

UNIVERZITET U BEOGRADU

FIZIČKI FAKULTET

Snježana K. Dupljanin

**PRIMJENA METODE ELEKTRONSKIH
ROJEVA ZA DOBIJANJE KOMPLETNIH
PRESJEKA I TRANSPORTNIH
KOEFIČIJENATA ZA AZOT SUBOKSID,
TETRAFLUOROETAN I DIMETIL ETAR**

Doktorska disertacija

Beograd, 2016.

UNIVERSITY OF BELGRADE

FACULTY OF PHYSICS

Snježana K. Dupljanin

**COMPLETE SETS OF CROSS SECTIONS
AND TRANSPORT COEFFICIENTS FOR
NITROUS OXIDE,
TETRAFLUOROETHANE AND
DIMETHYL ETHER OBTAINED BY
USING THE SWARM TECHNIQUE**

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2016.

Mentor:

dr Olivera Šašić, redovni profesor, Saobraćajni fakultet, Univerzitet u Beogradu

Članovi komisije:

Akademik dr Zoran Petrović, naučni savetnik, Institut za fiziku, Univerzitet u Beogradu

dr Olivera Šašić, redovni profesor, Saobraćajni fakultet, Univerzitet u Beogradu

dr Srđan Bukvić, redovni profesor, Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu

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

Datum odbrane:

Ova doktorska disertacija je urađena u Laboratoriji za Gasnu elektroniku Instituta za fiziku Univerziteta u Beogradu, pod rukovodstvom Akademika dr Zorana Lj. Petrovića i dr Olivera M. Šašić. Iskreno se zahvaljujem mentorima, Akademiku dr Zoranu Lj. Petroviću i dr Oliveri M. Šašić, na razumijevanju, pomoći, trudu i svemu onom što je doprinjelo realizaciji ovog rada.

Posebnu zahvalnost dugujem prof. Jaime de Urquiju iz Mexica u čijoj su laboratoriji vršena mjerenja koja smo obrađivali za neke od gasova. Zahvalnost takođe dugujem i kolegama Danku Bošnjakoviću i dr Saši Dujku koji su detaljno provjerili naše presjeke za $C_2H_2F_4$ i primjenili ih u modelovanju komora sa rezistivnim pločama (Resistive Plate Chambers-RPC) koji su najčešće korišćeni detektori elementarnih čestica u CERNu i koji prije svega koriste ovaj gas.

Zahvaljujem se i kolegi dr Milanu Vrućiniću na nesebičnoj pomoći, članovima komisije prof. dr Srđanu Bukviću i prof. dr Goranu Popariću kao i kolegama sa studijskog programa za fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta u Banja Luci.

Porodici i prijateljima koji su na bilo koji način pomogli u radu na ovoj disertaciji veliko hvala.

U Banja Luci i Beogradu, 2016.

Snježana Dupljanin

PRIMJENA METODE ELEKTRONSKIH ROJEVA ZA DOBIJANJE KOMPLETNIH PRESJEKA I TRANSPORTNIH KOEFICIJENATA ZA AZOT SUBOKSID, TETRAFLUOROETAN I DIMETIL ETAR

Rezime:

Predmet istraživanja prikazanog u ovoj doktorskoj disertaciji su transportne karakteristike rojeva elektrona koji se kreću pod dejstvom konstantnog (DC) električnog polja, ukrštenih DC električnih i magnetnih polja kao i ukrštenih, vremenski zavisnih (RF) električnih i magnetnih polja kroz neutralne gasove: azot suboksid (N_2O), tetrafluoroetan ($\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4$) i dimetil etar (CH_3OCH_3), kao i njihove smješe sa argonom (Ar) i neonom (Ne), sa ciljem dobijanja kompletnih skupova presjeka i transportnih i brzinskih koeficijenata. Izbor navedenih gasova je određen zahvaljujući dostupnosti novijih eksperimentalnih rezultata transportnih koeficijenata i velikoj praktičnoj primjeni ovih gasova u poluprovodničkoj industriji, detektorima visokoenergijskih čestica itd. Primijenjena je metoda rojeva za dobijanje efektivnih presjeka na osnovu izmjerenih transportnih koeficijenata, koja se zasniva na modifikaciji polaznog skupa presjeka do postizanja što boljeg stepena slaganja između izmjerenih i izračunatih vrijednosti.

U slučaju molekule $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4$, u modifikacionom procesu polaznog skupa presjeka su korištene izmjerene vrijednosti brzine drifta i efektivnog koeficijenta jonizacije u čistom $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4$ i njegovim smješama sa Ar (2%, 5%, 10%, 20% i 50% $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4$ u Ar) prof. Jaime de Urquija i saradnika (de Urquijo i ostali, 2009), kao i mjerenja Basilea i saradnika (Basile i ostali, 1991) u čistom gasu.

Izmjerene vrijednosti brzine drifta i koeficijenta jonizacije u čistom CH_3OCH_3 i njegovim smješama sa Ar i Ne (20% i 50% CH_3OCH_3 u Ar i 50% CH_3OCH_3 u Ne) E Oettinger i saradnika (Oettinger i ostali, 1998) su korištene za fitovanje efektivnih presjeka za CH_3OCH_3 . U slučaju ovog i prethodnog molekula, polazni skup presjeka je preuzet iz Biagijeve baze podataka (Biagi, 1998; 2007; 2010).

U slučaju N_2O , analiziran je transport elektrona u uslovima delovanja DC i RF ukrštenih polja, pri čemu smo se koristili kompletnim skupom presjeka dobijenih u našim ranijim istraživanjima.

Za proračun transportnih koeficijenata su korišteni kompjuterski kodovi Elendif, Bolsig+ i naš Monte Carlo (MC) simulacioni kod. Prva dva koda se zasnivaju na rješavanju Boltzmannove jednačine u dvočlanoj aproksimaciji, te su korišteni u polaznom, grubom podešavanju presjeka, dok su svi konačni rezultati dobijeni egzaktnom MC tehnikom.

Skupovi efektivnih presjeka i transportnih i brzinskih koeficijenata koji su dobijeni za navedene gasove i njihove smješe, u širokom opsegu redukovanih električnih i magnetnih polja, predstavljaju jednu bazu podataka neophodnih za modelovanje niskotemperaturnih plazmi.

Ključne riječi: metoda rojeva, efektivni presjeci, transportni koeficijenti, azot suboksid, tetrafluoroetan, dimetil etar

Naučna oblast: Fizika

Uža naučna oblast: Fizika jonizovanog gasa i plazme

UDK broj:

COMPLETE SETS OF CROSS SECTIONS AND TRANSPORT COEFFICIENTS FOR NITROUS OXIDE, TETRAFLUOROETHANE AND DIMETHYL ETHER OBTAINED BY USING THE SWARM TECHNIQUE

Abstract:

Object of study of this doctoral thesis are transport characteristics of electron swarms moving under the influence of a constant (DC) electric field, crossed DC electric and magnetic fields as well as crossed, time-dependent (RF) electric and magnetic fields through the neutral gases: nitrous oxide (N_2O), tetrafluoroethane ($\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4$) and dimethyl ether (CH_3OCH_3), as well as their mixtures with argon (A_r) and neon (N_e), in order to obtain a complete sets of cross sections and transport and rate coefficients. Selection of those gases is determined thanks to the availability of recent experimental results of the transport coefficients and high practical application of these gases in the semiconductor industry, high energy particle detectors, etc. The swarm method is applied for getting a cross sections based on the measured transport coefficients, which is based on the modification of the initial set to achieve higher levels of agreement between measured and calculated values.

In the case of the molecule $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4$, in the modifying process of the initial set have been used measured values of the drift velocity and the effective ionization coefficient in pure $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4$ and its mixtures with an A_r (2%, 5%, 10%, 20% and 50% $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4$ in A_r) of professor J de Urquijo and colleagues (de Urquijo *et al.*, 2009), as well as the measurement of Basile and colleagues (Basile *et al.*, 1991) in the pure gas.

The measured values of the drift velocity and ionization coefficient in pure CH_3OCH_3 and its mixtures with A_r and N_e (20% and 50% CH_3OCH_3 in A_r and 50% CH_3OCH_3 in N_e) E Oettinger and colleagues (Oettinger *et al.*, 1998), were used to fit the cross sections for CH_3OCH_3 . In the case of both molecules the initial set is taken from the database of S. Biagi (Biagi, 1998; 2007; 2010).

In the case of N_2O , an area of research has extended to crossed DC and RF fields, using a complete set of cross section obtained in our previous studies.

For the calculation of transport coefficients are used computer codes Elendif, Bolsig + and our Monte Carlo (MC) simulation code. The first two codes are based on solving the Boltzmann equation under the two-term (TTA) approximation, and they were used in the initial coarse adjustment cross section, while all the final results were obtained by exact MC technique.

Sets of the cross sections and the transport and rate coefficients are obtained for the mentioned gases and their mixtures, in a wide range of reduced electric and magnetic fields, represent a database necessary for the modeling of a low-temperature plasma.

Key words: swarm method, cross sections, transport coefficients, Nitrous oxide, Tetrafluoroethane, Dimethyl ether

Scientific field: Physics

Research area: Physics of ionized gases and plasma

UDK broj:

SADRŽAJ

1. UVOD	1
2. OSNOVNE TEORIJSKE POSTAVKE FIZIKE ELEKTRONSKIH ROJEVA	5
2.1. UVOD	5
2.2. ISTORIJSKI RAZVOJ FIZIKE ELEKTRONSKIH ROJEVA	5
2.3. BOLTZMANNOVA JEDNAČINA	9
2.3.1. Boltzmannova jednačina u hidrodinamičkim uslovima	12
2.3.2. Definicija balk i flaks transportnih koeficijenata	14
2.3.3. Flaks transportni koeficijenti	15
2.4. METODE ZA RJEŠAVANJE BOLTZMANNOVE JEDNAČINE	17
2.4.1. Metoda dvočlane aproksimacije	18
2.4.2. Oblast primjenjivosti metode dvočlane aproksimacije	21
2.5. KOMPJUTERSKI KODOVI ELENDF I BOLSIG+	23
2.5.1. Elendif	23
2.5.2. Bolsig+	25
2.6. MONTE CARLO SIMULACIONA TEHNIKA	28
2.6.1. Radni uslovi simulacije i ulazni parametri	29
2.6.2. Generator slučajnih brojeva	30
2.6.3. Određivanje trenutka i vrste sudarnog procesa	31
2.6.4. Integralna metoda	32
2.6.5. Metoda nultih sudara	33
2.6.6. Određivanje vrste sudarnog procesa	34
2.6.7. Određivanje komponenti vektora brzine rasijanog elektrona	35
2.6.8. Samplovanje transportnih koeficijenata	36
2.7. ITERATIVNI POSTUPAK DOBIJANJA EFEKTIVNIH PRESJEKA-METODA ROJEVA	38
3. TRANSPORT ELEKTRONA U AZOT SUBOKSIDU (N₂O)	44
3.1. UVOD	44

3.2. SKUP PRESJEKA ZA RASIJANJE ELEKTRONA NA MOLEKULI N ₂ O	45
3.3. TRANSPORTNE KARAKTERISTIKE ELEKTRONA U USLOVIMA DJELOVANJA DC UKRŠTENIH ELEKTRIČNIH I MAGNETNIH POLJA	47
3.3.1. Teorijski opis kretanja elektrona u dc električnim i magnetnim poljima	48
3.3.2. Ciklotronska i ukupna kolizijska frekvencija	49
3.3.3. Srednja energija	51
3.3.4. Brzina drifta	51
3.3.5. Difuzioni koeficijenti	53
3.3.6. Brzinski koeficijenti za neelastične procese	54
3.3.7. Uticaj nekonzervativne prirode procesa na transportne koeficijente	57
3.4. TRANSPORTNI KOEFICIJENTI ELEKTRONA U RF ELEKTRIČNOM I MAGNETNOM POLJU	58
3.4.1. Uticaj jačine magnetnog polja na fazne zavisnosti transportnih koeficijenata	59
3.4.2. Uticaj frekvencije električnog polja na fazne zavisnosti transportnih koeficijenta	62
3.4.3. Uticaj nekonzervativnih procesa na transportne koeficijente u RF polju	65
3.5. ZAKLJUČAK	66
4. TRANSPORT ELEKTRONA U TETRAFLUOROETANU (C₂H₂F₄) I NJEHOVIM SMJEŠAMA SA ARGONOM (Ar)	68
4.1. UVOD	68
4.2. POLAZNI SKUP PRESJEKA	70
4.3. MODIFIKACIJA POLAZNOG SKUPA PRESJEKA I TRANSPORTNI KOEFICIJENTI-SKUP I	72
4.3.1. Brzina drifta i efektivni koeficijent jonizacije	74
4.4. MODIFIKACIJA II-METODA GASNIH SMJEŠA	75
4.4.1. Transportni koeficijenti u čistom C ₂ H ₂ F ₄	77

4.4.2. Transportni koeficijenti u $C_2H_2F_4/A_r$ smješama	81
4.5. MODIFIKACIJA III	84
4.5.1. Polazni skup presjeka	86
4.5.2. Modifikacija polaznog skupa	88
4.5.3. Transportni koeficijenti u čistom gasu i njegovim smješama sa A_r dobijeni SKUPOM III	92
4.5.4. Swarm analiza izmjerenih vrijednosti Basilea i saradnika	100
4.6. ZAKLJUČAK	103
 5. TRANSPORT ELEKTRONA U DIMETIL ETRU (CH_3OCH_3) I NJEGOVIM SMJEŠAMA SA ARGONOM (A_r) i (N_e)	 107
5.1. UVOD	107
5.2. PREGLED LITERATURE, TRANSPORTNI KOEFICIJENTI I EFEKTIVNI PRESJECI	110
5.3. POLAZNI SKUPOVI PRESJEKA	112
5.3.1. Transportni koeficijenti dobijeni polaznim skupom presjeka u konstantnom (DC) električnom polju	113
5.4. MODIFIKACIJA POLAZNOG SKUPA PRESJEKA ZA e^-/DME INTERAKCIJU-KOMPLETAN SKUP PRESJEKA ZA DME	116
5.5. SKUP TRANSPORTNIH KOEFICIJENATA DOBIJEN KONAČNIM SKUPOM PRESJEKA ZA e^-/DME INTERAKCIJU U DC ELEKTRIČNOM POLJU	118
5.5.1. Srednja energija	118
5.5.2. Brzina drifta i koeficijent jonizacije u čistom DME	120
5.5.3. Brzina drifta i koeficijent jonizacije u smješama DME sa A_r i N_e	121
5.5.4. Longitudinalni i transverzalni koeficijenti difuzije elektrona u DME i smješama sa A_r i N_e	123
5.5.5. Brzinski koeficijenti za neelastične procese u čistom DME	125
5.6. SKUP TRANSPORTNIH KOEFICIJENATA DOBIJEN KONAČNIM SKUPOM PRESJEKA ZA e^-/DME INTERAKCIJU U UKRŠTENOM DC ELEKTRIČNOM I MAGNETNOM POLJU	125
5.6.1. Ciklotronska i kolizijska frekvencija	126

5.6.2. Srednja energija	127
5.6.3. Brzina drifta	128
5.6.4. Koeficijenti difuzije	129
5.6.5. Uticaj nekonzervativnih procesa na transportne koeficijente u DC ukrštenim električnim i magnetnim poljima	131
5.7. TRANSPORTNE KARAKTERISTIKE ELEKTRONA U SMJEŠI 20%DME+80%A _r U USLOVIMA DJELOVANJA RF ELEKTRIČNOG I MAGNETNOG POLJA	132
5.7.1. Uticaj jačine magnetnog polja na faznu zavisnost transportnih koeficijenata	133
5.7.2. Uticaj frekvencije RF polja na faznu zavisnost transportnih koeficijenata	136
5.7.3. Uticaj nekonzervativnih procesa na transportne koeficijente u RF polju	141
5.7.4. Brzinski koeficijenti za elastične i neelastične procese	143
5.8. ZAKLJUČAK	145
6. ZAKLJUČAK	148
7. LITERATURA	152

1. UVOD

Krajem 20. vijeka je došlo do velikog razvoja mikroelektronske industrije, digitalne tehnologije i različitih uređaja bez kojih bi život savremenog čovjeka danas bio nezamisliv. Različite plazma tehnologije imaju važnu ulogu u ovom razvojnog putu, kao što je: plazmom poboljšano naparavanje, nagrizanje, čišćenje, modifikacija i obrada određenih površina (Matsui i ostali, 2004; Kim i ostali, 2004; Kline i ostali 1989; Hayes i ostali 1989). Osim u poluprovodničkoj industriji ove plazme se koriste i u medicini, hemiji, detektorima visokoenergijskih čestica, za razvoj gasnih lasera, prečišćavanje otpadnih gasova i drugdje (Heinlin i ostali, 2010; Lazović i ostali, 2010; Geijsberts i ostali, 1991; Cattani, 2012). Prednost niskotemperaturskih plazmi koje se koriste u ove svrhe je u njihovoj reaktivnosti, tj. činjenjici da spoljašnjim poljem možemo povećati energiju elektrona do srednjih ili visokih vrijednosti koje su potrebne za održavanje plazme i pokretanja niza neelastičnih i hemijskih procesa, a da sam gas ostane na sobnoj temperaturi ili se ne zagrije previše.

Matematičko modelovanje procesa koji se dešavaju u plazmi kao i njihova interakcija sa različitim objektima predstavljaju osnov za razvoj plazma tehnologija. U tu svrhu je neophodno poznavanje detaljnog skupa efektivnih presjeka i transportnih koeficijenata koji predstavljaju ulazne parametre svih plazma modela, kao i poznavanje funkcija raspodjele elektrona po energijama. Ova potreba je i osnovni motivirajući faktor ove doktorske disertacije. Namjera je bila upravo izrada jedne takve baze podataka za one gasove i smješe gasova koji su trenutno od najvećeg interesa sa stanovišta mogućih primjena.

Za predmet proučavanja u ovom radu izabrana su tri molekulska gasa: azot-suboksid (N_2O), tetrafluoroetan ($C_2H_2F_4$) i dimetil etar (CH_3OCH_3). Važnu ulogu u odabiru gasova imala je dostupnost novijih eksperimentalnih podataka za transportne koeficijente, kao i interes za ove gasove i njihove primjene. N_2O je gas koji se koristi u nekim plazma procesima (dopiranje atoma azota u oksidne materijale kao i za nanošenje dijamantu sličnih karbonskih filmova), a sa druge strane doprinosi efektu staklene bašte, te utiče na globalno zagrijavanje (Crutzen 1971; Graedel i Crutzen 1993). $C_2H_2F_4$ se vrlo često koristi kao rashladno sredstvo, u radijacionim čestičnim detektorima

(Abrescia, 2008; Shnide, 2009) a predložen je i kao sredstvo u procesima plazma nagrivanja određenih površina (Kirmse, 1996). CH_3OCH_3 se koristi kao operativni gas u detektorima visokoenergijskih čestica (Geijsberts i ostali, 1991; Miyamoto i ostali, 1999; Angelini i ostali, 1994) a predstavlja, usljed visokog cetanskog broja (55) potencijalnu zamjenu za dizel gorivo (Verbek i Van der Weide, 1997; Mittal i ostali, 2008). I pored ovako značajnih primjena, a samim tim i velike potrebe za pouzdanim podacima, zastupljenost $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4$ i CH_3OCH_3 u literaturi je oskudna, dok je situacija sa N_2O nešto bolja. Razlog tome je, prije svega, smanjena aktivnost laboratorija koje se bave eksperimentalnom fizikom elektronskih rojeva. Tako možemo reći da su na tom polju danas aktivna samo dva centra: jedan kojim rukovodi profesor de Urquijo u okviru Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, México i drugi u okviru univerziteta Keio u Japanu. U posljednje vrijeme, međutim, su se intenzivirale aktivnosti na izradi baza podataka o presjecima za rasijanje i transportnim koeficijentima, koje bi putem globalne mreže bile dostupne svim zainteresovanim istraživačima. Jedan od takvih projekata je izrada LX-cat baze podataka (<http://www.lxcat.laplace.univ-tlse.fr>) u koji je trenutno uključen najveći broj istraživača, kako iz oblasti fizike rojeva i plazme, tako i iz oblasti fizike atomskih sudara. Saradnja koju ima naš Centar za neravnotežne procese Instituta za fiziku u Beogradu i posebno Laboratorija za gasnu elektroniku sa grupom profesora de Urquija, omogućila je naše uključivanje u rad na izradi LX-cat baze podataka, pa je i rad na ovoj disertaciji jedan doprinos u tom smjeru.

Polazna osnova za rad na ovoj disertaciji su bila mjerenja transportnih koeficijenta de Urquija i saradnika u $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4$ i njegovim smješama sa Ar (de Urquijo i ostali, 2009), kao i E Oettinger i saradnika u CH_3OCH_3 i njegovim smješama sa Ar i Ne (Oettinger i ostali, 1998), kao i postojeći skupovi efektivnih presjeka koji se mogu naći u literaturi (prvenstveno je korišćena baza podataka S. Biagia, <http://consult.cern.ch/writeup/magboltz/>). Metoda koju smo koristili za dobijanje skupova efektivnih presjeka je poznata metoda rojeva koja se zasniva na modifikaciji polaznog skupa presjeka na osnovu izmjerenih transportnih koeficijenata u iterativnom postupku koji se ponavlja sve dok se ne postigne zadovoljavajući stepen slaganja između izračunatih i izmjerenih vrijednosti transportnih koeficijenata, a o kojoj će nešto kasnije biti više riječi. Za proračun transportnih koeficijenata su korištena tri

kompjuterska koda: Elendif i Bolsig+, koji se zasnivaju na rješenju Boltzmannove jednačine u aproksimaciji dva člana (*eng. two-term approximation*-TTA), kao i Monte Carlo (MC) kod, potpuno razvijen i više puta testiran u Laboratoriji za gasnu elektroniku Instituta za fiziku u Beogradu. Tehnika primijenjena u kodu se zasniva na numeričkom praćenju velikog broja čestica u neutralnom gasu pod dejstvom električnih i magnetnih polja, koja mogu biti konstantna ili vremenski zavisna. Imajući u vidu ograničenost primjene TTA aproksimacije, kodovi koji se zasnivaju na njoj su korišteni zbog brzine i jednostavnosti dobijanja rezultata u nekim međukoracima modifikacionog procesa, imajući u vidu ogroman broj ponavljajućih krugova. Svi naši krajnji rezultati su dobijeni egzaktnom MC tehnikom.

Ova disertacija podijeljena je na šest poglavlja.

Prvo poglavlje je kratak uvod koji bi čitaoca trebalo da u najkraćim crtama obavijesti o predmetu istraživanja u okviru ove disertacije i o metodi, kao i razlozima kojim smo se rukovali pri izboru predmeta istraživanja.

Teorijske osnove fizike elektronskih rojeva su date u drugom poglavlju. Opisani su kodovi Elendif, Bolsig+ i MC kod, korišteni za dobijanje rezultata ovog rada kao i metoda rojeva korištena za dobijanje kompletnih skupova efektivnih presjeka.

Treće poglavlje ove disertacije bavi se transportnim karakteristikama elektrona u N_2O polazeći od novog skupa presjeka za e^-/N_2O interakciju dobijenog u magistarskoj tezi S. Dupljanin (Dupljanin i ostali, 2010). Istraživanje je prošireno na proračun transportnih koeficijenata u slučaju djelovanja konstantnih i vremenski promjenljivih (DC i RF) ukrštenih električnih i magnetnih polja ortogonalne konfiguracije.

Četvrto poglavlje je posvećeno interakciji elektrona sa molekulom tetrafluoroetana ($C_2H_2F_4$). Koristeći se novim mjerenjima brzine drifta i efektivnog koeficijenta jonizacije de Urquija i saradnika u čistom gasu kao i smješama sa A_r , primijenjena je metoda rojeva za dobijanje skupa efektivnih presjeka za elektrone. Polazni skup presjeka, koliko je nama poznato, jedini dostupan u literaturi, je preuzet iz Biagijeve baze podataka (Biagi, 2007; 2010). Analizirani su i eksperimentalni rezultati Basilea i saradnika (Basilei ostali, 1991).

U petom poglavlju je predstavljen rad na dobijanju skupa presjeka za elektronske interakcije sa molekulom dimetil etra (CH_3OCH_3), polazeći od polaznog skupa presjeka dostupnog u literaturi (S. Biagi, <http://consult.cern.ch/writeup/magboltz/>

magboltz-10.0.2.f), i izmjerenih transportnih koeficijenata E. Oettinger i saradnika (Oettinger i ostali, 1998). Nadalje, izračunati su kompletni skupovi transportnih i brzinskih koeficijenata u čistom gasu u slučaju djelovanja DC električnog polja, DC ukrštenog električnog i magnetnog polja ortogonalne konfiguracije, dok su u smješi $20\%CH_3OCH_3+80\%A_r$ proučavane transportne karakteristike elektrona u uslovima djelovanja RF ukrštenih električnih i magnetnih polja.

Zaključak je dat u šestom poglavlju, gdje su eksplicitno nabrojani rezultati ove disertacije.

2. OSNOVNE TEORIJSKE POSTAVKE FIZIKE ELEKTRONSKIH ROJEVA

2.1. UVOD

U ovoj glavi je dat pregled istorijskog razvoja fizike elektronskih rojeva, kako eksperimentalnog, tako i teorijskog. Ukratko su opisane neke od eksperimentalnih tehnika za dobijanje transportnih koeficijenata elektrona. Detaljno je opisana metoda dvočlane aproksimacije (TTA) za rješavanje Boltzmannove jednačine, kao i kodovi ELENDF i BOLSIG+ koji se zasnivaju na istoj, a korišteni su za dobijanje rezultata prikazanih u ovom radu. Dat je detaljan opis Monte Carlo (MC) simulacione tehnike koja se zasniva na praćenju trajektorija jedne ili više naelektrisanih čestica (u našem slučaju elektrona) kroz neutralan pozadinski gas, pod dejstvom električnog i magnetnog polja, koji mogu biti konstantni ili vremenski zavisni. Opisan je i Monte Carlo kod korišten za dobijanje rezultata ovog rada. Na kraju je prikazana metoda dobijanja efektivnih presjeka pomoću izmjerenih transportnih koeficijenata, poznata kao metoda rojeva.

2.2. ISTORIJSKI RAZVOJ FIZIKE ELEKTRONSKIH ROJEVA

Razvoj fizike elektronskih rojeva kao važnog dijela jedne šire oblasti, gasne elektronike, kreće još od ranih istraživanja elektroprovodnosti gasova. Nakon otkrića elektrona i drugih naelektrisanih čestica, istraživanja su išla u smjeru proučavanja njihovih interakcija sa molekulima gasova. Jedan od prvih važnih rezultata ove oblasti je Ramsauer-Townsendov efekat koji, u najkraćim crtama, predstavlja transparentnost nekih plemenitih gasova za elektrone energija manjih od 1eV. Otkriće ovog efekta je jako značajno. Sa jedne strane je dovelo do povezivanja mikroskopskih karakteristika slabo jonizovanog gasa tj. elementarnih sudarnih procesa opisanih efektivnim presjecima za rasijanje i makroskopskog stanja samog gasa, dok je sa druge strane obezbijedilo bazu za razvoj kvantne mehanike ali i za razvoj eksperimentalnih tehnika

koje su danas, zahvaljujući brzom tehnološkom razvoju, mnogo pouzdanije, tačnije i u mogućnosti su da daju mnogo više podataka negoli one izvorne.

Detaljan pregled teorijskih metoda i eksperimentalnih tehnika koje se bave problemom transporta roja naelektrisanih čestica prije 80-tih godina prošlog vijeka se može naći u knjizi Huxleya i Cromptona (Huxley i Crompton, 1974).

Daljnji razvoj gasne elektronike i fizike elektronskih rojeva je išao kako u teorijskom, tako i u eksperimentalnom pravcu. Velika primjena i značaj niskotemperaturnih, neravnotežnih, sudarno dominantnih plazmi u razvoju gasnih lasera, detektora čestica, izvora svjetlosti, u biofizici i medicini, u poluprovodničkoj industriji za minijaturizaciju integrisanih kola i mnogih drugih, je tražila da se istraživanja u ovoj oblasti nastave. Potreba određivanja efektivnih presjeka na niskim energijama je bila jedan od motivirajućih faktora u razvoju eksperimenata sa rojevima elektrona.

Eksperimentalne tehnike za određivanje transportnih karakteristika elektrona, kao što su brzina drifta i karakteristična energija, u istosmjernim poljima, su dosta dobro razvijene i usavršene. Neke od njih su u mogućnosti da daju vrijednosti brzine drifta i karakteristične energije velike tačnosti, sa greškom ispod 1 % (Crompton i ostali, 1970; Huxley i Crompton, 1974; Petrović i Crompton, 1989). Postoji više različitih metoda za mjerenje brzine drifta elektrona. Jedna od najranijih, razvijena još 1936 godine, se zasniva na Bradbery-Nielsen tehnici (Roberston, 1972; Crompton i Elford, 1973; England i Elford, 1988; Elford i ostali, 1994). Ova metoda određivanja brzine drifta elektrona se u suštini zasniva na mjerenju vremena preleta pomoću driftne cijevi sa dvije rešetkaste elektrode, na koje se dovodi naizmjenični napon. Iz ovih eksperimenata je moguće dobiti i koeficijente difuzije u pravcu polja (longitudinalni difuzioni koeficijent), ali samo u slučaju niskih vrijednosti redukovano električnog polja (E/N -električno polje podijeljeno koncentracijom čestica gasa). Manje precizne metode, ali primjenjive i na višim vrijednostima E/N , su Tyndall-Powellova tehnika (Hegerberg i ostali, 1982; Larsen i Elford, 1986) i tehnika koja kombinuje ove dvije tehnike (Roznerski i ostali, 1994). Mjerenja na uređajima Townsend-Huxley tipa se izvode između dvije paralelne elektrode, pri čemu se elektroni dobijaju fotoelektronskom emisijom, laserima impulsnog tipa. U anodnom kolu se mjeri struja pomjeraja, a vrijeme preleta se dobija kao vrijeme koje je potrebno da struja padne na polovinu svoje

početne vrijednosti. Ovi eksperimenti su poznati kao impulsni Townsedovi eksperimenti i takođe se mogu izvoditi i na višim vrijednostima E/N . Pored navedenih metoda, postoje i metode koje se mogu izvoditi samo na visokim vrijednostima E/N , a zasnivaju se na mjerenju optičke emisije koja dolazi od kratkoživećih pobuđenih čestica (Hunter i Christophorou, 1984).

Kako difuzija u prisustvu električnog polja nije izotropna (Parker i Lowke, 1969), koriste se dva koeficijenta da opišu širenje roja: longitudinalni (D_L -u pravcu električnog polja) i transverzalni difuzioni koeficijent (D_T -ortogonalan na električno polje). Inače, otkriće anizotropije difuzije je svakako pomoglo i ubrzalo razvoj teorijskih modela koji tretiraju transport naelektrisanih čestica kroz gas kao i razvoj Monte Carlo simulacija. Odnos transverzalnog koeficijenta difuzije i pokretljivosti elektrona (D_T/μ) pri malim vrijednostima električnog polja teži srednjoj energiji roja i kao takav predstavlja mjeru temperature elektrona, dok na višim vrijednostima polja roj nije u termalnoj ravnoteži i nema definisanu temperaturu, ali je odnos D_T/μ pogodna mjera energije roja, takozvana karakteristična energija. Upravo ova veličina može da se mjeri u tzv. Townsend-Huxley eksperimentima (Townsend, 1915; Crompton i Jory, 1962; Huxley i Bennet, 1940; Huxley i Crompton, 1974), koji se u suštini zasnivaju na određivanju odnosa struja koje dolaze na različite segmente anode.

Razvijen je i određen broj eksperimentalnih tehnika za mjerenje ekscitacionih koeficijenata, i one se uglavnom primjenjuju na atome i molekule koji se radijativno deekscituju. Ova vrsta eksperimenata potiče još iz pedesetih godina prošlog vijeka, a vršio ih je von Engel, kasnije Phelps sa saradnicima (Lawton i Phelps, 1978; Tachibana i Phelps, 1981), a izvode se i u Laboratoriji za gasnu elektroniku Instituta za fiziku u Beogradu (Božin i ostali, 1983; Stokić i ostali, 1992; Malović i ostali, 1997; 1999; 2000). Pored impulsnih verzija ovih eksperimenata postoje i one metode koje koriste sistem paralelnih elektroda, a vrše se u stacionarnom režimu.

Mjerenje jonizacionih i koeficijenata zahvata elektrona na atomima ili molekulima, a koji spadaju u nekonzervativne procese, se odvija uglavnom u eksperimentima koji tretiraju ova dva koeficijenta zajedno. Kod stacionarnih tehnika (Davies i Williams, 1977) se snima prostorna raspodjela intenziteta struje u funkciji rastojanja koje elektroni pređu krećući se brzinom drifta, za razliku od impulsnih

tehnika (Petrović *et al.* 1988) gdje se, dodajući jednu elektronegativnu komponentu osnovnom gasu može odrediti gubitak elektrona usljed zahvata.

Ako se pored električnog polja posmatra transport naelektrisanih čestica i pod dejstvom magnetnog polja, situacija se značajno mijenja jer se broj koeficijenata koji opisuju taj transport gotovo udvostruči. S toga je bilo značajno proširiti i razviti nove eksperimentalne tehnike koje bi uključile i prisustvo magnetnog polja. Uglavnom se razmatra transport u ukrštenim električnim i magnetskim poljima pri uglu od $\pi/2$ između njih (Schmidt, 1993; Shmidt i ostali, 1994).

Kako su se vremenom razvijale i usavršavale eksperimentalne tehnike za određivanje transportnih koeficijenata došlo je i do razvoja teorijskih metoda koje tretiraju transport velikog broja naelektrisanih čestica kroz neutralan pozadinski gas. Monte Carlo (MC) simulaciona tehnika i Boltzmanova kinetička jednačina (BE) (Boltzmann, 1872) su dva osnovna pravca koja se se bave ovom tematikom.

Teorija dvočlane aproksimacije (TTA) je bila jedna od prvih približnih metoda za rješavanje BE (Holstein, 1946; Frost i Phelps, 1962). Kodovi ELENIDIF (Morgan i Penetrante, 1990) i BOLSIG+ (Hagelaar i Pitchford, 2005), korišteni za dobijanje rezultata prikazanih u ovom radu se zasnivaju upravo na rješavanju BE u dvočlanoj aproksimaciji, tako da će o ovoj teoriji biti više riječi u sledećem poglavlju. Kasnije su razvijene i neke druge približne metode kao što je teorija prenosa impulsa (Robson, 1986; Robson, 1994; Vrhovac i Petrović, 1996).

Kako TTA nije davala dovoljno tačne vrijednosti transportnih koeficijenata, prvenstveno brzine drifta i difuzionih koeficijenata, a razvojem gasnih detektora čestica rasla je i potreba za što tačnijim vrijednostima istih, razvijane su tzv. „multi-term“ teorije koje su zadržavale i više članove razvoja funkcije raspodjele. U početku su one bile primjenjive samo u slučaju električnog polja. Biagi je modifikovao TTA i samim tim povećao pouzdanost i tačnost dobijenih rezultata (Biagi, 1988; Biagi, 1989), ali su nedostaci ove teorije (neprimjenjivost u slučaju ukrštenih električnih i magnetnih polja kao i u slučaju vremenski zavisnih polja) i dalje ostali. Daljnji teorijski razvoj je išao u pravcu pronalaženja metoda koje bi uključile i ove dodatne efekte ukrštenih polja kao i njihove promjene u vremenu (Ness, 1993; Robson i ostali, 1997; White i ostali, 1999). Metodu koja tretira problem paralelnih kao i ukrštenih električnih i magnetnih polja, poznatu kao FTI (flight time integral) su razvili Ikuta i Sugai (Ikuta i Sugai, 1989). Svoj

doprinos analizi i razvoju tehnika za dobijanje „multi-term“ rješenja Boltzmannove jednačine u vremenski zavisnim hidrodinamičkim i ravnotežnim nehidrodinamičkim uslovima dao je i S. Dujko (Dujko, 2009) iz Laboratorije za gasnu elektroniku Instituta za fiziku u Beogradu.

Jedna od tehnika za proučavanje transporta naelektrisanih čestica je i Monte Carlo simulaciona tehnika koja se zasniva na numeričkom pojedinačnom praćenju velikog broja naelektrisanih čestica kroz neutralan gas i ona spada u egzaktne teorije. Postoji veliki broj kodova koji se zasnivaju na ovoj tehnici, koji su stalno usavšavani, a u mogućnosti su da tretiraju transport čestica kako u konstantnim, tako i u vremenski zavisnim i ukrštenim električnim i magnetnim poljima (Itoh i Musha, 1960; Brenan i ostali, 1990; Biagi, 1999). Monte Carlo kod koji je korišten za dobijanje rezultata prikazanih u ovom radu je nastao i razvijao se u Laboratoriji za gasnu elektroniku Instituta za fiziku u Beogradu (Bzenić, 1997; Raspopović, 1999; Sakadžić, 2000; Dujko, 2004). Opsežan pregled početne verzije koda se može naći u preglednim radovima Petrovića i saradnika kao i Dujka i saradnika (Petrović i ostali, 2002; Dujko i ostali, 2005). Poboljšanja početne verzije koda je dao Dujko u svojoj doktorskoj disertaciji (Dujko, 2009) uvođenjem novih elemenata, od kojih je najznačajniji tretman kretanja roja elektrona pod dejstvom električnog i magnetnog polja proizvoljne konfiguracije.

Za dobijanje rezultata prikazanih u ovom radu korištena je prvobitna verzija koda čije su osnovne karakteristike date u poglavlju (2.6.)

2.3. BOLTZMANNOVA JEDNAČINA

Opisivanjem ponašanja velikog broja naelektrisanih čestica koje se kreću u neutralnom gasu pod dejstvom električnog i magnetnog polja, bavi se kinetička teorija gasova. Polazeći od opštih kinetičkih jednačina, uz određene aproksimacije i pretpostavke, može se doći do jednačina koje opisuju kretanje jednostavnijih sistema kakav je roj elektrona.

Po definiciji, roj elektrona predstavlja skup identičnih čestica koje međusobno ne interaguju, gustina im je takva da se interakcije između njih i interakcije sa zidovima

cijevi u kojima se kreću mogu zanemariti. Pretpostavka je da kretanje roja ne utiče značajno na stanje samog gasa i on se nalazi u stanju termodinamičke ravnoteže.

Pod dejstvom spoljašnjeg električnog polja kojem je roj izložen, srednja energija mu se povećava. Pored haotične brzine kretanja koja je dominantna, roj dobija i usmjerenu, takozvanu driftnu komponentu, koja je mnogo manja od haotične i koja može da se mjeri, za razliku od haotične. Na kretanje roja elektrona pored električnog polja utiču i sudari sa atomima ili molekulima pozadinskog gasa. Prilikom tih sudara dolazi do preraspodjele energije između čestica roja i samog gasa, pri čemu je moguće uravnoteženje ova dva procesa. Kada energija, koju roj dobije u vremenu između dva sudara, postane približno jednaka energiji koju on izgubi u brojnim sudarima sa atomima ili molekulima gasa, karakteristike roja se dalje ne mijenjaju u prostoru i vremenu i zavise samo od jačine električnog polja i osobina samog gasa (njegove koncentracije i temperature). Kažemo da je uspostavljeno ravnotežno stanje, iako se ovdje ne radi o termodinamičkoj ravnoteži.

Kretanje elektrona u gasovima relativno niske gustine je moguće opisati zakonima klasične mehanike, dok kvantnomehanički efekti postaju značajni samo u toku sudara tj, u vremenu koje je mnogo manje od vremena između dva sudara (srednje slobodno vrijeme). Jedan od najbitnijih parametara koji opisuje stanje roja je funkcija raspodjele elektrona po energijama (ili brzinama). Kada nema električnog polja funkcija raspodjele elektrona po energijama je Maxwellova tj. ravnotežna, dok u slučaju djelovanja električnog polja dolazi do novih preraspodjela energije između elektrona i atoma (ili molekula) i uspostavljanja nove raspodjele koja više nije Maxwellova. Osnovni cilj svih teorijskih metoda za proučavanje kinetike jonizovanog gasa je upravo dobiti ovu funkciju raspodjele, jer je to veličina koja povezuje mikroskopsko stanje samog gasa, opisano presjecima za rasijanje, i makroskopsko, opisano transportnim koeficijentima koji su eksperimentalno mjerljive veličine (brzina drifta, karakteristična energija, koeficijent jonizacije). Polazeći od pretpostavki sadržanih u definiciji roja elektrona, zanemarujući korelaciju između čestica, lanac integralno diferencijalnih jednačina se značajno pojednostavljuje i vodi ka jednačini poznatoj kao Boltzmannova jednačina.

Rješenje Liouvillove jednačine (Liboff, 1969; Résbois i Leener, 1977) koja opisuje dinamiku N-čestičnog sistema sa 3N-stepeni slobode je N-čestična funkcija

raspodjele $f_N(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, t)$, gdje su $\vec{q}$ -generalisane koordinate a $\vec{p}$ -impulsi, dok proizvod $d\vec{q}_1, \dots, d\vec{p}_N = d\vec{p}d\vec{q}$ predstavlja vjerovatnoću nalaženja sistema u stanju $(\vec{q}_1, \dots, \vec{p}_N)$. Kako se većina transportnih parametara, kao makroskopski mjerljivih veličina može opisati jednočestičnom funkcijom raspodjele $f(\vec{q}_1, \vec{p}_1, t)$, dolazi se do Boltzmannove jednačine (Boltzmann, 1872), koja je za roj elektrona u električnom i magnetnom polju (a koja mogu biti i vremenski zavisna), oblika:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \vec{a} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \right] f(\vec{r}, \vec{v}, t) = -Jf(\vec{r}, \vec{v}, t), \quad (2.1)$$

gdje je $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ -jednočestična funkcija raspodjele u šestodimenzionalnom faznom prostoru, $\vec{a} = \frac{q}{m}(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$ -ubrzanje elektrona, J -kolizioni integral.

Kolizioni integral sadrži informacije o sudarnim procesima koji se dešavaju između elektrona i konstituenata gasa. Ukoliko su prisutni nekonzervativni procesi (prvenstveno jonizacija i zahvat elektrona) J se može podijeliti na dva dijela: konzervativni J^C i nekonzervativni J^R dio. Teškoće prilikom rješavanja Boltzmannove jednačine potiču upravo od ovog operatora, ali se u slučaju roja elektrona i pretpostavki datih prilikom definicije roja, on može značajno uprostiti. U tom slučaju kolizioni operator za roj elektrona je oblika (Lin i ostali, 1979; Kumar i ostali, 1980):

$$J(f) = \sum_{i,j} \int [f(\vec{v})F_i(\vec{V}) - f(\vec{v}')F_j(\vec{V}')] \vec{u} \sigma(ij, u, \Omega) d\vec{u}' d\vec{V}', \quad (2.2)$$

gdje je $f(\vec{v})$ -jednočestična funkcija raspodjele za elektrone, $F(\vec{V})$ -funkcija raspodjele za konstituente gasa (koja se može smatrati Maxwelllovom), u -brzina relativnog kretanja, σ -diferencijalni presjeci za rasijanje dok se onaka (') odnosi na stanje sistema nakon sudara.

Rješenje jednačine (2.1) je jednočestična funkcija raspodjele koja u sebi nosi kompletnu informaciju o stanju samog sistema, bilo u hidrodinamičkim ili nehidrodinamičkim uslovima. Da bi se dobili transportni koeficijenti potrebno je dalje pojednostavljenje Boltzmannove jednačine, a koje je moguće u hidrodinamičkim uslovima.

U većini eksperimenata sa rojevima elektrona dolazi do odstupanja od hidrodinamičkih uslova. Naime, u blizini izvora primarnih elektrona transportne

karakteristike elektrona su prostorno zavisne što znači da se o ravnotežnom stanju može govoriti samo u oblastima koje su dosta udaljene od ovih izvora. Vjerovatnoća interakcije elektrona sa neutralnim česticama opada ukoliko se radi o energijama elektrona u opsegu od 100 eV do 1 MeV (Bakhov i ostali, 2000). To dalje znači da na višim vrijednostima električnog polja energija koju elektroni dobiju od polja može postati značajna i mnogo veća od energije koju oni troše na sudare sa konstituentima gasa, što vodi ka razvoju neravnotežnog stanja. Postoji još jedan primjer odstupanja od hidrodinamičkih uslova a radi se o transportu elektrona u nehomogenim tj. poljima koja se brzo mijenjaju u prostoru i vremenu. Usljed te brze promjene roj nema dovoljno vremena da se relaksira i pređe u ravnotežno stanje.

2.3.1. Boltzmannova jednačina u hidrodinamičkim uslovima

Boltzmannova jednačina i njeno rješavanje se značajno pojednostavljuje u tzv. hidrodinamičkim uslovima koji predstavljaju osnovnu pretpostavku teorije transporta rojeva naelektrisanih čestica kroz neutralan gas (Kumar i ostali, 1980). U slučaju kvazistacionarnih raspodjela brzina i malih relativnih gradijenata koncentracije, tj. u hidrodinamičkim uslovima, moguće je Boltzmannovu jednačinu razdvojiti na dva dijela. Tako dobijamo dvije jednačine, od kojih jedna opisuje brzinsku (energijsku) zavisnost funkcije raspodjele elektrona dok druga opisuje prostorno-vremensku zavisnost koncentracije čestica roja.

Jednačina za koncentraciju čestica roja, poznata kao jednačina kontinuiteta i kao generalisana difuzionu jednačina, je oblika:

$$\left(\partial_t - \sum_{k=0}^{\infty} \omega^{(k)} * (-\nabla)^k \right) n(\vec{r}, t) = 0, \quad (2.3)$$

gdje su $\omega^{(k)}$ -simetrični tenzori k-tog reda. Ako u prethodnoj jednačini sumiranje zaustavimo na drugom članu dobijamo standardnu difuzionu jednačinu:

$$\partial_t n + W \nabla n - D * \nabla^2 n = -\alpha n, \quad (2.4)$$

u kojoj se prepoznaju transportni koeficijenti:

- efektivni koeficijent jonizacije: $\alpha = -\omega^{(0)}$,
- brzina drifta: $W = \omega^{(1)}$

- difuzioni tenzor: $D = \omega^{(2)}$.

U hidrodinamičkoj aproksimaciji funkciju raspodjele je moguće izraziti na sljedeći način:

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \sum_{j=0}^{\infty} f^{(j)}(\vec{v}, t) * (-\nabla)^j n(\vec{r}, t), \quad (2.5)$$

gdje je $f^{(j)}(\vec{v}, t)$ - tenzorska funkcija j -tog reda dok $(*)$ predstavlja kontrakciju tenzora j -tog reda.

Jednačine (2.3) i (2.5) predstavljaju osnovne jednačine za dobijanje transportnih koeficijenata.

Uvrštavanjem generalisane difuzione jednačine (2.3) i jednačine (2.5) koja predstavlja razvoj funkcije raspodjele po gradijentima koncentracije, u Boltzmannovu jednačinu (2.1) i izjednačavanjem koeficijenata uz svako $(-\nabla)^k n(\vec{r}, t)$, za svako k na obe strane, dobijamo lanac jednačina za određivanje funkcije raspodjele po brzinama (energijama):

$$(\vec{a} \partial_{\vec{v}} + J) f^{(0)} = -\omega^{(0)} f^{(0)}, \quad k = 0, \quad (2.6)$$

$$(\vec{a} \partial_{\vec{v}} + J) f^{(k)} = \vec{v} f^{(k-1)}(\vec{v}) - \sum_{j=0}^k \omega^{(j)} f^{(k-j)}, \quad k \neq 0. \quad (2.7)$$

Prethodne jednačine se rješavaju sukcesivno. Prva od njih (jednačina 2.6) predstavlja svojstveni problem, pri čemu je najmanja svojstvena vrijednost ustvari efektivni koeficijent jonizacije $\alpha = -\omega^{(0)}$, a traženo rješenje $f^{(0)}(\vec{v})$ je svojstveni vektor koji odgovara ovoj svojstvenoj vrijednosti.

Normalizacioni uslovi za funkciju raspodjele su:

$$\int f^{(0)}(\vec{v}) d\vec{v} = 1, \quad k = 0, \quad (2.8)$$

$$\int f^{(k)}(\vec{v}) d\vec{v} = 0, \quad k \neq 0, \quad (2.9)$$

dok se transportni koeficijenti mogu dobiti iz sljedećih jednačina:

$$\omega^{(0)} = -\int J^R f^{(0)}(\vec{v}) d\vec{v}, \quad (2.10)$$

$$\omega^{(k)} = \int \vec{v} f^{(k-1)}(\vec{v}) d\vec{v} - \int J^R f^{(k)}(\vec{v}) d\vec{v}, \quad (2.11)$$

2.3.2. Definicija balk i flaks transportnih koeficijenata

Kada su prisutni nekonzervativni procesi (jonizacija i zahvat elektrona), koeficijenti $\omega^{(k)}$, dati jednačinom za koncentraciju čestica roja (2.3) se mogu predstaviti kao zbir dva člana:

$$\omega^{(k)} = G^{(k)} + S^{(k)}, \quad (2.12)$$

gdje prvi član, $G^{(k)}$, potiče iz protoka elektrona, a drugi, $S^{(k)}$, se odnosi na nekonzervativne procese. Koeficijenti $\omega^{(k)}$ se nazivaju balk (engl. *bulk*), a $G^{(k)}$ flaks (engl. *flux*) transportni koeficijenti. Balk vrijednosti transportnih koeficijenata su one koje se dobijaju usrednjavanjem u realnom prostoru i mjerenjem u eksperimentima sa rojevima, gdje se u stvari posmatra centar mase i širenje roja oko tog centra. Flaks vrijednosti predstavljaju usrednjene vrijednosti posmatranog koeficijenta po svim elektronima u roju, a dobijaju se usrednjavanjem u brzinskom prostoru. Razlika između balk i flaks transportnih koeficijenata je veća što je veći uticaj nekonzervativnih procesa na transport roja naelektrisanih čestica.

Ako uporedimo jednačine (2.11) i (2.12) vidi se da se flaks transportni koeficijenti mogu izraziti na sljedeći način:

$$G^{(k)} = \int \vec{v} f^{(k-1)}(\vec{v}) d\vec{v}, \quad (2.13)$$

što znači da su flaks transportni koeficijenti dio balk transportnih koeficijenata od kojih je oduzet reaktivni dio koji opisuje nekonzervativne procese. Ukoliko se u kolizionom integralu zanemari dio J^R koji se odnosi na ove procese, balk i flaks transportni koeficijenti su jednaki.

Integraljenjem jednačine (2.3), uz pretpostavku da koncentracija čestica i njeni vremenski izvodi na granicama oblasti teže nuli, dobijaju se balk transportni koeficijenti:

$$\omega^{(0)} \equiv -\alpha = \frac{d(\ln N)}{dt}, \text{ efektivni koeficijent jonizacije,} \quad (2.14)$$

$$\omega^{(1)} \equiv W = \frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt}, \text{ balk brzina drifta,} \quad (2.15)$$

$$\omega^{(2)} \equiv D = \frac{1}{2!} \frac{d\langle r^* r^* \rangle}{dt}, \text{ tenzor balk difuzije,} \quad (2.16)$$

gdje je $r^* = \bar{r} - \langle \bar{r} \rangle$, a N -ukupan broj čestica roja definisan jednačinom:

$$N \equiv N(t) = \int n(\bar{r}, t) d\bar{r}. \quad (2.17)$$

2.3.3. Flaks transportni koeficijenti

Polazeći od prethodnih jednačina može se doći do definicije flaks transportnih koeficijenata. Naime, ako zanemarimo nekonzervativne procese ukupan broj čestica roja se ne mijenja, te je moguće izvršiti komutiranje operatora srednje vrijednosti i vremenskog izvoda. Ako u jednačini (2.15), kojom je definisana balk brzina drifta, ovi operatori zamijene mjesta, dolazimo do definicije flaks brzine:

$$w_i = \frac{d}{dt} \langle x_i \rangle = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{j=N} x_{ij} \right) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{j=N} \frac{dx_{ij}}{dt} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N w_{ij} = \langle w_i \rangle, \text{ tj.} \quad (2.18)$$

$$\bar{w}_F = \langle \bar{w} \rangle. \quad (2.19)$$

Vidimo da je flaks brzina elektrona srednja vrijednost brzine svih elektrona u roju.

Na isti način možemo doći do definicije flaks vrijednosti difuzionog tenzora. Polazeći od jednačine (2.16) kojom su definisane balk vrijednosti difuzionog tenzora, čije su dijagonalne komponente:

$$\begin{aligned} D_{Bxx} &= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \right), \\ D_{Byy} &= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(\langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2 \right), \\ D_{Bzz} &= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(\langle z^2 \rangle - \langle z \rangle^2 \right), \end{aligned} \quad (2.20)$$

komutiranjem operatora srednje vrijednosti i vremenskog izvoda dobijamo flaks komponente:

$$\begin{aligned} D_{Fxx} &= \langle x w_x \rangle - \langle x \rangle \langle w_x \rangle, \\ D_{Fyy} &= \langle y w_y \rangle - \langle y \rangle \langle w_y \rangle, \\ D_{Fzz} &= \langle z w_z \rangle - \langle z \rangle \langle w_z \rangle. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Ako je spoljašnje električno polje usmjereno u x -pravcu tada D_{Bxx} i D_{Fxx} predstavljaju balk i flaks koeficijente longitudinalne difuzije, dok su D_{Byy} i D_{Bzz} balk, a D_{Fyy} i D_{Fzz} flaks koeficijenti transverzalne difuzije.

Ako se posmatra transport roja u prisustvu magnetnog polja usmjerenog u z -pravcu, ($\langle z = 0 \rangle$) imamo da je:

$$D_{Bzz} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle z^2 \rangle \text{ i } D_{Fzz} = \langle zw_z \rangle, \quad (2.22)$$

odakle zaključujemo da su transverzalne komponente difuzionog tenzora D_{yy} i D_{zz} različite.

Kada nema magnetnog polja ove komponente su jednake, te mozemo pisati:

$$D_{BT} = \frac{1}{2} (D_{Byy} + D_{Bzz}), \quad (2.23)$$

$$D_{FT} = \frac{1}{2} (D_{Fyy} + D_{Fzz}). \quad (2.24)$$

U kodu koji se zasniva na Monte Carlo tehnici, o kome će detaljno biti riječi u tekstu koji slijedi, a koji je korišten za dobijanje rezultata ovoga rada, transportni koeficijenti su definisani na gore opisani način.

Razlike između balk i flaks vrijednosti transportnih koeficijenata su značajne sa stanovišta modelovanja plazme u određenom gasu ili gasnoj smjesi. Modelovanje niskotemperaturskih, sudarno dominantnih plazmi se odvija u dva pravca. Jedan je tzv. fluidni pravac u kojem su konstituenti plazme (elektroni, joni, pobuđene čestice, radikali) predstavljeni makroskopskim veličinama (energija, impuls, gustoća čestica ili drugi), čije su prostorno vremenske promjene opisane fluidnim jednačinama dobijenim iz brzinskih momenata Boltzmannove jednačine. U jednačinama fluidnih modela plazme koriste se flaks vrijednosti transportnih koeficijenata dok se sa druge strane kao ulazni parametri u fluidnim modelima koriste transportni koeficijenti dobijeni u eksperimentima sa rojevima elektrona, a to su balk vrijednosti. Dakle, u slučaju osjetljivosti samog modela na transportne koeficijente trebalo bi imati u vidu razliku između balk i flaks transportnih koeficijenata, izuzev u slučajevima kada se nekonzervativni procesi mogu zanemariti.

Drugi pravac u modelovanju niskotemperaturske plazme je čestični model, poznat i kao Monte Carlo metod, u kojem se prate trajektorije pojedinačnih čestica,

sudari se tretiraju slučajnim brojevima dok se makroskopske veličine tj. transportni koeficijenti dobijaju određenim usrednjavanjima. Kombinovanjem ova dva modela, fluidnog i čestičnog, došlo se do hibridnog modela u kojem se visokoenergijski elektroni tretiraju Monte Carlo tehnikom a niskoenergijski fluidnim modelom.

2.4. METODE ZA RJEŠAVANJE BOLTZMANNOVE JEDNAČINE

Kao što je u prethodnom tekstu već rečeno, Boltzmannova jednačina opisuje transport i ponašanje velikog broja naelektrisanih čestica (u našem slučaju elektrona) kroz neutralan pozadinski gas. Modelovanje plazmi, kako u čistom gasu tako i u gasnim smjesama traži poznavanje što tačnijih vrijednosti transportnih koeficijenata koji opisuju makroskopsko stanje posmatranog sistema. Imajući u vidu veliku primjenu niskotemperaturnih (sudarno dominantnih) plazmi, u poluprovodničkoj industriji prilikom obrade materijala plazmom (Makabe i Petrović, 2006), u medicini, detektorima visokoenergijskih čestica i drugim, javila se potreba za razvojem što tačnijih metoda rješavanja Boltzmannove jednačine.

Postoje brojne tehnike za rješavanje BE, kako egzaktna tako i približna, koje su se vremenom razvijale i usavršavale u dva bitno različita pravca. Prvi pravac se zasniva na integralnom metodu u kojem se BE rješava direktno, integracijom, dok se drugi pravac bazira na razvoju funkcije raspodjele u red po nekim pogodno izabranim funkcijama a zatim se pristupa njenom rješavanju.

Osnovni cilj egzaktnih ili „multi-term” teorija je dobiti što bolju konvergenciju transportnih koeficijenata. Pristupi su razni: Fourier transformacije, pretvaranje Boltzmannove jednačine u čisto integralnu i potom njeno rješavanje, razvoj po prostornim gradijentima, razvoj funkcije raspodjele u red i zadržavanje što više članova istog i druge. Postoje brojne studije i radovi na ovu temu, starijeg i novijeg datuma, a ovdje ćemo izdvojiti samo neke od njih: Parker i Lowke, 1969; Lin i ostali, 1979; Braglia, 1980; Penetrante i Bardsley, 1984; Petrović, 1985; Ness i Robson, 1986; 1989; White i ostali, 2002; Dujko, 2005. U suštini, nabrojane metode u prvom koraku daju funkciju raspodjele elektrona pomoću koje se, zatim, mogu dobiti transportni koeficijenti.

Kod približnih metoda za rješavanje Boltzmannove jednačine, vrši se odsjecanje viših članova reda u razvoju funkcije raspodjele, pri čemu se pouzdanaost dobijenih rezultata značajno smanjuje ali se sa druge strane pojednostavljuje i ubrzava njeno rješavanje.

Kako su u ovom radu, za dobijanje rezultata korišteni kodovi ELENIDIF i BOLSIG+ u kojima se BE rješava u dvočlanoj aproksimaciji, u sljedećem poglavlju će biti detaljno izložena ova metoda. Pored ove približne metode, korištena je i jedna egzaktna metoda koja se zasniva na Monte Carlo simulacionoj tehnici i Monte Carlo kod, i na ovom mjestu možemo istaći da su svi konačni rezultati prikazani u ovoj disertaciji dobijeni MC kodom, dok su rezultati dobijeni u dvočlanoj aproksimaciji, kodom ELENIDIF i BOLSIG+ služili kao „vodič za oči” zbog brzine i jednostavnosti dobijanja rezultata.

2.4.1. Metoda dvočlane aproksimacije

Rješavanje Boltzmannove jednačine u dvočlanoj aproksimaciji potiče još iz vremena Lorentza, koji se bavio proučavanjem transporta elektrona u metalima (Lorentz, 1905). U slučaju elektrona, usljed malog odnosa njihove mase i mase jona ($\sim 1/1836$) konzervativni dio kolizionog integrala je moguće izraziti u konačnoj diferencijalnoj formi. Kada su prisutni samo elastični sudari, pri prostorno homogenim uslovima, BE je moguće riješiti analitički pomoću metode dvočlane aproksimacije. Ova aproksimacija se vremenom razvijala i bez obzira na sva ograničenja i oblast primjenjivosti još uvijek se koristi.

Teorija transporta elektrona kroz neutralan pozadinski gas se razvila iz opštijih teorija koje tretiraju transport naelektrisanih čestica proizvoljne mase tj. jona (Kumar i ostali, 1980; Skulerud, 1984). Prvu „multi-term” teoriju za rješenje BE razvili su Lin i saradnici (Lin i ostali, 1979) a obuhvatala je konzervativne sudare i transport naelektrisanih čestica pod dejstvom električnog polja. Lin, Robson i Mason su ovu teoriju prilagodili elektronskom transportu (Lin i ostali, 1979a) koja je postala poznata kao LRM teorija.

U LRM teoriji, ili teoriji poznatoj još kao momentni metod, polazi se od razvoja funkcije raspodjele u red po sfernim harmonicima:

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_{lm}(\vec{r}, \vec{v}, t) Y_{lm}^+ \left(\frac{\vec{v}}{v} \right), \quad (2.25)$$

gdje su f_{lm} momenti funkcije raspodjele, odnosno koeficijenti razvoja, dok je Y_{lm} kolizijski operator definisan na sljedeći način:

$$Y_{lm} \left(\frac{\vec{v}}{v} \right) = P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}. \quad (2.26)$$

U fizici elektronskih rojeva ovaj operator je rotaciono invarijantan:

$$J(f(v) Y_{lm}) = Y_{lm} J_l(f(v)), \quad (2.27)$$

zahvaljujući čemu je:

$$J(f(\vec{v})) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm} \left(\frac{\vec{v}}{v} \right) J_l(f(\vec{v})). \quad (2.28)$$

Uvrštavanjem razvoja (2.25) u Boltzmannovu jednačinu (2.1), izjednačavajući faktore koji množe harmonike, dobijaju se jednačine za koeficijente razvoja tj. funkcije f_{lm} .

Ako se u razvoju (2.25) zadržimo samo na prva dva člana reda, dolazimo do teorije poznate kao teorija dvočlane aproksimacije. U tom slučaju Boltzmannovu jednačinu je moguće transformisati u dvije obične diferencijalne jednačine, koje se rješavaju iterativno, polazeći od nekog početno pretpostavljenog oblika funkcije raspodjele. Postupak se ponavlja sve do dobijanja dobre konvergencije rezultata koji ne smiju zavisti od početnog oblika izabrane funkcije.

Ako u BE (2.1) uvrstimo kolizijski operator (2.28) i razvoj funkcije raspodjele (2.25), pri čemu se zaustavimo na drugom članu, zanemarimo članove uz prostorno vremenske izvode, dobijamo dvije jednačine (Huxley i Crompton, 1974). Kombinovanjem prve od njih, tzv. skalarne jednačine sa vektorskom:

$$\vec{f}_1 = \frac{e\vec{E}}{N\sigma_m(\varepsilon)} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} [f_0(\varepsilon)], \quad (2.29)$$

dobija se jednačina:

$$\begin{aligned}
 & \frac{E^2}{3N} \frac{d}{d\varepsilon} \left(\frac{\varepsilon}{\sigma_m(\varepsilon)} \frac{df_0}{d\varepsilon} \right) + \frac{2mNkT}{M} \frac{d}{d\varepsilon} \left(\varepsilon^2 \sigma_m(\varepsilon) \frac{df_0}{d\varepsilon} \right) + \frac{2mN}{M} \frac{d}{d\varepsilon} \left(\varepsilon^2 \sigma_m(\varepsilon) f_0(\varepsilon) \right) + \\
 & \sum_{j < k} N_j \left[(\varepsilon + \varepsilon_{jk}) f_0(\varepsilon + \varepsilon_{jk}) \sigma(jk; \varepsilon + \varepsilon_{jk}) - \varepsilon f_0(\varepsilon) \sigma(jk; \varepsilon) \right] + \\
 & \sum_{j < k} N_k \left[(\varepsilon + \varepsilon_{jk}) f_0(\varepsilon + \varepsilon_{jk}) \sigma(kj; \varepsilon - \varepsilon_{jk}) - \varepsilon f_0(\varepsilon) \sigma(kj; \varepsilon) \right] = 0,
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

gdje prvi član opisuje energiju koju roj dobije od polja, drugi opisuje energiju dobijenu prilikom sudara sa molekulima posmatranog gasa na temperaturi T, treći član se odnosi na energiju koju roj izgubi prilikom elastičnih sudara dok četvrti i peti član opisuju neelastične i superelastične sudare. σ_m u prvom članu je totalni efektivni presjek za prenos impulsa, dok su N_k i N_j koncentracije molekula gasa u j -tom i k -tom stanju, a povezane su sljedećom relacijom:

$$N_k = \frac{w_k}{w_j} N_j e^{-\frac{\varepsilon_{jk}}{kT}}, \tag{2.31}$$

dok je:

$$\sigma(kj) = \frac{w_j}{w_k} \frac{\varepsilon}{\varepsilon - \varepsilon_{jk}} \sigma(jk), \tag{2.32}$$

$$\int_0^\infty \varepsilon^2 f_0(\varepsilon) d\varepsilon = 1. \tag{2.33}$$

Integrišući jednačinu (2.30) po svim energijama, dolazimo do jednačine:

$$a(u) f_0(u) + b(u) \frac{df_0}{du} + c(f_0, u) = 0, \tag{2.34}$$

gdje je u -energija, dok su funkcije $a(u)$, $b(u)$ i $c(u)$ definisane na sljedeći način:

$$a(u) = \left(\frac{2m}{M} \right) u^2 \sigma_m(u), \tag{2.35}$$

$$b(u) = \frac{1}{3} \left(\frac{E}{N} \right)^2 \frac{u}{\sigma_m} + kTa(u), \tag{2.36}$$

$$c(f_0, u) = \sum_{j,k} N_j \int_u^{u+\varepsilon_{jk}} e \sigma(jk, \varepsilon) \left(f_0(\varepsilon) - e^{-\frac{\varepsilon_{jk}}{kT}} f_0(\varepsilon - \varepsilon_{jk}) \right) d\varepsilon. \tag{2.37}$$

Rješenje jednačine (2.34) za proizvoljno ε je:

$$f_0(\varepsilon) = g(\varepsilon) \left(1 + \int_0^{\varepsilon_{\max}} \frac{c(f_0, u)}{b(u)g(u)} du \right), \quad (2.38)$$

pri čemu je:

$$g(\varepsilon) = \exp \left(- \int_0^{\varepsilon} \frac{a(u)}{b(u)} du \right). \quad (2.39)$$

Poznavajući funkciju raspodjele f_0 mogu se dobiti transportni koeficijenti. Eksplicitni izrazi za proračun ovih koeficijenata, a koji slijede iz teorije dvočlane aproksimacije dati su sljedećim izrazima (Huxley i Crompton, 1974):

- brzina drifta:

$$w = - \frac{eE}{3N} \left(\frac{2}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{\sigma_m(\varepsilon)} \frac{df_0}{d\varepsilon} d\varepsilon, \quad (2.40)$$

- transverzalni koeficijent difuzije pomnožen koncentracijom čestica gasa:

$$ND_T = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{\sigma_m(\varepsilon)} f_0(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (2.41)$$

- odnos transverzalnog koeficijenta difuzije i pokretljivosti elektrona:

$$\frac{D_T}{\mu} = \frac{E}{N} \frac{ND_T}{w}, \quad (2.42)$$

- srednja energija:

$$\langle \varepsilon \rangle = \int_0^{\infty} \varepsilon^{\frac{3}{2}} f_0(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (2.43)$$

2.4.2. Oblast primjenjivosti metode dvočlane aproksimacije

Metoda rješavanja Boltzmannove jednačine u dvočlanoj aproksimaciji spada u približne metode i kao takva ne može biti pouzdana u velikom broju slučajeva. Ova metoda daje korektne rezultate samo u slučaju malog stepena anizotropije funkcije raspodjele tj. samo onda kada su neelastični efektivni presjeci mali u poređenju sa elastičnim (Holstein, 1946), mada se ni u tom slučaju ne može govoriti o egzaktnom rješenju.

Primjenjivošću ove aproksimacije i nekorektnostima do kojih dovodi zanemarivanje viših članova razvoja funkcije raspodjele bavili su se mnogi autori (Makabe i Mori, 1980; Pitchford i ostali, 1981; Pitchford i Phelps, 1982; Segur i ostali, 1983). U ovim radovima je pokazano da metoda dvočlane aproksimacije ne daje dobre rezultate ukoliko se radi o jako polarnim molekulima kod kojih su presjeci za rotacione ekscitacije poredivi sa elastičnim kao i u slučajevima kada su presjeci za vibracione ekscitacije veliki u oblasti energija gdje se javlja Ramzauer-Townsendov minimum u elastičnom ili totalnom presjeku za prenos impulsa. Preporučljivo je, čak i u slučaju kada se očekuje da ona da dobre rezultate, uvesti i više članove reda (Baraff i Buchbaum, 1963; Parker i Lowke, 1969).

Postoji veliki broj komercijalnih kodova baziranih na rješenju BE u dvočlanoj aproksimaciji (Luft, 1975; Thomson i ostali, 1976; Morgan, 1979; Rockword i Green 1980; Morgan i Penetrante, 1990; Hagelaar i Pitchford, 2005) koji su prvobitno bili namijenjeni za modelovanje gasnih lasera. Neki od njih su kasnije razvijani i korišteni za dobijanje transportnih i brzinskih koeficijenata elektrona za fluidne modele plazme (Hagelaar i Pitchford, 2005), kao i za dobijanje efektivnih presjeka metodom elektronskih rojeva. Ova metoda je korištena za dobijanje rezultata ove disertacije, te će o njoj biti više riječi u odjeljku 2.7.

U tekstu koji slijedi opisani su kodovi ELENDIF (Morgan i Penetrante, 1990) i BOLSIG+ (Hagelaar i Pitchford, 2005) koji se zasnivaju na rješenju BE u dvočlanoj aproksimaciji. I pored svih gore navedenih ograničenja primjenljivosti dvočlane aproksimacije, odlučili smo se za ove kodove, zbog brzine i jednostavnosti dobijanja transportnih koeficijenata, koji su nam bili „vodilja za oči“ u velikom broju ponavljajućih krugova iterativog postupka modifikacije efektivnih presjeka. Svi naši konačni rezultati, kako što je već rečeno u prethodnom tekstu, dobijeni su Monte Carlo simulacionom tehnikom koja spada u egzaktnu metodu.

2.5. KOMPJUTERSKI KODOVI ELENDF I BOLSIG+

2.5.1. Elendif

Kompjuterski kod ELENDF (Morgan i Penetrante, 1990) koji se zasniva na rješavanju Boltzmannove jednačine u dvočlanoj aproksimaciji je korišten za dobijanje polaznih rezultata ove disertacije, koji su zbog brzine i jednostavnosti dobijanja služili kao polazna osnova u procesu modifikacije skupova efektivnih presjeka. Prvobitna verzija koda je nastala na Wayne State University, a bavila se prenosom energije u CO laserima. Vremenom je izvorna verzija doživjela mnoge izmjene i nadogradnje čiji je primarni cilj bio mogućnost njegovog pokretanja na novijim generacijama personalnih računara ali je sam kod doživio i promjene u smislu uvođenja sofisticiranih fizičkih modela, grafike, kao i različitih formata ulaznih podataka.

Polazeći od opšte forme BE (jednačina 2.1), uz pretpostavku nezavisnosti električnog polja od prostorno-vremenskih koordinata, koristeći razvoj funkcije raspodjele: $f(v) = f_0(v) + \frac{\vec{v}}{v} \cdot \vec{f}_1(v)$ (Holstein, 1946), uz prisustvo elastičnih, neelastičnih i superelastičnih procesa, BE je u ovom kodu izražena u formi:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} = & -\frac{\partial J_f}{\partial \mathcal{E}} - \frac{\partial J_{el}}{\partial \mathcal{E}} + \sum_{i,j} N_i^0 [R_{ij}(\mathcal{E} + \mathcal{E}_{ij})n(\mathcal{E} + \mathcal{E}_{ij}) - R_{ij}(\mathcal{E})n(\mathcal{E})] - \\ & - \sum_{i,j} N_i^j [R_{ij}^*(\mathcal{E})n(\mathcal{E}) - R_{ij}^*(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{ij})n(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{ij})] \end{aligned} \quad (2.44)$$

gdje je:

$$J_f = \frac{2Ne^2(E/N)^2 \mathcal{E}}{3m(2\mathcal{E}/m)^{1/2} \sum_i \delta_i \sigma_i(\mathcal{E})} \left(\frac{n}{2e} - \frac{\partial n}{\partial \mathcal{E}} \right), \quad (2.45)$$

$$J_{el} = -N \left(\frac{2\mathcal{E}}{m} \right)^{1/2} \sum_i \delta_i \frac{2m}{M} \sigma_e(\mathcal{E}) \left[n \left(\frac{kT}{2} - \mathcal{E} \right) - kT \mathcal{E} \frac{\partial n}{\partial \mathcal{E}} \right], \quad (2.46)$$

$$R_{ij}(\mathcal{E}) = \left(\frac{2}{m} \right)^{1/2} [\mathcal{E}^{1/2} \sigma_{ij}(\mathcal{E})], \quad R_{ij}^*(\mathcal{E}) = \left(\frac{2}{m} \right)^{1/2} \left[\frac{(\mathcal{E} + \mathcal{E}_{ij})}{\mathcal{E}^{1/2}} \sigma_{ij}(\mathcal{E} + \mathcal{E}_{ij}) \right], \quad (2.47)$$

$$n(\mathcal{E}) = n_e f_0(\mathcal{E}) \mathcal{E}^{1/2}, \quad \int_0^\infty n(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = n_e. \quad (2.48)$$

U prethodnim relacijama sa N je definisana gustina, dok se indeksi i i j odnose na vrstu i stanje konstituenata posmatranog gasa. Dalje je: σ_i -presjek za prenos impulsa; $\sigma_{ij}, \varepsilon_{ij}$ -presjek za elektronske ekscitacije i energijski gubitak za j -to stanje vrste i , respektivno, dok je $\delta_i = \frac{N_i}{N}$. Prvi član u jednačini (2.44) predstavlja energiju koju elektroni dobiju od polja, drugi član energiju izgublenu u elastičnim sudarima sa teškim česticama dok su treći i četvrti član korektivni članovi koji se odnose na termalnu energiju teških čestica. Veličine $R_{ij}(\varepsilon)$ i $R_{ij}^*(\varepsilon)$ su pragovi za elektronsku ekscitaciju i superelastični proces, respektivno.

Rješavanjem Boltzmannove jednačine u vremenski zavisnoj formi kod u prvom koraku daje funkciju raspodjele elektrona po energijama, koji se kreću u određenom gasu ili gasnoj smješi. U sprezi sa skupom efektivnih presjeka, koji se zadaju u posebnoj datoteci i tretiraju se kao ulazni podaci, kod računa transportne koeficijente: srednju energiju, brzinu drifta, karakterističnu energiju, koeficijente jonizacije i zahvata kao i efektivni koeficijent jonizacije, brzinske koeficijente za elastični i sve zadate neelastične procese. Pored efektivnih presjeka u ulazne parametre, koji se tdkj. zadaju u posebnoj datoteci, spadaju i parametri koji definišu razmatrani gas ili gasnu smjesu, a to su: vrsta gasa ili procentualni sastav komponenata gasne smješe, pritisak, temperatura gasa, jačina spoljašnjeg električnog polja podijeljena koncentracijom gasa- E/N , (E/N je osnovni skalirajući faktor u fizici elektronskih rojeva, a jedinica je $1\text{Td} = 10^{-21}\text{m}^2$).

Poslednja verzija koda ima mogućnost tretiranja transporta elektrona pod dejstvom vremenski zavisnog električnog polja, neelastične i superelastične sudare, jonizaciju, uključujući i sekundarne elektrone, procese elektronskog zahvata, elektron-elektron sudare, elektron-jon sudare, foton-elektronske procese, spoljašnji izvor elektrona i difuziju.

Rotacione ekscitacije se mogu zadati na dva načina, ili preko CAR parametra (*Continuos Approximation to Rotation*) (Frost i Phelps, 1962), kojeg zadajemo u ulaznom fajlu, zajedno sa efektivnim presjecima ili dodavanjem člana koji opisuje ove procese direktno u Boltzmannovu jednačinu.

Difuzija elektrona je uključena u Boltzmannovu jednačinu korištenjem modela Yu. P. Raizera (Raizer, 1991).

U kodu se disocijativna rekombinacija i elektronski zahvat tretiraju kao neelastični procesi, dok se energija sekundarnih elektrona koji se uvrštavaju u funkciju raspodjele uzima ili kao nulta ili kao energija određena uniformnom raspodjelom od nulte do energije $\varepsilon = \frac{\varepsilon_1 - I}{2}$, gdje je ε_1 -energija elektrona koji je izazvao jonizaciju a I -potencijal jonizacije.

Pored ograničenja oblasti primjenjivosti metode dvočlane aproksimacije, ovaj kod ima i sljedeće nedostatke: maksimalan broj energijskih tačaka u kojima se mogu zadati presjek za prenos impulsa kao i neelastični presjeci je 120, dok je maksimalan broj efektivnih presjeka koji se mogu zadati u ulaznom fajlu za jednog konstituenta 30.

Opravdanost korištenja ovog koda, i pored svih navedenih nedostataka i ograničenja je u brzini dobijanja mnoštva rezultata, a samim tim i glatkoći krivih energijske zavisnosti transportnih koeficijenata što je od velikog značaja za dalji rad nekom egzaktnom metodom kao što je Monte Carlo simulaciona tehnika.

2.5.2. Bolsig+

Kompjuterski kod BOLSIG+ (Hagelaar i Pitchford, 2005) se, slično kao i ELENDF, zasniva na rješenju BE u dvočlanoj aproksimaciji. Razvijen je prvenstveno za proračun transportnih i brzinskih koeficijenata za elektrone u formi pogodnoj za direktnu primjenu u fluidnim modelima gasnih pražnjenja. U tekstu koji slijedi biće date osnovne ideje i koraci za rješavanje BE u ovom kodu, bez ulaženja u detalje matematičke procedure.

Osnovne pretpostavke korištene prilikom rješavanja BE (2.1) su prostorna homogenost električnog polja i vjerovatnoće sudara kada je funkcija raspodjele elektrona u brzinskom prostoru simetrična. Korištenjem sfernih koordinata u brzinskom prostoru BE jednačina postaje:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cos \theta \frac{\partial f}{\partial z} - \frac{e}{m} E \left(\cos \theta \frac{\partial f}{\partial v} + \frac{\sin^2 \theta}{v} \frac{\partial f}{\partial \cos \theta} \right) = Cf, \quad (2.49)$$

gdje je v intenzitet brzine, θ je ugao između pravca brzine i električnog polja dok je z položaj duž tog pravca. Uobičajena procedura za rješavanje ove jednačine je razvoj

funkcije raspodjele f po Legendreovim polinomima (sferno harmonijski razvoj) i formiranje skupa jednačina za koeficijente razvoja. Za rezultate visoke preciznosti potrebno je šest ili više članova razvoja, mada u mnogim slučajevima aproksimacija dva člana daje korisne rezultate. U ovom kodu je primijenjena dvočlana aproksimacija razvoja funkcije raspodjele:

$$f(v, \cos \theta, z, t) = f_0(v, z, t) + f_1(v, z, t) \cos \theta, \quad (2.50)$$

gdje je f_0 izotropni dio a f_1 je anizotropna perturbacija. Uvrštavanjem prethodnog razvoja u jednačinu 2.49 dobijaju se jednačine za f_0 i f_1 :

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \frac{\gamma}{3} \epsilon^{1/2} \frac{\partial f_1}{\partial z} - \frac{\gamma}{3} \epsilon^{-1/2} \frac{\partial}{\partial \epsilon} (\epsilon E f_1) = C_0, \quad (2.51)$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \gamma \epsilon^{1/2} \frac{\partial f_0}{\partial z} - E \gamma \epsilon^{1/2} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = -N \sigma_m \gamma \epsilon^{1/2} f_1, \quad (2.52)$$

gdje je $\gamma = \left(\frac{2e}{m}\right)^{1/2}$, dok je $\epsilon = \left(\frac{v}{\gamma}\right)^2$ energija elektrona u eV. Desna strana jednačine

(2.51) predstavlja promjenu f_0 usljed sudara, dok desna strana jednačine (2.52) sadrži totalni presjek za prenos impulsa σ_m koji predstavlja sumu svih mogućih sudarnih procesa elektrona sa česticama gasa.

Jednačine (2.51) i (2.52.) je dalje moguće uprostiti uz pretpostavku vremenske i prostorne zavisnosti f_0 i f_1 , jer funkcija raspodjele f ne može biti konstantna i u prostoru i u vremenu usljed nekonzervativnih procesa (jonizacije i zahvata). U ovom kodu razdvajanje energijske od prostorno-vremenske zavisnosti funkcije raspodjele je dato izrazom:

$$f_{0,1}(\epsilon, z, t) = \frac{1}{2\pi\gamma^3} F_{0,1}(\epsilon) n(z, t), \quad (2.53)$$

gdje je sada funkcija raspodjele $F_{0,1}$ konstantna u vremenu i prostoru. Prostorna ili vremenska zavisnost gustine elektrona je sada povezana isključivo sa čistim brojem novonastalih elektrona. U tom kontekstu, razmotrena su dva slična slučaja koja odgovaraju uslovima koji su specifični u eksperimentima sa rojevima elektrona: eksponencijalni vremenski porast bez prostorne zavisnosti i eksponencijalni prostorni porast broja elektrona bez vremenske zavisnosti. Prvi slučaj odgovara impulsnim a drugi stacionarnim Townsendovim eksperimentima (Tagashira, Sakai i

Sakamoto,1977). Detalji matematičke procedure za dobijanje transportnih i brzinskih koeficijenata u formi koja omogućava njihovu direktnu primjenu u fluidnim modelima mogu se naći u radu Hagelaara i Pitchforda (Hagelaar i Pitchford, 2005).

Kod je u mogućnosti da jednostavno i brzo izračuna veliki broj transportnih i brzinskih koeficijenata. Ovdje ćemo prikazati samo neke od eksplicitnih izraza za njihov proračun u DC poljima:

- Srednja energija:

$$\bar{\epsilon} = \int_0^{\infty} \epsilon^{3/2} F_0 d\epsilon, \quad (2.54)$$

- Pokretljivost elektrona pomnožena koncentracijom molekula gasa N :

$$\mu N = -\frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \frac{e}{\sigma_m} \frac{\partial F_0}{\partial \epsilon} d\epsilon, \quad (2.55)$$

- Difuzioni koeficijent pomnožena koncentracijom molekula gasa N :

$$DN = \frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \frac{\epsilon}{\sigma_m} F_0 d\epsilon, \quad (2.56)$$

- Brzinski koeficijenti:

$$k_k = \gamma \int_0^{\infty} \epsilon \sigma_k F_0 d\epsilon, \quad (2.57)$$

- Townsendow koeficijent podijeljen koncentracijom gasa N :

$$\frac{\alpha_k}{N} = \frac{k_k \alpha}{\bar{v}_i}, \text{ za vremenski porast,} \quad (2.58)$$

$$\frac{\alpha_k}{N} = \frac{k_k}{\mu E}, \text{ za prostorni porast.} \quad (2.59)$$

Kod ima mogućnost tretiranja transporta naelektrisanih čestica i u slučaju ukrštenih električnih i magnetnih polja kao i u slučaju vremenski zavisnih polja. U ovoj disertaciji, kod Bolsig+ smo koristili za proračun transportnih koeficijenata, odnosno u međukoracima procesa modifikacije efektivnih presjeka za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju, usljed njegove jednostavnosti i brzine dobijanja podataka.

2.6. MONTE CARLO SIMULACIONA TEHNIKA

Monte Carlo (MC) tehnika je numerička simulaciona metoda koja je u svojoj osnovi statističke prirode i u kojoj se za rješavanje najrazličitijih matematičkih, fizičkih i proizvoljnih kompleksnih problema koriste slučajni brojevi. Ono što je zajedničko u svim MC tehnikama je da očekivana vrijednost izabranog slučajnog broja treba da bude jednaka vrijednosti fizičke veličine koja se određuje. Razvoj ove tehnike počeo je još u pedesetim godinama prošlog vijeka, kada su Von Neumann i Ulam, usljed nemogućnosti dobijanja analitičkog rješenja određenih problema velike kompleksnosti, došli do rješenja matematičkih problema simulacijom stohastičnih procesa. Kako se metoda zasniva na slučajnosti i velikom broju ponavljanja određenih događaja, ime je dobila po poznatim kockarnicama u Monaku.

Proučavanjem transporta naelektrisanih čestica kroz neutralan pozadinski gas primjenom MC simulacija prvi su se bavili Itoh i Musha (Itoh i Musha, 1960) i Skullerud (Skullerud, 1968). Najveći nedostatak ovih, istorijski gledano početnih modela, je bio u tome što nisu bili uključeni nekonzervativni sudari a zanemaren je i uticaj elektronske difuzije. Vremenom su ova, kao i mnoga druga ograničenja, prevaziđena od strane brojnih istraživačkih grupa u svijetu (detaljan pregled je dat u Dujko, 2009). Razvojem računarskih resursa MC tehnika se počela intenzivnije koristiti početkom osamdesetih godina prošlog vijeka.

U ovom radu je korišten kod koji se zasniva na MC simulacionoj tehnici, nastao u Laboratoriji za gasnu elektroniku Instituta za fiziku u Beogradu, čiju izvornu verziju je razvio Bzenić (Bzenić, 1997). Na njegovom poboljšanju, testiranju i razvoju su kasnije radili Raspopović (Raspopović, 1999), Sakadžić (Sakadžić, 2000) i Dujko (Dujko, 2004; 2009), pod neposrednim rukovodstvom Akademika dr Zorana Petrovića. Korišteni kod se sastoji iz dva programska paketa, prvi je napisan u programskom jeziku c++, dok se drugi sastoji od više programa napisanih u programskom jeziku matlab i služi za obradu i grafičko procesiranje rezultata. Kod ima mogućnost proučavanja transporta roja naelektrisanih čestica kroz neutralan pozadinski gas pod dejstvom električnog i magnetnog polja, a koji mogu biti i vremenski zavisni. Prednost ove metode u odnosu na numeričke metode za rješavanje Boltzmannove jednačine je u

tome što je lako prilagodljiva realnim eksperimentalnim uslovima kao što su brzo promjenljiva polja, refleksivne elektrode, prisustvo prostornog naelektrisanja i druge.

Učitavanje ulaznih podataka, generisanje slučajnih brojeva tj. događaja, izračunavanje makroskopskih veličina koje karakterišu ponašanje roja (srednja energija, karakteristična energija, brzina drifta, koeficijenti difuzije i drugi), odgovarajuća usrednjavanja po svim elektronima, te njihov periodični i konačni zapis su osnovne procedure korištene MC simulacije.

2.6.1. Radni uslovi simulacije i ulazni parametri

U MC simulaciji se posmatra kretanje velikog broja naelektrisanih čestica (u našem slučaju elektrona) kroz neutralan pozadinski gas koji je prostorno neograničen. Roj se pušta iz koordinatnog početka, sa Maxwelllovom raspodjelom po brzinama, proizvoljne početne energije, s obzirom da ona ne utiče na vrijednosti relaksiranih transportnih koeficijenata, nego samo na vrijeme relaksacije roja u ravnotežno stanje. U ovom radu, u svim simulacijama je uzeto da je njihova početna energija 1eV. Elektroni se kreću pod dejstvom spoljašnjeg električnog i magnetnog polja, koji mogu biti i vremenski zavisni, sudaraju se sa konstituentima gasa, pri čemu gube dio svoje energije dok dio energije dobijaju od električnog polja. Kažemo da je roj relaksirao u ravnotežno stanje kada su disipirana i dobijena energija jednake. Sudari mogu biti elastični i neelastični, a sva rasijanja elektrona na atomima i molekulima izabranog gasa ili gasne smjese se, u ovoj verziji koda, smatraju izotropnim. Ovi sudari su opisani efektivnim presjecima za rasijanje koji se zadaju u posebnim datotekama i smatraju se ulaznim podacima. Pored njih, u ulazne podatke spadaju i: koncentracija gasa, za koju je u ovom radu uzeto da iznosi $3.54 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$, što odgovara pritisku od 1 Torr (1 Torr=133.322 Pa) pri temperaturi od 273 K, njegova molarna masa, DC vrijednosti redukovanog električnog i magnetnog polja kao i AC vrijednosti amplituda električnog i magnetnog polja, u slučaju polja koja se mijenjaju u vremenu. Ako se razmatra transport roja u ukrštenim električnim i magnetnim poljima potrebno je zadati i faznu razliku između njih. Vremenski zavisna polja se računaju kao:

$$\frac{E(t)}{N} = \frac{E_{DC}}{N} + \frac{E_{AC}}{N} \cos(2\pi f t), \quad (2.60)$$

$$\frac{B(t)}{N} = \frac{B_{DC}}{N} + \frac{B_{AC}}{N} \cos(2\pi f t + \theta), \quad (2.61)$$

dok je u ovom radu, u svim simulacijama uzeto da je fazna razlika između električnog i magnetnog polja $\pi/2$.

Ulaznim podacima se smatra i maksimalna energija elektrona koja bi trebalo da je od šest do deset puta veća od srednje energije roja. U procjeni ove vrijednosti korisni su rezultati dobijeni nekom manje tačnom tehnikom, kao što je metoda dvočlane aproksimacije. Takođe se, u ulaznom fajlu, zadaje i vremenski interval koji bi morao biti dovoljno veliki da bi se dostigao hidrodinamički režim, tj. elektronski roj bi u relaksiranom stanju trebao da boravi dovoljno dugo da bi se odgovarajućim usrednjavanjima po svim elektronima i po periodu kretanja dobile što tačnije vrijednosti izračunatih transportnih koeficijenata. Početni broj elektrona koji se pušta je bitan parametar sa stanovišta dobre statistike rezultata, jer se standardna devijacija smanjuje povećanjem broja elektrona, tj. sa $\sqrt{n}$. Naravno da nije moguće beskonačno povećavati njihov broj, što zbog ograničenih računarskih resursa, što zbog porasta procesorskog vremena rada računara. U ovom radu početni broj elektrona je varirao od $2.5 \cdot 10^5$ do $5 \cdot 10^5$.

2.6.2. Generator slučajnih brojeva

Kao što je već u prethodnom tekstu rečeno, u osnovne procedure Monte Carlo simulacija se ubrajaju procedure za dobijanje diskretnih slučajnih veličina čije se vrijednosti javljaju kao rezultati slučajnih događaja. Slučajna veličina može da bude npr. trenutak sudara elektrona sa molekulom neutralnog pozadinskog gasa ili ugao rasijanja prilikom sudara. Za određivanje ovih slučajnih veličina, kao i nekih drugih, koriste se generatori slučajnih brojeva koji su široko dostupni.

U Monte Carlo kodu korištenom za dobijanje rezultata prikazanih u ovom radu, za generisanje slučajnih brojeva je iskorišten *ran3* generator, preuzet iz drugog izdanja *Numerical Recipes* (Press i ostali, 1994). Generisani slučajni brojevi služe za

određivanje trenutka sudara, vrste sudarnog procesa i pravca vektora brzine rasijanog elektrona. Ovaj generator je u prvobitnoj verziji koda pokazivao korelaciju petog reda koja je otklonjena razdvajanjem generatora slučajnih brojeva za različite procedure (Sakadžić, 2000), tj. umjesto jednog korištena su tri generatora, pri čemu svaki od njih ima raličit ulazni parametar, čime je izbjegnuta korelacija između generisanih slučajnih brojeva.

2.6.3. Određivanje trenutka i vrte sudarnog procesa

U MC simulaciji prati se putanja pojedinačnog elektrona pri čemu je značajno što tačnije odrediti trenutak sudara sa atomom ili molekulom pozadinskog gasa, kao i prirodu samog sudara. Posmatra se kretanje elektrona u prostoru i vremenu, u tačno određenim vremenskim koracima konstantne dužine, Δt , nakon čega se pristupa određenim usrednjavanjima po svim elektronima u roju i po svim vremenskim koracima. U slučaju konstantnog električnog polja vremenski korak se određuje pomoću srednje vrijednosti sudarne frekvencije elektrona, koja je u slučaju izotropnog rasijanja jednaka frekvenciji za prenos impulsa. Ako se posmatraju polja koja se mijenjaju u vremenu, vremenski korak je jednak stotom dijelu perioda polja.

Vjerovatnoća da elektron koji se pušta iz koordinantnog početka nije doživio sudar prije određenog vremena t data je izrazom:

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

gdje je t_0 vrijeme ulaska elektrona u gas ili vrijeme prethodnog sudara. Vremenski zavisna totalna frekvencija sudara ν_T je:

$$\nu_T(\varepsilon(t)) = N\sigma_T(\varepsilon)v, \quad (2.63)$$

gdje je N gustina molekula pozadinskog gasa, $\sigma_T(\varepsilon)$ je totalni presjek za rasijanje elektrona dok je v brzina elektrona. Kako je gustina vjerovatnoće sudara u vremenskom intervalu $(t, t + \Delta t)$:

$$p(t)dt = P(t) - P(t + \Delta t), \quad (2.64)$$

pokazuje se da je:

$$p(t) = \nu_T(\varepsilon(t)) \exp\left(-\int_{t_0}^t \nu_T(\varepsilon(t')) dt'\right). \quad (2.65)$$

Trenutak sudara t_c , koji u kontekstu prethodnog teksta predstavlja slučajnu veličinu, možemo odrediti izjednačavanjem vjerovatnoće da je slučajan broj η_1 iz uniformne raspodjele na intervalu $[0, 1]$ i vjerovatnoće da je trenutak sudara t_c na intervalu $[t_0, t_c]$. Tako dobijamo da je:

$$\eta_1 = \int_{t_0}^{t_c} \nu_T(\varepsilon(t)) \exp\left(-\int_{t_0}^t \nu_T(\varepsilon(t')) dt'\right) dt, \quad (2.66)$$

što je ekvivalentno sa:

$$-\ln(1 - \eta_1) = \int_{t_0}^{t_c} \nu_T(\varepsilon(t)) dt. \quad (2.67)$$

Prethodnu jednačinu, u kojoj je nepoznata veličina trenutak sudara t_c , nije moguće riješiti analitički. Postoji više numeričkih metoda za njeno rješavanje a mi ćemo u tekstu koji slijedi dati kratak pregled metode nultih sudara i integralne metode.

2.6.4. Integralana metoda

U našem MC kodu za određivanje trenutka sudara korištena je integralana metoda koja se bazira na numeričkoj integraciji jednačine (2.67) u malim vremenskim koracima, a u svojoj osnovi se oslanja na metodu koju su koristili Itoh i Musha (Itoh i Musha, 1960) i Sakai i ostali (Sakai i ostali, 1972). Najvažniji zadatak ove metode je određivanje vremenskog koraka za izračunavanje integrala u jednačini (2.67). U našem kodu on je određen kao minimum tri relevantne vremenske konstante: srednjeg vremena između dva sudara (koje određujemo iz trenutne vrijednosti sudarne frekvencije i unaprijed podijelimo zadatim brojem), vremena koje odgovara ciklotronskom periodu, ukoliko se posmatraju ukrštena električna i magnetna polja i vremena samplovanja tj. vremena nakon kojeg se snimaju makroskopske karakteristike roja. Tako određen vremenski korak se potom dijeli pogodno unapred odabranim brojem (20-100) na određeni broj vremenskih podintervala koji se zatim koriste za izračunavanje integrala u jednačini (2.67).

Naime, jednačinu (2.67) možemo napisati u obliku:

$$(1 - \eta_1) = \exp \left(- \int_{t_0}^{t_c} \nu_T(\varepsilon(t)) dt \right), \quad (2.68)$$

pri čemu se posmatra vrijednost integrala u eksponentu sa desne strane, koji se diskretizuje u tzv. sudarnu sumu:

$$\sum_k \nu_T(\varepsilon(t_k)) \delta t_k, \quad t_k = \delta t_1 + \dots + \delta t_k, \quad (2.69)$$

gdje je δt_k vremenski korak. Ukoliko je vrijednost integrala u eksponentu jednačine (2.68) manja od izabranog slučajnog broja η_1 sudar se nije desio te se na vrijednost izračunatog integrala dodaje vrijednost integrala za sljedeći vremenski interval. Postupak se ponavlja sve dok suma tih vrijednosti ne bude jednaka ili veća od izabranog slučajnog broja, kada se sudar se desio. Zatim se bira novi slučajni broj a vrijednost integrala vraća na nulu.

2.6.5. Metoda nultih sudara

Druga metoda za rješavanje jednačine (2.67) je tzv. metoda nultih sudara koju je razvio Skullerud (Skullerud, 1968) baveći se razmatranjem transporta jona u gasovima. Ova metoda se primjenjuje uglavnom u slučajevima transporta naelektrisanih čestica pod dejstvom konstantnog električnog polja, dok u slučajevima djelovanja vremenski zavisnih polja nije unapređivana i prilično je nepraktična. Naime, u vremenu između dva sudara polja mogu značajno da se promijene što sa druge strane zahtijeva da se procedura više puta zaustavi u toku jednog perioda polja radi promjene električnog polja.

Osnova metode nultih sudara leži u činjenici da je jednačinu (2.67) moguće riješiti analitički ukoliko je koliziona frekvencija $\nu_T(\varepsilon(t))$ konstantna. To je moguće postići uvođenjem tzv. nultih sudara koji ni na koji način ne utiču na energiju elektrona i predstavljaju fiktivne procese. Koliziona frekvencija uvedenih nultih sudara $\nu_{null}(\varepsilon(t))$ se bira tako da je totalna koliziona frekvencija, koja uključuje i frekvenciju nultih sudara konstanta i jednaka svojoj maksimalnoj vrijednosti:

$$v_{\max} = v_{\text{null}}(\varepsilon(t)) + v_T(\varepsilon(t)). \quad (2.70)$$

Ako ovako definisanu frekvenciju uvrstimo u jednačinu (2.67) moguće ju je riješiti analitički i dobiti trenutak sudara:

$$t_c = t_0 + \frac{1}{v_{\max}} \ln \left(\frac{1}{1 - \eta_1} \right). \quad (2.71)$$

Kada se odredi trenutak sudara bira se novi slučajni broj kojim se određuje da li se desio nulti ili stvarni sudar. U slučaju da se desio nulti sudar elektron će nastaviti da se kreće po svojoj trajektoriji bez promjene energije.

Pored neprimjenjivosti ove metode u slučaju vremenski promjenjivih polja, problem se može pojaviti i kada broj nultih sudara postane veći od broja stvarnih sudara, pri čemu dolazi do usporenja rada samog programa. Ovo je naročito izraženo kod inertnih gasova koji imaju izražen Ramsauer-Townsendov minimum na energijama oko 1eV, pri čemu elektron može da pređe značajan put a da se ne sudari sa atomom ili molekulom ispitivanog gasa. Razdvajanjem energijskih oblasti na više podoblasti sa pripadajućim konstantnim kolizionim frekvencijama (Reid, 1979) moguće je donekle prevazići ovaj nedostatak metode nultih sudara.

2.6.6. Određivanje vrste sudarnog procesa

Kada je određen trenutak sudara, bilo integralnom ili metodom nultih sudara, sljedeći korak je odrediti vrstu sudarnog procesa. Sa uniformne raspodjele $[0, 1]$ bira se novi slučajni broj (η_2) , porede se vjerovatnoće da se desio sudar j -te vrste, pri čemu za neko k mora da važi da je:

$$\sum_{j=1}^{k-1} P_j < \eta_2 < \sum_{j=1}^k P_j. \quad (2.72)$$

Kada je ispunjen ovaj uslov desio se sudar k -te vrste.

2.6.7. Određivanje komponenti vektora brzine rasijanog elektrona

Kada je poznat trenutak sudara i vrsta sudarnog procesa prelazi se na algoritam koji služi za određivanje intenziteta i projekcije vektora brzine rasijanog elektrona. Sa uniformne raspodjele $[0,1]$ biraju se još dva slučajna broja (η_3 i η_4) koji služe za određivanje azimutalnog i ugla rasijanja (φ i θ , respektivno), kojima je određen pravac vektora brzine elektrona u odnosu na pravac električnog polja. U našem MC kodu posmatra se izotropno rasijanje. U slučaju anizotropnog rasijanja vjerovatnoća da se elektron rasiye pod uglom θ je određena diferencijalnim presjekom $I(\varepsilon, \theta)$, dok je raspodjela azimutalnog ugla φ uvijek izotropna. Ovi uglovi se određuju na sljedeći način:

$$\varphi = 2\pi\eta_3, \quad (2.73)$$

$$\cos\theta = 1 - 2\eta_4. \quad (2.74)$$

Kosinusi pravaca vektora brzine elektrona poslije sudara su dati sa:

$$\begin{aligned} \cos x &= \cos \varphi, \\ \cos y &= \sin \varphi \sin \theta, \\ \cos z &= \sin \varphi \cos \theta, \end{aligned} \quad (2.75)$$

dok su komponente vektora brzine poslije sudara:

$$\begin{aligned} v_x &= v \cos x, \\ v_y &= v \cos y, \\ v_z &= v \cos z. \end{aligned} \quad (2.76)$$

Pored pravca potrebno je odrediti i intenzitet brzine rasijanog elektrona pomoću njegove energije nakon sudara. Ukoliko se radi o elastičnom rasijanju energiju koju elektron izgubi je moguće dobiti iz zakona održanja energije i impulsa, pri čemu je gubitak energije:

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon_0 \left(1 - 2 \frac{mM}{(m+M)^2} (1 - \cos\theta) \right), \quad (2.77)$$

gdje je ε_0 -energija elektrona prije sudara, m i M -mase elektrona i molekula neutralnog pozadinskog gasa, respektivno, a θ -ugao između vektora brzine elektrona prije i poslije sudara.

Kod neelastičnog rasijanja energija koju elektron izgubi je jednaka energiji praga za određeni proces, pri čemu je intenzitet njegove brzine poslije sudara:

$$v = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}}, \quad (2.78)$$

gdje je ε -energija elektrona koja je jednaka razlici energije elektrona prije sudara i energije koju izgubi prilikom sudara.

Ukoliko su prisutni nekonzervativni procesi kao što su elektronski zahvat i jonizacija, može doći do gubitaka elektrona kao i njihovog umnožavanja usljed jonizacije. Presjek za zahvat elektrona, u slučaju elektronegativnih gasova može da bude značajan i da se javi kako na niskim, tako i na srednjim ili višim energijama, što vodi ka stalnom gubitku elektrona tokom simulacije. Sa druge strane, usljed intenzivnih jonizacionih procesa može doći do značajnog povećanja broja elektrona, što vodi do zagušenja memorije računara i prestanka rada simulacije. Da bi se izbjegle statističke fluktuacije rezultata i zagušenje memorijskih kapaciteta računara, potrebno je u simulaciji ili dodavati ili izbacivati elektrone ili ova dva procesa (intenzivan gubitak i intenzivno umnožavanje) nekako uskladiti. U našem MC kodu ovaj problem je riješen tako što se pri svakom gubitku elektrona usljed zahvata u simulaciju dodaje novi elektron koji ima osobine nekog od preostalih elektrona, a u slučaju pojave sekundarnog elektrona, slučajnim brojem se izbacuje jedan elektron. Postoji više načina preraspodjele energije između primarnog i sekundarnog elektrona u slučaju jonizacionih procesa. U našem MC kodu je uzeto da odnos ovih energija određuje novi slučajni broj η_5 , pri čemu su energije primarnog i sekundarnog elektrona:

$$\varepsilon_p = \eta_5 \cdot \varepsilon, \quad (2.79)$$

$$\varepsilon_s = \varepsilon - \varepsilon_p, \quad (2.80)$$

gdje je ε energija primarnog elektrona nakon sudara, umanjena za energiju jonizacionog praga.

2.6.8. Samplovanje transportnih koeficijenata

U odjeljku 2.3.2. i 2.3.3. definisani su balk i flaks transportni koeficijenti koji opisuju makroskopsko stanje posmatranog sistema. Date jednačine (2.11; 2.13; 2.14;

2.15; 2.16) predviđa kinetička teorija, međutim da bi one bile direktno primjenjive u MC kodu potrebno ih je dodatno diskretizovati. Neka je C proizvoljan parametar roja elektrona (energija, koordinata..), tada je njegova srednja vrijednost:

$$\langle C \rangle = \frac{1}{N(t)} \sum_{j=1}^{N(t)} C_j(t), \quad (2.81)$$

pri čemu se usrednjavanje vrši po svim elektronima u roju, dok je $N(t)$ broj elektrona u određenom trenutku vremena.

Efektivni koeficijent jonizacije definisan jednačinom (2.14) u odjeljku 2.3.2. tj. diferenciranje po vremenu se diskretizuje dijeljenjem sa Δt , jer se u MC simulaciji snima broj elektrona u vremenskim koracima konstante dužine Δt .

Balk brzina drifta, definisana jednačinom (2.15) u odjeljku 2.3.2. je data kao izvod po vremenu srednjeg radijus vektora roja elektrona u trenutku t , koji se može jednostavno dobiti zahvaljujući činjenici da se nakon svakog vremenskog koraka dužine Δt snimaju koordinate svih elektrona u roju:

$$\langle \vec{r} \rangle = \frac{1}{N(t)} \sum_{j=1}^{N(t)} \vec{r}_j(t), \quad (2.82)$$

dok se diferenciranje po vremenu diskretizuje tkđ. dijeljenjem sa Δt :

$$W(t + \Delta t) = \frac{\langle r(t + \Delta t) \rangle - \langle r(t) \rangle}{\Delta t}. \quad (2.83)$$

Jednačinom (2.16) u odjeljku 2.3.2. definisan je tenzor balk difuzije, a njegove komponente duž koordinantnih osa u MC kodu su date sa:

$$D_{ii} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2 \right), \quad i=x, y, z. \quad (2.84)$$

Pored balk vrijednosti transportnih koeficijenata potrebno je na određeni način formirati jednačine za samplovanje flaks transportnih koeficijenata (koji su definisani u odjeljcima 2.3.2. i 2.3.3.), jer su oni značajni u nekim aspektima modelovanja niskotemperaturskih plazmi. Flaks transportni koeficijenti su dati sa:

$$G^{(k)} = \int \vec{v} f^{(k-1)}(\vec{v}) d\vec{v}, \quad (2.85)$$

pri čemu članove $f_j(\vec{v})$ možemo dobiti množenjem razvoja funkcije raspodjele po gradijentima koncentracije (jednačina (2.5)) sa momentima radijusa i integraleći po prostoru. Tako dobijeni prvi član:

$$f^0(\vec{v}) = \frac{1}{N(t)} \int f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{r}, \quad (2.86)$$

služi za određivanje flaks brzine drifta, dok drugi član:

$$f^{(1)}(\vec{v}) = \frac{1}{N(t)} \int f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{r} - \frac{1}{N(t)} \int f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{r} \frac{1}{N(t)} \int \vec{r} f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{r} d\vec{v}, \quad (2.87)$$

služi za određivanje tenzora flaks difuzije.

Ako funkciju raspodjele napišemo u obliku:

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \sum_{k=1}^{N(t)} \delta(\vec{r} - \vec{r}_k(t)) \delta(\vec{v} - \vec{v}_k(t)), \quad (2.88)$$

gdje se sumiranje vrši po svim česticama roja, te uvrstimo izraze (2.86), (2.87) i (2.88) u (2.85) dobijamo da je:

$$G^{(1)} = \frac{1}{N(t)} \sum_{k=1}^{N(t)} \vec{v}_k(t) - \text{flaks brzinu drifta}, \quad (2.89)$$

$$G^{(2)} = \frac{\sum_{k=1}^{N(t)} |\vec{v}_k(t)\rangle \langle \vec{r}_k(t)|}{N(t)} - \frac{\sum_{j=1}^{N(t)} |\vec{v}_j(t)\rangle \sum_{k=1}^{N(t)} \langle \vec{r}_k(t)|}{N(t)} - \text{flaks difuzioni tenzor}. \quad (2.90)$$

2.7. ITERATIVNI POSTUPAK DOBIJANJA EFEKTIVNIH PRESJEKA-METODA ROJEVA

Jedan od osnovnih motivirajućih faktora razvoja transportne teorije rojeva naelektrisanih čestica kroz neutralan pozadinski gas je dobijanje efektivnih presjeka za rasijanje elektrona na atomima ili molekulima. Razvojem gasnih lasera i drugim mnogobrojnim primjenama neravnotežnih plazmi javila se potreba za poznavanjem što tačnijih vrijednosti efektivnih presjeka na niskim energijama elektrona, tj. u onim energijskim oblastima gdje metoda ukrštenih snopova nije davala dovoljno tačne apsolutne vrijednosti. Dobijanje presjeka metodom rojeva spada u „inverzne probleme“ u fizici, gdje se početni skup presjeka modifikuje do dobijanja zadovoljavajućeg stepena slaganja izmjerenih i izračunatih transportnih koeficijenata. Prvi pokušaji dobijanja presjeka na osnovu izmjerenih transportnih koeficijenata i transportne teorije potiču još iz 20-tih godina dvadesetog vijeka, kada su Ramsauer i Townsend na osnovu izmjerenih

vrijednosti brzine drifta u gasu u funkciji E/p , korištenjem aproksimativnog izraza za energijsku raspodjelu elektrona izračunali presjek za prenos impulsa. Sredinom dvadesetog vijeka Phelps (Phelps, 1968) i drugi saradnici razvijaju algoritme za rješavanje Boltzmannove jednačine i dobijanje transportnih koeficijenata i funkcija raspodjele elektrona i na višim vrijednostima električnog polja, kao i u slučaju prisustva neelastičnih sudara. Istovremeno, povećava se i tačnost izmjerenih vrijednosti brzine drifta i transverznog difuzionog koeficijenta u električnom polju u eksperimentima sa rojevima elektrona, što je dovelo do mogućnosti poređenja efektivnih presjeka dobijenih metodom rojeva i onih izmjerenih u eksperimentima sa ukrštenim snopovima. Ova metoda tzv. „swarm method“ se vremenom razvijala i postala je jedna od opšteprihvaćenih tehnika za dobijanje efektivnih presjeka.

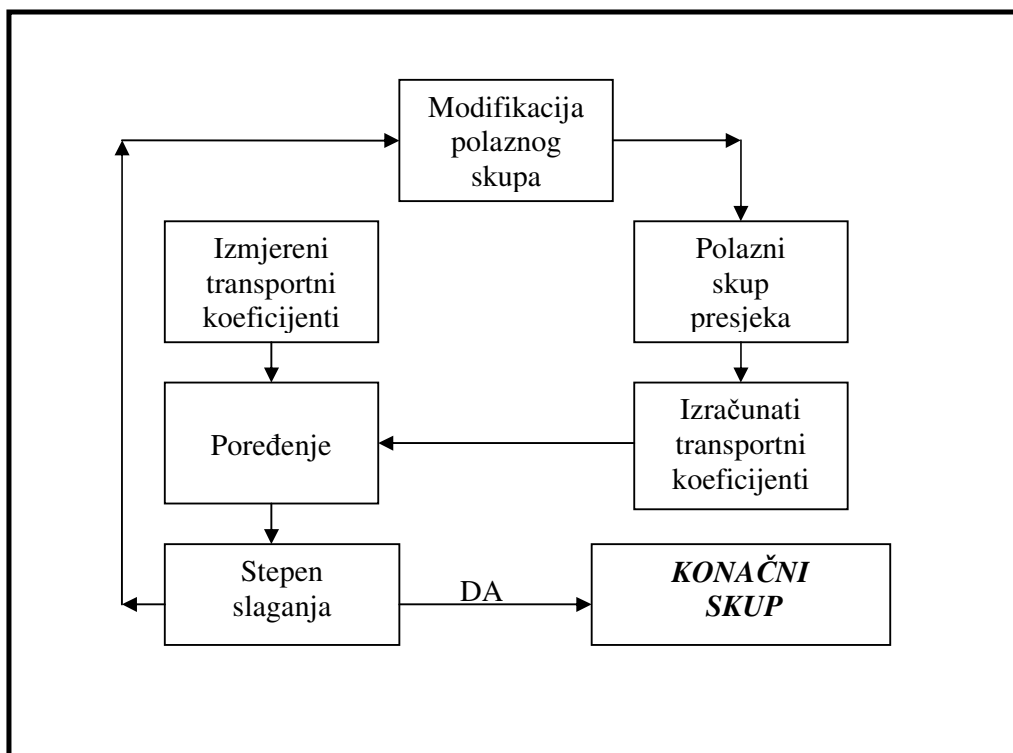
Postupak dobijanja efektivnih presjeka metodom rojeva je šematski prikazan na slici 2.7.1. Tehnika se sastoji iz nekoliko koraka koji se ponavljaju, sve dok skup efektivnih presjeka ne bude konzistentan sa skupom izmjerenih transportnih koeficijenata, tj. do momenta kada je stepen slaganja između izmjerenih i izračunatih koeficijenata zadovoljavajući.

Uspjeh same metode uveliko zavisi od polaznih podataka koje je potrebno obezbijediti, a to su:

- Polazni skup efektivnih presjeka. On bi trebalo da predstavlja kompilaciju što pouzdanijih podataka koji potiču iz različitih izvora, iz eksperimenata sa rojevima elektrona, ukrštenim snopovima ili teorijskih proračuna i da pokriva što širi energijski opseg.

- Skup transportnih koeficijenata preko veličina izmjerenih u eksperimentima sa rojevima. Što je veći broj transportnih koeficijenata to je veća jedinstvenost dobijenog skupa presjeka.

Zatim se pristupa proračunu transportnih koeficijenata, bilo rješavanjem Boltzmannove jednačine, ili korištenjem Monte Carlo simulacija i poređenju tako dobijenih vrijednosti sa izmjerenim. Stepenn njihovog slaganja predstavlja mjeru valjanosti polaznog skupa presjeka.



Slika 2.7.1. Šematski prikaz postupka dobijanja efektivnih presjeka metodom rojeva

Ukoliko odstupanja izračunatih transportnih koeficijenata u odnosu na izmjerene vrijednosti nisu zanemariva, pristupa se modifikaciji polaznog skupa sve dok se ne dobije što bolji stepen slaganja.

Uglavnom se, u procesu modifikacije polaznog skupa presjeka koriste brzina drifta i karakteristična energija, zbog visoke tačnosti sa kojom se mogu izmeriti, kao i koeficijent jonizacije i zahvata elektrona. Takođe su značajni i transportni koeficijenti elektrona u gasnim smjesama, koji mogu poslužiti za modifikacije neelastičnih presjeka na niskim srednjim energijama elektrona i značajno dovode do povećanja pouzdanosti dobijenog skupa presjeka

Krajnji rezultat metode rojeva je kompletan skup efektivnih presjeka, transportnih koeficijenata (brzina drifta, srednja energija, karakteristična energija, koeficijenti jonizacije i zahvata), brzinskih koeficijenata za pojedinačne procese, kako elastični tako i neelastične, te funkcija raspodjele elektrona po energijama, što je od velikog značaja imajući u vidu plazma modelovanje za koje ovaj skup predstavlja ulazne podatke. Kompletan skupovi presjeka (za razliku od nekompletnih i potpuno

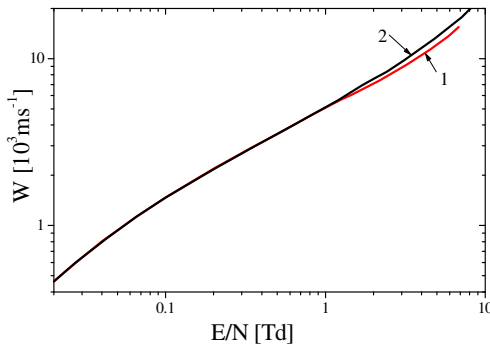
tačnih) mogu da zadovolje balans energije i impulsa čak i kada nisu svi tačni. Oni daju ukupno tačnu funkciju raspodjele jer su dobijeni fitovanjem na izmjerene transportne koeficijente.

Naime, ni jedna druga metoda ne daje ovako veliki skup podataka koji pokrivaju energijski opseg od najnižih do visokih srednjih energija elektrona, koji su dovoljni i za najdetaljnije modele niskotemperaturnih plazmi. Ovo je jedna od prednosti ove metode dobijanja efektivnih presjeka i transportnih koeficijenata, a druga je kompletnost dobijenog skupa presjeka, koja nam omogućava da dobijemo niz transportnih i brzinskih koeficijenata i u slučajevima kada nisu poznati svi procesi u posmatranom gasu.

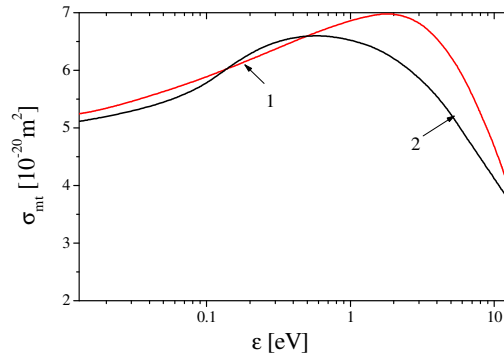
Metoda rojeva se susreće i sa određenim nedostacima, pri čemu je osnovni jedinstvenost dobijenog skupa presjeka. Naime, dobijeni skup presjeka iako dobro fituje izmjerene vrijednosti transportnih koeficijenata nije jedinstven. Postoji nekoliko načina kojima se pokušava prevazići ovaj problem. Metoda gasnih smješa značajno povećava pouzdanost dobijenog skupa presjeka a sastoji se u mjerenju transportnih koeficijenata u gasnoj smješi, pri čemu se dominantnom gasu čiji je presjek dobro poznat i pouzdan dodaje vrlo mala koncentracija gasa koji se ispituje (Engelhard i Phelps, 1964; Haddad i Crompton, 1980; Petrović i saradnici, 1988; 1995). Npr., u slučaju elektronegativnih gasova moguće je odrediti presjek za zahvat ako se dominantnom gasu doda vrlo mala koncentracija ispitivanog jer ona ne utiče na balans energije i impulsa kao ni na funkciju raspodjele elektrona po energijama. Drugi mogući način povećanja jedinstvenosti dobijenog skupa presjeka je uvođenje fiktivnih procesa (Thomas, 1969; Jacob i Mangano, 1976; Specht i ostali, 1980). Imajući u vidu osjetljivost jonizacionog koeficijenta na presjek za elektronske ekscitacije i činjenicu da se sam koeficijent kao i presjek za jonizaciju mogu mjeriti sa vrlo malom greškom, moguće je dosta pouzdano, poznavajući izmjerene vrijednosti jonizacionog koeficijenta, odrediti efektivni ekscitacioni presjek.

Pored jedinstvenosti skupa presjeka dobijenog metodom rojeva postoji još nekoliko nedostataka ove metode. Tačnost, odnosno pouzdanost dobijenog skupa zavisi od tačnosti sa kojom su izmjereni transportni koeficijenti. Ovaj nedostatak se može jasno vidjeti na slikama 2.7.2. i 2.7.3. (koje su preuzete iz Petrović, 1985).

Na slici 2.7.2. je prikazana izmjerena vrijednost brzine drifta u H_e sa tačnošću 5%-linija 1 i tačnošću 1%-linija 2, dok su na slici 2.7.3. prikazani odgovarajući presjeci za prenos impulsa dobijeni metodom rojeva na osnovu tih izmjerenih vrijednosti brzine drifta. Očigledno je kako vrlo male razlike u izmjerenim vrijednostima, u ovom slučaju brzine drifta, mogu dovesti do bitno različitih vrijednosti presjeka za prenos impulsa.



Slika 2.7.2. Brzina drifta u H_e izmjerena sa tačnošću od 5% i 1% (linije 1 i 2, respektivno), (slika je preuzeta iz Petrović, 1985)



Slika 2.7.3. Presjeci za prenos impulsa u H_e dobijeni metodom rojeva na osnovu izmjerenih vrijednosti brzine drita, (slika je preuzeta iz Petrović, 1985)

Dalje, uspjeh same metode zavisi i od tačnosti sa kojom su izračunati transportni koeficijenti. Poznato je da metoda dvočlane aproksimacije ne daje dovoljno tačne vrijednosti transportnih koeficijenata (o čemu je bilo riječi u odjeljku 2.4.2.) te je poželjno u procesu modifikacije polaznih presjeka koristiti neku tačniju metodu, kao što su MC simulacije ili metode za rješavanje Boltzmannove jednačine koje u razvoju funkcije raspodjele zadržavaju i više članove reda, tzv. „multi term“ teorije. Pošto se radi o dugotrajnom ponavljajućem postupku, korišćenje kodova koji rješavaju BE u dvočlanoj aproksimaciji je donekle opravdano, posebno na samom početku grubog podešavanja presjeka, imajući u vidu brzinu i jednostavnost dobijanja velikog broja transportnih koeficijenata, za razliku od MC simulacija koje su dugotrajne i zahtjevaju određene računarske resurse.

Nemogućnost dobijanja fine strukture presjeka u oblasti visokih srednjih energija zbog velike energijske širine funkcije raspodjele elektrona je takođe jedan od nedostataka metode rojeva. Sa druge strane, u slučaju niskih srednjih energija elektrona

gdje je funkcija raspodjele jako uska, ovom metodom se mogu dobiti dovoljno tačne vrijednosti pragova pojedinih procesa.

Uprkos svih navedenih nedostataka sve dileme vezane za tačnost rezultata koje daje tehnika rojeva riješene su u njenu korist, te je zbog toga ona primijenjena za dobijanje rezultata prikazanih u ovoj disertaciji.

3. TRANSPORT ELEKTRONA U AZOT SUBOKSIDU (N_2O)

3.1. UVOD

Polazeći od rezultata prikazanih u Magistarskoj tezi S. Dupljanin (Dupljanin, 2008) koja je posvećena dobijanju efektivnih presjeka za e^-/N_2O interakciju metodom rojeva i proračunu transportnih i brzinskih koeficijenata u uslovima djelovanja vremenski konstantnog (DC) električnog polja (Dupljanin i ostali, 2010), nastavili smo istraživanja vezana za ovaj gas, proširujući ih na DC ukrštena električna i magnetna polja kao i razmatranje transporta roja elektrona pod dejstvom vremenski promjenljivih (RF) ukrštenih električnih i magnetnih polja ortogonalne konfiguracije (Šašić i ostali, 2009). Kao ulazni skup podataka u svim simulacijama korišćen je kompletan skup presjeka za rasijanje elektrona na molekuli N_2O Dupljanin i saradnika (Dupljanin i ostali, 2010).

Azot suboksid ima veliku primjenu u hemiji, medicini (kao anestetik) i tehnologiji, prvenstveno za dopiranje atoma azota (N) u oksidne materijale (Matsui i ostali, 2004) i nanošenje dijamantu sličnih karbonskih filmova (Kim i ostali, 2004). U oba slučaja N_2O se koristi kao RF izvor plazme za proizvodnju određenih vrsta radikala koji dovode do poboljšanja efikasnosti samih procesa. Ovaj gas ima značajan uticaj na okolinu jer izaziva uništenje ozonskog sloja kada se nađe u višim slojevima atmosfere, te je poslije ugljen dioksida i metana, treći gas po svom uticaju na globalno zagrijavanje kao i na apsorpciju infracrvenog zračenja u atmosferi (Crutzen 1971; Graedel i Crutzen 1993). Predložen je kao potencijalna zamjena za gasove sa mnogo većim GWP (*Global Warming Potencial*) kao što je SF_6 koji se još uvijek koristi u elektronskoj industriji kao gasni izolator. Iako je koncentracija N_2O u atmosferi mnogo manja od koncentracije ugljen dioksida i metana, postoje brojni pokušaji dekompozicije ovog gasa, zajedno sa drugim azotovim oksidima (NO_x), pomoću električnih pražnjenja, što bi dovelo do smanjenja štete i zagađenja koje izazivaju (Mizuno i ostali, 1995; Masuda i Nakao 1990; Mok i ostali, 2003).

I pored velikog značaja ovog gasa evidentan je nedostatak pouzdanih i kompletnih skupova efektivnih presjeka i transportnih i brzinskih koeficijenata, čak i u

slučaju konstantnog električnog polja, dok podataka o kinetici elektrona u prisustvu magnetnog polja, kao i u slučaju vremenski promjenljivih električnih i magnetnih polja, nema. Upravo ovi podaci predstavljaju kritičnu tačku za modelovanje procesa koji vode ka daljnjoj optimizaciji primjene nisko temperaturnih RF plazmi. Usljed nedostatka dostupnih transportnih podataka u RF poljima, kao i teškoće uključivanja ovih koeficijenata u fluidne i hibridne kodove usljed njihove kompleksnosti, jedina opcija modelovanja RF plazmi je bila ekstrapolacija dostupnih podataka dobijenih za DC električna polja. Kod niskih frekvencija polja uglavnom je korišćena tzv. kvazistatička aproksimacija dok je aproksimacija efektivnog polja korišćena u slučaju visokih frekvencija, pri čemu obe aproksimacije u opsegu frekvencija koje se odnose na praktičnu primjenu nisu dobre. Isto tako, u većini ranijih radova koji se odnose na plazma modelovanje, efekat magnetnog polja nije uzet u potpunosti što je u suprotnosti sa modernim pokušajima rigoroznih plazma modela, gdje magnetno polje ponekad igra veoma važnu ulogu.

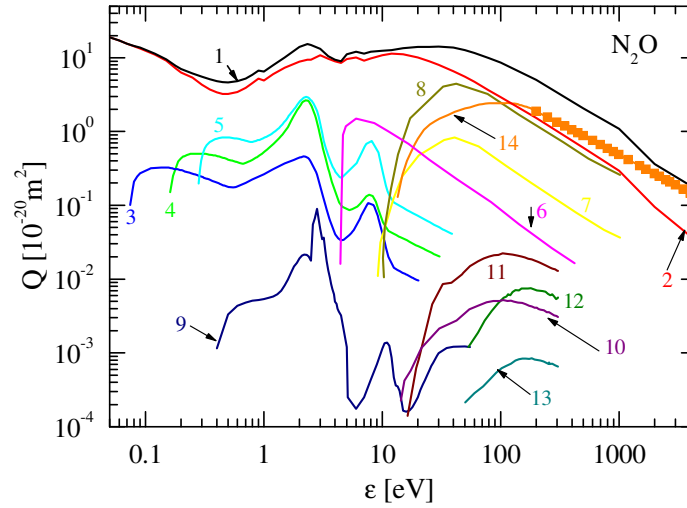
Imajući u vidu veliku primjenu ovog gasa i potrebu za podacima o kinetici elektrona pod djelovanjem i magnetnog polja, kao i RF električnih i magnetnih polja, proširili smo oblast istraživanja i na ove slučajeve sa ciljem da se provjeri koji kinetički fenomeni se javljaju pri elektronskom transportu u N_2O i kako su oni povezani sa efektivnim presjecima.

3.2. SKUP PRESJEKA ZA RASIJANJE ELEKTRONA NA MOLEKULI N_2O

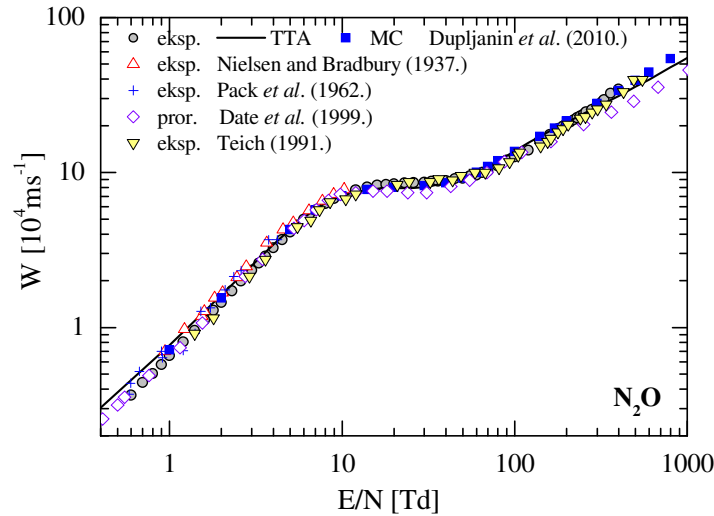
Kao što je u uvodnom dijelu već rečeno, dio rezultata ove disertacije, prikazanih u ovom poglavlju, je nastavak istraživanja vezanih za transport elektrona u N_2O u DC električnom polju koji je bio predmet istraživanja magistarske teze S. Dupljanin (Dupljanin, 2008). U ovom odjeljku je dat sažet pregled najvažnijih dobijenih rezultata.

Na slici 3.1. je prikazan kompletan skup efektivnih presjeka za e^-/N_2O interakciju dobijen metodom rojeva, za čiju su reprodukciju korišćeni rezultati mjerenja brzine drifta i efektivnog koeficijenta jonizacije elektrona u N_2O i N_2O/N_2 smjesama de Urquija i saradnika (Dupljanin i ostali, 2010), a koji je korišćen kao ulazni podatak za naše proračune prikazane u ovom radu. Sastoji se od četrnaest presjeka: totalni i

elastični presjek za prenos impulsa (1, 2), presjeci za vibracione ekscitacije (3, 4, 5), elektronske ekscitacije (6, 7, 8), disocijativni zahvat (9), disocijativne elektronske ekscitacije (10-13) i presjek za jonizaciju (14).



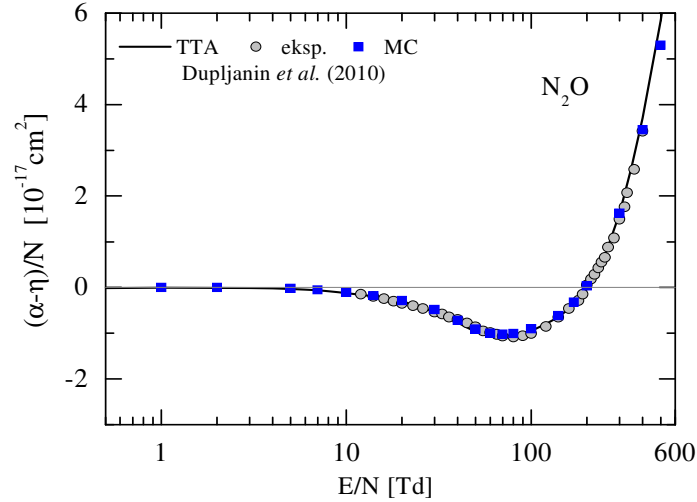
Slika 3.1. *Kompletan skup presjeka za e^-/N_2O interakciju dobijen metodom rojeva: 1-totalni presjek za prenos impulsa; 2-elastični presjek za prenos impulsa; 3, 4 i 5-vibracione ekscitacije; 6, 7 i 8-elektronske ekscitacije; 9-disocijativni zahvat; 10, 11, 12 i 13- disocijativne elektronske ekscitacije; 14-jonizacija (Dupljanin i ostali, 2010).*



Slika 3.2. *Brzina drifta elektrona u N_2O . Poređenje izmjerenih i izračunatih vrijednosti.*

Na slici 3.2. je prikazana brzina drifta elektrona u N_2O u funkciji E/N . Sivim krugovima su prikazane izmjerene vrijednosti de Urquija i saradnika i kao što se vidi,

slaganje sa MC vrijednostima (plavi kvadrati) dobijene skupom presjeka za e^-/N_2O interakciju (slika 3.1.) je zadovoljavajuće na cijelom razmatranom opsegu E/N . Na slici je prikazan i TTA rezultat dobijen kodom Elendif kao i ostale izmjerene vrijednosti koje smo našli u literaturi.



Slika 3.3. Efektivni koeficijent jonizacije. Poređenje izmjerenih i izračunatih vrijednosti.

Na slici 3.3. je prikazan efektivni koeficijent jonizacije u funkciji E/N . Plavim kvadratima su prikazani rezultati MC proračuna dobijeni sa našim presjecima za N_2O (slika 3.1) i kao što se vidi slaganje sa izmjerenim vrijednostima de Urquija i saradnika je zadovoljavajuće na cijelom opsegu E/N . Zaključujemo da je kompletan skup presjeka za e^-/N_2O interakciju u mogućnosti da reprodukuje i izmjerene vrijednosti brzine drifta i efektivnog koeficijenta jonizacije u N_2O/N_2 smješama.

3.3. TRANSPORTNE KARAKTERISTIKE ELEKTRONA U USLOVIMA DJELOVANJA DC UKRŠTENIH ELEKTRIČNIH I MAGNETNIH POLJA

U ovom odjeljku su predstavljeni rezultati MC proračuna transportnih i brzinskih koeficijenata roja elektrona koji se kreće u gasu N_2O pod dejstvom DC ukrštenih električnih i magnetnih polja ortogonalne konfiguracije. Roj srednje energije 1eV je puštan iz koordinantnog početka sistema koji je orijentisan tako da električno polje ima pravac x -ose, magnetno pravac z -ose, dok je u y -pravcu ukršteno električno i magnetno polje, pretpostavljajući Maxwelllovu raspodjelu po brzinama. Početni broj

elektrona je variran od $2 \cdot 10^5$ do $5 \cdot 10^5$, osim u slučaju $B/N=2000$ Hx, gdje je zbog otežane relaksacije roja uzeto $1 \cdot 10^5$ početnih elektrona. Proračuni su urađeni za pet različitih vrijednosti redukovano magnetnog polja ($B/N=100$ Hx, 200 Hx, 500 Hx, 1000 Hx i 2000 Hx, $1\text{Hx}=10^{-27} \text{ Tm}^3$), pri čemu smo za svaku od ovih vrijednosti varirali vrijednosti redukovano električnog polja (E/N) u opsegu od 50 Td do 2000 Td. Na svim slikama je prikazan i rezultat u slučaju odsustva magnetnog polja.

3.3.1. Teorijski opis kretanja elektrona u dc električnim i magnetnim poljima

Kretanje roja naelektrisanih čestica (u našem slučaju elektrona) u spoljašnjem elektromagnetnom polju, zanemarujući mikroskopsko polje koje potiče od samih čestica (što je opravdano imajući u vidu definiciju roja elektrona datu u poglavlju 2.) je opisano jednačinom:

$$m\dot{\vec{v}} = q\vec{E}(\vec{r},t) + q\vec{v} \times \vec{B}(\vec{r},t) + \vec{\Phi}(\vec{r},\vec{v},t), \quad (3.1)$$

gdje su m i q masa i naelektrisanje elektrona, dok su $\vec{E}(\vec{r},t)$ i $\vec{B}(\vec{r},t)$ spoljašnje električno i magnetno polje a $\vec{\Phi}(\vec{r},\vec{v},t)$ predstavlja sumu svih sila neelektromagnetne prirode, pri čemu su zanemareni relativistički efekti i zakočna sila zračenja. Nekom od numeričkih tehnika moguće je riješiti gornju jednačinu i dobiti trajektorije čestica.

Ako posmatramo kretanje roja elektrona pod dejstvom stacionarnog homogenog magnetnog polja jednačina (3.1) postaje:

$$m\dot{\vec{v}} = q\vec{v} \times \vec{B}. \quad (3.2)$$

Ako prethodnu jednačinu pomnožimo skalarno vektorom brzine čestice, dobijamo da je:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} mv^2 \right) = 0, \quad (3.3)$$

odakle zaključujemo da stacionarno i homogeno magnetno polje ne mijenja intenzitet brzine čestice a samim tim ni kinetičku energiju. Rješavanjem jednačine (3.2) dobija se da je putanja čestice zavojnica, po kojoj čestica kruži oko linije sile magnetnog polja frekvencijom $\omega_c = \frac{qB}{m}$, tj $\nu_c = \frac{qB}{2\pi m}$, koja se naziva ciklotronska frekvencija a samo kretanje čestice se naziva ciklotronska rotacija. Korak zavojnice ostaje konstantan dok

je njen radijus dat izrazom $r_L = \frac{v_{\perp} m}{qB}$, tzv. Larmorov radijus koji u ovom razmatranom slučaju ostaje konstantan ($v_{\perp}$ je komponenta brzine čestice normalna na pravac magnetnog polja). Ukoliko je magnetno polje nehomogeno putanja po kojoj se čestice kreću više nije zavojnica konstantnog koraka i radijusa, niti čestice rotiraju oko samo jedne magnetne linije sile.

Kretanje roja elektrona pod dejstvom samo električnog polja se opisuje tzv. ukupnom kolizionom frekvencijom ν_k koja u sebi sadrži frekvencije za sve moguće sudarne procese između elektrona i atoma (ili molekula) razmatranog gasa. Kako broj sudara zavisi od energije elektrona, njihovo kretanje je određeno ovim sudarima tj. jačinom spoljašnjeg električnog polja koje im daje energiju i ubrzava ih duž srednjeg slobodnog puta.

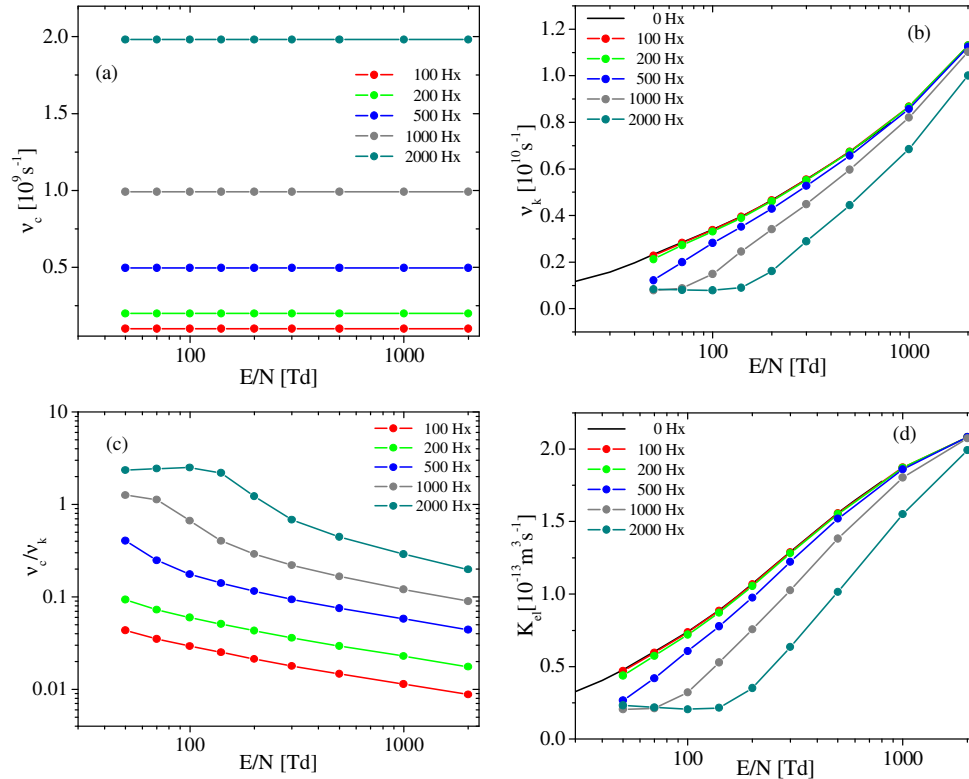
S obzirom na gornje razmatranje jasno je da su ciklotronska (ν_c) i koliziona (ν_k) frekvencija bitni parametri za opis transporta roja naelektrisanih čestica pod dejstvom spoljašnjeg, vremenski konstantnog, elektromagnetnog polja. Ako je odnos $\nu_c/\nu_k \ll 1$ režim kretanja naelektrisanih čestica je sudarno dominantan i u tom slučaju elektroni ne stižu da opišu svoje putanje usljed čestih sudara sa konstituentima gasa, dok za $\nu_c/\nu_k \gg 1$ njihovo kretanje je određeno jačinom spoljašnjeg magnetnog polja zahvaljujući kojem elektroni, u vremenu između sudara, uspijevaju da u potpunosti opišu svoje putanje.

3.3.2. Ciklotronska i ukupna koliziona frekvencija

Na slici 3.4. (a) je prikazana ciklotronska frekvencija (ν_c) u funkciji E/N za pet vrijednosti B/N i vidimo da ona zavisi samo od jačine spoljašnjeg magnetnog polja i to tako da raste sa porastom B/N .

Na slici 3.4. (b) je prikazana ukupna koliziona frekvencija (ν_k) koja predstavlja sumu kolizionih frekvencija svih procesa (elastičnih i neelastičnih). Prvo što uočavamo je da niske vrijednosti B/N (100 Hx i 200 Hx) gotovo da ne utiču na ν_k , dok se povećanjem B/N ona počinje smanjivati kako B/N raste. Povećanjem B/N roj elektrona sve više skreće sa pravca spoljašnjeg električnog polja čime se smanjuje mogućnost dobijanja energije, drugim riječima dolazi do smanjenja srednje energije roja pa samim

tim i ukupne kolizione frekvencije. Sa druge strane v_k se može povezati i sa brzinskim koeficijentima za elastične procese jer oni daju najveći doprinos ukupnoj kolizijskoj frekvenciji. Poređenjem vrijednosti v_k prikazanih na slici 3.4. (b) za različite vrijednosti B/N i vrijednosti brzinskih koeficijenata za elastične procese prikazanih na slici 3.4. (d) za iste vrijednosti B/N (u istim tačkama E/N) vidimo da v_k prati ponašanje ovih koeficijenata.

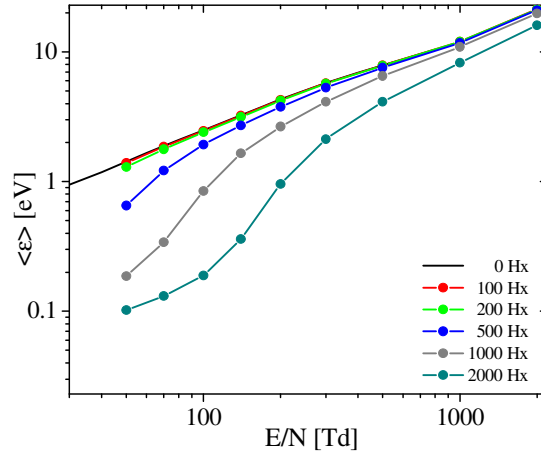


Slika 3.4. (a) Ciklotronska frekvencija, (b) Ukupna kolizijska frekvencija, (c) Odnos ciklotronske i ukupne kolizijske frekvencije, (d) Brzinski koeficijent za elastične sudarne procese u funkciji redukovano električnog polja za više različitih vrijednosti redukovano magnetnog polja.

Na slici 3.4. (c) je prikazan odnos ciklotronske i ukupne kolizijske frekvencije. Vidimo da je ovaj odnos manji od jedan za sve vrijednosti B/N , osim u slučaju najveće vrijednosti od 2000 Hx (i to za najmanje razmatrane vrijednosti E/N koje nisu dovoljne za porast energije roja) kada je on nešto malo iznad jedan, te možemo reći da se u većini slučajeva nalazimo u sudarno dominantnom režimu, pri čemu je transport elektrona određen spoljašnjim električnim poljem.

3.3.3. Srednja energija

Na slici 3.5. je prikazana srednja energija roja elektrona u funkciji E/N , za više različitih vrijednosti B/N .



Slika 3.5. Srednja energija u funkciji E/N za pet vrijednosti B/N , kao i u slučaju $B/N=0Hx$.

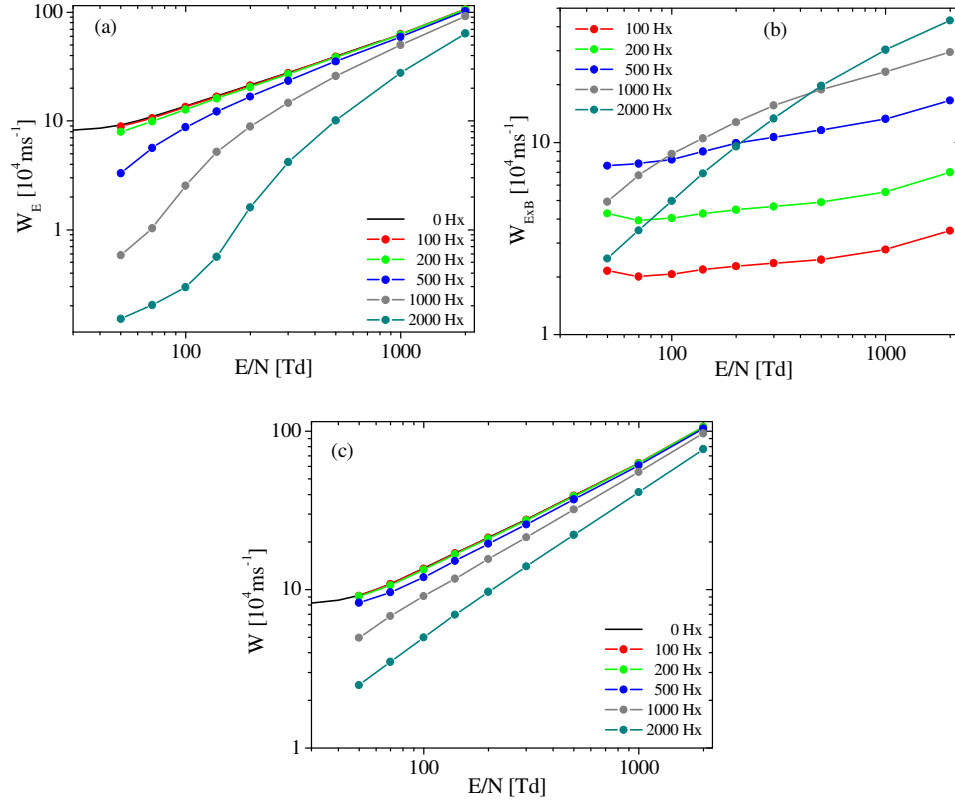
Vidimo da do hlađenja roja, tj. smanjenja njegove srednje energije, dolazi pri većim vrijednostima B/N (>200 Hx), pri čemu je smanjenje veće pri nižim vrijednostima E/N . Kako E/N raste smanjenje srednje energije sa porastom B/N je manje jer jako električno polje daje dovoljno energije roju prije nego što ga jako magnetno polje skrene sa pravca kretanja. Vidimo da pri 100 Hx i 200 Hx srednja energija ostaje gotovo nepromijenjena.

3.3.4. Brzina drifta

Prilikom transporta roja elektrona u spoljašnjem ukrštenom električnom i magnetnom polju postoje dvije komponente brzine drifta: jedna u pravcu električnog polja ($W_{\vec{E}}$) i druga u pravcu normalnom na ravan u kojem se nalaze električno i magnetno polje ($W_{\vec{E} \times \vec{B}}$).

Na slici 3.6. (a) je prikazana brzina drifta elektrona u pravcu električnog polja. Vidimo da pri 100 Hx i 200 Hx brzina drifta ima gotovo iste vrijednosti (za isto E/N) kao za $B/N=0$ Hx. Daljnjim povećanjem jačine magnetnog polja sve više elektrona skreće sa pravca električnog polja što za posljedicu ima smanjenje srednje energije roja,

pa samim tim i smanjenje komponente brzine drifta u tom pravcu. Brzina drifta, vidimo da raste sa porastom E/N za sve vrijednosti B/N i ne pokazuje energijsku strukturu presjeka.



Slika 3.6. (a) Brzina drifta u pravcu električnog polja, (b) Brzina drifta u pravcu normalnom na ravan u kojoj leže vektori električnog i magnetnog polja, (c) Ukupna brzina drifta.

Na slici 3.6. (b) je prikazana brzina drifta u pravcu normalnom na vektore električnog i magnetnog polja ($W_{\vec{E} \times \vec{B}}$). Suprotno komponenti $W_{\vec{E}}$, ovdje vidimo da sa porastom magnetnog polja (za 100 Hx, 200 Hx i 500 Hx) brzina drifta raste (za istu vrijednost E/N). Za $B/N=1000$ Hx vrijednosti brzine drifta u tačkama do 100 Td su manje od onih dobijenih za 500 Hx dok za E/N veće od 100 Td ona ponovo raste. Ovaj efekat je još izraženiji na najvišoj vrijednosti $B/N=2000$ Hx gdje je prelomna tačka pomjerena na $E/N=500$ Td.

Na slici 3.6. (c) je prikazana ukupna brzina drifta (W) tj. rezultanta komponenti $W_{\vec{E}}$ i $W_{\vec{E} \times \vec{B}}$ ($W = \sqrt{W_{\vec{E}}^2 + W_{\vec{E} \times \vec{B}}^2}$). Vidimo da se W ponaša slično kao komponenta

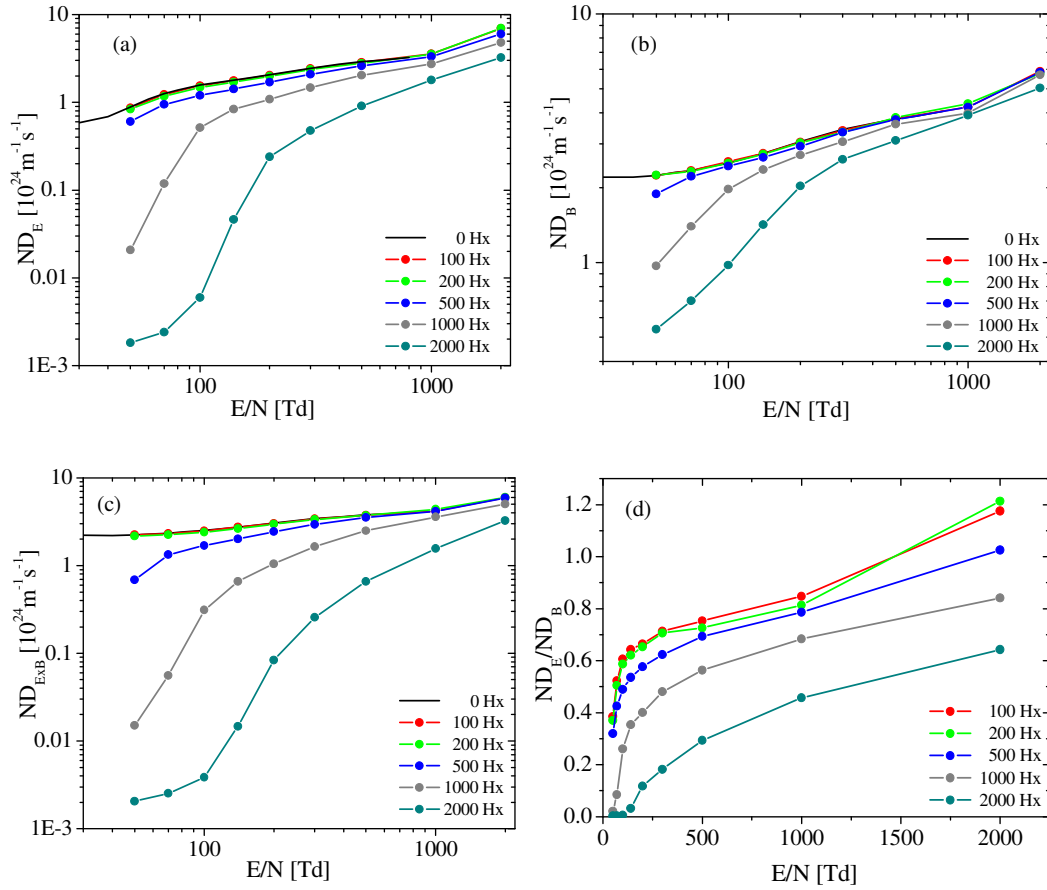
brzine u pravcu električnog polja samo je smanjenje sa porastom B/N manje zbog uticaja komponente $W_{\vec{E} \times \vec{B}}$.

3.3.5. Difuzioni koeficijenti

Na slici 3.7. (a) je prikazan difuzioni koeficijent u pravcu električnog polja u funkciji E/N, za pet vrijednosti B/N, kao i u slučaju odsustva magnetnog polja kada su koeficijenti u pravcima $\vec{B}$ i $\vec{E} \times \vec{B}$ jednaki i predstavljaju transversalni difuzioni koeficijent. Vidimo da niske vrijednosti B/N (100 Hx i 200 Hx) ne utiču na difuziju u pravcu $\vec{E}$ koja počinje da se smanjuje tek pri B/N=500 Hx, a zatim sve više kako B/N raste. Ako pogledamo zavisnost ovog koeficijenta od električnog polja, vidimo da za dvije najviše razmatrane vrijednosti B/N (1000 Hx i 2000 Hx) difuzioni koeficijent u $\vec{E}$ pravcu jako brzo raste sa porastom E/N (do 200 Td) a zatim ulazi u oblast nešto sporijeg rasta. Sa slike presjeka za e^-/N_2O interakciju (slika 3.1.) vidimo da oblast brzog rasta difuzionog koeficijenta odgovara oblasti srednjih energija elektrona za koje vibracioni procesi i elektronski zahvat imaju karakter naglog smanjivanja što olakšava difuziju. Porastom E/N ulazimo u oblast srednjih energija u kojima se javljaju novi neelastični procesi elektronskih ekscitacija i jonizacije koji ometaju difuziju te dolazi do nešto sporijeg rasta difuzionog koeficijenta.

Na sličan način se ponašaju i difuzioni koeficijenti u pravcu magnetnog polja prikazani na slici 3.7. (b) kao i u pravcu normalnom na pravac električnog i magnetnog polja (slika 3.7. (c)).

Na slici 3.7. (d) je prikazan odnos difuzionih koeficijenata u pravcu električnog i magnetnog polja. Vidimo da je ovaj odnos blizak jedinici na nižim vrijednostima B/N (100 Hx i 200 Hx) a višim vrijednostima E/N (500 Td i više), dok sa porastom B/N njihov odnos se smanjuje. Možemo zaključiti da je difuzija elektrona u N_2O blago anizotropna i da je anizotropija izraženija što je intenzitet redukovanog magnetnog polja veći.



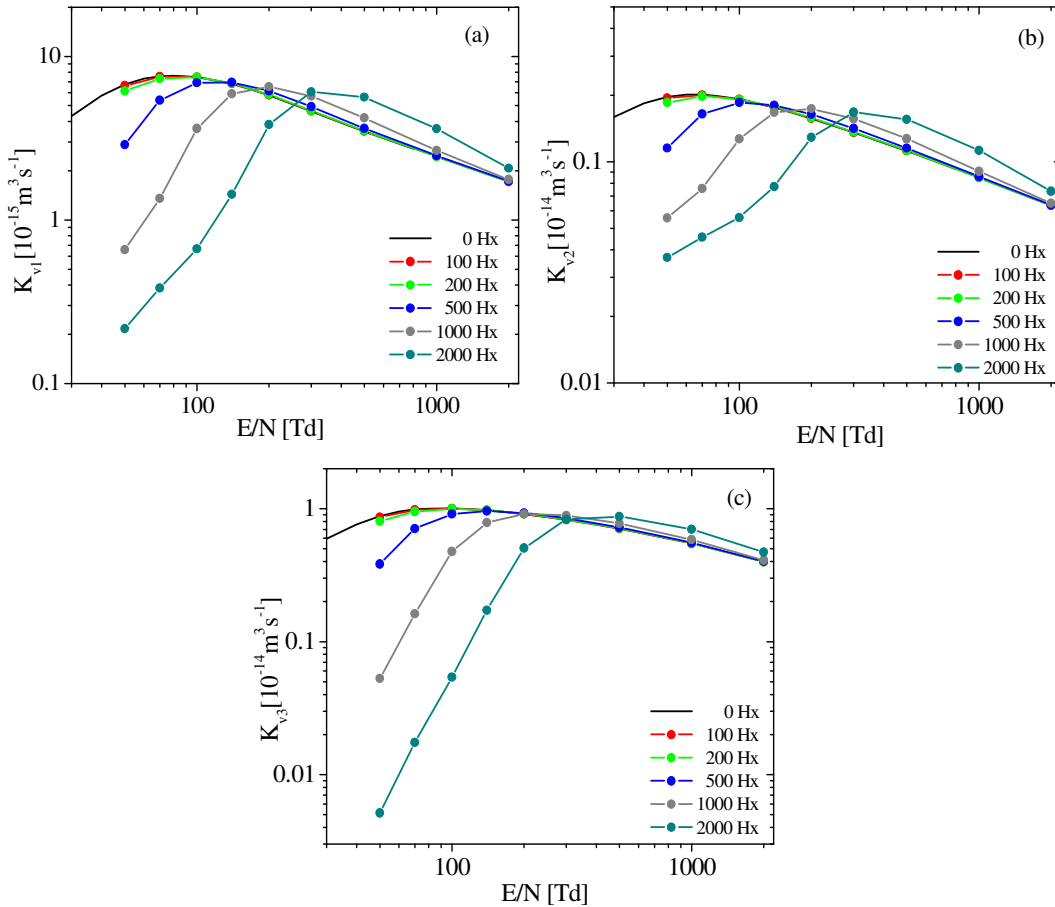
Slika 3.7. Difuzioni koeficijent u funkciji E/N za pet vrijednosti B/N : (a) u pravcu električnog polja, (b) u pravcu magnetnog polja, (c) u pravcu normalnom na pravac električnog i magnetnog polja. (d) Odnos difuzionih koeficijenata u pravcu električnog i magnetnog polja.

3.3.6. Brzinski koeficijenti za neelastične procese

Na slici 3.8. (a, b i c) su prikazani brzinski koeficijenti za procese vibracionih ekscitacija (linije 3, 4 i 5 na slici 3.1.) u funkciji E/N , za različite vrijednosti B/N . Sva tri koeficijenta, kao što se vidi na slikama, ponašaju se na sličan način.

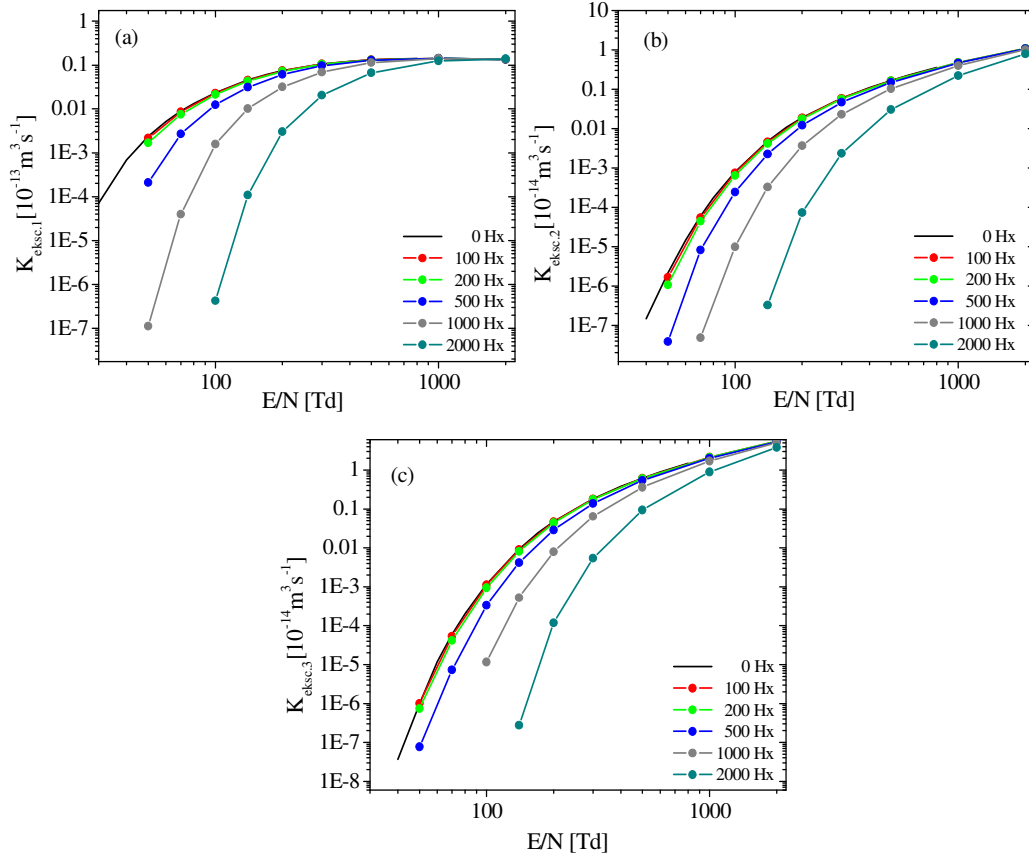
Naime, pri niskim vrijednostima E/N (do 140 Td), u sva tri slučaja vibracionih procesa, brzinski koeficijenti se, u istim tačkama E/N , smanjuju sa porastom B/N . Kao što smo već rekli, porast magnetnog polja dovodi do hlađenja roja tj. smanjenja njegove srednje energije, što za posljedicu ima i smanjenje brzinskih koeficijenata jer slabo

električno polje ne može da nadoknadi gubitak energije. Pri većim vrijednostima E/N ($E/N > 140$ Td) situacija je obrnuta. Kako električno polje raste, povećava se i srednja energija, te je sve veći broj elektrona u mogućnosti da savlada energijske barijere ovih procesa, tako da brzinski koeficijenti, iako se magnetno polje povećava, počinju da rastu.



Slika 3.8. Brzinski koeficijenti za vibracione procese energijskih pragova: (a) $\epsilon_{th} = 0.1593 \text{ eV}$, (b) $\epsilon_{th} = 0.073 \text{ eV}$, (c) $\epsilon_{th} = 0.2757 \text{ eV}$, u funkcij E/N za različite vrijednosti B/N .

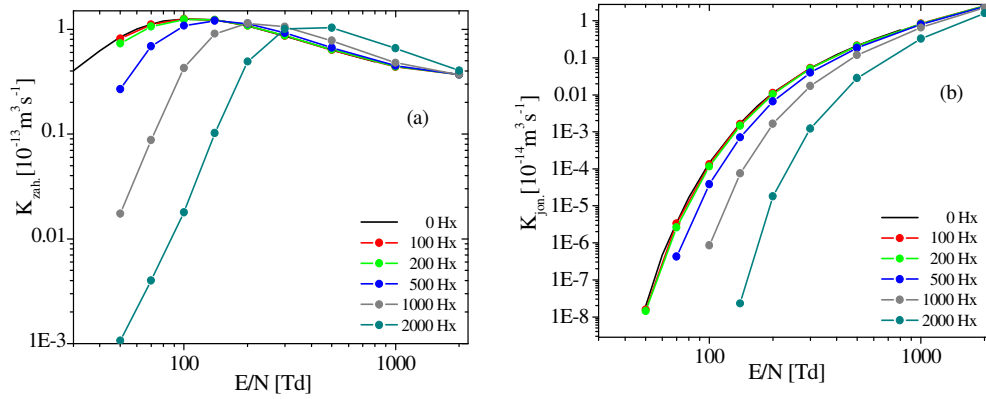
Na slici 3.9. (a, b i c) su prikazani brzinski koeficijenti za procese elektronskih ekscitacija (linije 6, 7 i 8 na slici 3.1.). Kao što vidimo na slikama, sva tri koeficijenta se u istim tačkama E/N smanjuju sa porastom B/N , prvenstveno u oblasti nižih vrijednosti električnog polja koje nije dovoljno jako da nadoknadi gubitke energije usljed porasta magnetnog polja. Pri višim vrijednostima E/N smanjenje ovih koeficijenata je manje izraženo, dok na najvišim magnetno polje gotovo da nema uticaja.



Slika 3.9. Brzinski koeficijenti za procese elektronskih ekscitacija energijskih pragova: (a) $\epsilon_{th} = 4 \text{ eV}$, (b) $\epsilon_{th} = 8.5 \text{ eV}$, (c) $\epsilon_{th} = 9.6 \text{ eV}$, u funkcij E/N za pet vrijednosti B/N .

Na slici 3.10. (a) je prikazan brzinski koeficijent za proces elektronskog zahvata. Ako posmatramo uticaj magnetnog polja na ovaj koeficijent vidimo da postoje dvije oblasti, oblast niskih vrijednosti E/N (do 140 Td) u kojoj se vrijednosti ovog koeficijenta (za isto E/N) smanjuju kako B/N raste i oblast viših vrijednosti E/N (većih od 140 Td) u kojoj njegove vrijednosti rastu (za isto E/N) kako B/N raste. U prvoj oblasti električno polje nije dovoljno da nadoknadi gubitak energije usljed porasta magnetnog polja dok u drugoj oblasti i pored jakog magnetnog polja koje je ohladilo roj elektrona električno polje je dovoljno jako da nadoknadi ovaj gubitak. Ako posmatramo ovaj koeficijent za istu vrijednost B/N vidimo da u svih pet slučajeva B/N on raste sa porastom E/N do maksimuma i zatim opada kako E/N raste. Ova prelomna tačka se pomjera ka višim vrijednostima E/N kako magnetno polje raste, jer što je veće magnetno polje smanjenje srednje energije roja je veće pa je potrebno i veće električno polje da nadoknadi taj gubitak.

Na slici 3.10. (b) je prikazan brzinski koeficijent za proces jonizacije u funkciji E/N . Vidimo da se vrijednosti ovog koeficijenta smanjuju (za isto E/N) kako B/N raste, kao i da oblik funkcije brzinskog koeficijenta odgovara energijskoj zavisnosti presjeka za jonizaciju (slika 3.1).

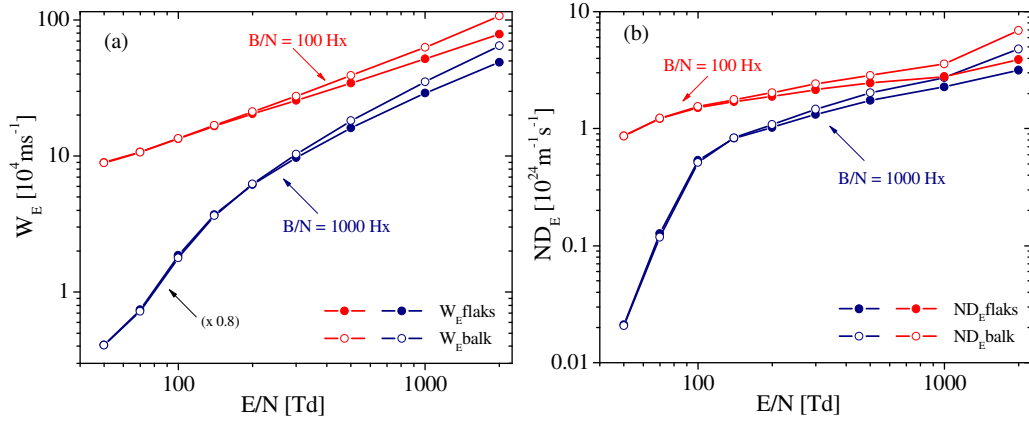


Slika 3.10. Brzinski koeficijenti za procese (a) disocijativnog zahvata i (b) jonizacije, u funkciji E/N za pet vrijednosti B/N .

3.3.7. Uticaj nekonzervativne prirode procesa na transportne koeficijente

Svi transportni koeficijenti prikazani na prethodnim slikama su balk transportni koeficijenti. Imajući u vidu definiciju balk i flaks vrijednosti, datu u poglavlju 2. (odjeljak 2.3.2.), na primjeru brzine drifta i difuzionog koeficijenta u pravcu električnog polja ćemo vidjeti da li i kako jonizacija i zahvat kao nekonzervativni procesi utiču na njihove vrijednosti u uslovima djelovanja DC $\vec{E} \times \vec{B}$ polja.

Na slici 3.11. (a) i (b) su prikazane balk i flaks komponente brzine drifta i difuzionog koeficijenta u pravcu električnog polja, respektivno, za dvije vrijednosti redukovano magnetnog polja od 100 Hx i 1000 Hx. Kao što vidimo na slikama, u oba slučaja razlike postoje tek pri $E/N > 300$ Td, kada su balk vrijednosti ovih koeficijenata veće od flaks vrijednosti, jer tim vrijednostima električnog polja, iako je prisutno i magnetno polje, odgovaraju takve srednje energije elektrona koje su dovoljne za brojne jonizacione procese. Vidimo da na nižim vrijednostima E/N (do 300 Td) gotovo da nema razlike između balk i flaks komponenti u oba posmatrana slučaja.



Slika 3.11. Balk i flaks komponente (a) brzine drifta, (b) difuzionog koeficijenta u pravcu električnog polja u funkciji E/N , za dvije vrijednosti B/N .

3.4. TRANSPORTNI KOEFICIJENTI ELEKTRONA U RF ELEKTRIČNOM I MAGNETNOM POLJU

U ovom odjeljku su prikazani transportni koeficijenti elektrona u uslovima djelovanja vremenski zavisnih, ukrštenih električnih i magnetnih polja ortogonalne konfiguracije (Šašić i ostali, 2009). Razmatranje elektronskog transporta u RF poljima je od velikog značaja, imajući u vidu primjenu ovih koeficijenata kao ulaznih podataka u modelovanju RF pražnjenja, kao i veliku primjenu ovih plazmi u poluprovodničkoj industriji, o čemu je već bilo riječi u uvodnom dijelu.

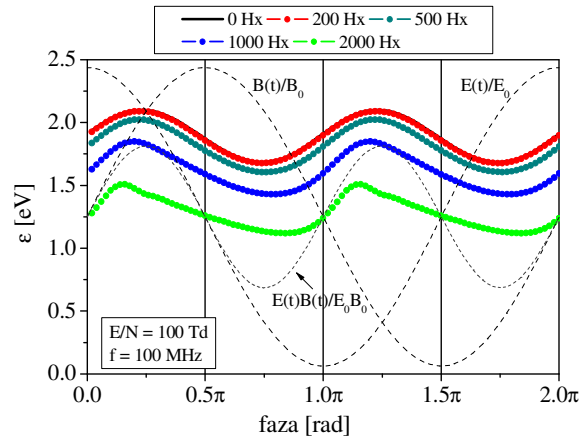
Proračuni su urađeni našim Monte Carlo simulacionim kodom, pri čemu smo izvršili dva seta simulacija, oba pri istoj vrijednosti $E/N=100 \text{ Td}$. U prvom setu je, pri $B/N=0 \text{ Hx}$, posmatran uticaj frekvencije električnog polja koja je varirana od 10 MHz do 1000 MHz, dok je u drugom setu simulacija posmatran uticaj magnetnog polja, koje je varirano od 200 Hx do 2000 Hx, pri frekvenciji polja od 100 MHz. U svim simulacija smo pratili ponašanje $5 \cdot 10^6$ početnih elektrona u prostoru i vremenu, čiji je početni broj izabran tako da vrijeme simulacije bude razumno i da se dobije što bolja statistika izlaznih podataka. Pretpostavka je da se roj elektrona koji puštamo u gas pokorava Maxwelllovoj raspodjeli po brzinama, pri čemu je uzeto da je njegova početna srednja energija 1 eV. Koncentracija neutrala je iznosila $3,54 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$ što odgovara pritisku gasa od 1 Torr (133.3 Pa) i temperaturi od 273 K. Skup efektivnih presjeka za e^-/N_2O

interakciju koji smo koristili kao ulazni podatak u ovim proračunima je naš preporučeni skup (Dupljanin i ostali, 2010) prikazan na slici 3.1..

Transportni koeficijenti prikazani u ovom poglavlju su usrednjeni transportni koeficijenti, pri čemu je usrednjavanje izvršeno po svim fazama jednog perioda polja i po svim periodima od trenutka kada je roj ušao u relaksirano stanje.

3.4.1. Uticaj jačine magnetnog polja na fazne zavisnosti transportnih koeficijenata

Na slici 3.12. je prikazana fazna zavisnost srednje energije roja za pet vrijednosti redukovanog magnetnog polja, pri $E/N=100$ Td i $f=100$ MHz.

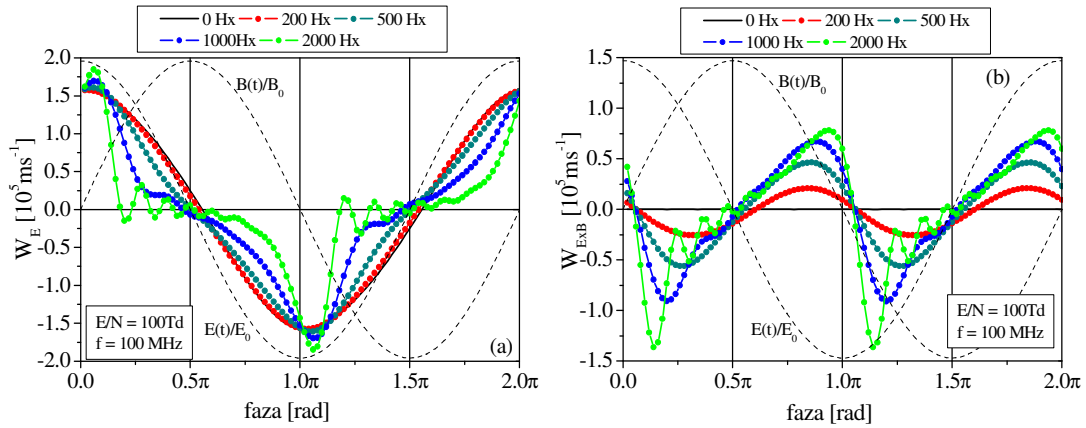


Slika 3.12. Fazna zavisnost srednje energije elektrona za pet vrijednosti B/N , pri $E/N=100$ Td i $f=100$ MHz.

Crnim isprekidanim linijama su prikazane sinusna i kosinusna funkcija tj. promjene magnetnog i električnog polja, dok je sivom isprekidanom linijom prikazan njihov proizvod. Vidi se da funkcija srednje energije prati oblik funkcije $E(t) \cdot B(t)$, s tim što su minimumi i maksimumi slabije izraženi i za veće vrijednosti B/N su pomjereni ka manjim fazama. Vidimo da srednja energija ostaje gotovo nepromijenjena pri najnižoj razmatranoj vrijednosti $B/N=200$ Hx. Daljnjim povećanjem amplitude magnetnog polja dolazi do njenog smanjenja što je posljedica skretanja elektrona sa pravca električnog polja i njihove rotacije oko linija sile magnetnog polja. Kako magnetno polje raste funkcija srednje energije postaje asimetrična i trouglasta sa brzim porastom i sporijim opadanjem. U dijelu faze gdje srednja energija počinje brzo da raste vidimo da

magnetno polje prolazi kroz nultu vrijednost a električno je maksimalno i ono jako brzo daje energiju roju. Nasuprot tome, kako magnetno polje raste srednja energija roja počinje polako da se smanjuje jer je magnetnom polju potrebno više vremena za smanjenje energije kroz njihovo skretanje.

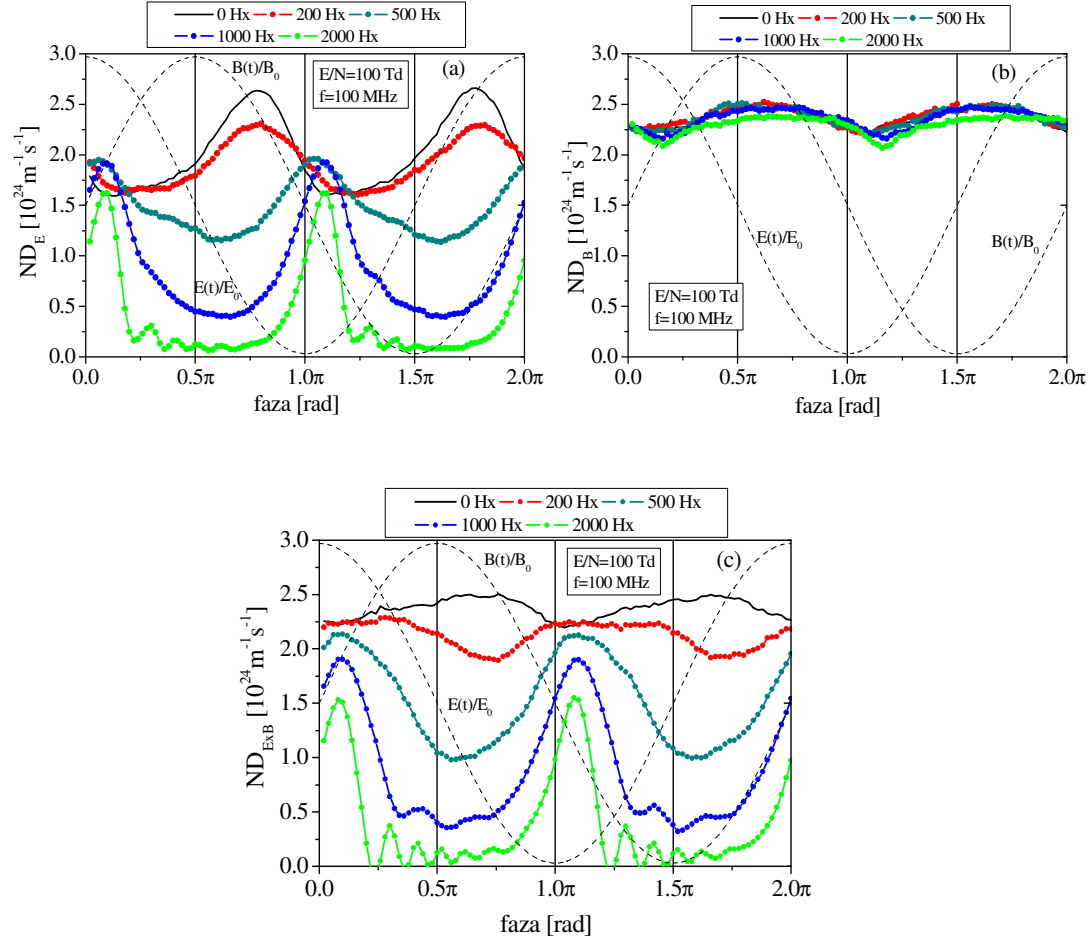
Na slici 3.13 (a) je prikazana fazna zavisnost brzine drifta elektrona u pravcu električnog polja za više vrijednosti B/N , pri $E/N=100$ Td i $f=100$ MHz. Vidimo da za niže vrijednosti B/N magnetno polje nema značajan uticaj na ovu komponentu brzine drifta koja približno prati oblik kosinusne funkcije tj. vremenske promjene električnog polja sa maksimumom u dijelu faze gdje je B/N minimalno, kako je i očekivano.



Slika 3.13. Fazna zavisnost brzine drifta: (a) u pravcu električnog polja, (b) u pravcu normalnom na pravac električnog i magnetnog polja, pri $E/N=100$ Td i $f=100$ MHz

Povećanjem B/N dolazi do smanjenja komponente u pravcu električnog polja, pomjeranja maksimuma ka većim fazama i do njegovog sužavanja, kao i do pojave asimetrije profila sa jasno izraženim minimumima i maksimumima koji se naizmjenično smjenjuju. Kada magnetno polje prolazi kroz nultu vrijednost jako električno polje ubrzava elektrone i daje im energiju te brzina drifta u pravcu električnog polja raste i dostiže maksimum dok komponenta u pravcu $\vec{E} \times \vec{B}$, prikazana na slici 3.13. (b) počinje brzo da opada. Nakon toga $\vec{E} \times \vec{B}$ komponenta počinje da raste dosta sporije sa pojavom vidljivih oscilacija u intenzitetu. Vidimo da pri najvišim vrijednostima B/N njena srednja vrijednost nije jednaka nuli što dovodi do makroskopske rotacije elektronskog roja.

Na slici 3.14. (a), (b) i (c) je prikazana fazna zavisnost difuzionih koeficijenata u pravcima $\vec{E}$, $\vec{B}$ i $\vec{E} \times \vec{B}$, respektivno.



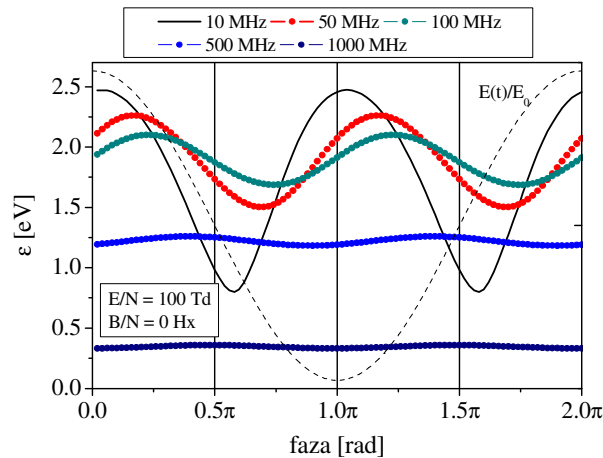
Slika 3.14. Fazna zavisnost difuzionih koeficijenata: (a) u pravcu električnog polja, (b) u pravcu magnetnog polja, (c) u pravcu normalnom na pravac električnog i magnetnog polja, pri $E/N=100 \text{ Td}$ i $f=100 \text{ MHz}$.

Kao što je i očekivano, porastom B/N longitudinalna komponenta difuzionog tenzora (ND_E) se smanjuje usljed smanjenja longitudinalne komponente brzine drifta i srednje energije (slika 3.14 (a)). Maksimumi se, kako magnetno polje raste, pomijeraju ka višim fazama jakog električnog polja i pri najvišoj vrijednosti B/N difuzija je značajno smanjena u svim fazama polja. U suprotnosti sa difuzionim koeficijentom u pravcu električnog polja, koeficijent u pravcu magnetnog polja (ND_B) ne pokazuje neke značajne promjene sa porastom B/N (slika 3.14 (b)). Uočavaju se male modulacije kao i

nezatno smanjenje pri najvišoj vrijednosti B/N od 2000 Hx. Na slici 3.14 (c) vidimo da difuzioni koeficijent u pravcu normalnom na pravac električnog i magnetnog polja (ND_{ExB}) opada kako B/N raste. Vidimo da se maksimalne vrijednosti ovog koeficijenta nalaze u dijelovima faza u kojima električno polje ima maksimalnu vrijednost pri čemu se njihov položaj ne mijenja porastom B/N . Poređenjem slika 3.14. (a) i (c) vidimo da se difuzioni koeficijenti u $\vec{E}$ i $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu ponašaju na sličan način. U slučaju difuzije u $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu dolazi do pojave „negativne“ difuzije (White i ostali, 2008) pri najvišoj vrijednosti B/N , i to u onim dijelovima faze u kojima je električno polje slabo.

3.4.2. Uticaj frekvencije električnog polja na fazne zavisnosti transportnih koeficijenta

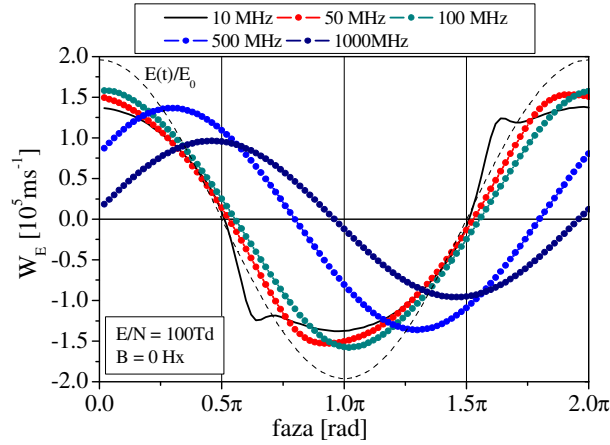
Na slici 3.15. je prikazana fazna zavisnost srednje energije roja, za više vrijednosti frekvencije električnog polja, pri $E/N=100$ Td, u slučaju odsustva magnetnog polja.



Slika 3.15. Fazna zavisnost srednje energije roja za više vrijednosti frekvencije električnog polja, pri $E/N=100$ Td i $B/N=0$ Hx.

Sa slike vidimo da se sa porastom frekvencije električnog polja srednja energija roja smanjuje jer zbog visoke frekvencije polja elektroni nemaju dovoljno vremena da popune visokoenergijski rep funkcije raspodjele. Na najnižoj frekvenciji od 10 MHz amplituda srednje energije je modulirana, kao i na frekvencijama od 50 i 100 MHz, ali znatno slabije. Porastom frekvencije preko 100 MHz modulacija srednje energije

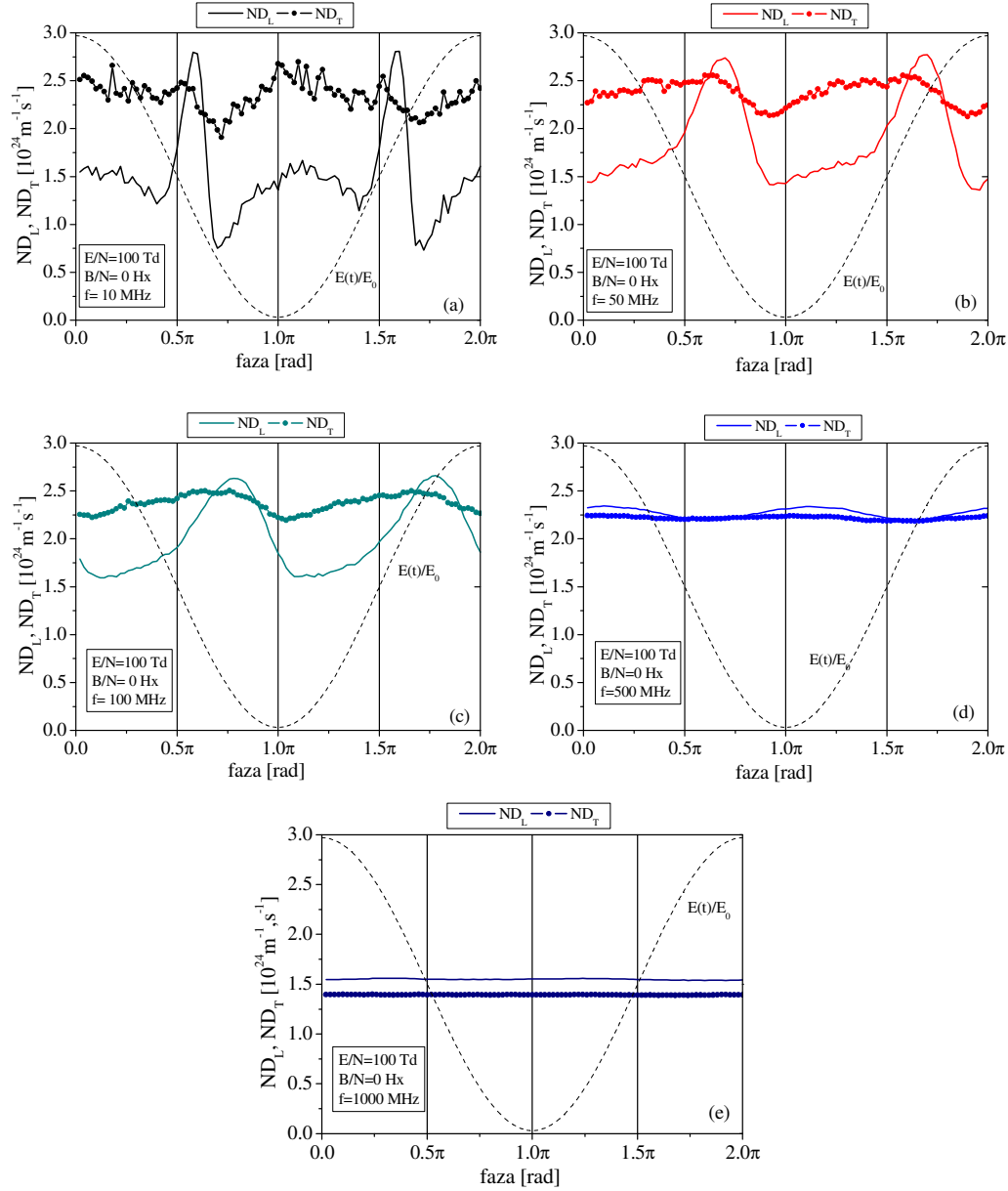
iščezava i na najvišoj razmatranoj vrijednosti od 1000 MHz srednja energija se ponaša kao u slučaju DC polja.



Slika 3.16. Fazna zavisnost brzine drifta roja u $\vec{E}$ pravcu za više vrijednosti frekvencije električnog polja, pri $E/N=100 \text{ Td}$ i $B/N=0 \text{ Hx}$.

Na slici 3.16. je prikazana fazna zavisnost brzine drifta u pravcu električnog polja. Pri najnižoj frekvenciji od 10 MHz vidimo znakove vremenski razložene negativne diferencijalne provodnosti (NDC) (Bzenić i ostali, 1999). Kako frekvencija polja raste oblik fazne zavisnosti brzine drifta se mijenja u sinusoidalni sa smanjenjem modulacije. Na najvišoj razmatranoj frekvenciji od 1000 MHz profil je sinusoidalan sa faznim pomjerajem od $\pi/2$ u odnosu na električno polje, što je jasan znak da elektroni prolaze kroz veliki broj oscilacija prilikom sudara. Električno polje nije u mogućnosti da pumpa energiju u sistem i transport se približava termalnom limitu.

Na slici 3.17. je prikazana fazna zavisnost transversalnog (ND_T) i longitudinalnog (ND_L) difuzionog koeficijenta. Pri najnižoj razmatranoj frekvenciji polja od 10 MHz vidimo da dolazi do pojave anomalne longitudinalne difuzije koja se ogleda u tome da longitudinalni difuzioni koeficijent raste i ima maksimum u onom dijelu faze u kojem električno polje mijenja znak. Nadalje, u jednom malom dijelu faze ND_L postaje veći od ND_T . U DC poljima, kao što je već rečeno ranije, difuzija je anizotropna i $ND_T > ND_L$. Ovaj fenomen anomalnog ponašanja longitudinalnog difuzionog koeficijenta je uočen za određeni broj modelnih i realnih gasova (Petrović i ostali, 2002; White i ostali, 1995; Maeda i ostali, 1997). Oba koeficijenta su pri ovoj frekvenciji izrazito modulirana.



Slika 3.17. Fazna zavisnost longitudinalnog i transversalnog difuzionog koeficijenta, pri $E/N=100$ Td i $B/N=0$ Hx za više vrijednosti frekvencije električnog polja: (a) 10 MHz, (b) 50 MHz, (c) 100 MHz, (d) 500 MHz i (e) 1000 MHz.

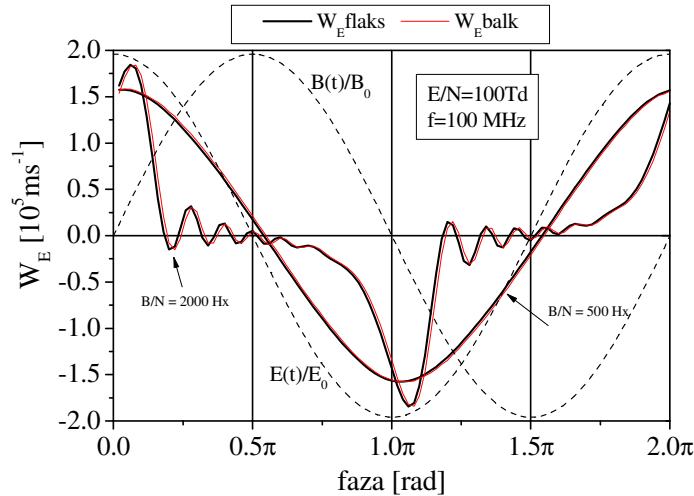
Porastom frekvencije polja (slike 3.17 (b), (c), (d) i (e)) vidimo da se srednje vrijednosti oba koeficijenta smanjuju kao i njihove modulacije. Pri frekvenciji polja od 500 MHz (slika 3.17 (d)) vidimo da ND_L i ND_T imaju iste vrijednosti u tačkama u kojima je polje jednako nuli dok je u dijelovima faze jačeg električnog polja $ND_L > ND_T$. Na najvišoj frekvenciji od 1000 MHz modulacija kod oba koeficijenta nestaje.

3.4.3. Uticaj nekonzervativnih procesa na transportne koeficijente u RF polju

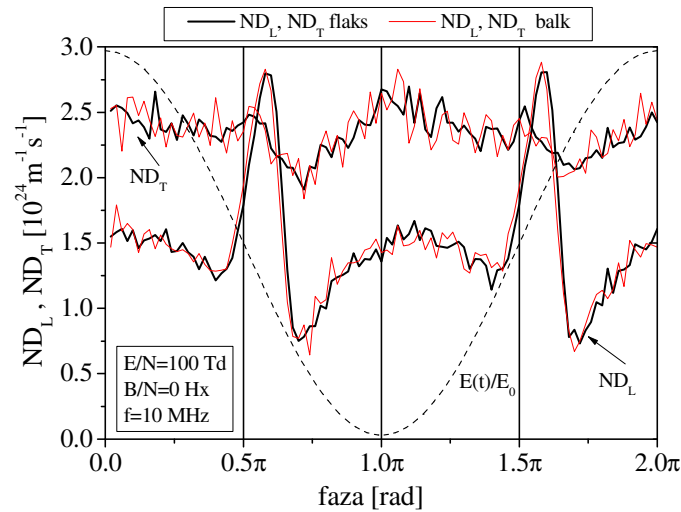
Transportni koeficijenti prikazani u odjeljku 3.4. su flaks transportni koeficijenti. Ovdje ćemo na primjeru brzine drifta u pravcu električnog polja i transversalnog i longitudinalnog difuzionog koeficijenta vidjeti u kojoj mjeri jonizacija i zahvat, kao nekonzervativni procesi, utiču na razliku između balk i flaks vrijednosti navedenih koeficijenata.

Na slici 3.18. je prikazana fazna zavisnost balk i flaks komponente brzine drifta u pravcu električnog polja a na slici 3.19. fazna zavisnost balk i flaks komponenti longitudinalnog i transversalnog difuzionog koeficijenta, za dvije vrijednosti amplitude redukovanog magnetnog polja (500 Hx i 2000 Hx).

Kao što vidimo na slikama 3.18. i 3.19., postoji jako mala razlika između balk i flaks komponenti kod sva tri posmatrana koeficijenta (W_E , ND_T , ND_L), te možemo zaključiti da je naš izbor parametara polja bio takav da uticaj nekonzervativnih procesa nije bio od značaja.



Slika 3.18. Poređenje balk i flaks komponenti brzine drifta u pravcu električnog polja za dvije vrijednosti B/N , pri $E/N=100$ Td i $f=100$ MHz.



Slika 3.19. Poređenje balk i flaks komponenti longitudinalnog i transverznog difuzionog koeficijenta, pri $E/N=100$ Td i $f=10$ MHz.

3.5. ZAKLJUČAK

Rezultati prikazani u ovom poglavlju predstavljaju nastavak istraživanja elektronskog transporta u azot suboksidu (N_2O) započetog u magistarskoj tezi S. Dupljanin (Dupljanin, 2008). U uvodnom dijelu je, stoga, dat pregled dobijenih rezultata: preporučeni skup presjeka za e^-/N_2O interakciju dobijen metodom rojeva (slika 3.1), na osnovu izmjerenih transportnih koeficijenata de Urquija i saradnika (Dupljanin i ostali, 2010). Tako dobijeni skup presjeka je u mogućnosti da reprodukuje izmjerene vrijednosti brzine drifta i efektivnog koeficijenta jonizacije kako u čistom N_2O tako i u smjesama sa N_2 .

Oblast istraživanja je proširena na transportne karakteristike elektrona u DC ukrštenim električnim i magnetnim poljima ortogonalne konfiguracije, čemu je posvećen treći odjeljak ovog poglavlja. Za proračune transportnih koeficijenata smo koristili naš MC simulacioni kod (Bzenić i ostali, 1999; Raspopović i ostali, 2000; Petrović i ostali, 2002; Dujko i ostali 2005). Proračuni su urađeni za više vrijednosti redukovanog magnetnog polja. Odnos ciklotronske i ukupne kolizione frekvencije u ovom razmatranom slučaju je za sve vrijednosti B/N manji od jedan (izuzev najviše, kada je neznatno veći od jedan), te možemo reći da se radi o sudarno dominantnom

režimu. Vidljiv je efekat hlađenja roja tj. smanjenja njegove srednje energije kako magnetno polje raste, kao i smanjenje komponente brzine drifta u pravcu električnog polja. Difuzija je blago anizotropna jer je odnos koeficijenata difuzije u pravcima $\vec{E}$ i $\vec{B}$ blizak jedinici. Prikazani su i brzinski koeficijenti za pojedinačne procese, kako za elastične tako i za sve neelastične. Na primjeru brzine drifta i difuzionog koeficijenta u pravcu električnog polja je posmatran uticaj nekonzervativnih procesa za dvije vrijednosti redukovano magnetnog polja od 100 Hx i 1000 Hx (slika 3.11.). Utvrđeno je da se razlike između balk i flaks komponenti u oba slučaja javljaju pri višim vrijednostima E/N kada dolazi do značajnijih jonizacionih procesa dok na niskim vrijednostima E/N razlike nema. Razlog tome je što naš izbor vrijednosti polja odgovara energijskoj oblasti gde je presek za zahvat nekoliko redova veličine manji od konzervativnih neelastičnih procesa.

Odjeljak 4 je posvećen transportu roja elektrona u uslovima djelovanja vremenski zavisnih (RF) električnih i magnetnih polja. Urađena su dva seta simulacija, našim MC kodom, gdje je u prvom setu posmatran uticaj amplitude magnetnog polja pri E/N=100 Td i f=100 MHz, dok je u drugom posmatran uticaj frekvencije električnog polja, amplitude 100 Td. Uočen je efekat hlađenja roja porastom B/N, smanjenje komponente brzine drifta u pravcu električnog polja, pojava nenulte srednje vrijednosti brzine drifta u $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu, što za posljedicu ima makroskopsku rotaciju roja kao cjeline, te do pojave negativne difuzije u $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu pri B/N=2000 Hx. Porastom frekvencije električnog polja (u odsustvu magnetnog polja) srednja energija se smanjuje da bi na najvišoj posmatranoj frekvenciji od 1000 MHz modulacija u potpunosti iščezla. Brzina drifta u pravcu električnog polja pri najnižoj frekvenciji od 10 MHz pokazuje znakove vremenski razložene negativne diferencijalne provodnosti. Pri najnižoj frekvenciji od 10 MHz dolazi i do pojave anomalne longitudinalne difuzije, dok na najvišoj od 1000 MHz longitudinalni i transverzalni difuzioni koeficijenti postaju nemodulisani i približno jednaki. Na kraju ovog odjeljka je na primjeru brzine drifta u pravcu električnog polja, kao i na primjeru longitudinalnog i transverznog difuzionog koeficijenta, posmatran uticaj nekonzervativnih procesa (slike 3.18. i 3.19.). Utvrđeno je da pri datom izboru parametara polja nema neke značajnije razlike između balk i flaks komponenti posmatranih transportnih koeficijenata.

4. TRANSPORT ELEKTRONA U TETRAFLUOROETANU ($C_2H_2F_4$) I NJEGOVI SMJEŠAMA SA ARGONOM (A_r)

4.1. UVOD

Ova glava je posvećena dobijanju skupa efektivnih presjeka za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju metodom rojeva (Šašić i ostali, 2010; Šašić i ostali, 2013), na osnovu izmjerenih transportnih koeficijenata (brzine drifta, W , i efektivnog koeficijenta jonizacije, $(\alpha - \eta)/N$) u čistom $C_2H_2F_4$ kao i u njegovim smješama sa A_r (de Urquijo i ostali, 2009). U brojnim ponavljajućim krugovima modifikacionog procesa efektivnih presjeka su korišćeni kodovi Elendif (Morgan i Penetrante, 1990) i Bolsig+ (Hagelaar i Pitchford, 2005), koji se zasnivaju na rješenju Boltzmannove jednačine u dvočlanoj aproksimaciji (TTA), dok su svi konačni proračuni urađeni našim Monte Carlo kodom (MC), (Bzenić i ostali, 1999; Petrović i ostali, 2002).

Rad na presjecima za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju je podijeljen u tri faze. U prvoj fazi je dobijen skup presjeka koji je u mogućnosti da reprodukuje izmjerene vrijednosti W i $(\alpha - \eta)/N$ u čistom $C_2H_2F_4$ (Šašić i ostali, 2010). U drugoj fazi su korišćeni i rezultati mjerenja transportnih koeficijenata u $C_2H_2F_4/A_r$ smješama (de Urquijo i ostali, 2009), te je dobijen novi skup presjeka koji je konzistentan sa mjerenjima de Urquija i saradnika, kako u čistom gasu tako i u njegovim smješama sa A_r (Šašić i ostali, 2013). U završnoj, trećoj fazi je urađena još jedna revizija presjeka za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju, bazirajući se na oblast niskih i srednjih energija elektrona, gdje su presjeci za vibracione ekscitacije i elektronski zahvat dominantni. Nezadovoljni izborom vrijednosti pragova za vibracione ekscitacije koji su korišćeni u literaturi do tada, pa i u našoj analizi, mi smo na osnovu novih podataka proširili skup presjeka za vibracione ekscitacije. Takođe smo dodali informacije dobijene na osnovu programa Quantemol N (Tennyson i ostali, 2007) za presjeke za elektronske ekscitacije i jonizaciju. Ovdje su za analizu i reviziju presjeka korišćeni i rezultati mjerenja koeficijenata za zahvat u čistom $C_2H_2F_4$ Basilea i saradnika (Basile i ostali, 1991).

U prve dvije faze, polazni skup efektivnih presjeka za $C_2H_2F_4$ molekulu je preuzet iz Biagijeve baze podataka (Biagi, 2007), dok polazni skup presjeka završne

revizije predstavlja kompilaciju prethodno publikovanih rezultata (Šašić i ostali, 2013) i novih proračuna Quantemol N kodom. U sva tri slučaja, koristeći konačni skup presjeka kao ulazni podatak izračunati su transportni i brzinski koeficijenti u širokom opsegu DC električnog polja. U prvoj fazi izračunavanja su izvršena samo u čistom gasu a u preostale dvije faze i u smjesama ovog gasa sa A_r i to za više različitih procentualnih sastava.

1,1,1,2-Tetrafluoroetan, strukturne formule $C_2H_2F_4$, alternativnih naziva R-134a, HFC-134a, freon, spada u grupu haloalkana koji nemaju hlor u svom sastavu, već je hlor u potpunosti zamijenjen atomima vodonika. Ovaj gas se vrlo često koristi kao rashladno sredstvo, nema uticaja na ozonski omotač ali utiče na globalno zagrijavanje ($GWP=1.300$) kao i na pojavu kiselih kiša. Ima veliku primjenu u različitim plazma tehnologijama: kao sredstvo u procesima nagrivanja određenih površina (Kirmse, 1996), plazmom poboljšano uklanjanje hemijskih nečistoća (Labelle i Gleason, 2001), za porast nanostrukture (Vizireanu i ostali, 2012), funkcionalizaciju određenih površina (Guruvenket, 2008). Koristi se i u radijacionim čestičnim detektorima (Abrescia, 2008; Shnide, 2009; Cattani, 2012), prvenstveno u RPC (Resestive Plate Chamber) detektorima (Riegler, 2003; Cerron, 1997; Colafranceschi, 2010; Gonzalez-Dias i Sharma, 2013). Predložen je kao potencijalna zamjena gasnog izolatora SF_6 , za koji je poznato da ima veliki uticaj na globalno zagrijavanje ($GWP=22.8$), (McAllister, 1989). Iako freon ima srednju vrijednost GWP_a (1.3) i srednje vrijeme života u atmosferi od 14.6 godina, postoje određeni pokušaji dekompozicije i uklanjanja ovog gasa iz atmosfere pomoću mikrotalasnih „torch“ plazmi (Jasiński, 2000).

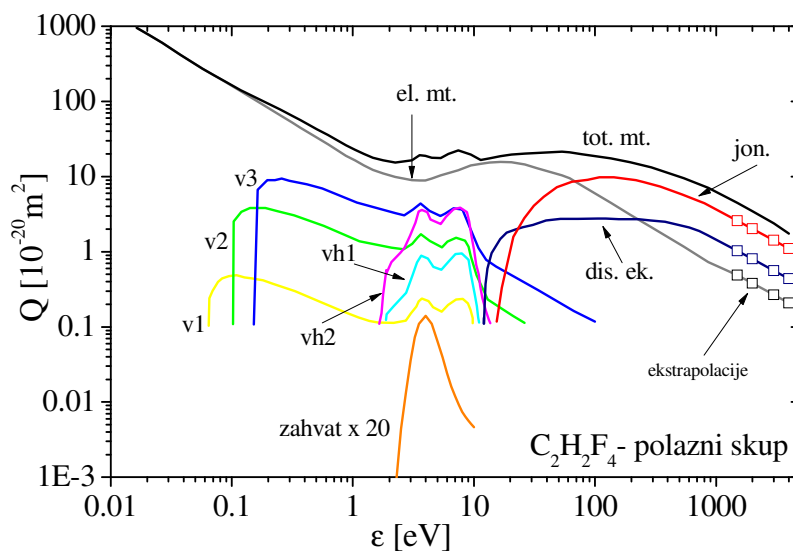
Moguće primjene ovog gasa, prvenstveno u električnim pražnjenjima, traže detaljno poznavanje skupa efektivnih presjeka i elektronskih transportnih koeficijenata. Koliko je nama poznato, jedini dostupan skup presjeka za rasijanje elektrona na $C_2H_2F_4$, uglavnom baziran na ekstrapolaciji presjeka za C_2F_6 , je iz Biagijeve baze podataka (Biagi, 2007; 2010), koji je pri tome implementiran u bazu koda Magboltz, te samim tim i teško dostupan jer podaci u programu Magboltz nisu navedeni tabelarno već su kodirani u program kao analitičke zavisnosti na netransparentan način i po pitanju porijekla, oblika i vrijednosti presjeka i po pitanju energijskih gubitaka i faktora skaliranja koji su im pridruženi. Sa druge strane, transportnih koeficijenata u literaturi gotovo da nema, izuzev mjerenja Basilea i saradnika (Basile i ostali, 1991) i to za drift

brzinu i efektivni koeficijent jonizacije, u ograničenom opsegu redukovano električnog polja, E/N , za $(\alpha - \eta)/N$ od 23 Td do 195 Td. Ova mjerenja su predstavljena u konferencijskom radu koji nije publikovan.

Nedostatak podataka u literaturi, a sa druge strane potreba za istim, motivisala nas je da pokrenemo istraživanja vezana za ovaj gas i transport elektrona u njemu. Kao polazna osnova su nam poslužili najnovi rezultati mjerenja brzine drifta i efektivnog jonizacionog koeficijenta de Urquija i saradnika (de Urquijo i ostali, 2009), kako u čistom gasu, tako i u njegovim smješama sa A_r različitog procentualnog sastava (2%, 5%, 10%, 20%, 50% $C_2H_2F_4$ u A_r).

4.2. POLAZNI SKUP PRESJEKA

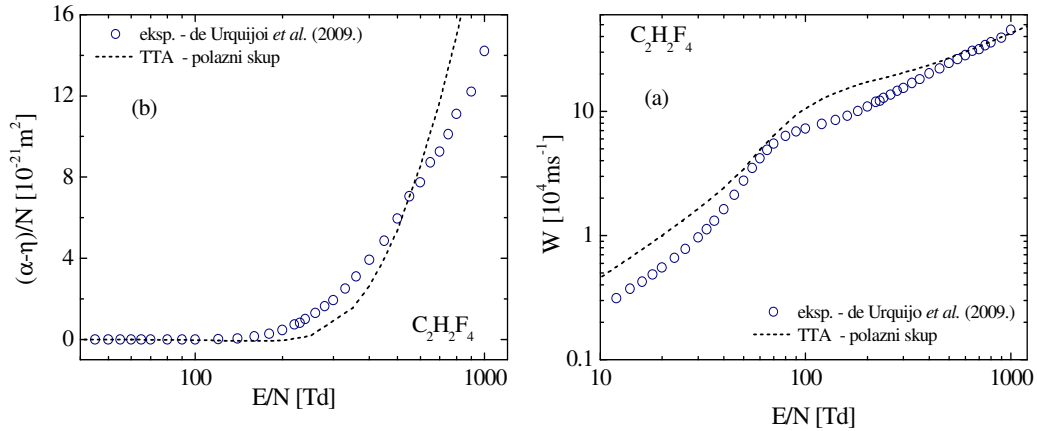
U prvoj fazi našeg rada polazni skup presjeka, slika 4.1, koji smo koristili za proračune transportnih koeficijenata preuzeli smo iz baze podataka Biagija (Biagi, 2007; <http://rjd.web.cern.ch/rjd/cgi-bin/cross?update>).



Slika 4.1. Polazni skup presjeka za elektrone u $C_2H_2F_4$ (Biagi, 2007). Totalni presjek za prenos impulsa: tot. mt.; elastični presjek za prenos impulsa: el. mt.; vibracione ekscitacije: v1, v2, v3, vh1 i vh2; presjek za zahvat: zah.x20 (uvećan 20 puta radi vidljivosti); disocijativne elektronske ekscitacije: dis. ek.; presjek za jonizaciju: jon. Praznim simbolima je prikazana naša ekstrapolacija ka višim energijama.

Ovaj skup presjeka uključuje pet presjeka za vibracione ekscitacije (v_1 , v_2 , v_3 , vh_1 , vh_2), presjek za jonizaciju (jon.), presjek za disocijativne ekscitacije (dis. ek.), elastični presjek za prenos impulsa (el. mt.), dok smo totalni presjek za prenos impulsa (tot. mt.) dobili kao sumu elastičnog i svih neelastičnih presjeka. Presjeke za jonizaciju, disocijativnu ekscitaciju i elastični presjek za prenos impulsa smo ekstrapolisali ka višim energijama koristeći se Bornovom aproksimacijom, te smo skup dopunili presjekom za zahvat elektrona na C_2F_6 , koji smo skalirali faktorom 0.05. Kako ovaj skup presjeka nije publikovan, detalje o samim presjecima kao i transportnim koeficijentima koji su korišćeni za njegovu reprodukciju nismo uspjeli pronaći.

Kodom Elendif, sa polaznim skupom presjeka prikazanim na slici 4.1. kao ulaznim parametrom, izračunali smo transportne koeficijente u čistom freonu i tako dobijene vrijednosti W i $(\alpha - \eta)/N$ uporedili sa izmjerenim vrijednostima de Urquija i saradnika. Kao što se može vidjeti na slici 4.2. značajna odstupanja postoje u oba slučaja, na cijelom razmatranom opsegu E/N . Iz ova dva primjera jasno je da je potrebno izvršiti modifikaciju polaznog skupa presjeka u cilju dobijanja što boljeg stepena slaganja izmjerenih i izračunatih vrijednosti transportnih koeficijenata.

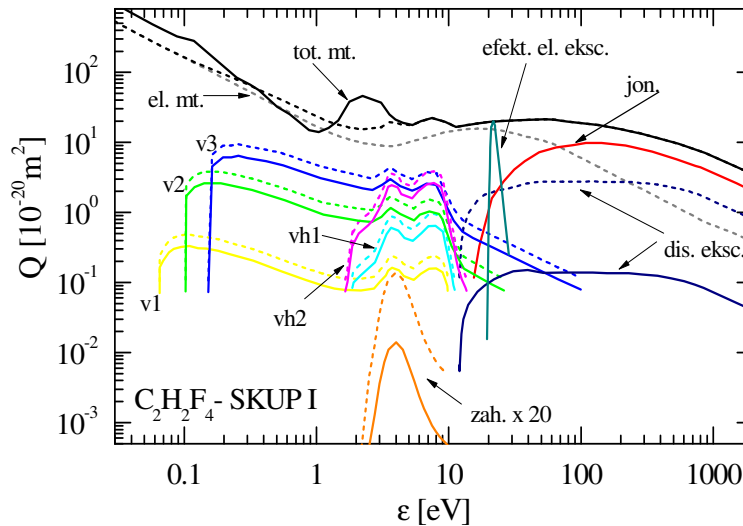


Slika 4.2. (a) Brzina drifta, (b) Efektivni koeficijent jonizacije elektrona u $C_2H_2F_4$. Simbolima su prikazane izmjerene vrijednosti de Urquija i saradnika (de Urquijo i ostali, 2009) a isprekidanom linijom TTA rezultat dobijen pomoću polaznog skupa presjeka.

4.3. MODIFIKACIJA POLAZNOG SKUPA PRESJEKA I TRANSPORTNI KOEFICIJENTI - SKUP I

Kako su odstupanja izračunatih vrijednosti brzine drifta i efektivnog koeficijenta jonizacije u odnosu na najnovija mjerenja de Urquija i saradnika značajna na cijelom opsegu E/N , kao što se vidi na slici 4.2. (a) i (b), izvršili smo modifikaciju polaznog skupa presjeka. Sam proces se odvijao u velikom broju ponavljajućih krugova do dobijanja skupa presjeka koji je u mogućnosti da reprodukuje oba izmjerena koeficijenta. Konačni skup presjeka - SKUP I je prikazan na slici 4.3. (Šašić i ostali, 2010), gdje su isprekidanim linijama prikazani polazni presjeci.

U cilju dobijanja što boljeg fita izmjerenih vrijednosti brzine drifta, modifikovali smo totalni (kao i elastični) presjek za prenos impulsa, usljed najveće osjetljivosti ovog koeficijenta na njega, koji sada, kao što vidimo na slici, ima lokalni maksimum između 1 i 2 eV. Ovaj maksimum podsjeća na rezonantno rasijanje, ali su maksimumi u vibracionim presjecima polaznog skupa na nešto višim energijama. Kako je ova faza rada na freonskim presjecima posvećana dobijanju skupa presjeka koji fituje transportne



Slika 4.3. Konačni skup presjeka - SKUP I za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju dobijen metodom rojeva (Šašić i ostali, 2010). Isprekidanim linijama su prikazani polazni presjeci (Biagi, 2007).

koeficijente u čistom freonu, polazeći od Biagijevog skupa, pitanje ovog razmimoilaženja je ostalo otvoreno do dobijanja nekih novijih podataka i mjerenja, prvenstveno karakteristične energije. Fitovanje efektivnog koeficijenta jonizacije je

izvedeno nizom modifikacija neelastičnih presjeka. Vibracione ekscitacije i presjek za disocijativne ekscitacije su smanjeni da bi se obezbijedio dobar fit jonizacionog koeficijenta u blizini praga. U isto vrijeme smanjen je i presjek za zahvat radi fitovanja efektivnog koeficijenta jonizacije $((\alpha - \eta)/N)$, mada je takođe moguće njegovo pomijeranje po energijskoj skali. Presjek za jonizaciju je ostao nepromijenjen vodeći se činjenicom da je jonizacioni koeficijent osjetljiviji na presjek za elektronske ekscitacije negoli na sam jonizacioni presjek, a poznato je da je to presjek koji se se mjeri sa najvećom tačnošću. U ovoj fazi modifikacija polaznog skupa presjeka, da bi se ostvario što bolji fit W i $(\alpha - \eta)/N$, uveden je fiktivni presjek za elektronske ekscitacije sa oštrim pikom između 20 i 30 eV (efekt. el. eksc. - tamno zelena linija na slici 4.3.). Ovaj presjek je uveden sa namjerom da „pokupi“ efekte svih nedostajućih neelastičnih procesa na energijsku funkciju raspodjele elektrona i tako obezbjedi kompletnost skupa presjeka. Konačni skup presjeka - SKUP I je prikazan na slici 4.3. (Šašić i ostali, 2010), gdje su, radi poređenja, isprekidanim linijama prikazani i polazni (Biagi, 2007) presjeci.

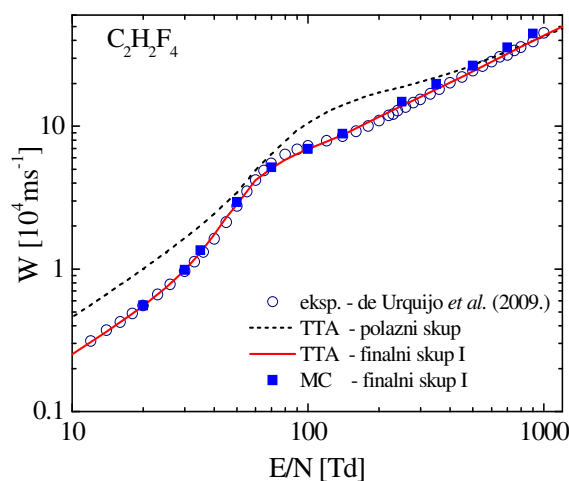
Ovako dobijen skup presjeka je konzistentan sa postojećim mjerenjima de Urquija i saradnika u čistom freonu, kao što se vidi na slikama 4.4. - 4.6., dok sa druge strane nije u mogućnosti da reprodukuje izmjerene vrijednosti W i $(\alpha - \eta)/N$ u $C_2H_2F_4/A_r$ smješama. Osnovni problem ovog skupa presjeka je slabo određen energijski balans, koji može biti prevaziđen ili mjerenjem karakteristične energije (D_T/μ) ili analizom brzine drifta u $C_2H_2F_4/A_r$ smješama (ili smješama sa nekim drugim plemenitim gasom) sa što manjim procentom freona, gdje bi se balans impulsa odvijao preko A_r a energije preko freona. I pored navedenih nedostataka dobijenog skupa presjeka prikazanog na slici 4.3. mišljenja smo da je dovoljno tačan za potrebe modelovanje u slučaju smješa sa niskim procentom freona.

Sa konačnim skupom presjeka kao ulaznim podatkom, našim MC simulacionim kodom smo izračunali transportne i brzinske koeficijente u čistom freonu. U svim simulacijama smo pratili kretanje u vremenu i prostoru svakog od $5 \cdot 10^5$ početnih elektrona, pod dejstvom konstantnog električnog polja. Za roj elektrona koji se pušta u gas iz koordinantnog početka se pretpostavlja da se pokorava Maxwelllovoj raspodjeli po energijama, dok je za početnu srednju energiju roja uzeto 1 eV. Svi procesi rasijanja elektrona na molekulima gasa su smatrani izotropnim. Koncentracija molekula

pozadinskog gasa je iznosila $3.5 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ što odgovara pritisku od 1 Torr (133.3 Pa) i temperaturi 273 K.

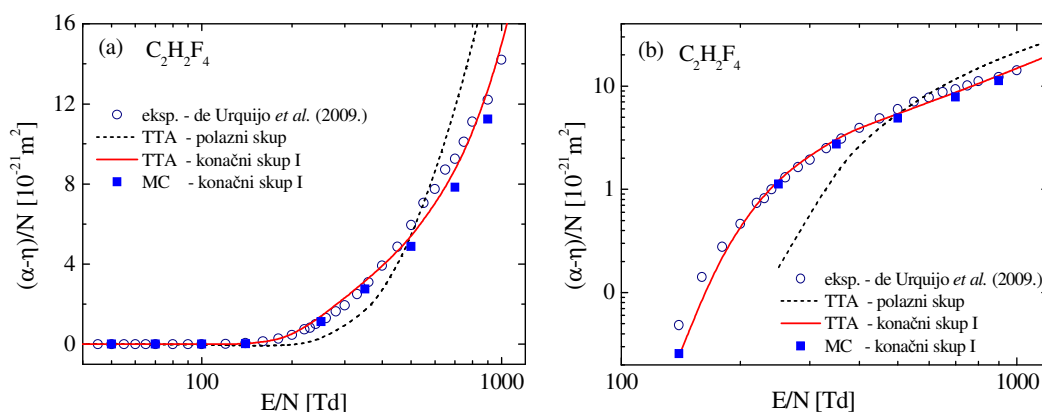
4.3.1. Brzina drifta i efektivni koeficijent jonizacije

Na slici 4.4. je prikazana brzina drifta elektrona u freonu u funkciji redukovano električnog polja. Kao što vidimo na slici, TTA i MC rezultati (crvena linija i plavi puni kvadrati, respektivno), dobijeni konačnim skupom presjeka prikazanih na slici 4.3. se dosta dobro slažu sa izmjerenim vrijednostima de Urquija i saradnika (plavi prazni krugovi), za razliku od rezultata dobijenog polaznim skupom presjeka (isprekidana linija). Vidimo da nema pojave negativne diferencijalne provodnosti.



Slika 4.4. Brzina drifta elektrona u $C_2H_2F_4$ u funkciji E/N . Poređenje izračunatih i izmjerenih vrijednosti.

Na slici 4.5. (a) i (b) prikazani su rezultati proračuna efektivnog koeficijenta jonizacije u funkciji E/N na linearnoj i logaritamskoj skali. Kao što vidimo sa slika, i u ovom slučaju je postignut zadovoljavajući stepen slaganja između izračunatih vrijednosti sa konačnim skupom presjeka (TTA-crvena linija, MC-plavi kvadrati) i izmjerenih vrijednosti de Urquija i saradnika (prazni krugovi), za razliku od vrijednosti dobijenih polaznim skupom presjeka (plava isprekidana linija) gdje su odstupanja značajna na cijelom opsegu E/N .



Slika 4.5. Efektivni koeficijent jonizacije u funkciji E/N : (a) linearna, (b) logaritamska skala. Poređenje izračunatih i izmjerenih vrijednosti.

Kao što smo već rekli u prethodnom tekstu, ovaj skup presjeka nije dobro energijski određen. Da bi se otklonio ovaj nedostatak potrebna su ili dodatna mjerenja karakteristične energije ili primjena metode gasnih smješa. Kako su nam bila dostupna mjerenja brzine drifta i efektivnog koeficijenta jonizacije u $C_2H_2F_4/A_r$ smješama (de Urquijo i ostali, 2009) različitog procentualnog sastava, koristeći se tim rezultatima, prešli smo na drugu fazu konstrukcije efektivnih presjeka za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju.

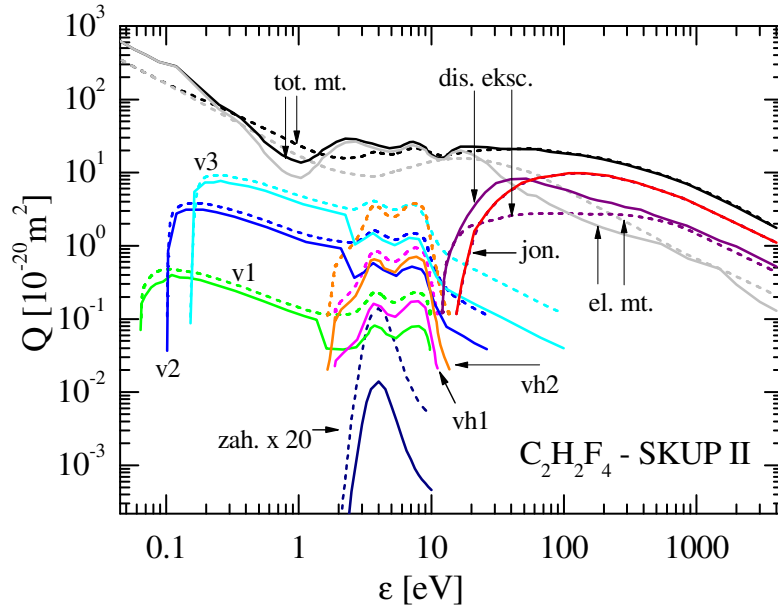
4.4. MODIFIKACIJA II - METODA GASNIH SMJEŠA

Kako skup presjeka prikazan u prethodnom odjeljku (SKUP I, slika 4.3, pune linije), ne može da reprodukuje izmjerene vrijednosti W i $(\alpha - \eta)/N$ u $C_2H_2F_4/A_r$ smješama, nastavili smo rad na freonskim presjecima koristeći tehniku gasnih smješa za poboljšanje jedinstvenosti dobijenog skupa presjeka (Šašić i ostali, 2013). U ovoj fazi modifikacionog procesa polaznog skupa (Biagi, 2007; slika 4.1.) koristili smo izmjerene vrijednosti transportnih koeficijenata za čisti $C_2H_2F_4$ kao i $C_2H_2F_4/A_r$ smješe različitog procentualnog sastava (2%, 5%, 10%, 20%, 50% $C_2H_2F_4$ u A_r), (Urquijo i ostali, 2009). U smješama sa niskim procentom $C_2H_2F_4$ balans impulsa se odvija preko A_r dok energijski balans zavisi od freona, te nam je ova činjenica omogućila poboljšanje tačnosti dobijenog skupa presjeka.

U početnoj fazi ovog kruga modifikacionog procesa, koji se odvijao u velikom broju naizmjenično ponavljajućih krugova proračuna transportnih koeficijenata u čistom

freonu i pet različitih smješa sa Ar , koristili smo kod Elendif (Morgan i Penetrante, 1990) radi brzine dobijanja podataka, dok su svi krajnji proračuni urađeni sa MC kodom. Imajući u vidu ograničenu tačnost rezultata TTA aproksimacije, na svim slikama su pored krajnjih MC rezultata prikazani i TTA, prvenstveno da se istakne razlika između njih. Inače, na svim slikama u ovom odjeljku prikazane su balk vrijednosti transportnih koeficijenata jer su to vrijednosti koje obično daje eksperiment. Šta se dobija kao rezultat eksperimenata tipa Pulsed Townsend kakav je koristio de Uruijo sa saradnicima ostaje da se vidi jer su istraživanja u toku (Dujko sa saradnicima, nepublikovano), ali indikacije su da se i ovde mjeri balk vrijednost a ne flaks, kako je to ponekad pretpostavljano u literaturi.

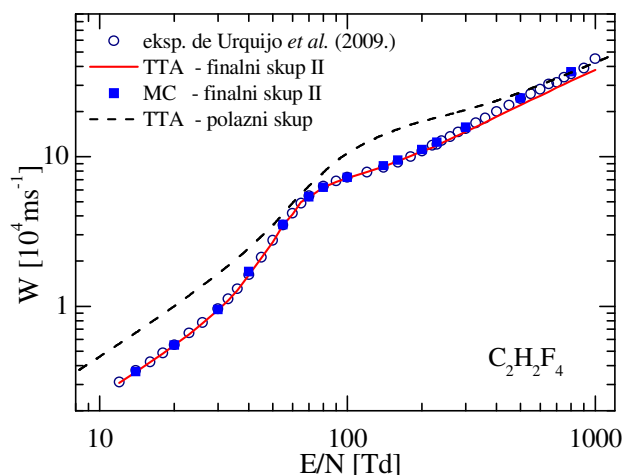
Konačni skup presjeka - SKUP II, prikazan na slici 4.6. punim linijama je dobijen fitovanjem svih transportnih podataka paralelno, kako u čistom gasu tako i u smješama sa Ar (Šašić i ostali, 2013). Kao što vidimo na slici, polazni skup presjeka (isprekidane linije) je pretpio značajne izmjene, gdje su modifikovani svi presjeci sem jonizacionog. Objašnjenja samog modifikacionog procesa su data u tekstu koji slijedi.



Slika 4.6. Konačni skup presjeka - SKUP II za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju dobijen metodom rojeva (Šašić i ostali, 2013). Isprekidanim linijama su prikazani polazni presjeci (Biagi, 2007).

4.4.1. Transportni koeficijenti u čistom $C_2H_2F_4$

Na slici 4.7. je prikazana brzina drifta elektrona u čistom freonu u funkciji E/N . Kao što vidimo na slici odstupanja rezultata dobijenog polaznim skupom presjeka (isprekidana linija) su značajna na cijelom razmatranom opsegu E/N , te je jasno da je potrebno izvršiti modifikaciju totalnog presjeka za prenos impulsa (tot. mt.) na skoro cijelom energijskom opsegu. Rezultat dobijen konačnim skupom presjeka je prikazan punim plavim kvadratima (MC) i punom linijom (TTA), i kao što vidimo na slici postignut je jako dobar stepen slaganja sa eksperimentom na cijelom opsegu E/N . Sve izračunate vrijednosti su unutar eksperimentalne neodređenosti koja je procijenjena na 3%.

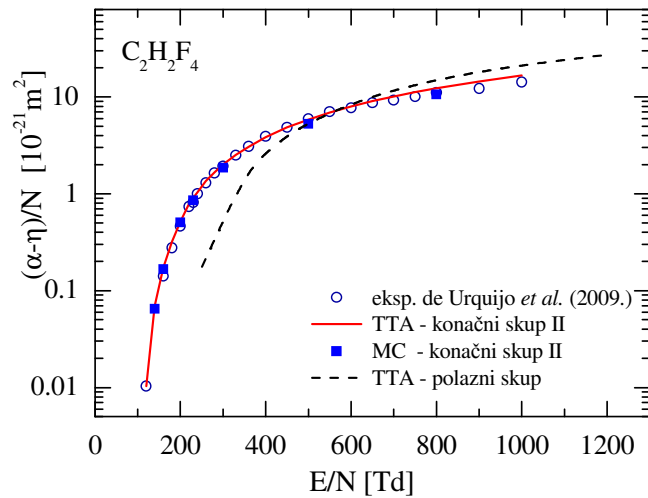


Slika 4.7. Brzina drifta elektrona u funkciji E/N . Poređenje izračunatih i izmjerenih vrijednosti.

Odstupanje TTA u odnosu na MC rezultat je jako malo, izuzev na najvišim vrijednostima E/N , što je i očekivano imajući u vidu nekonzarvativnu prirodu transporta u toj oblasti srednjih energija elektrona i dominantne procese disocijativnih ekscitacija na nešto nižim energijama. Takođe, sasvim očekivano je bolje slaganje MC rezultata sa eksperimentalnim vrijednostima na najvišim vrijednostima redukovanog polja (energija elektrona) s obzirom na činjenicu da se radi o balk vrijednostima.

Da bismo fitovali efektivni koeficijent jonizacije (kako u čistom gasu tako i u smješama sa A_r) modifikovali smo sve neelastične presjeke izuzev jonizacionog. I ova faza modifikacija polaznog skupa presjeka se odvijala u velikom broju ponavljajućih krugova u cilju dobijanja što boljeg stepena slaganja sa mjerenjima, ne samo u čistom

gasu nego u svim smješama, prvenstveno u onima sa malim procentom freona (2% i 5% freona). Drugim riječima, vrlo mala promjena određenog presjeka koja gotovo da ne utiče na jonizacioni koeficijent u čistom gasu, dovodi do velikih promjena u slučaju smješa gdje je freon prisutan u malom procentu. Rezultat ovih proračuna je prikazan na slici 4.8., na kojoj su prikazani proračuni efektivnog koeficijenta jonizacije u funkciji E/N sa polaznim (isprekidana linija) i konačnim skupom presjeka (crvena linija - TTA, plavi kvadrati - MC proračun).



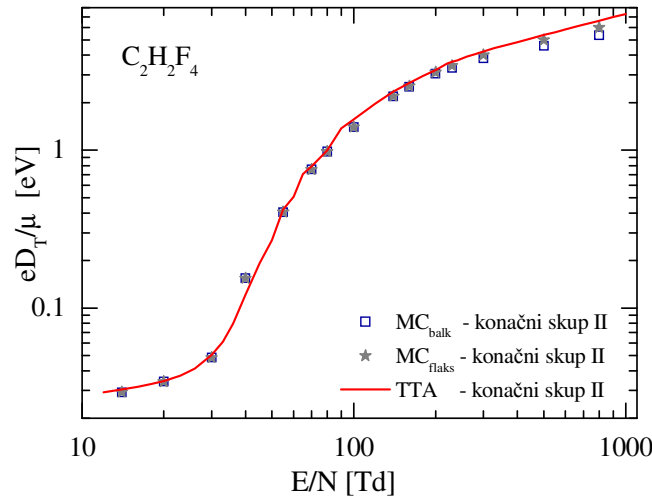
Slika 4.8. Efektivni koeficijent jonizacije u funkciji E/N . Poređenje izračunatih i izmjerenih vrijednosti.

Slično kao i u slučaju brzine drifta, vidimo da polazni skup presjeka nije u mogućnosti da reprodukuje izmjerene vrijednosti de Urquija i saradnika. Odstupanja postoje na gotovo cijelom razmatranom opsegu E/N , dok su najveća u opsegu od 200 Td-400 Td. Kao što vidimo na slici, MC (kao i TTA) rezultat, dobijen konačnim skupom presjeka-SKUP II za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju se dobro slaže sa izmjerenim vrijednostima na cijelom opsegu E/N .

Kao što se vidi sa slike 4.6., „swarm“ analiza je dovela do velikih promjena polaznog skupa presjeka, kako u intenzitetu tako i u obliku pojedinačnih presjeka. Totalni presjek za prenos impulsa sada ima lokalni minimum oko 1eV, na položaju minimuma polaznog presjeka (2.2 eV) je sada lokalni maksimum, dok je na najnižim vrijednostima energije dva puta veći negoli polazni. Vibracione ekscitacije (v_1 , v_2 , v_3) su skalirane istim faktorom ispod 2 eV, dok je na višim energijama njihov intenzitet dodatno smanjen. Ovdje treba imati u vidu da usljed nedostatka eksperimentalnih

podataka za karakterističnu energiju (eD_T/μ) u čistom freonu nismo bili u mogućnosti proizvesti pouzdanije presjeke za vibracione ekscitacije. Presjek za disocijativne ekscitacije je takođe pretrpio značajne promjene odmah nakon energije praga, strmiji je u odnosu na polazni, sa jasno izraženim maksimumom koji je tri puta veći od polaznog.

Na slici 4.9. su prikazane naše izračunate vrijednosti karakteristične energije elektrona u čistom freonu u funkciji E/N . Crvenom linijom je prikazan TTA rezultat dok su simbolima prikazane balk (plavi kvadrati) i flaks (sive zvijezde) vrijednosti MC proračuna sa konačnim skupom-SKUP II presjeka. Vidimo da, na niskim vrijednostima

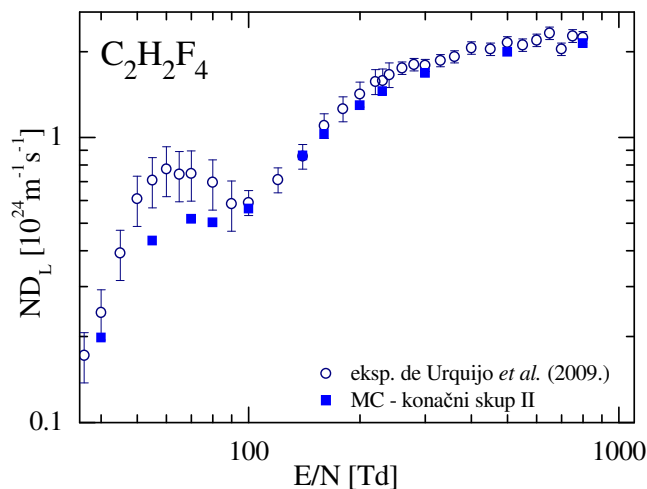


Slika 4.9. Karakteristična energija (eD_T/μ) u funkciji E/N . Poređenje MC balk i flaks vrijednosti. Crvenom linijom je prikazan TTA rezultat.

E/N , nema razlike između balk i flaks komponenti što je posljedica niskih vrijednosti presjeka za zahvat elektrona. Na visokim vrijednostima E/N flaks komponenta karakteristične energije je nešto veća od balk komponente.

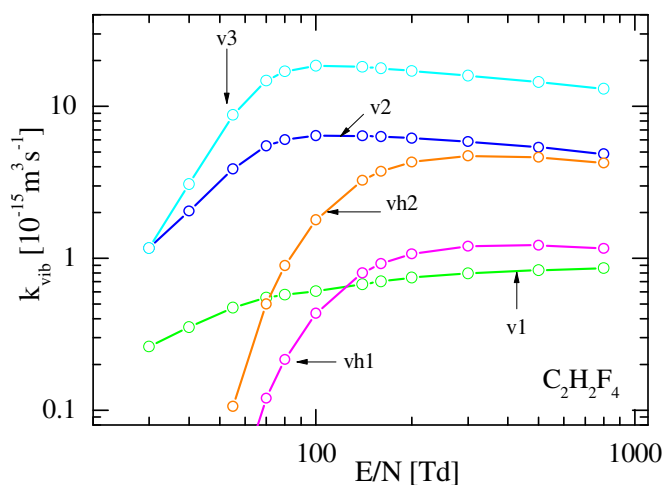
Na slici 4.10. je prikazan longitudinalni difuzioni koeficijent elektrona pomnožen koncentracijom molekula gasa (ND_L) u funkciji E/N . Vidimo da MC vrijednosti (plavi kvadrati) dobijene konačnim skupom presjeka - SKUP II, prate oblik eksperimentalne krive (prazni krugovi) na cijelom opsegu E/N . Za $E/N < 100$ Td izmjerene vrijednosti de Urquija i saradnika su veće negoli naše izračunate, za razliku od viših vrijednosti E/N , gdje je slaganje između eksperimenta i MC proračuna zadovoljavajuće. Poznato je da je u eksperimentima impulsnog Townsendovog tipa teško izmjeriti longitudinalni difuzioni koeficijent sa visokim stepenom tačnosti. Kako

je proizvod ND_L konstantan, porast koncentracije molekula gasa vodi ka smanjenju D_L do dovoljno niskih vrijednosti pri kojima se efekat difuzije preklapa sa propusnim opsegom instrumenta, što dovodi do velike greške mjerenja na niskim E/N .



Slika 4.10. Longitudinalni koeficijent difuzije pomnožen koncentracijom molekula gasa (N). Poređenje izračunatih i izmjerenih vrijednosti.

Na kraju ovog odjeljka, koji je posvećen transportnim koeficijentima u čistom freonu, na slici 4.11. su prikazani MC rezultati brzinskih koeficijenata za procese vibracionih ekscitacija dobijeni konačnim skupom presjeka za freon.



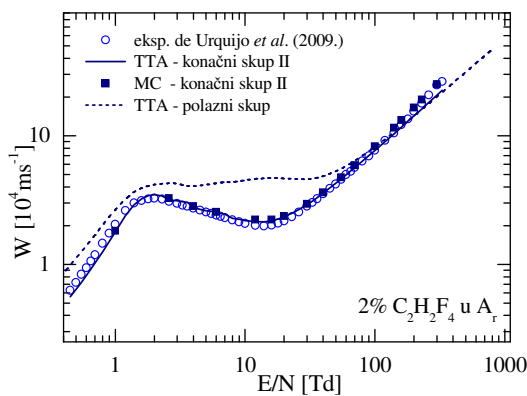
Slika 4.11. Brzinski koeficijenti za procese vibracionih ekscitacija u freonu dobijeni MC simulacijama sa konačnim skupom presjeka za freon.

4.4.2. Transportni koeficijenti u $C_2H_2F_4/A_r$ smješama

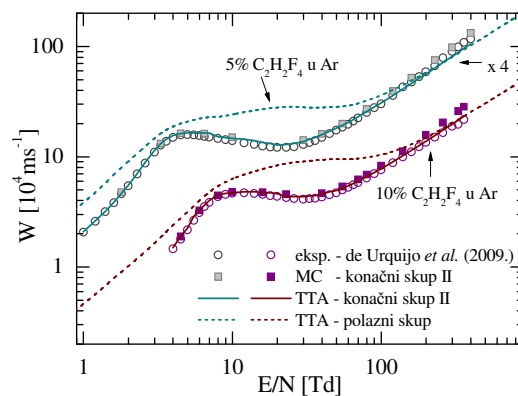
Veoma bitan test kvaliteta i pouzdanosti skupova efektivnih presjeka dobijenih metodom rojeva je metod gasnih smješa, prvenstveno u slučajevima kada je jedna komponenta gasne smješe razrijeđeni gas sa Ramsauer-Townsendovim minimumom, kakav ja A_r . Poznato je da takve smješe imaju kompleksnu strukturu transportnih koeficijenata u funkciji E/N , kao što je npr. negativna diferencijalna provodnost (NDC) (Vrhovac i Petrović, 1996; Robson, 1984; Petrović i ostali, 1984). Drugi razlog našeg interesa i rada na $C_2H_2F_4/A_r$ smješama je dobijanje podataka koji bi bili korisni za modelovanje praktičnih uređaja koji rade sa gasnim smješama. U slučaju A_r , za proračune transportnih koeficijenata smo koristili dobro poznat i testiran Hayashijev (Hayashi, 1992) skup presjeka.

Na slikama 4.12. do 4.19. je prikazano kako konačni (modifikovani) skup presjeka (SKUP II, slika 4.6.) reprodukuje izmjerene vrijednosti transportnih koeficijenata u smješama, za razliku od polaznog skupa.

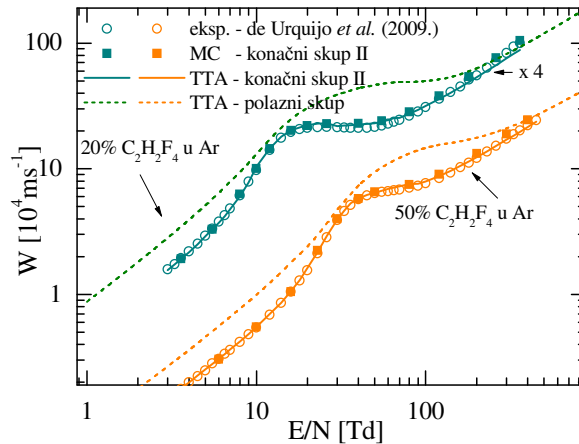
Na slikama 4.12. do 4.14. su prikazani rezultati proračuna brzine drifta u smješama 2%, 5%, 10%, 20% i 50% $C_2H_2F_4$ u A_r . Isprekidanim linijama je prikazan rezultat dobijen polaznim skupom presjeka u TTA aproksimaciji, punim linijama i punim kvadratima TTA i MC rezultat respektivno, dobijen konačnim skupom presjeka za freon, dok su praznim krugovima prikazani rezultati mjerenja de Urquija i saradnika.



Slika 4.12. Brzina drifta elektrona u smješi 2% $C_2H_2F_4$ u A_r . Poređenje izračunatih i izmjerenih vrijednosti.



Slika 4.13. Brzina drifta elektrona u smješama 5% i 10% $C_2H_2F_4$ u A_r . Izračunate i izmjerene vrijednosti za 5% smješu su pomnožene faktorom 4 da bi se izbjeglo preklapanje dva skupa podataka.

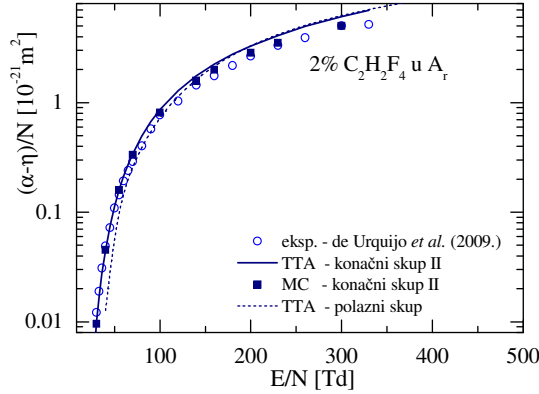


Slika 4.14. Brzina drifta elektrona u smješi 20% i 50% $C_2H_2F_4$ u A_r . Poređenje izračunatih i izmjenjenih vrijednosti. Izračunate i izmjerene vrijednosti za 20% smješu su pomnožene faktorom 4 da bi se izbjeglo preklapanje dva skupa podataka.

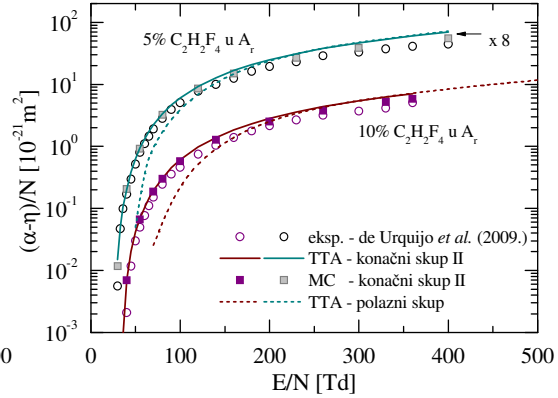
Kao što se vidi na slikama, u slučaju svih pet smješa, slaganje izračunatih i izmjenjenih vrijednosti brzine drifta je dosta dobro na cijelom razmatranom opsegu E/N , za razliku od rezultata dobijenih polaznim skupom presjeka. U slučaju smješe sa najnižim procentom freona (2% $C_2H_2F_4$ u A_r , slika 4.12.) vidimo jasno izraženu pojavu negativne diferencijalne provodnosti (NDC) koju, kao što vidimo na slici, nije predvidio polazni skup presjeka. Rezultati dobijeni polaznim skupom su 1.5 puta veći od izmjenjenih u niskoenergijskom regionu a gotovo dva puta u NDC oblasti (2 Td-20 Td). Slična situacija je i u preostale četiri smješe, s tim što je efekat NDC sve manje izražen kako se povećava procenat freona u smješi, da bi u slučaju najvećeg procenta od 50% iščezao.

Na slikama 4.15. - 4.17. su prikazani rezultati proračuna efektivnog koeficijenta jonizacije u $C_2H_2F_4/A_r$ smješama i poređenje sa izmjenjenim vrijednostima de Urquija i saradnika. Isprekidanim linijama su prikazani TTA rezultati dobijeni polaznim skupom presjeka, punim linijama i punim kvadratima TTA i MC rezultati dobijeni konačnim skupom presjeka, dok su rezultati mjerenja prikazani praznim krugovima. Kao što vidimo na slikama, slaganje MC rezultata dobijenih konačnim skupom presjeka (SET II, slika 4.6.) sa izmjenjenim vrijednostima de Urquija i saradnika je u okviru eksperimentalne greške u slučaju svih pet razmatranih smješa (2%, 5%, 10%, 20% i 50% $C_2H_2F_4$ u A_r). Pretpostavljajući da je presjek za jonizaciju u Bijagijevom polaznom skupu presjeka tačno određen, možemo zaključiti da su ukupni neelastični gubici na

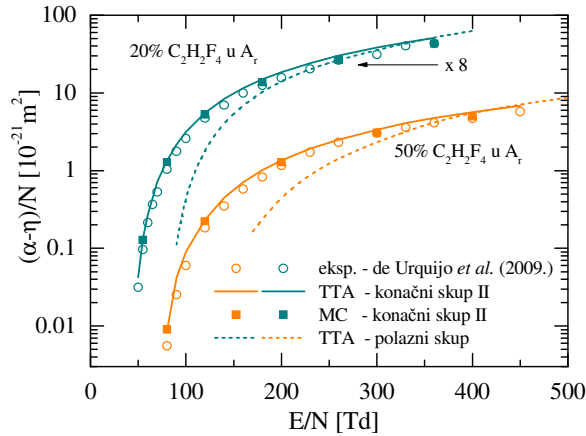
višim srednjim energijama dobro određeni, tj. da su izvršene modifikacije na polaznom skupu presjeka za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju dovele do značajnog poboljšanja stepena slaganja između izračunatih i izmjerenih vrijednosti kako u čistom gasu tako i u njegovim smješama sa A_r .



Slika 4.15. Efektivni koeficijent jonizacije u smješi 2% $C_2H_2F_4$ u A_r . Poređenje izračunatih i izmjerenih vrijednosti.



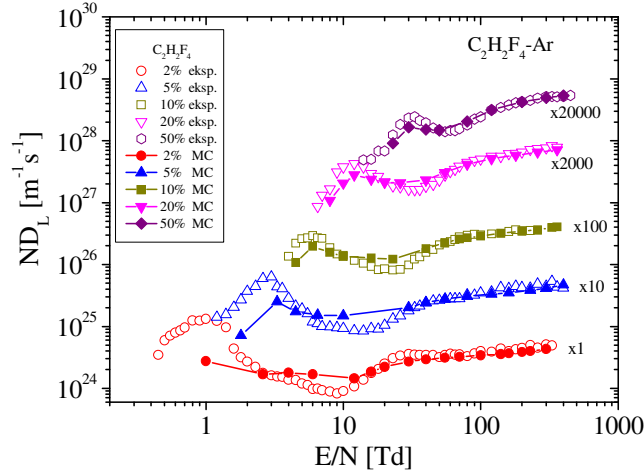
Slika 4.16. Efektivni koeficijent jonizacije u smješama 5% i 10% $C_2H_2F_4$ u A_r . Vrijednosti za 5% smješu su pomnožene faktorom 8 da bi se izbjeglo preklapanje dva skupa podataka.



Slika 4.17. Efektivni koeficijent jonizacije u smješama 20% i 50% $C_2H_2F_4$ u A_r . Poređenje izračunatih i izmjerenih vrijednosti. Vrijednosti za 20% smješu su pomnožene faktorom 8 da bi se izbjeglo preklapanje dva skupa podataka.

Na slici 4.18. je prikazan longitudinalni difuzioni koeficijent pomnožen koncentracijom gasnih molekula (ND_L) u $C_2H_2F_4/Ar$ smješama. Praznim simbolima su prikazane izmjerene vrijednosti de Urquija i saradnika dok su rezultati naših MC proračuna sa konačnim skupom presjeka prikazani punim simbolima. Kao što vidimo na

slici, slaganje sa izmjerenim vrijednostima je jako dobro u slučaju smješe sa malim procentom A_r . Kako se procenat A_r u smješi povećava, u oblasti niskih vrijednosti E/N dolazi do pogoršanja stepena slaganja koje je u slučaju smješa sa 2% i 5% $C_2H_2F_4$ u A_r najveće. Ovakvo ponašanje ND_L je slično ponašanju uočenom u čistom $C_2H_2F_4$ (slika 4.10.) i kao što je već rečeno u prethodnom tekstu ovo neslaganje se može pripisati teškoćama pri mjerenju ovog koeficijenta na niskim vrijednostima E/N .



Slika 4.18. Longitudinalni difuzioni koeficijent u $C_2H_2F_4/A_r$ smješama. Praznim simbolima su prikazane izmjerene vrijednosti de Urquija i saradnika dok su punim simbolima prikazani rezultati MC proračuna. Radi vidljivosti svaki skup podataka je pomnožen odgovarajućim faktorom navedenim na slici.

4.5. MODIFIKACIJA III

U prethodnom tekstu su prikazana dva skupa efektivnih presjeka za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju (SKUP I-slika 4.3. i SKUP II-slika 4.6, pune linije) dobijena metodom rojeva (Šašić i ostali, 2010; 2013) na osnovu izmjerenih transportnih koeficijenata de Urquija i saradnika (de Urquijo i ostali, 2009) u čistom $C_2H_2F_4$ i njegovim smješama sa A_r . Polazni skup presjeka je preuzet iz Biagijeve baze podataka (Biagi, 2007). Oba skupa presjeka, iako dobro fituju izmjerene transportne koeficijente, prvi u čistom gasu a drugi i u smješama sa A_r , imaju određene nedostatke. Naime, SKUP I je dobijen analizom izmjerenih vrijednosti brzine drifta i efektivnog koeficijenta jonizacije u čistom gasu i nije u mogućnosti da reprodukuje izmjerene vrijednosti ovih koeficijenata u smješama sa A_r za razliku od skupa II koji je dobijen u drugom modifikacionom

procesu u kojem su korišćeni i rezultati mjerenja u smješama. Nedostatak je i postojanje jednog efektivnog (fiktivnog) presjeka koji bi trebalo da nadomjesti nedostajuće neelastične procese. Uvođenje fiktivnih presjeka je opravdano, ali se ipak ovaj korak nastoji izbjeći kada god je to moguće. Iako je SKUP II očigledno unapređen i u mogućnosti je da reprodukuje sve izmjerene transportne koeficijente de Urquija i saradnika, ostalo je otvoreno pitanje oblasti niskih energija. Naime, kako nismo imali nikakve eksperimentalne podatke niti teorijska predviđanja energijske zavisnosti presjeka za vibracione ekscitacije nismo bili u mogućnosti detaljnije i tačnije analize niskoenergijske oblasti. Osim toga, oba skupa presjeka su dobijena fitovanjem polaznih presjeka koji predstavljaju ekstrapolaciju podataka za drugi molekul u nedostatku mjerenja ili proračuna za $C_2H_2F_4$. Takođe smo bili nezadovoljni pragovima (energijskim gubicima) za vibracione procese koji su se mogli ekstrapolirati iz analitičkih funkcija u programu Magboltz a koje smo koristili u drugoj fazi. U ovoj, trećoj fazi rada se taj nedostatak otklanja s obzirom na to da smo došli do pragova za vibracione presjeke iz novije literature i da su u okviru naše grupe izvršeni proračuni pragova i presjeka za ekscitacije i jonizaciju kodom Quantemol N (Tennyson i ostali, 2007).

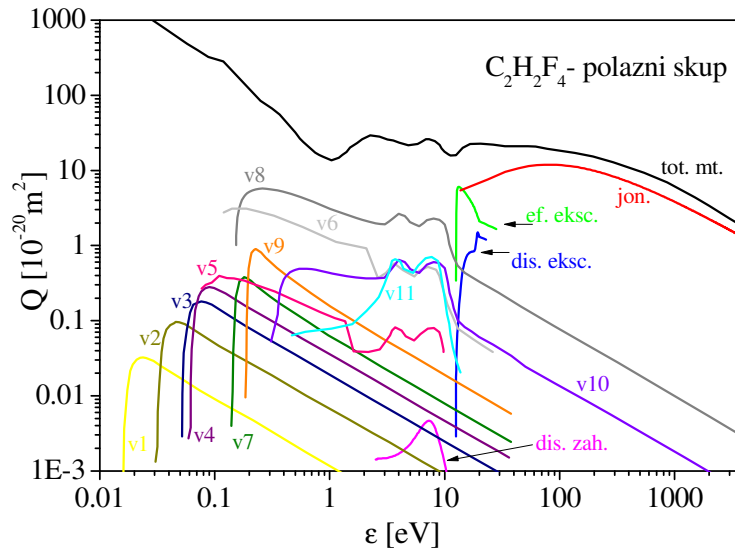
Osnovni cilj treće faze rada na freonskim presjecima je revizija i proširenje izučavanja elektronskih interakcija sa molekulom $C_2H_2F_4$, sa posebnim osvrtom na niskoenergijsku oblast, sa ciljem dobijanja što detaljnijeg skupa efektivnih presjeka čija bi jedinstvenost bila značajno poboljšana. S tim u vezi polazni skup presjeka je značajno izmijenjen i dopunjen novim teorijskim rezultatima za efektivne presjeke nekoliko neelastičnih procesa kao i novim energijskim pragovima za procese vibracionih ekscitacija.

U modifikacionom procesu polaznog skupa presjeka smo koristili dva različita skupa eksperimentalnih podataka odvojeno, oba dobijena uređajima impulsnog Townsendovog tipa. De Urquijo i saradnici (de Urquijo i ostali, 2009) su izmjerili brzinu drifta i efektivni koeficijent jonizacije za čist $C_2H_2F_4$ kao i u njegovim smješama sa A_r (2%, 5%, 10%, 20% i 50 % $C_2H_2F_4$ u A_r), u širokom opsegu E/N (od 0.2 Td-1000 Td). Nažalost, de Urquijo i saradnici u svom radu nisu dali podatke o vrijednosti pritisaka na kojima su mjereni transportni koeficijenti, što bi nam pomoglo u analizi niskoenergijske oblasti gde se pretpostavlja da postoji zahvat u sudaru tri tijela koji bi zavisio od pritiska. Poznat je samo opseg pritisaka na kojima su mjerenja izvršena

(0.4 Torr-30 Torr), iz koga vidimo da nije dovoljno širok, odnosno da su za potrebe našeg rada neophodna mjerenja i na znatno većim pritiscima. Sa druge strane, Basile i saradnici (Basile i ostali, 1991) su izmjerili iste transportne koeficijente u čistom $C_2H_2F_4$, u ograničenom opsegu E/N (20 Td-150 Td), ali su njihovi rezultati dati za pet različitih vrijednosti pritiska (od 10 Torr-480 Torr). Naša analiza ova dva nezavisna skupa eksperimentalnih podataka nije proizvela jedinstven skup efektivnih presjeka za $C_2H_2F_4$. Razlike postoje jedino u niskoenergijskoj oblasti, tačnije u presjeku za elektronski zahvat.

4.5.1. Polazni skup presjeka

Polazni skup presjeka koji smo koristili kao ulazni parametar u iterativnoj proceduri modifikacionog procesa u cilju fitovanja izmjerenih vrijednosti Urquija i saradnika je prikazan na slici 4.19..



Slika 4.19. Polazni skup presjeka za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju. Totalni presjek za prenos impulsa: tot. mt.; vibracione ekscitacije: v1-v11, presjek za efektivne elektronske ekscitacije: ef.eksc.; presjek za disocijativni zahvat: dis. zah.; disocijativne elektronske ekscitacije: dis. eksc.; presjek za jonizaciju: jon.

On predstavlja kompilaciju naših prethodno publikovanih rezultata (Šašić i ostali, 2013.), Biagijevih presjeka koji se mogu naći implementirani u kodu Magboltz 2.8.9. (Biagi, 2010) i novih proračuna. Sastoji se od šesnaest efektivnih presjeka: totalni

presjek za prenos impulsa (tot. mt.), 11 presjeka za vibracione ekscitacije (v1-v11), disocijativna i efektivna elektronska ekscitacija (dis. exsc.; ef. eksc.), disocijativni zahvat (dis. zah.) i presjek za jonizaciju (jon.).

Totalni presjek za prenos impulsa (tot. mt) je rezultat naših prethodno publikovanih rezultata (Šašić i ostali, 2013). Yamada i saradnici (Yamada i ostali, 1998) su u slučaju $C_2H_2F_4$ izračunali frekvencije harmonijskih vibracija od v1-v18. Kako su energijski pragovi u nekim slučajevima bili jako bliski, mi smo ovaj broj smanjili na jedanaest, tako što smo dva ili više procesa vibracionih ekscitacija zamijenili sa jednim, uzimajući za energiju praga najnižu vrijednost. Pošto nam nisu bile poznate energijske zavisnosti presjeka, u slučaju presjeka v1-v4, v7 i v9 smo pretpostavili njihov oblik i magnitudu, u slučaju presjeka v5, v6, i v11 smo uzeli energijsku zavisnost presjeka iz našeg prethodno publikovanog rada (Šašić i ostali, 2013) a za v8 i v10 Biagijeve presjeke (Biagi, 2010). Svim vibracionim procesima su pridruženi odgovarajući Yamadini (Yamada i ostali, 1998) energijski pragovi. U tabeli 4.1. su prikazani energijski pragovi svih vibracionih procesa prikazanih na slici 4.19..

Tabela 4.1. Energijski pragovi za procese vibracionih ekscitacija (Yamada i ostali, 1998)

Q_{vib}	ϵ_{th} [eV]
v1	0.01450
v2	0.02889
v3	0.04740
v4	0.05530
v5	0.07166
v6	0.11500
v7	0.13600
v8	0.15300
v9	0.18100
v10	0.20100
v11	0.40700

Polazni presjeci za procese disocijativnih i elektronskih ekscitacija, koji su na slici 4.19. predstavljeni plavom i zelenom linijom, respektivno, su dobijeni proračunima pomoću Quantemol N koda. Energijski pragovi za oba procesa iznose 12.52 eV. Oblici i

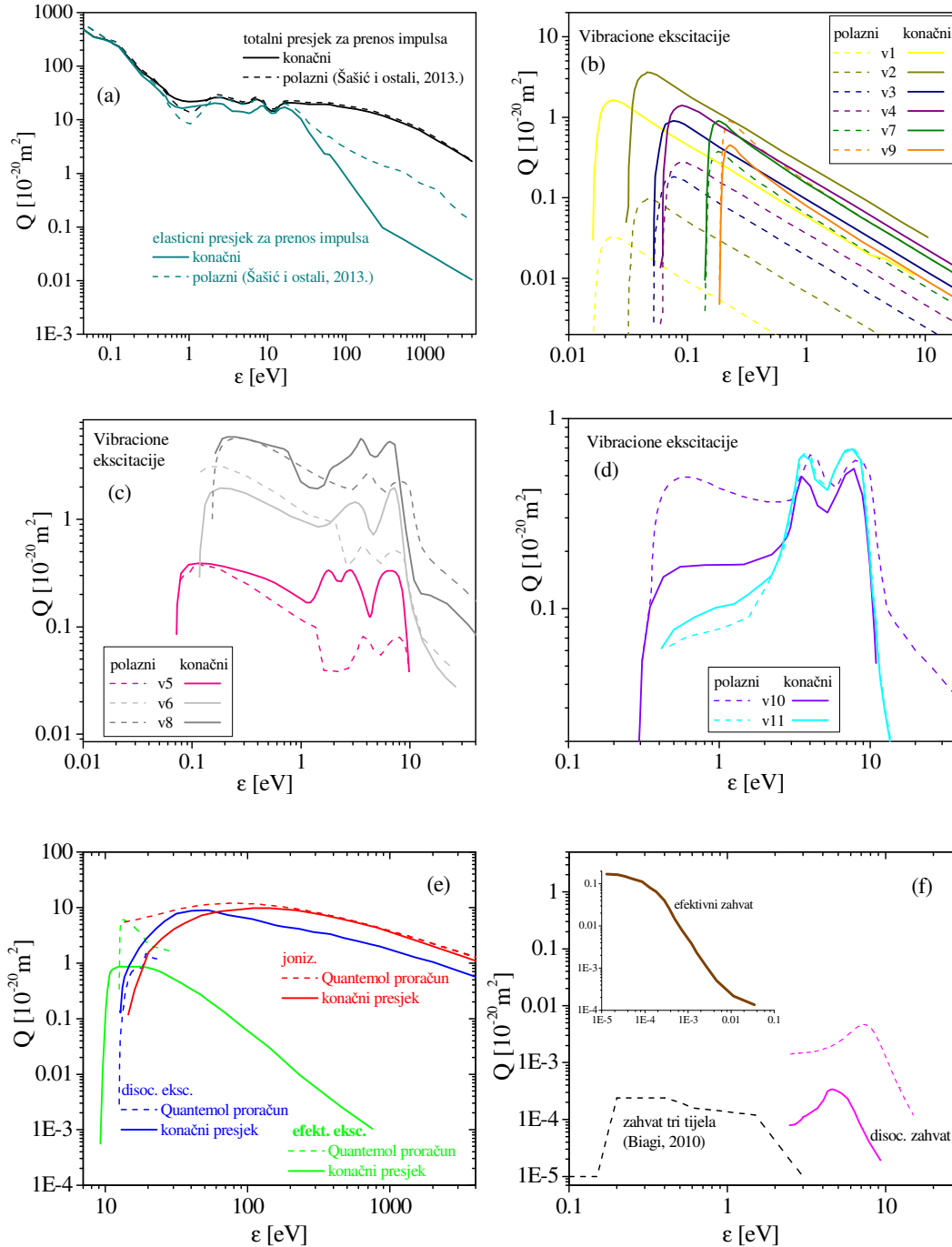
magnituda presjeka za disocijativni zahvat i jonizaciju su takođe dobijeni Quantemol N proračunima koji su za pragove ova dva procesa dali vrijednosti 2.45 eV i 13.45 eV, respektivno.

4.5.2. Modifikacija polaznog skupa

U našem polaznom skupu ove završne revizije freonskih presjeka (slika 4.19.) postoji nekoliko presjeka za vibracione ekscitacije koji se u potpunosti razlikuju od onih publikovanih ranije. Ti efektivni presjeci su dodatno modifikovani u procesu fitovanja eksperimentalnih vrijednosti brzine drifta u smjesama sa A_r . Nakon ovog modifikacionog koraka u kojem su određeni presjeci za vibracione ekscitacije, analizom izmjerenih vrijednosti brzine drifta u čistom gasu određen je totalni presjek za prenos impulsa usljed najveće osjetljivosti drifta u čistom gasu na njega. Modifikacioni proces efektivnih presjeka je nastavljen analizom efektivnog koeficijenta jonizacije, naizmjeničnim iteracijama u čistom gasu i smjesama sa A_r . Presjek za efektivne ekscitacije je pomjeren ka nižim energijama kako bi se uključili efekti nedostajućih neelastičnih procesa. Analiza je pokazala da je energijski prag ovog procesa sada 9.2 eV. Urađena je i njegova ekstrapolacija ka višim energijama. Modifikovani su i presjeci za disocijativne ekscitacije i jonizaciju kao i presjek za disocijativni zahvat. Analiza podataka za efektivni koeficijent jonizacije na najnižim energijama elektrona je pokazala da je neophodno uvesti još jedan proces elektronskog zahvata koji nije predviđen Quantemol N proračunima. Na kraju, elastični presjek za prenos impulsa je dobijen oduzimanjem sume svih konačnih neelastičnih presjeka od totalnog presjeka za prenos impulsa.

Na slikama 4.20. (a), (b), (c), (d) i (f) su prikazana poređenja polaznih presjeka sa konačnim presjecima dobijenim u ovoj završnoj reviziji freonskih presjeka.

Na slici 4.20. (a) je prikazano poređenje totalnog i elastičnog presjeka za prenos impulsa koje smo koristili kao polazne presjeke u ovoj, završnoj fazi rada na freonskim presjecima (isprekidana crna i zelena linija) sa našim konačnim rezultatima (pune linije). Kao što vidimo na slici, minimum u totalnom (kao i elastičnom) presjeku za prenos impulsa više nije tako dubok kao u slučaju polaznog.



Slika 4.20. Poređenje polaznih i konačnih presjeka: (a) totalni i elastični presjek za prenos impulsa; (b, c, d) vibracione eksc.; (e) presjek za jonizaciju, disocijativne i fiktivne eksc.; (f) presjeci za disoc. i efektivni zahvat. Punim linijama su prikazani konačni a isprekidanim linijama polazni presjeci. Na slici (f) je radi poređenja prikazan i presjek za zahvat tri tijela (Biagi, 2010).

Na slikama 4.20. (b), (c) i (d) isprekidanim linijama su prikazani polazni a punim konačni presjeci za procese vibracionih ekscitacija. Kao što vidimo, svi polazni presjeci, izuzev v11 su pretrpjeli značajne promjene u ovoj iterativnoj fazi freonskih presjeka. Konačni presjeci sada imaju prihvatljiviji oblik u domenu rezonance na višim energijama, koji su zajedno sa ostalim modifikovanim presjecima konačnog SKUPA III, prikazanog na slici (4.21.), u mogućnosti da reprodukuju izmjerene transportne koeficijente Urquija i saradnika sa zadovoljavajućim stepenom tačnosti.

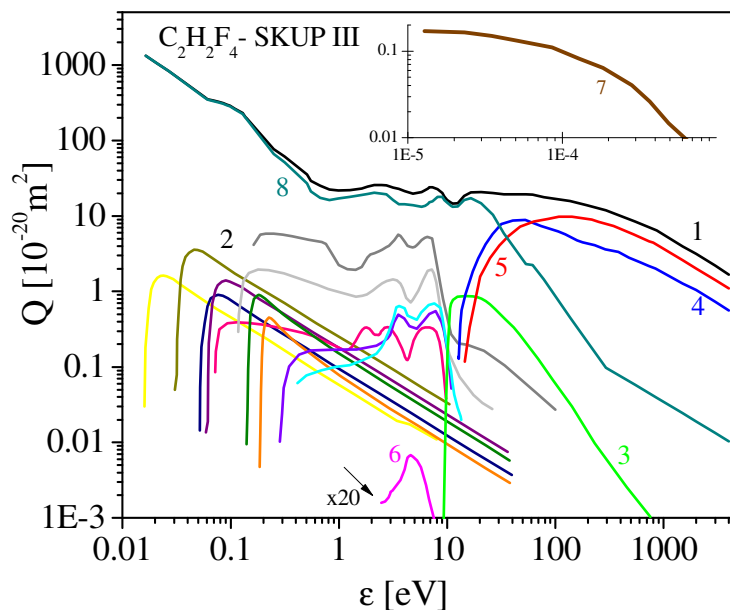
Na slici 4.20. (e) su prikazani polazni (isprekidana linija) i konačni (puna linija) presjeci za disocijativnu ekscitaciju, efektivnu ekscitaciju i jonizaciju. Kao što vidimo na slici, konačni presjek za efektivne ekscitacije (zelena puna linija) je pomjeren ka nižim energijama kako bi se uključili efekti nedostajućih neelastičnih procesa. Za razliku od polaznog, on sada ima nagli porast iz praga sa mnogo širim maksimumom, koji je sada sedam puta manji od predviđenog. Konačni presjek za disocijativne ekscitacije (plava puna linija) je, suprotno efektivnom ekscitacionom presjeku, sedam puta veći u maksimumu od polaznog. Sa slike vidimo da konačni presjek za jonizaciju (puna crvena linija) raste dosta sporije u blizini energije praga u odnosu na polazni, dok mu je intenzitet u tim tačkama oko šest puta manji od Quantemol N proračuna. Vidimo da je efektivni ekscitacioni presjek pretrpio najveće izmjene u odnosu na polazne presjeke. Razlog ovako dramatične promjene se može objasniti velikom osjetljivošću jonizacionog koeficijenta na neelastične procese sa energijskim pragom nižim od jonizacionog.

Na slici 4.20. (f) je prikazano poređenje konačnog presjeka za disocijativni zahvat elektrona (roza puna linija) sa polaznim (roza isprekidana linija). Energija praga za disocijativni zahvat dobijena Qauntemol N proračunima je 2.45 eV što je nešto više od našeg prethodno publikovanog rezultata (1.98 eV). Vrijednost u maksimumu je sada za red veličine manja negoli ona koju je predvidio Quantemol N kod. Na slici je radi poređenja prikazan i Biagijev (isprekidana linija) presjek za zahvat tri tijela. Biagijev presjek za zahvat tri tijela, dat za pritisak od 1 Atm je ovdje prikazan samo radi poređenja, on nije uvršten u konačni skup presjeka koji je dobijen analizom izmjerenih vrijednosti de Urquija i saradnika.

Analiza podataka za efektivni koeficijent jonizacije na najnižim energijama elektrona je pokazala da je neophodno uvesti još jedan proces elektronskog zahvata koji

nije predviđen Quantemol N proračunima. Opravdano je očekivati pojavu zahvata elektrona uz prisustvo trećeg tijela (zahvat tri tijela ili nedisocijativni zahvat) pri njihovom transportu kroz ovako težak gas. Međutim, skup izmjerenih transportnih koeficijenata de Urquija i saradnika, kao što je već ranije rečeno, nije davao dovoljno podataka koji bi opravdao uključivanje ovakvog procesa, dok sa druge strane nismo imali podatak o vrijednostima pritiska na kojima su izvedena mjerenja. Ovaj podatak je neophodan jer zahvat elektrona u prisustvu trećeg tijela jako zavisi od pritiska. Stoga smo, da bi reprodukovali izmjerene vrijednosti koeficijenta zahvata na niskim energijama uključili jedan efektivni presjek za zahvat, prikazan na umetku slike 4.20. (f), koji vjerovatno sadrži efekte oba procesa („two body“ i „three body“). Vrijednost u maksimumu mu je za dva reda veličine veća od maksimuma u disocijativnom zahvatu, zatim naglo opada, tako da je njegov uticaj na veoma niskim srednjim energijama elektrona (manjim od 0.1 eV) zanemariv.

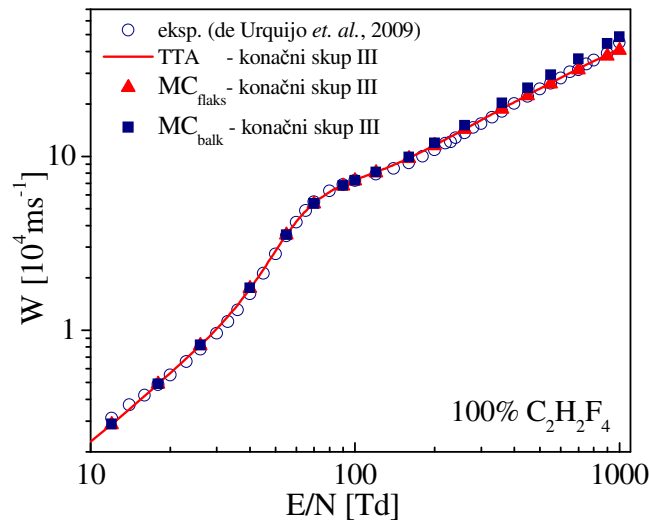
Konačni, kompletni skup presjeka za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju, koji reporučujemo za plazma modelovanje je prikazan na slici 4.21.



Slika 4.21. Konačni skup presjeka (SKUP III) za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju: 1-totalni presjek za prenos impulsa; 2-vibracione ekscitacije; 3-efektivna elektronska ekscitacija; 4-disocijativna ekscitacija; 5-jonizacija; 6-disocijativni zahvat (pomnožen faktorom 20 radi vidljivosti); 7- efektivni zahvat; 8- elastični presjek za prenos impulsa.

4.5.3. Transportni koeficijenti u čistom gasu i njegovim smješama sa A_r dobijeni SKUPOM III

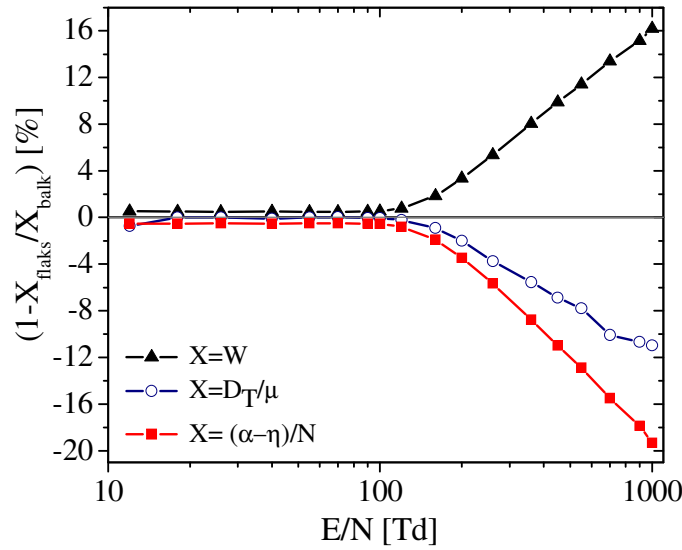
Koristeći konačni skup presjeka za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju, prikazan na slici 4.21. kao ulazni podatak, kodovima Bolsig+ i Monte Carlo smo izračunali vrijednosti transportnih koeficijenata u čistom gasu kao i njegovim smješama sa A_r . Skup presjeka za A_r korišćen u ovim proračunima je poznat i više puta testiran Hayashiev skup (Hayashi, 1992). Svi MC proračuni su urađeni sa 2.5×10^5 početnih elektrona, pri gustini gasa od $3.54 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ i temperaturi 273 K.



Slika 4.22. Brzina drifta u čistom $C_2H_2F_4$ u funkciji E/N . Poređenje TTA i MC proračuna sa izmjerenim vrijednostima de Urquija.

Na slici 4.22. je prikazano poređenje izračunatih vrijednosti brzine drifta sa konačnim presjecima za freon kao ulaznim parametrom (TTA i MC vrijednosti), sa izmjerenim vrijednostima de Urquija i saradnika. Kao što vidimo, postignut je zadovoljavajući stepen slaganja između TTA proračuna i mjerenja, odstupanja su unutar procijenjene eksperimentalne neodređenosti koja iznosi 3% - 5%. Nešto veća odstupanja su vidljiva jedino na ivicama razmatranog opsega E/N , što je i očekivano. Naime, u niskoenergijskoj oblasti, gdje elastični presjek za prenos impulsa opada, dok veliki broj procesa vibracionih ekscitacija naglo raste, TTA aproksimacija ne daje dobre rezultate, o čemu je bilo riječi u poglavlju 2. Slična situacija je i u visokoenergijskoj oblasti u kojoj je presjek za disocijativnu ekscitaciju porediv sa elastičnim, dok je na najvišim

energijama, kao što vidimo na slici 4.21., veći od njega. Vidimo da, ispod 120 Td, razlika između balk i flax vrijednosti brzine drifta je zanemarljiva usljed relativno malih vrijednosti presjeka za zahvat, dok u energijskoj oblasti gdje elektroni dobijaju dovoljno energije da izvrše procese jonizacije balk vrijednosti su veće od flaks, kao što je i očekivano. Najveće odstupanje imamo na 1000 Td koje iznosi 16%. Da bismo ilustrovali efekat nekonzervativnog transporta na slici 4.23. prikazane su razlike između balk i flaks vrijednosti za tri koeficijenta: brzinu drifta, karakterističnu energiju i efektivni koeficijent jonizacije u čistom gasu.

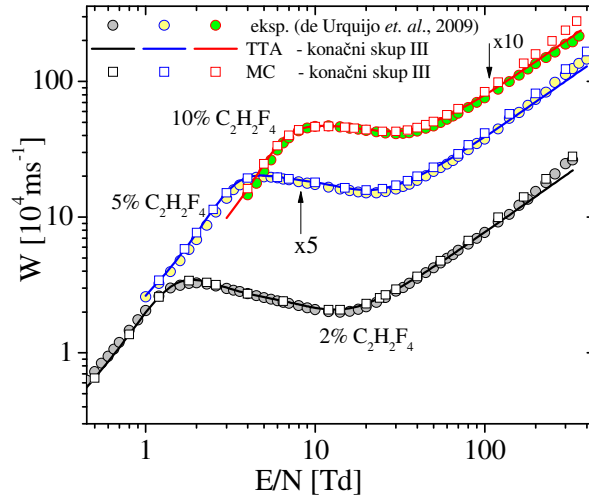


Slika 4.23. Razlike između balk i flaks vrijednosti transportnih koeficijenata za elektrone u $C_2H_2F_4$ u funkciji E/N .

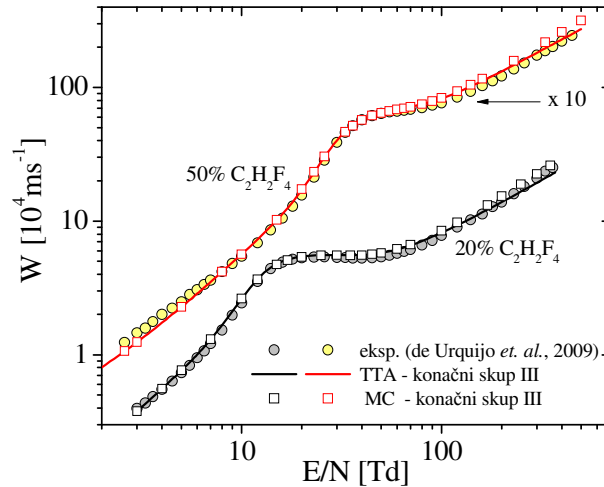
Na slikama koje slijede, svi predstavljeni MC rezultati su balk vrijednosti, ako drugačije nije naglašeno.

Na slikama 4.24. i 4.25. su predstavljene brzine drifta elektrona u $C_2H_2F_4/A_r$ smješama. Sa ovih slika je jasno vidljivo postojanje negativne diferencijalne provodnosti (NDC). Postojanje Ramsauer-Townsendovog minimuma u presjeku za prenos impulsa u A_r te nekoliko procesa vibracionih ekscitacija u freonskim presjecima u toj energijskoj oblasti su dovoljni uslovi za pojavu ovog fenomena. Kao što vidimo na slikama, NDC je najizraženija u smješi sa najmanjim procentom freona, zatim se postepeno smanjuje i iščezava u smješi $50\%C_2H_2F_4+50\%A_r$. Činjenica da je naš konačni skup presjeka za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju u mogućnosti da reprodukuje NDC u smješama, iako se ovaj fenomen ne javlja u čistom gasu, je valjan pokazatelj ispravnosti

načinjenih modifikacija na freonskim presjecima u ovoj posljednjoj reviziji. Na slikama se takođe vidi da je slaganje izračunatih i izmjerenih vrijednosti jako dobro, čak i u NDC oblasti, izuzev rezultata za najniže i najviše vrijednosti E/N u smješama sa 10% i 50% freona. Moguće je, s obzirom na stepen slaganja u ostalim smješama, da ovo odstupanje potiče od neke eksperimentalne greške.



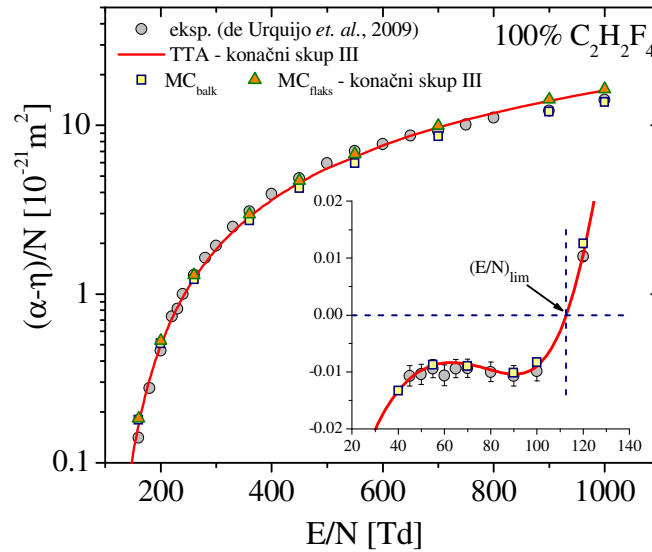
Slika 4.24. Brzina drifta elektrona u $C_2H_2F_4$ -Ar smješama (2%, 5% i 10% $C_2H_2F_4$). Poređenje izmjerenih i izračunatih vrijednosti. Izračunate i izmjerene vrijednosti u slučaju 5% i 10% $C_2H_2F_4$ su pomnožene faktorom 5 i 10 respektivno, da bi se izbjeglo preklapanje linija.



Slika 4.25. Brzina drifta elektrona u $C_2H_2F_4$ -Ar smješama (20% i 50% $C_2H_2F_4$). Poređenje izmjerenih i izračunatih vrijednosti. Izračunate i izmjerene vrijednosti u slučaju 50% $C_2H_2F_4$ su pomnožene faktorom 10, da bi se izbjeglo preklapanje linija.

Na slikama 4.26. do 4.31. su prikazani rezultati proračuna efektivnog koeficijenta jonizacije konačnim SKUPOM III presjeka za freon.

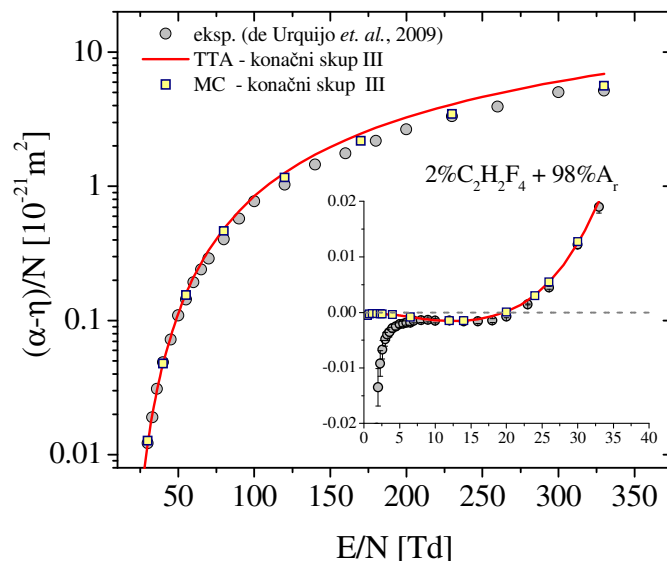
Kao što vidimo na slikama, jako dobar stepen slaganja između izračunatih i izmjerenih vrijednosti je postignut u čistom gasu (slika 4.26). Najveće odstupanje na niskim energijama je u tački $E/N=60$ Td i iznosi 20% (umetak na slici 4.26), dok je na višim energijama 14%, u tački $E/N=900$ Td. U oba ova slučaja, odstupanje je u granici procijenjene eksperimentalne greške. U ostalim posmatranim vrijednostima E/N odstupanje između MC proračuna i izmjerenih vrijednosti je oko 10%, što je još jedna potvrda tačnosti izvršenih modifikacija na freonskim presjecima, u ovom slučaju prvenstveno neelastičnim, na cijelom razmatranom opsegu E/N . Na umetku slike 4.26. vidimo da je granična vrijednost E/N ($(E/N)_{lim}$), odnosno vrijednost pri kojoj su koeficijenti jonizacije i zahvata jednaki, 112.5 Td, što je u skladu sa vrijednosti koju su dobili Basile i saradnici (Basile i ostali, 1991).



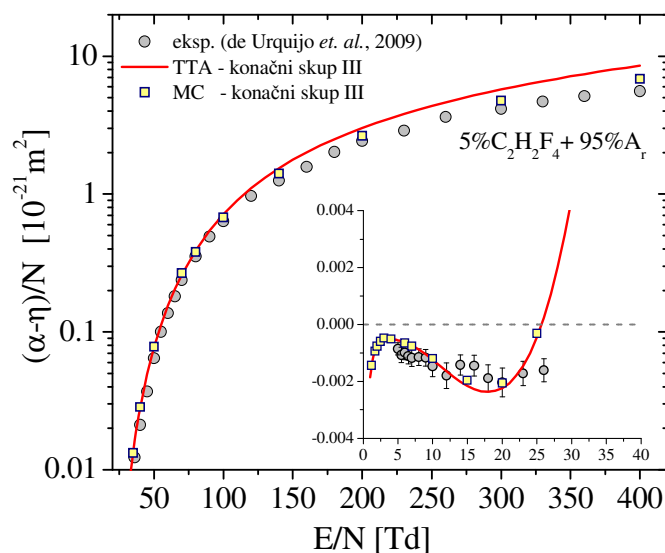
Slika 4.26. Efektivni koeficijent jonizacije za elektrone u čistom $C_2H_2F_4$. Poređenje naših izračunatih (TTA i MC) vrijednosti sa izmjerenim vrijednostima de Urquija i saradnika. Rezultati za niskoenergijsku oblast su prikazani na umetku slike.

Stepen slaganja izračunatih i izmjerenih vrijednosti u slučaju smješa (slike 4.27.-4.31.) se razlikuje od smješe do smješe. U smješi 2% $C_2H_2F_4$ sa A_r (slika 4.27.), jako dobro slaganje je postignuto za $E/N > 6$ Td, gdje su odstupanja manja od 10%. Sa druge strane, za $E/N < 6$ Td naši fitovi izmjerenih vrijednosti su loši. U ostalim vrijednostima E/N stepen slaganja je jako dobar, sa 10%-20% odstupanja u odnosu na eksperiment, izuzetak je jedino oblast E/N u kojoj su koeficijent jonizacije i zahvata poredivi. Slična situacija je i u smješama 20% i 50% $C_2H_2F_4$ sa A_r (slike 4.30. i 4.31.). U slučaju smješe 10% $C_2H_2F_4$ sa A_r (slika 4.29.), na umetku slike na kojoj je prikazana niskoenergijska

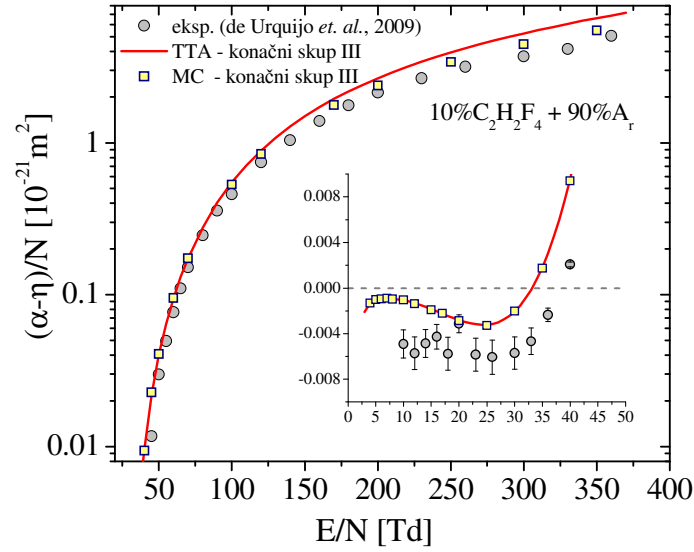
oblast, vidimo da se naša kriva sistematski razlikuje od eksperimentalne krive, i da se one preklapaju samo u jednoj tački ($E/N=20$ Td). Za $E/N>50$ Td kvalitet našeg fita je isti kao i u ostalim smjesama.



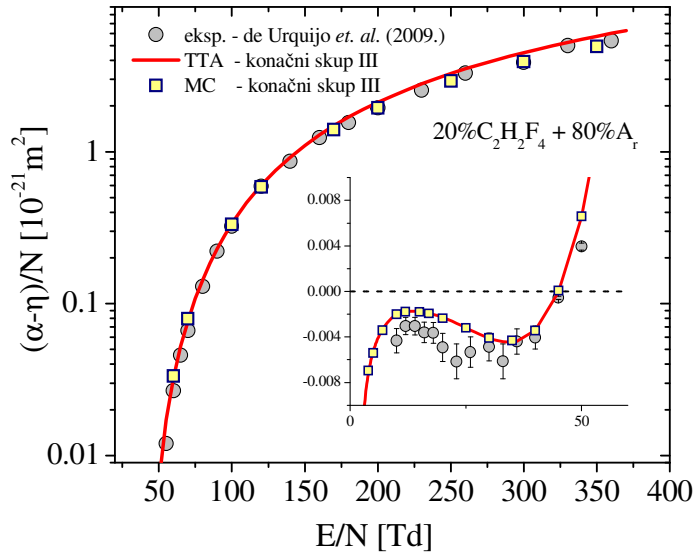
Slika 4.27. Efektivni koeficijent jonizacije za elektrone u smješi $2\%C_2H_2F_4+98\%A_r$. Poređenje naših izračunatih (TTA i MC) vrijednosti sa izmjerenim vrijednostima de Urquija i saradnika. Rezultati za niskoenergijsku oblast su prikazani na umetku slike.



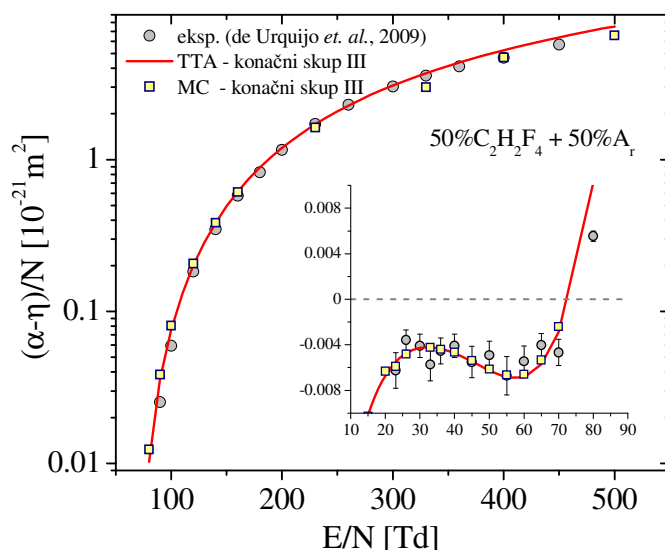
Slika 4.28. Efektivni koeficijent jonizacije za elektrone u smješi $5\%C_2H_2F_4+95\%A_r$. Poređenje naših izračunatih (TTA i MC) vrijednosti sa izmjerenim vrijednostima de Urquija i saradnika. Rezultati za niskoenergijsku oblast su prikazani na umetku slike.



Slika 4.29. Efektivni koeficijent jonizacije za elektrone u smješi $10\%C_2H_2F_4+90\%A_r$. Poređenje naših izračunatih (TTA i MC) vrijednosti sa izmjerenim vrijednostima de Urquija i saradnika. Rezultati za niskoenergijsku oblast su prikazani na umetku slike.



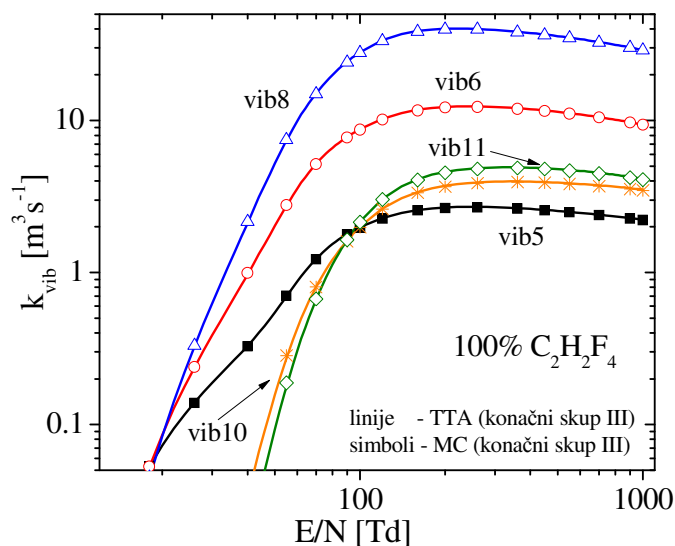
Slika 4.30. Efektivni koeficijent jonizacije za elektrone u smješi $20\%C_2H_2F_4+80\%A_r$. Poređenje naših izračunatih (TTA i MC) vrijednosti sa izmjerenim vrijednostima de Urquija i saradnika. Rezultati za niskoenergijsku oblast su prikazani na umetku slike.



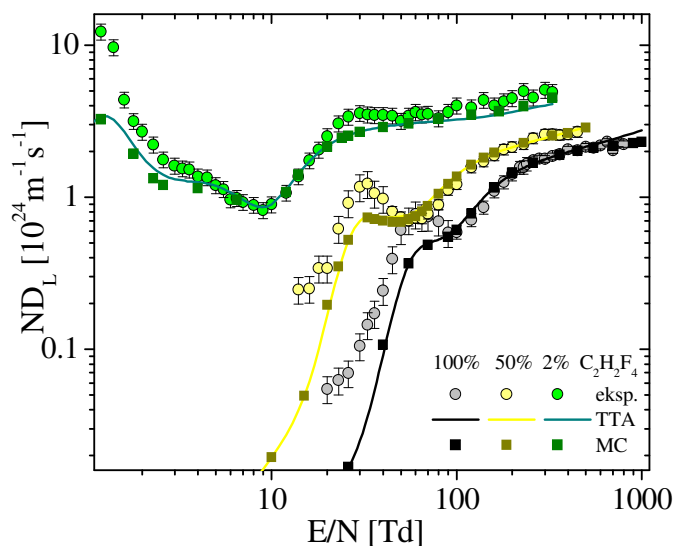
Slika 4.31. Efektivni koeficijent jonizacije za elektrone u smješi $50\%C_2H_2F_4+50\%A_r$. Poređenje naših izračunatih (TTA i MC) vrijednosti sa izmjerenim vrijednostima Urquija i saradnika. Rezultati za niskoenergijsku oblast su prikazani na umetku slike.

Kao zaključak, uzimajući u obzir rezultate prikazane na prethodnim slikama, možemo reći da su energijski gubici određeni sa relativno visokim stepenom tačnosti. Određena poboljšanja su moguća, prvenstveno u blizini energijskih pragova procesa elektronskih ekscitacija kao i u oblasti najnižih energija uključivanjem i rotacionih i super-elastičnih procesa, za šta su potrebna i dodatna mjerenja karakteristične energije ili npr. ekscitacionih koeficijenata.

Pored rezultata proračuna brzine drifta i efektivnog koeficijenta jonizacije, prikazanih u prethodnom tekstu, konačnim skupom presjeka kao ulaznim podatkom, izračunali smo niz transportnih i brzinskih koeficijenata u čistom gasu kao i u smješama sa A_r . Neki od njih su: srednja energija elektrona, karakteristična energija, koeficijent longitudinalne difuzije, brzinski koeficijenti za sve neelastične procese. Radi ilustracije, ovdje ćemo prikazati brzinske koeficijente za pet procesa vibracionih ekscitacija u čistom gasu (slika 4.32.) i longitudinalni difuzioni koeficijent pomnožen koncentracijom gasa u čistom gasu i smješama 2% i $50\%C_2H_2F_4$ sa A_r (slika 4.33.)



Slika 4.32. Brzinski koeficijenti za procese vibracionih ekscitacija u čistom $C_2H_2F_4$: vib5 ($\epsilon_{th}=0.07166$ eV), vib6 ($\epsilon_{th}=0.115$ eV), vib8 ($\epsilon_{th}=0.153$ eV), vib10 ($\epsilon_{th}=0.2$ eV), i vib11 ($\epsilon_{th}=0.407$ eV). Proračuni su urađeni sa MC kodom (simboli) i Bolsig+ kodom (linije).



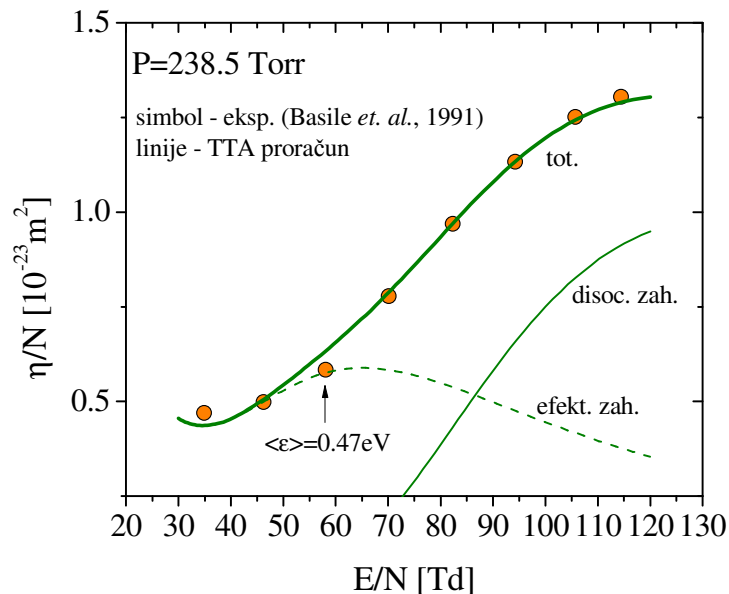
Slika 4.33. Poređenje izračunatih i izmjenjenih vrijednosti longitudinalnog difuzionog koeficijenta pomnoženog koncentracijom gasa u čistom $C_2H_2F_4$ i smješama 2% i 50% $C_2H_2F_4$ sa Ar.

4.5.4. Swarm analiza izmjerenih vrijednosti Basilea i saradnika

U okviru ove završne revizije efektivnih presjeka za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju analizirali smo i skup izmjerenih transportnih koeficijenta Basilea i saradnika (Basile i ostali, 1991) u čistom gasu. Mjerenja su izvedena u eksperimentu impulsnog Townsendovog tipa, na pet različitih vrijednosti pritiska (10 Torr-480 Torr), ali u veoma ograničenom opsegu E/N (20 Td-150 Td). S obzirom na to i činjenicu da su izmjerena samo dva transportna koeficijenta (brzina drifta i efektivni koeficijent jonizacije) jasno je da je pomoću njihovih podataka moguće analizirati samo niskoenergijsku oblast. Polazni skup presjeka koji smo koristili u ovaj analizi je naš konačni skup presjeka (SKUP III) prikazan na slici 4.21., izuzev efektivnog presjeka za zahvat. Umjesto efektivnog (linija 7 na slici 4.21.) uključili smo presjek za zahvat tri tijela izveden od strane Biagija (isprekidana crna linija na slici 4.20. (f)) (Biagi, 2010), koji smo normalizovali u skladu sa odgovarajućim pritiskom gasa, dok smo za polazni disocijativni zahvat uzeli vrijednosti naših Quantemol N proračuna (isprekidana roza linija na slici 4.20. (f)). Naša analiza je pokazala da Biagijev presjek za zahvat tri tijela ne može korektno reprodukovati izmjerene vrijednosti koeficijenta zahvata Basilea i saradnika na različitim pritiscima, kada se skalira na željeni pritisak. Naime, zavisnost efektivnog koeficijenta jonizacije, pa samim tim i koeficijenta zahvata nije linearna, čak ni na najnižim energijama, tako da možemo pretpostaviti da pored zahvata elektrona uz prisustvo trećeg tijela postoji još neki proces zahvata na niskim energijama koji utiče na ponašanje koeficijenta zahvata. Nažalost, za ovakvo tvrđenje nemamo dovoljno valjane podatke. Naš Quantemol N kod ne predviđa postojanje još nekog procesa zahvata elektrona pored procesa sa energijskim pragom 2.45eV. Sa druge strane, nije moguće uključiti ovaj nedostajući proces razdvajanjem uticaja zahvata tri tijela od uticaja nedostajućeg procesa usljed ograničenog broja eksperimentalnih tačaka (E/N) u kojima je izmjeren koeficijent zahvata. Pri pritisku od $p=238.5$ Torr, na primjer, date su svega tri izmjerene vrijednosti u niskoenergijskoj oblasti (kao što vidimo na slici 4.34.), a na nižim pritiscima i manje.

Na slici 4.34. je prikazano kako naš konačni skup presjeka (SKUP III) sa modifikovanim presjecima za efektivni i disocijativni zahvat reprodukuje imjerene vrijednosti koeficijenta zahvata Basilea i saradnika. Simbolima su prikazane izmjerene

vrijednosti dok je punom linijom prikazan konačni TTA rezultat koji predstavlja zbir koeficijenta za disocijativni (tanka linija) i efektivni zahvat (isprekidana linija) i kao što vidimo na slici slaganje je jako dobro.

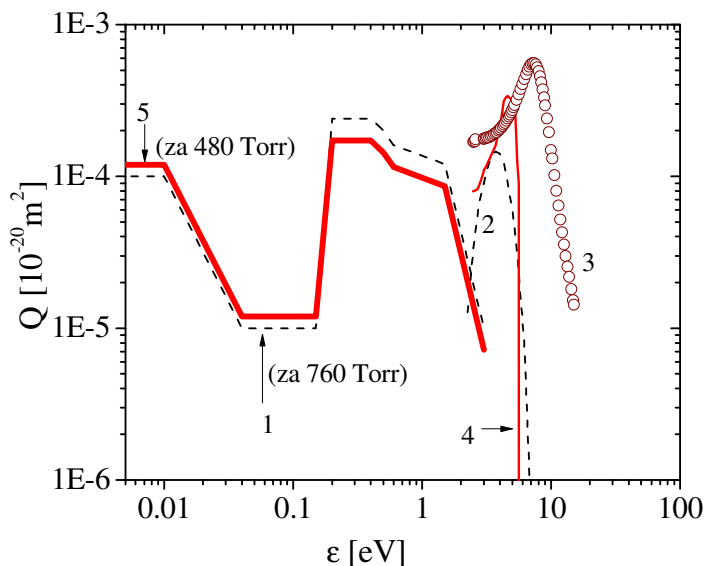


Slika 4.34. Koeficijent zahvata elektrona u $C_2H_2F_4$. Simbolima su prikazane izmjerene vrijednosti Basilea i saradnika (Basile i ostali, 1991) dok su linijama prikazani naši TTA proračuni. Ukupni koeficijent zahvata (debela linija) je zbir koeficijenta za disocijativni (tanka linija) i efektivni (isprekidana linija) zahvat.

S obzirom na razloge navedene u prethodnom tekstu, u ovoj našoj analizi smo Biagiev presjek za zahvat tri tijela posmatrali kao efektivni, koji u sebi nosi doprinos više od jednog nekonzervativnog procesa. Modifikovali smo ga u cilju fitovanja ekperimentalnog rezultata Basilea i saradnika pri pritisku od 480 Torr, i kao što vidimo na slici 4.35. (debela crvena linija) njegova energijska zavisnost je ista kao i polazna Biagieva. Vidimo da polazi iz nulte energije i ima intenzitet $1.19 \times 10^{-24} \text{ m}^2$, zatim opada za red veličine pri energiji od 0.04 eV i raste do maksimuma na energiji od 0.2 eV. Polazni presjek za disocijativne ekscitacije prikazan praznim krugovima na slici 4.35. je takođe pretrpio značajne izmjene i po obliku i po intezitetu. Konačni presjek za disocijativne ekscitacije je prikazan tankom crvenom linijom dok su isprekidanim linijama prikazani Biagievi presjeci za zahvat tri tijela i disocijativni zahvat.

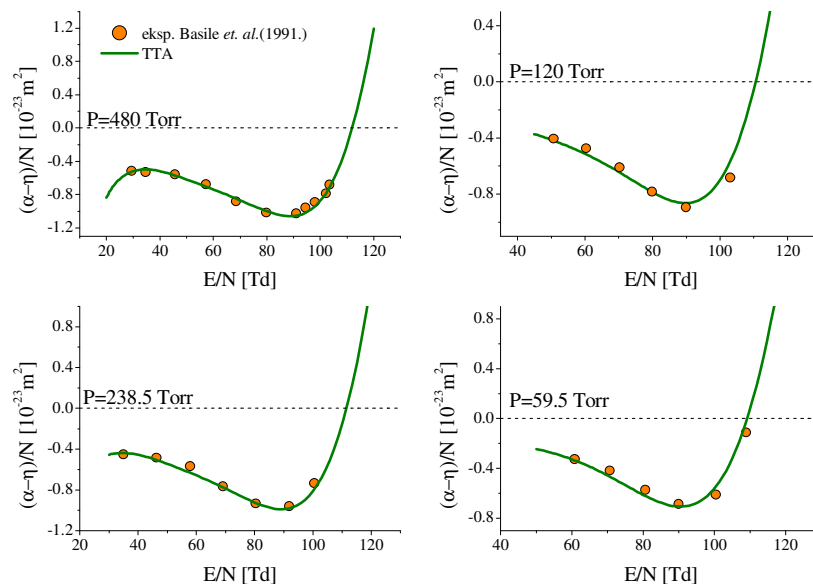
Naša analiza izmjerenih vrijednosti efektivnog koeficijenta jonizacije Basilea i saradnika je pokazala da su presjeci za zahvat dobijeni ovim modifikacionim procesima,

crvena debela linija-presjek za zahvat tri tijela i crvena tanka linija-presjek za disocijativnu ekscitaciju, slika 4.35., u mogućnosti da reprodukuju izmjerene vrijednosti na pritiscima 59.5 Torr, 120 Torr i 238.5 Torr, kada se efektivni zahvat dobijen za pritisak od 480 Torr skalira koeficijentima 0.38, 0.66 i 0.875, respektivno.



Slika 4.35. Konačni presjeci za zahvat elektrona na molekuli $C_2H_2F_4$: 1-Biagiev presjek za zahvat tri tijela dobijen za pritisak 760 Torr; 2-Biagiev disocijativni zahvat; 3-naš polazni presjek za disocijativne ekscitacije dobijen Quantemol N proračunima; 4-naš konačni presjek za disocijativni zahvat; 5-naš konačni presjek za efektivni zahvat dobijen za pritisak gasa od 480 Torr.

Na slici 4.36. je prikazano poređenje naših finalnih TTA rezultata i izmjerenih vrijednosti Basilea i saradnika za efektivni koeficijent jonizacije na pritiscima 480 Torr, 120 Torr, 238.5 Torr i 59.5 Torr. TTA rezultati su dobijeni Bolsig+ kodom sa konačnim presjecima za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju prikazanih na slici 4.21., u kojima su presjeci za zahvat zamijenjeni sa konačnim presjecima za zahvat (slika 4.35.), koje smo dobili analizom Basileovih podataka, pri čemu je na određenom pritisku efektivni zahvat skaliran pripadajućim koeficijentom. Vidimo da je u svim slučajevima postignut jako dobar stepen slaganja u odnosu na izmjerene vrijednosti. Maksimalno odstupanje u odnosu na eksperiment imamo za poslednju tačku pri pritisku od 120 Torr koje iznosi 16%.



Slika 4.36. Poređenje između izmjerenih (Basile et al. 1991) i izračunatih vrijednosti efektivnog koeficijenta jonizacije za elektrone u $C_2H_2F_4$. Proračuni su urađeni sa Bolsig+ kodom sa konačnim skupom presjeka kao ulaznim parametrom (slike 4.21. i 4.35).

4.6. ZAKLJUČAK

U ovoj glavi je razmatran transport elektrona kroz neutralan gas $C_2H_2F_4$, bilo čist ili u smješama sa A_r različitog procentualnog sastava, pod dejstvom DC redukovanog električnog polja.

U uvodnom dijelu su navedeni ciljevi i motivacija rada, sa posebnim osvrtom na efektivne presjeke i transportne koeficijente. Primjena ovog gasa koja je višestruka, nedostatak podataka u literaturi, bilo da se radi o mjerenjima ili teorijskim proračunima, dostupnost najnovijih mjerenja de Urquija i saradnika (de Urquijo i ostali, 2009) su polazna osnova kojom smo se vodili u ovim našim istraživanjima.

Drugi odjeljak je posvećen polaznom skupu efektivnih presjeka za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju koji smo preuzeli iz baze podataka Biagija (Biagi, 2007). Ovaj skup presjeka se sastoji iz pet presjeka za vibracione ekscitacije, jonizaciju, disocijativne ekscitacije, elastični presjek za prenos impulsa, dok smo totalni presjek za prenos impulsa dobili kao sumu elastičnog i svih neelastičnih presjeka. Skup smo dopunili presjekom za

zahvat elektrona na C_2F_6 , koji smo skalirali faktorom 0.05. Proračunom transportnih koeficijenata u čistom gasu, kodom Elendif (Morgan i Penetrante, 1990), sa Biagijevim skupom kao ulaznim parametrom, uvidjeli smo značajna odstupanja u odnosu na izmjerene vrijednosti de Urquija i saradnika na cijelom razmatranom opsegu E/N.

U trećem odjeljku je data prva faza modifikacionih procesa Biagijevog skupa u cilju fitovanja izmjerenih vrijednosti brzine drifta i efektivnog koeficijenta jonizacije de Urquija i saradnika u čistom gasu. Za proračun transportnih koeficijenata su korišćeni kodovi Elendif i naš MC simulacioni kod. Konačni skup presjeka (SKUP I) je prikazan na slici 4.3. punim linijama i kao što vidimo na slici, modifikovani su svi presjeci sem jonizacionog. Uveden je i jedan fiktivni ekscitacioni presjek usljed nemogućnosti fitovanja jonizacionog koeficijenta u određenim energijskim opsezima. Ovaj skup presjeka, iako dobro reprodukuje eksperimentalne vrijednosti u čistom gasu, nije u mogućnosti da reprodukuje one dobijene u smješama sa A_r , odnosno nije dobro energijski određen. Kako smo imali dostupne i izmjerene vrijednosti transportnih koeficijenata u smješama prešli smo na drugu fazu modifikacionog procesa koja je prikazana u odjeljku četiri.

Dakle, druga faza modifikacija freonskih presjeka, koja se zasniva na metodi gasnih smješa je prikazana u odjeljku četiri. Analizom izmjerenih vrijednosti brzine drifta i efektivnog koeficijenta jonizacije u $C_2H_2F_4/A_r$ smješama (2%, 5%, 10%, 20% i 50% $C_2H_2F_4$ u A_r) dobijen je novi skup presjeka (SKUP II) prikazan na slici (4.6.) punim linijama. U odnosu na SKUP I svi presjeci su dodatno modifikovani, dok je efektivni presjek za elektronske ekscitacije isključen. Sa konačnim skupom presjeka je izračunat kompletan skup transportnih i brzinskih koeficijenata u funkciji E/N. Neki od tih rezultata su prikazani u odjeljku 4.4.1. i 4.4.2.. U svim slučajevima je postignut zadovoljavajući stepen slaganja između izračunatih i izmjerenih vrijednosti, odnosno SKUP II je u mogućnosti da reprodukuje sve izmjerene transportne koeficijente de Urquija i saradnika, kako u čistom gasu tako i u njegovim smješama sa A_r , kao i da predvidi pojavu negativne diferencijalne provodnosti (slike 4.12.; 4.13.; 4.14.).

U petom odjeljku ove glave su prikazani rezultati završne revizije efektivnih presjeka za $e^-/C_2H_2F_4$ interakciju. Naime, iako su skupovi presjeka (SKUP I i SKUP II) u mogućnosti da reprodukuju izmjerene vrijednosti brzine drifta i efektivnog koeficijenta jonizacije, prvi u čistom gasu a drugi i u smješama sa A_r , oba imaju

nedostatak koji se odnosi na niskoenergijsku oblast. S tim u vezi, cilj ove završne revizije je poboljšati skup presjeka sa posebnim osvrtom na oblast niskih energija. Polazni skup presjeka korišćen u analizi izmjerenih transportnih koeficijenata de Urquija i saradnika, u ovoj trećoj fazi modifikacionog procesa, predstavlja kompilaciju naših prethodno publikovanih rezultata, odnosno SKUPA II (Šašić i ostali, 2013), i novih proračuna dobijenih Quantemol N kodom. Uključeni su novi presjeci za disocijativne ekscitacije, efektivne ekscitacije i jonizaciju (slika 4.20. (e)), kao i presjek za disocijativni zahvat (slika 4.20. (f)), čije postojanje je predvidio Quantemol N kod, dok je šest presjeka za vibracione ekscitacije (slike 4.20. (b), (c), (d)) uključeno, vodeći se proračunima vibracionih frekvencija Yamade i saradnika (Yamada i ostali, 1998). Takođe je uključen i jedan efektivni presjek za zahvat koji ima prag u nultoj energiji (slika 4.20. (f)) i bez koga je bilo nemoguće poboljšati stepen slaganja u niskoenergijskoj oblasti. Nizom modifikacionih procesa novoformiranog polaznog skupa, dobijen je konačni, kompletan skup presjeka (SKUP III), prikazan na slici 4.21.. Sa ovim skupom presjeka je izračunat skup transportnih i brzinskih koeficijenata u čistom gasu i smješama sa A_r , kodom Bolsig+ i našim MC kodom. Rezultati ovih proračuna su prikazani na slikama 4.22. - 4.33., i kao što se vidi na slikama, završna revizija freonskih presjeka je dala skup koji dobro fituje veliki broj transportnih koeficijenata na cijelom posmatranom opsegu E/N . U oblasti niskih energija, stepen slaganja izračunatih i izmjerenih vrijednosti efektivnog koeficijenta jonizacije je značajno poboljšan, izuzetak je jedino smješa $10\%C_2H_2F_4$ u A_r (slika 4.29.). Granična vrijednost $((E/N)_{lim})$ od 112.5 Td, koju daje naš proračun sa preporučenim skupom presjeka je u skladu sa vrijednosti Basilea i saradnika.

Konačni rezultat ove analize je skup dobijen u trećoj analizi. Činjenica da i prethodna dva skupa dobro fituju eksperimentalne podatke je posljedica nejednoznačnosti rezultata analize metodom rojeva. Naime, može se uvijek naći skup presjeka koji će na zadovoljavajući način da opiše transportne koeficijente ali u ograničenom domenu (ograničenja u E/N , smješama, ili drugim faktorima). Poboljšanjem ulaznih podataka dobija se sve bolji i bolji konačni skup presjeka. Tako vidimo da je u fazi dva skup koji je opisao transport u čistom freonu bio neadekvatan za smješe sa argonom. Takođe je važno unijeti sve druge podatke iz literature koji bi popravili opis presjeka. U drugom skupu su zanemareni vibracioni gubici ispod

100 meV, a uvedeni su efektivni gubici sa visokim pragom (koji je nerealan). Unošenjem podataka iz literature dobili smo nekoliko vibracionih presjeka koji su i dalje efektivni (spajaju više procesa sličnog praga) ali koji na realniji način proširuju domen važenja presjeka na niže energije.

Pored mjerenja de Urquija i saradnika, u petom odjeljku ove glave su analizirani i rezultati mjerenja efektivnog koeficijenta jonizacije Basilea i saradnika (Basile i ostali, 1991), koji su dati u dosta uskom intervalu E/N (20-150 Td), ali na pet različitih vrijednosti pritiska (10 Torr-480 Torr). U ovoj našoj analizi freonskih presjeka nismo uspjeli proizvesti jedan skup koji bi istovremeno fitovao oba skupa izmjerenih podataka (de Urquija i Basilea). Razlika postoji jedino u oblasti niskih energija, odnosno u presjeku za zahvat, koji u ovom drugom slučaju zavisi od pritiska. Na slici 4.35., crvenom debelom linijom je prikazan konačni efektivni presjek za zahvat dobijen fitovanjem efektivnog koeficijenta jonizacije Basilea na pritisku 480 Torr, polazeći od Biagijevo presjeka za zahvat tri tijela, koji je dat za 760 Torr, dok je tankom crvenom linijom prikazan konačni presjek za disocijativne ekscitacije. Naša analiza je pokazala da su ovako izvedeni presjeci za zahvat, zajedno sa našim preporučenim SKUPOM III presjeka za freon u mogućnosti da reprodukuju izmjerene vrijednosti Basilea i saradnika na pritiscima 59.5 Torr, 120 Torr i 238.5 Torr, kada se efektivni zahvat koji smo dobili za pritisak od 480 Torr skalira sa koeficijentima 0.38, 0.66 i 0.875, respektivno. Rezultati ovih proračuna su prikazani na slici 4.36 .

5. TRANSPORT ELEKTRONA U DIMETIL ETRU (CH_3OCH_3) I NJEGOVI SMJESAMA SA ARGONOM (Ar) I NEONOM (Ne)

5.1. UVOD

U ovom poglavlju su prikazani rezultati dobijeni razmatranjem transporta roja elektrona u dimetil etru ($\text{DME-CH}_3\text{OCH}_3$), kao i njegovim smjesama sa Ar i Ne (20% i 50%DME u Ar i 50%DME u Ne), pod dejstvom konstantnog spoljašnjeg električnog polja, ukrštenog konstantnog električnog i magnetnog polja, kao i pod dejstvom vremenski zavisnih ukrštenih električnih i magnetnih polja ortogonalne konfiguracije. Koristeći se izmjerenim vrijednostima brzine drifta i koeficijenta jonizacije Oettinger i saradnika (Oettinger i ostali, 1998) u DC električnom polju, kako u čistom DME tako i u gore navedenim smjesama, primijenili smo metodu rojeva (opisanu u glavi 2, poglavlje 2.7.) za dobijanje efektivnih presjeka za e^-/DME interakciju. Polazni skup presjeka za rasijanje elektrona na molekuli DME smo preuzeli iz baze podataka Biagija (Biagi, <http://consult.cern.ch/writeup/magboltz/magboltz-10.0.2.f>), dok smo efektivne presjeke za Ar i Ne preuzeli iz LXcat baze podataka (<http://www.lxcat.laplace.univ-tlse.fr>), za Ar iz Hayashieve (Hayashi database, www.lxcat.net, retrived on October 17, 2014.) a za Ne iz Morganove baze podataka (Morgan database, www.lxcat.net, retrived on October 17, 2014.). Izabrani polazni skup presjeka za DME smo modifikovali do dobijanja što boljeg stepena slaganja između izračunatih i izmjerenih transportnih koeficijenata, kako u čistom gasu tako i u njegovim smjesama sa Ar i Ne . Za proračun transportnih koeficijenta smo koristili kompjuterski kod ELENDF (Morgan i Penetrante, 1990) detaljno opisan u glavi 2, poglavlje 2.5., koji se zasniva na rješavanju Boltzmannove jednačine u aproksimaciji dva člana (TTA) i naš MC simulacioni kod, detaljno opisan u glavi 2, poglavlje 2.6, koji se zasniva na MC tehnici koja spada u egzaktne tehnike. Kako se rješenja Boltzmannove jednačine u TTA ne mogu smatrati egzaktnim, u procesu modifikacije polaznog skupa presjeka za DME smo uglavnom koristili rezultate dobijene MC tehnikom, iako je ovaj izbor nepraktičan zbog dužine trajanja same simulacije. Rezultati dobijeni kodom ELENDF su nam služili u nekim međukoracima grubih podešavanja tj. više kao „vodič za oči”. Na većini slika

prikazanih u ovoj disertaciji, pa tako i u slučaju DME, prikazani su i rezultati dobijeni u TTA, uglavnom zbog poređenja rezultata koje ona daje sa rezultatima neke egzaktne tehnike (u našem slučaju MC), dok su svi naši krajnji preporučeni rezultati, kako presjeka tako i transportnih i brzinskih koeficijenata dobijeni MC tehnikom.

Nadalje, sa modifikovanim skupom presjeka za e^-/DME interakciju, našim MC kodom smo izračunali transportne i brzinske koeficijente u DC ukrštenim električnim i magnetnim poljima, ortogonalne konfiguracije. Ovi proračuni su urađeni za pet različitih vrijednosti redukovano magnetnog polja ($B/N=100 \text{ Hx}$, 200 Hx , 500 Hx , 1000 Hx i 2000 Hx ; $1 \text{ Hx}=10^{-27} \text{ Tm}^3$), pri čemu je za svaku od navedenih vrijednosti B/N varirano električno polje u opsegu od 50 Td do 2000 Td .

Izračunat je i kompletan skup transportnih i brzinskih koeficijenata za smjesu $20\% \text{DME}+80\% A_r$ u ukrštenim, vremenski zavisnim električnim i magnetnim poljima za jednu vrijednost amplitude redukovano električnog polja od 100 Td . Pri toj izabranoj vrijednosti amplitude E/N razmatran je uticaj frekvencije polja, koju smo mijenjali u opsegu od 10 MHz do 1000 MHz , pri konstantnoj vrijednosti amplitude redukovano magnetnog polja od 1000 Hx , kao i u slučaju odsustva magnetnog polja. Proučavan je i uticaj magnetnog polja, kojeg smo pri konstantnoj vrijednosti amplitude redukovano električnog polja od 100 Td , pri frekvenciji polja od 100 MHz , mijenjali u opsegu od 100 Hx do 2000 Hx .

Proračun transportnih koeficijenta u DC i RF ukrštenim električnim i magnetnim poljima je jako značajan sa stanovišta modelovanja plazmi kako u istosmjernim tako i u RF poljima usljed sve veće primjene ovih plazmi u poluprovodničkoj industriji kao i primjene ovog gasa u detektorima visokoenergijskih čestica.

Postoji nekoliko razloga zbog kojih smo se odlučili za proučavanje transportnih karakteristika elektrona u ovam gasu. Prije svega, radi se o nedovoljnoj zastupljenosti ovog gasa u literaturi, imajući u vidu njegovu veliku primjenu. Podaci o transportnim koeficijentima su rijetki i potiču uglavnom iz druge polovine dvadesetog vijeka. Slična je situacija i sa efektivnim presjecima, bilo da se radi o mjerenjima ili teorijskim proračunima, a podaci koji se mogu naći u literaturi se uglavnom odnose na uske opsege energije.

DME je jedan od najvećih organskih molekula u međuzvjezdanom prostoru dok je njegova koncentracija u oblasti nastanka zvijezda značajna (Peetars i ostali, 2006), te

bi poznavanje efektivnih presjeka za rasijanje u ovom gasu značajno doprinijelo razumijevanju evolucijskog ciklusa.

Sa druge strane, ovaj gas predstavlja potencijalnu zamjenu za fosilna goriva čijim je neopravdanim korištenjem opstanak života na zemlji značajno ugrožen. Potraga za obnovljivim izvorima energije koji ne bi bili štetni po okolinu postaje neophodna i očekuje se da oni ili umanje ili uspore efekat globalnog zarijavanje planete na kojoj živimo. DME se može dobiti ekstrakcijom iz „jatropha” sjemena ili dehidracijom metanola (Verbek i Van der Weide, 1997), te ovaj gas, usljed njegove izuzetno male štetnosti po okolinu i usljed visokog cetanskog broja (55), predstavlja alternativno gorivo za dizel motore (Verbek i Van der Weide, 1997; Mittal i ostali, 2008). Kako korišćenje biogoriva zahtijeva optimizaciju procesa sagorijevanja u motorima, pri čemu je interakcija njihovih molekula sa elektronima jako bitna kao pokretački proces u većini motora (Hansen i ostali, 2009), jasno je da je poznavanje apsolutnih vrijednosti efektivnih presjeka za sudare elektrona sa ovim molekulima od ključnog značaja za razumijevanje samog procesa.

Dimetil etar se takođe primjenjuje u čestičnim detektorima, prvenstveno u MSGC-ima (Micro Strip Gas Chamber) (Geijsberts i ostali, 1991; Miyamoto i ostali, 1999; Angelini i ostali, 1994), koji su sastavni dio centralnog sistema CMS-a (Compact Muon Solenoid) i ATLAS-a (A Toroidal LHC Apparatus), a koji su, sa druge strane, dijelovi velikog hadronskog sudarača (LHC-Large Hadron Collider). Oed (Oed, 1988) je još 1987. godine uveo takve gasne komore mikrotrakaste strukture (MSGC), dok su Angelini i ostali (Angelini i ostali, 1989) ukazali na mogućnost njihove primjene za detekciju čestica, otvarajući time put njihovog korištenja kao tragača („trackera”) u fizici visokih energija. Za detekciju i praćenje naelektrisanih kao i neutralnih čestica u visoko luminoznim hadronskim sudaračima, operativne gasne smješe bi trebale da budu takve da imaju visoku primarnu jonizaciju i što je moguće manju transverzalnu difuziju. Idealan slučaj bi bio kada bi brzina drifta bila saturisana ili se vrlo malo mijenjala sa promjenom električnog i magnetnog polja. Smješa bi takođe trebalo da bude rashlađena („quenched”) da bi se izbjegli sekundarni efekti kao što su emisija pod dejstvom polja i pozadinskih fotona, čiji je krajnji cilj dobiti stabilno umnožavanje broja elektrona. Poznato je da su etan, izobutan i dimetil etar dobri „quencheri” sa helijumom (Cindro i ostali, 1991; Vav’ra i ostali, 1993). DME je gas sa visokom gustinom primarno

jonizovanih klastera (55/cm) (Bouclier i ostali, 1989), srednje ukupne jonizacione gustine od 150 e^-/cm , ima najveći odnos broja primarnih i broja sekundarnih elektrona nastalih lavinskim procesima (tzv. „gas gain”) od svih ispitanih organskih „quencher”, što ga čini dobrim kandidatom za detektore visokoenergijskih čestica.

DME se još koristi i u GEM (Gas Electron Multiplier) detektorima koje je razvio Sauli još 1996. godine (Sauli, 1997), kao i u LCP-GEM (Liquid Cristal Polymer GEM) detektorima koji predstavljaju poboljšanu verziju izvornih, a razvili su ih Takeuchi i saradnici (Takeuchi i ostali, 2012; 2014), gdje su kao izolator koristili polimerne tečne kristale, omogućivši tako njihovu primjenu u satelitskim misijama.

S obzirom na sve gore navedeno, poznavanje transportnih karakteristika elektrona i efektivnih presjeka za e^-/DME interakciju bi svakako pomoglo u odabiru gasa ili procentualnog sastava gasne smješe neophodne za optimalan rad čestičnih detektora. Kako ovi detektori rade u uslovima ukrštenih električnih i magnetnih polja korisno je poznavanje transportnih karakteristika i u tom slučaju da bi se izbjegle nepotrebne aproksimacije i ekstrapolacije neadekvativnih rezultata.

Velika primjena ovog gasa navedena u prethodnom tekstu i njegove osobine kao potencijalnog ekološkog gasa su svakako dovoljan razlog da se istraživanja vezana za DME nastave.

5.2. PREGLED LITERATURE, TRANSPORTNI KOEFICIJENTI I EFEKTIVNI PRESJECI

Kao što je u prethodnom tekstu već rečeno, jedan od motiva proučavanja transportnih karakteristika elektrona u DME je nedovoljna zastupljenost ovog gasa u literaturi, imajući u vidu njegovu potencijalno veliku primjenu. Podaci o izmjeranim vrijednostima transportnih koeficijenata koji se mogu naći u literaturi potiču iz druge polovine dvadesetog vijeka, dok podataka novijeg datuma nema.

Brzinu drifta elektrona u DME mjerili su Cottrell i Walker (Cottrell i Walker, 1965) i Villa (Villa, 1983), Bradbery-Nielsen tehnikom. Cindro i saradnici (Cindro i ostali, 1991) su mjerili brzinu drifta u čistom DME kao i u DME/ H_e smjesama različitog procentualnog sastava, dok su Oettinger i saradnici (Oettinger i ostali, 1998) impulsnom

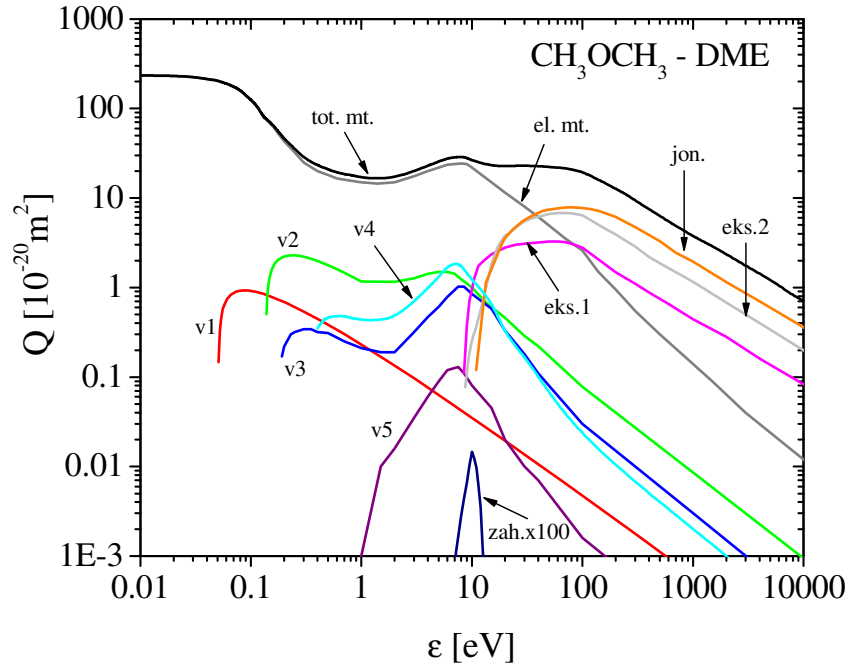
Townsendovom tehnikom mjerili brzinu drifta u čistom DME kao i DME/Ar i DME/Ne smjesama.

Townsendov energijski koeficijent (srednja energija elektrona/srednja energija molekula gasa) u čistom DME su mjerili Cottrell i Walker (Cottrell i Walker, 1967), mjereći radijalnu difuziju driftujućih elektrona kroz gas pod dejstvom električnog polja. Townsendov (jonizacioni) koeficijent su mjerili Sharma i Sauli (Sharma i Sauli, 1992; 1993) u DME/Ar smjesama, dok su Oettinger i saradnici, impulsnom Townsendovom tehnikom (Oettinger i ostali, 1998) mjerili ovaj koeficijent u čistom DME kao i njegovim smjesama sa Ar i Ne .

Kao i u slučaju transportnih koeficijenata, podaci o efektivnim presjecima za e/DME interakciju koji se mogu naći u literaturi su oskudni, bilo da se radi o mjerenim vrijednostima ili teorijskim proračunima. Koizumi i saradnici (Koizumi i ostali, 1986) su pomoću jonizacione komore i sinhrotronog zračenja izmjerili fotoapsorpcioni efektivni presjek u opsegu od 30 nm do jonizacionog potencijala ($\sim 120\text{ nm}-130\text{ nm}$). Mjereći apsolutni fotoapsorpcioni efektivni presjek u opsegu 52 nm-77 nm, Kameta i saradnici (Kameta i ostali, 1992) su dobili apsolutni fotojonizacioni i efektivni presjek za disocijaciju neutrala. Feng i saradnici (Feng i ostali, 2000) su, koristeći visoko rezoluciju ($\sim 0.05\text{ eV FWHM}$ - širina na poluvisini) dipolnu (e^+ , e^-) spektroskopiju u opsegu 5 eV-32 eV izmjerili apsolutni fotoapsorpcioni efektivni presjek, dok su za dobijanje nešto šireg spektra, od ultraljubičastog, preko vakuumski ultraljubičastog do oblasti mekog X-zračenja, u opsegu energija od 5 eV-200 eV koristili nešto slabiju rezoluciju ($\sim 1\text{ eV FWHM}$). Sugohara i saradnici (Sugohara i ostali, 2013) su metodom ukrštenih snopova mjerili diferencijalni, integralni i presjek za prenos impulsa u slučaju elastičnog rasijanja u opsegu 100 eV-1000 eV, pri uglovima rasijanja 5° - 130° . Apsolutne vrijednosti diferencijalnog efektivnog presjeka za elastično rasijanje elektrona na molekuli DME su dobili korištenjem „relative flow technique” (RTF), dok su integralni i presjek za prenos impulsa dobili direktnom numeričkom integracijom izmjerenih vrijednosti diferencijalnog efektivnog presjeka. U radu su prikazane i teorijski dobijene vrijednosti diferencijalnog, integralnog i presjeka za prenos impulsa u energijskom opsegu 1 eV-1000 eV. Sa druge strane, jedini kompletan skup presjeka za rasijanje e^- na molekuli DME koji smo našli u literaturi potiče iz Biagijeve baze podataka (Biagi, 1998; <http://consult.cern.ch/writeup/magboltz/magboltz-10.0.2.f>).

5.3. POLAZNI SKUPOVI PRESJEKA

Polazni skup presjeka koji smo koristili za proučavanje transportnih karakteristika elektrona u čistom DME, kao i u njegovim smjesama sa argonom i neonom, a koji smo preuzeli iz Biagijeve baze podataka (Biagi, 1998; <http://consult.cern.ch/writeup/magboltz/magboltz-10.0.2.f>), je prikazan na slici 5.1.



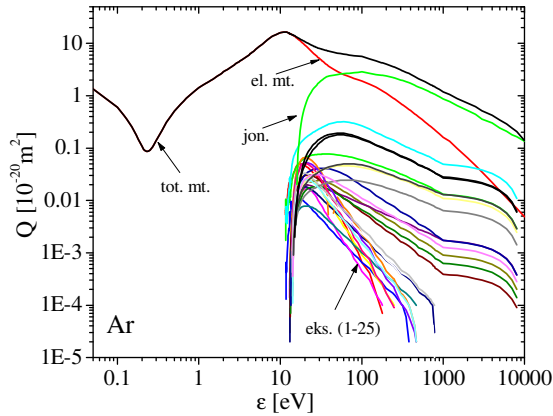
Slika 5.1. Polazni skup presjeka za e^-/DME interakciju (Biagi, 1998; <http://consult.cern.ch/writeup/magboltz/magboltz-10.0.2.f>). Totalni presjek za prenos impulsa: tot. mt.; elastični presjek za prenos impulsa: el. mt.; vibracione ekscitacije: v1, v2, v3, v4 i v5; presjek za zahvat: zah.x100 (uvećan 100 puta radi vidljivosti); elektronske ekscitacije: eks.1, eks.2; presjek za jonizaciju: jon.

Ovaj skup uključuje pet efektivnih presjeka za vibracione ekscitacije (v1, v2, v3, v4 i v5), dva presjeka za elektronske ekscitacije (eks.1 i eks.2), presjek za zahvat (zah.x100, na slici je prikazan uvećan 100 puta radi vidljivosti), presjek za jonizaciju (jon.) i elastični presjek za prenos impulsa (el. mt.). Totalni presjek za prenos impulsa (tot. mt.), koji nije dat u Biagijevom skupu, smo dobili kao sumu elastičnog i svih neelastičnih efektivnih presjeka. U bazi podataka iz koje smo preuzeli početni skup presjeka, nisu navedeni izvori za pojedinačne procese, niti metod pomoću kojeg su dobijeni. U tabeli 5.1. su prikazani energijski pragovi navedenih neelastičnih procesa.

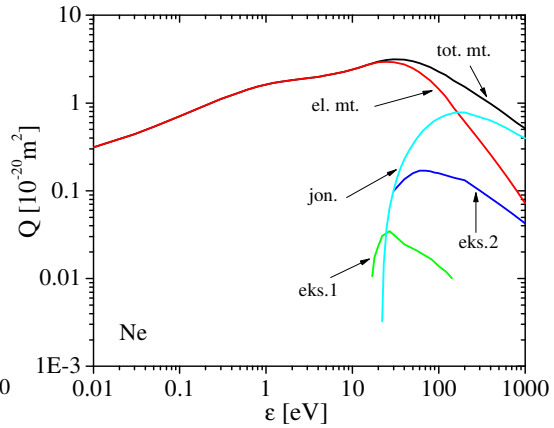
Tabela 5.1. Energijski pragovi za neelastične procese

proces	v1	v 2	v 3	v 4	v 5	eks.1	eks.2	zah.	jon.
ε_{th} (eV)	0.051	0.137	0.18	0.349	0.529	7.7	8.5	6.85	10.04

Efektivni presjeci za e^-/Ar i e^-/Ne interakciju su prikazani na slikama 5.2. i 5.3. respektivno. Sa navedenim skupovima presjeka kao ulaznim podacima izračunali smo transportne koeficijente u čistom DME i smješama sa Ar i Ne , prvo u TTA aproksimaciji kodom ELENDIF, zatim i našim MC simulacionim kodom. Poređenje rezultata brzine drifta i jonizacionog koeficijenta dobijenih polaznim skupom presjeka za e^-/DME interakciju i izmjerenih vrijednosti Oettinger i saradnika su prikazani u sljedećem odjeljku.



Slika 5.2. Efektivni presjeci za e^-/Ar interakciju (Hayashi database, www.lxcat.net, retrived on October 17, 2014.)

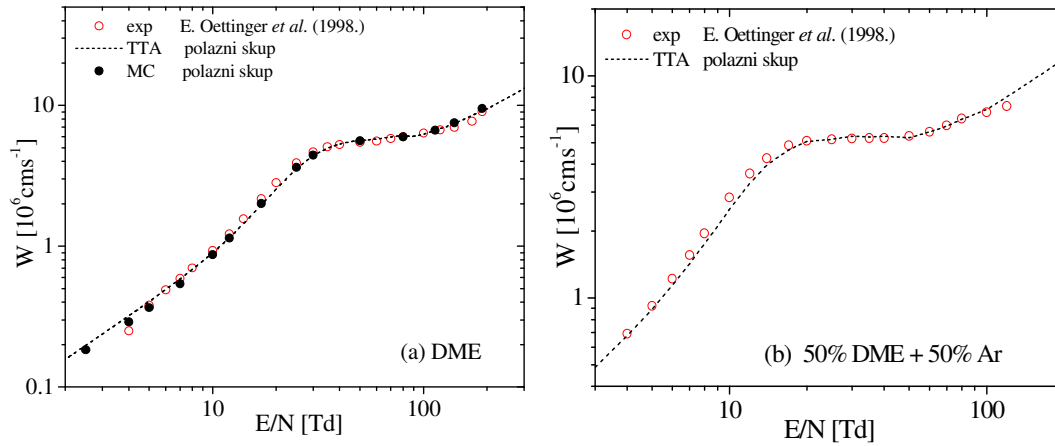


Slika 5.3. Efektivni presjeci za e^-/Ne interakciju (Morgan database, www.lxcat.net, retrived on October 17, 2014.)

5.3.1. Transportni koeficijenti dobijeni polaznim skupom presjeka u konstantnom (DC) električnom polju

Na slici 5.4. su prikazane vrijednosti brzine drifta elektrona: (a) u čistom DME, (b) u smješi 50%DME+50%Ar, dobijene polaznim skupom presjeka za DME, prikazanih na slici 5.1. i skupom presjeka za Ar , slika 5.2.. Isprekidanom linijom su prikazane TTA, a punom MC vrijednosti. Poređenjem naših izračunatih vrijednosti sa izmjerenim vrijednostima Oettinger i saradnika (Oettinger i ostali, 1998) može se

zaključiti da je slaganje na višim vrijednostima E/N , (40 Td i više, u slučaju čistog DME i 17 Td i više, u slučaju smješe 50%DME+50%Ar) dosta dobro, dok na nižim vrijednostima E/N postoje mala odstupanja, odakle se može zaključiti da bi modifikacija totalnog (kao i elastičnog) presjeka za prenos impulsa na nižim srednjim energijama elektrona dovela do poboljšanja stepena slaganja izmjerenih i izračunatih vrijednosti u slučaju čistog DME.

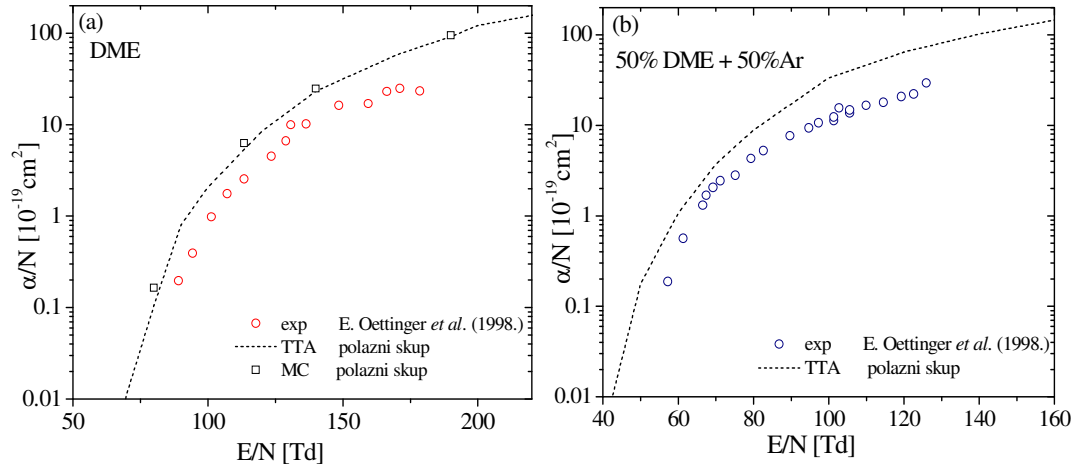


Slika 5.4. Brzina drifta elektrona: (a) u čistom DME, (b) u smješi 50%DME+50%Ar. Poređenje izračunatih vrijednosti dobijenih polaznim skupom i izmjerenih vrijednosti Oettinger i saradnika (Oettinger i ostali, 1998).

Na slici 5.4. (a) se može vidjeti da je slaganje izračunatih vrijednosti brzine drifta jednom približnom (TTA) i jednom egzaktom (MC) tehnikom dosta dobro za vrijednosti E/N veće od 12 Td (u slučaju čistog DME), dok odstupanja postoje na nižim vrijednostima E/N (do 12 Td), što je i očekivano imajući u vidu značajne vrijednosti vibracionih ekscitacija u tom opsegu srednjih energija elektrona.

Na slici 5.5. (a) su prikazane vrijednosti koeficijenta jonizacije u čistom DME dobijene proračunima koji uključuju polazni skup presjeka za e^-/DME interakciju, kodom ELENDIF-isprekidana linija i MC kodom-prazni kvadrati. Praznim krugovima su prikazane izmjerene vrijednosti Oettinger i saradnika (Oettinger i ostali, 1998). Vidljivo je odstupanje naših izračunatih vrijednosti u odnosu na izmjerene, na cijelom posmatranom opsegu E/N . Na slici 5.5. (b) su prikazane vrijednosti koeficijenta jonizacije u smješi 50%DME+50%Ar, isprekidanom linijom je prikazan TTA proračun, dok su praznim krugovima prikazane izmjerene vrijednosti Oettinger i saradnika. Slično

kao i u slučaju čistog DME i u ovoj smješi DME sa Ar je vidljivo odstupanje naših izračunatih vrijednosti u odnosu na izmjerene.

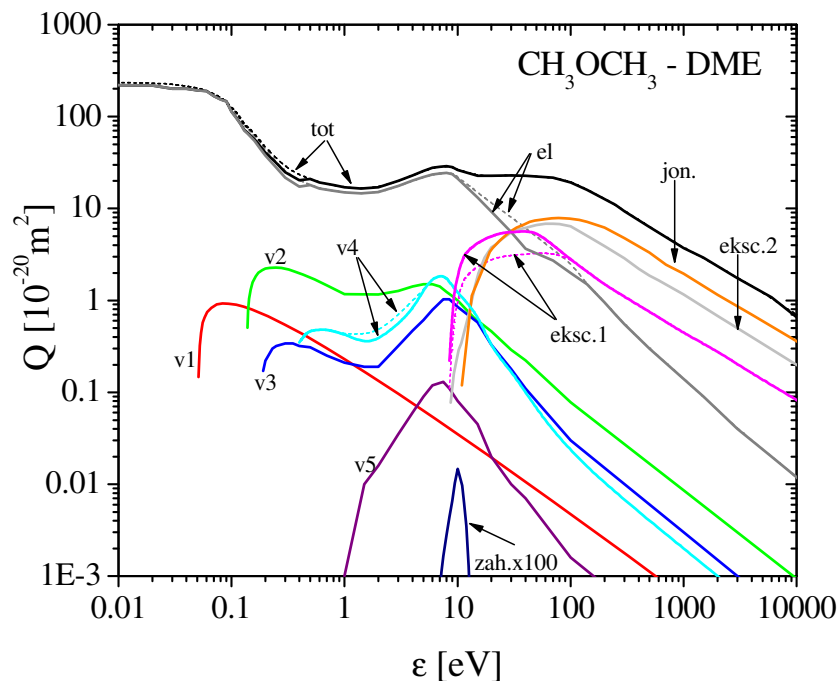


Slika 5.5. Koeficijent jonizacije: (a) u čistom DME, (b) u smješi 50%DME+50%Ar, Poređenje izračunatih vrijednosti dobijenih polaznim skupom i izmjerenih vrijednosti Oettinger i saradnika (Oettinger i ostali, 1998).

Usljed velikog neslaganja između izmjerenih i izračunatih vrijednosti koeficijenta jonizacije, u cilju poboljšanja stepena slaganja potrebno je izvršiti modifikacije presjeka za neelastične procese u postojećem skupu presjeka i to, prije svega, presjeka za ekscitaciju čiji je energijski prag nešto niži od praga za jonizaciju. Takođe postoji i nešto manje neslaganje u slučaju brzine drifta i to uglavnom na granicama ispitivanog intervala energije. To ukazuje na potrebu relativno malih modifikacija presjeka za prenos impulsa. Kako je to oblast koja odgovara brzorastućem presjeku za vibracione ekscitacije u oblasti energijskog praga koji se poklapa sa zonom RT minimuma u presjeku za prenos impulsa, što je situacija u kojoj aproksimacija dva člana ne daje dovoljno dobre rezultate, urađena je i provjera MC kodom. Provjera je ipak pokazala potrebu za manjim izmjenama u presjeku za prenos impulsa, s obzirom na veliku osjetljivost brzine drifta na modifikacije ovog presjeka i na veliku tačnost s kojom se mjere brzine drifta u eksperimentu ovog tipa.

5.4. MODIFIKACIJA POLAZNOG SKUPA PRESJEKA ZA e^-/DME INTERAKCIJU - KOMPLETAN SKUP PRESJEKA ZA DME

Proces modifikacije polaznog skupa presjeka za DME (slika 5.1.) se odvijao u velikom broju ponavljajućih krugova, do dobijanja konačnog skupa koji dobro fituje transportne koeficijente kako u čistom DME tako (istovremeno) i u njegovim smješama sa Ar i Ne . Rezultat tih modifikacija je konačni, kompletni skup presjeka koji je prikazan na slici 5.6. punim linijama dok su isprekidanim linijama prikazani polazni presjeci koje smo modifikovali.



Slika 5.6. Konačni, kompletni skup presjeka za e^-/DME interakciju dobijen metodom rojeva. Isprekidanim linijama su prikazani polazni presjeci, a punim linijama presjeci koji su rezultat ovog rada.

Kao što se vidi na slici 5.6. modifikovani su totalni i elastični presjek za prenos impulsa (el i tot), presjek za vibracione ekscitacije sa energijskim pragom 0.349 eV (v4) i presjek za elektronske ekscitacije sa pragom 7.7 eV (eksc.1).

Na samom početku modifikacionog procesa podešen je totalni presjek za prenos impulsa tako da dobro fituje brzinu drifta u čistom DME, unutar granice greške mjerenja koja se kreće od 2% za niže i srednje E/N , do 10% za najviše vrijednosti E/N

koje u ovom slučaju iznose 170 Td i 190 Td (Oettinger i ostali, 1998). Polazni totalni presjek za prenos impulsa je vrlo malo smanjen u opsegu energija 0.004 eV-0.4 eV da bi se poboljšao stepen slaganja izračunatih i izmjerenih vrijednosti brzine drifta u opsegu E/N koji odgovara ovim srednjim energijama elektrona (4 Td-10 Td). U ovom dijelu modifikacionog procesa, usljed odstupanja između TTA i MC vrijednosti koristili smo se rezultatima MC proračuna iako ovaj izbor nije praktičan usljed dužine trajanja same simulacije. Zatim smo pristupili fitovanju jonizacionog koeficijenta u čistom DME i smješi 50%DME+50% Ar . Kako je jonizacioni koeficijent vrlo osjetljiv na presjek za elektronske ekscitacije, posebno u oblasti energijskog praga za elektronske ekscitacije, modifikacijom presjeka sa nižim pragom od 7.7 eV (eksc.1) smo podešavali jonizacioni koeficijent u čistom DME, provjeravajući stepen slaganja u smješi 50%DME+50% Ar . U ovom dijelu modifikacionog procesa smo se služili kodom ELENDIF imajući u vidu dobar stepen slaganja između TTA i MC proračuna u ovom opsegu E/N. U cilju fitovanja jonizacionog koeficijenta presjek za elektronske ekscitacije sa pragom 7.7 eV smo povećali u energijskom opsegu 8.5 eV-80 eV. Sa druge strane ova modifikacija je neznatno narušila stepen slaganja brzine drifta u smješama DME sa Ar i N_e (20% i 50%DME sa Ar i N_e) te smo naizmjeničnim podešavanjima presjeka za vibracione ekscitacije sa pragom 0.349 eV (v4) u odgovarajućem energijskom opsegu i presjeka za elektronske ekscitacije sa pragom 7.7 eV došli do konačnog, kompletnog skupa presjeka za e^-/DME interakciju koji je prikazan na slici 5.6. punim linijama, pri čemu je konačni elastični presjek za prenos impulsa dobijen kao razlika totalnog i sume svih konačnih neelastičnih efektivnih presjeka.

Transportni koeficijenti dobijeni konačnim skupom presjeka za e^-/DME interakciju u DC električnom polju su prikazani u sljedećem poglavlju.

5.5. SKUP TRANSPORTNIH KOEFICIJENATA DOBIJEN KONAČNIM SKUPOM PRESJEKA ZA e^- /DME INTERAKCIJU U DC ELEKTRIČNOM POLJU

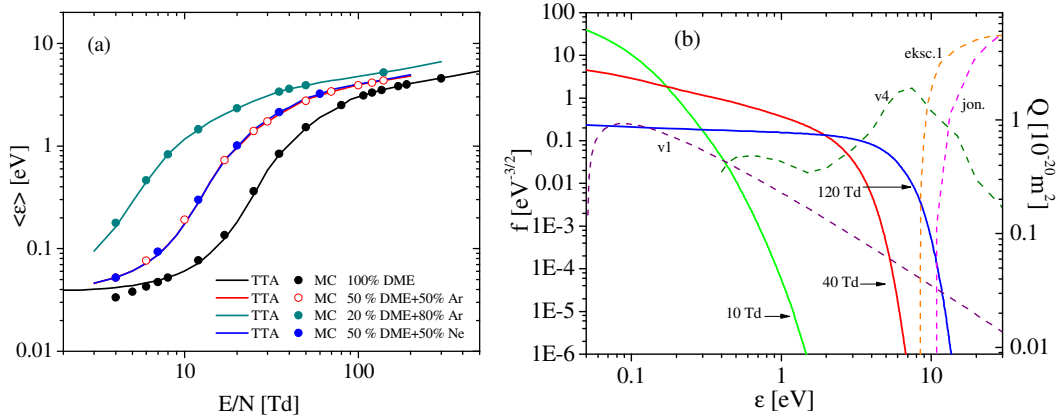
U ovom odjeljku su prikazani rezultati transportnih i brzinskih koeficijenata za elektrone koji se kreću pod dejstvom konstantnog (DC) električnog polja, u čistom DME kao i njegovim smješama sa A_r i N_e , dobijeni konačnim skupom presjeka za DME (slika 5.6). MC proračuni su urađeni pri pritisku gasa od 1 Torr (pri čemu su koncentracija i temperatura neutralnih čestica $N = 3.54 \times 10^{22} m^{-3}$ i $T = 273 K$), početna srednja energija elektrona je 1 eV dok su sve simulacije urađene sa 250 000 početnih elektrona. Na većini slika su prikazani i rezultati dobijeni polaznim skupom presjeka za e^- /DME interakciju, radi poređenja, dok su na svim slikama prikazane balk vrijednosti transportnih koeficijenata, imajući u vidu da one odgovaraju vrijednostima koje daje eksperiment. Takođe su prikazani i rezultati mjerenja Oettinger i saradnika (Oettinger i ostali, 1998) kao i drugi rezultati koje smo našli u literaturi.

5.5.1. Srednja energija

Na slici 5.7. (a) je prikazana srednja energija elektrona u čistom DME kao i smješama sa A_r i N_e (20% i 50%DME u A_r i 50%DME u N_e), punim linijama su prikazani TTA a simbolima MC rezultati. Na slici 5.7. (b) je prikazana funkcija raspodjele elektrona u čistom DME za tri vrijednosti E/N (10 Td, 40 Td i 120 Td), dok su isprekidanim linijama prikazani presjeci za vibracione ekscitacije ($v1$ i $v4$), elektronske ekscitacije (eksc.1) i jonizaciju (jon.).

U slučaju čistog DME vidimo da srednja energija (crna linija-TTA proračun, crni krugovi-MC proračun) ima blagi porast do 8 Td, zatim dosta brzo raste sa porastom E/N , da bi pri vrijednostima E/N koje su veće od 50 Td ponovo počela sporije da raste. U prvoj oblasti je, usljed niskih vrijednosti E/N porast srednje energije spor. Ako pogledamo sliku 5.7. (b) i funkciju raspodjele za $E/N=10$ Td, vidimo da određeni broj elektrona ima dovoljno energije za savladavanje barijera vibracionih procesa (čiji su energijski pragovi manji od 0.5 eV) ali ne i za procese ekscitacija i jonizacije. Kako E/N raste roj dobija sve više energije od polja pa imamo i brži porast, i kao što vidimo na

slici (b), za funkciju raspodjele za $E/N=40$ Td, elektroni nemaju dovoljnu energiju za savladavanje barijera neelastičnih procesa sa višim pragovima (koji su veći od 6.5 eV, tabela 5.1.). U trećoj oblasti veliki broj elektrona ima dovoljnu energiju da savlada ove procese te roj troši energiju ali ona, usljed jakog električnog polja u srednjem ponovo raste ali sporije.



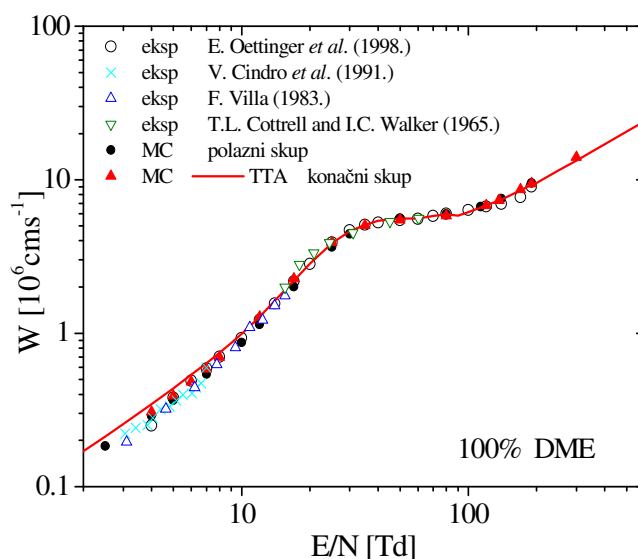
Slika 5.7. (a) Srednja energija elektrona u čistom DME i smješama sa Ar i Ne (20% i 50% DME u Ar i 50%DME u Ne), (b) Funkcija raspodjele elektrona u čistom DME za tri vrijednosti E/N (pune linije) dok su isprekidanim linijama prikazani presjeci za vibracione i elektronske ekscitacije (v1, v4, eksc.1) i jonizaciju (jon.).

Najviše vrijednosti srednje energije elektrona se javljaju u slučaju smješe 20%DME+80% Ar). Na niskim vrijednostima E/N (do 9Td) srednja energija elektrona u ovoj smješi jako brzo raste sa porastom E/N zahvaljujući Ramsauer-Townsendovom minimumu koji se javlja u presjeku za prenos impulsa kod Ar (slika 5.2.) i činjenici da je u slučaju Ar najniži energijski prag za neelastične procese 11.55 eV. Pri vrijednostima E/N većim od 12 Td srednja energija ulazi u oblast sporijeg porasta jer roj elektrona u toj energijskoj oblasti troši određeni dio energije na savladavanje energijskih barijera brojnih ekscitacionih procesa.

U slučaju preostale dvije razmatrane smješe (50%DME+50% Ne i 50%DME+50% Ar) srednja energija ima vrijednosti negdje između čistog DME i smješe 20%DME+80% Ar , izuzev niskih vrijednosti E/N (manje od 4 Td), gdje se vrijednosti srednje energije približavaju vrijednostima u čistom DME. Takođe se može zapaziti da su i same vrijednosti srednje energije u slučaju ove dvije smješe približno jednake. Oblik krive srednje energije je sličan kao u slučaju čistog gasa.

5.5.2. Brzina drifta i koeficijent jonizacije u čistom DME

Na slici 5.8. prikazana je brzina drifta elektrona u čistom DME. Poređenjem eksperimentalnih rezultata Oettinger i saradnika (Oettinger i ostali, 1998.) sa našim proračunima vidi se da modifikovani skup presjeka za DME bolje reprodukuje izmjerene vrijednosti brzine drifta u opsegu E/N (do 10 Td) u kojem je polazni (Biagihev) skup davao mala odstupanja. Takođe je postignut zadovoljavajući stepen slaganja na cijelom razmatranom opsegu E/N .

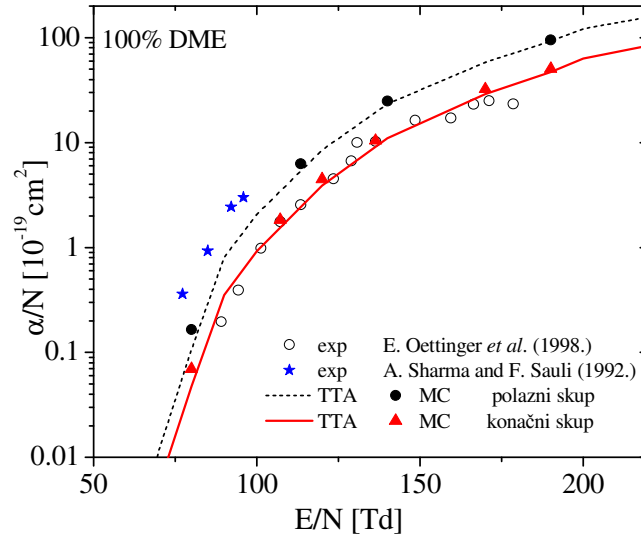


Slika 5.8. Brzina drifta elektrona u čistom DME. Poređenje vrijednosti dobijenih konačnim skupom presjeka za e^-/DME interakciju (MC rezultat-crveni trouglovi, TTA rezultat-crvena linija) sa izmjerenim vrijednostima Oettinger i saradnika-prazni krugovi (Oettinger i ostali, 1998). Na slici su prikazane i ostale izmjerene vrijednosti koje smo našli u literaturi kao i rezultat dobijen MC kodom polaznim skupom presjeka.

Na slici su prikazane i izmjerene vrijednosti Ville (Villa, 1983.) i Cottrella i Walkera (Cottrell i Walker, 1965) koje se dobro slažu sa našim izračunatim vrijednostima. Vidljivo je da u čistom DME nema pojave negativne diferencijalne provodnosti.

Na slici 5.9. je prikazan koeficijent jonizacije u funkciji redukovano električnog polja. Kao što se može vidjeti sa slike, stepen slaganja sa izmjerenim vrijednostima Oettinger i saradnika je daleko bolji negoli u slučaju rezultata dobijenih sa polaznim (Biagihev) skupom presjeka na cijelom razmatranom opsegu E/N . Na slici su plavim zvjezdicama prikazane izmjerene vrijednosti Sharpe i Saulija (Sharma i

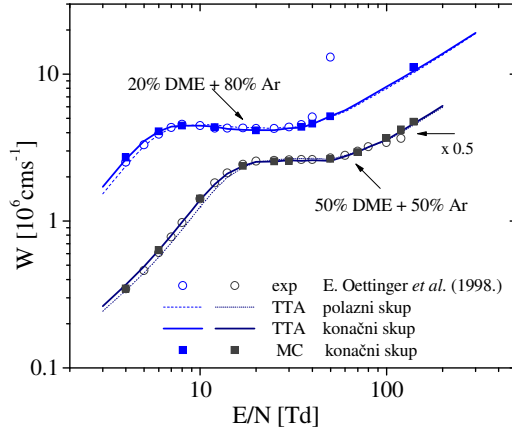
Sauli, 1992) u uskom opsegu E/N (od 70-100 Td) i kao što se vidi one značajno odstupaju od izmjerenih vrijednosti Oettinger i saradnika.



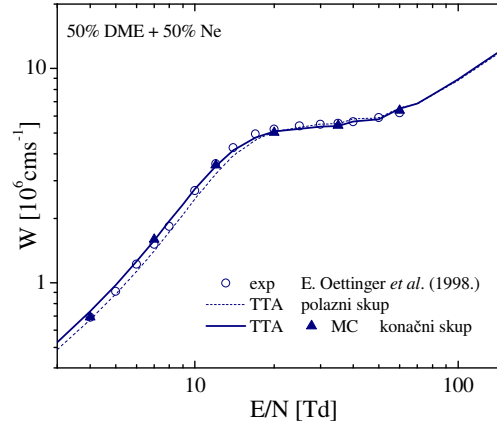
Slika 5.9. Jonizacioni koeficijent. Poređenje vrijednosti dobijenih konačnim skupom presjeka za e^-/DME interakciju (MC rezultat-crveni trouglovi, TTA rezultat-crvena linija) sa izmjerenim vrijednostima Oettinger i saradnika-prazni krugovi (Oettinger i ostali, 1998). Na slici su prikazane i izmjerene vrijednosti Sharma i Saulija-plave zvjezdice kao i rezultati dobijeni polaznim skupom presjeka: MC-crni krugovi, TTA-isprekidana linija.

5.5.3. Brzina drifta i koeficijent jonizacije u smješama DME sa Ar i N_e

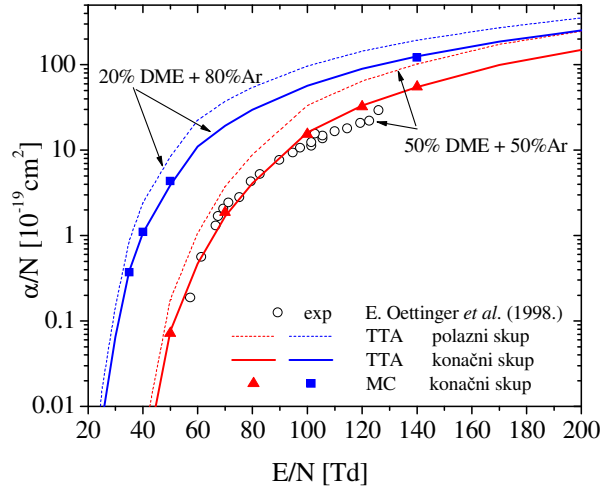
Na slici 5.10. je prikazana brzina drifta elektrona u funkciji redukovano električnog polja za dvije smješe DME sa Ar , procentualnog sastava 20% i 50% DME u Ar . U slučaju smješe 20%DME+80% Ar vidimo da se naš MC rezultat (plavi kvadrati), dobijen konačnim skupom presjeka za e^-/DME interakciju dosta dobro slaže sa izmjerenim vrijednostima Oettinger i saradnika (plavi prazni krugovi) uzimajući u obzir da je greška mjerenja za pretposlednju izmjerenu vrijednost (za $E/N=40$ Td) 10%, dok značajno odstupanje postoji za najvišu izmjerenu vrijednost (za $E/N=50$ Td). Svi naši pokušaji reprodukcije ove izmjerene vrijednosti brzine drifta su bili bezuspješni i doveli su do značajnog narušavanja stepena slaganja u svim ostalim slučajevima (kako brzine drifta tako i jonizacionog koeficijenta).



Slika 5.10. Brzina drifta elektrona u smješama DME sa Ar . Poređenje izračunatih i izmjerenih vrijednosti. Izračunate i izmjerene vrijednosti u 50% smješi su pomnožene faktorom 0.5 radi bolje vidljivosti.



Slika 5.11. Brzina drifta elektrona u smješi 50%DME+50% Ne . Poređenje izračunatih i izmjerenih vrijednosti.



Slika 5.12. Ionizacioni koeficijent u smješama 20%DME+80% Ar i 50%DME+50% Ar u funkciji E/N . Poređenje izračunatih i izmjerenih vrijednosti.

Takođe se opaža i pojava negativne diferencijalne provodnosti u opsegu od 7 Td-14 Td, što je i očekivano imajući u vidu da se u toj energijskoj oblasti kod DME nalaze brzo rastući presjeci vibracionih ekscitacija uporedivi po magnitudi sa brzo opadajućim presjekom za prenos impulsa u argonu (oblast Ramsauer-Townsendovog minimuma). U slučaju smješe 50%DME+50% Ar , vidimo da se naš MC rezultat (crni kvadrati) dosta dobro slaže sa izmjerenim vrijednostima Oettinger i saradnika (crni prazni krugovi) na cijelom razmatranom opsegu E/N , uzimajući u obzir da je greška mjerenja za poslednju

tačku ($E/N=120 \text{ Td}$) 10%. U ovoj smješi vidimo da nema NDC iako postoji tendencija smanjenja brzine drifta sa porastom E/N za šta je očigledno, potreban veći procenat Ar .

Na slici 5.11. je prikazana brzina drifta elektrona u funkciji E/N u smješi 50%DME+50% N_e . Vidimo da je slaganje naših MC rezultata dobijenih konačnim skupom presjeka za DME (plavi trouglovi) sa izmjerenim vrijednostima dosta dobro na cijelom razmatranom opsegu E/N .

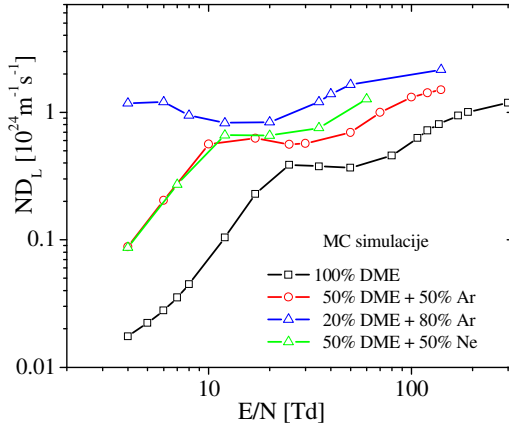
Na slici 5.12. je prikazan jonizacioni koeficijent u funkciji E/N za smješe 50%DME+50% Ar i 20%DME+80% Ar . U slučaju smješe većeg procentualnog sastava DME vidimo da se naš MC rezultat dobijen konačnim skupom presjeka za DME mnogo bolje slaže sa izmjerenim vrijednostima Oettinger i saradnika negoli rezultat dobijen polaznim presjecima za DME, što je još jedna potvrda opravdanosti izvršenih modifikacija na presjecima za DME. U slučaju smješe 20%DME+80% Ar je prikazan samo rezultat naših proračuna, TTA i MC, dobijenih polaznim i konačnim skupom presjeka za DME jer druge rezultate, kako mjerenja tako i proračuna nismo uspjeli pronaći u literaturi.

S obzirom na rezultate prikazane na prethodnim slikama, vidimo da konačni skup presjeka za DME (slika 5.6.) dosta dobro reprodukuje izmjerene vrijednosti brzine drifta i jonizacionog koeficijenta u čistom DME i smjesama sa Ar i N_e na cijelom razmatranom opsegu E/N .

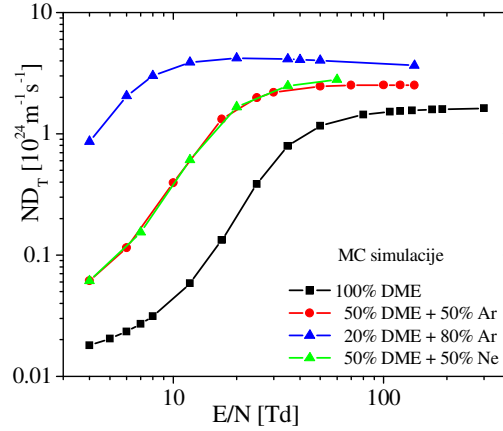
5.5.4. Longitudinalni i transversalni koeficijenti difuzije elektrona u DME i smjesama sa Ar i N_e

Na slikama 5.13. i 5.14. su prikazani MC rezultati longitudinalnog i transversalnog difuzionog koeficijenta pomnoženog koncentracijom gasa N (ND_L i ND_T) u čistom DME kao i njegovim smjesama sa Ar i N_e . Kao što se sa slika vidi, čist DME ima najnižu vrijednost ND_L i ND_T na cijelom razmatranom opsegu E/N . Dodavanjem Ar ili N_e oba koeficijenta se povećavaju i poprimaju najveću vrijednost u smješi 20%DME+80% Ar . Na slici 5.13. vidimo da ND_L u smjesama 50%DME+50% Ar i 50%DME+50% N_e ima približno jednake vrijednosti na nižim vrijednostima

redukovanog električnog polja, dok je na višim vrijednostima ND_L veći u smješi 50%DME+50% Ne . Na slici 5.14. možemo vidjeti da u smješama 50%DME+50% Ar i 50%DME+50% Ne vrijednosti ND_T su približno jednake na cijelom razmatranom opsegu E/N .

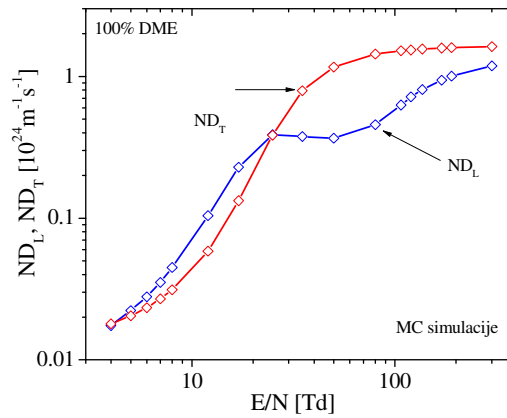


Slika 5.13. Longitudinalni difuzioni koeficijent za elektrone u DME i smješama sa Ar i Ne . Rezultati MC proračuna.



Slika 5.14. Transverzalni difuzioni koeficijent za elektrone u DME i smješama sa Ar i Ne . Rezultati MC proračuna.

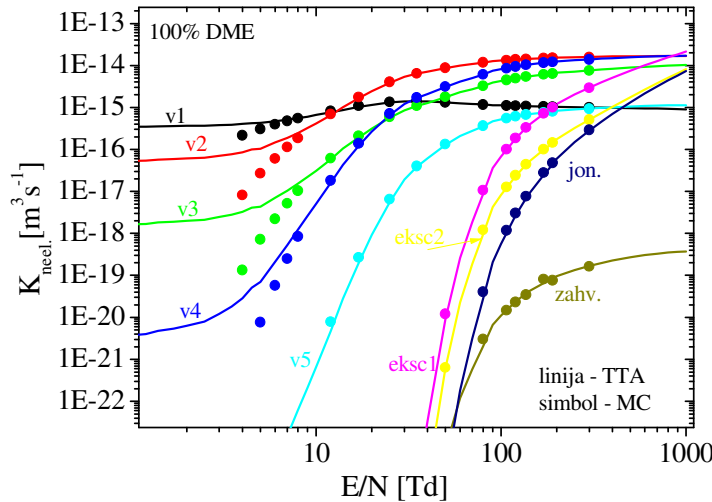
Na slici 5.15. prikazani su rezultati MC proračuna transversalnog i longitudinalnog koeficijenta difuzije u čistom DME. Kao što se vidi, na skoro cijelom razmatranom opsegu E/N difuzija je anizotropna osim u dvije tačke (4 Td i 25 Td) u kojima su ova dva koeficijenta jednaka. Za $E/N < 20$ Td longitudinalni koeficijent je veći od trasverznog dok je za $E/N > 20$ Td situacija obrnuta i u ovom opsegu E/N anizotropija je izraženija.



Slika 5.15. Transverzalni i longitudinalni koeficijent difuzije pomnožen koncentracijom čestica gasa u čistom DME.

5.5.5. Brzinski koeficijenti za neelastične procese u čistom DME

Na slici 5.16. prikazani su rezultati TTA i MC proračuna brzinskih koeficijenata za neelastične procese u čistom gasu.



Slika 5.16. Brzinski koeficijenti za neelastične procese u čistom DME. TTA i MC rezultati dobijeni konačnim skupom presjeka za DME.

Radi poređenja prikazani su i rezultati dobijeni metodom dvočlane aproksimacije i kao što se vidi na slici njihova odstupanja u odnosu na MC rezultate postoje na nižim vrijednostima E/N (< 7 Td) tj. u onom opsegu E/N (srednjih energija elektrona) u kojem postoje izraženi procesi vibracionih ekscitacija (v1, v2, v3, v4) sa niskim energijskim pragovima i istovremeno brzo opadajući presek za prenos impulsa.

5.6. SKUP TRANSPORTNIH KOEFICIJENATA DOBIJEN KONAČNIM SKUPOM PRESJEKA ZA e^-/DME INTERAKCIJU U UKRŠTENOM DC ELEKTRIČNOM I MAGNETNOM POLJU

U ovom odjeljku su prikazani transportni i brzinski koeficijenti elektrona u čistom DME dobijeni razmatranjem transporta roja elektrona pod dejstvom konstantnih (DC) ukrštenih električnih i magnetnih polja ortogonalne konfiguracije. Koordinatni sistem je orijentisan tako da je električno polje u pravcu x-ose ($\vec{E}$), magnetno u pravcu

z-ose ($\vec{B}$), dok je u y-pravcu ukršteno električno i magnetno polje ($\vec{E} \times \vec{B}$). Rezultati su dobijeni našim MC kodom, gde je kao ulazni podatak korišćen modifikovani skup presjeka za DME (slika 5.6). Roj elektrona srednje energije 1 eV je puštan iz koordinantnog početka, pri čemu je početni broj elektrona variran od $2.5 \cdot 10^5$ do $5 \cdot 10^5$, jer je u slučajevima niskih vrijednosti E/N i visokih B/N (u našem slučaju do $B/N=2000$ Hx) dolazilo do otežane relaksacije roja u ravnotežno stanje. Koncentracija molekula razmatranog gasa je iznosila $3.54 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$, što odgovara pritisku od 1 Torr (133.32 Pa), dok je temperatura gasa iznosila 273 K. Na svim slikama su, radi poređenja, prikazani i rezultati dobijeni za $B/N=0$ Hx. Kako druge podatke u literaturi nismo pronašli, na slikama su prikazani samo rezultati naših MC simulacija.

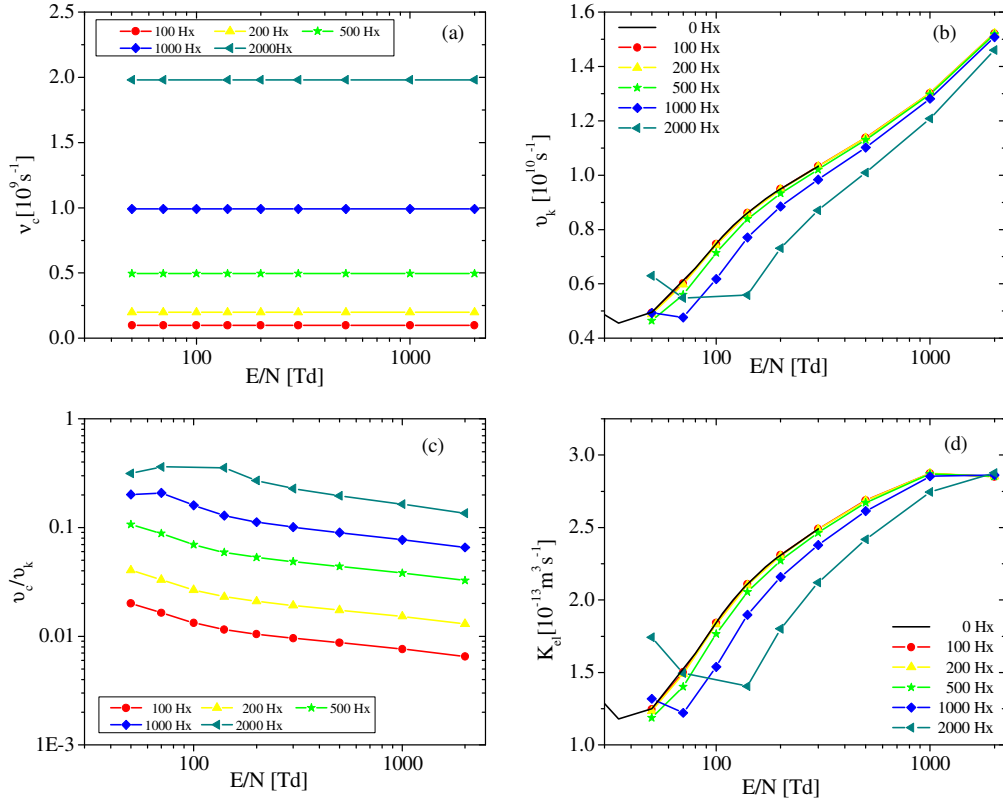
5.6.1. Ciklotronska i koliziona frekvencija

Osnovni parametar, kao što je već rečeno u poglavlju 3., odjeljak 3.3.1., koji određuje kretanje roja elektrona u DC električnim i magnetnim poljima je odnos ciklotronske i ukupne kolizione frekvencije (ν_c/ν_k). Ukoliko je ovaj odnos manji od jedan dominantan je sudarni režim, u suprotnom kretanje je određeno spoljašnjim magnetnim poljem.

Na slici 5.17. (a) prikazana je ciklotronska frekvencija (ν_c) u funkciji redukovanog električnog polja, za pet vrijednosti redukovanog magnetnog polja. Vidimo da ν_c ne zavisi od jačine električnog polja i da se povećava sa porastom magnetnog polja, što je u skladu sa definicijom ($\nu_c = eB/2\pi m$).

Na slici 5.17. (b) prikazana je ukupna koliziona frekvencija u funkciji E/N za pet različitih vrijednosti B/N , kao i u slučaju $B/N=0$ Hx. Kako ukupna koliziona frekvencija predstavlja sumu frekvencija za sve sudarne procese od kojih su elastični dominantni, jasno je da je njeno ponašanje usko povezano sa brzinskim koeficijentima za elastične sudare, što se vidi i sa slike 5.17. (d). Poređenjem rezultata prikazanim na ove dvije slike, (b) i (d), vidi se da je ponašanje brzinskih koeficijenata za različite vrijednosti B/N u skladu sa ponašanjem ukupne kolizione frekvencije za iste vrijednosti B/N . Sa slike 9.17. (b) vidimo da se ukupna koliziona frekvencija smanjuje sa porastom B/N što

je u stvari posljedica smanjenja srednje energije roja sa porastom B/N o čemu će biti više riječi u tekstu koji slijedi.



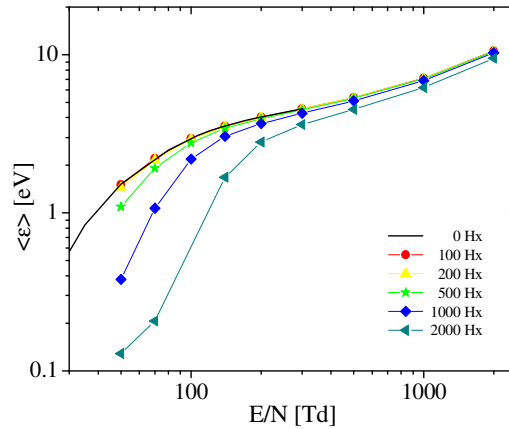
Slika 5.17. a) Ciklotronska frekvencija, b) Ukupna koliziorna frekvencija, c) Odnos ciklotronske i ukupne kolizione frekvencije, d) Brzinski koeficijenti za elastične sudarne procese u funkciji redukovano električnog polja za pet različitih vrijednosti redukovano magnetnog polja.

Na slici 5.17 (c) je prikazan odnos ciklotronske i ukupne kolizione frekvencije u funkciji redukovano električnog polja za četiri vrijednosti B/N i kao što se vidi u svim slučajevima je taj odnos manji od jedan. To znači da smo u svim našim proračunima radili u sudarno dominantnom režimu.

5.6.2. Srednja energija

Na slici 5.18 je prikazana srednja energija roja elektrona u funkciji redukovano električnog polja za više vrijednosti redukovano magnetnog polja. Prikazan je i rezultat za $B/N=0 \text{ Hx}$. Prvo što uočavamo je da niže vrijednosti B/N (100 Hx i 200 Hx) gotovo

da ne utiču na srednju energiju roja na cijelom razmatranom opsegu. Daljnjim povećanjem B/N energija roja se smanjuje i to značajno pri nižim vrijednostima E/N (do 200 Td) a nešto slabije na višim vrijednostima E/N , dok na najvišim vrijednostima E/N (preko 1000 Td) smanjenje srednje energije se opaža samo pri najvišoj razmatranoj vrijednosti $B/N=2000$ Hx. Ovakvo ponašanje funkcije srednje energije je očekivano i u skladu sa ranije opisanom pojavom hlađenja roja magnetnim poljem.



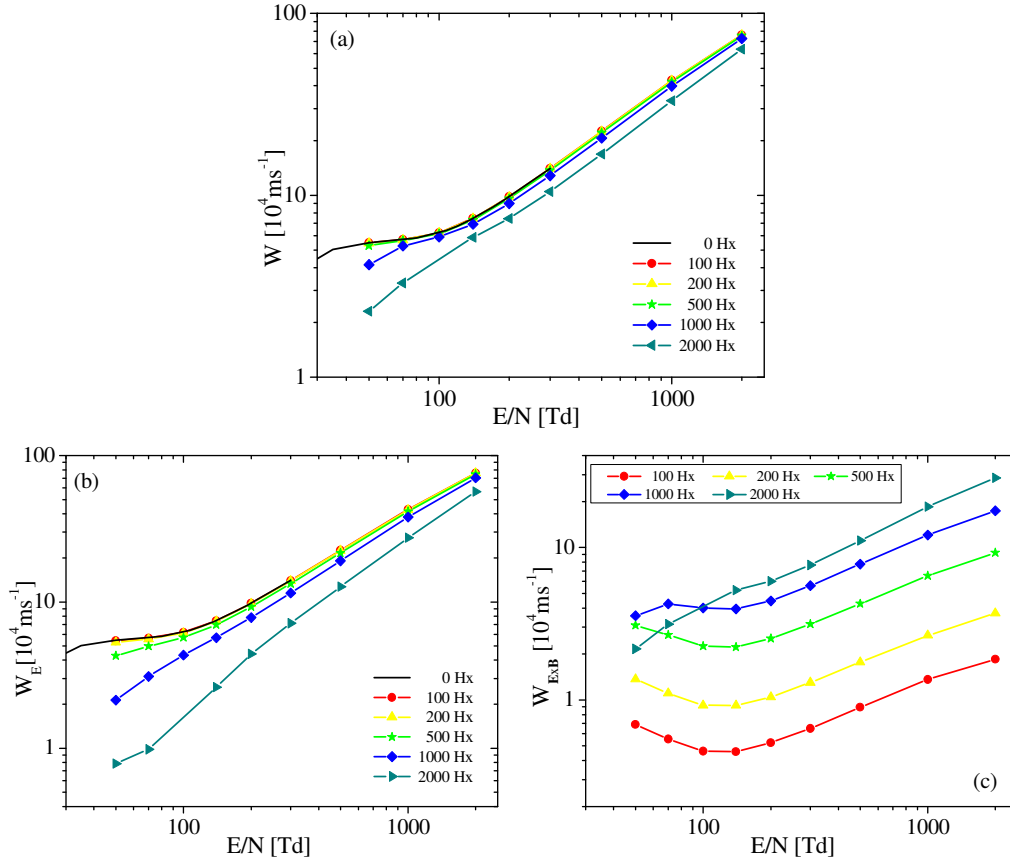
Slika 5.18. Srednja energija u funkciji redukovanog električnog polja za pet vrijednosti redukovanog magnetnog polja kao i u slučaju $B/N=0$ Hx.

5.6.3. Brzina drifta

Zavisnost ukupne brzine drifta, koja predstavlja rezultantu komponenata u pravcu električnog polja i pravcu koji je normalan na pravac električnog i magnetnog polja, od vrijednosti redukovanog električnog polja, za više različitih intenziteta magnetnog polja, prikazana je na slici 5.19. (a). Kako se sa slike može vidjeti, s povećanjem redukovanog magnetnog polja brzina drifta se smanjuje (pri istoj vrijednosti E/N) i pri najvećoj razmatranoj vrijednosti B/N od 2000 Hx raste gotovo linearno sa povećanjem E/N . Uticaj magnetnog polja na brzinu drifta se opaža tek pri većim vrijednostima B/N (1000 Hx i 2000 Hx), dok pri manjim vrijednostima B/N gotovo da nema razlike u odnosu na transport u električnom polju.

Na slici 5.19. (b) je prikazana brzina drifta u pravcu električnog polja u funkciji E/N za pet vrijednosti B/N . Vidljivo je smanjenje brzine drifta (za istu vrijednost E/N)

sa povećanjem B/N . Očekivano, ovo smanjenje je veće negoli u slučaju ukupne brzine drifta i počinje već na 500 Hx.



Slika 5.19. Brzina drifta u funkciji E/N za pet vrijednosti B/N : (a) Ukupna brzina drifta, (b) Brzina drifta u pravcu električnog polja, (c) Brzina drifta u pravcu normalnom na pravac električnog i magnetnog polja.

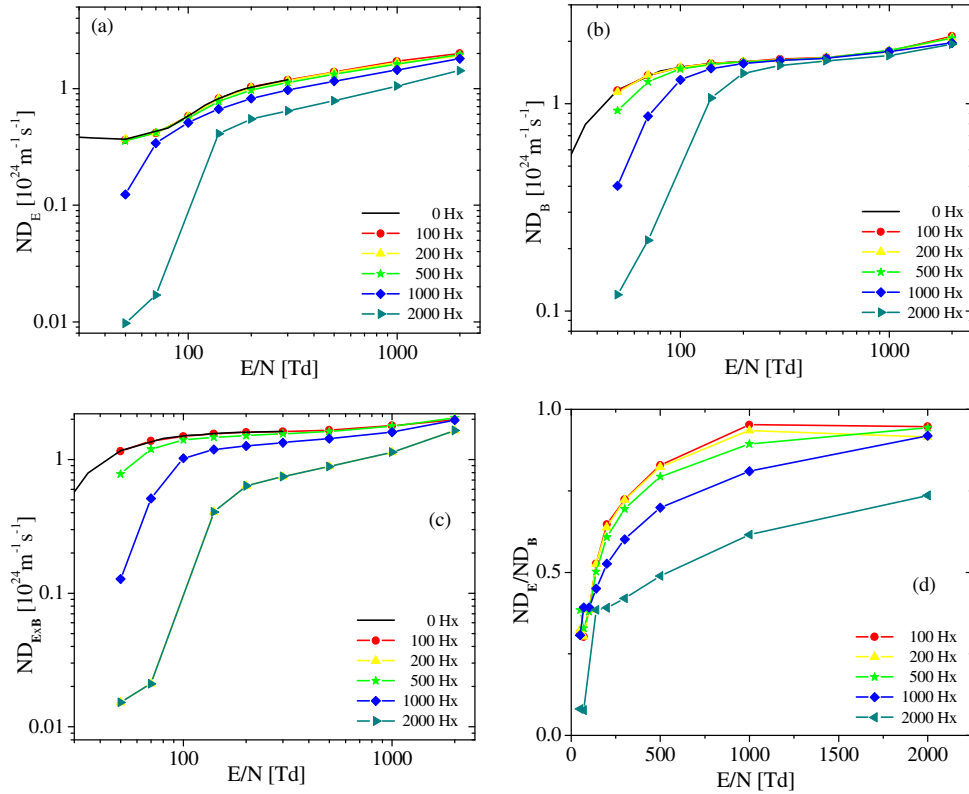
Na slici 5.19.(c) je prikazana brzina drifta u pravcu koji je normalan na ravan u kojoj se nalaze električno i magnetno polje u funkciji E/N za pet vrijednosti B/N . Vidimo da brzina drifta u ovom pravcu, za istu vrijednost E/N raste sa povećanjem B/N , dakle obrnuto u odnosu na W_E komponentu.

5.6.4. Koeficijenti difuzije

Na slici 5.20. (a) je prikazan koeficijent difuzije u pravcu električnog polja u funkciji E/N za pet različitih vrijednosti B/N . Prikazan je, radi poređenja i rezultat u

slučaju $B/N=0$ Hx, kada su koeficijenti u pravcu magnetnog polja i u $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu jednaki i predstavljaju transversalni difuzioni koeficijent. Kao što vidimo na slici, povećanjem B/N dolazi do smanjenja difuzije u pravcu električnog polja koje je izraženije što je B/N veće a vrijednosti E/N manje, što se može objasniti time da jako magnetno polje sprečava difuziju u pravcu normalnom na magnetno polje. Na nižim vrijednostima E/N (do 100 Td) difuzioni koeficijent jako brzo raste sa povećanjem redukovanog električnog polja, dok je na višim vrijednostima E/N (100 Td do 2000 Td) ovaj porast dosta slabiji.

Na sličan način se ponašaju i difuzioni koeficijenti u pravcu magnetnog polja i $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu, prikazani na slici 5.20. (b) i (c). U sva tri slučaja difuzioni koeficijenti ne pokazuju značajnu osjetljivost na energijsku zavisnost presjeka.



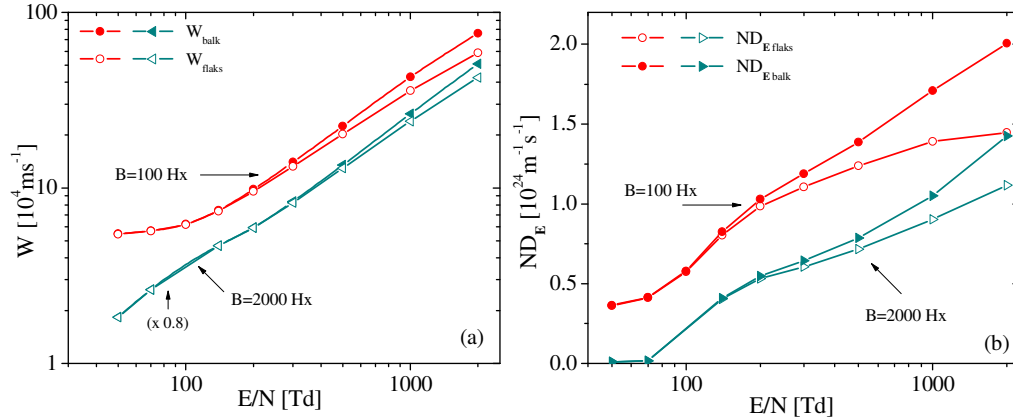
Slika 5.20. Difuzioni koeficijenti: (a) u pravcu električnog polja, (b) u pravcu magnetnog polja, (c) u pravcu $\vec{E} \times \vec{B}$, (d) odnos ND_E i ND_B .

Na slici 5.20. (d) je prikazan odnos difuzionog koeficijenta u pravcu električnog i koeficijenta u pravcu magnetnog polja u funkciji E/N za pet vrijednosti B/N . Vidimo da difuzija nije izotropna ali ni efekat anizotropije nije jako izražen, pogotovo pri nižim

vrijednostima B/N (100 Hx, 200 Hx i 500 Hx) i višim vrijednostima E/N gdje je odnos ND_E i ND_B blizak jedinici.

5.6.5. Uticaj nekonzervativnih procesa na transportne koeficijente u DC ukrštenim električnim i magnetnim poljima

Da bismo ispitali uticaj nekonzervativnih procesa na transport elektrona kroz DME, u uslovima kada deluju ukrštena DC polja, izračunali smo i na slikama 5.21 (a) i (b) predstavili, balk i flaks vrijednosti brzine drifta i longitudinalnog koeficijenta difuzije.



Slika 5.21. Uticaj nekonzervativnih procesa: (a) balk i flaks vrijednosti ukupne brzine drifta, (b) balk i flaks vrijednosti difuzionog koeficijenta u pravcu električnog polja u funkciji E/N za dvije vrijednosti B/N .

Kako se sa slika može uočiti, značajne razlike između dva skupa (balk i flaks) vrijednosti se javljaju na najvišim vrijednostima redukovano električnog polja i utoliko su veće ukoliko je magnetno polje slabije (jer je slabiji efekat hlađenja poljem). Razlog tome je što pri takvim uslovima elektroni imaju dovoljno energije da vrše intenzivnu jonizaciju, dok pri većim vrijednostima magnetnog polja, samo su elektroni iz visokoenergijskog repa funkcije raspodjele to u stanju. Na najnižim vrijednostima redukovano električnog polja iz odabranog opsega nije moguće uočiti razliku između balk i flaks vrijednosti zbog toga što je to oblast koja odgovara srednjim energijama elektrona od oko 1 eV, a to je oblast u kojoj postoje samo konzervativni neelastični

sudari. Energija praga za elektronski zahvat je tek na 6.85 eV, ali je i u toj oblasti ovaj presjek nekoliko redova veličine manji od konzervativnih procesa na toj energiji.

5.7. TRANSPORTNE KARAKTERISTIKE ELEKTRONA U SMJEŠI 20%DME+80% Ar U USLOVIMA DJELOVANJA RF ELEKTRIČNOG I MAGNETNOG POLJA

U ovom poglavlju su prikazani rezultati dobijeni razmatranjem transporta roja elektrona u smješi 20%DME+80% Ar u uslovima djelovanja vremenski zavisnih (RF) električnih i magnetnih polja ortogonalne konfiguracije. Iako smo proračune transportnih koeficijenata u uslovima RF polja izračunali i za slučaj čistog gasa i za slučaj nekoliko smješa sa argonom različitog sastava, odlučili smo da prikažemo rezultate samo za jednu smješu, radi ilustracije, s obzirom na činjenicu da se u svim slučajevima mogu izvući slični zaključci. Ostali izračunati podaci biće dostupni zainteresovanim korisnicima preko baze podataka koja je trenutno u izgradnji i koja će postati sastavni dio internacionalne baze podataka LXcat.

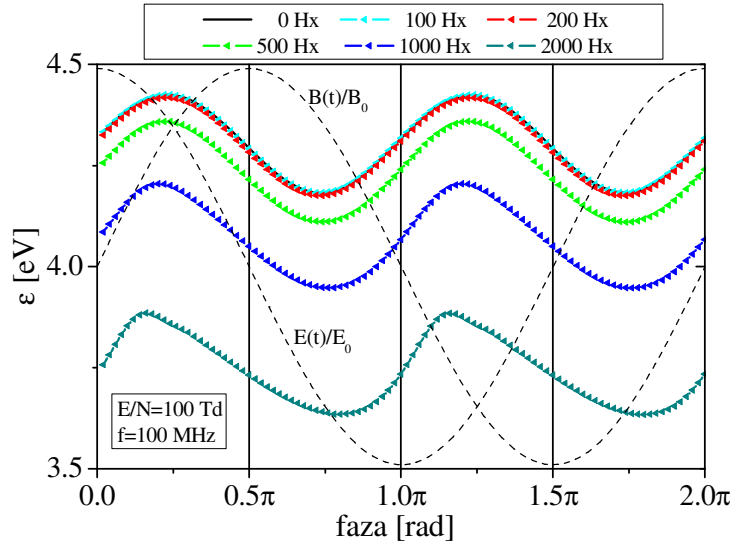
Prvo je razmatran uticaj amplitude magnetnog polja za vrijednost amplitude električnog polja od 100 Td i frekvenciju od 100 MHz, a potom je razmatran uticaj frekvencije električnog polja amplitude 100 Td, pri $B/N=0$ Hx i pri $B/N=1000$ Hx, na transport elektrona.

Za proračune transportnih koeficijenata smo koristili naš Monte Carlo simulacioni kod, koristeći kompletni skup presjeka za e^-/DME interakciju (slika 5.6.) koji je rezultat ovog rada. Presjeci za e^-/Ar interakciju koje smo koristili u ovim proračunima su prikazani na slici 5.2.. Početni broj elektrona, srednje energije 1 eV, je u svim simulacijama iznosio $2 \cdot 10^5$. Koncentracija neutrala je iznosila $3.54 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$ što odgovara pritisku gasa od 1 Torr (133.3 Pa) i temperaturi od 273 K. Električno polje je kosinusnog a magnetno sinusnog oblika sa faznom razlikom od 90° , što odgovara uslovima u većini induktivno spregnutih plazmi (ICPs).

Transportni koeficijenti (srednja energija, brzina drifta, koeficijenti difuzije) prikazani u ovom poglavlju, su flaks transportni koeficijenti koji su vremenski usrednjeni u jednom periodu polja.

5.7.1. Uticaj jačine magnetnog polja na faznu zavisnost transportnih koeficijenata

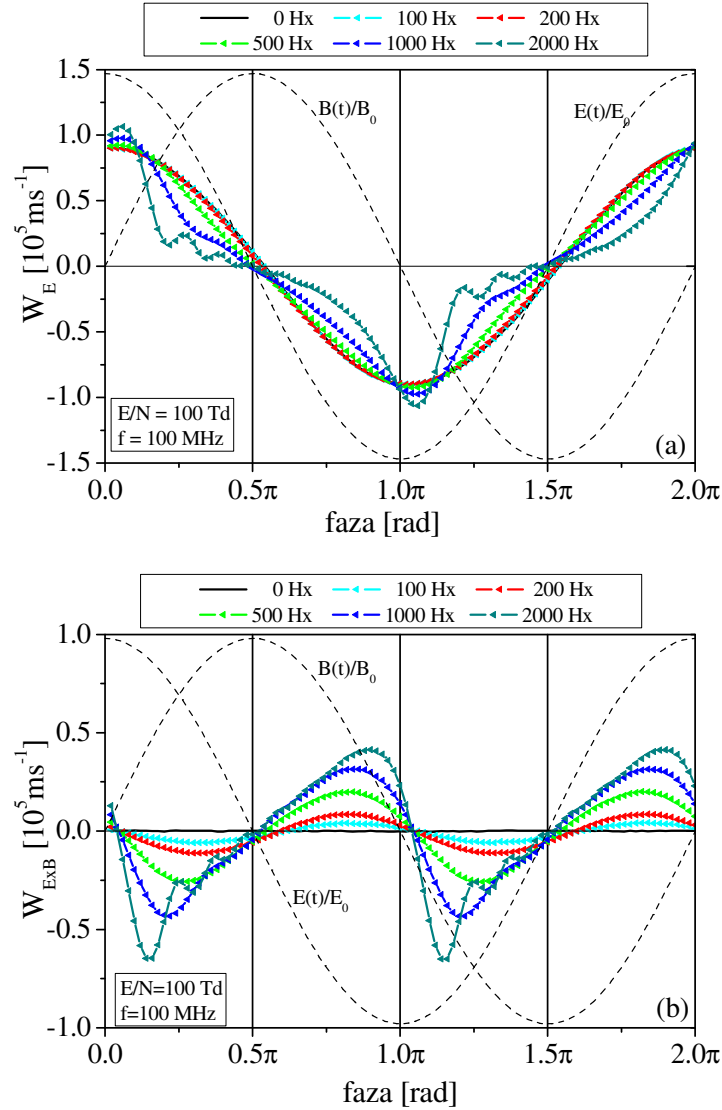
Na slici 5.22. je prikazana fazna zavisnost srednje energije roja elektrona pri $E/N=100$ Td i $f=100$ MHz, za više vrijednosti B/N . Kao što vidimo na slici, niže vrijednosti magnetnog polja (100 Hx i 200 Hx) gotovo da ne utiču na srednju energiju, te do hlađenja roja elektrona dolazi tek pri $B/N=500$ Hx.



Slika 5.22. Fazna zavisnost srednje energije u funkciji B/N , pri $E/N=100$ Td i $f=100$ MHz.

Daljnji porast magnetnog polja dovodi do sve većeg smanjenja srednje energije kao i do pojave asimetrije njenog profila. Na najvišoj vrijednosti $B/N=2000$ Hx jasno se vidi da je profil asimetričan i trouglast sa brzim porastom i sporijim opadanjem. Naime, porastom magnetnog polja raste i ciklotronska frekvencija te su elektroni u mogućnosti da opišu velike dijelove ili cijele ciklotronske orbite prije interakcije sa česticama pozadinskog gasa, te nisu u mogućnosti da prate električno polje, što za rezultat ima smanjenje njihove srednje energije. Brzi porast imamo u dijelovima faze gdje je električno polje maksimalno a magnetno prolazi kroz nultu vrijednost, te su elektroni u mogućnosti da se ubrzaju, dok sporije opadanje imamo u dijelovima faze u kojima rastuće magnetno polje skreće elektrone sa pravca spoljašnjeg električnog polja umanjujući tako šansu da povećaju svoju energiju tj. magnetnom polju je potrebno više vremena da ohladi roj nego što je električnom trebalo da ga zagrije.

Na slici 5.23. je prikazana brzina drifta elektrona u pravcu električnog polja (a) i u pravcu normalnom na pravac električnog i magnetnog polja (b), pri $E/N=100 \text{ Td}$ i $f=100 \text{ MHz}$, za više vrijednosti B/N .

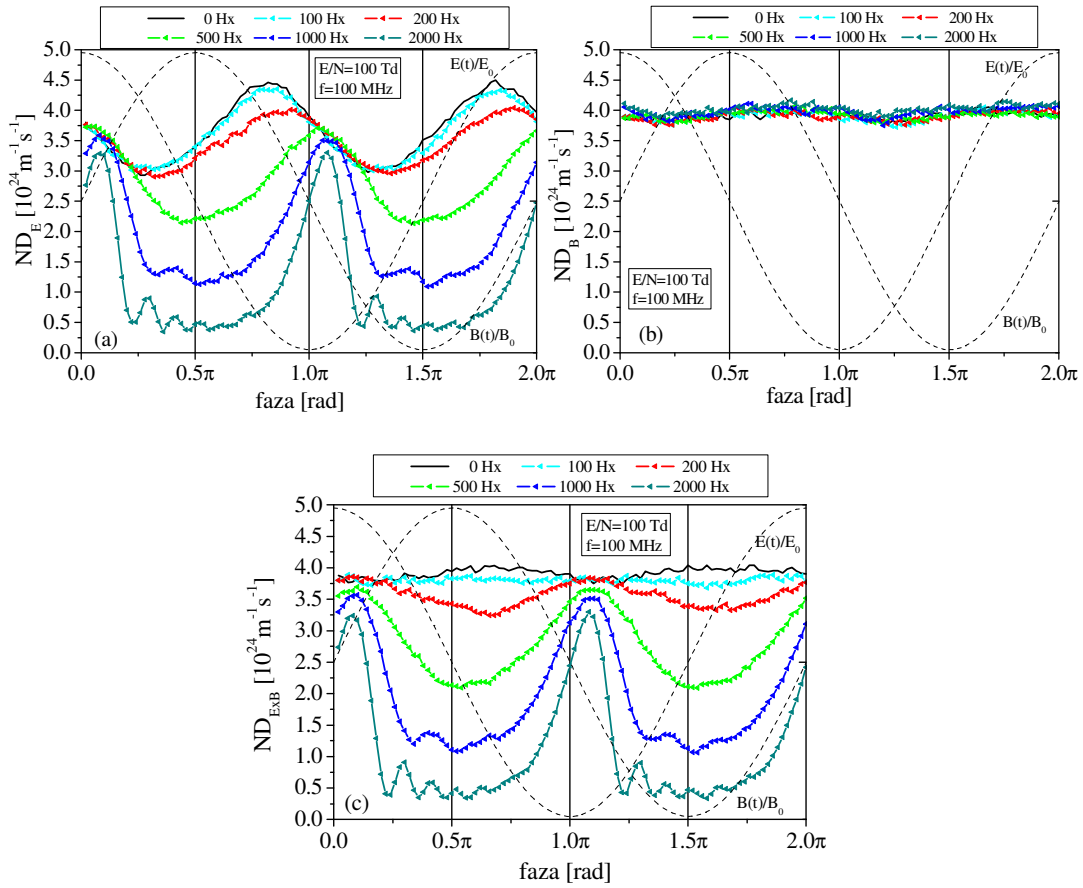


Slika 5.23. Fazna zavisnost brzine drifta u funkciji B/N , (a) u $\vec{E}$ pravcu, (b) u $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu, pri $E/N=100 \text{ Td}$ i $f=100 \text{ MHz}$ za više vrijednosti B/N .

Vidimo da brzina drifta u pravcu električnog polja ostaje nepromijenjena pri niskim vrijednostima B/N (100 Hx i 200 Hx) pri kojima je njen profil nemodulisan i ima maksimume u dijelovima faze u kojima je električno polje maksimalno a magnetno prolazi kroz nultu vrijednost. Porastom magnetnog polja preko 200 Hx vidimo da dolazi do smanjenja komponente brzine drifta u $\vec{E}$ pravcu i pri najvišoj razmatranoj

vrijednosti B/N od 2000 Hx vidimo da je njen profil izrazito asimetričan. Na niskim B/N maksimumi su široki i simetrični dok pri najvišoj vrijednosti B/N oni su suženi i gotovo trouglastog oblika. Za svih pet vrijednosti magnetnog polja vidimo da su položaji maksimuma ostali gotovo nepromijenjeni.

Za razliku od brzine drifta u pravcu električnog polja, komponenta u pravcu normalnom na pravac električnog i magnetnog polja (slika 5.23. (b)) raste i pri najnižim vrijednostima B/N (100 Hx i 200 Hx). Porastom magnetnog polja ovaj porast je sve veći, dok profil brzine drifta u $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu poprima asimetričan oblik sa vidljivim oscilacijama pri $B/N=2000$ Hx.



Slika 5.24. Fazna zavisnost difuzionih koeficijenata: (a) u $\vec{E}$ pravcu, (b) u $\vec{B}$ pravcu, (c) u $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu, pri $E/N=100 \text{ Td}$ i $f=100 \text{ MHz}$, za više vrijednosti B/N .

Na slici 5.24. (a) je prikazana fazna zavisnost longitudinalnog difuzionog koeficijenta (ND_E) za više vrijednosti B/N . Vidimo da sa porastom B/N dolazi do

smanjenja difuzije u pravcu električnog polja, što je i očekivano jer jako magnetno polje ohladi roj i smanji komponentu brzine u pravcu električnog polja. Maksimumi se sužavaju i pomijeraju ka fazama jačeg električnog polja dok se minimumi šire i postaju izrazito modulirani na najvišoj razmatranoj vrijednosti B/N .

Na slici 5.24. (b) je prikazana fazna zavisnost difuzionog koeficijenta u pravcu spoljašnjeg magnetnog polja (ND_B), pri $E/N=100$ Td i $f=100$ MHz, gdje je razmatran uticaj amplitude magnetnog polja. Kao što možemo vidjeti na slici, magnetno polje gotovo da ne utiče na ovaj koeficijent izuzev za najvišu vrijednost od 2000 Hx, gdje uočavamo njegov blagi porast.

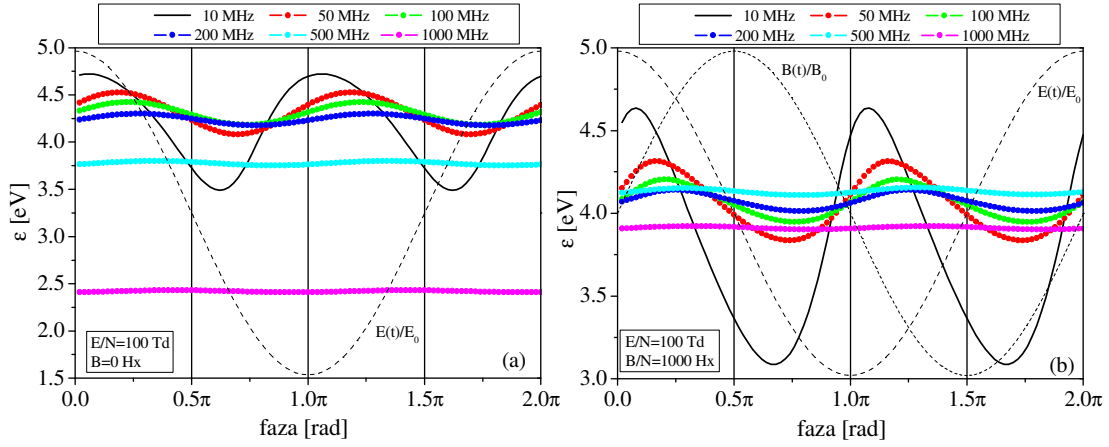
Na slici 5.24. (c) je prikazana fazna zavisnost difuzionog koeficijenta u $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu za više vrijednosti B/N . Vidimo da se ovaj koeficijent ponaša na sličan način kao i koeficijent u $\vec{E}$ pravcu, pogotovo na višim vrijednostima B/N (1000 Hx i 2000 Hx). Na nižim vrijednostima polja vidimo da su minimumi i maksimumi slabije izraženi dok na 100 Hx gotovo da ih nema.

5.7.2. Uticaj frekvencije RF polja na faznu zavisnost transportnih koeficijenata

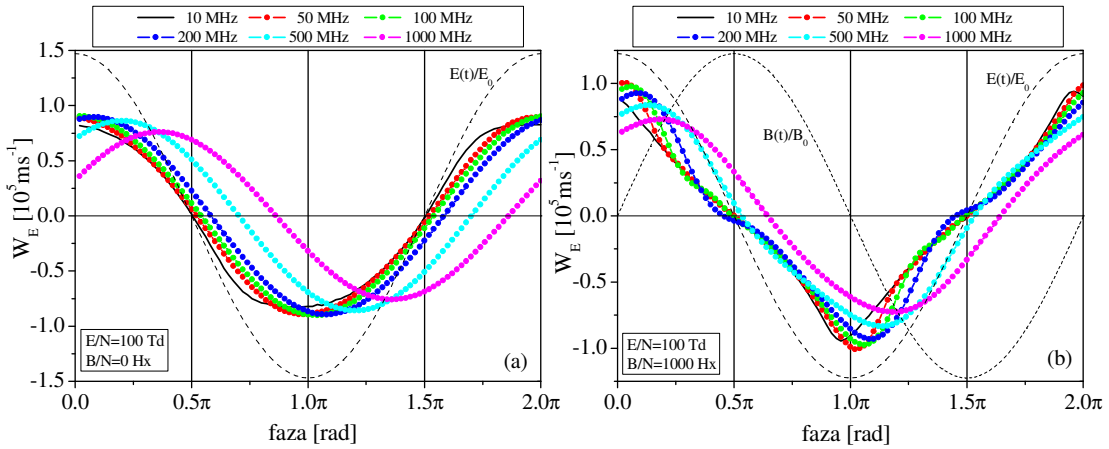
Na slici 5.25. je prikazana fazna zavisnost srednje energije roja u funkciji frekvencije polja: (a) pri $E/N=100$ Td, $B/N=0$ Hx; (b) $E/N=100$ Td, $B/N=1000$ Hx, gdje je u oba slučaja frekvencija polja uzimala vrijednosti 10 MHz, 50 MHz, 100 MHz, 200 MHz, 500 MHz i 1000 MHz. Vidimo da u oba slučaja dolazi do smanjenja srednje energije roja kako frekvencija polja raste. Brze promjene polja na elektrone utiču tako da oni nemaju dovoljno vremena da popune visokoenergijski rep funkcije raspodjele. Na najnižoj frekvenciji od 10 MHz profil srednje energije je izrazito modulisan, da bi na najvišoj frekvenciji od 1000 MHz modulacija u potpunosti nestala i vidimo da se srednja energija ponaša kao u efektivnom DC polju. Interesantno je da je pri višim frekvencijama (500 MHz i 1000 MHz) smanjenje srednje energije roja sa porastom frekvencije polja izraženije u odsustvu magnetnog polja.

Na slici 5.26. je prikazana fazna zavisnost brzine drifta u pravcu spoljašnjeg električnog polja u funkciji frekvencije polja: (a) $E/N=100$ Td, $B/N=0$ Hx;

(b) $E/N=100$ Td, $B/N=1000$ Hx, dok je u oba slučaja frekvencija polja varirana od 10 do 1000 MHz.



Slika 5.25. Fazna zavisnost srednje energije roja u funkciji frekvencije polja: (a) $E/N=100$ Td, $B/N=0$ Hx; (b) $E/N=100$ Td, $B/N=1000$ Hx.

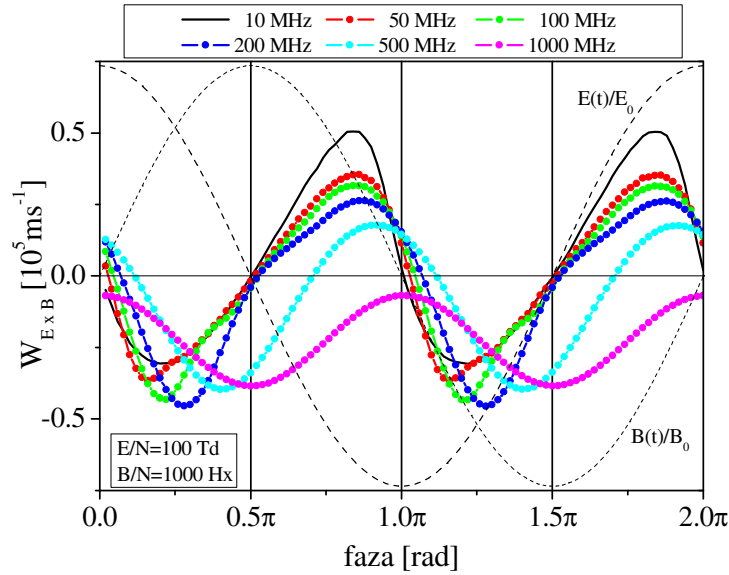


Slika 5.26. Fazna zavisnost brzine drifta u $\vec{E}$ pravcu u funkciji frekvencije polja: (a) $E/N=100$ Td, $B/N=0$ Hx; (b) $E/N=100$ Td, $B/N=1000$ Hx.

U slučaju odsustva magnetnog polja vidimo da se komponenta brzine drifta u pravcu električnog polja smanjuje sa porastom frekvencije te dolazi do porasta faznog pomjeraja u odnosu na polje. Kada je prisutno i magnetno polje vidimo da također dolazi do smanjenja $W_{\vec{E}}$ komponente sa porastom frekvencije ali vidimo i uticaj magnetnog polja. Naime, magnetno polje pri nižim frekvencijama dovodi do asimetrije $W_{\vec{E}}$

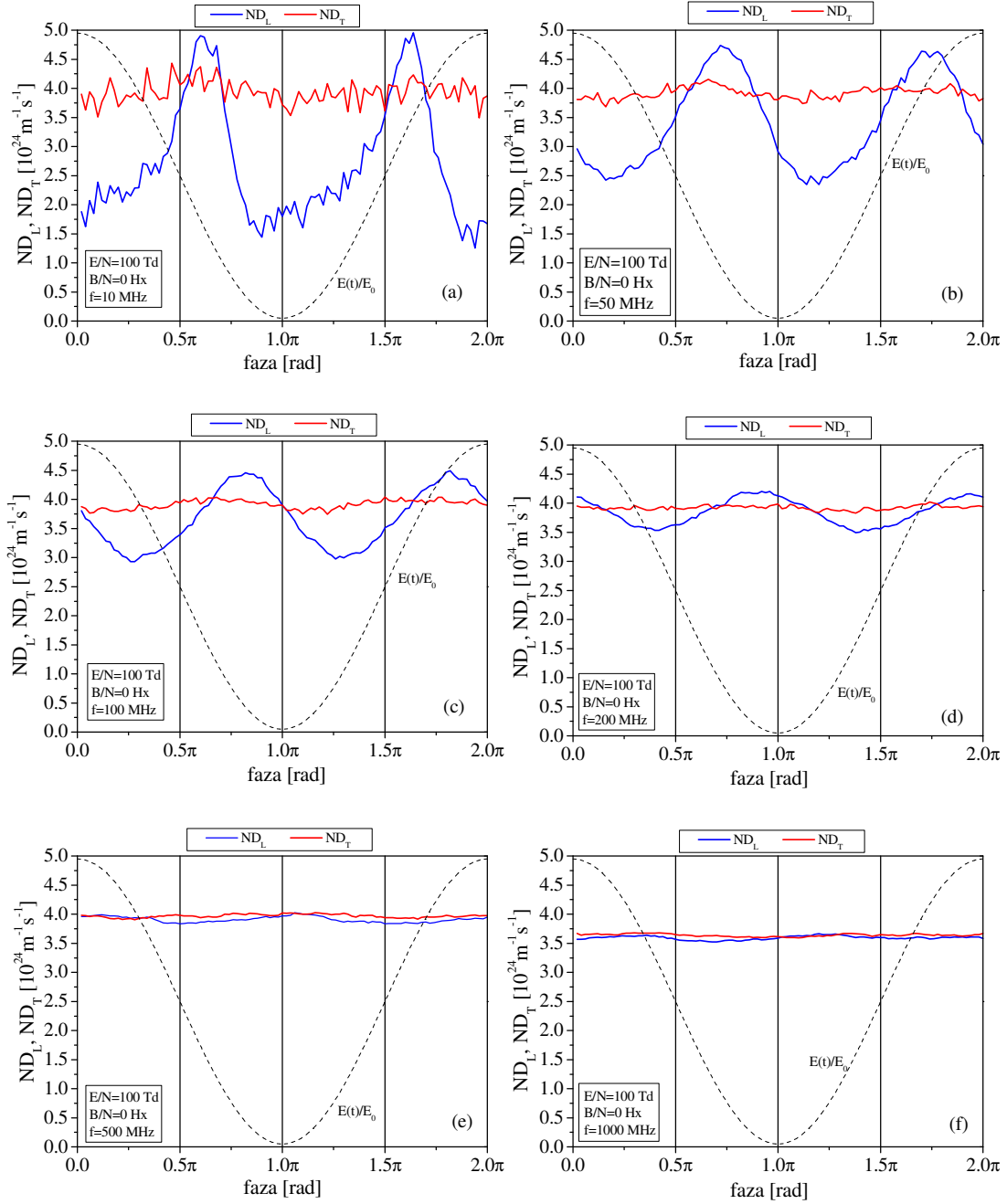
komponente i pojave trouglastog oblika njenog profila, dok na najvišoj frekvenciji od 1000 MHz ovaj uticaj nestaje.

Na slici 5.27. je prikazana fazna zavisnost brzine drifta u $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu, pri $E/N=100$ Td i $B/N=1000$ Hx, za više vrijednosti frekvencije polja. Vidimo da je na nižim frekvencijama njen profil izrazito asimetričan, pri čemu se asimetrija smanjuje kako frekvencija raste, dok na najvišoj razmatranoj frekvenciji (1000 MHz) asimetrija u potpunosti iščezava. Takođe vidimo da se povećava i srednja vrijednost brzine drifta u $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu kako frekvencija polja raste, što za posljedicu ima makroskopsku rotaciju roja elektrona.



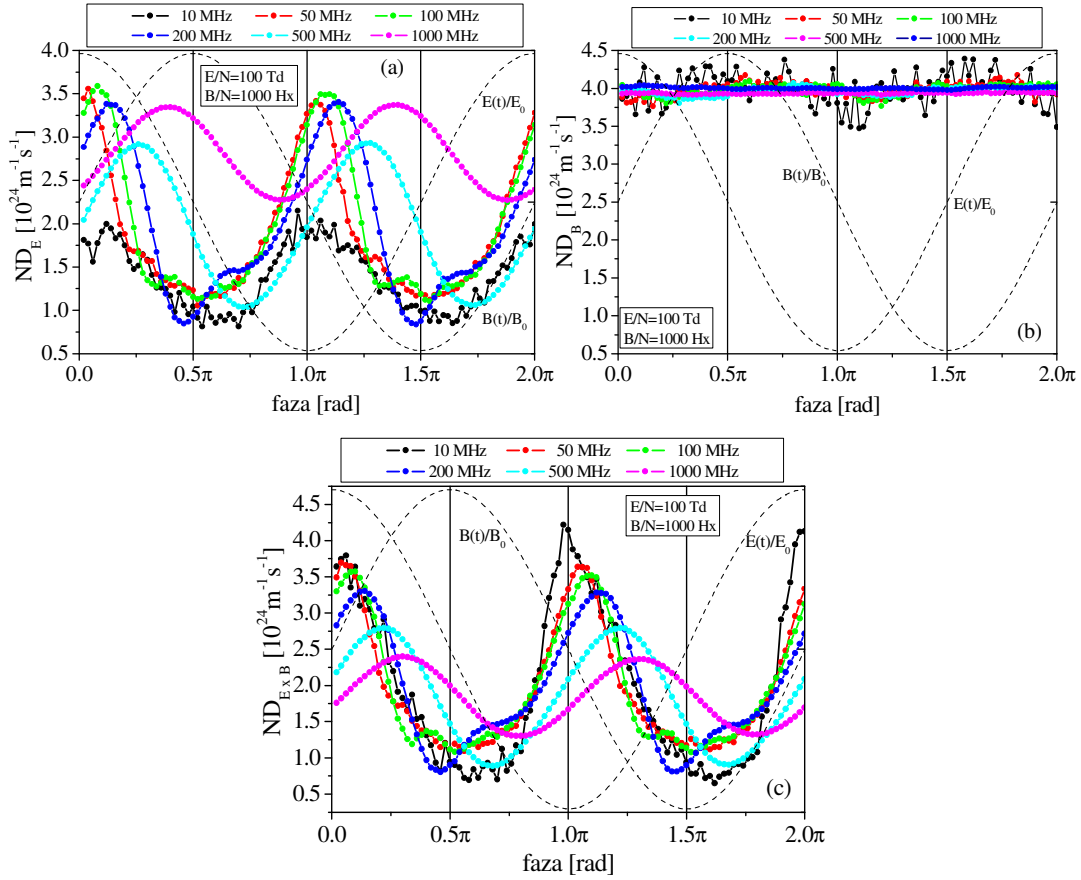
Slika 5.27. Fazna zavisnost brzine drifta u $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu u funkciji frekvencije polja pri $E/N=100$ Td, $B/N=1000$ Hx.

Na slici 5.28. je prikazana fazna zavisnost longitudinalnog (ND_L) i transverznog (ND_T) koeficijenta difuzije za više vrijednosti frekvencije električnog polja, amplitude 100 Td. Na najnižoj frekvenciji od 10 MHz vidimo znakove anomalne longitudinalne difuzije: koeficijent u pravcu električnog polja (ND_L) ima maksimum u dijelu faze kada električno polje prolazi kroz nultu vrijednost i u jednom malom dijelu faze longitudinalni koeficijent je veći od transverznog. Oba koeficijenta su jako modulirana i nisu u fazi sa poljem. Porastom frekvencije polja modulacija se smanjuje kao i anizotropija koja je, kao što vidimo, na 10 MHz jako izražena, dok na najvišoj frekvenciji od 1000 MHz gotovo iščezava.



Slika 5.28. Fazna zavisnost longitudinalnog i transverznog koeficijenta difuzije za više vrijednosti frekvencije električnog polja, amplitude 100 Td.

Na slici 5.29. je prikazana fazna zavisnost koeficijenta difuzije: (a) u pravcu električnog polja, (b) u pravcu magnetnog polja, (c) u pravcu $\vec{E} \times \vec{B}$, za više vrijednosti frekvencije polja, pri $E/N=100$ Td i $B/N=1000$ Hx.



Slika 5.29. Fazna zavisnost koeficijenta difuzije: (a) u $\vec{E}$ pravcu, (b) u $\vec{B}$ pravcu, (c) u $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu, za više vrijednosti frekvencije električnog polja, pri $E/N=100 \text{ Td}$, $B/N=1000 \text{ Hx}$.

Koeficijent u pravcu električnog polja (ND_E), kao što vidimo na slici (a) je na najnižoj frekvenciji od 10 MHz modulisan sa maksimumima u dijelu faze gdje je električno polje najjače, što je i očekivano. Porastom frekvencije (50 MHz i 100 MHz) dolazi do naglog skoka njegove maksimalne vrijednosti te do pomjeranja maksimuma ka višim fazama polja. Na 200 MHz i 500 MHz maksimalne vrijednosti se smanjuju da bi na najvišoj frekvenciji one ponovo porasle. Modulacija se porastom frekvencije smanjuje i na najvišim frekvencijama nestaje. Maksimumi su širi i nešto fazno pomjereni.

Koeficijent u pravcu magnetnog polja prikazan na slici (b) je na 10 MHz, 50 MHz i 100 MHz jako modulisan, pri čemu se modulacija smanjuje porastom frekvencije i iščezava na 1000 MHz. Kao što vidimo na slici, najviše frekvencije gotovo ne utiču na ovaj koeficijent, izuzev blagog porasta njegove srednje vrijednosti.

Koeficijent u pravcu $\vec{E} \times \vec{B}$, slika (c), na najnižoj frekvenciji od 10 MHz ima najveću srednju vrijednost sa oštrim maksimumima u dijelovima faze jakog električnog polja i sa izraženom modulacijom. Porastom frekvencije polja dolazi do smanjenja njegove srednje vrijednosti, maksimumi su sve širi i manje modulirani i pomjereni ka višim fazama.

Poređenjem rezultata prikazanih na prethodne tri slike (a, b i c) vidimo da koeficijent u pravcu magnetnog polja (ND_B) ima najveću srednju vrijednost na svim frekvencijama polja što je posljedica djelovanja jakog magnetnog polja, a sa druge strane slabog električnog (100 Td i 1000 Hx).

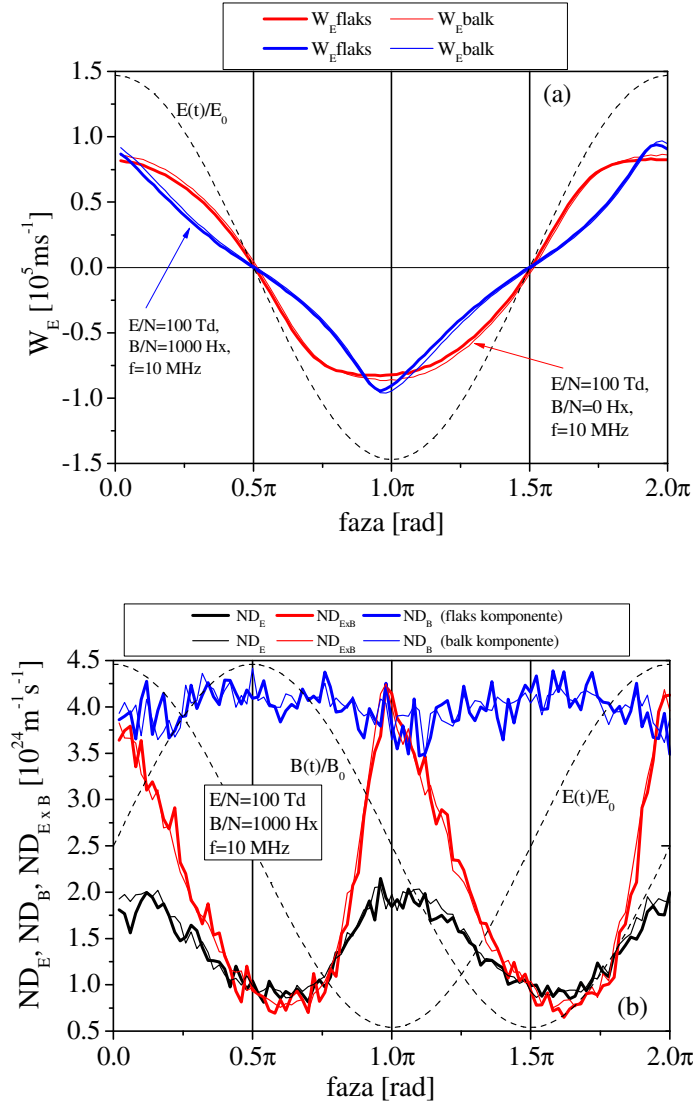
5.7.3. Uticaj nekonzervativnih procesa na transportne koeficijente u RF polju

U glavi 2. odjeljak 2.3.2. su definisane balk i flaks vrijednosti transportnih koeficijenata, gdje je rečeno kako nekonzervativni procesi utiču na same koeficijente. Kako su u poglavlju 5.7. na svim slikama predstavljene flaks vrijednosti transportnih koeficijenata, ovdje ćemo na primjeru brzine drifta i koeficijenta difuzije vidjeti da li nekonzervativni procesi u uslovima djelovanja RF električnih i magnetnih polja dovode do razlika između balk i flaks vrijednosti transportnih koeficijenata.

Na slici 5.30. (a) je prikazana brzina drifta u pravcu električnog polja i to njene balk i flaks vrijednosti (deblja i tanja linija, respektivno). Crvenom linijom je prikazana $W_{\vec{E}}$ komponenta za $E/N=100$ Td, $B/N=0$ Hx, plavom za $E/N=100$ Td, $B/N=1000$ Hx, dok je u oba slučaja frekvencija polja iznosila 10 MHz. Vidimo da su u oba slučaja razlike između balk i flaks brzine drifta male i postoje samo u onim dijelovima faze u kojima je električno polje jako, kada je balk brzina veća od flaks usljed pojačane jonizacije. Veće razlike bi se vjerovatno opažale pri većim vrijednostima E/N . Elektronski zahvat kao drugi nekonzervativni proces ovdje nema značajnijeg uticaja jer ga u A_r nema a u razmatranoj smješi, gde ima samo 20% DME, presjek za elektronski zahvat je neuporedivo manji od ostalih neelastičnih procesa.

Na slici 5.30 (b) su prikazane flaks (deblja linija) i balk (tanja linija) vrijednosti difuzionog koeficijenta u pravcima $\vec{E}$, $\vec{B}$ i $\vec{E} \times \vec{B}$ (crna, crvena i plava linija respektivno), za $E/N=100$ Td, $B/N=1000$ Hx i $f=10$ MHz. Vidimo da izvjesne razlike

između balk i flaks komponenti postoje u sva tri slučaja ali su razlike dovoljno male da možemo reći da nekonzervativni procesi u ovom razmatranom slučaju ne utiču značajno na difuziju.

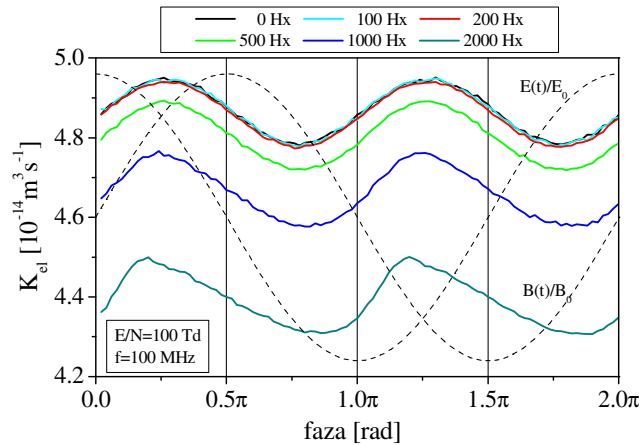


Slika 5.30. Uticaj nekonzervativnih procesa: (a) balk i flaks vrijednosti brzine drifta u $\vec{E}$ pravcu, (b) balk i flaks komponente koeficijenta difuzije u $\vec{E}$, $\vec{B}$ i $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu.

5.7.4. Brzinski koeficijenti za elastične i neelastične procese

U ovom poglavlju su prikazani brzinski koeficijenti za elastične i neelastične procese u smješi 20%DME+80% Ar u uslovima djelovanja RF polja, i to za slučaj $E/N=100 \text{ Td}$, $f=100 \text{ MHz}$, za više vrijednosti B/N . Zbog velikog broja koeficijenata ovdje su prikazani samo neki od njih.

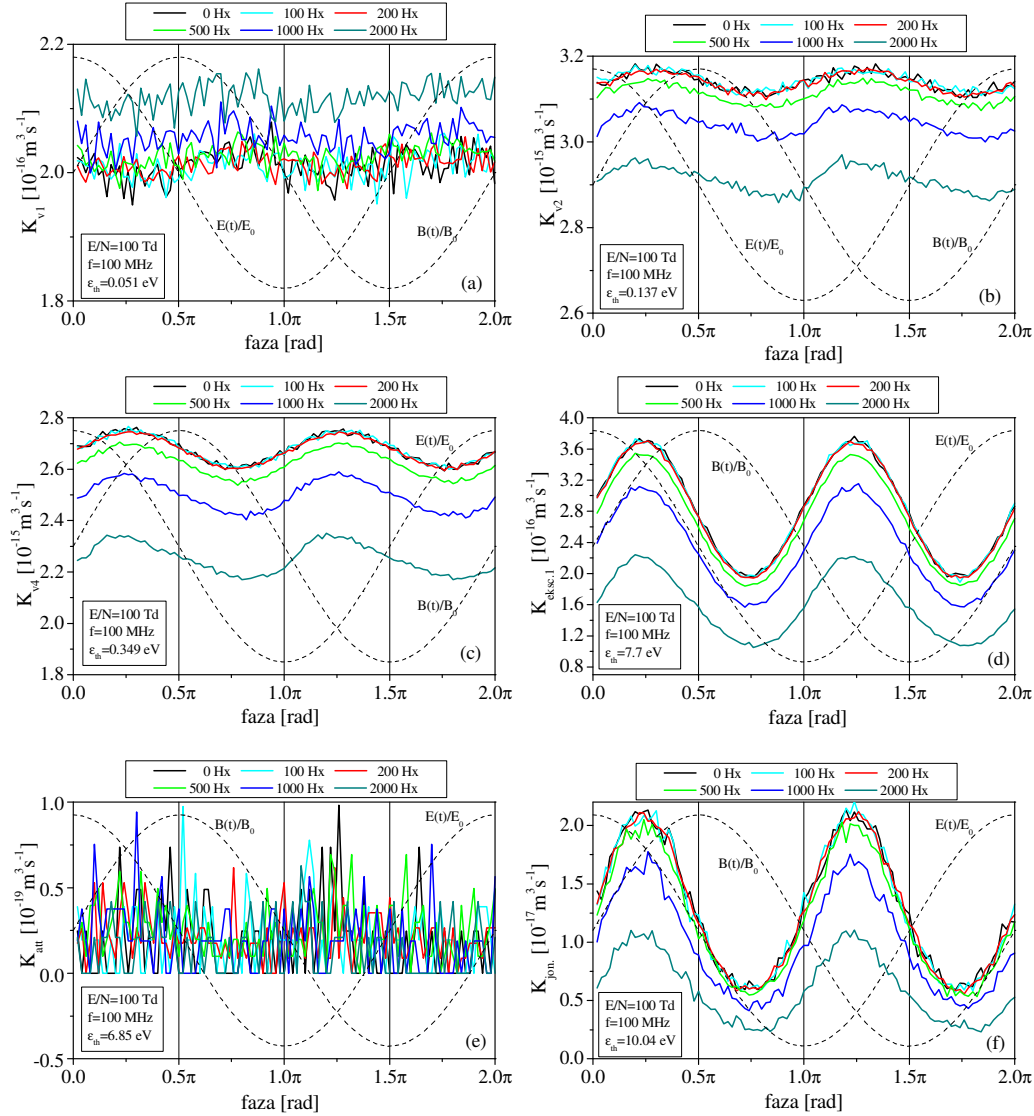
Na slici 5.31. je prikazana fazna zavisnost brzinskog koeficijenta za elastične procese u DME za nekoliko vrijednosti B/N . Kao što vidimo na slici brzinski koeficijent se smanjuje sa porastom B/N , dok pri najvišim vrijednostima (1000 Hx i 2000 Hx) dolazi do pojave asimetrije profila sa brzim porastom i sporijim opadanjem. Na nižim vrijednostima B/N ($<1000 \text{ Hx}$) profil je simetričan, sa maksimumima u dijelovima faze gdje električno i magnetno polje imaju iste apsolutne vrijednosti. Porastom B/N , vidimo da se maksimumi pomiču ka dijelovima faze jačeg električnog polja. Ako pogledamo sliku srednje energije (slika 5.22.) vidimo da se brzinski koeficijent za elastične procese ponaša na isti način.



Slika 5.31. Brzinski koeficijenti za elastične procese u DME, pri $E/N=100 \text{ Td}$, $f=100 \text{ MHz}$, za više vrijednosti B/N .

Na slici 5.32. (a), (b) i (c) su prikazani brzinski koeficijenti za procese vibracionih ekscitacija u DME, sa pragovima 0.051 eV , 0.137 eV i 0.349 eV , respektivno. Koeficijent sa najnižim pragom, vidimo da raste sa porastom magnetnog polja i jako je modulisan dok se koeficijenti prikazani na slikama (b) i (c) smanjuju sa njegovim porastom. Koeficijent sa pragom 0.349 eV (slika (c)) se ponaša kao i srednja energija (prikazana na slici 5.22.) sa maksimumima u dijelu faze gdje su električno i

magnetno polje jednakih apsolutnih vrijednosti. Na sličan način se ponaša i koeficijent za ekscitacioni proces sa pragom 7.7 eV (slika (d)), kao i brzinski koeficijent za jonizaciju prikazan na slici (f). Na slici (e) je prikazan brzinski koeficijent za zahvat elektrona sa pragom 6.85 eV, odakle vidimo da se njegove apsolutne vrijednosti smanjuju sa porastom B/N i na najvišoj vrijednosti od 2000 Hx, u većem dijelu faze njegove vrijednosti su jednake nuli.



Slika 5.32. Fazna zavisnost brzinskih koeficijenata za neelastične procese u DME: vibracione ekscitacije: (a) sa pragom 0.051 eV, (b) 0.137 eV, (c) 0.349 eV; (d) elektronske ekscitacije sa pragom 7.7 eV; (e) elektronski zahvat sa pragom 6.85 eV; (f) jonizacija; pri $E/N=100 \text{ Td}$, $f=100 \text{ MHz}$, za više vrijednosti B/N .

5.8. ZAKLJUČAK

U ovoj glavi su, u uvodnom dijelu izneseni ciljevi i motivacija proučavanja transporta roja elektrona u dimetil etru i njegovim smjesama sa Ar i Ne , te je opisana primjena ovog gasa i njegov veliki značaj.

Zatim je, u drugom odjeljku, dat detaljan pregled literature koja se odnosi na ovaj gas, sa osvrtom na transportne koeficijente i efektivne presjeke, bilo da se radi o mjerenjima ili teorijskim proračunima.

Treći odjeljak je posvećen polaznim skupovima efektivnih presjeka za e^-/DME , e^-/Ar , e^-/Ne interakciju, te transportnim koeficijentima koje oni daju u uslovima djelovanja konstantnog električnog polja. Početni skup efektivnih presjeka za DME smo preuzeli iz Biagijeve baze podataka (Biagi, 1998; <http://consult.cern.ch/writeup/magboltz/magboltz-10.0.2.f>), a za Ar i Ne iz LXcat baze (<http://www.lxcat.laplace.univ-tlse.fr>). Za proračun transportnih koeficijenata smo koristili kod ELENDF (Morgan i Penetrante, 1999) i naš Monte Carlo simulacioni kod (Bzenić i ostali, 1999; Raspopović i ostali, 2000; Petrović i ostali, 2002; Dujko i ostali 2005). Poređenjem izračunatih vrijednosti transportnih koeficijenata (brzine drifta i jonizacionog koeficijenta) sa izmjerenim vrijednostima Oettinger i saradnika (Oettinger i ostali, 1998) utvrdili smo da postoje određena odstupanja, prvenstveno koeficijenta jonizacije, kako u čistom DME tako i u smješi sa Ar .

Četvrti odjeljak je posvećen modifikaciji skupa presjeka za e^-/DME interakciju. Primijenjena je metoda rojeva za dobijanje skupa presjeka koji bi bio konzistentan sa postojećim mjerenim vrijednostima. U tu svrhu smo modifikovali elastični i totalni presjek za prenos impulsa, vibracione ekscitacije sa pragom 0.349 eV kao i presjek za elektronske ekscitacije sa pragom 7.7 eV. Totalni presjek za prenos impulsa je u energijskom opsegu od 0.004 eV-0.1 eV modifikovan od tačke do tačke, dok je u opsegu 0.11 eV-0.4 eV pomnožen faktorom 0.88. Presjek za elektronske ekscitacije sa pragom 7.7 eV je u opsegu 8.5 eV-9.5 eV modifikovan od tačke do tačke, od 10.5 eV-40 eV je pomnožen faktorom 1.8, a od 50 eV-80 eV je modifikovan ponovo od tačke do tačke. Presjek za vibracione ekscitacije sa pragom 0.349 eV je u opsegu energija 1 eV-4 eV pomnožen faktorom 0.8. Konačni, kompletni skup presjeka je prikazan na slici 5.6., gdje su isprekidanom linijom prikazani polazni presjeci. Sa tako dobijenim skupom

presjeka izračunati su transportni i brzinski koeficijenti u čistom DME i smjesama sa Ar i Ne . Rezultati tih proračuna su prikazani u odjeljku 5.

Šesti odjeljak je posvećen transportu roja elektrona u DME u uslovima djelovanja DC ukrštenog električnog i magnetnog polja ortogonalne konfiguracije. Za proračun transportnih koeficijenata je korišten naš MC kod i preporučeni skup presjeka za DME (prikazan na slici 5.6.). Izračunati su i prikazani transportni i brzinski koeficijenti (njihove balk vrijednosti) za više vrijednosti redukovano magnetnog polja. Na kraju odjeljka je na primjeru brzine drifta i koeficijenta difuzije ukazano na razliku između balk i flaks transportnih koeficijenata koja reflektuje nekonzervativnu prirodu procesa.

U sedmom odjeljku je proučavan transport roja elektrona u smješi 20%DME+80% Ar , u uslovima djelovanja vremenski zavisnih (RF), ukrštenih električnih i magnetnih polja ortogonalne konfiguracije. Proračuni su urađeni našim MC kodom, gdje je kao ulazni podatak korišćen preporučeni skup presjeka za DME (slika 5.6.). Posebno je razmatran uticaj amplitude magnetnog polja na transportne koeficijente, a posebno uticaj frekvencije polja. U ovom radu su prikazani flaks transportni koeficijenti. Uočeno je nekoliko očekivanih efekata: hlađenje roja porastom magnetnog polja, anizotropija difuzije, anomalna longitudinalna difuzija, efekat makroskopske rotacije roja elektrona sa porastom frekvencije polja i porastom amplitude magnetnog polja. U razmatranom slučaju nije primijećena vremenski razložena negativna diferencijalna provodnost. Posebno je razmatran i uticaj nekonzervativnih procesa na transportne koeficijente, tako što je izvršeno poređenje balk i flaks vrijednosti brzine drifta i koeficijenta difuzije. Uočeno je da su razlike između njih, u ovom slučaju vrlo male. Na kraju ovog odjeljka su prikazani brzinski koeficijenti za elastični i neke neelastične procese, imajući u vidu njihov veliki broj u ovoj smješi, za više vrijednosti B/N , pri $E/N=100 \text{ Td}$ i $f=00 \text{ MHz}$.

Dakle, u ovom poglavlju je konstruisan i preporučen kompletan skup podataka koji se mogu koristiti za modelovanje plazmi nastalih u gasu koji sadrži dimetil etar. Tu spadaju: kompletan skup presjeka za interakcije e^- sa molekulima DME, konzistentan sa eksperimentalnim vrijednostima brzine drifta i koeficijenta jonizacije izmjerenim u uslovima djelovanja DC električnih polja, transportni i brzinski koeficijenti u čistom DME u DC električnom polju, ukrštenom DC električnom i magnetnom polju, kao i

skup transportnih i brzinskih koeficijenata u smješi 20%DME+80%A_r u uslovima djelovanja RF polja.

6. ZAKLJUČAK

Ova doktorska disertacija je podijeljena u šest poglavlja. Prvo i drugo je posvećeno teorijskim osnovama fizike elektronskih rojeva dok su u poglavljima 3-5 prikazani dobijeni rezultati. Svi proračuni u ovoj disertaciji dobijeni su korišćenjem tri kompjuterska koda: ELENDF i BOLSIG+ koji rešavaju Boltzmannovu jednačinu u aproksimaciji dva člana i Monte Carlo simulacijom kodom, a koji su detaljno opisani u drugom poglavlju.

U trećem poglavlju ove disertacije prikazani su sljedeći rezultati istraživanja:

- Dva skupa izračunatih transportnih koeficijenata (srednja i karakteristična energija, koeficijent difuzije i koeficijent jonizacije), kao i brzinski koeficijenti za pojedinačne interakcije elektrona sa molekulima azot suboksida (N_2O) u uslovima djelovanja: konstantnih ukrštenih električnih i magnetnih polja ortogonalne konfiguracije i vremenski promjenljivih ukrštenih električnih i magnetnih polja. Presjeci korišćeni pri ovim proračunima rezultat su ranijeg rada predstavljenog u magistarskoj tezi S. Dupljanin (2010).
- Analizom transporta elektrona kroz N_2O , u uslovima DC $\vec{E} \times \vec{B}$ polja, u sudarno dominantnom režimu, uočeno je sljedeće:
 - Hlađenje roja magnetnim poljem, tj. smanjenje srednje energije s porastom intenziteta redukovano magnetnog polja (B/N).
 - Opadanje komponente brzine drifta u pravcu električnog i, očekivano, porast komponente normalne na pravac električnog i magnetnog polja sa povećanjem intenziteta magnetnog polja.
 - Difuzija elektrona je pretežno izotropna.
 - Razlika između balk i flaks vrijednosti brzine drifta i koeficijenta difuzije na višim vrijednostima E/N , tj. u energijskoj oblasti gde dominira presjek za jonizaciju. Suprotno tome, u oblasti niskih energija, ova razlika nije uočena, što je i očekivano, s obzirom na činjenicu da je presjek za zahvat u svom maksimumu dva reda veličine manji od konkurentskih neelastičnih procesa.

- Analiza transporta elektrona u uslovima RF polja (za N_2O) obuhvatila je razmatranje posebno uticaja intenziteta magnetnog polja i frekvencije električnog polja. Uočeno je sljedeće:
 - Smanjenje srednje energije roja i pojava asimetričnosti njenog profila sa porastom B/N kao i smanjenje komponente brzine drifta u $\vec{E}$ pravcu, dok je srednja vrijednost komponente u $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu, za najviše B/N različita od nule, što ima za posljedicu makroskopsku rotaciju roja kao cjeline.
 - Pojava negativne difuzije u $\vec{E} \times \vec{B}$ pravcu pri najvišoj vrijednosti B/N , vremenski razložena negativna diferencijalna provodnost, kao i pojava anomalne longitudinalne difuzije pri najnižoj razmatranoj frekvenciji polja od 10 MHz.Osnovni rezultati istraživanja prikazanog u četvrtom poglavlju ove disertacije odnose se na rasijanje elektrona u $C_2H_2F_4$ i u rezultate spadaju:
- Ranije korišćeni skup presjeka je bio baziran na presjecima za elektrone na C_2F_6 (Biagi, 2007) koji je iskonstruisan prvo bez provjere sa podacima za rojeve a onda malo promijenjen imajući u vidu samo podatke za čisti gas. Naša analiza je dodala podatke za smješe ovoga gasa sa A_r , (de Urquijo i ostali, 2009). Takođe su dodati i novi podaci za osobine vibraciono pobuđenih nivoa uključujući i procese sa niskim pragom i realne verzije procesa sa visokim pragom. Dodatno je izvršena analiza presjeka za elektronsku ekscitaciju i za jonizaciju na osnovu dodatnih rezultata dobijenih proračunima tehnikom R matrica. Ovo je najbolje fundiran set presjeka i on zadovoljava sve tražene balanse u širokom opsegu srednjih energija. Naši rezultati pokazuju da ovaj skup presjeka dobro reprodukuje izmjerene vrijednosti na čitavom opsegu E/N i za sve smješe tog gasa sa drugim gasovima, posebno sa A_r .
- Osim toga, izračunati su ostali transportni i brzinski koeficijenti za slučaj: konstantnih električnih polja u širokom opsegu vrijednosti polja (od 0.1 Td do 1000 Td), za slučaj čistog freona i za slučaj smješa sa argonom (2, 5, 10, 20 i 50% $C_2H_2F_4$ u A_r).
- Uočeno je da se transport elektrona u čistom $C_2H_2F_4$ karakteriše odsustvom negativne diferencijalne provodnosti koja se javlja u slučaju smješa sa argonom, utoliko izraženija ukoliko je zastupljenost $C_2H_2F_4$ u smješi manja, što predstavlja dobar test valjanosti određenog skupa presjeka.

- Sprovedena je i analiza izmjerenih vrijednosti efektivnog koeficijenta jonizacije Basilea i saradnika. Suprotno očekivanjima, ova analiza nije rezultirala određivanjem presjeka za zahvat tri tijela, s obzirom na činjenicu da mjerenja nisu vršena u dovoljnom broju tačaka (u dovoljno širokom opsegu E/N) na dovoljno niskim pritiscima. U slučaju podataka de Urquija i saradnika nisu nam bili dostupni pritisci na kojima su mjerenja vršena, te ovakav zadatak i nije bilo moguće obaviti. Ipak, pokazano je da ukoliko u skup presjeka koji smo odredili uključimo nešto izmijenjeni efektivni presjek za zahvat (dobijen analizom podataka Basile i saradnika za pritisak od 480 Torr) i skaliramo ga sa 0.38, 0.66 i 0.875, sa izuzetnom tačnošću možemo reprodukovati podatke izmjerene na pritiscima 59.5 Torr, 120 Torr i 238.5, redom. To ukazuje na činjenicu da efektivni presjek za zahvat u sebi sadrži doprinos presjeka za zahvat tri tijela, te time i na pravac mogućeg daljnjeg istraživanja, za šta bi nam bila potrebna nova mjerenja koeficijenta zahvata na niskim energijama, na poznatim vrijednostima pritiska.

U petom poglavlju ove disertacije prikazani su rezultati istraživanja za dimetil etar:

- Primjenom tehnike rojeva, analizom izmjerenih vrijednosti drift brzine i koeficijenta jonizacije Oettinger i saradnika (Oettinger i ostali, 1998), unapređen je u literaturi postojeći skup presjeka (Biagi, 1998) za rasijanje elektrona na molekulima dimetil etra (CH_3OCH_3 , DME). Detaljnije, renormirani su presjeci za elektronsku ekscitaciju (sa energijom praga 7.7 eV) i za vibracionu ekscitaciju (0.349 eV), kao i elastični presjek za prenos impulsa. Dobijeni skup presjeka je kompletan, tj. zadovoljen je balans kako broja čestica, tako i impulsa i energije.
- Izračunati su i transportni i brzinski koeficijenti i analiziran transport elektrona u slučajevima djelovanja konstantnog električnog polja (za čist gas i smješe sa neonom (50%) i argonom (20% i 50% DME)). Izbor smješa bio je određen postojećim eksperimentalnim podacima u literaturi.
- Izračunati su i transportni i brzinski koeficijenti i analiziran transport elektrona u slučajevima djelovanja konstantnih električnih i magnetnih polja ortogonalne konfiguracije, u sudarno dominantnom režimu (za čist gas), kao i u slučaju vremenski promjenljivih ukrštenih električnih i magnetnih polja ortogonalne

konfiguracije (za smjesu $20\%\text{CH}_3\text{OCH}_3+80\%\text{Ar}$). Posebno je analiziran uticaj intenziteta magnetnog polja i frekvencije električnog i magnetnog polja.

- Dobijeni rezultati pokazuju sljedeće:
 - Pojavu negativne diferencijalne provodnosti u smješi $20\%\text{CH}_3\text{OCH}_3+80\%\text{Ar}$, kao i anizotropiju difuzije u čistom gasu na skoro cijelom razmatranom opsegu E/N (DC polja).
 - Efekat hlađenja roja magnetnim poljem, kao i uticaj nekonzervativne prirode procesa na razliku balk i flaks vrijednosti transportnih koeficijenata, ali samo u oblasti velikih srednjih energija elektrona.
 - Difuzija je anizotropna, a javljaju se i efekti anomalne longitudinalne difuzije i efekat makroskopske rotacije roja elektrona sa porastom frekvencije polja i porastom amplitude magnetnog polja u slučaju transporta roja elektrona pod dejstvom RF ukrštenih polja.

Na kraju, naglasimo da su najvažniji rezultati istraživanja prikazanog u ovom radu: kompletan skup presjeka za rasijanje elektrona na molekulima $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4$, prvi takav u literaturi, unapređeni postojeći skup presjeka za elektrone u CH_3OCH_3 , kao i skupovi izračunatih transportnih koeficijenata i brzinskih koeficijenata za pojedinačne procese u ova dva gasa i u N_2O , kao i u izabranim smjesama ovih gasova sa argonom i neonom i to u uslovima djelovanja konstantnih i vremenski promjenljivih električnih i ukrštenih električnih i magnetnih polja. Time su formirane kompletne baze podataka koje se mogu primjeniti u fluidnim modelima plazme. Ukazano je i na dalje moguće pravce istraživanja, kao i na potrebu za novim mjerenjima, posebno karakteristične energije u slučaju $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4$ i novim teorijskim proračunima energijskih zavisnosti procesa ekscitacije vibracionih stanja.

7. LITERATURA

- Abrescia M (2008) *Nucl. Phys. B* **177-178** 293
- Angelini F, Bellazini R, Brez A, Massai M M, Spandre G and Torquati M R (1989) *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research A* **283** 755
- Angelini F, Bellazini R, Brez A, Masai M M, Raffo R, Spandre G, Spezziga M, Bozzo M, Meyer T, Ribeiro R, Markou A, Clergeau J F, Contardo D and Smadja G (1994) *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research A* **343** 441-446
- Bakhov I K, Babich L P and Kutsyk I M (2000) *IEEE Trans. Plasma Sci.* **28**, 1254
- Baraff G A and Buchsbaum S J (1963) *Phys. Rev.* **130**, 1007
- Basile G, Gallimberti I, Stangherlin S and Teich T H (1991) *Proceedings of the XX International Conference on Phenomena in Ionized Gases, edited by Vaselli M, Vol 2*, p 361
- Biagi S <http://consult.cern.ch/writeup/magboltz/>
- Biagi S (1998) <http://consult.cern.ch/writeup/magboltz/magboltz-10.0.2.f>
- Biagi S (2007) <http://rjd.web.cern.ch/rjd/cgi-bin/cross?update>
- Biagi S (2010) <http://consult.cern.ch/writeup/magboltz/magboltz-8.9.2.f>
- Boltzmann L (1872) *Wien. Ber.* **66** 275
- Bouclier R, Gaudaen J, Gouz I, Guerard B, Santiard J C, Sauli F and Wojcik R (1989) *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research A* **283** 509-514
- Božin J V, Urošević V V and Petrović Z Lj (1983) *Z. Phys.A* **312** 349
- Braglia G L (1980) *Beitr. Plasma Phys.* **20**, 147
- Bzenic S, Petrović Z Lj, Raspopović Z M and Makabe T (1999) *Jpn. J. Appl. Phys.* **38** 6077
- Bzenić S (1997) *Doktorska disertacija*, Fizički fakultet, Beograd
- Bzenić S, Raspopović Z M, Sakadžić S, Petrović Z Lj (1999) *IEEE Trans. Plasma Sci.* **27** 78
- Cattani G (2012) *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **661** S6-9
- Cerron Zeballos E, Crotty I, Hatzifotiadou D, Lamas Valverde J, Williams M C S and Zichichi A (1997) *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **396** 93-102
- Cindro V, Kolanoski H, Lange A, Lauterjung D, Müller F, Siegmund T, Söder W and Thurn H (1991) *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research A* **309** 411-421

- Colafranceschi S *et al.* (2010) *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **617** 146
- Cottrell T L and Walker I C (1965) *Trans. Faraday Soc.* **61** 1585-1593
- Cottrell T L and Walker I C (1967) *Trans. Faraday Soc.* **63** 549-554
- Crompton R W and Elford M T (1973) *Aust J. Phys* **26**, 771
- Crompton R W and Jory R L (1962) *Aust. J. Phys.* **15** 451
- Crompton R W, Elford M T and Robertson A G (1970) *Aust J. Phys* **23**, 667
- Crutzen P J (1971) *Geophys. Res.* **76**, 7311
- Davies G H L and Williams A W (1977) *J. Phys D* **10**, 269
- De Urquijo J, Juárez A M, Basurto E and Hernández-Ávila J L (2009) *Eur. Phys. J. D* **51** 2 241
- Dujko S (2004) *Magistarska teza, Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu*
- Dujko S (2009) *The multi-term Boltzmann equation analysis and Monte Carlo study of hydrodynamic and non-hydrodynamic charged particle swarms* PhD Thesis, James Cook University
- Dujko S, Raspopović Z M, Petrović Z Lj (2005) *J. Phys. D: Appl. Phys.* **38** 2952
- Dupljanin S (2008) *Magistarska teza, Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu*
- Dupljanin S, de Urquijo J, Šašić O, Basurto E, Juárez A M, Hernández-Ávila J L, Dujko S and Petrović Z Lj (2010) *Plasma Sources Sci. Technol.* **19** 025005
- Elford M T, Sasaki S and Ness K F (1994) *Aust. J. Phys* **47** 253
- Engelhardt A G and Phelps A V (1964) *Phys. Rev.* **133** A 375
- England J P and Elford M T (1988) *Aust. J. Phys* **41** 701
- Feng R, Cooper G and Brion C E (2000) *Chemical Physics* **260** 391-400
- Frost L S and Phelps A V (1962) *Phys. Rev.* **127** 1621
- Geijsberts M H J, Hartjes F G, Pannekoek J G, Schmitz J and Udo F (1991) *NIKHEF-H/91-21*
- Gonzalez-Dias D and Sharma A (2013) *J. Instrum.* **8** T02001
- Graedel T E and Crutzen P J (1993) *"Atmospheric Change: An Earth System Prospective"*, Freeman, New York
- Guruvenket S, Ganjigunte R S Iyer, Shestakova L, Morgen P, Larsen N B and Mohan Rao G (2008) *Appl. Surf. Sci.* **254** 5722
- Haddad G N and Crompton R W (1980) *Aust. J. Phys.* **33** 975
- Hagelaar G J M and Pitchford L C (2005) *Plasma Sources Sci. Tech.* **14** 722-733

- Hansen N, Cool T A, Westmoreland P R and Kohse-Höinghaus (2009) *Prog. Eng. Combust. Sci.* **35** 168
- Hayashi (1992) personal communication, www.lxcat.net
- Hayashi database, www.lxcat.net, retrieved on October 17, 2014.
- Hegerberg R, Elford M T and Skullerud H R (1982) *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15** 797
- Heinlin J, Morfill G, Landthaler M, Stolz W, Isbary G, Zimmerman N J L, Shimizu T, Karrer S (2010) *JDDG* **8** 968
- Holstein T (1946) *Phys. Rev.* **70** 367
- Hunter S R and Christophorou L G (1984) *Electron-molecule Interactions and their Applications*, vol. **2** 89 Academic Press, New York
- Huxley L G H and Bennett F W (1940) *Phil. Mag.* **30** 396
- Huxley L G H and Crompton R W (1974) *The Diffusion and Drift of Electrons in Gases*, (Wiley-Interscience, New York)
- Hayes T R, Dreisbach M A, Thomas P M, Dauteront-Smith W C, Heimbrook L A (1989) *J. Vac. Sci. Technol. B* **7**, 1130
- Ikuta N. and Sugai Y. J. (1989) *J. Phys. Soc. Jpn*, **56** 115
- Itoh T and Musha T (1960) *J. Phys. Soc. Japan* **15** 1675
- Jacob J H and Mangano J A (1976) *Appl. Phys. Lett.* **29** 467
- Jasiński M, Szczucki P, Dors M, Mizeraczyk J, Lubański M and Zakrzewski Z (2000) *Czech. J. Phys.* 50 (Suppl.) 285
- Kameta K, Ukai M, Kamosaki T, Shinsaka K, Kouchi N and Hatano Y (1992) *J. Chem. Phys.* **96** 4911
- Kim Y T, Yoon S G, Yoon S G, Jung S C, Suh S J and Yoon D H (2004) *Surface and Coatings Tech.* **180-181** 250-253.
- Kirmse K H R, Wendt A E, Disch S B, Wu J Z, Abraham I C, Meyer J A, Breun R A and Woods R C (1996) *J. Vac. Sci. Technol. B* **14** 710
- Kline L E, Partow W D, Bies W E (1989) *J. Appl. Phys* **65** 70
- Koizumi H, Hironaka K, Shinsaka K, Arai S, Nakazawa H, Kimura A, Hatano Y, Ito Y, Zhang Y, Yagishita A, Ito K and Tanaka K (1986) *J. Chem. Phys.* **85** 4276
- Kumar K, Skullerud H R and Robson R E (1980) *Aust. J. Phys.* **33** 343
- Labelle C B and Gleason K K (2001) *J. Appl. Pol. Sci.* **80** 2084
- Larsen P H and Elford M T (1986) *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **19** 449

- Lawton S A and Phelps A V (1978) *J. Chem. Phys.* **69** 1055
- Lazović S, Puač N, Miletić M, Pavlica D, Jovanović M, Bugarski D, Mojsilović S, Maletić D, Malović G and Milenković P (2010) *New Journal of Physics* **12** 083037
- Liboff R L (1969) *Introduction to the Theory of Kinetic Equations* (Wiley: New York)
- Lin S L, Robson R E and Mason E A (1979) *J. Chem. Phys.* **71** 3483
- Lin S L, Viehland L A and Mason E A (1979) *J. Chem. Phys.* **37** 411
- Lorentz H A (1905) *Proc. Amsterdam Acad.* **74** 438
- Luft P E (1975) *Jila Information Center Report* 14
- LX-cat, <http://www.lxcat.laplace.univ-tlse.fr>
- Maeda K, Makabe T, Nakano N, Bzenić S and Petrović Z Lj (1997) *Phys. Rev. E* **55** 5901
- Makabe T and Mori T (1980) *J. Phys. D* **13U** 387
- Makabe T and Petrović Z Lj (2006) *Plasma Electronics: Applications in Microelectronics Device Fabrications*, Taylor&Francis Group, New York
- Malović G N (1999) *Doktorska disertacija, Fizički fakultet Univerziteta u Beogradu*
- Malović G N, Božin J V, Jelenković B M and Petrović Z Lj (1997) *Nucl. Inst. and Methods in Phys. Research B* **129** 317
- Malović G N, Božin J V, Jelenković B M and Petrović Z Lj (1999) *Eur.Phys J. D* **7** 129
- Malović G N, Strinić A, Božin J V, Manola S and Petrović Z Lj (2000) *Eur.Phys J. D* **10** 147
- Masuda S and Nakao H (1990) *IEEE Trans. Ind. Applicat.* **26** 374-383
- Matsui H, Saeki H, Tomoji K, Tabata H and Mizobuchi B (2004) *J. Appl. Phys.* **95** 5882.
- McAllister I W (1989) *J. Phys. D: Appl. Phys.* **22** 1783
- Mittal G, Chaos M, Sung C J and Dryer F L (2008) *Fuel Process. Technol.* **89** 1244
- Miyamoto J and Shipsey I P J (1999) *Nuclear Physics B (Proc. Supl.)* **78** 695-702
- Mizuno A, Shimizu K, Chakrabarti A, Dascalescu L and Furuta S (1995) *IEEE Trans. Ind. Applicat.* **31** 957-964
- Mok Y S, Ravi V, Kang H C, and Rajanikanth B S (2003) *IEEE Transaction on Plasma Science*, **31** 157-165
- Morgan W L (1979) *JILA Information Center Report* 19
- Morgan database, www.lxcat.net, retrieved on October 17, 2014.

- Morgan W L and Penetrante B M (1990) *Comp. Phys. Commun.* **58** 127
- Ness K F (1993) *Phys. Rev. E* **47** 327
- Ness K F and Robson R E (1986) *Phys. Rev. A* **34** 2185
- Ness K F and Robson R E (1989) *Phys. Rev. A* **39** 6596
- Oed A (1988) *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research A* **263** 351-359
- Oettinger E, Hilderbrandt M and Schmidt B (1998) *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research A* **412** 355-360
- Parker Jr. J H and Lowke J J (1969) *Phys. Rev.* **181** 290
- Peetars Z, Rodgers S, Charnley S B, Schriver-Mazzuoli L, Schriver A, Keane J V and Ehrenfreund P (2006) *Astronom. Astrophys.* **445** 197
- Penetrante B M and Berdsley J N (1984) *J. Phys D* **17** 1971
- Petrović Z Lj (1985) *Low Energy Electron Transport Coefficients and Scattering Cross Sections Obtained Using Swarm Methods*, Australian National University, doktorska disertacija
- Petrović Z Lj and Crompton R W (1989) *Aust J. Phys.* **42** 609
- Petrović Z Lj, Crompton R W and Haddad G N (1984) *Aust. J. Phys.* **37** 23
- Petrović Z Lj, Dujko S, Smarić D, Malović G, Nikitović Ž, Šašić O, Jovanović J, Stojanović V and Radmilović-Rađenović M (2009) *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42** 194002
- Petrović Z Lj, O'Malley and Crompton R W (1995) *J. Phys B: At. Mol. Opt. Phys.* **28** 3309
- Petrović Z Lj, Raspopović Z M, Dujko S and Makabe T (2002) *Appl. Surf. Sci.* **192** 1
- Petrović Z Lj, Wang W C and Lee L C (1988) *J. Appl. Phys* **64** 1625
- Phelps A V *Rev. Mod. Phys.* (1968) **40** 399-410
- Pitchford L C and Phelps A V (1982) *Phys Rev. A* **25** 540
- Pitchford L C, Oneil S V, Rumble Jr. J R (1981) *Phys. Rev. A* **23** 294-304
- Press W H, Teukolsky S A, Vetterling W T and Flannery B P (1994), *Numerical Recipes in C*, Press Syndicate, University of Cambridge
- Raizer Y P (1991) *Gas Discharge Physics* Springer-Verlag, Berlin
- Raspopović Z M (1999) Doktorska disertacija, Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu
- Raspopović Z M, Sakadžić S, Petrović Z Lj, Makabe T (2000) *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33** 1298
- Raspopović Z R, Sakadžić S, Bzenić S and Petrović Z Lj (1999) *IEEE Trans. Plasma*

- Sci.* **27** 1241
- Reid I D (1979) *Aust. J. Phys.* **32** 231
- Résbois R and Leener M (1977) *Classical Kinetic Theory of Fluids* (Wiley Interscience: New York)
- Riegler W, Lippmann C and Veenhof R (2003) *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **500** 144–62
- Robertson A G (1972) *J. Phys B: Atom. Mol. Phys* **5** 648
- Robson R E (1984) *Aust. J. Phys.* **37** 35
- Robson R E (1986) *J. Chem. Phys.* **85** 4486
- Robson R E (1991) *Aust. J. Phys.* **44** 685
- Robson R E (1994) *Aust. J. Phys.* **47** 279
- Robson R E, Hildebrandt M and Schmidt B (1997) *Nucl. Instrum. Methods A* **304** 75
- Rockword S D and Green A E (1980) *Comp. Phys. Comm.* **19**, 377
- Sakadžić S (2000) *Magistarska teza, Elektrotehnički fakultet, Beograd*
- Sakai Y, Tagashira M and Sakamoto S (1972) *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **5** 1010
- Sauli F (1997) *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research A* **386** 531
- Schmidt B. (1993) *Comments At. Mol. Opt. Phys.* **28** 379
- Schmidt B., Berkhan K., Goetz B. and Mueller M. (1994) *Physica Scripta* **T53** 30
- Segur P, Bordage M, Balaguer J and Yousufi M (1983) *J. Comput. Phys* **50** 116
- Sharma A and Sauli F (1992) *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research A* **323** 280-283
- Sharma A and Sauli F (1993) *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research A* **334** 420-424
- Shnide Y, De Robertis G, Iaselli G, Loddo F, Pugliese G, Tupputi S and Roselli G (2009) *Nucl. Instrum. Methods Phys.Res. A* **602** 754
- Skullerud H R (1968) *J. Phys. D: Appl. Phys.* **1** 1567
- Specht L T, Lawton S A and DeTemple T A (1980) *J. Appl. Phys.* **51** 166
- Stokić Z, Fraga M M F R, Božin J, Stojanović V, Petrović Z Lj, Jelenković B M (1992) *Phys. Rev. A* **45** 7463
- Sugohara R T, Homem M G P, Iga I, de Souza G L C, Machado L E, Ferraz J R, dos Santos A S, Brescansin L M and Lee M T (2013) *Physical Review A* **88** 022709
- Šašić O, de Urquijo J, Juárez A M, Dupljanin S, Jovanović J, Hernández-Ávila J L, Basurto E and Petrović Z Lj (2010) *Plasma Sources Sci. Technol.* **19** 034003

- Šašić O, Dupljanin S, de Urquijo J and Petrović Z Lj (2013) *J. Phys. D: Appl. Phys.* **46** 325201
- Šašić O, Dupljanin S, Dujko S and Petrović Z Lj (2009) *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **267** 377-381
- Tachibana K and Phelps A V (1981) *J. Chem. Phys.* **75** 3315
- Tagashira H, Sakai Y and Sakamoto S (1977) *J. Phys. D: Appl. Phys.* **10** 1051-63
- Takeuchi Y, Tamagawa T, Asami F, Yoshikawa A, Iwahasani T, Konami S and Iwakiri W (2012) *JINST* **7** C03042
- Takeuchi Y, Tamagawa T, Kitaguchi T, Yamada S, Iwakiri W, Asami F, Yoshikawa A, Kaneko K, Enoto T, Hayato A, Kohmura T and the GEMS/XACT team (2014) *JINST* **9** C01002
- Tennyson J, Brown D B, Munro J J, Rozum I, Varambhia H N and Vinci N (2007) *J. Phys., Conference Series* **86** 012001
- Thomas W R L (1969) *J. Phys. B* **2** 551
- Thomson R M, Smith K and Davies A R (1976) *Comp. Phys. Comm.* **11** 369
- Townsend J S (1915) *Electricity in Gases*, Oxford University Press, London
- Vav'ra J (1993) *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research A* **324** 113
- Verbeek R and Van der Weide J (1997) *SAE Technical Paper* 971607
- Villa F (1983) *Nucl. Instr. and Meth.* **217** 273-276
- Vizireanu S, Ionita M D, Dinescu G, Enculescu I, Baibarac M and Baltog I (2012) *Plasma Process. Polym.* **9** 363
- Vrhovac S B and Petrović Z LJ (1996) *Phys. Rev. E* **53** 4012
- White R D, Dujko S, Ness K F, Robson R E, Raspopović Z and Petrović Z Lj (2008) *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** 025206
- White R D, Robson R E and Ness K F (1995) *Aust. J. Phys.* **48** 925.
- White R D, Robson R E and Ness K F (2002) *Appl. Surf. Sci.* **192** 26
- White R D, Robson R E and Ness KF (1999) *IEEE Trans. Plasma Sci.* **27** (5) 1249
- Yamada T, Lay H T and Bozzelli W J (1998) *J. Phys. Chem. A* **102** 7286-7293

BIOGRAFIJA

Snježana Dupljanin je rođena 08.02.1976. godine u Banjaluci, Republika Srpska, Bosna i Hercegovina. Srednju Elektrotehničku školu je završila 1994. godine u Banjaluci. Prirodno-matematički fakultet, odsjek za fiziku-opšti smjer je završila 2000. godine sa prosječnom ocjenom 8.72 i stekla zvanje diplomirani fizičar. Dobitnik je zlatne plakete koju dodjeljuje Univerzitet u Banjaluci, za najboljeg studenta Prirodno-matematičkog fakulteta za školsku 1998/1999. godinu. Magistarske studije na Fizičkom fakultetu Univerziteta u Beogradu, odsjek Eksperimentalna fizika jonizovanih gasova je završila 2008. godine, odbranivši magistarski rad pod nazivom “Sudari i transport elektrona u azot suboksidu i njegovim smješama” i stekla zvanje Magistar fizičkih nauka. Doktorske studije Fizičkog fakulteta u Beogradu, uža naučna oblast Fizika jonizovanog gasa i plazme je upisala školske 2009/2010. godine.

Od 2001. godine je u radnom odnosu na studijskom programu za fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta, prvo u zvanju Asistenta a sada Višeg asistenta.

Objavila je četiri rada u vodećim međunarodnim časopisima, sa impakt faktorom većim od jedan, jedanaest saopštenja na međunarodnim i tri na nacionalnim skupovima.

Udata je i majka jednog djeteta.

Прилог 1.

Изјава о ауторству

Потписани-а SNJEŽANA ĐURĐANIN

број уписа 014 / 2009-2010

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

PRIKLADNA METODE ELEKTRONSKIH DOJEVA ZA DOBIVANJE
KOMPLETNIH SKUPOVA PRESTJEKA I TRANSPORTNIH KOEFICIJENATA
ZA AZOTSUVOKSID, TETRAFLUOROETAN I DIMETIL ETAR

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

Потпис докторанда

У Београду, 20.04.2016.

Snježana Đurđanin

Прилог 2.

Изјава о истоветности штампане и електронске
верзије докторског рада

Име и презиме аутора SNJEŽANA ĐURUŠANIN

Број уписа 014 / 2009-2010

Студијски програм FIZIKA JONIZOVANOG GASA I PLAZME

Наслов рада PRIMENA METODE ELEKTRONSKIH POJEVA ZA DOBIVANJE KOMPLETNIH
SKUPOVA PRESJEKA I TRANSPORTNIH KOEFICIJENATA ZA AZOTSUBOKSA,
TETRAFLUOROETAN I DIMETIL ETAR

Ментор PROF. DR. OLIVERA JATIC, AKADEMIK DR. ZORAN PETROVIC

Потписани Snježana Đurušanin

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

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

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

Потпис докторанда

У Београду, 20. 04. 2016.

Snježana Đurušanin

Прилог 3.

Изјава о коришћењу

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

PRIMENJENA METODE ELEKTRONSKIH ROZEVA ZA DOBIVANJE
KOMPLETNIH SKUPOVA PRESJEKA I TRANSPORTNIH KOEFICIJENATA
ZA AZOT DIOKSIDA, TETRAFLUOROETAN I DIMETIL ETAR

која је моје ауторско дело.

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

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

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

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

Потпис докторанда

У Београду, 20.04.2016.

Јулијана Марковић