent difuzije u pravcu magnetskog polja  $\mathbf{B}$  u uslovima modela A i B (slika 6.22 (c)). Ovaj koeficijent se ponaša slično kao koeficijent  $n_0 D_T$  u odsustvu

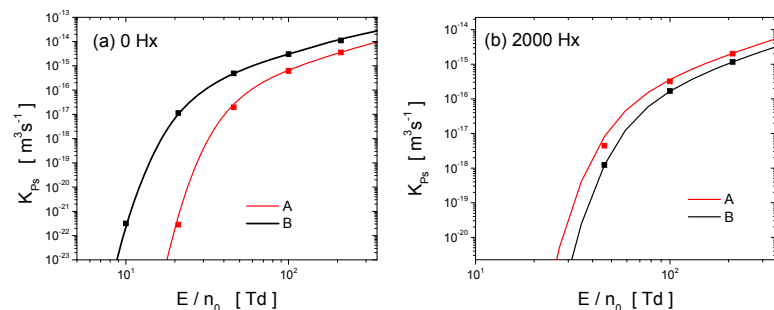
magnetskog polja. Vrednosti dobijene u modelu B veće su od vrednosti dobijenih u modelu A. Velika razlika se javlja na niskim  $E/n_0$  i ona je posledica činjenice da je presek za prenos impulsa u modelu B manji od preseka za elastično rasejanje u modelu A, kao i činjenice da magnetsko polje ima jači uticaj na roj na nislis  $E/n_0$  u modelu B nego u modelu A.



**Slika 6.22.** Poređenje transversalnog koeficijenta difuzije dobijenog u uslovima modela A (crvena kriva i simboli) i B (crna kriva i simboli): (a)  $n_0 D_T$  za  $B/n_0 = 0$  Hx, (b)  $n_0 D_{E \times B}$  za  $B/n_0 = 2000$  Hx i (c)  $n_0 D_B$  za  $B/n_0 = 2000$  Hx.

U skladu sa svime što je do sada rečeno je i ponašanje brzinskog koeficijenta za formiranje Ps. Ovaj koeficijent smo izračunali korišćenjem preseka za elastično rasejanje (model A) i preseka za prenos impulsa (model B) i poređenje smo prikazali za  $B/n_0 = 0$  Hx (slika 6.22 (a)) i  $B/n_0 = 2000$  Hx (slika 6.23 (b)). Za  $B/n_0 = 0$  Hx brzinski koeficijent za formiranje Ps je veći u modelu B, što je u skladu sa činjenicom da je presek za prenos impulsa iz modela B manji od preseka za elastične sudara iz modela A, pa je razlika između

ovog preseka i preseka za formiranje Ps manja. Zato je uticaj formiranja Ps dominantniji u modelu B u odnosu na model A kada nema magnetskog polja. U prisustvu magnetskog polja (slika 6.23 (b)) važi obrnuta situacija, brzinski koeficijent za formiranje Ps je veći u modelu A, koji koristi veći, elastični presek. Ovakva razlika između brzinskih koeficijenata posledica je jačeg uticaja magnetskog polja u modelu B, koje efikasno hladi roj pa pozitroni teže dostižu energije na kojima je moguće formiranje Ps u modelu B nego u modelu A. Ovo se, kao što smo videli, odražava i na profile transportnih koeficijenata za  $B/n_0 = 2000$  Hx izračunate u modelima A i B.



**Slika 6.23.** Poređenje brzinskog koeficijenta za formiranje Ps dobijenog u uslovima modela A (crvena kriva i simboli) i B (crna kriva i simboli): (a)  $B/n_0 = 0$  Hx i (b)  $B/n_0 = 2000$  Hx.

Rezultati prikazani u ovom odeljku odnose se na transport pozitrona u vodenoj pari. Molekul vode ima jak permanentni dipolni moment pa će pozitroni biti dominantno rasejani unapred na malim uglovima. Iz tog razloga trebalo je proveriti koliku smo grešku uneli u proračun transportnih koeficijenata pretpostavivši da je rasejanje izotropno i koristeći totalni presek za elastično rasejanje kao ulazni parametar umesto preseka za prenos impulsa. Zaključak je da se ne pravi velika greška, pogotovo u slučaju transporta u čisto električnom polju. Razlika koja se dobija je isključivo kvantitativna, dok su uočeni fenomeni, kao što je NDC u balk brzini drifta i velika razlika između fluks i balk vrednosti longitudinalnog koeficijenta difuzije, prisutni bez obzira da li smo kao ulazni podatak uzeli presek za elastične sudare ili presek za prenos impulsa. Što se tiče transporta u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  konfiguraciji polja, ako uračunamo diferencijalne preseke za rasejanje pozitrona, kao što smo uradili u modelu B, magnetsko polje će jače uticati na roj i samim tim će efekti do kojih ono dovodi (magnetsko

hladenje roja i smanjenje razlike između fluks i balk komponenti transportnih parametara na fiksnom  $E/n_0$ ) biti više izraženi. Takođe, možemo reći da će greška biti još manja za transportne koeficijente pozitrona u Ar, H<sub>2</sub> i N<sub>2</sub>, koji nemaju stalni dipolni moment.

## 6.4. TESTIRANJE DOMENA PRIMENLJIVOSTI APROKSIMATIVNIH METODA

Transportni koeficijenti pozitrona prikazani u ovoj disertaciji dobijeni su korišćenjem Monte Carlo simulacije i verifikovani uz pomoć teorije za rešavanje Boltzmannove jednačine u kojoj se funkcija raspodele u prostoru brzina razvija u red od više članova. Ove dve nezavisne tehnike dale su rezultate koji se međusobno jako dobro slažu. Korišćenje teorije za rešavanje Boltzmannove jednačine bilo je neophodno, jer trenutno ne postoje pozitronski eksperimenti sa rojevima u kojima bi se merili transportni parametri pozitrona i čiji bi rezultati mogli da se iskoriste za poređenje sa našim Monte Carlo rezultatima. Štaviše, u literaturi nema ni sistematski izračunatih transportnih koeficijenata za pozitronu u gasovima. Naši rezultati za transport pozitrona u Ar (Šuvakov *et al.*, 2008; Marler *et al.*, 2009), N<sub>2</sub> (Banković *et al.*, 2008a), H<sub>2</sub> (Banković *et al.*, 2012a) i H<sub>2</sub>O (Banković *et al.*, 2012c) su prvi rezultati ovog tipa.

Za razliku od pozitrona, transport elektrona i jona je decenijama intenzivno proučavan, kako eksperimentalno, tako i korišćenjem teorije i simulacija. Kako je teorija za rešavanje Boltzmannove jednačine razvojem funkcije raspodele u prostoru brzina u red od više članova matematički komplikovana, mnogi istraživači su pribegavali raznim manje ili više opravdanim aproksimacijama u cilju pojednostavljivanja problema. Vrlo često su ovakve aproksimacije implementirane u kompjuterske programe koji služe za generisanje transportnih koeficijenata za određene vrste naelektrisanih čestica u određenim uslovima, a koji se kasnije nekritički koriste u situacijama u kojima su date aproksimacije neadekvatne. Ovde ćemo se osvrnuti na tri najčešće korišćene aproksimacije.

Prva aproksimacija je uvođenje pretpostavke o simetriji u prostoru brzina (White *et al.*, 1999b; White *et al.*, 1999d). Kao što je već rečeno, važan korak u rešavanju Boltzmannove jednačine je razvoj funkcije raspodele u prostoru brzina u red po sfernim harmoncima (1.3.1):

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_m^{(l)}(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) Y_m^{(l)}(\hat{\mathbf{c}}). \quad (6.6)$$

Sferni harmonici opisuju ugaonu zavisnost funkcije raspodele u prostoru brzina. Ako se pretpostavi da je  $z$  osa rotacione simetrije, gubi se zavisnost od azimutalnog ugla  $\varphi$  i funkcija raspodele se razvija po Legendreovim polinomima,  $P_l(\cos\theta)$ . Ova pretpostavka je opravdana ukoliko se roj elektrona kreće pod dejstvom prostorno homogenih polja koja su međusobno paralelna ( $\Psi = 0$ ). U tom slučaju postoji rotaciona simetrija oko pravca polja i važi da je  $f(c) = f(c, \theta)$ . Za  $\Psi \neq 0$  rotaciona simetrija je narušena (Robson i Ness, 1986), tako da u opštem slučaju  $z$  osa nije osa rotacione simetrije. Vrlo često se za osu rotacione simetrije umesto pravca polja uzima pravac brzine drifta (Huxley i Crompton, 1974; Biagi, 1989; Winkler, 1972), ali ova pretpostavka nikada nije opravdana.

Ako se u razvoju funkcije raspodele (6.6) zadrže samo prva dva člana ( $l = 1$ ) govorimo o poznatoj aproksimaciji dva člana (*engl.* two term approximation (TTA)). Ovakvim odsecanjem razvoja uvodi se pretpostavka o kvazi - izotropnoj funkciji raspodele u prostoru brzina. Striktno govoreći, aproksimacija dva člana je validna isključivo za lake naelektrisane čestice koje se isključivo elastično sudaraju sa molekulima pozadinskog gasa. U ovoj fizičkoj situaciji transfer energije u elastičnim sudarima je mali, ali je veliki transfer impulsa što vodi ka randomizaciji brzina nakon sudara, odnosno izotropnom karakteru funkcije raspodele u brzinskom prostoru. U tom smislu dovoljna su samo dva člana za opis brzinske zavisnosti. Međutim, ukoliko neelastični sudari počnu da igraju važnu ulogu ova aproksimacija više nije validna. Iz ovih razloga transportna teorija za elektrone i jone se razvijala na dva potpuno različita koloseka. Čak i u elastičnim sudarima jona i neutrala transfer energije je veliki, funkcija raspodele je jako anizotropna u prostoru brzina, odnosno aproksimacija dva člana za jone nikad ne važi.

Transport u kombinovanim električnim i magnetskim poljima je znatno komplikovaniji od transporta u čisto električnom polju. Da bi se ovaj problem pojednostavio često se pribegava konceptu efektivnog polja. Koncept efektivnog polja pretpostavlja da srednja energija roja i brzina drifta mogu da se izraze preko efektivnog električnog polja u koje su makar delimično uračunati efekti magnetskog polja i ugla između pravca vektora polja,  $\Psi$ :

$$\varepsilon(E, B, \Psi) = \varepsilon(E_{\text{eff}}, 0, 0), \quad (6.7)$$

$$W(E, B, \Psi) = W(E_{\text{eff}}, 0, 0). \quad (6.8)$$

Jačina efektivnog polja je data izrazom:

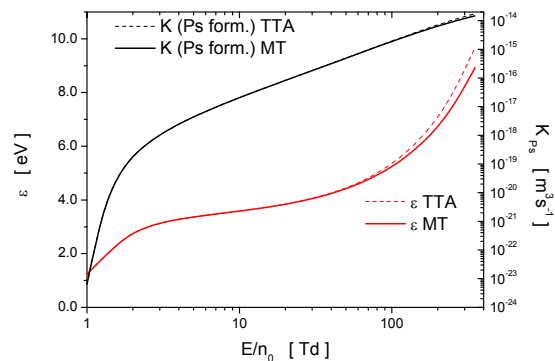
$$E_{\text{eff}}(\varepsilon) = E \sqrt{\frac{1 + (\Omega/v_m)^2 \cos^2 \Psi}{1 + (\Omega/v_m)^2}}, \quad (6.9)$$

gde je  $E$  jačina električnog polja pod čijim uticajem se kreće roj i koje gradi ugao  $\Psi$  sa pravcem magnetskog polja,  $\Omega$  ciklotronska frekvenca i  $v_m$  koliziona frekvenca za prenos impulsa. Koncept efektivnog polja omogućava da se transportni koeficijenti roja dobijeni u čisto električnom polju iskoriste za računanje transportnih koeficijenata u komplikovanijoj situaciji proizvoljne konfiguracije električnog i magnetskog polja. U specijalnom slučaju ortogonalnih polja, jednačine (6.7, 6.8 i 6.9) izražavaju takozvanu Tonksovu teoremu (White *et al.*, 1999c; Tonks, 1937; Tonks i Allis, 1937). Detaljnije o ovoj aproksimaciji može se naći u (Robson, 1994). Interesantna napomena koja ide u prilog tvrdnji da koncept efektivnog polja treba vrlo oprezno koristiti je da u najopštijem slučaju proizvoljne konfiguracije električnih i magnetskih polja postoji beskonačan broj mogućih konfiguracija i jačina polja koje daju istu srednju energiju roja. Takođe, veza između srednje energije roja i brzine drifta nije jednoznačna. Preciznije rečeno, za fiksiranu vrednost električnog polja one vrednosti intenziteta magnetskog polja i ugla  $\Psi$  koje daju istu srednju energiju roja daju različite brzine drifta (White *et al.*, 1999c). Primer provere validnosti koncepta električnog polja u transportu elektrona u  $\text{CF}_4$  mogu se naći u (Dujko *et al.*, 2006) za slučaj proizvoljne konfiguracije polja i (Dujko *et al.*, 2005) u ortogonalnoj konfiguraciji.

Jedan od ciljeva ove disertacije je provera da li teorija i metode simulacije razvijene za proučavanje transporta elektrona mogu da se iskoriste za izučavanje transportnih osobina rojeva pozitrona. Iz tog razloga testirali smo domen primenljivosti aproksimacije dva člana i validnost koncepta efektivnog polja u transportu pozitrona. Rezultati su prikazani u sledeća dva paragrafa. Detaljnije o primenljivosti različitih aproksimacija u transportu pozitrona bavili smo se u radu (Banković *et al.*, 2012b).

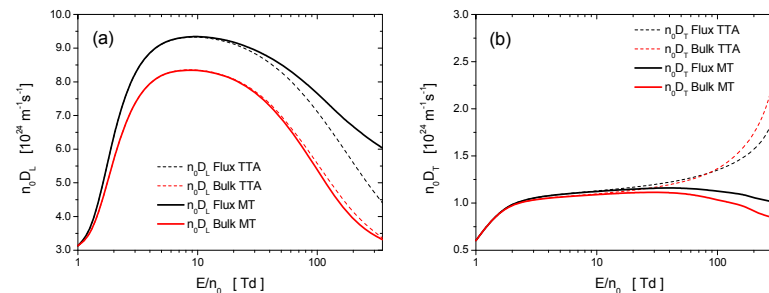
#### 6.4.1. DOMEN PRIMENLJIVOSTI APROKSIMACIJE DVA ČLANA

U ovom paragrafu ispitaćemo s kojom preciznošću aproksimacija dva člana pri rešavanju Boltzmannove jednačine reprodukuje rezultate dobijene rešavanjem Boltzmannove jednačine bez ograničavanja broja članova u razvoju funkcije raspodele u red po sfernim harmonicima (6.6) za pozitrona u gasu. Posmatrali smo transport pozitrona u molekulskom azotu, koji je u širokoj upotrebi za hlađenje pozitrona u pozitronskim zamkama.



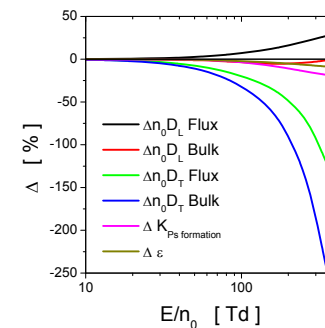
**Slika 6.24.** Poređenje srednje energije roja pozitrona (crveno) i brzinskog koeficijenta za formiranje Ps dobijenih rešavanjem Boltzmannove jednačine bez uvođenja aproksimacija (puna linija) i primenom aproksimacije dva člana (isprekidana linija).

Na slici 6.24 upoređena je srednja energija roja pozitrona u  $N_2$  izračunata korišćenjem teorije za rešavanje Boltzmannove jednačine razvojem funkcije raspodele u red od više članova i primenom aproksimacije dva člana. Vidi se da na nižim vrednostima  $E/n_0$  aproksimacija dva člana daje zadovoljavajuće rezultate, dok na višim  $E/n_0$  (~ 70 Td) počinje da premašuje rezultate dobijene rigoroznim rešavanjem Boltzmannove jednačine. S druge strane, rezultati za brzinski koeficijent za formiranje Ps se tek neznatno razlikuju na  $E/n_0$  većim od 100 Td (crna linija na slici 6.24). Samo na osnovu ovih rezultata moglo bi da se zaključi da primena aproksimacije dva člana neće rezultirati značajnom greškom u tretmanu pozitrona u  $N_2$ . Pogledajmo sada ponašanje elemenata tenzora difuzije.



**Slika 6.25.** Poređenje longitudinalnog koeficijenta difuzije (a) i transveralnog koeficijenta difuzije (b) dobijenih rešavanjem Boltzmannove jednačine bez uvođenja aproksimacija (puna linija) i primenom aproksimacije dva člana (isprekidana linija). Crvenom bojom su označene balk, a crnom fluks vrednosti.

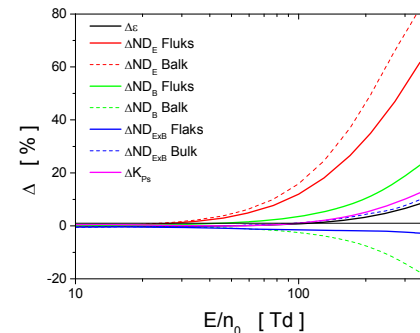
Na osnovu slike 6.25 (a) na kojoj je prikazana longitudinalna komponenta tenzora difuzije može da se zaključi da za računanje bulk komeponente može da se koristi aproksimacija dva člana. Međutim, kod fluks komponente se već na ~ 10 Td vidi razlika između rezultata koje daju dva pristupa, i ta razlika raste sa porastom  $E/n_0$ . Kod transveralne difuzije (slika 6.25 (b)) pored značajne kvantitativne razlike postoji i velika kvalitativna razlika između dva seta rezultata na  $E/n_0 > 10$  Td i u fluks i u balk komponenti.



**Slika 6.26.** Percentualna razlika između transportnih koeficijenata pozitrona u  $N_2$  dobijenih primenom aproksimacije dva člana i rešavanjem Boltzmannove jednačine bez uvođenja aproksimacija.

Na slici 6.26 prikazali smo procentualnu razliku između rezultata dobijenih primenom aproksimacije dva člana i strogo formalnim rešavanjem Boltzmannove jednačine.  $l_{max} = 5$  je bilo potrebno da se postigne preciznost od 1% za sve transportne koeficijente i parametre. Sa slike se jasno vidi da korišćenje aproksimacije dva člana dovodi do pravljenja greške u proračunu svih navedenih transportnih parametara. Primećuje se da različiti transportni parametri pokazuju različite trendove konvergencije. Za odabrani set uslova, pokazuje se da je greška do koje dolazi usled korišćenja aproksimacije dva člana reda 20% za srednju energiju i brzinski koeficijent za formiranje Ps, dok longitudinalni difuzioni koeficijent ima grešku reda 30%. Najveća greška se javlja kod transverznog koeficijenta difuzije i iznosi čak 250% u posmatranom opsegu električnog polja. Primećuje se da povećanje redukovano električnog polja  $E/n_0$  narušava preciznost aproksimacije dva člana za sve transportne koeficijente, iako to nije uvek očigledno, kao na primer u slučaju longitudinalnog koeficijenta difuzije. Ovo je intuitivno očekivano, jer sa povećanjem  $E/n_0$  neelastični sudari počinju da igraju sve veću ulogu, što za rezultat ima povećanje asimetrije funkcije raspodele pozitrona u prostoru brzina. Za elektrone u  $N_2$ , aproksimacija dva člana takođe ne daje dobre rezultate (Dujko *et al.*, 2011a), ali su greške koje se pritom javljaju znatno manje nego u slučaju pozitrona. Zanimljivo je da izgleda da formiranje Ps nema bitan uticaj na anizotropiju funkcije raspodele u prostoru brzina. Do sličnog zaključka se došlo posmatranjem uticaja zahvata u transportu elektrona (Ness i Robson, 1986b). Kod pozitrona, anizotropija funkcije raspodele brzina je indukovana aktivnom ulogom koju imaju neelastični sudari i prema tome, aproksimacija dva člana generalno nije adekvatna u energijskoj zoni gde je kolizijska frekvencija za neelastične sudare uporediva sa kolizijskom frekvencijom za elastične sudare.

Neadekvatnost aproksimacije dva člana za opis transporta pozitrona u prisustvu magnetskog polja ilustrovana je na slici 6.27. Posmatrali smo roj pozitrona u  $N_2$  za vrednost redukovano magnetnog polja od 500 Hx. Vidi se da su greške koje se javljaju zbog primene aproksimacije dva člana manje nego u slučaju transporta u čisto električnom polju. Pažljivom analizom otkriva se da se generalni trend konvergencije u indeksu  $l$  poboljšava sa porastom  $B/n_0$ . Drugim rečima, tačnost aproksimacije dva člana raste sa porastom  $B/n_0$ . Do sličnih zaključaka došlo se i izučavanjem transporta elektrona (Ness, 1994; White *et al.*, 1999b; Dujko *et al.*, 2011b).



Slika 6.27. Procentualna razlika između transportnih koeficijenata roja pozitrona u  $N_2$  dobijenih primenom aproksimacije dva člana i rešavanjem Boltzmannove jednačine bez uvođenja aproksimacija za vrednost  $B/n_0 = 500$  Hx.

#### 6.4.2. KONCEPT EFEKTIVNOG POLJA – TONKSOVA TEOREMA

U ovom odeljku tražimo odgovor na pitanje da li fenomeni koje smo uočili u transportu pozitrona u ukrštenim poljima mogu da se reprodukuju korišćenjem koncepta efektivnog polja, odnosno Tonksove teoreme (White *et al.*, 1999c; Tonks 1937; Tonks i Allis, 1937). Tonksova teorema spada u aproksimacije efektivnog polja i pretpostavlja da srednja energija i brzina drifta mogu da se izraze kao:

$$\varepsilon(E, B, 90^\circ) = \varepsilon(E_{eff}, 0, 0), \quad (6.10)$$

$$W(E, B, 90^\circ) = W(E_{eff}, 0, 0), \quad (6.11)$$

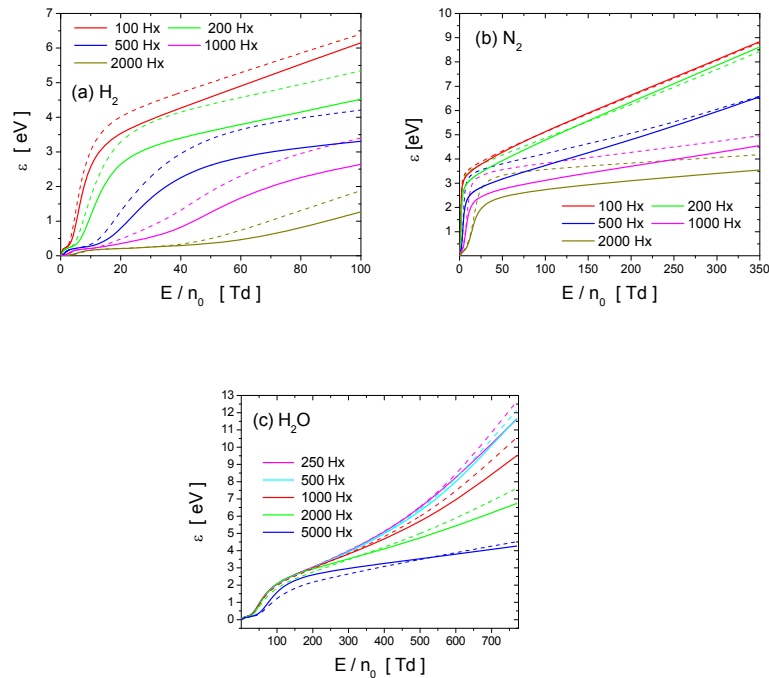
gde je  $E_{eff}$  efektivno polje čija je vrednost data kao (White *et al.*, 1999c):

$$E_{eff}(\varepsilon) = \frac{E}{\sqrt{1 + (\Omega/v_m)^2}}, \quad (6.12)$$

pri čemu je  $E$  intenzitet električnog polja iz ukrštene konfiguracije  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ ,  $\Omega$  ciklotronska frekvencija, a  $v_m$  kolizijska frekvencija za prenos impulsa. Sistem jednačina (6.10), (6.11) i (6.12) se rešava iterativno. Generalno, ova aproksimacija ima ograničen domen primene, jer korišćenjem Tonksove teoreme može da se izračuna srednja energija, ukupna brzina drifta i brzinski koeficijenti za određene procese, ali ne i individualni elementi brzine drifta i tenzora difuzije.

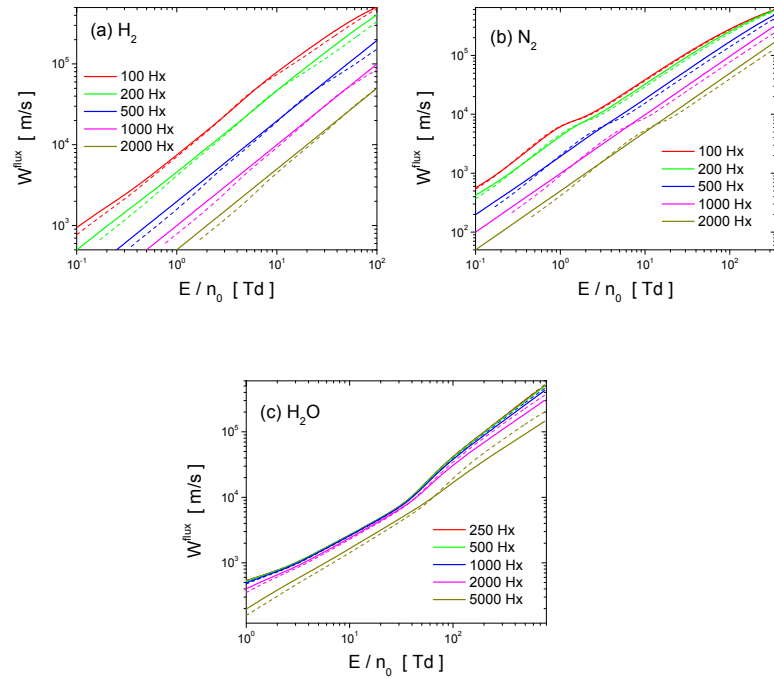


Na slici 6.28 uporedili smo srednju energiju roja pozitrona u (a)  $H_2$ , (b)  $N_2$  i (c)  $H_2O$  u funkciji redukovanoeg električnog polja  $E/n_0$  za različite vrednosti redukovanoeg magnetskog polja  $B/n_0$  dobijenu u uslovima ukrštenih polja sa srednjom energijom izračunatom primenom Tonksove teoreme (isprekidane linije na slici 6.28). Vidi se da se u slučaju sve tri gasa primenom Tonksove teoreme dobija nešto veća srednja energija roja na višim vrednostima  $E/n_0$ , dok za niže vrednosti redukovanoeg električnog polja Tonksova teorema potcenjuje vrednost srednje energije. Ovo se najbolje vidi na primeru vode (slika 6.28 (c)). Oblik zavisnosti srednje energije od  $E/n_0$  ostaje približno isti i dalje je uočljiv fenomen magnetskog hlađenja roja.

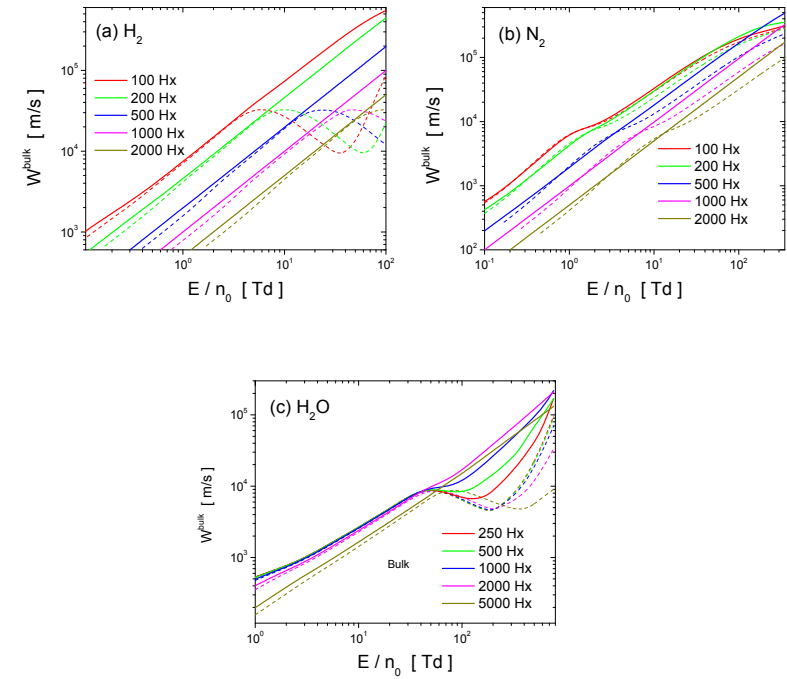


**Slika 6.28.** Srednja energija roja pozitrona u (a)  $H_2$ , (b)  $N_2$  i (c)  $H_2O$  u funkciji  $E/n_0$  za više različitih vrednosti  $B/n_0$ : poređenje između rezultata dobijenih rešavanjem Boltzmannove jednačine (puna linija) i primenom Tonksove teoreme (isprekidana linija).

Na slici 6.29 prikazana je fluks komponenta ukupne brzine drifta roja pozitrona izračunata rešavanjem Boltzmannove jednačine razvojem u red po više članova (kao i Monte Carlo tehnikom) (pune linije) i primenom Tonksove teoreme (isprekidane linije). Slaganje ovako dobijenih fluks brzina drifta je relativno dobro za sva tri gasa. Kada poredimo balk brzine drifta, slaganje je bitno lošije (slika 6.30 (a), (b) i (c)). U slučaju vodonika (a) i vode (c) uočljiv je veoma izražen NDC efekat u profilima balk brzine drifta izračunatim primenom Tonksove teoreme za sve vrednosti primenjenog redukovanoeg magnetskog polja,  $B/n_0$ . S druge strane profili dobijeni za  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  konfiguraciju polja jasno pokazuju da u prisustvu magnetskog polja NDC efekat nestaje. Ovi rezultati sugerisu da kada formiranje Ps dominira nad ostalim neelastičnim procesima vrednost balk komponente brzine drifta izračunata primenom Tonksove teoreme neće biti ni kvalitativno korektna. Što se tiče pozitrona u  $N_2$  (slika 6.30 (b)) situacija nije toliko dramatična, iako postoji značajna kvantitativna razlika između rezultata za  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  konfiguraciju i rezultata dobijenih Tonksovom teoremom. Može da se zaključi da Tonksova teorema ne može adekvatno da opiše kretanje centra mase roja pozitrona u molekulskim gasovima u uslovima razmatranim u ovom radu. Kada je formiranje Ps dominantan proces Tonksova teorema ima ograničen domen primene na fluks brzinu drifta, odnosno Tonksova teorema ne može adekvatno da opiše eksplicitan uticaj formiranja Ps na funkciju raspodele roja i odgovarajuće eksplicitne efekte na drift pozitrona.



**Slika 6.29.** Fluks komponenta brzine drifta roja pozitrona u (a)  $H_2$ , (b)  $N_2$  i (c)  $H_2O$  u funkciji  $E/n_0$  za više različitih vrednosti  $B/n_0$ : poređenje između rezultata dobijenih rešavanjem Boltzmannove jednačine (puna linija) i primenom Tonksove teoreme (isprekidana linija).

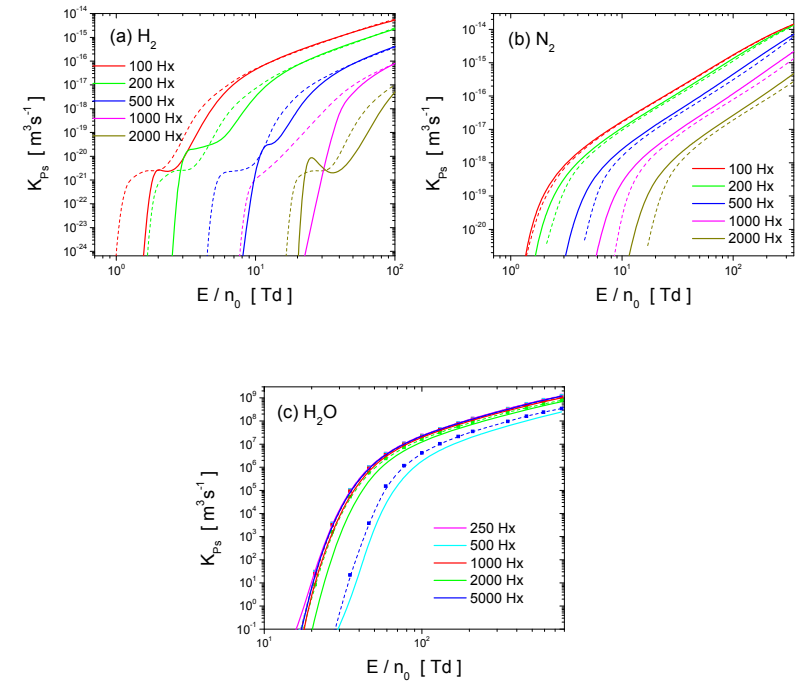


**Slika 6.30.** Bulk komponenta brzine drifta roja pozitrona u (a)  $H_2$ , (b)  $N_2$  i (c)  $H_2O$  u funkciji  $E/n_0$  za više različitih vrednosti  $B/n_0$ : poređenje između rezultata dobijenih rešavanjem Boltzmannove jednačine (puna linija) i primenom Tonksove teoreme (isprekidana linija).

Primenom Tonksove teoreme izračunali smo i brzinski koeficijent za formiranje Ps i dobijene rezultate uporedili sa odgovarajućim koeficijentom izračunatim u uslovima ukrštenih polja (slika 6.31). Na prvi pogled moglo bi se reći da Tonksova teorema daje zadovoljavajuće dobre, malo potcenjene vrednosti brzinskog koeficijenta za formiranje Ps za pozitronu u  $N_2$  za sve vrednosti  $B/n_0$  (slika 6.31 (b)). Dobijeni rezultat za pozitronu u  $N_2$  je očekivan jer je, usled kompeticije između formiranja Ps i elektronskih ekscitacija, formiranje Ps, u poređenju sa ostalim izučavanim gasovima, najmanje izražen proces u  $N_2$ . Kod pozitrona u vodenoj pari (slika 6.31 (c)) možemo da primetimo da Tonksova teorema jako promašuje vrednost brzinskog koeficijenta za formiranje Ps za 500 i 5000 Hx, dok daje dobro

slaganje za  $B/n_0$  od 250, 1000 i 2000 Hx. Zanimljivo je da su rezultati dobijeni Tonksovom teoremom veći od rezultata dobijenih rešavanjem Boltzmannove jednačine u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  konfiguraciji polja za sve vrednosti redukovano magnetnog polja osim za  $B/n_0 = 5000$  Hx, gde je  $K_{Ps}$  koji daje Tonksova teorema značajno manji od “Boltzmannovskog”. Jedini generalni zaključak koji odavde može da se izvede je da korišćenje Tonksove teoreme nije dobar metod za računanje brzinskog koeficijenta za formiranje Ps u vodi. Što se tiče vodonika (slika 6.31 (a)), Tonksova teorema generalno dobro reprodukuje kvalitativnu zavisnost koeficijenta za formiranje Ps od redukovano električnog polja,  $E/n_0$  za sve vrednosti redukovano magnetnog polja,  $B/n_0$ , ali da postoji kvantitativno neslaganje – Tonksova teorema predviđa nešto veće vrednosti  $K_{Ps}$ . Na višim vrednostima  $E/n_0$  ova razlika se gubi.

Prikazani rezultati vode nas do zaključka da koncept efektivnog polja nije adekvatan za izučavanje transportnih osobina roja pozitrona. Kvalitativno ponašanje srednje energije u zavisnosti od primenjenog redukovano električnog polja može da se korektno predvidi korišćenjem Tonksove teoreme, ali kvantitativna procena srednje energije nije dobra. Što se tiče brzine drifta pozitrona, koncept efektivnog polja nas navodi na potpuno pogrešne zaključke. Generalno bi moglo da se kaže da tačnost Tonksove teoreme raste sa dubljim ulaženjem u režim u kome osobine roja dominantno kontrolišu sudari. Sa povećanjem  $B/n_0$  tačnost Tonksove teoreme opada. Kvantitativne razlike između rezultata dobijenih rešavanjem Boltzmannove jednačine i rezultata Tonksove teoreme su u velikoj meri posledica zavisnosti koliziona frekvence i funkcije raspodele od  $B/n_0$ . Na onim vrednostima  $E/n_0$  na kojima srednja koliziona frekvencija za prenos impulsa slabije zavisi od magnetnog polja Tonksova teorema daje tačnije rezultate. Generalni zaključak koji proizilazi iz prikazanih rezultata je da kada se želi izbeći matematička kompleksnost teorije za rešavanje Boltzmannove jednačine razvojem funkcije raspodele u red od više članova u prostoru brzina, za izučavanje transporta pozitrona je bolje koristiti tehniku Monte Carlo simulacija uz odgovarajući skup preseka za sudarne procese nego koncept efektivnog polja.



**Slika 6.31.** Brzinski koeficijent za formiranje Ps roja pozitrona u (a)  $H_2$ , (b)  $N_2$  i (c)  $H_2O$  u funkciji  $E/n_0$  za više različitih vrednosti  $B/n_0$ ; poređenje između rezultata dobijenih rešavanjem Boltzmannove jednačine (puna linija) i primenom Tonksove teoreme (isprekidana linija i simboli).

Najznačajniji zaključak ovog poglavlja je da, ako zahtevamo preciznost u izračunatim transportnim koeficijentima, teorija za rešavanje Boltzmannove jednačine razvojem funkcije raspodele u red čiji broj članova nije unapred ograničen i/ili Monte Carlo simulacija ne mogu da se izbegnu.

## 7. POZITRONI U BIOMEDICINI

Jedna od najznačajnijih primena pozitrona je primena koju imaju u medicini u sklopu pozitronske emisione tomografije (*engl.* positron emission tomography (PET)). PET je medicinska tehnika za snimanje organizma, koja je u širokoj upotrebi za dijagnostiku tumora, ali takođe i za izučavanje metabolizma i funkcija mozga (Muehlllehner i Karp, 2006; Wahl, 2002). Uprkos činjenici da je sama tehnika veoma dobro razvijena, procesi koji se na atomskom i molekulskom nivou dešavaju u ljudskom organizmu usled interakcija sa pozitronima još uvek nisu dobro proučeni i kvantifikovani. Trenutno se primena PET tehnike zasniva na modelima koji podrazumevaju da se pozitroni pri interakciji sa ljudskim tkivom ponašaju slično kao elektroni ili na modelima u kojima se zanemaruje uticaj koji pozitroni imaju na tkivo do trenutka anihilacije i u kojima se prate samo rezultujući  $\gamma$  zraci. Neke tehnike koje se primenjuju na pozitronu prate depoziciju energije kao bitan parameter, ne ulazeći u činjenicu da neki od ključnih molekulskih procesa ne zahtevaju mnogo energije i ovakvi pristupi se obično baziraju na semiempirijskim relacijama.

Kako ovi pristupi generalno nisu dobri, da bi se potpuno shvatilo kako PET funkcioniše i da bi se tehnika eventualno unapredila potrebno je detaljno uključiti u razmatranje atomske procese na nivou poznavanja elementarnih verovatnoća za procese. Podaci za atomske sudarne procese su sve više na raspolaganju i ovaj rad je jedan od prvih koji konstruiše modele prolaska pozitrona kroz materiju na osnovu merenih podataka za binarne sudare. Pored osnovnih sudara neophodno je ispitati i sve sekundarne procese do kojih dolazi pri interakciji pozitrona sa materijom. Iz tog razloga je izuzetno bitno dobro razumeti interakcije nisko energijskih pozitrona sa biološki relevantnim molekulima, u koje pre svega spadaju voda, zatim jednostavni ugljo-vodonici i DNK/RNK baze: adenin

( $C_5H_5N_5$ ), timin ( $C_5H_6N_2O_2$ ), citozin ( $C_4H_5N_3O$ ), guanin ( $C_5H_5N_5O$ ) i uracil ( $C_4H_4N_2O_2$ ). Naravno, pored interakcija pozitrona sa ovim molekulima, potrebno je poznavati i interakcije svih ostalih relevantnih čestica, kao što su visoko energijski fotoni, zatim elektroni (uključujući niskoenergijske sekundarne elektrone i Augerove elektrone), pa čak i Ps. Potsetimo se da sliku na PET skeneru formiraju  $\gamma$  zraci koji potiču od anihilacije pozitrona energija manjih od 200eV (to su pozitroni koji mogu da formiraju Ps), tako da treba ispratiti proces termalizacije pozitrona, a zatim i Ps, kao i sve sekundarne procese do kojih pritom dolazi, odrediti energiju koja se deponuje u tkivu i proceniti štetu koja se pri tom napravi. Pod terminom „šteta“ podrazumevamo pre svega disocijaciju organskih molekula koja treba na odgovarajući način da se kvantifikuje.

Analiza strukture trajektorija naelektrisanih čestica daje korisnu osnovu za razumevanje ranih faza fizičkog i hemijskog delovanja zračenja na biološku materiju. Iz trajektorija mogu da se dobiju relevantne informacije od biomedicinskog značaja, kao što su mape deponovane energije i promene na molekulima jasno određene u prostoru. Veličine koje su od interesa za radijacionu fiziku su (Podgorsak, 2005):

- *Dužina putanje* koja odgovara dužini trajektorije koju čestica pređe krećući se od početne pozicije  $x_{ini}$  do krajnje pozicije  $x_{final}$ .
- *Domet* (*engl.* penetration) -  $|x_{final} - x_{mid}|$ .
- *Absorbovana doza*, koja predstavlja energiju deponovanu u tkivu po jedinici mase:

$$D = \frac{dE_{ab}}{dm}. \quad (7.1)$$

$dE_{ab}$  je absorbovana energija, a  $dm$  masa biološke materije u konačnoj zapremini  $V$ . Jedinica u kojoj se izražava absorbovana doza je grej,  $1Gy = 1J/kg$ .

- *Zaustavna moć* (*engl.* stopping power), određuje energijske gubitke po jedinici dužine putanje:

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

i izražava se u  $MeV \cdot cm^2/g$ .  $dE_k$  predstavlja promenu kinetičke energije posmatrane čestice, a  $\rho$  gustinu mete. Formula (7.2) predstavlja ukupnu (totalnu) zaustavnu moć, koja može da se

podeli na dve komponente, jednu koja pretstavlja gubitke u sudarima i drugu koja izražava radijativne gubitke:

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

Koliziona zaustavna može da se izračuna kao (Muñoz *et al.*, 2007a):

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

gde je  $\bar{E}$  srednja ekscitaciona energija, koja se obično dobija iz eksperimentalno izmerenog spektra gubitka energije,  $\sigma_{inel}$  ukupni presek za neelastične sudare,  $M$  molarna masa i  $N_a$  Avogadrov broj. Koliziona zaustavna moć je direktno povezana sa absorbovanom dozom.

- *Exposure* – količina naelektrisanja koja nastaje po jedinici mase:

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

Određuje se u vazduhu, pa tako  $dQ$  predstavlja ukupno naelektrisanje koje nastane u vazduhu pri potpunom zaustavljanju svih elektrona i pozitrona koji su nastali ili su oslobođeni u masi vazduha  $dm$ . Jedinica u kojoj izražavamo ovu veličinu je C/kg. Ranije se koristio roentgen, R ( $1R = 2.58 \cdot 10^{-4} C/kg$ ), ali poslednjih godina je sve manje u upotrebi.

Ovo poglavlje započinjemo kratkim prikazom uloge koju pozitroni imaju u okviru PET tehnike, kao i u potencijalnoj pozitronskoj terapiji tumora. Dalje nastavljamo pregledom Monte Carlo kodova koji su danas u upotrebi u medicini, pri čemu ćemo akcenat staviti na one kodove koji se koriste za simuliranje i izučavanje PET tehnike. Kodove smo podelili na simulacije opšte namene, kodove za planiranje doze i za rekonstrukciju slike u PET tehnici i u najkraćim crtama smo istakli njihove osnovne karakteristike. Kako je jedan od najvećih nedostataka većine komercijalnih kodova nemogućnost praćenja interakcije naelektrisanih čestica sa tkivom na energiji ispod  $\sim 10eV$  posebno smo skrenuli pažnju na rad Garcie i saradnika (Muñoz *et al.*, 2008a; 2005; 2007b), koji su pokušali svojim Monte Carlo kodom za praćenje niskoenergijskih čestica da prevaziđu ovaj problem. Na samom kraju napravićemo vezu između rezultata prikazanih u prethodnim poglavljima ove disertacije i potencijalne primene u medicini. Za Monte Carlo kodove koji se koriste za simuliranje različitih aspekata PET tehnike ne postoje standardni testovi i naš predlog je da se, slično kao

što je ustaljena praksa u fizici niskotemperaturnih plazmi, modeli i odgovarajući kodovi testiraju u limitu rojeva. U zaključku ćemo dati smernice za budući rad.

## 7.1. ULOGA POZITRONA U MEDICINI

Pozitronska emisiona tomografija (PET) je dijagnostička tehnika koja se danas koristi pre svega za rano dijagnostifikovanje tumora, ali i za ispitivanje moždanih funkcija, rada srca i metaboličkih funkcija organizma. Suština ove tehnike je da se u organizam pacijenta (obično direktno u krvotok) ubrizga radioaktivni šećer 18F-FDG, zatim se sačeka da se ovaj aktivni molekul rasporedi u tkivu (vreme čekanja za 18F-FDG iznosi oko sat vremena) i zatim se detektuje  $\gamma$  zračenje iz zona pojačane metaboličke aktivnosti (Muehlllehner i Karp, 2006; Wahl, 2002). 18F-FDG je glukoza u kojoj je jedna hidroksi-grupa zamenjena atomom fluora,  $^{18}F$ , koji emituje pozitrone. Kada 18F-FDG uđe u ćeliju pretvara se u 18F-FDG-6-fosfat i kako ne podleže glikolizi ne učestvuje dalje u metabolizmu, već ostaje zarobljena u ćeliji. Putanje pozitrona koje emituje radioizotop u tkivu su reda 1 mm i duž tih putanja pozitron gubi svoju kinetičku energiju dok ne dođe do anihilacije sa elektronom. Rezultujući  $\gamma$  fotoni se detektuju u koincidenciji pomoću scintilacionog detektora i fotomultiplikatora, pri čemu se lokalizuje njihov izvor, odnosno mesto u tkivu na kome je došlo do anihilacije. Simultanim rešavanjem jednačina za totalnu aktivnost svakog delića tkiva, takozvanog voksel, dobija se mapa radioaktivnosti u funkciji položaja voksel. Na mapi se vide zone pojačane koncentracije aktivnog molekula koje dalje tumači radiolog u kontekstu dijagnostike i planiranja tretmana pacijenta.

PET tehnika, pa samim tim i pozitroni, našli su primenu i u okviru *boron neutron capture terapije* (u daljem tekstu BNC terapija) (Barth, 2003; 2009; Beddoe, 1997). BNC terapija se bazira na nuklearnoj reakciji  $^{10}B(n,\alpha)^7Li$ , do koje dolazi kada se  $^{10}B$ , neradioaktivni izotop bora, ozrači nisko-energijskim termalnim neutronima, što dovodi do nastanka  $\alpha$  čestice i jezgra  $^7Li$ . Pri ovakvoj reakciji  $\alpha$  čestica i  $^7Li$  imaju putanje čija je dužina reda 5-9  $\mu m$ , pa je njihov destruktivan uticaj ograničen na ćelije koje sadrže  $^{10}B$ . BNC terapija je odavno prepoznata kao potencijalni tretman inače smrtonosnih moždanih tumora i prva testiranja su započeta pedesetih godina prošlog veka. Najveći problem je predstavljao nalaženje adekvatnog molekula koji u sebi sadrži bor i koji efikasno može da dovedu potrebnu količinu  $^{10}B$  atoma do oštećenog tkiva, a da istovremeno odnos količine  $^{10}B$  u

obolelom i zdravom tkivu bude što veći (Menichetti *et al.*, 2009). Uprkos mnogim naporima nedostatak molekula koji bi selektivno nosili  $^{10}\text{B}$  do tumorom zahvaćenog tkiva i nemogućnost da se apsolutna koncentracija  $^{10}\text{B}$  prati *in vivo* su i dalje problemi koji treba da se reše. Pronađene su samo dve supstance koje su, iako nisu dovoljno selektivne, dale pozitivne rezultate kao nosioci  $^{10}\text{B}$ : BSH – neorganska so, sodium borocaptate,  $\text{Na}_2\text{B}_{12}\text{H}_{11}\text{SH}$  (Hatanaka, 1975) i BPA – aromatična aminokiselina, boronophenylalanine (Mishima *et al.*, 1989) i za sad se BPA pokazala kao bolji izbor (Barth, 2009). *In vivo* farmakokinetika nosilaca  $^{10}\text{B}$  u BNC terapiji i kvantifikacija  $^{10}\text{B}$  u tkivu mete postali su ključni u optimizaciji dovođenja  $^{10}\text{B}$  do mete, a samim tim i efikasnosti BNC terapije (Ishiwata *et al.*, 1991; 1992; Vähätalo *et al.*, 2002; Imahori *et al.*, 1998a; 1998b; 1998c; 1998d). PET tehnika je zbog svoje jake osetljivosti i mogućnosti da proizvede sliku koja može da se kvantifikuje, takođe razmatrana kao moguće oruđe za proučavanje BPA farmakologije. Da bi se koristila u sklopu PET sistema BPA mora da bude obeležena pozitronskim emiterom ( $^{18}\text{F}$ ,  $^{11}\text{C}$ ,  $^{124}\text{I}$ ,...). Kao najoptimalniji pozitronski emiter pokazao se  $^{18}\text{F}$  (Ishiwata *et al.*, 1991). Ovaj eksperiment je dao obećavajuće rezultate vezane za farmakokinetiku obeležene BPA i njene metaboličke stabilnosti *in vivo*. U pokušaju pospešivanja dovođenja bora do oštećenog tkiva testirane su različite BPA formule i kao najbolja se pokazala BPA fruktoza, zbog minimalnih sporednih efekata i jednostavnije administracije. Markirana BPA fruktoza, L-[ $^{18}\text{F}$ ]-FBPA je pručavana *in vivo* pomoću PET tehnike (Imahori *et al.*, 1998a; 1998b; 1998c; 1998d) i u praksi je korišćena za tretman različitih vrsta tumora (Busse *et al.*, 2003; Kabalka *et al.*, 2003; Kankaanranta *et al.*, 2007; Fuwa *et al.*, 2008; Havu-Aurén *et al.*, 2007; Ariyoshi *et al.*, 2007; Aihara *et al.*, 2006). Navedene kliničke studije bave se transportom i nagomilavanjem BPA i takođe daju važne podatke koji idu u prilog tvrdnji da PET sa L-[ $^{18}\text{F}$ ]-FBPA ima budućnost u procenjivanju da li je konkretno, tumorom zahvaćeno tkivo pogodan kandidat za tretman BNC terapijom. Ovo je od velikog značaja jer s jedne strane omogućava da se proceni efikasnost tretmana na bazi jednog slučaja, tako da se lako mogu izuzeti oni pacijenti kojima ova vrsta terapije ne bi pogodovala. S druge strane, lokalna koncentracija L-[ $^{18}\text{F}$ ]-FBPA u korelaciji sa koncentracijom primljene supstance koja nosi bor daje mapu lokalne koncentracije  $^{10}\text{B}$ , što je izuzetno bitno za planiranje tretmana. Jedna od najvažnijih primena PET i kombinovane PET/CT tehnike danas je proučavanje farmakokinetike, metabolizma i akumulacije BPA u tkivu-meti. Među najbitnijim ciljevima u modernoj medicini je mogućnost brze procene reakcije konkretnog pacijenta na određenu terapiju i brzo

određivanje najbolje moguće terapije, a samim tim, ovo je i jedan od najbitnijih ciljeva farmaceutske industrije.

Nedavno je tim istraživača u USA na ćelijskom nivou pokazao terapijski potencijal pozitrona u tretmanu maligniteta (Moadel *et al.*, 2003), a nakon toga su sproveli i istraživanje u kome je prvi put iskorišćena 18F-2-deoxy-D-glukoza (18F-FDG) za tretman modelnog tumora dojke kod životinja i u kome je utvrđeno da 18F-FDG utiče i na brzinu rasta tumora i na preživljavanje tretiranih životinja (Moadel *et al.*, 2005).  $^{18}\text{F}$  emituje pozitronne srednje energije 0.250 MeV sa zastupljenošću od 96%. Pozitroni gube svoju energiju u tkivu, usporavaju se i na kraju anihiliraju sa elektronima, što dovodi do emisije dva fotona u suprotnim smerovima, pri čemu svaki nosi energiju 511 keV. Iako se potencijal elektrona da unište tumor deponujući svoju kinetičku energiju u tkivu koristi u praksi poslednjih 50 godina (od uvođenja u medicinsku praksu terapije tumora tiroide pomoću emitera elektrona  $^{131}\text{I}$  (Seidlin *et al.*, 1946)), terapijski potencijal pozitrona je i dalje neistražen. Teorijski, pozitroni bi trebalo da uništavaju tumor deponujući energiju u tkivu na isti način kao i elektroni. Moadel i saradnici (Moadel *et al.*, 2003; 2005) su po prvi put procenili potencijal 18F-FDG, pozitronskog emitera, u radiomolekularnoj terapiji tumora dojke na životinjskom modelu tumora i kod pacijenata sa metastatičkim tumorom dojke. Pokazalo se da 18F-FDG dovodi do apoptoze i nekroze ćelija tumora, a takođe i da smanjuje brzinu rasta tumora. Da su dobijeni rezultati od velikog praktičnog značaja govori činjenica da je za indukciju tumora kod miševa u ovom istraživanju (Moadel *et al.*, 2005) korišćena posebna ćelijska linija 5505, ćelijska linija raka mlečne žlezde, u kojoj Notch4 gen postoji u aktivnom obliku (Fitzgerald *et al.*, 2000). Notch gen utiče na deobu ćelije i njenu sudbinu tokom razvoja i zahteva prisustvo nekog onko-proteina da bi se razvio tumor. U slučaju pomenute ćelijske linije u pitanju je onko-protein *ras*, što je od velike važnosti jer je ranije pokazano da upravo Notch i *ras* igraju presudnu ulogu u razvoju tumora dojke kod žena (Weijzen *et al.*, 2002).

## 7.2. ULOGA MONTE CARLO SIMULACIJA U BIOMEDICINI

Monte Carlo simulacije su postale jedno od najpopularnijih oruđa u različitim oblastima medicinske fizike, uključujući zaštitu od zračenja, dijagnostičku radiologiju, radioterapiju i nuklearnu medicinu, sa rastućim interesovanjem za egzotične i nove primene, kao što su intravaskularna radijaciona terapija i BNC terapija. Sa brzim razvojem računarskih

tehnologija primena Monte Carlo simulacija postala je korisna i za rekonstrukciju slike u emisionoj tomografiji kao i u planiranju tretmana u terapiji zračenjem.

Za potrebe dijagnostike u nuklearnoj medicini, transport zračenja se simulira u nekoliko koraka. Prvo se kreiraju naelektrisane čestice ili fotoni koji dolaze iz definisanog prostornog izvora u opštem slučaju sa slučajnom početnom orijentacijom u prostoru. Simulacija prati čestice na njihovom putu kroz posmatrani sistem, pri čemu se sampluju ogovarajuće gustine verovatnoće sa ciljem određivanja trajektorija čestica i energije koja se deponuje u pojedinačnim delićima sistema. Interakcije sa sredinom određuju dubinu prodiranja čestica zračenja i karakteristike njihovog kretanja i, što je najbitnije, energija koja se deponuje tokom pojedinačnih interakcija daje absorbovanu dozu zračenja. Uz dovoljan broj interakcija, srednja absorbovana doza zračenja u zonama od interesa može da se dobije sa prihvatljivom tačnošću. Ključna pitanja koja se postavljaju su koliko dobro geometrijski model opisuje realni sistem i koliko je istorija sistema potrebno ispratiti da bi se postigla zadovoljavajuća sigurnost (obično se traži da bude 5 – 10 %). Drugo pitanje se pre svega odnosi na neophodno procesorsko vreme. Takođe se postavlja pitanje kako izmereni podaci mogu da se iskoriste za proveru i potvrđivanje validnosti teorijskih proračuna.

U ovom odeljku ćemo dati kratak pregled Monte Carlo programskih paketa koji se koriste širom sveta i sumirati njihovu primenu u dijagnostičkoj i terapijskoj nuklearnoj medicini. Akcenat će biti na primenama koje uključuju precizno modelovanje transporta zračenja kroz materiju. Takođe, sumiraćemo modelovanje objekta preko matematičkih i takozvanih “*voxel – based*” fantoma, i pokušaćemo da naglasimo prednosti i mane svakog pristupa modelovanju objekta koji se simulira.

Postoji veliki broj Monte Carlo programa koji se koriste u polju dijagnostike i dozimetrije u nuklearnoj medicini i mnogi među njima mogu besplatno da se skinu sa Interneta. Osnovna podela ovih kodova bila bi podela na opšte Monte Carlo simulacije koje su razvijene za potrebe opštih primena u medicinskoj fizici i primena na visokim energijama, i na specijalne programske pakete koji su razvijeni za optimizaciju kvaliteta slike u dijagnostici. Većina ovih kodova zahteva dobro poznavanje rada na računaru, kao i poznavanje teorije transporta zračenja i sadrži podatke o elektromagnetskim procesima iz javno dostupnih baza podataka. Ovi procesi uključuju jonizaciju, Bremsstrahlung, Comptonovo i Rayleighovo rasejanje, foto električni efekat, produkciju parova, anihilaciono, sinhrotronsko i tranziciono zračenje, scintilacije, refrakcije, refleksije, absorpcije i

Cerenkovljev efekat. Energija koju elektroni i pozitroni gube u ovim procesima se računa na osnovu tablica zaustavne moći (*engl.* stopping power). Ove numeričke simulacije su dizajnirane sa ciljem da budu primenljive u kompleksnim geometrijama.

### 7.2.1. OPŠTE MONTE CARLO SIMULACIJE

Pod terminom “opšta Monte Carlo simulacija” u nuklearnoj medicini podrazumevamo simulaciju opšte namene koja prati naelektrisane čestice na njihovom putu kroz materiju. Ovde ćemo nabrojati kodove koji su najčešće u upotrebi i dati neke od njihovih osnovnih karakteristika.

Jedan od najpopularnijih kompjuterskih kodova specijalno razvijenih za primene u medicinskoj fizici je **EGS** sistem (Electron Gamma Shower) (Nelson *et al.*, 1985). To je Monte Carlo kod za opšte primene u medicinskoj fizici, simulira spregnuto kretanje elektrona i fotona u proizvoljnoj geometriji na energijama od nekoliko keV do nekoliko TeV. Za ovaj kod se smatra da predstavlja vrhunsko dostignuće u polju simulacija transporta zračenja jer je veoma fleksibilan i dobro dokumentovan. Neophodne pragove za procese u kojima učestvuju elektroni i fotoni kao i ostale ulazne podatke koji se računaju na osnovu ovih pragova određuje pomoću inkorporiranog generatora preseka PEGS. Nova poboljšana verzija ovog koda, EGSnrc, koja je u mogućnosti da prati i niskoenergijske čestice, se pojavila u upotrebi 2000. godine (Kawrakow, 2000a; 2000b). EGSnrc se koristi za modelovanje radijacione terapije i za praćenje pozitrona u PET.

**MCNP** (Monte Carlo N-Particle) je kod nastao radom velikog tima u Nacionalnoj laboratoriji Los Alamos, USA. Njegova originalna namena je bila proračun transporta neutrona i fotona u reaktorima (Brown, 2003), a prvi put je primenjen za procenu brzinskog koeficijenta lančane neutronske reakcije u fisionom reaktoru. Ovaj kod i dalje ima brojne primene van oblasti medicinske fizike. Velika prednost ovog paketa je mogućnost modelovanja različitih geometrija. Kod u opštem slučaju prati neutrone, fotone i elektrone na njihovom putu kroz materiju, a može da radi i u modovima praćenja jedne ili bilo koje dve vrste čestica. Neutroni se prate u opsegu energija od  $10^{-11}$  MeV do 20 MeV, dok je opseg energija za elektrone i fotone između 1 keV i 1000 MeV. Transport elektrona se simulira pomoću ETRAN koda koji je inkorporiran u MCNP. Velika fleksibilnost ovog koda čini da je njegovo izvršavanje sporije nego kod EGSnrc koda, osim ako se prethodno ne adaptira za konkretnu primenu, npr. proračun doze u *voxel-based* fantomu (DeMarco *et al.*, 1998).

Najnovije verzije ovog koda su prilagođene trendovima u paralelnom programiranju i izvršavanju na računarskim klasterima.

**GEANT4** (GEometry ANd Tracking 4) (Agostinelli *et al.*, 2003) je kod opšte namene, a razvijen je za primene u fizici čestica. GEANT4 sadrži skup alata dizajniranih za simuliranje prolaska više vrsta čestica (neutrona, protona, piona, itd) kroz materiju. Ima veliku primenu u simulaciji fizike koja stoji iza radioterapije (Carrier *et al.*, 2004; 2006) i predstavlja osnovu programskog paketa GATE koji se koristi u nuklearnoj medicini za simulacije PET i SPECT tehnika (Jan *et al.*, 2004). Napisan je u programskom jeziku C++ i uključuje skup funkcija koje definišu geometriju sistema, materijal, modelovanje fizike, praćenje čestica na njihovom putu kroz materiju i sudarne procese. Što se fizike tiče, simulira se široka lepeza procesa, uključujući elektromagnetske, hadronske i optičke procese. Kod se može primenjivati u energijskom opsegu od 250 eV do nekoliko TeV. Osim u fizici čestica i za dizajniranje akceleratora, ovaj paket može da se koristi i u svemirskom inženjeringu i u medicinskoj fizici (Agostinelli *et al.*, 2003). Jedna od najbitnijih karakteristika GEANT4 paketa je njegova velika fleksibilnost. Ceo paket je dizajniran tako da mogu da se dodaju i modifikuju fizički procesi korišćenjem novih modela i baza podataka. Moguće je modifikovati pojedinačne procese implementirane u kod u cilju rešavanja nekog specifičnog problema, a takođe je moguće dodati nove procese kompletno napisane od strane korisnika, tako da funkcionišu zajedno sa već postojećim. Pri korišćenju GEANT4 paketa prvo se definiše geometrija sistema koji se simulira, zatim se generišu primarni događaji, registruju se različite vrste čestica koje se dalje prate u simulaciji, kao i fizički procesi u kojima one učestvuju. Takođe se definiše način na koji se tretiraju događaji da bi se dobila zadovoljavajuća statistika i neophodni izlazni podaci. Na žalost, GEANT4 i dalje ima probleme vezane za reprezentaciju transporta elektrona i njegovo izvršavanje je sporije u poređenju sa EGSnrc (Poon i Verhaegen, 2005; Poon *et al.*, 2005), ali je i dalje moćno oružje u nuklearnoj medicini.

Na listi osnovnih Monte Carlo kodova u medicinskoj fizici nalazi se i **PENELOPE** (PENetration and Energy LOSS of Positrons and Electrons) (Baró *et al.*, 1995). Ovaj programski paket sadrži detaljni tretman preseka za interakcije elektrona, pozitrona i fotona na relativno niskim energijama i fleksibilan geometrijski paket koji omogućava simulaciju akceleratorskih snopova (Baró *et al.*, 1995; Salvat *et al.*, 1996; Sempau *et al.*, 2001). Dizajniran je da pokrije kompletnu fiziku pri prolasku čestica kroz materiju od visokih

početnih energija reda 1 GeV do energija od svega 100 eV. Kretanje elektrona i pozitrona kroz materiju opisano je pomoću procedure koja pravi razliku između interakcija u kojima nastaju sekundarni elektroni i u kojima se gubi značajna količina energije, koje se detaljno simuliraju i interakcija u kojima se medijumu predaje mala količina energije, koje se opisuju preko teorije višestrukih sudara.

Neke istraživačke grupe su razvile sopstvene Monte Carlo kompjuterske simulacije na bazi jednog od gore navedenih opštih programskih paketa, koji služi kao osnova i daje mogućnost istraživaču da konstruiše module za specifične primene u arhitekturi hijerarhijskih slojeva. Primeri su Sim-SPECT kod baziran na MNCP (Yanch *et al.*, 1992; Yanch i Dobrzeniecki, 1993), PET-EGS baziran na EGS4 (Castiglioni *et al.*, 1999) i najskoriji u nizu GATE na bazi GEANT4, razvijen u CERNu (Jan *et al.*, 2004).

Ovde ćemo skrenuti pažnju na još jedan MC kod opšte namene razvijen za primene u biomedicini koji je interesantan zbog činjenice da se ne bazira na pomenutim komercijalnim kodovima. U pitanju je kod koji su razvili Champion i saradnici (Champion, 2003; Champion i Le Loirec, 2006; 2007) i koji generiše putanje elektrona i pozitrona u tečnoj vodi. Zapravo, preseci za interakcije pozitrona i elektrona sa molekulima vode su izračunati pod pretpostavkom da je voda u gasnoj fazi, pa je gustina vode  $\rho=1\text{g/cm}^3$  uvedena kao korekcionni faktor pri izračunavanju trajektorija. Kod radi u opsegu energija od  $\sim 10\text{eV}$  do  $10\text{keV}$ , a kako se preseci i za elektrone i za pozitronu u tečnoj i gasnoj fazi vode najviše razlikuju na energijama ispod  $10\text{eV}$  (Champion, 2003; Champion i Le Loirec, 2006), ova aproksimacija nije problematična. S druge strane, ponovo imamo situaciju, kao i u većini komercijalnih kodova, da se čestice ne prate ispod unapred određene vrednosti energije, čime se gube dragoceni podaci o detaljima termalizacije pozitrona i sekundarnih elektrona. U kodu se koriste teorijski izračunati totalni i višestruki diferencijalni preseci za interakcije elektrona i pozitrona sa molekulom vode korišćenjem metode parcijalnih talasa (*engl.* partial wave method) (Champion, 2003). Uključeni su integralni i diferencijalni presek za elastično rasejanje obe vrste čestica, preseci za ekscitacije, pri čemu su preseci za rotacione i vibracione ekscitacije zanemareni jer je njihov doprinos značajan samo na niskim energijama, presek za formiranje Ps i direktnu anihilaciju i integralni i diferencijalni presek za jonizaciju. Što se tiče tretmana jonizacije, prednost ovog koda u odnosu na komercijalne kodove je ta što jonizaciju ne tretira semi-empirijski, već kvantno-mehanički, čime obezbeđuje pouzdane višestruke diferencijalne preseke (po uglovima i po energiji). Kvantno-mehanički pristup



tretmanu molekula vode se bazira na korišćenju Slaterovih funkcija centriranih na jezgru kiseonika, što daje molekulski opis molekula vode, za razliku od atomskog, koji je u širokoj upotrebi. Teorijski tretman preseka za formiranje Ps je još jedna prednost ovog koda u odnosu na komercijalne kodove, što omogućava da se i putanja detaljno Ps isprati do trenutka anihilacije. Monte Carlo kod za računanje trajektorije elektrona i pozitrona u vodi funkcioniše na sledeći način. Nakon što se definiše tip čestice koja se prati i njena energija, kod određuje srednji slobodni put slučajnim samplovanjem na osnovu sume integralnih preseka za moguće interakcije i pomera česticu na njenu novu poziciju na kojoj se dešava sudar. Tip sudara se određuje iz individualnih integralnih preseka biranjem slučajnog broja. Ukoliko se radi o elastičnom sudaru pravac rasejane čestice se bira na osnovu diferencijalnog preseka i energije sa kojom čestica ulazi u sudarni proces. U slučaju jonizacije, prvo se na osnovu diferencijalnog preseka slučajno bira kinetička energija izbačenog elektrona, a zatim se na osnovu veličine preseka za jonizaciju na energiji izbačenog elektrona bira vrednost jonizacionog potencijala i energija čestice se umanjuje za zbir energije izbačenog elektrona i jonizacionog potencijala. Pravci rasejanog i izbačenog elektrona se biraju na osnovu petostrukog i trostrukog diferencijalnog preseka, a određeni jonizacioni potencijal se čuva kao vrednost lokalno deponovane energije. Ukoliko dolazi do formiranja pozitronijuma u rasejanju pozitrona na sličan način se određuje jonizacioni potencijal i potencijal formiranja Ps, a deponovana energija je jednaka razlici ova dva potencijala. Konačno, ako dolazi do ekscitacije, tranzicioni nivo  $n$  se bira Monte Carlo samplovanjem na osnovu svih parcijalnih totalnih preseka za ekscitacije. Energija čestice se smanjuje za vrednost partikularnog ekscitacionog potencijala, koji se određuje slično kao jonizacioni potencijal i kao vrednost deponovane energije čuva se vrednost ekscitacionog potencijala. Svi ovi koraci se sprovede za svaku česticu u simulaciji sve dok njena kinetička energija ne padne ispod unapred određene energije (12.63 eV za pozitrone i elektrone). Čestice čija energija padne ispod ovog novog nestaju iz simulacije deponujući svoju kinetičku energiju na mestu na kom su nastale. Pod ovim uslovima ova simulacija nije u mogućnosti da korektno opiše domet niskoenergijskih elektrona i pozitrona. Ipak, do određene granične vrednosti energije, dat je kompletan opis dezintegracije visokoenergijskih pozitrona u vodi na najfinijoj, ćelijskoj skali, praćenjem i pozitrona i sekundarnih elektrona i Ps. Na osnovu dobijenih trajektorija kod određuje zaustavne moći za svaku vrstu čestica, zaustavne moći za svaki od neelastičnih procesa pojedinačno, prostorno lokalizovane energijske gubitke za svaki odvojeni neelastični

proces, domete različitih vrsta čestica, kao i kvantitativne podatke o formiranju Ps u tečnoj vodi: rejt Ps, vreme koje protekne od emitovanja pozitrona do formiranja pozitronijuma, kao i dubinu prodora pozitronijuma u vodi. Poslednja informacija je od najvećeg značaja za rekonstrukciju slike u PET dijagnostici (Champion i Le Loirec, 2007). Ovakav tip opisa se po svojoj prirodi razlikuje od opisa u komercijalnim numeričkim kodovima (EGS4, PENELOPE, GEANT) koji su generalno dizajnirani i razvijeni za tretman fizičkih modela koji su u upotrebi u nuklearnoj medicini uzimajući u obzir kompleksnu geometriju medicinskih uređaja.

### 7.2.2. MONTE CARLO SIMULACIJE SPECIJALIZOVANE ZA PLANIRANJE DOZE

Jedan od najbitnijih zadataka radioterapije je određivanje raspodele doze u pacijentu. Iako su Monte Carlo simulacije uvek smatrane za najpouzdaniji način za određivanje raspodele doze, u praksi nisu često korišćene jer su bile vremenski jako zahtevne. Danas, kada su računari brži i jeftiniji sve se više preporučuje korišćenje Monte Carlo simulacija, pa je u te svrhe razvijeno nekoliko kodova. Jedan od njih je takozvani PEREGRINE projekat. Zasnovan je na simulaciji EGS-4 tipa ubrzanoj za kliničke potrebe korišćenjem više procesora paralelno (Hartmann Siantar *et al.*, 2001). Drugi je VMC (Voxel Monte Carlo) kod koji su razvili Kawrakov i Fippel, koji su prvo omogućili brzi proračun za elektronske snopove (Kawrakov *et al.*, 1996; Fippel *et al.*, 1997), a zatim uključili i snopove fotona (Fippel, 2000). Kasnije je Kawrakov (2001) napravio poboljšanu verziju ovog koda, takozvani VMC++ koji je postao baza za Nucletron – algoritam za računanje doze pri interakciji sa elektronskim snopovima (Cyglar *et al.*, 2004). Ovaj kod je između 50 i 100 puta brži nego odgovarajući EGSnrc kod za računanje doze u fantomu, a slaganje rezultata je do 1%. Postoji još nekoliko brzih Monte Carlo kodova, kao što su DPM (Sempau *et al.*, 2000) i MCDOSE (Ma *et al.*, 2002), ali ni jedan od njih ne postiže brzinu VCC++ koda. Međutim, u svim pomenutim kodovima fizički opis snopova elektrona i fotona je na istom nivou.

Sada je već pitanje trenutka kada će svi komercijalni sistemi za planiranje tretmana biti bazirani na Monte Carlo proračunima. Kodovi i računari postaju dovoljno brzi i sve više

ima smisla koristiti Monte Carlo umesto tehnika koje se zasnivaju na različitim, manje i više opravdanim, teorijskim aproksimacijama.

Kada je, kao pri izučavanju oštećenja DNA, bitno poznavati detalje interakcija tkiva sa zračenjem na molekulskom nivou, prostorna rezolucija pri određivanju raspodele doze bi trebalo da bude reda nanometra. Na ovom nivou atomske i molekulske osobine mete moraju da se uzmu u obzir. Visokoenergijsko zračenje proizvodi jako veliku količinu sekundarnih elektrona, ali se u većini relevantnih modela nisko energijski elektroni zanemaruju tako što se ispod neke unapred određene vrednosti energije pretpostavlja da se sva njihova preostala energija deponuje u sredini i/ili se tretiraju korišćenjem aproksimacija baziranih na teorijama višestrukih sudara (*engl. multiple-scattering theories*) (Fuss *et al.*, 2011). Iako ova pojednostavljenja ubrzavaju izvršavanje koda i redukuju neophodnu količinu ulaznih podataka (preseci za interakcije na niskim energijama ovde nisu potrebni), ona zanemaruju činjenicu da nisko energijski elektroni takođe odnose deo energije primarne čestice i nastavljaju da interaguju sa sredinom. Pionirska istraživanja Huelsa i saradnika (Boudaïffa *et al.*, 2000; Huels *et al.*, 2003) su pokazala da oštećenja tkiva na molekularnom nivou (disocijacija molekula ili raskidanje veza u DNA) mogu da indukuju elektroni sa energijama ispod jonizacionog potencijala putem molekulskih rezonanci (Boudaïffa *et al.*, 2000; Huels *et al.*, 2003) i disocijativnog elektronskog zahvata (Hanel *et al.*, 2003; Abdoul-Carime *et al.*, 2004) i to efikasnije nego jonizacijom. Tokom poslednje decenije vršena su intenzivna eksperimentalna (Denifl *et al.*, 2003; Gohlke *et al.*, 2003; Hanel *et al.*, 2003; Caron i Sanche, 2003; Martin *et al.*, 2004; Scheer *et al.*, 2004; Abdoul-Carime *et al.*, 2004; 2005; Denifl *et al.*, 2004a; 2004b; 2006; Feil *et al.*, 2004; Ptasińska *et al.*, 2005) i teorijska istraživanja (Pan i Sanche, 2005; Winstead i McKoy, 2006a; 2006b; 2006c; 2006d) u cilju kvantifikacije i potvrđivanja otkrića Huelsa i saradnika. Nasuprot dobijenim potvrdama, većina medicinskih procedura i dalje se bazira na konceptu doze zračenja i ovo otkriće nije uključeno u medicinske simulacije. To znači da je referentna veličina energija koja se absorbuje po jedinici mase, pa se prema tome može dobiti samo makroskopski opis procedure. Medicinski protokoli, ili kodovi koji se koriste (Andreo *et al.*, 2000) za karakterizaciju snopova zračenja u radijacionoj terapiji preporučuju korišćenje jonizacionih komora kalibrisanih (u smislu absorbovane doze) prema vodi. Korišćenje ovih uređaja za procenu doze implicira da je veza naelektrisanja i deponovane energije dobro poznata konstanta, što sigurno ne važi na niskim energijama i čime je očigledno zanemaren uticaj zračenja sa energijom ispod jonizacionog

potencijala. Da bi se povećala preciznost ovakvih uređaja povećanjem njihove prostorne rezolucije, poslednjih godina je veliki napor uložen u razvoj malih detektora koji rade kao proporcionalni brojači. Procedure za merenje doze bazirane na redukovanoj površini detektora razvijene su u polju mikrodozimetrije (Waker, 2006). Ove tehnike su poboljšale definisanje mapa transfera energije, ali i kod njih je referentna veličina i dalje absorbovana doza, tako da nikakvi molekularni efekti nisu uključeni u ovakve modele. Iz ovog razloga se preporučuje korišćenje metoda za simulaciju deponovanja energije zajedeno sa merenjima doze u jonizacionim komorama pri planiranju tretmana elektronima, fotonima i jonima u radioterapiji (Both i Pawlizki, 2004; Chow, 2007). Brojne Monte Carlo simulacije se koriste u ovom cilju. Primer su PARTRAC (Friedland *et al.*, 1998; 2003), MCNPX (Hendrick *et al.*, 2007), PENELOPE (Baró *et al.*, 1995; Sempau *et al.*, 1997; 2003), GEANT-4 (Agostinelli *et al.*, 2003; Ivanchenko i For, 2004) i tako dalje. Većina ovih kodova na sofisticiran način manipulišu podacima o interakciji zračenja sa materijom i empirijskim zakonitostima primenjenim za odgovarajuće čestice zračenja (elektrone, fotone, jone) koje interaguju sa različitim materijalima. Međutim, ulazni parametri i matematičke relacije koje se koriste u ovim kodovima generalno važe za čestice visokih energija (iznad 100 eV). Većina ovih podataka se bazira na prvoj Bornovoj aproksimaciji koja čak i kod lakih molekula (N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub>) precenjuje verovatnoću interakcije za oko 30% (Garcia i Manero, 1996; 1998; Garcia i Blanco, 2001; Garcia *et al.*, 2001), a takođe nije nimalo precizna u zoni oko maksimuma preseka i na nižim energijama od energije praga za neelastične procese.

### 7.2.3. MONTE CARLO SIMULACIJE SPECIJALIZOVANE ZA REKONSTRUKCIJU SLIKE U DOMENU DIJAGNOSTIKE U NUKLEARNOJ MEDICINI

U ovom poglavlju ćemo samo kratko nabrojati najpopularnije Monte Carlo simulacije specijalizovane za dijagnostiku u nuklearnoj medicini (*engl. medical imaging*). Ove simulacije prate kretanje fotona kroz različite materijale i sve su veoma fleksibilne po pitanju definisanja materijala detektora. Ono po čemu se razlikuju ove simulacije je geometrija fantoma (da li je u pitanju "voxel - based" fantom ili fantom unapred definisane geometrije, takozvani matematički fantom) i da li je uključeno modelovanje neke od realnih detektorskih postavki (PET, SPECT, 3D PET, ...). Tako SIMSET (Harrison *et al.*, 1993; Lewellen *et al.*,

1998) omogućava modelovanje kretanja fotona iz "voxel-based" fantoma, može da simulira SPECT i PET detektorske sisteme, a takođe korisnik može da doda module koji su mu potrebni, napisane u programskom jeziku C. SIMIND (Ljungberg i Strand, 1989; Ljungberg, 1998) s druge strane, može da simulira fotone i iz "voxel-based" i iz matematičkih fantoma, ali zato može da simulira samo SPECT sistem. Moguće je dodati nove module napisane u Fortranu. Paket Unnamed (De Vries *et al.*, 1990; De Vries i Moore, 1998), za razliku od SIMIND može da koristi nove module napisane i u Fortranu i u programskom jeziku C, ali simulira samo matematičke fantome, dok se paket MCMATV (Smith *et al.*, 1993; Smith, 1998) razlikuje po tome što koristi "voxel-based" fantome. PETSIM (Thompson *et al.*, 1992; Thompson i Picard, 1998) ima mogućnost za simulaciju PET sistema i mogućnost dodavanja modula napisanih u Fortranu. Za simulaciju 3D PET detektorskih sistema mogu da se koriste paketi EEIDOLON (Zaidi *et al.*, 1998; 1999) i PET-SORTEO (Reilhac *et al.*, 2004). Oba paketa simuliraju i matematičke i "voxel-based" fantome.

Primena Monte Carlo simulacija u okviru dijagnostike u nuklearnoj medicini pokriva modelovanje detektora i dizajna sistema, korekciju dobijene slike i tehnike rekonstrukcije, internu dozimetriju i modelovanje farmakokinetike, sa sve većim interesovanjem za nove egzotične aplikacije kao što je on-line PET monitoring terapije snopovima naelektrisanih čestica. Skorašnja otkrića su pokazala da prostornu rezoluciju PET tehnike ograničava nekoliko faktora od kojih je većina tehnološke prirode, kao što su veličina detektora, sam proces rekonstrukcije slike i tako dalje, ali su neki i teorijske prirode, kao što su nekolinearnost anihilacionih fotona i domet pozitrona. Svi ovi faktori zajedno utiču na prostornu rezoluciju sistema, ali je pokazano da je od svih njih najmanje ispitani domet pozitrona (Champion i Loirec, 2006). Da bi se unapredila prostorna rezolucija PETa neophodno je imati ne samo kvalitativne već i pouzdane kvantitativne podatke o uticaju pozitrona i Ps na biološku materiju. Ps koji se formira u ranim fazama usporavanja pozitrona je neutralna čestica i samim tim ne može da jonizuje i ekscituje molekule i na taj način gubi energiju, već to radi na manje efikasan način, putem fononskih ekscitacija, pa prema tome prelazi velike udaljenosti u tkivu pre anihilacije. Kinematika Ps može biti od suštinskog značaja u rekonstrukciji slike u PET tehnici. Ovde se dalje nećemo zadržavati na problemima simulacije detektorskih sistema u nuklearnoj medicini jer to izlazi van fokusa ove disertacije.

Treba naglasiti da nasuprot radjacionoj dozimetriji gde su mnoge studije posvećene potencijalnim razlikama između rezultata dobijenih korišćenjem različitih Monte Carlo

kodova (Tanner *et al.*, 2004), veoma mali broj radova je posvećen ovom problemu na polju simulacije dijagnostike (rekonstrukcije slike) u nuklearnoj medicini. Posebno, različiti Monte Carlo kodovi razvijeni za simulaciju sistema za generisanje slike u dijagnostici u nuklearnoj medicini koriste različite biblioteke preseka za interakcije fotona sa materijom i pokazano je da je efekat korišćenja različitih preseka veoma uočljiv (Zaidi, 2000). Standardizacija biblioteka preseka, kao i često korišćenih kompjuterskih modela će pomoći da se eliminišu potencijalne razlike između rezultata dobijenih korišćenjem različitih kodova.

#### 7.2.4. MODELOVANJE NISKOENERGIJSKIH ELEKTRONA

Poznato je da se prilikom izlaganja tkiva različitim vrstama zračenja veliki deo primljene doze deponuje u meti u višestrukim interakcijama sekundarnih elektrona sa molekulima/atomima tkiva. Uprkos tome, tek su skorija istraživanja pokazala da oštećenja na molekulskom nivou (disocijacija molekula ili raskidanje veza unutar DNA) mogu vrlo efikasno da izazovu elektroni sa energijom ispod jonizacione energije putem molekulskih rezonanci (Boudaïffa *et al.*, 2000; Huels *et al.*, 2003) i disocijativnog elektronskog zahvata (Hanel *et al.*, 2003; Abdoul-Carime *et al.*, 2004). Nova saznanja o značaju uloge koju spori elektroni imaju u interakciji sa biomaterijalima još uvek nisu našla svoje mesto u dijagnostici i terapeutskoj praksi, gde Monte Carlo simulacije postaju sve brže i brže uz korišćenje sofisticiranih algoritama i jednostavnih fizičkih modela.

LEPTS (Low Energy Particle Track Simulation) je Monte Carlo procedura koju su razvili Garcia i saradnici (Muñoz *et al.*, 2008a; 2005; 2007b) za tretman elektronskih sudara na niskim energijama, detaljniji od onoga što daju GEANT4 (Agostinelli *et al.*, 2003) ili PENELOPE (Baró *et al.*, 1995). Cilj ovog koda je da na molekulskom nivou opiše procese deponovanja energije elektrona. Ideja je da se za opis interakcije fotona sa tkivom koristi PENELOPE ili GEANT4 paket, a da se u trenutku generisanja sekundarnog elektrona automatski pređe na LEPTS. LEPTS se na taj način koristi kao jedna od pod-rutina u okviru pomenuta dva komercijalna koda, čime se postiže detaljniji opis interakcija svih primarnih i sekundarnih čestica sa tkivom. LEPTS koristi sopstvene baze podataka za elektronske interakcije i razdvaja različite vrste neelastičnih procesa elektrona sa ozračenom materijom, a opis geometrije i materijala, mehanizmi samplovanja, fizika fotona i grafički izlaz se preuzimaju iz komercijalnog koda. Kombinovani kod (komercijalni + LEPTS) je osmišljen za modelovanje ponašanje elektrona, pozitrona i fotona dajući detaljan opis primarnih i

sekundarnih elektrona energija od MeV do 1 eV. Efekti malih doza, koji generalno nisu proporcionalni absorbovanoj dozi ili deponovanoj energiji, mogu da se razumeju samo ako se u obzir uzmu elektronske, vibracione i rotacione ekscitacije, disocijacija neutrala i disocijativni zahvat elektrona, koji su uključeni u ovaj kod. Putanja generisana ovim kodom daje relevantne informacije od biomedicinskog interesa, kao što su mape deponovanja energije i sudarima indukovane promene na molekulima sredine koje daju informaciju o oštećenju tkiva zračenjem.

Kod radi na sledeći način. Za dolazeći elektron se na osnovu totalnog preseka sampluje srednji slobodni put. Na taj način se definiše mesto sledećeg sudara i nakon toga se na osnovu parcijalnih preseka određuje tip narednog sudara (elastični ili neelastični). Ukoliko se radi o elastičnom sudaru, kod sampluje ugao pod kojim se čestica rasejala na osnovu raspodele dobijene iz odgovarajućeg diferencijalnog preseka. U slučaju neelastičnih sudara, različiti pod-procesi čija je relativna frekvencija data odgovarajućim parcijalnim presecima se bave različitim tipovima interakcija. Dostupni tipovi interakcija zavise od energije elektrona i mogu biti jonizacija, disocijacija neutrala, elektronske ekscitacije, vibracione ekscitacije ili disocijativni zahvat elektrona. Prvo se određuje energija koju elektron gubi u sudaru. Kod vibracionih i rotacionih ekscitacija radi se o fiksnoj vrednosti jednako energiji praga, dok se za ostale neelastične kanale ova energija određuje na osnovu eksperimentalno dobijene raspodele gubitaka energije (*engl.* energy loss distribution). Zatim se sampluje pravac odlazećeg elektrona na osnovu diferencijalnih preseka izraženih u funkciji predatog impulsa (ne u funkciji ugla) kao što je opisano u (Muñoz *et al.*, 2008b). U slučaju da se radi o jonizaciji automatski se generiše sekundarni elektron koji ulazi u simulaciju sa energijom i pravcem kretanja određenim primenom zakona održanja energije i linearnog impulsa. Sekundarni elektroni se simuliraju na identičan način kao i primarni dok ne izgube svu svoju energiju ili dok ne ekscituju molekule/atome sredine. Tu se događaj prekida i elektron je spreman da uđe u sledeći sudar.

U poređenju sa ostalim Monte Carlo kodovima kao što su EGSnrc (Kawrakow, 2000a), GEANT4 (Agostinelli *et al.*, 2003), MCNPX (Hendrick *et al.*, 2007), PARTRAC (Friedland *et al.*, 1998; 2003) ili PENELOPE (Baró *et al.*, 1995), osnovne razlike koje se dobijaju korišćenjem kombinacije LEPTS simulacije i komercijalnog koda su sledeće. Prvo, LEPTS razdvaja različite tipove neelastičnih sudara (jonizacija, disocijacija neutrala, elektronske, vibracione i rotacione ekscitacije) i odvojeno ih tretira, zahvaljujući čemu

absorbovana doza nije proporcionalna ukupnom broju generisanih parova. Drugo, ulazni parametri (integralni i diferencijalni preseki i raspodele gubitaka energije elektrona) su kad god je to moguće bazirani na eksperimentalnim podacima, što omogućava da se bolje opišu uslovi u sredini koja se simulira nego što je to moguće korišćenjem teorije i koji ne zavise od aproksimacija i pojednostavljenja koja su neophodna za teorijsko računanje ovih podataka. Treće, svi elektroni se simuliraju do termalizacije (energije reda meV) u ozračenoj materiji bez uvođenja limita u energiji čestice. Dodatno, simulira se putanja svakog elektrona bez primena algoritama za objedinjavanje više trajektorija (*engl.* condensed history algorithms), što znači da simulacija daje tačnu poziciju za svaki energijski gubitak, kao i koliki je taj gubitak, a takođe se vidi i pozicija na kojoj se odigrao svaki neelastični proces. Prema tome, ovaj interakcioni model daje opis interakcije materije i zračenja na molekulskom nivou, obezbeđujući detaljne informacije o tipu interakcije i mestu na kome se interakcija odigrala. Ovi podaci mogu da se iskoriste za identifikovanje prostornih raspodela određenih događaja od interesa, kao što je, na primer, disocijacija molekula ili događaji sa velikim uglom skretanja.

### 7.3. DISKUSIJA I REZULTATI

U ovom odeljku skrenućemo pažnju na neke od problema sa kojima se susreću Monte Carlo kodovi koji se koriste danas za modelovanje PET tehnike i osvrnućemo se na naše rezultate prikazane u prethodnim glavama ove disertacije u kontekstu moguće primene u biomedicini. Prvi i možda najbitniji od pomenutih problema je pitanje verodostojnosti komercijalnih Monte Carlo kodova i njihovih rezultata, s obzirom na činjenicu da ne postoje standardni preporučeni testovi za ove kodove. Zatim ćemo kratko skrenuti pažnju na to koliko velike razlike u makroskopskim karakteristikama kretanja čestica kroz neku sredinu uzrokuju ne tako velike razlike u presecima za sudarne procese i upoređićemo transportne parametre za elektrone i pozitronu u vodenoj pari. Na kraju ćemo pokazati da naša Monte Carlo simulacija korišćena za računanje transportnih karakteristika rojeva pozitrona u atomskim i molekulskim gasovima takođe može da posluži za dobijanje trajektorija naelektrisanih čestica i ostalih veličina od interesa u biomedicini.

### 7.3.1. PROBLEM TESTIRANJA KODOVA

Monte Carlo kompjuterski kodovi koji se koriste za različite aspekte modelovanja PET tehnike u opštem slučaju prate interakcije fotona, elektrona, pozitrona i/ili jona sa tkivom, a kao ulazne parametre koriste preseke za sudare naelektrisanih čestica sa konstituentima sredine. Preseke uzimaju iz različitih baza podataka, koje mogu, a ne moraju da budu inkorporirane u kod. Od velike je važnosti da do danas ne postoje skupovi preseka za sudare elektrona, pozitrona i jona preporučeni i široko prihvaćeni za korišćenje u biomedicini. Finalni rezultati ovih kodova su trajektorije čestica (pri čemu se detalji informacija koje one nose razlikuju od koda do koda), zatim procena deponovane energije, dubina prodora čestica u tkivo i tako dalje. U većini slučajeva od korisnika se zahteva da precizira konkretnu geometriju u kojoj se simulira kretanje čestica kroz biološku materiju, a kao model za sredinu – tkivo koristi se voda u tečnom ili gasnom stanju, pri čemu se prelazak sa tečnog na gasno stanje u pomenutim kodovima definiše na različite načine. Komercijalni kodovi rade u različitim opsezima energije i ni jedan od njih ne razmatra energije čestica ispod ~ 10 eV. Sve ovo ukazuje da je jako teško porediti rezultate koji su dobijeni pomoću različitih kodova, odnosno uočena slaganja ili neslaganja između dobijenih rezultata teško da daju informacije o tome koji kod bolje simulira kretanje naelektrisanih čestica kroz tkivo. Problem na koji se često zaboravlja je da Monte Carlo kodovi koji se koriste za modelovanje interakcije zračenja sa tkivom, i komercijalni i oni koji nisu u širokoj upotrebi, nisu testirani. U biomedicini ne postoje standardni testovi koje ovi kodovi moraju da prođu da bi mogli da se koriste za simulaciju interakcije zračenja sa tkivom. Stiče se utisak da što je neki kod komplikovaniji, u mogućnosti da simulira više vrsta čestica uz korišćenje velike količine ulaznih podataka i što je veća njegova fleksibilnost u pogledu izbora geometrije to mu je teže verovati.

U domenu modelovanja različitih primena nisko-temperaturnih plazmi ovaj problem je prevaziđen korišćenjem limita rojeva naelektrisanih čestica. U ovoj grani fizike testiranje kompjuterskih kodova je u širokoj upotrebi i benčmark proračuni usrednjenih transportnih osobina rojeva elektrona u hidrodinamičkim i nehidrodinamičkim uslovima su ustanovljeni i prihvaćeni (Dujko *et al.*, 2010; Raspopović *et al.*, 1999; White *et al.*, 1997; Ness, 1994). U ovoj disertaciji mi predlažemo da se isti princip usvoji i u modelovanju interakcije naelektrisanih čestica u domenu biomedicine i predlažemo benčmark za modelovanje interakcije pozitrona niskih energija sa tkivom, koje se u većini modela simulira vodenom parom. Rezultati transporta roja pozitrona koji se kreće u vodenj pari pod uticajem

električnog polja (5. poglavlje ove disertacije) i pod uticajem ukrštenog električnog i magnetskog polja (rezultati iz poglavlja 6) upravo predstavljaju predloženi benčmark.

### 7.3.2. POREĐENJE TRANSPORTNIH PARAMETARA POZITRONA I ELEKTRONA U H<sub>2</sub>O

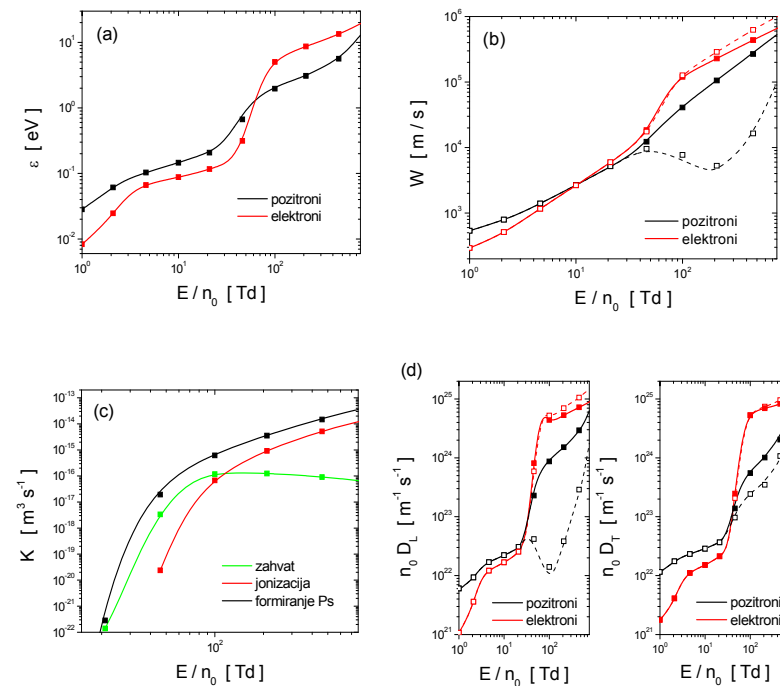
Informacije koje pružaju preseki za sudare naelektrisanih čestica sa nekim gasom opisuju samo jedan aspekt njihove interakcije sa materijom, verovatnoće za sudare pojedinačnih čestica na mikroskopskom nivou. Transportne osobine su izvor informacija o grupi ili ansamblu naelektrisanih čestica koje putuju kroz medijum i samim tim opisuju drugi aspekt interakcije čestica (elektrona, pozitrona, jona, ...) sa materijom. Kao što je u prethodnim poglavljima rečeno, u transportne parametre spadaju srednja energija roja, brzina drifta, difuzija i brzinski koeficijenti za pojedinačne procese i ove veličine su makroskopske. Za modelovanje interakcije elektrona i pozitrona sa tkivom u medicini polazna tačka je poznavanje preseka za sudarne procese ovih čestica pre svega sa molekulom vode u gasnoj fazi. Kako do skoro nije bilo pouzdanih eksperimentalnih merenja, a ni pouzdanih teorijskih proračuna za neke tipove sudara pozitrona sa molekulima vode, u praksi su se često koristili preseki za elektronske sudare i modeli su često izlazili van granica visoko energijske zone u kojoj važi prva Bornova aproksimacija. U trećoj glavi ove disertacije predstavili smo kompletan skup preseka za interakciju pozitrona sa vodenom parom u opsegu energija od ~0.01 eV do 1000 eV, a u petoj i šestoj smo prikazali transportne koeficijente roja pozitrona u vodenj pari u električnom i ukrštenom električnom i magnetskom polju. Poznajući preseke za elektrone u vodenj pari sada smo u mogućnosti da proverimo kako se razlike u mikroskopskim interakcijama antimaterija-materija i materija-materija odražavaju na makroskopske transportne karakteristike.

Transportne osobine rojeva elektrona i pozitrona koji se kreću u vodenj pari pod uticajem spoljašnjeg električnog polja smo izračunali i međusobno uporedili. Posebna pažnja je posvećena uticaju koji na brzinu drifta i difuziju imaju nekonzervativni procesi (formiranje Ps kod pozitrona i disocijativni zahvat i jonizacija u slučaju elektrona). Cilj je bio da se identifikuju zajednički aspekti u osnovnoj fenomenologiji transporta pozitrona i elektrona kada je transport pod jakim uticajem nekonzervativnih sudara.

Slično kao u 5. i 6. poglavlju ove disertacije, transportne osobine elektrona i pozitrona su date u funkciji redukovano električnog polja,  $E/n_0$  i to u opsegu od 1 Td do 770 Td. Rezultati dobijeni Monte Carlo simulacijom su prikazani korišćenjem simbola (punih za fluks vrednosti i otvorenih za balk vrednosti), dok su oni dobijeni rešavanjem Boltzmannove jednačine prikazani linijama (puna linija predstavlja fluks vrednosti, a isprekidana balk.) Za pozitrona je iskorišćen set preseka za sudare sa molekulima vode prikazan u poglavlju 3, dok je za elektrone iskorišćen set preseka preporučan od strane Morgana i saradnika (Morgan). U literaturi postoji veliki broj kompilacija preseka za interakciju elektrona sa molekulima vode koje različiti autori preporučuju za modelovanje primena elektrona (Itikawa i Mason, 2005; Hayashi, 2003; Karwasz et al, 2001; Shirai et al, 2001). Odabrani set je prošao swarm testove, tj. ovaj skup je kompletan, njegovim korišćenjem dobijaju se transportni koeficijenti koji se dobro slažu sa transportnim koeficijentima dobijenim u eksperimentima.

Profili srednje energije oba roja prikazani su na slici 7.1a. U oba slučaja ovi profili reflektuju oblik energijske zavisnosti preseka za sudarne procese, pa bi se prema tome očekivalo da je srednja energija pozitrona veća od srednje energije elektrona na fiksiranim vrednostima  $E/n_0$ , zbog manjeg broja dozvoljenih neelastičnih procesa. Sa slike 7.1a se vidi da ovo važi samo za  $E/n_0$  manje od 60 Td. Iznad 60 Td formiranje Ps hladi funkciju raspodele roja selektivno uklanjajući iz roja pozitrona viših energija. Posledica je niža srednja energija pozitrona u opsegu vrednosti  $E/n_0$  za koje je presek za formiranje Ps rastuće funkcija energije i za koje ovaj proces dominira nad neelastičnim sudarima.

Na slici 7.1b prikazani su profili fluks i balk komponenti brzine drifta za pozitrona i elektrone u vodenoj pari. Kao što je već rečeno u 5. poglavlju, vidi se da postoji velika razlika između fluks i balk komponente brzine drifta pozitrona, fluks komponenta je monotono rastuće funkcija  $E/n_0$ , a u balk komponenti se vidi jako izražen NDC efekat. Podsetimo se, ovaj efekat se manifestuje kao opadanje brzine drifta sa porastom električnog polja u određenoj zoni vrednosti  $E/n_0$ . Fluks komponenta brzine drifta pozitrona je u ovoj zoni  $E/n_0$  veća od balk komponente jer prilikom formiranja Ps iz roja nestaju pozitroni sa fronta roja. NDC efekat se kod pozitrona vidi samo u balk komponenti brzine drifta.



Slika 7.1. Poređenje (a) srednje energije, (b) brzine drifta, (c) reži koeficijenta i (d) koeficijenta difuzije za pozitrona i elektrone u H<sub>2</sub>O.

Kada uporedimo odgovarajuće komponente brzine drifta elektrona i pozitrona vidimo da postoje velike razlike i u obliku zavisnosti od  $E/n_0$  i u brojnim vrednostima. Slično kao što smo ispitivali uticaj nekonzervativnih sudara na brzinu drifta pozitrona, osvrnimo se sad na uticaj koji disocijativni zahvat elektrona i jonizacija imaju na brzinu drifta elektrona. Kod elektrona, fluks i balk komponenta brzine drifta počinju da se razlikuju na  $E/n_0 \approx 50$  Td, gde srednja energija roja iznosi  $\sim 0.5$  eV. Ova razlika je veoma mala, ali uočljiva i ide u korist fluks komponente. Na energiji oko 0.5 eV, disocijativni zahvat elektrona počinje da igra značajniju ulogu. Koliziorna frekvencija za zahvat je rastuća funkcija energije, tako da zahvat, slično kao formiranje Ps u slučaju pozitrona, selektivno uklanja elektrone viših energija sa fronta roja (slika 7.1c). Ovo se vidi kao opadanje vrednosti balk brzine drifta, tj. centar mase

roja elektrona se pomera u smeru suprotnom od smera primenjenog električnog polja. Slična situacija se vidi kod pozitrona, gde je presek za formiranje Ps nekoliko redova veličine veći od preseka za disocijativni zahvat elektrona i, što je još važnije, presek za formiranje Ps je mnogo veći od ostalih neelastičnih procesa u zoni  $E/n_0$  od interesa. Ovo znači da je uticaj koji formiranje Ps ima na pozitrone znatno jači od uticaja zahvata na elektrone. Ponovo se vraćamo na elektrone i vidimo da na vrednosti polja od oko 90 Td (što odgovara srednjoj energiji od  $\sim 4$  eV) postoji tačka u kojoj se presecaju krive fluks i balk brzine drifta i od koje počinju ponovo da divergiraju. Sada je situacija suprotna od one koju smo imali na 50 Td, sada je balk komponenta veća od fluks komponente. U ovom opsegu energija brzinski koeficijent za disocijativni zahvat ima maksimum, tako da zahvat selektivno uklanja sporije elektrone iz roja. U isto vreme visoko energijski rep funkcije raspodele počinje da oseća uticaj jonizacije (slika 7.1c). Kao posledica kombinacije ova dva nekonzervativna procesa centar mase roja se pomera napred u smeru drifta.

Na slici 7.1c uporedo smo prikazali brzinski koeficijent za formiranje Ps kod pozitrona i brzinske koeficijente za nekonzervativne procese u transportu elektrona, disocijativni zahvat i jonizaciju. Brzinski koeficijent za formiranje Ps u posmatranom opsegu redukovano električnog polja  $E/n_0$  dominira nad brzinskim koeficijentima za jonizaciju u elektronskim sudarima i disocijativni zahvat. Kako su jonizacija, koja povećava broj elektrona u roju, i disocijativni zahvat, koji isti broj smanjuje, međusobno konkurentni procesi i posebno imajući u vidu da je presek za disocijativni zahvat više redova veličine manji od preseka za formiranje Ps, jasno je da su nekonzervativni efekti u transportu elektrona znatno slabije izraženi nego u transportu pozitrona.

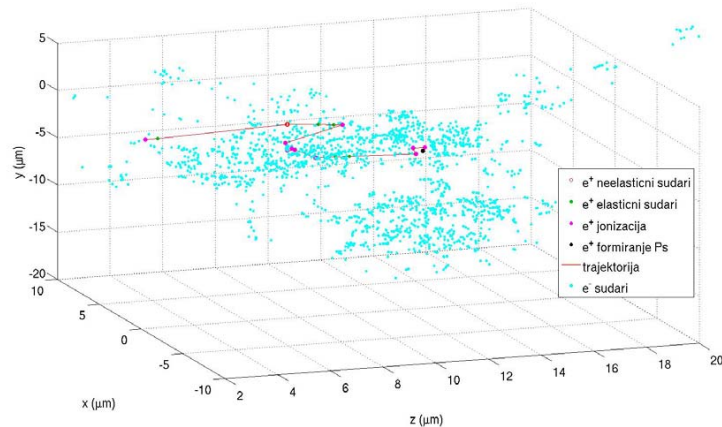
Zavisnost koeficijenata difuzije rojeva elektrona i pozitrona u vodenoj pari od redukovano električnog polja  $E/n_0$  prikazana je na slici 7.1d, gde su na panelima (1) i (2) poređeni longitudinalni i transverzalni koeficijenti difuzije, redom. Na niskim vrednostima  $E/n_0$  koeficijenti difuzije za pozitrone su skoro red veličine veći od odgovarajućih koeficijenata za elektrone. Kako  $E/n_0$  raste ova razlika se postepeno smanjuje i već između 30 i 40 Td situacija je suprotna: koeficijenti difuzije za elektrone postaju veći od koeficijenata difuzije za pozitrone. Sa slike 7.1b se jasno vidi da formiranje Ps ima jači uticaj na difuziju pozitrona nego disocijativni zahvat i jonizacija na difuziju elektrona.

Ovi rezultati ilustruju koliko je bitno da se za modelovanje pozitrona u konkretnim primenama koriste pouzdani preseki za rasejanje pozitrona. Transport elektrona i pozitrona se

sušinski razlikuje i zbog toga aproksimiranje preseka za pozitronske sudarne procese elektronskim generalno nije dobro i može da da rezultate koji čak ni kvalitativno nisu korektni.

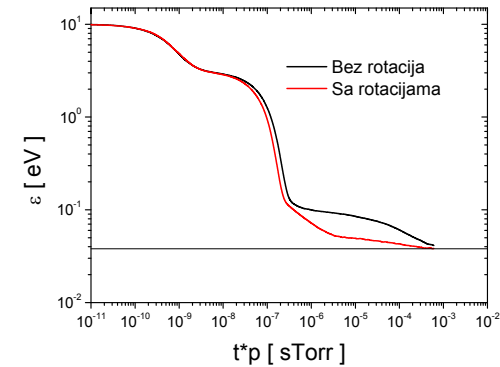
### 7.3.3. THERMALIZACIJA I SIMULIRANJE PUTANJA POZITRONA U VODENOJ PARI

Monte Carlo kod korišćen u ovoj disertaciji za računanje transportnih koeficijenata pozitrona u vodenoj pari može da računa i veličine od direktnog interesa u biomedicini, kao što su na primer trajektorije čestica. Na slici 7.2 dat je primer trajektorije pozitrona u vodenoj pari. Trajektorija je na slici 7.2 prikazana crvenom linijom. Pozitron energije 1200 eV ulazi u posmatranu zapreminu sa leve strane i interaguje sa molekulima vode u gasovitom stanju. Različitim bojama su označeni različiti tipovi sudara: otvoreni crveni simboli predstavljaju neelastične sudare pozitrona sa molekulom vode, puni zeleni i puni ljubičasti označavaju elastične i jonizaciju, redom, a crni simbol na kraju putanje pozitrona označava formiranje Ps. Sudari sekundarnih elektrona koji nastaju duž putanje pozitrona su označeni svetlo plavim simbolima. Proteklo vreme od ulaska pozitrona u materiju do formiranja Ps za datu putanju iznosi 4.5 ps. Sa slike se jasno vidi da je tokom prolaska pozitrona kroz vodenu paru formiran veliki broj sekundarnih elektrona koji dalje u sudarima predaju energiju molekulima vode i vidi se da njihove putanje nisu zanemarljive dužine u odnosu na putanju pozitrona kao i da znatno odstupaju od nje. Ovo pokazuje da uticaj sekundarnih elektrona na tkivo ne može da se zanemari. Za simulaciju putanje pozitrona u vodenoj pari korišćen je set preseka za sudare pozitrona sa vodenom parom diskutovan u poglavlju 3 i teorijski izračunati diferencijalni preseki (Tennyson, 2009), dok je za elektrone korišćen Morganov set preseka (Morgan) i diferencijalni preseki Garciae i saradnika (Garcia, 2011). Za elektrone je, isto kao i za pozitrone moguće različitim bojama označiti različite tipove sudara, ali za potrebe ove ilustracije to nije bilo bitno.



**Slika 7.2:** Putanja pozitrona inicijalne energije 1200eV u vodenoj pari.

Na slici 7.3 prikazan je profil vremenske relaksacije energije roja pozitrona u vodenoj pari iz Maxwelliana početne energije 10 eV. Na istoj slici je prikazano kako rotacione ekscitacije, koje su jako velike u slučaju vodene pare, utiču na termalizaciju pozitrona. Korišćene preseke za rotacione ekscitacije molekula vode u sudaru sa pozitronima dobili smo ljubaznošću Gustava Garcie (2011). Sa slike se vidi da dodavanje rotacionih preseka skupu preseka prikazanom u Poglavlju 3 ove disertacije ne ubrzava znatno termalizaciju pozitrona na energijama iznad 0.1 eV. Međutim, ispod 0.1 eV, rotacioni preseki postaju ključni mehanizam pomoću koga pozitroni gube energiju. Sa slike 7.3 procenili smo vreme termalizacije pozitrona u vodenoj pari u sličaju bez rotacionih preseka i u slučaju kada su rotacije uzete u obzir. Vreme termalizacije smo definisali na isti način kao i u sekciji 5.1.7. Trenutak kad pozitroni dostižu termalnu ravnotežu sa okolnim gasom definisan je kao trenutak kada je energija pozitrona jednaka polovini vrednosti termalne energije iznad  $3kT/2$ . Dobijena vremena termalizacije su  $1.296 \cdot 10^{-6}$  s za slučaj bez rotacije i  $2.019 \cdot 10^{-4}$  s, kada su rotacije uključene u igru. Vidimo da uticaj rotacionih preseka pri modelovanju ponašanja pozitrona na niskim energijama u vodenoj pari ne sme da se zanemari.



**Slika 7.3:** Termalizacija srednje energije roja pozitrona sa Maxwellianom kao početnom raspodelom i početnom energijom od 10 eV u vodenoj pari.

Modelovanje trajektorija čestica zračenja u radijacionoj terapiji predstavlja mesto gde se sreću medicinske primene zračenja i fizika atomskih i molekulskih sudara. Putanje mogu da se iskoriste za procenu dubine prodiranja određene vrste zračenja u tkivu kao i za praćenje određene vrste terapije, ali čak i za potpuno identičan skup ulaznih preseka za sudare određene vrste čestica Monte Carlo simulacija može da da potpuno različite putanje, u zavisnosti od sekvence slučajnih brojeva.

## 7.4. ZAKLJUČAK

Cilj ovog poglavlja bio je da se napravi uvod u novu oblast u kojoj naše istraživanje može da nađe novu značajnu primenu. PET tehnika postaje sve značajnija u modernoj medicini u domenu dijagnostike i monitoringa određenih tipova terapija, pa su sve veći zahtevi za kvalitetnom slikom, pouzdanošću i brzinom ove tehnike. Iz tog razloga dat je pregled Monte Carlo kompjuterskih programa koji se koriste u medicini za simulaciju različitih aspekata interakcije naelektrisanih čestica sa tkivom, ali i sa konkretnom aparaturom koja se koristi u PET tehnici. Nabrojali smo osnovne komercijalne programske pakete, ukratko dali njihove osnovne karakteristike i istakli prednosti i mane, kao i domen primene. Jedan od najvećih problema sa kojim su suočene ove simulacije, a kog korisnici vrlo često nisu svesni, je nepostojanje standardnih testova za ove kodove. Pre nego što se kompjuterski kod primeni za



simuliranje komplikovane realne situacije u kojoj se paralelno odvija veliki broj procesa na različitim vremenskim skalama, neophodno je da se na nekom jednostavnom primeru proveri i potvrdi teorija koja stoji iza tog koda. Naš predlog je da se u ovoj oblasti primeni recept iz fizike niskotemperaturske plazme i da se simulacije testiraju u limitu rojeva naelektrisanih čestica. Predloženi benčmark za pozitrone dat je u glavama 5 i 6 ove disertacije. U modelovanju konkretnih medicinskih primena treba imati u vidu da ulazne čestice imaju jako visoke energije i da na svom putu kroz materiju u procesu termalizacije stvaraju veliki broj sekundarnih čestica, pa hidrodinamička definicija transportnih koeficijenata neće biti validna. Ipak, poređenje sa transportnim koeficijentima dobijenim u limitu rojeva je validan test same simulacije. Kako se u retkim kodovima koji prate kretanje pozitrona kroz tkivo preseći za interakcije pozitrona sa molekulima sredine često aproksimiraju elektronskim presećima, pokazali smo koliko se transportni parametri, koji su makroskopske veličine, razlikuju za elektrone i pozitrone u vodenoj pari. Na kraju smo pokazali i primer trajektorije pozitrona u vodenoj pari dobijene našom Monte Carlo simulacijom.

U ovom poglavlju smo tek otškrinuli vrata jedne velike i zanimljive oblasti. Još uvek nije sasvim jasno kako koristeći Monte Carlo simulaciju na niskim energijama preći sa vodene pare na tečnu vodu. Na višim energijama se jednostavno koriste preseći za interakcije naelektrisanih čestica sa vodenom parom, a zatim se kao korekcionni faktor uvodi gustina sredine ( $1\text{g/cm}^3$  za tečnu vodu). Na višim energijama se na ovaj način ne pravi velika greška, ali na niskim energijama uvođenje gustine kao korekcionog faktora nije dovoljno, jer se preseći za sudare u gasnoj i tečnoj fazi jako razlikuju, pre svega na niskim energijama. Još jedan razlog zašto se istraživanja i dalje nastavljaju korišćenjem rezultata za vodenu paru umesto za tečnu vodu je i taj što su preseći za interakciju naelektrisanih čestica sa tečnom vodom (dobijeni i teorijski i eksperimentalno) jako retki i nepouzdati. Velika je verovatnoća da bi se korišćenjem ovih podataka unela još veća greška u proračune nego jednostavnom aproksimacijom tečne vode vodenom parom. Još jedna od bitnih stvari koje se zanemaruju je mogućnost simultanog rasejanja na više međusobno korelisanih molekula tečnosti. Nedavno su White i saradnici (White i Robson, 2009; White et al., 2012) modifikovali Boltzmannovu kinetičku jednačinu tako da obuhvati efekte koherentnog rasejanja na korelisanim molekulima sredine. Rezultujuća rešenja Boltzmannove jednačine dobijena razvijem funkcije raspodele u red bez ograničavanja broja članova su podjedanko validna i za elektrone i za pozitrone. Detalji teorije i rešenja nove kinetičke jednačine mogu se naći u (White i Robson,

2009). Ovde ćemo samo napomenuti da se tehnika rešavanja ne razlikuje previše od matematičke mašinerije ranije korišćene za tretiranje rojeva elektrona i pozitrona u gasovima. Bitno je da su ulazni podaci i dalje izmereni ili teorijski izračunati preseći za binarne sudare naelektrisanih čestica i molekula sredine i statički strukturni faktor sredine, koji je eksperimentalno merljiva veličina. Teorija je primenjena na transport elektrona i pozitrona u tečnom argonu (White i Robson, 2009) i modelnim sistemima (White et al., 2012). Otkriveni su novi fenomeni kao što je strukturno indukovani NDC. Uključivanje strukturnog faktora u Monte Carlo simulacije je problem koji tek treba da se reši.

## 8. ZAKLJUČAK

U okviru ove doktorske disertacije prikazani su transportni parametri rojeva pozitrona u neutralnim gasovima, preciznije u argonu, molekulskom vodoniku i azotu i vodenoj pari. Rezultati su dobijeni korišćenjem dve suštinski različite tehnike. Prva je metoda Monte Carlo simulacije, koja se ranije pokazala kao odličan alat za ispitivanje transporta elektrona i jona. Druga metoda je teorija za rešavanje Boltzmannove jednačine razvojem funkcije raspodele u red sa proizvoljnim brojem članova. Slaganje rezultata dobijenih korišćenjem ove dve tehnike je više nego zadovoljavajuće. Korišćenje dve nezavisne tehnike za računanje transportnih parametara pozitrona u gasovima je od suštinske važnosti jer je to, usled nepostojanja eksperimenta sa rojevima pozitrona, jedini način verifikacije dobijenih rezultata. Jedan od ciljeva ovog rada je i da ponovo probudi interesovanje za pozitronske swarm eksperimente.

Kao ulazni parametri i u Monte Carlo simulaciji i u kompjuterskom kodu za rešavanje Boltzmannove jednačine korišćeni su skupovi preseka za interakcije pozitrona sa određenim gasom. Da bi se na bazi ovih skupova preseka dobili verodostojni rezultati potrebno je da skupovi budu kompletni, tj. da daju dobar balans broja čestica u roju, impulsa i energije. Preporučeni skupovi preseka za modelovanje ponašanja elektrona u gasovima, bazirani na višedecenijskom teorijskom i eksperimentalnom radu postoje u literaturi, ali pre ovog rada za pozitronu to nije bio slučaj. U ovoj disertaciji su po prvi put predloženi kompletni skupovi preseka za pozitronu u vodoniku, azotu i vodenoj pari, dok je skup preseka za pozitronu u argonu predložen nešto ranije, takođe od strane saradnika iz Laboratorije za gasnu elektroniku. Ovi preseki su sastavljeni pažljivim izborom najpouzdanijih eksperimentalnih merenja i teorijskih proračuna dostupnih u literaturi. Za procese o kojima nema ni eksperimentalnih ni teorijskih podataka u literaturi, korišćeni su preseki za elektrone, imajući

u vidu sličnosti i razlike u interakciji pozitrona i elektrona sa materijom (na primer, elektronske ekscitacije vodene pare u sudaru sa pozitronima), ili su korišćeni odgovarajući preseki za neke druge molekule, bazirani na poznavanju sličnosti i razlika datih molekula (presek za formiranje Ps u slučaju CF<sub>4</sub>). U okviru ovog programa i između ostalog za potrebe ove disertacije, korišćenjem najmodernije trenutno dostupne aparature u laboratoriji Centra za proučavanje interakcije materije i antimaterije Australijskog Nacionalnog Univerziteta u Canberri, izmerene su apsolutne vrednosti totalnog preseka i preseka za formiranje pozitronijuma pri interakciji pozitrona sa vodenom parom. Detalji ovog eksperimenta dati su u poglavlju 4.

U ovom radu su po prvi put sistematski prikazani transportni parametri za rojeve pozitrona koji se kreću u gasu pod uticajem spoljašnjeg električnog polja. Ispitivani gasovi su H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> i vodena para. Takođe je nastavljen rad na proučavanju transporta u argonu, koji je prethodno započet u Laboratoriji za gasnu elektroniku, Instituta za fiziku u Zemunu. Izučavani gasovi su odabrani imajući u vidu realne primene pozitrona. Tako je molekulski vodonik gas od izuzetno velike važnosti u astrofizici, a nekada je korišćen i u pozitronskim zamkama za hlađenje pozitrona, jer ima jako kratko vreme termalizacije za pozitronu. Višegodišnji eksperimentalni rad svetskih naučnika pokazao je da vodonik uprkos kratkom vremenu termalizacije nije efikasan u hlađenju pozitrona. Rezultati prikazani u ovom radu jasno potvrđuju eksperimentalni zaključak i daju jasno objašnjenje. S druge strane, azot je gas koji je danas u širokoj upotrebi za hlađenje pozitrona u najsavremenijim zamkama. Rezultati prikazani u ovoj disertaciji objašnjavaju zašto je azot bolji izbor za hlađenje pozitrona nego vodonik, iako ima bitno duže vreme termalizacije pozitrona. Kako se azotu u pozitronskim zamkama često dodaje mala količina CF<sub>4</sub> radi pospešivanja hlađenja pozitrona, ispitali smo transportne osobine pozitrona u smeši azota i 10% CF<sub>4</sub>. U tom cilju smo sakupili i relevantne preseke za pozitronu u CF<sub>4</sub>. Poslednji gas koji smo ispitali je vodena para. Voda je bitna kao najvažniji konstituent svih živih organizama i interakcija pozitrona sa vodom je ključna u medicinskoj primeni pozitrona.

Jedan od ključnih problema kome je posvećena posebna pažnja pri proučavanju transporta pozitrona u gasovima pod uticajem spoljašnjeg električnog polja bio je uticaj koji formiranje Ps kao nekonzervativan proces ima na transportne parametre. Nekonzervativnost ovog procesa dovodi do razdvajanja fluksa i balk komponenti brzine drifta i difuzije. Razlike između dva tipa transportnih koeficijenata kod pozitrona su mnogo veće nego razlike koje su

ikada uočene u transportu elektrona. Ovo međutim ne važi za transport pozitrona u  $N_2$  jer elektronska ekscitacija  $a^1\Pi$  stanja onemogućava pozitronima da budu efikasno uklonjeni iz roja formiranjem Ps. Prag za pobuđivanje ovog stanja je nešto niži od praga za formiranje Ps, a preseći su uporedive magnitude, tako da pozitroni u  $N_2$  radije ekscituju  $a^1\Pi$  stanje nego što formiraju Ps.

Posebno značajan fenomen opisan u ovoj disertaciji je pojava negativne diferencijalne provodnosti (NDC) u balk brzini drifta pozitrona bez naznake postojanja ovog fenomena u fluks brzini drifta, kao što je uvek slučaj u transportu elektrona. Mehanizam nastanka NDC je detaljno ispitan i utvrđeno je da je ovaj efekat u transportu pozitrona posledica nekonzervativne prirode procesa formiranja Ps. Ovaj zaključak je potvrđen korišćenjem kako fluidne teorije, tako i samplovanjem prostorno razloženih osobina roja. Na energijama bliskim energiji praga za formiranje Ps u nekom gasu pri formiranju Ps iz roja se selektivno uklanjaju pozitroni sa najvišim energijama koji se nalaze na frontu roja. Iz tog razloga centar mase roja se pomera unazad i balk brzina drifta opada sa povećanjem polja. Formiranje Ps ne utiče tako dramatično na fluks komponentu brzine drifta, pa ona nastavlja da raste. NDC u balk brzini drifta je identifikovan pri transportu pozitrona kroz Ar,  $H_2$  i  $H_2O$ . Poredeći izračunatu balk brzinu drifta sa eksperimentalno izmerenom brzinom drifta pozitrona u  $H_2$  dobili smo kvalitativno dobro slaganje, što je još jedna potvrda validnosti naših rezultata. NDC efekat je najjače izražen u argonu. Kod pozitrona koji driftuju i difunduju kroz molekularni azot ovaj efekat nije primećen, iako je intenzitet preseka za formiranje Ps, kao i njegova energijska zavisnost u  $N_2$  jako slična kao kod Ar,  $H_2$  i  $H_2O$ . Razlog zašto nekonzervativnost formiranja Ps ne dolazi do izražaja u azotu je, kao što je već naglašeno, činjenica da je energija praga za formiranje Ps nešto viša od energije praga za  $a^1\Pi$  elektronsku ekscitaciju, tako da pozitroni gube energiju ekscitujući  $a^1\Pi$  modu azota i ne ulaze u zonu formiranja Ps. Ovo je upravo razlog zašto je azot tako efikasan u hlađenju pozitrona u pozitronskim zamkama.

U ovom radu je takođe napravljeno detaljno poređenje između transportnih koeficijenata elektrona i pozitrona u Ar i  $H_2$  (poglavlje 5) i  $H_2O$  (poglavlje 7). Pored radoznalosti, jedan od motiva za ovo istraživanje bila je činjenica da je uobičajena praksa u modelovanju raznih primena pozitrona, a pogotovo primena u medicini, da se u nedostatku preseka za pozitronu koriste elektronski preseći. Interesovalo nas je koliko će se usrednjene makroskopske karakteristike celog ansambla čestica dobijene na osnovu mikroskopskih

informacija o interakciji čestica sa materijom (preseka) razlikovati za dva tipa naelektrisanih čestica. Utvrdili smo da korišćenje preseka za elektrone u modelovanju transporta pozitrona u ogromnoj meri smanjuje tačnost modela koji opisuje ponašanje pozitrona. Bitne razlike se vide u profilima srednje energije, koji kod obe vrste čestica reflektuju energijsku zavisnost preseka, u profilima brzine drifta i koeficijenata difuzije. I kod elektrona i kod pozitrona jasno se vide razlike između odgovarajućih fluks i balk transportnih koeficijenata. U slučaju elektrona ove razlike su veoma male u poređenju sa odgovarajućim razlikama kod pozitrona. Kod pozitrona se (osim transporta u azotu) vidi veoma izražen NDC efekat u balk brzini drifta, koga nema u profilima brzine drifta elektrona. Ovo jasno ukazuje na bitne razlike u fenomenologiji transporta elektrona i pozitrona u istom gasu.

U šestoj glavi disertacije po prvi put je sistematski ispitan uticaj magnetskog polja na transport pozitrona u Ar,  $N_2$ ,  $H_2$  i  $H_2O$  u ukrštenoj konfiguraciji električnog i magnetskog polja ( $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ ). Primena magnetskog polja uvodi u igru nove transportne koeficijente. Jačinu magnetskog polja smo birali tako da istraživanje za svaki gas obuhvati sva tri režima u kojima se pozitroni mogu naći: režim u kome dominiraju sudari, režim u kome je roj dominantno pod kontrolom magnetskog polja i komplikovani među-režim. Otkrili smo da, slično kao kod elektrona, magnetsko polje snižava energiju roja pozitrona, odnosno hladi roj. Takođe, sa povećanjem magnetskog polja smanjuje se razlika između fluks i balk komponenti transportnih koeficijenata. Jedan od najzanimljivijih zaključaka je da magnetsko polje ukida NDC efekat u balk komponenti brzine drifta pozitrona. Fizičko objašnjenje ovakvog dejstva magnetskog polja nalazi se odvojenim razmatranjem komponenti brzine drifta u  $\mathbf{E}$  i  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu. Ove dve komponente brzine drifta se različito ponašaju pod uticajem magnetskog polja i, kako u balk komponenti ukupne brzine drifta sa povećanjem magnetskog polja sve više dominira komponenta u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  pravcu, iz profila ukupne brzine nestaje NDC efekat. Dijagonalne komponente tenzora difuzije u  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  konfiguraciji takođe pokazuju različitu osetljivost na prisustvo magnetskog polja i nekonzervativne sudare. Tako formiranje Ps najjači uticaj ima na difuziju pozitrona u pravcu primenjenog električnog polja, dok magnetsko polje najmanji uticaj ima na  $n_0 D_B$  komponentu tenzora difuzije. U ovom poglavlju smo ispitali domen primenljivosti aproksimacije dva člana pri rešavanju Boltzmannove jednačine na transport pozitrona na primeru vodene pare i validnost koncepta efektivnog polja (Tonksova teorema), takođe na primeru transporta pozitrona u vodenoj pari. Zaključak do koga smo došli je da transport pozitrona mora da se tretira ili Monte Carlo simulacijom ili

rigoroznom teorijom za rešavanje Boltzmannove jednačine razvojem funkcije raspodele u red bez ograničavanja broja članova reda. U suprotnom mogu da se dobiju rezultati koji ni kvalitativno nisu tačni.

U sedmoj glavi smo dali kratak prikaz komercijalnih Monte Carlo kodova koji se koriste za modelovanje PET tehnike. U kratkim crtama smo izneli njihove najosnovnije karakteristike i podvukli da u biomedicini ne postoje standardizovani testovi za ove kodove. Predložili smo da se ovakvi kodovi testiraju u limitu rojeva, kao što je to uobičajena praksa u modelovanju u oblasti niskotemperaturne plazme i predložili rezultate prikazane u poglavljima 5. i 6. ove disertacije za potencijalni benčmark. Takođe smo pokazali da je našim kodom, kojim su dobijeni benčmark transportni koeficijenti, takođe moguće dobiti trajektorije čestica sa svim neophodnim detaljima interakcija koje one nose, vreme termalizacije pozitrona i ostale karakteristike od interesa za biomedicinu.

Fizika pozitrona je oblast koja se u poslednjih nekoliko decenija naglo razvija. Napredak tehnologije za akumulaciju i čuvanje antimaterije dovodi do porasta broja primena koje pozitroni imaju u različitim domenima nauke i života. Fizika rojeva tu nalazi svoje mesto pre svega kao granični slučaj realnih uslova u kojima se pozitroni nalaze i kao takva pogodna je za jednostavno testiranje modela koji opisuju date realne situacije. U nekim važnim slučajevima, kao što je na primer Surkova pozitronska zamka, pozitronski snop se, nakon ulaska u zamku, jako brzo raširi i pređe u roj, tako da opis rojeva u ovom slučaju nije aproksimacija, već realan opis. Teorija koja je decenijama razvijana za tretman rojeva elektrona, kao što je u ovoj disertaciji pokazano, bez problema može da se primeni na roj pozitrona. Nadamo se da će rezultati prikazani u ovoj disertaciji probuditi interesovanje za razvoj eksperimenata sa rojevima pozitrona u kojima bi se merili transportni parametri pozitrona u neutralnim gasovima. Transportni parametri su neophodan test pouzdanosti i kompletnosti novih setova preseka za sudare pozitrona sa neutralnim gasovima, koji su s druge strane neophodni za modelovanje primena pozitrona.

## 9. LITERATURA

- Abdoul-Carime H., Gohlke S., Illenberger E., *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 168103.
- Abdoul-Carime H., Langer J., Huels M. A., Illenberger E., *Eur. Phys. J. D* **35** (2005) 399.
- Agostinelli S., *et al.*, *Nucl. Instrum. Methods A* **506** (2003) 250.
- Aihara T., Hiratsuka J., Morita N., Uno M., Sakurai Y., Maruhashi A., Ono K., Harada T., *Boron Neutron Capture Therapy Head Neck* **28** (2006) 850.
- Al-Qaradawi I., Charlton M., Borozan I., Whitehead R., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** (2000) 2725.
- Amoretti M., *et al.*, *Nature* **419** (2002) 456.
- Anderson C. D., *Phys. Rev.* **43** (1933) 491.
- Andreo P., Burns D. T., Hohlfeld K., Huq M. S., Kanai T., Laitano F., Smythe V. G., Vynckier S., (2000) *Technical Report 398* International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria.
- Arcidiacono C., Beale J., Pešić Z. D., Kover A., Laricchia G., *J. Phys. B* **42** (2009) 065205.
- Ariyoshi Y., Miyatake S. I., Kimura Y., Shimahara T., Kawabata S., Nagata K., Suzuki M., Maruhashi A., Ono K., Shimahara M., *Oncol. Rep.* **18** (2007) 861.
- Arretche F., Lima A. P., *Phys. Rev. A* **74** (2006) 042713.
- Armour E. A. G., *Phys. Rev. Lett.* **48** (1982) 1578.
- Armour E. A. G. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **16** (1983) 1295.
- Baille P., Darewych J. W., Lodge J. G., *J. Phys.* **52** (1974) 667.
- Baluja K. L., Jain A., *Phys. Rev. A* **45** (1992) 7838.
- Baluja K. L., Zhang R., Franz J., Tennyson J., *J. Phys. B* **40** (2007) 3515.

- Banković A., Marler J. P., Šuvakov M., Malović G., Petrović Z. Lj., *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **266** (2008a) 462.
- Banković A., Marler J. P., Petrović Z. Lj., Dujko S., White R. D., Malović G., (2008b) Proc. 24th Symposium on Physics of Ionized Gases - SPIG 2008, Novi Sad, Serbia, (25 - 29 August 2008), Contributed Papers and Abstracts of Invited Lectures, Topical Invited Lectures and Progress Reports, pp. 23-26.
- Banković A., Petrović Z. Lj., Robson R. E., Marler J. P., Dujko S., Malović G., *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **267** (2009) 350.
- Banković A., Dujko S., White R. D., Marler J. P., Malović G., Buckman S. J., Petrović Z. Lj., (2010) 25th Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases, 30th August - 3rd September 2010, Donji Milanovac, Serbia, (edt. L.Č. Popović and M. M. Kuraica) pp. 67 – 70.
- Banković A., Dujko S., White R. D., Buckman S. J., Petrović Z. Lj., *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **279** (2012a) 92.
- Banković A., Dujko S., White R. D., Buckman S. J., Petrović Z. Lj., submitted to European Journal of Physics D (2012b).
- Banković A., Dujko S., White R. D., Marler J. P., Buckman S. J., Marjanović S., Malović G., García G., Petrović Z. Lj., *New Journal of Physics* **14** (2012c) 035003.
- Barnes L. D., *PhD Thesis* (2005) University of California San Diego.
- Barnes L. D., Young J. A., Surko C. M., *Phys. Rev. A* **74** (2006) 012706.
- Baró J., Sempau J., Fernández-Varea J. M., Salvat F., *Nucl. Instrum. Methods B* **100** (1995) 31.
- Barth R. F., *Journal of Neuro-Oncology* **62** (2003) 1.
- Barth R. F., *Applied Radiation and Isotopes* **67** (2009) S3.
- Beale J., Armitage S., Laricchia G., *J. Phys. B* **39** (2006) 1337.
- Beddoe A. H., *The British Journal of Radiology* **70** (1997) 665.
- De Benedetti S., Cowan C. E., Konneker W. E., *Phys. Rev.* **76** (1949) 440.
- Biagi S. F., *Nucl. Instrum. Methods A* **283** (1989) 74.
- Birdsall C. K., Langdon A. B., (1974) *Plasma Physics Via Computer Simulation* New York: McGraw-Hill.
- Blum W., Rolandi L., (1993) *Particle Detection with Drift Chambers*, Springer, Berlin.

- Boltzmann L., *Wein. Ber.* **66** (1872) 275.
- Bose N., Paul D. A. L., Tsai J-S., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **14** (1981) L227.
- Both J. A., Pawlizki T., *Int. J. Med. Sci.* **1** (2004) 63.
- Boudaïffa B., Cloutier P., Hunting D., Huels M. A., Sanche L., *Science* **287** (2000) 1658.
- Brennan M. J., Garvie A. M., Kelly L. J., *Aust. J. Phys.* **43** (1990) 27.
- Bromley M. W. J., Mitroy J., *Phys. Rev. A* **65** (2002) 062506.
- Bromley M. W. J., Lima M. A. P., Laricchia G., *Phys. Scr.* **74** (2006a) C37.
- Bromley M. W. J., Mitroy J., *Phys. Rev. A* **73** (2006b) 032507.
- Brown F. B., (ed) *MCNP—A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Report LA-UR-03-1987* (Los Alamos, NM: Los Alamos National Laboratory) (2003).
- Busse P. M., Harling O. K., Palmer M. R., Kiger W. S., Kaplan J., Kaplan I., Chuang C. F., Goorley J. T., Riley K. J., Newton T. H., SantaCruz G. A., Lu X. Q., Zamenhof R. G., *J. Neuro-Oncol.* **62** (2003) 111.
- Bzenić S., Petrović Z. Lj., Raspopović Z. M., Makabe T., *Jpn. J. Appl. Phys.* **38** (1999a) 6077.
- Bzenić S., Raspopović Z. R., Sakadzić S., Petrović Z. Lj., *IEEE Trans. Plasma Sci.* **27** (1999b) 78.
- Campeanu R. I., *Canadian Journal of Physics* **60** (1982) 615.
- Campeanu R. I., Fromme D., Kruse G., McEachran R. P., Parcell L. A., Raith W., Sinapius G., Stauffer A. D., *J. Phys. B* **20** (1987) 3557.
- Campeanu R. I., *Nuclear instruments and methods B* **267** (2009) 239.
- Canter K. F., Coleman P. G., Griffith T. C., Heyland G. R., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **5** (1972) L167.
- Canter K. F., Heyland G. R., *Appl. Phys.* **5** (1974) 231.
- Canter K. F., *Slow Positron Optics*. In Positron Studies of Solids, Surfaces and Atoms, eds. A. P. Mills Jr., W. S. Crane and K. F. Canter (World Scientific) (1986) 102.
- Canter K. F., Lippell P. H., Crane W. S., Mills Jr. A. P., *Modified Soa immersion lens positron gun*. In Positron Studies of Solids, Surfaces and Atoms, (1986) 102.

- Canter K. F., Brandes G. R., Horsky T. N., Lippel P. H., Mills Jr. A. P., *The high brightness beam at Brandeis*. In Atomic Physics with Positrons, eds. J. W. Humberston and E. A. G. Armour (Plenum Press) (1987) 153.
- de Carvalho C. R. C., do N. Varella M. T., Lima M. A. P., da Silva E. P., Germano J. S. E., *Nucl. Instr. Methods B* **171** (2000) 33.
- Caron L. G., Sanche L., *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 113201.
- Carrier J. F., Archambault L., Beaulieu L., Roy R., *Med. Phys.* **31** (2004) 484.
- Carrier J. F., Beaulieu L., Therriault-Proulx F., Roy R., *Med. Phys.* **33** (2006) 595.
- Cassidy D. B., Deng S. H. M., Greaves R. G., Maruo T., Nishiyama N., Snyder J.B., Tanaka H. K. M., Mills Jr A. P., *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 195006.
- Cassidy D. B., Deng S. H. M., Greaves R. G., Mills Jr. A. P., *Rev. Sci. Instrum.* **77** (2006) 073106.
- Cassidy D. B., Mills Jr A. P., *Nature* **449** (2007) 195.
- Castiglioni I., Cremonesi O., Gilardi M. C., Bettinardi V., Rizzo G., Savi A., Bellotti E., Fazio F., *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **46** (1999) 2053.
- Champion C., *Phys. Med. Biol.* **48** (2003) 2147.
- Champion C., Le Loirec C., *Phys. Med. Biol.* **51** (2006) 1707.
- Champion C., Le Loirec C., *Phys. Med. Biol.* **52** (2007) 6605.
- Charlton M., Griffith T. C., Heyland G. R., Wright G. L., *J. Phys. B* **13** (1980) L353.
- Charlton M., *Rep. Prog. Phys.* **48** (1985a) 737.
- Charlton M., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **18** (1985b) L667.
- Charlton M., Laricchia G., in *Positron (Electron) – Gas Scattering*, World Scientific (1986) 73.
- Charlton M., Humberston J., (2000) *Positron Physics*, New York: Cambridge University Press.
- Charlton M., *Journal of Physics: Conference Series* **162** (2009) 012003.
- Cherrington B., (1979) *Gaseous Electronics and Gas Lasers*, Pergamon Press.
- Chow J. C. L., *Med. Phys.* **34** (2007) 175.
- Clarke J., van der Werf D. P., Griffiths B., Beddows D. C. S., Charlton M., Telle H. H., Watkeys P. R., *Rev. Sci. Instrum.* **77** (2006) 063302.

- Coleman P. G., Griffith T. C., Heyland G. R., Twaney T. R., private communication as reported by Griffith T C and Heyland G R *Phys. Rep.* **39** (1978) 169.
- Coleman P. G., Griffith T. C., Heyland G. R., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **14** (1981) 2509.
- Coleman, P. G., (2000) Ed., *Positron Beams and Their Applications*, World Scientific, Singapore.
- Coleman P. G., Cheesman N., Lowry E. R., *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 173201.
- Crompton R. W., *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **32** (1994) 97.
- Cyglar J. E., Daskalov G. M., Chan G. H., Ding G. X., *Med. Phys.* **31** (2004) 142.
- David A., Kögel G., Sperr P., Triftshäuser W., *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001) 067402.
- Denifl S., Ptasińska S., Cingel M., Matejcik S., Scheier P., Märk T. D., *Chem. Phys. Lett.* **377** (2003) 74.
- Denifl S., Ptasińska S., Probst M., Hrušak J., Scheier P., Märk T. D., *J. Phys. Chem. A* **108** (2004a) 6562.
- Denifl S., Ptasińska S., Hanel G., Gstir B., Probst M., Scheier P., Märk T. D., *J. Chem. Phys.* **120** (2004b) 6557.
- Denifl S., Zappa F., Mähr I., Lecointre J., Probst M., Märk T. D., Scheier P., *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006) 043201.
- Deutsch M., *Phys. Rev.* **82** (1951) 455.
- Dirac P. A. M., *Proc. R. Soc. Lond. A* **117** (1928) 610.
- Dirac P. A. M., *Proc. R. Soc. Lond. A* **126** (1930) 360.
- Dirac P. A. M., *Proc. R. Soc. Lond. A* **133** (1931) 60.
- Dujko S., Raspopović Z. M., Petrović Z. Lj., Makabe T., *IEEE Trans. Plasma Sci.* **31** (2003) 711.
- Dujko S., Raspopović Z. R., Petrović Z. Lj., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **38** (2005) 2952.
- Dujko S., White R. D., Ness K. F., Petrović Z. Lj., Robson R. E., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39** (2006) 4788.
- Dujko S., White R. D., Petrović Z. Lj., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** (2008) 245205.
- Dujko S., PhD Thesis (2009) James Cook University, Townsville, Australia.
- Dujko S, White R.D., Petrović Z. Lj., Robson R. E., *Phys. Rev. E* **81** (2010) 046403.
- Dujko S., Ebert U., White R. D., Petrović Z. Lj., *Jpn. J. Appl. Phys.* **50** (2011a) 08JC01.

- Dujko S., White R. D., Petrović Z. Lj., Robson R. E., *Plasma Sources Sci. Technol.* **20** (2011b) 024013.
- Dupasquier, A., Mills A. P., (1995), Eds., *Positron Spectroscopy of Solids*, IOS, Amsterdam.
- Dyatko N. A., Napartovich A. P., Petrović Z. Lj., Raspopović Z. R., Sakadžić S., *J.Phys. D: Appl. Phys.* **33** (2000) 375.
- Feil S., Gluch K., Matt-Leubner S., Scheier P., Limtrakul J., Probst M., Deutsch H., Becker K., Stamatovic A., Märk T. D., *J. Phys. B* **37** (2004) 3013.
- Fitzgerald K., Harrington A., Leder P., *Oncogene* **19** (2000) 191.
- Fippel M., Kawrakow I., Friedrich K., *Phys. Med. Biol.* **42** (1997) 501.
- Fippel M., *Med.Phys.* **26** (1999) 1466.
- Friedland W., Jacob P., Paretzke H. G., Stork T., *Radiat. Res.* **150** (1998) 170.
- Friedland W., Jacob P., Bernhardt P., Paretzke H. G., Dingfeldr M., *Radiat. Res.* **159** (2003) 401.
- Fromme D., Kruse G., Raith W., Sinapius G., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **21** (1988) L261.
- Fuss M. C., Muñoz A., Oller J. C., Blanco F., Williard A., Limão-Vieira P., Borge M. J. G., Tengblad O., Huerga C., Téllez M., García G., *Applied Radiation and Isotopes* **69** (2011)1198.
- Fuwa N., Suzuki M., Sakurai Y., Nagata K., Kinashi Y., Masunaga S., Maruhashi A., Imahori Y., Kodaira T., Tachibana H., *et al.*, *Br. J. Radiol.* **81** (2008) 749.
- Gabrielse G., Bowden N. S., Oxley P., Speck A., Story C. H., Tan J. N., Wessels M., Grzonka D., Oelert W., Schepers G., Sefzick T., Walz J., Pittner H., Hänsch T. W., Hessels E. A., *Physical Review Letters* **89** (2002) 213401.
- Gabrielse G., *Adv. At. Mol. Phys.* **50** (2005) 155.
- Garcia G., Manero F., *Phys. Rev. A* **53** (1996) 250.
- Garcia G., Manero F., *Phys. Rev. A* **57** (1998) 1069.
- Garcia G., Blanco F., *Phys. Lett. A* **279** (2001) 61.
- Garcia G., Blanco F., Williard A., *Chem. Phys. Lett.* **335** (2001) 277.

- Garcia G., Petrović Z. Lj., White R., Buckman S. J., *IEEE Transactions on Plasma Science*, **39** (2011) 2962.
- Garcia G., private communication (2011).
- Gerjuoy E., Stein S., *Phys. Rev.* **97** (1955) 1671.
- Gianturco F. A., Jain A., Rodriguez-Ruiz J. A., *Phys. Rev. A* **48** (1993) 4321.
- Gianturco F. A., Mukherjee T., *Phys. Rev. A* **55** (1997) 1044.
- Gianturco F. A., Mukherjee T., *Phys. Rev. A* **64** (2001) 024703.
- Gianturco F. A., Mukherjee T., Occhigrossi A., *Phys. Rev. A* **64** (2001) 032715.
- Gidley D. W., Peng H. G., Vallery R. S., *Annu. Rev. Mater. Res.* **36** (2006) 49.
- Gilbert S. J., Kurz C., Greaves R. G., Surko C. M., *Appl.Phys. Lett.* **70** (1997) 1944.
- Gilbert S. J., Greaves R. G., Surko C. M., *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 5032.
- Gillespe E. S., Thompson D. G., *J. Phys. B* **8** (1975) 2858.
- Gohlke S., Abdoul-Carime H., Illenberger E., *Chem. Phys. Lett.* **380** (2003) 595.
- Greaves R. G., Tinkle M. D., Surko C. M., *Phys. Plasmas* **1** (1994) 1439.
- Greaves R. G., Surko C. M., *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 1883.
- Greaves R. G., Surko C. M., *Phys. Plasmas* **8** (2001) 1879.
- Greaves R. G., Surko C. M., *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **192** (2002) 90.
- Greaves R. G., Moxom J. M., *Phys. Plasmas* **15** (2008) 072304.
- Gribakin G. F., Knudsen H., Surko C. M., *Physica Scripta* **70** (2004) C1.
- Griffith T. C., Heyland G. R., *Phys. Rep.* **39** (1978) 169.
- Guessoum N., Ramaty R., Lingenfelter R. E., *Astrophysical Journal* **378** (1991) 170.
- Hanel G., Gstir B., Denifl S., Scheier P., Probst M., Farizon B., Farizon M., Illenberger E., Märk T. D., *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003) 188104.
- De-Hang S., Jin-Feng S., Xiang-Dong Y., Zun-Lue Z., Yu-Fang L., *Chin. Phys. Soc.* **13** (2004) 1018.
- Hara S., *J. Phys B* **7** (1974) 1748.
- Harrison R. L., Vannoy S. D., Haynor D. R. *et al.*, (1993) Records of IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference, San Francisco, pp 1154-1158.

- Hartmann Siantar C. L., Welling R. S., Daly T. P., Bergstrom P., Garrett D., House R. K., Knapp D., Faddegon B., Albright N., Chuang C., Wieczorek D. J., Verhey L. J., Bielajew A. F., *Med. Phys.* **28** (2001) 1322.
- Hatanaka H. A., *J. Neurol.* **209** (1975) 81.
- Havu-Aurén K., Kiiski J., Lehtiö K., Eskola O., Kulvik M., Vuorinen V., Oikonen V., Vähätalo J., Jääskeläinen J., Minn H., *Eur. J. Nucl. Med. Mol. Imaging* **34** (2007) 87.
- Hayashi M., (2003) *Bibliography of Electron and Photon Cross Sections with Atoms and Molecules, in 20th Century–Water Vapour–NIFS-Data-81* National Institute for Fusion Science, Oroshi-cho, Toki, Japan.
- Hendrick J. S., McKinney G. W., Fensin M. L., James M. R., Johns R. C., Durkee J. W., Finch J. P., Pelowitz D. B., Waters L. S., Gallmeier F. X., (2007) *MCNPX version 26D* Los Alamos National Laboratory report LA-UR-07-4137.
- Hervieux P.-A., Fojon O. A., Champion C., Rivarola R. D., Hanssen J., *J. Phys. B* **39** (2006) 409.
- Heylen A. E. D., *IEE Proc.* **127** (1980) 221.
- Hoffman K. R., Dababneh M. S., Hsieh Y. F., Kauppila W. E., Pol V., Smart J. H., Stein T. S., *Phys. Rev. A* **25** (3) (1982) 1393.
- Holzscheiter M. H., Charlton M., Nieto M. M., *Phys. Rep.* **402** (2004) 1.
- Huels M. A., Boudaïffa B., Cloutier P., Hunting D., Sanche L., *J. Am. Chem. Soc.* **125** (2003) 4467.
- Hulet Jr. L. D., Donohue D. L., Xu J., Lewis T.A., McLuckey S. A., Glish G. L., *Chemical Physics Letters* **216** (1993) 236.
- Huxley L. G. H., Crompton R. W., (1974) *The Diffusion and Drift of Electrons in Gases*, Wiley, London
- Imahori Y., Ueda S., Ohmori Y., Kusuki T., Ono K., Fujii R., Ido T., *J.Nucl.Med.* **39**(2) (1998a) 325.
- Imahori Y., Ueda S., Ohmori Y., Sakae K., Kusuki T., Kobayashi T., Takagaki M., Ono K., Ido T., Fujii R., *Clin. Cancer Res.* **4** (1998b) 1825.

- Imahori, Y., Ueda S., Ohmori Y., Sakae K., Kusuki T., Kobayashi T., Takagaki M., Ono K., Ido T., Fujii R., *Clin. Cancer Res.* **4** (1998c) 1825.
- Imahori, Y., Ueda S., Ohmori Y., Kusuki T., Ono K., Fujii R., Ido T., *J. Nucl. Med.* **39** (1998d) 325.
- Ishiwata K., Ido T., Kawamura M., Kubota K., Ichihashi M., Mishima Y., *Radiat. Appl. Instrum. B* **18** (1991) 745.
- Ishiwata K., Shiono M., Kubota K., *Melanoma Res.* **2** (1992) 171.
- Itikawa Y., Mason N., *J. Phys. Chem. Ref. Data.* **34** (2005) 1.
- Ivanchenko V., For N., *Nucl. Instrum. Meth. A* **525** (2004) 402.
- Jan S., Santin G., Strul D., *et al.*, *Phys. Med. Biol.* **49** (2004) 4543.
- Jørgensen L. V., Collier M. J. T., Fine K. S., Watson T. L., van der Werf D. P., Charlton M., *Materials Science Forum* **363** (2001) 634.
- Jørgensen L. V., *et al.*, (ATHENA collaboration) *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 025002.
- Kabalka G. W., Nichols T. L., Smith G. T., Miller L. F., Khan M. K., Busse P. M., *J. Neuro-Oncol.* **62** (2003) 187.
- Kankaanranta L., Seppälä T., Koivunoro H., Saarilahti K., Atula T., Collan J., Salli E., Kortensniemi M., Uusi-Simola J., Mäkitie A., Seppänen M., Minn H., Kotiluoto P., Auterinen I., Savolainen S., Kouri M., Joensuu H., *Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys.* **69** (2007) 475.
- Karwasz G. P., Brusa R. S., Zecca A., *Rivista Nuovo Cimento* **24** No. 1 (2001).
- Karwasz G. P., Pliszka D., Brusa R. S., *Nucl. Instrum. Methods B* **247** (2006) 68.
- Kauppila W. E., Stein T. S., Jesion G., *Phys. Rev. Lett.* **36** (1976) 580.
- Kawrakow I., Fippel M., Friedrich K., *Med. Phys.* **23** (1996) 445.
- Kawrakow I., *Med. Phys.* **27** (2000a) 485.
- Kawrakow I., *Med. Phys.* **27** (2000b) 499.
- Kawrakow I., (2001) *VMC++*, *electron and photon Monte Carlo calculations optimized for radiation treatment planning Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport Simulation and Applications: Proc. MonteCarlo 2000 Meeting (Lisbon)* ed. Kling A., Barao F., Nakagawa M., Távora L., Vaz P., (Berlin: Springer) 229.
- Kimura M., Sueoka O., Hamada A., Itikawa Y., *Adv. Chem. Phys.* **111** (2000) 537.



- Kumar K., Skullerud H. R., Robson R. E., *Aust. J. Phys.* **33** (1980) 343.
- Kurihara M., Petrović Z. Lj., Makabe T., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33** (2000) 2146.
- Laricchia G., Reeth P. V., Sluzińska M., Moxom J., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35** (2002) 2525.
- Lewellen T., Harrison R. L., Vannoy S., (1998) "The SIMSET program" in: *Monte Carlo calculations in nuclear medicine: Applications in diagnostic imaging* (edt. M Ljungberg, S-E Strand, and M A King) Institute of Physics Publishing, Bristol, 77.
- Li B., Robson R. E., White R. D., *Phys. Rev. E* **74** (2006) 026405.
- Lopantseva G. B., et al., *Sov. J. Plasma Phys.* **5** (1979) 767.
- Lucas J., Saelee H. T., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **8** (1975) 640.
- Ljungberg M., Strand S.-E., *Comput. Methods Programs. Biomed.* **29** (1989) 257.
- Ljungberg M., (1998) "The SIMIND Monte Carlo program" in: *Monte Carlo calculations in nuclear medicine: Applications in diagnostic imaging* (edt. by M Ljungberg, S-E Strand, and M A King) Institute of Physics Publishing, Bristol, 145.
- Ma C. M., Li J. S., Pawlicki T., Jiang S. B., Deng J., Lee M. C., Koumrian T., Luxton M., Brain S., *Phys. Med. Biol.* **47** (2002) 1671.
- Maeda K., Makabe T., Nakano N., Bzenić S., Petrović Z. Lj., *Phys. Rev. E* **55** (1997) 5901.
- Makabe T., Petrović Z. Lj., (2006) *Plasma Electronics: Applications in Microelectronic Device Fabrications*, Taylor&Francis Group, New York.
- Makochekanwa C., Sueoka O., Kimura M., *J. Phys. Conf. Series* **80** (2007) 012012.
- Makochekanwa C., Banković A., Tattersall W., Jones A., Caradonna P., Slaughter D. S., Sullivan J. P., Nixon K., Brunger M. J., Petrović Z. Lj., Buckman S. J., *New J. Phys.* **11** (2009) 103036.
- Marder S., Hughes V. W., Wu C. S., Bennett W., *Phys. Rev.* **103** (1956) 1258.
- DeMarco J. J., Solberg T. D., Smathers J. B., *Med. Phys.* **25** (1998) 1.
- Marjanović S., Šuvakov M., Banković A., Savić M., Malović G., Buckman S. J., Petrović Z. Lj., *IEEE Transactions on Plasma Science*, **39** (2011) 2614.
- Marler J. P., Surko C. M., *Phys. Rev. A* **72** (2005) 062713.
- Marler J. P., Sullivan J. P., Surko C. M., *Phys. Rev. A* **71** (2005) 022701.

- Marler J. P., Petrović Z. Lj., Banković A., Dujko S., Šuvakov M., Malović G., Buckman S. J., *Physics of plasmas* **16** (2009) 057101.
- Martin F., Burrow P. D., Cai Z., Cloutier P., Hunting D., Sanche L., *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004) 068101.
- McEachran R. P., Private communication (2006).
- Menichetti L., Cionini L., Sauerwein W. A., Altieri S., Solin O., Minn H., Salvadori P. A., *Appl. Radiat. Isot.* **67** (2009) S351.
- Mills Jr. A.P., *Phys. Rev. Lett.* **46** (1981) 717.
- Mills Jr. A. P., *Positron Solid State Physics*, Proc. Int. School of Physics "Enrico Fermi", Course 83, eds. W. Brandt and A. Dupasquier (North Holland) (1983) 432.
- Mills Jr. A. P., Gullikson E. M., *Appl. Phys. Lett.* **49** (1986) 1121.
- Mishima Y., Ichihashi M., Tsui M., Hatta S., Ueda M., Honda C., Susuki T., *Lancet* **2** (1989) 388.
- Mitroy J., Bromley M. W. J., Ryzhikh G. G., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35** (2002) R81.
- Mitroy J., Bromley M. W. J., *Phys. Rev. A* **73** (2006) 052712.
- Moadel R. M., Nguyen A. V., Lin E. Y., Lu P., Mani J., Blafox M. D., Pollard J. W., Dadacheva E., *Breast Cancer Res.* **5** (2003) 199.
- Moadel R. M., Weldon R. H., Katz E. B., Lu P., Mani J., Stahl M., Blafox M. D., Pestell R. G., Charron M. J., Dadachova E., *Cancer Res.* **65** (2005) 698.
- Mohorovičić S., *Astron. Nachr.* **253** (1934) 93.
- Morgan L. W., [http://www.lxcat.laplace.univ-tlse.fr/cross\\_sec\\_plot.php](http://www.lxcat.laplace.univ-tlse.fr/cross_sec_plot.php)
- Moxom J., Schrader D. M., Laricchia G., Xu J., Hullet L. D., *Phys. Rev. A* **62** (2000) 052708.
- Muehlllehner G., Karp J. S., *Phys. Med. Biol.* **51** (2006) R117.
- Muñoz A., Pérez J. M., García G., Blanco F., *Nucl. Instrum. Methods A* **536** (2005) 176.
- Muñoz A., Oller J. C., Blanco F., Gorfinkiel J. D., García G., *Chem. Phys. Lett.* **433** (2007a) 253.
- Muñoz A., Blanco F., Oller J. C., Pérez J. M., García G., *Adv. Quantum Chem.* **52** (2007b) 21.

- Muñoz A., Oller J. C., Blanco F., Gorfinkiel J. D., Limão-Vieira P., Maira-Vidal A., Borge M. J. G., Tengblad O., Huerga C., Téllez M., García G., *Journal of Physics: Conference Series* **133** (2008a) 012002.
- Muñoz A., Blanco F., García G., Thorn P. A., Brunger M. J., Sullivan J. P., Buckman S. J., *Int. J. Mass Spectrom.* **277** (2008b) 175.
- Murphy T. J., Surko C. M., *Phys. Rev. A* **46** (1992) 5696.
- Murtagh D. J., Arcidiacono C., Pešić Z. D., Laricchia G., *Nucl. Instrum. Methods B* **24(7)** (2006) 92.
- Nelson W. R., Hirayama H., Rogers D. W. O., *SLAC Report* **265** (1985).
- Ness K. F., Robson R. E., *Transport Theory and Statistical Physics* **14** (1986a) 257.
- Ness K. F., Robson R. E., *Phys. Rev. A* **34** (1986b) 2185.
- Ness K. F., *Phys. Rev. E* **47** (1993) 323.
- Ness K. F., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **27** (1994) 1848.
- Ness K.F., Makabe T., *Phys. Rev. E* **62** (2000) 4083.
- Nishimura T., Gianturco F. A., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37** (2004) 215.
- Nishimura T., Gianturco F. A., *Eur. Phys. J. D* **33** (2005) 221.
- Oppenheimer J. R., *Phys. Rev.* **35** (1930a) 562.
- Oppenheimer J. R., *Phys. Rev.* **35** (1930b) 939.
- Pan X., Sanche L., *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 198104.
- Paul D. A. L., Leung C. Y., *Can. J. Phys.* **46** (1968) 2779.
- Paul D. A. L., Tsai J-S., *Can. J. Phys.* **57** (1979) 1667.
- Paul D. A. L., Böse N., in *Electron and Ion Swarms* Pergamon Press (1982) 65.
- Parcell L. A., McEachran R. P., Stauffer A., *Nucl. Instrum. Methods B* **171** (2000) 113.
- Penetrante B. M., Bardsley J. N., Pitchford L. C., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **18** (1985) 1087.
- Petrović Z. Lj., Crompton R. W., Haddad G. N., *Aust. J. Phys.* **37** (1984) 23.
- Petrović Z. Lj., Ph. D. Thesis (1985) Australian National University, Canberra.
- Petrović Z. Lj., Raspopović Z. M., Dujko S., Makabe T., *Appl. Surf. Sci.* **192** (2002) 1.
- Petrović Z. Lj., Šuvakov M., Nikitović Ž., Dujko S., Šašić O., Jovanović J., Malović G., Stojanović V., *Plasma Sources Sci. Technol.* **16** (2007) S1.

- Petrović Z. Lj., Dujko S., Marić D., Malović G., Nikitović Ž., Šašić O., Jovanović J., Stojanović V., Radmilović-Radenović M., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42** (2009) 194002.
- Petrović Z. Lj., Banković A., Dujko S., Marjanović S., Šuvakov M., Malović G., Marler J. P., Buckman S. J., White R. D., Robson R. E., *J. Phys.: Conf. Ser.* **199** (2010) 012016.
- Phelps A. V., *Rev. Mod. Phys.* **40** (1968) 399.
- Phelps A. V., Tachibana K., private communication (1985).
- Phelps A. V., <ftp://jila.colorado.edu/collisiondata/electronneutral/electron.txt>
- Podgorsak E.B., e.d. (2005) *Radiation Oncology Physics: A Handbook for Teachers and Students*, International atomic energy agency, Vienna.
- Poon E., Verhaegen F., *Med. Phys.* **32** (2005) 1696.
- Poon E., Seuntjens J. S., Verhaegen F., *Phys. Med. Biol.* **50** (2005) 681.
- Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., Flannery B. P., (1994) *Numerical Recipes in C* Cambridge University Press.
- Ptasińska S., Denifl S., Mróz B., Probst M., Grill V., Illenberger E., Scheier P., Märk T. D., *J. Chem. Phys.* **123** (2005) 124302.
- Raspopović Z. R., Sakadžić S., Bzenić S., Petrović Z. Lj., *IEEE Trans. Plasma Sci.* **27** (1999) 1241.
- Raspopović Z. M., Sakadžić S., Petrović Z. Lj., Makabe T., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33** (2000) 1298.
- Reid I. D., *Aust. J. Phys.* **32** (1979a) 231.
- Reid I. D., *Aust. J. Phys.* **32** (1979b) 255.
- Reilhac A., Lartzien C., Costes N., Sans S., Comtat C., Gunn R. N., Evans A. C., *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **51** (2004) 46.
- Robson R. E., *Aust. J. Phys.* **37** (1984) 35.
- Robson R. E., *J. Chem. Phys.* **85** (1986) 4486.
- Robson R. E., Ness K. F., *Phys. Rev. A* **33** (1986) 2068.
- Robson R. E., *Aust. J. Phys.* **50** (1991) 577.
- Robson R. E., *Aust. J. Phys.* **47** (1994) 279.
- Robson R. E., Li B., White R. D., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** (2000) 507.

- Robson R. E., Petrović Z. Lj., Raspopović Z. M., Loffhagen D., *J. Chem. Phys.* **119** (2003) 11249.
- Robson R. E., White R. D., Petrović Z. Lj., *Rev. Mod. Phys.* **77** (2005) 1304.
- Robson R. E., (2006) *Introductory Transport Theory for Charged Particles in Gases* Singapore: World Scientific.
- Saito S. L., *J. Chem. Phys.* **122** (2005) 054302.
- Salvat F., Fernández-Varea J. M., Baró J., Sempau J., (1996) *PENELOPE, an algorithm and computer code for MonteCarlo simulation of electron-photon showers* University of Barcelona Report.
- Sanchez S. d'A., da Costa R. F., Lima M. A. P., (ed) Proc. 13th Int. Workshop on Low Energy Positron and Positronium Physics, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* (2006) 247 1–154.
- Sanz A. G., Fuss M. C., Muñoz A., Blanco F., Limão-Vieira P., Brunger M. J., Buckman S. J., García G., *International Journal of Radiation Biology* (2011) submitted.
- Sakadžić S., Magistarska teza, (2000) Elektrotehnički Fakultet, Beograd.
- Scheer A. M., Aflatooni K., Gallup G. A., Burrow P. D., *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 068102.
- Seidlin S. M., Marinelli L. D., Oshry E., *JAMA* **132** (1946) 838.
- Sempau J., Acosta E., Baro J., Fernandez-Varea J. M., Salvat F., *Nucl. Instrum. Meth. B* **132** (1997) 377.
- Sempau J., Wilderman S. J., Bielajew A. F., *Phys. Med. Biol.* **45** (2000) 2263.
- Sempau J., Sánchez-Reyes A., Salvat F., ben Tahar H. O., Jiang S. B., Fernández-Varea J. M., *Phys. Med. Biol.* **46** (2001) 1163.
- Sempau J., Fernandez-Varea J. M., Acosta E., Salvat F., *Nucl. Instrum. Meth. B* **207** (2003) 107.
- Shirai T., Tabata T., Tawara H., *Atomic Data Nucl. Data Tables* **79** (2001) 143.
- Shizgal B., *Chem. Phys.* **147** (1990) 271.
- Shultz P. J., Lynn K. G., *Rev. Mod. Phys.* **60** (1988) 701.
- Smith M. F., Floyd C. E., Jaszczak, R. J., *Med. Phys.* **20** (1993) 1121.

- Smith M. F., (1998) ‘‘Vectorized Monte Carlo code for modelling photon transport in nuclear medicine’’ in: *Monte Carlo calculations in nuclear medicine: Applications in diagnostic imaging* (edt. by M Ljungberg, S-E Strand, and M A King) Institute of Physics Publishing, Bristol, 93.
- Sueoka O., Mori S., Katayama Y., *J. Phys. B* **19** (1986) L373.
- Sueoka O., Mori S., Katayama Y., *J. Phys. B* **20** (1987) 3237.
- Sullivan J. P., Gilbert S. J., Surko C. M., *Phys. Rev. Lett.* **86** (2001a) 1494.
- Sullivan J. P., Marler J. P., Gilbert S. J., Buckman S. J., Surko C. M., *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001b) 073201.
- Sullivan J. P., Gilbert S. J., Marler J. P., Graves R. G., Buckman S. J., Surko C. M., *Phys. Rev. A* **66** (2002) 042708.
- Sullivan J. P., Jones A., Caradonna P., Makochekanwa C., Buckman S. J., *Review of scientific instruments* **79** (2008a) 113105.
- Sullivan J. P., Jones A., Caradonna P., Makochekanwa C., Buckman S. J., *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **266** (2008b) 384.
- Sullivan J. P., Makochekanwa C., Jones A., Caradonna P., Buckman S. J., *J. Phys. B* **41** (2008c) 081001.
- Surko C. M., Passner A., Leventhal M., Wysoki F. J., *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 1831.
- Surko C. M., Greaves R. G., *Physics of Plasmas* **11**(5) (2004) 2333.
- Surko C. M., Gribakin G. F., Buckman S. J., *J. Phys. B* **38** (2005) R35.
- Surko C. M., NASA Conference Publication Service, ed. A. Bhatia, (2006)
- Šuvakov M., Diplomaska teza, (2004) Fizički fakultet, Beograd.
- Šuvakov M., Petrović Z. Lj., Marler J. P., Buckman S. J., Robson R. E., Malović G., *New J. Phys.* **10** (2008) 053034.
- Tagashira H., Sakai Y., Sakamoto S., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **10** (1977) 1051.
- Tanner R. J., Chartier J.-L., Siebert B. R. L., Agosteo S., Großwendt B., Gualdrini G., Kodeli I., Leuthold G. P., Ménard S., Price R. A., Tagziria H., Terrissol M., Zankl M., *Radiat. Prot. Dosimetry* **110** (2004) 769.
- Tennyson J., Private communication (2009).
- Teutsch W. B., Hughes V. W., *Phys. Rev.* **103** (1956) 1266.
- Thomas W. R. L., *J. Phys. B: Atom Molec. Phys.* **2** (1969) 551.

- Thomas R. W. L., Thomas W. R. L., *J. Phys. B* **2** (1969) 562.
- Thompson C. J., Cantu J.-M., Picard Y., *Phys. Med. Biol.* **37** (1992) 731.
- Thompson C. J., Picard Y., (1998) *PETSIM: Monte Carlo simulation of positron imaging systems* in: Monte Carlo calculations in nuclear medicine: Applications in diagnostic imaging, (edt. by M Ljungberg, S-E Strand, and M A King) Institute of Physics Publishing, Bristol, 233.
- Thorn P., Campbell L., Brunger M., *PMC Physics B* **2** (2009) 1.
- Tonks L., *Phys. Rev.* **51** (1937) 744.
- Tonks L., Allis W. P., *Phys. Rev.* **52** (1937) 710.
- Tóth I., Campeanu R. I., Chiş V., Nagy L., *Phys. Lett. A* **360** (2006) 131.
- Tóth I., Campeanu R. I., Chiş V., Nagy L., *Nuclear instruments and methods B* **267** (2009) 362.
- Tóth I., Campeanu R. I., Chis V., Nagy L., *Journal of Physics: Conference Series* **199** (2010) 012018.
- D'Urso B., Van Handel R., Odom B., Hanneke D., Gabrielse G., *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 113002.
- Vähätalo J. K., Eskola O., Bergman J., Forsback S., Lehtikainen P., Jääskeläinen J., Solin O., *J. Labelled Comp. Radiopharm.* **45** (2002) 697.
- Viehland L. A., Goeringer D. E., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38** (2005) 3987.
- Vrhovac S. B., Petrović Z. Lj., *Phys. Rev. E* **53** (1996) 4012.
- Vrhovac S. B., Petrović Z. Lj., Viehland L. A., Santhanam T. S., *J.Chem.Phys.* **110** (1999) 2423.
- De Vries D. J., Moore S. C., Zimmerman R. E., Mueller S. P., Friedland B., Lanza R. C., *IEEE Trans. Med. Imaging* **9** (1990) 430.
- De Vries D., Moore S., (1998) "Monte Carlo simulation of photon transport in gamma camera collimators" in: *Monte Carlo calculations in nuclear medicine: Applications in diagnostic imaging* (edt. by M Ljungberg, S-E Strand, and M A King) Institute of Physics Publishing, Bristol, 125.
- Wahl R. L., (2002) *Principles and Practice of Positron Emission Tomography* Lippincott, Williams and Wilkins, Philadelphia.

- Waker A. J., *Radiat. Prot. Dosim.* **122** (2006) 369.
- Weijnen S., Rizzo P., Braid M., Vaishnav R., Jonkheer S. M., Zlobin A., Osborne B. A., Gottipati S., Aster J. C., Hahn W. C., Rudolf M., Siziopikou K., Kast W. M., Miele L., *Nat. Med.* **8** (2002) 979.
- Wheeler J. A., *Polyelectrons. Ann. N. Y. Acad. Sci.* **48** (1946) 219.
- White R. D., Ph.D. Thesis, (1996) James Cook University, Australia
- White R. D., Brennan M. J., Ness K. F., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **30** (1997) 810.
- White R. D., Robson R. E., Ness K. F., *Phys. Rev. E* **60** (1999a) 7457.
- White R. D., Ness K. F., Robson R. E., Li B., *Phys. Rev. E* **60** (1999b) 2231.
- White R. D., Robson R. E., Ness K. F., *IEEE Trans. Plasma Sci.* **27** (1999c) 1249.
- White R. D., Ness K. F., Robson R. E., *J. Phys. D* **32** (1999d) 1842.
- White R. D., Robson R. E., Ness K. F., *Appl. Surf. Sci.* **192** (2002) 26.
- White R. D., Robson R. E., Ness K. F., Makabe T., *J. Phys D:Appl. Phys.* **38** (2005) 997.
- White R. D., Robson R. E., Dujko S., Nicoletopoulos P., Li B., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42** (2009) 194001.
- White R. D., Robson R. E., *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 230602.
- White R. D., Sullivan J. P., Banković A., Dujko S., Robson R. E., Petrović Z. Lj., García G., Brunger M., Buckman S. J., (2012) *Positron and Electron Interactions and Transport in Biological Media: Modeling Tracks and Radiation Damage* G. García and M.C. Fuss (eds.), Radiation Damage in Biomolecular Systems, Biological and Medical Physics, Biomedical Engineering, DOI 10.1007/978-94-007-2564-5 14, © Springer Science+Business Media B.V.
- Winkler R., *Plasmaphysik* **27** (1972) 318.
- Winstead C., McKoy V., *J. Chem. Phys.* **125** (2006a) 074302.
- Winstead C., McKoy V., *J. Chem. Phys.* **125** (2006b) 174304.
- Winstead C., McKoy V., *J. Chem. Phys.* **125** (2006c) 244302.
- Winstead C., McKoy V., *J. Chem. Phys.* **127** (2006d) 085105.
- Yanch J. C., Dobrzeniecki A. B., Ramanathan C., Behrman R., *Phys. Med. Biol.* **37** (1992) 853.
- Yanch J. C., Dobrzeniecki A. B., *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **40** (1993) 198.
- Zafar N., Laricchia G., Charlton M., Griffith T. C., *Hyperfine Interactions* **73** (1992) 213.

Zaidi H., Labbé C., Morel C., *Parallel Comput.* **24** (1998) 1523.

Zaidi H., *Med. Phys.* **26** (1999) 574.

Zaidi H., Scheurer A. H., Morel C., *Comput. Methods Programs. Biomed.* **58** (1999) 133.

Zaidi H., *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **47** (2000) 2722.

Zecca A., Sanyal D., Chakrabarti M., Brunger M. J., *J. Phys. B* **39** (2006) 1597.

## Biografija autora

Ana Banković je rođena 21. 06. 1980. godine u Kragujevcu.

Fizički fakultet – smer Teorijska i eksperimentalna fizika je završila na Univerzitetu u Beogradu 2007. godine, sa prosečnom ocenom 8,63. Diplomski rad na temu “Formiranje pozitronijuma kao nekonzervativni proces pri transportu pozitrona kroz molekulske gasove” odbranila je 9. 07. 2007. godine sa ocenom 10. Mentor diplomskog rada je bio akademik Zoran Petrović, naučni savetnik Instituta za fiziku. Rad je nagrađen nagradom fonda „Prof. dr Ljubomir Čirković“ za najbolji diplomski rad odbranjen na Fizičkom fakultetu 2007. godine.

Doktorske studije na Fizičkom fakultetu upisala je 2007. godine. Sve ispite iz izbornih predmeta na doktorskim studijama položila je sa prosečnom ocenom 10.

Ana Banković je u radnom odnosu od 10. jula 2007. godine u Institutu za fiziku u Beogradu. Od 2009. godine je u zvanju istraživač saradnik. Do sada je objavila šest radova u vodećim međunarodnim časopisima sa impakt faktorom većim od 1, pet radova u tematskom zborniku međunarodnog značaja i jedno poglavlje u knjizi. Pored toga, Ana Banković ima još jedan rad predat za publikovanje u vodećem međunarodnom časopisu, koji je prihvaćen za štampu. Rezultati njenog rada su prezentirani i u sklopu četrnaest predavanja po pozivu na međunarodnim konferencijama i u više saopštenja na međunarodnim i domaćim konferencijama.

Прилог 1.

Изјава о ауторству

Потписани-а ANA BANKOVIĆ

број индекса 28/2007

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

Sudari i transport pozitivnog i negativnog: kinetički faktori i mogućnost primene u veterinarstvu

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

Потпис докторанда

У Београду, 20.06.2012.

Ana Banković

Прилог 2.

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора ANA BANKOVIĆ

Број индекса 28/2007

Студијски програм Fizika pozitivnih gena, plazma i kvaliteta opstanka

Наслов рада Sudari i transport pozitivnog i negativnog: kinetički faktori i mogućnost primene u veterinarstvu

Ментор prof. Zoran Ij. Petrović, Dr Sasa Djukić

Потписани/а Ana Banković

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

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

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

Потпис докторанда

У Београду, 20.06.2012.

Ana Banković

Прилог 3.

## Изјава о коришћењу

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

Својом и транспорт позитивне и негативне: Контракти  
феномени; неограничност рачуна и веоинформација

која је моје ауторско дело.

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

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

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

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

Потпис докторанда

У Београду, 20.06.2012.

Ана Бабић

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

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

5. Ауторство – без прераде. Дозвољавање 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. Дозвољавање 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.