

UNIVERZITET U BEOGRADU

FIZIČKI FAKULTET

Jasmina M. Atić

**TRANSPORT ELEKTRONA, RAZVOJ LAVINA
I PROPAGACIJA STRIMERA
U JAKO ELEKTRONEGATIVNIM GASOVIMA**

doktorska disertacija

Beograd, 2022

UNIVERSITY OF BELGRADE

FACULTY OF PHYSICS

Jasmina M. Atić

**ELECTRON TRANSPORT,
DEVELOPMENT OF AVALANCHES
AND STREAMER PROPAGATION
IN STRONG ELECTRONEGATIVE GASES**

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2022

Mentor

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

Članovi komisije za odbranu doktorske disertacije

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

dr Goran Poparić, redovni profesor
Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu

dr Đorđe Spasojević, redovni profesor
Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu

Datum odbrane: _____

Zahvalnica

Doktorska disertacija pod nazivom *Transport elektrona, razvoj lavina i propagacija strimera u jako elektronegativnim gasovima* je urađena u Laboratoriji za neravnotežne procese i primenu plazme Instituta za fiziku u Beogradu, pod rukovodstvom naučnog savetnika dr Saše Dujko. Ova disertacija je u svom najvećem delu realizovana u okviru projekta III41011 Ministarstva prosvete, nauke i tehnološko razvoja Republike Srbije čiji je rukovodilac bila dr Nevena Puač.

Pre svega, zahvalila bih se svom mentoru dr Saši Dujko na prenetom znanju iz oblasti gasne elektronike, dragocenoj pomoći i nesebičnoj podršci u svim fazama rada na ovoj doktorskoj disertaciji. Uz pomoć dr Saše Dujko je definisana tema naučnog istraživanja dok je uz konstruktivne razgovore bazirane na njegovom velikom znanju i višedecenijskom iskustvu u disertaciji prikazan značajan naučni doprinos kao i spektar rezultata kod kojih je tumačenje uočenih specifičnih fenomena dato sa aspekta razumevanja fizičkih interakcija elektrona sa gasovima.

Veliku zahvalnost upućujem nekadašnjem šefu Laboratorije, akademiku dr Zoranu Lj. Petroviću. Zahvaljujući dr Petroviću sam postala član Laboratorije i stekla veliko znanje i iskustvo iz oblasti plazma fizike. Kroz programom predviđena predavanja, neformalne razgovore sa akademikom Petrovićem kao i brojne korisne savete i smernice, iskusila sam zadovoljstvo koje se oseti pri bavljenju istraživanjima iz oblasti fizike.

Želela bih da se zahvalim svojim kolegama iz kancelarije, dr Danku Bošnjakoviću i dr Iliji Simonoviću na svakodnevnom korisnim diskusijama, savetima i pomoći.

Zahvaljujem se i ostalim kolegama, članovima i saradnicima Laboratorije za neravnotežne procese i primenu plazme Instituta za fiziku na interesovanju i podršci tokom svih prethodnih godina.

Veliku zahvalnost upućujem i svojoj nastavnici fizike i elektrotehnike Mileniji Joksimović na postavljanju kvalitetnih temelja i prenetom interesovanju za prirodne nauke koje se kod mene razvilo u doba srednjoškolskih dana.

Jasmina M. Atić

TRANSPORT ELEKTRONA, RAZVOJ LAVINA I PROPAGACIJA STRIMERA U JAKO ELEKTORNEGATIVNIM GASOVIMA

Rezime: U prvom delu ove doktorske disertaciju su proučavani sudarni i transportni procesi elektrona u jako elektronegativnim gasovima. Osnovni motivacioni faktor za ova istraživanja je potraga za inovativnim rešenjima u pogledu zamene sumpor-heksafluorida (SF_6) za izolaciju gasom u visoko-naponskoj tehnologiji. Primenujući tehniku rojeva naelektrisanih čestica koja podrazumeva korišćenje numeričkih rešenja Bolcmanove jednačina i Monte Karlo simulacije, konstruisani su kompletni i samousaglašeni skupovi preseka za rasejanje elektrona u trifluorometil-jodidu (CF_3I), 1,3,3,3 tetrafluoropropanu ($\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$) i 2,3,3,3 tetrafluoro-2-(trifluorometil)propan-nitrilu ($\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$). Na osnovu ovih preseka za rasejanje elektrona, izračunati su transportni koeficijenti u smešama ovih gasova sa Ar, N_2 , CO_2 i SF_6 . Opaženo je opadanje srednje energije elektrona sa porastom električnog polja i negativna diferencijalna provodnost u balk brzini drifta za elektrone u gasovima SF_6 i CF_3I i njihovim smešama. Ovi kinetički fenomeni su diskutovani na osnovu prostorno razloženih karakteristika roja, uključujući lokalnu srednju energiju i lokalne brzinske koeficijente za zahvat elektrona. Izračunata su kritična polja i diskutovan je efekat pozitivne sinergije u smešama SF_6 i $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$.

U drugom delu ove disertacije, proučavani su sudarni i transportni procesi elektrona u parama žive (Hg) i indijuma (In). Konstruisani su skupovi preseka za rasejanje elektrona i proučavano je ponašanje transportnih koeficijenata rojeva elektrona u funkciji električnog polja, pritiska i temperature metalnih para. Posebna pažnja je posvećena uticaju gasnih atoma indijuma, koji se nalaze u prvom pobuđenom metastabilnom stanju ($5s^25p$) $^2\text{P}_{3/2}$ na transportne osobine elektrona. Negativna diferencijalna provodnost u parama žive je objašnjena prisustvom dimera žive. Na osnovu klasičnog fluidnog modela prvog reda, u oba dela disertacije su proučavani tranzicija lavine elektrona u negativni strimer i propagacija strimera u zavisnosti od prirode transportnih koeficijenata, jačine električnog polja, temperature gasa i drugih parametara koji su bili od interesa u ovom radu.

Ključne reči: transport elektrona u gasovima, gasni dielektrici, transport elektrona u metalnim parama, Bolcmanova jednačina, Monte Karlo simulacije, fluidni modeli

Naučna oblast: fizika jonizovanih gasova

Uža naučna oblast: kinetička teorija gasova, plazma fizika, dinamika elektrona u gasovima

UDK broj: 533.7+533.9+537.5

ELECTRON TRANSPORT, DEVELOPMENT OF AVALANCHES AND STREAMER PROPAGATION IN STRONG ELECTRONEGATIVE GASES

Abstract: In the first part of this doctoral dissertation, the collisional and transport processes of electrons in strongly electronegative gases are investigated. The main motivating factor for the study is the search for innovative solutions regarding the replacement of sulfur hexafluoride (SF_6) for gas insulation in high voltage technology. Using a swarm method of deriving cross sections, the complete and self-consistent sets of cross sections for electron scattering in trifluoromethyl-iodide (CF_3I), 1,3,3,3 tetrafluoropropane ($\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$) and 2,3,3,3 tetrafluoro-2-(trifluoromethyl)propane-nitrile ($\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$) are developed. Derived cross-section sets are used as input to solve the Boltzmann equation and perform Monte Carlo simulations of electron transport in the mixtures of these gases with Ar, N_2 , CO_2 and SF_6 . A reduction in mean electron energy with increasing electric field and negative differential conductivity in the bulk drift velocity of electrons in SF_6 and CF_3I gases and their mixtures are observed. These kinetic phenomena are discussed on the basis of the spatially resolved characteristics of the swarm, including the local average energy and the local rate coefficients for electron attachment. Critical electrical fields are calculated and the positive synergy effect of the SF_6 and $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ mixtures is discussed.

The second part of this dissertation focuses on the collisional and transport processes of electrons in mercury and indium vapours. Cross-section sets for electron scattering are constructed, and the behaviour of transport coefficients of electron swarms as a function of the applied electric field, pressure and temperature of metal vapours is studied. Emphasis is placed upon the influence of indium gas atoms, which are in the first excited metastable state ($5s^25p$) $^2\text{P}_{3/2}$ on electron transport properties. It is found that the negative differential conductivity in mercury vapours is caused by the presence of mercury dimers. Using the classical fluid model of the first order, in both parts of the dissertation, the transition of the electron avalanche into a negative streamer and the propagation of the streamer are investigated depending on the nature of transport coefficients, electric field strength, gas temperature, and other parameters that were of interest in this work.

Keywords: electron transport in gases, gaseous dielectrics, electron transport in metal vapours, Boltzmann equation, Monte Carlo simulations, fluid models

Scientific area: physics of ionized gases

Scientific sub-area: kinetic theory of gases, plasma physics, electron dynamics in gases

UDC number: 533.7+533.9+537.5

Sadržaj

Uvod	1
1. Osnovni elementi fizike gasnih dielektrika	8
1.1 Uvod	8
1.2 Izolacija gasom u tehnologiji prenosa električne struje	8
1.3 Istorijski razvoj gasnih dielektrika	10
1.4 Osobine gasnih dielektrika	11
1.5 Očuvanje životne sredine	13
1.5.1 Montrealski protokol	13
1.5.2 Kjoto protokol	16
1.6 Gasni dielektrici poslednje generacije	17
1.7 Toksičnost gasova i njihovih produkata	18
1.8 Zaključak	20
2. Transportna teorija rojeva naelektrisanih čestica u gasovima	21
2.1 Uvod	21
2.2 Roj naelektrisanih čestica	21
2.3 Hidrodinamički režim i definicija transportnih koeficijenata	22
2.3.1 Jednačina kontinuiteta	22
2.3.2 Hidrodinamička aproksimacija	22
2.3.3 Definicije fluks i balk transportnih koeficijenata	23
2.4 Rešavanje Bolcmanove jednačine	24
2.4.1 Tretman ugaone zavisnosti funkcije raspodele: sferno-harmonijska dekompozicija	24
2.4.2 Tretman prostorne zavisnosti funkcije raspodele	25
2.4.3 Tretman zavisnosti funkcije raspodele od intenziteta brzine	25
2.5 Kolizioni operator	26
2.6 Izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona iz Bolcmanove jednačine	27
2.7 Transportni koeficijenti elektrona na osnovu momenata funkcije raspodele	28
2.8 Monte Karlo metod	29
2.8.1 Generator slučajnih brojeva	30
2.8.2 Jednačine kretanja elektrona	30
2.8.3 Određivanje vremenskog trenutka i vrste sudara	32
2.8.4 Izračunavanje parametara rasejanja elektrona	34
2.8.5 Izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona putem Monte Karlo simulacija	35
2.9 Zaključak	35

3. Transport elektrona u trifluorometil-jodidu (CF_3I)	37
3.1 Uvod	37
3.2 Eksperimentalne tehnike za merenje transportnih koeficijenata elektrona	37
3.3 Tehnika rojeva	38
3.4 Inicijalan skup preseka za CF_3I	40
3.5 Konačan skup preseka za CF_3I	41
3.5.1 Izračunavanje preseka za superelastične procese	42
3.6 Transport elektrona u čistom CF_3I na višim vrednostima redukovanog električnog polja	43
3.7 Transport elektrona u $\text{CF}_3\text{I-Ar}$ i $\text{CF}_3\text{I-CO}_2$ smešama	46
3.7.1 $\text{CF}_3\text{I-Ar}$ smeša	46
3.7.2 $\text{CF}_3\text{I-CO}_2$ smeša	50
3.8 Zaključak	52
4. Tehnike reskaliranja rojeva elektrona u Monte Karlo simulacijama	54
4.1 Uvod	54
4.2 Efekti zahvata elektrona i tehnike reskaliranja	54
4.3 Skupovi preseka i uslovi simulacija	56
4.4 Tehnike reskaliranja elektrona	57
4.5 Transportni koeficijenti elektrona u SF_6 i CF_3I	59
4.5.1 Srednja energija	60
4.5.2 Brzina drifta	64
4.5.3 Koeficijenti difuzije	68
4.5.4 Koeficijenti jonizacije i zahvata	70
4.6 Poređenje tehnika reskaliranja	70
4.7 Transport elektrona u $\text{SF}_6\text{-CF}_3\text{I}$ smešama	72
4.8 Zaključak	76
5. Transport elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$	77
5.1 Uvod	77
5.2 Gas $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$	77
5.3 Transport elektrona nezavisan od pritiska	78
5.3.1 Inicijalan skup preseka	78
5.3.2 Konačan skup preseka	78
5.3.3 Transport elektrona u čistom $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$	79
5.3.4 Transport elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{-Ar}$ smešama	80
5.3.5 Transport elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{-N}_2$ smešama	83
5.4 Nehidrodinamički efekti: transport elektrona na raznim pritiscima gasa	86
5.4.1 Skup preseka za rasejanje elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ zavisao od pritiska	86
5.4.2 Transport elektrona u čistom $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ na različitim pritiscima	87
5.4.3 Transport elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{-CO}_2$ i $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{-SF}_6$ smešama	91
5.5 Zaključak	93
6. Transport elektrona u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$	95
6.1 Uvod	95
6.2 Fizičke i hemijske osobine $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ gasa	95
6.3 Sudarne i transportne osobine elektrona u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$	96
6.3.1 Inicijalan skup preseka	96
6.3.2 Konačan skup preseka	96
6.3.3 Transport elektrona u čistom $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$	97
6.3.4 Transport elektrona u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N-Ar}$ smešama	99
6.3.5 Transport elektrona u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N-N}_2$ smešama	102

6.3.6	Transport elektrona u $C_4F_7N-CO_2$ i $C_4F_7N-SF_6$ smešama	104
6.4	Zaključak	108
7.	Negativni strimeri u jako elektronegativnim gasovima	109
7.1	Uvod	109
7.2	Modelovanje neravnotežnih plazmi	109
7.3	Fluidne jednačine	110
7.4	Fluidni modeli strimera	112
7.4.1	Klasičan 1-dimenzioni fluidan model	112
7.4.2	Korigovan 1-dimenzioni fluidan model	115
7.4.3	Klasičan 1.5-dimenzioni fluidan model	116
7.4.4	Korigovan 1.5-dimenzioni fluidan model	117
7.5	Negativni strimeri u gasovima i gasnim smešama	117
7.5.1	Razvoj i propagacija strimera u funkciji spoljašnjeg električnog polja	118
7.5.2	Razvoj i propagacija strimera u funkciji numeričke procedure za izračunavanje ulaznih podataka	119
7.5.3	Razvoj i propagacija strimera u funkciji konfiguracije fluidnog modela	121
7.5.4	Razvoj i propagacija strimera u funkciji fluidnih modela	123
7.5.5	Brzina fronta strimera u čistom jako elektronegativnom gasu	125
7.5.6	Razvoj i propagacija strimera u funkciji sastava gasne smeše	128
7.6	Zaključak	129
8.	Poređenje osobina gasova CF_3I, $C_3H_2F_4$ i C_4F_7N sa SF_6	130
8.1	Uvod	130
8.2	Poređenje molekularne strukture, fizičkih i hemijskim osobina gasova CF_3I , $C_3H_2F_4$ i C_4F_7N sa SF_6	130
8.3	Poređenje transportnih koeficijenata elektrona u CF_3I , $C_3H_2F_4$, C_4F_7N sa SF_6	132
8.4	Poređenje kritičnih električnih polja u CF_3I , $C_3H_2F_4$, C_4F_7N i SF_6 i njihovim smešama	133
8.5	Poređenje karakteristika strimera u CF_3I , $C_3H_2F_4$, C_4F_7N i SF_6 i njihovim smešama	135
8.6	Zaključak	137
9.	Transport elektrona u parama žive i indijuma	139
9.1	Uvod	139
9.2	Transport elektrona u parama žive	139
9.2.1	Preseci za rasejanje elektrona u parama žive	140
9.2.2	Zavisnost transportnih koeficijenata elektrona od pritiska i NDC efekat	140
9.2.3	Zavisnost transportnih koeficijenata elektrona od temperature	143
9.3	Transport elektrona u parama indijuma	146
9.3.1	Preseci za rasejanje elektrona u parama indijuma	146
9.3.2	Transportni koeficijenti elektrona u parama indijuma	149
9.3.3	Razvoj i propagacija strimera u parama indijuma	153
9.4	Zaključak	158
	Zaključak	160
	Literatura	169

Uvod

Jako elektronegativni gasovi su grupa gasova okarakterisana velikom sposobnošću formiranja dugoživećih negativnih jona (vreme života duže od $1\mu s$) [1]. Ova osobina proističe iz velikog afiniteta prema elektronu koga poseduju atomi koji se nalaze u molekularnom sastavu ovih gasova. Zahvatom slobodnih elektrona od strane molekula jako elektronegativnog gasa smanjuje se njihov broj, usporavanjem preostalih elektrona u velikom broju neelastičnih sudara sa molekulima smanjuje se mogućnost akumulacije velike količine energije a time i mogućnost za nastanak novih elektrona u procesima sudarne elektronske jonizacije. Ovakav mehanizam kontrole multiplikacije elektrona je izuzetno poželjan kod gasova koji se koriste kao dielektrici za izolovanje pojedinačnih delova opreme u sistemima za prenos električne energije. Ograničavanjem i kontrolom broja elektrona u gasu se značajno smanjuje mogućnost razvoja strimerskih pražnjenja koja predstavljaju osnovni mod za proboj u gasu na atmosferskom i višim pritiscima. Sprečavanjem pojave strimera se izbegavaju situacije koje mogu dovesti do oštećenja opreme u srednje-naponskoj i visoko-naponskoj tehnologiji.

Pored primene u srednje-naponskoj i visoko-naponskoj tehnologiji za izolaciju gasom, jako elektronegativni gasovi se koriste u mikroelektronici za depoziciju tankih filmova i nagrizanje površina [2, 3], ali kao i izvori negativnih jona [4, 5]. Kada se koriste kao dielektrici u sistemima za prenos električne struje, jedan od najpoznatijih gasova je svakako sumpor-heksafluorid (SF_6). Ovaj gas ima izuzetne karakteristike koje se, pre svega, ogledaju u zadržavanju poželjnih dielektričnih osobina sa stanovišta aplikacija do visokih vrednosti električnih polja. Međutim, SF_6 ima izuzetno dugo atmosfersko vreme života i jako veliki faktor globalnog zagrevanja. Kako je sve veća svest istraživača i šire javnosti o značaju sprečavanja daljeg porasta temperature na planeti Zemlji, potraga za zamenom SF_6 gasa je jedna od vodećih tema savremene nauke.

Pojavi električnog pražnjenja u gasu prethodi razvoj strimera [6]. Razumevanje procesa razvoja i propagacije strimera u gasovima je od ključnog značaja za sprečavanje oštećenja industrijske opreme za čiju izolaciju se koriste jako elektronegativni gasovi. Prvi korak u numeričkom modelovanju razvoja i propagacije strimera je razumevanje sudarnih i transportnih procesa elektrona u neutralnim gasovima. Ovi procesi su predmet proučavanja fizike rojeva naelektrisanih čestica koja predstavlja osnovu za razvoj modela sudarno dominantnih neravnotežnih plazmi [7–10]. Konstrukcija i razvoj skupova preseka za rasejanje elektrona se nalazi u temelju ovih istraživanja. Nije opravdano očekivanje da skup preseka, koji je dobijen direktnom kompilacijom podataka iz literature za preseke

pojedinačnih sudarnih procesa, obezbedi dobar balans broja naelektrisanih čestica, njihovog impulsa i energije u modelima strimerske plazme. Bez obzira na pouzdanost merenja/proračuna pojedinačnih preseka, neophodno je da skup preseka reprodukuje dobro slaganje sa eksperimentalno određenim transportnim koeficijentima rojeva elektrona. Ovo slaganje se može postići reskaliranjem skupa preseka primenjujući tehniku rojeva neelektrisanih čestica [7, 8]. U ovoj iterativnoj proceduri, polazeći od inicijalnog skupa preseka i ustanovljenog neslaganja sa referentnim eksperimentalnim podacima, pristupa se modifikaciji preseka sve dok se ne postigne zadovoljavajuće slaganje između eksperimentalno određenih i teorijski izračunatih transportnih koeficijenata. Ova tehnika je razvijena šezdesetih godina prošlog veka u radovima Cromptona, Phelps-a i njihovih saradnika [11–14], a na mnogo različitih aspekata je usavršena u radovima Petrovića i saradnika [7, 8, 15, 16]. Ova metoda ima svoje prednosti i nedostatke u odnosu na druge tehnike za određivanje preseka za rasejanje naelektrisanih čestica na neutralnim atomima/molekulima gasa. Danas se smatra da je tehnika rojeva naelektrisanih čestica nezavisna i komplementarna metoda u odnosu na direktna eksperimentalna merenja sudarnih preseka i teorijske proračune. Veoma važnu ulogu ima ne samo za određivanje i normalizaciju preseka za rasejanje elektrona, već i u domenu pozitivnih i negativnih jona [17–19]. Sa druge strane, što se tiče rojeva elektrona, ova metoda igra veoma važnu ulogu u oblastima niskih energija elektrona, imajući u vidu da eksperimentalne tehnike za direktno merenje preseka imaju čitav niz poteškoća, od kojih je nedovoljna energijska rezolucija snopova elektrona jedna od najočiglednijih.

Imajući u vidu veliku osetljivost funkcije raspodele elektrona na prisustvo drugih atoma i/ili molekula, od posebnog interesa za metodu rojeva elektrona je korišćenje eksperimentalno određenih transportnih koeficijenata u gasnoj smeši koju čine ispitivani gas i druga komponenta čije preseke dobro poznajemo. Na ovaj način je moguće precizno odrediti preseke za individualne sudarne procese ispitivanog gasa u onoj oblasti energija u kojoj ovi procesi ne postoje u nosećem gasu čije preseke dobro poznajemo. Na ovaj način se može odrediti presek za zahvat elektrona molekula jako elektronegativnog gasa u smešama sa nekim od plemenitih gasova [20–32]. Prisustvo male količine elektronegativnog gasa ne menja funkciju raspodele elektrona, ali omogućava proračun brzinskog koeficijenta za zahvat elektrona. Na osnovu zavisnosti brzinskog koeficijenta za zahvat elektrona od primenjenog električnog polja, inverzijom je moguće konstruisati presek za zahvat elektrona u funkciji energije elektrona.

Transportni procesi elektrona u neutralnim gasovima se mogu proučavati na osnovu numeričkih rešenja Bolcmanove jednačine [9, 33, 34], simulacija baziranih na Monte Karlo metodi [35–39] i u okviru teorije prenosa impulsa [9, 40–42]. U literaturi postoji veliki broj radova u kojima je osnova za rešavanje Bolcmanove jednačine sferno-harmonijski razvoj funkcije raspodele u brzinskom prostoru i odsecanje ovog razvoja na prva dva člana [43, 44]. Iako je dobro poznato da je aproksimacija dva člana validna procedura isključivo za lake naelektrisane čestice koje se pretežno elastično sudaraju sa atomima/molekulima pozadinskog gasa, mnogo puta je ova aproksimacija korišćena u situacijama u kojima neelastični sudari kontrolišu ponašanje roja [8]. Nekonzervativni sudarni procesi u kojima dolazi do promene broja naelektrisanih čestica u roju se ubrajaju u neelastične sudare. U jako elektronegativnim gasovima, koji su predmet istraživanja u ovoj disertaciji, nekonzervativni sudarni procesi su od ključnog značaja, jer upravo ovi procesi su odgovorni za dielektrične osobine gasova. U tom smislu, od velikog je značaja proćavanje domena primenljivosti aproksimacije dva člana i drugih aproksimativnih teorija za rešavanje Bolcmanove jednačine.

U prisustvu nekonzervativnih sudara, razlikuju se dve familije transportnih koeficijenata: fluks i balk. Dualna priroda transportnih koeficijenata je prepoznata u okviru hidrodinamičke kinetičke teorije transporta naelektrisanih čestica početkom 1990-tih [45], iako su radovi iz 1970-ih od suštinskog značaja za razumevanje prirode transportnih koeficijenata [46–49]. U ovim istim ranim radovima, prepoznato je da priroda transportnih veličina zavisi od načina observacije roja naelektrisanih čestica u eksperimentima sa rojevima naelektrisanih čestica. U hidrodinamičkim uslovima, dakle u oblasti daleko od graničnih površina, izvora i ponora naelektrisanih čestica, opaženo je da se fluks i balk transportni koeficijenti mogu međusobno kvantitativno razlikovati od nekoliko procenata do

nekoliko redova veličina [48, 49]. Ove dve familije transportnih koeficijenata se mogu i kvalitativno razlikovati i u tom smislu ove kvalitativne razlike se često svrstavaju u kinetičke fenomene transporta elektrona [50, 51]. U okviru ove disertacije, opaženo je nekoliko kinetičkih fenomena u transportu elektrona u jako elektronegativnim gasovima koji do sada nisu zabeleženi u literaturi.

Simulacije bazirane na Monte Karlo metodi takođe imaju svoje specifičnosti kada je u pitanju ispitivanje transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima. Intenzivnim gubitkom elektrona u procesu zahvata od strane molekula jako elektronegativnog gasa, veoma često dolazi do smanjenja statističke pouzdanosti veličina koje figurišu u izrazima za izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona. U ekstremnim slučajevima, simulacije mogu biti potpuno zaustavljene pre dostizanja stacionarnog stanja zbog prevelikog, ili potpunog gubitka elektrona. Jedan od načina za kompenzaciju gubitka velikog broja elektrona u simulaciji je upotreba tehnika reskaliranja [52]. Ovim tehnikama se obezbeđuje održavanje broja elektrona u simulaciji na nivou unapred zadatog početnog broja elektrona čime je omogućeno dostizanje stacionarnog stanja sistema u kome izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona jedino ima smisla. Nadoknađivanje broja elektrona mora biti sprovedeno na način kojim se ne menja funkcija raspodele, što zahteva sprečavanje pojave indukovanih gradijenata u konfiguracionom prostoru koji nisu posledica realnih fizičkih procesa, već su povezani sa ograničenjima numeričkog tretmana roja naelektrisanih čestica.

S obzirom na značaj pronalaska zamene za SF_6 gas u industriji prenosa električne struje, u ovoj disertaciji biće sistematski upoređene sudarne i transportne osobine elektrona u SF_6 gasu sa onima u trifluorometil-jodidu (CF_3I), 1,3,3,3 tetrafluoropropanu ($\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$) i 2,3,3,3 tetrafluoro-2-(trifluorometil)-propan-nitrilu ($\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$) i njihovim smešama sa argonom (Ar), azotom (N_2) i ugljendioksidom (CO_2). Veoma važno mesto ovim proučavanjima ima analiza tranzicije lavine elektrona u strimer i propagacija negativnih strimera u ovim gasovima. Strimeri su uski kanali neravnotežne plazme čija dinamika je kontrolisana ostrim gradijentom koncentracije elektrona na frontu propagacije i efektima prostornog naelektrisanja. Radi se o nelinearnom, nehidrodinamičkom, nestacionarnom i nelokalnom fenomenu koji zahteva sofisticirano modelovanje i poznavanje kako sudarnih tako i transportnih osobina naelektrisanih čestica. U dosadašnjoj praksi, strimeri su modelovani u SF_6 gasu i njegovim smešama sa N_2 . U najvećem broju slučajeva, strimeri su modelovani u sintetičkom vazduhu (smeša $\text{N}_2:\text{O}_2=80:20$) sa ciljem interpretacije eksperimentalnih rezultata koji su dobijeni u električnim merenjima, metodama optičke spektroskopije ili snimanjem ICCD kamerama.

Jedan od načina za numeričko modelovanje razvoja i propagacije strimera je rešavanje sistema parcijalnih diferencijalnih jednačina koje opisuje balanse koncentracije, impulsa i energije naelektrisanih čestica. Ove jednačine se moraju spregnuti sa Puasonovom jednačinom da bi se opisali efekti prostornog naelektrisanja i obezbedio koncept samousaglašenog polja. Jednačine balansa koncentracije, impulsa i energije se mogu dobiti na osnovu prvih principa ili integracijom Bolcmanove jednačine u brzinskom prostoru. Sistem fluidnih jednačina se mora zatvoriti primenom neke od fenomenoloških aproksimacija, kao što je aproksimacija lokalnog polja. Modeli koji su koncipirani na ovaj način obično se kolokvijalno nazivaju fluidni modeli, imajući u vidu da se strimerska plazma posmatra kao kontinualna sredina. Pored fluidnih modela, važno mesto u modelovanju strimera imaju Particle in Cell/Monte Carlo modeli (PIC/MC) i hibridni modeli koji kombinuju fluidne jednačine, kojima se opisuje kinetika sporih elektrona i jona, i Monte Karlo metodu kojom se prate brzi neravnotežni elektroni na frontu strimera.

U ovoj disertaciji, biće razmatran razvoj i propagacija strimera u 1 dimenziji (1D) i 1.5 dimenziji (1.5D). U 1.5D, jednačine balansa se rešavaju u 1D, a Puasonova jednačina se rešava podrazumevajući aksijalnu simetriju pri čemu je raspodela naelektrisanja duž radijalnog pravca uniformna. Biće razmotren razvoj i propagacija strimera, a primenjujući klasičan fluidni model koji je baziran na drift-difuzionoj aproksimaciji, biće izračunate koncentracije naelektrisanih čestica, raspodela električnog polja i brzina propagacije strimera u jako elektronegativnim gasovima. Ovi rezultati će biti testirani korigovanim fluidnim modelom prvog reda, koji je baziran na razvoju izvornog člana u drift-difuzionoj aproksimaciji u stepeni red po gradijentima koncentracije elektrona. Korigovan fluidni

model bolje opisuje nelokalne efekte nekonzervativnih sudara i u tom smislu je superiorniji u pogledu opisa prostorne nelokalnosti ovih procesa. Ovaj model je korišćen u modelovanju strimerskog pražnjenja u detektorima sa ravnim pločastim elektrodama. Koristeći ove modele, biće ispitana osetljivost propagacije strimera na prirodu transportnih koeficijenata i način njihovog proračuna. Standardna analiza uključuje proučavanje propagacije strimera u funkciji spoljašnjeg električnog polja, koja moraju biti veća od kritičnog polja da bi uopšte došlo do tranzicije lavine elektrona u strimer.

Proučavanja transporta elektrona i propagacije strimera u gasnim smešama su od posebnog značaja. U prošlosti su opaženi efekti pozitivne sinergije u gasnim smešama koju čine SF_6 gas i drugi gasovi. Ovaj efekat podrazumeva porast kritičnog polja uz istovremeno smanjivanje koncentracije SF_6 gasa u gasnoj smeši, pri čemu je kritično polje druge komponente mnogo manje u odnosu na čist SF_6 gas. Primeri uključuju gasne smeše C_3F_6 i SF_6 , SO_2 i SF_6 , CCl_2F_2 i SF_6 i C_3F_8 i SF_6 . U ovoj disertaciji je opažen efekat pozitivne sinergije u smeši $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ i SF_6 , čime je potvrđeno opažanje grupe sa ETH univerziteta u Cirihi.

Na osnovu prethodne diskusije, u ovoj disertaciji će biti razmotrene dielektrične osobine poslednje generacije gasnih dielektrika sa ultra niskim potencijalima za globalno zagrevanje primenjujući kombinovana proučavanja sudarnih i transportnih procesa elektrona, simulacije razvoja i propagacije strimera, i konačno razmatrajući molekularnu strukturu, fizičke i hemijske osobine ovih molekula. Ovde je veoma važno naglasiti da sudarni preseki koji su dobijeni primenjujući tehniku rojeva naelektrisanih čestica su efektivni preseki koji će obezbediti dobar balans broja naelektrisanih čestica, njihov impuls i energiju u fluidnim modelima strimerskih pražnjenja. Ovi preseki se ne mogu koristiti u plazma-hemijskim modelima, jer ovi modeli zahtevaju da pored kompletnosti i samousaglašenosti skupa preseka kao celine, preseki za individualne sudarne procese precizno reprezentuju ove procese na jedinstven način. Tokom rada na ovoj disertaciji, u literaturi se nisu mogli pronaći preseki za individualne sudarne procese, a istovremeno postojala je velika potreba da se testiraju nova inovativna rešenja za izolaciju gasom u visoko-naponskoj tehnologiji. Slična situacija postoji u zajednici fizičara koja se bavi optimizacijom, dizajnom i projektovanjem gasnih detektora čestica visokih energija. Uprkos tome da freoni koji se koriste u gasnim detektorima sa ravnim pločastim elektrodama pokazuju dobre efekte primarne jonizacije, ove supstance imaju nedostatke koji se ogledaju u činjenici da su veoma štetni za atmosferu naše planete, a sa druge strane odgovorni su za sintezu jedinjenja koja se u procesu depozicije nagomilavaju na elektrodama detektora, čime se u značajnoj meri kvare karakteristike detektora.

Dok se pojava strimerskih pražnjenja u sistemima za prenos električne energije mora ograničiti i kontrolisati primenom gasnih dielektrika koji minimalno doprinose globalnom zagrevanju planete, sa druge strane, u ovoj disertaciji su razmotrena strimerska pražnjenja u metalnim parama, čije razumevanje je od ključnog značaja za razvoj i optimizaciju izvora svetlosti koji funkcionišu na principima električnih gasnih pražnjenja. Jedan od ključnih problema u ovoj aktivnosti fizičara plazme je potraga za adekvatnom zamenom žive (Hg) u gasnim smešama koje se koriste u lampama različite konstrukcije u pogledu prenosa snage u sistem na niskom i visokom pritisku. Upotreba žive u Evropskoj Uniji je dozvojena u različitim tipovima gasnih lampi, ali u manjim i zakonom ograničenim količinama. U tom smislu, danas se ulažu veliki napor za pronalazak adekvatne zamene žive u izvorima svetlosti, uključujući fluorescentne lampe i lampe velike izlazne snage fluksa zračenja, kao što su lampe sa parama metalnih halida. U ovim izvorima svetlosti, prisustvo atoma žive omogućuje postizanje povoljnijih uslova za proboj u gasu, imajući u vidu da metastabilni atomi žive u sudarima sa atomima druge gasne komponente podržavaju procese jonizacije. Istovremeno, deeksitacijom pobuđenih atoma žive emituju se fotoni sa talasnom dužinom od 253.7 nm, a upravo na ove fotone je osetljiv fosfor kojim je veoma često premazana unutrašnjost lampe. Iz očevidnih razloga, razumevanje sudarnih i transportnih procesa elektrona u parama žive je od ključnog značaja za razvoj i optimizaciju izvora svetlosti.

U literaturi se mogu pronaći skupovi preseka za rasejanje elektrona u parama žive različitog nivoa pouzdanosti i preciznosti. Transportni koeficijenti rojeva elektrona se takođe mogu pronaći u liter-

aturi, ali može se uočiti nekoliko sistemskih nedostataka ovih podataka. Prvo, efekat termalnog kretanja atoma čive na transport elektrona je u najvećem broju slučajeva zanemaren, iako su temperature u parama žive za neke izvore svetlosti veoma visoke, ponekad i nekoliko hiljada Kelvina. Drugo, u dosadašnjim proračunima transportnih koeficijenata, sistematski je zanemarena dualna priroda transportnih koeficijenata i obično su isključivo fluks transportni koeficijenti prikazivani u funkciji spoljašnjeg električnog polja. Konačno, sistematski je zanemareno nehidrodinamičko ponašanje transportnih koeficijenata rojeva elektrona koje se ogleda u njihovoj zavisnosti od temperature i pritiska gasa. Pored činjenice da je u najvećem broju slučajeva transport elektrona proučavan primenjujući aproksimaciju dva člana za rešavanje Bolcmanove jednačine, svi ovi nedostaci u ranijim istraživanjima su zapravo bili motivacioni faktori za ovu disertaciju.

Potencijalni kandidati za zamenu žive u izvorima svetlosti su indijum-bromid [53] i smeša gasova koju čine halogeni elementi i metalna para indijuma u prisustvu argona [54–56]. Upravo iz ovih razloga, postoji očigledna potreba za razumevanjem sudarnih i transportnih osobina elektrona u parama indijuma. Ništa manje važna potreba postoji za razumevanjem razvoja i propagacije strimera u parama ovog metala. Međutim, u literaturi ne postoje skupovi preseka za rasejanje elektrona u ovom gasu već samo preseki za individualne sudarne procese. Malobrojni rezultati koji se odnose na transportne koeficijente za elektrone u ovom gasu nisu dobijeni uzimanjem u obzir činjenice da sa porastom temperature gasa dolazi do povećanja koncentracije gasnih atoma indijuma koji se nalaze u prvom pobuđenom metastabilnom stanju $(5s^25p)^2P_{3/2}$. Preseki za rasejanje elektrona prvog pobuđenog metastabilnog stanja se razlikuju u odnosu na one sa osnovnog stanja atoma i moraju biti uključeni u skup ulaznih podataka prilikom razmatranja transporta elektrona i propagacije strimera na visokim temperaturama pare ovog metala.

Konstrukcija skupova preseka za rasejanje elektrona u parama žive i parama indijuma je bio prvi gradivni element u izgradnji modela strimerskih pražnjenja u ovim metalnim parama. Na osnovu preseka za rasejanje elektrona, transportni koeficijenti su izračunati u funkciji spoljašnjeg električnog polja i temperature gasa, a efekti termalnog kretanja gasnih atoma na transport elektrona i dualna priroda transportnih koeficijenata su razmatrani i iskorišćeni u razvoju strimerskih pražnjenja. Sličnih rezultata nema u literaturi i naši rezultati su prvi ovakve vrste.

Ova doktorska disertacija je koncipirana na sledeći način:

Prvo poglavlje ove doktorske disertacije je posvećeno sistematskom pregledu gasova koji se koriste kao gasni dielektrici u sistemima za prenos električne struje. Nakon definicije električnog proboja u gasovima i diskusije koja se odnosi na pojedinačne faze u razvoju strimerskog pražnjenja, biće istaknuti mehanizmi kojima se ovaj proces može kontrolisati i suzbiti u cilju sprečavanja oštećenja industrijske opreme. Jedan od najčešće korišćenih gasova u ovoj ulozi je sumporheksafluorid (SF_6) koji se, pored izvanrednih dielektričnih osobina, odlikuje izrazito velikim potencijalom globalnog zagrevanja i izuzetno dugim atmosferskim vremenom života. Polazeći od fizičkih i hemijskih osobina gasova, njihovog atomskog sastava, molekularne strukture, tipova hemijskih veza između atoma koji ih čine kao i toksičnosti kako gasova tako i njihovih produkata, biće date smernice za odabir potencijalnih kandidata za zamenu SF_6 u ulozi gasnog dielektrika u sistemima za prenos električne energije.

Drugo poglavlje ove disertacije je posvećeno transportnoj teoriji naelektrisanih čestica u gasu, sa posebnim akcentom na rojeve elektrona. Nakon definicije roja i hidrodinamičkog režima, biće opisana dualna priroda transportnih koeficijenata koja je posledica eksplicitnih efekata nekonzervativnih sudara elektrona i molekula gasa. Nakon ovoga će biti prikazani osnovni elementi teorije za rešavanje Bolcmanove jednačine koja je bazirana na razvoju funkcije raspodele u više članova u brzinskom prostoru i osnovni koraci numeričkih simulacija baziranih na Monte Karlo metodi.

Treće poglavlje doktorske disertacije je posvećeno ispitivanju transporta elektrona u trifluorometiljodidu (CF_3I), jednom od potencijalnih zamena za SF_6 . Osim u čistom gasu, transport elektrona će biti simuliran i u njegovim smešama sa argonom i ugljendioksidom u opsegu električnih polja u kome postoje rezultati eksperimentalnih merenja transportnih koeficijenata. Primenjujući tehniku rojeva

naelektrisanih čestica konstruisani su skupovi preseka za rasejanje elektrona u CF_3I i CO_2 koji, kada se koriste kao ulazni podaci za rešavanje Bolcmanove jednačine ili u Monte Karlo simulacijama, obezbeđuju slaganja sa referentnim eksperimentalnim podacima za transportne koeficijente. Pored ove dve originalne metode koje su razvijene u Laboratoriji za neravnotežne procese i primenu plazme Instituta za fiziku, u ovoj disertaciji je korišćen javno dostupan kompjuterski kod BOLSIG+ koji je zasnovan na aproksimaciji dva člana za rešavanje Bolcmanove jednačine.

Četvrto poglavlje je posvećeno tehnikama za reskaliranje rojeva elektrona u Monte Karlo simulacijama transportnih procesa u jako elektronegativnim gasovima. Prikazane su, diskutovane i analizirane tri različite tehnike: tehnika diskretnog reskaliranja, tehnika dupliranja roja kao i tehnika kontinualnog reskaliranja rojeva elektrona koja je razvijena u okviru ove disertacije. Transportni koeficijenti elektrona će biti izračunati u gasovima SF_6 , CF_3I kao i u njihovim smešama. Posebna pažnja je posvećena analizi kinetičkih fenomena u transportu elektrona koji su indukovani eksplicitnim uticajem zahvata elektrona.

U petom poglavlju disertacije je ispitivan transport elektrona u 1,3,3,3 tetrafluoropropanu ili HFO-1234ze ($\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$), jednom od gasova iz poslednje generacije gasnih dielektrika koji se odlukuju ultra niskim potencijalom za globalno zagrevanje. Skup preseka za rasejanje elektrona u ovom gasu koji obezbeđuje slaganje sa eksperimentalnim vrednostima transportnih koeficijenata na fiksiranom pritisku gasa. Pored toga, prikazana je dopunska verzija preseka koja dobro opisuje nehidrodinamičko ponašanje brzinskog koeficijenta efektivne jonizacije koje se ogleda u zavisnosti ovog transportnog koeficijenta od pritiska. Transportni koeficijenti rojeva elektrona su izračunati na osnovu numeričkih rešenja Bolcmanove jednačine i u Monte Karlo simulacijama koje su opisane u trećem poglavlju disertacije kako u čistom gasu tako i u njegovim smešama sa Ar, N_2 , CO_2 i SF_6 .

U šestom poglavlju disertacije je prikazan razvoj skupa preseka za rasejanje elektrona u 2,3,3,3 tetrafluoro-2-(trifluorometil)propan-nitrilu ($\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$), još jednom od gasova sa ultra niskim potencijalom za globalno zagrevanje. Ova gasna supstanca se odlikuje izuzetno visokim kritičnim poljem, približno 2.5 puta većim od onoga za SF_6 gas. Transportni koeficijenti rojeva elektrona u čistom gasu i njegovim smešama sa Ar, N_2 , CO_2 i SF_6 su analizirane sa ciljem razumevanja dielektričnih osobina ovih gasova i njihove potencijalne primene za izolaciju srednje-naponskih i visoko-naponskih komponenti u sistemima za prenos električne energije.

U sedmom poglavlju disertacije su sumirani rezultati modelovanja razvoja i propagacije negativnih strimera u gasovima i gasnim smešama analiziranim u prethodnim poglavljima. Rezultati simulacija su dobijeni na osnovu klasičnog i korigovanog fluidnog modela prvog reda u 1D i 1.5D konfiguracijama. Ovi fluidni modeli koriste transportne koeficijente i druge transportne osobine rojeva elektrona koji su analizirani u prethodnim poglavljima. Ispitivaće se uticaj jačine spoljašnjeg električnog polja, prirode ulaznih podataka, konfiguracije i vrste fluidnih modela kao i sastava gasne smeše na proces razvoja i propagacije strimera. Brzine propagacije negativnih strimera, koje su izračunate u okviru 1D fluidnog modela, biće upoređene sa brzinama propagacije koje se mogu dobiti na osnovu jednostavnih analitičkih teorija za opis propagacije planarnog jonizacionog fronta.

U osmom poglavlju su sumirane i upoređene različite osobine gasova CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$, $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ sa SF_6 gasom koje su od značaja sa stanovišta primena u domenu srednje-naponske i visoko-naponske tehnologije. Rezultati ovog poglavlja će predstavljati detaljnu analizu formirane baze podataka o sudarnim i transportnim podacima elektrona kao i rezultata modelovanja razvoja i propagacije strimera u ispitivanim gasovima. Na osnovu poređenja sudarnih i transportnih osobina elektrona u ovim gasovima, kao i na osnovu analize propagacije strimera u ovim gasovima, biće predložene alternative za SF_6 gas.

Deveto poglavlje doktorske disertacije je posvećeno ispitivanju transporta elektrona u parama žive i indijuma. Na osnovu skupa preseka za rasejanje elektrona u parama žive, koji je konstruisan u ovoj disertaciji, analiziraće se uticaj dimera žive na transport elektrona na različitim pritiscima gasa. U okviru ovog poglavlja će biti prikazan skup preseka za rasejanje elektrona u parama indijuma imajući u vidu potrebu za zamenom toksične žive u izvorima svetlosti koji rade na principima električnih

gasnih pražnjenja. Pored skupa preseka za rasejanje elektrona sa osnovnog energijskog nivoa, biće prikazan skup preseka za rasejanje elektrona sa prvog pobuđenog metastabilnog stanja atoma indijuma u gasnoj fazi imajući u vidu da se veliki broj atoma nalazi u ovom stanju u oblasti temperatura gasa koje su od interesa za izvore svetlosti. Radi ispravnog izračunavanja transportnih koeficijenata elektrona na visokim temperaturama pare indijuma (reda veličine nekoliko hiljada K), u skup preseka će biti uključeni i preseki za superelastične sudare izračunati principom detaljnog balansa. Razvoj i propagacija strimera u parama indijuma će biti ispitivani klasičnim fluidnim modelom u 1D i 1.5D konfiguraciji, a posebna pažnja će biti posvećena proučavanju osetljivosti parametara strimerske plazme na prisustvo metastabilnih gasnih atoma indijuma.

U zaključku su sumirani najvažniji rezultati i originalni doprinosi disertacije kao i značaj postignutih rezultata u okviru kinetičke teorije neravnotežnih plazmi. Prikazani rezultati će poslužiti za identifikaciju budućih tema istraživanja.

Poglavlje 1

Osnovni elementi fizike gasnih dielektrika

1.1 Uvod

U ovom poglavlju je najpre definisan električan proboj u gasu, faze njegovog razvoja i mehanizmi kontrole ovog procesa. Vodeći se pomenutim mehanizmima, poznavajući fizičke i hemijske osobine gasova, njihovu molekularnu strukturu, atomski sastav i međusobnu zavisnost ovih parametara, date su smernice za odabir gasova i gasnih smeša koje su potencijalna zamena SF₆ gasa u ulozi dielektrika u sistemima za prenošenje električne struje. Posebna pažnja je skrenuta na očuvanje životne sredine, jednu od tema koja je u fokusu istraživanja naučnika širom sveta u cilju smanjenja efekta staklene bašte i zaštite ozonskog omotača planete Zemlje.

1.2 Izolacija gasom u tehnologiji prenosa električne struje

Osnovna karakteristika dielektričnih materijala je onemogućavanje protoka električne struje. Ova osobina je posledica jakih međuatomskih hemijskih veza u molekulima dielektričnih materijala. Grupa dielektričnih gasova poznata pod nazivom elektronegativni gasovi, specifična je i po sposobnosti vezivanja slobodnih elektrona. Kao posledica velikog afiniteta prema elektronu, neutralni molekuli elektronegativnih gasova lako zahvataju slobodne elektrone čime postaju negativni joni. Jako elektronegativni gasovi u svom sastavu imaju takve atome i vrste hemijskih veza koje obezbeđuju jako visoku vrednost afiniteta prema elektronu. Njihova velika efikasnost u zahvatanju slobodnih elektrona ih čini poželjnim u primenama u kojima je cilj sprečavanje pojave električnih pražnjenja u gasovima. Jedna od takvih primena su sistemi za prenos električne struje.

Dielektrici se mogu javiti u tri agregatna stanja. Upotreba dielektrika u gasovitom agregatnom stanju u sistemima za prenos električne struje donosi velike benefite. Mala masa, relativno jednostavan dizajn industrijske opreme, potpun povratak performansi sistema na početan nivo nakon električnih pražnjenja, mogućnost ugradnje pokretnih delova u sistem i pristupačna cena su neke od na-

jznačajnijih prednosti koje se postižu primenom dielektrika u gasovitom agregatnom stanju u odnosu na primenu tečnih i čvrstih dielektrika.

Proces proboja u gasu nastaje kao posledica pojave parcijalnog pražnjenja (engl. *partial discharge*) [6]. U pitanju je lokalizovan električan proboj koji se dešava u jednom segmentu gasa a kojim nije zahvaćen celokupan prostor među elektrodama. Parcijalna pražnjenja su strimeri i korone, električna pražnjenja na pritiscima blizu i višim od atmosferskog [57] koja nastaju usled nesavršenosti metalnih elektroda, depozicije materijala, neadekvatnih metalnih kontakata i prisustva čestica metalne prašine [6]. Nabrojene nesavršenosti kreiraju jaka električna polja u svojoj blizini kojima se slobodni elektroni ubrzavaju do visokih energija. Ti visokoenergijski elektroni u procesu jonizacije gasa imaju sposobnost kreiranja novih slobodnih elektrona. Kada njihov broj poraste iznad kritične vrednosti, u gasu se javlja električan proboj. Dakle, električan proboj je posledica brze sekvence ireverzibilnih događaja kojima se gas prevodi iz svog normalnog (neprovodnog) stanja u provodno stanje [58]. Ovaj proces se odigrava na vremenskim skalama reda ns do ms .

Električan proboj u gasu je kompleksan proces koga karakterišu tri faze:

1. prisustvo primarnih slobodnih elektrona,
2. razvoj lavine elektrona multiplikacijom odnosno eksponencijalnim porastom broja slobodnih elektrona,
3. generisanje sekundarnih elektrona koji održavaju pražnjenje sve do pojave električnog proboja.

Ključna strategija za sprečavanje pojave proboja u gasu, koji može da ošteti industrijsku opremu, je kontrola procesa multiplikacije slobodnih elektrona.

Inženjerska praksa je takva da se kontrola procesa multiplikacije slobodnih elektrona postiže podešavanjem geometrije i dimenzija industrijske opreme, podešavanjem pritiska u njoj, utiče se na homogenost polja u opremi, odabir odgovarajućih sistema elektroda uz posebnu pažnju na njihov površinu a vodi se računa i o sprečavanju kontaminacije gasa nepoželjnim česticama [59, 60]. Konstruisanje industrijske opreme za izolaciju gasovima se vrši na osnovu sprege prethodno navedenih parametara i podataka o razvoju i propagaciji strimera u uslovima prostorno homogenog i nehomogenog električnog polja na atmosferskom pritisku [61–63] ali i na višim pritiscima i na većim međuelektrodnim rastojanjima [64, 65]. Na pritiscima do nekoliko stotina Torr (1 Torr = 133.32 Pa) i u geometriji sa paralelnim elektrodama, Townsend-Paschen teorijom se mogu dobiti podaci o probojnim naponima gasova u funkciji proizvoda pritiska gasa i međuelektrodnog rastojanja [66–69].

Pored navedenih načina, kontrola multiplikacije elektrona se postiže optimizacijom postojećih i razvojem novih gasnih dielektrika. U razvoju novih gasnih dielektrika, važnu ulogu imaju fizika rojeva naelektrisanih čestica, fizika električnih gasnih pražnjenja i atomska i molekularna fizika. Poznavanjem sudarnih i transportnih karakteristika elektrona u gasovima od interesa i razumevanjem metoda za njihovu manipulaciju, mogu se obezbediti potrebne osobine gasova među kojima su dielektrične osobine koje su u fokusu ovog doktorata. Ova tema je odavno prepoznata od strane velikog broja istraživača kao uspešan način za obezbeđivanje optimalnog dizajna industrijske opreme uz kontrolu i unapređivanje efikasnosti gasnih dielektrika. Elementarna fizika gasnih dielektrika je tema mnogih publikacija [13, 70], preglednih radova [58, 71, 72] i predavanja na međunarodnim skupovima kao što su Međunarodni simpozijum gasnih dielektrika (engl. *International Symposium on Gaseous Dielectrics*) i Međunarodna konferencija o gasnim pražnjenjima u njihovim primenama (engl. *International Conferences on Gas Discharges and Their Applications*).

Motivacija ove doktorske disertacije je ispitivanje i optimizacija gasova i gasnih smeša u cilju utvrđivanja potencijalnih gasnih dielektrika za primenu u sistemima za prenos električne struje u visokonaponskoj ([115000, 230000] VAC) i sredjenaponskoj ([2400, 69000] VAC) tehnologiji (engl. *volts of AC current*, VAC). Osnovni metodološki pristup koji primenjujemo u proučavanju gasnih dielektrika su rojevi elektrona i fizika električnih gasnih pražnjenja.

1.3 Istorijski razvoj gasnih dielektrika

Prva ideja o upotrebi gasova u svrhu dielektrika je predložena 1937. godine kada je objavljen patent o primeni gasa CCl_2F_2 u sistemima za prenos električne struje [73]. Već godinu dana kasnije je objavljen patent kojim se predlagala upotreba novog sintetičkog gasa sumpor-heksafluorida (SF_6) u istu svrhu. Industrijska proizvodnja ovog gasa je započeta 1953. godine kada je u Sjedinjenim Američkim Državama konstruisan prvi komercijalan prekidač struje izolovan SF_6 gasom [74].

SF_6 je široko primenljiv gas već nekoliko decenija. U pitanju je gas relativno velike mase (146.06 g/mol), bez boje i mirisa koji je hemijski inertan, netoksičan i nezapaljiv. Odlikuju ga visoko kritično polje od 361 Td ($1 \text{ Td} = 10^{-21} \text{ Vm}^2$) i niska tačka ključanja od -64°C . Ovaj gas ima veliki broj primena [21] uključujući proizvodnju poluprovodnika procesom nagrivanja podloga od silicijuma i jedinjenja galijuma i arsena, ima ulogu reaktivnog gasa u procesu reciklaže aluminijuma, SF_6 je donor fluora u eksimer laserima koji koriste smešu halida i plemenitih gasova, koristi se za termalnu i akustičnu izolaciju, primenjuje se kao kontrastni agens u ultrasoničnim snimanjima, ovim gasom se pune avionske gume, primenjuje se u oftamologiji pri hirurškom lečenju ablacije retine. Međutim, jedna od globalno najpoznatijih primena SF_6 gasa je u sistemima za prenos električne struje u kojoj se koristi kao gasni dielektrik. Iako je SF_6 tek drugi predložen gasni dielektrik, od početka njegove upotrebe pa sve do današnjih dana, ovaj gas je gotovo nezamenljiv u pomenutoj primeni.

SF_6 u izuzetno velikoj meri utiče na Zemljinu atmosferu. On je snažan apsorber zračenja iz infracrvenog dela spektra što ima za posledicu višestruko veći faktor globalnog zagrevanja u odnosu na CO_2 (22800, za stogodišnji interval) koji uz izuzetno dugo atmosferko vreme života (3200 godina) definišu SF_6 kao gas sa ekstremno snažnim efektom staklene bašte. Gustina SF_6 gasa je aproksimativno pet puta veća od gustine vazduha. Prirodna koncentracija ovog gasa u atmosferi je 0.4 ppt (engl. *parts per trillion*, ppt) [?]. Zbog svoje mase, u slučaju oslobađanja u atmosferu SF_6 ostaje u slojevima blizu tla. Osnovni način na koji se SF_6 može ukloniti iz troposfere je njegovo premeštanje u mezosferu u kojoj doživljava degradaciju pri reakciji sa slobodnim elektronima.

Masovna globalna upotreba SF_6 gasa je dovela do toga da je njegova godišnja svetska proizvodnja u 1993. godini iznosila 7000 tona od čega je čak 80% korišćeno upravo u industriji prenosa električne struje [75]. Merenja u vremenskom intervalu od 1978. do 1996. godine su pokazala da je koncentracija SF_6 u atmosferi rasla za 7% godišnje. U 2002. godini je ustanovljeno da emisija SF_6 iz industrije prenosa električne struje u Sjedinjenim Američkim Državama iznosi 589 metričkih tona. Ukoliko se ova brojna vrednost izrazi preko CO_2 gasa, ona je jednaka vrednosti od 14.1 miliona metričkih tona CO_2 što iznosi 25% ukupne emisije gasova sa efektom staklene bašte iz industrijskih postrojenja ove države [76].

Usled sve veće svesti stručne i naučne zajednice o štetnom uticaju gasova na atmosferu naše planete i život na njoj, ukazala se potreba za pronalaskom zamene za SF_6 u industriji prenosa električne struje [77, 78]. Kako bi nov gasni dielektrik i dalje imao potrebna svojstva za ovu primenu dok bi se koncentracija SF_6 gasa smanjila, prvo se nametnula ideja o upotrebi smeša ovog gasa ($\text{SF}_6\text{-N}_2$, $\text{SF}_6\text{-CO}_2$, $\text{SF}_6\text{-CF}_4$). Međutim, ovakvim predlogom se SF_6 ne izbacuje u potpunosti iz upotrebe. Radiklaniji predlog se odnosi na zamenu SF_6 gasa prirodnim gasovima kao što su N_2 , CO_2 , suvi vazduh ili sintetički elektronegativni gasovi sa znatno manjim efektom staklene bašte.

Uzimajući u obzir predložene prirodne gasove, CO_2 ima najbolje dielektrične osobine [79, 80]. Međutim, one su inferiorne u poređenju sa osobinama SF_6 gasa [80, 81] pa bi sistemi punjeni ugljen-dioksidom trebali da rade na jako visokim pritiscima reda 10^{15} bar ($1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$). Postojeća oprema za izolaciju gasom koja se koristi u sistemima za prenos elektrine struje se ne može koristiti na ovako visokim pritiscima. Pored toga, ukoliko bi se CO_2 koristio kao gasni dielektrik, komore koje bi se punile ovim gasom bi morale da budu većih dimenzija, debljih zidova dok bi minimalna radna temperatura morala da bude viša [82]. U cilju rešavanja nabrojenih problema, CO_2 i ostali pogodni prirodni gasni dielektrici se ne mogu samostalno koristiti u sistemima za transport električne struje već u vidu smeše sa drugim adekvatnim gasovima.

Ukoliko bi se umesto prirodnih koristili sintetički elektronegativni gasovi, njihova znatno viša

tačka ključanja u odnosu na SF₆ bi onemogućila upotrebu sistema za transport električne struje u predelima kao što su Antarktik, Grenland, Aljaska, Kanada ili Rusija u kojima se temperatura vazduha spušta na izuzetno niske vrednosti. Za upotrebu u ovako hladnim predelima, kao bafer gas u visokonaponskoj tehnologiji se koristi CO₂ (tačka ključanja -78.5 °C) dok se u srednjenaponskoj opremi može koristiti i vazduh u kombinaciji sa C₅F₁₀O [83, 84].

Sintetički gas CF₃I je jedan od pogodnijih kandidata za zamenu SF₆. Ovaj gas je prvenstveno uveden kao zamena CF₃Br gasa koji ima veliku moć razaranja ozona a koji se koristio kao agens za suzbijanje požara i inertan gas u tankovima sa gorivom za punjenje aviona. Danas se CF₃I primenjuje u procesu nagrizanja plazmom u industriji proizvodnje poluprovodnika. ODP faktor ovog gasa (engl. *Ozone Depletion Potential*, ODP) se kreće u opsegu 0.006-0.017 [85–87] a kako je njegova tačka ključanja (-22.5 °C) znatno viša od SF₆, CF₃I bi se mogao koristiti kao gasni dielektrik u smešama sa CO₂ ili N₂ (tačka ključanja -195.8 °C) [88, 89] čime bi se obezbedile izuzetne dielektrične osobine uz praktično zanemarljiv uticaj na atmosferu. CF₃I podleže snažnoj fotolizi usled slabe C-I veze koja se razara pod dejstvom ultraljubičastog zračenja (engl. *ultraviolet*, UV) [85] usled čega je atmosfersko vreme života ovog gasa svega 1.8 dana. Postojanje joda u strukturi molekula je nepoželjno iz razloga depozicije ovog metala u unutrašnjosti opreme prilikom pojave električnih lukova i pražnjenja. Takođe, nataložen jod redukuje dielektrične performanse opreme [90, 91]. Oksidacija metalnih površina zbog prisustva joda u ovom molekulu i činjenica da je CF₃I potencijalan mutagen [92] pokazuju da nije najpovoljnije da se ovaj gas koristi samostalno već u smeši sa drugim pogodnim gasovima.

Ispitivanjem kompleksnijih sintetičkih molekularnih gasova se stiče utisak da se C5-perfluoroketon (C₅F₁₀O) [93] i C4-perfluoronitril (C₄F₇N) [94] izdvajaju kao najprihvatljivije zamene SF₆ gasa. U odgovarajućoj smeši sa N₂, CO₂ ili vazduhom ovi gasovi zadovoljavaju potrebe gasnog dielektrika za primenu u visokonaponskoj ili srednjenaponskoj tehnologiji uz jako malu potrebnu za redizajnom uređaja koji se već koriste u sistemima za prenos električne struje.

1.4 Osobine gasnih dielektrika

Gasni dielektrik je opisan svojim atomskim sastavom, molekularnom strukturom gasa, fizičkim, hemijskim i električnim osobina kao i uticajem gasa na atmosferu planete Zemlje. U nastavku sledi objašnjenje kako se pravilnim odabirom karakteristika gasa utiče na izbor prirodnog ili razvoj sintetičkog gasnog dielektrika koji ima mogućnost kontrole lavinskog procesa multiplikacije elektrona, čime se sprečava nastajanje električnog proboja, a koji, istovremeno, zadovoljava stroge ekološke norme.

Dijametar molekula ima uticaj na dielektrične osobine gasa. U molekularnom gasu velikog dijametra, slobodni elektroni imaju mali srednji slobodan put između sudara čime im se ograničava akumulacija energije. Time se većina elektrona ne ubrzava do energija potrebnih za odvijanje procesa jonizacije. Dakle, gasovi koji su sačinjeni od molekula velikog dijametra obezbeđuju povoljne dielektrične osobine čime postaju potencijalni kandidati za primenu u sistemima za prenos električne struje.

Poželjna dielektrična svojstva se obezbeđuju halogenim atomima. Atomi iz grupe halogenih elemenata sadrže sedam elektrona u valentnoj orbitali zahvaljujući čemu poseduju maksimalan afinitet prema elektronu u poređenju sa afinitetom svih ostalih grupa atoma. Ovako veliki afinitet obezbeđuje snažnu elektronegativnost gasa u čijem se sastavu nalaze ovi halogeni elementi. Sa stanovišta atomske fizike, velika elektronegativnost odgovara velikom preseku za zahvat elektrona (engl. *electron attachment*). Procesom zahvata, neutralni molekuli gasa se prevode u negativne jone višestruko manje pokretljivosti, smanjuje se mogućnost nastajanja lavinskog procesa multiplikacije elektrona a time i nastajanje električnog proboja što je od krucijalnog značaja kod gasnih dielektrika.

Osim potrebe za snažnim procesom zahvata elektrona, važno je da molekularan gas ne poseduje mogućnost oslobađanja zahvaćenog elektrona (engl. *electron detachment*). Jednom kada slobodan elektron biva zahvaćen i iskorišćen za formiranje negativnog jona, taj jon treba da ostane u svom

stanju bez mogućnosti oslobađanja elektrona.

Osim proseca zahvata i oslobađanja elektrona, još nekoliko elektronskih procesa ima značajan uticaj na dielektrične osobine gasa. Elektrone srednjih energija (reda veličine nekoliko eV) je potrebno usporiti i prevesti u niskoenergijsku oblast u kojoj dominira proces zahvata elektrona. To se postiže neelastičnim procesima elektronske ekscitacije kao i vibracionim i rotacionim ekscitacijama. Što se tiče procesa jonizacije, prag ovog procesa treba da bude što viši a sam proces što manje dominantan kako bi se stvaranje novih slobodnih elektrona svelo na minimum.

Električno polje na kome se javlja proboj u gasu se naziva *kritično električno polje* a obeležava se oznakom $(E/n_0)_{lim}$. Kako bi gas u što širem opsegu polja ispoljavao svoja dielektrična svojstva, njegova $(E/n_0)_{lim}$ vrednost treba da bude što viša. Uočeno je da se ovo javlja kod gasova koji u svojoj strukturi sadrže dvostruku ili trostruku kovalentnu vezu. Gasni dielektrici prelaze u tečno stanje snižavanjem temperature ili povećavanjem pritiska što dovodi do zaključka da na tipičnim radnim temperaturama opreme za transport električne struje, tačka ključanja dielektrika treba da bude što niža. Svakako, molekularan gas mora da bude pouzdan za rad i u tom smislu je neophodna netoksičnost, nezapaljivost i nekorozivnost kako samog gasa tako i njegovih produkata nastalih u procesu disocijacije pod dejstvom električnog polja, sunčevog zračenja i slično.

Posebna pažnja mora da se vodi o uticaju gasova na atmosferu planete Zemlje. U tom smislu je potrebno poznavanje faktora globalnog zagrevanja (engl. *Global Warming Potential*, GWP), faktora za razaranje ozona i atmosferskog vremena života gasa.

U industrijskoj primeni se jedan deo gasnog dielektrika izbacuje u atmosferu direktnim putem dok se manji deo gasa oslobađa prilikom nepoželjnog curenja iz opreme (engl. *leaking*). Kada dospe u atmosferu, gas može da apsorbuje energiju iz infracrvenog dela spektra zračenja, stupi u hemijsku reakciju sa ozonom ili ostane nepromenjen usled hemijske inertnosti. GWP faktor je relativna mera količine toplote koju određena masa gasa zadržava u atmosferi u poređenju sa istom masom referentnog gasa CO₂. Ovaj faktor se određuje za vremenski interval od 20, 100 ili 500 godina i njegova vrednost za referentan gas iznosi 1. Gasovi okarakterisani velikim GWP faktorom su odgovorni za pojavu efekta staklene bašte i kao takvi spadaju u listu nepoželjnih gasova. ODP faktor je odnos potencijala za razaranje ozona koji ima ispitivan gas i potencijala referentnog gasa trihlorofluorometana (CCl₃F, poznatog pod nazivom Freon-11) kome je dodeljen ODP faktor vrednosti 1. Ekološki prihvatljiv gasni dielektrik treba da poseduje ODP faktor što bliži nuli. Atmosfera planete Zemlje bi trebala da sadrži samo one gasove koji se prirodno nalaze u njenom sastavu (78% azota, 20% kiseonika, 1% argona i male primese drugih gasova) dok svako prisustvo drugih gasova treba svesti na minimum. Poželjno je da se gasni dielektrik na što brži način ukloni iz atmosfere odnosno da je njegovo atmosfersko vreme života što kraće.

Sumirajući prethodna objašnjenja, dolazi se do spiska karakteristika koje molekularan gas mora da poseduje kako bi bio okarakterisan kao dobar gasni dielektrik:

1. poželjni su halogeni elementi u strukturu gasa,
2. poželjan je veliki dijametar molekula gasa,
3. gas treba da sadrži dvostruku ili trostruku kovalentnu vezu u svojoj strukturi,
4. poželjan je snažan proces zahvata elektrona uz istovremeno neispoljavanje procesa detačmenta,
5. poželjne su elektronske ekscitacije, vibracione i rotacione ekscitacije,
6. molekularan gas bi trebao da ima što nižu jonizaciju sa što većim pragom za njeno nastajanje,
7. poželjni su visoko kritično polje i niska tačka ključanja,
8. potrebno je da gas nema izražen efekat staklene bašte, ne reaguje sa ozonskim omotačem i poseduje kratko atmosfersko vreme života,

9. neophodno je da gas bude hemijski inertan, netoksičan, nekorozivan, nezapaljiv i neeksplozivan,

10. dostupnost na tržištu i prihvatljiva cena su bitni za masovnu upotrebu gasa.

Evidentna je kompleksnost zahteva koje dobar dielektrik mora da ispuni. Posebno otežavajuću okolnost unosi međusobna zavisnost pomenutih parametara. Na primer, gasovi velike molekularne mase obično imaju visoko kritično polje dok im je istovremeno tačka ključanja visoka. Ova visoka vrednost tačke ključanja je nepoželjna u slučaju upotrebe opreme u ekstremno hladnim podnebljima [24]. Veliki broj atoma vodonika u gasovima obezbeđuje kratko atmosfersko vreme života molekularnog gasa ali povećava njegovu zapaljivost. Zato su zasićeni (molekularni gasovi nastali od alkana) hidrofluorokarbonati (engl. *hydrofluorocarbons*, HFC) sa malim brojem atoma fluora relativno kratkoživeći ali zapaljivi u odnosu na dugoživeće ali nezapaljive perfluorokarbonate (engl. *perfluorocarbons*, PFC). Hemijska inertnost gasa, kao što je SF₆, je poželjna osobina dok se gas nalazi u sistemu za provođenje struje (ne dolazi do korozije metalnih delova sistema) dok ta ista osobina pokazuje svoju negativnu stranu onda kada gas bude ispušten u atmosferu (hemijska inertnost odgovara dugom atmosferskom vremenu života). Kratkoživeći gasovi su molekularni gasovi male hemijske stabilnosti koja je posledica velikog broja veza u molekularnoj strukturi gasa. Nepoželjna karakteristika ovih gasova je ta da mogu da učestvuju u formiranju smoga dok, dodatno, produkti njihove dekompozicije ulaze u vodeni ekosistem [95, 96]. Pokazano je da je GWP faktor molekula sa C-F vezama veliki dok se zamenom jedne ili više veza C-O grupom ovaj faktor značajno smanjuje [97, 98]. Takođe je poznato da u molekularnim gasovima iste structure GWP raste sa porastom broja atoma fluora [99] iako je povećana koncentracija fluora odgovorna za nezapaljivost gasa.

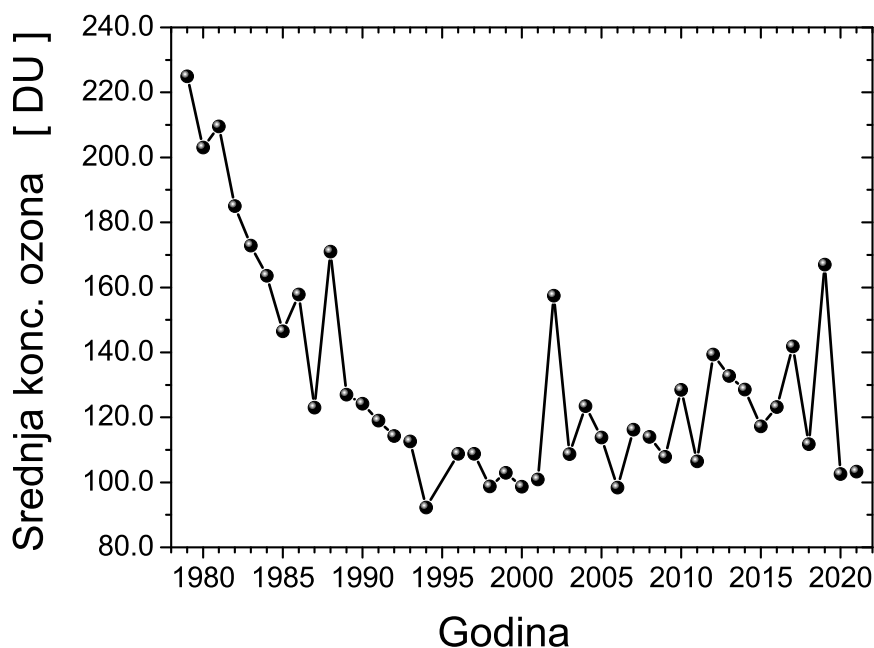
Pored ove kompleksne zavisnosti jednih parametara od drugih, potrebno je obratiti pažnju na još neke bitne činjenice. Za razliku od SF₆, molekularni gasovi sa velikim brojem hemijskih veza i nekoliko različitih atoma u svojoj strukturi disocijacijom grade veliki broj različitih produkata bez mogućnosti rekombinacije u svoju prvobitnu molekularnu formu. Time nastaje čitav spektar novih produkata od kojih je svaki okarakterisan individualnim GWP i ODP faktorom, atmosferskim vremenom života i ostalim karakteristikama. Pojedini molekularni gasovi u kontaktu sa kišom, oblacima ili morskom vodom u procesu hidrolize formiraju trifluoroacetičnu kiselinu (engl. *trifluoroacetic acid*, TFA), izuzetno jaku kiselinu toksičnu po ljudski organizam prilikom inhalacije ili dodira sa kožom i takođe toksičnu, sa dugoročnim efektima, za vodene organizme čak i u jako niskim koncentracijama [100, 101] a za koju ne postoji način uklanjanja kada se jednom nađe u životnom okruženju [102]. Vidimo da specifične osobine molekularnih gasova kao i složen međusoban uticaj parametara gasa zahteva izuzetno veliku pažnju pri odabiru pogodnih gasnih dielektrika za potencijalnu zamenu SF₆ gasa.

1.5 Očuvanje životne sredine

Nepoželjne karakteristike SF₆ gasa su izuzetno ozbiljne i dobro poznate. Emisija ovog gasa se mora strogo kontrolisati jer on, kao i druge grupe štetnih gasova, snažno utiče na atmosferu planete Zemlje i život na njoj. U svrhu kontrole emisije štetnih gasova, postignuta su dva međunarodna sporazuma od izuzetnog globalnog značaja. U pitanju su Montrealski protokol iz 1987. godine i Kjoto protokol iz 1997. godine.

1.5.1 Montrealski protokol

Montrealski protokol (engl. *Montreal Protocol*) je međunarodan sporazum o zaštiti ozonskog omotača koji se zalaže za ukidanje proizvodnje i izbacivanje iz upotrebe supstanci koje razaraju ozon. Ovim protokolom se pre svega skreće pažnja na štetnost hlorofluorokarbonata (engl. *Chlorofluorocarbons*, CFC) i hidrohlorofluorokarbonata (engl. *Hydrochlorofluorocarbons*, HCFC) (tabela 1.1, supstance



Slika 1.1: Srednja koncentracija ozona u stratosferi južne hemisfere u vremenskom intervalu od 1979. do 2021. godine. Podaci preuzeti sa <https://ozonewatch.gsfc.nasa.gov>

iz Aneksa A, B i C). U pitanju su jedinjenja hlora ili broma koja su, zbog prisustva ovih atoma, izuzetno destruktivna prema ozonu u stratosferi. N_2O se ne kontroliše ovim protokolom iako produkti ovog gasa predstavljaju katalizatore za razaranje ozona [?]. Ovim protokolom se takodje ne ograničava proizvodnja i upotreba SF_6 pošto on ne reaguje sa ozonom. Kao rezultat poštovanja Montrealskog protokola, ustanovljeno je postepeno smanjivanje ozonske rupe iznad Antarktika [103] uz predviđanje da će se u intervalu između 2050. i 2070. godine ozonski omotač vratiti na nivo iz 1980. godine (slika 1.1) koji je iznosio približno 200 DU (engl. *Dobson Unit*, DU) odnosno 2 mm. Ovaj protokol je potpisalo 196 zemalja sveta kao i članice Evropske Unije. Srbija je ratifikovala Montrealski protokol 1990. godine.

HCFC se razlažu u nižim slojevima atmosfere i imaju niži ODP (0.01-0.5) i GWP (76-2270) u odnosu na CFC grupu gasova (ODP: 0.6-1, GWP: 4680-10720). Ipak, zemlje potpisnice Montrealskog protokola su se obavezale da će koristiti HFC grupu gasova u zamenu za CFC i HCFC gasove. I pored uvođenja ove zamenske grupe gasova, januara 2019. godine je stupio na snagu amandman Montrealskog protokola (tabela 1.1, supstance iz Aneksa F) kojim se zemlje potpisnice obavezuju na redukciju HFC gasova za više od 80% u toku narednih 30 godina. Iako ovi gasovi ne sadrže hlor pa nemaju negativan uticaj na ozonski omotač, njihov GWP je uporediv sa vrednostima onih gasova u čiju zamenu su uvedeni.

Tabela 1.1: Supstance i proizvodi koji sadrže supstance definisane Aneksima Montrealskog protokola [?]

Aneksi Montrealskog protokola	Supstance i proizvodi koji sadrže supstance definisane Aneksima Montrealskog protokola
Supstance iz Aneksa A	• Grupa I (CFC): $CFCl_3$, CF_2Cl_2 , $C_2F_3Cl_3$, $C_2F_4Cl_2$, C_2F_5Cl
	• Grupa II (haloni): CF_2BrCl , CF_3Br , $C_2F_4Br_2$
	• Grupa I (CFC):

Supstance iz Aneksa B	CF_3Cl , C_2FCl_5 , $\text{C}_2\text{F}_2\text{Cl}_4$, C_3FCl_7 , $\text{C}_3\text{F}_2\text{Cl}_6$, $\text{C}_3\text{F}_3\text{Cl}_5$, $\text{C}_3\text{F}_4\text{Cl}_4$, $\text{C}_3\text{F}_5\text{Cl}_3$, $\text{C}_3\text{F}_6\text{Cl}_2$, $\text{C}_3\text{F}_7\text{Cl}$ • Grupa II: CCl_4 • Grupa III: $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_3$
Supstance iz Aneksa C	• Grupa I (HCFC): CHFCl_2 , CHF_2Cl , CH_2FCl , C_2HFCl_4 , $\text{C}_2\text{HF}_2\text{Cl}_3$, $\text{C}_2\text{HF}_3\text{Cl}_2$, CHCl_2CF_3 , $\text{C}_2\text{HF}_4\text{Cl}$, CHFClCF_3 , $\text{C}_2\text{H}_2\text{FCl}_3$, $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_2\text{Cl}_2$, $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_3\text{Cl}$, $\text{C}_2\text{H}_3\text{FCl}_2$, CH_3CFCl_2 , $\text{C}_2\text{H}_3\text{F}_2\text{Cl}$, $\text{CH}_3\text{CF}_2\text{Cl}$, $\text{C}_2\text{H}_4\text{FCl}$, C_3HFCl_6 , $\text{C}_3\text{HF}_2\text{Cl}_5$, $\text{C}_3\text{HF}_3\text{Cl}_4$, $\text{C}_3\text{HF}_4\text{Cl}_3$, $\text{C}_3\text{HF}_5\text{Cl}_2$, $\text{CF}_3\text{CF}_2\text{CHCl}_2$, $\text{CF}_2\text{ClCF}_2\text{CHClF}$, $\text{C}_3\text{HF}_6\text{Cl}$, $\text{C}_3\text{H}_2\text{FCl}_5$, $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_2\text{Cl}_4$, $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_3\text{Cl}_3$, $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{Cl}_2$, $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_5\text{Cl}$, $\text{C}_3\text{H}_3\text{FCl}_4$, $\text{C}_3\text{H}_3\text{F}_2\text{Cl}_3$, $\text{C}_3\text{H}_3\text{F}_3\text{Cl}_2$, $\text{C}_3\text{H}_3\text{F}_4\text{Cl}$, $\text{C}_3\text{H}_4\text{FCl}_3$, $\text{C}_3\text{H}_4\text{F}_2\text{Cl}_2$, $\text{C}_3\text{H}_4\text{F}_3\text{Cl}$, $\text{C}_3\text{H}_5\text{FCl}_2$, $\text{C}_3\text{H}_5\text{F}_2\text{Cl}$, $\text{C}_3\text{H}_6\text{FCl}$ • Grupa II (HBFC): CHF_2Br , CH_2FBr , C_2HFBr_4 , $\text{C}_2\text{HF}_2\text{Br}_3$, $\text{C}_2\text{HF}_3\text{Br}_2$, $\text{C}_2\text{HF}_4\text{Br}$, $\text{C}_2\text{H}_2\text{FBr}_3$, $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_2\text{Br}_2$, $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_3\text{Br}$, $\text{C}_2\text{H}_3\text{FBr}_2$, $\text{C}_2\text{H}_3\text{F}_2\text{Br}$, $\text{C}_2\text{H}_4\text{FBr}$, C_3HFBr_6 , $\text{C}_3\text{HF}_2\text{Br}_5$, $\text{C}_3\text{HF}_3\text{Br}_4$, $\text{C}_3\text{HF}_4\text{Br}_3$, $\text{C}_3\text{HF}_5\text{Br}_2$, $\text{C}_3\text{HF}_6\text{Br}$, $\text{C}_3\text{H}_2\text{FBr}_5$, $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_2\text{Br}_4$, $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_3\text{Br}_3$, $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{Br}_2$, $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_5\text{Br}$, $\text{C}_3\text{H}_3\text{FBr}_4$, $\text{C}_3\text{H}_3\text{F}_2\text{Br}_3$, $\text{C}_3\text{H}_3\text{F}_3\text{Br}_2$, $\text{C}_3\text{H}_3\text{F}_4\text{Br}$, $\text{C}_3\text{H}_4\text{FBr}_3$, $\text{C}_3\text{H}_4\text{F}_2\text{Br}_2$, $\text{C}_3\text{H}_4\text{F}_3\text{Br}$, $\text{C}_3\text{H}_5\text{FBr}_2$, $\text{C}_3\text{H}_5\text{F}_2\text{Br}$, $\text{C}_3\text{H}_6\text{FBr}$ • Grupa III (HBFC): CH_2BrCl
Aneks D: proizvodi koji sadrže supstance iz Aneksa A	• Klima uređaji u automobilima i kamionima • Domaći i komercijalni uređaji: frižideri, zamrzivači, ovlaživači vazduha, aparati za led, aparati za hlađenje vode, toplotne pumpe • Aerosoli sa izuzetkom medicinskih aerosola • Prenosni aparati za gašenje požara • Izolacione ploče, paneli i omotači za cevi
Supstance iz Aneksa E	CH_3Br
Supstance iz Aneksa F	• Grupa I (HFC): CHF_2CHF_2 , CH_2FCF_3 , CH_2FCHF_2 , $\text{CHF}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{CF}_2\text{CH}_3$, $\text{CF}_3\text{CHF}_2\text{CF}_3$, $\text{CH}_2\text{FCF}_2\text{CF}_3$, $\text{CHF}_2\text{CHF}_2\text{CF}_3$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{CF}_3$, $\text{CH}_2\text{FCF}_2\text{CHF}_2$, $\text{CF}_3\text{CHFCH}_2\text{CF}_2\text{CF}_3$, CH_2F_2 , CHF_2CF_3 , CH_3CF_3 , CH_3F , $\text{CH}_2\text{FCH}_2\text{F}$, CH_3CHF_2 • Grupa II:

1.5.2 Kjoto protokol

Kjoto protokol (engl. *Kyoto Protocol*) je međunarodan sporazum o redukciji upotrebe i emisije gasova sa efektom staklene bašte. Ovaj sporazum je sastavljen 1997. godine dok je 2005. godine postao međunarodan zakon. Ukupno 192 države su se obavezale da u vremenskom intervalu 2008-2012 redukuju emisiju GWP gasova za 5.2% u odnosu na emisiju iz 1990. godine. Evropska komisija je predložila regulativu kojom bi se u Evropskoj Uniji redukovala emisija gasova sa efektom staklene bašte za 80-95% do 2050. godine u odnosu na prethodno pomenut referentan nivo. Zemlje potpisnice Kjoto protokola su dužne da redukuju emisiju šest gasova (tabela 1.2) i postepeno predju na korišćenje takozvanih čistih tehnologija. Kako je SF₆ gas sa najvećim GWP faktorom u poređenju sa ostalim navedenim gasovima, potraga za njegovom zamenom je neodložan zadatak. Ovaj protokol je u Republici Srbiji stupio na snagu 2008. godine.

NOAA/ESRL laboratorija [104] je 1995. godine započela proces globalnog merenja prisustva SF₆ u atmosferi čiji su rezultati pokazali značajnu kontaminaciju atmosfere ovim gasom. Agencija za zaštitu životne sredine (engl. *Environmental Protection Agency*, EPA) je 1999. godine stvorila partnerstvo među članicama Američke industrije električne energije u cilju identifikacije, izlaganja predloga i implementacije rešenja za redukciju emisije SF₆. 2006. godine je doneta regulativa Evropske Unije o izveštavanju, praćenju, reciklaži i pravilnom odlaganju gasova sa efektom staklene bašte navedenih u Kjoto protokolu. Kako su stručnjaci iz različitih oblasti nauke i tehnike sve više postajali svesni o neophodnosti pronalaska zamene gasa SF₆, istraživanja su se preusmerila na čitav spektar molekularnih gasova. Francuska kompanija *ALSTOM* i kompanija *3M* iz Sjedinjenih Američkih Država su zajedno predstavile gas C₄F₇N okarakterisan C≡N grupom dok je Švajcarsko-Švedska kompanija *ABB* predstavila svoje gasove C₅F₁₀O i C₆F₁₂O kojima je zajedničko postojanje C=O grupe u strukturi. Ovi gasovi bi mogli biti potencijalna zamena za SF₆ u ulozi gasnog dielektrika u tehnologiji prenosa električne struje.

Gasovi sa efektom staklene bašte utiču na povećanje temperature na Zemlji. Procene [105] upozoravaju na porast globalne temperature za 1.5°C - 4.5°C ukoliko se koncentracija CO₂ u atmosferi (što je, da podsetimo, referentan gas u odnosu na koji se definiše GWP) duplira u odnosu na nivo iz perioda pre industrijalizacije. Iako ovakav porast temperature možda deluje bezazleno, posledice bi bile izuzetno dramatične sa više aspekata.

Porast temperature na Zemlji u navedenom opsegu stepeni bi doveo do daleko ozbiljnijih posledica u odnosu na one koje se već javljaju. Iz tog razloga, jedan od osnovnih ciljeva Kjoto protokola je zadržavanje globalnog porasta temperature ispod 2°C do kraja ovog veka [106]. Međutim, čak i ovaj graničan porast srednje globalne temperature predstavlja veliku brigu za naučnike i stanovništvo uopšte. Porast temperature tla dovodi do većeg isparavanja vlage sa zemljišta čime se povećava količina padavina a samim tim i nivo vodenih površina. Posledice su izuzetno dramatične: javljaju se poplave, erozije zemljišta, kontaminacija pitke vode slanom morskom vodom, uragani [107]. Neki od svetskih gradova kao što su Njujork, Los Anđeles ili Sidnej su locirani uz samu obalu okeana pa je populacija koja živi u njima direktno pogođena porastom nivoa vodenih površina. Ustanovljeno je [108] da godišnji porast nivoa mora iznosi 1.7 milimetara što je u vremenskom intervalu od 1900. do 2010. godine dovelo do srednjeg globalnog porasta nivoa mora za 0.19 metara. Međuvladin panel o klimatskim promenama (engl. *Intergovernmental Panel on Climate Change*, IPCC) ukazuje na srednji globalni porast nivoa mora za 0.5 do 0.98 metara do kraja 21. veka dok agencija NOAA (engl. *National Oceanic and Atmospheric Administration*, NOAA) procenjuje da će do 2100. godine srednji nivo mora porasti za 2 metra.

Porast temperature na Zemlji utiče na topljenje santi leda. Ledeni pokrivači na Antarktiku i Grenlandu sadrže skoro 99% leda od ukupne količine na Zemlji. Procenjeno je da bi topljenje leda sa Antarktika dovelo do porasta nivoa mora za 1 metar do 2100. godine i za čak 15 metara do 2500.

Tabela 1.2: GWP faktori gasova definisanih u Kjoto protokolu. Vrednosti GWP faktora se odnose na stogodišnji vremenski interval [110].

Zabranjeni gasovi po Kyoto protokolu	GWP [/]
CO ₂	1
CH ₄	28
N ₂ O	265
HFC grupa gasova	4-12400
PFC grupa gasova	6630-11100
SF ₆	23500

godine ukoliko emisija gasova sa efektom staklene bašte bude nastavljena današnjim tempom [109].

Kontaminacija pitke vode dovodi do otežanog navodjavanje useva što negativno utiče na pri-nos hrane. Same poplave ali i suša takođe dovode do nestašice hrane što će uticati na raseljavanje stanovništva iz kriznih područja. IZ tog razloga, veliki problem će postati prenaseljenost oblasti koje su udaljene od rečnih tokova.

Porast temperature na Zemlji pozitivno utiče na razvoj insekata od kojih velika većina može da bude prenosilac bolesti kao što su groznica, malarija, bolest Zapadnog Nila. Brojne zdravstvene tegobe i ekološki problemi nastaću ukoliko se naruši ravnoteža ekosistema koja danas vlada.

Emisija gasova, koji prirodno nisu u sastavu Zemljine atmosfere, utiče na kvalitet vazduha što izaziva ozbiljne zdravstvene probleme pre svega kod osoba koje pate od respiratornih tegoba. Gasoviti polutanti se raznose vetrom na velika rastojanja od izvora emisije i mogu prouzrokovati izuzetno ozbiljna oštećenja životne sredine.

Iz svega navedenog se zaključuje da se neophodne globalne akcije zarad rešavanja ovog dra-matičnog problema koji ne poznaje granice među državama.

1.6 Gasni dielektrici poslednje generacije

U gasne dielektrike poslednje generacije spadaju hidrofluoroolefini (engl. *hydrofluoroolefines*, HFO) i ranije pomenuti perfluoroketoni i perfluoronitrili. Konkretno, gasovi koji imaju potenci-jalnu primenu u ulozi gasnih dielektrika u sistemima za prenošenje električne struje su 1,3,3,3-tetrafluoropropan hemijske formule C₃H₂F₄ čija je oznaka HFO-1234ze i već spomeniti gasovi 1,1,1,3,4,4,4-heptafluoro-3-(trifluorometil)-2-butanon (C₅F₁₀O) i 2,3,3,3-tetrafluoro-2-(trifluorometil)propan-nitril (C₄F₇N). Kritično električno polje gasa HFO-1234ze iznosi 193.0 Td dok su odgovarajuće vrednosti C5-perfluoroketona i C4-perfluoronitrila višestruko veće od one za SF₆ (781.9 Td i 969.4 Td, respek-tivno). Ovo je jedan od pokazatelja da su C₅F₁₀O i C₄F₇N potencijalno bolji dielektrici u odnosu na SF₆. Ova tri dielektrika poslednje generacije imaju potencijal za razaranje ozona blizak ili jednak nuli dok je stogodišnji potencijal globalnog zagrevanja HFO-1234ze jednak 6, njegova vrednost u slučaju C5-perfluoroketona iznosi 1 a za C4-perfluoronitril uzima vrednosti iz opsega 1490-3646.

Rabie i saradnici [111] su primenili empirijsku teoriju za estimaciju $(E/n_0)_{lim}$ i tačke ključanja kompleksnih molekularnih gasova koji pokazuju potencijalnu primenu u ulozi gasnih dielektrika u visokonaponskoj tehnologiji. Li i saradnici [112] kao i Zhou i saradnici [113] su ispitivali uticaj pritiska gasova i udela komponenata u gasnim smešama C₄F₇N-N₂ i C₄F₇N-CO₂ na razvoj pozitivnih i negativnih strimera u jako neuniformnom električnom polju. Pored toga, ispitivan je probojni napon različitih smeša gasova. Ova i druga brojna ispitivanja gasnih dielektrika poslednje generacije imala su veliki značaj u formiranju baze podataka o najperspektivijim alternativama SF₆ gasa u sistemima za prenos električne struje.

Ukoliko bi se ustanovilo da je u sistemima za prenos električne struje najpogodnije koristiti smešu gasova umesto čistog SF₆, onda bi taj sastav zavisio kako od vrste opreme u kojoj bi se smeša koristila tako i od minimalne temperature na kojoj bi oprema radila. Različite gasne smeše su od značaja u

Tabela 1.3: Karakteristike gasova i gasnih smeša koje se koriste u visoko-naponskoj (HV) i srednje-naponskoj (MV) opremi za prenos električne energije [82].

Gas/ gasna smeša	Molarna koncen- tracija gasova $C_5F_{10}O$ i C_4F_7N [%]	Radni pritisak [MPa]	Radna tempe- ratura [°C]	GWP [/]
SF_6	/	[0.43, 0.6]	[-41, -31]	22800
CO_2	/	[0.6, 1]	<-48	1
CO_2 - $C_5F_{10}O$ - O_2 (HV)	[6, 12]	0.7	[-5, 5]	1
CO_2 - C_4F_7N (HV)	[4, 6]	[0.67, 0.82]	[-25, -10]	[327, 690]
vazduh- $C_5F_{10}O$ (MV)	[7, 13]	0.13	[-25, -15]	0.6
N_2 - C_4F_7N (MV)	[20, 40]	0.13	[-25, 25]	[1300, 1800]

srednje-naponskoj i visoko-naponskoj opremi (tabela 1.3). Na osnovu pomenute tabele se vidi da je molarna koncentracija gasova $C_5F_{10}O$ i C_4F_7N u smeši manja ili jednaka vrednosti od 13% osim kod smeše koja se koristi u srednje-naponskoj industriji a sadrži C_4F_7N . Potrebno je obratiti pažnju da se u slučaju gasne smeše za visoko-naponsku industriju koja koristi $C_5F_{10}O$, osim CO_2 smeši dodaje i kiseonik kako bi se redukovalo nastajanje štetnih produkata kao što su ugljenmonoksid ili čađ [114].

Kada se porede gasne smeše za visoko-naponska postrojenja, smeša koja sadrži gas $C_5F_{10}O$ ima višestruko manji GWP u odnosu na onu koja sadrži C_4F_7N . Međutim, oprema može da radi na nižoj temperaturi ukoliko je gasno izolovana smešom sa C_4F_7N gasom. Isti zaključak u pogledu GWP faktora se vidi i kod gasnih smeša za srednje-naponska postrojenja dok je, kod ove vrste postrojenja, jako sličan opseg radne temperature na kojoj ona mogu da rade bez obzira na vrstu gasa koji se koristi kao izolator.

Teorijska i laboratorijska ispitivanja pomenutih gasnih dielektrika poslednje generacije i njihovih smeša su rezultovala konstrukcijom pilot opreme za prenos električne struje. Prve instalacije koje koriste gas C_4F_7N su GIL sistem (engl. *Gas Insulated Lines*, GIL) od 420 kV u mestu Sellindge u Engleskoj [115] i GIS sistem (engl. *Gas Insulated Substation*, GIS) od 145 kV na planini Etzel u Švajcarskoj [116]. U nekoliko Evropskih zemalja je planirana instalacija opreme koje bi bila izolovana smešom C_4F_7N - CO_2 [117] uključujući 145 kV GIS opremu za unutrašnju primenu u Švajcarskoj, spoljašnji transformator struje od 245 kV u Nemačkoj i 420 kV GIL sistem za spoljašnju upotrebu u Engleskoj [117, 118]. Što se tiče gasa $C_5F_{10}O$, visokonaponska instalacija koja ga koristi je uspešno instalirana u Švajcarskoj [119, 120] i Nemačkoj 2015. godine [121].

1.7 Toksičnost gasova i njihovih produkata

Već je istaknuto da pronalazak zamene SF_6 gasa nije nimalo jednostavan zadatak. Ne može se olako proglasiti superiornost jednog potencijalnog alternativnog gasa u odnosu na drugi kako zbog nedostatka kompletnih podataka o dielektričnim, fizičkim, hemijskim, ekološkim karakteristikama

Tabela 1.4: Gasovi i gasne smeše koje imaju ulogu dielektrika u sistemima za prenošenje električne energije i produkti njihove disocijacije u vazduhu [122].

Gas/gasna smeša	Disocijativni produkti
SF ₆	SOF ₂ , SO ₂ F ₂ , SO ₂ , HF, CF ₄ , CS ₂ , CO ₂
CO ₂ -C ₄ F ₇ N	CO, COF ₂ , C ₃ F ₅ N, C ₂ F ₆ , C ₂ F ₃ N, HF
CF ₃ I-N ₂	C ₂ F ₆ , C ₂ F ₄ , CHF ₃ , C ₃ F ₈ , C ₃ F ₆ , COF ₂ , C ₂ F ₅ I, čvrst I ₂
CO ₂ -C ₅ F ₁₀ O-O ₂	CF ₄ , C ₂ F ₆ , c-C ₄ F ₈ , CO, C ₃ F ₈ , C ₄ F ₁₀ , C ₃ HF ₇

Tabela 1.5: Pregled posledica koje disocijativni produkti gasnih dielektrika ostavljaju na ljude, životnu sredinu i industrijsku opremu [123].

Posledice	Disocijativni produkti gasnih dielektrika
Izazivanje pospanosti i vrtoglavice	C ₂ F ₅ I
Oštećenja digestivnog sistema organa	SOF ₂ , HF
Oštećenja respiratornih organa	SO ₂ F ₂ , CF ₄ , CO, COF ₂ , C ₃ F ₅ N, C ₂ F ₃ N, C ₂ F ₄ , C ₃ F ₆ , C ₂ F ₅ I, SOF ₂ , HF, SO ₂
Oštećenja očiju	CF ₄ , CS ₂ , COF ₂ , C ₂ F ₅ I, SOF ₂ , HF, SO ₂
Oštećenja kože	CF ₄ , CS ₂ , COF ₂ , C ₃ F ₅ N, C ₂ F ₅ I, SOF ₂ , HF, SO ₂
Nagoveštaj o uticaju na plodnost i oštećenje fetusa	CS ₂ , CO
Toksičnost po vodeni ekosistem	SO ₂ F ₂ , c-C ₄ F ₈
Korozivnost	SOF ₂ , COF ₂ , čvrst I ₂
Zapaljivost	CS ₂ , CO
Eksplzivnost pri visokom pritisku	CO ₂ , C ₂ F ₆ , C ₂ F ₃ N, CHF ₃ , C ₃ F ₈ , C ₂ F ₅ I, c-C ₄ F ₈ , C ₄ F ₁₀ , C ₃ HF ₇
Stvaranje taloga u opremi	čvrst I ₂

gasu tako i zbog nedovoljno podataka o disocijativnim produktima ovih gasova. Osim jednostavnog utvrđivanja disocijativnih produkata, neophodno je ustanoviti njihovu toksičnost prema živom svetu i industrijskoj opremi. Brojni autori su se posvetili ispitivanju termalne dekompozicije molekularnih gasova i dekompoziciji koja nastaje u toku električnih pražnjenja. Neki od radova posvećenih ovoj temi se odnose na dielektrik nove generacije C_4F_7N [124–126] i njegove smeše sa CO_2 [58].

Kada je reč o disocijaciji gasa SF_6 , većina produkata koji nastaju u procesu električnog pražnjenja u ovom gasu (tabela 1.4) je veoma toksična ali je njihova koncentracija jako mala zahvaljujući veoma efikasnoj sposobnosti rekombinacije koju ovaj gas poseduje. Za razliku od njega, dekompozicija kompleksnih molekularnih gasova C_4F_7N i $C_5F_{10}O$ i gasnih smeša rezultuje stvaranjem čitavog spektra produkata, kako gasovitih tako i čvrstih. Mnogi od njih nisu poželjni (tabela 1.5): na primer, SO_2F_2 je, pored toksičnog dejstva na ljudski organizam prilikom udisanja ili gutanja, veoma toksičan i za vodeni ekosistem dok za gasove CS_2 i CO postoji nagoveštaj da onemogućavanju proces začeca i imaju negativan uticaj na nerođen plod.

Ovo je još jedan od pokazatelja da se postojeća oprema za transport električne struje ne može na tako jednostavan način prevesti na rad sa novim gasnim dielektricima. Po potrebi se mora korigovati dizajn opreme ili se moraju upotrebiti pogodniji materijali za izradu komora izolovanih novim dielektricima. Svakako, oprez pri radu sa novim ali i postojećim gasovima je neophodan u cilju prevencija ozbiljnih posledica po opremu, zaposlene u industrijskim postrojenjima, živi svet i atmosferu.

1.8 Zaključak

Vodeći se velikim naporima u pronalaženju zamene SF_6 gasa u ulozi dielektrika u sistemima za prenošenje električne struje, u ovom poglavlju je dat pregled fizičkih i hemijskih osobina gasova, njihove molekularne strukture, atomskog sastava. Istaknuta je međusobna zavisnost ovih karakteristika pa su na osnovu njih date smernice za pravilan odabir gasova i gasnih smeša koje mogu biti alternativa ovom jako elektronegativnom gasu koji snažno utiče na povećanje efekta staklene bašte. Istaknuti su gasni dielektrici najnovije generacija koji se odlikuju ultra niskim GWP faktorom. Trenutna istraživanja pokazuju da su ovo najperspektivniji gasovi za zamenu SF_6 što je upravo i razlog konstruisanja pilot opreme gasno izolovane dielektricima najnovije generacije. Svakako, skrenuta je pažnja na toksičnost produkata dekompozicije ovih kompleksnih molekularnih gasova te je naglašeno da je neophodan maksimalan oprez pri radu sa njima ali kao i dodatna istraživanja kako se u budućnosti ne bi javila potreba za pronalaženjem novih gasnih dielektrika za ovu istu ulogu.

Poglavlje 2

Transportna teorija rojeva naelektrisanih čestica u gasovima

2.1 Uvod

U ovom poglavlju su prikazani osnovni elementi hidrodinamičke kinetičke teorije rojeva elektrona u neutralnim gasovima. Definisani su roj elektrona i hidrodinamički režim a nakon toga je diskutovana dualna priroda transportnih koeficijenata u prisustvu nekonzervativnih sudara. Posle ovih fundamentalnih pretpostavki teorije rojeva, opisana je metodologija za rešavanje Bolcmanove jednačine i najvažnije procedure numeričkog koda baziranog na Monte Karlo metodi.

2.2 Roj naelektrisanih čestica

Pod pojmom *roj naelektrisanih čestica* podrazumevamo ansambl naelektrisanih čestica koji se kreće pod dejstvom spoljašnjeg električnog i magnetskog polja u makroskopski neutralnom i prostorno homogenom pozadinskom gasu. Koncentracija naelektrisanih čestica roja je zanemarljiva u odnosu na koncentraciju pozadinskog gasa pa se mogu zanemariti međusobni sudari čestica roja, njihov uticaj na pozadinski gas i na spoljašnje električno polje. Na dinamiku roja utiču isključivo sudari naelektrisanih čestica sa česticama pozadinskog gasa, prilikom kojih roj gubi energiju, kao i spoljašnja polja od kojih čestice roja dobijaju energiju.

Osnovna jednačina koja opisuje dinamiku roja naelektrisanih čestica u pozadinskom gasu neutralnih atoma i/ili molekula, koji se kreću pod uticajem spoljašnjeg električnog polja $\mathbf{E}$, je Bolcmanova jednačina za faznu funkciju raspodele $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) + \frac{q\mathbf{E}}{m} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)}{\partial \mathbf{c}} = -J(f, f_0). \quad (2.1)$$

Veličine $\mathbf{r}$ i $\mathbf{c}$ su vektori položaja i brzina naelektrisanje čestice u trenutku t , q je naelektrisanje dok je m masa čestica roja. U opštem slučaju, električno polje je vremenski zavisno i prostorno neuniformno. Za potrebe ove disertacije, električno polje je prostorno homogeno, a ako ne bude drugačije naglašeno, i vremenski statičko. Kolizionim operatorom $J(f, f_0)$ se opisuju elastični, neelastični i nekonzervativni sudari između čestica roja, opisanih funkcijom raspodele f , i neutralnih atoma/molekula pozadinskog gasa koji su opisani funkcijom raspodele f_0 . Funkcija raspodele f_0 je Maksvelova (engl. *Maxwell*) imajući u vidu da se pozadinski gas nalazi u termodinamičkoj ravnoteži.

Bolcmanova jednačina je jednačina kontinuiteta za jednočestičnu funkciju raspodele naelektrisanih čestica $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$ u šestodimenzionom faznom prostoru. Prvi član ove jednačine opisuje vremensku promenu fazne funkcije raspodele, drugi član opisuje promene funkcije raspodele u konfiguracionom prostoru a treći član opisuje gradijente funkcije raspodele u brzinskom prostoru koji su indukovani delovanjem električne sile na čestice roja. Leva strana jednačine je izbalansirana sudarima opisanim kolizionim operatorom $J(f, f_0)$.

Kako je ova disertacija posvećena proučavanju transporta elektrona u gasovima, u nastavku će se pod naelektrisanim česticama smatrati elektroni ukoliko ne bude drugačije naglašeno.

2.3 Hidrodinamički režim i definicija transportnih koeficijenata

Rešavanje BE se svodi na izračunavanje fazne funkcije raspodele elektrona $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$. Ova veličina sadrži sve informacije o ponašanju roja naelektrisanih čestica ali nije eksperimentalno merljiva. Ono što se u većini eksperimenata meri je koncentracija elektrona odnosno indukovana struja u sistemu elektroda.

2.3.1 Jednačina kontinuiteta

Osnovna jednačina u izgradnji hidrodinamičke i nehidrodinamičke kinetičke teorije rojeva naelektrisanih čestica je jednačina kontinuiteta. Imajući u vidu da se u najvećem broju eksperimenata sa rojevima naelektrisanih čestica meri struja u sistemu između dve elektrode, a struja je direktno povezana sa koncentracijom naelektrisanih čestica, jednačinom kontinuiteta se uspostavlja veza između teorije i eksperimenta:

$$\frac{\partial}{\partial t}n(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = S(\mathbf{r}, t). \quad (2.2)$$

Oznaka $n(\mathbf{r}, t)$ se odnosi na koncentraciju elektrona, $\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = n\langle\mathbf{c}\rangle$ je fluks elektrona dok je $S(\mathbf{r}, t)$ izvorni član. Srednja brzina elektrona $\mathbf{v}$ se dobija usrednjavanjem trenutnih brzina $\mathbf{c}$ pojedinačnih elektrona roja:

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \langle\mathbf{c}\rangle = \frac{1}{N(\mathbf{r}, t)} \int \mathbf{c}f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)d(\mathbf{c}) \quad (2.3)$$

pri čemu se integracija vrši po svim N elektronima roja. Član $S(\mathbf{r}, t)$ opisuje učestalost dešavanja nekonzervativnih sudara u jedinici zapremine i jedinici vremena odnosno daje podatak o brzini nastajanja i nestajanja elektrona. Koncentracija elektrona je definisana kao integral fazne funkcije raspodele u brzinskom prostoru:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)d\mathbf{c}. \quad (2.4)$$

2.3.2 Hidrodinamička aproksimacija

Pod hidrodinamičkim režimom se podrazumeva kretanje elektrona u beskonačnom prostoru daleko od fizičkih površina, izvora i ponora elektrona. Navedeni uslovi obezbeđuju da u sistemu ne postoje veliki gradijenti u koncentraciji elektrona. U hidrodinamičkom režimu se može pratiti vremenska relaksacija roja sve do dostizanja stacionarnog stanja. U stacionarnom stanju postoji balans energije

koji je postignut između energijskih dobitaka usled ubrzanog kretanja elektrona u električnom polju i gubitaka usled sudara sa neutralnim atomima/molekulima pozadinskog gasa. Nakon dostizanja stacionarnog stanja, transportne osobine elektrona se opisuju prostorno i vremenski nezavisnim transportnim koeficijentima.

U hidrodinamičkom režimu se fazna funkcija raspodele može opisati razvojem u stepeni red po gradijentima koncentracije elektrona:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{f}^k(\mathbf{c}, t) \odot (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t), \quad (2.5)$$

u kome su $\mathbf{f}^k(\mathbf{c}, t)$ tenzori k -tog reda koji predstavljaju koeficijente razvoja dok simbol $\odot$ predstavlja kontrakciju tenzora k -tog reda. Primenujući ovaj razvoj, koji predstavlja *jednačinu hidrodinamičke aproksimacije*, fluks elektrona $\Gamma(\mathbf{r}, t)$ i izvorni član $S(\mathbf{r}, t)$ se na sličan način mogu razviti u red po gradijentima koncentracije:

$$\Gamma(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \Gamma^{(k+1)}(t) \odot (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t), \quad (2.6)$$

$$S(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{S}^{(k)}(t) \odot (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t). \quad (2.7)$$

gde stepeni (k) i $(k+1)$ označavaju rangove tenzora tj. koeficijenata razvoja $\Gamma(t)$ i $\mathbf{S}(t)$.

2.3.3 Definicije fluks i balk transportnih koeficijenata

Ukoliko se razvoj (2.6) odseče na drugom članu ($k=1$) i zanemare doprinosi transportnih koeficijenata višeg reda, dobija se *vremenski zavisna fluks – gradijentna relacija*

$$\Gamma(\mathbf{r}, t) = \mathbf{W}^{(*)}(t)n(\mathbf{r}, t) - \mathbf{D}^{(*)}(t) \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t), \quad (2.8)$$

u kojoj je $\mathbf{W}^{(*)}(t)$ fluks brzina drifta dok je $\mathbf{D}^{(*)}(t)$ fluks difuzioni tenzor. Zamenom razvoja za $\Gamma(\mathbf{r}, t)$ (2.6) i $S(\mathbf{r}, t)$ (2.7) u jednačinu kontinuiteta (2.2) i grupisanjem odgovarajućih članova dobija se *generalisana vremenski zavisna difuzionna jednačina*:

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \omega^{(k)}(t) \odot (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t), \quad (2.9)$$

gde su $\omega^{(k)}$ vremenski zavisni tenzori k -tog reda koji predstavljaju balk transportne koeficijente:

$$\omega^{(k)}(t) = \Gamma^{(k)}(t) + \mathbf{S}^{(k)}(t). \quad (2.10)$$

Odsecanjem razvoja (2.9) na $k=2$ dobija se *vremenski zavisna difuzionna jednačina*:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{W}(t) \cdot \nabla n - \mathbf{D}(t) : \nabla \nabla n = -R_a(t)n, \quad (2.11)$$

kojom se definišu balk brzina drifta i balk difuzioni tenzor, respektivno:

$$\mathbf{W}(t) = \omega^{(1)}(t) = \mathbf{W}^{(*)}(t) + \mathbf{S}^{(1)}(t), \quad (2.12)$$

$$\mathbf{D}(t) = \omega^{(2)}(t) = \mathbf{D}^{(*)}(t) + \mathbf{S}^{(2)}(t), \quad (2.13)$$

dok se efektivan koeficijent jonizacije, koji se odnosi na ukupan doprinos svih novonastalih i nestalih elektrona, definiše kao:

$$R_{\text{eff}}(t) = -\omega^{(0)}(t) = S^{(0)}(t). \quad (2.14)$$

Dualnost transportnih koeficijenata, odnosno postojanje balk i fluks transportnih koeficijenata, je posledica anizotropne prostorne raspodele lokalne srednje energije duž roja. Energijska zavisnost nekonzervativnih procesa (jonizacije, zahvata elektrona) utiče na prostono neuniformno stvaranje i nestajanje elektrona u roju [34]. Balk brzina drifta opisuje kretanje centra mase roja čiji se položaj menja kako dejstvom spoljašnjeg polja tako i eksplicitnim uticajem nekonzervativnih sudara. Sa druge strane, fluks brzina drifta predstavlja srednju vrednost brzine pojedinačnih elektrona u roju na čiju vrednost utiče spoljašnje polje a nekonzervativni sudari implicitno, preko funkcije raspodele. Na osnovu ovoga se zaključuje da su fluks i balk transportni koeficijenti identični u odsustvu nekonzervativnih procesa. U suprotnom, razlike među njima mogu biti u opsegu od par procenata do nekoliko redova veličina [8]. O postojanju dve familije transportnih koeficijenata elektrona se mora voditi računa ne samo u fizici rojeva već i u modelovanju plazme. U eksperimentima sa rojevima se mere balk transportni koeficijenti dok se u fluidnim modelima plazme rešavaju fluidne jednačine u kojima se koriste kako fluks tako i balk transportni koeficijenti u zavisnosti od tipa električnog pražnjenja i uslova koji se razmatraju.

2.4 Rešavanje Bolcmanove jednačine

Bolcmanovu jednačinu je razvio austrijski fizičar Ludwig Eduard Boltzmann (1844 - 1906) razmatrajući dinamiku idealnog gasa u kome se atomi međusobno isključivo elastično sudaraju [127]. Iako je ova jednačina razvijena pre 150 godina i u međuvremenu je našla primenu u različitim oblastima fizike, njen oblik je ostao nepromenjen do današnjih dana.

Rešiti BE znači izračunati faznu funkciju raspodele $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$. Postoje dva glavna pristupa u numeričkom rešavanju BE. BE se može rešiti direktnom integracijom u konfiguracionom i brzinskom prostoru što postaje sve popularniji metod u poslednje vreme imajući u vidu porast performansi modernih računara [128]. Drugi način za rešavanje BE je metod koji u svojoj osnovi ima razvoj funkcije raspodele po ortogonalnim polinomima u brzinskom prostoru i razvoj funkcije raspodele u stepeni red po gradijentima koncentracije elektrona. Ova tehnika za rešavanje BE se veoma često naziva momentna metoda (engl. *moment method*) ([33,43,44]). U praksi, BE se ne može analitički rešiti osim za model konstantne kolizione učestalosti u prisustvu isključivo elastičnih sudara.

2.4.1 Tretman ugaone zavisnosti funkcije raspodele: sferno-harmonijska dekompozicija

Prvi korak momentne metode za rešavanje BE je razvoj fazne funkcije raspodele elektrona $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$ po sfernim harmonicima u prostoru brzina. Ovim razvojem se opisuje ugaona zavisnost funkcije raspodele u brzinskom prostoru. Razvoj je prikazan izrazom

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_m^{(l)}(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) Y_m^{[l]}(\hat{\mathbf{c}}), \quad (2.15)$$

u kome su $Y_m^{[l]}$ sferni harmonici dok $(\hat{\mathbf{c}})$ označava uglove brzine $\mathbf{c}$. Ovaj izraz je primenljiv kako u hidrodinamičkom tako i u nehidrodinamičkom režimu pošto se odnosi samo na prostor brzina. Bitno je napomenuti da se fazna funkcija raspodele može razviti i po Lažandrovim (engl. *Legendre*) polinomima ali takav razvoj bi bio primenljiv u slučaju kada bi sve prostorne nehomogenosti sistema bile orijentisane samo duž ose koja definiše pravac električnog polja.

Ukoliko se razvoj (2.15) ograniči do $l = 1$ dobija se aproksimacija dva člana (engl. *two-term approximation*, TTA). Neophodno je voditi računa o domenu primenljivosti ove aproksimacije: ona je validna samo u slučaju rojeva lakih čestica (elektrona i pozirona) koji se isključivo elastično sudaraju sa atomima/molekulima pozadinskog gasa. Elastični sudari dovode do male razmene energije ali velike razmene impulsa čime funkcija raspodele postaje skoro idealno izotropna u brzinskom prostoru. Iz tog razloga su za opis ugaone zavisnosti funkcije raspodele dovoljna samo dva

člana razvoja (2.15). U slučajevima kada neelastični sudari počinju da igraju važnu ulogu, TTA ne daje zadovoljavajuće rezultate. Kod neelastičnih sudara se neznatno menja intenzitet brzine čestica nakon sudara ali energijski transfer postaje značajan pa se favorizuju pojedini pravci rasejanja čestica. Time se narušava kvazi-izotopan karakter funkcije raspodele u brzinskom prostoru odnosno, funkcija raspodele postaje izrazito anizotropna. U ovom slučaju, za njen opis je potreban veći broj sfernih harmonika. Takođe, primena TTA nije adekvatna ni za opis rojeva jona, čak iako doživljavaju samo elastične sudara. Usled sličnijih masa, pri elastičnim sudarima jona sa neutralima pozadinskog gasa dolazi do velikog transfera energije čime funkcija raspodele postaje izrazito anizotropna u brzinskom prostoru [43]. Upravo iz ovih razloga, ne postoje javno dostupni kodovi za rešavanje BE za transport jona a samo nekoliko istaknutih istraživača u fizici rojeva se bavi ovom tematikom [129].

2.4.2 Tretman prostorne zavisnosti funkcije raspodele

Drugi korak momentne metode za rešavanje BE je opis prostorne zavisnosti funkcije raspodele. U ovom koraku je neophodno obratiti pažnju da li je posmatrani sistem u hidrodinamičkom ili nehidrodinamičkom režimu. U slučaju hidrodinamičkog režima se sve prostorne zavisnosti i eksplicitne vremenske zavisnosti funkcije raspodele izražavaju preko gradijenata koncentracije naelektrisanih čestica:

$$f_m^{(l)}(\mathbf{r}, c, t) = \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{\lambda=0}^{\infty} f(lm|s\lambda; c, t) G_m^{(s\lambda)} n(\mathbf{r}, t), \quad (2.16)$$

pri čemu je $G_m^{(s\lambda)}$ operator gradijenta u ireducibilnoj formi dok su $f(lm|s\lambda; c, t)$ momenti funkcije raspodele. Indeksi l i m potiču od sfernih harmonika dok s i λ određuju red jednačine koju treba rešiti kako bi se dobio željeni transportni koeficijent. Ukoliko je sistem u nehidrodinamičkom režimu, BE se rešava na prostornoj mreži primenjujući neku od numeričkih tehnika za njenu prostornu diskretizaciju.

2.4.3 Tretman zavisnosti funkcije raspodele od intenziteta brzine

Treći korak momentne metode je opis zavisnosti funkcije raspodele od intenziteta brzine. Ovo se može postići na nekoliko različitih načina ali u ovom radu je prćena tradicionalna kinetička teorija prema kojoj se momenti funkcije raspodele razvijaju u red po Sonine polinomima oko težinske funkcije koja je u našem slučaju Maksvelova funkcija raspodele. Razvoj je prikazan izrazom [43]:

$$f(lm|s\lambda\mu; c, t) = \omega(\alpha, c) \sum_{v=0}^{\infty} F(vlm|s\lambda\mu; \alpha, t) R_{vl}(\alpha c), \quad (2.17)$$

gde je $\omega(\alpha, c)$ težinska Maksvelova funkcija

$$\omega(\alpha, c) = \left(\frac{\alpha^2}{2\pi}\right)^{(3/2)} \exp\left(-\frac{\alpha^2 c^2}{2}\right), \quad (2.18)$$

dok su $R_{vl}(\alpha c)$ tzv. R-polinomi koji se odnose na radijale deo Sonine polinoma S :

$$R_{vl}(\alpha c) = N_{vl} \left(\frac{\alpha c}{\sqrt{2}}\right)^l S_{l+1/2}^{(\nu)}\left(\frac{\alpha^2 c^2}{2}\right), \quad (2.19)$$

$$S_{l+1/2}^{(\nu)}\left(\frac{\alpha^2 c^2}{2}\right) = \sum_{p=0}^{\nu} \frac{1}{p!(\nu-p)!} \frac{\Gamma(\nu+l+3/2)}{\Gamma(p+l+3/2)} \left(-\frac{\alpha^2 c^2}{2}\right)^p. \quad (2.20)$$

U prethodnim izrazima i koeficijentu razvoja $F(vlm|s\lambda; \alpha, t)$ figurišu:

$$\alpha = \frac{m}{kT_b}, \quad (2.21)$$

$$N_{vl}^2 = \frac{2\pi^{(3/2)}\nu!}{\Gamma(\nu + l + 3/2)}, \quad (2.22)$$

kao i Bolcmanova konstanta k , parametar za optimizaciju konvergencije transportnih koeficijenata koji ima smisao temperature T_b , parametar koji prebrojava Sonine polinome u brzinskom prostoru ν , indeks koji služi za razvoj matričnih elemenata kolizionog operatora u bazu Barnettovih (engl. *Barnett*) funkcija p i gama funkcija Γ .

Poslednji korak momentne metode se svodi na unošenje razvoja funkcije raspodele u brzinskom (2.15) i konfiguracionom prostoru (2.16) kao i razvoja u funkciji intenziteta brzine (2.17) u izraz za Bolcmanovu jednačinu (2.1). Integracijom po svim uglovima i brzinama i primenom neophodnih algebarskih operacija nad matričnim elementima svih članova jednačina, BE se konvertuje u beskonačan sistem međusobno spregnutih nehomogenih diferencijalnih jednačina za momente funkcije raspodele:

$$\sum_{\nu'=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} \left(\partial_t \delta_{\nu\nu'} \delta_{ll'} + n_0 J_{\nu\nu'}^l(\alpha) \delta_{ll'} - R_a(t) \delta_{\nu\nu'} \delta_{ll'} + ia(t) \alpha(l'm10|lm) \langle \nu l || K^{[1]} || \nu' l' \rangle \right. \\ \left. - n_0 J_{0\nu'}^0(\alpha) F(\nu l 0 | 00; \alpha, t) \times (1 - \delta_{s0} \delta_{\lambda 0}) \delta_{l'0} \delta_{m0} \right) F(\nu' l m | s\lambda; \alpha, t) = \bar{X}(\nu l m | s\lambda; \alpha t) \quad (2.23)$$

U ovoj jednačini figurišu koeficijent zahvata elektrona $R_a(t)$ dok je eksplicitan izraz za desnu stranu ove jednačine, u oznaci $\bar{X}(\nu l m | s\lambda; \alpha t)$, dat jednačinom (3.29) u [43].

Numeričkom diskretizacijom vremenskog izvoda i odgovarajućim odsecanjima razvoja funkcije raspodele koristeći konačan broj članova, ovaj beskonačni sistem diferencijalnih jednačina se konvertuje u konačan sistem algebarskih kompleksnih jednačina za momente funkcije raspodele. Numeričkim rešavanjem ovog sistema algebarskih jednačina, dobijaju se momenti funkcije raspodele na osnovu kojih se izračunavaju sve transportne veličine elektrona uključujući i samu funkciju raspodele.

2.5 Kolizioni operator

U ovom potpoglavlju su opisani kolizioni operatori za elastične, neelastične i nekonzervativne sudare elektrona i neutralnih čestica pozadinskog gasa. Kolizioni operator definiše promenu fazne funkcije raspodele usled sudarnih procesa između čestica roja (elektrona, u našem slučaju) i neutralnih čestica pozadinskog gasa. Svaki sudarni proces doprinosi kolizionom operatoru:

$$J(f, f_0) = J_{WUB}(f, f_0) + J_A(f, f_0) + J_I(f, f_0) + \dots \quad (2.24)$$

Elastični, neelastični i superelastični sudarni procesi elektrona su definisani putem Wang-Chang, Uhlenbeck a de Boer semi-klasičnog kolizionog operatora [130] čija je forma:

$$J_{WUB}(f, f_0) = \sum_{jk} \int \left[f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) f_{0j}(\mathbf{c}_0) - f(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t) f_{0k}(\mathbf{c}'_0) \right] g \sigma(jk; g\chi) d\mathbf{g}' d\mathbf{c}_0 \quad (2.25)$$

gde je $\sigma(jk; g\chi)$ diferencijalan presek za sudarni proces $(j, \mathbf{c}, \mathbf{c}_0) \rightarrow (k, \mathbf{c}', \mathbf{c}'_0)$ dok je $\cos \chi = \mathbf{g} \cdot \mathbf{g}'$ pri čemu $\mathbf{g}$ predstavlja relativnu brzinu ($\mathbf{g} = \mathbf{c} - \mathbf{c}_0$). Veličine uz koje je napisan simbol $'$ se odnose na stanje nakon sudara. Pozadinski gas nije perturbovan česticama roja iz kog razloga je $f_{0j}(\mathbf{c}_0)$ opisan Maksvelijanom za neutrane u internom stanju j . Kada je $k = j$ radi se o elastičnom sudaru dok se u slučaju kada je $k > j$ odnosno $k < j$ radi o neelastičnom odnosno superelastičnom sudarnom procesu, respektivno.

Kolizioni operator za procese zahvata elektrona je definisan na sledeći način [131]:

$$J_A(f, f_0) = \sum_j f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) \int f_{0j}(\mathbf{c}_0) g \sigma_A(j; g) d\mathbf{c}_0 \quad (2.26)$$

gde je $\sigma_A(j; g)$ diferencijalan presek za proces zahvata elektrona od strane neutrala koji se nalaze u stanju j . Generalan oblik člana kolizionog operatora kojim se uzima u obzir proces jonizacije [131] ima nešto komplikovaniji oblik od (2.26). Razlog leži u činjenici da nakon procesa jonizacije dolazi do stvaranja slobodnog elektrona što zahteva posmatranje sistema sačinjenog od tri čestice. Oblik ovog člana kolizionog operatora je:

$$J_I(f, f_0) = \sum_j n_{0j} \left[c \sigma_I(j; c) f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) - 2 \int \mathbf{c}' \sigma_I(j; \mathbf{c}') \mathbf{B}(\mathbf{c}, \mathbf{c}'; j) f(\mathbf{r}, \mathbf{c}', t) d\mathbf{c}' \right] \quad (2.27)$$

gde je $\sigma_I(j; c)$ presek za j -ti jonizacioni kanal dok $\mathbf{B}(\mathbf{c}, \mathbf{c}'; j)$ predstavlja verovatnoću da jedan od dva elektrona nakon jonizacije ima brzinu iz opsega vrednosti od $\mathbf{c}$ do $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$ pri čemu je brzina inicijalnog elektrona obeležena sa $\mathbf{c}'$.

2.6 Izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona iz Bolcmanove jednačine

Transportni koeficijenti su definisani u hidrodinamičkom režimu u kome razvoj funkcije raspodele ima oblik (7.32). Za funkciju $f^{(k)}(\mathbf{c})$ važe dva normalizaciona uslova [132]:

$$\int f^{(0)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c} = 1, \quad (2.28)$$

$$\int f^{(k)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c} = 0, \quad k \geq 1. \quad (2.29)$$

Kada se izraz za hidrodinamički razvoj funkcije raspodele (7.32) zameni u BE (2.1), iskoristi izraz za generalisanu vremenski zavisnu difuzionu jednačinu (2.9) i izjednače članovi uz isti stepen gradijenta koncentracije, dobija se hijerarhija kinetičkih jednačina za funkciju $f^{(k)}(\mathbf{c})$:

$$\left(\frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{c} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}} + J \right) f^{(0)}(\mathbf{c}) = -\omega^{(0)} f^{(0)}(\mathbf{c}), \quad (2.30)$$

$$\left(\frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{c} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}} + J \right) f^{(k)}(\mathbf{c}) = \mathbf{c} f^{(k-1)}(\mathbf{c}) - \sum_{j=0}^k \omega^{(j)} f^{(k-j)}(\mathbf{c}), \quad k \neq 0. \quad (2.31)$$

U pitanju su parcijalne diferencijalne jednačine koje se sukcesivno rešavaju. Njihovom integracijom u brzinskom prostoru se dobijaju transportni koeficijenti elektrona.

Kolizionni operator J se može napisati kao suma kolizionog operatora koji se odnosi na konzervativne J^C i reaktivne (nekonzervativne) procese J^R . Kada se prva jednačina (2.30) prointegrira u prostoru brzina i iskoristi pretpostavku da je svaka $f^{(j)}$ jednaka nuli na granicama integracije kao i to da je integral konzervativnog dela kolizionog operatora u prostoru brzina jednak nuli, dobija se:

$$\omega^{(0)} = - \int J^R f^{(0)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}. \quad (2.32)$$

Integracijom druge jednačine (2.31) uz identične pretpostavke se dobija izraz za balk transportne koeficijente višeg reda:

$$\omega^{(j)} = - \int \mathbf{c} f^{(j-1)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c} - \int J^R f^{(j)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}. \quad (2.33)$$

Efektivan koeficijent jonizacije $\omega^{(0)}$, balk brzina drifta $\omega^{(1)}$ i balk difuzioni tenzor $\omega^{(2)}$ imaju oblik:

$$R_{eff} = \omega^{(0)} = - \int J^R f^{(0)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}, \quad (2.34)$$

$$\mathbf{W} = \int \mathbf{c} f^{(0)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c} - \int J^R f^{(1)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}, \quad (2.35)$$

$$\mathbf{D} = \int \mathbf{c} f^{(1)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c} - \int J^R f^{(2)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}. \quad (2.36)$$

Poređenjem opšteg izraza za balk transportne koeficijente (2.10) i prethodnih jednačina, lako se uočava da fluks transportni koeficijenti u opštem obliku mogu biti zapisani kao:

$$\Gamma^{(k)} = \int \mathbf{c} f^{(k-1)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}, \quad k \geq 1, \quad (2.37)$$

dok se korekcije na prisustvo nekonzervativnih sudara definišu izrazom:

$$\mathbf{S}^{(k)} = \int J^R f^{(k)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}. \quad (2.38)$$

Fluks brzina drifta i fluks difuzioni tenzor, na osnovu (2.37) imaju oblik:

$$\mathbf{W}^* = \int \mathbf{c} f^{(0)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}, \quad (2.39)$$

$$\mathbf{D}^* = \int \mathbf{c} f^{(1)}(\mathbf{c}) d\mathbf{c}. \quad (2.40)$$

2.7 Transportni koeficijenti elektrona na osnovu momenata funkcije raspodele

Transportni koeficijenti su povezani sa koeficijentima razvoja $F(\nu l m | s \lambda \mu; \alpha, t)$ momenata funkcije raspodele $f(l m | s \lambda \mu; c, t)$ po Sonine polinomima oko Maksvelijana (2.17) [43, 133]:

$$R_{eff}(t) = n_0 \sum_{\nu'=0}^{\infty} J_{0\nu'}^0(\alpha) F(\nu' 00 | 000; \alpha, t), \quad (2.41)$$

$$W(t) = \frac{i}{\alpha} F(010 | 000; \alpha, t) - i n_0 \sum_{\nu'=1}^{\infty} J_{0\nu'}^0(\alpha) F(\nu' 00 | 110; \alpha, t), \quad (2.42)$$

$$D_L = -\frac{1}{\alpha} F(010 | 11) - n_0 \sum_{\nu'=1}^{\infty} J_{0\nu'}^0(\alpha) \left(F(\nu' 00 | 20) - \sqrt{2} F(\nu' 00 | 22) \right), \quad (2.43)$$

$$D_T = -\frac{1}{\alpha} F(011 | 11) - n_0 \sum_{\nu'=1}^{\infty} J_{0\nu'}^0(\alpha) \left(F(\nu' 00 | 20) + \frac{1}{\sqrt{2}} F(\nu' 00 | 22) \right), \quad (2.44)$$

$$\varepsilon(t) = \frac{3}{2} k T_b \left(1 - \sqrt{\frac{2}{3}} F(100 | 000; \alpha, t) \right). \quad (2.45)$$

Gradijent energije, koji definiše prostornu promenu srednje energije duž roja, se izračunava na sledeći način:

$$\gamma(t) = \frac{3}{2} k T_b \left(i \sqrt{\frac{2}{3}} F(100 | 110; \alpha, t) \right). \quad (2.46)$$

U prethodnim izrazima figurišu n_0 , ν' i koliziona matrica $J_{0\nu'}^0$.

U svim prethodnim izrazima, članovi koji su uzeti u obzir u sabircima pod sumom unose u izraz efekte nekonzervativnih sudara. Na taj način, izrazi za balk komponente brzine drifta i difuzionih koeficijenata su dati izrazima (2.42), (2.43) i (2.44) se odnose na balk koeficijente dok se izrazi za fluks koeficijente dobijaju kada se izrazi pod sumom izjednače sa nulom.

2.8 Monte Karlo metod

U prethodnom poglavlju je pokazano da je roj elektrona u potpunosti opisan funkcijom raspodele koja se dobija rešavanjem Bolcmanove jednačine. Njeno rešavanje je izuzetno težak numerički problem u slučaju proučavanja transporta elektrona u realnim gasovima. U okviru momentne metode, izračunavanje matričnih elemenata kolizionog operatora u bazu Burnetovih funkcija (engl. *Burnett*), koje se dobijaju kao proizvod R-polinoma i sfernih harmonika, je veoma težak numerički problem. U najvećem broju slučajeva, preseki za rasejanje elektrona imaju komplikovane energijske zavisnosti pa je numerički proračun matričnih elemenata kolizionog operatora veoma kompleksan i često neizvesan proces. U nehidrodinamičkim uslovima, implementacija početnih i graničnih uslova za rešavanje BE u konfiguracionom i brzinskom prostoru je takođe povezana sa nizom poteškoća. Veoma često nije moguće na očigledan način ukloniti ove poteškoće imajući u vidu kompleksnost eksperimentalnih uslova na graničnim površinama koje je potrebno na adekvatan način implementirati u numeričko rešenje BE. U ovim situacijama Monte Karlo simulacije (engl. *Monte Carlo*, MC) predstavljaju jako zgodno rešenje za izračunavanje funkcije raspodele i transportnih osobina elektrona u gasovima.

Prednosti MC simulacija u odnosu na numeričko rešavanje Bolcmanove jednačine su očigledne u domenu nehidrodinamičkih studija transporta naelektrisanih čestica. U odnosu na numeričko rešavanje Bolcmanove jednačine, u MC simulacijama se na jednostavniji i transparentniji način može proučavati transport elektrona u blizini graničnih površina i u uslovima prostorno nehomogenih polja [38, 134, 135]. MC simulacije su veoma dobar metodološki pristup za proučavanje kinetičkih fenomena indukovanih vremenskom nelokalnošću transporta elektrona ([7, 8, 136, 137]) a i od velikog značaja za proučavanje prostorne nelokalnosti, posebno u situacijama u kojima se pojavljuju efekti rezonanci [135]. MC simulacije su praktično jedini način za proučavanje nastanka relativističkih lavina bežećih elektrona u planetarnim atmosferama [138]. Modelovanje interakcije antimaterije i materije kao i modelovanje uređaja za proizvodnju i akumulaciju antimaterije u značajnoj meri je zasnovano na MC simulacijama ([139, 140]). Konačno, proširenje metodologije proučavanja transporta elektrona iz domena neutralnih gasova u domen soft-kondenzovane materije je takođe lakše postići generalizacijom i proširenjem postojećih MC kodova koji su inicijalno dizajnirani za proučavanje u neutralnim gasovima [141]. Jednom rečju, Monte Karlo metoda je pouzdana i fleksibilna metoda kojom se mogu proučavati kompleksni problemi u savremenoj fizici.

U poređenju sa drugim metodama za proučavanje transporta elektrona, nedostaci MC simulacione tehnike se ogledaju pre svega u većim zahtevima po pitanju korišćenja računarskih kapaciteta (potrebno je praćenje velikog broja čestica kako bi se postigla zadovoljavajuća tačnost izračunatih transportnih osobina) i unošenju nesigurnosti u rezultate simulacija odabirom grube numeričke mreže ili podešavanjem prevelikih prostornih i vremenskih koraka za numeričko diferenciranje i integraciju. Međutim, ovi nedostaci su sve manje izraženi razvojem računara i povećavanjem njihovih mogućnosti.

Motivacija za primenu MC simulacija u ovoj doktorskoj disertaciji se pre svega ogleda u tome da je ovaj metod baziran na prvim principima (jednačine kretanja elektrona se izvode iz drugog Njutnovog zakona) i da se ovim metodom mogu analizirati svi kritični elementi u transport elektrona u jako elektronegativnim gasovima što je jedan od osnovnih ciljeva ove disertacije. Sve greške koje se javljaju pri ovim simulacijama su statističke prirode i kao takve se dobro razumeju pa se mogu preduzeti koraci za njihovo uklanjanje.

U jednoj tipičnoj MC simulaciji transporta elektrona se prati prostorno-vremenska evolucija velikog broja čestica (reda 10^6 ili više) korišćenjem generatora slučajnih brojeva. Nezavisno od vrste čestica čija se evolucija prati, a u ovoj doktorskoj disertaciji su u pitanju elektroni, MC metoda se sastoji od nekoliko osnovnih koraka [36, 39, 43]. Na početku simulacije elektroni imaju određenu srednju početnu energiju i raspodelu brzina. Bitno je naglasiti da odabir početne srednje energije elektrona ne utiče na konačne vrednosti transportnih koeficijenata elektrona već samo na vreme potrebno za njihovu relaksaciju u stacionaran režim. Početna srednja energija elektrona u našim MC simulacijama obično ima vrednost od 1 eV dok se pravci kretanja elektrona u početnom trenutku izračunavaju na osnovu Maksvelove raspodele brzina elektrona (engl. *Maxwell*). Smatra se da su pravci kretanja

elektrona nepromenljivi sve do trenutka sudara sa česticama pozadinskog gasa. Kretanje svakog pojedinačnog elektrona se prati u toku vremenskog intervala dužine Δt rešavanjem jednačina kretanja. Ukoliko je u tom vremenskom periodu elektron doživeo sudar sa atomom/molekulom pozadinskog gasa, vrsta sudarnog procesa se utvrđuje slučajnim brojem na osnovu parcijalnih sudarnih verovatnoća za sve sudarne procese na tekućoj energiji elektrona. Ukoliko elektron nije učestvovao u sudaru, njegova evolucija nastavlja da se prati u narednom vremenskom intervalu. Nakon utvrđivanja vrste sudarnog procesa, izračunavaju se parametri rasejanja elektrona: novi pravci elektrona (određivanjem uglova rasejanja za čije izračunavanje su potrebni novi slučajni brojevi) i njegova nova energija koja se određuje u zavisnosti od toga da li se elektron sudario elastično ili neelastično sa neutralnom česticom gasa. Na kraju svakog intervala ΔT , koji se unapred određuje kao ulazni parametar simulacije, vrši se usrednjavanje vrednosti dinamičkih karakteristika roja elektrona uključujući srednje koordinate, srednje komponente brzine, srednju energiju i druge veličine koje su neophodne za izračunavanje transportnih osobina elektrona u posmatranom gasu. Bitno je naglasiti značaj pravilnog odabira vremenskog koraka Δt za pomeranje elektrona. Pre svega, ovaj vremenski korak ne sme biti korelisan za izborom vremenskog koraka ΔT za izračunavanje dinamičkih karakteristika roja. U slučaju kretanja rojeva elektrona u vremenski konstantnom električnom polju, korak Δt se procenjuje na osnovu srednje kolizione frekvence elektrona. Ukoliko na roj deluju vremenski promenljivo električno i magnetsko polje, potrebno je razmotriti i vremenski korak koji odgovara periodu ciklotronskih rotacija elektrona. Detaljan opis svakog pojedinačnog koraka MC [36–38, 43] je dat u narednim potpoglavljima.

2.8.1 Generator slučajnih brojeva

U literaturi postoji veliki broj algoritama za generisanje slučajnih brojeva. U cilju njihovog uspešnog korišćenja, algoritmi moraju da ispune tri ključna zahteva. Pre svega, period ponavljanja mora da bude veći od broja slučajnih brojeva koji se koriste u simulaciji kako bi se izbegla distorzija dobijenih rezultata. U algoritmu ne sme da se javlja korelacija između generisanih slučajnih brojeva kako se ne bi proizvodile sistematske greške koje se teško otkrivaju a utiču na rezultate simulacije u većoj meri od statističkih grešaka. Konačno, vreme rada procedura koje pozivaju algoritme za generisanje slučajnih brojeva treba da bude što kraće kako se proces simulacije ne bi usporio u značajnijoj meri. Generatori slučajnih brojeva su nedovoljno brzi pa se u praksi koriste generatori pseudo-slučajnih brojeva.

U naš Monte Karlo kod je implementiran generator pseudo-slučajnih brojeva *ran3* koji je predložio Knuth [142]. Ovaj generator proizvodi korelacije petog reda koje se efikasno otklanjaju razdvajanjem generatora za različite procese (određivanje vremena sudara, vrste sudarnog procesa itd.) od kojih svaki ima nezavisan ulazni parametar koji se naziva *seme* (engl. *seed*). Uticaj korelacije pseudo-slučajnih brojeva generisanih *ran3* generatorom na transportne koeficijente izračunate MC simulacijama je detaljno analiziran u radu [143].

2.8.2 Jednačine kretanja elektrona

Prvi od tri osnovna koraka MC simulacija je određivanje trajektorije elektrona na osnovu jednačina kretanja. Na kretanje elektrona između dva sudara utiče Lorenzova sila dok se vremenska promena brzine kretanja elektrona opisuje drugim Newtonovim zakonom ¹:

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = e (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (2.47)$$

¹U ovoj disertaciji se ne razmatraju efekti magnetskog polja na transport elektrona ali imajući u vidu da je kompjuterski kod koncipiran na način koji uključuju i prisustvo magnetskog polja, odlučeno je da diskusija koja se odnosi na kretanje elektrona uključi i efekte magnetskog polja.

u kome su $\mathbf{E}$ i $\mathbf{B}$ spoljašnje električno i magnetsko polje, e i m su naelektrisanje i masa elektrona, $\mathbf{v}$ je brzina elektrona dok se t odnosi na vreme. Pri $\mathbf{E} = E\vec{e}_x$, $\mathbf{B} = B\vec{e}_z$ (što je slučaj u ovoj doktorskoj disertaciji prethodna jednačina se može zapisati u koordinatama Dekartovog sistema:

$$m \frac{dv_x}{dt} = e (E + v_y B), \quad (2.48)$$

$$m \frac{dv_y}{dt} = -ev_x B, \quad (2.49)$$

$$m \frac{dv_z}{dt} = 0. \quad (2.50)$$

Analitičkim rešavanjem sistema jednačina (2.48)-(2.50) se dobijaju vremenske promene komponentata brzine elektrona u intervalima između dva sudara. Na osnovu njih se izračunavaju vremenski zavisne koordinate koje definišu poziciju elektrona između dva sudara.

Još jedna tehnika koja se često primenjuje za određivanje kretanja elektrona u prisustvu električnog i magnetskog polja je *Borisova rotacija* [144]. U pitanju je tehnika koja je jednako uspešna za reprezentovanje kretanja elektrona u prisustvu kako vremenski konstantnih tako i vremenskih promenljivih polja. Ova tehnika je veoma precizna a ujedno i izuzetno efikasna kada je u pitanju korišćenje računarskih resursa. Prvi korak u algoritmu zasnovanom na ovoj tehnici je izračunavanje ubrzanja elektrona pod dejstvom električnog polja u toku polovine vremenskog koraka Δt :

$$v_x := v_x + \frac{eE}{m} \frac{\Delta t}{2}. \quad (2.51)$$

nakon ovoga, vektor brzine elektrona se rotira pod dejstvom magnetskog polja:

$$v_x := v_x + s v_y', \quad (2.52)$$

$$v_y := v_y - s v_x', \quad (2.53)$$

pri čemu je

$$s := -\frac{2 \operatorname{tg}\left(\frac{\theta}{2}\right)}{1 + \operatorname{tg}\left(\frac{\theta}{2}\right)^2} \quad (2.54)$$

dok se brzine v_x' i v_y' izračunavaju na osnovu izraza:

$$v_x' = v_x + \operatorname{tg}\left(-\frac{\theta}{2}\right) v_y, \quad (2.55)$$

$$v_y' = v_y + \operatorname{tg}\left(-\frac{\theta}{2}\right) v_x, \quad (2.56)$$

u kojima je θ ugao rotacije vektora brzine pod dejstvom magnetskog polja čija je vrednost

$$\theta = \frac{eB}{m} \Delta t. \quad (2.57)$$

Nakon rotacije, intenzitet brzine se uvećava za vrednost ubrzanja elektrona nastalog dejstvom električnog polja u toku druge polovine vremenskog koraka Δt :

$$v_x := v_x + \frac{eE}{m} \frac{\Delta t}{2}. \quad (2.58)$$

Položaj elektrona nakon vremenskog koraka Δt se definiše izrazima:

$$x := x_0 + \frac{1}{2} (v_{x0} + v_x(t)) \Delta t, \quad (2.59)$$

$$y := y_0 + \frac{1}{2} (v_{y0} + v_y(t)) \Delta t, \quad (2.60)$$

$$z := z_0 + v_z(t) \Delta t, \quad (2.61)$$

gde se oznake x_0, y_0, z_0, v_{x0} i v_{y0} odnose na x, y i z koordinate i x i y komponente vektora brzine pre vremenskog koraka Δt , respektivno.

U kompjuterskom kodu koji je korišćen u ovoj disertaciji, za opis kretanja elektrona u električnim i magnetskim poljima se koristi Borisova rotacija. Ova procedura je detaljno testirana u domenu kako vremenski statičkih tako i vremenski promenljivih ukrštenih električnih i magnetskih polja. U slučaju vremenski promenljivih polja, jednačina kretanja se može rešiti primenjujući kombinovane metode bazirane na metodi konačnih razlika i Runge-Kutta metoda [145, 146].

2.8.3 Određivanje vremenskog trenutka i vrste sudara

Određivanje vremenskog trenutka i vrste sudarnog procesa je drugi osnovni korak u praćenju evolucije rojeva elektrona u MC simulacijama. Vremenski trenutak u kome dolazi do sudara se određuje slučajnim brojem na osnovu kolizione frekvence elektrona na datoj energiji dok su za izračunavanje vrste sudara potrebno poznavanje odnosa preseka za rasejanje elektrona u svakom pojedinačnom sudarnom procesu i totalnog preseka za rasejanje elektrona na datoj energiji.

Određivanje vremenskog trenutka sudara

Verovatnoća da elektron neće doživeti sudar do trenutka t se izračava jednačinom [36]

$$P(t) = \exp \left(- \int_{t_0}^t \nu_T(\epsilon(t')) dt' \right) \quad (2.62)$$

u kojoj je $\nu_T(\epsilon)$ totalna koliziona frekvencija elektrona na energiji ϵ dok je t_0 početan trenutak simulacije ili trenutak prethodnog sudara. U izrazu za totalnu kolizionu frekvenciju figuriše sumiranje preseka za svaki k -ti sudarni proces σ_k koji se odigrava na energiji ϵ

$$\nu_T(\epsilon) = n_0 \sqrt{\frac{2\epsilon}{m}} \sum_k \sigma_k(\epsilon), \quad (2.63)$$

kao i koncentracija čestica pozadinskog gasa n_0 i masa elektrona m . Gustina verovatnoće da će elektron doživeti sudar u vremenom intervalu $(t + \Delta t)$ se izračunava izrazom

$$p(t) = \frac{P(t) - P(t + \Delta t)}{\Delta t} = \nu_T(\epsilon(t)) \exp \left(- \int_{t_0}^t \nu_T(\epsilon(t')) dt' \right). \quad (2.64)$$

Trenutak sudara t_c se određuje izjednačavanjem verovatnoće da slučajni broj ξ_1 uzima vrednost iz uniformne raspodele u intervalu od 0 do 1 i verovatnoće da slučajna veličina t_c pripada intervalu $[t_0, t_c]$:

$$-ln(1 - \xi_1) = \int_{t_0}^{t_c} \nu_T(\epsilon(t)) dt. \quad (2.65)$$

Generalno, prethodna jednačina je analitički nerešiva pošto je totalna koliziona frekvencija komplikovana funkcija energije i vremena. Egzaktan trenutak sudara t_c se može dobiti numeričkom integracijom jednačine (2.65) [147] ili primenom metode multih sudara [148].

U metodi numeričke integracije, koja je primenljiva kako u vremenski konstantnim tako i u vremenski promenljivim poljima, leva strana prethodne jednačine se aproksimira kolizionom sumom:

$$-ln(1 - \xi_1) \leq \sum_i \nu_T(\epsilon(t_i)) \Delta t_i. \quad (2.66)$$

Kada za neko $i = k$ prestane da važi prethodna nejednakost, trenutak sudara se izračunava kao $\sum_{i=1}^{i=k} \Delta t_i$. Na preciznost određivanja vremena sudara t_c utiče veličina vremenskog koraka Δt_i . Njegova vrednost se izračunava biranjem najmanje od sledećih vremenskih konstanti: srednje vreme između dva sudara, ciklotronski period i vreme samplovanja fizičkih karakteristika elektrona, koja se zatim deli proizvoljnim brojem iz opsega od 20 do 100. Promena imenioca u izrazu za određivanje vremenskog koraka Δt_i može da se iskoristi za testiranje konvergencije numeričke integracije.

Putem metode nultih sudara (engl. *null – collision method*) [148], jednačina (2.65) se analitički rešava nakon obezbeđivanja vremenske nepromenljivosti kolizione frekvence $\nu_T(\epsilon(t))$. Ovaj uslov se zadovoljava uvođenjem fiktivnog procesa za nulti sudar koji ne menja energiju elektrona. Njegova koliziona frekvencija se bira tako da suma totalne kolizione frekvence $\nu_T(\epsilon(t))$ i kolizione frekvence nultih sudara $\nu_{null}(\epsilon(t))$ bude konstantna u vremenu i jednaka maksimalnoj vrednosti ν_{max} :

$$\nu_{max} = \nu_T(\epsilon(t)) + \nu_{null}(\epsilon(t)). \quad (2.67)$$

Uvođenjem ovog izraza u jednačinu (2.65), izračunava se vreme sudara biranjem slučajnog broja ξ_1 iz uniformne raspodele na intervalu od 0 do 1:

$$t_c = t_0 - \frac{\ln(1 - \xi_1)}{\nu_{max}}. \quad (2.68)$$

Metoda nultih sudara zahteva da se modifikuje totalni presek za rasejanje elektrona u posmatranom gasu. Ovo se postiže dodavanjem preseka za nulte sudare na stvarni totalni presek čime se dobija ukupan presek koji se ponaša prema zavisnosti $1/v$ gde je v brzina elektrona. Nakon određivanja trenutka sudara t_c bira se dodatan slučajan broj kako bi se utvrdilo da li je doživeo pravi ili nulti sudar. Ukoliko se desio nulti sudar, elektron nastavlja kretanje bez promene svoje putanje i energije.

Metoda nultih sudara je jednostavna i brza metoda za izračunavanje trenutka sudara. Zahvaljujući svojoj jednostavnosti, preciznosti i primenljivosti kako u hidrodinamičkim tako i u nehidrodinamičkim uslovima [43], implementirana je u javno dostupnim MC kodovima (MAGBOLTZ, METHES). Međutim, ova metoda može osetno da uspori računarski kod ukoliko elektroni doživljavaju veliki broj nultih sudara. Primer za to je transport elektrona u plementim gasovima čiji presek za elastične sudare na malim energijama ima Ramsauer-Townsendov minimum kao i transport elektrona pod dejstvom vremenski promenljivih polja.

Određivanje vrste sudara

Nakon utvrđivanja vremena sudara, određuje se vrsta sudarnog procesa u kome elektron učestvuje. Uvode se parcijalne sudarne verovatnoće date odnosom preseka za rasejanje elektrona u procesu j , obeleženih oznakom $\sigma_j(\epsilon)$, i totalnog preseka za rasejanje elektrona na energiji ϵ u oznaci $\sigma_T(\epsilon)$:

$$P_j = \frac{\sigma_j(\epsilon)}{\sigma_T(\epsilon)}. \quad (2.69)$$

Bira se slučajan broj ξ_2 iz uniformne raspodele na intervalu (0,1) i utvrđuje za koje $j = k$ je zadovoljena relacija:

$$\sum_{j=1}^{k-1} P_j < \xi_2 < \sum_{j=1}^k P_j. \quad (2.70)$$

Vrsta sudarnog procesa koju elektron doživljava definisana je k -tim procesom. Bitno je napomenuti da ukoliko se pri određivanju vremena sudara koristi metoda nultih sudara onda se u prethodnoj relaciji figuriše i parcijalna sudarna verovatnoća za nulti sudar.

2.8.4 Izračunavanje parametara rasejanja elektrona

Sledeći važan korak u MC simulacijama je utvrđivanje komponenti vektora brzine i energije elektrona nakon sudara. U ovoj disertaciji, smatra se da je rasejanje elektrona na čestici pozadinskog gasa uniformno kako po azimutalnom uglu φ tako i po uglu rasejanja θ koje novi smer kretanja elektrona zahvata sa električnim poljem. Drugim rečima, u ovoj disertaciji se razmatra izotropan model rasejanja. Kako se smatra da je ugao φ uzima vrednost iz uniformne raspodele u intervalu $[0, 2\pi]$, njegova vrednost je određena na osnovu slučajnog broja ξ_3 koji je uniforman na intervalu $(0,1)$:

$$\varphi = 2\pi\xi_3. \quad (2.71)$$

U našem kodu se i ugao rasejanja θ smatra uniformnim za sve vrste sudarnih procesa čime se njegova vrednost izračunava kao:

$$\theta = \arccos(1 - 2\xi_4) \quad (2.72)$$

pri čemu i slučajan broj ξ_4 uzima vrednost iz uniformne raspodele u granicama $(0,1)$. Umesto totalnog preseka za elastično rasejanje, u modelu izotropnog rasejanja je potrebno koristiti presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima. Što se tiče preseka za neelastične sudare, u ovom modelu se mogu koristiti totalni preseki, imajući u vidu minimalan transfer impulsa u ovim sudarima. Ukoliko je neophodno uzeti u obzir anizotropiju rasejanja, ugao rasejanja je dat diferencijalnim presekom na tekućoj energiji elektrona. U ovom slučaju, za proračun totalne kolizione frekvence koja je neophodna za određivanje tačnog trenutka sudara, neophodno je koristiti totalni presek za elastične sudare koji se može dobiti integracijom diferencijalnih preseka. Anizotropno rasejanje ima važnu ulogu na visokim energijama elektrona, na kojima rasejanje unapred postaje dominantno, ili u limitu malih energija za molekule sa velikim dipolnim momentum. Pored direktne implementacije diferencijalnih preseka, postoji više načina za tretman ugaone raspodele rasejanja. Uticaj ugaone raspodele rasejanja u elastičnim sudarima na transport elektrona se može proučavati na osnovu algoritama koje su predložili [149], [150] i [151]. U svim ovim modelima ugaonog rasejanja, neophodno je fiksirati transfer impulsa u elastičnim sudarima.

Pravac rasejanja elektrona nakon sudara je definisan uglovima φ i θ dok se intenzitet brzine određuje na osnovu energije elektrona nakon sudara:

$$v = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}}, \quad (2.73)$$

gde je ε energija elektrona nakon sudara dok je m njegova masa. Što se tiče energije elektrona nakon elastičnog rasejanja, njena vrednost se izračunava izrazom:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{2m}{M}(1 - \cos \theta) \right), \quad (2.74)$$

u kome se oznaka ε_0 odnosi na energiju elektrona pre sudara dok su m i M masa elektrona i masa neutralnih čestica od kojih je sačinjen pozadinski gas, respektivno. Ukoliko elektron doživi neelastičan sudar sa metom čiji je energijski prag ε_{thresh} , onda se energija elektrona nakon ovakvog sudara izračunava izrazom:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 - \varepsilon_{thresh}. \quad (2.75)$$

Nakon sudara, elektron može i da poveća svoju energiju. Do ovoga dolazi pri superelastičnom procesu koji se odigrava u suprotnom smeru od odgovarajućeg neelastičnog procesa a pri kome elektron povećava svoju energiju za vrednost ε_{thresh} .

Elektron može da učestvuje i u nekonzervativnim sudarima. U pitanju su procesi u kojima se ne održava broj elektrona u sistemu. Primer su jonizacija, zahvat elektrona (engl. *attachment*) od strane neutrala pozadinskog gasa i rekombinacija elektrona i pozitivnih jona. Prilikom jonizacije nastaje

nov elektron dok se energija inicijalnog elektrona umanjuje za vrednost praga ovog procesa. Deljenje energije između inicijalnog i novonastalog elektrona može biti rešeno na nekoliko načina. Oba elektrona mogu dobiti po polovinu energije koja preostaje nakon jonizacije, inicijalan elektron može zadržati svu energiju ili, kao što je to rešeno u našem MC kodu, deljenje energije može da se odvija na potpuno slučajnan način biranjem slučajnog broja ξ_5 koji uzima vrednost iz uniformne raspodele na intervalu (0,1). Ukoliko elektron učestvuje u drugim navedenim nekonzervativnim sudarima (zahvat ili rekombinaciju sa pozitivnim jonom), on se u MC simulacijama jednostavno uklanja iz roja.

2.8.5 Izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona putem Monte Karlo simulacija

Monte Karlo simulacijama se izračunavaju transportni koeficijenti elektrona. Međutim, direktan produkt simulacija nisu transportni koeficijenti već veličine na osnovu kojih se ovi koeficijenti naknadno izračunavaju.

Jednačinama 2.34, 2.35, 2.36, 2.39, 2.40 se izračunavaju transportni koeficijenti elektrona. Međutim, ove jednačine nisu direktno primenljive u Monte Karlo simulacijama već je neophodna njihova diskretizacija.

Kao što je objašnjeno u potpoglavlju 2.8, kretanje pojedinačnih elektrona se prati u toku vremenskog intervala dužine Δt dok se nakon svakog vremenskog koraka ΔT vrši usrednjavanje vrednosti dinamičkih karakteristika roja elektrona. Te dinamičke karakteristike su prostorne koordinate i komponente brzina elektrona na osnovu kojih se, nakon svakog ΔT , izračunavaju transportni koeficijenti elektrona. Srednja energija elektrona se izračunava na sledeći način:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle, \quad (2.76)$$

dok se balk brzina drifta i balk difuziono tenzor izračunavaju narednim formulama, respektivno:

$$\mathbf{W} = \frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \rangle, \quad (2.77)$$

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle \mathbf{r}^* \mathbf{r}^* \rangle, \quad (2.78)$$

u kojima se simbol $\langle \rangle$ odnosi na usrednjavanje po ansamblu elektrona dok je $\mathbf{r}^* = \mathbf{r} - \langle \mathbf{r} \rangle$. Fluks brzina drifta i fluks difuzioni tenzor se izračunavaju kao:

$$\mathbf{W}^* = \left\langle \frac{d}{dt} \mathbf{r} \right\rangle, \quad (2.79)$$

$$\mathbf{D}^* = \frac{1}{2} \left\langle \frac{d}{dt} \mathbf{r}^* \mathbf{r}^* \right\rangle. \quad (2.80)$$

Efektivan koeficijent jonizacije se u Monte Karlo simulacijama izračunava putem:

$$\alpha = - \frac{d(\log N)}{dt} \quad (2.81)$$

gde je N broj elektrona u trenutku t .

2.9 Zaključak

U ovom poglavlju su prikazani osnovni elementi hidrodinamičke kinetičke teorija za opis transporta elektrona u neutralnim gasovima. Definisan je roj elektrona, uveden je pojam hidrodinamičkog režima

uz čiju pretpostavku je funkcija raspodele prikazana preko razvoja po gradijentima koncentracije elektrona. Identifikovani su i definisani fluks brzina drifta i fluks difuzioni tenzor koji figurišu u vremenski zavisnoj fluks-gradijentnoj relaciji kao i balk brzina drifta elektrona i balk difuzioni tenzor u vremenski zavisnoj difuzionj jednačini. Objašnjeni su osnovni koraci momentne metode za rešavanje Bolcamnove jednačine kojom se funkcija raspodele razvija po specijalnim funkcijama.

Kao druga tehnika za izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona, prikazana je Monte Karlo metoda kojom se prati prostorno-vremenska evolucija velikog broja elektrona u beskonačnom gasu pod uticajem električnog i magnetskog polja. Objašnjene su osnovne metode, uključujući metodu za integraciju jednačina kretanja, metodu za određivanje tačnog trenutka i vrste sudara, metodu za određivanje dinamičkih karakteristika elektrona nakon sudara i tretman nekonzervativnih sudara.

Poglavlje 3

Transport elektrona u trifluorometil-jodidu (CF_3I)

3.1 Uvod

U ovom poglavlju je analiziran transport elektrona u trifluorometil-jodidu (CF_3I) i njegovim smešama sa argonom i ugljendioksidom. Transportni koeficijenti elektrona su izračunati u opsegu redukovanih električnih polja u kojima postoje eksperimentalni rezultati. Polazeći od inicijalnog skupa preseka za CF_3I , konstruisan je kompletan i samousaglašen konačan skup preseka za rasejanje elektrona u ovom gasu primenom tehnike rojeva. Na isti način, konstruisan je i skup preseka za rasejanje elektrona u CO_2 imajući u vidu potrebu za proračunom transportnih koeficijenata elektrona u smešama dva pomenuta molekularna gasa. Ovi proračuni su izvršeni našim numeričkim kodovima baziranim na Monte Karlo metodi i numeričkim multi-term rešenjima Bolcmanove jednačine kao i javno dostupnim kodom BOLSIG+.

3.2 Eksperimentalne tehnike za merenje transportnih koeficijenata elektrona

Transportni koeficijenti elektrona u gasovima se mogu meriti u različitim tipovima eksperimenata. SST eksperiment (engl. *steady – state experiment*, SST) je prvenstveno razvijen za merenje prvog Taunsendovog (engl. *Townsend*) koeficijenta jonizacije α koji opisuje električno pražnjenje [57]. Potom je ustanovljeno da se karakteristike pražnjenja kod jako elektronegativnih gasova u značajnoj meri razlikuju od atomskih i elektro-pozitivnih molekularnih gasova pa je SST eksperiment iskorišćen i za merenje koeficijenta zahvata η . Ovim eksperimentom se meri struja elektrona koja se razvija između sistema pločastih elektroda u paralelnoj konfiguraciji. Inicijalni elektroni se emituju sa katode pod dejstvom UV zračenja kojim se ona pobuđuje a izmeren strujni signal je u korelaciji sa rastojanjem

između elektroda. Pošto je pritisak gasa u ovom eksperimentu manji od nekoliko kPa, može se smatrati da je izbegnuta sekundarna emisija elektrona sa površine katode. Na taj način, izmeren strujni signal zavisi isključivo od procesa primarne jonizacije i zahvata elektrona. Fitovanjem odgovarajuće analitičke formule na ovaj strujni signal, dobijaju se vrednosti koeficijenata α i η .

Eksperimentom u impulsnom Taunsendovom režimu (engl. *pulsed – Townsend experiment*, PT) se pored α i η koeficijenata mogu izmeriti brzina drifta elektrona i longitudinalan koeficijent difuzije [57]. I u ovoj eksperimentalnoj postavci, jonizaciona komora se sastoji od međusobno paralelnih pločastih elektroda. Anoda je uzemljena a katoda se napaja potencijalom čime se u prostoru između elektroda formira uniformno električno polje. Primarni elektroni se generišu laserskom pobudom fotosenzitivne ćelije unutar metalne katode. Osnovni zahtev PT eksperimenta je da katoda emituje približno 10^7 primarnih elektrona. Brzina drifta elektrona se dobija na osnovu poznatog rastojanja među elektrodama i precizno utvrđenog tranzijentnog vremena elektrona. Od preciznosti određivanja brzine drifta elektrona zavisi preciznost ostalih transportnih koeficijenata koji se dobijaju PT eksperimentom. Efektivan koeficijent jonizacije, jednak razlici koeficijenta jonizacije i zahvata, se izračunava na osnovu fitovanja strujnog signala i izračunate brzine drifta elektrona. Konačno, na osnovu ova dva transportna koeficijenta elektrona i analitičkog izraza za izmerenu struju u ovom eksperimentu, izračunava se longitudinalan koeficijent difuzije [152].

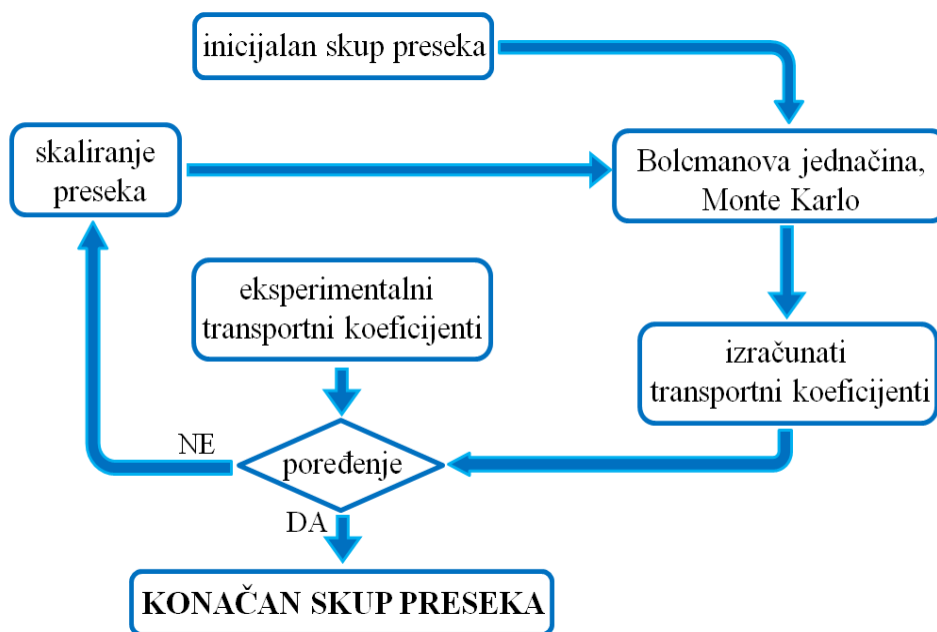
U eksperimentu zasnovanom na merenju vremena preleta elektrona (engl. *time of flight*, TOF), laserski impuls iz UV oblasti spektra pogađa fotoemisionu elektrodu integrisanu u katodi. Generisan snop inicijalnih elektrona putuje ka mernoj elektrodi dejstvom ubrzavajućeg vremenski konstantnog polja [153]. Tokom eksperimenta se podešava rastojanje između elektroda i meri struja elektrona koja odgovara svakom od ovih rastojanja. Izmerena struja je proporcionalna koncentraciji elektrona koja je u korelaciji sa brzinom drifta elektrona, njihovom difuzijom i efektivnim koeficijentom jonizacije. Tri navedena transportna koeficijenta se dobijaju fitovanjem analitičkog izraza za koncentraciju elektrona na strujne profile izmerene pri svim podešenim međuelektrodnim rastojanjima. Poređenjem referentnih transportnih podataka (koje možemo dobiti rešavanjem Bolcmanove jednačine ili Monte Karlo simulacijama na osnovu poznatog skupa preseka za rasejanje elektrona u ispitivanom gasu) sa podacima dobijenim opisanom tehnikom fitovanja, mogu se izračunati korekcionni faktori naftovanih transportnih koeficijenata elektrona.

3.3 Tehnika rojeva

Tehnika rojeva je iterativna procedura kojom se inicijalan skup preseka za rasejanje elektrona u ispitivanom gasu modifikuje u cilju postizanja zadovoljavajućeg slaganja između izračunatih i eksperimentalno izmerenih transportnih koeficijenata elektrona. Inicijalno razvijena od strane Phelps [11] i Cromptona [14], tehnika rojeva je postala prihvaćena, kompetitivna i komplementarna tehnika ostalim metodama za dobijanje individualnih preseka za rasejanje elektrona kao što su eksperimenti sa ukrštenim snopovima i eksperimenti sa totalnom atenuacijom snopova elektrona. Tehnika rojeva ima najveći značaj u oblasti niskih energija elektrona u kojoj druge eksperimentalne tehnike imaju čitav niz sistematskih poteškoća od kojih je nedovoljna energijska rezolucija snopa elektrona jedna od ključnih.

Tehnika rojeva se upotrebljava na dva načina. Njom se mogu utvrditi efekti nepoznatih individualnih sudarnih procesa elektrona što su najčešće preseki za rotacionu ili vibracionu ekscitaciju molekula. Sa druge strane, ova tehnika se može primeniti u tzv. *normalizaciji skupova preseka* za rasejanje elektrona. U ovom slučaju, modifikuje se jedan ili više preseka za rasejanje elektrona sa ciljem povećanja stepena konzistentnosti skupa preseka sa eksperimentalno određenim transportnim koeficijentima elektrona. Neophodno je naglasiti da se u kinetičkim modelima neravnotežnih plazmi mogu koristiti isključivo normirani skupovi preseka. Zato je tehnika rojeva od ključnog značaja u formiranju ulaznih podataka ovih modela [7, 8].

Postupak konstruisanja konačnog skupa preseka tehnikom rojeva je šematski prikazan na slici 3.1.



Slika 3.1: Šematski prikaz iterativnog postupka modifikacije preseka tehnikom rojeva.

Polazeći od inicijalnog skupa preseka za rasejanje elektrona u ispitivanom gasu, transportni koeficijenti elektrona se izračunavaju numeričkim rešavanjem BE ili MC simulacijama a zatim se upoređuju sa referentnim eksperimentalnim transportnim koeficijentima elektrona. Ukoliko nije postignut unapred određen stepen slaganja između pomenutih podataka, vrši se skaliranje individualnih preseka. Time se formira korigovan skup preseka na osnovu koga se izračunavaju novi transportni koeficijenti elektrona i porede sa istim referentnim eksperimentalnim podacima. Opisan postupak se ponavlja sve dok se ne dostigne željeno slaganje između izračunatih i izmerenih transportnih koeficijenata elektrona u ispitivanom gasu. Ovim se dobija konačan odnosno normiran skup preseka na eksperimentalne podatke koji su referentni u ovoj iterativnoj proceduri.

Uspeh tehnike rojeva zavisi od nekoliko faktora. Pre svega, mora se voditi računa o načinu sastavljanja inicijalnog skupa preseka. On bi trebao da sadrži što pouzdanije preseke za individualne sudarne procese koji su eksperimentalno izmereni ili izračunati teorijskim putem. Takođe, preseki bi trebali da se odnose na različite vrste individualnih procesa i da obuhvataju što širi opseg energija elektrona. Drugi bitan faktor su inherentne osobine metode za izračunavanje transportnih koeficijenata. Veoma je važno da se primenjuje što preciznija tehnika kako bi ovaj korak iterativnog postupka na najmanji mogući način uticao na razliku između izračunatih i izmerenih transportnih koeficijenata. Što se tiče skupa transportnih koeficijenata koji predstavlja referentne eksperimentalne podatke, važno je koristiti što veći broj različitih transportnih koeficijenata kako bi se obezbedila jedinstvenost finalnog skupa preseka. Od izuzetne je važnosti da se u ovom skupu nalaze transportni koeficijenti koji se mere sa velikom preciznošću (brzina drifta, karakteristična energija, koeficijenti jonizacije i zahvata elektrona). Ukoliko se kao referentni eksperimentalni podaci koriste transportni koeficijenti elektrona u smešama, tehnikom rojeva se može povećati pouzdanost konačnog skupa preseka putem preciznijeg određivanja pojedinačnih preseka imajući u vidu veliku osetljivost funkcije raspodele elektrona na prisustvo drugih gasova. Metoda gasnih smeša se zasniva na analizi smeše malog procenta ispitivanog gasa koji se dodaje gasu sa pouzdanim presecima [29, 154–156]. Bitno je da se kod ovog nosećeg gasa ne javljaju sudarni procesi u oblasti energija u kojoj želimo da precizno odredimo preseke ispitivanog gasa. Metodom gasnih smeša se najčešće određuju preseki ispitivanog gasa na niskim i srednjim

energijama.

Tehnika rojeva ima svoje prednosti ali i nedostatke. Kao rezultat ove metode, dobijaju se kompletni i samousaglašeni skupovi preseka za rasejanje elektrona u ispitivanom gasu koji obezbeđuju balans broja čestica, impulsa i energije u modelima plazme ili nekog drugog sistema koji se razmatra. Ukoliko skup preseka obezbeđuje zadovoljavajuć stepen slaganja između izračunatih i izmerenih transportnih koeficijenata, znači da su obezbeđeni pomenuti balansi kao i da je tačno određena funkcija raspodele elektrona po energijama u energijskom opsegu koji je obuhvaćen ovim eksperimentalnim podacima. Imajući u vidu da se tehnikom rojeva dobijaju preseki na apsolutnoj skali, oni se direktno mogu koristiti kao ulazni podaci u kinetičkim modelima plazme.

Jedan od nedostataka tehnike rojeva je nejedinstvenost skupa preseka. Ona se ogleda u mogućnosti konstruisanja više međusobno različitih skupova preseka koji obezbeđuju jednako dobro slaganje sa istim referentnim eksperimentalnim podacima. Ovaj nedostatak se u značajnoj meri može prevazići primenom metode gasnih smeša ili korišćenjem većeg broja transportnih koeficijenata u proceduri fitovanja. Veći broj eksperimentalno određenih transportnih koeficijenata se može dobiti u prisustvu električnih i magnetskih polja [157] a mogu se koristiti i transportni koeficijenti trećeg reda [158–161].

Takođe, jedinstvenost skupa preseka se može obezbediti uvođenjem fiktivnih sudarnih procesa [46, 162, 163]. Na primer, poznato je da se preseki za elektronsku ekscitaciju (i disocijaciju u slučaju molekularnih gasova) najčešće eksperimentalno određuju sa ne tako velikom pouzdanošću. Takođe, poznato je da je koeficijent jonizacije jako osetljiv upravo na ovaj presek. Na osnovu toga, pouzdanost konačnog skupa preseka se povećava uvođenjem efektivnog ekscitacionog preseka (i efektivnog disocijativnog preseka) koji dobro reprezentuje referentan koeficijent jonizacije. Koeficijent jonizacije elektrona je, naravno, izuzetno osetljiv i na presek za jonizaciju međutim kako se ovaj presek meri sa velikom pouzdanošću on se po pravilu nikada ne modifikuje. Drugi nedostatak ove iterativne tehnike je ograničena rezolucija. Još jedan nedostatak tehnike rojeva se odnosi na usrednjavanje ugaone raspodele u rasejanju elektrona. To znači da ne postoji mogućnost određivanja diferencijalnih preseka za rasejanje elektrona. Ovaj nedostatak je izražen u situacijama kada transportni podaci zavise od ugla pod kojim se elektroni rasejavaju nakon sudara. Kao što je rečeno, u proučavanju transporta elektrona u ovoj doktorskoj disertaciji se smatra da se u svim sudarnim procesima elektroni rasejavaju izotropno u prostoru pa ovaj nedostatak tehnike rojeva nije od uticaja na kvalitet konstruisanih skupova preseka. Još jedna karakteristika tehnike rojeva se može navesti kao njen nedostatak a to je indirektna priroda tehnike kojom se preseki za rasejanje elektrona dobijaju posredstvom eksperimentalnih transportnih koeficijenata elektrona.

Uprkos navedenim nedostacima, određivanje nepoznatih individualnih preseka i normalizacija skupova preseka za rasejanje elektrona ima važnu ulogu u fizici rojeva naelektrisanih čestica i u modelovanju neravnotežnih plazmi. U poslednje vreme, klasične iterativne numeričke procedure se sve češće zamenjuju savremenim metodama baziranim na veštačkoj inteligenciji i mašinskom učenju. Na ovaj način se drastično smanjuje vreme i mogući subjektivni elementi koji se unose u iterativnu proceduru za normalizaciju preseka. Metode mašinskog učenja su nedavno upotrebljene za razvoj i normalizaciju preseka za rasejanje elektrona u biomolekulima C_4H_8O [164] i $C_5H_{10}O$ [165] kao i molekulu NO [166].

3.4 Inicijalan skup preseka za CF_3I

U literaturi su publikovana tri skupa preseka za rasejanje elektrona u CF_3I . U pitanju su skupovi Kimure i Nakamure [167], Kochetova i saradnika [168] kao i skup preseka koji su razvili Kawaguchi i saradnici [169].

Skup preseka Kimure i Nakamure [167] je konstruisan fitovanjem inicijalnog skupa preseka na eksperimentalne podatke koji su uključivali α/n_0 i η/n_0 u čistom CF_3I dobijene u SST eksperimentu i transportne koeficijente W , $n_0 D_L$ i $(\alpha - \eta)/n_0$ iz TOF eksperimenta [170]. Transportni koeficijenti

elektrona su izračunati rešavanjem Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana (u oznaci TTA-BE) a dobijen skup preseka je definisan u opsegu energija od 0.01 eV do 100 eV.

Kochetov i saradnici [168] su svoj skup preseka dobili fitovanjem na eksperimentalne transportne koeficijente elektrona u smeši $\text{CF}_3\text{I-N}_2$ koje su izmerili Urquijo i saradnici u PT eksperimentu [88]. Kao i u prethodnom slučaju, transportni koeficijenti su izračunati rešavanjem TTA-BE a dobijen skup preseka je definisan u opsegu [0.01, 100] eV.

Skup preseka koji su razvili Kawaguchi i saradnici [169] nije dobijen fitovanjem na merenja jednog referentnog autora. Transportni koeficijenti elektrona u CF_3I su izračunati MC simulacijama nakon čega su upoređeni sa eksperimentalnim podacima dobijenim u PT eksperimentu Urquijo i saradnika [88], SST eksperimentu Kimure i saradnika [167] kao i u SST eksperimentu i eksperimentu duplog uzmaka. Hasegawe i saradnika [171]. Skup preseka Kawaguchija i saradnika je definisan u opsegu energija od 0.01 eV do 1000 eV.

Pored ovih skupova preseka, koji se u dobroj meri mogu okarakterisati kao kompletni i samousaglašeni, postoje i preporučeni preseki za individualne sudarne procese koje su predložili Christophorou i Olthoff [21]. Međutim, ovaj skup pojedinačnih preseka nije normiran na referentne transportne koeficijente elektrona već predstavlja skup najboljih preseka za individualne sudarne procese koji se, kao takvi, ne mogu direktno koristiti u modelovanju pre njihove normalizacije.

Za potrebe ove doktorske disertacije je kao inicijalan skup preseka odabran onaj koji je razvijen od strane Kimura i Nakamura [167]. Iako je ovaj skup preseka po svojoj prirodi kompletna, on nije konzistentan sa eksperimentalnim vrednostima transportnih koeficijenata koji su izmereni u PT eksperimentu de Urquijo i saradnika [88]. Na osnovu eksperimentalnih transportnih koeficijenata elektrona u čistom CF_3I i njegovim smešama sa argonom (Ar) i ugljendioksidom (CO_2) izmerenim u PT eksperimentu od strane pomenute grupe autora, i skupa preseka Kimure i Nakamre [167] koji smo koristili kao inicijalan skup preseka, konstruisan je konačan skup preseka za rasejanje elektrona u CF_3I gasu primenom tehnike rojeva.

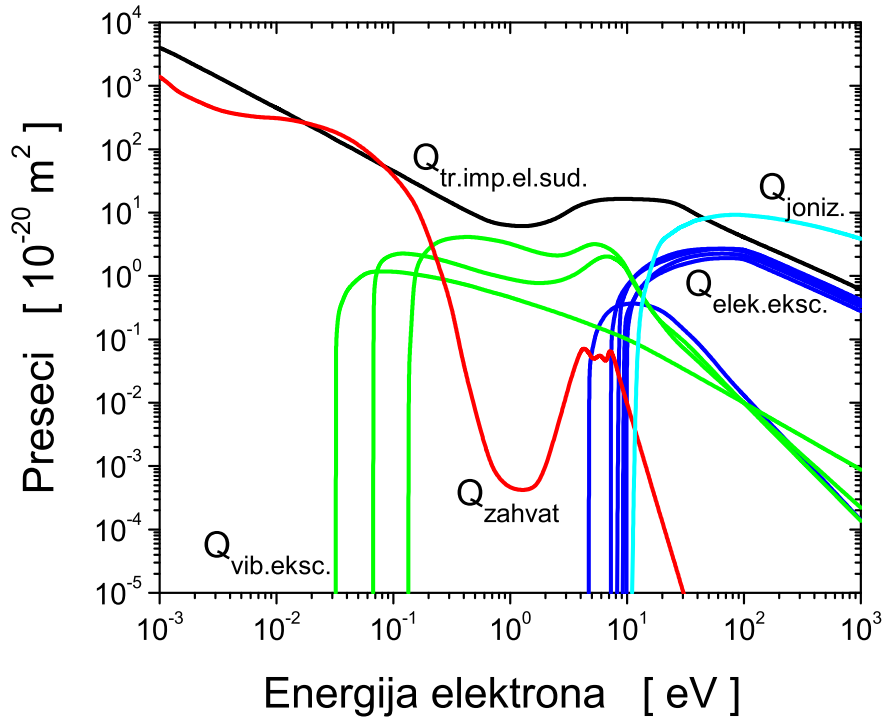
3.5 Konačan skup preseka za CF_3I

U cilju konstruisanja konačnog skupa preseka za rasejanje elektrona u CF_3I , modifikacija skupa preseka Kimure i Nakamure [167] je izvršena na sledeći način:

1. smanjena je veličina preseka za totalni transfer impulsa u opsegu [4, 20] eV dok je na energijama manjim od 10^{-2} eV presek izračunat metodom logaritamske ekstrapolacije,
2. svi preseki za elektronsku ekscitaciju su skalirani faktorom 1.17 nakon čega su dalje modifikovani,
3. povećan je presek za vibracionu ekscitaciju sa najvećim pragom u opsegu [4, 6] eV,
4. presek za zahvat elektrona je najpre dopunjen vrednostima autora Alajajian i saradnika [172] na najnižim energijama dok je u opsegu [0.5, 3] eV izvršena rekonstrukcija preseka na osnovu predloženih podataka autora Christophorou i Olthoff [21],
5. za vrednosti preseka za jonizaciju na energijama većim od 45 eV uzeti su teorijski podaci autora Anthony i saradnika [173] dok je za energijski prag uzeta vrednost najnižeg jonizacionog kanala iz [174].

Konačno, svi preseki su ekstrapolirani do energije 1000 eV sa ciljem izračunavanja transportnih koeficijenata počevši od nekoliko Td do nekoliko hiljada Td.

U našim numeričkim kodovima (MC, BE) se kao ulazni podaci zadaju preseki za rasejanje elektrona u ispitivanom gasu. Među njima je neophodan presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima. Kada je rasejanje elektrona izotropno, svi preseki za neelastične sudare se smatraju presecima za



Slika 3.2: Skup preseka za rasejanje elektrona u CF_3I . Skup sadrži: $Q_{tr.imp.el.sud.}$ presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, tri $Q_{vib.eksc.}$ preseka za vibracionu ekscitaciju, pet $Q_{elek.eksc.}$ preseka za elektronsku ekscitaciju, Q_{zahvat} presek za zahvat elektrona i $Q_{joniz.}$ presek za jonizaciju.

transfer impulsa. To znači da se presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima može dobiti oduzimanjem svih preseka za neelastične sudare od ukupnog preseka za transfer impulsa koji je u aproksimaciji izotropnog rasejanja jednak preseku za totalno rasejanje. Alternativno, presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima se može dobiti integracijom diferencijalnog preseka za elastično rasejanje.

3.5.1 Izračunavanje preseka za superelastične procese

U slučaju potrebe za izračunavanjem transportnih koeficijenata elektrona u gasu na nenultoj temperaturi, osim preseka za rasejanje elektrona na atomima/molekulima gasa u osnovnom stanju, moraju se uzeti u obzir i sudari elektrona sa pobuđenim gasom. Ove sudare opisuju preseci za superelastične procese.

Kod jednostavnijih gasova, čiji atomi/molekuli imaju dipolan ili kvadrupolan moment, mogu se primeniti poznate teorije za izračunavanje preseka za superelastične sudarne procese (Takayanagi i Gerjouy and Stein teorija, respektivno). Za razliku od njih, kod komplikovanih gasova koji se ne mogu okarakterisati jednim od ovih momenata ili kod gasova za koje ne postoje podaci o fizičkim veličinama koje figurišu u izrazima ovih teorija, može se primeniti princip detaljnog balansa za izračunavanje preseka za superelastične procese.

Po ovom principu, stopostotan presek za superelastičan proces q_S na energiji ε se izračunava na osnovu stopostotnog preseka za odgovarajuć neelastičan proces q_J :

$$q_S(\varepsilon) = \frac{P_0}{P_J} \frac{\varepsilon + \varepsilon_J}{\varepsilon} q_J(\varepsilon + \varepsilon_J). \quad (3.1)$$

ε_J je energijski prag za dešavanje neelastičnog procesa dok su P_0 i P_J statističke težine nultoj i J -tog

nivoa respektivno, izračunate prema jednačini

$$P_J = (2I + 1)(I - a)(2J + 1) \quad (3.2)$$

u kojoj figurišu nuklearan spin I i konstanta a koja uzima različite vrednosti za parne i neparne energetske nivoe. Otežinjen presek za superelastičan proces se dobija množenjem preseka $q_S(\varepsilon)$ populacijom novoa sa koga se odigrava ovaj prelaz:

$$Q_S(\varepsilon) = q_S(\varepsilon) \frac{P_J}{P_r} \exp\left(-\frac{E_J}{kT}\right). \quad (3.3)$$

Oznaka k se odnosi na Bolcmanovu konstantu dok je T temperatura gasa. U prethodnom izrazu figuriše suma statističkih težina P_r koja se izračunava izrazom:

$$P_r = \sum_J P_J \exp\left(-\frac{E_J}{kT}\right), \quad (3.4)$$

u kome se energija nivoa J , u oznaci E_J , izračunava preko rotacione konstante B_0 :

$$E_J = J(J + 1)B_0. \quad (3.5)$$

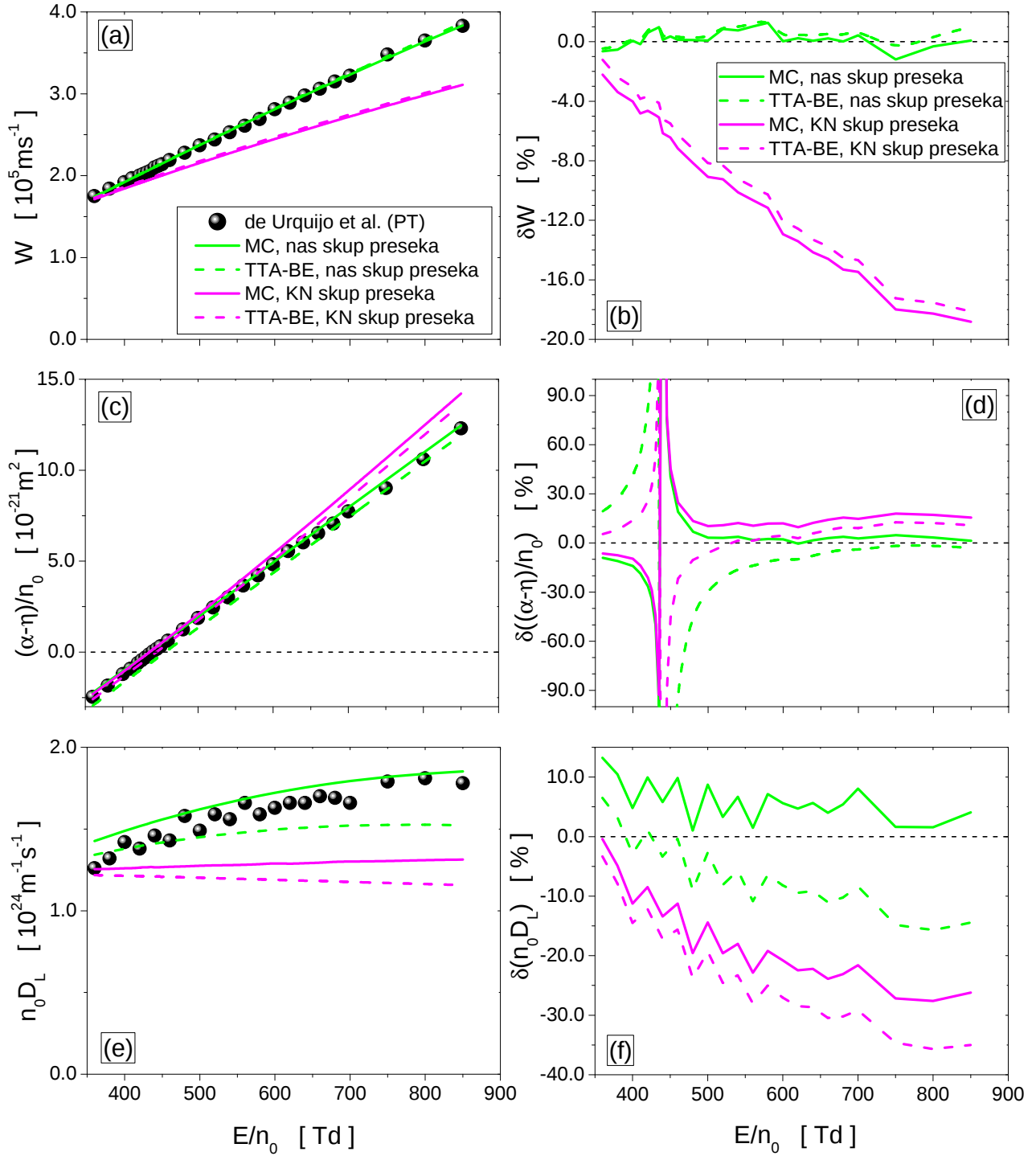
3.6 Transport elektrona u čistom CF₃I na višim vrednostima redukovano električnog polja

U ovom potpoglavlju su prikazana poređenja izračunatih i eksperimentalno određenih transportnih koeficijenata elektrona u CF₃I na onim vrednostima redukovano električnog polja (E/n_0) na kojima postoje ovi eksperimentalni podaci.

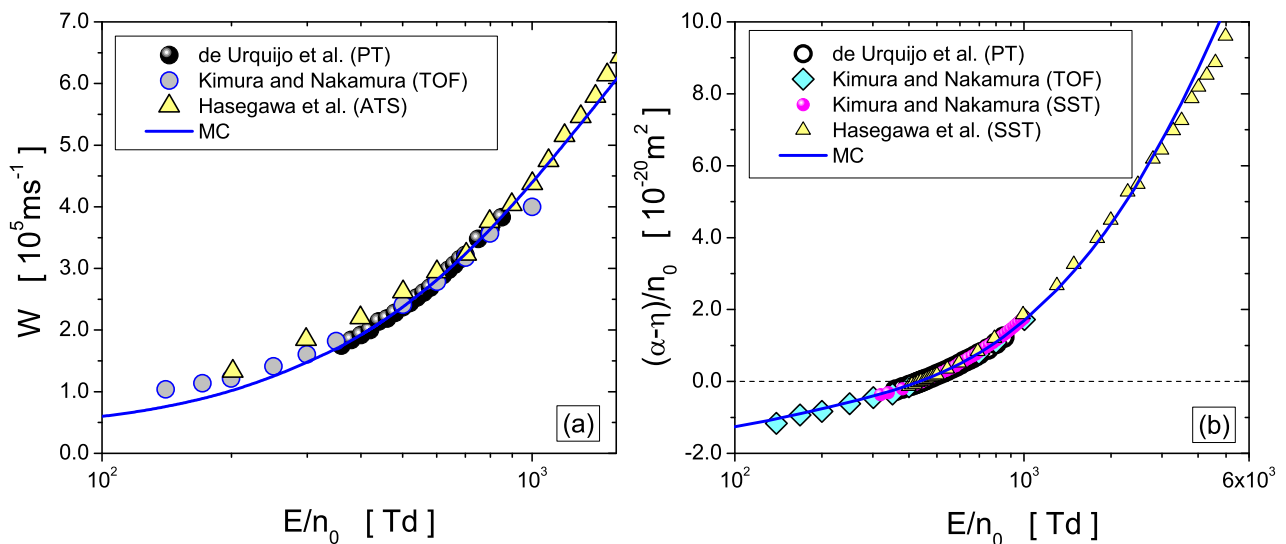
Kvalitet skupa preseka se utvrđuje upravo pomenutim poređenjima. Na levim panelima slike 3.3 su prikazane eksperimentalne vrednosti brzine drifta elektrona W (a), efektivnog koeficijenta jonizacije $(\alpha - \eta)/n_0$ (c) i proizvoda longitudinalnog koeficijenta difuzije i koncentracije gasa $n_0 D_L$ (e) u funkciji E/n_0 izmerene u PT eksperimentu od strane Urquijo i saradnika [88]. Osim njih, na istima panelima su prikazani i rezultati naših MC simulacija i TTA-BE rešenja korišćenjem našeg skupa preseka i konačnog skupa preseka iz rada Kimure i Nakamure [167] (u oznaci *KN skup preseka*). Na odgovarajućim desnim panelima iste slike su prikazana procentualna odstupanja svih grupa naših proračuna od referentnih eksperimentalnih merenja.

Sa panela (a) se uočava da obe numeričke tehnike daju mnogo bolje slaganje sa eksperimentalnim W ukoliko se u proračunima koristi naš skup preseka za rasejanje elektrona u CF₃I. Iskazano preko relativnog odstupanja, sa panela (b) se vidi da ono kreće u opsegu od 2% dok u slučaju korišćenja KN skupa preseka odstupanje dostiže vrednost od blizu 20% na najvišim ispitivanim poljima. Brzina drifta elektrona je jako osetljiva na promenu preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima. Kako smo pri formiranju našeg skupa preseka smanjili vrednost $Q_{tr.imp.el.sud.}$ u potrebnom opsegu energija, upravo se u njemu odgovarajućem intervalu polja povećala vrednost brzine drifta elektrona u odnosi na onu koju daje KN skup preseka.

Sa panela (c) slike 3.3 se vidi da naš skup preseka bolje reprezentuje eksperimentalan koeficijent $(\alpha - \eta)/n_0$ nego KN skup preseka. Ovo poboljšanje slaganja, koje je najuočljivije na poljima višim od 600 Td, je postignuto pri formiranju našeg skupa preseka: povećani su svi preseki za elektron-sku ekscitaciju i presek za vibracionu ekscitaciju za najvišim pragom. Kako su u oblasti energija počevši od 4 eV povećani preseki u kojima elektroni gube svoju energiju dok je koeficijent zahvata ostao nepromenjen, smanjila se mogućnost dostizanja praga za jonizaciju CF₃I molekula. Samim tim, opala je i vrednost efektivnog koeficijenta jonizacije elektrona u odnosu na vrednost koja se dobija KN skupom preseka. Procentualnim odstupanjima sa panela (d) se numerički potvrđuje poboljšanje slaganja sa eksperimentalnim rezultatima ukoliko se u proračunima koristi naš skup preseka za CF₃I.



Slika 3.3: Poređenje izračunatih i eksperimentalnih vrednosti brzine drifta W , efektivnog koeficijenta jonizacije $(\alpha - \eta)/n_0$ i longitudinalnog koeficijenta difuzije $n_0 D_L$ za elektrone u CF_3I u funkciji E/n_0 . Paneli (a), (c) i (e) prikazuju poređenje izračunatih transportnih koeficijenata dobijenih polazeći od našeg skupa preseka i preseka Kimure i Nakamure sa eksperimentalnim vrednostima de Urquijo i saradnika dok je na panelima (b), (d) i (f) prikazano procentualno odstupanje svih proračuna od eksperimentalnih podataka. Legenda sa panela (a) se odnosi i na panele (c) i (e) dok se legenda sa panela (b) odnosi i na panele (d) i (f).

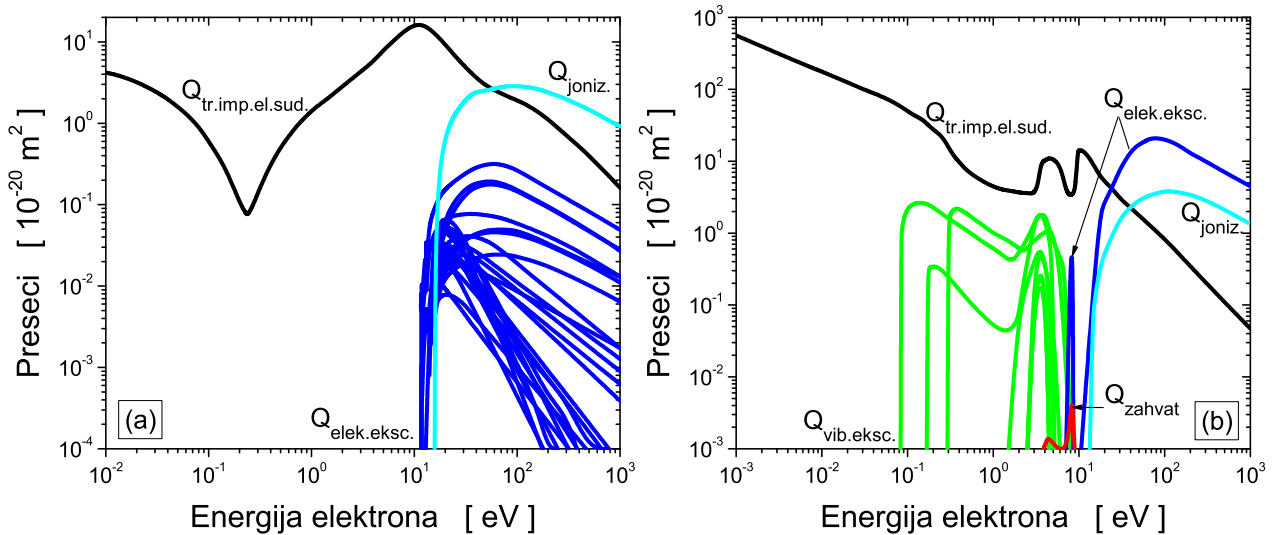


Slika 3.4: Poređenje Monte Karlo proračuna sa dostupnim eksperimentalnim vrednostima brzine drifta elektrona (a) i efektivnog koeficijenta jonizacije (b) u CF_3I u funkciji E/n_0 merenih u različitim eksperimentalnim postavkama.

Pored toga, sa istog panela se vidi i sledeće: ukoliko u proračunima koristimo naš skup preseka, MC numerička tehnika će dati mnogo bolje slaganje sa eksperimentalnim $(\alpha - \eta)/n_0$ (do 5%) u odnosu na TTA-BE tehniku. Velika procentualna odstupanja koja se javljaju u okolini nulte vrednosti efektivnog koeficijenta jonizacije nisu zabrinjavajuća jer su posledica malih razlika između izračunatih i izmerenih vrednosti ovog koeficijenta koji se međusobno razlikuju po apsolutnoj vrednosti.

Naš skup preseka za rasejanje elektrona u CF_3I u dobroj meri reprodukuje trend eksperimentalnih tačaka koeficijenta $n_0 D_L$ (slika 3.3(e)). Dok se procentualna odstupanja rezultata KN skupa preseka u odnosu na referentna merenja (panel (f)) kreću do $\sim 40\%$, našim skupom preseka se redukuje ovo odstupanje na upola manju vrednost na najvišim ispitivanim poljima. Dodatno, ukoliko se kao numerička tehnika za proračun ovog koeficijenta koriste MC simulacije, odstupanje se kreće u granicama od 10%. Iako se ovo odstupanje čini velikim, treba imati na umu da se koeficijent difuzije uglavnom meri sa velikom eksperimentalnom greškom koja veoma često značajno prelazi vrednost od 10%. U svakom slučaju, na osnovu rezultata naših proračuna u čistom CF_3I gasu prikazanim na slici 3.3 se zaključuje da naš skup preseka na zadovoljavajuć način reprodukuje referentna eksperimentalna merenja Urquija i saradnika [88].

Osim transportnih koeficijenata elektrona u CF_3I izmerenih PT eksperimentom [88], koji su iskorišćeni za dobijanje našeg skupa preseka, u literaturi se mogu naći i drugi eksperimentalni podaci. Na slici 3.4 je prikazano poređenje MC rezultata brzine drifta i efektivnog koeficijenta jonizacije u CF_3I (dobijenih našim skupom preseka) sa merenjima u različitim eksperimentima. Brzine drifta elektrona izračunate našim MC simulacijama dobro reprezentuju eksperimentalne podatke svih prikazanih autora (panel (a)). Na poljima nižim od 800 Td, slaganje naših rezultata sa merenjima Kimure i Nakamure u TOF eksperimentu je unutar 20% dok se nešto lošije slaganje postiže sa rezultatima Hasegawe i saradnika postignutim ATS eksperimentom (do 25%). Na poljima višim od 800 Td je poboljšano slaganje između rezultata naših proračuna i Hasegawe i saradnika (manje od 2.5%). Efektivan koeficijent jonizacije (panel (b)) prati trend svih prikazanih eksperimentalnih rezultata. Na poljima nižim od 400 Td, naši MC rezultati odstupaju za manje od 7.5% od merenja Kimure i Nakamure u TOF eksperimentu odnosno za manje od 6% u odnosu na merenja istih autora ali u SST eksperimentu. Odstupanje od merenja Hasegawe i saradnika iznosi maksimalno 9%.



Slika 3.5: Skupovi preseka za rasejanje elektrona u argonu (a) i ugljendioksidu (b) konstruisanom za potrebe ove doktorske disertacije. Skup preseka za rasejanje elektrona u argonu sadrži preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima, dvadeset pet preseka za elektronsku ekscitaciju i presek za jonizaciju gasa. Skup preseka za rasejanje elektrona u ugljendioksidu sadrži presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, osam preseka za vibracionu ekscitaciju, dva preseka za elektronsku ekscitaciju i po jedan presek za zahvat elektrona i jonizaciju gasa.

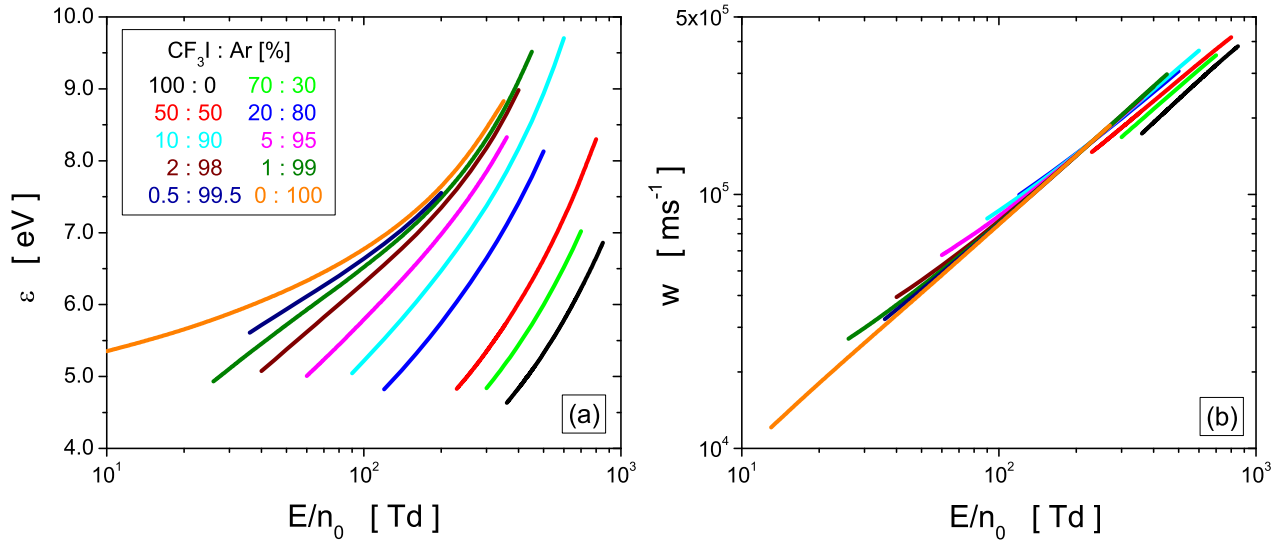
3.7 Transport elektrona u $\text{CF}_3\text{I-Ar}$ i $\text{CF}_3\text{I-CO}_2$ smešama

U ovom potpoglavlju je analiziran transport elektrona u smešama CF_3I gasa sa Ar i CO_2 . Rezultati MC i TTA-BE proračuna su upoređeni sa merenjima Urquijo i saradnika u PT eksperimentu. Korišćen je skup preseka za rasejanje elektrona u Ar koji je razvio Hayashi i koji je dostupan na LxCat bazi podataka [175] (slika 3.5(a)). Što se tiče skupa preseka za rasejanje elektrona u CO_2 , polazeći od inicijalnog skupa koji su razvili Phelps i saradnici [176], konstruisali smo naš skup preseka (slika 3.5(b)) primenom tehnike rojeva kako bi dobili dobro slaganje sa referentnim merenjima de Urquijo i saradnika izmerenim u PT eksperimentu.

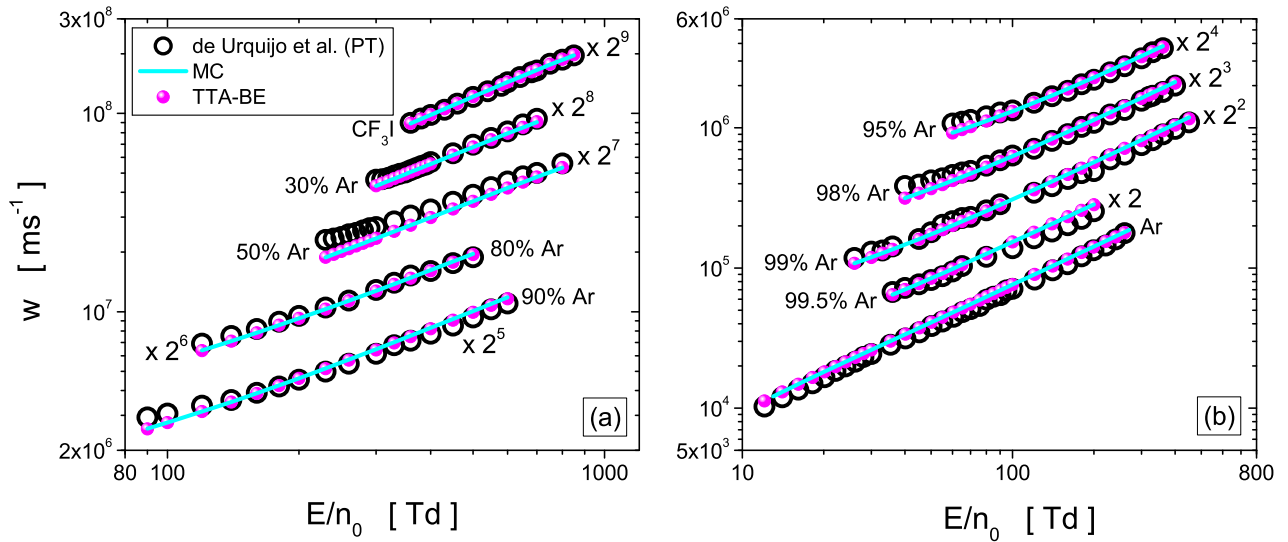
3.7.1 $\text{CF}_3\text{I-Ar}$ smeša

Na slici 3.6 su prikazane srednja energija i brzina drifta elektrona u $\text{CF}_3\text{I-Ar}$ smešama u funkciji E/n_0 . U pitanju su rezultati MC simulacija koji su, za svaku od smeša, izračunati u opsegu polja u kojima postoje eksperimentalni podaci o koeficijentima W i $(\alpha - \eta)/n_0$. Sa panela (a) se vidi da je srednja energija elektrona monotono rastuća funkcija redukovanog električnog polja bez obzira na sastav gasne smeše. Na fiksiranoj vrednosti E/n_0 , srednja energija elektrona raste sa povećanjem koncentracije Ar u smeši. Na osnovu ovih rezultata u uskim oblastima E/n_0 se vidi da je brzina drifta elektrona (panel (b)) takođe monotono rastuća funkcija električnog polja. Ne primećuje se značajnija zavisnost W od sastava gasne smeše sve do opadanja koncentracija Ar ispod 50%. Tada, brzina drifta elektrona opada sa opadanjem koncentracije ovog atomskog gasa u smeši.

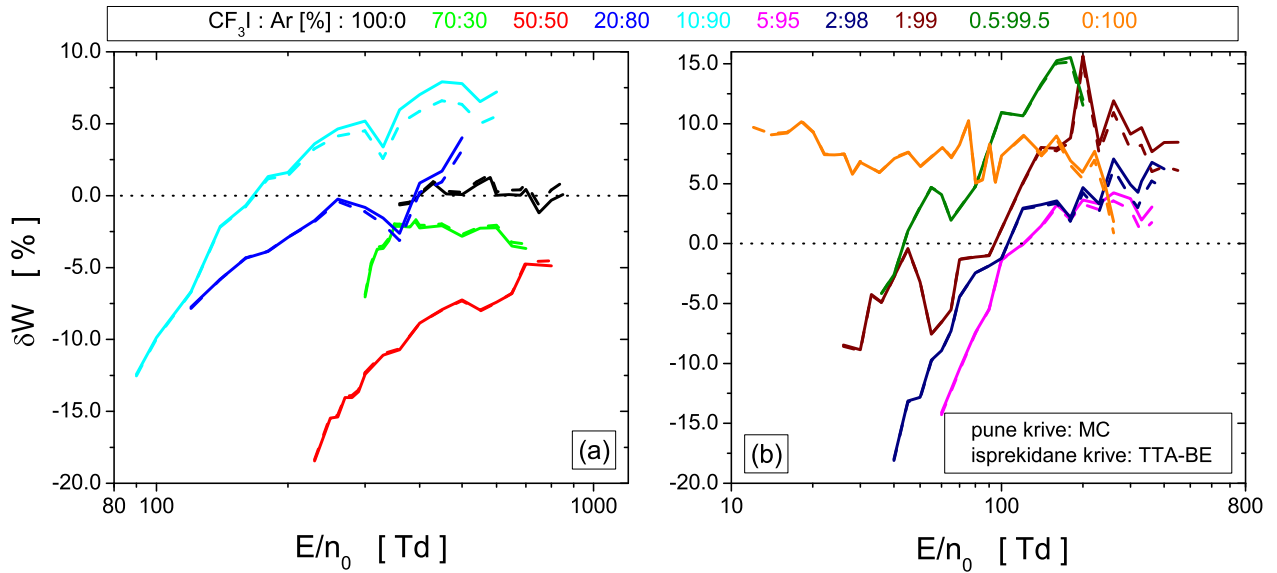
Radi preglednosti, na slici 3.7 su prikazani isti rezultati kao na 3.6(b) osim što su, u ovom slučaju, brzine drifta skalirane faktorima 2^n . Pored ovih MC rezultata, prikazani su i naši TTA-BE rezultati kao i eksperimentalne vrednosti de Urquijo i saradnika izmerene u PT eksperimentu. Na osnovu ove slike se može videti da obe grupe naših proračuna u dobroj meri prate trend eksperimentalnih podataka u svakoj od prikazanih gasnih smeša. Takođe se vidi da se MC i TTA-BE rezultati međusobno dobro slažu. Precizni podaci o ovom slaganju se nalaze na slici 3.8 u vidu procentualnih odstupanja naših proračuna od eksperimentalnih vrednosti brzina drifta elektrona. Na osnovu svih prikazanih gasnih



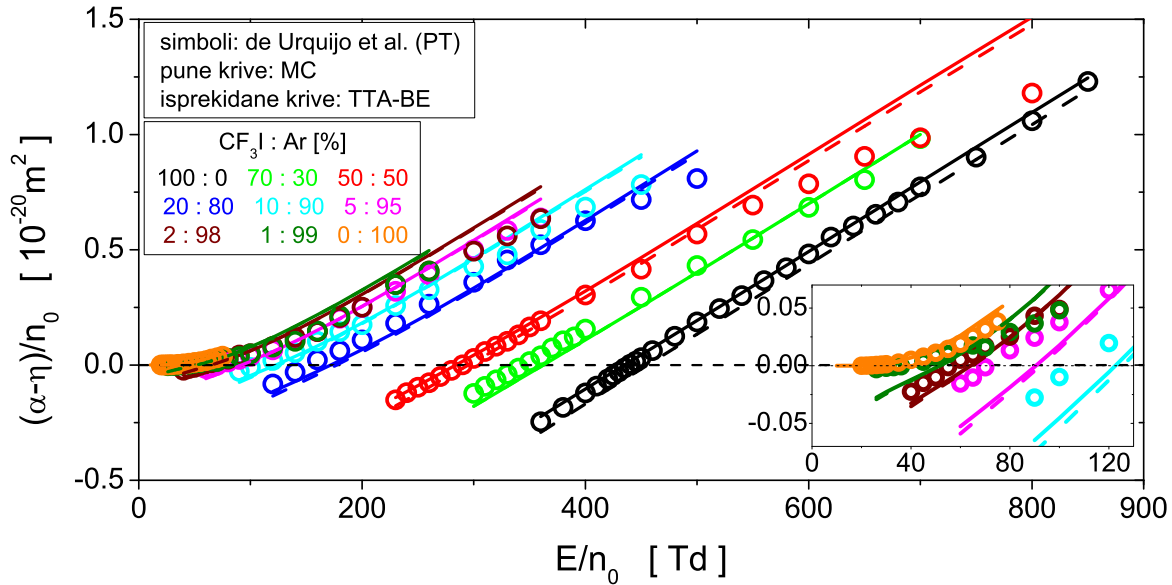
Slika 3.6: Srednja energija (a) i brzina drifta elektrona (b) u CF_3I -Ar smešama u funkciji E/n_0 izračunate Monte Karlo simulacijama. Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panel (b).



Slika 3.7: Brzina drifta elektrona u CF_3I -Ar smešama u funkciji E/n_0 . Poređenje eksperimentalnih vrednosti sa rezultatima Monte Karlo simulacija i rešenjima Bolemanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Panel (a) prikazuje rezultate u smešama sa koncentracijom Ar do 90% dok panel (b) prikazuje rezultate u smešama sa većom koncentracijom Ar. Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panel (b). Radi preglednosti, rezultati su skalirani faktorom 2^n .

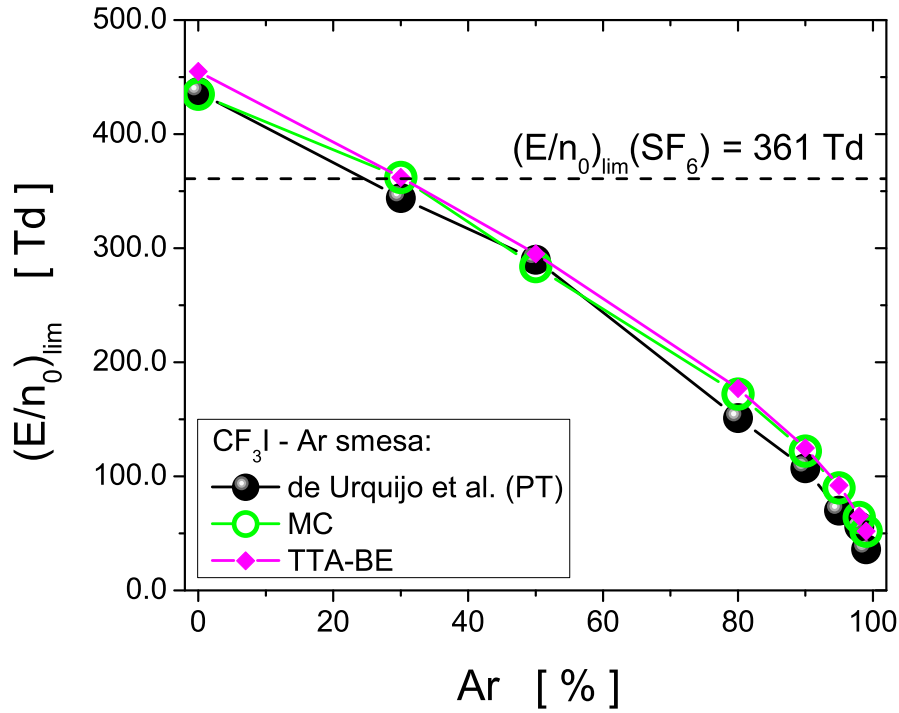


Slika 3.8: Procentualno odstupanje brzine drifta elektrona u CF_3I -Ar mešama od eksperimentalnih podataka de Urquijo i saradnika izmerenih u PT eksperimentu. Proračuni su izvršeni na osnovu Monte Karlo simulacija i rešavanja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Panel (a) prikazuje rezultate u mešama sa koncentracijom Ar do 90% dok panel (b) prikazuje rezultate u mešama sa većom koncentracijom Ar. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).



Slika 3.9: Efektivan koeficijent jonizacije u CF_3I -Ar mešama u funkciji E/n_0 . Eksperimentalne vrednosti de Urquijo i saradnika su upoređene sa našim proračunima Monte Karlo metodom i rešenjima Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana.

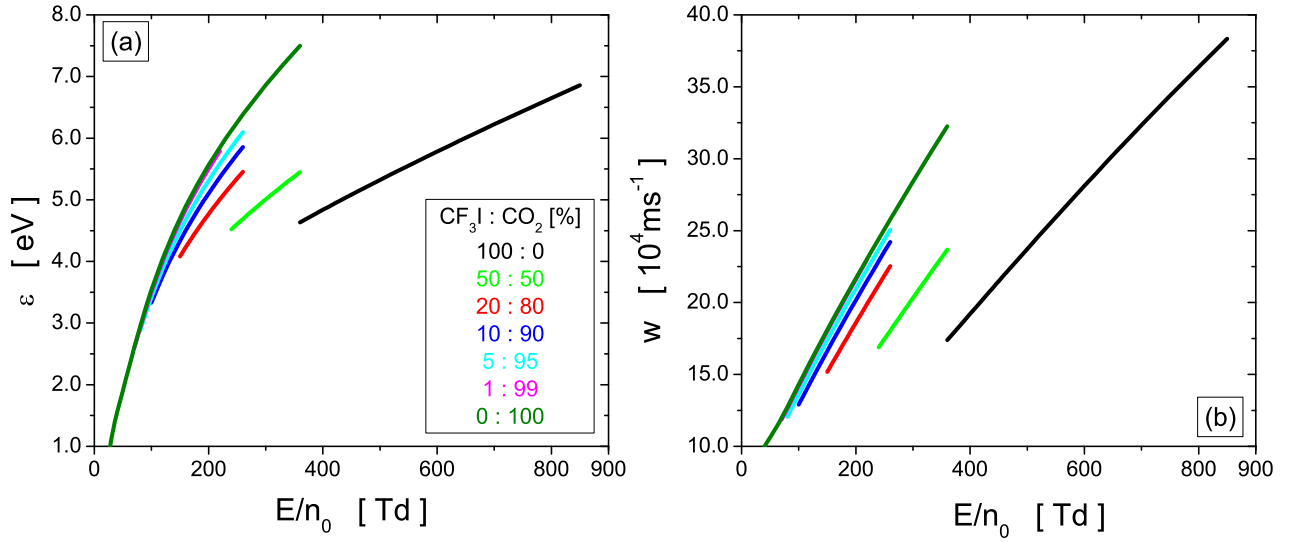
smeša se vidi da se odstupanja kreću u opsegu $(-20, 15)\%$. Pre svega, ovo odstupanje je posledica skupa preseka za rasejanje elektrona u Ar (slika 3.5(a)) koji ne reprodukuje merenja autora sa kojim se poredimo u ovom poglavlju disertacije. Sa panela (b) slike 3.8 se vidi da izračunata W čistog Ar odstupa od izmerenih vrednosti de Urquijo i saradnika za $(1.5, 10)\%$. Sa druge strane, dodatno fitovanje preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima, na čije promene je W najosetljivija, bi svakako uticalo na poboljšanje stepena slaganja naših proračuna koeficijenta W sa referentnim eksperimentalnim vrednostima.



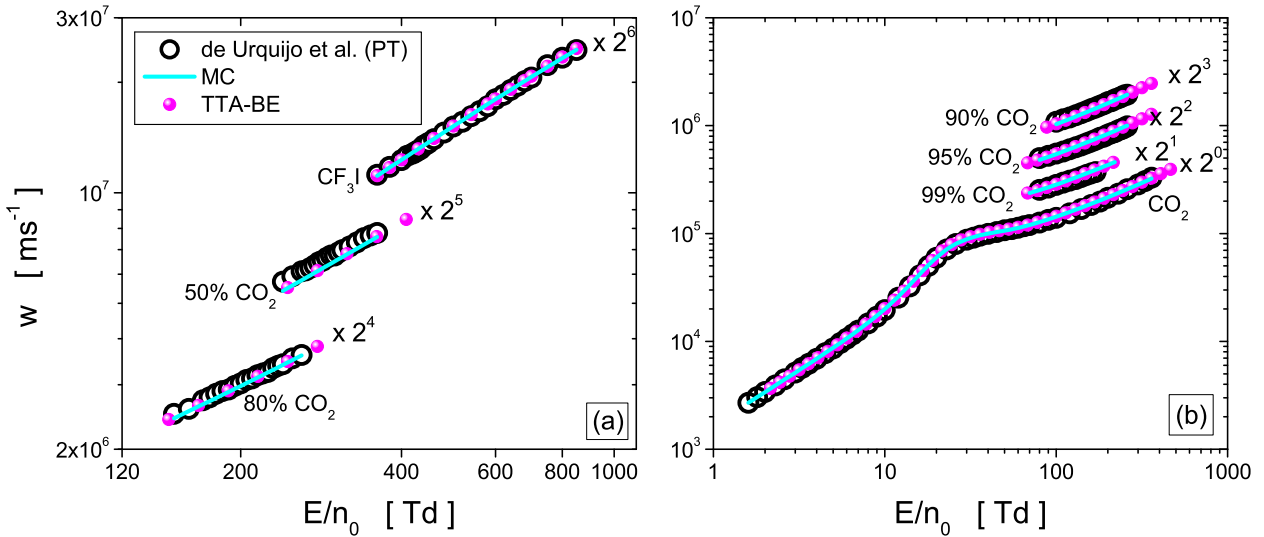
Slika 3.10: Kritično polje gasne smeše CF_3I -Ar u funkciji udela CF_3I gasa. Rezultati su dobijeni na osnovu eksperimentalnih i numerički izračunatih efektivnih jonizacionih koeficijenata elektrona u funkciji E/n_0 prikazanih na prethodnom grafiku.

Slika 3.9 prikazuje efektivan koeficijent jonizacije u CF_3I -Ar smešama u funkciji E/n_0 . Rezultati MC i TTA-BE numeričkih proračuna su prikazani zajedno sa eksperimentalnim podacima de Urquijo i saradnika. Procentualna odstupanja ova dva skupa rezultata u odnosu na eksperimentalne vrednosti su namerno izostavljena radi preglednosti. Naime, u okolini nulte vrednosti efektivnog koeficijenta jonizacije se javljaju velika procentualna odstupanja, slično kao na slici 3.3. Ona bi, uz veliki broj krivih koje se odnose na svaku od posmatranih smeša, uticale na napreglednost rezultata i davale pogrešan utisak o kvalitetu dobijenih rezultata. Sa slike 3.9 se vidi da se međusobno slaganje proračuna sa referentnim merenjima poboljšava sa opadanjem koncentracije Ar na vrednosti niže od 50%. U tim smešama su adekvatno reprodukovane i vrednosti $(E/n_0)_{lim}$ tj. polja u kojima koeficijent $(\alpha - \eta)/n_0$ prolazi kroz nulu. Kada koncentracija Ar u smeši postane veća od 50%, ne samo da slaganje proračuna sa merenjima postaje lošije već se i izračunate vrednosti $(E/n_0)_{lim}$ znatno razlikuju od onih koje se dobijaju na osnovu eksperimentalnih koeficijenata $(\alpha - \eta)/n_0$ (videti umetnut panel slike 3.9). Iako je osnovni uzrok neslaganja naših proračuna sa referentnim merenjima posledica činjenice da Hayashijev skup preseka za Ar ne reprodukuje Urquijova merenja u ovom plemenitom gasu, pažljivije podešavanje preseka za neelastične sudarne procese elektrona u CF_3I u kombinaciji sa unapređenim skupom preseka za rasejanje elektrona u Ar bi uticalo na poboljšanje stepena slaganja između izračunatih i izmerenih vrednosti $(\alpha - \eta)/n_0$.

Na slici 3.10 su prikazane vrednosti $(E/n_0)_{lim}$ koje su određene na osnovu rezultata prikazanih na slici 3.9. Kritično električno polje smeše raste sa opadanjem koncentracije Ar u CF_3I . Može se primetiti da pri dostizanju koncentracije Ar od 25% (prema eksperimentalnim podacima) odnosno od 30% (prema proračunima), $(E/n_0)_{lim}$ smeše postaje uporedivo sa vrednošću koja se odnosi na čist SF_6 . Kako je jedan od osnovnih ciljeva ove doktorske disertacije potraga za adekvatnom zamenom SF_6 u ulozi gasnog dielektrika u sistemima za prenos električne struje, na osnovu ovog rezultata se zaključuje da smeša sa približno 30% Ar u CF_3I ima dielektrične osobine jednake SF_6 gasu, bar u pogledu vrednosti kritičnog električnog polja.



Slika 3.11: Srednja energija (a) i brzina drifta elektrona (b) u $\text{CF}_3\text{I}-\text{CO}_2$ smešama u funkciji E/n_0 izračunate Monte Karlo simulacijama. Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panel (b).

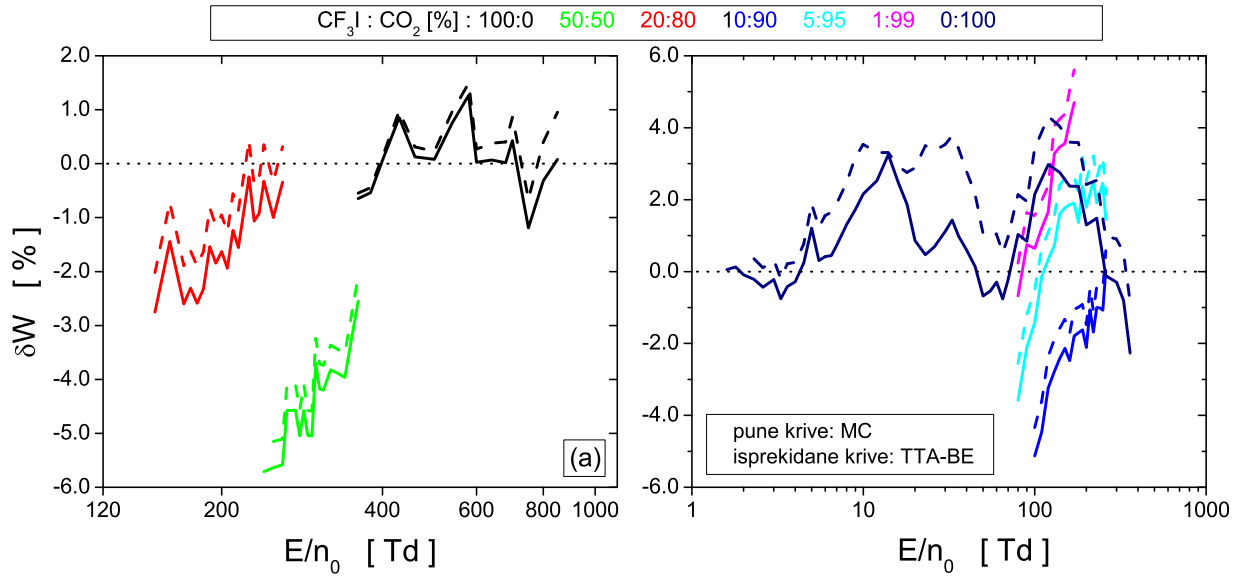


Slika 3.12: Brzina drifta elektrona u $\text{CF}_3\text{I}-\text{CO}_2$ smešama u funkciji E/n_0 . Eksperimentalne vrednosti su upoređene sa proračunima Monte Karlo metodom i rešenjima Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Panel (a) prikazuje rezultate u smešama sa koncentracijom CO_2 do 80% dok panel (b) prikazuje rezultate u smešama sa većom koncentracijom CO_2 . Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panel (b). Radi preglednosti, rezultati su skalirani faktorom 2^n .

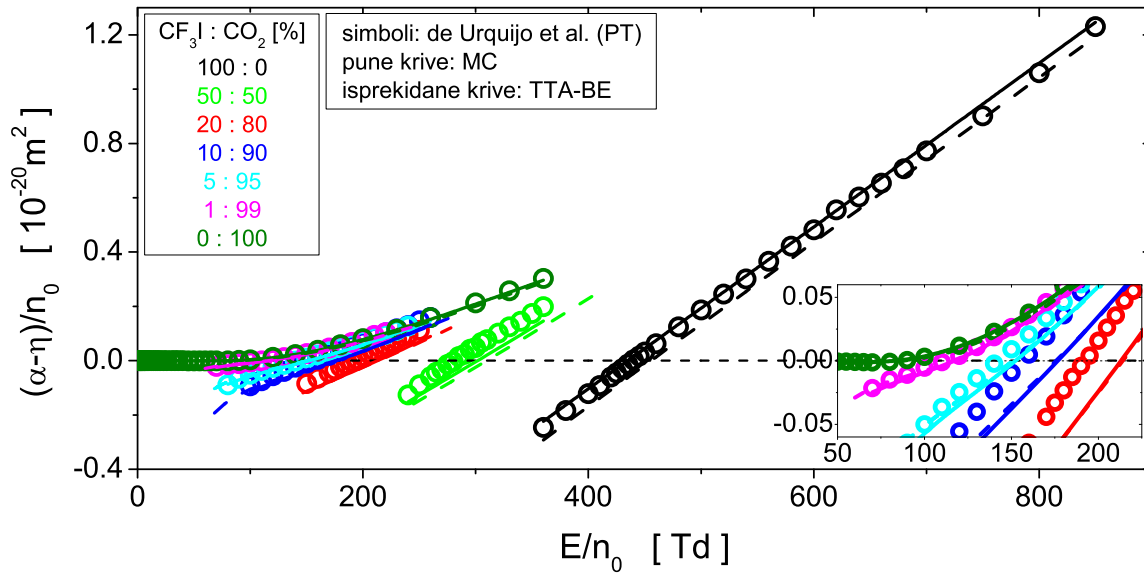
3.7.2 $\text{CF}_3\text{I}-\text{CO}_2$ smeša

Na slici 3.11 su prikazane MC proračuni srednje energije i brzine drifta elektrona u $\text{CF}_3\text{I}-\text{CO}_2$ smešama u funkciji E/n_0 . Kao i kod $\text{CF}_3\text{I}-\text{Ar}$, transportni koeficijenti svake smeše su izračunati u opsegu polja u kojima postoje eksperimentalni podaci o W i $(\alpha - \eta)/n_0$. Na osnovu ovih rezultata u uskim oblastima E/n_0 se ne može sa preciznošću govoriti o trendovima ponašanja ε i W sa promenom koncentracije komponenata smeše gasova. Ipak, prikazani rezultati mogu pomoći u tumačenju narednih rezultata.

Na slici 3.12 su prikazani isti rezultati kao na slici 3.11(b) samo što su u ovom slučaju svi rezultati skalirani faktorom 2^n . Na slici 3.13 je prikazano procentualno odstupanje naših MC i TTA-BE brzina drifta elektrona u $\text{CF}_3\text{I}-\text{CO}_2$ smešama u odnosu na eksperimentalne rezultate de Urquijo i sarad-



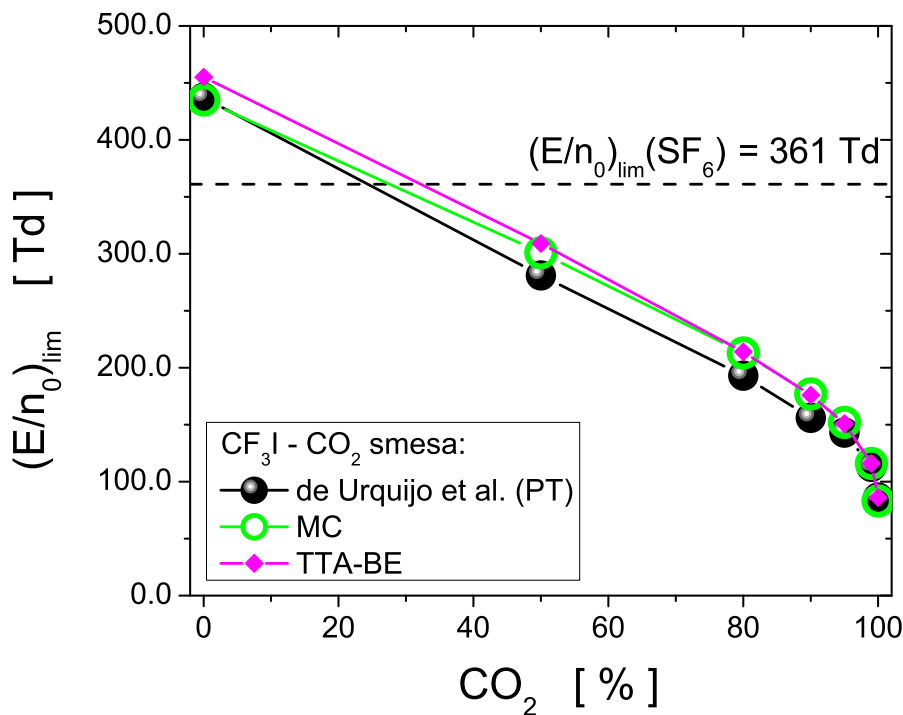
Slika 3.13: Procentualno odstupanje brzine drifta elektrona u $\text{CF}_3\text{I}-\text{CO}_2$ smešama od eksperimentalnih podataka de Urquijo i saradnika izmerenih u PT eksperimentu. Proračuni su izvršeni na osnovu Monte Karlo rezultata i rešenja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Panel (a) prikazuje rezultate u smešama sa koncentracijom CO_2 do 80% dok panel (b) prikazuje rezultate u smešama sa većom koncentracijom CO_2 . Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).



Slika 3.14: Efektivan koeficijent jonizacije u $\text{CF}_3\text{I}-\text{CO}_2$ smešama u funkciji E/n_0 . Poređenje eksperimentalnih vrednosti sa proračunima Monte Karlo metodom i rešenjima Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana.

nika. Za razliku od $\text{CF}_3\text{I}-\text{Ar}$ smeše, u ovom slučaju je ostvareno mnogo bolje slaganje proračuna sa referentnim podacima: procentualna odstupanja se kreću u opsegu $(-6, 4)\%$. Ovo malo odstupanje je posledica fitovanja skupa preseka za CO_2 (slika 3.5(b)) upravo na eksperimentalne podatke de Urquijo i saradnika.

Slika 3.14 prikazuje efektivan koeficijent jonizacije u smešama CF_3I i CO_2 u funkciji E/n_0 . Pored naših MC i TTA-BE proračuna, prikazane su i referentne eksperimentalne vrednosti ovog koeficijenta.



Slika 3.15: Kritično polje gasne smeše $\text{CF}_3\text{I}-\text{CO}_2$ u funkciji udela CF_3I gasa. Rezultati su dobijeni na osnovu eksperimentalnih i numerički izračunatih efektivnih jonizacionih koeficijenata elektrona u funkciji E/n_0 prikazanih na prethodnoj slici.

Ukoliko se zanemare veća odstupanja u okolini $(E/n_0)_{lim}$ (videti umetnut panel), vidi se da su odstupanja u okviru 10% u smešama sa koncentracijom CO_2 višom od 90%. Iz istog razloga kao u slučaju gasne smeše $\text{CF}_3\text{I}-\text{Ar}$, izostavljena je slika sa prikaznom procentualnih odstupanja između izračunatih i izmerenih vrednosti efektivnih koeficijenata jonizacije. Kvalitet dobijenih rezultata se može tumačiti na osnovu slike 3.15 na kojoj je prikazano kritično električno polje u $\text{CF}_3\text{I}-\text{CO}_2$ smešama u funkciji E/n_0 određeno na osnovu rezultata sa slike 3.14. Kao i u slučaju smeše $\text{CF}_3\text{I}-\text{Ar}$, uočava se da se pri određenoj koncentraciji CO_2 u smeši nadmašuje kritično polje SF_6 . Smanjujući koncentraciju CO_2 u smeši na 25% (na osnovu eksperimentalnih podataka), 28% (na osnovu MC proračuna) odnosno 32% (na osnovu TTA-BE proračuna), gasna smeša postaje uporediva sa SF_6 gasom po pitanju mogućnosti sprečavanja razvoja električnog proboja u gasu.

3.8 Zaključak

Ovo poglavlje je posvećeno ispitivanju transporta elektrona u trifluorometil-jodidu (CF_3I) u opsegu redukovanih električnih polja u kome postoje eksperimentalni rezultati. Jedan od najvažnijih doprinosa ovog poglavlja je razvoj skupa preseka za rasejanje elektrona u CF_3I . Primenjena je tehnika rojeva, navedene su njene prednosti i nedostaci kao i načini za prevazilaženje ovih nedostataka. Kvalitet razvijenog skupa preseka je potvrđen dobrim slaganjima naših proračuna sa rezultatima merenja u PT eksperimentu kako u čistom gasu tako i u smešama sa Ar i CO_2 . Proračuni su vršeni MC i TTA-BE numeričkim kodovima razvijenim u našoj laboratoriji.

Pored razvoja skupa preseka za ovaj gas, u cilju proračuna transportnih koeficijenata elektrona u $\text{CF}_3\text{I}-\text{CO}_2$ smešama, konstruisan je skup preseka za rasejanje elektrona u CO_2 koji daje dobro slaganje sa PT merenjima Urquijo i saradnika.

Kvalitet razvijenog skupa preseka za rasejanje elektrona u CF_3I gasu je potvrđen i na osnovu dobrog slaganja kritičnog električnog polja različitih $\text{CF}_3\text{I}-\text{Ar}$ i $\text{CF}_3\text{I}-\text{CO}_2$ smeša određenih na osnovu

naših proračuna sa vrednostima određenim na osnovu ekperimentalnih podataka. Uočeno je da, u slučaju obe ispitivane gasne smeše, sa koncentracijom Ar ili CO₂ nižom od ~30% dielektrične osobine gasne smeše postaju uporedive sa SF₆, ukoliko se kao kriterijum poređenja dielektričnih osobina razmatraju vrednosti $(E/n_0)_{lim}$.

Poglavlje 4

Tehnike reskaliranja rojeva elektrona u Monte Karlo simulacijama

4.1 Uvod

Ovo poglavlje je posvećeno Monte Karlo simulacijama transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima. U cilju pravilnog opisa transporta elektrona u oblastima električnog polja u kojima zahvat elektrona kontroliše ponašanje roja, neophodno je primeniti tehnike reskaliranja rojeva elektrona. Objašnjene su tri tehnike koje su implementirane u naš MC kod: tehnika diskretnog reskaliranja, tehnika dupliranja roja i tehnika kontinualnog reskaliranja razvijena za potrebe ove doktorske disertacije. Transport elektrona je proučavan u jako elektronegativnim gasovima SF_6 i CF_3I primenjujući ove tehnike za reskaliranje. Sa ciljem verifikacije i provere numeričkog integriteta ovih tehnika, rezultati MC simulacija su upoređeni sa rezultatima javno dostupnog koda BOLSIG+ namenjenog rešavanju Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana.

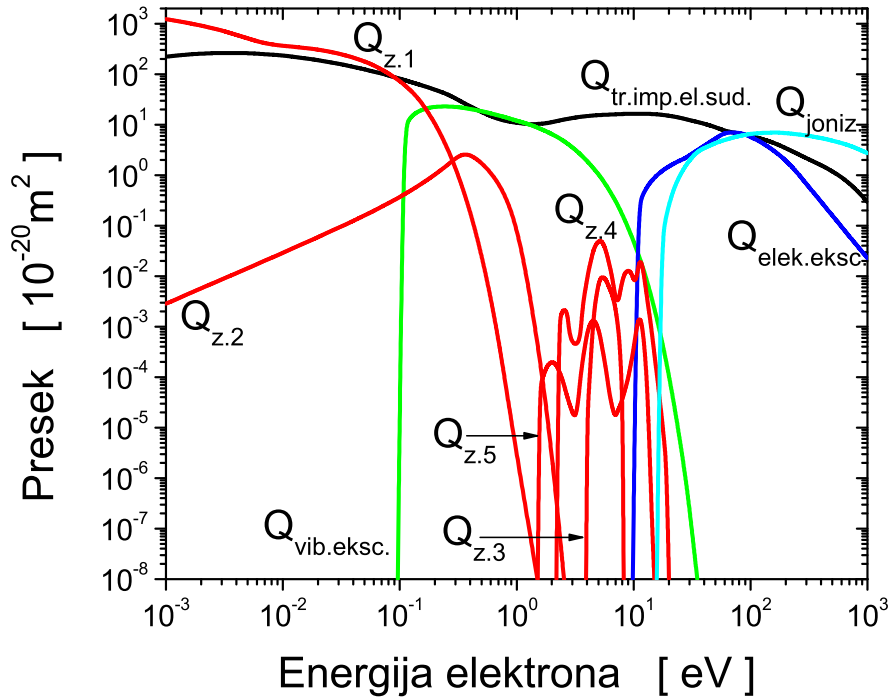
4.2 Efekti zahvata elektrona i tehnike reskaliranja

Intenzivan gubitak slobodnih elektrona u jako elektronegativnim gasovima indukuje čitav spektar karakterističnih fenomena. Neki od njih su grejanje i hlađenje roja elektrona [131, 177], negativna apsolutna fluks mobilnost [51, 178], anomalni fazni pomeraj brzine drifta u vremenski promenljivim električnim poljima [133], negativna diferencijalna provodnost (engl. *negative differential conductivity*, NDC) [44] kao i dualnost transportnih koeficijenata elektrona [8, 9, 45, 179]. Poslednji od nabrojanih fenomena se ogleda u postojanju dve različite familije transportnih koeficijenata elektrona, balk i fluks koeficijenata. Njihova razlika, koja je posledica eksplicitnih efekata procesa jonizacije i zahvata elektrona, može da iznosi od nekoliko procenata do nekoliko redova veličina. Iz tog razloga je neophodna velika pažnja pri korišćenju transportnih koeficijenata elektrona u modelovanju električnih gasnih pražnjenja.

U literaturi se mogu pronaći transportni koeficijenti elektrona u SF_6 gasu i njegovim smešama koji su izračunati numeričkim rešavanjem Bolcmanove jednačine [20, 180–186]. Nedavno su objavljeni transportni koeficijenti elektrona u CF_3I gasu koji su takođe dobijeni na osnovu numeričkih rešenja Bolcmanove jednačine [187, 188]. U većini slučajeva, ovi transportni koeficijenti su izračunati na osnovu aproksimacije dva člana za rešavanje Bolcmanove jednačine zanemarujući eksplicitne efekte zahvata elektrona. Na ovaj način, transport elektrona je analiziran isključivo na osnovu fluks transportnih koeficijenata. Takođe, ove teorije zanemaruju eksplicitne efekte procesa zahvata elektrona čime je transport elektrona uglavnom analiziran na osnovu fluks podataka. U slučaju SF_6 , u literaturi se ne mogu pronaći podaci na poljima nižim od 50 Td. Momentna metoda za rešavanje BE [9, 33] takođe nailazi na velike poteškoće. One su posebno izražene u uslovima intenzivnih gubitaka elektrona malih energija čime se indukuje porast srednje energije roja odnosno nastaje tzv. grejanje zahvatom (engl. *attachment heating*). Pod ovim uslovima, centar mase roja je pomeren ka višim energijama, javlja se porast broja elektrona na začelju funkcije raspodele čiji profil dobija oblik koji se u značajnoj meri razlikuje od ravnotežnog Maksvelijana. Ovo je upravo slučaj koji se javlja kod jako elektronegativnih gasova SF_6 i CF_3I u opsegu niskih vrednosti E/n_0 . Pri ovim ekstremnim uslovima, momentna metoda za rešavanje BE zahteva veliki broj bazisnih funkcija za opis brzinske zavisnosti funkcije raspodele imajući u vidu velika odstupanja ove funkcije od Maksvelijana i/ili ne-realno dugo vreme izračunavanja transportnih koeficijenata elektrona. Rešavanje ovih problema nije moguće u okviru standardnih numeričkih procedura koje su implementirane za rešavanje Bolcmanove jednačine.

Iz prethodno navedenih razloga, istraživanje koje je prikazano u ovom poglavlju disertacije u svom najvećem delu je ograničeno na Monte Karlo metodu. U literaturi se mogu naći rezultati ovih simulacija koji se odnose na smeše SF_6 [182, 189–192] i CF_3I [193] sa drugim gasovima u cilju poboljšanja dielektričnih karakteristika smeša gasova. Međutim, i simulacije bazirane na MC metodi se susreću sa poteškoćama pri analizi transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima. Ovo je posebno izraženo u oblasti niskim E/n_0 u kojoj dominira proces zahvata elektrona. Broj elektrona u roju jako opada čime se drastično povećavaju fluktuacije veličina koje se izračunavaju ovom tehnikom. Fluktuacije postaju tako izražene da se sumnja u validnost rezultata simulacija dok u ekstremnim situacijama dolazi do prekida simulacije zbog nestanka svih elektrona pre uspostavljanja stacionarnog stanja. Kao jedan od načina rešavanja ovog problema se nameće ideja o zadavanju velikog broja inicijalnih elektrona u simulaciji. Međutim, ovim se drastično povećava računsko vreme kao i potreba za memorijskim resursima. U cilju zadržavanja računarskih resursa na optimalnom nivou, istraživači su razvili dve tehnike za kompenzaciju zahvaćenih elektrona. Prva tehnika se svodi na dodavanje novih elektrona u roj putem uniformnog skaliranja postojećih elektrona u roju u određenim vremenskim koracima u hidrodinamičkim uslovima [39, 177] ili u određenim prostornim koracima u uslovima SST eksperimenta [178]. Dodavanje novih elektrona u roj se vrši onda kada njihov broj dostigne unapred zadatu minimalnu vrednost. Drugu grupu tehnika čine one kojima se broj elektrona u roju održava približno konstantnim u toku celokupnog trajanja simulacije tako što se reskaliranje vrši pre nego što se dostigne minimalna broj elektrona. Ovakvo reskaliranje je obezbeđeno implementacijom fiktivnog procesa jonizacije u skup preseka za rasejanje elektrona u posmatranom gasu. Koliziona frekvencija ovog procesa se bira tako da koeficijent jonizacije fiktivnog procesa bude približno jednak koeficijentu zahvata elektrona [189]. Važno je imati na umu da se analogno reskaliranje može primeniti kod gasova sa izraženim presecima za jonizaciju kod kojih broj elektrona u roju značajno nadmašuje unapred zadatu vrednost maksimalnog broja elektrona [194]. U prvoj grupi tehnika reskaliranja se nalaze tehnika diskretnog reskaliranja elektrona i tehnika dupliranja roja dok drugoj grupi pripada tehnika kontinualnog reskaliranja elektrona.

Jedan od ciljeva ovog poglavlja disertacije je opis modifikacija tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona koju su razvili Yousfi i saradnici [189]. Modifikacija se odnosi na definisanje vremenski zavisne kolizione frekvence fiktivnog procesa jonizacije. Poboljšanje u odnosu na postojeću tehniku se ogleda u simultanom podešavanju kolizione frekvence fiktivnog procesa u svakom vremenskom



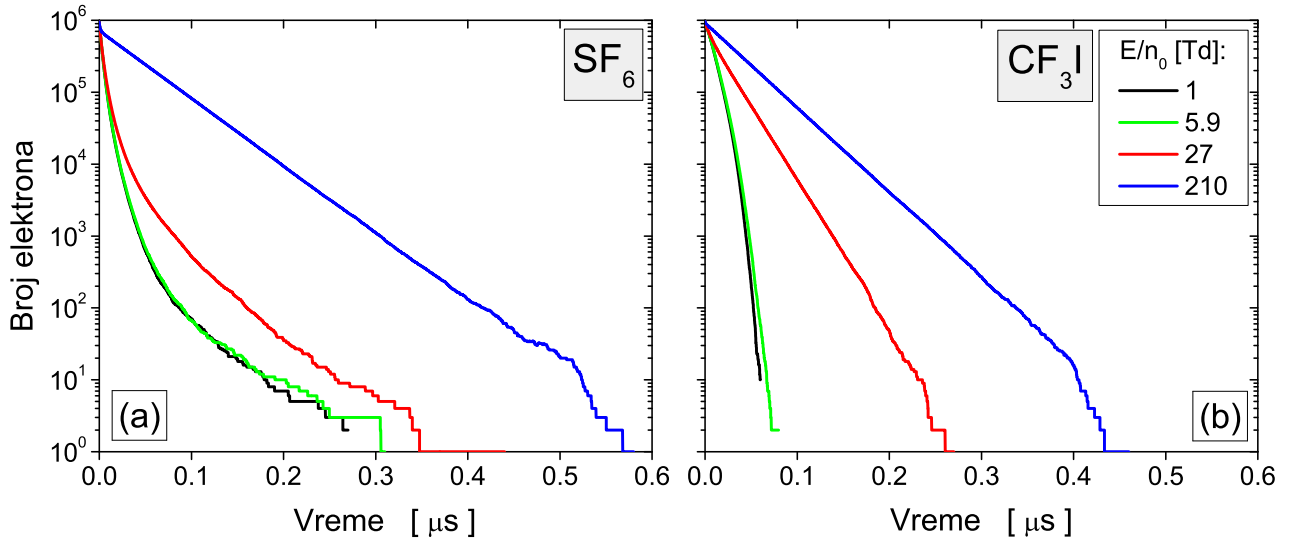
Slika 4.1: Skup preseka za rasejanje elektrona u SF_6 gasu [183]. Skup sadrži: $Q_{mom.tr.el.sud.}$ presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, $Q_{vib.eksc.}$ presek za vibracionu ekscitaciju, $Q_{elek.eksc.}$ presek za elektronsku ekscitaciju, $Q_{z.1}$ presek za formiranje jona SF_6^- pri zahvatu elektrona, $Q_{z.2}$ presek za formiranje jona SF_5^- pri zahvatu elektrona, $Q_{z.3}$ presek za formiranje jona F_2^- pri zahvatu elektrona, $Q_{z.4}$ presek za formiranje jona F^- pri zahvatu elektrona, $Q_{z.5}$ presek za formiranje jona SF_4^- pri zahvatu elektrona i $Q_{joniz.}$ presek za jonizaciju.

koraku čime se obezbeđuje da se trenutni broj elektrona u roju ne razlikuje za više od $\sim 10\%$ u odnosu na inicijalna broj elektrona. Važno je naglasiti da je naša tehnika kontinualnog reskaliranja elektrona detaljno testirana [52] i da njenom primenom ne dolazi do perturbacije funkcije raspodele elektrona po energijama kao ni njene prostorne ni vremenske evolucije.

4.3 Skupovi preseka i uslovi simulacija

U našim istraživanjima je korišćen skup preseka za rasejanje elektrona u SF_6 koji su razvili Itoh i saradnici [183] (slika 4.1). Ovaj skup je inicijalno bio baziran na publikovanim eksperimentalnih presecima za individualne sudarne procese nakon čega je modifikovan tehnikom rojeva u cilju postizanja boljeg slaganja između izračunatih i izmerenih transportnih koeficijenata elektrona u ovom gasu. Za izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona u CF_3I je korišćen skup preseka razvijen u našoj laboratoriji za potrebe ove doktorske disertacije [195] (slika iz poglavlja 4).

Smatra se da su svi individualni sudarni procesi elektrona u SF_6 i CF_3I izotropni pa presek za elastično rasejanje elektrona odgovara preseku za transfer impulsa u elastičnim sudarima. Simulacije su vršene u opsegu redukovanih električnih polja od 1 Td do 1000 Td. Pritisak pozadinskog gasa je 1 Torr dok je temperatura 300 K. U našem MC kodu je posebna pažnja posvećena adekvatnom opisu termalnog kretanja molekula pozadinskog gasa i njihovom uticaju na elektrone. Ovo je izuzetno značajno u oblasti niskih polja u kojoj je srednja energija elektrona uporediva sa termalnom energijom pozadinskog gasa [196].



Slika 4.2: Opadanje broja elektrona u funkciji vremena u SF_6 (a) i CF_3I (b). Rezultati Monte Karlo simulacijama na različitim vrednostima spoljašnjeg redukovano električnog polja su dobijeni bez primene tehnika reskaliranja elektrona. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panela (a).

4.4 Tehnike reskaliranja elektrona

Neophodnost primene tehnika reskaliranja elektrona u MC simulacijama pri ispitivanju jako elektronegativnih gasova se može objasniti rezultatima sa slike 4.2. Na njoj je prikazano opadanje broja elektrona u funkciji vremena u SF_6 i CF_3I pri evoluciji roja elektrona. U pitanju su rezultati MC simulacija dobijeni bez korišćenja tehnika reskaliranja elektrona. Inicijalan broj elektrona je 10^6 dok se proračuni odnose na različite vrednosti E/n_0 . Kod oba gasa se primećuje da je opadanje broja elektrona najintenzivnije na najnižem ispitivanom E/n_0 kome odgovaraju male vrednosti srednje energije elektrona. Ovo je jasan pokazatelj da koliziorna frekvencija za zahvat elektrona raste sa opadanjem E/n_0 . Neutralni molekuli CF_3I gasa kontinualno zahvataju slobodne elektrone čime njihov broj eksponencijalno opada sa vremenom. Ista zavisnost je vidljiva i kod SF_6 na 210 Td dok se na nižim ispitivanim poljima javlja brže opadanje broja slobodnih elektrona. Upoređivanjem gasova SF_6 i CF_3I se zaključuje da je zahvat elektrona dominantniji u SF_6 u ranijim fazama simulacije. Za razliku od ovoga, u poslednjoj fazi simulacije, pre gubitka svih elektrona iz roja, njihov broj se intenzivnije smanjuje u CF_3I . U svakom slučaju, kod oba gasa dolazi do gubitka svih slobodnih elektrona pre uspostavljanja stacionarnog režima čime se simulacija zaustavlja. Broj elektrona opada za šest redova veličina u vremenskom intervalu kraćem od $0.6 \mu\text{s}$ kod oba ispitivana jako elektronegativna gasa.

U cilju kompenzacije efekata snažnog procesa zahvata elektrona, u naš MC kod (poglavlje 3.5) su implementirane tri tehnike reskaliranja elektrona:

1. Tehnika zasnovana na uniformnom generisanju novih elektrona čije se inicijalne karakteristike biraju na osnovu preostalih elektrona iz roja. Na ovaj način se održava već postignuta ravnoteža [39]. Kako bi ova procedura bila efikasna, tj. kako bi se izbegli gubici populacija elektrona iz uskih opsega energija, dozvoljeno je odstupanje broja elektrona u roju u intervalu između N_1 i N_0 pri čemu važi da je $N_1 > N_0$ dok je njihova razlika relativno mala. N_0 je minimalan dozvoljen broj elektrona u simulaciji dok je N_1 maksimalan dozvoljen broj elektrona u simulaciji nakon reskaliranja broja elektrona;

2. Tehnika zasnovana na uniformnom skaliranju roja elektrona faktorom 2 ili 3 u određenim vremenskim [177] ili prostornim [178] koracima u zavisnosti od uslova simulacije. Verovatnoća skaliranja svakog pojedinačnog elektrona je jednaka jedinici;

3. Tehnika zasnovana na implementaciji fiktivnog procesa jonizacije u skup preseka za rasejanje

elektorna u ispitivanom gasu [189, 194]. Koliziona frekvencija ovog procesa je konstantna i približno jednaka kolizionoj frekvenciji procesa zahvata elektrona. Reskaliranje elektrona se vrši uniformnim dupliranjem postojećih elektrona u roju. Novi (dupliran) elektron dobija iste početne karakteristike (koordinate, brzinu, energiju) kao elektron čijom je duplikacijom nastao dok se njegova prostono-vremenska evolucija odvija na osnovu nezavisno odabranih slučajnih brojeva.

Poređenjem prve dve tehnike reskaliranja se vidi da među njima ne postoji suštinska razlika. Jedina razlika se vidi u činjenici da se dupliranje elektrona u drugoj tehnici vrši nad svim elektronima u roju dok se verovatnoća dupliranja elektrona kod prve tehnike određuje na osnovu razlike između željenog i trenutnog broja elektrona u roju pri čemu se željeni broj elektrona unapred zadaje. Sa druge strane, fiktivnim procesom jonizacije iz treće tehnike reskaliranja se generiše novi elektron na istoj poziciji i sa istom energijom i brzinom kao elektron na osnovu koga je dupliran ali koji ne mora nužno da bude elektron koji je zahvaćen od strane jako elektronegativnog gasa. Prvu tehniku reskaliranja ćemo nazvati *diskretno reskaliranje* pošto se tehnika primenjuje u diskretnim vremenskim koracima. Druga tehnika će biti nazvana *dupliranje roja* dok će treća tehnika biti nazvana *kontinualno reskaliranje* kako bi se istaklo da se reskaliranje elektrona u roju vrši u toku celokupnog trajanja simulacije. Neophodan zahtev koji tehnike reskaliranja moraju da obezbede je taj da ne dovode do perturbacije funkcije raspodele ni njene evolucije. Li i saradnici [194] su pokazali da tehnika kontinualnog reskaliranja obezbeđuje ovaj zahtev. Ukoliko se tehnika diskretnog reskaliranja elektrona primenjuje nad simetričnom situacijom okarakterisanom velikim porastom broja elektrona u roju usled intenzivne jonizacije, nije sa sigurnošću zaključeno da je reskalirana funkcija raspodele dobra reprezentacija originalne raspodele [197]. Ovo je, naravno, obezbeđeno kada je uspostavljeno stacionarno stanje [198].

Ukoliko analizirano tehniku kontinualanog reskaliranja a vodimo se radovima Yousfi i saradnika [189] i Li i saradnika [194], Bolcmanova jednačina za faznu funkciju raspodele $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$ bez reskaliranja i funkciju $f^*(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$ sa reskaliranjem dobija oblik:

$$(\partial_t + \mathbf{c} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \cdot \nabla_{\mathbf{c}}) f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = -J(f), \quad (4.1)$$

$$(\partial_t + \mathbf{c} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{c}}) f^*(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = -J(f^*) + \nu_{fi} f^*, \quad (4.2)$$

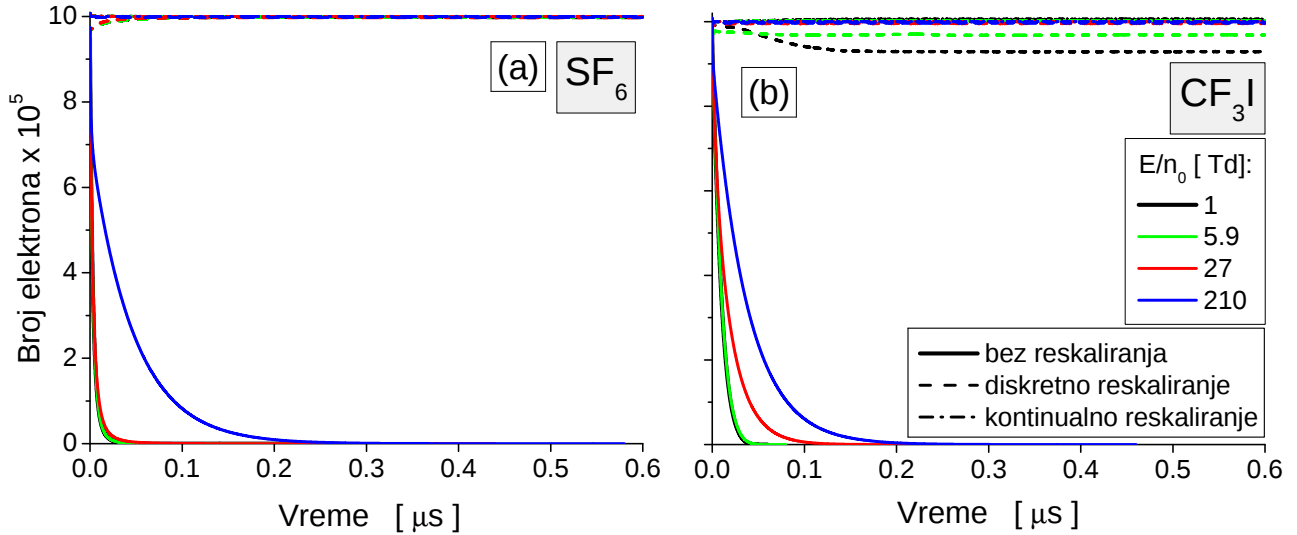
pri čemu je $\mathbf{a}$ ubrzanje usled spoljašnjeg polja, $\mathbf{c}$ je vektor brzine, $J(f)$ je kolizioni operator koji opisuje sudare između elektrona i neutrala dok je ν_{fi} vremenski zavisani brzinski koeficijent fiktivnog procesa jonizacije. Ukoliko je kolizioni operator linearan tj. ukoliko se mogu zanemariti međusobni sudari elektrona, i ukoliko su inicijalne funkcije raspodele (u $t = 0$) međusobno jednake, pokazuje se da važi:

$$f^*(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) \exp \left(\int_0^t \nu_{fi}(\tau) d\tau \right). \quad (4.3)$$

Zamenom jednačine (4.3) u (4.2) uz primenu linearnosti kolizionih operatora, dobija se:

$$J(f^*) = \exp \left(\int_0^t \nu_{fi}(\tau) d\tau \right) J(f). \quad (4.4)$$

Za razliku od Li i saradnika [194], koliziona frekvencija fiktivnog procesa jonizacije je sada vremenski zavisna funkcija. U smislu numeričke implementacije, jedina razlika između naše tehnike kontinualnog reskaliranja i one opisane u [189, 194] je ta da u našoj tehnici ne postoji potreba za određivanjem koliziona frekvencije fiktivnog procesa pre početka simulacije. Umesto toga, koliziona frekvencija fiktivnog procesa jonizacije se na početku simulacije u našoj tehnici kontinualnog reskaliranja izjednačuje sa frekvencom koja odgovara procesu zahvata elektrona. U daljem toku simulacije, frekvencija fiktivnog procesa se podešava u fiksni vremenski koraci tako da odgovara trenutnoj vrednosti koliziona frekvencije procesa zahvata elektrona. Na ovaj način se obezbeđuje da se broj elektrona u toku simulacije ne razlikuje od inicijalnog broja elektrona za više od 10%. Važno je naglasiti da



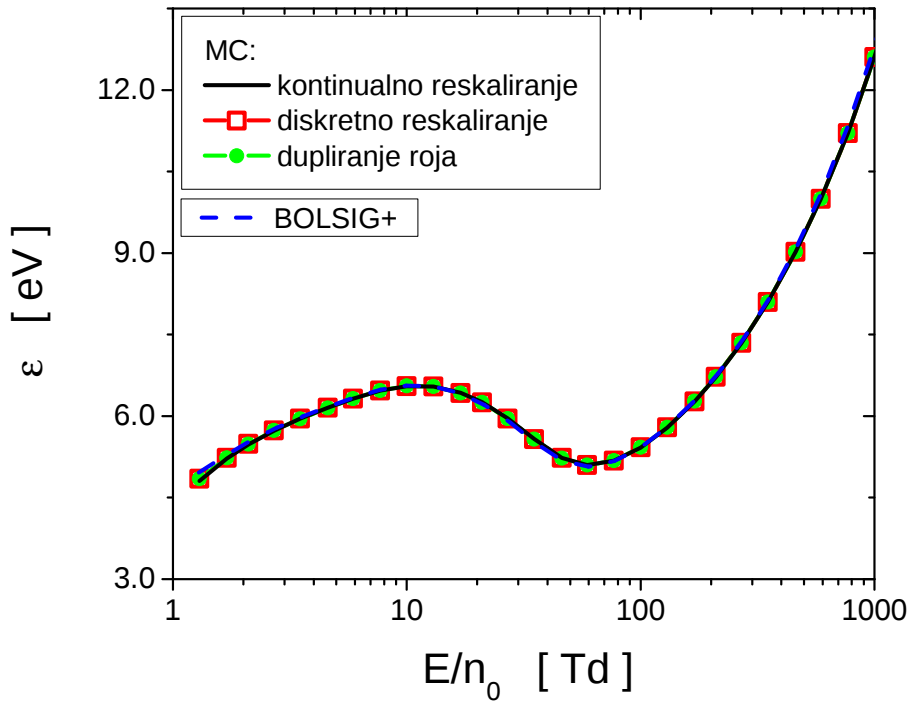
Slika 4.3: Poređenje promene broja elektrona u Monte Karlo simulacijama sa i bez tehnika reskaliranja u SF_6 (a) i CF_3I (b) na različitim vrednostima spoljašnjeg redukovanog električnog polja. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).

fiktivan proces jonizacije ni na koji način nije povezan sa stvarnim procesom jonizacije. Njegovo uvođenje u skup preseka služi samo u cilju dupliranja elektrona.

Na slici 4.3 je prikazana vremenska promena broja elektrona u SF_6 i CF_3I dobijena u MC simulacijama bez tehnika reskaliranja i uz njihovu primenu na različitim vrednostima E/n_0 . Efikasnost tehnika je izražena kroz sposobnost održavanja broja elektrona na vrednost što bližu vrednosti početnog broja elektrona u simulacijama. Na najnižem ispitivanom polju od 1 Td, tehnika diskretnog reskaliranja u CF_3I obezbeđuje da broj elektrona u roju bude za 10% niži od one koju obezbeđuje tehnika kontinualnog reskaliranja. Pomenuta razlika iznosi $\sim 5\%$ na polju od 5.9 Td dok je broj elektrona na višim poljima približno jednak početnom broju elektrona. U slučaju tehnike kontinualnog reskaliranja, broj elektrona u roju se održava u okviru početno zadate vrednosti na svim poljima. U gasu SF_6 , obe ispitivane tehnike reskaliranja imaju gotovo identičnu efikasnost na svim ispitivanim poljima. Najvažnija činjenica koja se vidi na ovoj slici je ta da upotreba tehnika reskaliranja pri simulaciji transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima obezbeđuje relaksaciju roja elektrona tj. dostizanje stacionarnog stanja u kome je omogućeno izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona.

4.5 Transportni koeficijenti elektrona u SF_6 i CF_3I

Izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona u jako elektronegativnim gasovima SF_6 i CF_3I predstavlja dobar način testiranja tehnika reskaliranja, posebno u oblasti niskih vrednosti E/n_0 u kojoj dominira proces zahvata elektrona. Pored poređenja različitih tehnika, cilj ovog potpoglavlja je prikazivanje i fizička interpretacija fenomena u profilima srednje energije, brzine drifta i koeficijenata difuzije indukovanih ovim nekonzervativnim procesom. Dodatno, skrenuće se pažnja na razlike između balk i fluks transportnih koeficijenata. U ovom segmentu rada je izostavljeno poređenje naših proračuna sa eksperimentalnim rezultatima transportnih koeficijenata elektrona iz nekoliko razloga. Pre svega, akcenat tumačenja narednih rezultata nije na utvrđivanju kvaliteta skupa preseka za rasejanje elektrona u ispitivanim gasovima. Dodatno, ne postoje eksperimentalni podaci o transportnim koeficijentima u opsegu niskih vrednosti E/n_0 . Konkretno, uslučaju gasa SF_6 , u literaturi se ne mogu pronaći podaci o eksperimentalnim transportnim koeficijentima elektrona na poljima nižim od 50 Td. Takođe, na ovako niskim poljima se ne može očekivati validnost numeričkih rešenja Bolcmanove



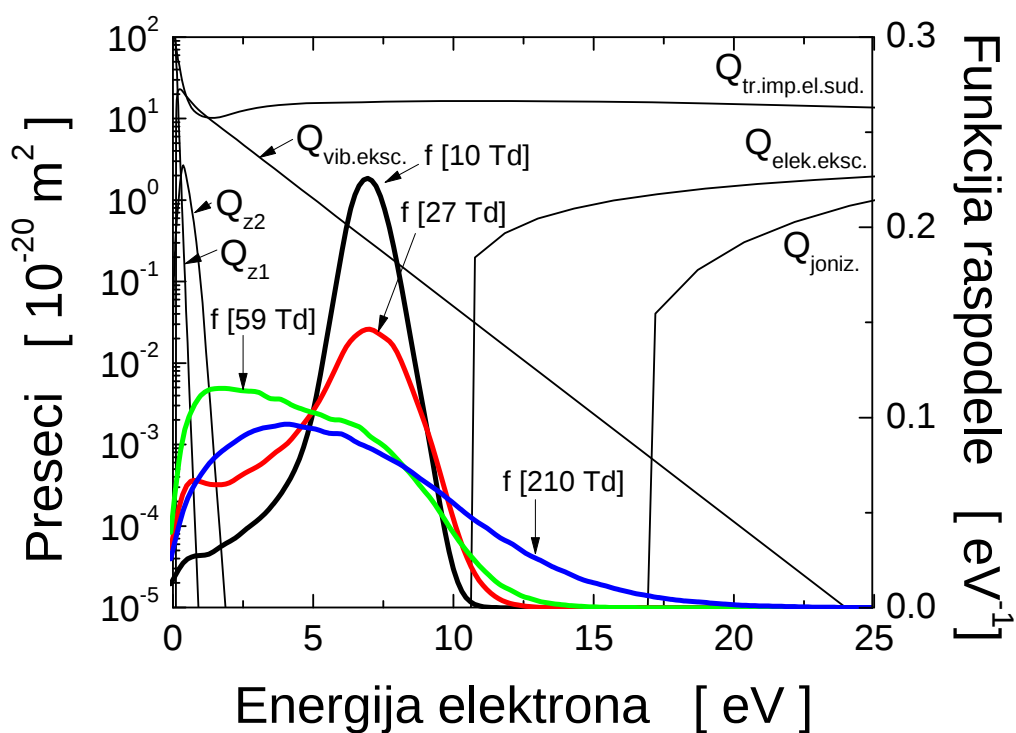
Slika 4.4: Srednja energija elektrona u SF_6 u funkciji E/n_0 . Poređenje rezultata Monte Karlo simulacija uz različite tehnike reskaliranja elektrona sa rezultatima BOLSIG+ koda.

jednačine u kojima se funkcija raspodele razvija u red sa više članova pošto je, usled intenzivnog zahvata elektrona, otežana konvergencija rezultata ove tehnike. Upravo iz ovih razloga, rezultati koji su dobijeni na osnovu ove metode za rešavanje Bolcmanove jednačine neće biti prikazani na slikama koje slede.

4.5.1 Srednja energija

Na slici 4.4 je prikazana srednja energija elektrona u SF_6 u funkciji E/n_0 . Odmah se može uočiti izuzetno slaganje rezultata koji su dobijeni primenjujući različite tehnike reskaliranja. Ovo je jasan pokazatelj da su sve tri tehnike reskaliranja jednako validne za izračunavanje srednje energije roja elektrona u SF_6 . Dodatno, rezultati BOLSIG+ numeričkog koda se jako dobro slažu sa rezultatima MC simulacija. U oblasti niskih E/n_0 , ε raste sa porastom polja, dostiže svoj maksimum u okolini 10 Td nakon čega počinje da opada. Minimalna vrednost srednje energije se dostiže u okolini 60 Td. Na poljima višim od ove vrednosti, ε monotono raste sa porastom E/n_0 . Pojava opadanja srednje energije elektrona sa porastom E/n_0 je opažena kod Ar [199] i O_2 [200] u prisustvu snažnog magnetskog polja. Međutim, na slici 4.4 se uočava opadanje srednje energije elektrona sa porastom E/n_0 koje nastaje u odsustvu magnetskog polja. Ovakvo ponašanje srednje energije se može tretirati kao anomalno jer je u suprotnosti sa dosadašnjim observacijama. U prisustvu električnog polja i kada elektroni nisu u termodinamičkoj ravnoteži sa molekulima pozadinskog gasa, srednja energija roja elektrona je monotono rastuća funkcija E/n_0 bez obzira na prirodu gasa. Međutim, zbog kombinovanog efekta hlađenja roja usled zahvata elektrona u prisustvu neelastičnih sudara, srednja energija u jako elektronegativnom gasu može da opada sa porastom E/n_0 . Ovaj efekat predstavlja jedan od značajnijih kinetičkih fenomena koji su opaženi u ovoj disertaciji.

Kako bi se razumeo uzrok nastanka ovog fenomena, na slici 4.5 je prikazana funkcija raspodele energije elektrona u SF_6 na poljima 10 Td, 27 Td, 59 Td i 210 Td. Pored ovoga, na slici su prikazani i preseki za najznačajnije sudarne procese u prikazanom opsegu srednjih energija elektrona. Radi



Slika 4.5: Funkcije raspodele energije elektrona izračunate Monte Karlo simulacijama na poljima od 10 Td, 27 Td, 59 Td i 210 Td (crna, crvena, zelena i plava kriva) u međusobnom odnosu sa presecima za rasejanje elektrona u SF_6 gasu (tanke crne krive). Prikazani su $Q_{tr.imp.el.sud.}$ presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, $Q_{vib.eksc.}$ presek za vibracionu ekscitaciju, $Q_{elek.eksc.}$ presek za elektronsku ekscitaciju, $Q_{joniz.}$ presek za jonizaciju, Q_{z1} presek za formiranje jona SF_6^- i Q_{z2} presek za formiranje jona SF_5^- .

preglednosti, izostavljeni su presezi za zahvat elektrona koji dovode do formiranja jona SF_4^- , F_2^- i F^- . Na poljima od 10 Td i 27 Td se jasno uočava efekat *bušenja rupa* u profilima funkcije raspodele energije elektrona. Ovaj fenomen je uočen i detaljno diskutovan za elektrone u O_2 [201, 202] i njegovim smešama [44, 203] pod uslovima koji dovode do pojave apsolutne negativne mobilnosti elektrona [51, 178] kao i za elektrone u smeši gasova $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4$, izomera C_4H_{10} i SF_6 koja se koristi u detektorima sa ravnim pločastim elektrodama u eksperimentima fizike čestica visokih energija u CERN-u [204]. U slučaju elektrona u SF_6 , koliziona frekvencija za zahvat elektrona opada sa porastom energije čime sporiji elektroni sa začelja roja postaju dominantno zahvaćeni od strane SF_6 neutrala. Na ovaj način dolazi do redistribucije unutar roja: elektroni sa nanižim energijama nestaju iz roja a začelje roja se pomera ka višim energijama. Ovim procesom dolazi do *grejanja roja zahvatom elektrona*, fenomena koji je opažen kako za modelne [131, 177] tako i za realne gasove [44, 204]. U oblasti najnižih ispitivanih polja, srednja energija elektrona dostiže neočekivano visoku vrednost od skoro 5 eV (slika 4.4). Kod većine molekularnih gasova, ε je značajno redukovana u oblasti niskih E/n_0 usled velikih gubitaka energije elektrona u velikom broju neelastičnih sudara koji mogu voditi ka rotacionoj, vibracionoj i elektronskoj ekscitaciji molekula.

Sa daljim porastom E/n_0 , srednja energija elektrona raste usled ubrzavanja elektrona u jakom spoljašnjem polju. Međutim, u slučaju SF_6 se javlja opadanje ε sa porastom polja iznad 10 Td. Ovo atipično ponašanje je posledica kombinacije efekata grejanja roja zahvatom elektrona i *hlađenja roja neelastičnim procesima*. Sa slike 4.5 se vidi da na poljima od 27 Td i 59 Td elektroni sa začelja funkcije raspodele imaju dovoljno energije da učestvuju u procesu elektronske ekscitacije molekula SF_6 . U ovom procesu elektroni gube energiju jednaku vrednosti praga ovog procesa (9.8 eV) čime prelaze u niskoenergijsku oblast funkcije raspodele. Na ovaj način se kompenzuje efekat bušenja rupa i repopuliše funkcija raspodele na niskim energijama. Kombinacija efekata grejanja roja zahvatom, hlađenja roja neelastičnim procesima i repopulacija funkcije raspodele u opsegu niskih energija ima veći uticaj na održavanje balansa energije od dobitaka energije od strane spoljašnjeg polja i gubitaka energije prilikom odvijanja sudarnih procesa. Presek za vibracionu ekscitaciju sa pragom od 0.098 eV nije od velikog uticaja na balans energije imajući u vidu vrednost srednje energije elektrona koja odgovara ovim redukovanim električnim poljima. Na poljima višim od 60 Td, balansu energije najviše doprinosi dobitak energije od strane spoljašnjeg polja dok su zagrevanje roja zahvatom i indukovani fenomeni od manjeg značaja. Iz tog razloga se primećuje porast ε sa porastom E/n_0 u ovoj oblasti polja.

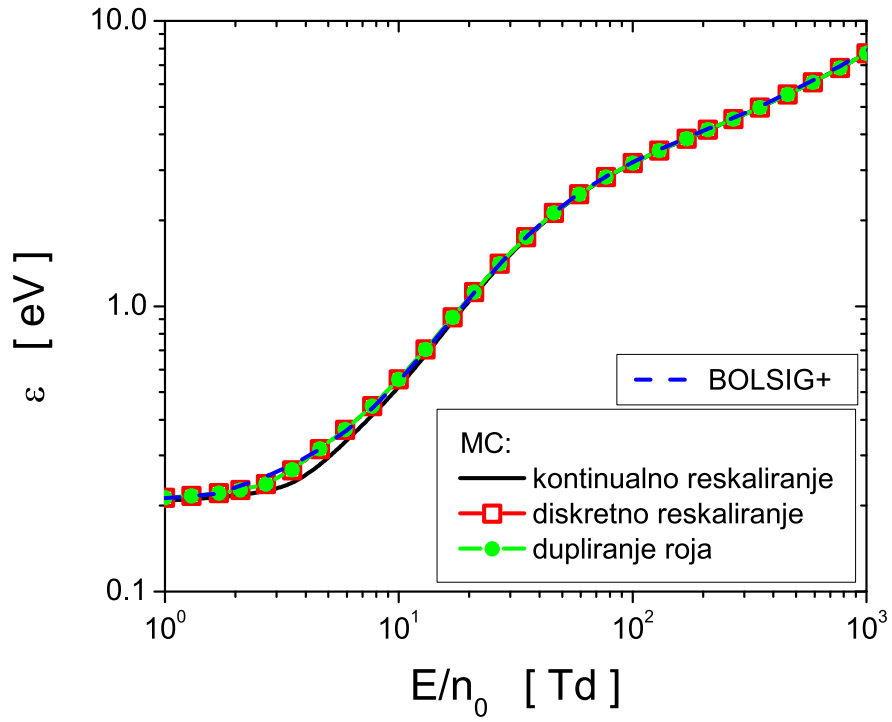
Na slici 4.6 je prikazana promena srednje energije sa E/n_0 za elektrone u CF_3I . Pre svega, primećuje se dobro međusobno slaganje rezultata različitih tehnika reskaliranja. Neslaganje između tehnike kontinualnog reskaliranja i preostalih tehnika je vidljivo u opsegu polja od 3 Td do 20 Td. Za razliku od srednje energije u SF_6 , u CF_3I gasu se uočava njen monoton rast sa E/n_0 u čitavom ispitivanom opsegu polja. Pažljivim posmatranjem rezultata sa slike se mogu izdvojiti tri oblasti polja:

1. U najnižoj oblasti polja, srednja energija raste relativno sporo sa porastom E/n_0 usled velikih energijskih gubitaka pri vibracionim ekscitacijama molekula pozadinskog gasa. Srednja energija elektrona je veća od termalne energije usled intenzivnog grejanja roja zahvatom elektrona;

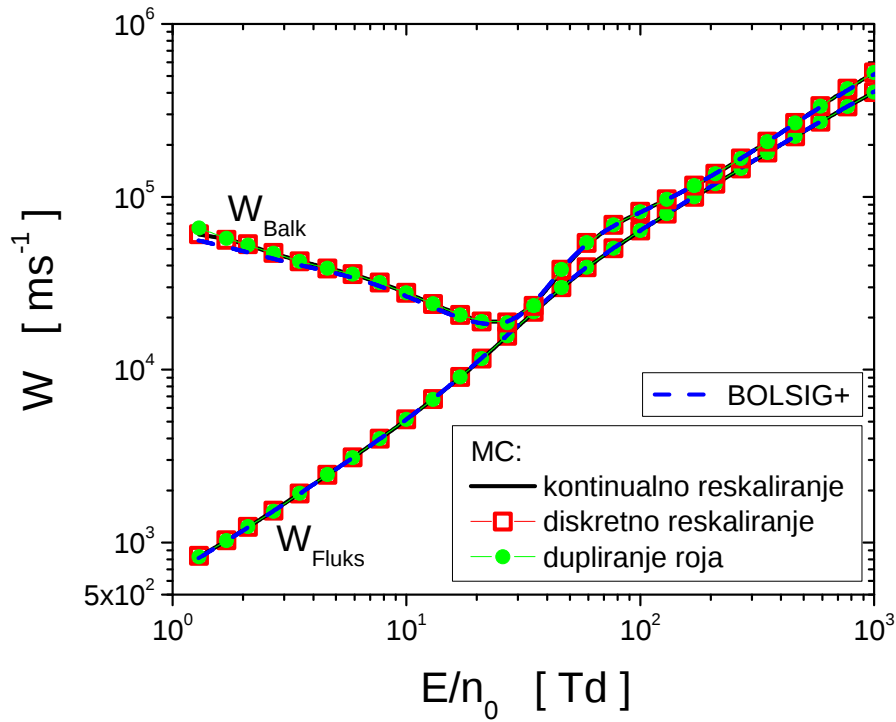
2. U oblasti polja između 5 Td i 50 Td, srednja energija elektrona oštro raste sa porastom polja pošto elektroni uspevaju da napuste energijsku oblast u kojoj dominira proces vibracione ekscitacije;

3. Oblast sporijeg rasta srednje energije sa poljem se javlja na E/n_0 višim od 50 Td. Ovakav način rasta ε je posledica hlađenja roja elektronskim ekscitacijama i jonizacijom.

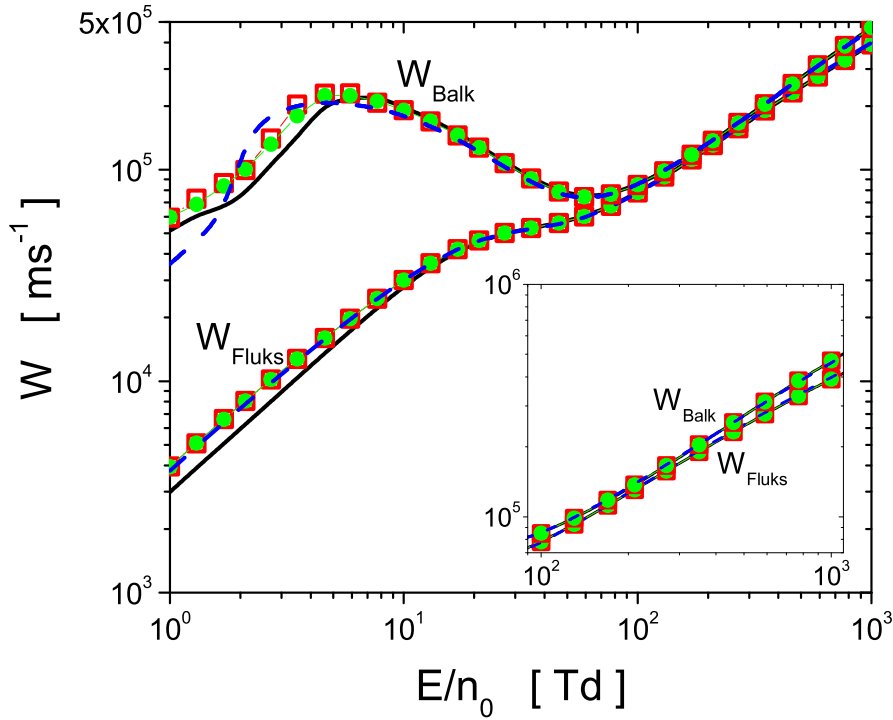
Zaključuje se da priroda sudarnih procesa elektrona sa molekulima CF_3I , njihova energijska zavisnost kao i međusoban uticaj ovih faktora ne favorizuju razvoj anomalnog ponašanja srednje energije elektrona sa promenom E/n_0 kakva je viđena kod SF_6 .



Slika 4.6: Srednja energija elektrona u CF_3I u funkciji E/n_0 . Rezultati Monte Karlo simulacija sa različitim tehnikama reskaliranja su upoređeni sa rezultatima BOLSIG+ koda



Slika 4.7: Brzina drifta elektrona u funkciji E/n_0 za elektrone u SF_6 . Rezultati Monte Karlo simulacija sa različitim tehnikama reskaliranja su upoređeni sa rezultatima BOLSIG+ koda.

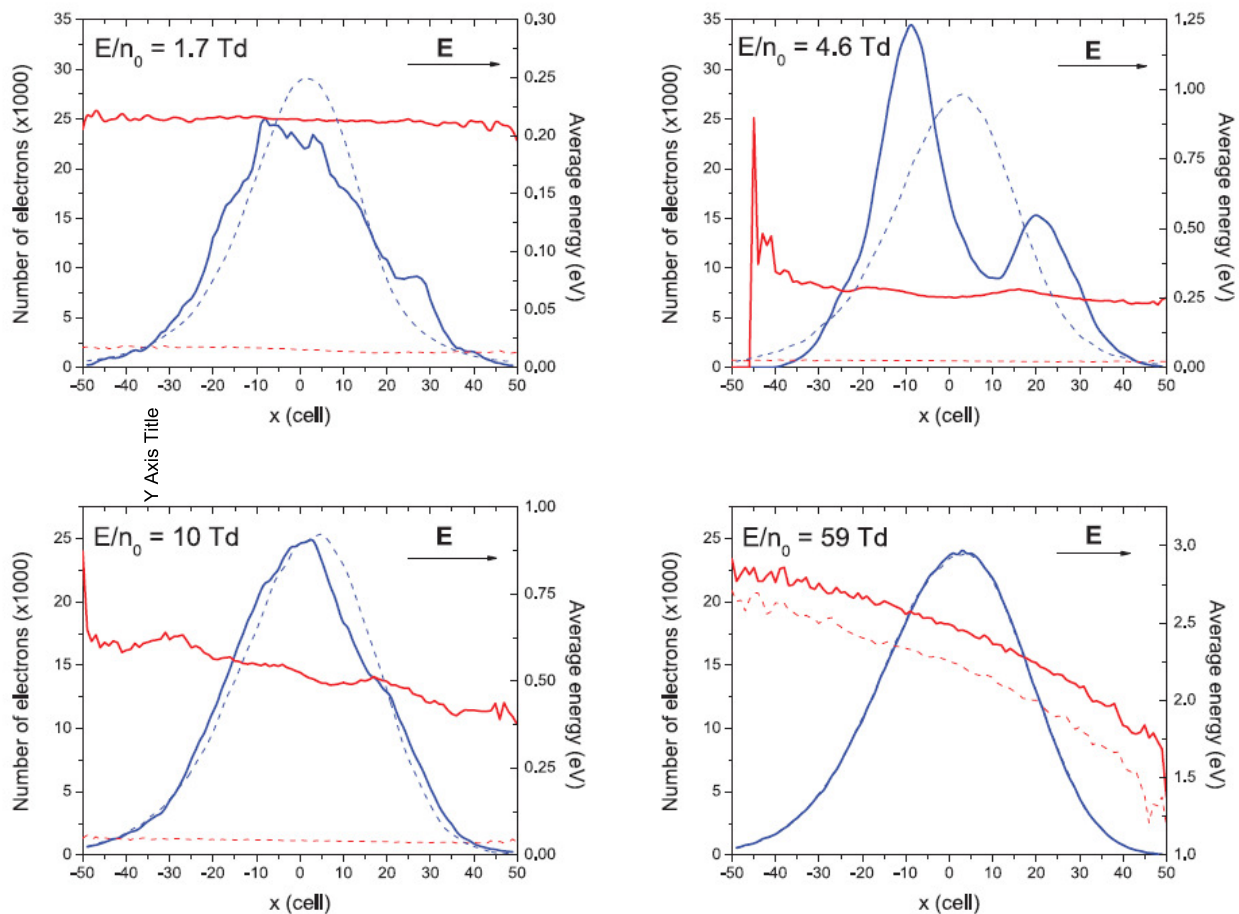


Slika 4.8: Brzina drifta elektrona u funkciji E/n_0 za elektrone u CF_3I . Rezultati Monte Karlo simulacija sa razliitim tehnikama reskaliranja su upoređeni sa rezultatima BOLSIG+ koda. Oznake krivih i simbola su iste kao na slici 4.7.

4.5.2 Brzina drifta

Na slikama 4.7 i 4.8 su prikazane promene balk i fluks brzine drifta sa E/n_0 za elektrone u SF_6 i CF_3I , respektivno. U slučaju SF_6 gasa se primećuje odlično međusobno slaganje rezultata različitih tehnika kako kod balk tako i kod fluks brzine drifta u celokupnom prikazanom opsegu E/n_0 . Rezultati BOLSIG+ koda su neznatno manje vrednosti u odnosu na rezultate preostalih tehnika kada je u pitanju balk brzina drifta elektrona u opsegu najnižih prikazanih polja. U slučaju gasa CF_3I , razlike između rezultata različitih numeričkih tehnika su neznatne na poljima višim od 10 Td dok su značajnije na poljima nižim od ove vrednosti. Kod oba gasa se vidi da je balk brzina veća od odgovarajućih fluks vrednosti u celokupnom prikazanom opsegu polja. Ovakav odnos je posledica veoma intenzivnog grejanja roja zahvatom kada je u pitanju opseg niskih polja kao i eksplicitnih efekata jonizacije na višim E/n_0 . Kao što je pomenuto, kada grejanje roja zahvatom značajno utiče na transport elektrona, neutrali gasa intenzivnije zahvataju sporije elektrone sa začelja roja u odnosu na brže elektrone sa fronta roja. Na ovaj način, zahvat elektrona pomera centar mase roja ka frontu čime balk brzina postaje veća od fluks vrednosti. Jonizacija pozadinskog gasa se pre svega javlja u oblasti fronta roja u kojoj su elektroni viših energija. Time se povećava ukupan broj elektrona na frontu roja i to u većoj meri nego na začelju roja. I na ovaj način se centar mase roja pomera ka frontu pa je balk brzina veća od fluks brzine i u opsegu viših polja. Naravno, prethodno objašnjenje je validno samo u slučaju kada je koliziona frekvenca procesa jonizacije rastuća funkcija energije elektrona što je upravo slučaj kod gasova SF_6 i CF_3I . Neophodno je naglasiti da su eksplicitni efekti zahvata elektrona u SF_6 i CF_3I snažniji od efekata jonizacije. Kada je jonizacija dominantan nekonzervativan proces, razlika između dualnih vrednost brzine drifta ne prelazi 30% u slučaju oba ispitivana gasa. Međutim, kada je roj pod dejstvom snažnog procesa zahvata elektrona, razlika između balk i fluks brzine drifta iznosi skoro dva reda veličine kao što se vidi na primeru SF_6 gasa u oblasti najnižih polja.

U profilima balk brzine drifta u SF_6 i CF_3I se primećuje snažan NDC efekat dok odgovarajuće



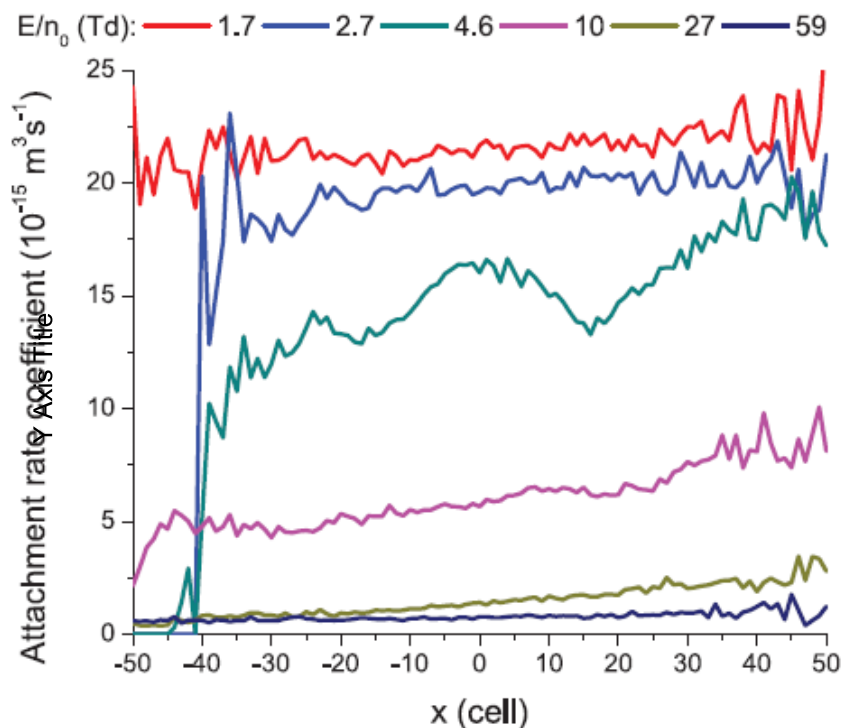
Slika 4.9: Prostorna raspodela broja elektrona (plave krive) i prostorno razložena lokalno srednja energija elektrona (crvene krive) u CF_3I pri različitim vrednostima električnih poljima. Rezultati su dobijeni smatrajući da je proces zahvata elektrona nekonzervativan proces (pune krive) odnosno konzervativan proces sa nultim pragom (isprekidane krive). Rezultati Monte Karlo simulacija sa 10^6 elektrona su dobijeni korišćenjem tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona.

fluks brzine monotonno rastu sa porastom E/n_0 . Ovakvo ponašanje brzine drifta je slično nedavno uočenom NDC efektu za pozitivne elektrone u molekularnim gasovima [205, 206] kod kojih formiranje pozitronijuma ima ulogu analognu zahvatu elektrona.

Da bismo razumeli NDC efekat u profilima balk brzine drifta, na slici 4.9 su prikazani prostorne raspodele broja elektrona (plave krive) i prostorno razložene lokalno srednje energije elektrona (crvene krive) u CF_3I na različitim vrednostima E/n_0 . U pitanju su rezultati MC simulacija koji su dobijeni korišćenjem tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Rezultati se odnose na scenario u kome je zahvat elektrona tretiran kao konzervativan proces sa nultim energijskim gubitkom (isprekidane krive) i na scenario u kome je zahvat tretiran na standardan način, kao pravi nekonzervativan proces (pune krive). Prvi scenario je analiziran kako bi se uvidelo da NDC nije prvenstveno posledica oblika preseka za zahvat elektrona već da nastaje usled sinergije eksplicitnih i implicitnih efekata procesa koji utiču na promenu broja elektrona u roju.

Kada se zahvat elektrona tretira kao konzervativan neelastičan proces, prostorna raspodela elektrona ima oblik Gausijana sa malim nagibom indukovanim spoljašnjim poljem. Ova nesimetričnost profila prostorne raspodele je izraženija sa porastom polja. Dok je prostorna promena lokalno srednje energije mala na nižim poljima, na višim poljima (pre svega na najvišem polju od 59 Td) je izražen nagib ove veličine što pokazuje da je raspodela energije unutar roja izrazito anizotropna.

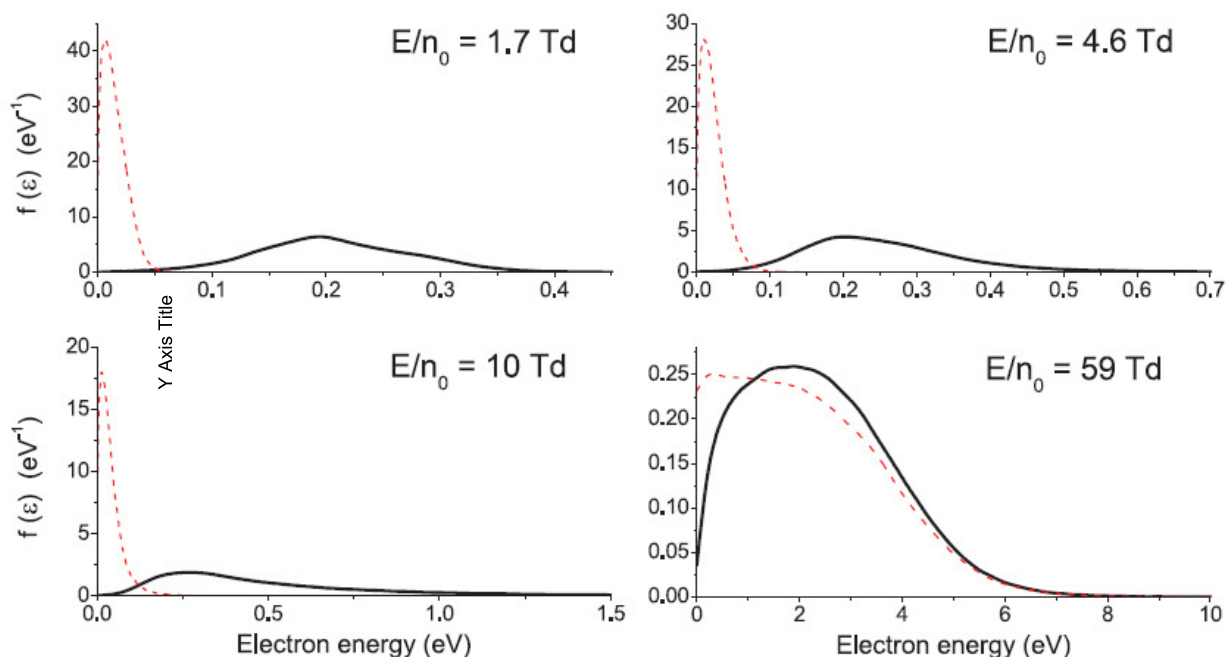
Kada se zahvat elektrona tretira na standardan način, kao nekonzervativan proces, profil raspodele broja elektrona i prostorno razložene lokalno srednje energije se drastično menja. Na svim prikazanim



Slika 4.10: Prostorno razloženi brzinski koeficijenti zahvata elektrona u CF_3I na različitim električnim poljima. Rezultati Monte Karlo simulacija uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona.

poljima se primećuje veća vrednost prostorno razložene lokalno srednje energije u odnosu na slučaj kada se zahvat elektrona smatra konzervativnim procesom. Ovo je potpuno očekivan rezultat imajući u vidu da nekonzervativan proces zahvata uklanja niskoenergijske elektrone iz roja. Profili prostornih raspodela broja elektrona na poljima od 1.7 Td i 4.6 Td se u značajnoj meri razlikuju od Gausijana. Na 1.7 Td se javlja neznatna prostorna varijacija lokalno srednje energije duž roja. Profil prostorne raspodele broja elektrona na 4.6 Td je izrazito nesimetričan i pomeren u smeru suprotnom od spoljašnjeg polja. Ovaj pomerač približno odgovara razlici između balk brzina drifta u dva pomenuta scenarija. Pik u profilu ove veličine koji se nalazi na začelju roja (desni pik) je značajno manji od drugog pika. Pri tome je lokalno srednja energija u roju praktično nepromenjena. Na frontu roja se primećuje značajan porast lokalno srednje energije koji je praćen naglim opadanjem vrednosti ove veličine. Pik na frontu roja u profilu prostorne raspodele elektrona odgovara većem broju elektrona nego što to odgovara profilu oblika Gausijana koji se odnosi na slučaj kada se zahvat elektrona smatra konzervativnim neelastičnim procesom. Na dva najviša ispitivana polja su i dalje uticajni eksplicitni efekti zahvata elektrona ali su značajno manje izraženi. Prostorna zavisnost lokalno srednje energije na 10 Td je približno linearna sa malim porastom na frontu roja. Poređenjem funkcija raspodele elektrona na 4.6 Td i 10 Td u opsegu začelja roja se zaključuje da se umanjenje pika na začelju roja javlja u manjoj meri na polju 10 Td. Ovo pokazuje da je sa porastom polja sve manje elektrona zahvaćeno neutralnim molekulima CF_3I gasa. Prostorna raspodela broja elektrona na najvišem analiziranom polju od 59 Td ima profil koji je identičan profilu dobijenom u slučaju kada je zahvat elektrona smatran konzervativnim neelastičnim procesom.

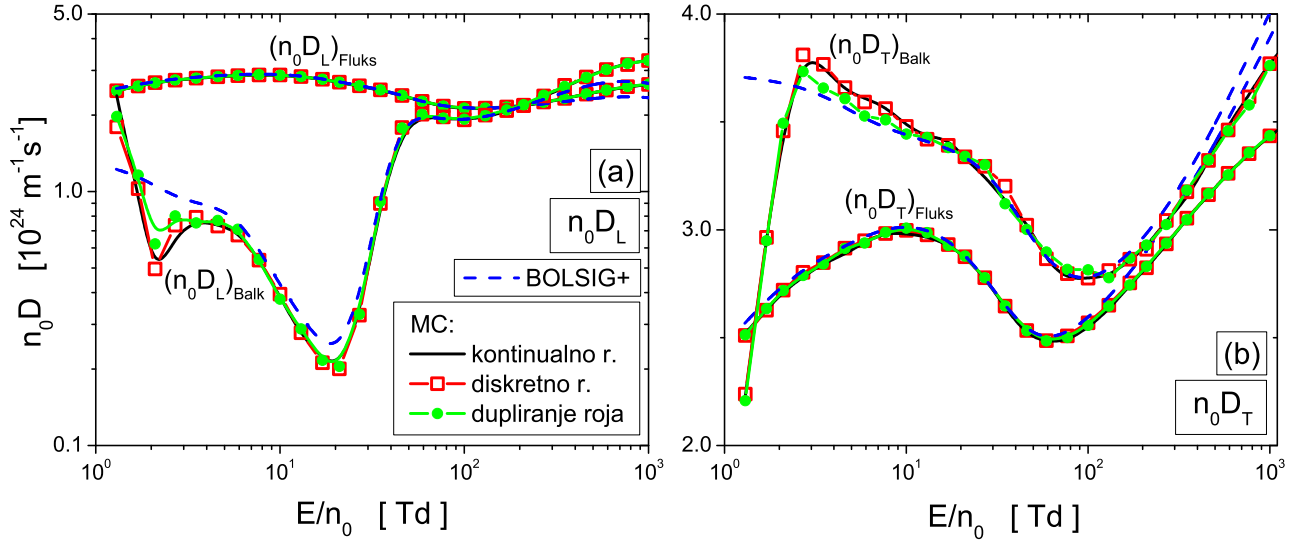
Na slici 4.10 su prikazani prostorno razloženi brzinski koeficijenti zahvata elektrona. U pitanju su rezultati MC simulacija dobijeni uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Pre svega se uočava da brzinski koeficijenti ovog procesa imaju najveću vrednost na začelju roja u čijoj oblasti se nalaze elektroni najmanjih energija. Sa porastom polja opada brzinski koeficijent ovog procesa dok se, takođe, uočava linearno opadanje vrednosti ovog koeficijenta od začelja ka frontu roja. Elektroni na frontu roja imaju dovoljno energije da jonizuju molekule CF_3I čime je značajno



Slika 4.11: Funkcija raspodele energije elektrona u CF_3I na različitim električnim poljima izračunata pri tretiranju procesa zahvata elektrona kao nekonzervativan (pune krive) i kao konzervativan neelastičan proces sa nultim pragom (isprekidane krive). Rezultati Monte Karlo simulacija uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona.

umanjen eksplicitan efekat zahvata elektrona na ponašanje roja. Kao posledica, NDC nestaje iz profila balk brzine drifta.

Pored eksplicitnih efekata zahvata elektrona, javljaju se i implicitni efekti usled gubitaka energije elektrona koji modifikuju raspodelu energije duž roja i time indirektno utiču na fluks roja. Generalno govoreći, ne postoji mogućnost razdvajanja eksplicitnih i implicitnih efekata osim u slučaju kada se analiza vrši sa i bez procesa zahvata elektrona u skupu preseka ispitivanog gasa. U cilju pojašnjenja prethodne činjenice, na slici 4.11 je prikazana funkcija raspodele energije za elektrone u CF_3I izračunata u slučaju kada je zahvat elektrona tretiran na standardan način, kao nekonzervativan proces (pune krive) i kao konzervativan neelastičan proces (isprekidane krive). U pitanju su rezultati MC simulacija na poljima 1.7 Td, 4.6 Td, 10 Td i 59 Td dobijeni korišćenjem tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Kao u slučaju gasa SF_6 (slika 4.5), uočen je efekat *bušenja rupa* u profilima funkcija raspodele koje odgovaraju standardnom načinu tretiranja procesa zahvata elektrona. Ovaj efekat je jedan od najilustrativnijih primera implicitnih efekata. Deo profila funkcije raspodele koji odgovara visokoenergijskim elektronima jako sporo opada sa porastom energije, sporije nego kod Maksvelijana. Upravo u ovim uslovima, kada je zbog grejanja roja zahvatom elektroan funkcija raspodele depopulisana u niskoenergijskom delu i sporo opadajuća u oblasti većih energija, numeričke šeme koje se koriste za rešavanje Bolcmanove jednačine u okviru momentne metode veoma često ne uspevaju da obezbede konvergenciju transportnih koeficijenata. U slučaju kada se zahvat elektrona tretira kao konzervativan neelastičan proces, funkcija raspodele je populisana niskoenergijskim elektronima dok visokoenergijski deo naglo opada. Sa porastom E/n_0 , kada se zahvat elektrona tretira na standardan način, efekat bušenja rupa u funkciji raspodele je značajno redukovano dok se visokoenergijski deo ove funkcije poklapa sa funkcijom koja se odnosi na slučaj u kome se proces zahvata smatra konzervativnim neelastičnim procesom.



Slika 4.12: Promena longitudinalnog (a) i transverznog koeficijenta difuzije (b) za elektrone u SF_6 u funkciji E/n_0 . Rezultati Monte Karlo simulacija sa različitim tehnikama reskaliranja su upoređeni sa rezultatima BOLSIG+ koda. Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panela (b).

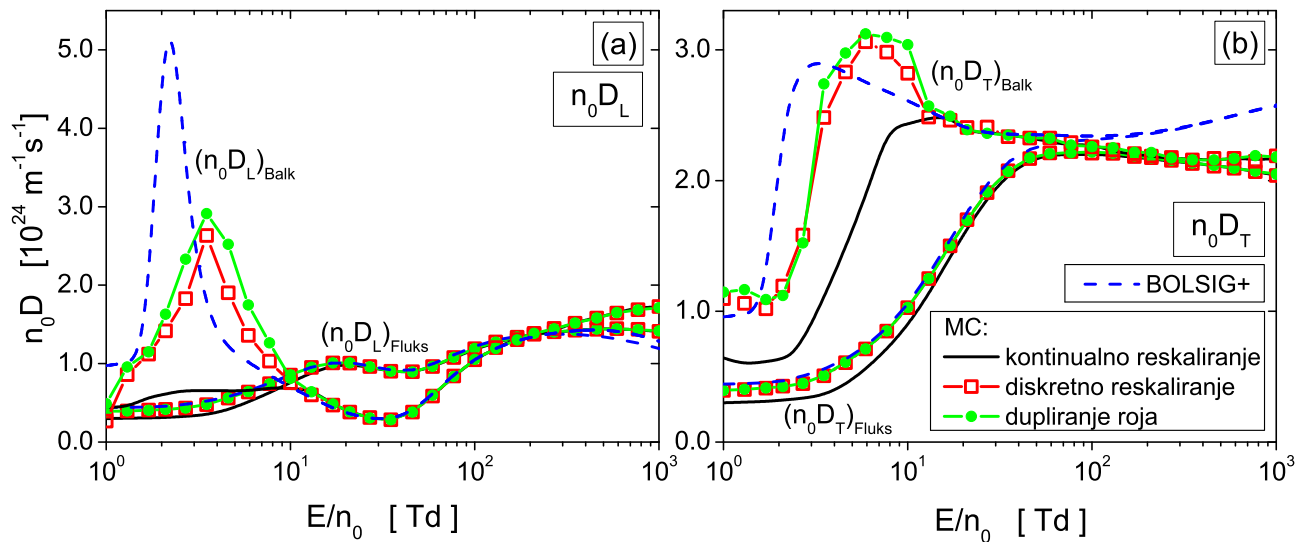
4.5.3 Koeficijenti difuzije

Na slici 4.12 je prikazana promena longitudinalnog i transverznog koeficijenta difuzije sa E/n_0 za elektrone u SF_6 . Na osnovu profila fluks koeficijenata se vidi jako dobro međusobno slaganje različitih tehnika reskaliranja elektrona u MC simulacijama. Što se tiče balk koeficijenata, dobro međusobno slaganje pomenutih tehnika se uočava u oblasti srednjih i najviših ispitivanih polja.

U profilima balk n_0D_L i n_0D_T se jasno uočavaju međusobna neslaganja rezultata MC simulacija i numeričkog koda BOLSIG+ koja su najuočljivija na poljima nižim od ~ 30 Td kao i na najvišim ispitivanim poljima. Ona se mogu pripisati nepreciznosti aproksimacije dva člana za rešavanje BE koja je uvek veća pri izračunavanju koeficijenata difuzije nego pri izračunavanju brzine drifta. Na visokim vrednostima E/n_0 , zbog velikog broja neelastičnih sudara u kojima elektroni gube značajnu količinu energije, funkcija raspodele postaje izrazito anizotropna u brzinskom prostoru. Pod ovim uslovima, difuzioni koeficijenti koji su dobijeni na osnovu aproksimacije dva člana za rešavanje BE će značajno odstupati od onih koji su dobijeni egzaktnim tehnikama kakve su Monte Karlo simulacije ili momentna metoda za rešavanje BE u kojoj se funkcija raspodele razvija u više članova. Neelastični procesi nisu od velikog značaja na nižim E/n_0 ali, kako je evidentna razlika između rezultata MC simulacija i BOLSIG+ koda, dodatna analiza uticaja zahvata elektrona na funkciju raspodele u brzinskom prostoru bi bila od velikog značaja.

Profili longitudinalnog koeficijenta difuzije na niskim i srednjim E/n_0 pokazuju interesantnu karakteristiku. Za razliku od brzine drifta (slika 4.7) i transverznog koeficijenta difuzije (slika 4.12(b)), balk n_0D_L je manji od odgovarajuće fluks vrednosti. Ovo je indikacija da opadanje broja elektrona, usled procesa njihovog zahvata, umanjuje difuziju duž pravca spoljašnjeg polja. Kao što je već diskutovano, gubitak slobodnih elektrona sa začelja roja pomera centar mase roja ka frontu što dovodi do porasta balk brzine drifta i srednje energije. Isti efekti dovode do porasta fluks longitudinalne difuzije. Na najvišim ispitivanim poljima, na kojima postaje značajan uticaj jonizacije, dolazi do porasta difuzije u pravcu spoljašnjeg polja odnosno balk n_0D_L postaje veća od odgovarajuće fluks komponente. Ovakav odnos koeficijenata longitudinalne difuzije se javlja u slučajevima kada je koliziorna frekvenca procesa jonizacije rastuća funkcija energije elektrona.

Balk transverzalni koeficijent difuzije (slika 4.12(b)) je veći od odgovarajuće fluks vrednosti u celokupnom ispitivanom opsegu E/n_0 . Jedino se u limitu najnižih polja primećuje suprotan odnos ovih koeficijenata. Za razliku od longitudinalne difuzije, širenje roja elektrona u pravcu transverzal-



Slika 4.13: Promena longitudinalnog (a) i transverznog koeficijenta difuzije (b) u CF_3I u funkciji E/n_0 . Rezultati Monte Karlo simulacija sa različitim tehnikama reskaliranja su upoređeni sa rezultatima BOLSIG+ koda. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).

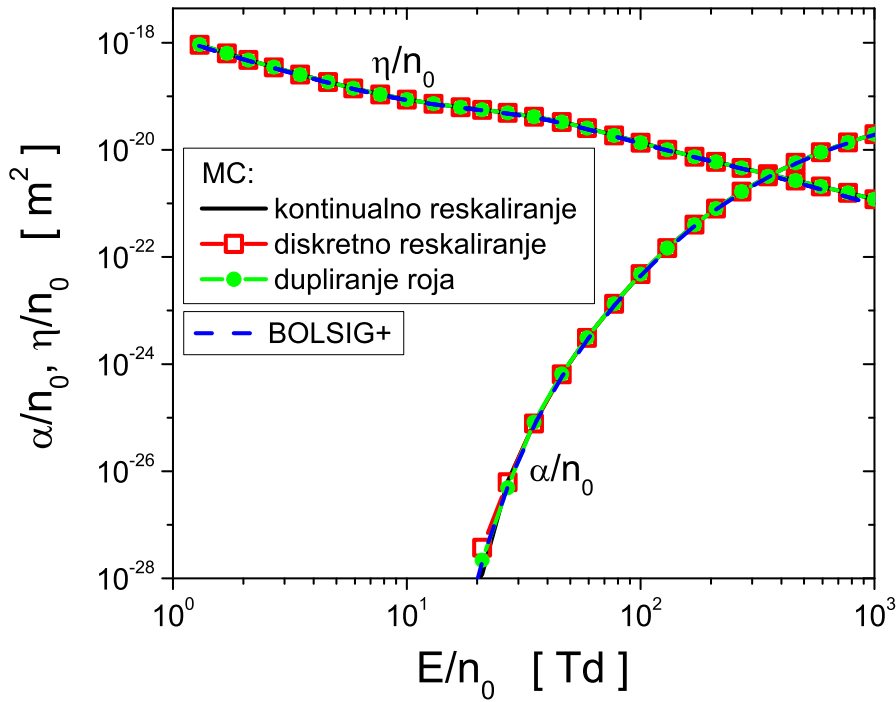
nom u odnosu na pravac spoljašnjeg polja je potpuno određeno termalnim kretanjem elektrona. Visokoenergijski elektroni najviše doprinose transverznom širenju roja. Iz tog razloga, zahvat elektrona dovodi do porasta balk transverznog difuzionog koeficijenta.

Na slici 4.13 je prikazana promena longitudinalnog i transverznog koeficijenta difuzije sa E/n_0 za elektrone u CF_3I . Međusobno slaganje koeficijenata $(n_0D_L)_{Balk}$ izračunatih različitim tehnikama reskaliranja elektrona je u okviru 12% na poljima između 10 Td i 400 Td. Isto važi i za fluks komponentu ovog koeficijenta. Ovo međusobno slaganje je lošije na nižim E/n_0 , posebno kod balk komponente.

Ukoliko poredimo rezultate MC i BOLSIG+ kodova, vidimo da je njihova međusobna razlika najveća na nižim i najvišim poljima. Za razliku od SF_6 , CF_3I ima brzorastući presek za vibracionu ekscitaciju koji odgovara istoj energijskoj oblasti u kojoj opada presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima. Pod ovim uslovima je povećana razmena energije tokom sudara elektrona i molekula pozadinskog gasa i izdvajaju se dominantni pravci rasejanja elektrona. Drugim rečima, funkcija raspodele postaje znatno različita od izotropne raspodele u brzinskom prostoru a upravo u ovakvim uslovima, aproksimacija dva člana za rešavanje BE postaje problematična sa stanovišta preciznosti proračuna.

Razlika između profila balk i fluks koeficijenata difuzije je mnogo složenija nego u slučaju SF_6 gasa. Kod n_0D_L se vidi da je balk koeficijent veći od odgovarajućeg fluks koeficijenta na nižim i višim poljima dok je odnos ovih koeficijenata suprotan u srednjoj oblasti polja. Ponašanje transverznog koeficijenta difuzije je jednostavnije: balk vrednosti su veće od fluks vrednosti u celokupnom prikazanom opsegu polja.

Kao što se vidi na prethodnim slikama, mnogo je komplikovanije objasniti ponašanje balk i fluks koeficijenata difuzije nego brzine drifta. Ovo potiče od kompleksnosti faktora koji utiču na koeficijente difuzije. Dva najznačajnija faktora su: efekat termalne anizotropije koji se javlja zbog različitog kretanja elektrona u različitim pravcima i efekat anizotropije indukovane spoljašnjim poljem koji se javlja usled prostorne varijacije srednje energije i lokalne usrednjene brzine duž roja koja deluje tako da pojačava ili kompenzuje difuziju elektrona. Dodatni faktori uključuju efekte rasejanja, totalnu kolizionu frekvencu zavisnu od energije kao i prisustvo nekonzervativnih sudara. Uzajamno dejstvo ovih faktora je uvek prisutno pa upravo iz ovih razloga veoma česti nije jednostavno razumeti osnovne trendove u ponašanju difuzionih koeficijenata. Konačno, da bi se mnogo bolje razumeli efekti



Slika 4.14: Koeficijenti jonizacije i zahvata elektrona u SF_6 u funkciji E/n_0 . Rezultati Monte Karlo simulacija sa različitim tehnikama reskaliranja su upoređeni sa rezultatima BOLSIG+ koda.

neKonzervativnih sudara na difuziju elektrona, potrebno je razmotriti prostorne varijacije drugog reda srednje energije duž roja. Ovakva analiza bi zahtevala mnogo više prostora u ovoj disertaciji, od onoga koji nam je bio na raspolaganju, i svakako izlazi van okvira ovog rada.

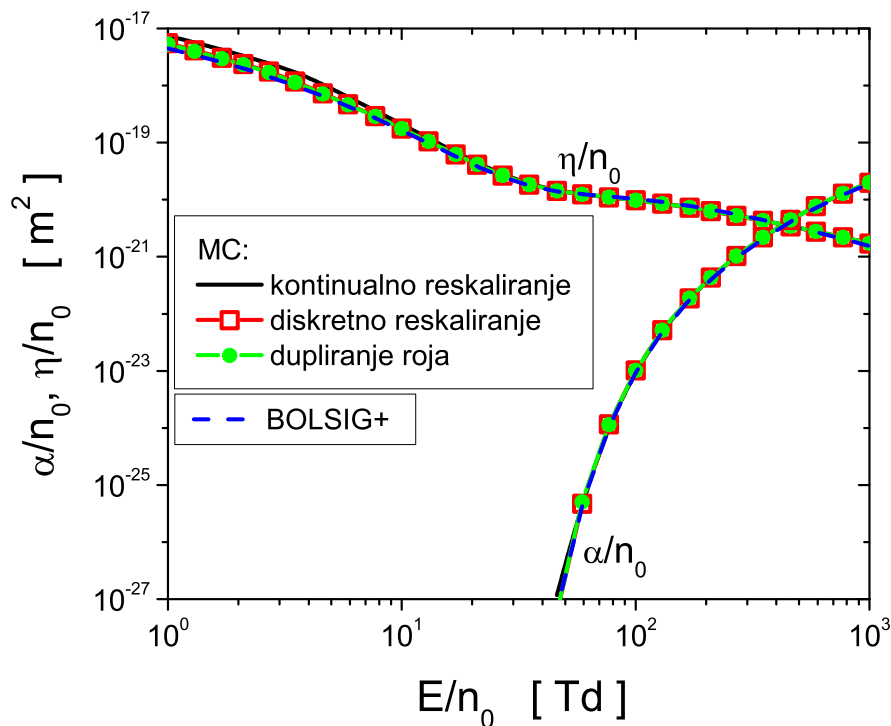
4.5.4 Koeficijenti jonizacije i zahvata

Na slici 4.14 je prikazana promena koeficijenata jonizacije i zahvata sa E/n_0 za elektrone u SF_6 . U slučaju oba prikazana koeficijenta je dobijeno veoma dobro međusobno slaganje rezultata različitih tehnika reskaliranja elektrona u MC kodu i rezultata koda BOLSIG+. Važno je naglasiti da je dobro slaganje postignuto i u domenu najnižih razmatranih polja u kome je funkcija raspodele elektrona pod snažnim uticajem procesa zahvata elektrona. Koeficijenti se menjaju sa porastom polja na očekivan način: koeficijent α/n_0 raste dok koeficijent η/n_0 opada. U preseku krivih koje se odnose na ova dva koeficijenta se dobija vrednost kritičnog električnog polja gasa SF_6 koja iznosi ~ 360 Td što je u izuzetnom slaganju sa rezultatima eksperimentalnih merenja [207].

Na slici 4.15 je prikazana promena koeficijenata jonizacije i zahvata sa E/n_0 za elektrone u CF_3I . Postignuto je izuzetno međusobno slaganje između rezultata različitih tehnika reskaliranja i BOLSIG+ koda u slučaju koeficijenta α/n_0 . Na poljima nižim od ~ 10 Td, tehnika kontinualnog reskaliranja elektrona daje veće vrednosti koeficijenta η/n_0 u odnosu na preostale scenarije proračuna. Presek ovih koeficijenata se nalazi u okolini polja od 440 Td što je u jako dobrom slaganju sa eksperimentalnim merenjima u SST [167, 171] i PT eksperimentu [88] kao i sa rezultatima na osnovu teorijskih proračuna koeficijenata α/n_0 i η/n_0 [187, 193].

4.6 Poređenje tehnika reskaliranja

Ovde ćemo se osvrnuti na glavne karakteristike tehnika reskaliranja elektrona u MC simulacijama, njihovu implementaciju u numerički kod i dati preporuke za primenu najoptimalnije tehnike u zavis-



Slika 4.15: Koeficijenti jonizacije i zahvata elektrona u CF_3I u funkciji električnog polja. Rezultati Monte Karlo simulacija sa različitim tehnikama reskaliranja su upoređeni sa rezultatima BOLSIG+ koda.

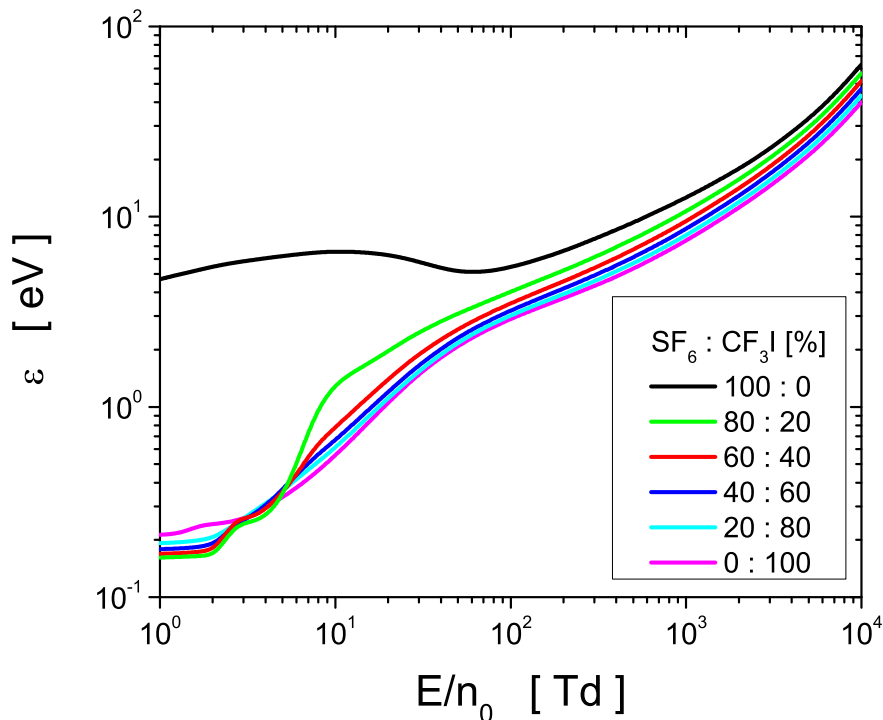
nosti od vrste gasa i željenih performansi procesa simulacije.

Generalan zaključak je taj da se međusobno slaganje rezultata različitih tehnika reskaliranja postiže onda kada je njihova implementacije izvedena na pažljiv način. Pod tim se pre svega misli na pažljivo podešavanje vremenskih koraka u kojima se vrši nadoknađivanje elektrona kod tehnike diskretnog reskaliranja i tehnike dupliranja roja. Ukoliko je dužina ovog vremenskog koraka prevelika u poređenju sa vremenskom konstantnom koja odgovara kolizionoj frekvenci procesa zahvata elektrona, javlja se trajni gubitak elektrona iz pojedinih oblasti energija usled čega se ne može u potpunosti rekonstruisati funkcija raspodele elektrona po energijama. Sa druge strane, ukoliko je vremenski korak suviše mali onda simulacija postaje znatno vremenski zahtevna. Implementacija tehnike kontinualnog reskaliranja je neznatno komplikovanija. Na osnovu dosadašnje primene tehnika reskaliranja elektrona je ustanovljeno da je slaganje rezultata različitih tehnika uvek bolje kod fluksa nego kod njima odgovarajućih balk transportnih koeficijenata.

Ukoliko je merilo održavanje broja elektrona u roju na vrednost što približniju početnom broju elektrona, onda se tehnika kontinualnog reskaliranja nameće kao potencijalno najbolji izbor primenljiv kod različitih jako elektronegativnih gasova.

Što se tiče fleksibilnosti tehnika reskaliranja, ukoliko želimo da izbegnemo potrebu za procenama pre početka simulacije, onda je tehnika kontinualnog reskaliranja najbolji izbor. Jednom kada se implementira u kod, ova tehnika omogućava analizu transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima bez obzira na energijsku zavisnost preseka za zahvat elektrona. Sa druge strane, ukoliko se analiziraju slabo elektronegativni gasovi, onda je tehnika diskretnog reskaliranja zgodniji izbor zbog svoje jednostavnije implementacije u kod i manje zahtevnosti po pitanju računarskog vremena.

Poređenje rezultata različitih tehnika nadoknađivanja elektrona u MC simulacijama sa rešenjima Bolcmanove jednačine pokazuje da su tehnike reskaliranja izuzetno pouzdane. Neophodno je naglasiti da jedinonumerička rešenja momentne metode više članova ove jednačine mogu biti merodavna u ovoj proceni. Ograničenja aproksimacije dva člana za rešavanje BE su više puta isticana u litera-



Slika 4.16: Srednja energija elektrona u SF₆-CF₃I smešama u funkciji E/n_0 . Rezultati Monte Karlo simulacija uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona.

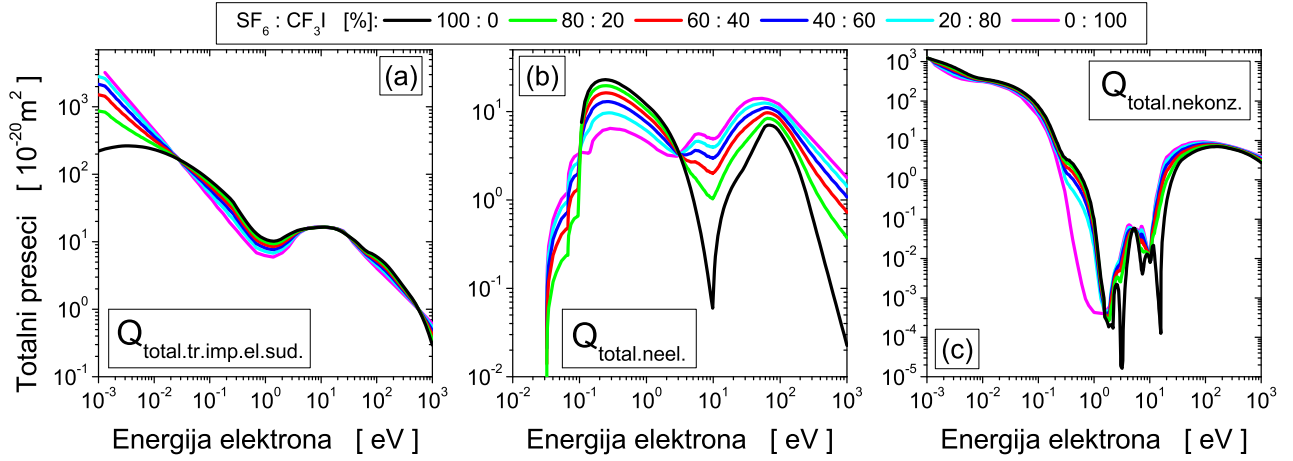
turi [8,9], posebno kada je u pitanju izračunavanje koeficijenata difuzije.

Dakle, u cilju analize transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima putem MC simulacija, neophodna je primena tehnika reskaliranja elektrona kako bi se obezbedilo pravilno izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona u oblasti energija u kojima dominiraju preseki za zahvat elektrona.

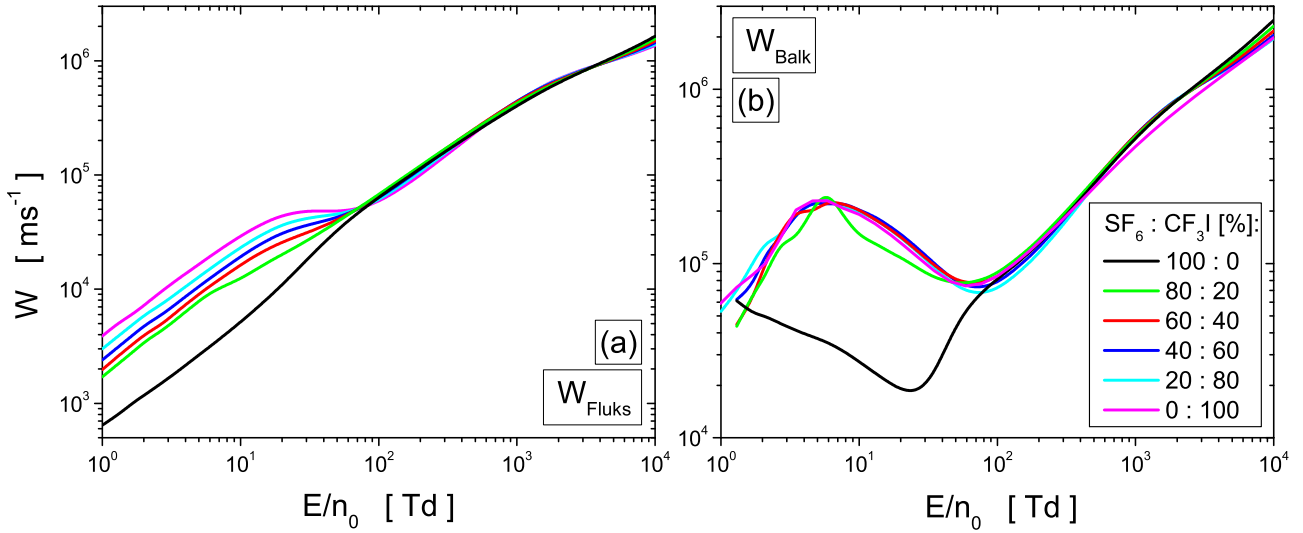
4.7 Transport elektrona u SF₆-CF₃I smešama

U ovom potpoglavlju je diskutovan transport elektrona u smešama jako elektronegativnih gasova SF₆ i CF₃I. U pitanju su rezultati MC simulacija dobijeni korišćenjem tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona razvijene za potrebe ove doktorske disertacije. Radi preglednosti, sa svih narednih slika su izostavljeni rezultati BOLSIG+ koda.

Na slici 4.16 je prikazana srednja energija elektrona u SF₆-CF₃I smešama u funkciji E/n_0 . Ova veličina ima različit trend sa porastom polja koji zavisi kako od oblasti polja tako i od koncentracije gasova u smeši. Ukoliko se izuzmu smeša 80%SF₆-20%CF₃I i čist SF₆ a međusobno uporede trendovi srednje energije elektrona u preostalim smešama na poljima višim od ~7 Td, vidi se da su oni gotovo identični. Njihova međusobna razlika je u veličini srednje enrgije koja raste sa opadanjem koncentracije CF₃I u smeši. Za ovakvo ponašanje ε na srednjim i visokim poljima su, pre svega, odgovorni preseki za elektronsku ekscitaciju i jonizaciju. Na slici 4.17 su prikazani totalni preseki za rasejanje elektrona u elastičnim, neelastičnim i nekonzervativnim sudarnim procesima elektrona u SF₆-CF₃I smešama. Ovde treba imati u vidu da totalnom preseku za elastično rasejanje odgovara presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima imajući u vidu da mi koristimo model izotropnog rasejanja. Izračunati su na osnovu skupova preseka za rasejanje elektrona u ova dva gasa (slike 4.1 i 3.2), kao suma preseka za odgovarajuće sudarne procese koji su otežinjani koncentracijom gasova u smeši. Sa panela (b) i (c) ove slike se vidi da totalni preseki za neelastične i nekonzervativne sudare opadaju sa opadanjem koncentracije CF₃I u smeši na poljim višim od ~7 Td. Time se sve manje



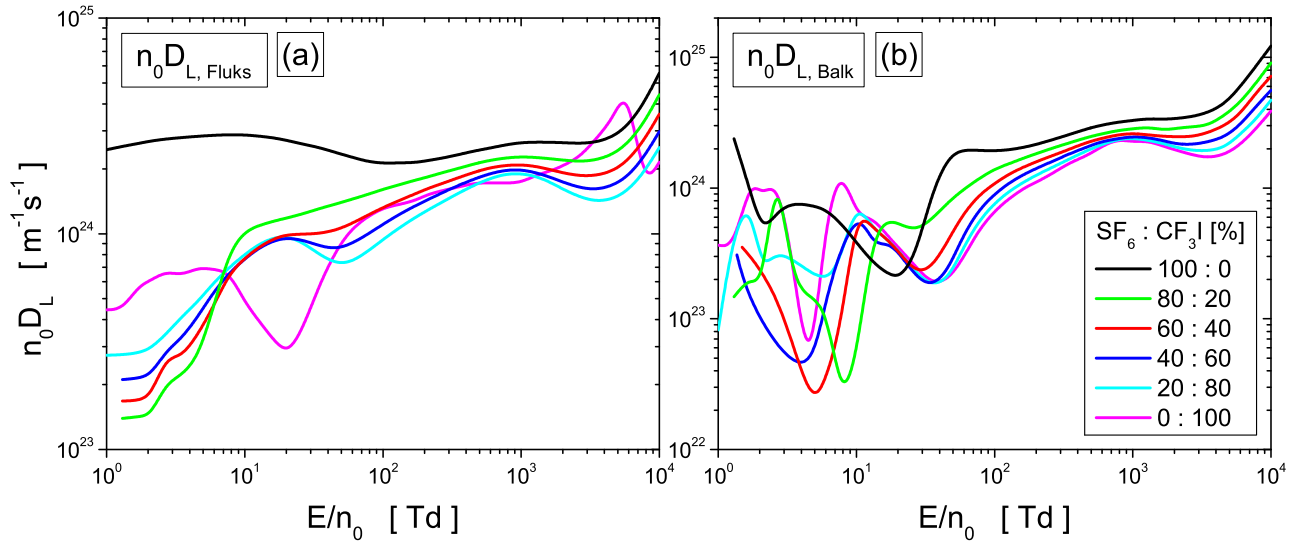
Slika 4.17: Totalni preseki za rasejanje elektrona u $\text{SF}_6\text{-CF}_3\text{I}$ smešama: totalan presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima (a), totalan presek za neelastične sudare (b) i totalan presek za nekonzervativne sudare (c).



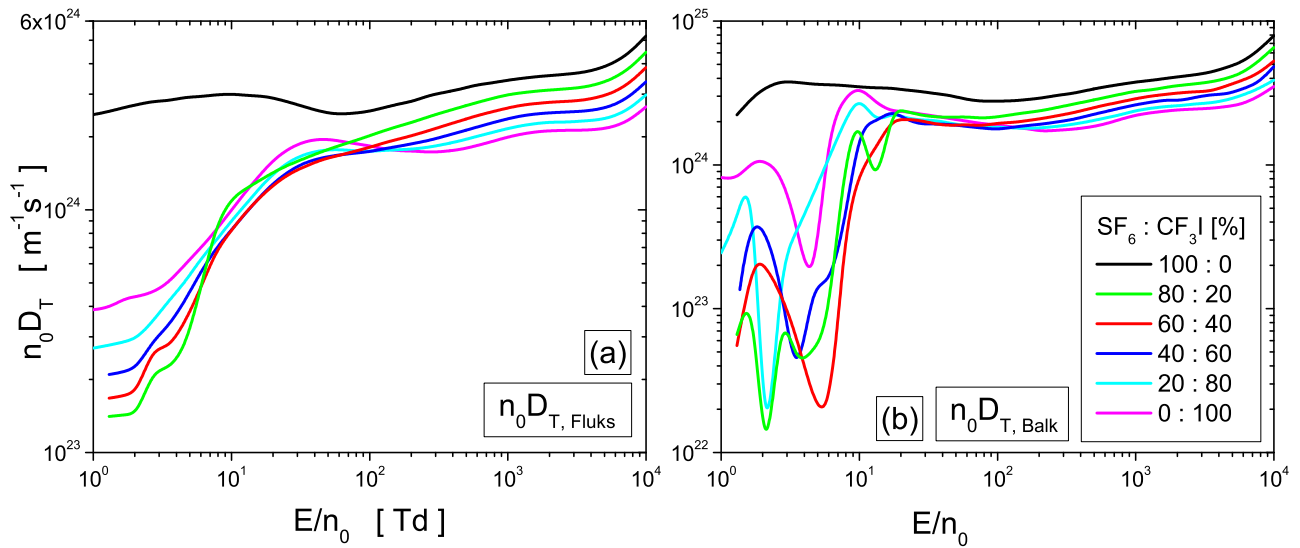
Slika 4.18: Fluks (a) i balk (b) brzina drifta elektrona u $\text{SF}_6\text{-CF}_3\text{I}$ smešama u funkciji E/n_0 . Rezultati Monte Karlo simulacija uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).

oseća efekat *hlađenja roja* pa se ε ponaša na opisan način. Ukoliko se izuzme čist SF_6 , u oblasti najnižih ispitivanih polja (slika 4.16) se primećuje da ε opada sa opadanjem koncentracije CF_3I u smeši. U ovoj oblasti E/n_0 , vrednosti ε su više od termalnih vrednosti usled *grejanja roja* zahvatom elektrona (slika 4.17(c)). U opsegu polja od ~ 3 Td do ~ 7 Td, ε pokazuje manju osetljivost na sastav smeše.

Na slici 4.18 je prikazana fluks i balk brzina drifta elektrona u $\text{SF}_6\text{-CF}_3\text{I}$ smešama u funkciji E/n_0 . Kao u slučaju čistih gasova (slike 4.7 i 4.8), balk brzina drifta je veća od fluks brzine u svim smešama u celokupnom prikazanom opsegu polja. Što se tiče W_{Fluks} , njena vrednost raste sa porastom polja u svim prikazanim smešama ali uz različit trend u različitim oblastima E/n_0 . Na poljima nižim od ~ 50 Td, W_{Fluks} opada sa opadanjem koncentracije CF_3I u smeši. Presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima najviše utiče na ponašanje brzine drifta. Ovom opsegu polja odgovaraju srednje energije iz intervala $\sim (2, 5)$ eV (slika 4.16) u čijem opsegu raste $Q_{total.tr.imp.el.sud.}$ (slika 4.17(a)) što upravo dovodi do prikaznog ponašanje fluks brzine drifta sa promenom polja. Na višim električnim poljima, W_{Fluks} je slabo osetljiva na sastav gasne smeše: razlike između vrednosti brzine su u opsegu



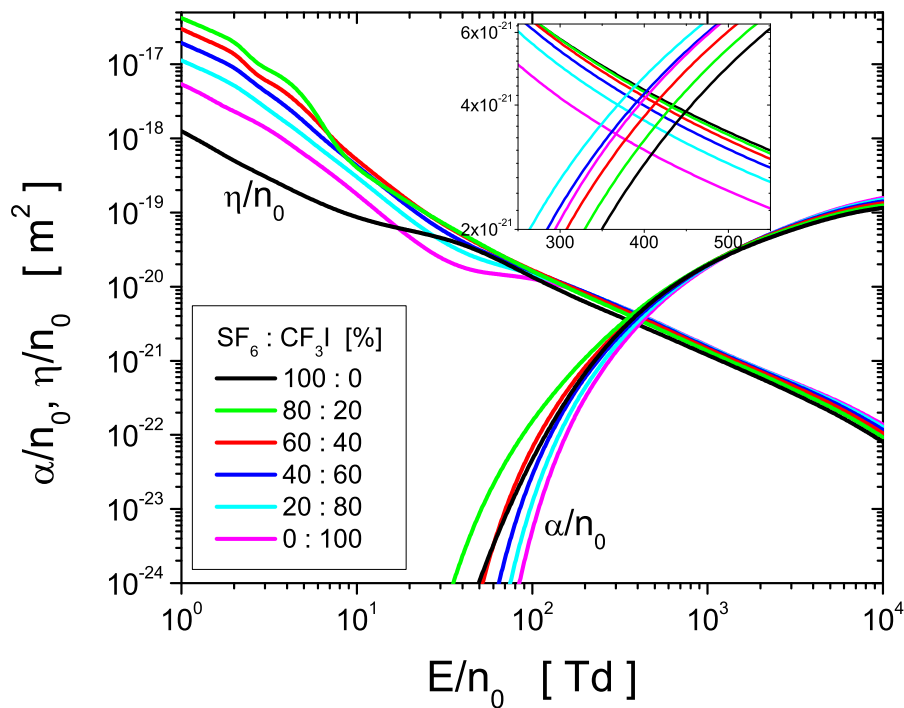
Slika 4.19: Promena fluks (levi panel) i balk (desni panel) longitudinalnog koeficijenta difuzije sa E/n_0 za elektrone u SF_6 - CF_3I smešama. Rezultati Monte Karlo simulacija uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Oznake krivih sa desnog panela se odnose i na levi panel.



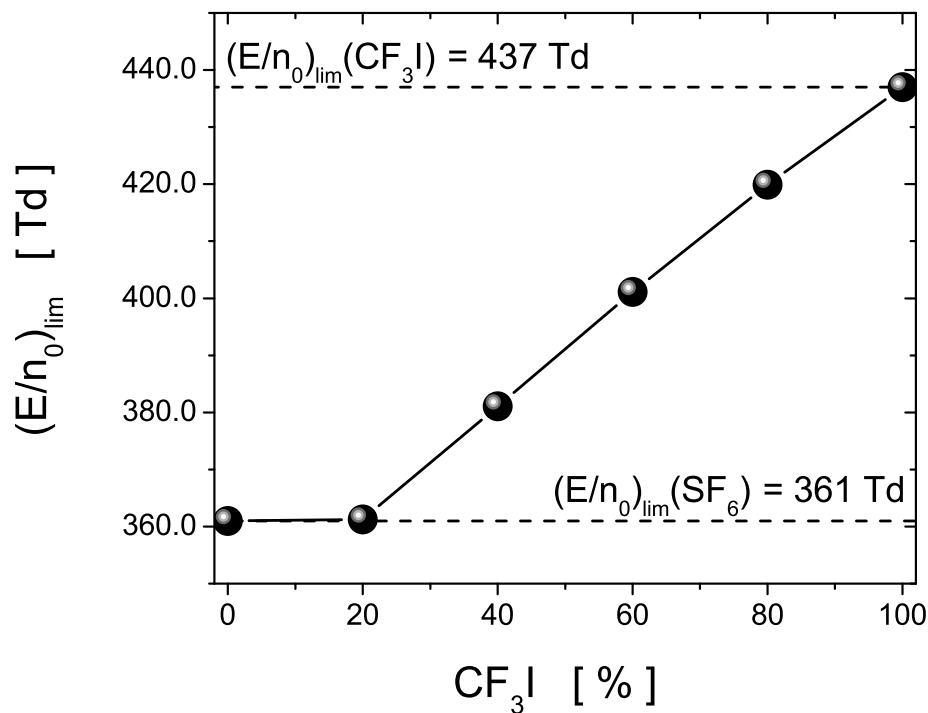
Slika 4.20: Promena fluks (levi panel) i balk (desni panel) transversalnog koeficijenta difuzije sa E/n_0 za elektrone u SF_6 - CF_3I smešama. Rezultati Monte Karlo simulacija uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Oznake krivih sa desnog panela se odnose i na levi panel.

od maksimalno $\sim 12\%$. Balk brzina drifta monotono raste sa poljem u intervalu od ~ 70 Td do 10^4 Td dok se na nižim poljima uočava NDC. Za razumevanje ovog fenomena u smešama SF_6 i CF_3I se mogu koristiti slični fizički argumenti kao i u slučaju čistih gasova.

Na slici 4.19 su prikazani fluks i balk longitudinalni koeficijenti difuzije u SF_6 - CF_3I smešama izračunati MC simulacijama uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Na poljima višim od ~ 30 Td se uočava da koeficijent $(n_0 D_L)_{Fluks}$ opada sa porastom koncentracije CF_3I u smeši. Od opisanog ponašanja odstupa kriva koja se odnosi na čist CF_3I . Ovaj koeficijent ima suprotan trend na poljima nižim od ~ 7 Td: raste sa porastom koncentracije CF_3I u smeši od čega odstupa trend čistog SF_6 . Kada se posmatraju rezultati koji se odnose na koeficijent $(n_0 D_L)_{Balk}$, jedina pravilnost se uočava na poljima višim od ~ 40 Td: balk koeficijent longitudinalne difuzije opada sa porastom koncentracije CF_3I u smeši.



Slika 4.21: Koeficijenti jonizacije i zahvata elektrona u SF_6 - CF_3I smešama u funkciji E/n_0 . Rezultati Monte Karlo simulacija uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona.



Slika 4.22: Kritično polje gasne smeše SF_6 - CF_3I u funkciji koncentracije CF_3I gasa. Rezultati su dobijeni na osnovu rezultata prikazanih na prethodnoj slici.

Na slici 4.20 su prikazani fluks i balk transversalni koeficijenti difuzije u $\text{SF}_6\text{-CF}_3\text{I}$ smešama izračunati MC simulacijama uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Koeficijent $(n_0 D_T)_{Fluks}$ opada sa porastom koncentracije CF_3I u smeši na poljima višim od ~ 200 Td dok, ukoliko izuzmemo čist SF_6 , ovaj koeficijent ima suprotan trend ponašanja na poljima nižim od ~ 7 Td. Kao i koeficijent $(n_0 D_T)_{Fluks}$, balk vrednosti ovog koeficijenta opadaju sa porastom koncentracije CF_3I na poljima višim od ~ 200 Td.

Slika 4.21 prikazuje koeficijente jonizacije i zahvata elektrona u $\text{SF}_6\text{-CF}_3\text{I}$ smešama u funkciji E/n_0 . U celokupnom prikazanom opsegu polja, koeficijenti α/n_0 rastu dok koeficijenti η/n_0 opadaju sa porastom električnog polja, što je, kao i kod čistih gasova, posledica opsega električnih polja u okviru koga se oseća uticaj preseka za jonizaciju i zahvat elektorna, respektivno. U presecima prikazanih krivih, kao što to prikazuje umetnut panel slike 4.21, dobijaju se vrednosti $(E/n_0)_{lim}$. Sa porastom koncentracije CF_3I u smeši, kritično električno polje raste (slika 4.22) čime se poboljšavaju karakteristike ove gasne smeše u pogledu dielektričnih osobina do viših vrednosti redukovanog električnog polja.

4.8 Zaključak

U ovom poglavlju su prikazani transportni koeficijenti elektrona u jako elektronegativnim gasovima SF_6 , CF_3I i njihovim smešama u funkciji redukovanog električnog polja. Proračuni su vršeni Monte Karlo simulacijama i javno dostupnim kodom BOLSIG+ za rešavanje Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Akcenat ovog poglavlja je stavljen na izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona u opsegu niskih polja u kome dominira uticaj procesa zahvata elektrona.

U cilju pravilnog izračunavanja transportnih koeficijenata elektorna u jako elektronegativnim gasovima u opsegu niskim polja, manjih od približno 50 Td, u Monte Karlo kod su implementirane tehnike reskaliranja elektrona. Pored tri postojeće tehnike, u naš kod je implementirana dinamička tehnika kontinualnog reskaliranja elektorna razvijena za potrebe ove doktorske disertacije. Naša tehnika kontinualnog reskaliranja je fleksibilnija i univerzalnija u odnosu na postojeću tehniku pošto ne zahteva procenu brzinskog koeficijenta fiktivnog procesa jonizacije pre početka simulacije. Istovremeno, naša tehnika omogućava simultano podešavanje ovog brzinskog koeficijenta u toku celokupnog trajanja simulacije čime je obezbeđena varijacija broja elektrona u roju za maksimalno 10% u odnosu na unapred zadat broj elektrona.

Zapaženi su značajni fenomeni u transportu elektrona u gasovima sa izraženim zahvatom elektrona. Neki od njih su anomalno ponašanje srednje energije elektrona u SF_6 okarakterisano njenim opadanjem sa porastom E/n_0 i pojava NDC fenomena u profilima balk brzine drifta u SF_6 i CF_3I uz istovremeno odsustvo ovog fenomena u fluks brzini drifta elektrona.

Poglavlje 5

Transport elektrona u $C_3H_2F_4$

5.1 Uvod

Ovo poglavlje je posvećeno analizi transporta elektrona u $C_3H_2F_4$ i njegovim smešama sa argonom (Ar), azotom (N_2), ugljendioksidom (CO_2) i sumpor-heksafluoridom (SF_6). Polazeći od dostupnih podataka o sudarnim procesima elektrona u gasovima sličnih karakteristika kao $C_3H_2F_4$, konstruisan je skup preseka za rasejanje elektrona u ovom dielektriku koji daje dobra slaganja sa referentnim eksperimentalnim podacima za transportne koeficijente. Pored ovoga, konstruisana je i druga verzija skupa preseka koja fituje nehidrodinamičko ponašanje brzinskog koeficijenta efektivne jonizacije potvrđeno merenjima druge grupe autora. Transportni koeficijenti elektrona su izračunati u opsegu električnih polja u kojima postoje eksperimentalni rezultati putem Monte Karlo simulacija i rešenja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana.

5.2 Gas $C_3H_2F_4$

$C_3H_2F_4$ je sintetički proizvod američke kompanije *Honeywell International Inc.* koja posluje u oblasti vazduhoplovstva, građevinarstva, novih materijala i drugih savremenih tehnologija. Gas se vodi pod identifikacionim imenom *Solstice® ZE R-1234ze(E)*. Poznat je još i po nazivima 1,3,3,3 tetrafluoropropan, TFP1333 i HFO-1234ze.

$C_3H_2F_4$ je bezbojan i nezapaljiv gas sa blagim mirisom etera. Toksičan je pri udisanju, izaziva promrzline u kontaktu sa kožom i očima i jako je reaktivan sa alkalnim metalima. Njegove najznačajnije fizičke karakteristike su molekularna masa od 114 g/mol, tačka ključanja od $-19.0\text{ }^{\circ}C$ na pritisku od jedne atmosfere ($1\text{ atm} = 101325\text{ Pa}$) i pritisak pare od 3.2 bar na $21\text{ }^{\circ}C$.

$C_3H_2F_4$ spada u grupu hidrofluoroolefina, nezasićenih organskih komponenti (alkena) sačinjenih od vodonika, fluora i ugljenika. Jedan je od gasova četvrte generacije rashladnih gasova koji su ekološki prihvatljivi usled benignog uticaja na Zemljinu atmosferu. Okarakterisan je niskim faktorom

globalnog zagrevanja (GWP=6 za stogodišnji interval) i potencijalom za razaranje ozona jednakim nuli. Pre svega zbog ovih karakteristika, potencijalan je kandidat za zamenu SF₆ u industriji prenosa električne struje [208, 209]. Već se koristi kao alternativan rashladan fluid umesto hidrofluorokarbonata C₂H₂F₄ (poznatog i pod nazivom Freon-134a). C₃H₂F₄ se odlikuje atmosferskim vremenom života od približno tri nedelje pri čemu produkti njegove degradacije nisu štetni po životnu sredinu. Kritično polje ovog gasa je ~190 Td.

5.3 Transport elektrona nezavisan od pritiska

Ovo potpoglavlje je posvećeno analizi transporta elektrona u C₃H₂F₄ čiji su preseki za rasejanje elektrona nezavisni od pritiska gasa. Na osnovu inicijalnog skupa preseka, sastavljen je konačan skup preseka za rasejanje elektrona u C₃H₂F₄ primenom tehnike rojeva. Na osnovu ovog skupa preseka su izračunati transportni koefijenti elektrona u čistom gasu i značajnim gasnim smešama.

5.3.1 Inicijalan skup preseka

Na osnovu detaljnog pregleda literature ustanovljeno je sledeće: (i) nema publikovanih rezultata za individualne sudarne preseke za rasejanje elektroan u C₃H₂F₄, (ii) ne postoje predlozi ekstrapolacija poznatih preseka za rasejanje elektrona u drugim gasovima u domen C₃H₂F₄ gasa odnosno nije bilo pokušaja da se konstruiše kompletan skup preseka koji bi omogućio reprodukciju i dobro slaganje sa izmerenim transportnim koeficijentima. Koristeći ove činjenice, kao i sličnost u pogledu fizičkih i hemijskih osobina, za inicijalan gas čiji će preseki biti modifikovani i prilagođeni je odabran oktafluoropropan (C₃F₈). Skup preseka za rasejanje elektrona u C₃F₈ je preuzet iz javno dostupnog Monte Karlo koda MAGBOLTZ [210]. Ovaj skup preseka je prikazan na slici 5.1 i korišćen je kao inicijalan skup preseka za fitovanje eksperimentalno određenih transportnih koeficijenata u PT eksperimentu.

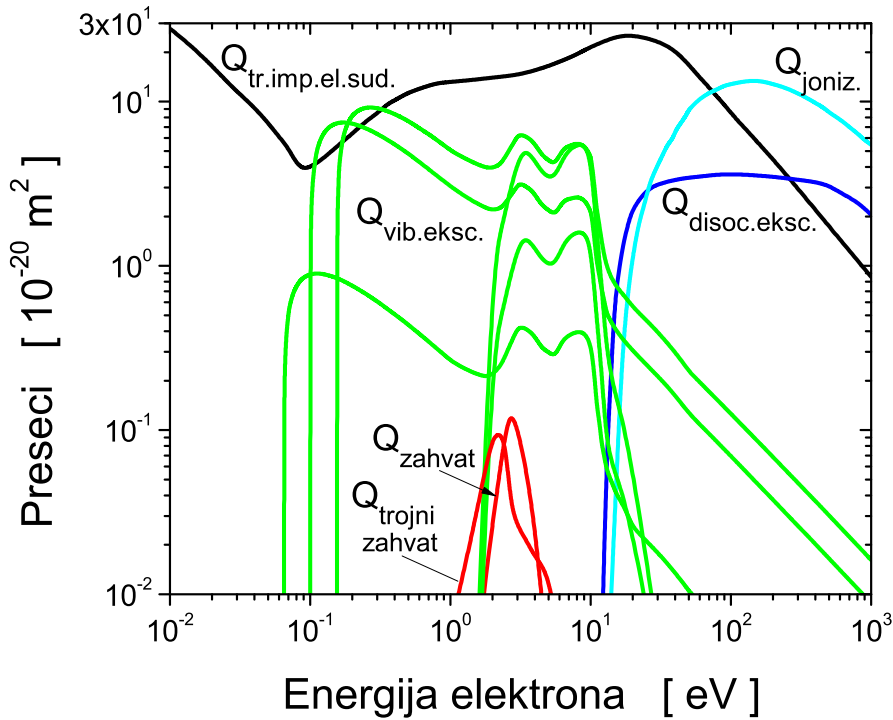
5.3.2 Konačan skup preseka

Skup preseka za rasejanje elektrona u C₃H₂F₄ je konstruisan tako da daje dobra slaganja sa eksperimentalnim podacima de Urquijo i saradnika izmerenim u PT eksperimentu u čistom gasu i smešama sa Ar i N₂ [211].

Konačan skup preseka je prikazan na slici 5.2. Oblici i veličina preseka za pojedinačne sudarne procese se značajno razlikuju od odgovarajućih preseka u inicijalnom skupu. Njihova modifikacija je izvršena na sledeći način:

1. $Q_{tr.imp.el.sud.}$ je neznatno modifikovan na energijama većim od 30 eV. Lokalni minimum je transliran sa 0.08 eV na 5 eV dok je njegova vrednost smanjena za više od jednog reda veličine. Na najnižim prikazanim energijama, vrednost ovog preseka je povećana za više od reda veličine;

2. $Q_{vib.eksc.}$ sa pragom 0.065 eV je transliran na 0.011 eV i smanjena je vrednost lokalnog maksimuma u okolini praga. U oblasti između 1 eV i 10 eV je povećana vrednost ovog preseka dok su dva lokalna maksimuma zamenjena jednim. Slična modifikacije je izvršena i nad $Q_{vib.eksc.}$ sa pragom od 0.1 eV. Presek je transliran na 0.045 eV, smanjena je njegova veličina u okolini praga, povećan u energijskoj oblasti od 1 eV do 10 eV a dva lokalna maksimuma su zamenjena jednim. $Q_{vib.eksc.}$ sa pragom od 0.1532 eV je transliran na 0.15 eV, smanjen je intenzitet u maksimumu dok je trend preseka na višim energijama modifikovan u monotono opadajuću funkciju energije. U odnosu na inicijalan skup preseka, dodat je $Q_{vib.eksc.}$ sa pragom od 0.097 eV i istim trendom ponašanja kao prethodno opisan presek. U konačnom skupu preseka postoji još jedan $Q_{vib.eksc.}$ sa istim pragom od 0.097 eV ali sa maksimumom u okolini 0.6 eV. Umesto vibracionih prelaza sa pragovima od 0.35 eV i 0.5 eV, u konačnom skupu se nalazi presek sa pragom od 0.21 eV;



Slika 5.1: Skup preseka za rasejanje elektrona u C_3F_8 . Skup sadrži: $Q_{tr.imp.el.sud.}$ presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, pet $Q_{vib.eksc.}$ preseka za vibracionu ekscitaciju, $Q_{disoc.eksc.}$ presek za disocijativnu ekscitaciju, Q_{zahvat} presek za disocijativan zahvat elektrona, $Q_{trojni zahvat}$ presek za trojni zahvat elektrona i $Q_{joniz.}$ presek za jonizaciju.

3. u konačan skup preseka je dodat $Q_{elek.eksc.}$ sa pragom od 2.0 eV kako bi se opisali gubici energije elektrona u ovoj oblasti energija;

4. modifikovan je prag preseka $Q_{elek.disoc.}$ sa 11.8 eV na 11.0 eV, trend ponašanja preseka sa energijom elektrona je neznatno izmenjen dok se najveća promena ogleda u povećanju veličine preseka u lokalnom maksimumu;

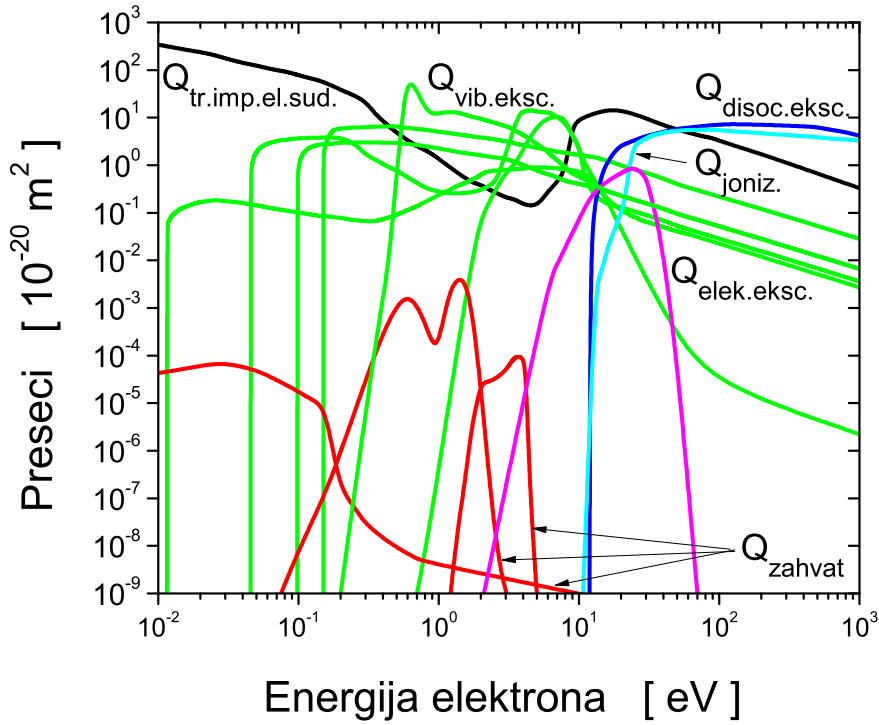
5. presek Q_{zahvat} sa pragom od 1 eV je transliran na 0.8 eV a njegov intenzitet je smanjen za skoro tri reda veličine. Izbačen je presek za trojni zahvat umesto koga su uključena dva Q_{zahvat} : jedan sa pragom od 0.08 eV a drugi sa vrednostima počevši od termalnih energija;

6. $Q_{joniz.}$ je transliran sa 13.38 eV na 10.6 eV i modifikovan kako po pitanju trenda njegovog ponašanja sa promenom energije elektrona tako i po vrednosti preseka u maksimumu.

5.3.3 Transport elektrona u čistom $C_3H_2F_4$

U ovom potpoglavlju su prikazani rezultati transportnih koeficijenata elektrona u čistom $C_3H_2F_4$ u oblasti električnih polja u kojoj postoje eksperimentalni podaci. Rešenja naših MC simulacija uz tehniku diskretnog reskaliranja elektrona i TTA-BE rezultati su upoređeni sa eksperimentalnim podacima de Urquijo i saradnika izmerenim u PT eksperimentu.

Panel (a) slike 5.3 prikazuje poređenje naših proračuna W u $C_3H_2F_4$ sa referentnim eksperimentalnim podacima dok je na panelu (b) prikazano procentualno odstupanje ovih proračuna od pomenutih referentnih vrednosti. Pre svega, uočava se jako dobro međusobno slaganje rezultata dve numeričke tehnike u gotovo čitavom ispitivanom opsegu polja. Značajnije razilaženje ovih rezultata je vidljivo samo na najvišim poljima. U pogledu slaganja proračuna sa eksperimentalnom W , odstupanja iznose



Slika 5.2: Konačan skup preseka za rasejanje elektrona u $C_3H_2F_4$. Skup sadrži: $Q_{tr.imp.el.sud.}$ presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, šest $Q_{vib.eksc.}$ preseka za vibracionu ekscitaciju, $Q_{elek.eksc.}$ presek za elektronsku ekscitaciju, $Q_{disoc.eksc.}$ presek za disocijativnu ekscitaciju, tri Q_{zahvat} preseka za zahvat elektrona i $Q_{joniz.}$ presek za jonizaciju.

maksimalno 4% osim na najvišim poljima na kojima rezultati MC simulacija za 14% odstupaju od rezultata PT eksperimenta.

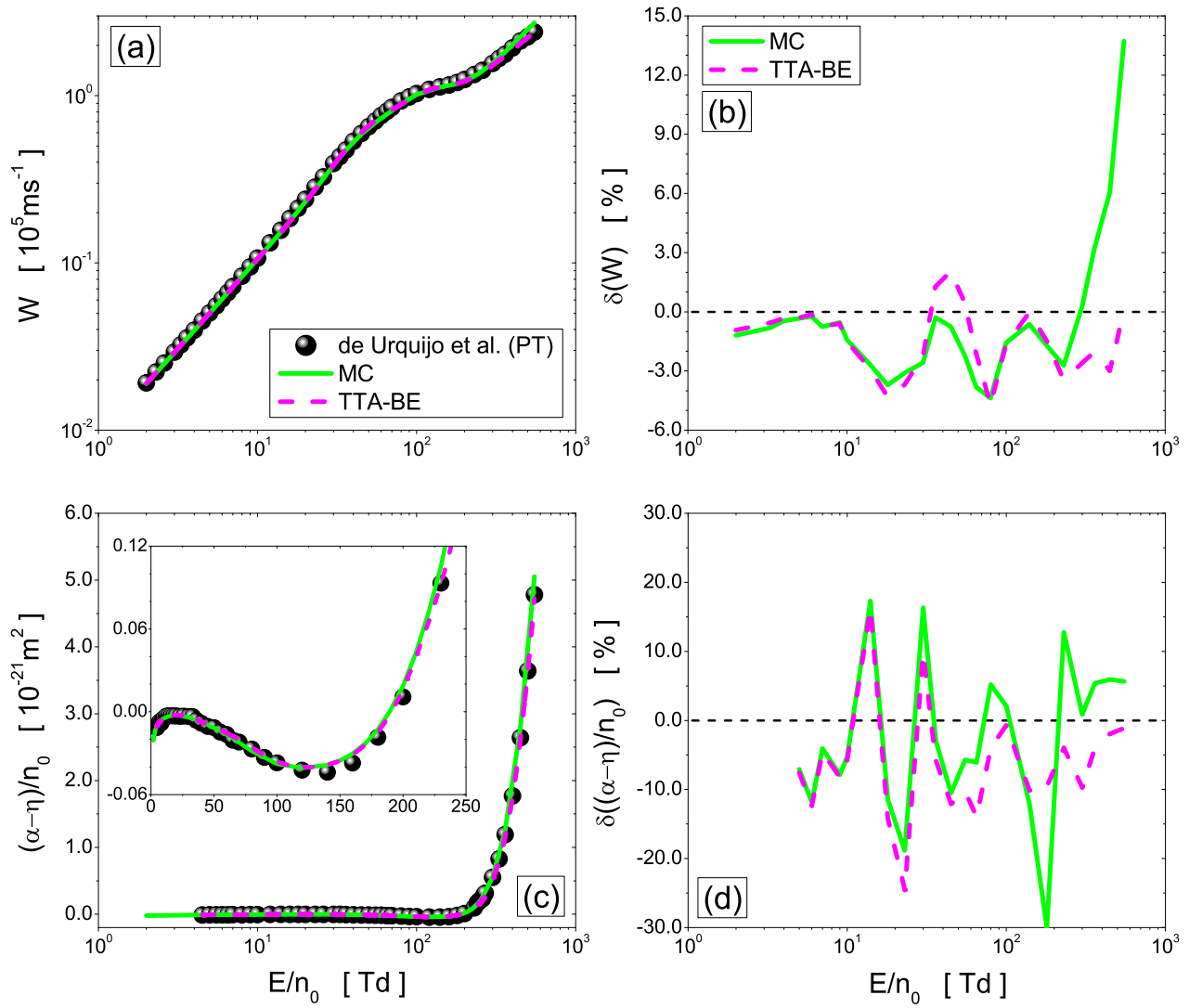
Paneli (c) i (d) slike 5.3 prikazuju analogne rezultate koji se, u ovom slučaju, odnose na koeficijent $(\alpha - \eta)/n_0$. Proračunima putem MC i TTA-BE numeričkih tehnika se dobijaju gotovo identični rezultati. Procentualna odstupanja proračuna od eksperimentalnih podataka se kreću u opsegu od -30% do ~20%. Najveća odstupanja se uočavaju na poljima u kojima efektivan koeficijent jonizacije $(\alpha - \eta)/n_0$ ima vrednost blisku nuli. Ta odstupanja nisu zabrinjavajuća imajući u vidu da naši proračuni prate trend ponašanja eksperimentalnih podataka, posebno u opsegu najnižih polja (umetnut panel u okviru panela (c)). Ovo je pokazatelj da se našim skupom preseka za rasejanje elektrona u $C_3H_2F_4$ može odrediti kritično polje ovog gasa sa velikom tačnošću. Vrednost od 189 Td određena na osnovu MC simulacija i vrednost 190 Td određena putem TTA-BE proračuna se za svega 2% odnosno 1.5% razlikuju od vrednosti 193 Td dobijene na osnovu referentnih eksperimentalnih podataka.

SF_6 se odlikuje izuzetnim dielektričnim svojstvima koja mu obezbeđuju gotovo nepremašivu prednost u odnosu na mnoge dielektrike. Njegovo kritično polje od 361 Td je za oko 50% više od kritičnog polja $C_3H_2F_4$. Ovo je pokazatelj da se $C_3H_2F_4$ ne može samostalno koristiti u svrhu dielektrika u industriji prenosa električne struje ali da postoji potencijal za njegovu upotrebu u vidu gasnih smeša.

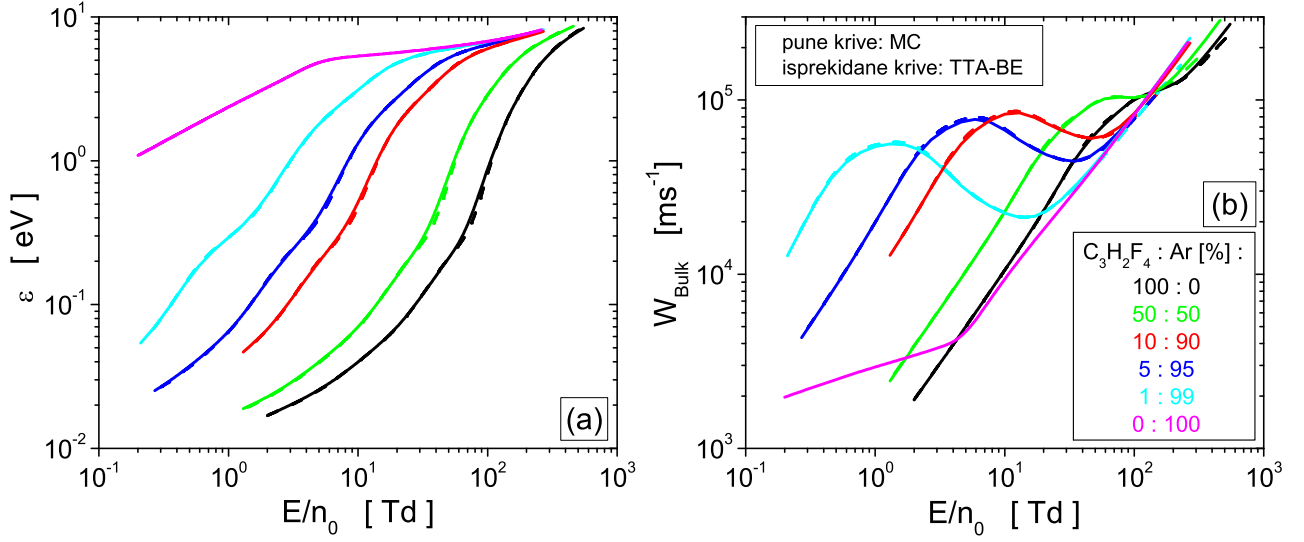
5.3.4 Transport elektrona u $C_3H_2F_4$ -Ar smešama

Pri izračunavanju transportnih koeficijenata elektrona u $C_3H_2F_4$ -Ar smešama je korišćen skup preseka za rasejanje elektrona u Ar autora Hayashi (slika 3.5(a)). Transportni koeficijenti elektrona su izračunati u opsegu polja u kome postoje eksperimentalni podaci de Urquijo i saradnika.

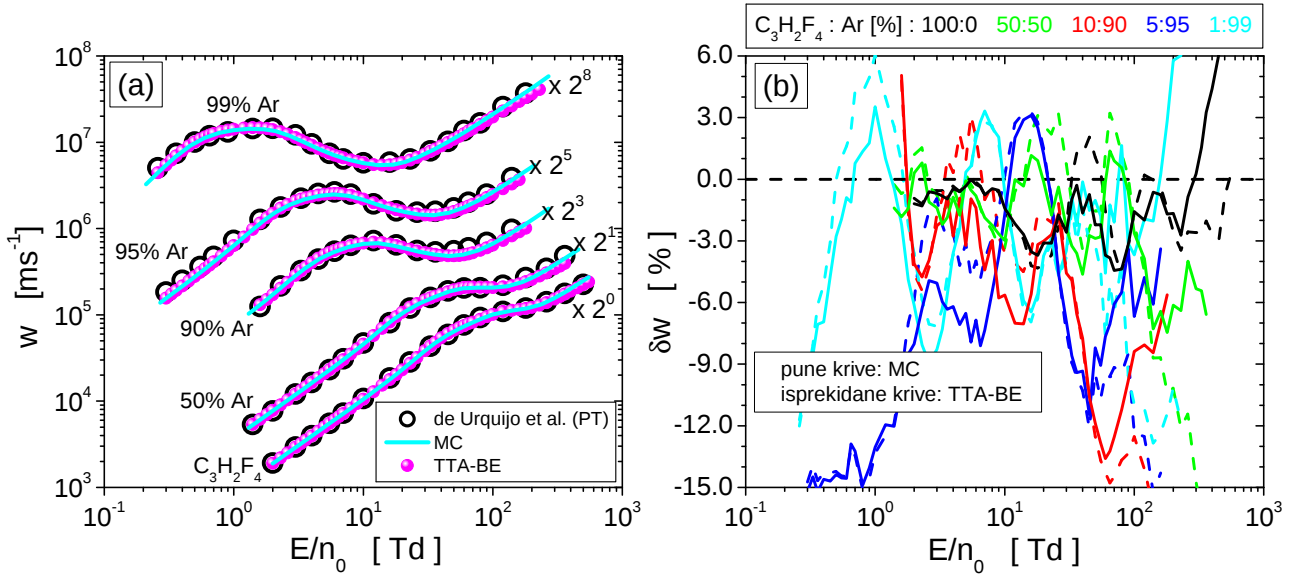
Na slici 5.4 su prikazani rezultati MC simulacija i TTA-BE rešenja veličina ε i W_{Bulk} u $C_3H_2F_4$ -Ar smešama u funkciji E/n_0 . ε je monotono rastuća funkcija električnog polja u svim prikazanim



Slika 5.3: Međusobno slaganje izračunatih i eksperimentalnih vrednosti brzine drifta W i efektivnog koeficijenta jonizacije $(\alpha - \eta)/n_0$ za elektrone u $C_3H_2F_4$ u funkciji E/n_0 . Paneli (a) i (c) prikazuju poređenje izračunatih transportnih koeficijenata sa eksperimentalnim vrednostima de Urquijo i saradnika dok je na panelima (b) i (d) prikazano procentualno odstupanje proračuna od eksperimentalnih podataka. Legenda sa panela (a) se odnosi i na panel (c) dok se legenda sa panela (b) odnosi i na panel (d).

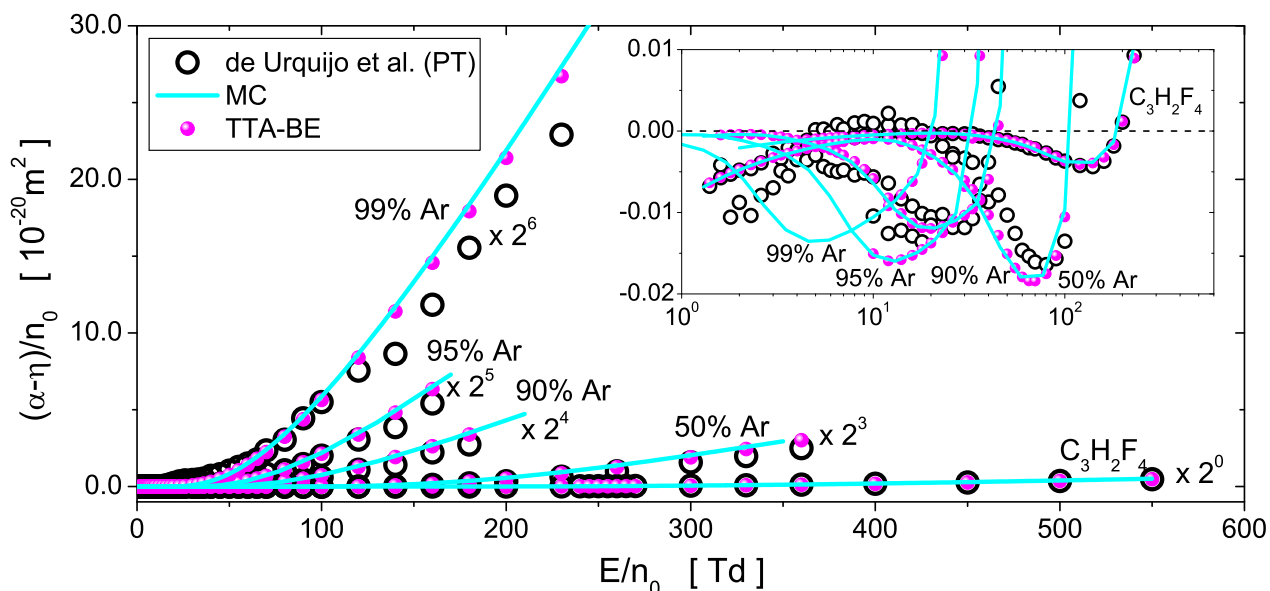


Slika 5.4: Srednja energija (a) i balk brzina drifta elektrona (b) u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ -Ar smešama u funkciji E/n_0 . Rezultati Monte Karlo simulacija i rešavanja Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).



Slika 5.5: Brzina drifta elektrona (a) i procentualna odstupanja proračuna u odnosu na eksperimentalne podatke de Urquijo i saradnika izmerene u PT eksperimentu (b). Rezultati Monte Karlo simulacija i rešavanja Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ -Ar smešama u funkciji E/n_0 . Radi preglednosti, svi rezultati sa panela (a) su skalirani faktorom 2^n .

smešama. Porast srednje energije sa povećanjem koncentracije Ar u smeši je posledica smanjenja energijskih gubitaka elektrona u velikom broju neelastičnih sudara sa molekulom $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$. U odnosu na ε , W ima komplikovanije ponašanje sa promenom E/n_0 . Na poljima nižim od ~ 2 Td i višim od ~ 160 Td, W raste sa porastom koncentracije Ar u smeši. U opsegu polja (106, 160) Td, ponašanje balk brzine drifta je suprotno opisanom ponašanju dok se u centralnoj oblasti polja uočava NDC efekat u sve četiri dvikomponentne smeše. Ovaj fenomen je izraženiji sa porastom koncentracije Ar u smeši što jasno ukazuje na činjenicu da NDC fenomen nije indukovao eksplicitnim uticajem zahvata elektrona, kao što je to bio slučaj u gasovima CF_3I i SF_6 . U ovom slučaju, NDC nastaje zbog rapidne promene načina na koji elektroni gube svoju energiju u velikom broju elastičnih sudara. NDC fenomen u smešama plemenitih i molekularnih gasova je opažen mnogo puta do sada [16, 212].



Slika 5.6: Efektivan koeficijent jonizacije u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ -Ar smešama u funkciji E/n_0 . Poređenje rezultata Monte Karlo simulacija i rešavanja Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana sa eksperimentalnim vrednostima de Urquijo i saradnika izmerenim u PT eksperimentu. Radi preglednosti, rezultati su skalirani faktorom 2^n (osim rezultata na umetnutom panelu).

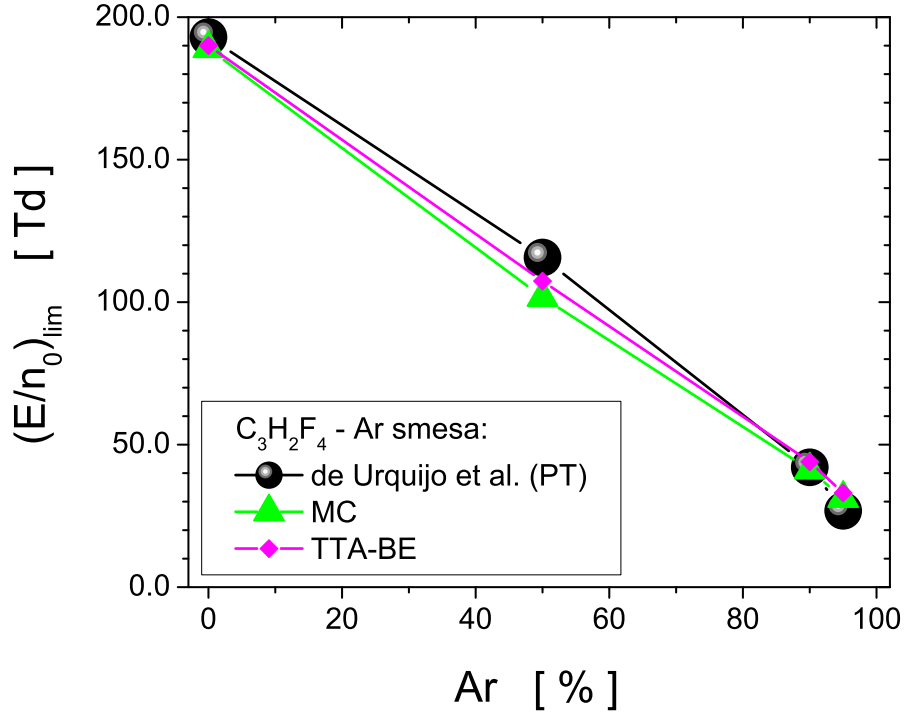
Na slici 5.5(a) su prikazani rezultati MC simulacija i TTA-BE rešenja za W u funkciji E/n_0 . Ove vrednosti su upoređene sa referentnim podacima dobijenim u PT eksperimentu. U pitanju su isti rezultati kao na slici 5.4(b) samo što su u ovom slučaju, radi preglednosti, skalirani faktorom 2^n . Međusobno slaganje ovih rezultata je brojčano izraženo procentualnim odstupanjima (panel (b)). Ono se kreće u opsegu $\pm 6\%$ osim na najnižim i najvišim poljima na kojima uzima vrednost do -15% .

Na slici 5.6 je prikazan efektivan koeficijent jonizacije u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ -Ar smešama u funkciji E/n_0 . Rezultati naših MC simulacija i TTA-BE rešenja su upoređeni sa referentnim podacima izmerenim u PT eksperimentu. Možemo opaziti relativno dobro slaganje između naših izračunatih vrednosti i eksperimentalnih vrednosti. Veća odstupanja se mogu opaziti za E/n_0 manje od 50 Td zbog komplikovanog fitovanja ovog transportnog koeficijenta u oblasti polja u kojoj su njegove vrednosti negativne. Namerno je izostavljena slika koja prikazuje procentualno odstupanje izračunatih $(\alpha - \eta)/n_0$ u odnosu na eksperimentalne vrednosti kako bi se, kao u potpoglavljima 3.6 i 3.7, izbeglo donošenje pogrešnih zaključaka o kvalitetu konstruisanog skupa preseka za ispitivan gas. Na osnovu pažljive rekonstrukcije efektivnog koeficijenta jonizacije $(\alpha - \eta)/n_0$ u okolini njihove nulte vrednosti su izračunata $(E/n_0)_{lim}$ koja za maksimalno 12% odstupaju od vrednosti dobijenih na osnovu eksperimentalnih podataka (slika 5.7). Sa ove slike se uočava opadanje vrednosti $(E/n_0)_{lim}$ sa porastom koncentracije Ar u smeši što je očekivano imajući u vidu činjenicu da plemeniti gasovi, kakav je Ar, ne poseduju mogućnost zahvata slobodnih elektrona.

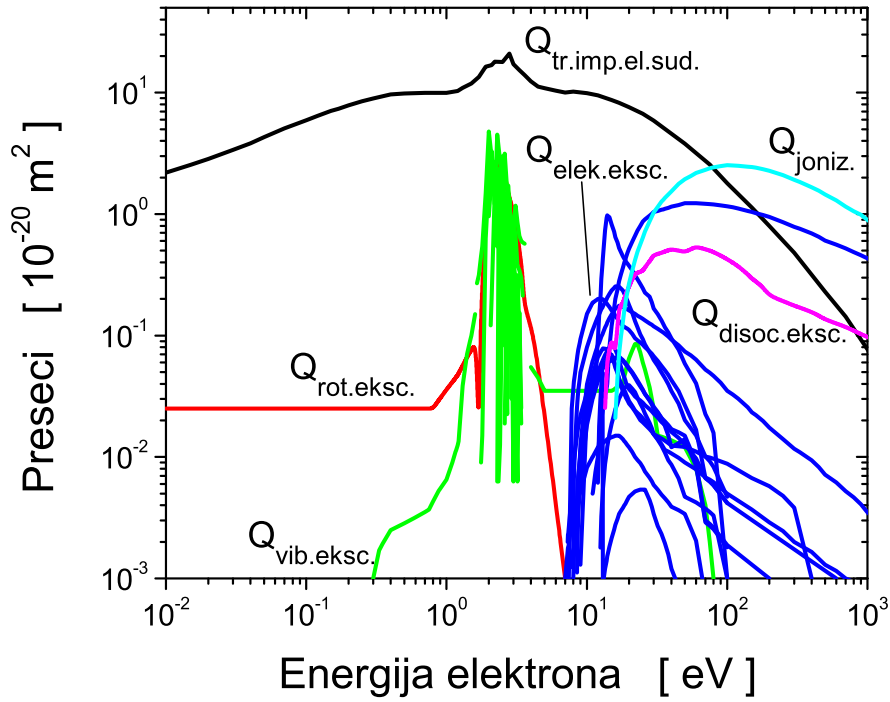
5.3.5 Transport elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ - N_2 smešama

Za potrebu izračunavanja transportnih koeficijentata elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ - N_2 smešama je korišćen skup preseka za rasejanje elektrona u N_2 (slika 5.8) koji su konstruisale kolege iz naše laboratorije [213]. Proračuni transportnih koeficijentata elektrona u ovoj gasnoj smeši su izvršeni u opsegu E/n_0 u kome postoje eksperimentalni rezultati de Urquijo i saradnika.

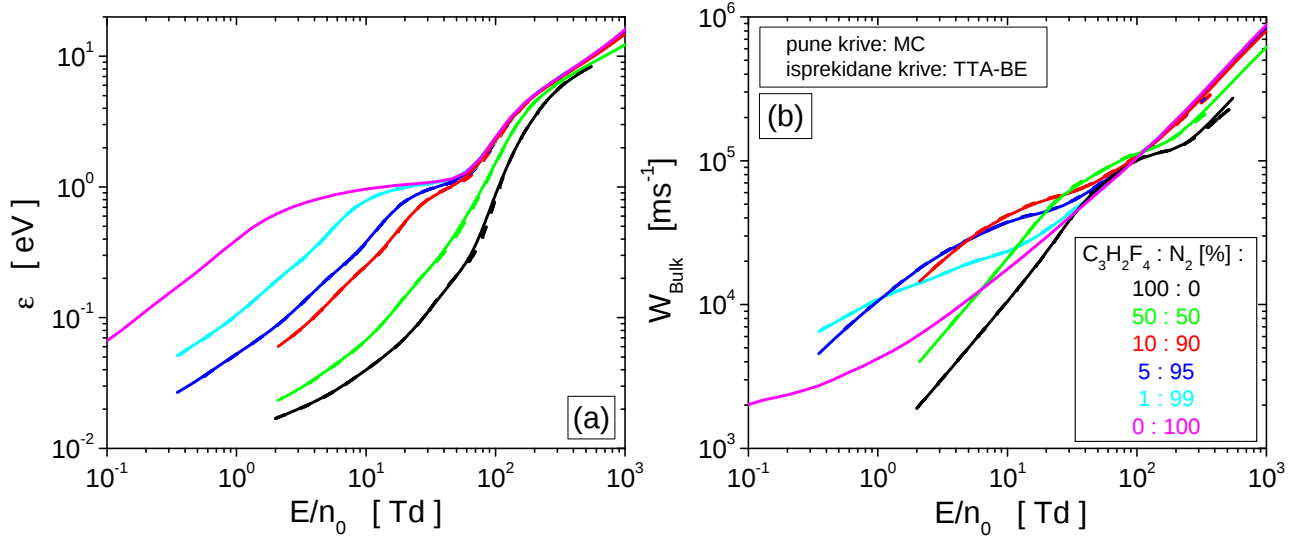
Na slici 5.9 su prikazani rezultati MC simulacija i TTA-BE rešenja za veličine ε i W_{Bulk} u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ - N_2 smešama u funkciji E/n_0 . Kao i u prethodno analiziranoj gasnoj smeši, ε je monotono rastuća funkcija polja koja na fiksnom E/n_0 dobija veću vrednost sa porastom koncentracije N_2 u smeši. ε je neznatno zavisna od sastava gasne smeše na poljima višim od $\sim 50\text{ Td}$, posebno u slučaju smeša



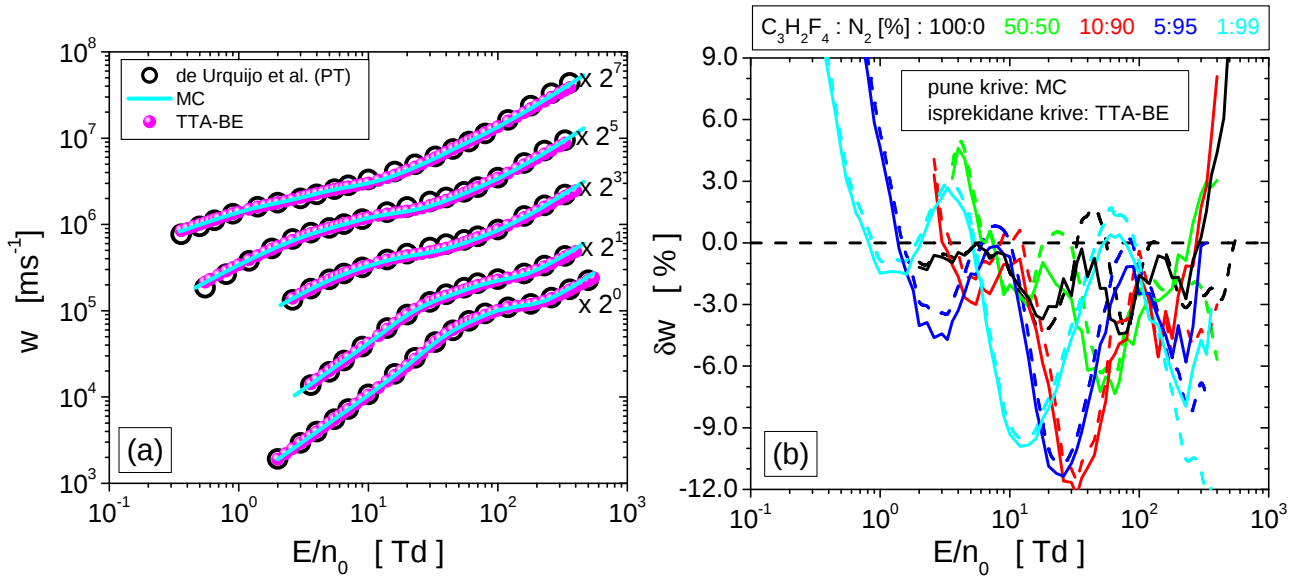
Slika 5.7: Kritično polje gasne smeše $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{-Ar}$ u funkciji koncentracije argona. Rezultati su dobijeni na osnovu eksperimentalnih i numerički izračunatih efektivnih koeficijenata jonizacije prikazanih na prethodnoj slici.



Slika 5.8: Skup preseka za rasejanje elektrona u azotu konstruisan u našoj laboratoriji. Skup sadrži: $Q_{\text{tr.imp.el.sud.}}$ presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, $Q_{\text{rot.eksc.}}$ presek za rotacionu ekscitaciju, devet $Q_{\text{vib.eksc.}}$ preseka za vibracionu ekscitaciju, trinaest $Q_{\text{elek.eksc.}}$ preseka za elektronsku ekscitaciju, $Q_{\text{disoc.eksc.}}$ presek za disocijativnu ekscitaciju i $Q_{\text{joniz.}}$ presek za jonizaciju.



Slika 5.9: Srednja energija (a) i balk brzina drifta elektrona (b) u $C_3H_2F_4-N_2$ smešama u funkciji E/n_0 . Rezultati Monte Karlo simulacija i rešavanja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).

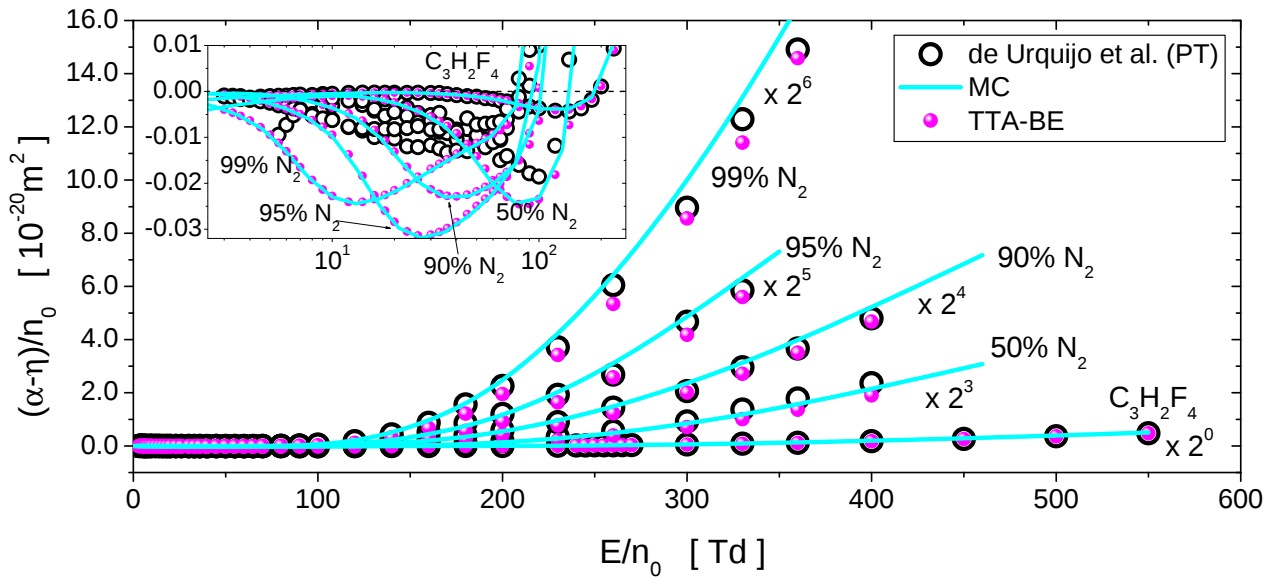


Slika 5.10: Brzina drifta elektrona (a) i procentualna odstupanja proračuna u odnosu na eksperimentalne podatke de Urquijo i saradnika izmerene u PT eksperimentu. Rezultati Monte Karlo simulacija i rešavanja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana u $C_3H_2F_4-N_2$ smešama u funkciji E/n_0 . Radi preglednosti, svi rezultati sa panela (a) su skalirani faktorom 2^n .

sa koncentracijom N_2 većom od 50%. W_{Bulk} takođe monotono raste sa porastom polja uz promenu trenda brzine porasta sa promenom E/n_0 . Za redukovana električna polja približno veća od ~ 100 Td se uočava pravilnost ponašanja W_{Bulk} : njena vrednost raste sa porastom koncentracije N_2 u smeši.

Na slici 5.10(a) su prikazani isti rezultati kao na slici 5.9(b) samo što su, u ovom slučaju, otežinjani faktorima 2^n kako bi se povećala preglednost rezultata. Na panelu (b) slike 5.10 su prikazana procentualna odstupanja naših rezultata od referentnih vrednosti. Ona se kreću u opsegu od $\pm 5\%$ dok u pojedinim poljima iznose do -12% . Opažena odstupanja su posledica nepotpune konzistentnosti skupa preseka za rasejanje elektrona u N_2 i eksperimentalnih merenja transportnih koeficijenata u istom gasu od strane de Urquijo i saradnika.

Na slici 5.11 je prikazan efektivan koeficijent jonizacije u smešama $C_3H_2F_4-N_2$ u funkciji E/n_0 .



Slika 5.11: Efektivan koeficijent jonizacije u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{-N}_2$ smešama u funkciji E/n_0 . Poređenje rezultata Monte Karlo simulacija i rešavanja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana sa eksperimentalnim vrednostima de Urquijo i saradnika izmerenim u PT eksperimentu. Radi preglednosti, rezultati su skalirani faktorom 2^n (osim rezultata na umetnutom panelu).

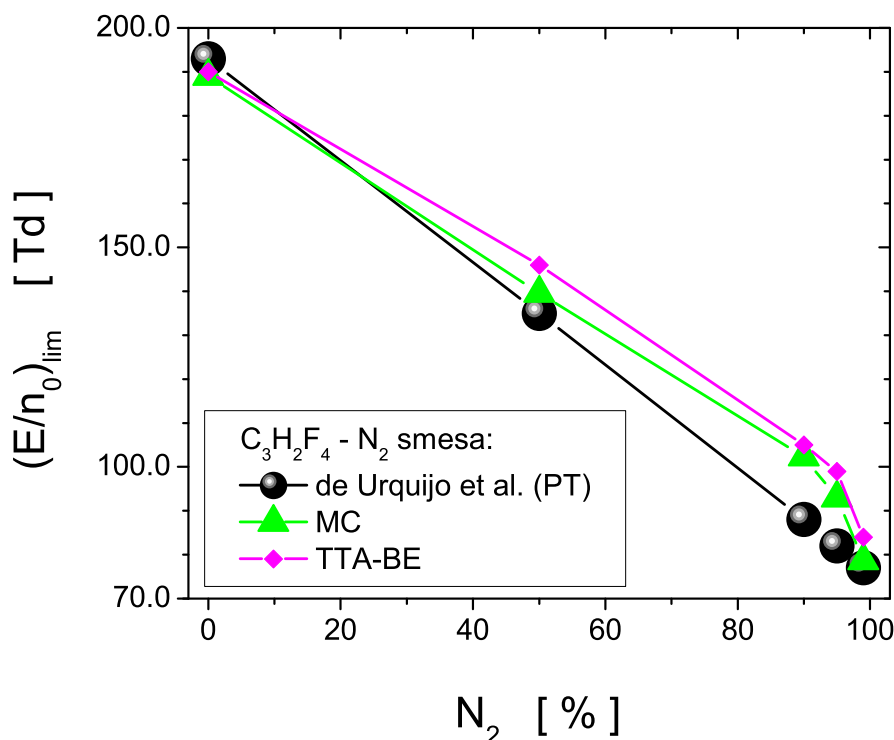
U pitanju su rezultati naših MC simulacija i TTA-BE rešenja pored kojih su prikazani i referentni podaci. Na poljima višim od ~ 200 Td odstupanja TTA-BE rezultata od eksperimentalnih podataka su u okviru 20%. Kao i u okviru rezultata kod smeša $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{-Ar}$, izostavljeno je prikazivanje procentualnih odstupanja između izračunatih i izmerenih vrednosti efektivnog koeficijenta jonizacije kako se ne bi stekao pogrešan utisak o kvalitetu skupa preseka za ispitivan gas. Za E/n_0 manje od približno 200 Td, slaganja između izračunatih i eksperimentalnih vrednosti su mnogo lošija (videti umetnut panel). Upravo zbog ovog neslaganja između izračunatih i eksperimentalno određenih vrednosti efektivnog koeficijenta jonizacije, mogu se opaziti neslaganja između kritičnih polja koja su prikazana u funkciji koncentracije N_2 (slika 5.12). U svakom slučaju, generalan trend ponašanja $(E/n_0)_{lim}$ sa porastom koncentracije N_2 je identičan, kako sa jedne strane za MC i TTA-BE proračune, tako i sa druge strane za eksperimentalno određivanje ove veličine.

5.4 Nehidrodinamički efekti: transport elektrona na raznim pritiscima gasa

U ovom potpoglavlju se bavimo analizom transporta elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ na različitim pritiscima. Na osnovu druge verzije skupa preseka za ovaj gas, u kome je presek za zahvat elektrona zavisao od pritiska, izračunati su transportni koeficijenti elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$. Rezultati MC simulacija (dobijeni uz korišćenje tehnike diskretnog reskaliranja elektrona) i rešenja TTA-BE proračuna u opsegu polja u kome postoje eksperimentalni podaci su i upoređeni sa referentnim merenjima A. Chachereau i saradnika u PT eksperimentu [209].

5.4.1 Skup preseka za rasejanje elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ zavisao od pritiska

Konstruisanje skupa preseka koji zavise od pritiska je izvršeno analogno postupku iz potpoglavlja 5.3.2. Koristeći preseke sa slike 5.2 kao inicijalan skup, konačan skup preseka je konstruisan tehnikom rojeva (slika 5.13). Modifikovani su preseki za pojedinačne sudarne procese i uvedeni skalirajući faktori preseka za zahvat elektrona koji zavisi od pritiska (u oznaci $Q_{trojni \text{ zahvat}}$).



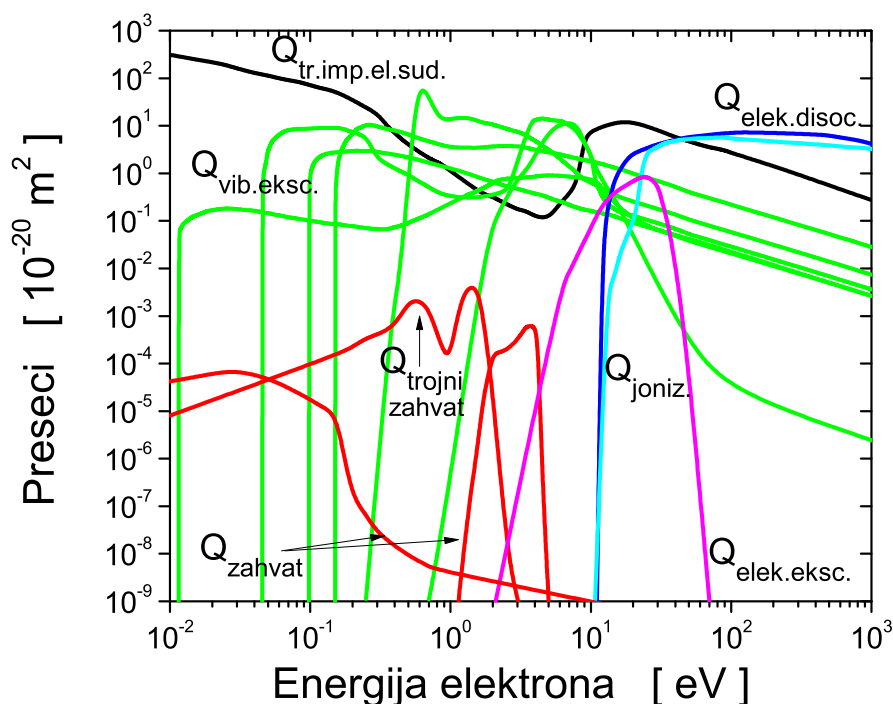
Slika 5.12: Kritično polje gasne smeše $C_3H_2F_4-N_2$ u funkciji koncentracije azota. Rezultati su dobijeni na osnovu eksperimentalnih i numerički izračunatih efektivnih koeficijenata jonizacije prikazanih na prethodnoj slici.

Slika 5.14(a) prikazuje poređenje skupova preseka za rasejanje elektrona u $C_3H_2F_4$ koji su nezavisni (inicijalan skup) i zavisni od pritiska (konačan skup). Konačan skup preseka je konstruisan na sledeći način:

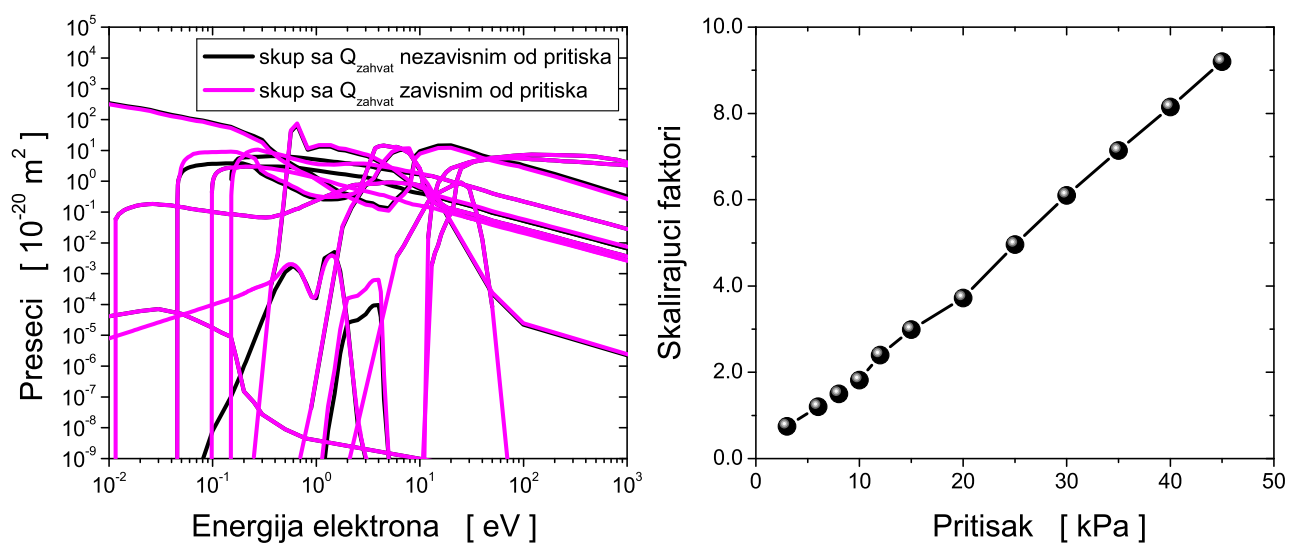
1. $Q_{tr.imp.el.sud.}$ je dobijen skaliranjem odgovarajućeg preseka iz inicijalnog skupa faktorom 0.83;
2. $Q_{vib.eksc.}$ sa pragom 0.045 eV je skaliran faktorima iz intervala (1.1, 2.5) u opsegu energija od 0.049 eV do 2.27 eV. $Q_{vib.eksc.}$ sa pragom 0.097 eV je skaliran faktorima iz intervala (0.35, 0.9) u opsegu energija od 0.3 eV do poslednje tačke preseka. $Q_{vib.eksc.}$ sa pragom 0.15 eV je skaliran faktorima iz intervala (0.3, 1.7) počevši od praga do 12.06 eV;
3. iz preseka Q_{zahvat} sa pragom 0.08 eV su izbačene tačke niže od 0.15 eV (čime je ova vrednost proglašena za novi prag) nakon čega je celokupan presek skaliran faktorima iz opsega (0.75, 11250). Dodatno, za ovaj presek je ustanovljena zavisnost od pritiska iskazana skalirajućim faktorima (slika 5.14(b));
4. Q_{zahvat} sa pragom od 0.8 eV je skaliran faktorima (3.1, 3.3) u celokupnom opsegu definisanosti.

5.4.2 Transport elektrona u čistom $C_3H_2F_4$ na različitim pritiscima

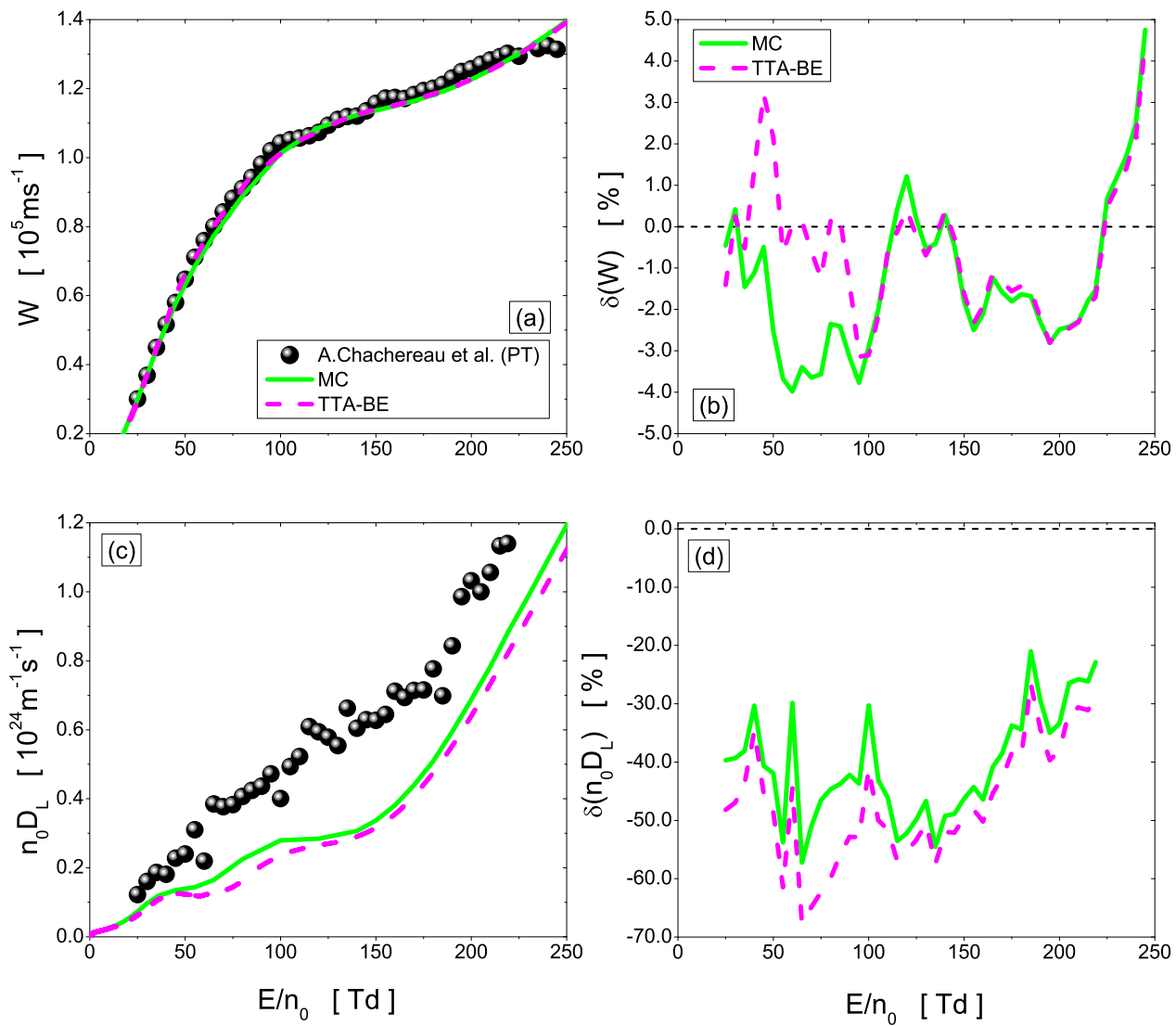
Na slici 5.15(a) su prikazani rezultati naših MC simulacija i TTA-BE rešenja za brzinu drifta elektrona u $C_3H_2F_4$ zajedno sa rezultatima referentnih merenja. Generalno govoreći, rezultati obe numeričke tehnike prate trend eksperimentalnih rezultata uz odstupanja u odnosu na njih u opsegu od $\pm 4\%$ (slika 5.15(b)). MC i TTA-BE rezultati su gotovo identični na poljima višim od ~ 100 Td. Razlike između ovih rezultata na nižim poljima potiču od neadekvatnosti TTA-BE proračuna u opsegu



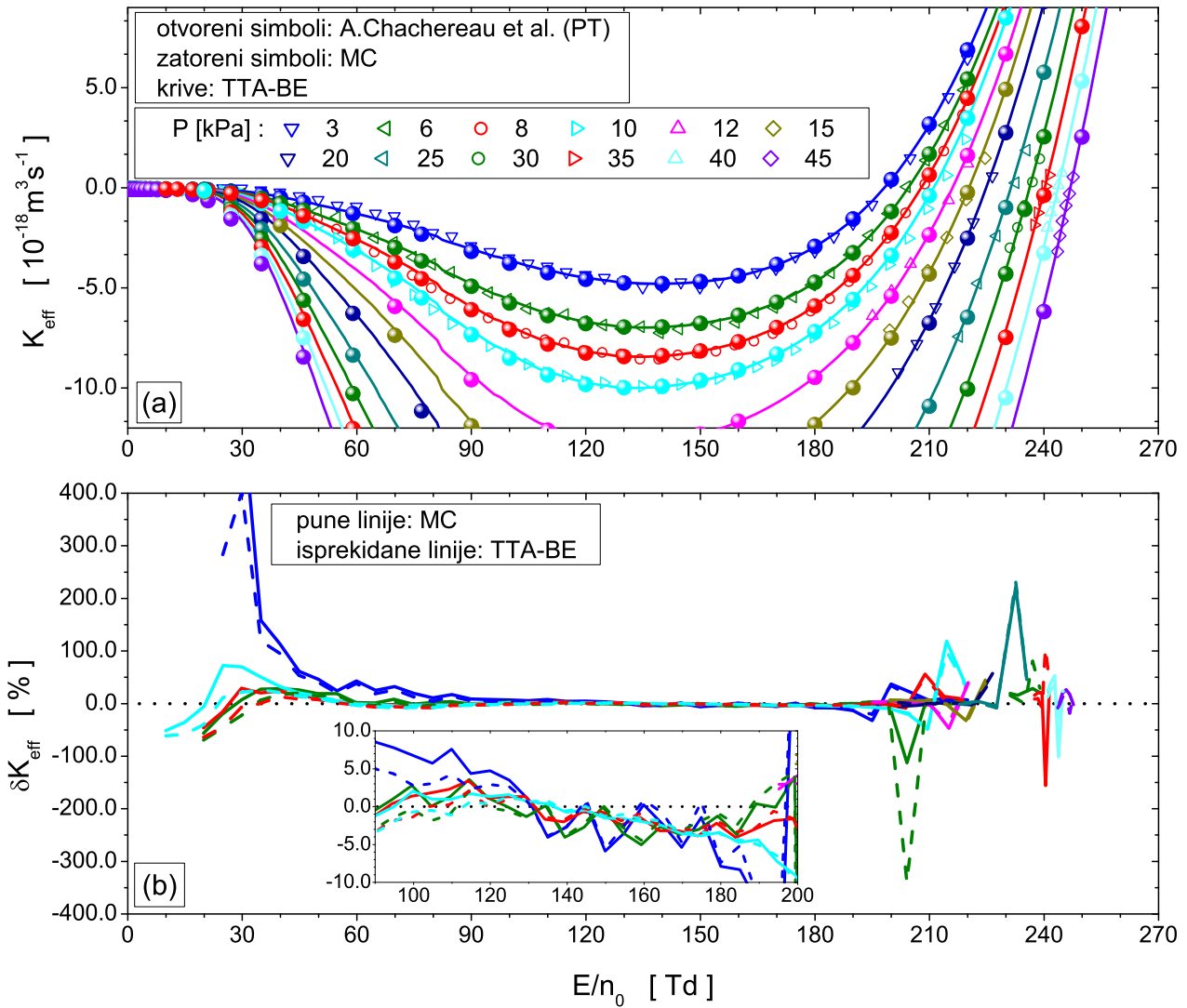
Slika 5.13: Skup preseka za rasejanje elektrona u $C_3H_2F_4$ koji sadrži presek za zahvat elektrona zavisn od pritiska. Skup sadrži: $Q_{tr.imp.el.sud.}$ presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, šest $Q_{vib.eksc.}$ preseka za vibracionu ekscitaciju, $Q_{elek.eksc.}$ presek za elektronsku ekscitaciju, $Q_{elek.disoc.}$ presek za elektronsku disocijaciju, dva Q_{zahvat} preseka za zahvat elektrona nezavisna od pritiska, $Q_{trojni zahvat}$ presek za zahvat elektrona zavisn od pritiska i $Q_{joniz.}$ presek za jonizaciju.



Slika 5.14: Međusobno poređenje skupova preseka za rasejanje elektrona u $C_3H_2F_4$ koji sadrže presek za zahvat elektrona nezavisn i zavisn od pritiska (a) i skalirajući faktori preseka za zahvat elektrona koji je zavisn od pritiska (b).



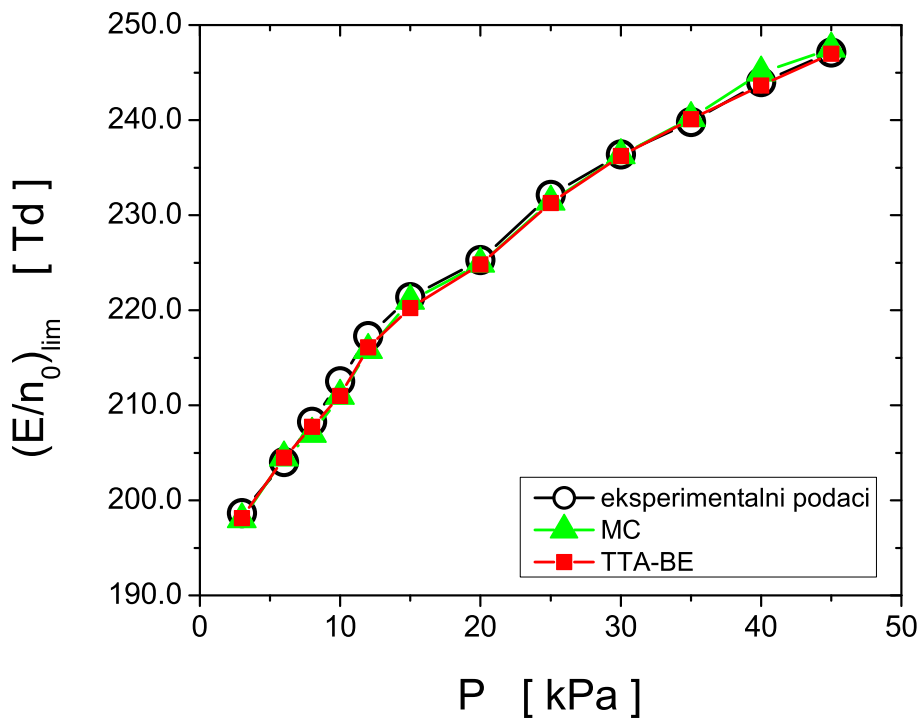
Slika 5.15: Transportni koeficijenti elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ u funkciji E/n_0 . Poređenje rezultata Monte Karlo simulacija i rešavanja Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana sa eksperimentalnim podacima A. Chachereau i saradnika za koeficijente W i $n_0 D_L$, respektivno (paneli (a) i (c)). Procentualno odstupanje proračuna od referentnih vrednosti pomenutih transportnih koeficijenata (paneli (b) i (d))). Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panel (c) dok se oznake krivih sa panela (b) odnose i na panel (d).



Slika 5.16: Brzinski koeficijent efektivne jonizacije u $C_3H_2F_4$ u funkciji E/n_0 na različitim pritiscima. Poređenje rezultata Monte Karlo simulacija i rešavanja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana sa eksperimentalnim merenjima A. Chachereau u PT eksperimentu (a). Procentualno odstupanje proračuna u odnosu na eksperimentalne podatke (b).

energija u kome se oseća uticaj $Q_{vib.eksc.}$. Što se tiče koeficijenta $n_0 D_L$ (panel (c)), rezultati naših proračuna ne odgovaraju trendu eksperimentalnih podataka. Ukoliko međusobno poredimo MC i TTA-BE rezultate, MC simulacijama se dobijaju vrednosti $n_0 D_L$ koje su za 5% veće od TTA-BE rezultata. Odstupanja rezultata obe numeričke tehnike od referentnih merenja se kreću u opsegu od -20% do -70% (panel (d)).

Fokus ovog potpoglavlja je rekonstrukcija brzinskog koeficijenta efektivne jonizacije (K_{eff}) u čistom $C_3H_2F_4$ na različitim pritiscima. Rezultati naših MC simulacija i TTA-BE rešenja (slika 5.16(a)) gotovo savršeno prate trendove eksperimentalnih podataka na svim pritiscima. Ukoliko se zanemare odstupanja u nekoliko tačaka na poljima nižim od 40 Td i na najvišim prikazanim poljima (slika 5.16(b)), onda se može reći da naši proračuni ne odstupaju za više od 5% od eksperimentalnih podataka (umetnut panel slike 5.16(b)). Prikazano slaganje je rezultat pravilnog odabira preseka za zahvat elektrona koji reprezentuje trojni zahvat kao i rezultat ispravnih skalirajućih faktora ovog preseka na različitim pritiscima (slika 5.14(b)). Neophodno je naglasiti da upoređujući naše proračune sa slike 5.16(a) sa proračunima iz rada A. Chachereau i saradnika (slika 11 u [209]), vidi se da se naši rezultati na svim pritiscima mnogo bolje slažu sa odgovarajućim eksperimentalnim vrednostima od



Slika 5.17: Kritično polje $C_3H_2F_4$ u funkciji pritiska gasa. Vrednosti su dobijene na osnovu rezultata prikazanih na prethodnoj slici.

proračuna koje su objavili sami autori.

Na slici 5.17 su prikazane vrednosti $(E/n_0)_{lim}$ u $C_3H_2F_4$ u funkciji pritiska gasa koje su dobijene na osnovu rezultata prikazanih na slici 5.16. Pre svega, vidi se da je $(E/n_0)_{lim}$ monotono rastuća funkcija pritiska u slučaju sva tri prikazana skupa rezultata. Drugim rečima, $C_3H_2F_4$ ispoljava snažnije dielektrične osobine sa porastom pritiska. Ovaj rezultat je očekivan imajući u vidu da presek $Q_{trojni\ zahvat}$ raste sa pritiskom (slika 5.14(b)). Što se tiče međusobnog odstupanja prikazanih rezultata, njegova vrednost ne prelazi 0.5%.

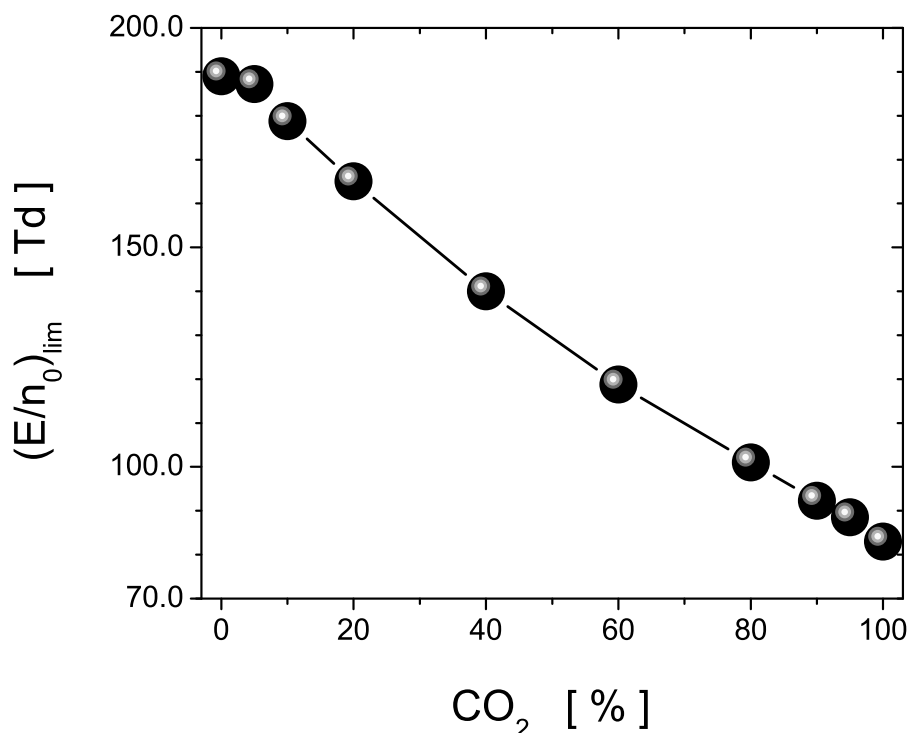
5.4.3 Transport elektrona u $C_3H_2F_4$ - CO_2 i $C_3H_2F_4$ - SF_6 smešama

Ovo potpoglavlje je posvećeno smešama $C_3H_2F_4$ sa CO_2 i SF_6 . Kao i do sada, izračunati su transportni koeficijenti elektrona u funkciji redukovanoeg električnog polja. Međutim, akcenat je stavljen na analizu kritičnih polja u ovim smešama za čije izračunavanje su korišćeni skup preseka za CO_2 konstruisan u okviru ove doktorske disertacije (slika 3.5(b)) i skup preseka za SF_6 koji su razvili Itoh i saradnici (slika 4.1).

Naredni proračuni su vršeni MC simulacijama uz tehniku diskretnog reskaliranja elektrona. Bitno je naglasiti da u slučaju obe analizirane gasne smeše nismo imali referentne podatke sa kojima bi se poredili.

Na slici 5.18 su prikazane vrednosti $(E/n_0)_{lim}$ u smeši $C_3H_2F_4$ - CO_2 dobijene na osnovu rezultata MC simulacija za koeficijent $(\alpha - \eta)/n_0$ u funkciji koncentracije CO_2 (nije prikazano u disertaciji). Kako je CO_2 slabiji dielektrik u odnosu na $C_3H_2F_4$, očekivano je opadanje vrednosti $(E/n_0)_{lim}$ sa porastom koncentracije ugljendioksida u smeši. Kritična polja smeša su za (50, 70)% manja od vrednosti kojom se odlikuje SF_6 . Ipak, niska vrednosti GWP faktora ovog gasa čini ga pogodnim u ulozi potencijalne zamene za SF_6 .

Tipični zahtevi u srednjenaponskoj opremi za transport struje su pritisak gasa od 140 kPa na 293 K i minimalna radna temperatura od 258 K. Na osnovu karakteristika $C_3H_2F_4$ se zaključuje da ove

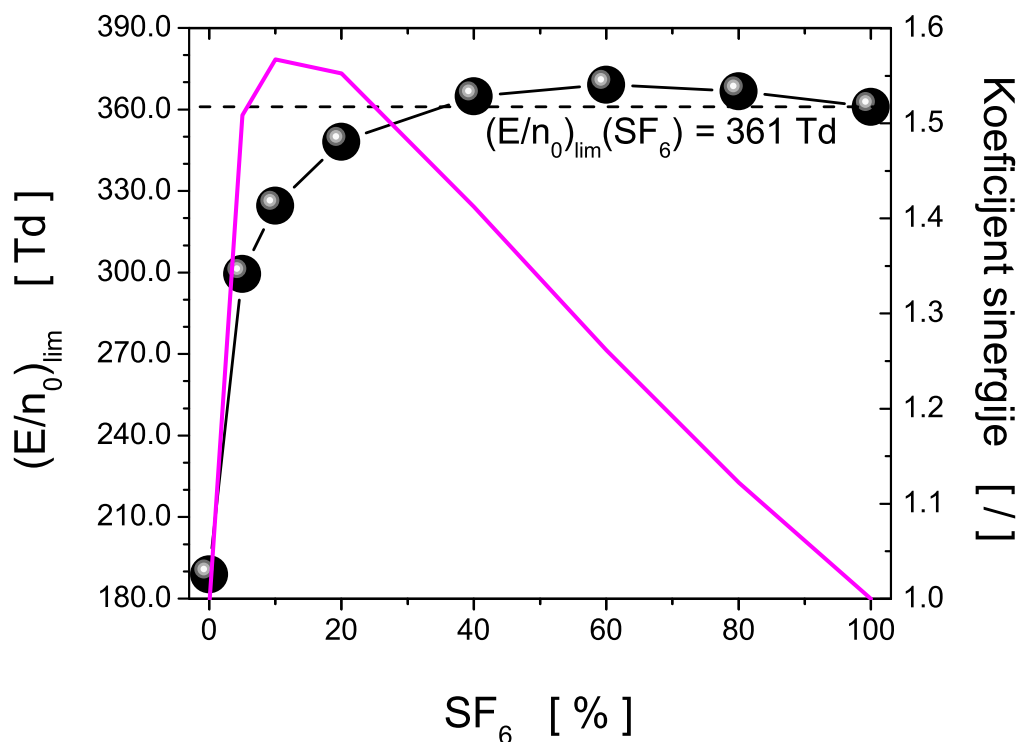


Slika 5.18: Kritično polje gasne smeše $C_3H_2F_4$ - CO_2 u funkciji koncentracije ugljendioksida. Rezultati su dobijeni na osnovu efektivnih koeficijenata jonizacije izračunatih Monte Karlo simulacijama.

zahteve može da obezbedi smeša sa koncentracijom $C_3H_2F_4$ od maksimalnih 95%. U visokonaponskoj opremi, u kojoj je potreban pritisak gasa od 600 kPa na 293 K i minimalna temperatura od 248 K, koncentracija $C_3H_2F_4$ u smeši ne sme preći vrednost od 15% ([214]). Kao što je pomenuto, iako se $C_3H_2F_4$ odlikuje višestruko nižim $(E/n_0)_{lim}$ u odnosu na SF_6 , ekstrapolacijom rezultata sa slike 5.17 do vrednosti od 140 kPa se dobija kritično polje od ~ 360 Td. Činjenica da kritično polje $C_3H_2F_4$ dostiže vrednost kojom se odlikuje SF_6 je veoma optimistična po pitanju upotrebe ovog dielektrika najnovije generacije u srednjenaponskoj opremi za transport električne struje.

Na slici 5.19 su prikazana kritična električna polja $C_3H_2F_4$ - SF_6 smeše u funkciji koncentracije SF_6 . Rezultati su dobijeni na osnovu koeficijenta $(\alpha - \eta)/n_0$ koji je izračunat MC simulacijama (nije prikazano u disertaciji). Na slici se vidi atipično ponašanje $(E/n_0)_{lim}$: umesto očekivanog rasta ili opadanja sa porastom koncentracije jedne komponente gasne smeše, u opsegu koncentracija SF_6 od $\sim 40\%$ do $\sim 90\%$ se uočava porast $(E/n_0)_{lim}$ iznad vrednosti kojima se odlikuju čiste komponente ove smeše. Prikazana pojava, poznata pod nazivom *efekat pozitivne sinergije*, je već uočena u binarnim gasnim smešama. James [215] i Wootton [216] su 1980. godine uočili ovaj efekat u smešama 1- C_3F_6 i SF_6 , c- C_4F_8 i 1- C_3F_6 , SO_2 i SF_6 , SO_2 i 1- C_3F_6 , SF_6 i 1- C_3F_6 . James i saradnici su pretpostavili da efekat nastaje kao posledica elektronske termalizacije u gasovima sa dvostrukom kovalentnom vezom dok su Wootton i saradnici tvrdili da je uzrok ovog efekta distorzija funkcije raspodele energija elektrona. U dodatnim analizama novih gasnih smeša (CCL_2F_2 - SF_6 , C_3F_8 - SF_6) je takođe uočen efekat pozitivne sinergije ali u znatno manjoj meri. Hunter [217] i Christophorou [218] su na osnovu svojih istraživanja zaključili da je uzrok ovog efekta zahvat elektrona koji je zavisao od pritiska. Svoj zaključak su izveli ispitivanjem smeša u kojima je bar jedan molekularan gas posedovao presek za zahvat elektrona koji zavisi od pritiska.

Hösl i saradnici su uočili efekat pozitivne sinergije u $C_3H_2F_4$ - SF_6 smešama i objavili ga u svom radu [219]. Autori ovog rada su objasnili ovaj efekat činjenicom da elektroni veoma efikasno gube energiju u velikom broju neelastičnih sudara koji vode ka vibracionoj ekscitaciji molekula $C_3H_2F_4$ i na taj način se prevode u energijsku oblast u kojoj budu zahvaćeni od strane molekula SF_6 . Tačnost



Slika 5.19: Kritično polje gasne smeše $C_3H_2F_4-SF_6$ u funkciji koncentracije sumpor-heksafluorida (leva y-osa) i koeficijent sinergije (desna y-osa). Rezultati su dobijeni na osnovu efektivnih koeficijenata jonizacije izračunatih Monte Karlo simulacijama.

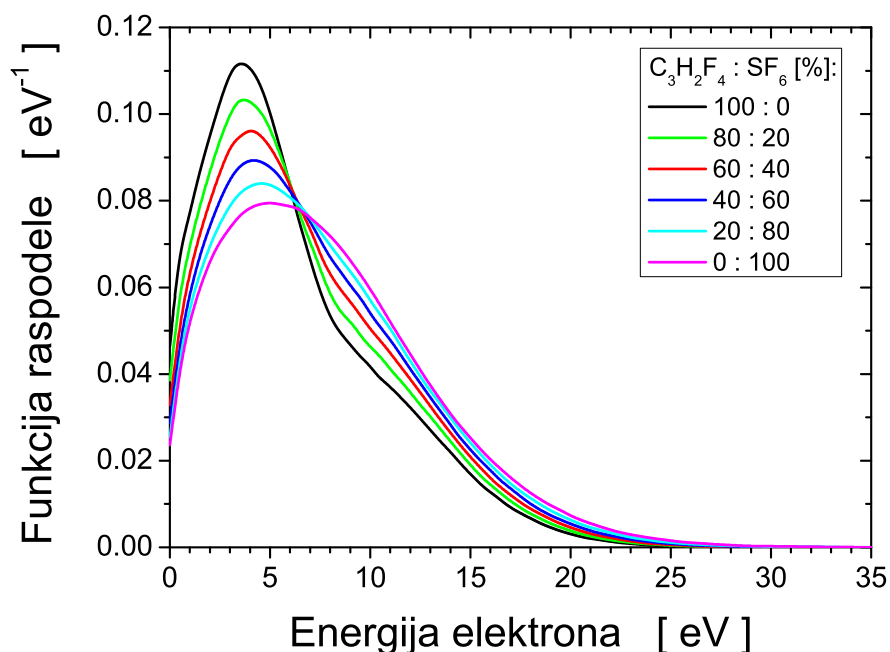
ovog objašnjenja se može videti na osnovu funkcija raspodele energija elektrona u $C_3H_2F_4-SF_6$ smešama koje su izračunate za E/n_0 od 361 Td (slika 5.20). Povećanjem koncentracije $C_3H_2F_4$ u smeši, funkcija raspodele energija elektrona sve manje podseća na Maksvelovu raspodelu. Najveći broj elektrona se nalazi u oblasti energija oko 4 eV u kojoj svi preseki za vibracionu ekscitaciju gasa $C_3H_2F_4$ (osim preseka sa pragom 0.097 eV i maksimumom u okolini 6 eV) imaju maksimum svog intenziteta (slika 5.13). Upravo se ovim sudarnim procesima umanjuje energija elektrona i povećava efikasnost zahvata elektrona putem SF_6 gasa.

Na slici 5.19 je takođe prikazan i koeficijent sinergije. Ovaj koeficijent je izračunat kao odnos kritičnog polja gasne smeše i zbira kritičnih polja komponenta smeše otežinjenih koncentracijom gasova u smeši. Sa slike se vidi da je ovaj koeficijent najveći u smeši koja sadrži oko 10% SF_6 . Na osnovu rezultata sa ove slike se vidi da $C_3H_2F_4-SF_6$ smeša može da bude pogodan kandidat za zamenu SF_6 u ulozi dielektrika u sistemima za prenos električne struje. Ne samo da se na ovaj način ostvaruje značajna redukcija SF_6 već se, upravo efektom pozitivne sinergije, povećava $(E/n_0)_{lim}$ smeše iznad vrednosti kojom se odlikuje ovaj gas sa velikim GWP faktorom.

Efekat sinergije koji su Hösl i saradnici prikazali u svom radu [219] je snažniji od onoga koji smo mi dobili MC simulacijama. Razlog leži u fitovanju našeg skupa preseka za rasejanje elektrona u čistom $C_3H_2F_4$ na PT merenja istraživača sa ETH Univerziteta u Cirihi. Za razliku od čistog gasa, proračuni u $C_3H_2F_4-SF_6$ smešama su vršeni bez prethodnog fitovanja na eksperimentalne podatke pošto nisu bili objavljeni u doba kada smo vršili proračune.

5.5 Zaključak

U ovom poglavlju je analiziran transport elektrona u hidrofluoroolefinu $C_3H_2F_4$ i njegovim smešama sa Ar, N_2 , CO_2 i SF_6 . Jedan od osnovnih doprinosa ovog poglavlja doktorske disertacije je razvoj konačnog i samousaglašenog skupa preseka za rasejanje elektrona u $C_3H_2F_4$. Ovaj presek je razvijen



Slika 5.20: Funkcija raspodele energija elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ - SF_6 smešama. Rezultati Monte Karlo simulacija na polju od 361 Td.

u dve varijante od kojih druga varijanta reprodukuje nehidrodinamičko ponašanje brzinskog koeficijenta efektivne jonizacije koje je eksperimentalno utvrđeno.

Kvalitet konstruisanih skupova preseka je potvrđen dobrim slaganjima izračunatih kritičnih električnih polja $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ i njegovih smeša sa eksperimentalnim vrednostima. Među značajnim zaključcima koji se iz njih donose, izdvaja se podatak o tome da $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ (čije kritično polje na atmosferskom pritisku iznosi ~ 190 Td) dostiže vrednost kojom se karakteriše SF_6 ukoliko se pritisak poveća na 140 kPa. Ova činjenica je vrlo optimistična kada je u pitanju potencijalna primena $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ - CO_2 smeša u srednjenaponskoj opremi za transport električne struje.

U ovom poglavlju je uočen fenomen pozitivne sinergije u smeši $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ - SF_6 koje se odlikuje povećanjem $(E/n_0)_{lim}$ iznad vrednosti kritičnog polja pojedinačnih komponenti smeše. Ovim su omogućena dva značajna benefita pri korišćenju gasne smeše $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ - SF_6 . Ne samo da se smanjuje koncentracija SF_6 okarakterisanog visokim GWP faktorom i time sprečava dalji porast efekta staklene bašte na Zemlji već gasna smeša obezbeđuje bolje dielektrične osobine od samog SF_6 .

Poglavlje 6

Transport elektrona u C_4F_7N

6.1 Uvod

U ovom poglavlju je konstruisan kompletan i samousaglašen skup preseka za rasejanje elektrona u C_4F_7N gasu. Na osnovu skupa preseka, proučavan je transport elektrona u ovom gasu i njegovim smešama sa argonom (Ar), azotom (N_2), ugljendioksidom (CO_2) i sumpor-heksafluoridom (SF_6).

6.2 Fizičke i hemijske osobine C_4F_7N gasa

C_4F_7N je sintetički proizvod američke multinacionalne korporacije 3M koja posluje u oblasti industrije, bezbednosti na radu i zaštite zdravlja. Identifikaciona oznaka gasa je *NovecTM* 4710 a pozat je i po nazivima 2,3,3,3 tetrafluoro-2-(trifluorometil)propan-nitril, C4-perfluoronitril i C4-PFN.

C_4F_7N je bezbojan, nezapaljiv gas bez mirisa. Toksičan je pri udisanju i izaziva promrzline u kontaktu sa kožom i očima. U pitanju je izolacioni gas koji ima isključivo industrijsku primenu uz strogu zabranu korišćenja u medicinske svrhe. Kompatibilan je sa najčešće korišćenim industrijskim metalima (Al i Cu) usled čega se može koristiti u različitim uređajima bez bojazni od korozije (Novec Insul Gases for Power Gen Brochure.pdf). Pošto je njegova osnovna namena izolacija uređaja za transport električne energije, gas je testiran kako u laboratorijskim uslovima tako i u samim instalacijama u srednjenaponskim i visokonaponskim uređajima. Odlikuje se molekularnom masom od 195.04 g/mol, tačkom ključanja od $-4.7\text{ }^{\circ}C$ na atmosferskom pritisku i pritiskom pare od 253 kPa na $20\text{ }^{\circ}C$.

C_4F_7N je nezasićen molekularan gas (alkin) u kome je atom azota vezan za ugljenični niz putem trostruke kovalentne veze. Spada u grupu rashladnih gasova četvrte generacije. C_4F_7N ne razara ozon ($ODP = 0$) ali je njegov GWP faktor (za stogodišnji interval) prilično visok (procenjena vrednost je između 1490 i 3646) dok je atmosfersko vreme života od 22 do 47 godina [116]. I pored ovako visokog GWP faktora, njegov nulti ODP faktor, visoko kritično polja (približno 970 Td, preko dva

ipo puta više od SF_6) i niska tačka ključanja su obećavajuće karakteristike za potencijalnu upotrebu $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ u cilju zamene SF_6 u industriji prenosa električne struje [220]. Preporučljiva je upotreba $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ u smeši sa CO_2 sa molarnom koncentracijom nižom od 10% kako bi se u što manjoj meri osetio visok GWP faktor ovog gasa.

6.3 Sudarne i transportne osobine elektrona u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$

6.3.1 Inicijalan skup preseka

$\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ je jedan od gasnih dielektrika poslednje generacije. Laboratorijska istraživanja rasejanja i transportnih procesa elektrona u ovom gasu su strogo kontrolisana od strane proizvođača. Prvi podaci za sudarne procese elektrona i molekula $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ su objavljeni tokom rada na ovoj disertaciji. Transportni koeficijenti elektrona su izmereni u impulsnom Taunzendovom eksperimentu u grupi profesora Jamie de Urquijo. Ovi transportni koeficijenti su korišćeni za modifikaciju inicijalnog skupa preseka i fitovanje eksperimentalno određenih transportnih koeficijenata. Nedavno su publikovana merenja u SST eksperimentu i u impulsnom Taunzendovom eksperimentu grupe sa ETH Univerziteta u Cirihi.

Za inicijalan skup preseka, korišćeni su podaci za rasejanje elektrona u 1,1,1,3,4,4,4-heptafluoro-3-(trifluorometil)-2-butanonu ($\text{C}_5\text{F}_{10}\text{O}$). Ovaj skup preseka je razvijen u saradnji sa grupom profesora Jamie de Urquijo sa Nacionalnog Univerziteta u Meksiku na komercijalnom projektu sa jednom od vodećih multi-nacionalnih kompanija koja posluje u domenu tehnologije za prenos električne energije.

6.3.2 Konačan skup preseka

Konačan skup preseka za rasejanje elektrona u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ je konstruisan tehnikom rojeva. Modifikacijom oblika i veličine preseka za pojedinačne sudarne procese i izbacivanjem nekoliko preseka iz inicijalnog skupa, obezbeđeno je slaganje između izračunatih transportnih koeficijenata elektrona i referentnih eksperimentalnih rezultata de Urquija i saradnika.

Pre svega, modifikacija inicijalnog skupa preseka je izvedena izbacivanjem četiri od ukupno šest preseka za vibracionu ekscitaciju elektrona. Preostali preseki su modifikovani na sledeći način:

1. $Q_{tr.imp.el.sud.}$ je povećan za približno red veličine u oblasti najnižih energija elektrona i smanjen za približno jednaku vrednost u opsegu najviših energija. Lokalni minimum je proširen na veći opseg energija;

2. $Q_{vib.eksc.}$ sa pragom od 0.097 eV je transliran na vrednost od 0.09 eV. Pored toga, smanjena je veličina preseka u prvom lokalnom maksimumu za približno red veličine, formiran je lokalni minimum na 0.65 eV i drugi lokalni maksimum na 1.8 eV. Lokalni minimum $Q_{vib.eksc.}$ preseka sa pragom od 0.15 eV je podešen na 0.7 eV a lokalni maksimum na 8 eV;

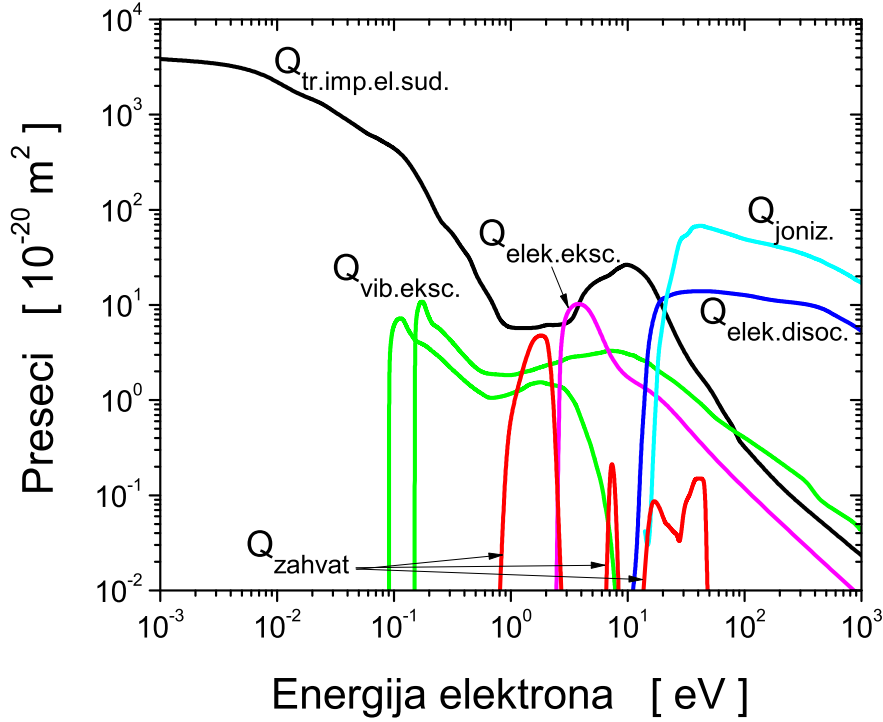
3. prag preseka $Q_{elek.eksc.}$ je transliran na 2.4 eV, a njegov lokalni maksimum na 4.0 eV;

4. $Q_{elek.disoc.}$ je neznatno izmenjen po pitanju intenziteta;

5. Q_{zahvat} sa pragom od 0.8 eV je modifikovan tako da poseduje jedan maksimum u okolini 1.7 eV, a umesto preostala dva preseka za za ovaj proces, u konačnom skupu preseka se nalaze dva nova preseka sa pragovima 6.0 eV i 12.0 eV;

6. $Q_{joniz.}$ je transliran na 13.38 eV i modifikovan je u celokupnom opsegu definisanosti.

Konačan skup preseka za rasejanje elektrona u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ je prikazan na slici 6.1.



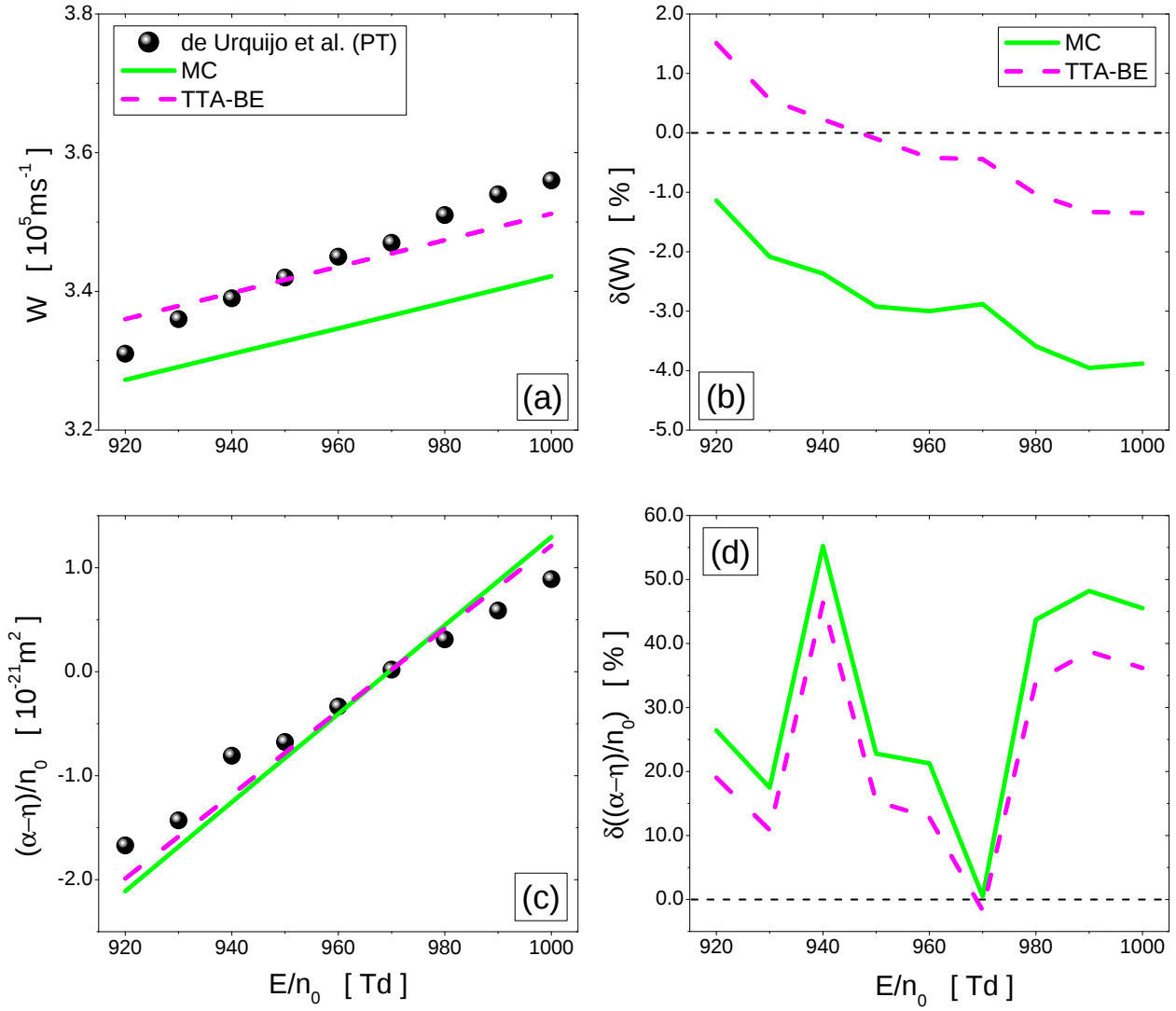
Slika 6.1: Skup preseka za rasejanje elektrona u C_4F_7N . Skup sadrži: $Q_{tr.imp.el.sud.}$ presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, dva $Q_{vib.eksc.}$ preseka za vibracionu ekscitaciju, $Q_{elek.eksc.}$ presek za elektronsku ekscitaciju, $Q_{elek.disoc.}$ presek za elektronsku disocijaciju, tri Q_{zahvat} preseka za zahvat elektrona i $Q_{joniz.}$ presek za jonizaciju.

6.3.3 Transport elektrona u čistom C_4F_7N

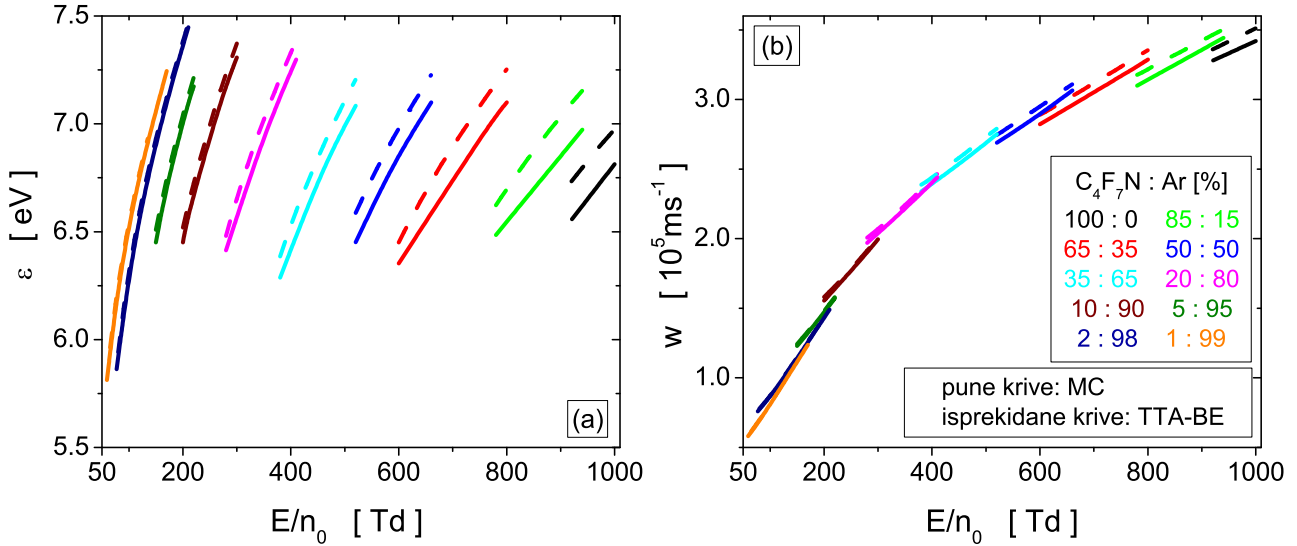
U ovom potpoglavlju su prikazani transportni koeficijenti elektrona u čistom C_4F_7N u funkciji E/n_0 u opsegu električnih polja u kome postoje eksperimentalni podaci. Rezultati naših Monte Carlo simulacija (MC) i numerička rešanja Boltzmannove jednačine bazirane na aproksimaciji dva člana (TTA-BE) su upoređeni sa eksperimentalnim rezultatima de Urquija i saradnika koji su dobijeni u impulsnom Townsendovom eksperimentu.

Na slici 6.2(a) je prikazano poređenje naših proračuna za brzinu drifta W sa eksperimentalnim podacima dok je na panelu (b) iste slike prikazano procentualno odstupanje proračuna od pomenutih referentnih vrednosti. Paneli (c) i (d) prikazuju isti skup rezultata koji se, u ovom slučaju, odnosi na efektivni koeficijent jonizacije $(\alpha - \eta)/n_0$. Imajući u vidu da su referentni transportni koeficijenti elektrona izmereni u uskom opsegu polja od svega 80 Td, može se smatrati da je skup preseka za rasejanje elektrona u C_4F_7N u zadovoljavajućoj meri reprodukuje na merenja de Urquija i saradnika. Na osnovu koeficijenta $(\alpha - \eta)/n_0$ sa panela (c) se očitava da vrednost $(E/n_0)_{lim}$ iznosi 969.5 Td na osnovu MC rezultata odnosno 969.3 Td na osnovu TTA-BE rezultata što se za svega 0.01% razlikuje od kritičnog polja određenog na osnovu eksperimentalnog $(\alpha - \eta)/n_0$ koje iznosi 969.4 Td.

Ovako visoko $(E/n_0)_{lim}$ gasa C_4F_7N je preko 2.5 puta veće od kritičnog polja SF_6 (361 Td). Ipak, visoko kritično polje nije jedini kriterijum za kvalitet i potencijalnu upotrebu gasnog dielektrika. Kako C_4F_7N ima visok GWP faktor i znatno višu tačku ključanja ($-4.7^\circ C$) u odnosu na SF_6 ($-64^\circ C$), ovaj gas se ne može samostalno primenjivati u ulozi gasnog dielektrika u industriji prenosa električne struje već u smeši sa odgovarajućim gasovima.



Slika 6.2: Poređenje izračunatih i eksperimentalnih vrednosti brzine drifta W i efektivnog koeficijenta jonizacije $(\alpha - \eta)/n_0$ za elektrone u C_4F_7N u funkciji E/n_0 . Proračuni su izvršeni Monte Karlo simulacijama i rešavanjem Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Paneli (a) i (c) prikazuju poređenje izračunatih transportnih koeficijenata sa eksperimentalnim vrednostima de Urquijo i saradnika dok je na panelima (b) i (d) prikazano procentualno odstupanje proračuna od eksperimentalnih podataka. Legenda sa panela (a) se odnosi i na panel (c) dok se legenda sa panela (b) odnosi i na panel (d).



Slika 6.3: Srednja energija (a) i brzina drifta elektrona (b) u C_4F_7N -Ar smešama u funkciji E/n_0 . Prikazani su rezultai koji su dobijeni u Monte Karlo simulacijama i na osnovu aproksimacije dva člana za rešavanje Bolcmanove jednačine. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).

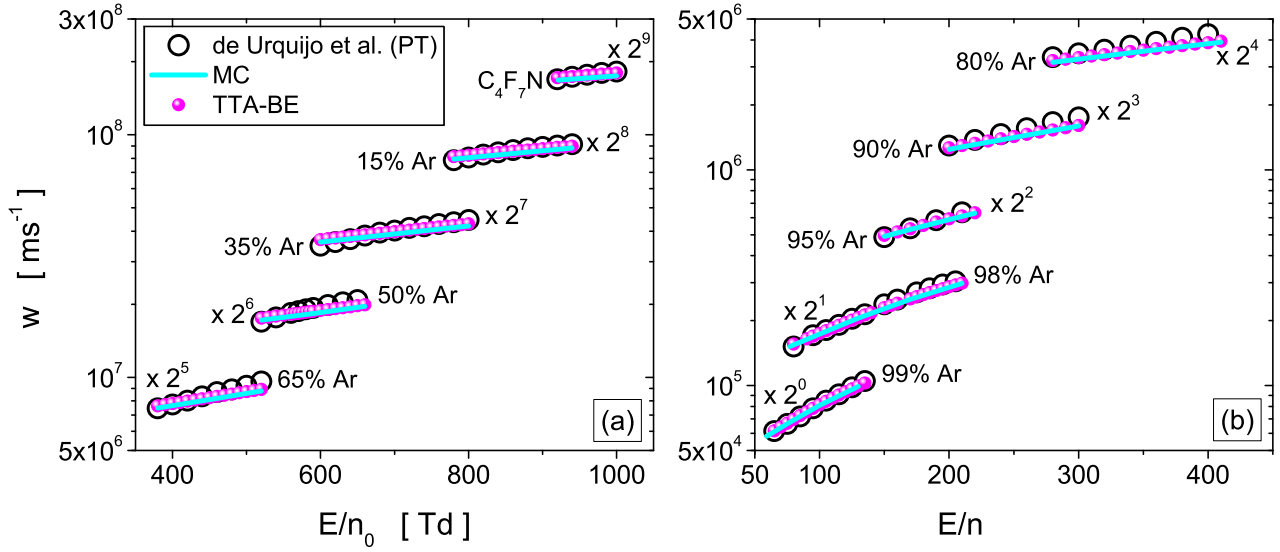
6.3.4 Transport elektrona u C_4F_7N -Ar smešama

Kao i u čistom gasu, transportni koeficijenti elektrona u C_4F_7N -Ar smešama su izračunati u opsegu E/n_0 u kome postoje referentni rezultati de Urquijo i saradnika dobijeni u PT eksperimentu. Pri proračunima je korišćen skup preseka za rasejanje elektrona u Ar autora Hayashi i sradnika (slika 3.5(a)).

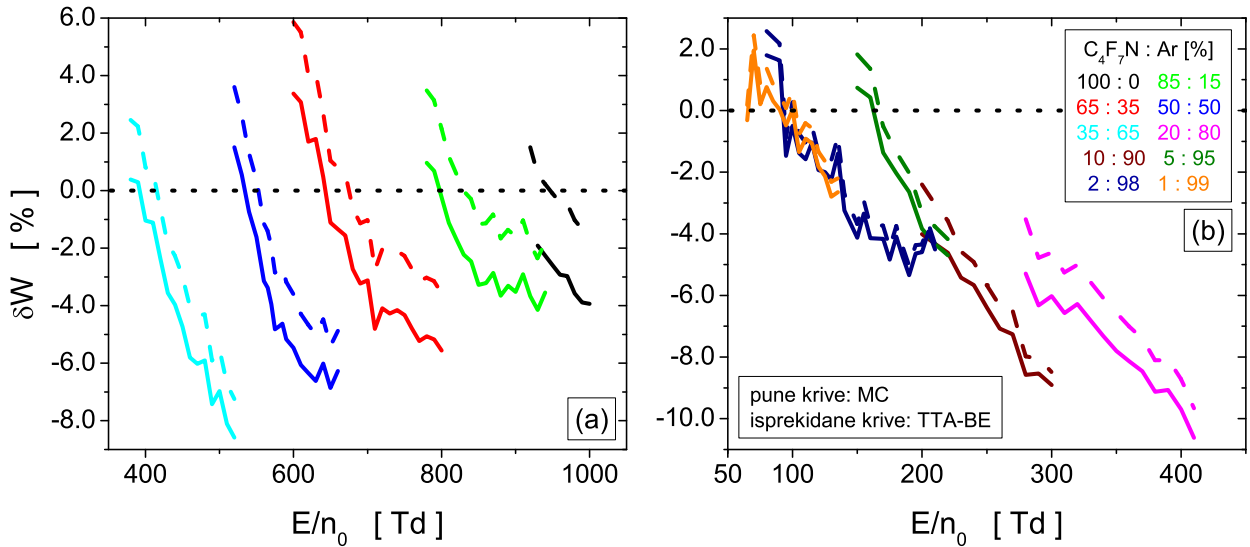
Na slici 6.3 su prikazane ε i W elektrona u C_4F_7N -Ar smešama. U pitanju su MC i TTA-BE rezultati u funkciji E/n_0 . Na osnovu rezultata u ovako uskom opsegu polja se ne može sa sigurnošću govoriti u trendu ε kao ni o njenoj promeni sa promenom koncentracije gasova u smeši (panel (a)). Jedino se može primetiti da je međusobno odstupanje rezultata dve numeričke tehnike u opsegu od 1.5% do 3%. Što se tiče W (panel (b)), međusobno odstupanje rezultata MC i TTA-BE numeričkih tehnika se kreće u istom intervalu procenata. Na osnovu prikaznih rezultata se primećuje da W raste sa porastom koncentracije Ar u smeši do 65% odnosno smanjuje sa daljim povećanjem koncentracije ovog atomskog gasa. Kako je W najosetljivija na $Q_{tr.imp.el.sud.}$, poređenjem preseka za ove sudarne procese iz skupova preseka za rasejanje elektrona u C_4F_7N i Ar se vidi da se ukupan transfer impulsa u elastičnim sudarima menja sa promenom koncentracije gasova u smeši na takav način da dovodi do prikazane zavisnosti W od sastava gasne smeše.

Na slici 6.4 je prikazano poređenje MC i TTA-BE proračuna W u C_4F_7N -Ar smešama sa referentnim podacima dobijenim u PT eksperimentu. U pitanju su isti rezultati kao na slici 6.3(b) samo što su u ovom slučaju, skalirani faktorom 2^n . Međusobno slaganje ovih rezultata je brojčano izraženo procentualnim odstupanjima (slika 6.5). MC i TTA-BE rezultati prate trendove eksperimentalnih podataka uz odstupanje u odnosu na njih u opsegu od -10% do 6%.

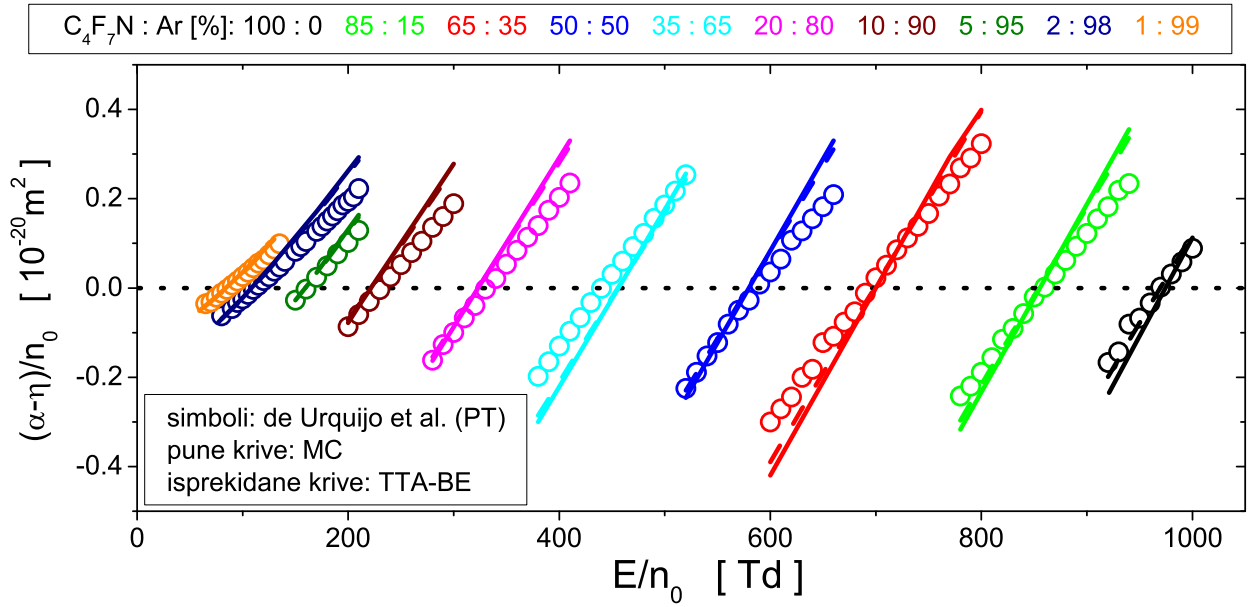
Na slici 6.6 su prikazani rezultati naših MC simulacija i TTA-BE rešenja efektivnog koeficijenta jonizacije u C_4F_7N -Ar smešama zajedno sa referentnim eksperimentalnim vrednostima. Usled uske oblasti polja u kojoj postoje referentni podaci, i pored najboljeg mogućeg fitovanja skupa preseka za rasejanje elektrona u C_4F_7N , javljaju se odstupanja izračunatih koeficijenta $(\alpha - \eta)/n_0$ od eksperimentalnih vrednosti od $\sim 50\%$. Kao i u slučaju prethodno analiziranog gasa $C_3H_2F_4$, izostavljen je prikaz procentualnih odstupanja izračunatog koeficijenta $(\alpha - \eta)/n_0$ od eksperimentalnih vrednosti u smešama C_4F_7N -Ar i C_4F_7N - N_2 . Ovaj transportni koeficijent je pažljivo rekonstruisan u okolini svoje nulte vrednosti: $(E/n_0)_{lim}$ vrednosti dobijene na osnovu



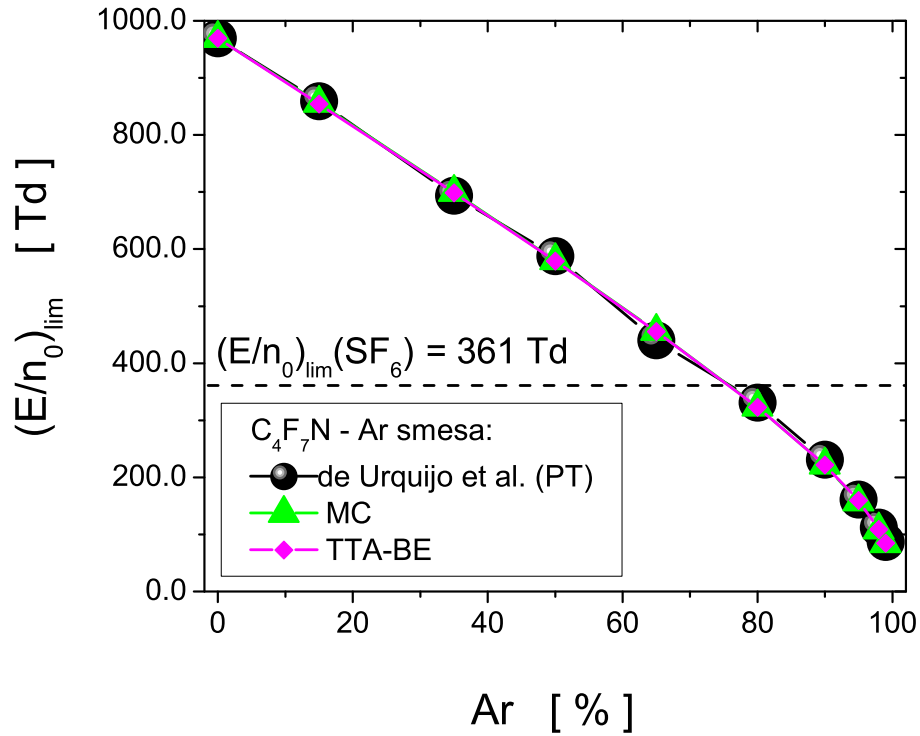
Slika 6.4: Brzina drifta elektrona u C_4F_7N -Ar smešama u funkciji E/n_0 . Poređenje eksperimentalnih vrednosti sa rezultatima Monte Karlo simulacija i rešenjima Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Panel (a) prikazuje rezultate u smešama sa koncentracijom Ar do 65% dok panel (b) prikazuje rezultate u smešama sa većom koncentracijom Ar. Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panel (b). Radi preglednosti, rezultati su skalirani faktorom 2^n .



Slika 6.5: Procentualno odstupanje brzine drifta elektrona u C_4F_7N -Ar smešama od eksperimentalnih podataka de Urquijo i saradnika izmerenih u PT eksperimentu. Proračuni su izvršeni na osnovu rezultata Monte Karlo simulacija i rešavanja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Panel (a) prikazuje rezultate u smešama sa koncentracijom Ar do 65% dok panel (b) prikazuje rezultate u smešama sa većom koncentracijom Ar. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).



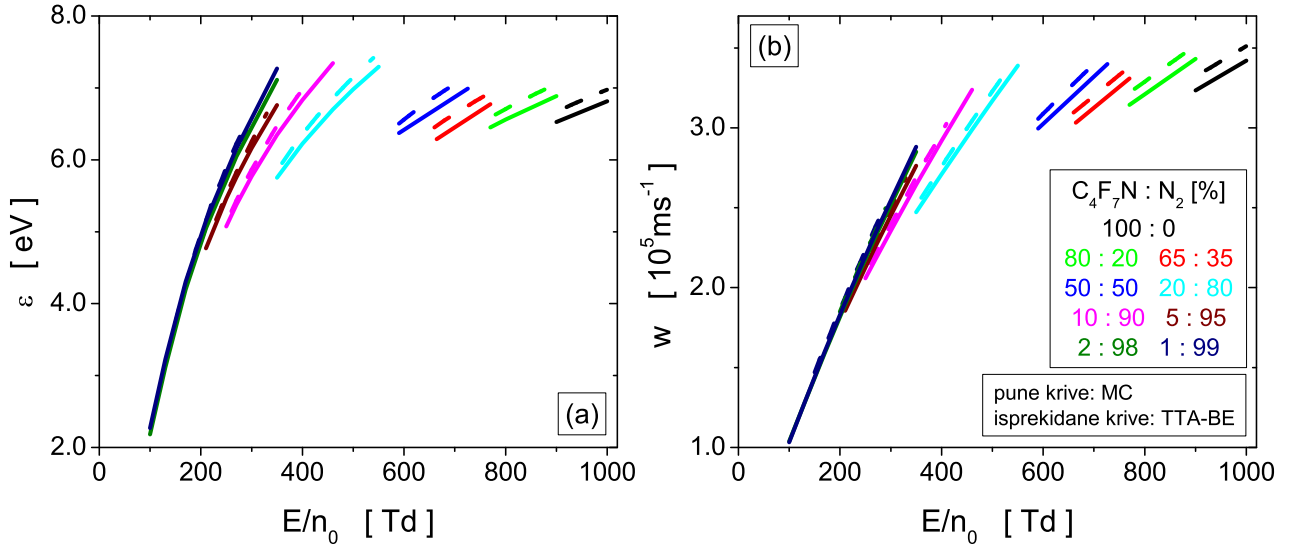
Slika 6.6: Efektivan koeficijent jonizacije u C_4F_7N -Ar smešama u funkciji E/n_0 . Poređenje rezultata Monte Karlo simulacija i rešavanja Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana sa eksperimentalnim vrednostima de Urquijo i saradnika izmerenim u PT eksperimentu.



Slika 6.7: Kritično polje gasne smeše C_4F_7N -Ar u funkciji koncentracije argona. Rezultati su dobijeni na osnovu eksperimentalnih i numerički izračunatih efektivnih koeficijenata jonizacije prikazanih na prethodnoj slici.

naših proračuna odstupaju za manje od 1% od vrednosti dobijenih na osnovu eksperimentalnih podataka (slika 6.7) dok je pri 60% Ar u C_4F_7N odstupanje približno 3%.

Neophodno je obratiti pažnju na vrednosti kritičnog električnog polja sa prethodne slike. Osim što sam C_4F_7N ima visoku vrednost $(E/n_0)_{lim}$, smeše sa argonom čija koncentracija ne prelazi $\sim 70\%$ imaju veće kritično polje od SF_6 . Ovo je važan rezultat u kontekstu potrage



Slika 6.8: Srednja energija (a) i brzina drifta elektrona (b) u $C_4F_7N-N_2$ smešama u funkciji E/n_0 . Rezultati Monte Karlo simulacija su upoređeni sa numeričkim rešenjima Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).

za adekvatnom zamenom SF_6 gasa u visoko-naponskoj tehnologiji, mada treba imati u vidu da se gasne smeše sa plemenitim gasovima veoma retko koriste za ovu svrhu. U tom smislu, ovaj rezultat ima širi značaj u domenu proučavanja proboja u smešama plemenitih i jako elektronegativnih gasova.

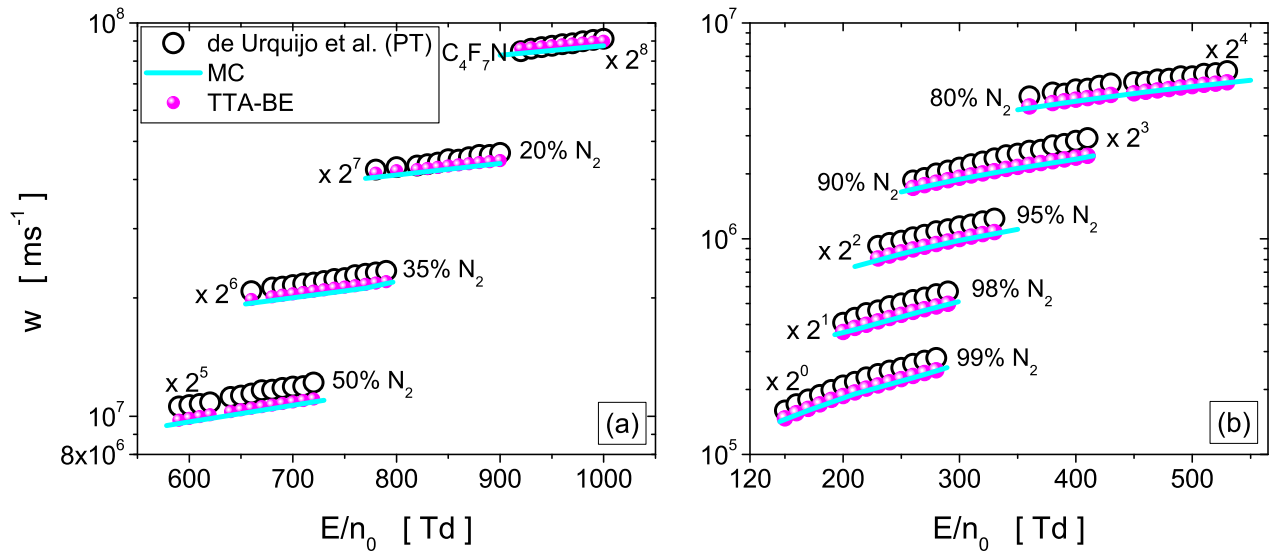
6.3.5 Transport elektrona u $C_4F_7N-N_2$ smešama

U ovom potpoglavlju su prikazani transportni koeficijenti elektrona u smešama C_4F_7N i N_2 izračunati Monte Karlo simulacijama i rešavanjem Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. U proračunima je korišćen skup preseka za rasejanje elektrona u N_2 (slika 5.8) koji je konstruisan u Laboratoriji za neravnotežne procese i primenu plazme Instituta za fiziku u Beogradu [213] dok su proračuni vršeni u opsegu polja definisanom eksperimentalnim podacima. Referentni podaci su izmereni u PT eksperimentu od strane de Urquijo i saradnika [211].

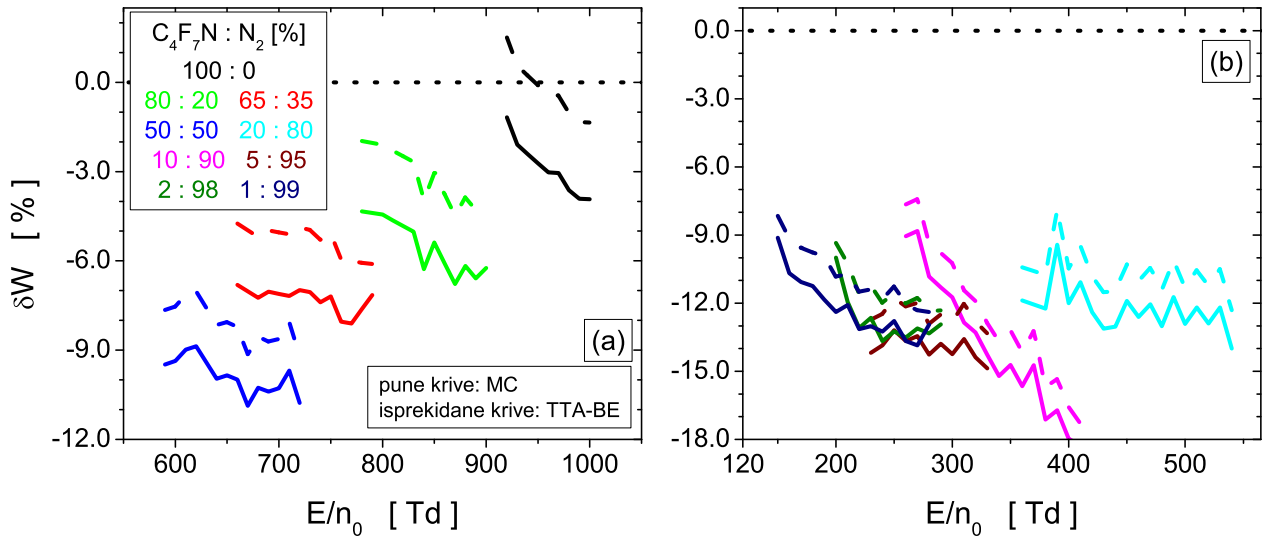
Na slici 6.8(a) je prikazana ε za elektrone u $C_4F_7N-N_2$ smešama. U pitanju su rezultati MC simulacija i TTA-BE rešenja u funkciji E/n_0 . Dve numeričke tehnike daju vrednosti ε koje se međusobno razlikuju za maksimalno 2%. Ovako male razlike su prihvatljive, imajući u vidu ograničenja aproksimacije dva člana u pogledu preciznosti proračuna transportnih koeficijenata. Na panelu (b) iste slike su prikazani rezultati MC simulacija i TTA-BE numeričkih proračuna za brzinu drifta W . I u ovom slučaju su vidljive razlike između rezultata ovih tehnika koje su, takođe, izraženije sa opadanjem koncentracije N_2 u smeši. Zbog uske oblasti polja u kojoj su vršeni proračuni, na osnovu ove slike se ne mogu tumačiti trendovi ε ni W sa promenom E/n_0 ni koncentracijom gasova u smeši.

Na slici 6.9 je prikazana W elektrona u $C_4F_7N-N_2$ smešama. Prikazani su rezultati MC i TTA-BE numeričkih proračuna u funkciji E/n_0 . U pitanju su rezultati sa slike 6.8(b) koji su skalirani faktorom 2^n . Međusobno slaganje prikaznih proračuna sa referentnim podacima je izraženo procentualnim odstupanjima (slika 6.10). Vidi se da se manja odstupanja javljaju u smešama sa manjom koncentracijom N_2 . Ovo jasno pokazuje veću konzistentnost skupa preseka za rasejanje elektrona u N_2 sa merenjima de Urquija i saradnika u odnosu na C_4F_7N .

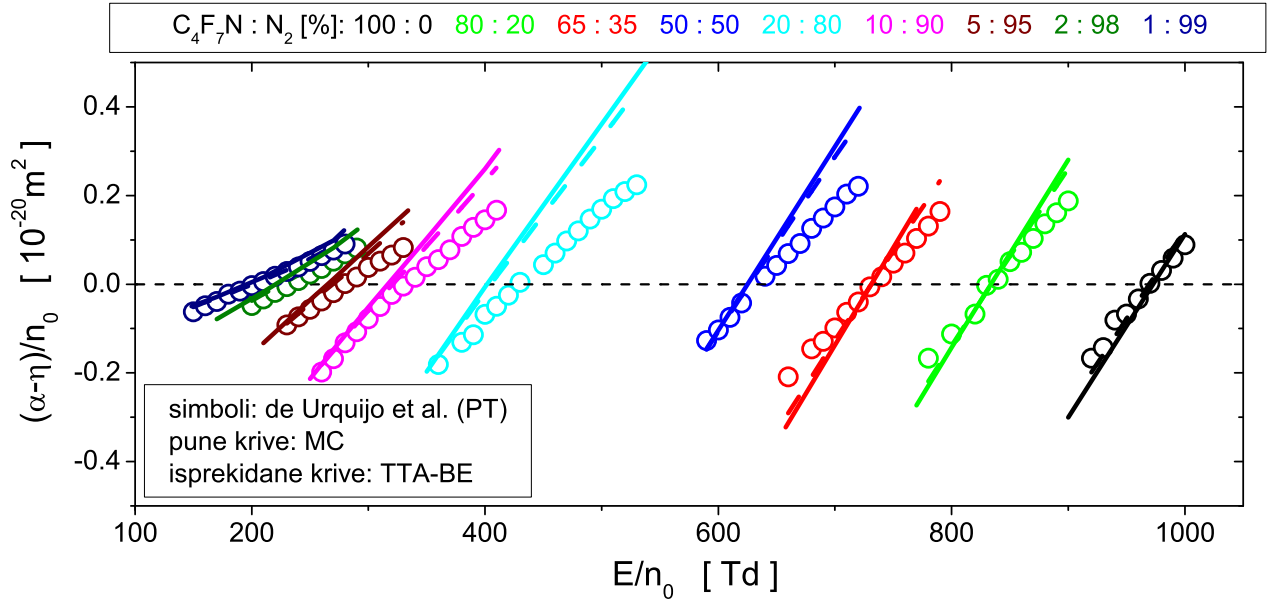
Na slici 6.11 je prikazan $(\alpha - \eta)/n_0$ u $C_4F_7N-N_2$ smešama u funkciji E/n_0 . U pitanju su rezultati MC simulacija i TTA-BE proračuna kao i referentni eksperimentalni podaci. Kao i kod C_4F_7N-Ar smeša, ni u ovoj gasnoj smeši nije reprodukovani trend $(\alpha - \eta)/n_0$ na najbolji način.



Slika 6.9: Brzina drifta elektrona u C_4F_7N - N_2 smešama u funkciji E/n_0 . Poređenje eksperimentalnih vrednosti sa rezultatima Monte Karlo simulacija i rešenjima Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Panel (a) prikazuje rezultate u smešama sa koncentracijom N_2 do 50% dok panel (b) prikazuje rezultate u smešama sa većom koncentracijom N_2 . Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panel (b). Radi preglednosti, rezultati su skalirani faktorom 2^n .



Slika 6.10: Procentualno odstupanje brzine drifta elektrona u C_4F_7N - N_2 smešama od eksperimentalnih podataka de Urquijo i saradnika izmerenih u PT eksperimentu. Proračuni su izvršeni na osnovu Monte Karlo simulacija i rešavanja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Panel (a) prikazuje rezultate u smešama sa koncentracijom N_2 do 50% dok panel (b) prikazuje rezultate u smešama sa većom koncentracijom N_2 . Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panel (b).



Slika 6.11: Efektivan koeficijent jonizacije u C_4F_7N - N_2 smešama u funkciji E/n_0 . Poređenje rezultata Monte Karlo simulacija i numeričkih rešenja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana sa eksperimentalnim vrednostima de Urquijo i saradnika izmerenim u PT eksperimentu.

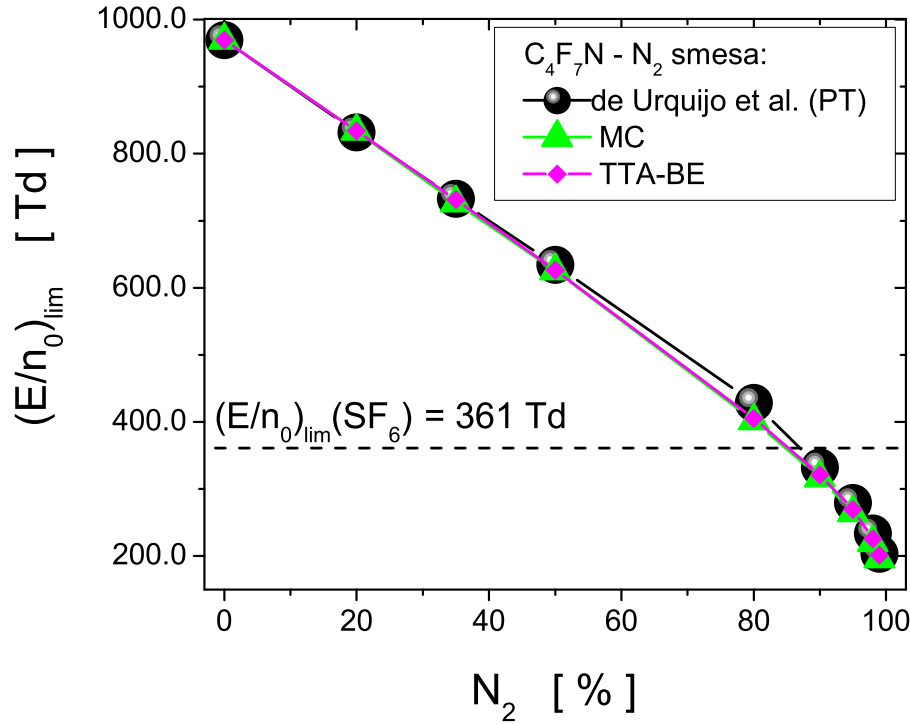
Jedan od razloga je uska oblast polja u kojoj postoje eksperimentalni podaci što onemogućava pravilnu rekonstrukciju preseka za pojedinačne sudarne procese u širokom opsegu energija. Ipak, $(\alpha - \eta)/n_0$ je dosta preciznije naftovan u okolini svoje nulte vrednosti čime je obezbeđeno da se $(E/n_0)_{lim}$ izračunat na osnovu naših proračuna slaže sa podacima dobijenim na osnovu referentnih merenja u okviru 1.5% osim u smeši sa 80% N_2 u kojoj je odstupanje približno 6.5% (slika 6.12).

Smeša gasova C_4F_7N i N_2 pokazuje izuzetna dielektrična svojstva u pogledu vrednosti $(E/n_0)_{lim}$. U smešama sa 85% N_2 , kritično polje dostiže vrednost kojom se karakteriše SF_6 dok daljim opadanjem koncentracije ovog gasa $(E/n_0)_{lim}$ linearno raste. Ipak, uzevši u obzir tačku ključanja C_4F_7N ($-4.7^\circ C$ na atmosferskom pritisku), ovaj gasni dielektrik najnovije generacije može da se nađe u smeši sa N_2 u koncentraciji od 7% do 13% kako bi se zadovoljili zahtevi koje dielektrik mora da poseduje kako bi se koristio u industriji prenosa električne struje [221].

6.3.6 Transport elektrona u C_4F_7N - CO_2 i C_4F_7N - SF_6 smešama

Ovo potpoglavlje je posvećeno proučavanju transporta elektrona u smešama C_4F_7N sa CO_2 i SF_6 . Transportni koeficijenti elektrona su izračunati u funkciji električnog polja u onom opsegu u kome postoje u rezultatima dostupnim u literaturi. Za razliku od smeša C_4F_7N gasa analiziranih u prethodnim potpoglavljima, u ovom slučaju nismo imali referentne eksperimentalne podatke koji bi bili merilo kvaliteta naših proračuna. Umesto toga, odabrano je po nekoliko gasnih smeša za koje su izračunati transportni koeficijenti elektrona a zatim su, od mnoštva rezultata, prikazani samo efektivni koeficijenti jonizacije i kritična električna polja kao jedni od najznačajnijih parametara za opis gasnih dielektrika. U proračunima je korišćen skup preseka za rasejanje elektrona u CO_2 koji je konstruisan u našoj laboratoriji (slika 3.5(b)) kao i skup preseka za SF_6 autora Itoh i saradnika (slika 4.1). Za proračune je korišćen numerički kod zasnovan na Monte Karlo simulacijama u koji je ugrađena tehnika diskretnog reskaliranja elektrona.

Jedna od najznačajnijih smeša C_4F_7N gasa je smeša sa ugljendioksidom. U literaturi se mogu naći podaci o dielektričnim karakteristikama ove smeše [222, 223] na osnovu kojih je ispitivana njihova upotreba u GIL sistemima u poljima jednosmernih struja [224, 225]. Nechmi i



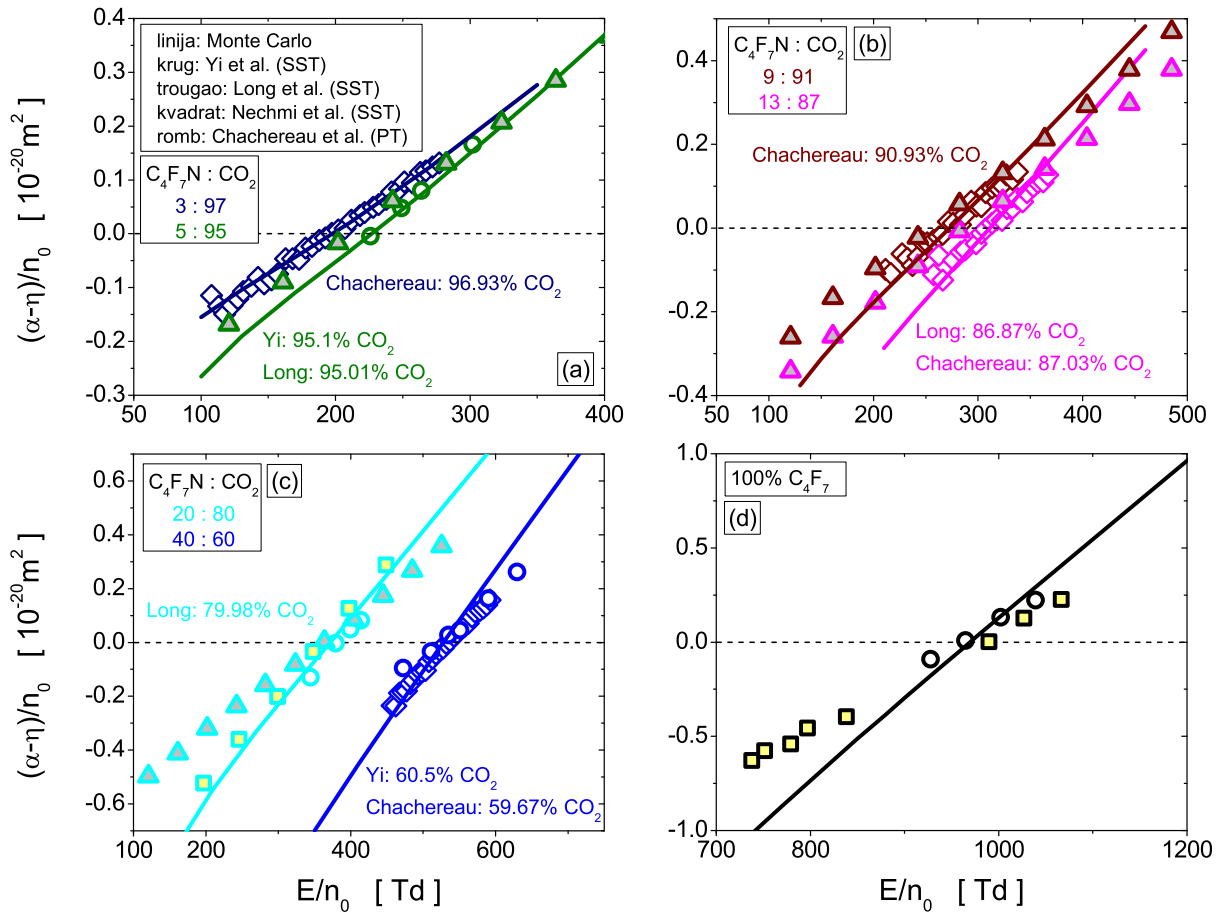
Slika 6.12: Kritično polje gasne smeše $C_4F_7N-N_2$ u funkciji koncentracije azota. Rezultati su dobijeni na osnovu eksperimentalnih i numerički izračunatih efektivnih koeficijenata jonizacije prikazanih na prethodnoj slici.

saradnici [226] su SST eksperimentom merili karakteristike pražnjenja u čistom C_4F_7N i $C_4F_7N-CO_2$ smešama sa koncentracijom CO_2 većom od 80% dok su Chachereau i saradnici [116] objavili rezultate PT eksperimenta u smešama sa koncentracijom CO_2 većom od 40.33%. Yi i saradnici [227] su u SST eksperimentu merili efektivne koeficijente jonizacije na osnovu kojih su izračunavali kritična polja ove smeše gasova. Long i saradnici [221] su izmerili Townsendov prvi jonizacioni koeficijent α/n_0 i koeficijent zahvata elektrona η/n_0 u SST eksperimentu. Autori su se takođe posvetili istraživanju uticaja pritiska na tačku ključanja $C_4F_7N-CO_2$ smeša što je jedan od važnijih aspekata istraživanja posvećenog pronalasku zamene SF_6 gasa u ulozi gasnog dielektrika u sistemima za prenošenje električne struje.

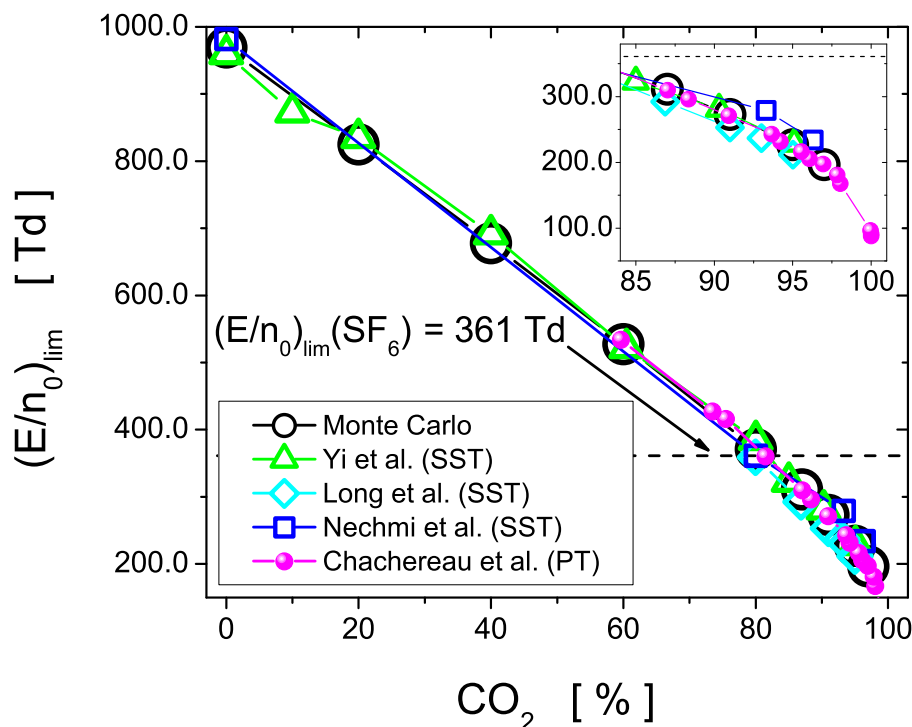
Na slici 6.13 su prikazani efektivni koeficijenti jonizacije $(\alpha - \eta)/n_0$ izračunati MC simulacijama kao i eksperimentalni podaci različitih autora koji se odnose na smeše sa najpribližnijom koncentracijom komponenata. I pored toga što se sastavi smeša malo razlikuju, rezultati naših proračuna odgovaraju trendu ponašanja eksperimentalnih podataka. Rezultati naših proračuna se sistematski bolje slažu sa merenjima u impulsnom Townsendovom eksperimentu u odnosu na one koji su izmereni u SST uslovima. Ovo se može objasniti činjenicom da je observacija roja elektrona u ova dva eksperimenta drugačija, što neminovno vodi ka različitoj prirodi transportnih koeficijenata. Pored toga, treba uzeti u obzir da su preseki za rasejanje elektrona u C_4F_7N i CO_2 dobijeni na osnovu eksperimentalnih vrednosti transportnih koeficijenata koji su dobijeni u impulsnom Townsendovom eksperimentu.

Na slici 6.14 je prikazano kritično električno polje $(E/n_0)_{lim}$ u funkciji koncentracije CO_2 u smeši $C_4F_7N-CO_2$. Rezultati dobijeni na osnovu naših MC simulacija za svega par procenata odstupaju od merenja autora označenih na slici. Najveće odstupanje se javlja pri koncentraciji CO_2 u smeši većim od 80% (umetnut panel slike 6.14).

Nechmi i saradnici [226] su svojim merenjima utvrdili da, kao što i naši proračuni pokazuju, smeša sa 80% CO_2 ima kritično polje ekvivalentno SF_6 gasu. Do sličnog zaključka je došla i



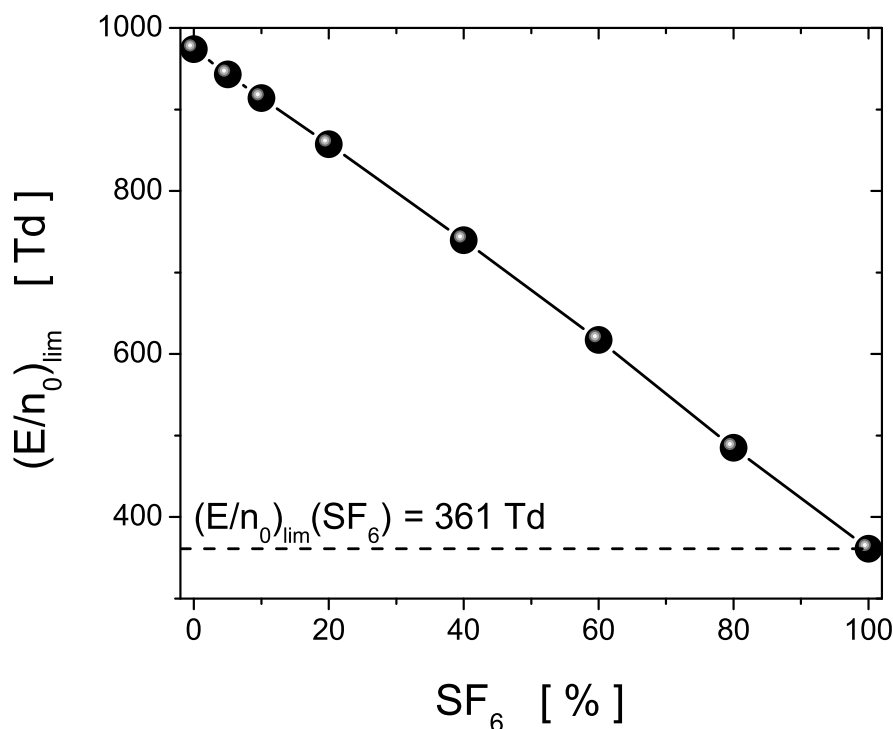
Slika 6.13: Efektivan koeficijent jonizacije u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}-\text{CO}_2$ smešama. Rezultati Monte Karlo simulacija su upoređeni sa eksperimentalnim podacima iz literature. Oznake krivih na panela (a) se odnose i na ostale panele.



Slika 6.14: Kritično polje gasne smeše C_4F_7N - CO_2 u funkciji koncentracije ugljendioksida dobijeno na osnovu rezultata sa prethodne slike.

grupa saradnika na čelu sa Chachereau [116]: pri koncentraciji CO_2 od $\sim 81.5\%$, smešu C_4F_7N - CO_2 karakteriše $(E/n_0)_{lim}$ gotovo identično vrednosti čistog SF_6 . Na osnovu rezultata Yi i saradnika [227] se vidi da smeše sa manje od 80% CO_2 imaju kritična polja koja nadmašuju vrednost kojom je okarakterisan SF_6 . Rezultat Long i saradnika [221] je jako sličan prethodno navedenom rezultatu: autori ističu da smeši sa 79.98% CO_2 odgovara kritično polje SF_6 gasa. Ova grupa autora naglašava da smeša sa 86.87% CO_2 dostiže 80% vrednosti kritičnog polja SF_6 dok smeša sa 91% CO_2 prevazilazi 70% vrednost $(E/n_0)_{lim}$ gasa SF_6 . Na osnovu navedenih činjenica se zaključuje da se gasne smeše sa (87-91)% CO_2 u C_4F_7N mogu razmatrati kao potencijalna zamena za SF_6 u ulozi gasnog dielektrika.

Bazirano na našim saznanjima, ne postoje objavljeni radovi o merenjima i analizi smeša gasova C_4F_7N i SF_6 . Kako smeša ovih gasova pruža mogućnost smanjenja koncentracije SF_6 uz obezbeđivanje kritičnog polja koje može biti 361 Td ili veće, pomenuta smeša gasova je bila predmet našeg interesovanja. Od svih dobijanih rezultata izdvojićemo i prikazaćemo samo vrednosti $(E/n_0)_{lim}$ u funkciji sastava gasne smeše izračunate na osnovu rezultata naših MC proračuna. Sa slike 6.15 se vidi očekivana zavisnost $(E/n_0)_{lim}$ od koncentracije SF_6 u smeši: kritično polje smeše raste sa opadanjem koncentracije ovog gasa. Iako se $(E/n_0)_{lim}$ povećava dodavanjem male količine C_4F_7N u SF_6 , potrebna su detaljna ispitivanja ove gasne smeše. Pre svega, cilj pronalaska alternative gasa SF_6 podrazumeva da se ovaj gas u potpunosti izbaci iz upotrebe a, ukoliko to nije moguće, onda smanji u značajnoj meri. Međutim, C_4F_7N se odlikuje prilično visokim GWP faktorom i dugim atmosferskim vremenom života što ne ide u prilog karakteristikama koje bi trebao da ima alternativan gasni dielektrik. Osim toga, tačka ključanja ovog gasa nije odgovarajuća kako bi oprema za izolaciju gasovima bila upotrebljiva u podnebljima u kojima su niske temperature.



Slika 6.15: Kritično polje gasne smeše C_4F_7N - SF_6 u funkciji koncentracije sumpor-heksafluorida dobijeno na osnovu rezultata MC simulacija.

6.4 Zaključak

Ovo poglavlje je posvećeno C_4F_7N gasu i njegovim smešama sa Ar, N_2 , CO_2 i SF_6 . Najvažniji doprinos u istraživanju prikazanom u ovom poglavlju je konstrukcija kompletnog i samousaglašenog skupa preseka za rasejanje elektrona u C_4F_7N . Ovo je skup efektivnih preseka, koji su dobijeni ekstrapolacijom preseka za rasejanje elektrona u $C_5F_{10}O$. Razvijen skup preseka dobro reprodukuje eksperimentalno odredjene transportne koeficijente u impulsnom Taunzendovom eksperimentu u relativno uskoj oblasti E/n_0 oko kritičnog polja.

U ovom poglavlju je posebna pažnja posvećena proračunu kritičnog električnog polja. Pokazano je da $(E/n_0)_{lim}$ u gasnim smešama 80% Ar, 85% N_2 i 80% CO_2 ima identičnu vrednost kao u čistom SF_6 gasu. Sa druge strane, u smešama C_4F_7N i SF_6 , imaju'ci u vidu da je kritično električno polje C_4F_7N približno 2.5 puta veće od onog u SF_6 , uvođenje SF_6 gasa u smešu dovodi do opadanja kritičnog električnog polja.

Poglavlje 7

Negativni strimeri u jako elektronegativnim gasovima

7.1 Uvod

Ovo poglavlje je posvećeno analizi razvoja i propagacije negativnih strimera u jako elektronegativnim gasovima i gasnim smešama. Korišćeni su različiti fluidni modeli u 1D i 1.5D konfiguraciji čiji su ulazni podaci transportni koeficijenti elektrona izračunati Monte Karlo simulacijama i rešavanjem Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Prikazani su rezultati koji se odnose na CF_3I i njegovu smešu sa SF_6 a koji se generički ponavljaju u svim ostalim ispitivanim gasovima.

7.2 Modelovanje neravnotežnih plazmi

U literaturi postoji nekoliko tipova modela neravnotežnih plazmi. Svaki od njih se zasniva na poznavanju sudarnih i transportnih procesa elektrona, jona, pozitrona kako sa atomima i molekulima ispitivanog gasa tako i sa različitim površinama (elektrodama, zidovima).

Kao prvi bi se mogli navesti fluidni modeli neravnotežnih plazmi. Fluidnim modelima se dinamičke karakteristike naelektrisanih čestica, ekscitovanih stanja, slobodnih radikala opisuju preko makroskopskih veličina kao što su energija i impuls. Prostorne i vremenske promene ovih veličina se opisuju fluidnim jednačinama koje se dobijaju integracijom Bolcmanove jednačine (BE) u brzinskom prostoru. Nepreciznost fluidnih modela potiče od odsecanja beskonačnog skupa jednačina na konačan skup kao i od uvođenja aproksimacija za opis članova višeg reda. Fluidnim modelima se ne može izračunati funkcija raspodele posmatranih čestica. Po pitanju računarskih resursa, ova grupa modela je jako malo zahtevna.

Kinetički modeli neravnotežnih plazmi se zasnivaju na direktnom rešavanju BE. Na ovaj način se izračunava funkcija raspodele čestica a njenim poznavanjem je moguće izračunati bilo

koju transportnu veličinu. Ovim modelima se na egzaktan način opisuje kinetika naelektrisanih čestica. Modeli su jako složeni pošto se baziraju na rešavanju beskonačnog sistema spregnutih parcijalnih diferencijalnih jednačina.

Čestičnim modelima se prati prostorno-vremenska evolucija naelektrisanih čestica. Primenljivi su i u nehidrodinamičkim uslovima (u blizini izvora i ponora čestica, u blizini graničnih površina) i bazirani na jednostavnim jednačinama kretanja čestica izvedenim iz Njutnovog zakona (engl. *Newton*). Monte Karlo simulacijama se prati prostorno-vremenska evolucija svake pojedinačne čestice dok se dinamičke karakteristike celog ansambla dobijaju odgovarajućim usrednjavanjima u brzinskom i konfiguracionom prostoru. Metoda PIC (engl. *Particle In Cell*, PIC) je prvenstveno bila namenjena rešavanju besudarnih plazmi sa Maksvelovom raspodelom brzina elektrona ali je kasnije našla primenu i kod sudarno dominantnih neravnotežnih plazmi. Ovi modeli su jako zahtevni po pitanju računarskih resursa.

Hibridni modeli predstavljaju najsofisticiraniju grupu modela neravnotežnih plazmi. U njima se kombinuju fluidni modeli sporih čestica i čestični modeli brzih čestica. Najkomplikovaniji korak ovih modela je sprega između fluidnih i kinetičkih jednačina.

7.3 Fluidne jednačine

U ovoj doktorskoj disertaciji su korišćeni fluidni modeli neravnotežnih plazmi. Ovi modeli počivaju na fluidnim jednačinama čije izvođenje može biti bazirano na prvim principima ili na momentnim jednačinama balansa različitih veličina [228] što je upravo primenjeno u ovoj disertaciji.

Momentne jednačine se dobijaju množenjem BE funkcijama $\phi(\mathbf{c})$ koje sadrže različite stepene brzina. Nakon integracije u brzinskom prostoru, dobijaju se srednje vrednosti tih funkcija. Svaka ovako dobijena jednačina definiše balans odgovarajuće makroskopske veličine.

Posmatrajmo sistem koji sadrži jednu grupu čestica (npr. elektrone) i smatrajmo da na sistem deluje samo električno polje. Pri takvim uslovima, BE dobija oblik:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{e}{m} \mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} = -J(f, f_0). \quad (7.1)$$

Množenjem jednačine (7.1) funkcijom $\phi_1(\mathbf{c})$ koja je jednaka jedinici i integracijom u brzinskom prostoru, dobija se jednačina balansa broja čestica:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla_r \cdot (n\mathbf{v}) = \int J d\mathbf{c}. \quad (7.2)$$

Nepoznate veličine u ovoj jednačini su koncentracija elektrona n i njihova srednja brzina $\mathbf{v}$:

$$n = \int f d\mathbf{c} \quad (7.3)$$

$$\mathbf{v} = \frac{1}{n} \int \mathbf{c} f d\mathbf{c}. \quad (7.4)$$

Jednačina balansa impulsa se dobija množenjem jednačine (7.1) funkcijom $\phi_2(\mathbf{c}) = m\mathbf{c}$ i integracijom u brzinskom prostoru. Njen oblik je:

$$\frac{\partial}{\partial t}(nm\mathbf{v}) + \nabla_r \cdot (nm\langle \mathbf{c}\mathbf{c} \rangle) - en\mathbf{E} = \int m\mathbf{c} J d\mathbf{c}. \quad (7.5)$$

Ukoliko se uvede tenzor pritiska:

$$\mathbf{P} = nm\langle (\mathbf{c} - \mathbf{v})(\mathbf{c} - \mathbf{v}) \rangle, \quad (7.6)$$

u kome se oznaka $\langle \rangle$ odnosi na usrednjavanje po brzinskom prostoru, prethodna jednačina postaje:

$$nm \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (nm \langle \mathbf{v} \mathbf{v} \rangle) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{P} - en \mathbf{E} = \int m \mathbf{c} J d\mathbf{c}. \quad (7.7)$$

Upravo je tenzor pritiska nova nepoznata veličina, pored dve prethodno navedene. Analogno, jednačina balansa energije se dobija množenjem BE funkcijom koja ima oblik energije ($\phi_3(\mathbf{c}) = 1/2 m \mathbf{c}^2$) i integracijom u brzinskom prostoru. Izgled ove jednačine (koja se odnosi na totalnu energiju) je:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} nm \mathbf{v}^2 + \frac{3}{2} nk \mathbf{T} \right) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[\left(\frac{1}{2} nm \mathbf{v}^2 + \frac{3}{2} nk \mathbf{T} \right) \mathbf{v} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{q} \right] \\ - en \mathbf{E} \mathbf{v} = \int \frac{1}{2} m \mathbf{c}^2 J d\mathbf{c}. \end{aligned} \quad (7.8)$$

Pored prethodno navedenih nepoznatih veličina, u ovoj jednačini se javljaju i temperaturski tenzor $\mathbf{T}$ kao i vektor toplotnog provođenja $\mathbf{q}$ čija se komponenta j izračunava na sledeći način:

$$q_j = \frac{1}{2} m \int (\mathbf{c} - \mathbf{v})^2 (c_j - v_j) f d\mathbf{c}. \quad (7.9)$$

Kombinujući jednačinu balansa totalne energije sa jednačinom balansa impulsa (7.5), dobijaju se jednačine za balans makroskopskog kretanja:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} nm \mathbf{v}^2 \right) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left(\frac{1}{2} nm \mathbf{v}^2 \mathbf{v} \right) + (\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{P}) \cdot \mathbf{v} - en \mathbf{E} \mathbf{v} = \int m \left(\mathbf{v} \mathbf{c} - \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 \right) J d\mathbf{c}, \quad (7.10)$$

i balans haotičnog (tj. termalnog) kretanja:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} nk \mathbf{T} \right) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left(\frac{3}{2} nk \mathbf{T} \mathbf{v} + \mathbf{q} \right) + \mathbf{P} \cdot (\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{v}) = \int \frac{1}{2} m (\mathbf{c} - \mathbf{v})^2 J d\mathbf{c}. \quad (7.11)$$

Grupa istraživača Laboratorije za neravnotežne procese i primenu plazme Instituta za fiziku u Beogradu ima veliko znanje iz oblasti fluidnog modelovanja neravnotežnih plazmi. Upravo narednu fluidnu jednačinu, jednačinu balansa energijskog fluksa, su prvi izveli Dujko i saradnici [228] i uveli u fluidan model višeg reda za simulaciju propagacije strimera. Izgled ove jednačine je:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\left(\frac{1}{2} nm \mathbf{v}^2 + \frac{3}{2} nk \mathbf{T} \right) \mathbf{v} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{q} \right] \\ + \nabla \cdot \left[\left(\frac{1}{2} nm \mathbf{v}^2 + \frac{3}{2} nk \mathbf{T} \right) \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + 2\mathbf{v} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{Q}) + 2\mathbf{v} \mathbf{q} + \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 \mathbf{P} + \mathbf{Q} : \mathbf{v} + \mathbf{S} \right] \\ - \frac{e}{m} \left(\frac{1}{2} nm \mathbf{v}^2 + \frac{3}{2} nk \mathbf{T} \right) \mathbf{E} - en (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) \mathbf{E} \\ - \frac{e}{2m} \mathbf{P} \cdot \mathbf{E} = \int \frac{1}{2} m \mathbf{c}^2 \mathbf{c} J d\mathbf{c} \end{aligned} \quad (7.12)$$

a dodatne nepoznate veličine koje se u njoj javljaju su tenzor energijskog fluksa višeg reda $\mathbf{Q}$ i tenzor pritiska višeg reda $\mathbf{S}$ čije se komponente izračunavaju na sledeći način:

$$Q_{ijk} = m \int \delta v_i \delta v_j \delta v_k f d\mathbf{c}, \quad (7.13)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} m \int \delta v^2 \delta v_i \delta v_j f d\mathbf{c}. \quad (7.14)$$

Povećavanjem stepena brzine koji se javlja u funkcijama $\phi(\mathbf{c})$ i množenjem jednačine (7.1) ovim funkcijama, može se dobiti beskonačan broj jednačina balansa. Iako bi rešavanje ovakvog skupa jednačina bilo ekvivalentno izračunavanju funkcije raspodele, u praksi se zadržava konačan broj jednačina balansa iako je jasno da se time gubi deo informacija koje daje BE. Međutim, pri odabiru konačnog broja jednačina u skupu, uvek će se javiti veći broj nepoznatih veličina od broja jednačina pa se takav sistem ne može rešiti. U tu svrhu se uvode odgovarajuće metode za zatvaranje sistema jednačina.

U BE figuriše kolizioni operator J koji se može definisati i izračunati teorijom za transfer impulsa (engl. *momentum transfer theory*, MTT). Ova teorija je odgovarajuća za opis transporta naelektrisanih čestica u prisustvu električnih i magnetskih polja i prvenstveno je bila izvedena za slučaj transporta čestica u smeši gasova koji poseduju samo preseke za elastične sudare. Članovi naše Laboratorije su ostvarili značajne rezultate i u ovoj oblasti. Profesori Vrhovac i Petrović [40] su proširili MTT teoriju tako da bude primenljiva u smeši gasova koji poseduju i nekonzervativne procese. Pored toga, izveli su formule koje pokazuju kriterijum za nastajanje NDC fenomena u smeši gasova sa samo elastičnim sudarima i za slučaj jednog gasa sa nekonzervativnim sudarima.

7.4 Fluidni modeli strimera

Fluidni modeli se mogu podeliti u grupe prema broju fluidnih jednačina koje se u njima koriste. Tako se u modelima prvog reda javljaju prve dve jednačine: jednačina balansa broja čestica i balansa impulsa. Fluidni modeli drugog reda sadrže i jednačinu balansa energije pored dve prethodne jednačine dok se u modelima višeg reda javljaju bar prve četiri jednačine balansa. U ovoj disertaciji su korišćeni fluidni modeli prvog reda, odnosno modeli koji se zasnivaju na prvim dvema jednačinama balansa.

Podela fluidnih modela se može izvršiti i prema dimenziji. Iako postoje fluidni modeli u dve kao i u tri dimenzije, u ovoj disertaciji su korišćeni 1-dimenzioni i 1.5-dimenzioni fluidni modeli. Za opis koncentracije naelektrisanih čestica u ovim modelima se koristi jednačina kontinuiteta dok je za opis potencijala odnosno električnog polja korišćena Poissonova jednačina (engl. *Poisson*). U 1-dimenzionim modelima se obe jednačine rešavaju u jednoj dimenziji dok se u 1.5-dimenzionim modelima jednačina kontinuiteta rešava u jednoj a Poissonova jednačina u dve dimenzije.

7.4.1 Klasičan 1-dimenzioni fluidan model

Model sa fluks podacima

U klasičnom fluidnom modelu prvog reda sa fluks podacima figuriše jednačina za balans broja čestica definisana izrazom 7.2. Ukoliko se iskoristi identitet:

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{r}} \cdot (nm\langle \mathbf{c}\mathbf{c} \rangle) &= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (nm(\mathbf{v}\mathbf{v} + \mathbf{v}\langle \mathbf{c} - \mathbf{v} \rangle + \langle \mathbf{c} - \mathbf{v} \rangle\mathbf{v} + \langle (\mathbf{c} - \mathbf{v})(\mathbf{c} - \mathbf{v}) \rangle)) \\ &= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (nm\mathbf{v}\mathbf{v}) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (nm\langle (\mathbf{c} - \mathbf{v})(\mathbf{c} - \mathbf{v}) \rangle),\end{aligned}\quad (7.15)$$

i uvede konvektivan izvod:

$$\frac{d}{dt} = \partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}}, \quad (7.16)$$

jednačina za balans impulsa dobija oblik:

$$nm\frac{d\mathbf{v}}{dt} = en\mathbf{E} - \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{P} + C_{mc} - m\mathbf{v}C_1. \quad (7.17)$$

Oznaka C_1 se odnosi na integral sa desne strane jednačine (7.2) do je C_{mc} oznaka za desnu stranu jednačine (7.7). Kako bi sistem ove dve jednačin balansa bio rešiv, potrebno je definisati tenzor

pritiska. Ukoliko posmatramo sistem koji sadrži lake čestice (elektrone), funkcija raspodele elektrona je približno izotropna u brzinskom prostoru pa se može smatrati da je tenzor pritiska adekvatno opisan hidrostatičkim pritiskom:

$$\mathbf{P} \approx p\mathbf{I} = nkT, \quad (7.18)$$

u kome figurišu Bolcmanova konstanta k i temperatura elektrona T dok je $\mathbf{I}$ jediničan tenzor.

Sada je potrebno definisati kolizione članove C_1 i C_{mc} . Obično se koristi izraz:

$$C_{mc} = -nm\nu_{eff}\mathbf{v}, \quad (7.19)$$

u kome figuriše efektivna koliziona frekvencija za transfer impulsa ν_{eff} koja se odnosi na elastične sudare dok se razmena impusa u neelastičnim sudarima zanemaruje (što je opravdano u većini sistema). Uz prethodne pretpostavke, jednačina za balans impulsa postaje:

$$nm\frac{d\mathbf{v}}{dt} = en\mathbf{E} - \nabla_r nkT - nm\nu_{eff}\mathbf{v}. \quad (7.20)$$

Ukoliko je srednja brzina elektrona stacionarna ($d\mathbf{v}/dt = 0$) a gradijenti temperature zanemarljivi, na osnovu prethodne jednačine se dobija izraz za gustinu fluksa elektrona:

$$\mathbf{\Gamma} = n\mathbf{v} = n\mu\mathbf{E} - D\nabla_r n, \quad (7.21)$$

u kome se javljaju mobilnost elektrona μ i difuziona konstanta D :

$$\mu = \frac{e}{m\nu_{eff}}, D = \frac{kT}{m\nu_{eff}}. \quad (7.22)$$

Spomenuto je da izraz (7.18) važi kada je brzina elektrona izotropna. U slučajevima kada to nije ispunjeno, kao što je na primer oblast fronta strimera, tenzoru pritiska se ne može dodeliti skalarna vrednost. Ukoliko ponovo posmatramo slučaj u kome je srednja brzina elektrona stacionarna a transfer impulsa u neelastičnim sudarima zanemarljiv, jednačina (7.17) postaje:

$$m\nu_{eff}\mathbf{v} = en\mathbf{E} - \nabla_r \cdot \mathbf{P}, \quad (7.23)$$

dok gustina fluksa elektrona (uz prethodno definisanu mobilnost elektrona) postaje:

$$\mathbf{\Gamma} = n\mu\mathbf{E} - \frac{1}{\nu_{eff}}\nabla_r \cdot (n\langle(\mathbf{c} - \mathbf{v})(\mathbf{c} - \mathbf{v})\rangle). \quad (7.24)$$

Upoređujući ovu jednačinu sa (7.21) se vidi da se može definisati veličina

$$\mathbf{D}^* = \frac{\langle(\mathbf{c} - \mathbf{v})(\mathbf{c} - \mathbf{v})\rangle}{\nu_{eff}} \quad (7.25)$$

koja podseća na difuzioni tenzor iz drift-difuzione aproksimacije. Kada ν_{eff} ne zavisi od energije, ova veličina se svodi na difuzionu konstantu D . Ovakvo svođenje difuzionog tenzora na difuzionu konstantu je korisno u modelovanju strimera kako zbog izrazite anizotropije ovog tenzora u pojedinim gasovima tako i zbog odstupanja funkcije raspodele brzina elektrona od Maksvelove raspodele u određenim oblastima strimera.

Kad se gornja aproksimacija uvrsti u jednačinu balansa broja čestica (7.2), dobija se drift-difuziona jednačina za opis transporta naelektrisanih čestica:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla_r \cdot (\mu(\mathbf{E})\mathbf{E}n - D(\mathbf{E}) \cdot \nabla_r n) = \int Jd\mathbf{c}. \quad (7.26)$$

U prethodnoj jednačini je nepoznat izvorni član $\int J d\mathbf{c}$. On se obično ne izvodi iz Bolcmanove jednačine već se uvodi fenomenološki polazeći od oblika jednačine kontinuiteta (jednačine balansa broja čestica) sa izvornim članom. Kako se u klasičnom fluidnom modelu smatra da izvorni član zavisi od lokalne koncentracije čestica i od lokalnog električnog polja, ovaj model je opisan jednačinama:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (D \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n) - \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mu n \mathbf{E}) + n(\nu_i - \nu_a), \quad (7.27)$$

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = n\nu_i, \quad \frac{\partial n_n}{\partial t} = n\nu_a, \quad (7.28)$$

koje su spregnute sa Poisonovom jednačinom za opis električnog polje nastalog od prostornog naelektrisanja:

$$\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \sum_i e_i n_i(\mathbf{r}, t) \quad (7.29)$$

gde se n_i odnosi na koncentraciju različitih grupa čestica. Pomenuta sprega je obezbeđena putem aproksimacije lokalnog polja koja podrazumeva da su elektroni u lokalnoj ravnoteži sa električnim poljem. Tom ravnotežom je omogućeno da transportni koeficijenti elektrona budu funkcije isključivo lokalnog električnog polja. Znajući da važi $\mathbf{E} = -\nabla_{\mathbf{r}} \phi$, jednačina (7.29) za opis električnog polja strimera (izražena preko potencijala električnog polja) postaje:

$$\nabla_{\mathbf{r}}^2 \phi = \frac{e}{\epsilon_0} (n - n_p + n_n). \quad (7.30)$$

U prethodnim jednačinama su figurisale koncentracije pozitivnih i negativnih jona u oznakama n_p i n_n , respektivno, i kolizione frekvence za jonizaciju i zahvat elektrona u oznakama ν_i i ν_a , respektivno. Dakle, jednačine (7.27), (7.28) i (7.30) su osnova klasičnog fluidnog modela (modela prvog reda) u jednoj dimenziji sa fluks podacima.

Model sa balk podacima

Pođimo od jednačine kontinuiteta

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = S(\mathbf{r}, t), \quad (7.31)$$

u kojoj figurišu koncentracija elektrona $n_e(\mathbf{r}, t)$, gustina fluksa elektrona $\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = n_e \langle \mathbf{v} \rangle$ ($\langle \mathbf{v} \rangle$ je srednja brzina elektrona) i izvorni član koji opisuje brzinu nastajanja elektrona po jedinici zapremine usled nekonzervativnih sudara $S(\mathbf{r}, t)$. Na velikom rastojanju od elektroda, izvora i ponora elektrona važe hidrodinamički uslovi. Tada se prostorno-vremenska zavisnost funkcije raspodele elektrona u faznom prostoru i ostale veličine mogu izraziti linearnim funkcionalima koncentracije elektrona. Ova zavisnost fazne funkcije raspodele i koncentracije elektrona u slučaju malih gradijenata koncentracije elektrona je poznata pod nazivom hidrodinamička aproksimacija [132]:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{f}^{(k)}(\mathbf{c}) \odot (\nabla_{\mathbf{r}})^k n(\mathbf{r}, t). \quad (7.32)$$

Članovi $\mathbf{f}^{(k)}(\mathbf{c})$ su tenzori k -tog reda dok se simbol $\odot$ odnosi na tenzorsku kontrakciju. Uz prethodnu funkcionalnu zavisnost, razvoji gustine fluksa elektrona $\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t)$ i izvornog člana $S(\mathbf{r}, t)$ (zaključno sa članovima drugog reda) postaju:

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{W}_F n(\mathbf{r}, t) - \mathbf{D}_F \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t), \quad (7.33)$$

$$S(\mathbf{r}, t) = S^{(0)} n(\mathbf{r}, t) - \mathbf{S}^{(1)} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t) + \mathbf{S}^{(2)} : \nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t). \quad (7.34)$$

Oznake $\mathbf{W}_F$ i $\mathbf{D}_F$ predstavljaju *fluks* brzinu elektrona i *fluks* difuzioni tenzor, respektivno. Kad se ova dva razvoja uvrste u jednačinu kontinuiteta (7.31), dobija se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{W}_F n(\mathbf{r}, t) - \mathbf{D}_F \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t)) \\ = S^{(0)} n(\mathbf{r}, t) - \mathbf{S}^{(1)} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t) + \mathbf{S}^{(2)} : \nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (7.35)$$

koja se može napisati i u obliku:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{W}_B n(\mathbf{r}, t) - \mathbf{D}_B \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t)) \\ = S^{(0)} n(\mathbf{r}, t) + \left(\nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{S}^{(1)} \right) n(\mathbf{r}, t) - (\nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{S}^{(2)}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (7.36)$$

u kome se javljaju *balk* brzina drifta $\mathbf{W}_B$ i *balk* difuzioni tenzor $\mathbf{D}_B$, respektivno, čija se povezanost sa odgovarajućim fluks koeficijentima izražava na način:

$$\mathbf{W}_B = \mathbf{W}_F + \mathbf{S}^{(1)}, \quad \mathbf{D}_B = \mathbf{D}_F + \mathbf{S}^{(2)}. \quad (7.37)$$

Ako se pretpostavi da važi

$$\nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{S}^{(1)} n(\mathbf{r}, t) - \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{S}^{(2)} \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t) \approx 0, \quad (7.38)$$

što je ispunjeno u homogenom električnom polju koje se javlja u toku lavinske faze razvoja strimera, jednačina (7.36) se svodi na:

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{W}_B n(\mathbf{r}, t) - \mathbf{D}_B \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t)) = S^{(0)} n(\mathbf{r}, t). \quad (7.39)$$

U pitanju je drift-difuzionna jednačina istog oblika kao (7.26) u klasičnom fluidnom modelu sa *fluks* podacima osim što u ovom slučaju u jednačini figurišu *balk* transportni koeficijenti. Iako je oblik ovih jednačina isti, postoji suštinska razlika između fluidnog modela koji koristi *fluks* koeficijente (7.27) i modela sa *balk* koeficijentima (7.39). Ova razlika potiče od prirode *fluks* i *balk* transportnih koeficijenata elektrona koja je, kao što to pokazuje jednačina (7.37), indukovana prisustvom nekonzervativnih sudara.

Sprega jednačina (7.39) i (7.29) uz aproksimaciju lokalnog polja predstavlja osnovu klasičnog 1-dimenzionog fluidnog modela sa *balk* podacima. Za izračunavanje koncentracije jona se koristi jednačina (7.28). Vrednost izvornog člana $S^{(0)}$ će biti određena u narednom potpoglavlju.

7.4.2 Korigovan 1-dimenzioni fluidan model

Pri izvođenju jednačina klasičnog fluidnog modela sa *balk* podacima, uvedena je pretpostavka (7.38) koja važi samo u slučaju homogenog električnog polja. Ukoliko je polje nehomogeno, što se javlja u strimerima, za izračunavanje koncentracije elektrona se koristi jednačina (7.36). Fluidan model koji se zasniva na ovoj jednačini se naziva *korigovan fluidan model* pošto se razlikuje od klasičnog modela upravo po korekcijama u izvornom članu. Pored pomenute jednačine, osnovu ovog modela čini i jednačina (7.28) za izračunavanje koncentracije jona. Obe navedene jednačine su spregnute sa jednačinom (7.30) za opis električnog polja.

Neka se korigovan model zasniva na jednačini (7.35). Pored *fluks* transportnih koeficijenata, potrebno je poznavati i korekcije $\mathbf{S}^{(k)}$ koje se javljaju u razvoju izvornog člana. Ukoliko se ovi koeficijenti, prema jednačini (7.37), izračunaju kao razlika *balk* i *fluks* transportnih koeficijenata elektrona, onda se njihova brojna vrednost odnosi na ukupan doprinos nekonzervativnih sudara. Ukoliko je potrebno da se pojedinačno prati koncentracija pozitivnih i negativnih jona

ovi koeficijenti se razdvajaju na one koje se odnose na doprinos jonizacije $\mathbf{S}_i^{(k)}$ i doprinos zahvata $\mathbf{S}_a^{(k)}$.

Na osnovu definicije izvornog člana

$$S(\mathbf{r}, t) = \int (\nu_i - \nu_a) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}), t d\mathbf{v}, \quad (7.40)$$

u kojoj figurišu kolizione frekvence za jonizaciju ν_i i zahvat elektrona ν_a , kao i na osnovu hidrodinamičkog razvoja funkcije raspodele (7.32), izvorni član se zapisuje u obliku:

$$S(\mathbf{r}, t) = S_i(\mathbf{r}, t) - S_a(\mathbf{r}, t), \quad (7.41)$$

pri čemu se, uz oznake $m = i, a$ i $\mathbf{r}^* = \mathbf{r} - \langle \mathbf{r} \rangle$, pojedinačni članovi definišu na sledeći način:

$$S_m(\mathbf{r}, t) = S_m^{(0)} n(\mathbf{r}, t) - \mathbf{S}_m^{(1)} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t) + \mathbf{S}_m^{(2)} : \nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t), \quad (7.42)$$

$$S_m^{(0)} = \langle \nu_m \rangle, \quad (7.43)$$

$$\mathbf{S}_m^{(1)} = \langle \nu_m \mathbf{r}^* \rangle, \quad (7.44)$$

$$\mathbf{S}_m^{(2)} = \frac{1}{2} \langle \nu_m (\mathbf{r}^* \mathbf{r}^* - \langle \mathbf{r}^* \mathbf{r}^* \rangle) \rangle. \quad (7.45)$$

Ovde je neophodno istaći sledeće: za razliku od modela sa *fluks* podacima (7.27), model sa *balk* podacima predstavlja (7.39) dobru aproksimaciju korigovanog fluidnog modela čak i u prisustvu nekonzervativnih procesa ukoliko je zadovoljen uslov (7.38).

7.4.3 Klasičan 1.5-dimenzioni fluidan model

Kao što je pomenuto, u fluidnim modelima u 1.5-dimenziji se jednačina kontinuiteta rešava u jednodimenzionom slučaju. Smatrajmo da se elektroni kreću duž ose polja $\mathbf{E} = E \vec{e}_x$ pri čemu je $\vec{e}_x$ jediničan vektor x-ose. U jednoj dimenziji, jednačina (7.27) ima oblik:

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(W \operatorname{sgn}(E) n(x, t) + D_L \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} \right) + (\nu_i - \nu_a) n(x, t). \quad (7.46)$$

Brzina drifta elektrona je definisana kao pozitivna veličina dok se $\operatorname{sgn}(E)$ odnosi na signum funkciju. Sve veličine koje se javljaju u ovoj jednačini su date u funkciji intenziteta električnog polja $|E(x, t)|$. Koncentracije pozitivnih i negativnih jona se izračunavaju jednačinama

$$\frac{\partial n_p(x, t)}{\partial t} = n(x, t) \nu_i, \quad \frac{\partial n_n(x, t)}{\partial t} = n(x, t) \nu_a, \quad (7.47)$$

koje podrazumevaju stacionarnost ovih čestica. Ova pretpostavka je opravdana imajući u vidu da je pokretljivost jona manja za dva do tri reda veličine u odnosu na elektrone.

Što se tiče električnog polja, spomenuto je da se u 1.5-dimenzionom fluidnom modelu ono izračunava u dve dimenzije. Smatrajmo stoga da se prostorno naelektrisanje nalazi unutar cilindra poluprečnika R_0 čija osa odgovara x-osi koordinatnog sistema. Pri tome se smatra da koncentracija elektrona i jona ne zavisi od radijalne koordinate ni azimutalnog ugla već samo od aksijalne koordinate x . U ovakvoj konfiguraciji, električno polje duž x-ose ima vrednost [229]:

$$E(x, t) = E_0 + \frac{e_0}{2\epsilon_0} \int_0^d (n_p(x', t) - n_n(x', t) - n(x', t)) \cdot \left(\operatorname{sgn}(x - x') - \frac{x - x'}{\sqrt{(x - x')^2 + R_0^2}} \right) dx', \quad (7.48)$$

pri čemu se E_0 , d , e_0 i ϵ_0 odnose na spoljašnje električno polje, rastojanje među elektrodama, elementarno naelektrisanje i permitivnost vakuumu, respektivno.

Koncentracije elektrona i jona se izračunavaju iz jednačina (7.46) i (7.28) uz Dirihletov (engl. Dirichlet) graničan uslov za elektrone:

$$n(x=0, t) = 0, \quad n(x=d, t) = 0, \quad (7.49)$$

i početne uslove za elektrone i jone:

$$n(x, t=0) = \frac{N_0}{\pi R_0^2 \sigma_0 \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma_0^2}\right), \quad (7.50)$$

$$n_p(x, t=0) = n(x, t=0), \quad n_n(x, t=0) = 0. \quad (7.51)$$

N_0 se odnosi na početan broj elektrona Gausove raspodele centrirane u x_0 . Za numeričku diskretizaciju prostornih izvoda se koriste centralne konačne razlike drugog reda dok se za vremensku integraciju primenjuje klasična Runde-Kuta 4 šema četvrtog reda (engl. *Runde – Kutta*). Za ovaj numerički metod postoje najmanje dva potrebna uslova stabilnosti za vremenski korak [230]:

$$\Delta t < C_a \Delta x / W \quad (\text{CFL kriterijum}), \quad (7.52)$$

$$\Delta t < C_d (\Delta x)^2 / D_L \quad (\text{granica usled difuzije}), \quad (7.53)$$

u kojima je Δx korak prostorne rešetke dok su C_a i C_d Kurantovi brojevi (engl. *Courant*) [231] koji zavise od prostorne diskretizacije i konkretne šeme za vremensku integraciju. U našim proračunima se koristi takav korak prostorne rešetke da su oba uslova zadovoljena.

7.4.4 Korigovan 1.5-dimenzioni fluidan model

Jednačine kontinuiteta za elektrone i jone u korigovanom 1.5-dimenzionom fluidnom modelu imaju oblik:

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(W_F \text{sgn}(E) n(x, t) + D_{L,F} \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} \right) + S_i - S_a, \quad (7.54)$$

$$\frac{\partial n_p(x, t)}{\partial t} = S_i, \quad \frac{\partial n_n(x, t)}{\partial t} = S_a, \quad (7.55)$$

Korekcije izvornog člana se izračunavaju na sledeći način:

$$S_m = S_m^{(0)} n(x, t) + S_m^{(1)} \text{sgn}(E) \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} + S_{L,m}^{(2)} \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2} \quad (m = i, a), \quad (7.56)$$

pri čemu se $S_m^{(0)}$ i $S_m^{(1)}$ izračunavaju na osnovu (7.43) i (7.44) dok je $S_{L,m}^{(2)}$ komponenta u pravcu električnog polja izračunava izrazom (7.45). Sistem jednačina korigovanog 1.5-dimenzionog fluidnog modela čini još i jednačina (7.48) za izračunavanje polja.

7.5 Negativni strimeri u gasovima i gasnim smešama

U ovom potpoglavlju će biti prikazani rezultati fluidnog modelovanja razvoja i propagacije strimera u različitim gasovima i gasnim smešama. Među mnoštvom rezultata, biće prikazani oni koji se odnose na CF_3I . Na njihovim primerima će biti objašnjena karakteristična generička ponašanja strimera u funkciji određenih parametara.

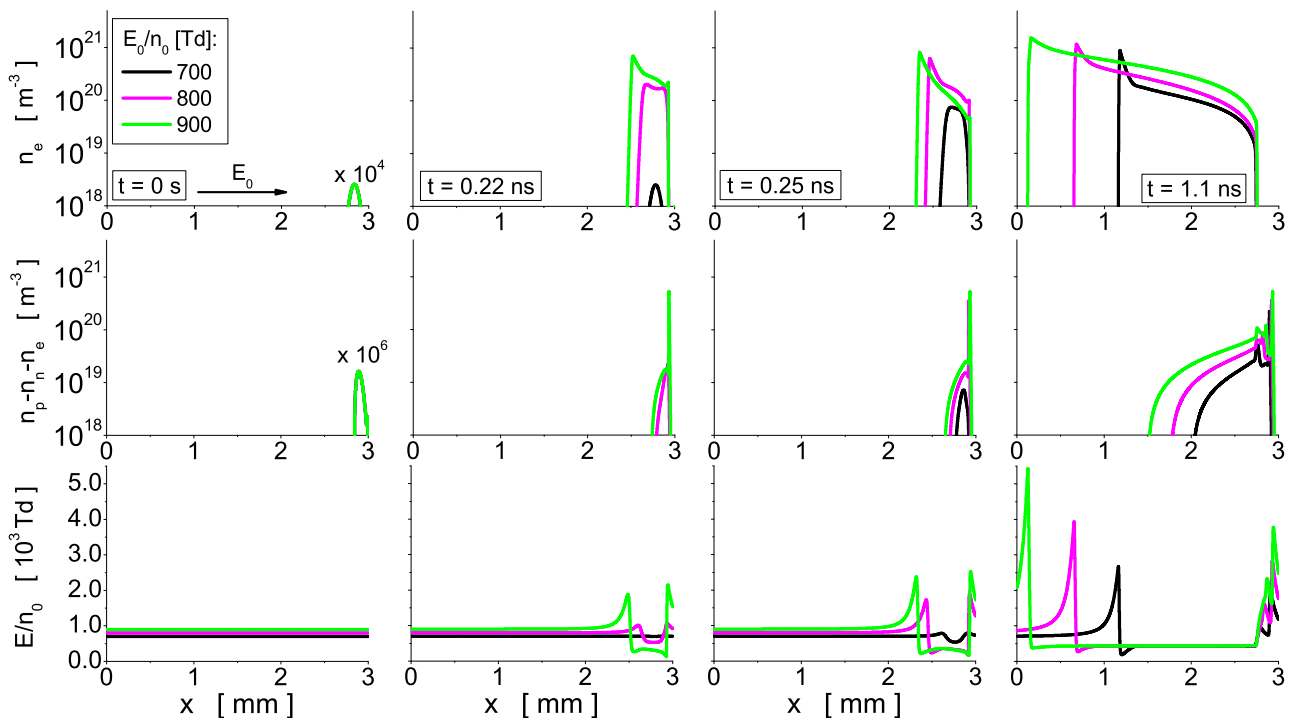
Uslovi simulacija su jedinstveni kako bi bilo moguće tumačenje rezultata u različitim gasovima i gasnim smešama. Zadato je rastojanje među elektrodama od 3 mm, poluprečnik snopa

elektrona od 0.1 mm, prostor između elektroda je podeljen na 5000 ćelija, vreme trajanja simulacije 9 ns.

U okviru rezultat koji slede, biće potrebe za čestim korišćenjem određenih fraza. Iz tog razloga će se umesto naziva "ulazni podaci dobijeni izračunavanjem transportnih koeficijenata elektrona na osnovu MC simulacija" koristiti kraći naziv "MC ulazni podaci". Pored njega, biće korišćen i naziv "TTA-BE ulazni podaci" koji ima analogno značenje. Takođe, oznaka E_0/n_0 će biti korišćena za jačinu spoljašnjeg električnog polja.

7.5.1 Razvoj i propagacija strimera u funkciji spoljašnjeg električnog polja

U ovom potpoglavlju je prikazano na koji način E_0/n_0 utiče na razvoj i propagaciju strimera. Prikazani su rezultati koji se odnose na CF_3I a koji su izračunati klasičnim fluidnim modelom u 1.5D konfiguraciji koji koristi balk vrednosti MC ulaznih podataka. Rezultati pomenute analize su prikazani na slici 7.1.



Slika 7.1: Razvoj i propagacija negativnih strimera u CF_3I u funkciji spoljašnjeg električnog polja.

Rezultati 1.5D klasičnog fluidnog modela uz korišćenje balk transportnih koeficijenata elektrona izračunatih Monte Karlo simulacijama.

Rezultati su dobijeni pri jačini spoljašnjih električnih polja koja su za približno 60%, 83% i 106% veća od kritičnog polja ovog gasa (437 Td), respektivno. Odabrane su vrednosti E_0/n_0 koje su veće od kritičnog polja ovog gasa kako bi se obezbedili uslovi za razvoj strimera čija se propagacija prati. Smer spoljašnjeg električnog polja je označen na slici što znači da se negativni strimeri kreću sa desna (katoda) na levo (anoda).

Slika 7.1 prikazuje uporedne rezultate koncentracije elektrona, ukupnog naelektrisanja (definisano razlikom koncentracije pozitivnih jona i sume koncentracija negativno naelektrisanih čestica) i električnog polja unutar lavine elektrona odnosno strimera. Rezultati koji se odnose na nulti vremenki trenutak su potpuno očekivani: koncentracija svih čestica ima oblik Gausijana dok je polje neperturbovano odnosno jednako spoljašnjem električnom polju. Ovakav rezultat se dobija nezavisno od vrednosti spoljašnjeg polja.

U prvom narednom prikazanom trenutku (0.22 ns), profil koncentracija elektrona i ukupnog naelektrisanja na najmanjem polju (700 Td) i dalje ima oblik Gausijana dok je polje još uvek

neperturbovano. Sa porastom E_0/n_0 , koncentracije čestica i polje menjaju svoje profile. Na 800 Td se uočava porast koncentracije elektrona u lavini i modifikacija profila ove veličine. Na najvišem ispitivanom polju (900 Td) je potpuno formiran strimer koji se odlikuje karakterističnim profilom obeleženim zelenom krivom. Dok inicijalan Gausijan raste usled jonizacije, javlja se razdvajanje naelektrisanja unutar strimera kao posledica kretanja naelektrisanja suprotnog znaka u suprotnim smerovima. Stvara se unutrašnje električno polje čime ukupno polje, koje je homogeno na početku simulacije, postaje zaklonjeno. Ovo se upravo vidi u profilu polja: E/n_0 opada unutar strimera dok se na frontu i začelju javlja pojačanje polja koje je karakteristično za fluidne modele u 1.5D konfiguraciji. Polje u strimerskom kanalu opada na vrednost kritičnog polja ovog gasa (437 Td) dok je dvostruko povećano na frontu. Sporiji elektroni se nalaze u delu strimera koji je bliži katodi. Srednja energija ovih elektrona pripada oblast u kojoj dominira proces zahvata elektrona a dovoljno je daleko od praga za jonizaciju. Na taj način, u ovoj oblasti strimera nestaju niskoenergijski elektroni što se uočava u profilu koncentracije ovih čestica kao i u profilu ukupnog naelektrisanja.

U sledećem vremenskom trenutku (0.25 ns), lavina elektrona i jona je transformisana u strimer i pri jačini spoljašnjeg polja od 800Td. Nakon 1.1 ns od početka simulacije, strimer je razvijen i pri najnižem ispitivanom polju. Polje u kanalu opada na vrednost 437 Td u slučaju sve tri vrednosti E_0/n_0 dok je polje na frontu strimera pojačano preko tri puta (pri polju od 700 Td), skoro pet puta (pri polju od 800 Td) odnosno preko šest puta (pri najvišoj vrednosti E_0/n_0). Ovo je jedan od pokazatelja da su strimeri samoodržive, u kojima se jačina polja na frontu višestruko povećava.

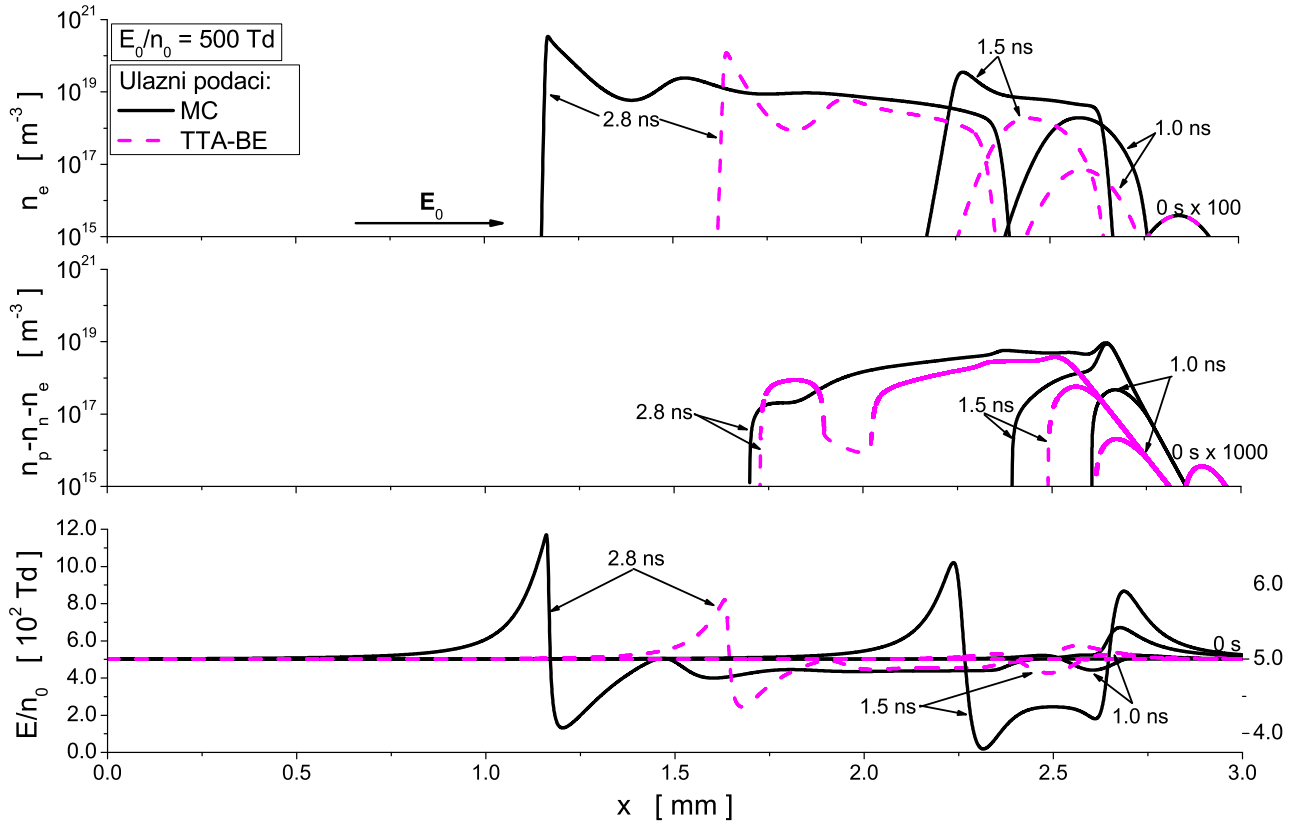
Neophodno je naglasiti da je strimerski kanal elektroneutralan u svakom vremenskom trenutku. Preciznije, ova tvrdnja je validna za oblast fronta strimera dok se na začelju strimera javlja porast koncentracije pozitivnih jona. Ova pojava, koja se vidi i u svim rezultatima koja slede, biće detaljno objašnjena u nastavku.

Dakle, na osnovu rezultata sa ove slike se zaključuje da porast E_0/n_0 utiče na brži razvoj elektronske lavine u strimer. Ova je posledica snažnije jonizacije gasa sa porastom energije elektrona koju obezbeđuje spoljašnje električno polje. U kontekstu potrage za gasnim dielektrikom koji bi bio adekvatna zamena za SF_6 , na osnovu prikazane analize se zaključuje da bi CF_3I mogao da se primenjuje pri što nižim vrednostima spoljašnjeg električnog polja. Na taj način bi se teže javljala tranzicija lavine elektrona u strimer čime bi se smanjivala verovatnoća za pojavu električnog proboja u gasu i oštećenje opreme u kojoj bi CF_3I imao ulogu gasnog dielektrika.

7.5.2 Razvoj i propagacija strimera u funkciji numeričke procedure za izračunavanje ulaznih podataka

Na slici 7.2 je prikazan razvoj i propagacija strimera u CF_3I pri spoljašnjem električnom polju od 500 Td. Upoređivani su rezultati klasičnog fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji uz balk vrednosti MC i TTA-BE ulaznih podataka.

Pri ovom E_0/n_0 , koje je za približno 15% veća od kritičnog polja CF_3I , koncentracija elektrona i ukupno naelektrisanje u nultom trenutku imaju oblik Gausijana dok polje ostaje neperturbovano. Nakon 1 ns od početka simulacije, koncentracije čestica rastu za približno pet redova veličina u odnosu na one u početnom trenutku. Polje unutar lavine opada na vrednost od ~ 420 Td pri korišćenju MC ulaznih podataka odnosno ostaje nepromenjeno pri korišćenju TTA-BE ulaznih podataka. Nakon 1.5 ns od početka simulacije, broj čestica u lavini postaje još veći. Ovaj porast iznosi približno dva (TTA-BE ulazni podaci) odnosno tri reda veličine (MC ulazni podaci). Dodatno, u ovom drugom slučaju se uočava tranzicija lavine u strimer. Polje u strimerskom kanalu opada na vrednost od ~ 480 Td (TTA-BE ulazni podaci) odnosno ~ 440 Td (MC ulazni podaci). E/n_0 na frontu i začelju strimera raste za preko 20% ukoliko

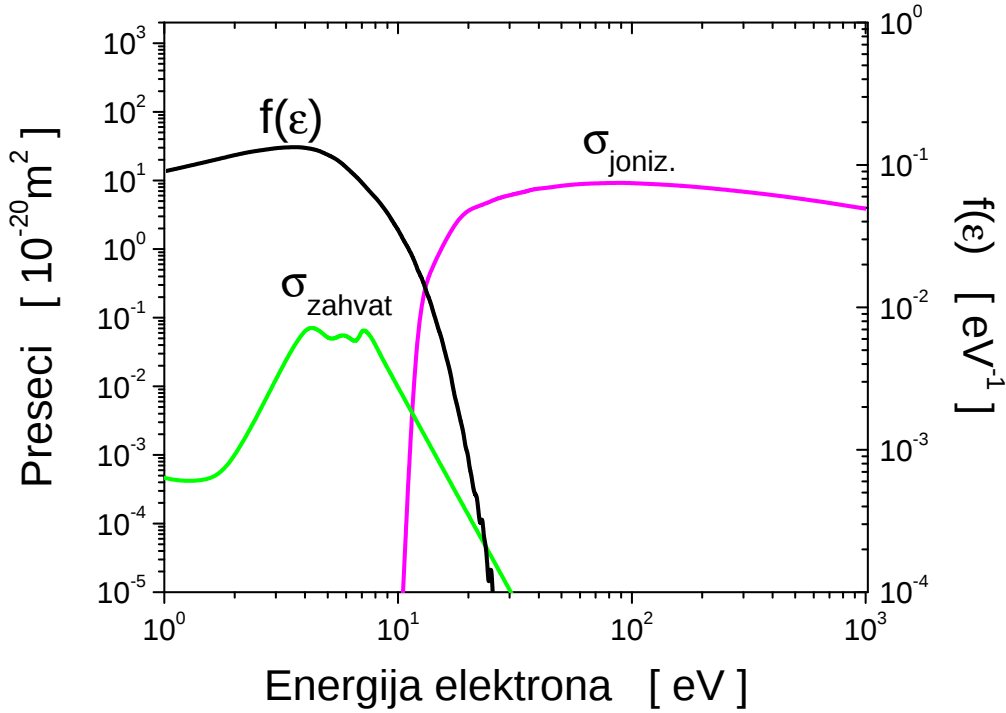


Slika 7.2: Razvoj i propagacija negativnih strimera u CF_3I pri spoljašnjem polju jačine 500 Td. Rezultati klasičnog fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji uz korišćenje balk transportnih koeficijenata elektrona izračunatih Monte Karlo simulacijama i na osnovu rešenja Bolemanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Vrednosti električnog polja sa leve ose se odnose na vremenski trenutak 2.8 ns dok se desna osa odnosi na sva tri ranija vremenska trenutka.

se koriste MC ulazni podaci dok je ovaj porast neznatan u slučaju primene TTA-BE ulaznih podataka. Nakon 2.8 ns od početka simulacije, strimer je potpuno razvijen bez obzira na numeričku tehniku kojom su izračunati transportni koeficijenti elektrona. Polje u strimerskom kanalu opada na vrednost od ~ 450 Td (TTA-BE ulazni podaci) odnosno na vrednost 437 Td što je jednako vrednosti kritičnog polja ovog gasa (MC ulazni podaci). Pojačanje polja za preko 60% (TTA-BE ulazni podaci) odnosno za preko 100% (MC ulazni podaci) je vidljivo na frontu i začelju strimera.

Na srednjem panelu slike 7.2 je prikazano ukupno naelektrisanje u različitim vremenskim trenucima. Na začelju lavine i strimera se uočava veliki višak pozitivnog naelektrisanja čija se pojava može objasniti na osnovu funkcije raspodele energije elektrona i preseka $Q_{joniz.}$ i Q_{zahvat} (slika 7.3). Visokoenergijski elektroni sa začelja funkcije raspodele imaju dovoljno energije da učestvuju u jonizaciji CF_3I . Time nastaju spori pozitivni joni i slobodni elektroni. Ovi slobodni elektroni, čija energija može biti u rasponu od 0 eV do energije primarnih elektrona, bivaju zahvaćeni i prevedeni u negativne jone (ukoliko je njihova energija mala) ili se ubrzavaju spoljašnjim poljem (ukoliko njihova ε ne pripada energijskom intervalu u kome deluje zahvat elektorna). Ovim procesima, na frontu strimera se povećava koncentracija brzih elektrona ali i pozitivnih jona pa je plazma na frontu strimera približno elektroneutralna tj. ukupno naelektrisanje je približno jednako nuli. Sa druge strane, u blizini katode ima jako malo slobodnih elektrona (kao što se vidi na gornjem panelu slike 7.2). Time, u izrazu za ukupno naelektrisanje (srednji panel slike) figuriše mala koncentracija elektrona pa je ukupno naelektrisanje pozitivnog znaka.

Na osnovu prikazanih poređenja rezultata dobijenih korišćenjem MC i TTA-BE ulaznih podataka se zaključuje da se strimer brže razvija ukoliko se u 1.5D fluidnom klasičnom modelu



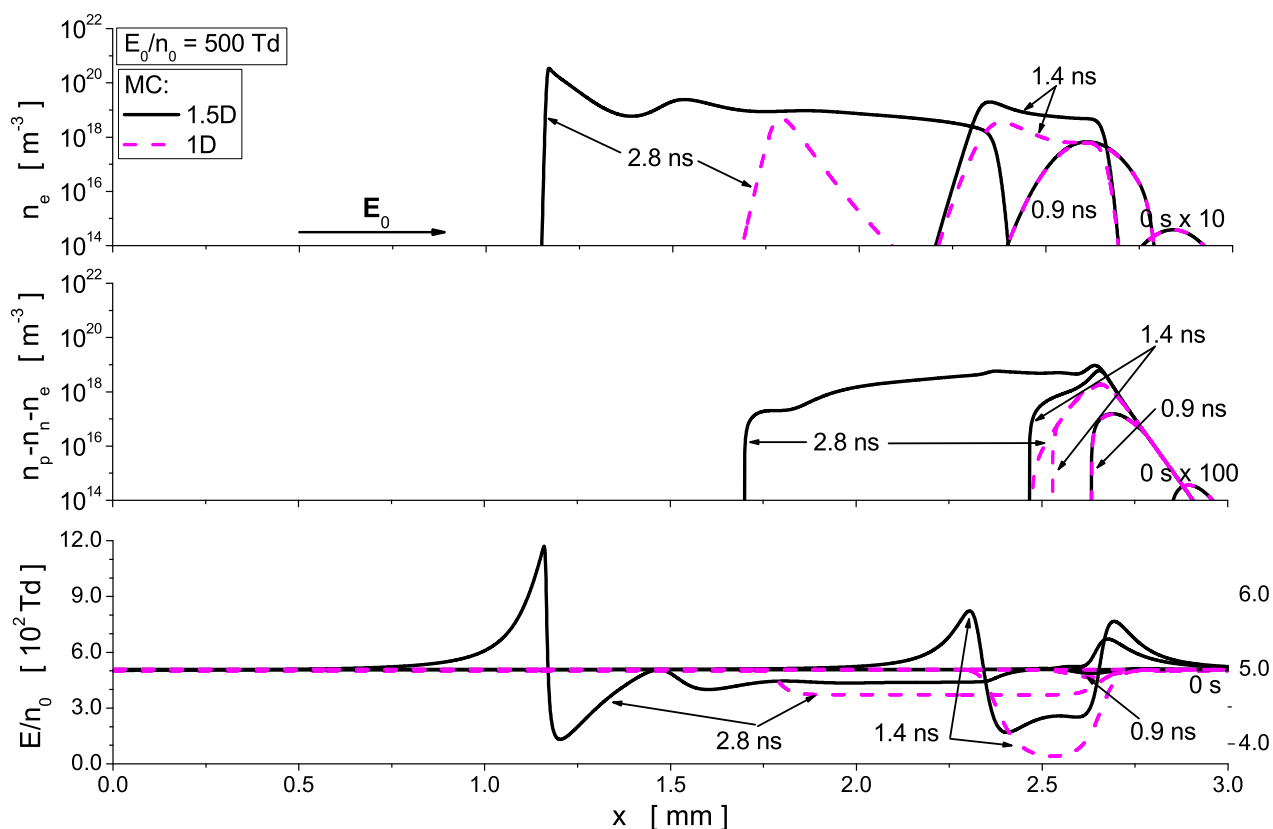
Slika 7.3: Funkcija raspodele energije elektrona u CF_3I na 500 Td upoređena sa presecima za jonizaciju i zahvat elektrona.

prvog koriste ulazni podaci izračunati MC simulacijama. Sa stanovišta ispitivanja dielektričnih osobina gasova, ova činjenica se mora uzeti u obzir kao najgori mogući scenario. U tom smislu, ukoliko se klasičnim fluidnim modelom u 1.5D konfiguraciji ispituje razvoj strimera u nekom gasu, u fluidan model je potrebno uneti MC ulazne podatke. Na osnovu dobijenih rezultata se dalje mogu izvesti zaključci o potrebnim rastojanjima među elektrodama, jačini spoljašnjeg električnog polja i drugim parametrima. Ovi parametri će definisati strožije kriterijume (u odnosu na one koji bi se izveli iz proračuna uz TTA-BE ulazne podatke) koji će obezbediti da ispitivan gas obezbedi svoju ulogu odnosno da će sprečiti razvoj strimera u uređaju u kome se koristi.

7.5.3 Razvoj i propagacija strimera u funkciji konfiguracije fluidnog modela

Ovo potpoglavlje je posvećeno isticanju razlike u rezultatima fluidnih modela koji su definisani u 1D i 1.5D konfiguraciji. Kao ulaz fluidnih modela su korišćeni balk transportni koeficijenti MC ulaznih podataka koji se odnose na CF_3I . Proračuni su vršeni pri spoljašnjem električnom polju jačine 500 Td.

Koncentracije svih čestica u 0 s (slika 7.4) imaju profil Gausijana dok je polje jednako vrednosti E_0/n_0 . Koncentracije čestica u trenutku 0.9 ns su za približno četiri reda veličine veće od koncentracija u početnom trenutku dok je njihov profil neznatno promenjen. Polje koje odgovara ovoj lavinskoj fazi je opalo za svega 4%. Nakon 1.4 ns od početka simulacije je uočljiva tranzicija lavine u strimer koja je nešto brža uoiko se koristi fluidan model u 1.5D konfiguraciji. Opisano ponašanje se vidi kako u koncentraciji elektrona tako i u profilima koji definišu ukupno naelektrisanje. Unutar još uvek neformiranog strimera, polje je opalo na ~ 440 Td u 1.5D konfiguraciji dok je na frontu poraslo za 16%. U 1D konfiguraciji, E/n_0 unutar ove strukture je opalo na vrednost od ~ 370 Td. Strimer je potpuno razvijen u obe konfiguracije u najkasnijem prikazanom vremenskom trenutku (2.8 ns). Koncentracija elektrona je za približno



Slika 7.4: Razvoj i propagacija negativnih strimera u CF_3I u pri spoljašnjem polju jačine 500 Td.

Poređenje rezultata klasičnog fluidnog modela u 1D i 1.5D konfiguraciji uz korišćenje balk transportnih koeficijenata elektrona izračunatih Monte Karlo simulacijama. Vrednosti električnog polja sa leve ose se odnose na vremenski trenutak 2.8 ns dok se desna osa odnosi na sva tri ranija vremenska trenutka.

šest redova veličine veća od one u 0 s. E/n_0 u strimerskom kanalu u 1.5D konfiguraciji opada na vrednost od 437 Td, što se poklapa sa kritičnim poljem CF_3I , dok je polje na frontu strimera poraslo za preko 100% u odnosu na vrednost spoljašnjeg polja. Fluidan model u 1D konfiguraciji daje nižu vrednost polja u strimerskom kanalu, ~ 370 Td.

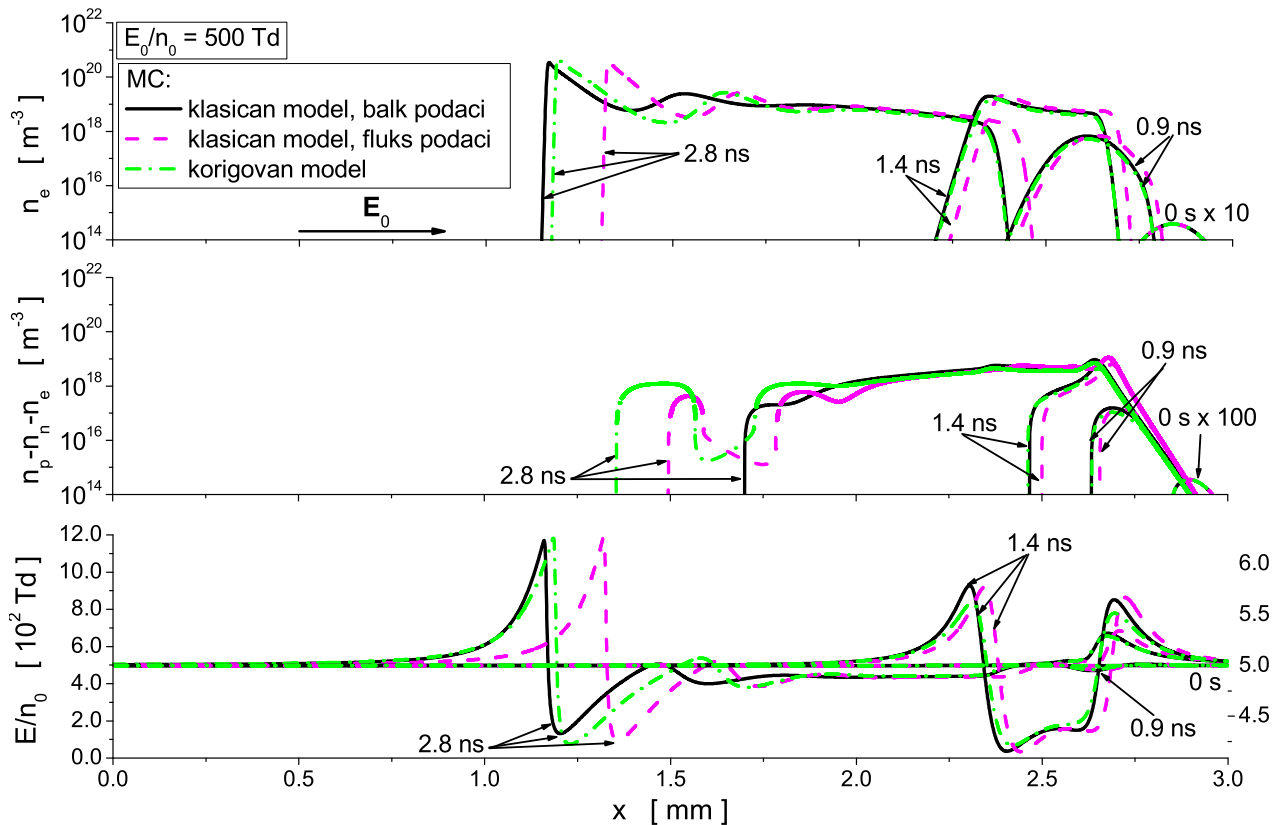
Važno je naglasiti da se u mnogobrojnim simulacijama propagacije strimera u gasovima dobija da je polje u strimerskom kanalu potpuno zaklonjeno (odnosno jednako nuli) ukoliko se koristi klasičan fluidan model u 1D konfiguraciji. Međutim, sva pomenuta istraživanja su bila posvećena gasovima koji se ne odlikuju velikom elektronegativnošću. U slučaju CF_3I , čije $(E/n_0)_{lim}$ iznosi 437 Td (veće od kritičnog polja SF_6 za približno 20%), 1D modelom se dobija nenulta vrednost polja u strimerskom kanalu. Preciznije rečeno, ne samo da je polje veće od nule već je niže od kritičnog polja CF_3I . Razlog ove pojave je sledeći. Brzi elektroni driftom i difuzijom dospevaju na front strimera gde, svojim naelektrisanjem, utiču na smanjenje polja na frontu strimera. Pozitivni i negativni joni se sporo kreću ka odgovarajućim elektrodama ali, usled ukupnog bliskog naelektrisanja ovih jona, njihov uticaj na promenu polja u strimerskom kanalu je skoro zanemarljiv. Time, na E/n_0 u strimerskom kanalu utiče samo nagomilano negativno naelektrisanje u blizini anode čime je ovo polja samo delimično ekranirano prostornim naelektrisanjem.

Fluidnim modelom u 1.5D konfiguraciji se dobija da polje u strimerskom kanalu dobija vrednost kritičnog polja.

Upoređujući rezultate koji se dobijaju modelima u 1D i 1.5D konfiguraciji se uočava da se strimer brže razvija i kreće u drugoj pomenutoj konfiguraciji. Nakon 2.8 ns od početka simulacije, strimer u 1.5D konfiguraciji prelazi rastojanje od 1.85 mm (strimer se kreće sa desne

strane slike ka levoj) dok u 1D konfiguraciji, za isto vreme, strimer prelazi rastojanje koje je kraće za ~ 1 mm. Ukoliko želimo da budemo sigurni da ispitivan gas ima adekvatne dielektrične osobine po pitanju onemogućavanja razvoja strimera, onda se fluidni proračuni moraju vršiti u 1.5D konfiguraciji. Na osnovu njih, kao jedan od radnih parametara gasa će se navesti ono rastojanje među elektrodama koje ne omogućava tranziciju lavine elektrona u strimer.

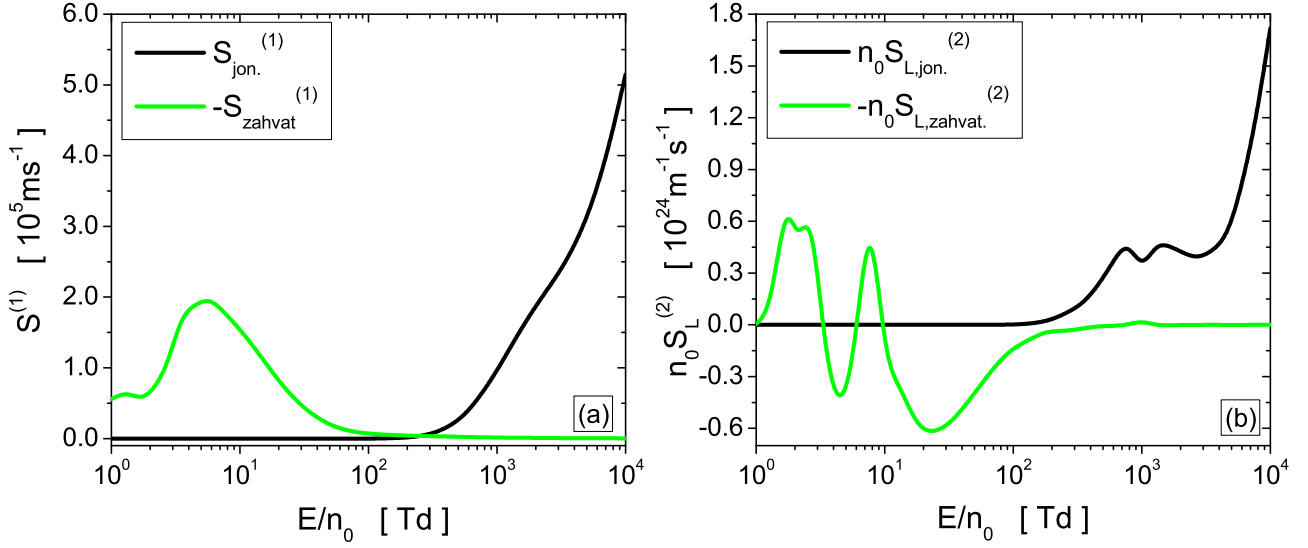
7.5.4 Razvoj i propagacija strimera u funkciji fluidnih modela



Slika 7.5: Razvoj i propagacija negativnih strimera u CF_3I u pri spoljašnjem polju jačine 500 Td. Rezultati klasičnog fluidnog modela sa balk i fluks podacima i rezultati korigovanog fluidnog modela. Ulazni podaci su izračunati Monte Karlo simulacijama dok su fluidni modeli u 1.5D konfiguraciji. Vrednosti električnog polja sa leve ose se odnose na vremenski trenutak 2.8 ns dok se desna osa odnosi na sva tri ranija vremenska trenutka.

Na slici 7.5 je prikazano poređenje rezultata različitih fluidnih modela u 1.5D konfiguraciji. U pitanju su klasični fluidni modeli sa balk i fluks podacima i korigovan model. Pomenuti modeli koriste MC ulazne podatke. Korigovan fluidan model je konkurentan u odnosu na klasične modele u pogledu potpune kontrole nad ulaznim podacima. Naime, ne postoji jednoznačan odgovor na pitanje da li je potrebno koristiti balk ili fluks podatke u klasičnom fluidnom modelu. Generalno pravilo je da se fluks podaci koriste ukoliko je potreban precizniji proračun koncentracije elektrona u strimerskom kanalu dok se balk podaci koriste kao ulaz modela u cilju preciznijeg izračunavanja brzine fronta strimera. U korigovanom fluidnom modelu se unose balk i fluks transportni koeficijenti elektrona kao i izvorni članovi S (u nastavku nazvani S koeficijenti) koji uzimaju u obzir eksplicitan doprinos procesa jonizacije i zahvata elektrona. Na slici 7.6 su prikazni S koeficijenti koji su izračunati MC simulacijama putem izraza (7.44) i (7.45). Vidi se da je doprinos zahvata elektrona najizraženiji u oblasti niskih polja, u kojima je srednja energija elektrona niža od 2 eV (vidi grafik srednje energije elektrona u CF_3I), dok doprinos jonizacije dominira na višim E/n_0 . Upravo će ovakav doprinos različitih sudarnih

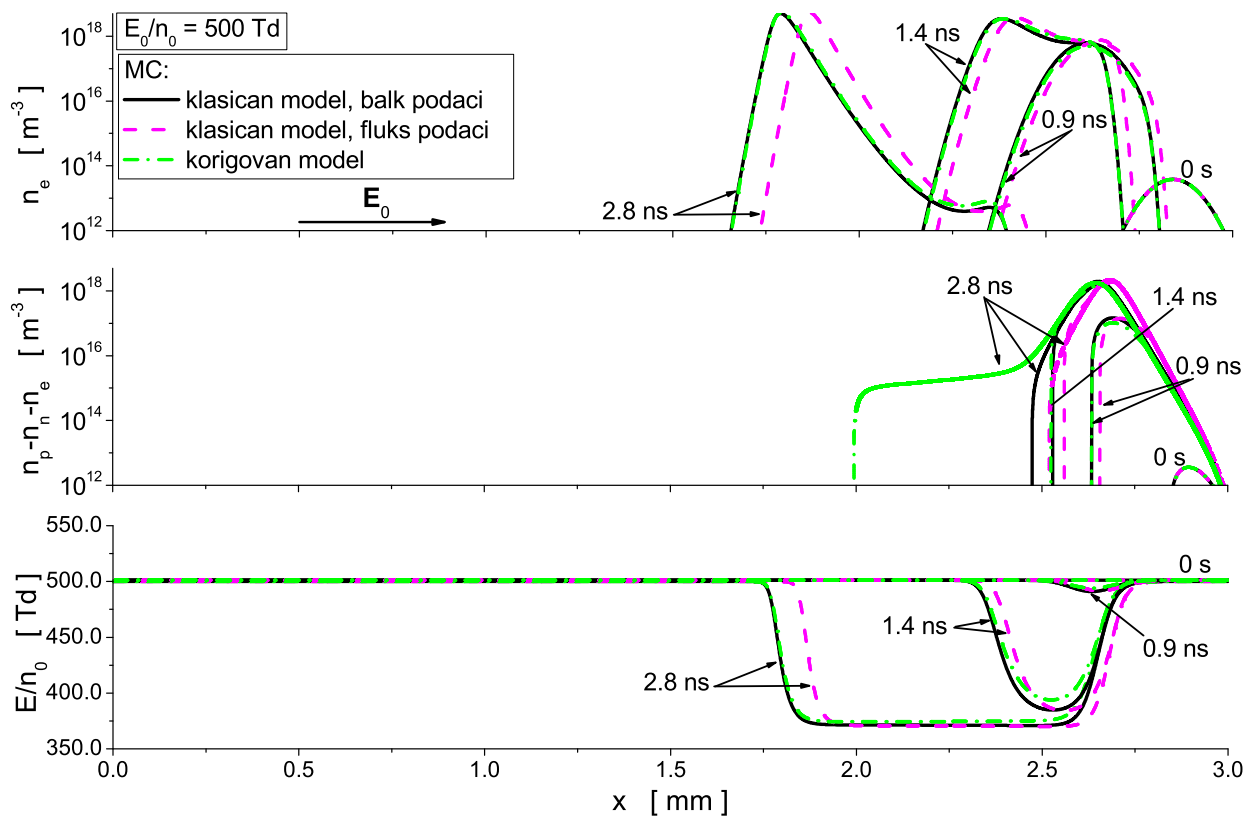
procesa u različitim oblastima polja imati uticaj na rezultate izračunate korigovanim fluidnim modelom.



Slika 7.6: Doprinosi jonizacije i zahvata elektrona S koeficijentu prvog (panel (a)) i drugog reda (panel (b)). Rezultati Monte Karlo simulacija u CF_3I .

Na slici 7.5 se vidi očekivan profil koncentracija čestica (Gausijan) i vrednost polja u 0 s (neperturbovano polje). U 0.9 ns, E/n_0 neznatno opada tj. i dalje ima vrednost blisku spoljašnjem polju dok su koncentracije elektrona porasle za približno četiri reda veličine. Srednje energije elektrona se kreću od 5 eV do 6 eV u ovom opsegu polja (vidi grafik skupa preseka iz poglavlja 4 i srednju energiju i W drifta iz poglavlja 5). U ovom intervalu energija deluje proces zahvata elektrona ali je njegov intenzitet manji od preseka za sve ostale konkurentne sudarne procese. Takođe, u ovom opsegu energija se ne odvija jonizacija pošto elektroni još uvek ne dostižu prag ovog procesa. Drugim rečima, doprinos nekonzervativnih sudara je zanemarljiv što se vidi i na slici 7.6. Kako se korigovan model ne razlikuje od klasičnog fluidnog modela sa bulk podacima u slučaju kada se doprinos nekonzervativnih sudara može zanemariti, očekivano je dobro međusobno slaganje rezultata ova dva modela. Za razliku od njih, rezultati klasičnog modela sa fluks podacima prikazuju nešto sporiji rast lavine elektrona što je, pre svega, posledica manje W_{Fluks} u odnosu na W_{Bulk} (videti grafik brzine drifta iz poglavlja 5). U narednom vremenskom trenutku (1.4 ns) lavina elektrona je promenila svoj profil: umesto oblika Gausijana, na frontu profila koncentracija čestica se generišu novi elektroni. Strimer i dalje nije formiran ali polje opada na ~ 440 Td dok na frontu ansambla elektrona polje dostiže vrednost iz opsega [560-580] Td u zavisnosti od primenjenom fluidnog modela. I u ovom vremenskom trenutku se jako dobro slažu rezultati korigovanog fluidnog modela i klasičnog modela sa bulk podacima. Model koji koristi fluks podatke daje sporiju tranziciju lavine u strimer i manji porast E/n_0 na frontu strimera. U najkasnijem prikazanom vremenskom trenutku od 2.8 ns strimeri su formirani u sva tri scenarija. Najbrži (najbliži anodi) je strimer koji odgovara rezultatima klasičnog modela sa bulk podacima, od njega je neznatno sporiji strimer koji odgovara korigovanom modelu dok najkraće rastojanje od katode prelazi strimer koji se odnosi na klasičan fluidan model sa fluks podacima. Polje u strimerskom kanalu dostiže vrednost kritičnog polja CF_3I (437 Td).

Na slici 7.7 je prikazan isti skup rezultata kao na slici 7.5 koji se, u ovom slučaju, odnosi na rezultate fluidnih modela u 1D konfiguraciji. I ovi rezultati prikazuju već uočenu pravilnost: međusobno slaganje rezultata korigovanog modela i klasičnog modela sa balk koeficijentima kao i sporiji razvoj strimera u odnosu na rezultate pomenutih modela ukoliko se proračuni vrše



Slika 7.7: Razvoj i propagacija negativnih strimera u CF_3I u pri spoljašnjem polju jačine 500 Td. Rezultati klasičnog fluidnog modela sa balk i fluks podacima i rezultati korigovanog fluidnog modela. Ulazni podaci su izračunati Monte Karlo simulacijama dok su fluidni modeli u 1D konfiguraciji.

klasičnim modelom sa fluks podacima. Polje u strimerskom kanalu opada na vrednost 371 Td (klasičan model sa balk podacima), 370 Td (klasičan model sa fluks podacima) odnosno 374 Td (korigovan model).

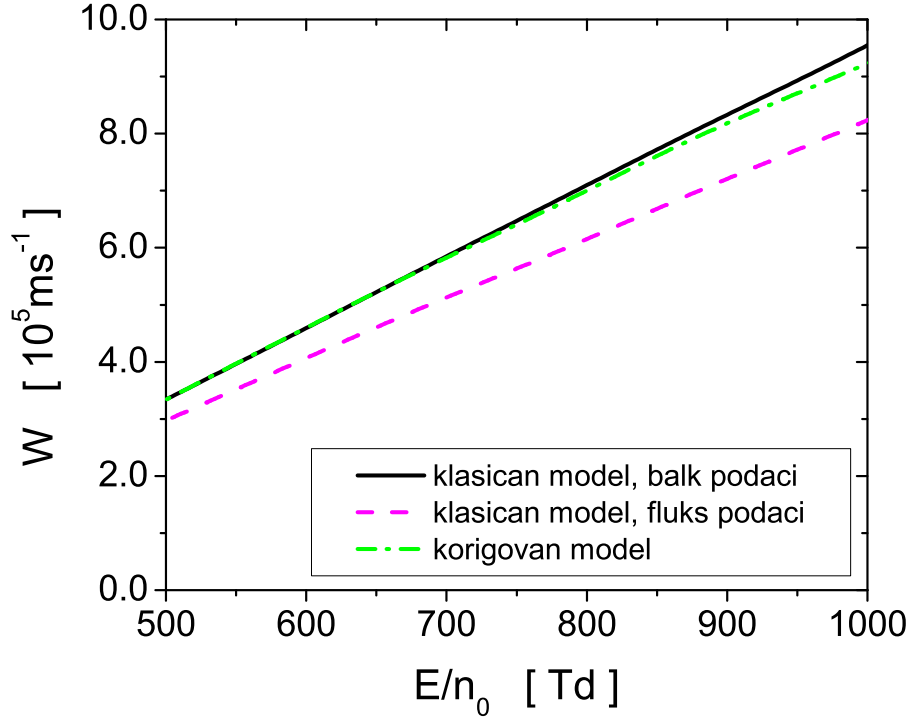
Kao što je već pomenuto, jedna od osnovnih karakteristika gasnog dielektrika je onemogućavanje razvoja i propagacije strimera u sredini u kojoj se primenjuje. Na osnovu rezultata sa prethodno pomenutih slika se može utvrditi koje je dozvoljeno rastojanje između elektroda u cilju zadovoljavanja prethodne karakteristike. Kako se najbrži razvoj i propagacija strimera dobijaju klasičnim fluidnim modelom sa balk podacima, upravo na ovom modelom određuje dozvoljeno međuelektrodno rastojanje.

7.5.5 Brzina fronta strimera u čistom jako elektronegativnom gasu

Na slici 7.8 je prikazana brzina fronta strimera u CF_3I u funkciji E/n_0 . U pitanju su rezultati različitih fluidnih modela u 1D konfiguraciji u koje su uneti MC ulazni podaci. Brzina fronta strimera je izračunavana praćenjem kretanja tačke maksimuma koncentracije elektrona počevši od vremenskog trenutka u kome se ustaljuje oblik profila ove veličine.

Pre svega, sa slike se vidi da je brzina fronta strimera rastuća funkcija električnog polja bez obzira na fluidan model na osnovu čijih rezultata je izračunata. Razlog ove zavisnosti od polja se objašnjava porastom brzine difta elektrona i $n_0 D_L$ sa E/n_0 koja je odgovorna za kretanje ansambla elektrona (slike iz poglavlja 5).

Brzina fronta strimera izračunata na osnovu rezultata klasičnog fluidnog modela sa balk podacima se poklapaju sa rezultatima korigovanog modela sve do 800 Td nakon čega je maksimalna razlika ova dva rezultata približni 4%. Brzina fronta strimera izračunata klasičnim modelom sa fluks podacima je niža od pomenutih brzina za (12-16)% u opsegu polja prikazanih



Slika 7.8: Brzina fronta strimera u funkciji električnog polja u CF_3I izračunata na osnovu rezultata fluidnog modelovanja u 1D konfiguraciji. Poređenje rezultata različitih fluidnih modela čiji su ulazni podaci transportni koeficijenti elektrona izračunati Monte Karlo simulacijama.

na slici. Ovakav odnos brzina fronta strimera je očekivan na osnovu rezultata sa slike 7.7.

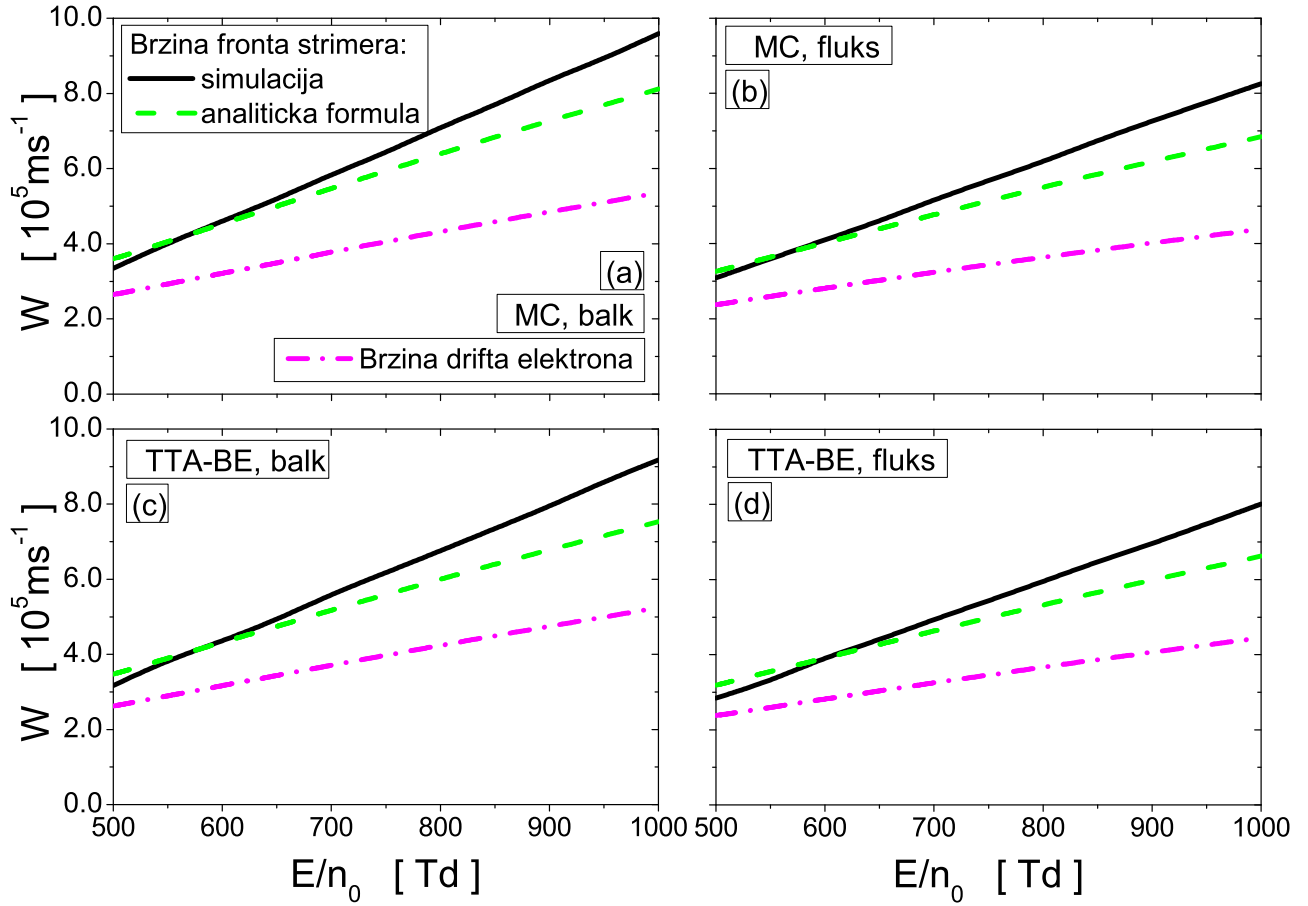
Na slici 7.9 je prikazno poređenje brzine fronta strimera i brzine drifta elektrona u CF_3I u funkciji E/n_0 . Rezultati su izračunati klasičnim fluidnim modelima na osnovu različitih ulaznih podataka (balk ili fluks, kao što je obeleženo na svakom panelu slike) koji su izračunati označenom numeričkom tehnikom (MC, TTA-BE). Pored već opisanog načina, brzina fronta strimera se može izračunati i analitičkim putem [232–235]. U tu svrhu se primenjuje izraz

$$W = \mu(E)|E| + 2\sqrt{D_L(E)\mu(E)|E|\alpha(E)}, \quad (7.57)$$

u kome je brzina fronta strimera obeležena oznakom W , μ je mobilnost elektrona, E je jačina električnog polja, D_L je longitudinalan koeficijent difuzije dok je α Taunsendov koeficijent jonizacije.

Sa slike 7.9 se vidi da brzina fronta strimera izračunata jednačinom (7.57) odstupa od brzine fronta koja je izračunata na osnovu rezultata fluidnog modela. Ono se kreće od 7% na najnižim do 18% na najvišim prikazanim poljima. Jedan od razloga ovog odstupanja je primenljivost analitičke formule. Dodatno, za razliku od indijuma [236] u kome je međusobno odstupanje brzina fronta strimera manje od 5% u prikazanom opsegu polja, CF_3I je jako elektornegativan gas što predstavlja dodatan razlog za neadekvatnost primene analitičke jednačine (7.57).

Uporedimo rezultate dobijene istom numeričkom tehnikom, na primer MC simulacijama, koji se odnose na različitu prirodu transportnih koeficijenata elektrona (paneli (a) i (b)). Sa ovih panela se vidi da brzine fronta strimera kao i brzine drifta elektrona imaju veće vrednosti ukoliko su ovom tehnikom izračunati balk transportni koeficijenti elektrona. Razlike između balk i fluks rezultata, kako brzina fronta strimera tako i brzine drifta elektrona, se kreću od 8% na najnižem polju do 16% na najvišem prikazanom polju. Isti odnos odgovarajućih skupova rezultata se dobija i u slučaju poređenja balk i fluks rezultata izračunatih TTA-BE numeričkom



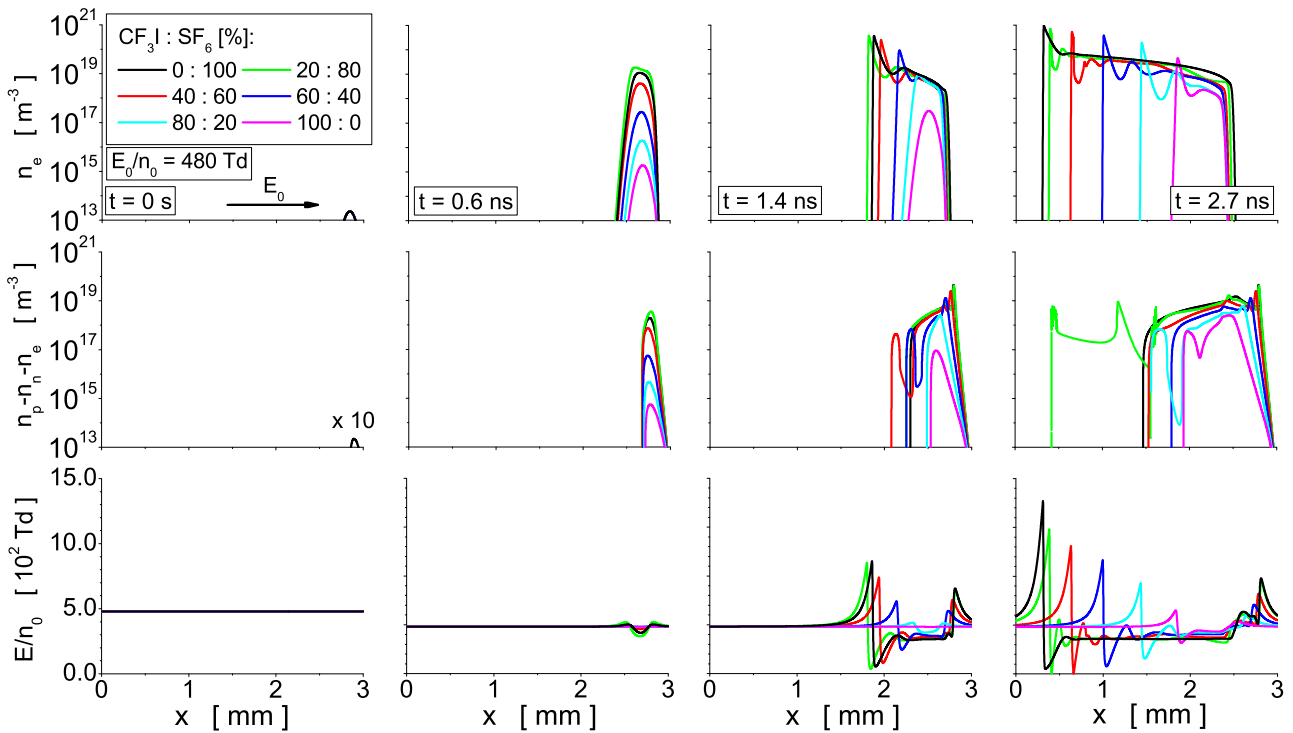
Slika 7.9: Brzina fronta strimera u funkciji električnog polja u CF_3I izračunata na osnovu rezultata klasičnog fluidnog modela u 1D konfiguraciji. Ulazni podaci su različiti skupovi podataka kao što je označeno na panelima slike. Radi poređenja su prikazane i brzine fronta strimera izračunate analitičkom formulom kao i brzine drifta elektrona. Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na ostale panele.

tehnikom (paneli (c) i (d)). Ovakav odnos između brzina fronta strimera izračunatih balk i fluks ulaznim podacima je očekivan na osnovu propagacija strimera sa slike 7.7.

Uporedimo rezultate dobijene različitim numeričkim tehnikama koji se odnose na istu prirodu podataka, npr. balk (paneli (a) i (c)). Razlike između odgovarajućih brzina fronta strimera i brzina drifta elektrona iznose svega 5% u korist balk podataka u celokupnom prikazanom opsegu polja. Slična razlika se javlja i kod fluks podataka (paneli (b) i (d)). Odnos odgovarajućih skupova rezultata je očekivan na osnovu propagacija strimera sa slike 7.2. Iako ova slika prikazuje rezultate u 1.5D konfiguraciji, na osnovu odnosa rezultata u 1.5D i 1D konfiguraciji sa slike 7.4 znamo da će se i u 1D konfiguraciji strimeri brže razvijati i propagirati ukoliko se koriste MC ulazni podaci umesto TTA-BE podataka.

Na svakom od panela slike 7.9 se vidi da je brzina fronta strimera veća od brzine drifta elektrona bez obzira na numeričku tehniku korišćenu pri izračunavanju transportnih koeficijenata elektrona a ni prirodu transportnih koeficijenata (balk ili fluks). Pomenuta razlika je u opsegu od približno 25% na najnižim poljima do čak 80% na najvišim prikazanim električnim poljima. Ovo je jedna od karakteristika strimera u neutralnim gasovima [228, 237, 238] i atomskim tečnostima [141]. Brzina fronta strimera je određena kako brzinom drifta elektrona tako i brzinskim koeficijentom jonizacije na frontu strimera. Dodatno, strimer se kreće i usled snažne koja se javlja usled velikog gradijenta gustine elektrona na frontu strimera.

7.5.6 Razvoj i propagacija strimera u funkciji sastava gasne smeše



Slika 7.10: Razvoj i propagacija negativnih strimera u $\text{CF}_3\text{I-SF}_6$ u funkciji sastava smeše. Rezultati klasičnog fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji pri spoljašnjem polju jačine 480 Td. Ulazni podaci su balk transportni koeficijenti elektrona izračunati Monte Karlo simulacijama. Oznake krivih sa gornjeg levog panela se donose i na ostale panele.

Na slici 7.10 je prikazan razvoj i propagacija strimera u $\text{CF}_3\text{I-SF}_6$ u funkciji sastava gasne smeše. U pitanju su rezultati klasičnog fluidnog modela sa balk podacima koji su izračunati MC simulacijama. U cilju prikazivanja ovog skupa rezultata u gasovima sa različitim kritičnim poljima, kao spoljašnje polje u fluidnom modelovanju je odabrana vrednost koja je veća od $(E/n_0)_{lim}$ obe komponente smeše. U pitanju je vrednost od 480 Td koja je za $\sim 10\%$ veća od kritičnog polja CF_3I odnosno za $\sim 33\%$ veća od kritičnog polja SF_6 .

Na početku simulacije (0 s), bez obzira na sastav gasne smeše, koncentracije čestica imaju oblik Gausijana a polje unutar lavine elektrona je jednako spoljašnjem polju. Nakon 0.6 ns se primećuje porast koncentracije čestica u lavini koji je intenzivniji sa povećanjem koncentracije SF_6 u smeši. Ovaj porast koncentracija iznosi od tri reda veličine do skoro šest redova veličine u odnosu na koncentraciju na početku simulacije. Prema trendu rezultata bi se očekivalo da je koncentracija čestica najveća u čistom SF_6 . Međutim, kako ovaj i naredni vremenski trenutak od 1.4 ns predstavljaju tranzijentan proces (proces tranzicije iz lavine u strimer), smeša sa 20% CF_3I i čist SF_6 odstupaju od očekivanog ponašanja. Za razliku od ovoga, u poslednjem prikazanom vremenskom trenutku (2.7 ns) u kome je strimer razvijen u svim smešama, vidi se upravo ponašanje koje je očekivano: strimer se najbrže kreće u čistom SF_6 . Ovaj rezultat je potpuno intuitivan ukoliko se zna da je kritično polje SF_6 (361 Td) manje od kritičnog polja CF_3I (437 Td).

Što se tiče E/n_0 , u trenutku 0.6 ns polje unutar lavine elektrona opada na minimalnu vrednost od 383 Td (za smešu sa 20% CF_3I) dok se u 1.4 ns, u smešama u kojima se razvio strimer, polje u strimerskom kanalu se spušta na vrednosti kritičnog polja datih smeša (videti grafik kritičnih polja u poglavlju 5). Na frontu strimera, polje je pojačano za 52% (40% SF_6 u smeši), za 102% (60% SF_6 u smeši), za 136% (80% SF_6 u smeši) odnosno za 140% (čist SF_6) u odnosu na vrednost spoljašnjeg polja. U 2.7 ns, polje u strimerskom kanalu opada na vrednost

kritičnog polja odgovarajućih smeša dok su polja na frontu strimera višestruko pojačana u odnosu na spoljašnje polje.

U cilju upoređivanja karakteristika gasova CF_3I i SF_6 , na osnovu ove slike se zaključuje da se strimer sporije razvija ukoliko opada koncentracija SF_6 u smeši. Drugim rečima, CF_3I je komponenta koja popravlja dielektrična svojstva ove smeše gasova. Pripremanjem smeša sa većom koncentracijom CF_3I u odnosu na SF_6 se sprečava pojava proboja u gasu i oštećenje opreme koja se izoluje ovom smešom gasova. Dodatno, smanjenje koncentracije SF_6 je, kao što je više puta naglašeno, poželjno zato što predstavlja srž ispitivanja novih potencijalnih gasnih dielektrika.

7.6 Zaključak

U ovom poglavlju je analiziran razvoj i propagacija negativnih strimera u jako elektronegativnim gasovima i gasnim smešama. Analiza je obavljena u svim gasovima i smešama prikazanim u prethodnim poglavljima disertacije dok su prikazani samo rezultati koji se odnose na CF_3I i njegovu smešu sa SF_6 . Ovim rezultatima je predstavljeno generičko ponašanje strimera u funkciji jačine spoljašnjeg električnog polja, ulaznih podataka, vrste fluidnog modela i njihove konfiguracije. Na osnovu prikaznih rezultata su date generalne smernice koji mogu biti od značaja pri odabiru gasova pogodnih za ulogu gasnih dielektrika i sistemima za prenošenje električne struje.

Poglavlje 8

Poređenje osobina gasova

CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ i $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ sa SF_6

8.1 Uvod

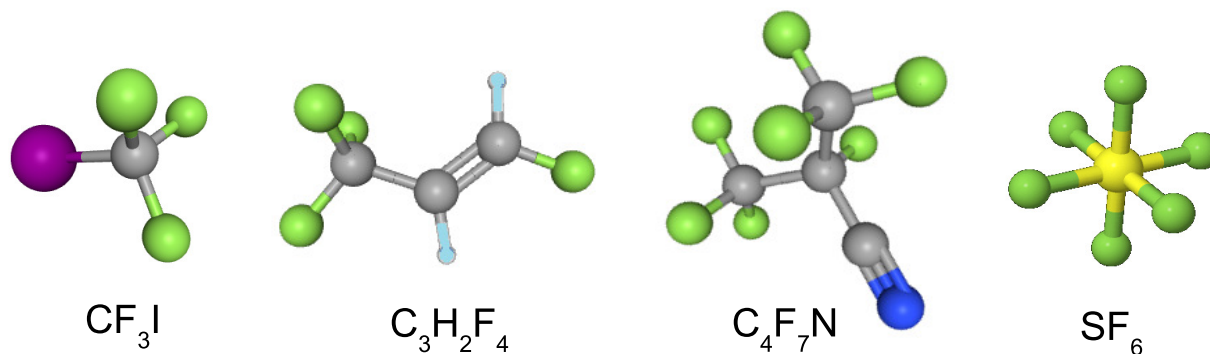
Tema ovog poglavlja je analiza gasova CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ i $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ i SF_6 iz nekoliko različitih uglova. Najpre su protumačene osobine gasova koje direktno zavise od njihove molekularne strukture i atomskog sastava. Analizirane se fizičke i hemijske osobine gasova uz predlaganje kompromisnog rešenja u cilju izdvajanja najpovoljnijeg gasa za potencijalnu zamenu SF_6 u ulozi gasnog dielektrika u sistemima za prenošenje električne struje. Na kraju poglavlja su upoređene dielektrične osobine ispitivanih gasova na osnovu rezultata simulacija razvoja i propagacija strimera u njima.

8.2 Poređenje molekularne strukture, fizičkih i hemijskim osobina gasova CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ i $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ sa SF_6

Potruga za zamenom SF_6 u ulozi gasnog dielektrika u sistemima za prenošenje električne struje je izuzetno kompleksan zadatak. Neophodno je da gasovi i njihove smeše ispunjavaju čitav spektar zahteva kako bi bili uzeti u obzir kao potencijalni kandidati za pomenutu ulogu. Jedan od zahteva se odnosi na molekularnu strukturu gasa. Različiti tipovi hemijskih veza između atoma koji ulaze u sastav gasa utiču na fizičke, hemijske, ekološke ali i dielektrične osobine gasa.

Na slici 8.1 su prikazani modeli gasova CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$, $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ i SF_6 preuzeti sa internet stranice PubChem [?]. U $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ i $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ postoji po jedna dvostruka odnosno trostruka kovalentna veza respektivno koja, kao što je pomenuto u potpoglavlju 2.4, obezbeđuje veću podložnost disocijaciji u odnosu na onu kojom su okarakterisani zasićeni gasovi (kao što su CF_3I i SF_6). Iako se nezasićeni gasovi jednostavnije uklanjaju iz atmosfere putem disocijacije, što je poželjno u ekološkom smislu, njihovo razlaganje na produkte manje mase i jednostavnije strukture ne

Oznake boja: ugljenik, fluor, jod, sumpor, vodonik, azot



Slika 8.1: Molekularna struktura gasova CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$, $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ i SF_6 . Atomi su obeleženi odgovarajućim bojama prema legendi sa slike.

znači da su novonastali molekularni gasovi benigni prema atmosferi i živim bićima. Dodatno, u opštem slučaju, atmosfersko vreme života ovih gasovitih produkata nije kraće od vremena kojim su okarakterisani inicijalni gasovi. Dakle, na osnovu molekularne strukture i atomskog sastava ispitivanih gasova se mogu dobiti podaci o gasovima koji zadovoljavaju stroge ekološke norme. Iako ovi podaci predstavljaju značajne smernice za odabir potencijanih kandidata za zamenu SF_6 u ulozi gasnog dielektrika u sistemima za prenošenje električne struje, dodatna analiza gasova obuhvata utvrđivanje njihovih fizičkih i hemijskih osobina.

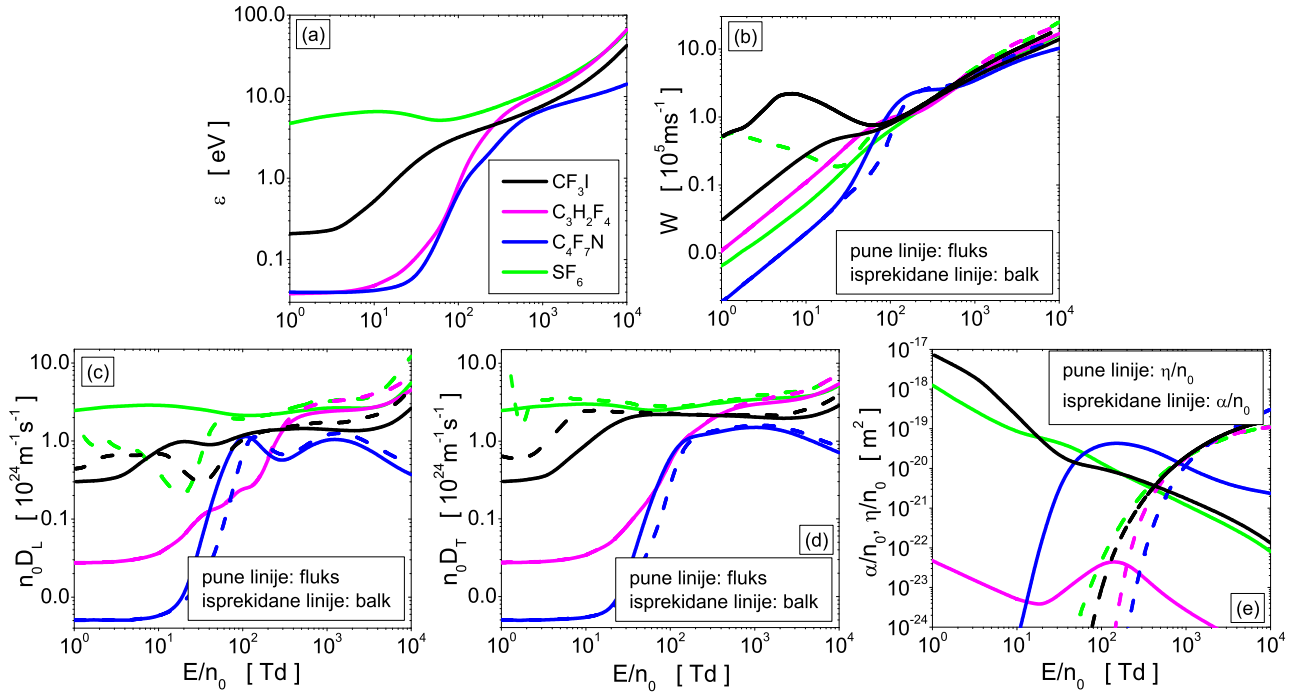
Tabela 8.1: Fizičke i hemijske osobine gasova CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$, $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ i SF_6 .

Osobine gasova	Gasovi			
	CF_3I	$\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$	$\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$	SF_6
Molekularna težina [amu]	195.91	114.04	195.04	146.06
Tačka ključanja [$^{\circ}\text{C}$ na 1 atm]	-22.5	-19.0	-4.7	-64.0
Napon pare [Torr na 21°C]	3294.3	3975.3	1900.0	16100.0
Kritično polje [Td]	437.0	193.0	969.4	361.0
GWP [ref. CO_2 , 100 god.]	0.4	6	1490-3646	22800
ODP [ref. CCl_3F]	0.07-0.5	0	0	0
Atmosfersko vreme života	1.8 d.	3 ned.	22-47 g.	3200 g.

U tabeli 8.1 su upoređene fizičke i hemijske osobine CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ i $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ sa gasom SF_6 . Potencijalan kandidat za zamenu SF_6 mora da bude u gasovitom agregatnom stanju u širokom opsegu temperatura kako bi bio primenljiv i u hladnijim podnebljima. Iz tog razloga, tačka ključanja gasa bi trebala da bude uporediva ili čak niža od vrednosti kojom se odlikuje SF_6 . Upoređujući ove vrednosti, vidi se da su tačke ključanja ispitivanih gasova više od vrednosti kojom je okarakterisan SF_6 za bar 2.8 puta. Ipak, nedovoljno niska tačka ključanja se može nadomestiti formiranjem smeša sa pogodnim gasovima. Iako SF_6 ima odgovarajuću tačku ključanja, njegov GWP faktor je za nekoliko redova veličina veći od vrednosti preostalih ispitivanih gasova što je jedan od osnovnih motiva potrage za njegovom zamenom. Isti zaključak se donosi poređenjem atmosferskih vremena života ovih gasova. Ukoliko se analiziraju kritična električna polja, uočava se da se $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ ubedljivo izdvaja od ostalih gasova. Ovaj gas zadržava svoja dielektrična svojstva odnosno sprečava razvoj strimera na tipičnim radnim uslovima koji se javljaju u sistemima za prenošenje električne struje (poglavlje 7.4.3). Ipak, ova izuzetna karakteristika $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ je u senci nedovoljno niske tačke ključanja i relativno dugog atmosfetskog vremena života. Zaključuje se da se nijedan od ispitivanih gasova ne izdvaja u odnosu

na ostale po pitanju svih ispitivanih karakteritika. Ovo je jasan pokazatelj da se potraga za zamenom SF₆ ne može svesti na posmatranje pojedinačnih karakteristika gasova već na njihovu međusobnu zavisnost koja zahteva uvođenje kompromisa u pogledu ispunjavanja različitih zahteva.

8.3 Poređenje transportnih koeficijenata elektrona u CF₃I, C₃H₂F₄, C₄F₇N sa SF₆



Slika 8.2: Transportni koeficijenti elektrona u CF₃I, C₃H₂F₄, C₄F₇N i SF₆ u funkciji E/n_0 : srednja energija elektrona (a), fluks i balk brzina drifta (b), fluks i balk longitudinalan (c) kao i transverzalni koeficijent difuzije (d), koeficijenti jonizacije α/n_0 i zahvata elektrona η/n_0 (e). Rezultati Monte Karlo simulacija uz tehniku kontinualnog reskaliranja elektrona. Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na ostale panele.

U cilju dodatne analize gasova, na slici 8.2 su međusobno upoređeni transportni koeficijenti elektrona u CF₃I, C₃H₂F₄, C₄F₇N i SF₆ u funkciji električnog polja. U pitanju su rezultati MC simulacija uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Rezultati za C₃H₂F₄ su dobijeni korišćenjem skupa preseka za rasejanje elektrona koji daje dobro slaganje sa merenjima de Urquijo i saradnika (poglavlje 5.3).

Srednja energija elektrona (panel (a)) je monotono rastuća funkcija E/n_0 kod svih gasova osim kod SF₆ u čijem profilu se uočava opadanje ε sa porastom polja diskutovano u poglavlju 5.5.2. U domenu najnižih prikazanih polja, srednja energija elektrona se razlikuje od vrednosti referentnog gasa SF₆ za 95.5% u slučaju CF₃I odnosno za približno 99% u slučaju preostala dva gasa. U domenu najviših prikazanih polja, pomenuta razlika iznosi 29.1% za CF₃I, 4.6% za C₃H₂F₄ i 77.8% za C₄F₇N.

Brzina drifta elektrona (panel b) je takođe monotono rastuća funkcija električnog polja osim kod balk brzine u CF₃I (u oblasti od približno (7-70) Td) i SF₆ (u oblasti od najnižih prikazanih polja do 25 Td) u kojima se javlja snažan NDC efekat. Na najnižim prikazanim poljima, fluks brzina drifta je najveća u CF₃I a najmanja u C₄F₇N sve do polja od približno 45 Td. Elektroni se kreću najmanjom fluks brzinom u C₄F₇N i to za 71.6% sporije od elektrona u SF₆ dok elektroni imaju veće brzine u preostala dva gasa. Na najnižem prikaznom polju, balk

brzina drifta u CF_3I je skoro izjednačena sa brzinom u referentnom gasu dok su od nje manje balk brzine drifta u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ (za 98.1%) i u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ (za 99.7%). Na poljima višim od približno 500 Td, ni balk ni fluks brzine drifta elektrona u ova četiri gasa ne odstupaju jedne od drugih u značajnijoj meri.

Panel (c) slike 8.2 prikazuje poređenje fluksa i balka longitudinalnog koeficijenta difuzije u ispitivanim gasovima u funkciji E/n_0 . Uočljiva je komplikovana zavisnost od polja kako kod fluksa tako i u balk koeficijenta. Ukoliko upoređujemo fluks koeficijente na najnižim i najvišim prikazanim poljima, elektroni najbrže difunduju u pravcu polja ukoliko se kreću u referentnom gasu SF_6 dok su najsporiji u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$. Na najnižim poljima, sporija od ove je difuzija u CF_3I (za 87.4%), nakon nje sledi difuzija u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ (za 98.9%) pa u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ (za 99.8%). $(n_0 D_L)_{\text{Fluks}}$ u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ na najvišem prikazanom polju je jednaka onoj u referentnom gasu dok je od nje manja difuzija u CF_3I (za 48.2%) i u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ (za 92.9%). $(n_0 D_L)_{\text{Balk}}$ je takođe najveća u referentnom gasu kako na najnižem tako i na najvišem prikazanom polju. U oblasti najviših polja, balk komponente nadjačavaju odgovarajuće fluks komponente za prosečno 40%. Na najnižim poljima, balk i fluks $n_0 D_L$ su izjednačeni u gasovima $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ i $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$.

Transverzalni koeficijent difuzije, prikazan na panelu (d), se ponaša jako slično koeficijentu $n_0 D_L$. Dodatno, posmatrajući najnižu oblast prikazanih polja, vidi se da su fluks transverzalni difuzioni koeficijenti skoro izjednačeni sa svojim odgovarajućim fluks longitudinalnim koeficijentima usled čega se može smatrati da je fluks difuzija prostorno izotropna u svakom od ova četiri gasa u oblasti termalnih energija.

Na panelu (e) su prikazani koeficijenti jonizacije i zahvata elektrona. Koeficijent η/n_0 opada sa porastom polja kod CF_3I i SF_6 . U srednjem opsegu polja je primetan suprotan trend ovog koeficijenta kod $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ nastao dejstvom netermalnih preseka za zahvat elektrona (slika 7.2). Atipično ponašanje ovog koeficijenta se javlja i kod $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ koje je posledica odsustva procesa zahvata elektrona na termalnim energijama (slika 8.1). Koeficijent jonizacije raste sa porastom E/n_0 kod svih ispitivanih gasova što je direktna posledica porasta odgovarajućeg preseka za jonizaciju sa porastom energije elektrona.

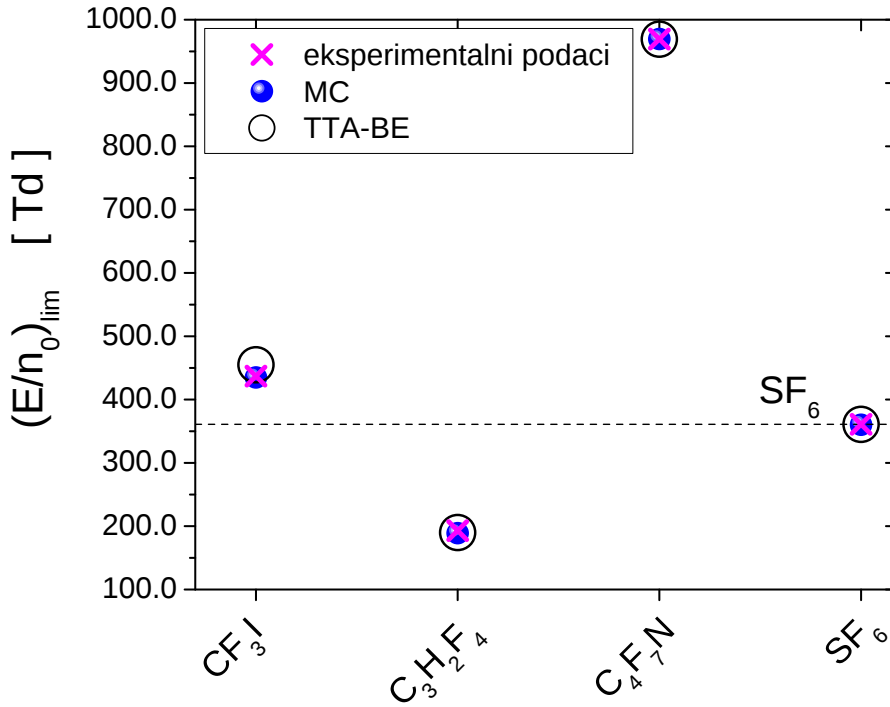
8.4 Poređenje kritičnih električnih polja u CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$, $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ i SF_6 i njihovim smešama

U ovom potpoglavlju je prikazano poređenje kritičnih električnih polja čistih gasova i njihovih smeša u cilju ocene dielektričnih osobina gasova CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$, $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ u odnosu na SF_6 .

Na slici 8.3 su prikazana kritična električna polja u CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$, $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ i SF_6 . Rezultati su dobijeni u preseku krivih sa slike 8.2(e), kada su u pitanju MC rezultati, odnosno u preseku analognih krivih koje se odnose na eksperimentalna merenja i TTA-BE rezultate. Pre svega, uočava se izuzetno slaganje rezultata numeričkih tehnika sa eksperimentalnim rezultatima osim kod CF_3I kod koga TTA-BE rezultat odstupa od eksperimentalnih rezultata za svega 4.6%. Prikazani rezultati su pokazatelj da su skupovi preseka za rasejanje elektrona u CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ i $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$, koji su sastavljeni u ovoj disertaciji, dobro naftovani na referentna eksperimentalna merenja, posebno u oblasti kritičnih električnih polja.

Što se tiče međusobnog odnosa kritičnih polja ispitivanih gasova, sa slike se vidi da je $(E/n_0)_{\text{lim}}$ gasa $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ približno trostruko veće od referentne vrednosti kojom je okarakterisan SF_6 . Kritično polje CF_3I je za ~20% veće od SF_6 dok je vrednost koja se odnosi na $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ za ~90% manja od vrednosti pomenutog referentnog gasa. Ukoliko je kriterijum za opis dielektrika kritično električno polje čistog gasa, onda je $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ najbolji iz ove grupe ispitivanih gasova.

Ukoliko se pored kritičnih električnih polja u čistim gasovima za ocenu dielektrika uzimaju u obzir i kritična polja u smešama, onda se analiza ispitivanih gasova može izvršiti na osnovu rezultata sa slike 8.4. Prikazane su vrednosti $(E/n_0)_{\text{lim}}$ gasova CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ i $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ i to u smešama sa Ar (levi panel), CO_2 (srednji panel) i SF_6 (desni panel). Sa levog panela se uočava

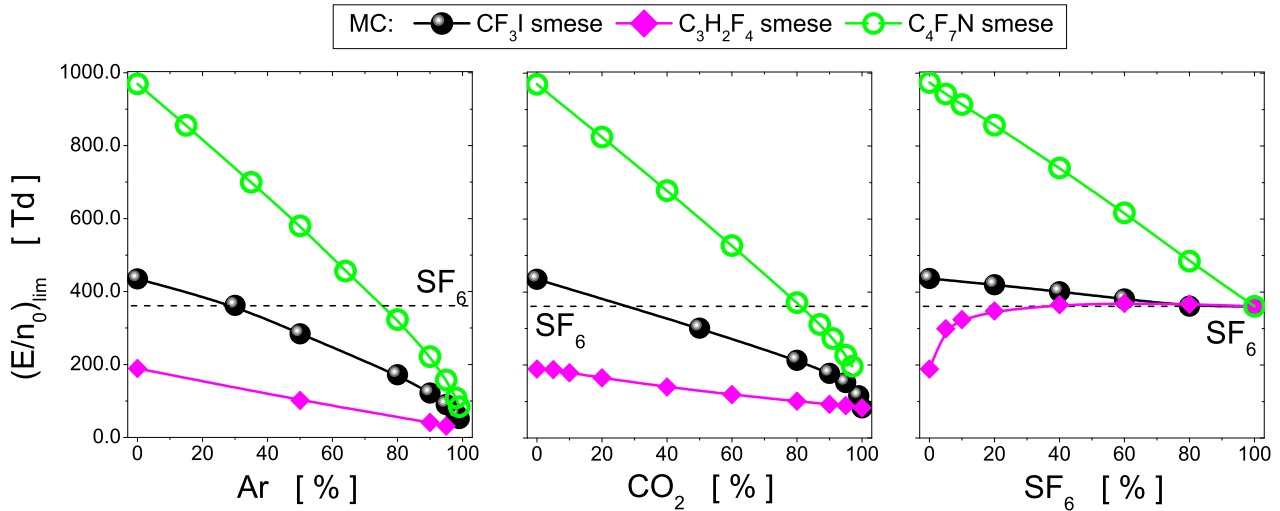


Slika 8.3: Kritična električna polja u CF₃I, C₃H₂F₄, C₄F₇N i SF₆. Poređenje rezultata dobijenih na osnovu eksperimentalnih podataka, Monte Karlo simulacija i rešavanja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana.

da smeša CF₃I-Ar ima veće kritično polje od SF₆ ukoliko se koncentracija Ar u smeši zadrži do vrednosti od 20%. Ukoliko smešu čine gasovi C₄F₇N i Ar a koncentracija Ar ima vrednost manju od 80%, takve smeše će nadjačati vrednosti $(E/n_0)_{lim}$ referentnog gasa SF₆. Poslednja ispitivana smeša sa ovog panela slike (C₃H₂F₄-Ar) ima vrednosti kritičnih polja koja su manja od 361 Td (kritično polje za SF₆) bez obzira na sastav smeše.

Sa srednjeg panela ove slike se donosi isti zaključak u vezi smeše sa C₃H₂F₄: ovaj gas ima niže vrednosti $(E/n_0)_{lim}$ od SF₆ bez obzira na njegovu koncentraciju u smeši sa CO₂. Smeša CF₃I-CO₂ ima veću vrednost kritičnog polja od 361 TD ukoliko je koncentracija CO₂ niža od 20%. Maksimalna koncentracija CO₂ u smeši sa C₄F₇N koja obezbeđuje veću vrednost $(E/n_0)_{lim}$ u odnosu na SF₆ je 80%. Poređenjem rezultata sa levog i srednjeg panela slike se vidi da se gasovi CF₃I, C₃H₂F₄ i C₄F₇N na gotovo identičan način ponašaju u smešama sa Ar i CO₂.

Na desnom panelu slike su prikazane smeše ispitivanih gasova sa SF₆. U slučaju CF₃I i C₄F₇N, kritična električna polja imaju vrednosti koje su više od 361 Td bez obzira na koncentraciju SF₆ u ovim smešama. Za razliku od njih, u smeši C₃H₂F₄-SF₆ se javlja efekat pozitivne sinergije koji je detaljno analiziran u poglavlju 5.4.3. Primećuje se da kritično električno polje ima vrednost veću od 361 Td u svim smešama prikazanim na ovom panelu osim u C₃H₂F₄-SF₆ smeši u kojoj je koncentracija SF₆ manja od 40%. Dakle, u cilju smanjenja upotrebe SF₆, svaka od pomenutih gasnih smeša može da zadovolji zahtev za visokom vrednošću $(E/n_0)_{lim}$ i time obezbediti jedan od osnovnih karakteristika gasnih dielektrika koje nalaze potencijalnu primenu u sistemima za prenošenje električne struje.



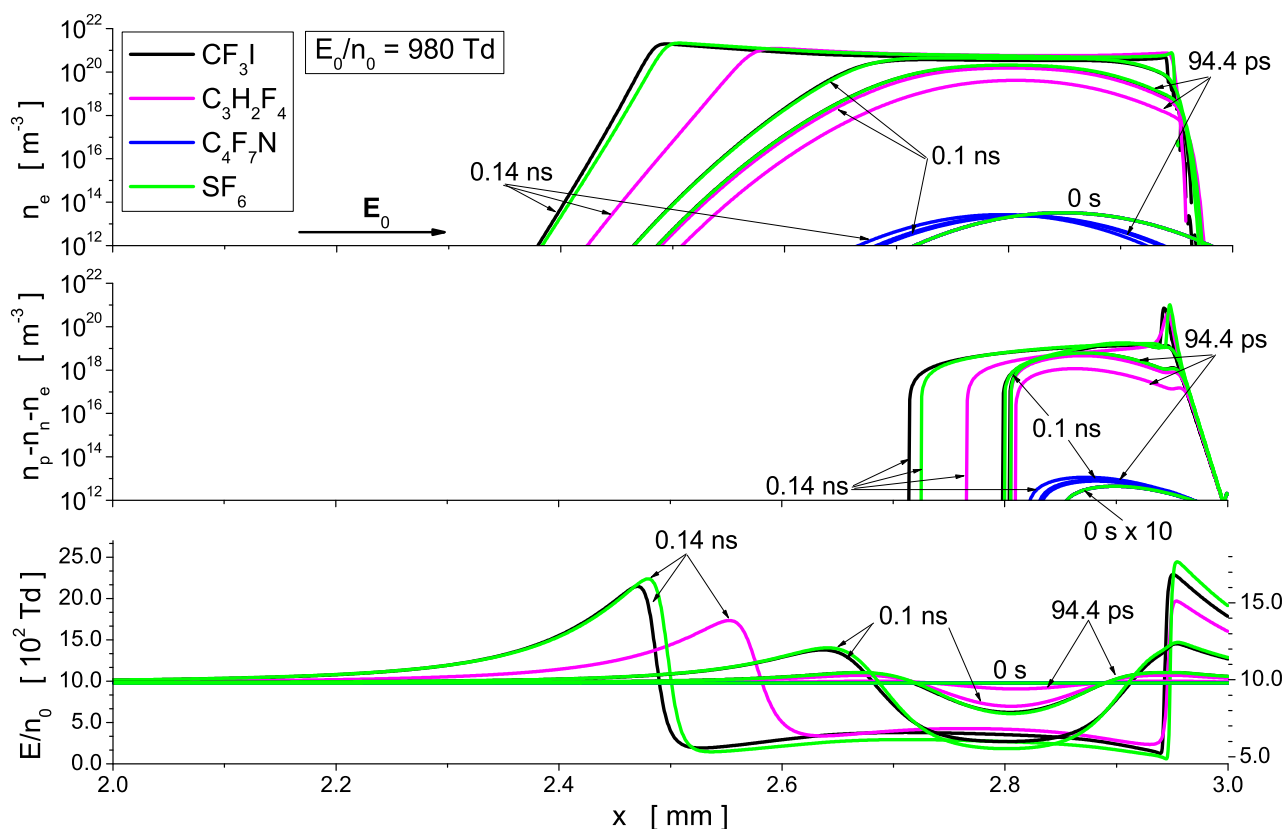
Slika 8.4: Kritična električna polja u smešama gasova CF_3I , $C_3H_2F_4$ i C_4F_7N sa Ar, CO_2 i SF_6 . Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama.

8.5 Poređenje karakteristika strimera u CF_3I , $C_3H_2F_4$, C_4F_7N i SF_6 i njihovim smešama

U ovom potpoglavlju su analizirane dielektrične osobine gasova putem upoređivanja razvoja i propagacije strimera u njima. CF_3I , $C_3H_2F_4$, C_4F_7N i SF_6 su ispitivani iz dva različita ugla: analiziranjem razvoja i propagacije strimera pri istoj jačini spoljašnjeg električnog polja i pri spoljašnjim poljima koja su za jednaku vrednosti procenata veća od kritičnih polja svakog pojedinačnog gasa.

Na slici 8.5 je prikazano poređenje razvoja i propagacije strimera u CF_3I , $C_3H_2F_4$, C_4F_7N i SF_6 . U pitanju su rezultati korigovanog fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji u kome su, kao ulazni podaci, korišćeni transportni koeficijenti elektrona izračunati MC simulacijama. Kao spoljašnje električno polje je odabrana vrednost od 980 Td koja je veća od $(E/n_0)_{lim}$ sva četiri ispitivana gasa. Sa slike se vidi da se u CF_3I strimer najbrže razvija i prelazi najveće rastojanje od katode. Ovakav rezultat je posledica transportnih koeficijenata elektrona u ispitivanim gasovima, pre svega α/n_0 i W . Ukoliko pogledamo sliku 8.2(e), vidimo da je koeficijent jonizacije na 980 Td najveći u CF_3I . Ovim je obezbeđeno efikasno generisanje novih elektrona i povećanje njihove koncentracije u lavini čime se najefikasnije dostiže uslov proboja upravo u ovom gasu. Bez obzira na nešto nižu balk brzinu drifta elektrona u CF_3I u odnosu na $C_3H_2F_4$ i SF_6 (slika 8.2(b)), fluks brzina drifta je najveća u CF_3I što obezbeđuje najbrže kretanje elektrona u pravcu polja u ovom gasu. Dakle, ukoliko se kao kriterijum poređenja dielektričnih karakteristika gasova posmatra razvoj i propagacija strimera na istoj vrednosti spoljašnjeg električnog polja (koja je veća od $(E/n_0)_{lim}$ svih ispitivanih gasova) onda se zaključuje da CF_3I ima najlošije osobine pošto se strimer najbrže razvija upravo u njemu. Istim poređenjem se zaključuje da C_4F_7N ima najbolje dielektrična svojstva pošto se broj elektrona čak ni ne povećava u značajnijoj meri u ovom gasu (gornji panel) dok takođe ne dolazi ni do ekraniranja polja unutar lavine čestica (donji panel).

Na slici 8.6 je prikazana brzina fronta strimera u CF_3I , $C_3H_2F_4$, C_4F_7N i SF_6 izračunata na osnovu rezultata korigovanog fluidnog modela u 1D konfiguraciji. Kako su rezultati ovog fluidnog modela analogni onima sa slike 8.5 koji se odnose na 1.5D konfiguraciju modela, očekivana je prikazana zavisnost brzine fronta strimera od E/n_0 . Najsporiji su strimeri u C_4F_7N , brži od njih su strimeri u $C_3H_2F_4$ dok su najbrži oni koji se kreću u SF_6 (na poljima do ~ 1200 Td) odnosno u CF_3I (na višim poljima). Potrebno je obratiti pažnju na to da se strimeri razvijaju na poljima koja su viša od $(E/n_0)_{lim}$ ispitivanog gasa. Iz tog razloga, brzina fronta strimera u

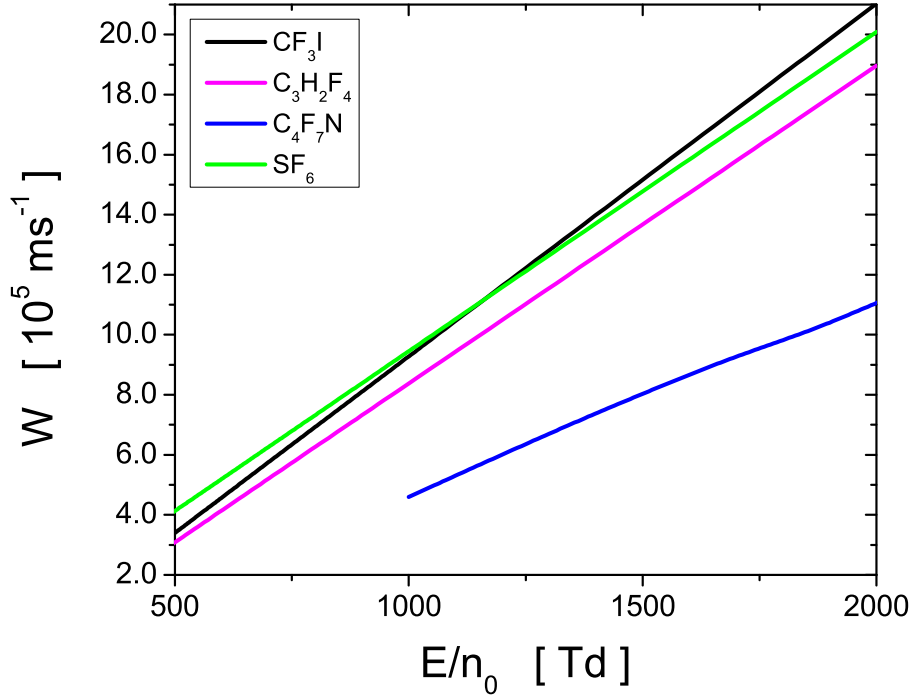


Slika 8.5: Razvoj i propagacija negativnih strimera u CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$, $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ i SF_6 pri spoljašnjem polju jačine 980 Td. Rezultati korigovanog fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji uz korišćenje transportnih koeficijenata elektrona izračunatih Monte Karlo simulacijama. Vrednosti električnog polja sa leve ose se odnose na vremenski trenutak 0.14 ns dok se desna osa odnosi na sva tri ranija vremenska trenutka.

$\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ se može izračunati na poljima višim od ~ 980 Td.

Poređenje dielektričnih osobina gasova se može izvršiti i na drugačiji način. Kako se kritična električna polja gasova CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$, $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ i SF_6 osetno razlikuju, propagacija strimera se može analizirati na poljima koja su za jednak procenat veća od $(E/n_0)_{lim}$ svakog pojedinačnog gasa. Na slici 8.7 su prikazani rezultati pomenute analize u gasovima CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$, $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ i SF_6 . Rezultati se odnose na vremenski trenutak od 1.3 ns a izračunati su pri spoljašnjem električnom polju od 500 Td, 218.5 Td, 1116 Td i 415 Td, respektivno. I u ovom slučaju, objašnjenje prikazanih rezultata se dobija na osnovu zavisnosti α/n_0 i W od električnog polja. Na slici 8.2(e) se vidi da je α/n_0 na 1116 Td (za $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$) veći od odgovarajućih koeficijenata jonizacije na 500 Td (za CF_3I), 218.5 Td (za $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$) i 415 Td (za SF_6) za iznos od red veličine do čak tri reda veličine. Ne samo da je α/n_0 izražito veći u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ u odnosu na ostale gasove već se sličan odnos dobija i poređenjem brzine drifta elektrona. W na 1116 Td (za $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$) je za iznos od 50% do čak 300% veća od brzine drifta na poljima koja odgovaraju preostalim ispitivanim gasovima. Sa druge strane, iako je difuzija u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ na 1116 Td manja od istog koeficijenta na odgovarajućim poljima u ostalim ispitivanim gasovima, strimer se ipak najbrže kreće u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$. Drugim rečima, difuzija elektrona ne utiče na parametre strimera na značajniji način. Poređenjem propagacije strimera pri spoljašnjim poljima koja su za isti iznos veća od $(E/n_0)_{lim}$ svakog pojedinačnog gasa se zaključuje da $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ pokazuje najmanje poželjna dielektrična svojstva. Za razliku od njega, $\text{C}_3\text{H}_3\text{F}_4$ se odlikuje najboljim dielektričnim osobinama pošto se strimer najsporije kreće upravo u ovom gasu.

Rezultati sa slika 8.5 i 8.7 opisuju dielektrike na različite načine. Upoređujući ova četiri ispitivana gasa pri identičnim uslovima (slika 8.5) zaključuje se da $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ pokazuje najbolje

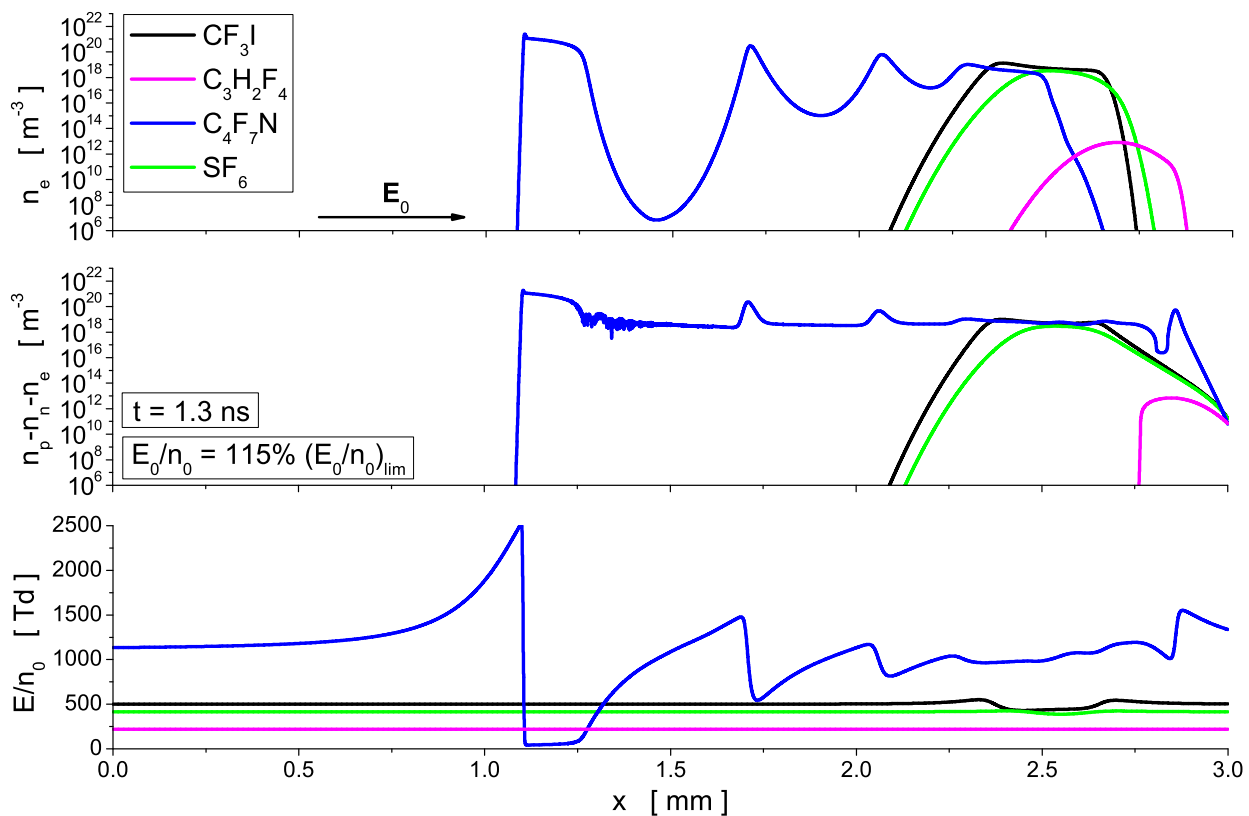


Slika 8.6: Brzina fronta strimera u CF_3I , $C_3H_2F_4$, C_4F_7N i SF_6 . Rezultati korigovanog fluidnog modela u 1D konfiguraciji čiji su ulazni podaci transportni koeficijenti elektrona izračunati Monte Karlo simulacijama.

dielektrične osobine pošto ne dolazi do razvoja strimera u ovom gasu. Međutim, ukoliko se strimer ipak razvije (slika 8.7), onda se najmanje intenzivna parcijalna pražnjenja javljaju u $C_3H_2F_4$. Formiran strimer se zadržava u blizini katode što znači da bi uz upotrebu ovog gasa u sistemima za prenošenje električne struje potencijalna oštećenja industrijske opreme bila najbezazlenija u poređenju sa onima koju bi izazvalo razvoj strimera u nekom od preostala tri ispitivana gasa.

8.6 Zaključak

U ovom poglavlju disertacije je prikazano poređenje gasova CF_3I , $C_3H_2F_4$, C_4F_7N i SF_6 iz nekoliko različitih uglova. Najpre je poređenjem molekularne strukture gasova i njihovog atomskog sastava ustanovljeno da su najpoželjniji nezasićeni molekularni gasovi kada ocena njihovog kvaliteta spada u domenu ekologije. Poređenjem fizičkih i hemijskih osobina gasova je ustanovljeno da se ne može na jednostavan način izdvojiti jedan od ovih gasova kao najprikladnija potencijalna zamena za SF_6 u svrhu dielektrika u sistemima za prenošenje električne struje. Međusobna zavisnost ovih osobina zahteva uvođenje kompromisa kako bi se bar najznačajnije osobine gasova zadržale u značajnijoj meri. Što se tiče kritičnih električnih polja čistih gasova, C_4F_7N je ubedljivo najbolji dielektrik dok se na osnovu analiza ovog parametra u gasnim smešama utvrđuje da smeše gotovo svih ispitivanih gasova sa SF_6 mogu da obezbede veću vrednost kritičnog polja od 361 Td. Analizom razvoja i propagacije strimera u CF_3I , $C_3H_2F_4$, C_4F_7N i SF_6 je zaključeno da se, pri istim uslovima, strimer najteže razvija u C_4F_7N što je poželjna osobina gasnih dielektrika. Sa druge strane, ukoliko se strimer razvije u gasu, onda je najpovoljnije da se kao dielektrik u sistema za prenošenje električne struje koristi $C_3H_2F_4$. Strimer prelazi najkraće rastojanje od katode ukoliko se formira upravo u ovom gasu što potencijalno u najmanjoj meri izaziva oštećenje opreme. Iz prethodne analize se zaključuje da



Slika 8.7: Propagacija negativnih strimera u CF_3I , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$, $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ i SF_6 pri spoljašnjim poljima koja su, za svaki gas, za 15% veća od kritičnog polja posmatranog gasa. Rezultati korigovanog fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji uz korišćenje transportnih koeficijenata elektrona izračunatih Monte Karlo simulacijama. Rezultati u vremenskom trenutku 1.3 ns. Oznake krivih sa gornjeg panela se odnose na sve panele.

je ispitivanje dielektričnih osobina gasova izuzetno kompleksan i sveobuhvatan proces. Gasovi se ne mogu okarakterisati pojedinačnim parametrima već se u ocenu njihovog kvaliteta mora uzeti u obzir međusoban uticaj ovih karakteristika. Jedino se ovakvom detalnom analizom gasova mogu zadovoljiti električni, fizički, hemijski, termalni, toksikološki, ekološki i finansijski zahtevi čime bi se opravdalo korišćenje novog gasa ili gasne smeše umesto SF_6 u sistemima za prenošenje električne struje.

Poglavlje 9

Transport elektrona u parama žive i indijuma

9.1 Uvod

Poslednje poglavlje doktorske disertacije je posvećeno analizi transporta elektroan u metalnim parama značajnim u modelovanju izvora svetlosti koji rade na principu električnih gasnih pražnjenja. Tema prvog dela poglavlja je živa u gasovitom agregatnom stanju. Sastavljen je kompletan i samousaglašen skup preseka za rasejanje elektorna u ovom gasu na osnovu koga je ispitana zavisnost transportnih koeficijenata elektrona od pritiska i temperature pozadinskog gasa. Uočeno je da se razlike u trendovima profila transportnih koeficijenata javljaju usled prisustva dimera žive na visokim pritiscima.

U drugom delu ovog poglavlja je ispitivan transport elektrona i razvoj i propagacija striemra u parama indijuma. Konstruisan je skup preseka za rasejanje elektrona u atomima ovog gasa koji se nalaze na svom osnovnom i prvom pobuđenom stanju. Ispitivanje je vršeno u širokom opsegu električnih polja na različitim temperaturama. Između ostalog, uočena je brža tranzicija lavine u strimer sa povećanjem temperature indijumovih para. Ovaj rezultat može biti od značaja pri testiranju radnih uslova izvora svetlosti koje rade na principu električnih gasnih pražnjenja a koje bi, umesto toksične žive, mogle biti punjene parama indijuma.

9.2 Transport elektrona u parama žive

Poznavanje podataka o transportu elektrona u parama žive pod dejstvom električnog polja je od značaja u izvorima svetlosti koji rade na principu električnih gasnih pražnjenja [239–241], u laserima [242, 243] ali i u specijalnim namenama kao što je jonski potisnik za svemirski pogon [244]. U literaturi se mogu naći podaci o presecima za rasejanje elektrona u parama žive

i transportnim koeficijentima elektrona u ovom gasu [245–247]. Raju je dao pregled eksperimentalnih i teorijski izračunatih sudarnih preseka i preporučio najpouzdaniju brzinu drifta i redukovan koeficijent jonizacije u ovom gasu [31, 32]. Objavljeni su kompletni skupovi preseka za rasejanje elektrona u parama žive [248–252]. Winkler i saradnici [253, 254] kao i Yousfi i saradnici [255] su dali značajan doprinos sastavljanju baze o sudarnim i transportnim podacima elektrona u parama ovog metala uzevši u obzir kinetiku ekscitovanih stanja i Peningovu jonizaciju (engl. *Penning*) u svojim modelima fluorescentnih lampi. Istraživačka grupa profesora Tagashire se posvetila ispitivanju uticaja matostabila žive na transport elektrona kako u čistom gasu tako i u njegovim smešama sa Ar i Kr [?, 251, 256]. Ispitivan je uticaj termalnog kretanja gasovite žive na transport elektrona u njoj [257] kao i efekat ukrštenih električnih i magnetskih polja na transportne koeficijente elektrona u ovom gasu [258].

U pomenutim publikacijama je zanemareno nehidrodinamičko ponašanje transportnih koeficijenata elektrona u parama žive koje se ogleda u njihovoj zavisnosti od pritiska i temperature gasa. Dodatno, često je zanemareno termalno kretanje atoma ovog gasa dok dualnost transportnih koeficijenata elektrona (balk i fluks koeficijenti) takođe nije razmatrana. Neophodno je istaći da su mnoga istraživanja rezultat rešavanja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana iako su njena ograničenja dobro poznata [8, 259].

Prethodno nabrojane činjenice su motivacija istraživanja prikazanog u ovom potpoglavlju. Iako je generisan čitav spektar rezultata, u nastavku ćemo se fokusirati na zavisnost transportnih koeficijenata elektrona od pritiska i temperature kojom su generisani specifični fenomeni. Konačan skup preseka za rasejanje elektrona u parama žive je konstruisan tehnikom rojeva (NAVEDI POGLALVJE) dok su za izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona korišćene numeričke tehnike zasnovane na MC simulacijama i numeričkim multi term rešenjima BE. Neophodno je naglasiti da je, u cilju pravilnog opisa transporta elektrona u limitu niskih električnih polja, u naš MC kod implementirana procedura za izračunavanje koliziona frekvence u slučaju kada se termalno kretanje pozadinskog gasa ne može zanemariti [196].

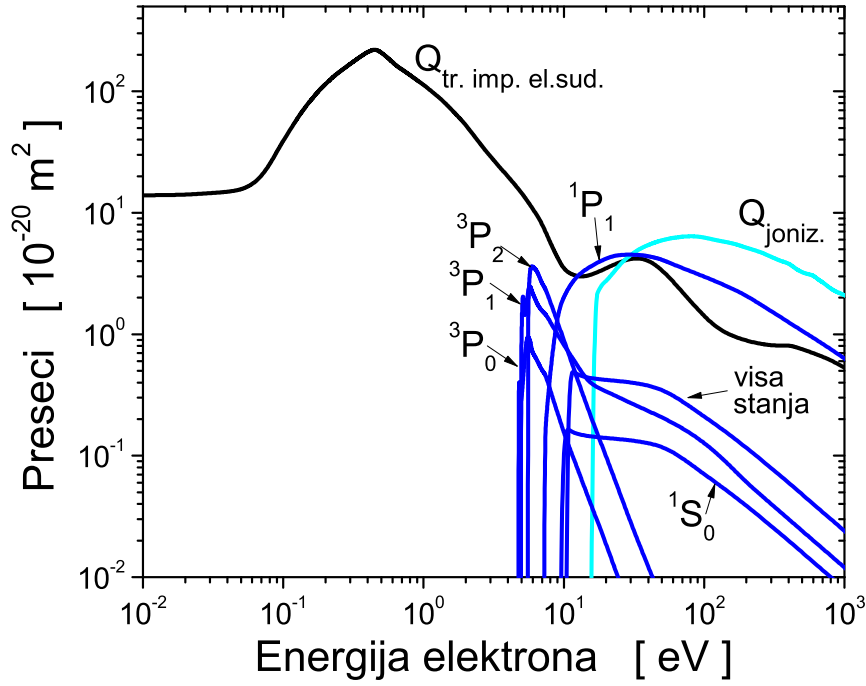
9.2.1 Preseci za rasejanje elektrona u parama žive

Na slici 9.1 je prikazan konačan skup preseka za rasejanje elektrona u parama žive. Njegova konstrukcija je izvedena na sledeći način. Na niskoenergijski eksperimentalan presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima Englanda i Elforda [260] je dodat visokoenergijski presek iz koda MAGBOLTZ [210]. Preseci za elektronsku ekscitaciju na stanja 3P_0 , 3P_1 i 3P_2 su preuzeti iz [261] dok je MAGBOLTZ iskorišćen kao izvor preseka za preostale kanale ovog sudarnog procesa. Presek za jonizaciju je preuzet iz [262]. Ovako formiran skup preseka je modifikovan u cilju postizanja boljeg slaganja između izračunatih i izmerenih transportnih koeficijenata elektrona [263]. Ove modifikacije podrazumevaju veoma male promene preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima da bi se postigla dobra slaganja između izračunatih i eksperimentalno određenih vrednosti brzine drifta. Preseci za elektronsku ekscitaciju su takođe minimalno modifikovani da bi se postiglo dobro slaganje za koeficijent jonizacije.

9.2.2 Zavisnost transportnih koeficijenata elektrona od pritiska i NDC efekat

Ovaj segment rada je posvećen ispitivanju zavisnosti transportnih koeficijenata elektrona od pritiska usled postojanja dimera žive (Hg_2) u gasu sačinjenom od monomera ovog metala (Hg). Proračuni transportnih koeficijenata elektrona su vršeni MC simulacijama na 573 K i različitim pritiscima što odgovara uslovima eksperimentalne postavke Englanda i Elforda [260].

Prisustvo Hg_2 u parama žive na osetan način utiče na gubitke energije elektrona prilikom rotacionih i vibracionih ekscitacija ovih molekula. Iz tog razloga, presek za sudare elektrona sa dimerima žive je opisan efektivnim presekom koji reprezentuje pomenute neelastične procese. U skup preseka za rasejanje elektrona u parama žive (9.1) je dodat ovaj efektivan presek čime



Slika 9.1: Skup preseka za rasejanje elektrona u parama žive. Skup sadrži: presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima $Q_{tr.imp.el.sud.}$, šest preseka za elektronsku ekscitaciju sa osnovnog stanja na stanje 3P_0 , 3P_1 , 3P_2 , 1P_1 , 1S_0 i na viša stanja kao i presek za jonizaciju $Q_{joniz.}$.

je, između ostalog, obezbeđeno slaganje izračunate brzine drifta elektrona sa eksperimentalnim vrednostima Elforda i saradnika [260, 264]. Pri konstrukciji efektivnog preseka za rasejanje elektrona na dimerima žive su korišćene sledeće pretpostavke:

1. dimeri žive su uvek prisutni u parama žive pri čemu je njihova koncentracija proporcionalna gustini broja atoma žive,
2. u cilju uzimanja u obzir gustine broja dimera žive, amplitudu efektivnog preseka je potrebno skalirati njihovom frakcionom populacijom,
3. u parama žive važi jednačina stanja idelanog gasa.

Prema [260], efektivan presek za dimere žive se izračunava:

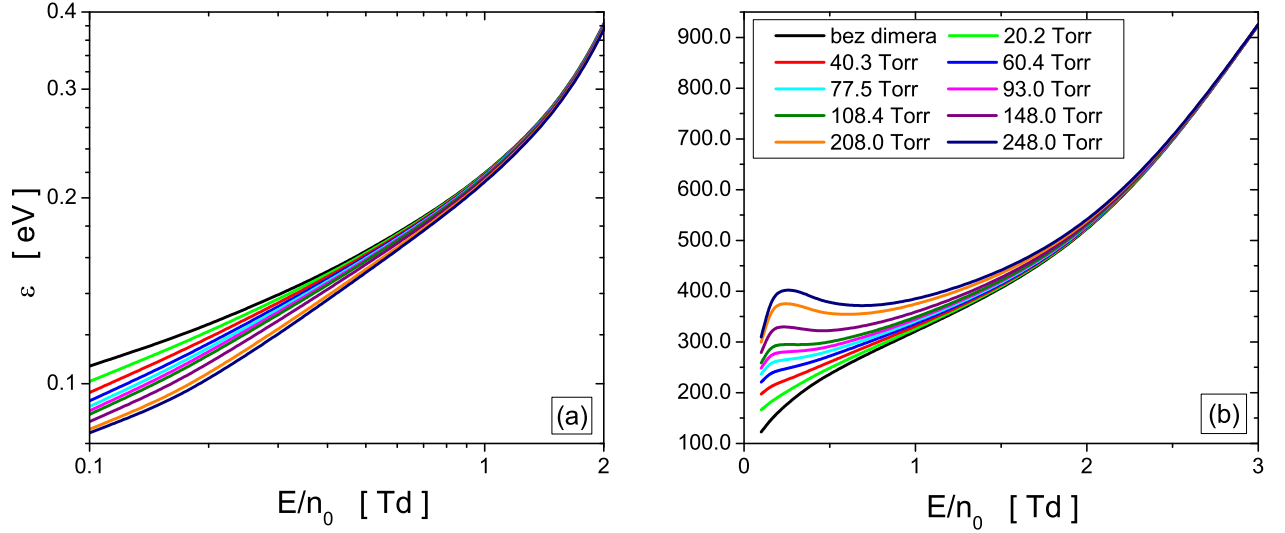
$$\sigma(\epsilon) = 8.3\sigma_i(\epsilon)\Delta(p, T), \quad (9.1)$$

pri čemu se vrednost 8.3 odnosi na maksimalnu vrednost ovog preseka pri populaciji dimera od 1 ppm. Oznaka $\sigma_i(\epsilon)$ predstavlja presek za dimere žive dok je $\Delta(p, T)$ frakciona populacija dimera na pritisku p i temperaturi T . Presek za dimere $\sigma_i(\epsilon)$ je funkcija energije elektrona, izražen je u jedinici $\text{\AA}^2$ ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$) a preuzet je iz [260]. Uz prethodne pretpostavke i frakcionu populaciju dimera na 1 kPa i 573 K u iznosu od 21.8×10^{-6} dobija se

$$\frac{\Delta(p, T)}{\Delta_1(p_1, T_1)} = \frac{n}{n_1} = \frac{p}{p_1} \frac{T_1}{T}, \quad (9.2)$$

a odatle i

$$\Delta(p, T) = 21.8 \times 10^{-6} \frac{p}{1 \text{ kPa}} \frac{573 \text{ K}}{T}. \quad (9.3)$$



Slika 9.2: Srednja energija (a) i brzina drifta elektrona (b) u parama žive u funkciji redukovanoeg električnog polja. Rezultati Monte Karlo simulacija na 573 K i različitim pritiscima. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).

Kombinacijom jednačina (9.1) i (9.3) se dolazi do izraza za presek za rasejanje elektrona na dimerima žive na pritisku p i temperaturi T :

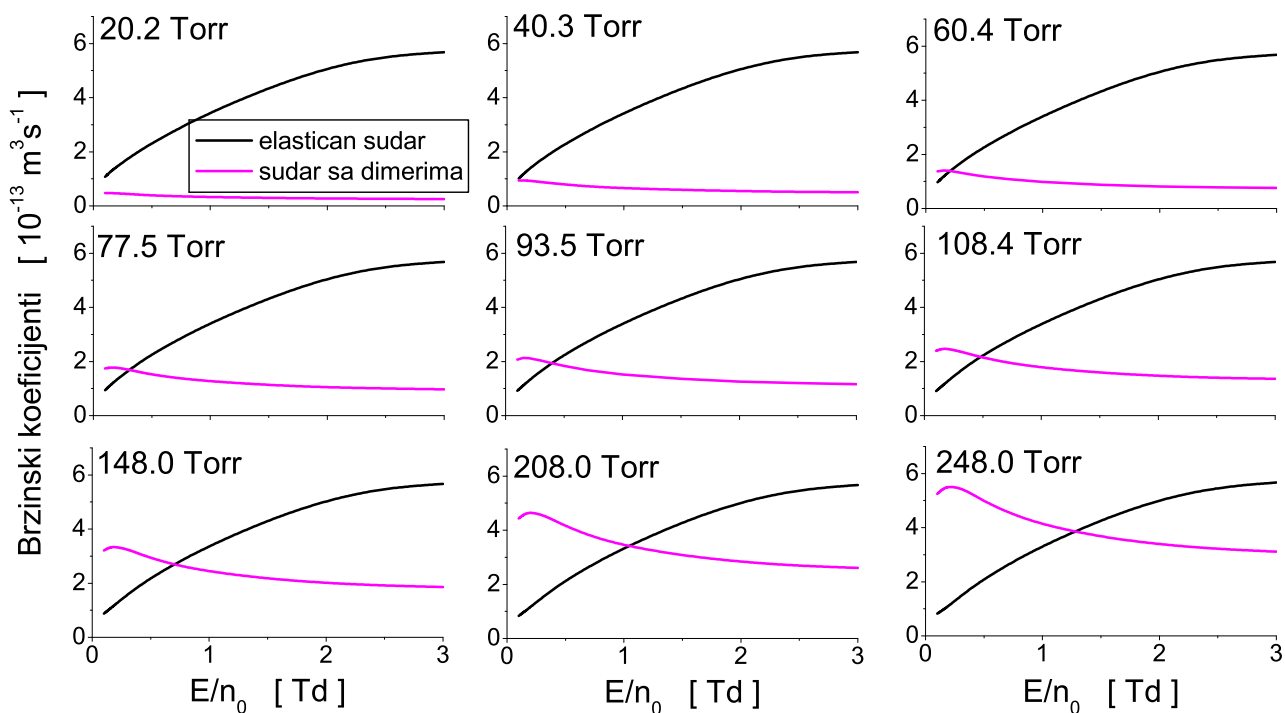
$$\sigma(\epsilon) = 180 \times 10^{-6} \frac{p}{1 \text{ kPa}} \frac{573 \text{ K}}{T} \sigma_i(\epsilon). \quad (9.4)$$

Na osnovu ove jednačine se jasno vidi da presek za rasejanje elektrona na dimerima žive zavisi od odnosa p/T . Ovaj efektivni presek raste sa porastom pritiska pri fiksnoj temperaturi. Sa druge strane, porast temperature dovodi do opadanja ovog preseka pri fiksnoj temperaturi. Ipak, treba imati u vidu uslove u kojima je živa u gasovitom agregatnom stanju. Na temperaturi od 573 K, pritisak koji dovodi do saturacije žive iznosi 33 kPa (~ 248 Torr). Drugim rečima, kako bi se naši proračuni na 573 K odnosili na živu u gasovitom agregatnom stanju, pritisak gasa ne sme biti viši od 33 kPa.

U cilju pravilnog izračunavanja transportnih koeficijenata elektrona u parama žive na 573 K mora se voditi računa i o dobicima energije elektrona pri sudarima sa monomerima i dimerima žive. Iz tog razloga, preseki za superelastične sudarne procese elektrona u parama žive (pozovi se na poglavlje gde je objašnjeno izračunavanje superel preseka) su izračunati za svaki pojedinačan neelastičan proces putem principa detaljnog balansa.

Na slici 9.2 su prikazani ϵ i W elektrona u parama žive na 573 K i različitim pritiscima u funkciji E/n_0 . Srednja energija elektrona je rastuća funkcija polja koja opada sa porastom pritiska. Prikazana zavisnost od pritiska je očekivana na osnovu jednačine (9.4): rast preseka za rasejanje elektrona na dimerima žive sa porastom pritiska gasa utiče na porast energijskih gubitaka pri ovom neelastičnom procesu čime opada srednja energija elektrona.

Brzina drifta elektrona (slika 9.2(b)) raste sa porastom pritiska u oblasti najnižih ispitivanih polja dok se njena osetljivost na promene ovog parametra smanjuje sa porastom E/n_0 . Prikazan trend brzine drifta sa promenom pritiska je posledica postojanja preseka za rasejanje elektrona na dimerima žive. Kako što je rečeno, ovaj presek reprezentuje neelastične gubitke elektrona nakon kojih porast električnog polja utiče na povećanje komponente brzine elektrona u pravcu tog polja. Drugim rečima, postojanje neelastičnih procesa utiče na porast W . Počevši od 108.4 Torr, u profilima W se uočava NDC efekat koji je izraženiji na višim pritiscima. Njegova pojava je direktna posledica preseka za rasejanje elektrona na dimerima žive. Porastom električnog polja dolazi do tranzicije roja elektrona iz oblasti sa dominantnim neelastičnim u oblast



Slika 9.3: Brzinski koeficijenti za elastične sudare elektrona i sudare za dimerima žive u funkciji električnog polja. Rezultati Monte Karlo simulacija na 573 K. Brzinski koeficijenti koji se odnose na dimere žive su skalirani faktorom 10^5 .

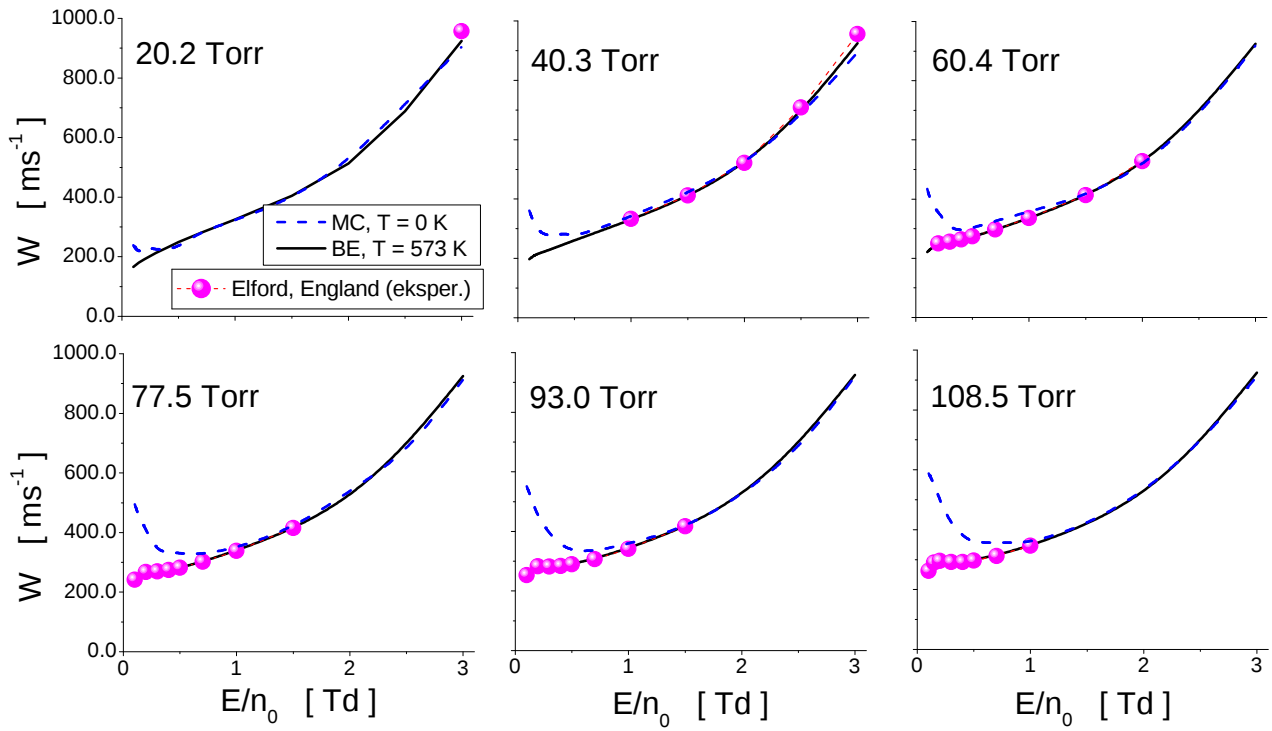
sa dominantnim elastičnim mehanizmima gubitaka energije elektrona što izaziva pojavu NDC efekta.

Porast pritiska ne utiče samo na povećanje preseka za rasejanje elektrona na Hg_2 već i na povećanje brzinskog koeficijenta ovog procesa. Na slici 9.3 su prikazani brzinski koeficijenti koji odgovaraju ovom neelastičnom procesu (skalirani faktorom 10^5) kao i elastičnim sudarima elektrona sa monomerima žive. Porast električnog polja dovodi do porasta brzinskog koeficijenta elastičnog procesa kao i do opadanja koeficijenta koji se odnosi na neelastične sudare sa Hg_2 . Ovakvo ponašanje brzinskih koeficijenata pogoduje razvoju NDC efekta. Iako se analizirani brzinski koeficijenti razlikuju za više redova veličina u korist elastičnih procesa, velike razlike postoje i u energijskim gubicima pri ovim sudaranim procesima (10^{-7} - 10^{-6} eV pri elastičnim sudarima, 0.04 eV pri sudarima sa Hg_2). Drugim rečima, i pored višestruko manjeg brzinskog koeficijenta za sudare elektrona sa dimerima žive u odnosu na koeficijent koji odgovara elastičnim sudarima, veliki energijski gubici u ovim neelastičnim procesima su odgovorni za njihov snažan uticaj na funkciju raspodele energije elektrona. Na pritiscima nižim od približno 100 Torr je tako mala koncentracija dimera (jednačina (9.3)) da su ukupni energijski gubici u ovim procesima zanemarljivi u odnosu na one u elastičnim sudarima. Usled toga ne dolazi do razvoja NDC efekta u profilima brzine drifta elektrona na pritiscima manjim od pomenute granične vrednosti (slika 9.2(b)).

9.2.3 Zavisnost transportnih koeficijenata elektrona od temperature

U ovom potpoglavlju je analiziran uticaj termalnog kretanja pozadinskog gasa na transportne koeficijente elektrona. Pored MC simulacija, transportni koeficijenti su dobijeni na osnovu višestrukih rešenja BE.

Rezultati sa slike 9.4 prikazuju značaj pravilnog opisa termalnog kretanja atoma i molekula žive pri proračunu brzine drifta elektrona u opsegu najnižih električnih polja. Prikazani su rezultati MC simulacija u uslovima kada termalno kretanje čestica nije uzeto u obzir ($T = 0$

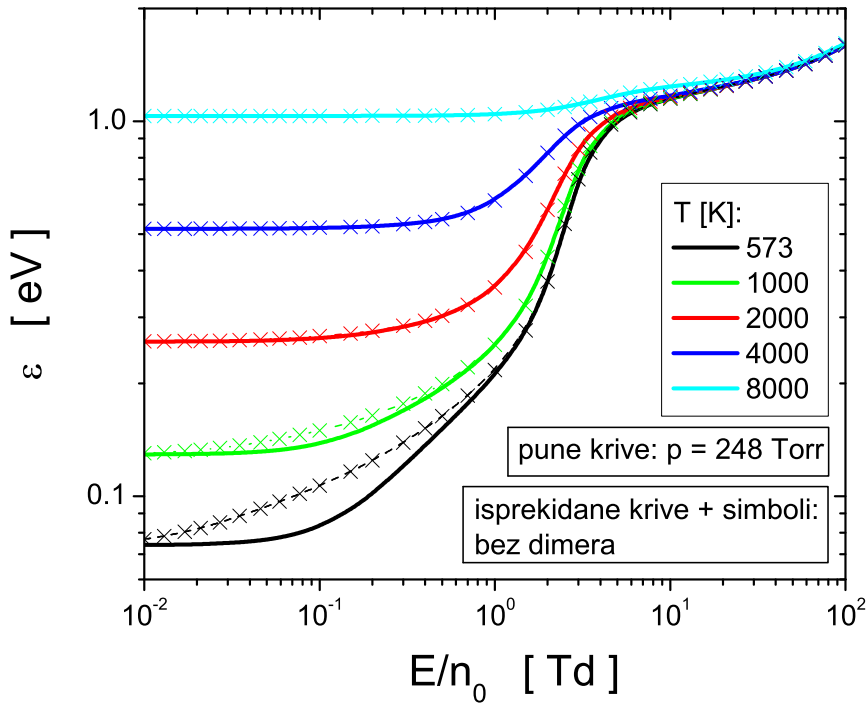


Slika 9.4: Brzina drifta elektrona u parama žive u funkciji električnog polja. Poređenje rezultata Monte Karlo simulacija na 0 K, višečlanih rešenja Bolcmanove jednačine na 573 K i eksperimentalnih podataka iz literature.

K), višečlana rešenja BE na 573 K kao i eksperimentalne vrednosti brzine drifta elektrona [260] na istoj nenuljoj temperaturi. Na svakom panelu slike, koji odgovara označenoj vrednosti pritiska gasa, se vidi da se slaganje sa eksperimentalnim podacima postiže ukoliko se uzme u obzir termalno kretanje čestica. Na svim pritiscima, MC rezultati daju lažne strukture koje podsećaju na NDC efekat a koje su sve izraženije sa porastom pritiska. Njegova pojava je posledica neopravdanosti primene aproksimacije hladnog gasa ($T = 0$ K) na niskim E/n_0 . Sa porastom pritiska je sve izraženije neslaganje između MC rezultata i eksperimentalnih podataka. Ono je posledica razlike između skupa preseka sa i bez preseka za dimere žive koja je sve veća sa porastom pritiska.

Naredne slike prikazuju zavisnost transportnih koeficijenata elektrona od temperature pozadinskog gasa u širokom opsegu polja. Uslovi proračuna su relevantni za izvore svetlosti punjene živom koji rade na principu električnih gasnih pražnjenja. Prikazani rezultati se odnose na višečlana rešenja BE u dva slučaja: u prisustvu dimera žive na pritisku od 248 Torr i u slučaju kada se zanemaruje prisustvo Hg_2 . Važno je naglasiti da se prvi scenario ne može analizirati na temperaturama nižim od 573 K kako gasovita živa ne bi promenila svoje agregatno stanje. Rezultati dva pomenuta scenarija razdvajaju uticaj termalnih efekata od onih koje indukuju dimeri žive.

Na slici 9.5 je prikazana promena srednje energije elektrona sa električnim poljem u parama žive na različitim temperaturama u dva pomenuta scenarija. Na fiksnoj temperaturi, srednja energija elektrona je monotono rastuća funkcija polja. ε je termalna i ne zavisi od E/n_0 u opsegu najnižih prikazanih polja. Ovo znači da je brzinska funkcija raspodele termalni Maksvelijan. Pomenuto ponašanje je vidljivo na tri najviše temperature dok bi, za dostizanje termalnih srednjih energija na preostale dve temperature, bilo potrebno proširiti oblast polja ka nižim vrednostima (ovakvi proračuni su izostavljeni zbog otežane relaksacije transportnih koeficijenata elektrona na niskim poljima). Porast temperature dovodi do rasta ε na fiksnom E/n_0 . Razlike u vrednostima srednje energije elektrona su veće na nižim poljima. Na dve najniže tem-

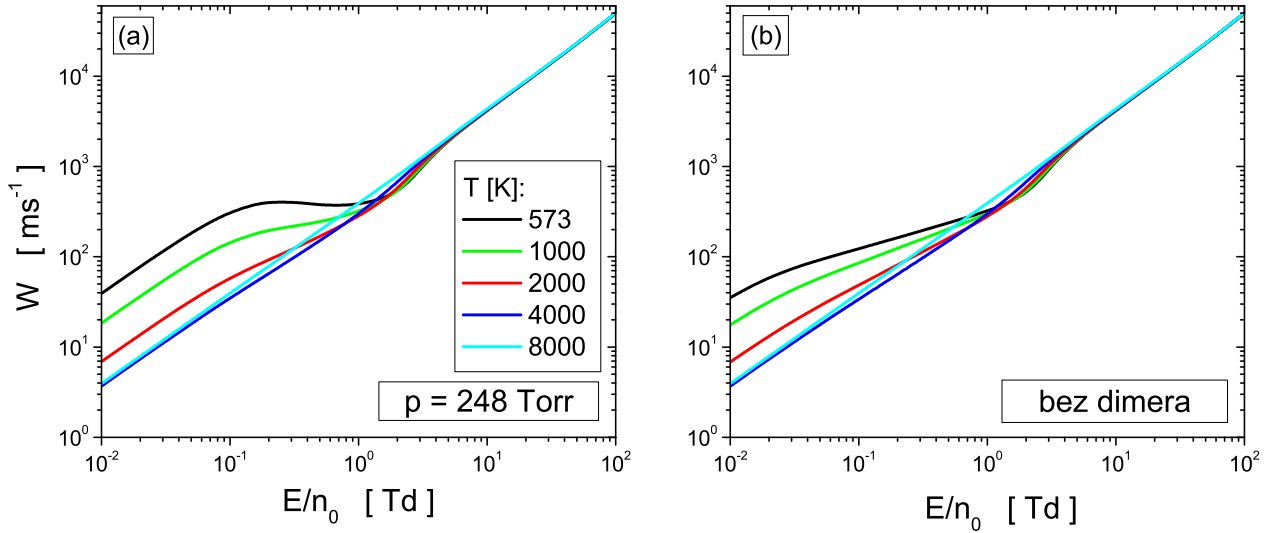


Slika 9.5: Srednja energija elektrona u parama žive u funkciji električnog polja. Višečlana rešenja Bolcmanove jednačine na različitim temperaturama u dva različita scenarija: sa i bez prisustva dimera žive.

perature se uočava da ε dobija veće vrednosti ukoliko se zanemari postojanje Hg_2 u parama žive. Prikazan rezultat je očekivan imajući u vidu gubitke energije elektrona pri ovom neelastičnom procesu. Na preostale tri temperature se ne vidi uticaj dimera usled smanjenja veličine preseka sa porastom temperature (jednačina (9.4)). Neosetljivost ε na promenu temperature u opsegu najviših prikazanih polja je posledica visoke srednje energije elektrona koja izlazi iz opsega delovanja preseka za dimere žive koji je jedini osetljiv na promenu temperature.

Na slici 9.6 je prikazana balk brzina drifta elektrona u funkciji električnog polja na različitim temperaturama živinih para. Na panelu (a) su prikazani rezultati dobijeni u prisusvu Hg_2 na pritisku od 248 Torr dok su na panelu (b) prikazani rezultati u odsustvu ovih molekula. Na 573 K i pritisku od 248 Torr, u profilu brzine drifta se javlja NDC efekat, kao što to prikazuje slika 9.5(b). Ovaj efekat nestaje sa porastom temperature što je uzrokovano temperaturskom zavisnošću preseka za dimere (jednačina (9.4)). Takođe, smanjenje preseka za dimere sa porastom temperature gasa je uzrok međusobno sličnih rezultata brzine drifta u dva ispitivana scenarija na temperaturama počevši od 1000 K. Na osnovu prikazanih rezultata se zaključuje da se pojava NDC efekta može kontrolisati promenom temperature živinih para.

Brzina drifta elektrona opada sa porastom temperature u opsegu najnižih prikazanih polja dok se odstupanje od ove pravilnosti uočava na 8000 K. Naime, brzina drifta na toj temperaturi ima veće vrednosti od onih koji se odnose na 4000 K. Razlog ovakvog ponašanja leži u presecima za rasejanje elektrona u parama žive (slika 9.1). Srednja energija elektrona na 8000 K ima vrednosti koje se nalaze u opsegu energija u kojima opada presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima dok na roj elektrona na 4000 K deluje rastući segment ovog preseka. Porast preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima utiče na smanjenje brzine drifta elektrona što je upravo vidi na prikaznim rezultatima. Brzina drifta elektrona ima kompleksnu zavisnost od električnog polja u opsegu od 1 Td do 10 Td koja je posledica kako dejstva preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima tako i neelastičnih procesa. Brzina drifta elektrona ne



Slika 9.6: Balk brzina drifta elektrona u parama žive u funkciji električnog polja. Višečlana rešenja Bolcmanove jednačine na različitim temperaturama u dva scenarija: sa (a) i bez prisustva dimera žive (b). Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panel (b).

nezavisi od temperature gasa u opsegu najviših prikazanih polja već je isključivo kontrolisana električnim poljem.

9.3 Transport elektrona u parama indijuma

Indijum je drugi metal koji je analiziran u ovom poglavlju disertacije. U pitanju je materijal čiji je potencijal prepoznat u različitim tehnološkim primenama. Na primer, indijum-kalaj oksid (engl. *indium tin oxide*, ITO) se primenjuje za proizvodnju transparentnih elektroda displeja na bazi tečnih kristala (engl. *liquid – crystal display*, LCD) [265], solarnih ćelija, kao reflektivan sloj u automobilskim farovima i izvorima svetlosti punjenim natrijumom dok dovođenje napona na tanak sloj ovog materijala na vetrobranim aviona omogućava njihovo odmrzavanje pri niskim atmosferskim temperaturama. Indijum ima i brojne primene u poluprovodničkoj industriji: InAs i InSb se koriste u niskotemperaturnim a InP u visokotemperaturnim tranzistorima [266] dok se jedinjenja InGaN i InGaP primenjuju u svetlosnoemisionim i laserskim diodama [267].

Ipak, pored ovih značajnih primena indijuma, istraživanje iz ovog potpoglavlja ima za cilj modelovanje i optimizaciju izvora svetlosti koji rade na principu električnih gasnih pražnjenja u parama žive [253–255]. Kako je upotreba toksične žive u izvorima svetlosti strogo ograničena u zemljama Evropske Unije i mnogim drugim zemljama, postoji velika potreba za pronalaskom alternative ovog metala.

Jedan od osnovnih ciljeva ovog potpoglavlja je sastavljanje kompletnog skupa preseka za rasejanje elektrona u parama indijuma. Pri tome, uzeta je u obzir popunjenost pobuđenih energijskih nivoa indijuma na različitoj temperaturi. Iz tog razloga, ne samo da je sastavljen skup preseka koji se odnosi na indijum na osnovnom već i na prvom pobuđenom metastabilnom energijskom nivou koji je popunjen u značajnijoj meri na tri nenulte temperature na kojima su vršeni proračuni transportnih koeficijenata elektrona.

9.3.1 Preseci za rasejanje elektrona u parama indijuma

Skup preseka za rasejanje elektrona u parama indijuma je, kao što je uobičajeno, sastavljen tako da se odnosi na atome ovog gasa čiji se svi elektroni nalaze na osnovnom energijskom

novou. U pitanju je novi $(5s^25p)^2P_{1/2}$.

Proces sastavljanja skupa preseka je započet prikupljanjem i poređenjem dostupnih eksperimentalnih i teorijskih integralnih preseka za elastično rasejanje elektrona u ovom gasu. Upoređivani su sledeći podaci: eksperimentalni podaci Rabasović i saradnika [268], teorijski proračuni istih autora na osnovu SEPASo modela, proračuni Hamiltona i saradnika [269] različitim numeričkim metodama (relativistički SEP, neralativistički OP1 i OP2, relativistički RCCC-75, DBSR-214 metod). Na osnovu njih je formiran preporučen integralan presek za elastično rasejanje elektrona u parama indijuma koji predstavlja rezultate DBSR-214 teorijske metode u opsegu energija od 0.001 eV do 100 eV kombinovane sa OP1 rezultatima u opsegu energija od 100 eV do 10000 eV skaliranim faktorom 1.025. Procenjeno je da je nesigurnost ovog preseka približno $\pm 20\%$ za energije manje od 3 eV odnosno približno $\pm 15\%$ na većim energijama elektrona.

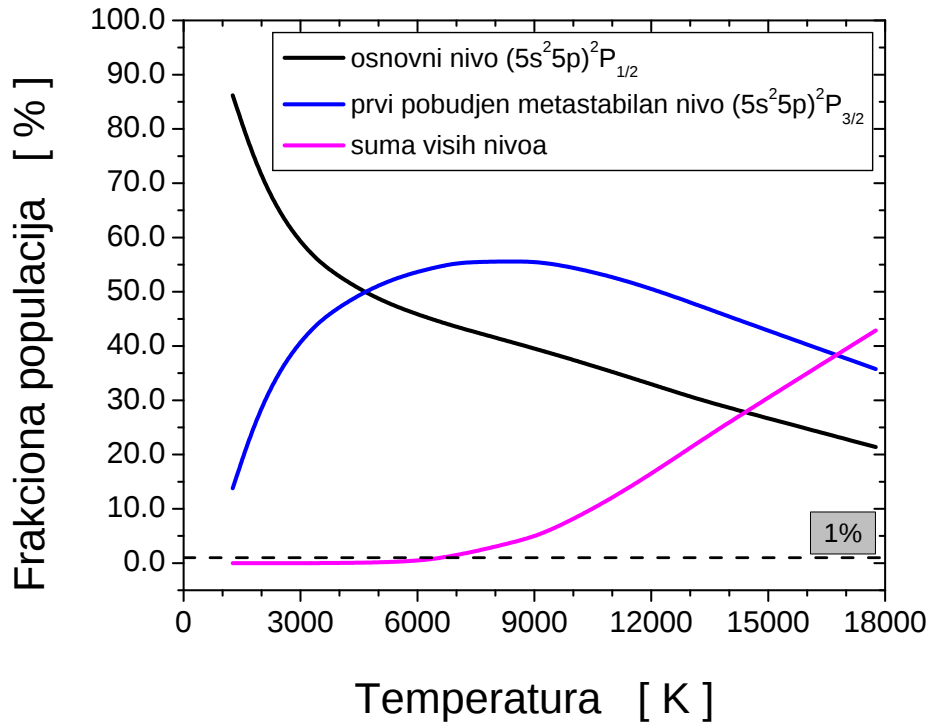
Što se tiče preseka za elektronsku ekscitaciju sa osnovnog nivoa $(5s^25p)^2P_{1/2}$, u literaturi postoje podaci koji su dobijeni OP1, OP2, RCCC-75 i DBSR-214 proračunima. Na osnovu njih, preporučeni preseki su formirani kombinacijom DBSR-214 rezultata od praga do 100 eV i RCCC-75 rezultata u opsegu od 100 eV do 10000 eV skaliranih faktorom 0.7694. Procenjena nesigurnost ovih preseka iznosi $\pm 20\%$ u celokupnom opsegu energija. Na ovakav način su sastavljeni preseki za 21 ekscitacioni kanal sa osnovnog energijskog nivoa.

Totalni presek za jonizaciju gasovitog indijuma je u [269] izračunat putem OP1, OP2, BEB, BEB+autojonizacija, RCCC-75 i DBSR-214 metode. Osim ovih podataka, u literaturi postoje eksperimentalni preseki za autora Vainshtein i saradnika [270] i Shul i saradnika [271]. Dodatni teorijski rezultati koji su javno dostupni se odnose na polu-empirijske proračune autora Lotz [272], proračune autora Kim i Stone [273], totalnu jednostuku jonizaciju (koja rezultuje stvaranjem jona In^+) autora [274], proračune putem Deutsch-Märk metode [275]. Naš preporučen presek za jonizaciju je sastavljen na osnovu srednjih vrednosti eksperimentalnih podataka počevši od praga do 200 eV na koja su nadovezani rezultati OP1 metode skalirani faktorom 1.014. Estimacija nesigurnosti ovog preseka iznosi približno $\pm 22\%$.

U našim numeričkim kodovima koji se zasnivaju na rešavanju BE ili na MC simulacijama je potreban presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima. Konstrukcija ovog preseka se zasniva na presecima koji su korišćeni pri dobijanju integralnog preseka za elastično rasejanje elektrona na indijumu. Presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima predstavlja kombinaciju DBSR-214 rezultata u opsegu [0.001-100] eV, RCCC-75 rezultata u opsegu od 100 eV do 7000 eV skaliranih faktorom 0.9564 i OP1 rezultata u opsegu energija [7000, 10000] eV skaliranih faktorom 2.653. Nesigurnost ovog preseka je jednaka nesigurnosti integralnog preseka za elastično rasejanje elektrona u parama indijuma.

Kako bi se opisao uticaj temperature gasa na transport elektrona u indijumu, potrebno je uzeti u obzir superelastične sudare između elektrona i indijuma u pobuđenom metastabilnom stanju. Ovi preseki su izračunati na osnovu detaljnog balansa polazeći od odgovarajućih neelastičnih procesa (pozovi se na poglavlje o proračunima superel preseka). Kako bi se pri proračunima transportnih koeficijenata elektrona u indijumu uzeli u obzir svi energijski nivoi ovog gasa koji su značajnije popunjeni na posmatranoj temperaturi, izračunate su frakcije populacije različitih energijskih nivoa putem Maksvel-Bolcman statistike. Kao što se vidi na slici 9.7, do ~ 5000 K su dominantno popunjeni osnovan energijski nivo $(5s^25p)^2P_{1/2}$ i prvi pobuđen (metastabilan) nivo $(5s^25p)^2P_{3/2}$. Viši energijski nivoi su popunjeni u jako maloj koncentraciji čime suma njihovih frakcionih populacija doprinosi ukupnoj populaciji sa manje od 1%. Iz tog razloga, ovi viši energijski nivoi su zanemareni u analizi transporta elektrona u indijumu do pomenute temperature.

Ispitivanje transporta elektrona u parama indijuma je vršeno na temperaturama nižim od pomenute granične vrednosti: na 0 K, 1260 K, 3260 K i 5260 K. Na svakoj od ovih temperatura su izračunati superelastični preseki za sve pojedinačne neelastične sudarne procese (elektronske



Slika 9.7: Frakciona populacija atoma indijuma na osnovnom nivou $(5s^25p)^2P_{1/2}$, prvom pobuđenom metastabilnom nivou $(5s^25p)^2P_{3/2}$ i suma populacija na višim nivoima u funkciji temperature gasa.

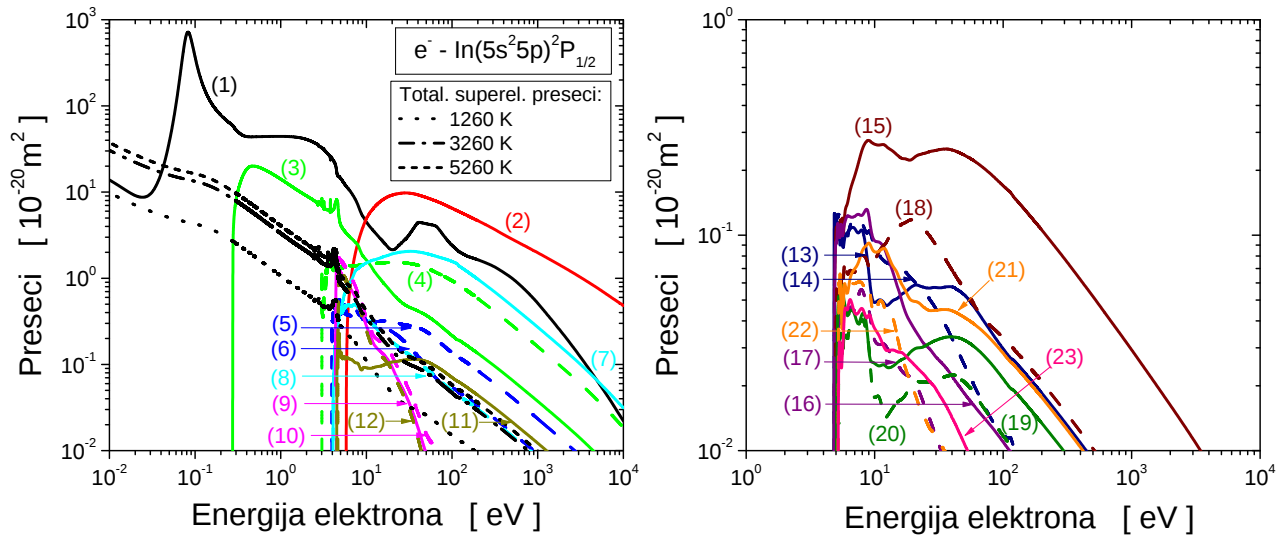
ekscitacije). Na osnovu njih su izračunati totalni preseki za superelastične sudare (jednaki sumi preseka za superelastične procese na datoj temperaturi) koji su, na svakoj od temperatura, otežinjani frakcionim populacijama osnovnog energijskog nivoa na toj temperaturi. Ovako pripremljen skup preseka za rasejanje elektrona u parama indijuma sa atomima na osnovnom energijskom nivou $(5s^25p)^2P_{1/2}$ je prikazan na slici 9.8.

Kao što je spomenuto, na ispitivanim temperaturama je u značajnoj meri popunjen prvi pobuđen (metastabilan) energijski nivo $(5s^25p)^2P_{3/2}$. Preciznije rečeno, na 1260 K se $\sim 86\%$ atoma indijuma nalazi u osnovnom a $\sim 14\%$ na prvom pobuđenom nivou, na 3260 K je $\sim 57\%$ atoma indijuma na osnovnom dok je $\sim 43\%$ na prvom nivou dok je na 5260 K oko 48% atoma na osnovnom a približno 52% atoma na prvom pobuđenom nivou. Iz tog razloga je sastavljen i skup preseka za rasejanje elektrona na atomima indijuma na prvom pobuđenom energijskom nivou. Ovaj skup preseka je sastavljen polazeći od odgovarajućih preseka za osnovni energijski nivo (slika 9.8).

Presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima elektrona sa atomima indijuma na pobuđenom energijskom nivou $(5s^25p)^2P_{3/2}$ je dobijen na osnovu integralnog preseka za elastično rasejanje elektrona na atomima indijuma na ovom nivou koji je dobijen analognim postupkom primenjenim kod izračunavanja integralnog elastičnog preseka za osnovni nivo. Ovako dobijen presek je skaliran odnosom preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima i integralnog preseka za elastično rasejanje elektrona pri čemu se oba pomenuta presek odnose na osnovni energijski nivo [269].

Preseci za elektronsku ekscitaciju sa pobuđenog nivoa su dobijeni na istu način i sa istom nesigurnošću kao preseci za ovaj tip sudarnih procesa koji se odnose na osnovni nivo. Postoji ukupno dvadeset preseka za elektronsku ekscitaciju sa metastabilnog nivoa.

Totalni presek za jonizaciju atoma indijuma koji je na pobuđenom nivou ima identičan profil kao odgovarajuć presek koji se odnosi na osnovni nivo samo što je "transliran" ka nižim energijama za vrednost energije ovog pobuđenog (metastabilnog) nivoa (0.2743 eV). Na taj



Slika 9.8: Integralni preseki za rasejanje elektrona u parama indijuma sa atomima na osnovnom nivou $(5s^25p)^2P_{1/2}$. Na levom panelu su prikazani preseki za transfer impulsa u elastičnim sudarima (1), totalnu jonizaciju (2) i veličina koje su dobijene množenjem totalnih preseka za superelastične sudare frakcionim populacijama osnovnog nivoa na temperaturi 1260 K, 3260 K odnosno 5260 K. Pored njih, prikazani su diskretni ekscitacioni prelazi sa osnovnog nivoa na nivo $(5s^25p)^2P_{3/2}$ (3), $(5s^26s)^2S_{1/2}$ (4), $(5s^26p)^2P_{1/2}$ (5), $(5s^26p)^2P_{3/2}$ (6), $(5s^25d)^2D_{3/2}$ (7), $(5s^25d)^2D_{5/2}$ (8), $(5s^24p)^2P_{1/2}$ (9), $(5s^24p)^2P_{3/2}$ (10), $(5s^27s)^2S_{1/2}$ (11) i $(5s^24p)^2P_{5/2}$ (12). Na desnom panelu su prikazani diskretni ekscitacioni prelazi sa sa osnovnog nivoa na nivo $(5s^27s)^2P_{1/2}$ (13), $(5s^27s)^2P_{3/2}$ (14), $(5p^26d)^2D_{3/2}$ (15), $(5p^26d)^2D_{5/2}$ (16), $(5p^24f)^2F_{7/2}$ (17), $(5p^24f)^2F_{5/2}$ (18), $(5p^28s)^2S_{1/2}$ (19), $(5p^28s)^2P_{1/2}$ (20), $(5s^27d)^2D_{3/2}$ (21), $(5s^27d)^2D_{5/2}$ (22) i $(5s^28p)^2P_{3/2}$ (23).

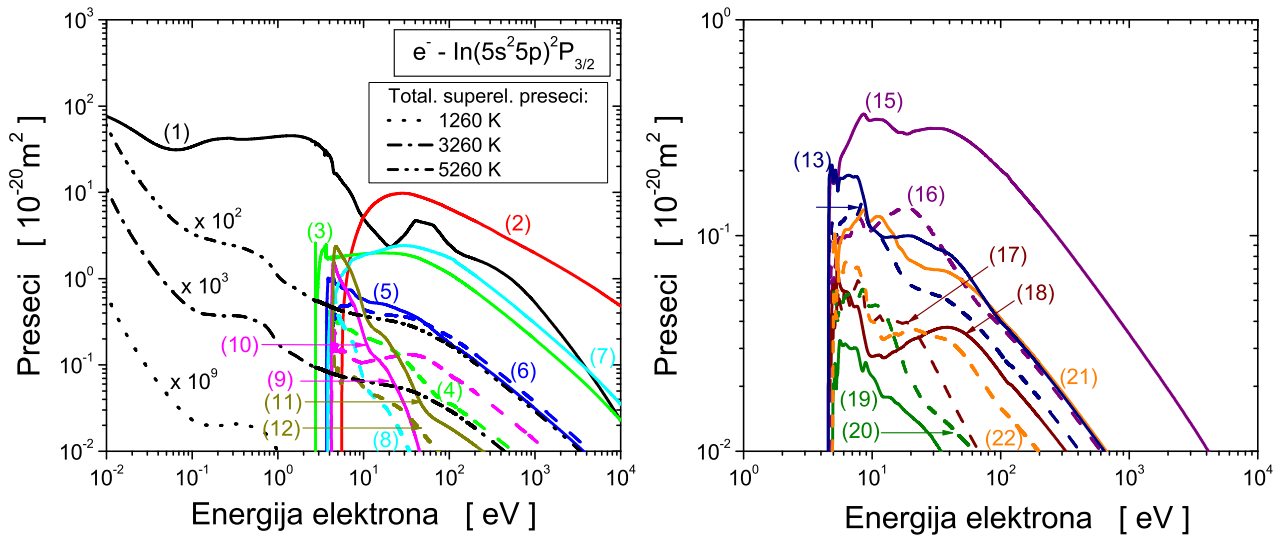
način, prag totalnog preseka za jonizaciju indijuma koji je na nivou $(5s^25p)^2P_{3/2}$ postaje 5.512 eV.

Preseki za superelastične sudarne procese elektrona sa atomima indijuma na pobuđenom nivou na tri ispitivane temperature su izračunati postupkom koji je isti kao u proračunima ovih preseka za osnovni energijski nivo. Izračunati preseki su takođe otežinjani frakcionim populacijama ovog energijskog nivoa na posmatranoj temperaturi. Za svaku temepraturu je izračunat totalni superelastičan presek kao suma 20 pojedinačnih preseka. Skup preseka za rasejanje elektrona u parama indijuma sa atomima na prvom pobuđenom energijskom nivou je prikazan na slici 9.9.

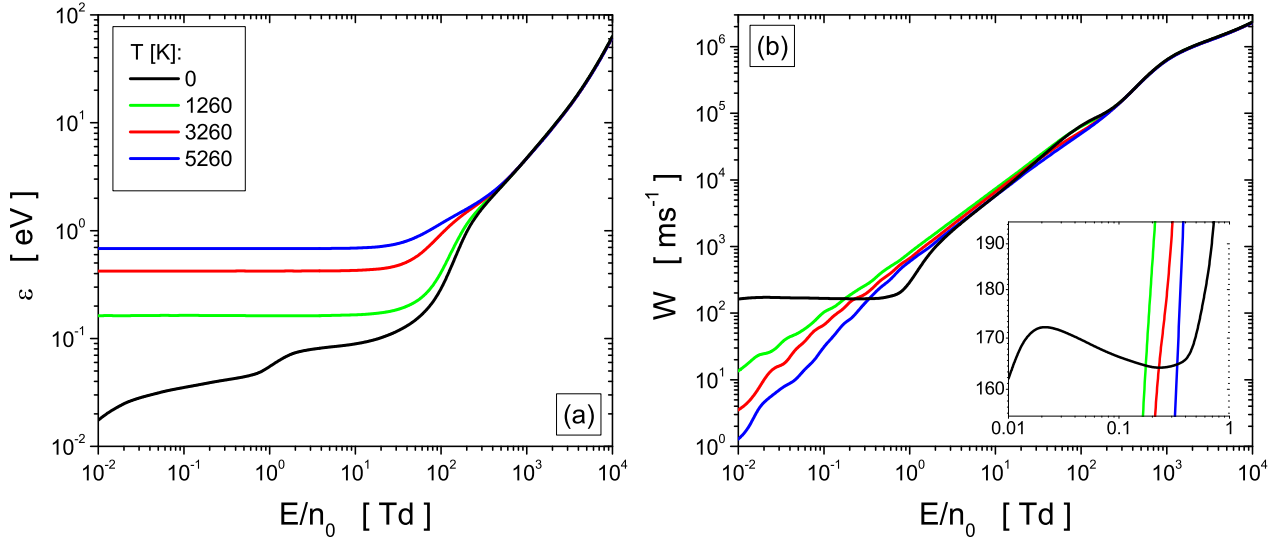
Tabelirani preseki za sudare elektrona sa atomima indijuma koji su na osnovnom i pobuđenom energijskom novou se mogu naći u Excel tabelama koje su sastavni deo rada [269]. Neophodno je naglasiti da je proračun transportnih koeficijenata elektrona u parama indijuma vršen u smeši gasovitog indijuma na osnovnom i prvom pobuđenom energijskom nivou kako bi se uzela u obzir značajna populacija oba pomenuta nivoa na posmatranim temperaturama. Na svakoj temperaturi, svi pojedinačni preseki za rasejanje elektrona u In na oba pomenuta energijska nivoa su otežinjani populacijom odgovarajućeg nivoa (pored već otežinjenih sumiranih superelastičnih preseka prikazanih na slikama 9.8 i 9.9).

9.3.2 Transportni koeficijenti elektrona u parama indijuma

Transportni koeficijenti elektrona u parama indijuma su izračunati MC simulacijama u širokom opsegu E/n_0 u funkciji temperature gasa. Na slici 9.10(a) je prikazana srednja energija elektrona na različitim temperaturama. ε na 0 K ima monotono rastuću zavisnost od polja uz promenljivu brzinu rasta koja reflektuje energijsku zavisnost preseka za elastično i neelastično rasejanje



Slika 9.9: Integralni preseki za rasejanje elektrona u parama indijuma sa atomima na prvom pobuđenom metastabilnom nivou $(5s^25p)^2P_{3/2}$. Na levom panelu su prikazni preseki za transfer impulsa u elastičnim sudarima (1), totalnu jonizaciju (2) i veličina koje su dobijene množenjem totalnih preseka za superelastične sudare frakcionim populacijama prvog pobuđenog metastabilnog nivoa na temperaturi 1260 K, 3260 K odnosno 5260 K. Dodatno, ovi preseki su pomnoženi faktorima 10^9 , 10^3 i 10^2 , respektivno. Pored njih, prikazani su diskretni ekscitacioni prelazi sa osnovnog nivoa na nivo $(5s^26s)^2S_{1/2}$ (3), $(5s^26p)^2P_{1/2}$ (4), $(5s^26p)^2P_{3/2}$ (5), $(5s^25d)^2D_{3/2}$ (6), $(5s^25d)^2D_{5/2}$ (7), $(5s^24p)^2P_{1/2}$ (8), $(5s^24p)^2P_{3/2}$ (9), $(5s^27s)^2S_{1/2}$ (10), $(5s^24p)^2P_{5/2}$ (11) i $(5s^27s)^2P_{1/2}$ (12). Na desnom panelu su prikazani diskretni ekscitacioni prelazi sa prvog pobuđenog metastabilnog nivoa na nivo $(5s^27s)^2P_{3/2}$ (13), $(5p^26d)^2D_{3/2}$ (14), $(5p^26d)^2D_{5/2}$ (15), $(5p^24f)^2F_{7/2}$ (16), $(5p^24f)^2F_{5/2}$ (17), $(5p^28s)^2S_{1/2}$ (18), $(5p^28s)^2P_{1/2}$ (19), $(5s^27d)^2D_{3/2}$ (20), $(5s^27d)^2D_{5/2}$ (21) i $(5s^28p)^2P_{3/2}$ (22).

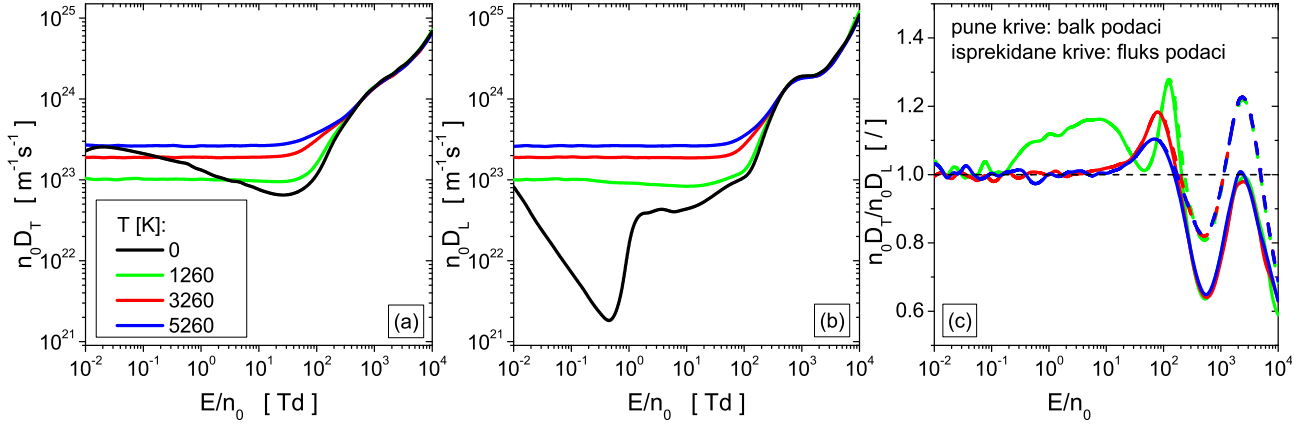


Slika 9.10: Srednja energija (a) i balk brzina drifta elektrona (b) u parama indijuma u funkciji redukovano električnog polja na različitim temperaturama. Rezultati Monte Karlo simulacija. Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panel (b).

elektrona u indijumu. Srednja energija ima termalnu vrednost sve do polja od ~ 10 Td na tri nenulte temperature. To je pokazatelj da su elektroni u termalnoj ravnoteži sa parom indijuma odnosno da je njihova funkcija raspodele termalni Maksvelijan. Ova oblast niskih E/n_0 može da se označi kao *režim pare*. Energija elektrona raste sa porastom polja čime oni prestaju da budu u termalnoj ravnoteži sa okolnim gasom. Time njihova funkcija raspodele postaje različita od termalnog Maksvelijana dok temperatura gasa i dalje utiče na ponašanje elektrona. Ova oblast srednjih polja se prostire od ~ 10 Td do ~ 400 Td. Na poljima višim od ovog, ε dobija mnogo veće vrednosti od termalnih. Uticaj temperature indijumove pare na srednju energiju elektrona je zanemarljiv pa se oblast ovih polja naziva *režim polja*.

Na panelu (b) slike 9.10 je prikazana balk brzinu drifta elektrona u funkciji E/n_0 na različitim temperaturama para indijuma. Na prvi pogled se čini sa balk brzina drifta ne menja svoju vrednosti sa promenom E/n_0 na nultoj temperaturi u oblasti najnižih polja. Međutim, umetnut panel prikazuje da se u oblasti polja između 0.03 Td i 0.3 Td javlja NDC efekat u profilu ovog transportnog koeficijenta. Ova oblast polja odgovara opsegu srednjih energija elektrona u kojoj se javlja tranzicija iz dominantnog neelastičnog u elastičan režim gubitaka energije. Sa daljim porastom srednje energije elektrona, balk brzina drifta na $T = 0$ K monotono raste sa poljem. Ova brzina je rastuća funkcija polja u celokupnom prikazanom opsegu polja na temperaturama 1260 K, 3260 K i 5260 K. Oscilacije u profilima ovih veličina u oblasti najnižih polja su rezultat statističke nesigurnosti veličina koje su izlaz našeg MC koda. W opada sa porastom temperature indijumove pare u ovoj i u oblasti srednjih polja dok u oblasti najviših polja temperatura praktično ne utiče na ponašanje ovog transportnog koeficijenta.

Na slici 9.11 su prikazani koeficijenti difuzije u parama indijuma u funkciji E/n_0 na različitim temperaturama. Na panelima (a) i (b) su prikazane balk vrednosti transversalnog i longitudinalnog koeficijenta difuzije, respektivno. Na fiksnom E/n_0 u opsegu najnižih polja, $n_0 D_T$ raste sa porastom nenulte vrednosti temperature dok koeficijent na 0 K odstupa od opisanog trenda. Na ovoj temperaturi se uočava opadanje vrednosti $n_0 D_T$ sa porastom polja kao i minimum u okolini 30 Td. Ovo opadanje vrednosti koeficijenta difuzije je posledica naglog porasta preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima kao i preseka za ekscitaciju atoma indijuma na pobuđenom nivou $(5s^25p)^2P_{3/2}$. $n_0 D_T$ je neosetljiv na promenu temperature na najvišim prikazanim poljima. Koeficijent $n_0 D_L$ na tri najviše temperature ima slično ponašanje



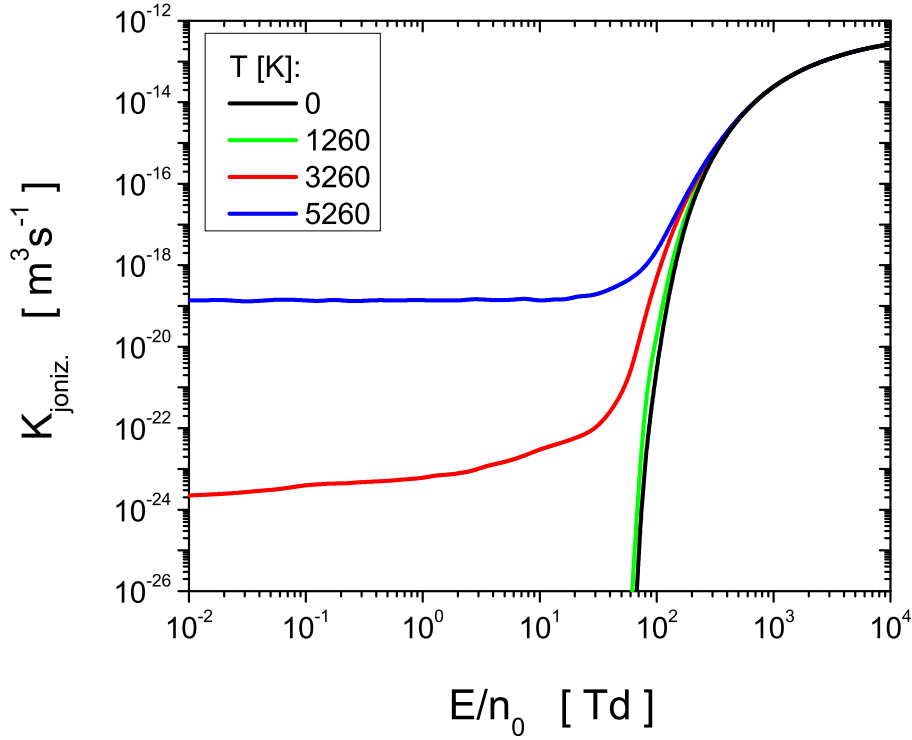
Slika 9.11: Balk vrednosti longitudinalnog (a), i transverznog (b) koeficijenta difuzije i odnos transverznog i longitudinalnog koeficijenta difuzije (c) izračunat kako za balk tako i za fluks vrednosti. Rezultati Monte Karlo simulacija u parama indijuma u funkciji redukovano električnog polja na različitim temperaturama. Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panele (b) i (c).

kao $n_0 D_T$ do polja od ~ 100 Td. Osim toga, oba koeficijenta se neznatno menjaju sa poljem u ovom opsegu E/n_0 pri fiksnoj temperaturi što znači da dostižu svoje termalne vrednosti.

Na slici 9.11(c) je prikazan odnos transverznog i longitudinalnog koeficijenta difuzije. Ovaj odnos pruža informaciju o anizotropiji difuzije tj o nejednakosti koeficijenata $n_0 D_T$ i $n_0 D_L$. Kao što se očekuje, termalne vrednosti $n_0 D_T$ i $n_0 D_L$ su približno jednake na svim nenultim temperaturama odnosno difuzija je približno izotropna u opsegu polja do ~ 10 Td. Na višim poljima i svim analiziranim temperaturama, razlika između koeficijenata $n_0 D_T$ i $n_0 D_L$ ne prelazi $\sim 30\%$. Na srednjim poljima je primetno opadanje razlike između koeficijenata difuzije sa porastom temperature para indijuma. Interesantno je da se na poljima višim od ~ 200 Td uočavaju veće balk vrednosti $n_0 D_L$ u odnosu na odgovarajuće vrednosti transverznog koeficijenta što nije slučaj ukoliko se uporede fluks koeficijenti.

Na slici 9.12 je prikazan brzinski koeficijent jonizacije u funkciji E/n_0 na različitim temperaturama indijumovih para. Porast $K_{joniz.}$ sa E/n_0 je posledica energijske zavisnosti preseka za jonizaciju (slike 9.8 i 9.9). Na dve najniže temperature, ovaj koeficijent ima trend koji je tipičan za mnoge gasove. Za razliku od toga, srednja energija elektrona na dve najviše temperature ima takve vrednosti (slika 9.10(a)) da najbrži elektroni iz funkcije raspodele imaju dovoljno energije da jonizuju atome indijuma na osnovnom i metastabilnom nivou. Iz tog razloga, $K_{joniz.}$ ima veliku vrednost u oblasti nižih E/n_0 .

Na slici 9.13 su prikazani brzinski koeficijenti različitih sudarnih procesa u funkciji E/n_0 na četiri različite temperature. Atomi indijuma se nalaze na osnovnom stanju na temperaturi od 0 K (panel (a)) pa u ovom slučaju ne postoje superelastični sudarni procesi kao ni njima odgovarajući brzinski koeficijenti. Brzinski koeficijent za transfer impulsa u elastičnim sudarima na 0 K raste do ~ 1 Td nakon čega opada. Na tri nenulte temperature, trend ovog koeficijenta je približno konstantan do dostizanja maksimuma u okolini 500 Td. Približno konstantne vrednosti ovog koeficijenta na nižim i srednjim poljima su posledica postojanja preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima koji se odnosi na atome indijuma u pobuđenom stanju. Brzinski koeficijent sume neelastičnih procesa na 0 K oštro raste sa E/n_0 sve do ~ 200 Td kada jonizacija postaje konkurentan proces gubitka energije elektrona. Na preostale tri temperature, ponašanje ovog brzinskog koeficijeta podseća na koeficijent za transfer impulsa u elastičnim sudarima. Razlog leži u srednjoj energiji elektrona u opsegu (0.15, 0.6) eV u okviru koje se dostiže prag za ekscitaciju In sa osnovnog stanja na stanje $(5s^2 5p)^2 P_{3/2}$ (proces (3) sa slike 9.8). Vrednosti brzinskih koeficijenata sume superelastičnih procesa na tri nenulte temperature



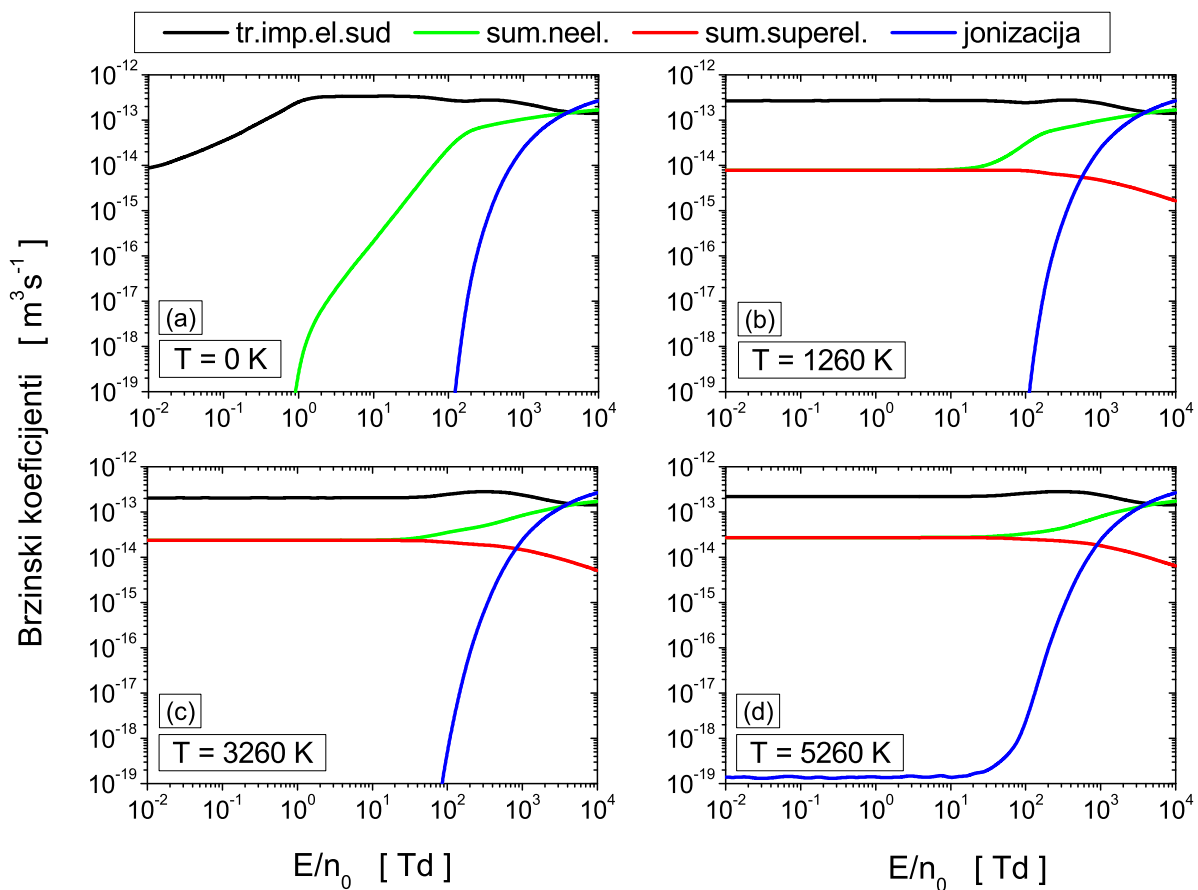
Slika 9.12: Brzinski koeficijent jonizacije u parama indijuma u funkciji redukovanog električnog polja na različitim temperaturama. Rezultati Monte Karlo simulacija.

na najnižim i srednjim poljima su jednake onima koje se odnose na sumu neelastičnih procesa. Ova jednakost koeficijenata je posledica principa detaljnog balansa i činjenice da su elektroni u termalnoj ravnoteži sa parom indijuma. Na poljima višim od ~ 20 Td (na 1260 K), ~ 30 Td (na 3260 K) odnosno ~ 40 Td (na 5260 K), ovi koeficijenti dobijaju međusobno različite vrednosti. Brzinski koeficijenti procesa jonizacije imaju jednak trend na svim ispitivanim temperaturama: dominiraju u oblasti najviših ispitivanih polja sa čijim porastom i sami rastu.

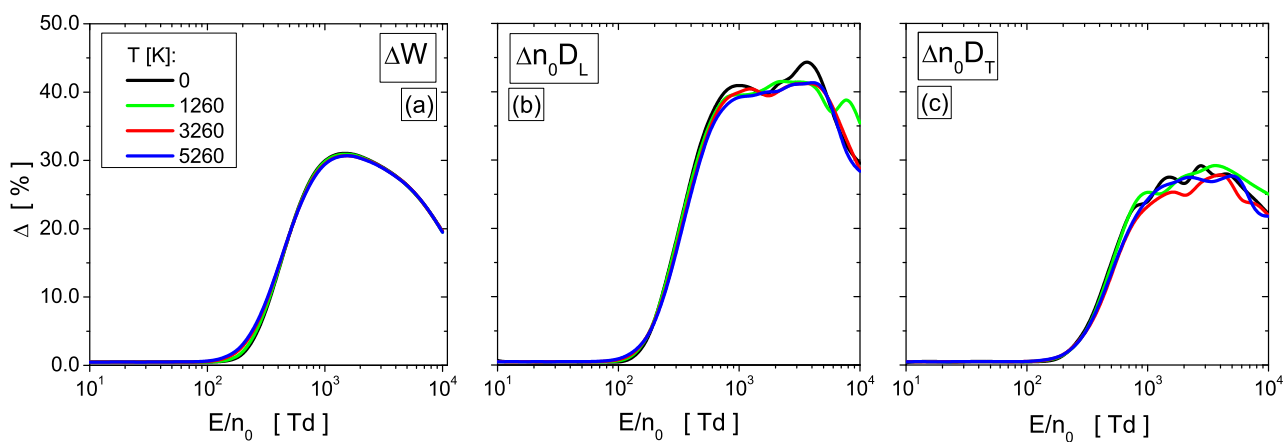
Eksplisitan uticaj nekonzervativnog procesa jonizacije na transportne koeficijente elektorna se može prikazati putem procentualnih razlika između njihovih balk i fluks vrednosti. Na slici 9.14 su prikazane procentualne razlike između vrednosti dualnih brzina drifta elektrona (a), longitudinalnih (b) i transverzalnih koeficijenata difuzije (c) na različitim temperaturama. Sva tri prikazana koeficijenta su neosetljiva na proces jonizacije do polja od ~ 200 Td. Iako brzinski koeficijent jonizacije na 3260 K i 5260 K ima visoku vrednost u režimu pare (slika 9.12) u ovoj oblasti postoje i procesi ekscitacije kao i superelastični procesi (slika 9.13) koji kompenzuju uticaj ovog nekonzervativnog procesa. Iz tog razloga je procentualna razlika između dualnih vrednosti sva tri prikazana transportna koeficijenta manja od 1%. Na poljima višim od ~ 200 Td se uočava značajna razlika između balk i fluks transportnih koeficijenata: njena vrednost dostiže $\sim 30\%$ u slučaju brzine drifta elektrona i transverznog koeficijenta difuzije odnosno 45% u slučaju koeficijenta $n_0 D_L$. Dakle, porast broja elektrona u parama indijuma usled procesa jonizacije atoma i molekula ovog gasa utiče na porast balk transportnih koeficijenata u odnosu na odgovarajuće fluks koeficijente dok, istovremeno, promena temperature indijumovih para ne menja vrednosti ovih koeficijenata u značajnijoj meri.

9.3.3 Razvoj i propagacija strimera u parama indijuma

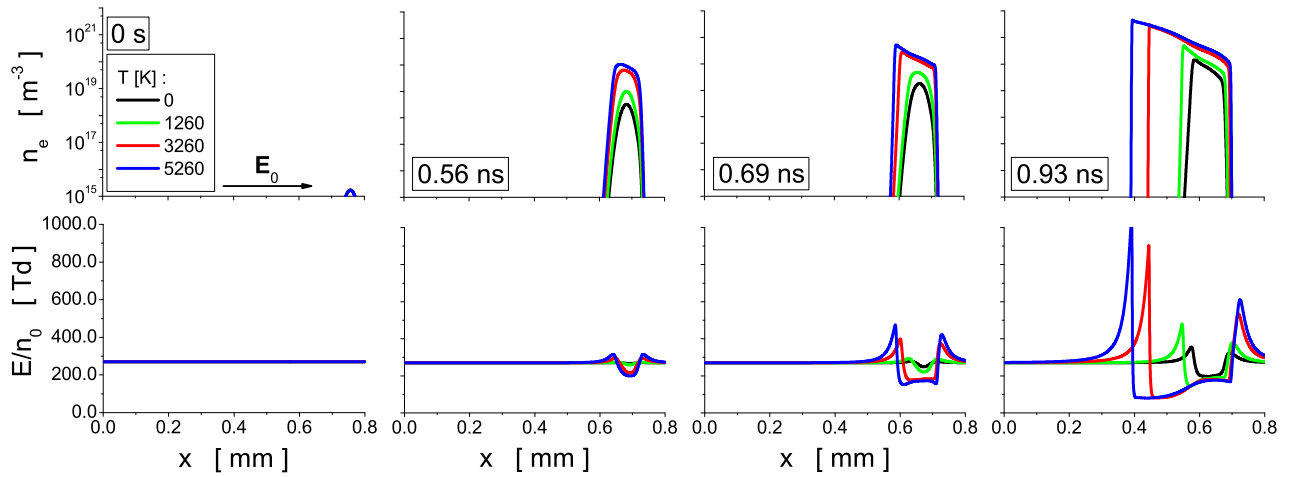
Tema ovog potpoglavlja je analiza razvoja i propagacije strimera u parama indijuma na različitim temperaturama. Proračuni su vršeni klasičnim fluidnim modelom u 1.5D i 1D kon-



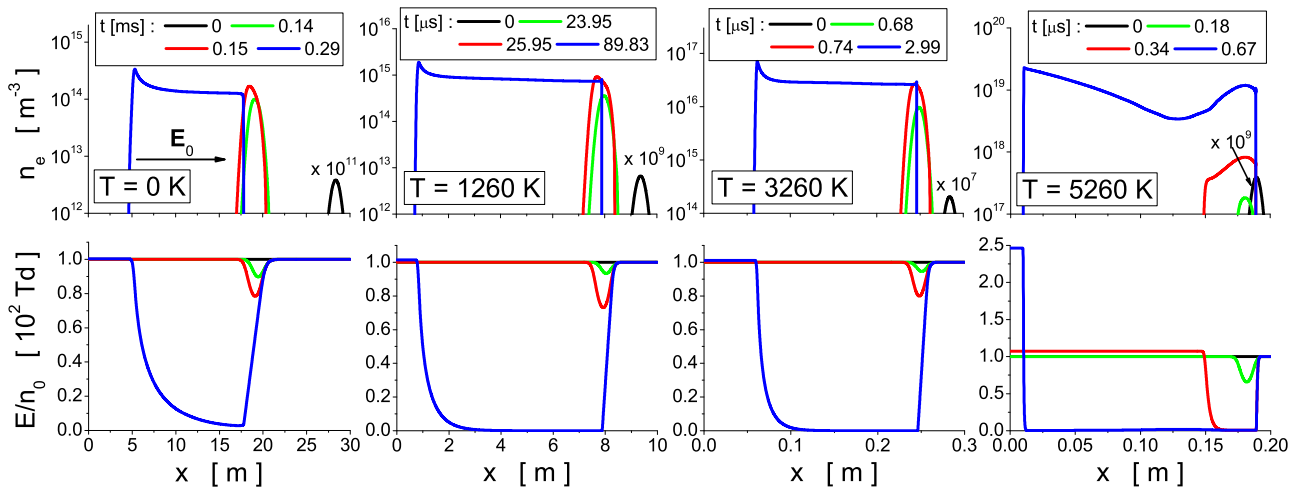
Slika 9.13: Brzinski koeficijenti za transfer impulsa u elastičnim sudarima, sumu neelastičnih procesa, sumu superelastičnih procesa i jonizaciju. Koeficijenti predstavljaju sume odgovarajućih koeficijenata za osnovni i pobuđen energijski nivo. Rezultati Monte Karlo simulacija u funkciji redukovanog električnog polja na različitim temperaturama indijumovih para.



Slika 9.14: Procentualna razlika između balk i fluks brzine drifta (a), longitudinalnog (b) i transverznog koeficijenta difuzije elektrona (c) u parama indijuma. Rezultati Monte Karlo simulacija u funkciji redukovanog električnog polja na različitim temperaturama indijumovih para.



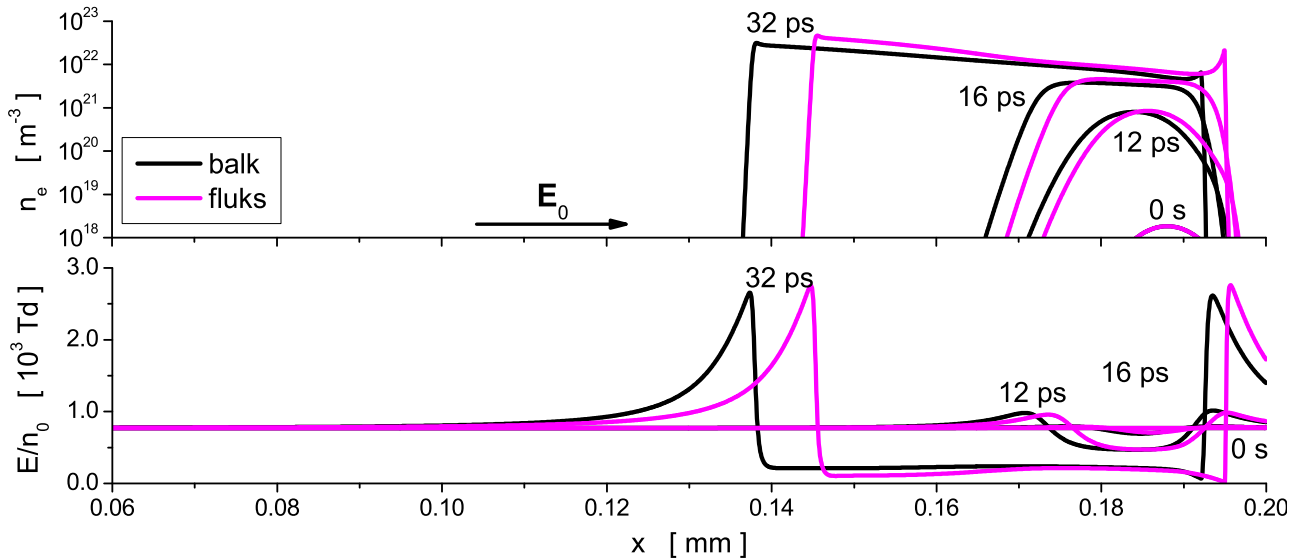
Slika 9.15: Razvoj i propagacija strimera u parama indijuma u funkciji električnog polja na 270 Td na različitim temperaturama. Rezultati klasičnog fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji uz korišćenje balk transportnih koeficijenata elektrona izračunatih Monte Karlo simulacijama.



Slika 9.16: Razvoj i propagacija strimera u parama indijuma u funkciji električnog polja na 100 Td na različitim temperaturama. Rezultati klasičnog fluidnog modela u 1D konfiguraciji uz korišćenje balk transportnih koeficijenata elektrona izračunatih MConte Karlo simulacijama.

figuraciji u kome su korišćeni transportni koeficijenti elektrona iz prethodnog potpoglavlja. Na osnovu narednih rezultata se vidi da prisustvo atoma indijuma u pobuđenom stanju $(5s^25p)^2P_{3/2}$ značajno utiče na karakteristike strimera.

Na slici 9.15 je prikazan razvoj i propagacija strimera u parama indijuma pri spoljašnjem električnom polju od 270 Td na različitim temperaturama. U pitanju su rezultati fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji. Profil koncentracije elektrona na početku simulacije ima oblik Gausijana dok je električno polje jednako vrednosti spoljašnjeg polja. Koncentracija elektrona raste u ranoj fazi razvoja strimera (0.56 ns) pri čemu profili na 3260 K i 5260 K počinju da se transformišu u oblik koji podseća na strimer. Električno polje u kanalu ove strukture je zaklonjeno za maksimalnih 26.2% (na 5260 K) u odnosu na vrednost spoljašnjeg polja dok je polje na frontu pojačano za 16.7% u odnosu na istu referentnu vrednost. Sa daljim protokom vremena, u trenutku 0.69 ns, koncentracija elektrona raste na račun povećanja polja na frontu formiranih struktura. Na ovoj većoj vrednosti polja je veći brzinski koeficijent jonizacije (slika 9.13) što doprinosi daljem povećanju koncentracije elektrona na frontu formiranih struktura. Strimer je potpuno formiran na 3260 K i 5260 K u ovom vremenskom trenutku dok je u 0.93 ns razvijen i na dve niže temperature.

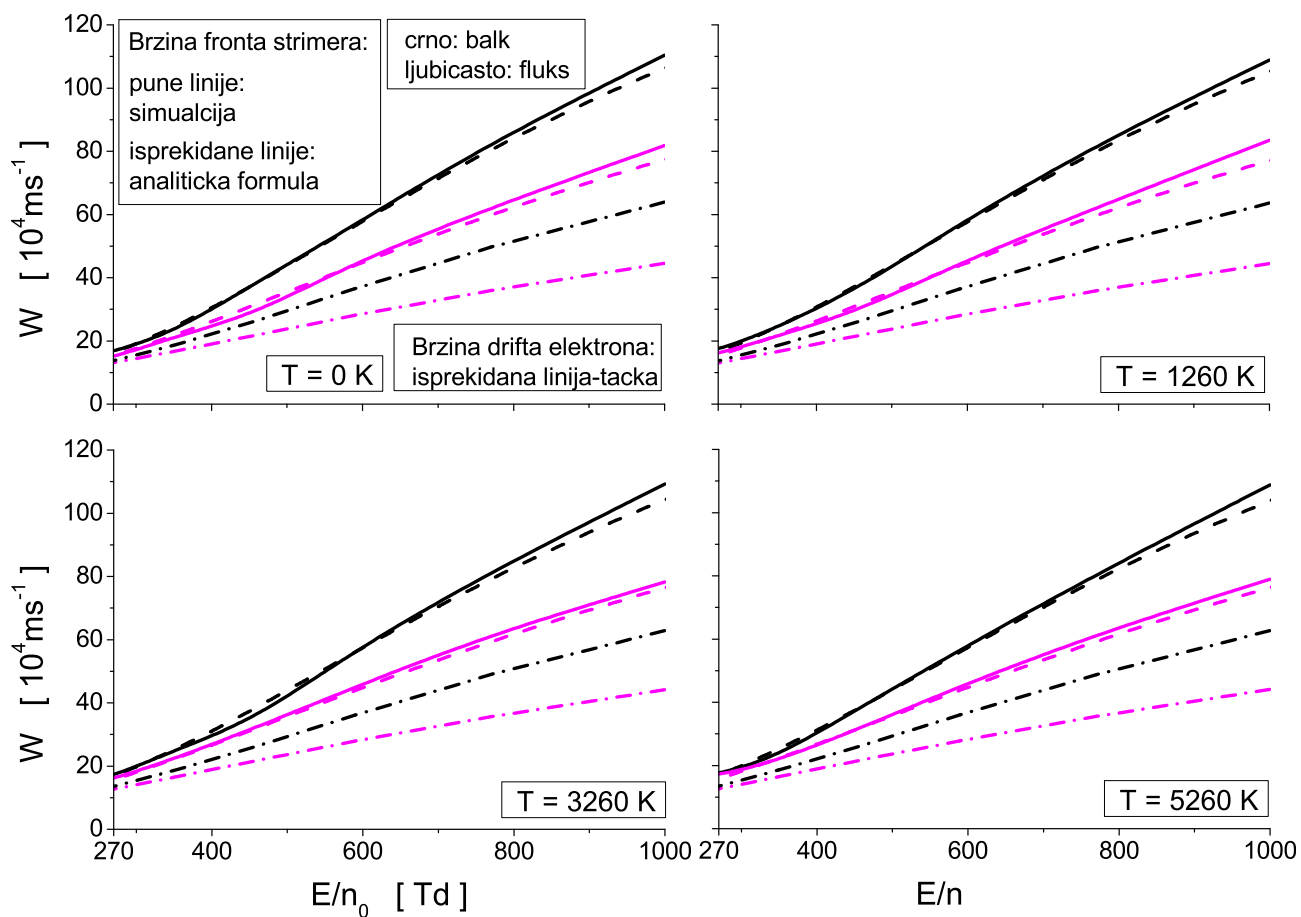


Slika 9.17: Razvoj i propagacija strimera u parama indijuma u funkciji električnog polja na 770 Td i 1260 K. Rezultati klasičnog fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji uz korišćenje balk i fluks transportnih koeficijenata elektrona izračunatih Monte Karlo simulacijama.

U cilju boljeg razumevanja efekta temperature, na slici 9.16 je prikazan razvoj i propagacija strimera pri spoljašnjem električnom polju od 100 Td. U pitanju su rezultati fluidnog modela u 1D konfiguraciji. Svaki panel sa koncentracijom elektrona i njemu odgovarajućim električnim poljem predstavlja rezultat razvoja i propagacije strimera na datoj temperaturi u četiri karakteristična vremenska trenutka. Pre svega, primećuje se da se razvoj i propagacija strimera dešavaju na različitim prostornim i vremenskim skalama na svakoj od analiziranih temperatura indijumovih para. U profilima n_e potpuno formiranih strimera (tamno plave krive) se uočava karakteristično povećanje koncentracije elektrona na frontu dok se odstupanje od ovakvog ponašanja primećuje u rezultatu na 5260 K. Na toj temperaturi se javlja porast koncentracije elektrona na začelju strimera kako u trenutku kada je strimer potpuno formiran ($0.67 \mu s$) tako i u ranijoj fazi njegovog razvoja ($0.34 \mu s$). Istovremeno, potpuno je zaklonjeno električno polje strimera u ova dva vremenska trenutka. Prikazano ponašanje je posledica velikog $K_{joniz.}$ na 5260 K na niskom E/n_0 (slika 9.12) čime je omogućena jonizacija atoma indijuma kako na osnovnom tako i u pobuđenom energijskom stanju. Upravo su jonizacije u oblasti začelja strimera odgovorne za povećanje koncentracije elektrona.

Na slici 9.17 je prikazan razvoj i propagacija strimera u 1.5D konfiguraciji pretpostavljajući dva skupa ulaznih veličina u simulaciji, balk i fluks transportne koeficijente. Spoljašnje električno polje je fiksirano na 770 Td a temperatura pare indijuma je 1260 K. U svim prikazanim fazama razvoja strimera (osim u 0 s) se uočava da roj elektrona odnosno formiran strimer prelazi veće rastojanje od katode ukoliko se kao ulazni podaci fluidnog modela koriste balk koeficijenti elektrona. Sa druge strane, koncentracija elektrona i polje imaju manju vrednost u maksimumu svojih profila u odnosu na vrednosti koje se dobijaju prilikom korišćenja fluks podataka. Ovakav odnos rezultata fluidnog modela uz korišćenje dualnih transportnih koeficijenata elektrona je uočen i u azotu [228, 237, 238]. Kako je $K_{joniz.}$ jedinstven (ne postoji balk i fluks koeficijent), rezultati sa ove slike se mogu objasniti većom vrednošću balk brzine drifta i balk longitudinalnog koeficijenta difuzije u odnosu na odgovarajuće fluks vrednosti (slika 9.14, paneli (a) i (b)).

Rezultati sa slike 9.18 prikazuje poređenje brzina fronta strimera u parama indijuma na različitim temperaturama. U pitanju su rezultati dobijeni na osnovu rešenja fluidnog modela u 1D konfiguraciji i analitičkog proračuna brzine fronta strimera (jednačina 7.57). Pri tome su kao ulazni podaci korišćeni balk i fluks transportni koeficijenti elektrona izračunati MC simulaci-



Slika 9.18: Brzina fronta strimera u parama indijuma u funkciji električnog polja na različitim temperaturama. Rezultati klasičnog fluidnog modela u 1D konfiguraciji i analitičke formule uz korišćenje balk i fluks transportnih koeficijenata elektrona izračunatih Monte Karlo simualcijama. Radi poređenja, prikazane su i balk i fluks brzine drifta elektrona. Oznake krivih sa gornjeg levog panela se odnose i na preostale panele.

jama. Pored ovoga su prikazne balk i fluks brzine drifta elektrona. Ukoliko se obrati pažnja na odnos brzina fronta strimera i brzina drifta elektrona, primećuje se da on iznosi bar 50% u korist brzine fronta strimera. Ovaj odnos je približno jednak bez obzira na dualnu prirodu transportnih koeficijenata i temperaturu indijumovih para. U pitanju je već ustanovljena činjenica koja je potvrđena kako u neutralnim gasovima [228, 237, 238] tako i u atomskim tečnostima [141]. Razlog leži u tome što na brzinu propagacije strimera utiče ne samo brzina drifta elektrona već i brzinski koeficijent jonizacije na frontu strimera kao i snažna difuzija indukovana velikim gradijentom koncentracije elektrona na frontu strimera.

Ukoliko međusobno poredimo brzine fronta strimera koje su izračunate na različite načine (na osnovu rezultat fluidnih modela i analitičke formule), vidimo da se međusobno odstupanje ovih rezultata zadržava u okviru 3.5% na svim analiziranim temperaturama u slučaju obe grupe dualnih transportnih koeficijenata elektrona. Ovaj rezultat pokazuje da se brzina fronta strimera u indijumovim parama u prikazanom opsegu polja može izračunavati sa velikom preciznošću i putem analitičke formule. Za razliku od ovog gasa, kod jako elektornegativnih gasova je primećeno veliko međusobno odstupanje brzina fronta strimera izračunatih na dva pomenuta načina koje je posledica snažnog nekonzervativnog procesa zahvata elektrona (slika 7.9).

Brzina fronta strimera koja je izračunata korišćenjem balk transportnih koeficijenata elektrona ima veće vrednosti od one koja se dobija uz korišćenje fluks koeficijenata. Ovaj međusoban odnos je vidljiv na svim prikazanim poljima, na svim temperaturama kao i pri oba načina izračunavanja brzine fronta strimera. Upoređujući rezultate sa svih panela slike 9.18 se uočava da brzina fronta strimera neznatno zavisi od temperature indijumovih para u celokupnom prikazanom opsegu E/n_0 . Razlog leži u činjenici da se brzina fronta strimera računa praćenjem kretanja tačke na frontu ove strukture kojoj odgovaraju takve vrednosti E/n_0 na kojima ne postoji značajnija zavisnost koeficijenata W (slika 9.10(b)), $K_{joniz.}$ (slika 9.12) i $n_0 D_L$ (slika 9.11(b)) od temperature indijumovih para.

9.4 Zaključak

Tema ovog poglavlja je analiza transporta elektrona, tranzicije lavina u strimer i propagacije strimera u metalnim parama. Prikazani rezultati nalaze značaj u modelovanju i konstrukciji izvora svetlosti koji rade na principu električnih gasnih pražnjenja.

Prvi deo poglavlja je posvećen transportu elektrona u parama žive. Pre svega, konstruisan je skup preseka za rasejanje elektrona u parama ovog metala čiji jedan od preseka reprezentuje neelastične gubitke energije elektrona u sudarima sa diemrima žive. Ovi molekuli, čija se koncentracija u gasu povećava sa porastom pritiska, u značajnoj meri utiču na ponašanje transportnih koeficijenata elektrona. Skrenuta je pažnja na značaj pažljivog proračuna transportnih koeficijenata elektrona u opsegu najnižih električnih polja. Ispitivan je uticaj temperature živinih para na transportne koeficijente elektrona u širokom opsegu polja na osnovu kojih je utvrđena njihova temperaturska zavisnost samo u opsegu polja u kojima se oseća uticaj dimera žive.

U drugom delu ovog poglavlja su prikazani najznačajniji rezultati proučavanja transporta elektrona i propagacije negativnih strimera u parama indijuma. Prvi korak je bio konstrukcija skupova preseka za rasejanje elektrona na atomu indijuma koji se namazi u osnovnom stanju $(5s^2 5p)^2 P_{a/2}$ i prvom pobuđenom metastabilnom stanju $(5s^2 5p)^2 P_{3/2}$. Proračun transportnih koeficijenata elektrona u smešama gasnih atoma koji se nalaze u osnovnom stanju i gasnih atoma koji se nalaze u prvom pobuđenom metastabilnom stanju je od ključnog značaja za razumevanje kinetike elektrona u parama indijuma čije se temperature kreću do ~ 5000 K. Skupove preseka, između ostalih, čine i kanali za pojedinačne superelastične sudarne procese koji utiču na balans srednje energije elektrona. Generisana baza transportnih podataka je iskorišćena kao skup ulaznih parametara klasičnog fluidnog modela u 1.5D i 1D konfiguraciji

kojim je ispitivan razvoj i proagacija strimera u ovom gasu. Opaženo je da brzina propagacije strimera u parama indijuma raste sa porastom temperature gasa i da su ove iste brzine veće ukoliko se koriste balk transportni koeficijenti, u poređenju sa strimerima koji su dobijeni u simulacijama gde se koriste fluks transportni koeficijenti.

Zaključak

Jako elektronegativni gasovi su grupa gasova okarakterisana velikom sposobnošću zahvata slobodnih elektrona. Zahvaljujući ovoj karakteristici, jako elektronegativni gasovi nalaze primenu u elektronskoj industriji za depoziciju tankih filmova i nagrizanje površina, u ulozi izvora negativnih jona kao i u ulozi dielektrika u sistemima za prenos električne struje. Među istraživačima širom sveta, jedna od aktuelnih tema je pronalazak zamene za gas SF₆. U pitanju je gas izuzetnih dielektričnih karakteristika koji se, nažalost, odlikuje izuzetno dugim atmosferskim vremenom života (3200 godina) i velikom vrednošću faktora globalnog zagrevanja (22800 puta više od referentnog CO₂). U tom smislu je neodložan zadatak pronalazak zamene za SF₆, gas koji u izuzetno velikoj meri utiče na povećanje efekta staklene bašte.

Pri ispitivanju gasova sa ciljem pronalaska alternative gasa SF₆, potrebno je ustanoviti sudarne i transportne osobine elektrona u ispitivanim gasovima kao i sposobnost gasa za sprečavanje razvoja strimera, pojave koja prethodi električnom pražnjenju. U literaturi se mogu naći rezultati fluidnog modelovanja razvoja i propagacije strimera u gasovima koji su ispitivani u ovu svrhu. Međutim, i pored preciznosti fluidnih modela, rezultati ovih proračuna direktno zavise od ulaznih podataka što su transportni koeficijenti elektrona. Ovi koeficijenti se mogu izračunati različitim numeričkim metodama (rešavanje Bolcmanove jednačine, Monte Karlo simulacije) ali se, zbog prirode ispitivanih gasova, očekuje dobijanje dve familije transportnih koeficijenata: balk u fluks. Njihova međusobna razlika se kreće u opsegu od nekoliko procenata do nekoliko desetina procenata, u zavisnosti od vrste gasa, električnog polja i transportnog koeficijenta koji se izračunava. U velikom broju objavljenih radova se ne razmatra ova jako značajna činjenica koja utiče na rezultat fluidnog modelovanja razvoja strimera u gasovima. Postoji i druga vrsta problema na koju se često može naići u literaturi. Naime, brojni autori koriste numeričku metodu za izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona koja se zasniva na rešavanju Bolcmanove jednačine. Neretko se nailazi na neopravdanu primenu aproksimacije dva člana za rešavanje Bolcmanove jednačine u toku ispitivanja gasova koji se odlikuju velikim kolizionim frekvencijama za odvijanje nekonzervativnih sudarnih procesa. U jako elektronegativnim gasovima, koji sadrže velike preseke za zahvat elektrona, javlja se intenzivan gubitak elektrona niskih energija. Gubitkom velikog broja elektrona iz ove oblasti energija, srednja energija elektrona postaje veća te odgovara odvijanju neelastičnih sudarnih procesa. Ti procesi

povećavaju anizotropan karakter funkcije raspodele u brzinskom prostoru koji ne može adekvatno biti opisan sa samo dva člana sferno-harmonijskog razvoja funkcije raspodele. Iako je poznat domen primenljivosti aproksimacije dva člana, ipak se nailazi na objavljene rezultate analize jako elektronegativnih gasova koji su dobijeni upravo ovom aproksimacijom.

Izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona u jako elektronegativnim gasovima putem Monte Karlo simulacija je specifično na drugačiji način. Intenzivan gubitak elektrona u simulacijama, usled zahvatanja niskoenenrgijskih elektrona, dovodi do nedovoljne pouzdanosti izlaznih veličina ovih simulacija na osnovu kojih se izračunavaju transportni koeficijenti. U ekstremnim slučajevima, simulacije se prekidaju pre dostizanja stacionarnog stanja u kome je jedino opravdano izračunavanje transportnih koeficijenata. Ova specifičnost jako elektronegativnih gasova zahteva uvođenje tehnika kojima se kompenzuju efekti intenzivnog gubitka elektrona.

Bez obzira na vrstu numeričke metode za izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona u gasovima, njihovi ulazni podaci su skupovi preseka za rasejanje elektrona u ispitivanom gasu. Sastavljanje skupova preseka je jedan od ključnih koraka u cilju pravilnog izračunavanja transportnih karakteristika gasova. U literaturi se može naići na primere analize gasova izvedenih na osnovu skupova preseka koji ne obezbeđuju balans broja čestica, impulsa i energije. Drugim rečima, skupovi preseka nisu fitovani na referentne eksperimentalne podatke već su formirani jednostavnim prikupljanjem preseka za pojedinačne sudarne procese elektrona i ispitivanog gasa. Bez obzira na preciznost merenja pojedinačnih preseka, primena u metodama za izračunavanje transportnih koeficijenata zahteva njihovo reskaliranje putem odgovarajućih tehnika a jedna od njih je tehnika rojeva.

Lampe koje funkcionišu na principu električnih gasnih pražnjenja proizvode svetlost zahvaljujući deekscitaciji elektronski pobuđenih stanja atoma/molekula aditiva koji se u maloj količini nalaze u radnom gasu. U velikom broju slučajeva, ulogu aditiva ima živa. Njene karakteristike su takve da se pobuđeno stanje odgovara proizvodnji fotona one talasne dužine koja, prilikom pobude materijala kojim su obloženi zidovi lampe, daje svetlost iz vidljivog dela spektra. Dakle, živa je ključna za efikasan rad velikog broja lampi koje funkcionišu na principu električnih gasnih pražnjenja ali je njena upotreba najstrožije zabranjena u zemljama Evropske Unije i mnogim drugim zemljama iz razloga toksičnosti ovog metala. Paraleleno za aktuelnom potragom za zamenom SF_6 u ulozi gasnog dielektrika u sistemima za prenos električne struje, u svetu je aktuelna tema o potrazi adekvatne zamene žive u pomenutim tipovima lampi.

U literaturi se mogu naći skupovi preseka za rasejanje elektrona u parama žive i transportni koeficijenti elektrona u ovom gasu. Međutim, ne postoje naznake o nehidrodinamičkom ponašanju transportnih koeficijenata elektrona u ovim parama koje se ogleda u zavisnosti koeficijenata od pritiska i temperature. Čest je slučaj i zanemarivanja termalnog kretanja atoma žive kao i razmatranje dualnosti transportnih koeficijenata elektrona u ovom gasu. Kao i kod jako elektronegativnih gasova, i pri ispitivanju ovog gasa je česta upotreba numeričkih procedura za rešavanje Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana koja je, i u ovom slučaju, problematična zbog velikog broja neelastičnih sudarnih procesa koje elektroni doživljavaju što utiče na neuniformnost funkcije raspodele u brzinskom prostoru. Iako se kao potencijalna zamena žive izdvajaju indijum i njegova jedinjenja, prvi objavljen skup preseka za rasejanje elektrona u parama ovog metala je rezultat istraživanja prikazanog u ovoj disertaciji. Tek je na osnovu njega bilo moguće izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona koji uzimaju u obzir značajnu populaciju prvog pobuđenog metastabilnog stanja $(5s^25p)^2P_{3/2}$ sa povećanjem temperature gasa do 5260 K.

Doktorska disertacija sadrži devet poglavlja pored kojih postoje i uvodno poglavlje kao i zaključak. U uvodnom poglavlju je prikazan pregled stanja u oblasti gasnih dielektrika koji nalaze primenu u sistemima za prenos električne struje. Takođe, prikazan je pregled literature posvećene analizi gasova, gasnih smeša i metalnih aditiva značajnim u lampama koje funkcionišu na principu razvoja električnih gasnih pražnjenja. Identifikovani su aktuelni prob-

lemi, propusti i nekonzistentnosti u dosadašnjim objavljivanim rezultatima koji predstavljaju motivacione faktore istraživanja predstavljenog u ovoj disertaciji. Među značajnijim doprinosima ove disertacije je istaknut razvoj tehnike za kontinualno reskaliranje elektrona u Monte Karlo simulacijama koja predstavlja neophodan alat u cilju pravilnog izračunavanja transportnih koeficijenata elektrona u jako elektronegativnim gasovima u oblasti polja u kojoj je značajna koliziona frekvenca za zahvat elektrona.

Na početku prvog poglavlja doktorske disertacije je objašnjen proces električnog proboja u gasovima. Posebna pažnja je skrenuta ka mehanizmima kontrole i suzbijanja razvoja ovog procesa u cilju sprečavanja oštećenja industrijske opreme u kojoj se koriste gasovi sa ulogom dielektrika. Kako bi se pronašla potencijalna zamena za SF_6 , snažan dielektrik koji u značajnoj meri utiče na povećanje efekta staklene bašte, dat je pregled karakteristika koje gas treba da poseduje kako bi bio okarakterisan kao poželjan dielektrik. Pored opreza pri korišćenju poznatih gasova, koji su detaljno ispitivani sa različitih aspekata, skrenuta je pažnja na činjenicu da se sa posebnim oprezom mora rukovati gasovima koji pripadaju najnovijoj generaciji dielektrika kako zbog nedovoljnih podataka o njihovim osobinama tako i zbog nedovoljnih informacija o produktima njihove dekompozicije.

U drugom poglavlju je predstavljena transportna teorija rojeva naelektrisanih čestica u gasovima. Najpre je uveden i definisan pojam roja nakon koga je analizirana numerička procedura za rešavanje Bolcmanove jednačine. Definisan je hidrodinamički režim i dati su izrazi za izračunavanje dve familije transportnih koeficijenata elektrona: fluks i balk koeficijenata. Zatim su objašnjeni osnovni koraci simulacija baziranih na Monte Karlo metodi i dati izrazi za izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona ovom numeričkom metodom. Skrenuta je pažnja na činjenicu da je dualnost transportnih koeficijenata posledica anizotropije raspodele srednje energije duž roja koja je izražena kod gasova u kojima elektroni učestvuju u nekonzervativnim sudarnim procesima. Istaknut je značaj pravilnog definisanja ovih familija transportnih koeficijenata usled velike razlike između njih koja može da iznosi i do nekoliko desetina procenata.

U trećem poglavlju disertacije je analiziran transport elektrona u gasu CF_3I , potencijalnom kandidatu za zamenu SF_6 u ulozi gasnog dielektrika u sistemima za prenos električne struje. Najpre je konstruisan konačan skup preseka za rasejanje elektrona u ovom gasu primenom tehnike rojeva, iterativne procedure za normalizaciju skupova preseka. Ovim je obezbeđeno slaganje između izračunatih i referentnih izmerenih transportnih koeficijenata elektrona. Transportni koeficijenti su izračunati kako u čistom gasu tako i u njegovim smešama sa Ar i CO_2 u opsegu redukovanih električnih polja u kome postoje eksperimentalni podaci. U svrhu ispitivanja transporta elektrona u drugoj navedenoj smeši, konstruisan je i skup preseka za rasejanje elektrona u CO_2 takođe primenom tehnike rojeva. Transportni koeficijenti su izračunati Monte Karlo simulacijama i javno dostupnim kodom BOLSIG+ za rešavanje Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Druga numerička tehnika je korišćena sa ciljem provere njenog domena primenljivosti kada su u pitanju jako elektronegativni gasovi.

U četvrtom poglavlju disertacije je predstavljen jedan od najznačajnijih doprinosa ove doktorske disertacije. Razvijena je tehnika kontinualnog reskaliranja elektrona u Monte Karlo simulacijama koja je, pored već postojećih tehnika reskaliranja, neophodna u cilju ispitivanja transporta elektrona u gasovima sa izraženim nekonzervativnim sudarnim procesima. Istaknute su karakteristike ove tehnike a naglašena je i njena veća fleksibilnost i univerzalnost u odnosu na već postojeću tehniku kontinualnog reskaliranja elektrona. Implementiranjem ove tehnike u naš Monte Karlo kod, po prvi put su na pravilan način izračunati transportni koeficijenti elektrona u SF_6 , CF_3I i njihovim smešama u opsegu niskih polja u kome se oseća snažan uticaj procesa zahvata elektrona. Uočeni su karakteristični kinetički fenomeni u transportu elektrona u ovim jako elektronegativnim gasovima od kojih se, kao jedni od najznačajnijih, izdvajaju anomalno ponašanje srednje energije elektrona u SF_6 i pojava NDC efekta isključivo u profilima balk brzine drifta kod oba ispitivana gasa.

U petom poglavlju disertacije su prikazani rezultati ispitivanja transpota elektrona u $C_3H_2F_4$, jednom od gasova iz poslednje generacije gasnih dielektrika koji se odlikuje benignim uticajem na klimu planete Zemlje. Ispitivanje ovog gasa je sprovedeno u cilju utvrđivanja njegove podobnosti u ulozi potencijalne zamene za SF_6 u ulozi gasnog dielektrika u sistemima za prenos električne struje. Pre svega, primenom tehnike rojeva je konstruisan skup preseka za rasejanje elektorna u ovom gasu koji obezbeđuje slagane sa rezultatima referentnih eksperimentalnih merenja. Ne samo da je po prvi put konstruisan skup preseka za rasejanje elektrona u ovom gasu iz najnovije generacije gasnih dielektrika, već je konstruisana i varijanta ovog skupa preseka koja fituje nehidrodinamičko ponašanje brzinskog koeficijenta efektivne jonizacije koje je uočeno u merenjima druge grupe autora. Transportni koeficijenti elektrona su izračunati Monte Karlo simulacijama i rešavanjem Bolcmanove jednačine kako u čistom gasu tako i u njegovim smešama sa Ar, N_2 , CO_2 i SF_6 . Kao još jedan od najznačajnijih fenomena uočenih u ovoj doktorskoj disertaciji se idvaja efekat pozitivne sinergije u smeši gasova $C_3H_2F_4$ - SF_6 koji se ogleda u povećanju vrednosti kritičnog električnog polja gasne smeše sa opadanjem koncentracije SF_6 u njoj. Ne samo da pojava ovog fenomena obezbeđuje smanjenje upotrebe SF_6 , koji u značajnoj meri utiče na povećanje efekta staklene bašte na planeti Zemlji, već utiče i na poboljšanje dielektričnih osobina smeše ovih gasova. Ispostavlja se da iako je kritično polje gasa $C_3H_2F_4$ približno dvostruko niže od vrednosti kojom je okarakterisan SF_6 , smeša ova dva gasa može da obezbedi poželjne dielektrične karakteristike uz redukciju koncentracije SF_6 .

U šestom poglavlju disertacije su prikazani rezultati ispitivanja transporta elektrona u još jednom gasu iz najnovije generacije gasnih dielektrika. U pitanju je C_4F_7N , gas sa preko dva ipo puta višim kritičnim poljem u odnosu na vrednost kojom je okarakterisan SF_6 . Pre svega, prikazan je skup preseka za rasejanje elektrona u ovom gasu koji je po prvi put konstruisan u svrhu izrade ove disertacije. Transportni koeficijenti elektrona su izračunati u čistom gasu i njegovim smešama sa Ar, N_2 , CO_2 i SF_6 . Utvrđeno je da već pri $\sim 20\%$ C_4F_7N u smeši, bez obzira na drugu komponentu smeše, kritično polje ispitivane smeše dostiže vrednosti kojom je okarakterisan gas SF_6 .

Tema sedmog poglavlja doktorske disertacije je simulacija razvoja i propagacije negativnih strimera u gasovima i gasnim smešama analiziranim u svim prethodnim poglavljima. Radi preglednosti, prikazani su samo rezultati koji se odnose na CF_3I čija se zavisnost od različitih ulaznih parametara na generički način javlja i kod ostalih ispitivanih gasova. Simulacije su vršene modelima koji počivaju na rešavanju fluidnih jednačina u kojima se, kao ulazni podaci, koriste transportni koeficijenti elektrona izračunati u prethodnim poglavljima disertacije. Objašnjene su razlike između, na prvi pogled jednakih, fluidnih modela sa balk i fluks podacima između kojih postoji suštinska razlika indukovana nekonzervativnim sudarima u ispitivanim gasovima. Definisana je razlika između klasičnih i korigovanih fluidnih modela i prikazane su jednačine na kojima počivaju ovi modeli u 1D i 1.5D konfiguraciji. Utvrđeno je na koji način proces razvoja i propagacije strimera zavisi od jačine spoljašnjeg električnog polja, numeričke procedure za izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona, dualnosti tih koeficijenata, sastava gasne smeše kao i, naravno, vrste fluidnih modela i njihove konfiguracije. Na osnovu rezultata fluidnih modela u 1D konfiguraciji su izračunate brzine fronta strimera i upoređene sa vrednostima dobijenim na osnovu analitičkog izraza. Ustanovljeno je da razlike između dva pomenuta načina izračunavanja brzine fronta strimera rastu sa redukovanim električnim poljem i da dostižu vrednost od $\sim 20\%$ u opsegu najviših ispitivanih polja. Ovo je pokazatelj da se analitička formula za izračunavanje brzine propagacije strimera razvijenih u jako elektronegativnim gasovima ne može primenjivati u proizvoljnom opsegu redukovanih električnih polja.

Za razliku od prethodnog poglavlja u kome su prikazani i diskutovani rezultati simulacije razvoja i propagacije strimera u samo jednom gasu, u osmom poglavlju disertacije su sumirani, upoređeni i diskutovani rezultati razvoja i propagacije strimera u gasovima CF_3I , $C_3H_2F_4$ i

C₄F₇N koji su upoređeni sa rezultatima koji se odnose na SF₆ u cilju čije potencijalne zamene su i ispitivani. Pored toga, upoređivani su i rezultati transportnih koeficijenata elektrona u ovim gasovima kao i strukturne, fizičke, hemijske, dielektrične i ekološke karakteristike ovih gasova kako bi se sagledala njihova potencijalna primena u ulozi gasnih dielektrika u sistemima za prenos električne struje.

Deveto poglavlje doktorske disertacije prikazuje rezultate analize transporta elektrona kao i razvoja i propagacije strimera u metalnim parama. Za razliku od jako elektronegativnih gasova kod kojih je nepoželjan razvoj strimera, u ovom poglavlju su ispitivane pare žive i indijuma u kojima se očekuje razvoj strimera kako bi ovi gasovi bili efikasni u izvorima svetlosti koji funkcionišu na principu razvoja ove pojave. Živa se već koristi kao aditiv u lampama koje rade na principu električnih gasnih pražnjenja dok je, zbog njene toksičnosti, indijum u fokusu istraživanja kao njena potencijalan zamena. U ovoj disertaciji je najpre konstruisan skup preseka za rasejanje elektrona u parama žive u kome se, pored preseka sa atomima žive, nalazi i presek koji opisuje rotacione i vibracione sudarne procese elektrona sa molekulom žive Hg₂. Kako je za ovaj presek ustanovljena zavisnost od temperature i pritiska, transport elektrona u parama žive je ispitivan upravo u funkciji ova dva parametra. Ustanovljeno je da se sa porastom pritiska javlja NDC efekat u profilu brzine drifta elektrona što je posledica upravo preseka za rasejanje elektrona na dimerima žive. Pored značaja uzimanja sudara elektrona sa dimerima žive, istaknut je i značaj pravilnog opisa termalnog kretanja pozadinskog gasa radi preciznog izračunavanja transporta elektrona u opsegu niskih polja u kome je srednja energija elektrona uporediva sa termalnom energijom. U delu poglavlja koji se odnosi na ispitivanje transporta elektrona u parama indijuma, najpre je konstruisan skup preseka za rasejanje elektrona u parama ovog metala. Osim skupa preseka koji se odnosi na osnovno stanje, konstruisan je i skup preseka za rasejanje elektrona na atomima indijuma na prvom pobuđenom metastabilnom stanju u kome se elektroni nalaze na energijskom nivou $(5s^25p)^2P_{3/2}$. U oba skupa preseka, koji su po prvi put konstruisani u ovoj disertaciji, su inkorporirani preseki za superelastične sudarne procese koji su izračunati po principu detaljnog balansa. Ovako pripremljenim skupovima preseka se obezbeđuje pravilno izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona na nenultim temperaturama. U nastavku istraživanja, ovi transportni koeficijenti su iskorišćeni kao ulaz klasičnog fluidnog modela u 1D i 1.5D konfiguraciji u cilju ispitivanja razvoja i propagacije strimera u parama indijuma uz poseban osvrt na osetljivost rezultata na prisustvo elektrona na metastabilnom nivou. Uočeno je dobro slaganje između brzine fronta strimera, izračunate na osnovu rezultata fluidnog modelovanja, sa brzinom dobijenom primenom analitičke formule.

Osnovni naučni doprinosi postignuti u okviru doktorske disertacije

U nastavku je dat pregled i detaljno obrazloženje originalnih naučnih doprinosa ove doktorske disertacije.

1. Razvijen je konačan skup preseka za rasejanje elektrona u CF₃I koji je konzistentan sa referentnim eksperimentalnim podacima u čistom gasu i njegovim smešama sa Ar i CO₂. Pored ovog, razvijen je i konačan skup preseka za rasejanje elektrona u CO₂ koji daje dobro slaganje sa odgovarajućim referentnim podacima.

2. Razvijena je savremena tehnika kontinualnog reskaliranja elektrona u Monte Karlo simulacijama primenljiva u analizi transporta elektrona u gasovima sa izraženim nekonzervativnim sudarima.

3. Primenom tehnika reskaliranja elektrona, kako savremene tehnike kontinualanog reskaliranja elektrona tako i već postojećih tehnika, po prvi put su izračunati transportni koeficijenti elektrona u jako elektronegativnim gasovima CF₃I i SF₆ na niskim električnim poljima. Uočeni

su značajni fenomeni: opadanje vrednosti srednje energije elektrona u SF_6 sa porastom električnog polja i NDC efekat u profilima balk brzine drifta kod oba ispitivana gasa.

4. Po prvi put je razvijen konačan skup preseka za rasejanje elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$, jednom od dielektrika najnovije generacije. Ovim skupom preseka je obezbeđeno slaganje sa referentnim merenjima u čistom gasu i smešama sa Ar, N_2 , CO_2 i SF_6 . Pored ovoga, po prvi put je konstruisana i modifikovana varijanta skupa preseka za rasejanje elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ kojim se opisuje nehidrodinamičko ponašanje brzinskog koeficijenta efektivne jonizacije sa promenom pritiska. Uočen je izuzetno značajan efekat pozitivne sinergije u smeši $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{-SF}_6$ koji se ogleda u porastu kritičnog električnog polja gasne smeše sa smanjenjem koncentracije SF_6 .

5. Po prvi put je konstruisan konačan skup preseka za rasejanje elektrona u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$, još jednom dielektriku najnovije generacije. Kvalitet skupa preseka je potvrđen slaganjima izračunatih i referentnih transportnih koeficijenata elektrona u čistom gasu i njegovim smešama sa Ar i N_2 .

6. Na osnovu analize sudarnih i transportnih procesa elektrona kao i na osnovu analize razvoja i propagacije strimera u jako elektronegativnim gasovima ispitivanim u ovoj disertaciji, formirana je baza podataka na osnovu koje se može proceniti koji bi se gas ili gasna smeša mogli koristiti kao potencijalna zamena za SF_6 u ulozi dielektrika u sistemima za prenos električne struje.

7. Konstruisan je skup preseka za rasejanje elektrona u parama žive i ispitana je zavisnost transportnih koeficijenata elektrona od pritiska i temperature pozadinskog gasa. Jedan od značajnih uočenih fenomena je NDC efekat u profilu brzine drifta koji je indukovao dimerima žive.

8. Kontruisean je skup preseka za rasejanje elektrona u parama indijuma koga čine atomi u osnovnom i pobuđenom metastabilnom stanju. Uočen je NDC efekat u profilu brzine drifta na nultoj temperaturi indijumovih para koji iščezava sa porastom temperature.

U velikom broju dosadašnjih istraživanja se mogu pronaći rezultati izračunavanja transportnih koeficijenata elektrona u jako elektronegativnim gasovima dobijeni primenom neadekvatnih numeričkih alata. Česta je upotreba numeričkih metoda baziranih na aproksimaciji za rešavanje Bolcmanove jednačine zasnovanoj na zadržavanju prva dva člana sferno-harmonijske dekompozicije funkcije raspodele u brzinskom prostoru. U ovoj disertaciji je skrenuta pažnja na neophodnost primene adekvatnih numeričkih procedura u cilju pravilnog izračunavanja transportnih koeficijenata elektrona u gasovima sa izraženim nekonzervativnim sudarima zbog kojih funkcija raspodele u značajnoj meri odstupa od Maksvelijana. U ovakvim slučajevima je neophodna upotreba multi-term momentnih metoda za rešavanje Bolcmanove jednačine.

Postojanje nekonzervativnih sudara u jako elektronegativnim gasovima ne utiče samo na profil funkcije raspodele već i na generisanje dve familije transportnih koeficijenata elektrona: fluks i balk. Njihova međusobna razlika je posledica neuniformnog generisanja i zahvatanja slobodnih elektrona duž roja što je definisano energijskom zavisnošću nekonzervativnih procesa. U disertaciji je naglašeno, dok je brojnim rezultatima i pokazano, da razlike između ove dve familije transportnih koeficijenata mogu iznositi od par procenata do nekoliko redova veličina. Dodatno, istaknuto je da je neophodno voditi računa o primeni ovih familija transportnih koeficijenata. Dok se u eksperimentima sa rojevima mere balk transportni koeficijenti, u fluidnim modelima plazme se rešavaju fluidne jednačine u kojima se, u zavisnosti od tipa električnog pražnjenja i uslova simulacije, unose fluks ili balk transportni koeficijenti elektrona.

Ukoliko se transport elektrona u jako elektronegativnim gasovima analizira Monte Karlo simulacijama, u opsegu niskih polja, u kojima se oseća dejstvo preseka za zahvat elektrona,

dolazi do snažnog gubitka slobodnih elektrona. Ovim se povećava statistička nesigurnost veličina kojima se izračunavaju transportni koeficijenti elektrona dok se, u ekstremnim slučajevima, simulacije zaustavljaju pre dostizanja stacionarnog stanja. U disertaciji je skrenuta pažnja na neophodnost primena tehnika reskaliranja elektrona u cilju izračunavanja transportnih koeficijenata elektrona u SF₆, CF₃I i drugim jako elektronegativnim gasovima u opsegu niskih vrednosti E/n_0 . Za potrebe ove disertacije je razvijena savremena tehnika kontinualnog reskaliranja elektrona koja podrazumeva uvođenje fiktivnog procesa jonizacije čija je uloga u kompenzaciji efekata procesa zahvata elektroan. Fleksibilnost ove tehnike u odnosu na postojeću tehniku istog tipa se ogleda u izbegavanju određivanja kolizione frekvence fiktivnog procesa jonizadije pre početka simulacije. Umesto toga, njena vrednost na početku simulacije se izjednačuje sa frekvencnom koja se odnosi na proces zahvata elektrona dok se u daljem toku simulacije njena vrednost simultano prilagođava kolizionoj frekvenci za zahvat elektrona. Ovakvim postupkom se obezbeđuje da se trenutni broj elektrona ne razlikuje za više od 10% od inicijalnog broja elektrona zadatog na početku simulacije. Zadržavanjem broja elektrona u okviru unapred definisane vrednosti se obezbeđuje visoka statistička sigurnost izlaznih veličina Monte Karlo simulacija čime se omogućava precizno izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona.

Jako elektronegativni gasovi indukuju niz specifičnih fenomena u profilima transportnih koeficijenata izračunatim u funkciji redukovano električnog polja. Pokazano je da je opadanje srednje energije elektrona u SF₆ sa porastom E/n_0 posledica kombinacije efekata grejanja roja zahvatom i hlađenja roja neelastičnim procesima. U probilima balk brzine drifta u gasovima SF₆ i CF₃I je uočen efekat negativne diferencijalne provodnosti uz njegovo istovremeno odsustvo u profilima fluks brzine drifta. Ustanovljeno je da NDC nije prvenstveno posledica oblika preseka za zahvat elektrona već da je njegova pojava posledica zajedničkog dejstva eksplicitnih i implicitnih efekata procesa koji modifikuju broj elektrona u roju. Tumačenje ponašanja koeficijenata difuzije u jako elektronegativnim gasovima je znatno komplikovanije zbog kompleksnosti uticajnih faktora od kojih se, kao najznačajniji, izdvajaju efekat termalne anizotropije i efekat anizotropije indukovani spoljašnjim poljem.

Ispitivanju transporta elektrona u dielektriku C₃H₂F₄ je prethodilo sastavljanje skupa preseka za rasejanje elektrona u ovom gasu. Ne samo da je po prvi put sastavljen skup preseka za ovaj gas iz grupe četvrte generacije gasnih dielektrika već je sastavljena i modifikovana verzija skupa preseka koja fituje nehidrodinamičko ponašanje brzinskog koeficijenta efektivne jonizacije. U smeši gasova C₃H₂F₄ i SF₆ je uočen efekat pozitivne sinergije koji se ogleda u povećanju vrednosti kritičnog električnog polja gasne smeše sa smanjenjem koncentracije SF₆ u njoj. Ovaj izuzetno značajan fenomen obezbeđuje ne samo poboljšanje karakteristika dielektrika, kada je u pitanju sposobnost zadržavanja izolatorskih svojstava do viših vrednosti električnog polja, već i smanjenje upotrebe gasa SF₆ koji značajno utiče na povećanje efekta staklene bašte na Zemlji. I pored toga što čisto C₃H₂F₄ ima daleko nižu vrednost kritičnog polja od SF₆ (~190 Td), upravo je razvoj efekta pozitivne sinergije razlog velikog interesovanja istraživačke zajednice za ispitivanje gasa C₃H₂F₄. Ispitivanje drugog gasa iz najnovije generacije gasnih dielektrika, C₄F₇N, je takođe započeto konstruisanjem skupa preseka za rasejanje elektrona što je takođe urađeno po prvi put. U pogledu kritičnog električnog polja, C₄F₇N dostiže vrednost koja se odnosi na gas SF₆ čak već sa koncentracijom od približno 20% u smešama sa Ar, N₂ i CO₂ što je izuzetno značajan rezultat koji otvara mogućnost potencijalne primene smeša ovih gasova u ulozi gasnih dielektrika.

U svrhu utvrđivanja sposobnosti zadržavanja dielektričnih osobina gasova, izvršeno je modelovanje razvoja i propagacije strimera u gasovima SF₆, CF₃I, C₃H₂F₄ i C₄F₇N i značajnim smešama putem modela zasnovanih na rešavanju fluidnih jednačina. Razmatrana je zavisnost rezultata simulacija od jačine spoljašnjeg električnog polja, vrste fluidnih modela (klasičan, korigovan), konfiguracije fluidnog modela (1D, 1.5D), vrste numeričkih metoda za izračunavanje

transportnih koeficijenata (Bolcman, Monte Karlo) i dualne prirode transportnih koeficijenata (balk, fluks). Simulacije modelima u 1.5D konfiguraciji sa ulaznim podacima izračunatim Monte Karlo simulacijama predviđaju brži razvoj strimera od slučaja kada je korišćen model u 1D konfiguraciji dok su ulazni podaci rezultati rešavanja Bolcmanove jednačine. Radi zaštite industrijske opreme koja bi se punila ovim gasovima, procena dometa razvijenog strimera se mora vršiti pri strožim uslovima simulacije (u ovom slučaju, 1.5D konfiguracija i MC ulazni podaci). Poređenjem rezultata različitih fluidnih modela je ustanovljeno da kalsičan model sa balk podacima predviđa najbrži razvoj strimera bez obzira na ispitivan gas. Na osnovu dobijenih rezultata u 1D modelima je izračunata brzina fronta strimera i upoređena kako sa izrazom dobijenim analitičkim proračunom tako i sa brzinom drifta elektrona u roju. Skrenuta je pažnja na činjenicu da izraz za analitičko izračunavanje brzine fronta strimera ima ograničen domen primenljivosti kada su u pitanju jako elektronegativni gasovi. Sa druge strane, značajno veća vrednost brzine fronta strimera od brzine drifta elektrona je pokazatelj da je brzina fronta strimera posledica brzine drifta elektrona, intenzivne jonizacije gasa na frontu strimera i snažne difuzije koja se javlja usled velikog gradijenta gustine elektrona na frontu strimera.

Upoređujući karakteristike sva četiri ispitivana gasa, sa stanovišta predlaganja potencijalne zamene za SF₆ u ulozi gasnog dielektrika u sistemima za prenos električne struje, ustanovljeno je da čist C₄F₇N ima najveće kritično električno polje. Do identičnog zaključka se dolazi poređenjem rezultata fluidnog modelovanja: strimer se najsporije razvija u ovom gasu u poređenju sa SF₆, CF₃I i C₃H₂F₄. Međutim, ukoliko su uslovi simulacije takvi da do razvoja strimera dođe u svakom od ova četiri ispitivana gasa, najkraći domet u pravcu električnog polja dostiže strimer u C₃H₂F₄ što potencijalno osigurava najmanju verovatnoću za oštećenje opreme koja je punjena ovim gasom. Poređenjem fizičkih osobina ovih gasova se zaključuje da se nijedan od tri ispitivana gasa ne odlikuje tačkom ključanja uporedivom sa SF₆. Međutim, ova činjenica je relativno lako rešiva formiranjem adekvatnih gasnih smeša. Sa druge strane, svaki od ispitivanih gasova u ovoj disertaciji ima daleko benigniji uticaj na klimu planete Zemlje u odnosu na SF₆ kako u pogledu atmosferskog vremena života tako i po vrednosti faktora globalnog zagrevanja. Zaključuje se da je predlaganje zamene za SF₆ u ulozi dielektrika u sistemima za prenos električne struje izuzetno komplikovan i sveobuhvatan zadatak koji zahteva ispitivanje gasova iz različitih aspekata, utvrđivanje velikog broja pojedinačnih karakteristika kako samih gasova tako i njihovih produkata kao i uvođenje kompromisa usled međusobnog uticaja jednih parametara na druge.

Deo disertacije je posvećen ispitivanju gasova sa potpuno suprotnim ciljem od onoga koji je do sada predstavljen. Naime, ispitivanje gasova je obavljeno sa ciljem pronalaska potencijalne zamene toksične žive u lampama koje funkcionišu na principu električnih gasnih pražnjenja kod kojih je pojava strimera u gasovima ključna za efikasan rad. Na osnovu konstruisanog skupa preseka za rasejanje elektrona u živinim parama je ispitivana zavisnost transportnih koeficijenata elektrona od pritiska gasa. Ustanovljeno je da se pojava efekta negativne diferencijalne provodnosti u profilu brzine drifta javlja sa porastom pritiska živinih para usled povećanja koncentracije dimera žive. Istaknuto je da se u cilju pravilnog opisa transporta elektrona na nenultoj temperaturi gasa, pored gubitaka energije elektrona moraju uzeti u obzir i dobici kako u sudarima sa monomerima tako i u sudarima sa dimerima žive. U tu svrhu je neophodno određivanje preseka za superelastične sudarne procese elektrona. Pored zavisnosti od pritiska, ustanovljeno je da transport elektrona u živnim parama zavisi i od temperature gasa što je takođe posledica prisustva dimera žive čiji presek za rasejanje zavisi i od ovog parametra. Ispitivanjem različitih metalnih para, kao potencijalan zamena žive se izdvaja indijum i njegova jedinjenja. Iz tog razloga, u ovoj disertaciji je po prvi put predstavljen skup preseka za rasejanje elektrona u parama ovog metala. Utvrđivanjem porasta populacije elektrona na višim energijskim nivoima sa porastom temperature, sastavljeni su skupovi preseka za rasejanje elektrona na atomima indijuma indijumom u osnovnom stanju $(5s^25p)^2P_{1/2}$ i prvom pobuđenom

metastabilnom stanju $(5s^25p)^2P_{3/2}$. Ispitivanjem transporta elektrona u parama indijuma u funkciji temperature gasa je uočena pojava efekta negativne diferencijalne provodnosti samo na nultoj temperaturi uz odsustvo ovog fenomena na svim ispitivanim nenultim temperaturama što je posledica opsega srednjih energija elektrona na ovoj temperaturi u kome se javlja tranzicija iz dominantnog neelastičnog u elastičan režim gubitaka energije elektrona što upravo pogoduje razvoju ovog fenomena. Skrenuta je pažnja na dualnost transportnih koeficijenata i u metalnim parama, konkretno u indijumu, gde se razlika između balk i fluks brzine drifta kreće do maksimalnih $\sim 30\%$ odnosno $\sim 45\%$ u slučaju longitudinalne difuzije. Procena električne provodnosti gasa je utvrđena ispitivanjem razvoja i propagacije strimera u parama indijuma. Rezultati modelovanja su pokazali da je brži razvoj strimera i njegov domet dalji od katode sa povećanjem temperature gasa i korišćenjem balk transportnih koeficijenata kao ulaznih podataka fluidnog modela. U slučaju ove metalne pare je ustanovljeno jako dobro međusobno slaganje brzine fronta strimera izračunate na osnovu rezultata fluidnog modelovanja i analitičkim proračunom na osnovu poznatih transportnih koeficijenata elektrona. Ovo je pokazatelj da se u gasovima sa ne tako izraženim nekonzervativnim sudarima, dobra predikcije brzine prostiranja strimera može izvesti na osnovu poznavanja transportnih koeficijenata elektrona u tim gasovima.

Ostvareni naučni doprinosi i prikazani rezultati u ovoj doktorskoj disertaciji otvaraju mogućnost budućih istraživanja. Pre svega, potrebno je ispitati još neke značajne dielektrike u cilju utvrđivanje njihove primene u svrhu zamene za SF_6 u ulozi dielektrika u sistemima za prenos električne struje. Pri tome bi se obratila pažnja kako na gasove koji su već u industrijskoj upotrebi tako i na dodatne gasove iz najnovije generacije dielektrika. Modelovanje razvoja i propagacije strimera u njima bi se vršilo savremenijim fluidnim modelima u dve ili čak tri dimenzije radi realističnijeg sagledanja dielektričnih karakteristika ispitivanih gasova. U pogledu pronalaska adekvatne zamene za živu u lampama čiji se rad bazira na razvoju električnih gasnih pražnjenja, pažnja bi se posvetila jedinjenima sa indijumom koja pokazuju obećavajuće karakteristike.

Literatura

- [1] Christophorou L G. *Adv. Electron. Electron Phys.*, 46:55, (1978).
- [2] Liebermann M A and Lichtenberg A J. *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing*. New York: John Wiley and Sons, (1994).
- [3] Granier A, Nicolazo F, Vallee C, Goullet A, Turban G, and Grolleau B. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 6:147, (1997).
- [4] Sheehan D P and Rynn N. *Rev. Sci. Instrum.*, 59:1369, (1988).
- [5] Grisham L R and Kwan J W. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A*, 606:83, (2009).
- [6] Hikita M, Ohtsuka S, Okabe S, and Ueta G. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 16:1413, (2009).
- [7] Petrović Z Lj, Šuvakov M, Nikitović Ž, Dujko S, Šašić O, Jovanović J, Malović G, and Stojanović V. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 16:S1, (2007).
- [8] Petrović Z Lj, Dujko S, Marić D, Malović G, Nikitović Ž, Šašić O, Jovanović J, Stojanović V, and Radmilović-Radenović M. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 42:194002, (2009).
- [9] White R D, Robson R E, Dujko S, Nicoletopoulos P, and Li B. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 42:194001, (2009).
- [10] White R D, Dujko S, Robson R E, Petrović Z Lj, and McEachran R P. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 19:034001, (2010).
- [11] Phelps A V. *Rev. Mod. Phys.*, 40:399, (1968).
- [12]
- [13] Huxley L G H and Crompton R W. *The Diffusion and Drift of Electrons in Gases*. London: Wiley, (1974).
- [14] Crompton R W. *Adv. At. Mol. Opt. Phys.*, 32:97, (1994).
- [15] Šašić O, Dujko S, Makabe T, and Petrović Z Lj. *Chem. Phys.*, 398:154, (2012).
- [16] Šašić O, Dupljanin S, de Urquijo J, and Petrović Z Lj. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 46:325201, (2013).

- [17] Petrović Z Lj, Raspopović Z M, Stojanović V D, Jovanović J V, Malović G, Makabe T, and de Urquijo J. *Appl. Surf. Sci.*, 253:6619, (2007).
- [18] Jovanović J V, Vrhovac S B, and Petrović Z Lj. *Eur. Phys. J. D*, (2002).
- [19] Jovanović J V, Stojanović V, Raspopović Z, de Urquijo J, and Petrović Z Lj. *Plasma Sources Sci. Technol.*, (2019).
- [20] Phelps A V and van Brunt R J. *J. Appl. Phys.*, 64:4269, (1988).
- [21] Christophorou L G and Olthoff J K. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 29:267, (2000).
- [22] Jarvis G K, Kennedy R A, and Mayhew C A. *Int. J. Mass Spectrom.*, 205:253, (2001).
- [23] Dahl D A and Franck C M. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 46:445202, (2013).
- [24] Rabie M and Franck C. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 22:296, (2015).
- [25] Christophorou L G and Olthoff J K. *Fundamental Electron Interactions with Plasma Processing Gases*. New York: Springer, (2004).
- [26] Hunter S R and Christophorou L G. *J. Chem. Phys.*, 80:6150, (1984).
- [27] Novak J P and Frechette M F. *J. Appl. Phys.*, 63:2570, (1988).
- [28] Hunter S R, Carter J G, and Christophorou L G. *Phys. Rev. A*, 38:58, (1988).
- [29] Petrović Z Lj, Wang W C, and Lee L C. *J. Appl. Phys.*, 64:1625, (1988).
- [30] Petrović Z Lj, Wang W C, Suto M, Han J C, and Lee L C. *J. Appl. Phys.*, 67:675, (1990).
- [31] Raju G G. *Gaseous Electronics: Theory and Practice*. Boca Raton: CRC Press Taylor & Francis (2006).
- [32] Raju G G. *Gaseous Electronics: Tables, Atoms, and Molecules*. Boca Raton: CRC Press Taylor & Francis (2012).
- [33] Dujko S, White R D, Petrović Z Lj, and Robson R E. *Phys. Rev. E*, 81:046403, (2010).
- [34] Dujko S, White R D, Petrović Z Lj, and Robson R E. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 20:024013, (2011).
- [35] Petrović Z Lj, Raspopović Z M, Dujko S, and Makabe T. *Appl. Surf. Sci.*, 192:1, (2002).
- [36] Dujko S, Raspopović Z M, and Petrović Z Lj. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 38:2952, (2005).
- [37] Dujko S, White R D, Ness K F, Petrović Z Lj, and Robson R E. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 39:4788, (2006).
- [38] Dujko S, White R D, and Petrović Z Lj. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 41:245205, (2008).
- [39] Raspopović Z M, Sakadžić S, Bzenić S, and Petrović Z Lj. *IEEE Trans. Plasma Sci.*, 27:1241, (1999).
- [40] Vrhovac S and Petrović Z Lj. *Phys. Rev. E*, 53:4012, (1996).
- [41] Robson R E, White R D, and Petrović Z Lj. *Rev. Mod. Phys.*, 77:1303, (2005).

- [42] year = (1986) volume = 85 pages = 4486 Robson R E, journal = J. Chem. Phys.
- [43] Dujko S. PhD thesis, James Cook University, Townsville, Australia, (2009).
- [44] Dujko S, Ebert U, White R D, and Petrović Z Lj. *Jap. J. Appl. Phys.*, 50:08JC01, (2011).
- [45] Robson R E. *Aust. J. Phys.*, 44:685, (1991).
- [46] Thomas W R L. *J. Phys. B*, 2:551, (1969).
- [47] Thomas R W L and Thomas W R L. *J. Phys. B*, 2:562, (1969).
- [48] Tagashira H, Sakai Y, and Sakamoto S. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 10:1051, (1977).
- [49] Taniguchi T, Tagashira H, and Sakai Y. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 10:2301, (1977).
- [50] Dyatko N A, Napartovich A P, Petrović Z Lj, Raspopović Z M, and Sakadžić S. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 33:375, (2000).
- [51] Dujko S, Raspopović Z M, Petrović Z Lj, and Makabe T. *IEEE Trans. Plasma Sci.*, 31:711, (2003).
- [52] Mirić J, Bošnjaković D, Simonović I, Petrović Z Lj, and Dujko S. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 25:065010, (2016).
- [53] Mulders H C J. PhD thesis, Eindhoven University of Technology, Eindhoven, Netherlands, (2010).
- [54] Hayashi D, Hilbig R, Körber A, Schwan S, Scholl R, Boerger M, and Huppertz M. *Appl. Phys. Lett.*, 96:061503, (2010).
- [55] Ögün C M, Truong W, Kaiser C, Kling R, and Heering W. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 47:285202, (2014).
- [56] Fedorov P P, Popov A I, and Simoneaux R L. *Russ. Chem. Rev.*, 86:240, (2017).
- [57] Xiao D. *Gas Discharge and Gas Insulation*. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University Press, Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, (2016).
- [58] Christophorou L G and Pinnaduwege L A. *IEEE Trans. Electr. Insul.*, 25:55, (1990).
- [59] Okabe S, Hayakawa N, Murase H, Hama H, and Okubo H. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 13:327, (2006).
- [60] Bujotzek M and Seeger M. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 20:845, (2013).
- [61] Hayakawa N, Hatta K, Okabe S, and Okubo H. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 13:842, (2006).
- [62] Li C, Teunissen J, Nool M, Hundsdorfer W, and Ebert U. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 21:055019, (2012).
- [63] Teunissen J and Ebert U. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 25:044005, (2016).
- [64] [dopuni-referenca iz SciencePartFranckDujko.pdf](#). *journal*, volume:pages, year.
- [65] [dopuni-referenca iz SciencePartFranckDujko.pdf](#). *journal*, volume:pages, year.

- [66] Škoro N, Marić D, Malović G, Graham W G, and Petrović Z Lj. *Phys. Rev. E*, 84:055401(R), (2011).
- [67] Torres C, Rayes P G, Castillo F, and Martinez H. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 370:012067, (2012).
- [68] Marić D, Savić M J, Škoro N, Radmilović-Rađenović M, Malović G, and Petrović Z Lj. *Eur. Phys. J. D*, 68:155, (2014).
- [69] Sivoš J, Marić D, Malović G N, and Petrović Z Lj. *Eur. Phys. J. D*, 74:64, (2020).
- [70] Raether H. *Electron Avalanches and Breakdown in Gases*. London: Butterworth, (1964).
- [71] Pedersen A. *IEEE Trans. Electr. Insul.*, 24:721, (1989).
- [72] Okubo H and Beroual A. *IEEE Electr. Insul. Magaz.*, 27:34, (2011).
- [73] Cooper F S. *Gas-insulated electric device*. United States Patent Office US2221670, (1937).
- [74] Brenninkmeijer C A. *Environ. Sci. Technol.*, 32:3077, (1998).
- [75] Dervos C and Vassiliou P. *J. Air Waste Manage. Assoc.*, 50:137, (2000).
- [76] Blackman J and Kantamaneni R. *Gaseous Dielectr.*, 10:457, (2004).
- [77] Niemeyer L. *Gaseous Dielectrics*, 8:459, (1998).
- [78] Christophorou L G, Olthoff J K, and Green D S. US Department of Commerce, Technology Administration, National Institute of Standards and Technology. (1997).
- [79] Uchii T, Hoshina Y, Kawano H, Suzuki K, Nakamoto T, and Toyoda M. In *Proceedings of International Symposium on Eco Topia Science ISETSO7*.
- [80] Stoller P, Seeger M, Iordanidis A, and Naidis G. *IEEE Trans. Plasma Science*, 41:2359, (2013).
- [81] Juhre K and Kynast E. In *14th Int. Symp. High Voltage Eng.(ISH)*, volume 1, (2005).
- [82] Seeger M, Smeets R, Yan J, Ito H, Claessens M, Dullni E, Franck C M, Gentils F, Hartmann W, Kieffel Y, Jia S, Jones G, Mantilla J, Pawar S, Rabie M, Robin-Jouan P, Schellekens H, Spencer J, Uchii T, Lia X, and Yanabu S. ELECTRA, CIGRE's bimonthly digital magazine, April (2007).
- [83] Saxegaard M, Kristoffersen M, Sroller P, Seeger M, Hyrenbach M, and Landsverk H. In *23rd International Conference on Electricity Distribution*, June (2015).
- [84] Hyrenbach M, Hintzen T, Müller P, and Owens J. In *23rd International Conference on Electricity Distribution*, June (2015).
- [85] Solomon S, Burkholder J B, Ravishankara A R, and Garcia R R. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 99:20929, (1994).
- [86] Li Y, Patten K, Youn D, and Wuebbles D. *Atmos. Chem. Phys.*, 6:4559, (2006).
- [87] Youn D, Patten K, Wuebbles D, Lee H, and So C-W. *Atmos. Chem. Phys.*, 10:10129, (2010).

- [88] de Urquijo J. *J. Phys. Conf. Ser.*, 86:012008, (2007).
- [89] Katagiri H, Kasuya H, Mizoguchi H, and Yanabu S. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 15:1424, (2008).
- [90] Ngoc M N, Denat A, Bonifaci N, Lesaint O, Daoud W, and Hassanzadeh M. In *IEEE Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena (CEIDP)*, volume 557, (2009).
- [91] Takeda T, Matsuoka S, Kumada A, and Hidaka K. (2011), 131:859.
- [92] McCain W C and Macko J. In *Halon Options Technical Working Conference*, page 242, (1999).
- [93] 3mTMnovecTM 5110 dielectric fluid: Technical data sheet (2015).
- [94] 3mTMnovecTM 4710 dielectric fluid: Technical data sheet (2015).
- [95] Calm J M. *Int. J. Refrig.*, 31:1123, (2008).
- [96] Papasavva S, Luecken D J, Waterland R L, Taddonio K N, and Andersen S O. *Env. Sci. technol.*, 43:9252, (2009).
- [97] Elrod M J. *J. Chem. Educ.*, 76:1702, (1999).
- [98] Yu J K. *Chem. Propell. Polymeric Mater.*, 10:41, (2012).
- [99] Chen G, Tu Y, Wang C, Wang J, Yuan Z, Ma G, Wang J, Qi B, and Li C. *CSEE J. Power Energy Syst.*, 7:510, (2021).
- [100] Taniguchi N, Wallington T, Hurley M, Guschin A, Molina L, and Molina M. *J. Phys. Chem. A*, 107:2674, (2003).
- [101] Wallington T J, Schneider W F, Worsnop D R, Nielsen O J, Sehested J, Debruyne W J, and Shorter J A. *Environ. Sci. Technol.*, 28:320A, (1994).
- [102] Boutonnet J C, Bingham P, Calamari D, de Rooij C, Franklin J, Kawano T, Libre J-M, McCulloch A, Malinverno G, Odom J M, Rusch G M, Smythe K, Sobolev I, Thompson R, and Tiedje J M. *Hum. Ecol. Risk Assess.*, 5:59, (1999).
- [103] Ewenfeldt B. Ozonlagret mir battre. *Arbetarbladet*, september (2014). p.10.
- [104] <https://www.esrl.noaa.gov>.
- [105] <https://www.climate.gov/news-features/climate-qa/how-much-will-earth-warm-if-carbon-dioxide-doubles-pre-industrial-levels>.
- [106] Mele A, Paglialunga E, and Sforza G. *Socio-Econ. Plan. Sci.*, 75:100942, (2021).
- [107] <https://www.c2es.org/content/hurricanes-and-climate-change>.
- [108] Climate change 2013: The physical science basis, contribution of working group I to the fifth assessment report of the intergovernmental panel on climate change. Cambridge, United Kingdom and New York: Cambridge University Press, (2013).
- [109] DeConto R M and Pollard D. *Nature*, 531:591, (2016).

- [110] R.K. Pachauri [Core Writing Team and Switzerland 151 pp L.A. Meyer (eds.)]. IPCC, Geneva. Climate change 2014: Synthesis report. contribution of working groups i, ii and iii to the fifth assessment report of the intergovernmental panel on climate change.
- [111] Rabie M, Dahl D A, Donald S M A, Reiher M, and Franck C M. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 20:856, (2013).
- [112] Li Y, Zhang X, Chen Q, Mingli F, Zhuo R, Xiao1 S, Chen D, and Tang J. *IEEE Access*, 6:42868, (2018).
- [113] Zhou W, Zhang T, and Wang L. *IEEE Access*, 8:29291, (2020).
- [114] Mantilla J D et al. Environmentally friendly perfluoroketones-based mixture as switching medium in high voltage circuit breakers. In *CIGRE*, volume A3, (2016).
- [115] Laruelle E, Ficheux A, Kieffel Y, and Waldron Mr. *Cigre Sci. Eng.*, 7:102, (2017).
- [116] Chachereau A, Hösl A, and Franck C M. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, (2018).
- [117] Kieffel Y, Irwin T, Ponchon P, and Owens J. *IEEE Power Energy Mag.*, 14:32, (2016).
- [118] Gautschi D. *CIGRE*, B3:106, (2016).
- [119] Tehlar D, Diggelmann T, Müller P, Buehler R, Ranjan N, and Doiron Ch. *CIGRE Colloquium*, (2015).
- [120] Müller P. Gis anwenderforum, (2016).
- [121] Engel M. Gis anwenderforum, (2016).
- [122] Xianglian Y, Keli G, Zhibing L, Jie H, Yu Z, Shizhuo H, and Wenjun Z. In *4th International Conference on Electric Power Equipment - Switching Technology (ICEPE-ST)*, (2017).
- [123] <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>.
- [124] Fu Y, Yang A, Wang X, and Rong M. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 52:245203, (2019).
- [125] Chen L, Zhang B, Xiong J, Li X, and Murphy A B. *J. Appl. Phys.*, 126:163303, (2019).
- [126] Chen L, Zhang B, Yang T, Deng Y, Li X, and Murphy A B. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 53:055502, (2020).
- [127] Boltzmann L. *Wien. Ber.*, 66:275, (1872).
- [128] Zabelok S, Arslanbekov R, and Kolobov V. *J. Comp. Phys.*, 30:455, (2015).
- [129] Goeringer D E and Viehland L A. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 38:4027, (2005).
- [130] Wang-Chang C S, Uhlenbeck G E, and de Boer J. *Studies in Statistical Mechanics*, volume v.II. New York: Wiley, (1964). p.241.
- [131] Ness K F and Robson R E. *Phys. Rev. A*, 34:2185, (1986).
- [132] Kumar K, Skullerud H R, and Robson R E. *Aust. J. Phys.*, 33:343, (1980).
- [133] White R D, Robson R E, and Ness K F. *Phys. Rev. E*, 60:7457, (1999).

- [134] Moratz T J, Pitchford L C, and Bardsley J N. *J. Appl. Phys.*, 61:2146, (1987).
- [135] Albert A, Bošnjaković D, Dujko S, and Donko Z. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 54:135202, (2021).
- [136] Maeda K, Makabe T, Nakano N, Bzenić S, and Petrović Z Lj. *Phys. Rev. E*, 55:5901, (1997).
- [137] Bzenić S, Petrović Z Lj, Raspopović Z M, and Makabe T. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 38:6077, (1997).
- [138] Dwyer J R and Babich L P. *J. Geophys. Res.*, 116:A09301, (2011).
- [139] Marjanović S, Banković A, Cassidy D, Cooper B, Deller A, Dujko S, and Petrović Z Lj. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 49:215001, (2016).
- [140] Petrović Z Lj, Marjanović S, Dujko S, Banković A, Malović G, Buckman S, Garcia G, White R, and Brunger M. *Appl. Radiat. Isotop.*, 83:148, (2014).
- [141] Simonović I, Garland N A, Bošnjaković D, Petrović Z Lj, White R D, and Dujko S. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 28:015006, (2019).
- [142] Press W H, Teukolsky S A, Vetterling W T, and Flannery B P. *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press (1994).
- [143] Sakadžić S. Master's thesis, Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu, (2000).
- [144] Birdsall C K and Langdon A B. *Plasma Physics Via Computer Simulation*. New York: McGraw-Hill (1974).
- [145] Aoneas M M, Vojnović M M, Ristić M M, Vičić M D, and Poparić G B. *Phys. Plasmas*, 24:023502, (2017).
- [146] Ristić M M, Aoneas M M, Vojnović M M, Galijaš S M D, and Poparić G B. *Plasma Chem. Plasma Process*, 38:903, (2018).
- [147] Itoh H and Musha T. *J. Phys. Soc. Jpn*, 15:1675, (1960).
- [148] Skullerud H R. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 1:1568, (1968).
- [149] Okhrimovskyy A, Bogaerts A, and Gijbels R. *Phys. Rev. E*, 65:037402, (2002).
- [150] Longo S and Capitelli M. *Plasma Chem. Plasma Process.*, 14:1, (1993).
- [151] Janssen J F J, Pitchford L C, Hagelaar G J M, and van Dijk J. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 25:055026, (2016).
- [152] Hernandez-Avila J L, Basurto E, and de Urquijo J. *J. Phys.D: Appl. Phys.*, 35:2264, (2002).
- [153] Vass M, Egüz E, Chachereau A, Hartmann P, Korolov I, Hösl A, Bošnjaković D, Dujko S, Donko Z, and Franck C M. *J. Phys.D: Appl. Phys.*, 54:035202, (2021).
- [154] Engelhardt A G and Phelps A V. *Phys. Rev.*, 133:A375, (1964).
- [155] Haddad G N and Crompton R W. *Aust. J. Phys.*, 33:975, (1980).

- [156] Petrović Z Lj, O'Malley T F, and Crompton R W. *J. Phys B: At. Mol. Opt. Phys.*, 28:3309, (1995).
- [157] Schmidt B. *Comm. At. Mol. Phys.*, 28:379, (1993).
- [158] Simonović I, Bošnjaković D, Petrović Z Lj, White R D, and Dujko S. *Eur. Phys. J. D*, 74:63, (2020).
- [159] Simonović I, Bošnjaković D, Petrović Z Lj, Stokes P, White R D, and Dujko S. *Phys. Rev. E*, 101:023203, (2020).
- [160] Simonović I, Bošnjaković D, Petrović Z Lj, White R D, and Dujko S. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 31:015003, (2022).
- [161] Stokes P, Simonović I, Philippa B, Cocks D, Dujko S, and White R D. *Scientific Reports*, 8:2226, (2018).
- [162] Specht L T, Lawton S A, and DeTemple T A. *J. Appl. Phys.*, 51:166, (1980).
- [163] Jacob J H and Mangano J A. *Appl. Phys. Lett.*, 51:467, (1976).
- [164] Stokes P W, Casey M J E, Cocks D G, de Urquijo J, Garsia G, Brunger M J, and White R D. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 29:105008, (2020).
- [165] Stokes P W, Foster S P, Casey M J E, Cocks D G, Gonzalez-Magana O, de Urquijo J, Garsia G, Brunger M J, and White R D. *J. Chem. Phys.*, 154:084306, (2021).
- [166] Stokes P W, White R D, Campbell L, and Brunger M J. *J. Chem. Phys.*, 155:084305, (2021).
- [167] Kimura M and Nakamura Y. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 43:145202, (2010).
- [168] Kochetov I V, Napartovich A P, Vagin N P, and Yuryshev N N. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 42:055201, (2009).
- [169] Kawaguchi S, Satoh K, and Itoh H. *Eur. Phys. J. D*, 68:100, (2014).
- [170] Kimura M. Master's thesis, Keio university, Tokyo, Japan, (2002).
- [171] Hasegawa H, Date H, Shimoizuma M, and Itoh H. *Appl. Phys. Lett.*, 95:101504, (2009).
- [172] Alajajian S H, Man K-F, and Chutjian A. *J. Chem. Phys.*, 94:3629, (1991).
- [173] Antony B K, Joshipura N K, and Mason N J. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 38:189, (2005).
- [174] Kawada M K, Sueoka O, and Kimura M. *Chem. Phys. Lett.*, 330:34, (2000).
- [175] Hayashi database, www.lxcat.net.
- [176] Lowke J J, Phelps A V, and Irwin B W. *J. Appl. Phys.*, 44:4664, (1973).
- [177] Nolan A M, Brennan M J, Ness K F, and Wedding A B. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 30:2865, (1997).
- [178] Dyatko N A and Napartovich A P. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 32:3169, (1999).

- [179] Dujko S, White R D, Raspopović Z M, and Petrović Z Lj. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, 279:84, (2012).
- [180] Yousfi M, Segur P, and Vassiliadis T. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 18:359, (1985).
- [181] Itoh H, Miurat Y, Ikuta N, Nakao Y, and Tagashira H. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 21:922, (1988).
- [182] Itoh H, Kawaguchi M, Satoh K, Miura Y, Nakano Y, and Tagashira H. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 23:299, (1990).
- [183] Itoh H, Matsumura T, Satoh K, Date H, Nakano Y, and Tagashira H. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 26:1975, (1993).
- [184] Frechette M F and Novak J P. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 20:438, (1987).
- [185] Pinheiro M J and Loureiro J. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 35:3077, (2002).
- [186] Tezcan S S, Akcayol M A, Ozerdem O C, and Dincer M S. *IEEE Trans. Plasma Sci.*, 38:2332, (2010).
- [187] Deng Y and Xiao D. *Japan J. Appl. Phys.*, 53:096201, (2014).
- [188] Li X, Zhao H, Wu J, and Jia S. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 46:345203, (2013).
- [189] Yousfi M, Hennad A, and Alkaa A. *Phys. Rev. E*, 49:3264, (1994).
- [190] Dincer M S and Gaju G R. *J. Appl. Phys.*, 54:6311, (1983).
- [191] Dincer M S, Ozerdem O C, and Bektas S. *IEEE Trans. Plasma Sci.*, 35:1210, (2007).
- [192] Satoh K, Itoh H, Nakano Y, and Tagashira H. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 21:931, (1988).
- [193] Kawaguchi S, Satoh K, and Itoh H. *Eur. Phys. J. D*, 68:100, (2014).
- [194] Li Y M, Pitchford L C, and Moratz T J. *Appl. Phys. Lett.*, 54:1403, (1989).
- [195] Mirić J, Šašić O, Dujko S, and Petrović Z Lj. In *Proc. 27th Summer School and Int. Symp. on the Physics of Ionized Gases (SPIG2014)*, page p.122. Belgrade: Institute of Physics, (2014).
- [196] Ristivojević Z and Petrović Z Lj. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 21:035001, (2012).
- [197] Kline L and Siambis J. *Phys. Rev. A*, 5:794, (1972).
- [198] Kunhardt E and Tzeng Y. *J. Comput. Phys.*, 67:279, (1986).
- [199] Ness K F and Makabe T. *Phys. Rev. E*, 62:4083, (2000).
- [200] White R D, Robson R E, Ness K F, and Makabe T. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 38:997, (2005).
- [201] Skullerud H R. *Aust. J. Phys.*, 36:845, (1983).
- [202] McMahon D R A and Crompton R W. *J. Chem. Phys.*, 78:603, (1983).
- [203] Hegerberg R and Crompton R W. *Aust. J. Phys.*, 36:831, (1983).

- [204] Bošnjaković D, Petrović Z Lj, White R D, and Dujko S. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 47:435203, (2014).
- [205] Banković A, Dujko S, White R D, Marler J P, Buckman S J, Marjanović S, Malović G, Garcia G, and Petrović Z Lj. *New J. Phys.*, 14:035003, (2012).
- [206] Banković A, Dujko S, White R D, Buckman S J, and Petrović Z Lj. *Nucl. Instrum. Methods B*, 279:92, (2012).
- [207] Aschwanden T. *Gaseous Dielectrics IV*. New York: Pergamon (1984). p.24.
- [208] Koch M and Franck C M. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 48:055207, (2015).
- [209] Chachereau A, Rabie M, and Franck C. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 25:045005, (2016).
- [210] <https://magboltz.web.cern.ch/magboltz/>.
- [211] privatna komunikacija J. de Urquijo et al. (2018).
- [212] de Urquijo J, Basurto E, Juarez A M, Ness K F, Robson R E, Brunger M J, and White R D. *J. Chem. Phys.*, 141:014308, (2014).
- [213] Stojanović V D and Petrović Z Lj. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 31:834, (1998).
- [214] Chachereau A and Franck C. In *20th International Symposium on High Voltage Engineering (ISH 2017)*, volume 257, (2017).
- [215] James D, Christophorou L, and Mathis R. *Gaseous dielectrics II*. New York, Oxford, Toronto, Sydney, Paris, Frankfurt: Pergamon Press (1980).
- [216] Wootton R, Dale S, and Zimmerman N. *Gaseous dielectrics II*. New York, Oxford, Toronto, Sydney, Paris, Frankfurt: Pergamon Press (1980).
- [217] Hunter S and Christophorou L. *J. Appl. Phys.*, 57:4377, (1985).
- [218] Christophorou L, Sauers I, James D, Rodrigo H, Pace M, Carter J, and Hunter S. *IEEE Trans. Electr. Insul.*, 6:550, (1984).
- [219] Hösl A, Pachin J, Egüz E, Chachereau A, and Franck C. *IEEE Trans. Diel. Electr. Insul.*, 27:322, (2020).
- [220] Seeger M, Smeets R, Yan J, Ito H, Claessens M, Dullni E, Falkingham L, Franck C M, Gentils F, Hartmann W, Kieffel Y, Jia S, Jones G, Mantilla J, Pawar S, Rabie M, Robin-Jouan P, Schellekens H, Spencer J, Uchii T, Li X, and Yanabu S. *Plasma Phys. Techn.*, 20:1, (2017).
- [221] Long Y, Guo L, Shen Z, Chen C, Chen Y, and Li F. *IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul.*, 26:1358, (2019).
- [222] Zhao H, Li X, Tang N, Jiang X, Guo Z, and Lin H. *IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul.*, 25:1332, (2018).
- [223] Nechmi H, Beroual A, Girodet A, and Vinson P. *IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul.*, 23:2587, (2016).
- [224] Tu Y, Cheng Y, Wang Y, Ai C, Chen G, and Zhou F. *IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul.*, 25:1324, (2018).

- [225] Wang C, Cheng Y, Tu Y, Chen G, Yuan Z, Xiao A, Owens J, Zhang A, and Mi N. *IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul.*, 25:1351, (2018).
- [226] Nechmi H, Beroual A, Girodet A, and Vinson P. *IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul.*, 24:886, (2017).
- [227] Yi C, Yuan Z, Tu Y, Zhang Y, and Wang C. *IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul.*, 27:1015, (2020).
- [228] Dujko S, Markosyan A H, White R D, and Ebert U. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 46:475202, (2013).
- [229] Davies A J, Evans C J, and Jones F L. In *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.*, volume 281, page 164, (1964).
- [230] Hundsdorfer W and Verwer J. *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*, volume v.33. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, (2003).
- [231] Courant R, Friedrichs K, and Lewy H. *Math. Ann.*, 100:32, (1928).
- [232] Li C. PhD thesis, Eindhoven University of Technology, Eindhoven, Netherlands, (2009).
- [233] Li C, Brok WJ M, Ebert Ute, and van der Mullen J J A M. *J. Appl. Phys.*, 101:123305, (2007).
- [234] Ebert U, van Saarloos W, and Caroli C. *Phys. Rev. E*, 55:1530, (1997).
- [235] Lagarkov A N and Rutkevich I M. *Ionisation Waves in Electrical Breakdown of Gases*. Berlin: Springer (1994).
- [236] Dujko S, Atić J, Bošnjaković D, White R D, Stokes P, Hamilton K R, Zatsarinny O, Bartschat K, Rabasović M S, Šević D, Marinković B P, Fursa D V, Bray I, McEachran R P, Blanko F, Garcia G, Jones D B, Campbell L, and Brunger M J. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 30:115019, (2021).
- [237] Markosyan A H, Dujko S, and Ebert U. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 46:475203, (2013).
- [238] Markosyan A H, Teunissen J, Dujko S, and Ebert U. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 24:065002, (2015).
- [239] Lister G G, Lawler J E, Lapatovich W P, and Godyak V A. *Rev. Mod. Phys.*, 76:541, (2004).
- [240] Flesch P. *Light and light sources*. Berlin: Springer, (2006).
- [241] Samukawa S, Hori M, Rauf S, Tachibana K, Bruggeman P, Kroesen G, Whitehead J C, Murphy A B, Gutso A F, Starikovskaia S, Kortshagen U, Boeuf J P, Sommerer T J, Kushner M J, Czarnetzki U, and Mason N. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 45:25300, (2012).
- [242] Fetzer G J and Rocca J J. *IEEE J. Quantum Electron*, 28:1941, (1992).
- [243] Little C E. *Metal vapour lasers: physics, engineering and applications*. Chichester: Wiley (1999).
- [244] Ahedo E. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 53:124037, (2011).

- [245] Garamoon A A and Abdelhaleem A S. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 12:2181, (1979).
- [246] Braglia G L, Diligenti M, Wilhelm J, and Winkler R. *Il Nuovo Cimento*, 12:257, (1990).
- [247] Liu J and Raju G G. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 25:167, (1992).
- [248] Rockwood S D. *Phys. Rev. A*, 8:2348, (1973).
- [249] Nakamura Y and Lucas J. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 11:325, (1978).
- [250] Nakamura Y and Lucas J. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 11:337, (1978).
- [251] Sakai Y, Sawada S, and Tagashira H. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 22:276, (1989).
- [252] Suzuki S, Kuzuma K, and Itoh H. *J. Plasma Fusion Res. Series*, 7:314, (2006).
- [253] Winkler R B, Wilhelm J, and Winkler R. *Ann. Phys. (Leipzig)*, 40:90, (1983).
- [254] Winkler R B, Wilhelm J, and Winkler R. *Ann. Phys. (Leipzig)*, 40:119, (1983).
- [255] Yousfi M, Zissis G, Alkaa A, and Damelincourt J J. *Phys. Rev. A*, 42:978, (1990).
- [256] Sakai Y, Sawada S, and Tagashira H. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 24:283, (1991).
- [257] Winkler R, Wilhelm J, Braglia G L, and Diligenti M. *Il Nuovo Cimento*, 12:975, (1990).
- [258] Liu J and Raju G G. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 25:465, (1992).
- [259] White R D, Robson R E, Schmidt B, and Morrison M A. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 36:3125, (2003).
- [260] England J P and Elford M T. *Aust. J. Phys.*, 44:647, (1991).
- [261] Bartschat K. In *Third Int. Conf. on Atomic and Molecular Data and their Applications*. New York: American Institute of Physics (2003).
- [262] Kieffer J and Dunn G H. *Rev. Mod. Phys.*, 38:1, (1966).
- [263] Mirić J, Simonović I, Petrović Z Lj, White R D, and Dujko S. *Eur. Phys. J. D*, 71:289, (2017).
- [264] Elford M T. *Aust. J. Phys.*, 33:231, (1980).
- [265] Šević D, Rabasović M, Pejčev V, and Marinković B P. *Experimental study of indium atom using electron and optical spectroscopy*, chapter Chapter 8 in Monography: Indium: Properties, Technological Applications and Health Issues. New York: Nova Science Publishers (2013).
- [266] Azad Malik M and O'Brien P. *III–V and Related Semiconductor Materials*, chapter Chapter 10 in: The Group 13 Metals Aluminium, Gallium, Indium and Thallium: Chemical Patterns and Peculiarities. New York: Wiley (2011).
- [267] Nakamura S. *Rev. Mod. Phys.*, 87:1139, (2015).
- [268] Rabasović M S, Kelemen V I, Tošić S D, Šević D, Dovhanych M M, Pejčev V, Filipović D M, Remeta E Yu, and Marinković B P. *Phys. Rev. A*, 77:62, (2008).

- [269] Hamilton K R, Zatsarinny O, Bartschat K, Rabasović M S, Šević D, Marinković B P, Dujko S, Atić J, Fursa D V, Bray I, McEachran R P, Blanco F, Garcia G, Stokes P Q, White R D, Jones D B, Campbell L, and Brunger M J. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 50:013101, (2021).
- [270] Vainshtein A, Golovach D G, Ochkur V I, Rakhovskii V I, Rumyantsev N M, and Shustriakov V M. *Sov. Phys. JETP*, 66:36, (1987).
- [271] Shul J, Wetzel R C, and Freund R S. *Phys. Rev. A*, 39:5588, (1989).
- [272] Lotz W. *Z. Phys. A*, 232:101, (1970).
- [273] Kim Y-K and Stone P M. *Phys. Rev. A*, 64:052707, (2001).
- [274] Talukder R, Bose S, Patoary M A R, Haque A K F, Uddin M A, Basak A K, and Kando M. *Eur. Phys. J. D*, 46:281, (2008).
- [275] Margreiter D, Deutsch H, and Märk D T. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Proc.*, 139:127, (1994).

Biografija

Jasmina M. Atić (rođena Mirić) je rođena 3. februara 1987. godine u Prizrenu. Prvih šest razreda osnovne škole je završila u rodnom gradu dok je nastavak osnovnog i srednje obrazovanje završila u Beogradu. Osnovne studije na Elektrotehničkom fakultetu Univerziteta u Beogradu je upisala 2005/2006. godine na odseku za Fizičku elektroniku i smeru za Biomedicinski i ekološki inženjering. Diplomirala je školske 2011/2012. godine sa prosečnom ocenom 8.62 odbranivši završni rad pod nazivom "Upotreba gipsanih ploča za zaštitu od Rentgenskog zračenja" pod mentorstvom prof. dr Predraga Marinkovića. Iste školske godine je upisala master studije koje je, na pomenutom odseku i smeru, završila u roku od godinu dana sa prosečnom ocenom 10.0. Master rad pod nazivom "Primena transportnih koeficijenata rojeva elektrona u modelovanju izvora svetlosti" je urađen u Institutu za fiziku u Beogradu pod mentorstvom dr Saše Dujka. Doktorske studije na Fizičkom fakultetu Univerziteta u Beogradu je upisala školske 2013/2014. godine na smeru Fizika jonizovanih gasova, plazme i tehnologija plazme.

Od februara 2014. godine je zaposlena kao istraživač pripravnik u Laboratoriji za neravnotežne procese i primenu plazme Instituta za fiziku u Beogradu dok je u zvanje istraživač saradnik izabrana aprila 2017. godine. Bila je angažovana na projektima OI 171037 "Fundamentalni procesi i primene transporta čestica u neravnotežnim plazmama, trapovima i nanos-strukturama" i III 41011 "Primena niskotemperaturnih plazmi u medicini, zaštiti čovekove okoline i nanotehnologijama" Ministarstva nauke, prosvete i tehnološkog razvoja Republike Srbije pod mentorstvom dr Saše Dujka.