

Универзитет у Бањој Луци
Природно-математички факултет
Студијски програм физика
Бања Лука

University of Banja Luka
Faculty of sciences
Department of Physics
Banja Luka

Физика 2010 БЛ
Physics 2010 BL

22.-24. септембар 2010., Бања Лука,
Република Српска, БиХ
22.-24. September 2010, Banja Luka
Republic of Srpska, BiH

Уредик:

Бранко Предојевић
Универзитет у Бањој Луци, Природно-математички факултет, М. Стојановића 2,
78 000 Бања Лука, Република Српска, БиХ

E-mail: bpredojevic@teol.net

Рецензенти:

Братислав Маринковић
Институт за физику, Прегревица 118,
11080 Земун, Република Србија

Лука Поповић
Астрономска Опсерваторија, Волгина 7,
11060 Београд, Република Србија

Технички уредник:
Милан Поповић, Природно-математички факултет, Бања Лука

CIP - Каталогизација у публикацији
Народна и универзитетска библиотека
Републике Српске, Бања Лука

53(082)
52(082)

НАУЧНИ скуп "Физика 2010 БЛ" (2010 ; Бања Лука)
Физика 2010 БЛ = Physics 2010 BL : [зборник
радова са научног скупа], 22-24. септембар 2010.
Бања Лука / [организатор] Природно-математички
факултет Бања Лука, Студијски програм физика ;
уредник Бранко Предојевић]. - Бања Лука :
Природно-математички факултет, 2011. - 239 стр. :
илустр. ; 24 цм + 1 CD

Тираж 100. - Библиографија уз сваки рад. -
Резимеи на срп. и енгл. језику уз сваки рад.

ISBN 978-99955-21-21-9
1. Природно-математички факултет. Студијски
програм физика (Бања Лука)

COBISS.BH-ID 1948696

Секција: Судари електрона са атомима и молекулама

С. Тошић, Д. Шевић, В. Пејчев, Б. П. Маринковић

Диференцијални пресеци за расејање електрона на атомима сребра и олова.

181

Б. Томчик

Производња и примена кисеоничке плазме у третирању површина материјала.

191

Ј. Б. Маљковић, А. Р. Милосављевић, Д. Шевић, Б. П. Маринковић

Мерење апсолутних диференцијалних пресека за еластично расејање електрона на малим биомолекулама.

201

Секција: Физика плазме

Ж. Никитовић

Утицај радикала на пражњења у реалним применама.

213

О. Шашић, С. Дупљанин, С. Дујко, Ј de Urquiјо, З. Љ. Петровић

Најновији комплети пресека за расејање електрона у гасовима добијени техником ројева.

221

Н. Шкоро, Д. Марић, Г. Маловић, З. Љ. Петровић

Особине и могуће примене микропражњења.

233

Физика 2010 БЛ

Научни одбор

Драгољуб Мирјанић, председник, Академија наука и умјетности
Републике Српске, Бања Лука, Република Српска, БиХ

Зоран Петровић, Институт за физику, Земун, Република Србија

Лука Поповић, Астрономска опсерваторија Београд, Република Србија

Братислав Маринковић, Институт за физику, Земун, Република Србија

Синиша Игњатовић, ПМФ Бања Лука, Република Српска, БиХ

Организациони одбор

Бранко Предојевић, ПМФ Бања Лука, председник

Синиша Вученовић, ПМФ Бања Лука,

Дупљанин Сњежана, ПМФ Бања Лука,

Сретен Лекић, ПМФ Бања Лука

Милан Поповић, ПМФ Бања Лука

Судари електрона са атомима и молекулима

МЕРЕЊЕ АПСОЛУТНИХ ДИФЕРЕНЦИЈАЛНИХ ПРЕСЕКА ЗА ЕЛАСТИЧНО РАСЕЈАЊЕ ЕЛЕКТРОНА НА МАЛИМ БИОМОЛЕКУЛИМА

*Ј. Б. Маљковић, А. Р. Милосављевић, Д. Шевић и Б. Маринковић
Лабораторија за атомске сударне процесе, Институт за физику,
Универзитет у Београду, Прегревица 118, Србија*

Сажетак. У овом раду је представљено мјерење апсолутних диференцијалних пресека за расејање електрона на малим биомолекулима, рађено на електронском спектрометру УГРА. Мјерења су вршена методом укрштених млазева електрона и молекула мете. Релативни диференцијални пресеци су мјерени у функцији угла расејања и упадне енергије електрона. Апсолутни диференцијални пресеци добијени су „*relative flow*“ методом. Добијени експериментални резултати се добро слажу са теоријским прорачунима.

Abstract. We have presented measurements of absolute differential cross sections for elastic scattering of electrons on small biomolecules, carried out on the electron spectrometer UGRA. Measurements have been done by using a crossed electron-molecular target beam method. Relative differential cross sections have been measured as a function of scattering angle and incident electron energy. Absolute differential cross sections were determined by relative flow method. Experimental results are in good agreement with theoretical calculations.

1. УВОД

Истраживања интеракције електрона са молекулима значајним за биологију иницирана су последњих година потребом разумевања суштине механизма који доводи до оштећења биолошког материјала услед јонизујућег зрачења. Сви ефекти код живих организама, који настају као последица високоенергијског зрачења описују се термином радијационо оштећење (*radiation damage*).

Показано је да важну улогу у овом оштећењу заправо имају секундарни електрони ниских енергија, формиран на путу високоенергијске честице. Примарна високоенергијска честица на свом путу кроз био-материјал, производи велики број побуђених молекула, позитивних и негативних јона и секундарних електрона (СЕ) чије су енергије испод 30 eV. Највећи део енергије депоноване у био-материјалу

од стране примарне честице, управо је садржан у великом броју нискоенергијских електрона [1]. У кратком временском интервалу, након стварања, СЕ трпе низ еластичних и нееластичних судара унутар медијума, и ти процеси дефинишу биолошке ефекте који су последица јонизујућег зрачења.

2000-године, у часопису „*Science*“, Boudaiffa и коаутори публиковали су резултате мјерења оштећења ДНК под дејством електрона ниских енергија (3-20 eV) [1]. У експерименту је плазмид ДНК, депонован на хемијски чистој површини, бомбардован монохроматским млазом електрона ниских енергија у условима високог вакуума. У циљу изучавања директног оштећења ДНК, покренути су бројни експерименти истраживања интеракције електрона са њеним градивним деловима или аналогним молекулима, под добро дефинисаним условима.

Постојећи теоријски прорачуни диференцијалних пресека за еластично расејање електрона на биомолекулима, у опсегу енергија који одговара нашим мерењима, се заснивају на методи независних атома (*Independent Atom Method – IAM*). Код овог метода процес расејања се своди на интеракцију електрона са индивидуалним градивним атомом тог молекула и пресек се добија као сума појединачних пресека за атоме. На малим енергијама, где су атомски пресеци упоредиви са квадратом интератомских растојања у молекулу, IAM не даје добре резултате [2] јер појединачни атоми не могу се више сматрати независним центрима расејања и вишеструка расејања у молекулу нису занемарљива. Као резултат, атоми се међусобно „заклањају“ унутар молекула од упадних електрона, и молекулски пресек више није обична сума атомских. Новији прорачуни су базирани на коригованој форми IAM, познатој као SCAR (*Screen Corrected Additivity Rule*) [2]. Прорачуни атомских пресека укључују релативистичке ефекте, као и нееластичне процесе.

2. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНИ СИСТЕМ

Мерења су извођена на електронском спектрометру УГРА (акроним од УГаона РАСподела) методом укрштених електрон–молекулских млазева. Детаљан опис експеримент дат је у референци [3]. Електронски топ производи добро колимирани електронски млаз, који се укршта под правим углом са молекулским млазом добијеним из капиларе унутрашњег пречника 0,8 mm. Расејани електрони се убрзавају и фокусирају 4-електродним сочивом у двоструки цилиндрични огледалски анализатор (ДЦОА). Након селекције по енергији електрони се помоћу 3-електродног сочива фокусирају у детектор. Електронски топ је фиксиран на плочи која може да ротира око гасне игле у опсегу углова од -30° до 110° , у односу на правац улазне оптике. Примарни електрони добијају се термалном емисијом са катоде од торираног волфрама, при струјама 2,1-2,2 А. Почетна термална расподела електрона емитованих са катоде лимитира максималну енергијску резолуцију на око 0,5 eV. Систем цилиндричних електрода електронског топа се може поделити у први део за екстракцију и

други део који фокусира млаз у интеракциону запремину. Овај систем садржи и 4 дефлекторске електроде за фино подешавање млаза. Последња електрода је на маси, као и интеракциона запремина. ДЦОА чине два концентрична цилиндра радијуса R_1 и R_2 , на потенцијалима V_1 и V_2 , респективно. Енергија пролаза, (E_p), односно енергија честица које могу да прођу кроз анализатор, је линеарна функција разлике потенцијала између цилиндара. Енергијска резолуција ДЦОА (ΔE) је такође дефинисана овом разликом потенцијала. За уређај који се користи на УГРИ, ΔE је 3%-4% од E_p , тако да у циљу добијања високе енергијске резолуције потребно је радити на малим енергијама пролаза. При мерењу диференцијалних пресека коришћен је режим рада са високим енергијама пролаза ДЦОА (реда 20 eV), што омогућава интезивнији сигнал и мању промену трансмисије.

Сви елементи система налазе се у вакуумској комори, унутар μ -металног оклопа који редукује магнетно поље Земље ($<2 \times 10^{-7}$ T). Основни притисак у комори реда 4×10^{-7} mbar остварује се помоћу турбомолекуларне пумпе, која је на ред везана са механичком пумпом која остварује предвакум ($\approx 10^{-2}$ mbar). Радни притисак је био око 5×10^{-6} mbar. Током рада је вођено рачуна да се радни притисак налази у домену вредности где је двоструко расејање занемарљиво, што се потврђује линеарном зависношћу одброја од притиска. Приликом мерења, гасни систем (узорак, цеви, игла) се греје ради стабилности експерименталних услова и побољшања сигнала. Шема гасног система који се користи при „*relative flow*“ мерењима дата је на слици 1.

Детаљнији опис мерења на апаратури УГРА дат је у референци [4]. Овде само укратко наводимо основне типове мерења.

Спектри губитака енергије електрона (electron energy loss). При овим мерењима фиксирани су енергија електрона (E_0), угао расејања (θ) и енергија пролаза (E_p), а мери се одброј у функцији потенцијала на последњој електроди улазног анализаторског сочива. Оваква мерења дају увид у положај енергијских-нивоа атома или молекула мете.

Релативни диференцијални пресеци у функцији угла и енергије (Differential Cross Sections - DCSs). Релативни диференцијални пресек за еластично расејање електрона на молекулу, за одређене вредности енергије и угла расејања - $DCS(E_0, \theta)$, одређује се мерењем одброја расејаних електрона у максимуму еластичног пика, у функцији енергије упадних електрона или угла расејања (видети одељак 3.1).

Апсолутни диференцијални пресеци (relative flow method). Овај метод је заснован на мјерењу интезитета еластичног расејања за испитивани и референтни гас (у нашем случају коришћен Ag или Kr), на датом углу расејања (θ) и упадној енергији електрона (E_0). Показано је да уколико су протоци из игле једнаки (дајући једнаке профиле млазева у интеракционом региону), за испитивани и референтни гас, апсолутни пресеци за испитивани гас могу бити израчунати на основу познатих пресека за референтни гас. (видети одељак 3.2)

Спектри енергијске расподеле позитивних јона. Систем је подешен за аквизицију позитивних јона насталих фрагментацијом или јонизацијом

молекула услед удара електрона. Мерења се врше при фиксираним параметрима (E_0 , θ , E_p), и мери се одброј у функцији потенцијала на последњој електроди улазног анализаторског сочива. Добијени спектри представљају зависност интензитета струје позитивних јона од њихове кинетичке енергије након судара.

3. ТИПОВИ МЈЕРЕЊА НА АПАРАТУРИ УТРИ

3.1 Мерење релативних диференцијалних пресека (*DCS*)

У случају еластичног расејања измерени одброј (I) повезан је са диференцијалним пресеком следећом формулом :

$$I(E_0, \theta) = DCS(E_0, \theta)\eta(E_0)V_{eff}(E_0, \theta) \quad (5)$$

где су: $DCS(E_0, \theta)$ - диференцијални пресек за расејање електрона упадне енергије E_0 , под углом θ , $\eta(E_0)$ - функција одзива детектора за електроне енергије E_0 , $V_{eff}(E_0, \theta)$ - ефективна интеракциона запремина изражена формулом:

$$V_{eff} = \int \rho(r)f(r)\Delta\Omega(r)G[\theta(r)]dr \quad (6)$$

где су: $\rho(r)$ - просторна расподела густине гасне мете, $f(r)$ - функција просторне расподеле упадног електронског млаза, $G[\theta(r)]$ - претпостављена угаона зависност диференцијалног пресека у области од интереса. Ефективна запремина је дефинисана пресеком упадног електронског млаза и млаза мете, унутар прихватног угла детектора.

3.1.1 Мерење диференцијалног пресека у функцији угла расејања

Из формуле (1) следи да је зависност диференцијалног пресека у функцији угла, при фиксираној вредности упадне енергије дата као:

$$DCS_{E_0}(\theta) = \frac{I_{E_0}(\theta)}{\eta(E_0)V_{effE_0}(\theta)} \quad (7)$$

Дакле, да би мерени интензитет $I_{E_0}(\theta)$ представљао тражени релативни пресек $DCS_{E_0}(\theta)$ потребно је V_{eff} одржавати константном. Уколико V_{eff} није потпуно константна при промени угла, потребно је урадити корекције како би се добио реалан облик зависности пресека од угла расејања. Ове корекције ефективне запремине се могу одредити на основу упоређивања добијене угаоне зависности за неку познату мету (на пример аргон или криптон), мерене под истим условима, са постојећим референтним

пресеком. Треба напоменути да су корекције ефективне запремине значајне пре свега на малим угловима. Да би интеракциона запремина остала унутар прихватног угла анализатора, примарни електронски млаз се подешава за сваку енергију [5].

3.1.2 Мјерење диференцијалних пресека у функцији упадне енергије

Из формуле (1) следи зависност диференцијалног пресека у функцији упадне енергије електрона, при фиксираном углу расејања:

$$DCS_{\theta}(E_0) = \frac{I_{\theta}(, E_0)}{\eta(E_0)V_{eff\theta}(E_0,)} \quad (8)$$

Мерење $I_{\theta}(E_0)$ даје $DCS_{\theta}(E_0)$, ако су трансмисиона функција и просторна расподела примарног електронског млаза (самим тим V_{eff}) константне. Ово се у експерименту обезбеђује подешавањем фокусирајућих напона на електронском топу и улазном анализаторском сочиву за сваку упадну енергију електрона [5]. Додатне евенуталне корекције измереног релативног пресека се такође раде на основу добијене енергијске зависности за неку познату мету (аргон или криптон), мерене под истим условима.

3.2. Мерење апсолутних диференцијалних пресека (*relative flow*)

Мерени релативни диференцијални пресеци су нормирани на апсолутну скалу према „*relative flow*“ методу [6]. Овај метод је заснован на мјерењу интезитета за еластично расејање за испитивани и референтни гас (у нашем случају коришћен Аг или Кг), на датом углу расејања (θ) и упадној енергији електрона (E_0). Показано је [6] да уколико су протоци из игле једнаки (дајући једнаке профиле млазева у интеракционом региону), за испитивани и референтни гас, апсолутни пресеци за испитивани гас могу бити израчунати на основу формуле:

$$DCS_x(E, \theta) = DCS_{ref}(E, \theta) \frac{N_x F_{ref}}{N_{ref} F_x} \sqrt{\frac{M_{ref}}{M_x}} \quad (9)$$

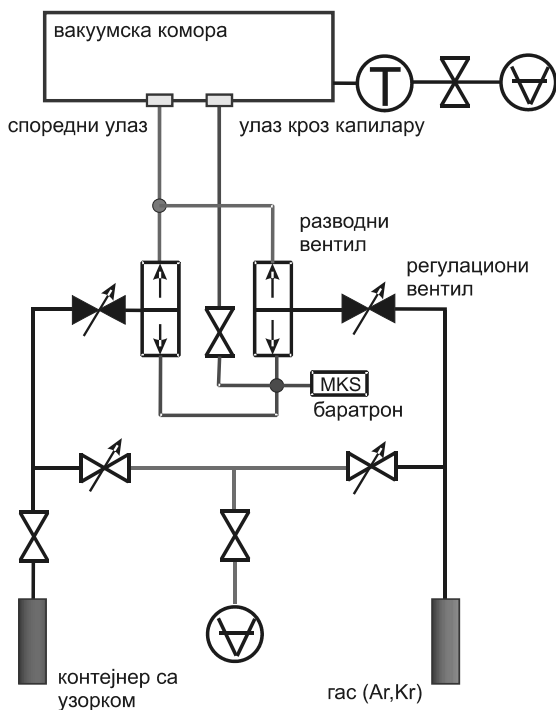
DCS_x, DCS_{ref} су апсолутни диференцијални пресеци за еластично расејање електрона на испитиваном и референтном гасу; N_x, N_{ref} су мерени интезитети сигнала; F_x, F_{ref} је мерени проток (*flow*) и M_x, M_{ref} су молекулске масе испитиваног и референтног гаса, респективно.

Према [6], да би се добили исти профили млазева у интеракционом региону, притисци иза игле за оба гаса морају бити такви да обезбеде једнаке слободне путеве, који су на основу кинетичке теорије гасова повезани гас-кинетичким дијаметрима. Пошто овај услов зависи од молекулских дијаметара и маса [6], важно је размотрити како грешке у

молекулским дијаметрима утичу на финални пресек. Ако је интеракциона запремина увек унутар прихватног угла детектора и ако је флукс електрона униформан, онда једначина (5) важи и без овог услова (укупан број честица у интеракционој запремини остаје исти). Ако је прихватни угао детектора мањи од интеракционе запремине, овај услов мора важити да би једначина (5) била валидна.

Приликом мерења апсолутних диференцијалних пресека, однос притисака испитиваног и референтног гаса је подешаван према гас кинетичким дијаметрима, али је такође уочено да варирањем овог односа ($\pm 15\%$) апсолутна вредност пресека се не мења значајно. Silva и сарадници [7] су недавно описали модификацију *relative flow* метода, која заобилази потребу за познавањем молекулских дијаметара коришћених гасова, што је значајно јер ове вредности за многе молекуле нису познати.

Проток гасова (F_x, F_{ref}) је одређиван затварањем улаза кроз капилару у вакуумску комору (слика 1), и мјерењем помоћу баратрона пораста апсолутног притиска у гасној линији иза капиларе у функцији времена. Пораст притиска у времену показује строгу линеарност. F_x, F_{ref} су одређени из експериментално добијених зависности, које су фитоване линеарном функцијом методом најмањих квадрата. За сваку експерименталну тачку, измерени сигнал се умањује за вредност шума који се добије преусмеравањем гаса кроз споредни пролаз – „*side leak*“ (слика 1). Шум је битнији на нижим енергијама и мањим угловима, гдје његов допринос може ићи и до 10 %.

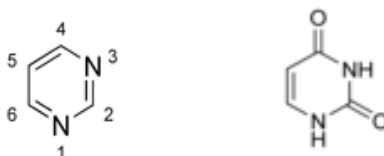


Слика 1. Гасни систем апаратуре УГПА

4. РЕЗУЛТАТИ

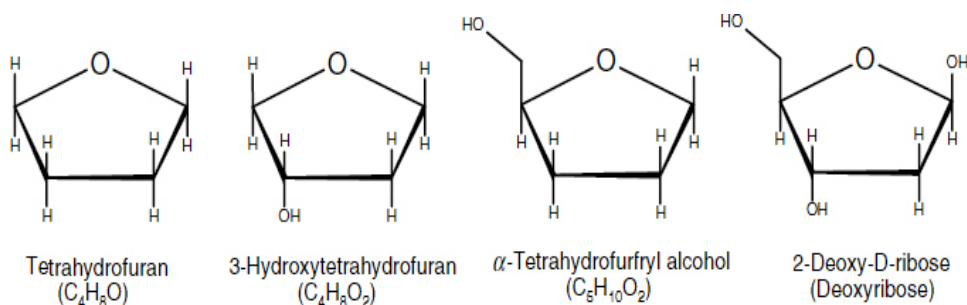
У овом раду биће представљен део резултата добијених за пиримидин (Пу), $C_4H_4N_2$ [8] и 3-хидрокситетрахидрофуран (3hTHF), $C_4H_8O_2$ [9].

Пиримидин, Пу, садржи 2 азотова атома у шесточланом прстену, слика 2. Три нуклеобазе нађене у нуклеинским киселинама: цитозин ($C_4H_5N_3O$), тимин ($C_5H_6N_2O_2$) и урацил ($C_4H_4N_2O_2$) су деривати пиримидина. Због сличности са нуклеотидским прстеном, Пу је коришћен као модел за проучавање расејања електрона на молекулима који су аналогни деловима ДНК.



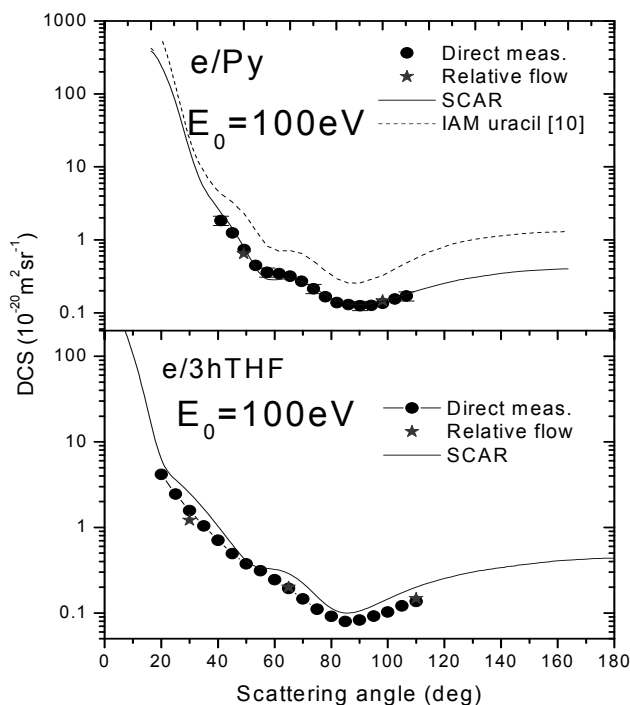
Слика 2. Структурна формуле за пиримидин ($C_4H_4N_2$) (лево) и урацил ($C_4H_4N_2O_2$) (десно)

3-хидрокситетрахидрофуран (3hTHF), $C_4H_8O_2$ се може сматрати аналогним шећеру дезоксирибози, која чини „кичму” ДНК (слика 3).



Слика 3. Структурне формуле за дезоксирибозу и аналогне молекуле [9]

Апсолутни диференцијални пресеци за еластично расејање електрона на Пу и 3hTHF су експериментално одређени користећи *relative flow* технику и Аг односно Кг, као референтни гас. Експериментални апсолутни угаоно-диференцијални пресеци за еластично расејање електрона на Пу [8] и 3hTHF [9], упадне енергије 100 eV су представљени на слици 4. Треба напоменути да нормирани експериментално добијени релативни диференцијални пресеци (пуни кругови) се добро слажу са тачкама добијеним “*relative flow*” методом (звезде). Интересантно је приметити да је угаона зависност диференцијалног еластичног пресека за Пу слична ономе за 3hTHF. Оба их карактерише мали плато између 40° - 50° и минимум између 80° - 90° . Асолутне вредности пресека за Пу су такође



Слика 4. Угаона зависност диференцијалног пресека за еластично расејање електрона на Py [8] и 3hTHF [9]

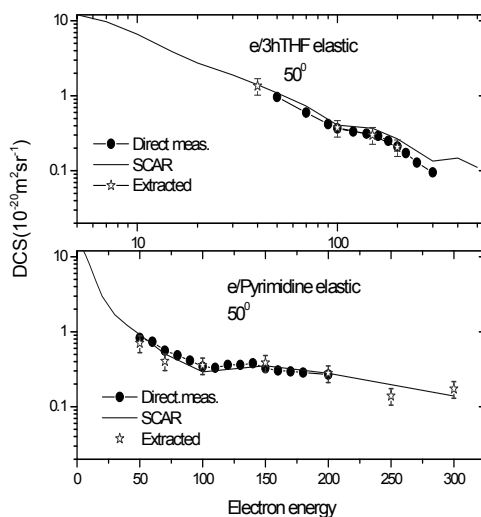
блиске онима за 3hTHF . Из овога се може закључити да су еластично расејани електрони у случају Py и 3hTHF као мета, слично редистрибуирани у интеракционој запремини.

Експериментални резултати за Py и 3hTHF су упоређени са SCAR прорачунима и види се јако добро слагање и у релативном облику и по апсолутној вредности. IAM теоријски резултати [10] за урацил су упоређени са теоријским и експерименталним резултатима за Py и показују слично понашање у облику угаоне дистрибуције. На апсолутној скали су нешто виши од Py .

Енергијска зависност апсолутног диференцијалног пресека за еластично електрон- Py [8] и електрон- 3hTHF [9] расејање на фиксном углу 50° је дата на слици 5. Експериментална мерења су нормирана на апсолутну скалу на основу вредности које су добијене из апсолутних угаоно зависних пресека. За оба молекула, директно мерени енергијски зависни пресеци се добро слажу са апсолутним тачкама добијеним из апсолутних угаоно зависних пресека. Експериментални резултати су упоређени и са SCAR [2,8,9] теоријом, и показују добро слагање.

Финални сет апсолутних пресека је конзистентан са сва три типа независно добијених резултата: релативним мјерењима у функцији угла расејања при фиксној упадној енергији, релативним мјерењима у функцији упадне енергије при константном углу расејања и апсолутним мерењима.

Поређење ова 3 типа независних резултата користи провери експерименталне процедуре и поузданости референтних пресека.



Слика 6. Енергијска зависност диференцијалног пресека за еластично расејање електрона на Py [8] и 3hTHF [9]

5. ЗАКЉУЧАК

Мерење апсолутних пресека за упадне енергије електрона од 50-300 eV, у угаоном распону од 30°-110°, је урађено методом укрштених млазева. Апсолутна мерења, са Ag или K_g као референтним гасом, су дала апсолутне тачке, у односу на које су нормирани релативни пресеци. Теоријски резултати, добијени SCAR [2] методом се добро слажу са експериментом и у облику и апсолутној вредности. Ови резултати доприносе фундаменталном разумевању интеракције електрона са биомолекулама.

ЗАХВАЛНИЦА

Захваљујемо се др. F. Blanco и др. G. Garcia на сарадњи. Овај рад је финансиран од стране Министарства за науку и технолошки развој, Републике Србије у оквиру пројекта 141011 и подржан од COST акција MP1002 “Nano-scale insights in ion beam cancer therapy (Nano-IBCT)” и CM0601 “Electron Controlled Chemical Lithography (ECCL)”.

ACKNOWLEDGEMENTS

We are very grateful to Dr. F. Blanco and Dr. G. Garcia for fruitful collaboration. This work has been carried out within the project 141011 financed by Ministry of Science and Technological Development of Republic Serbia and motivated by research within COST actions MP1002 “Nano-scale insights in ion beam cancer therapy (Nano-IBCT)” and CM0601 “Electron Controlled Chemical Lithography (ECCL)”.

6. ЛИТЕРАТУРА

- [1] Boudaiffa B., Cloutier P., Hunting D., Huels M. A., and Sanche L., *Science*, **287**, 1658 (2000).
- [2] Blanco F, García G., *Phys. Lett. A*, **317**, 458 (2003)
- [3] Milosavljević A.R., Mandžukov S, Šević D., Čadež I., Marinković B.P.,
- [4] Milosavljević A. R., Magistarski rad (Univerzitet u Beogradu), (2004)
- [5] Milosavljević A. R., Doktorski rad (Univerzitet u Beogradu), (2006)
- [6] Nickel J. C., Zetner P. V., Shen G. and Trajmar S., *J.Phys.E:Sci.Instrum.* **22**, 730 (1989)
- [7] Silva H., Muse J., Lopes M. C. A., Khakoo M. A., *Physical Review Letters*, **101**, 033201 (2008)
- [8] Maljković J. B., Milosavljević A.R., Blanco F. Šević D., García G., Marinković B. P., *Phys.Rev. A* **79**, 052706 (2009)
- [9] Milosavljević A. R., Blanco. F., Maljković J. B., Šević D., Garsia G., Marinković B. P., *New J.Phys.*, **10**, 103005 (2008)
- [10] Mozejko P., Sanche L. *Radiat.Environ.Biophys.* **42**, 201-211 (2003)