

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

Садржај:

Предавања по позиву:

З. Љ. Петровић

Транспорт наелектрисаних честица у гасовима.

1

**Б. П. Маринковић, Д. Шевић, Б. Предојевић,
В. М. Пејчев, С. Д. Тошић, М. С. Рабасовић, В. Д. Бочварски,
Б. А. Петрушевски, Н. С. Николић и Д. Радосављевић**

Електрон - метал атом судари и базе података.

13

С. Буквић

Један метод за кориговање ефеката самоапсорпције.

47

Н. Симоновић

Временски зависан опис атомских и молекулских фрагментационих процеса.

57

П. Јовановић

Утицај гравитационих сочива на спектар квазара.

83

М. Савић, М. Радмиловић-Рађеновић

Моделовање интеракција плазме са површинама.

101

А. Р. Милосављевић

Истраживања на синхротронима најновије генерације - SOLEIL.

111

Саопштења:

Секција: Спектралне линије као алат за истраживања у физици и астрофизици:

Е. Бон, Л. Ч. Поповић

Анализа кинематичких карактеристика плазме у централним деловима активних галаксија на основу емитованог спектра.

123

Д. Илић, Л. Ч. Поповић

Физичке особине широколинијског региона код активних галактичких језгара.

145

А. Ковачевић, Л. Ч. Поповић, Д. Илић

Дугопериодичне промене у оптичком спектру активних галактичких језгара; примери NGC4151 и 3C390.3.

157

С. Симић, Л. Ч. Поповић

Преглед истраживања феномена гама блескова.

163

З. Симић

Штарково ширење спектралних линија тешких метала у атмосферама топлих звезда.

173

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

Предговор

Овај зборник има карактер монографије која садржи изабране радове на тематику истраживања којој гравитирају истраживачке групе са научних института на Универзитету у Београду и Студијског програма за физику Природно-математичког факултета Универзитета у Бањој Луци. Приказани су резултати у три актуелене области физике и астрофизике: спектралне линије као алат за истраживања у физици и астрофизици, судари електрона са атомима и молекулама и физика плазме.

Организатори су свјесни да избор тема и радова не покрива укупне резултате заједничких истраживања у којима су учествовали истраживачи из Републике Србије (Институт за физику у Земуну, Астрономска опсерваторија у Београду, Физички факултет у Београду, Математички факултет у Београду) и Природно-математичког факултета (Студијски програм физика) у Бањој Луци, али се надају да је та сарадња представљена у одговарајућој мјери. Због тога овај зборник и има, у ширем смислу, карактер монографије о сарадњи набројаних образовних и научно-истраживачких институција у времену од 2000. до 2010. године.

Скуп је под називом „Физика 2010 БЛ“ одржан на Природно-математичком факултету у Бањој Луци од 22. до 24. 09. 2010. Финансијска средства за одржавање скупа добијена су од Министарства за науку и технологију Републике Српске којем се овом приликом захваљујемо. Такође се захваљујемо свима који су својом активношћу допринијели успјешном раду овог научног скупа.

Организациони одбор

Физика 2010 БЛ

Научни одбор

Драгољуб Мирјанић, предсједник, 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, предсједник

Синиша Вученовић, ПМФ Бања Лука,

Дупљанин Сњежана, ПМФ Бања Лука,

Сретен Лекић, ПМФ Бања Лука

Милан Поповић, ПМФ Бања Лука

Предавања по позиву

ТРАНСПОРТ НАЕЛЕКТРИСАНИХ ЧЕСТИЦА У ЈОНИЗОВАНИМ ГАСОВИМА: ОД ЕЛЕМЕНТАРНИХ СУДАРНИХ ПРОЦЕСА ПА ДО ПРИМЕНА У САВРЕМЕНИМ ПЛАЗМА ТЕХНОЛОГИЈАМА

З. Петровић¹, С. Дујко¹, А. Банковић¹, Г. Маловић¹

*¹Институт за физику, Универзитет у Београду, Прегревица 118,
11080 Земун, Република Србија*

Сажетак. У раду је дат кратак преглед основа транспортне теорије примењене на проучавање ројева наелектрисаних честица у јонизованим гасовима. Будући да је физика ројева кључна за моделовање неравнотежних плазми лако би могла да се ограничи само на прикупљање неопходних података. Међутим, треба имати у виду чињеницу да многи кинетички ефекти обликују функцију расподеле и јако утичу на бројне апликације, чак их и омогућавају. У овом прегледу фокус је на кинетичким феноменима и доприносу који је овом пољу дала Лабораторија за Гасну Електронику Универзитета у Београду.

Abstract. We give a brief review of the foundations of transport theory as applied to study charged particle swarms in ionized gases. Being a cornerstone of the modeling of non-equilibrium plasmas swarm physics could be easily limited to collection of the relevant data. One has to be aware also of the numerous kinetic data that may shape the distribution functions and strongly affect, even make possible some applications. In this review we focus on kinetic phenomena and try to represent the contributions of the Gaseous Electronics Laboratory of the University in Belgrade.

1. УВОД У ФИЗИКУ РОЈЕВА НАЕЛЕКТРИСАНИХ ЧЕСТИЦА

Физика јонизованих гасова је чврсто повезана са физиком плазме иако она представља много шири појам. Јонизовани гасови су сви гасови у којима постоје слободни носиоци наелектрисиња, док плазма захтева да се задовољи читав низ специфичних услова везаних за средњу дужину слободног пута, Деbye-ев радијус и димензију плазме. Поред тога можемо поједностављено тврдити да су плазме квази неутрални системи наелектрисаних честица и честица гаса који имају довољну концентрацију

да се ефекти наелектрисања могу осетити макар и кроз заклањање спољашњег електричног поља. Код јако јонизованих плазми Coulomb-овске силе доводе до јаке везе наелектрисаних честица, односно, до колективних феномена, таласа и нестабилности.

У лимиту малих степена јонизације налазе се ројеви наелектрисаних честица где се њихово кретање, под дејством електричног поља, може описати кроз баланс импулса, енергије и броја честица, одређен искључиво сударима са молекулима позадинског гаса. У таквим условима, ројеви наелектрисаних честица представљају мост између атомске и молекуларне сударне физике и феноменологије јонизованих гасова, а теоријска основа за опис феномена ројева је кинетичка теорија. Поједностављено, можемо рећи да у случају ројева посматрамо транспорт независних честица које добијају енергију и импулс од електричног поља, а губе их искључиво у сударима са молекулима гаса. У овим процесима могу бити или у равнотежи или ван равнотеже (особине се мењају од тачке до тачке или у времену) [1-3]. И поред тога што су честице независне, оне се могу посматрати као колектив – ансамбл и описати средњим величинама попут величине дрефта и дифузије.

Негде на пола пута између јако спрегнутих плазми и ројева налази се домен физике јонизованих гасова који се често назива разним именима: гасна пражњења, нискотемпературске плазме, хладне плазме или онако како ми највише волимо да их зовемо – неравнотежне плазме. У домену неравнотежних плазми истовремено су значајни како сударни и транспортни процеси, тако и Coulomb-овске интеракције и колективни ефекти. Ово је домен и најзначајнијих технолошких примена плазме, у које спадају плазма нагризање за производњу интегрисаних кола, плазма чишћење површина, имплантација јона ради промене особине материјала, плазма извори за наношење танких слојева, плазма извори за примену у медицини и бројне примене плазми за промене особина површина и материјала. Физика неравнотежне плазме је одувек била фокусирана на оне фундаменталне проблеме који су у највећој мери подржавали актуелне технолошке апликације. У том смислу је често и означена као примењена, па чак и инжењерска физика, иако је константно показивала да се фундаментална открића могу наћи и у том домену. На крају, у препорукама за приоритете у науци за период од 2010. до 2020. године, Америчка академија наука је као један од првих приоритета ставила јачање физике неравнотежне плазме [4].

Неравнотежност нискотемпературске плазме се састоји у раздвајању кинетике електрона од кинетике тешких честица. То се може постићи када је степен јонизације релативно мали. У тим условима Coulomb-ова интеракција не успева да повеже импулсе електрона и јона. Ако су одабрана електрична поља таква да електрони могу да постигну велике брзине и енергије, а да јони дисипирају свој импулс у бројним сударима, онда се практично може неограничено повећавати “температура” (средња енергија) електрона док истовремено јони и основни гас остају на собној температури. Очигледно је да оваква врста плазме нуди могућност примене за обраду органских и полимерских материјала па чак и за

третман ткива и живих организама. Ова, последња могућност је тренутно најактуелнија тема која фокусира област неравнотежне плазме и одређује приоритете истраживања.

У Лабораторији за гасну електронику Института за физику у Београду развијен је читав низ теоријских, нумеричких и експерименталних техника [3,5-8] за изучавање неравнотежне плазме које су послужиле и као основа за развој низа примена [3,9,10]. Као што смо рекли у основи физике неравнотежних плазми је изучавање сударних и транспортних процеса слободних наелектрисаних честица у гасовима. Овај рад покушава да да један шири приказ тема, идеја и фундаменталних резултата добијених у домену физике ројева са истовременим циљем да се прецизније опишу плазма технологије.

У разматрању неравнотежних плазми треба имати у виду да је теоријски опис равнотежних плазми могућ у генералном случају – закони за равнотежне плазме важе за све равнотежне плазме. Проблем је само што је, донекле, равнотежна плазма постојала у раном космосу, док се данас равнотеже и примена равнотежне плазме могу остварити само локално. Том приликом се температура користи као ефективни параметар за примену равнотежних закона. Код неравнотежних плазми, чак и када је средња енергија (температура) електрона иста, свака врста неравнотежне плазме је у основним физичким процесима и кинетици веома различита. На особине електрона утичу и састав гаса и површине суда у коме се налази и начин примене електричног, а и магнетског поља и општи закони за неравнотежне плазме се не могу формулисати као за равнотежне. Фундаменталност, односно, потрага за општим принципима се у овом случају мора тражити у техникама повезивања елементарних сударних процеса, транспортних процеса, плазма хемијских процеса и процеса на површинама. То значи да је неопходан један свеобухватни приступ који ће узимати законе и податке из много дисциплина и развити сопствену феноменологију и технике примене.

2. ОСНОВИ ТРАНСПОРТНЕ ТЕОРИЈЕ

Ансамбл електрона у гасу може се егзактно описати одговарајућом Boltzmann-овом једначином. Апроксимација молекуларног хаоса јако добро важи у домену реалних притисака у којима се овакве плазме производе. Тако је прецизност описа једино лимитирана квалитетом података о сударним пресецима. Boltzmann-ова кинетичка једначина описује ансамбл честица као флуид у времену, реалном простору и простору брзина:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f + \frac{q}{m} [\mathbf{E}(t) + \mathbf{c} \times \mathbf{B}(t)] \frac{\partial f}{\partial t} = -J(f), \quad (1)$$

где је f функција расподеле, а J је колизииони оператор. Пошто имамо седам степени слободе $(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$ директно нумеричко решавање Boltzmann-ове једначине, чак и са доста ограниченим бројем тачака по степену слободе се не може остварити на данашњим компјутерима. Да би се постигло решење морају се користити неке апроксимације, односно, неке симетрије. Као прво, обично се направи тзв. хидродинамичка апроксимација која представља развој функције расподеле по градијентима концентрације честица:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} f^{(k)}(\mathbf{c}, t) \circ (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t). \quad (2)$$

У овом развоју коефицијенти $f^{(k)}(\mathbf{c}, t)$ представљају функције расподеле по брзинама које могу да варирају у времену, симболом \circ је означен скаларни производ тензора (контракција тензора по свим индексима). Ова апроксимација у физичком смислу значи да смо ми просторну и брзинску расподелу раздвојили у два дела и тиме претпоставили да функција расподеле по брзинама не зависи од просторних координата. Ово је основа примене флуидних једначина. На сличан начин се развија и једначина континуитета:

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = S(\mathbf{r}, t), \quad (3)$$

(у којој је $\mathbf{\Gamma}$ флуks честица а S просторно-временски зависни извор честица) на:

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{W}^{(*)}(t)n(\mathbf{r}, t) - \mathbf{D}^{(*)}(t) \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t), \quad (4)$$

$$S(\mathbf{r}, t) = S^{(0)}(t)n(\mathbf{r}, t) - S^{(1)}(t) \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) + S^{(2)}(t) : \nabla \nabla n(\mathbf{r}, t), \quad (5)$$

где су \mathbf{W} и \mathbf{D} транспортни коефицијенти (брзина дрифта и коефицијент дифузије - уз напомену да праву дефиницију коефицијента у ствари задовољава $\mathbf{N}\mathbf{D}$, док само \mathbf{D} зависи од притиска или концентрације молекула гаса N). На сличан начин као за флуks честица и допринос извора се може развити у ред по градијентима концентрације.

Транспортни коефицијенти се могу мерити у функцији спољашњег електричног поља нормираног на концентрацију позадинског гаса E/N . У принципу хидродинамичка апроксимација је јако добра за већину експеримента који су дизајнирани тако да се одређују поуздани транспортни коефицијенти и да се чак на основу њих одређују сударни пресеци [1]. Међутим, у реалним пражњењима због дејства зидова суда и електрода, као и због примене ниских притисака, хидродинамичка апроксимација често не важи [6]. У таквим условима јавља се нелокалност, односно, особине наелектрисаних честица нису одређене само локалним E/N , већ су одређене претходном историјом кретања тих честица, а сама

функција расподеле по брзинама се мења од тачке до тачке у простору. Чувени Frank Hertz-ов експеримент је прототип оваквог понашања. Са катоде крећу електрони који крећу ка пољу, а функција расподеле подсећа на моноенергијски снап честица. После првих судара дисипира се енергија и јавља се расподела са два максимума чији се међусобни интензитет мења у простору. После другог и трећег судара функција расподеле је компликованија и састоји се од низа снопова, а услед дејства еластичног расејања ови моноенергијски пикови се шире и полако настаје широка функција расподеле која је одређена равнотежним кретањем електрона у спољашњем пољу. Тек тада почиње да важи хидродинамичка апроксимација [11]. Слични прелазак из неравнотежног режима у режим равнотеже са пољем се може видети и код просторних расподела ексцитације, јонизације и других транспортних коефицијената [5,6,12]. Други сличан пример је обрнут. То је тзв. случај бежећих (*run away*) електрона који се полако из равнотежне функције расподеле издвајају на високим енергијама и пошто су тамо пресеци за расејање мали, они се убрзавају и достижу веома велике енергије [13,14]. Овакви електрони обезбеђују атмосферска пражњења – муње, као и пражњења у високим слојевима атмосфере, а из њих настају и снопови гама зрака и честица антиматерије који се израчују у космос. Сви експерименти за одређивање транспортних коефицијената се праве тако да је зона нелокалне функције расподеле, односно, неравнотеже између честица и локалног поља веома мала у односу на целу запремину експеримента.

Део функције расподеле који описује брзински простор се може развити у ред по сферним хармоницима користећи симетрију коју овом простору намеће присуство електричног поља. Даље се могу користити друге специјалне функције које добро описују брзинску, односно, енергијску расподелу.

Осим развоја који користи горе наведене апроксимације и специјалне функције на било ком нивоу апроксимације се може применити нумерички прорачун. Дискретизација једначина је релативно лака, али оно што се тешко теоријски и нумерички приказује је сударни оператор Boltzmann-ове једначине. Овај оператор је веома сложен јер описује различите врсте сударних процеса, описује веома различите енергијске губитке у нееластичним сударима и сви сударни пресеци који су потребни за егзактни опис гасова су веома сложени и не постоји случај где се могу адекватно приказати аналитички. Према томе, нумерички прорачун је неопходан последњи корак решавања Boltzmann-ове једначине. С обзиром на комплексност, ово су веома захтевни нумерички прорачуни. Због тога је још у раним годинама развоја ове тематике развијена Monte-Carlo техника симулација (MC).

3. MONTE-CARLO СИМУЛАЦИЈЕ

Monte-Carlo симулације нису директна техника решавања Boltzmann-ове једначине већ нумерички експеримент у потпуности аналоган правим

експериментима. Поред тога, резултати симулације су у потпуности сагласни резултатима нумеричког решавања Boltzmann-ове једначине. Симулације саме по себи немају ограничења у тачности, уколико су сви релевантни процеси укључени и за њих постоје прецизни подаци. Предност је посебно значајна у случајевима када треба описати нелокалне-нехидродинамичке појаве и интеракцију ансамбла са површинама електрода. Тада се могу користити ефективни, директно мерени, коефицијенти као гранични услови, док се у решавању Boltzmann-ове једначине морају користити математички дефинисани гранични услови. Недостатак МС-а је у томе што мање вероватни процеси имају слабију статистику, а како је најбитнији процес јонизација релативно редак догађај, онда у неким ситуацијама симулације могу да буду компјутерски веома захтевне.

У МС транспортни коефицијенти се могу дефинисати кроз просторно-временске корелације честица ансамбла. Тако се брзина дрефта може дефинисати као:

$$w_i = \left\langle \frac{dr_i}{dt} \right\rangle = \langle v_i \rangle, \quad (6)$$

док се коефицијент дифузије може описати једначином

$$D_{ii} = \langle r_i v_i \rangle - \langle r_i \rangle \langle v_i \rangle. \quad (7)$$

Ови транспортни коефицијенти се називају флуks (*flux*) коефицијенти јер се врши само диференцирање по времену у целом простору. У стандардном опису кинетике честица требало би да је у потпуности аналогна формула за брзину дрефта:

$$W = \frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \rangle, \quad (8)$$

и за коефицијент дифузије:

$$D = \frac{1}{2!} \frac{d}{dt} \langle \mathbf{r}^* \mathbf{r}^* \rangle. \quad (9)$$

Ово су дефиниције тзв. балк (*bulk*) коефицијената и требало би да дају идентичне резултате као и дефиниције за флуks коефицијенте. Међутим, уколико поведемо рачуна о граници оператора усредњавања, која представља број честица, онда видимо да пролазак временског диференцирања кроз оператор усредњавања, у условима када се број честица мења, генерише додатни члан, односно, разлику између флуks и балк коефицијената:

$$W \approx w - \frac{2\langle \varepsilon \rangle}{3e} \frac{d\langle v_a(\varepsilon) \rangle}{dE}. \quad (10)$$

Промену броја честица у гасним пражњењима генеришу јонизација као процес креације и захват, односно, рекомбинација као процеси који смањују број честица.

Потребно је напоменути да се у већини апроксимативних решења Boltzmann-ове једначине добијају флукс коефицијенти, док је веома мали број кодова да израчунају балк коефицијенте. Експерименти међутим одређују коефицијенте из просторних расподела, па су мерене вредности, по дефиницији, балк коефицијенти. Касније ћемо видети примере када други члан у балк дефиницији постане доминантан и потпуно промени природу транспортног коефицијента.

4. КИНЕТИЧКИ ФЕНОМЕНИ У ЈОНИЗОВАНИМ ГАСОВИМА

Основни циљ заснивања физике ројева био је да се направе комплети пресека за све процесе који одговарају нпр. електронима или јонима у неком гасу, како би се моделовале неке појаве и гасна пражњења. Пошто ће о одређивању пресека техником ројева бити више речено у другом раду из ове едиције, ми се овде фокусирамо у два правца. Први је опис неуобичајених појава које се не могу тривијално предвидети из облика пресека за расејање и трајекторија појединачних честица. Ове појаве називамо кинетички феномени [6]. Други правац је примена података о ројевима као модела или за моделовање разних врста јонизованих гасова [3,15,16].

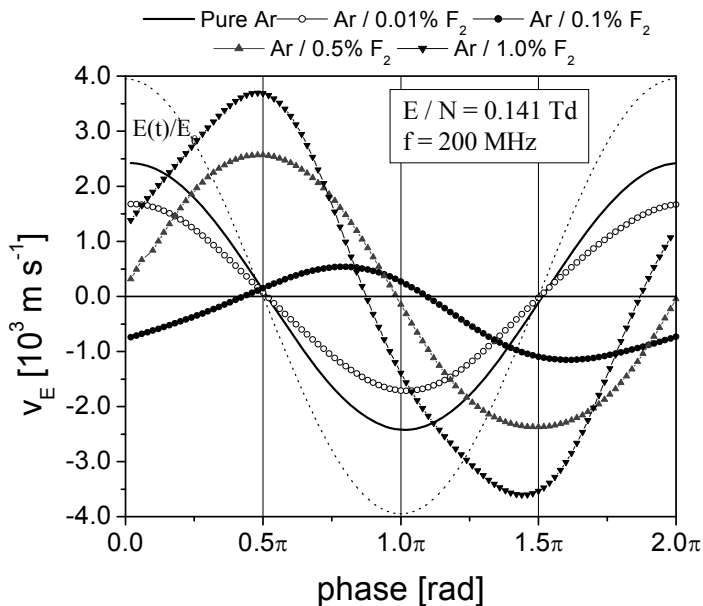
Први кинетички феномен који је описан у литератури и којим је физика ројева постигла своју научну зрелост је анизотропна дифузија [1], односно, објашњење разлике између дифузије дуж и попречно на правац електричног поља. Готово двадесет година после тога, следећи кинетички феномен који је био објашњен, негативна диференцијална проводност (*negative differential conductivity* – NDC) је постао прототип за читав низ физичких феномена [17,18]. Убрзо су се појавили специјални случајеви NDC под дејством спољашњих побуда неконзервативних судара, па чак и електрон-електронских судара у случајевима плазме мало веће концентрације. Посебан случај аналоган NDC је случај негативне транзијентне мобилности, односно, негативне апсолутне мобилности (NAM) [19,20]. NAM се јавља када се негативна транзијентна мобилност спрегне са захватом електрона на јако малој енергији. У том случају већина електрона се заиста креће супротно од онога што диктира спољашње електрично поље. Међутим, Други закон термодинамике није нарушен јер се центар масе ансамбала електрона, услед таласа захвата, креће у исправном смеру [19,20]. Ипак оваква ситуација се може искористити, наравно не као извор енергије ни из чега, већ као систем за конверзију енергије. У случају негативне апсолутне мобилности Maxwell-овог домена

представља процес захвата, а Други закон представља суштински разлог за разликовање флукс и балк транспортних коефицијената. Израчунати балк коефицијенти који се једини могу мерити су увек позитивни јер у себи садрже просторне градијенте, односно, допринос порасту ентропије кроз настанак негативних јона. Ово тумачење неконзервативности у транспорту честица, које у себи садржи како кинетичку теорију тако и атомску физику и термодинамику, је пример фундаменталних доприноса који се не могу остварити на нижим феноменолошким нивоима, већ морају да се базирају на комплетној феноменологији јонизованих гасова.

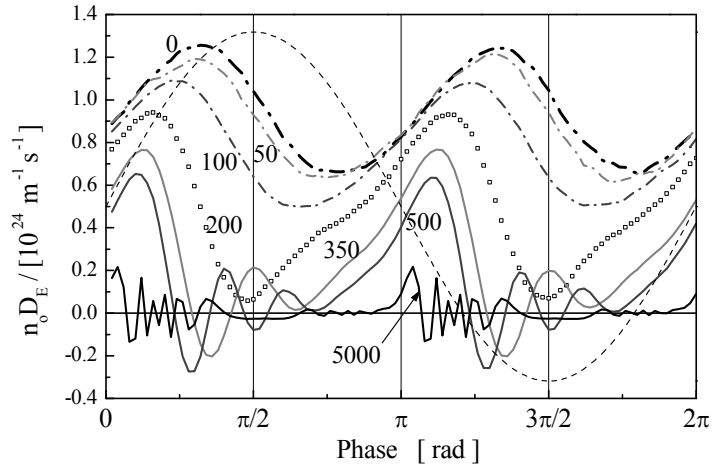
На слици 1 приказали смо специфичан случај флукс брзина дрифта у радиофреквентном електричном пољу.

Још један занимљив пример кинетичких феномена је транзијентна негативна дифузија (слика 2). Када се одређују компоненте дифузионог тензора у случају када постоји и електрично и магнетско поље, тада је могуће да се јављају флуксеве честица као последица градијента у правцу који је нормалан у односу на тај правац. Код временски променљивих поља, због ограничене брзине релаксације, могуће је да ти флуксеве добију и негативну вредност.

На крају, указали бисмо на један специфичан случај неконзервативних ефеката за транспорт позитрона у гасовима. Док се код електрона NDC јавља истовремено и за флукс и за балк брзине дрифта, код позитрона флукс компонента за већину гасова (до сада за све тестиране



Слика 1. Брзина дрифта у смешама аргона и флуора за разне саставе меше. На цртежу смо у ствари представили негативне вредности брзине како би се узело у обзир негативно наелектрисање електрона. У чистом аргону и уз јако малу количину флуора брзина дрифта прати електрично поље. Кад проценат флуора нарасте на 0.1% брзина је у супротној фази, односно електрони се крећу супротно од правца који им диктира поље [21]



Слика 2. Временска зависност коефицијента за дифузију дуж правца електричног поља у радиофреквентном пољу за Ридов модел рампе [22]

гасове осим азота) нема NDC, док је он код балк компоненте толико изражен да се брзине дрифта разликују за више од два реда величине [23-25]. Другим речима када би се посматрала функција расподеле добила би се велика брзина дрифта, али у реалном простору чим позитрони крену да се убрзавају њих прогута јако велики неконзервативни процес формирања позитронијума чији су пресеци типично три реда величине већи од пресека за захват електрона (слика 3).

5. МОДЕЛОВАЊЕ НЕРАВНОТЕЖНЕ ПЛАЗМЕ И ФИЗИКА РОЈЕВА

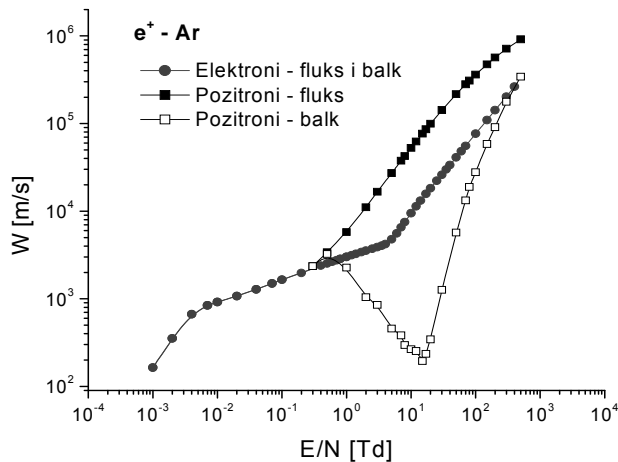
Посебне особине неравнотежне плазме које је чине привлачном за бројне примене су следеће:

- Температура јона и молекула гаса блиска собној, док су електрони на великим енергијама
- Утицај на материјале је само на површини и дубина дејства се може добро контролисати
- Променом састава, може се оптимизовати хемијска кинетика, активне честице, средња енергија електрона и флуks наелектрисаних честица
- На функцију расподеле електрона по енергијама се може утицати и променом облика импулса нападања, фреквенцијом поља, фазом и магнетским пољем
- Промене на површинама могу да буду трајне или привремене, могу да буду кроз наношење танких слојева, функционализацију или уклањање материјала

- Избором хемијске кинетике постиже се селективност
- На основни део и на реп функције расподеле може се одвојено деловати

Флуks и енергија јона који падају на површину могу се независно контролисати, а могуће је обезбедити и веома анизотропно дејство јона на површину. Посебну улогу у контроли функције расподеле могу имати кинетички феномени, а до сада нам је познат тек један пример у коме је укључена неконзервативност и њен утицај на брзину дрифта, у моделовању стримера [26], и два примера идентификовања дејства магнетског поља кроз настанак перпендикуларне брзине дрифта [27,28].

Ови примери утицаја кинетичких феномена на плазму управо и указују на то колико су они битни, јер у првом случају основа физике простирања стримера (поред осталог муње су својеврсни стримери у атмосфери) јесте постојање зоне високог градијента концентрације на фронту простирања. У другу руку, неузимање перпендикуларног дрифта у магнетским пољима очигледно смањује ефективни извор нових наелектрисаних честица и ефикасност одржавања плазме и за 50%.



Слика 3. Брзина дрифта роја позитрона у аргону. Уочљива је велика разлика између флуks и балк компоненте брзине. Такође се види да са порастом поља у једном тренутку балк брзина дрифта почиње да опада док флуks компонента наставља да расте – феномен NDC. Ради поређења дате су флуks и балк брзине дрифта роја електрона у аргону, које се у посматраном опсегу E/N међусобно не разликују

Кинетички ефекти представљају примере нових фундаменталних открића која се не могу објаснити на нижем нивоу феноменологије (атомски судари, трајекторије честица у пољу) већ захтевају своју феноменолошку основу која одговара комплексности феномена. Управо ту основу у овим примерима даје физика ројева.

6. ЛИТЕРАТУРА

- [1] Huxley L.G.H. and Crompton R.W., *The drift and diffusion of electrons in gases*, Wiley Interscience, New York (1974).
- [2] Lieberman M. A. and Lichtenberg A. J., *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing* 2nd edn Wiley-Interscience, Hoboken, NJ (2005).
- [3] Makabe T., Petrović Z. Lj., *Plasma Electronics*, Taylor and Francis New York (2006).
- [4] http://www.nap.edu/catalog.php?record_id=11960
- [5] Petrović Z. Lj., Šuvakov M., Nikitović Ž., Dujko S., Šašić O., Jovanović J., Malović G. Stojanović V., *Plasma Sources Sci. Technol.* **16**, S1–S12, (2007).
- [6] Petrović Z. Lj., Dujko S., Marić D., Malović G., Nikitović Ž., Šašić O., Jovanović J., Stojanović V., Radmilović-Radenović M., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42**, 194002, (2009).
- [7] Makabe T., Petrović Z. Lj., *Appl. Surf. Sci.*, **192**, 88-114, (2002).
- [8] Petrović Z.Lj., Raspopović Z.M., Stojanović V.D., Jovanović J.V., Malović G., Makabe T., de Urquijo J., *Applied Surface Science* **253**, 6619–6640, (2007).
- [9] Lazović S., Puač N., Miletić M., Pavlica D., Jovanović M., Bugarski D., Mojsilović S., Maletić D., Malović G., Milenković P., Z. Lj. Petrović, , **12**, 083037, (2010).
- [10] Radetić M., Jocić D., Jovančić P., Petrović Z.Lj., Thomas H., *Environ. Sci. Technol.*, **37**, 1008-1012, (2003).
- [11] Stojanović V. D., Jelenković B. M., Petrović Z. Lj., *J.Appl.Phys.*, **81**, 1601, (1997).
- [12] Malović G., Strinić A., Živanov S., Marić D., Petrović Z. Lj., *Plasma Sources Sci. Technol.*, **12**, S1-S7, (2003).
- [13] Vrhovac S. B., Stojanović V. D., Jelenković B. M., Petrović Z. Lj., *J. Appl. Phys.*, **90**, 5871-5877, (2001).
- [14] Petrović Z. Lj., Stojanović V., Nikitović Ž., *Plasma Sources Sci. Technol.*, **18**, 034017, (2009).
- [15] Nakano N., Shimura N., Petrović Z. Lj., Makabe T., *Phys. Rev. E.*, **49**, 4455, (1994).
- [16] Robson R. E., White R. D., Petrović Z. Lj., *Rev.Modern Phys.*, **77** (4), 1303-1320, (2005).
- [17] Petrović Z.Lj., Crompton R.W., Haddad G.N., *Aust. J. Phys.*, **37**, 23, (1984).
- [18] Vrhovac S.B., Petrović Z.Lj., *Phys. Rev. E*, **53**, 4012-4025, (1996).
- [19] Robson R. E., Petrović Z. Lj., Raspopović Z. M., Loffhagen D., *J.Chem. Phys.*, **119** (21), 11249-11252, (2003).
- [20] Šuvakov M., Ristivojević Z., Petrović Z. Lj., Dujko S., Raspopović Z. M., Dyatko N. A., Napartovich A. P., *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **33**, 532- 533, (2005).
- [21] Dujko S., Raspopović Z. M., Petrović Z. Lj., Makabe T., *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **31**, 711-716, (2003).

- [22] White R. D., Dujko S., Ness K. F., Robson R. E., Raspopović Z. M., Petrović Z. Lj., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **41**, 025206, (2008).
- [23] Marler J. P., Petrović Z. Lj., Banković A., Dujko S., Šuvakov M., Malović G., Buckman S. J., *Physics of Plasmas*, **16**, 057101, (2009).
- [24] Šuvakov M., Petrović Z. Lj., Marler J. P., Buckman S. J., Robson R. E., Malović G., *New J. Phys.*, **10**, 053034, (2008).
- [25] Banković A., Petrović Z. Lj., Robson R. E., Marler J. P., Dujko S., Malović G., *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, **267**, 350–353, (2009).
- [26] Li C., Ebert U., Hundsdorfer W., *J. Comp. Phys.*, **229**, 200-220, (2010).
- [27] Tadokoro M., Hirata H., Nakano N., Petrović Z. Lj., Makabe T., *Phys. Rev. E*, **57**, R43-R46, (1998).
- [28] Vasenkov A. V., Kushner M. J., *J. Appl. Phys.*, **94**, 5522, (2003).

ЕЛЕКТРОН-МЕТАЛ АТОМ ИНТЕРАКЦИЈЕ И ИНФОРМАЦИОНИ СИСТЕМ У ФИЗИЦИ АТОМСКИХ СУДАРА

*Б. П. Маринковић^{1,2}, Д. Шевић¹, Б. Предојевић³, В. М. Пејчев⁴, С. Д. Тошић¹, М. С. Рабасовић¹, В. Д. Бочварски⁴, Б. А. Петрушевски²,
Н. С. Николић² и Д. Радосављевић²*

¹*Институт за физику, Универзитет у Београду, Београд, Србија*

²*Висока школа за електротехнику и рачунарство струковних
студија, Београд, Србија*

³*Природно математички факултет, Универзитет у Бања Луци,
Бања Лука, Република Српска, Босна и Херцеговина*

⁴*Природно математички факултет, Универзитет у Крагујевцу,
Крагујевац, Србија*

Сажетак. У раду је истакнут значај истраживања интеракција електрона са атомима метала који поред општих сазнајно теоријских основа везаних за изоловане атоме метала, постоји и у биомолекуларним основама медицине где се интеракције електрона јављају са комплексима молекула који садрже метални јон. Описани су експериментални методи и апаратура на којој су добијени резултати еластичног и нееластичног расејања електрона на атомима метала. Посебно су разматрани проблеми одређивања апсолутних вредности диференцијалних пресека, утицај ефективне корекционе запремине, поступак нормирања на функцију расејања унапред (forward scattering function), као и сложене зависности напона паре метала од температуре. Приказана су два помоћна програма развијена у Лабораторији за физику атомских сударних процеса, Института за физику који су омогућили ефикасније извођење и обраду резултата експерименталног расејања. У самом експерименту са укрштеним електронским и атомским млазом остварени су услови за посматрање бинарних судара електрона са атомским честицама, у овом случају атомима метала. Моноенергијски млаз електрона се формира помоћу полусферног селектора и система цилиндричних сочива. Он се под правим углом расејава на ефузионом млазу атома који се формира грејањем пећи Кнудсеновог типа. Измерени су диференцијални пресеци за еластично расејање и екситацију стања атома из прве групе (Na, Rb), друге групе (Mg, Ca), једанаесте групе (Ag), дванаесте групе (Zn, Cd, Hg), као и тежих елемената

Периодног система (In, Sb, Yb, Pb, Bi). Поред диференцијалних пресека, приказани су и резултати интегралних пресека, пресека за пренос импулса и пресека вискозности. Општа особина пресека код атома метала, која се може уочити у спектрима губитака енергије, јесте у израженој висини пика резонантног прелаза у односу на висину пика еластичног расејања. Ово је супротно ономе што се запажа код молекула код којих је доминантан пик за еластично расејање. Упадне енергије електрона (E_0) се крећу у границама од 10 до 100 eV и обично је то стандардизован сет енергија (10, 20, 40, 60, 80 и 100 eV). Углови расејања су у интервалу од 1° до 150° за ексцитацију, односно од 10° до 150° за еластично расејање. Апсолутне вредности пресека за резонантна стања су добијене нормирањем релативних вредности на оптичку јачину осцилатора, док су апсолутне вредности еластичног расејања и осталих нерезонантних ексцитација добијене помоћу количника интензитета еластичног, односно нееластичног пика и резонантног пика на одређеном углу расејања. Прорачуни других аутора су поређени са нашим експерименталним резултатима и истакнути су проблеми како у теоријском тако и у експерименталном одређивању пресека.

Посебно је у раду приказан развој информационог система (ИС) у физици атомских сударних процеса, развој базе података заснован на постојећим мерењима у нашој Лабораторији као и на оним резултатима других аутора који су релевантни за постојећи избор атома мета. Циљ развоја овог ИС је вишеструк (планирање и организација истраживања, извор података, преглед литературе). Он је заснован на декомпозицији чланка од стране експерта и евалуацији сета података и примењених метода. Поред ИС који се развија, дат је приказ постојећих база података из електрон-атомских судара.

Abstract. Here we present the results of experimental research in atomic collision physics which is of relevance in the domain of electron-metal atom scattering and information systems. Beside the general importance for the interactions with isolated atoms, there is also a particular relevance of this research connected with the biomedical implications of scattering by molecular complexes that involve metal ions as their constituents. Experimental methods as well as apparatus are described together with the results for the elastic and inelastic electron scattering by metal atoms. Determination of absolute values for differential cross sections (*DCS*) is discussed in conjunction with the influence of effective volume correction factors (V_{eff}) and normalization procedure that is based on the

forward scattering function. Two particular software modules, one for determination of V_{eff} and the other for temperature dependence of metal vapour pressure, are developed in the Laboratory for Atomic Collision Processes, Institute of Physics with the aim to facilitate the performance of the experiment and data processing. In the crossed beam arrangement of the experiment, the binary collisions are favoured. Monoenergetic electron beam is obtained by means of hemispherical selector and it is focused by cylindrical electrostatic lenses. Electron beam is perpendicularly crossed by effusive atomic beam formed by heating of Knudsen type oven. Differential cross sections are presented for elastic scattering and inelastic excitation of atoms from the first column (Na, Rb), second column (Mg, Ca), eleventh column (Ag), twelfth column (Zn, Cd, Hg), as well as heavier elements of Periodic Table (In, Sb, Yb, Pb, Bi). Also integrated cross sections: integral, momentum transfer and viscosity, are determined. General observation for energy loss spectra of metal atoms is that the resonance peak is more pronounced than elastic one. This is contrary to the observations in molecules where the elastic peak dominates over all energy loss features. Incident electron energies (E_0) utilized in the experiment are between 10 eV and 100 eV with the usually chosen standardized set (10, 20, 40, 60, 80 and 100 eV). Scattering angles are from 1° to 150° for the excitations, while for the elastic scattering they span from 10° to 150° . Absolute values for the resonance states are obtained by normalization of relative differential cross sections to the optical oscillator strengths, while the absolute values for the elastic scattering and excitations other than resonance are obtained from the intensity ratios at particular scattering angle(s). Calculations of *DCSs* from other authors are compared with our results and several issues of their determination are discussed in the framework of different theoretical approximations and experimental difficulties.

Special attention is devoted to the development of an Information System (IS) in the physics of atomic collision processes. This information system is based on the data base related to the existing measurements in our Laboratory as well as on data of the other authors who performed calculations and/or experiments on the targets of relevance in the present study. The aim of the IS development is multifold, it should serve for planning and organization of the research, to be a source of the data and literature on specific topic, etc. It is based on the decomposition of the articles by the experts in the field and on the evaluation of the data sets and applied methods used in investigations. Beside the present IS, the overview of the existing data bases in electron-atom collisions is given.

1. УВОД

Интеракције електрона са атомским честицама, пре свега атомима инертних гасова а затим са атомима металних пара, малим молекулима (двоатомским, троатомским и четвороатомским) као и вишеатомским молекулима који су од значаја било за техничке примене или у биологији и биомедицини, представљају дугогодишњи објекат истраживања у Лабораторији за физику атомских сударних процеса Института за физику Универзитета у Београду. Прва објављена истраживања представљају разматрање и конципирање будућих експеримената и разраду експерименталних метода [1,2] од стране оснивача Лабораторије, професора Милана Курепе и сарадника. Ускоро су следили први резултати експерименталних истраживања расејања електрона обављени у Београду и објављени у радовима Вушковићеве и коаутора [3] и Курепе и коаутора [4-7]. Први теоријски радови представљају резултате истраживања зависности закона прага за јонизацију [8] и ексцитацију [9] у судару електрона са атомом водоника, као и резултате процеса захвата електрона у сударима позитивних мезона са водоником [10,11] и хелијумом [11], и сударима атома водоника и хелијума са алфа честицама [12].

Развој експерименталних техника електронске спектрометрије које су почеле да се примењују у Београду, текао је на основама истраживања наших сарадника како у иностранству тако и у земљи. Боравком М. Курепе на Универзитету у Ливерпулу (*University of Liverpool*) код професора Крегса (J. D. Craggs) започета су истраживања процеса захвата електрона и јонизације код молекула кисеоника, угљенмоноксида и угљендиоксида [13,14] као и пресека за јонизацију атома племенитих гасова [15]. У Сједињеним Америчким Државама, на Јел Универзитету (*Yale University*) боравио је А. Стаматовић код професора Шулца (G. J. Schulz) и ту је развио нову врсту електронског монохроматора, такозваног трохоидног монохроматора у укрштеном магнетском и електричном пољу [16,17]. Користећи направљен монохроматор и масени спектрометар са хлађеном сударном комором, посматрани су процеси дисоцијативног захвата електрона на молекулу угљендиоксида и одређени су пресеци за вибрациону ексцитацију фрагмената угљенмоноксида [18]. У сарадњи са Универзитетом у Јорку (*University of York*) развијани су елементи електронске оптике [19], а на Универзитету у Манчестеру (*Manchester University*) развијена је нова техника електронске спектроскопије прагова [20]. Користећи овај вид спектроскопије извршена су мерења судара електрона са атомом хелијума и одређени су 2^3S касп (*cusp*) и 2^2S резонанца [21] и експериментално потврђена енергијска зависност пресека за јонизације на прагу [22]. Истовремено, у Паризу су изучаване вибрационе моде основног стања молекула угљендиоксида изазваних ударом електрона ниских енергија [23] и угаоне зависности негативних јона кисеоника насталих из дисоцијативног захвата електрона на молекулу угљендиоксида [24]. У Београду су настављена теоријска истраживања закона прага за јонизацију и ексцитацију ударом електрона [25] као и експериментална истраживања диференцијалних пресека на атомима

племенитих гасова [26] и процеса јонизације и дисоцијативног захвата на вишеатомским молекулима [27].

Експериментална истраживања расејања електрона на атомима пара метала интензивно се обављало у два центра у Великој Британији, у Манчестеру и Саутемптону. У овим центрима су боравили и наши истраживачи. Д. Цвејановић је боравила у Манчестеру и учествовала у дизајнирању ефикасне пећи за добијање ефузивног млаза атома кадмијума [28] док је В. Пејчев боравио на докторским студијама у Саутемптону и ту изучавао побуде аутојонизационих стања атома метала и спектре избачених електрона на атому натријума [29]. Студије избачених електрона су проширене на низ мета из Периодног система елемената који спадају у метале. То су пре свега паре метала Cd [30,31], Li [32,33], K [34], Rb [35], Cs [36,37], Mg [38,39] и Ca [40].

Остали светски центри у којима су се истраживале бинарне интеракције електрона са атомима метала експерименталним методама су релативно малобројни: JPL (*California Institute of Technology, Jet Propulsion Laboratory, Pasadena, California, U.S.A.*), NYU (*New York University, U.S.A.*), JILA (*Joint Institute for Laboratory Astrophysics, University of Colorado and NIST, Boulder, U.S.A.*), IEP (*Institute of Electron Physics, National Academy of Sciences of Ukraine*), ANU (*The Australian National University, Atomic and Molecular Physics Laboratories*) и други. Наши истраживачи остварују интензивне везе са овим центрима кроз дуже и краће боравке и кроз научну сарадњу на истраживању пара атома метала, те објављују заједничке публикације: Л. Вушковић борави у JPL и NYU, Б. Маринковић у JILA и посећује IEP, Р. Панајотовић борави у ANU.

На осмој конференцији о физици јонизованих гасова (SPIG) одржаној 1976. године у Дубровнику уводно предавање посвећено изучавању сударних пресека електрона са атомима метала држи професор Шандор Трајмар (S. Trajmar) са JPL лабораторије [41]. Овом приликом представљен је експериментални уређај, електронски спектрометар, посебно прилагођен експериментима са парама метала. Такође представљени су резултати мерења диференцијалних пресека за читав низ атома метала, почевши од оних са нижим тачкама топљења (алкалних метала) па до атома бакра за који је потребна температура од око 1700 K за добијање ефузионог млаза атома метала који би обезбедио довољан интензитет сигнала расејаних електрона. Ово предавање подстиче рад на новом спектрометру намењеног изучавању пара метала а посебно ће се остварити научна сарадња са институцијом JPL лабораторија. Током боравка др Л. Вушковић у JPL лабораторији обављена је читав серија експеримената расејања неполаризованих млазева електрона са атомима алкалних метала Li [42], Na [43], K [44] и Rb [45]. Ови експерименти постају референца на коју су се ослањали потоњи експерименти у Београду, како у погледу спектра губитака енергије тако и у погледу одређивања апсолутних вредности диференцијалних пресека и облика њихових зависности од угла расејања.

Током друге половине седамдесетих година двадесетог века, започела је изградња новог електронског спектрометра у Институту за

физику у Београду под руководством др Лепосаве Вушковић, а посвећеног истраживањима на парама метала и одређивању диференцијалних пресека за еластично расејање електрона и ексцитацију електронских стања ових атома. Изградња ове апаратуре је захтевала дугогодишњи напор како истраживачког тима тако и пратећег тима техничких сарадника. Потребно је било решити читав низ технолошких захтева, почевши од остваривања високог вакуума, реда 10^{-5} Ра, са диференцијалним пумпањем коморе и електронске оптике, обезбеђења услова механичке ротације анализатора у широком опсегу углава, немагнетичности материјала и оклапње целе коморе ради елиминисања дејства земљиног магнетског поља, па до стања површина које види електронски млаз (направљених од бабра високе проводности и ниског садржаја кисеоника (ОФНС) и молибденских сфера. Први сигнал од расејаних електрона детектован на новој апаратури ЕСМА (Електронски Спектрометар Металних Атома) је добијен 1980. године. Тестирање перформанси апаратуре је обављено на млазевима атома инертних гасова, а пре свега са гасом аргона који је се лако могао набавити и по малој цени у техничкој чистоћи. Проучавано је еластично расејање електрона и ексцитације стања атома ксенона [46-48], криптона [46, 49, 50] а најинтензивније расејање електрона на атомима аргона, њихово еластично расејање [51,52] и ексцитација низа електронских стања [51,53,54]. На истој апаратури су мерени и диференцијални пресеци за еластично и нееластично расејање на троатомским молекулима H_2S [55] и N_2O [55-58].

Први резултати мерења пресека за расејање електрона на парама метала добијени у Београду објављени су на атомима кадмијума [59-61] и натријума [59,60,62]. Следе мерења на атомима живе [63,64] и цинка [64-66]. Истраживања побуде стања до првог јонизационог нивоа су настављена и проширена мерењима ексцитације аутојонизационих стања код кадмијума и цинка [67,68]. Од средине прве деценије двадесетпрвог века долази до наглог скока броја публикација везаних за истражиње атома метала са вишим температурама топљења. То су пре свега атоми калцијума [69-71], итербијума [72-74] и магнезијума [74-79]. Прегледни радови везани за мерења расејања електрона на парама метала која су обављена у Београду, саопштени су на међународним конференцијама CEPAS 2007 (*Conference on Elementary Processes in Atomic Systems*) [80], ECCL 2009 (*Electron Controlled Chemical Lithography*) [81] и ESCAMPIG 2010 (*20th European Conference on the Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases*) [82]. Најновија истраживања укључују мерења диференцијалних пресека за еластично и нееластично расејање на атомима метала олова [83-85], бизмута [86], индијума [87-89] и сребра [90].

2. МОТИВАЦИЈА

Имајући у виду дугу традицију београдске Лабораторије за физику атомских сударних процеса у истраживањима бинарних судара електрона са атомским честицама, јасно је да се тежило проширивању како

експерименталних метода и разноврсности истраживаних процеса, тако и повећању броја мета које су се разматрале. Први експерименти су се изводили на гасовима племенитих атома који представљају мету која је при стандарним условима у гасовитом стању, не интерагује са деловима система и код које се може лако подешавати притисак у гасном резервоару, тј. густина честица мете у интеракционој запремини. Истраживања су настављена на малим молекулима који представљају мете код којих се физички процеси могу објаснити са мањим бројем параметера (рецимо број вибрационих мода, број канала за дисоцијацију). Експерименти су проширени како на атоме металних пара, тако и на вишеатомске молекуле. Генерално, интерес за изучавање интеракција електрона са атомима метала долази од потребе разумевања низа процеса код ласера са металним парама, процеса код астрофизичких, фузионих и нискотемпературских плазми, али и процеса у којима учествују велики органски молекули код којих су атоми метала уграђени у облику јона са централном улогом у многим биохемијским процесима.

Са друге стране, изазов и мотивација за изучавање интеракција електрона са атомима метала долази из жеље за дубљим разумевањем појава на квантномеханичком нивоу поимања. У изучавању судара атомских честица није довољно само разумети њихову структуру већ треба познавати и врсте и јачине интеракција конститутивних елемената, односно разумети динамику процеса. Величине које се могу мерити у бинарним сударима су повезане са амплитудама расејања које теоријски описују процес. У зависности од сложености система и нивоа примењене апроксимације, судар се може описати мањим или већим бројем амплитуда које су комплексне величине. Тако, свакој амплитуди расејања одговарају две мерљиве физичке величине, а за систем са n амплитуда расејања, можемо смислити један или низ експеримената у којима се могу одредити $n - 1$ величина. То би био такозвани идеални експеримент расејања (*perfect scattering experiment*), појам уведен 1969. од стране Б. Бидерсона (B. Bederson) [91]. У идеалном експерименту одређујемо максимално могући број физичких величина које карактеришу дати процес расејања и тиме су до једне фазе одређене све амплитуде расејања. Једну могућу параметризацију дали су Фано и Мачек [92], док је генерализоване *STU* параметре дефинисао К. Бартчат [93]. У кључном прегледном раду Андерсен и коаутори су дали преглед параметризација и предложили тзв. природни координатни систем у коме се посматра судар атомских честица [94]. Даљим детаљним увидом у сударне процесе у којима се посматрају поларизовани млазеви или поларизација електрона након расејања [95-97], Андерсен и коаутори су генерализовали формализам и сугерисали оптималне геометрије сударних експеримената за извођење идеалног експеримента расејања [98]. Управо су судари поларизованих млазева електрона са атомима метала погодан систем за тестирање теоријских модела који описују ове сударе. Са друге стране, развијени су експериментални методи за препарацију поларизованих млазева атома мета на принципима оптичког пумпања. Као пример за лаке мете узима се атом натријума и посматра ексцитација резонантног 3^2P стања.

Експерименти са неполаризованим млазевима електрона и екситацијом овог стања су обављени од стране наших истраживача [43,62]. У теоријском опису екситације овог стања, коришћена је нерелативистичка апроксимација у којој се експлицитне силе које зависе од спина као што је то спин-орбитна интеракција између пројектила и језгра мете могу занемарити за време судара а тиме је очувана огледалска симетрија.

Значајну групу експеримената расејања електрона на атомима метала чине експерименти обављени методом електронског и фотонског двоструког узмака развијеног у Њујорку у лабораторији којом је руководио Б. Бидерсон, а затим Л. Вушковић. Посматрани су прво еластични пресеци електрона на атомима натријума побуђеним у 3^2P стању [99], а затим екситација електронима овог стања на малим угловима [100,101]. Продор у овим истраживањима представљају експерименти са екситованим атомима натријума у којима су одређени апсолутни пресеци за супереластично расејање и екситацију [102,103]. Даљи експерименти су вођени у циљу одређивања поларизабилности хомонуклеарних и хетеронуклеарних алкалних димера [104]. Даљим експериментима под руководством Л. Вушковић истраживани су орбитални ефекти [105] и азимуталне асиметрије [106] у еластичном расејању као и процеси јонизације код побуђеног атома натријума [107].

За теже атоме какви су на пример атоми цезијума или живе, морају се узети у разматрање и друге спински зависне интеракција поред изменских интеракција, те се стога број независних амплитуда расејања знатно повећава. Тиме и идеални експеримент расејања постаје знатно теже остварив. Но, у свим случајевима у којима се разматрају детаљни описи расејања електрона, неопходна величина је диференцијални пресек за расејање неполаризованих млазева. Ова величина се одређује у апсолутним вредностима, те самим тиме представља посебан изазов за експериментаторе. Управо одређивање ове величне представља фокус истраживања наше групе.

Експерименти одређивања диференцијалних пресека су пре свега мотивисани тежњи ка разумевању основних интеракција електрона са атомским честицама. У том циљу се експериментални резултати пореде са прорачунима и теоријским апроксимацијама које описује појаве. Развијен је читав низ теоријских модела који са већим или мањим степеном апроксимације описују динамику судара и у стању су да репродукују облике и апсолутне вредности диференцијалних пресека. У апроксимацији оптичког потенцијала израчунати су диференцијални пресеци за еластично расејање електрона на атому калцијума и упоређени са експериментом [70] као и за атом олова [85]. Апроксимација конвергентне блиске спреге (*convergent close coupling*) је примењена на процес екситације резонантног стања атома цинка и поређење је извршено са нашим експериментом [66]. Релативистички облик апроксимације изобличеног таласа (*relativistic distorted-wave approximation*) је примењен на истраживање интеракција електрона са атомом магнезијума и проверен нашим експериментом на малим угловима [75] и у целокупном домену углова расејања [76], као и на атому олова, такође за екситацију

резонантог стања на малим [83] и великим угловима расејања [84]. Наша експериментална мерења за еластично расејање електрона на атому индијума су упоређена са апроксимацијом оптичког потенцијала без и са урачунавањем апсорпционог потенцијала [87], а код атома сребра са комплексним оптичким потенцијалом без слободних параметара са израчунавањем спин-орбитне интеракције [90]. Може се закључити да квалитет описа, односно степен наших могућности да израчунамо електрон-атомске интеракције зависе од рафинираности примењене теоријске методе и посматраног енергијског домена.

Постоји и медицински аспект мотивисаности експеримената расејања електрона на атомима метала. Иако је наравно најзначајније наше разумевање расејање и губитак енергија, пре свега секундарних електрона насталих у процесу проласка јонизујућег зрачења кроз организам односно ткиво, од значаја је и познавање интеракција електрона са другим биомолекулима и то онима који имају атоме метала у свом саставу. То је пре свега потреба да се разуме улога метала у појединим болестима код људи. То су болести везане за дисбаланс присуства метала у организму или поремећаје метаболизма, као што су *beta-thalassemia*, *hemochromatosis* (Fe) и неуродегенеративне болести (Cu, Fe, Zn, Al).

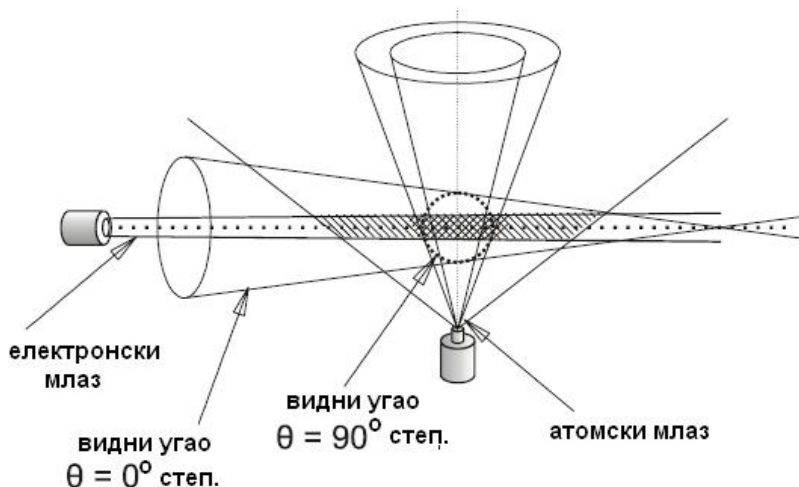
Атоми метала представљају носиоце информације код терапеутских циљева или слика за дијагностику (*imaging*). Метални комплекси који су у употреби за дијагностику су: парамагнетни лантаниди као контрастни агенти у визуелизацији магнетне резонансе (*magnetic resonance imaging* – MRI); радиомаркери - ^{68}Ga код позитронске емисионе томографије (*positron emission tomography* – PET *imaging*).

Посебну групу лекова чине метал-килаторски лекови који се вишенаменски користе у превенцији, дијагностици и третману канцера (канцерогене ћелије, као и све нормалне ћелије, захтевају есенцијалне јоне метала, као што су гвожђе, бакар и цинк за раст и пролиферацију). Килатори могу циљати метаболичке путеве канцерогених ћелија преко управљања протеинима који су укључени у регулацију ових метала и других молекула укључених у контролу ћелијског циклуса, ангиогенезе или у супресији метаболизма.

3. ЕКСПЕРИМЕНТ

Као што је горе већ напоменуто, експериментални уређај на коме су вршена мерења расејања монохроматских неполаризованих млазева електрона на ефузионим млазевима пара метала представља електронски спектрометар ЕСМА посебно смишљен и наменски реализован за оваква мерења. Детаљнији опис самог електронског спектрометра и приказ експерименталних метода које су примењене у истраживању еластичног и нееластичног расејања електрона дат је у претходним радовима [49,59] као и у овој монографији у раду који следи [108]. Експеримент расејања се изводи у геометрији укрштених млазева (*crossed electron-atom beam arrangement*). Електрон упадне енергије E_0 и таласног броја k_0 се расејава

на неполаризованом атому под углом расејања θ са енергијом E_n и таласним вектором k_n . Процес расејања се карактерише ефективним пресеком који представља временски независну вероватноћу да се деси одговарајући процес. Пресек је величина која зависи од енергије. У овим експериментима, расејани електрони се детектују као функција упадне енергије угла расејања и енергије губитка.

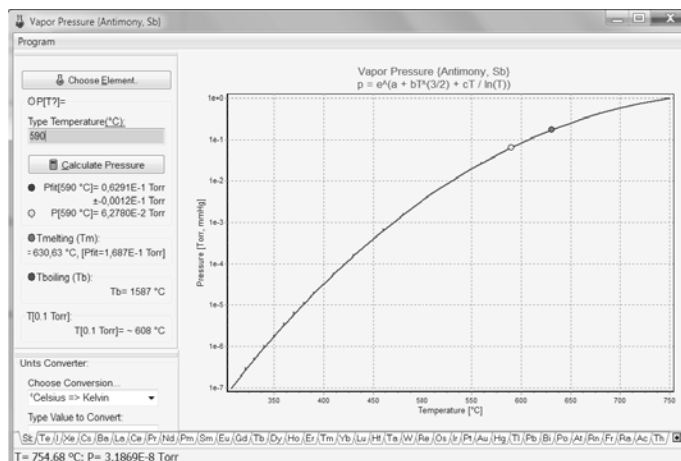


Слика 1. Схематски приказ експеримента у геометрији укрштених млазева [88,109].

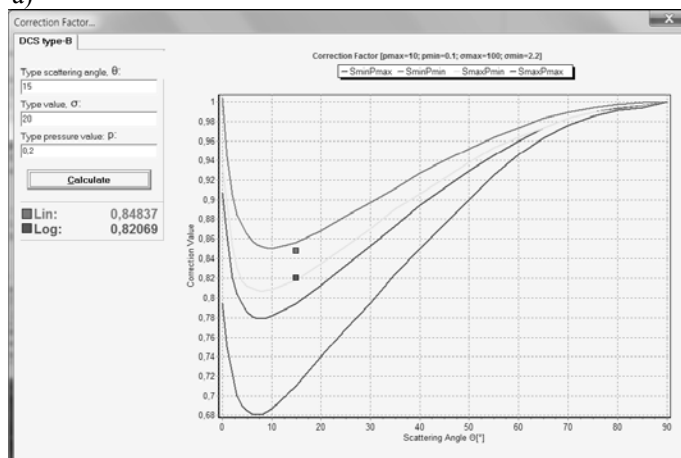
Моноенергијски млаз електрона се добија енергијском селекцијом у елементу са две концентричне полусфере направљене од молибдена, материјала који се показао као изузетно погодним за пролазак електрона јер су површине мало подложне променама микропотенцијала услед оксидације, неравнина и температурских разлика. Вођење електронског млаза се врши електронском оптиком која се састоји од низа цилиндричних сочива која слично као у таласној оптици доводи до преламања млаза и фокусирања. Коначна разлика потенцијала између термоемисионе нити и излазног сочива дефинише енергију електронског млаза. Ефузиони млаз пара атома метала се добија из пећи Кнудсеновог типа са два грејача, једног на дну пећи а другог на врху, чиме се обезбеђује градијент температуре код пећи и спречава зачепљење излазног отвора. Урађено је више модификација пећи према специфичним потребама сваког метала (потребне температуре, сублимација, прављење легура). Систематизација ових експеримената тек треба да буде извршена и описана у посебном раду.

На слици 2а је приказана зависност напона паре метала од температуре. Ове зависности су нелинеарне и тешко се могу обухватити једним аналитичким изразом у широком домену температура, већ су оне одређене експериментално. За сваки метал карактеристичне су две тачке, тачка топљења и тачка кључања. Направљено је софтверско решење које за

дату температуру која се постиже у експерименту даје фитовану вредност напона паре датог метала [110]. Слично софтверско решење је примењено



а)



б)

Слика 2. а) Зависност напона паре од температуре; б) Корекциони фактор услед ефективне интеракционе запремине – софтверско решење [110].

и на одређивање вредности корекционог фактора услед промене интеракционе запремине са променом угла расејања. За дату геометрију експеримента (растојања између центра интеракционе запремине и отвора монохроматора, анализатора и капиларе, пречнике дефинишућих бленди, димензија капиларе и њеног количника пречника отвора и дужине) израчунате су граничне вредности корекционих фактора. Њихове праве вредности за одређени угао расејања одређене су тада само врстом мете (гасним сударним пресеком) и притиском паре. Ове граничне криве су представљене на слици 2б [110].

Електронски спектрометар је подешен тако да се експерименти обављају у условима бинарних судара, дакле посматрамо интеракције појединачог електрона са појединачним атомом мете. Отуда и статистика

сигнала прати статистику ретких догађаја, односно Поасонову статистику. За рад са металним парама од круцијалне важности је да се обезбеде диференцијално пумпање (коморе и електронске оптике), оклопљеност свих делова са заштитом изолатора од напаравања и ефикасна колекција насталих пара мета путем хладног трапа.

Експериментална процедура добијања апсолутних вредности диференцијалних пресека подразумева неки од начина нормирања. Наиме, веома је тешко са већом тачношћу измерити неопходне величине које одређују диференцијални пресек, број/густину честица пројектила и честица мете, њихове просторне и енергијске расподеле и интеграле препокривања. Зато се прибегава нормирању пресека било на теоријске вредности које се могу релативно тачно одредити за поједина стања и на одређеним енергијама. То нормирање се може извршити или на једну тачку (вредност диференцијалног пресека на одређеној енергији и одређеном углу расејања) или на интегралну вредност пресека која се тачније одређује теоријски али се добија са већом мерном несигурношћу из експерименталних података, јер подразумева екстраполацију измерених вредности и њихову нумеричку интеграцију. Друга могућност нормирања је да се диференцијални пресеци преведу у генерализане јачине осцилатора (*GOS*) које у лимиту нултог преноса импулса теже оптичкој јачини осцилатора (*OOS*), величини која је добро позната и експериментално мерљива са грешком до пар процената. При томе се екстраполација вредности *GOS* до *OOS* врши преко функције расејања унапред дефинисаној од стране А. Мсезанеа и сарадника [111,112].

4. РЕЗУЛТАТИ

4.1. Расејање електрона на атомима прве групе периодног система

За атом натријума одређени су диференцијални пресеци за еластично расејање електрона и ексцитације $3p$, $4s$, $3d$ и $4p$ стања при упадним енергијама 10, 20 и 54,4 eV [62]. Измерен је спектар губитака енергије у опсегу од еластичног пика до нешто преко јонизационог потенцијала. У спектру су потпуно раздвојена два блиска ексцитована стања 3^2D и 4^2P . Спектром доминира ексцитациони пик резонантног 3^2P стања док је 4^2S стање релативно најслабије од свих мерених стања. Приказани су релативни диференцијални пресеци, али су дати и њихови количници интензитета и фактори нормирања за три врсте: нормирање на оптичку јачину осцилатора, на интегралне експериментално одређене пресеке, као и нормирање на теоријске резултате групе Мадисона и коаутора [113]. Значајан увид у процесе расејања електрона са атомом натријума је дат управо у назначеном теоријском раду који је штампан у истом броју часописа одмах иза нашег рада. Посебно су изоловани ефекти поларизације и изменског изобличења таласа у апроксимацији другог реда. Постигнуто је добро слагање са нашим експерименталним резултатима.

Мерења на атому рубидијума су у току [114]. Сем експерименталних резултата Вушковићеве и коаутора [45], колико је ауторима познато, не постоје други експериментално одређени диференцијални пресеци. У спектрима губитака енергије атома рубидијума јасно се издвајају еластични пик, ексцитација 5^2P стања, док се стања 4^2D и 6^2S међусобно преклапају.

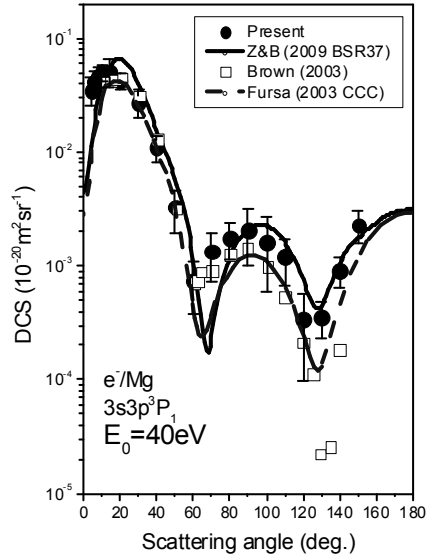
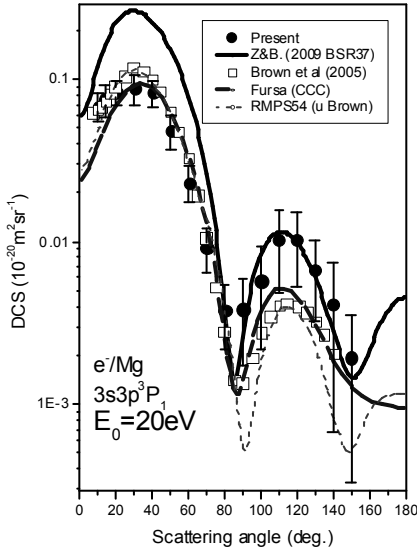
4.2. Расејање електрона на атомима друге групе периодног система

Од групе земноалкалних метала, мерени су диференцијални пресеци за атоме магнезијума [74-79] и калцијума [69-71]. За атом магнезијума мерена је и усмереност спољашње подљуске након судара са електроном методом анизотропне угаоне расподеле електрона емитованих у Ожеовом (Auger) процесу [115]. Код мерења диференцијалних пресека за магнезијум, прво су одређени пресеци за ексцитацију резонантног стања $3s3p\ ^1P_1$ на малим угловима [75] па у целом експериментално доступном домену углава расеања (до 150°) [76]. Затим су из количника интензитета одређени диференцијални пресеци за еластично расејање [77], а потом су одређени пресеци за ексцитације $3s4s\ ^1S_0$, $3s3d\ ^1D_2$ и $3s4p\ ^1P_1$ стања [78]. Најновији резултат представља мерење ексцитације триплетног стања 3P [79]. Експериментални резултати су упоређени са неколико различитих прорачуна (конвергирајуће блиске спреге, релативистичким изобличеним таласима).

На слици 3 представљено је поређење наших мерења диференцијалних пресека за ексцитацију 3P стања [79] и прорачуна и мерења других аутора за енергије од 20 eV и 40 eV. Постоји релативно добро слагање између наших мерења и мерења А. Кроуа и коаутора [117,118] изузев при енергији од 20 eV и већим угловима расејања. Прорачуни помоћу оригиналне методе B-spline R-matrix (BSR) [116] показују изненађујуће високе вредности пресека при малим угловима расејања док изузетно добро слагање постоји на већим угловима расејања (око другог локалног максимума). Насупрот овоме, прорачуни друге групе аутора методом конвергирајуће блиске спреге (CCC) [119] дају добро слагање на малим угловима расејања, а лошије на већим. Прорачун пресека методом RMPS (*R-matrix with pseudo-states*) [117] је урађен у конјункцији са мерењима. Генерално се може закључити да је међусобно слагање свих резултата боље на нешто вишој енергији упадних електрона од 40 eV него на енергији од 20 eV. Још увек не поседујемо теорију којом бисмо могли да подједнако добро опишемо диференцијалне пресеке за ексцитацију триплетног стања атома магнезијума на свим угловима расејања.

Атом калцијума је интензивно изучаван и раније. У табели 1 дат је преглед експерименталних и теоријских резултата везаних за одређивање диференцијалних пресека за еластично расејање електрона у зависности од угла, $\sigma(\theta)$, и у зависности од упадне енергије $\sigma(E_0)$.

Еластични пресеци су експериментално одређени за неколико дискретних упадних енергија електрона, $E_0 = (10, 20, 40, 60, 100)$ eV, па су на тим истим енергијама, у конјункцији са експериментом, урађени прора-



a)

б)

Слика 3. Диференцијални пресек за ексцитацију 3P стања атома магнезијума упадне енергије а) $E_0 = 20 \text{ eV}$; б) $E_0 = 40 \text{ eV}$. • овај рад [79], — B-spline R-matrix (BSR) [116], □ Brown et al. [117,118], - - CCC [119], - - - RMPS [117].

Табела 1. Диференцијални пресеци за еластично расејање електрона на атому калцијума

аутори	теорија/експеримент	резултат	параметри
Gregory and Fink [120]	Диракова једначина	$\sigma(\theta)$	$E_0 = (100-2000) \text{ eV}$
Khare et al. [121]	SF, SFPE, SFPEO	$\sigma(\theta)$	$E_0 = (10-500) \text{ eV}$
Kazakov and Kristoforov [122]	укрштени млазеви 127° цилиндрични ан.	$\sigma(E_0)$	$E_0 = (0-7) \text{ eV}$ $\theta = 90^\circ$
Nikolić and Tančić [123]	Дајсонова једначина	$\sigma(\theta)$	$E_0 = 8,7 \text{ eV}$
Yuan [124]	DF, QRHF, HF	$\sigma(\theta)$	$E_0 = (0,05-10) \text{ eV}$
Kelemen et al. [125]	OP	$\sigma(\theta)$	$E_0 = (0,1-1,8) \text{ eV}$
Remeta et al. [126]	PW	$\sigma(\theta)$	$E_0 = (0,1-1,8) \text{ eV}$
Milislavljević et al. [70]	укрштени млазеви полусферни анализ.	$\sigma(\theta)$	$E_0 = (10, 20, 40, 60, 100) \text{ eV}$ $\theta = 10^\circ - 150^\circ$
Milislavljević et al. [70]	OP (S, SE, SEP)	$\sigma(\theta)$	$E_0 = (10, 20, 40, 60, 100) \text{ eV}$ $\theta = 0^\circ - 180^\circ$
Zatsarinny et al. [127]	B-spline R-matrix	$\sigma(\theta)$	$E_0 = (0-4) \text{ eV}$

SF: static-field approximation, SFPE: static-field-polarization-exchange approximation, SFPEO: static-field-polarization-exchange-spin-orbit approximation, OP: complex optical potential, DF: Dirac Fock atomic wavefunction, QRHF: Cowan quasirelativistic Hartree Fock atomic wavefunction, HF: non-relativistic Hartree Fock atomic

wavefunction, PW: partial-wave expansion, S: static-field, SE: static exchange, SEP: static exchange plus polarization calculation

чуни [70]. Прорачуни су дати у апроксимацији оптичког потенцијала и то у три верзије: S – статичког поља (*static-field*), SE – статичког поља са изменом (*static exchange*) и SEP – статичког поља са изменом и додатом поларизацијом (*static exchange plus polarization calculation*). Резултати су приказани на слици 4.

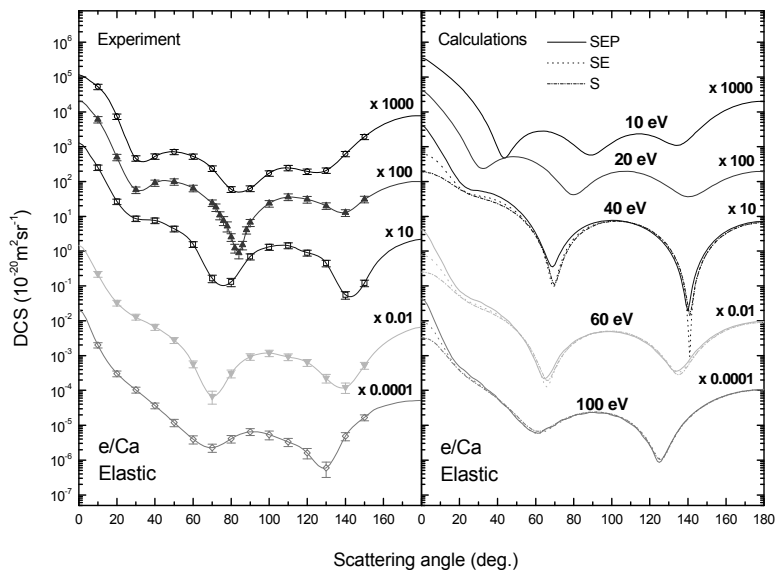
Спектар губитака енергије расејаних електрона на атому калцијума је приказан на слици 5. Стања код овог атома су блиска и не могу се раздвојити у нашем експерименту.

4.3. Расејање електрона на атомима дванаесте групе Периодног система

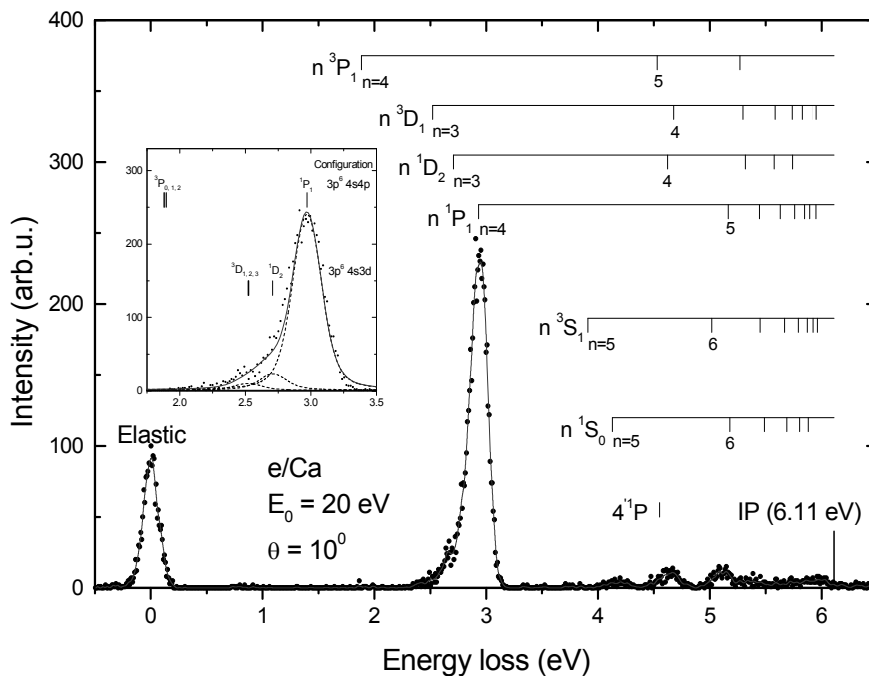
У дванаесту групу елемената Периодног система спадају цинк, кадмијум и жива. Сви ови елементи су детаљно истраживани у експериментима расејања електрона у Лабораторији за физику сударних процеса, Института за физику у Београду. Ови елементи имају попуњене спољашње s љуске испод којих леже попуњене d љуске. Структура електронског омотача је: [Rg] $nd^{10}(n+1)s^2$ где ознака [Rg] стоји за елементе Ar, Kr и Xe док је $n = 3, 4$ и 5 за елементе Zn, Cd и Hg респективно.

Мерења на малим угловима расејања за резонантну екситацију електронима представља важан корак ка одређивању апсолутних вредности диференцијалних пресека за читав сет стања. Ако се одреде апсолутне вредности резонантног стања, тада се апсолутне вредности осталих пикова у спектру губитака могу добити из количника интензитета. На слици 6 приказане су експериментално одређене тачке генерализованих јачина осцилатора и прорачуни. Експерименталне тачке су нормиране тако да се завршавају на линији функције расејања унапред (fsf) која у нултом лимиту тежи оптичкој јачини осцилатора од 1,47 за овај прелаз. Видимо да прва Борнова апроксимација далеко премашује вредности експеримената и другог теоријског прорачуна, CCC – конвергирајуће блиске спреге стања. Такође се може видети да CCC прорачуни за појединачне енергије не завршавају на fsf функцији већ прелазе ове границе.

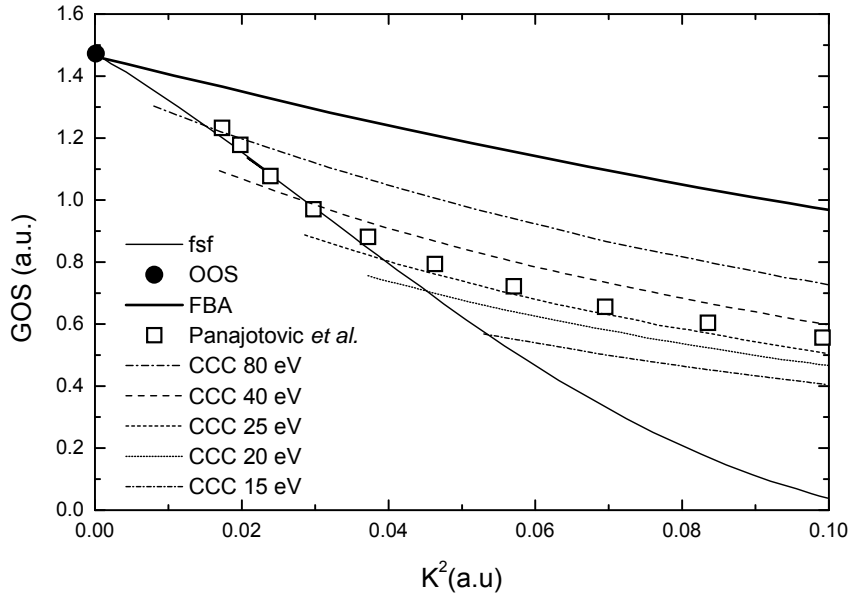
Поред диференцијалних пресека и спектра губитака енергије до првог јонизационог нивоа, проучавани су и спектри у области аутојонизационих стања [68], а на основу спектра избачених електрона под дејством удара електрона [127]. У раду посвећеном аутојонизационим стањима атома цинка [68] снимљени су спектри губитака од 10,2 eV до 12,5 eV за енергије електрона од 20 eV до 100 eV и за мале углове расејања до 10° . Спектри су декомпоновани у циљу одређивања доприноса појединих стања укупном мултиплету прелаза $3d^{10}4s^2 \rightarrow 3d^9 4s^2 4p$ који представља једноелектронски прелаз из унутрашње 3d љуске. Ово је приказано на слици 7. Од укупно 13 линија у мултиплету, одређени су за 7 линија количници интензитета према резонаном стању за неколико



Слика 4. Диференцијални пресек за еластично расејање електрона на атому калцијума. Упадне енергије су $E_0 = (10, 20, 40, 60, 100) \text{ eV}$. а) Експериментални резултати; б) прорачуни у апроксимацији оптичког потенцијала са: S: static-field, SE: static exchange, SEP: static exchange plus polarization [70].



Слика 5. Спектар губитака енергије расејаних електрона на атому калцијума при упадној енергији од $E_0 = 20 \text{ eV}$ и углу расејања од 10° . [69].



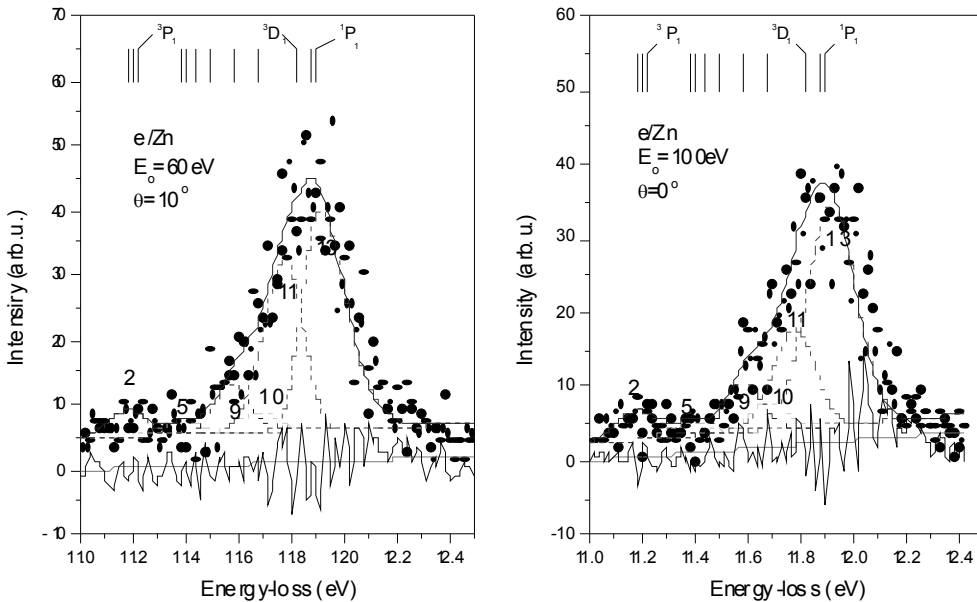
Слика 6. Генерализане јачине осцилатора за резонантну ексцитацију код атома цинка у функцији квадрата преноса импулса израженог у атомским јединицама. Квадрати представљају мерене величине, танка пуна линија функцију расејања унапред (*fsf*), *FBA* је прва Борнова апроксимација, док *CCC* линије представљају прорачуне у апроксимацији конвергентног блиског спрења. [65,66].

упадних енергија електрона и углова расејања.

За атом кадмијума одређен је сет релативних диференцијалних пресека за еластично расејање и ексцитације из основног 5^1S_0 стања у појединачна разлучена стања симетрија 5^3P_1 , 5^3P_2 , 5^1P_1 , 6^3S_1 , 6^1S_0 , 5^1D_2 , 6^1P_1 , 7^1S_0 , 8^1S_0 као и нераздвојених стања ($6^1D_2 + 7^1P_1$) и ($7^1D_2 + 8^1P_1$).

Упадне енергије електрона су посматране у опсегу од 3,4 eV до 85 eV. Дискретне вредности енергија на којима су одређивани диференцијални пресци су 3,4 eV, 6,4 eV, 10 eV, 15 eV, 20 eV, 40 eV, 60 eV и 85 eV. Као и у сличају мерења на атому натријума, и овде су експерименти пропраћени прорачунима од стране Мадисона и коаутора [128]. Теоријски прорачуни су извршени у апроксимацији изобличених таласа првог реда.

На слици 8 приказан је аутојонизациони део спектра губитака енергије електрона за атом кадмијума. На првом делу спектра јасно се виде дискретна стања испод првог јонизационог нивоа, а побуђена ударом електрона упадне енергије 40 eV. Затим следи област одмах изнад јонизационог лимита у коју спадају симултане ексцитације два спољашња $4s^2$ електрона. Ови електрони су промовисани у орбитале $4p5s$. Узан и интензиван пик на енергији од 10,834 eV представља двоструко расејање електрона са ексцитацијом резонантног стања 5^1P_1 . Следи област аутојонизационих стања која настају промоцијом једног електрона из уну-

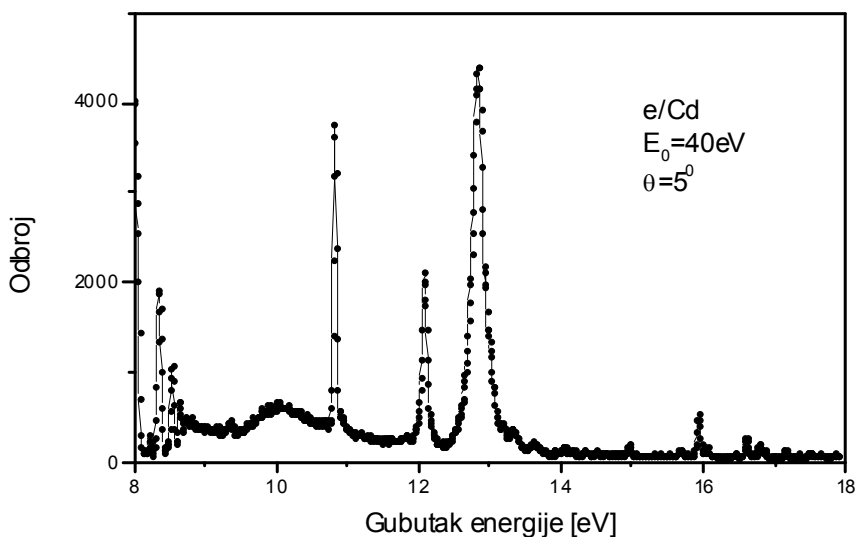


Слика 7. Декомпонован спектар губитака енергије за атом Zn при $E_0 = 60 \text{ eV}$ ($\theta = 10^\circ$) и $E_0 = 100 \text{ eV}$ ($\theta = 0^\circ$): • експерименталне тачке; - - -, декомпоноване линије на основној линији; —, синтетички спектар. Разлика између експерименталних тачака и синтетичког спектра је дата при дну цртежа [68].

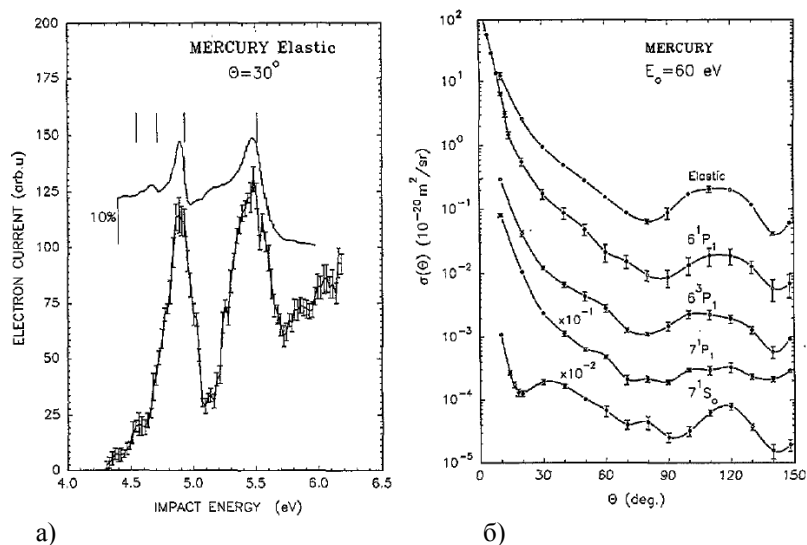
трашње 3d љуске То је мултиплет који је био анализиран и за који су одређене апсолутне вредности диференцијалних пресека [67].

Жива је једини метал који је при собним условима у течном стању. Отуда је и напон паре врло висок и довољно је било загрејати пећ на температуру 390 K да би се добио ефузиони млаз атома [63].

Код мерења на електронском спектрометру потребно је извршити калибрацију енергијске скале. Није довољно само узети разлику потенцијала између термоелектронске нити и последње електроде због постојања контактних разлика које настају између различитих материјала. Стандарни метод калибрације је преко резонанце у хелијуму која је одређена и експериментално и теоријски са великом тачношћу. Међутим, контактне разлике у спектрометру су зависне и од гаса, односно мете која се истражује, па се зато уводе мешавине испитиваног гаса и хелијума. Због експерименталних тешкоћа мешања гаса хелијума и пара метала, прибегава се другом методу, одређивању положаја неке од резонанци у самом атому метала. То је код живе искоришћено да би се посматрале резонанце у еластичном каналу на 4,94 eV и 5,51 eV које су одређене из ранијих мерења [129,130].



Слика 8. Спектар губитака енергије за атом кадмијума при $E_0 = 40 \text{ eV}$ ($\theta = 5^\circ$).



а)

б)

Слика 9. Диференцијални пресек за еластично расејање електрона на атому живе.
 а) Зависност диференцијалног пресека од упадне енергије на углу расејања 30° ; б)
 Угаона зависност при упадној енергији електрона од $E_0 = 60 \text{ eV}$ за еластично
 расејање, ексцитацију резонантног 5^1P_1 стања и осталих виших ексцитованих
 стања [63].

4.4. Расејање електрона на осталим атомима метала

Мерења диференцијалних пресека су обављена и на низу других атома метала, пре свега елемената који спадају у теже елементе са компликованијом структуром спољашњег електронског омотача. У Београду мерења су вршена на атомима ^{47}Ag , ^{49}In , ^{51}Sb , ^{70}Yb , ^{82}Pb и ^{83}Bi . Спектри избачених електрона су мерени у Саутемптону, Енглеска и они обухватају следеће атоме метала: ^{25}Mn [131], ^{29}Cu [132], ^{31}Ga [133], ^{62}Sm [131], ^{63}Eu [134], ^{70}Yb [135], ^{79}Au [136], ^{80}Hg [137], ^{81}Tl [138] и ^{82}Pb [139].

Детаљан опис резултата на атомима сребра и олова дат је у раду који следи [108]. У раду је описан поступак превођења релативних диференцијалних пресека у апсолутне преко процедуре нормализације на оптичку јачину осцилатора. Еластично и нееластично расејање електрона на овим елементима је експериментално проучавано на енергијама упадних електрона од 10, 20, 40, 60, 80 и 100 eV, а у опсегу углава расејања од 1° до 150° за ексцитацију и од 10° до 150° за еластично расејање.

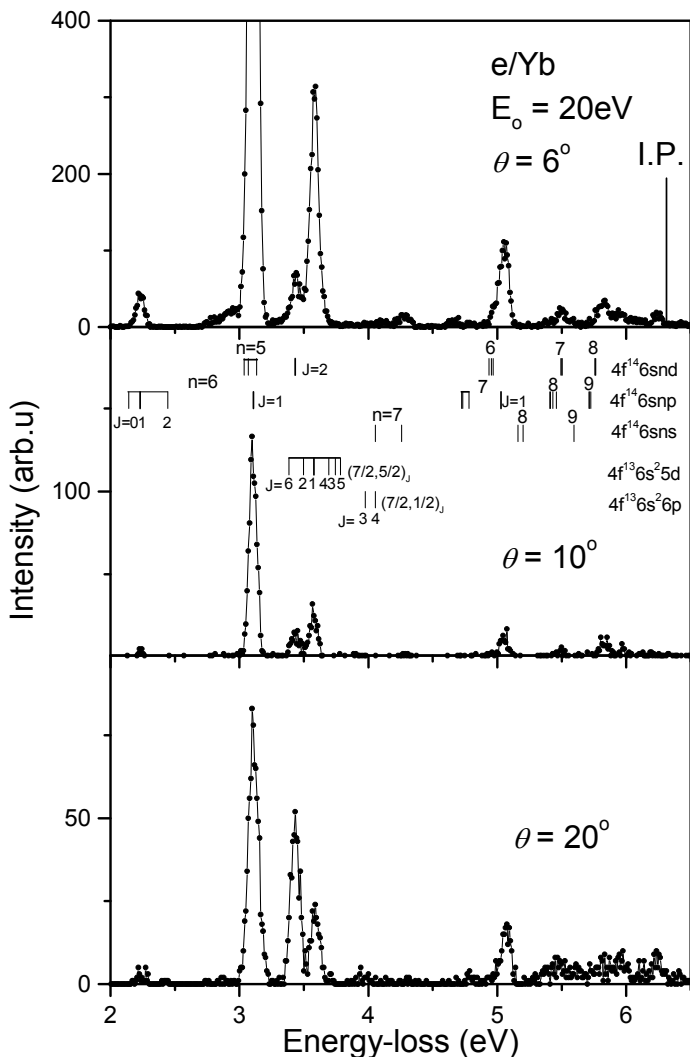
Расејање електрона на атому итербијума је изучавано у нееластичном резонантном каналу (стање $4f^{14}6s6p\ ^1P_1$) и еластичном каналу [72]. Такође изучаване су и ексцитације виших стања $4f^{14}(6s6p\ ^3P_1, 5d6s\ ^1D_2$ и $6s7p\ ^1P_1)$ као и $4f^{13}5d^6s^2\ (7/2, 5/2)_1$ стања [73]. Спектар губитака енергије за углове расејања од 6° , 10° и 20° при упадној енергији од 20 eV приказан је на слици 10. На слици је приказан јонизациони ниво и означена су побуђена стања атома итербијума.

Интересантно је напоменути да је недавно изашао нови рад групе експериментатора и теоретичара [140] у коме се разматра расејање електрона на ласерски ексцитованом атому итербијума, али се такође врши корекција претходно објављених диференцијалних пресека за ексцитацију [141,142]. Овом корекцијом диференцијални пресеци ових аутора се значајно приближавају по апсолутној вредности нашим објављеним резултатима [72,73]. То говори о квалитету и поузданости наших мерења којима је један од циљева да се одреде тачне апсолутне вредности диференцијалних пресека.

За атом индијума мерени су релативни диференцијални пресеци за еластично расејање а доведени су на апсолутну скалу путем нормирања на теоријске резултате групе из Ужгорода [87]. У раду је посебно разматрана промена угаоног положаја минимума са променом упадне енергије електрона. Опште је правило да што је атом мете тежи то је број минимума у диференцијалном пресеку већи. Такође се положаји минимума мењају са променом упадне енергије тако да на појединим енергијама постоји и промена у редном броју минимума, односно минимуми се јављају и нестају. Промена положаја угла минимума са упадном енергијом дата је на слици 11 лево. Положаји експерименталних тачака су добро описани теоријским третманом у апроксимацији оптичког потенцијала.

На слици 11 десно, приказана је промена диференцијалног пресека са упадном енергијом на посебном углу расејања. Експерименталне тачке су релативно ретко приказане, тако да се права слика процеса добија тек када се прикажу резултати прорачуна. Теорија је дата у две апроксимације:

SEPSo – комплексни феноменолошки оптички potencijal sa укљученом спин-орбитном интеракцијом (реални део potencijала укључује статички,



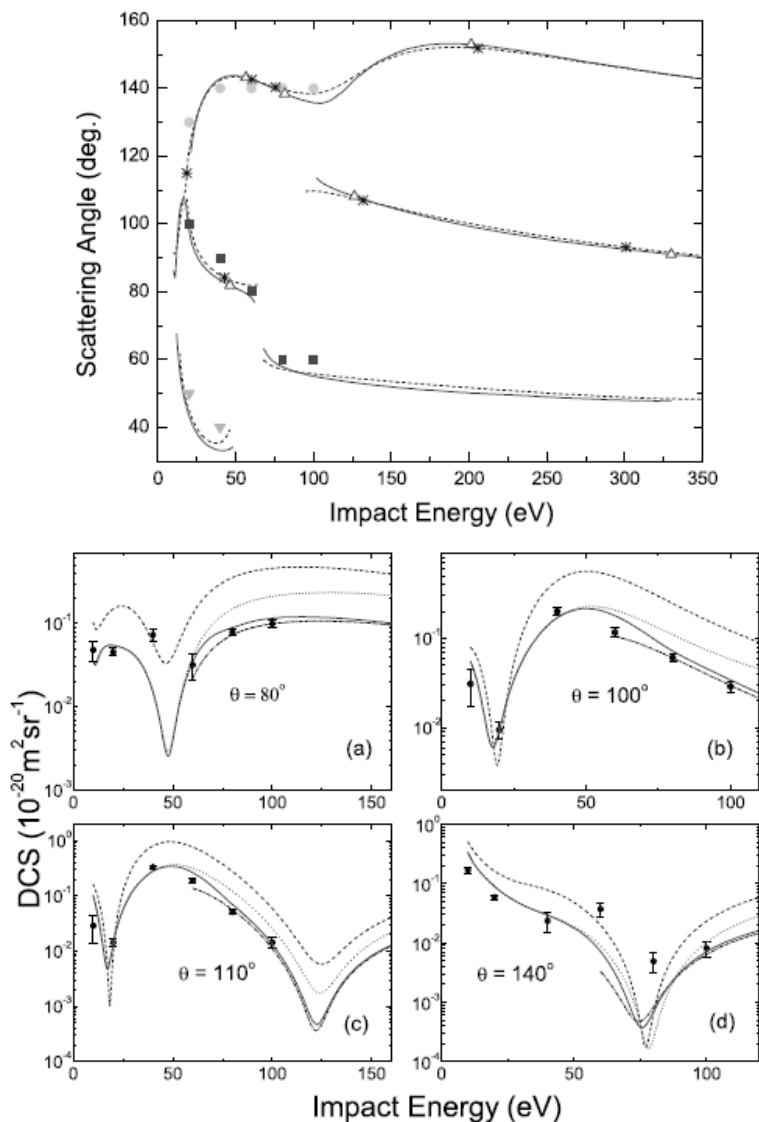
Слика 10. Спектар губитака енергије за атом итербијума при $E_0 = 20\text{ eV}$ ($\theta = 6^\circ$, 10° и 20°).

локални изменски, поларизациони и спин-орбитни члан), док је SEPASo апроксимација допуњена апсорпционим моделним чланом који дозвољава опис процеса губитака енергије.

На слици 12 дати су интегришући пресеци за еластично расејање електрона на атому индијума у области енергија доступних на електронском спектрометру ЕСМА. Запажа се добро слагање експеримента са прорачуном у коме су укључени апсорпциони ефекти у оптичком potencijалу.

5. ИНФОРМАЦИОНИ СИСТЕМ И БАЗА ПОДАТАКА У ФИЗИЦИ АТОМСКИХ СУДАРНИХ ПРОЦЕСА

Развој информационог система (ИС) у физици атомских сударних процеса и развој базе података заснован је на постојећим мерењима у нашој Лабораторији као и на оним резултатима других аутора који су реле-

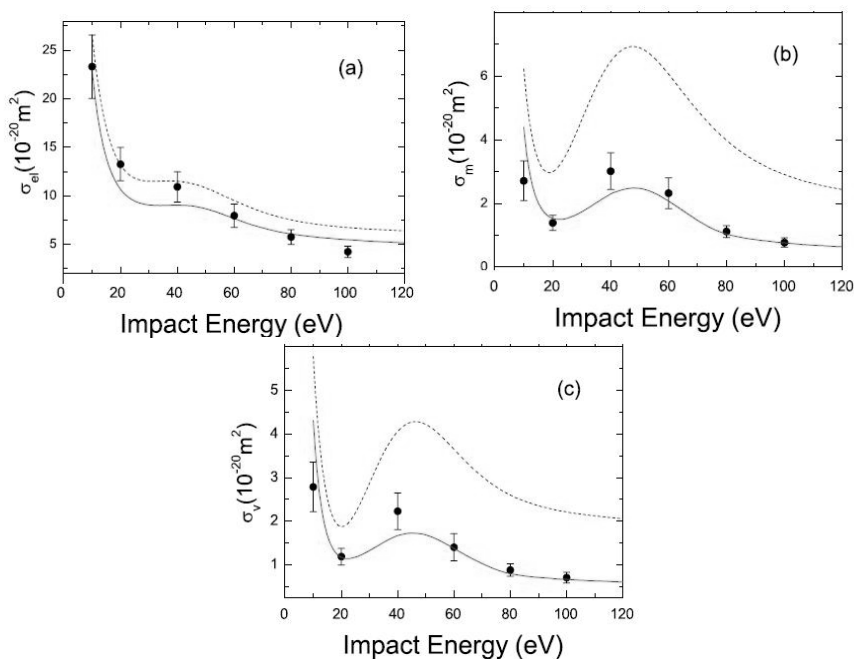


Слика 11. Диференцијални пресек за еластично расејање електрона на атому индијума. (горе) Зависност положаја угла минимума диференцијалног пресека од упадне енергије; (доле) Диференцијални пресек у зависности од упадне енергије на угловима расејања од а) 80° б) 100° в) 110° д) 140° . Пуном црвеном линијом приказан је прорачун у SEPASo апроксимацији а испрекиданом плавом линијом дат је прорачун у SEPSo апроксимацији [87].

вантни за постојећи избор атома мета. Циљ развоја овог ИС је вишеструк (планирање и организација истраживања, извор података, преглед литературе). Он је заснован на декомпозицији чланка од стране експерта и евалуацији сета података и примењених метода. Поред ИС који се развија, дат је приказ постојећих база података из електрон-атомских судара.

5.1. Специфични циљеви информационог система

Специфични циљеви развоја информационог система у области физике сударних процеса проистичу из потребе за изучавањем основних интеракција електрона, фотона и јона са појединачним молекулима са циљем укључивања молекулских ефеката у фундаменталним знањима процеса између осталих, радијационог оштећења. Даљи развој комјутерских кодова за моделовање радијационог оштећења ће бити заснован на новим експерименталним и теоријским подацима. Успостављање информационог система са свеобухватном базом података о пресецима за елементарне процесе интеракција атомских честица као и библиографском базом података представља циљ од далекосежног значаја. У информациони систем ће се укључити експертско знање, критичка евалуација и декомпозиција библиографских јединица у бази података.



Слика 12. Интегришући пресеци за еластично расејање електрона на атому индијума. а) интегрални пресек, б) пресек за преноса импулса, с) пресек вискозности [87]. Експерименталне вредности су приказане тачкама а теорија линијама као на слици 11.

У односу на специфичне циљеве развоја ИС, можемо закључити да је он актуелан и иновативан. Посматрајући само кључну реч “електронски судари” у светској бази знања *Web of Science*, лако се види да постоји преко 10 000 записа и да је интересовање научне јавности стално током читаве декаде. Посебно је релевантна чињеница да је одобрена нова ESF/COST Акција којом се финансира сарадња између 10 европских земаља са значајним научним излазом [143]. Постојећи компјутерски кодови за моделовање радијационог оштећења показали су се неадекватним уколико се жели ићи на нанометријску скалу (напр. скала ДНК молекула). Стога се развијају нови кодови који укључују финије детаље на молекулском нивоу, теже описивању процеса на мањим упадним енергијама са циљем не само да дају процене зауставне енергије, већ и друге детаље као што су угаона и енергијска дистрибуција расејаних честица. Иако данас постоје неке базе података оне су пре свега фрагментисане и оријентисане ка специфичним потребама својих творца. По нашим сазнањима, свеобухватни информациони систем који би комбиновао релационе базе података са пресецима за елементарне процесе са библиографским јединицама не постоји. Предност нашег информационог система је у понуди експертизе у датој области са циљем да се изврши декомпозиција података из литературе на начин погодан за употребу од стране научника, лекара и других истраживача заинтересованих за фундаменталне процесе и податке.

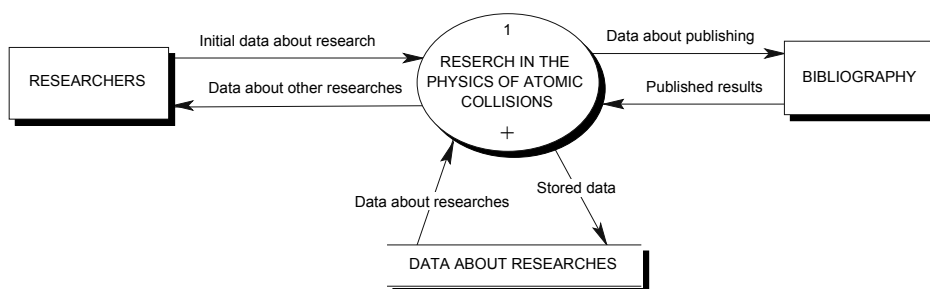
Прелиминарни рад на реализацији информационог система је обављен у групи у Београду где је постављена тест верзија ИС на серверском компјутеру са редувантним чврстим дисковима и 4 додатне радне станице. Систем са 1300 библиографских уноса је тренутно у процесу евалуације и експертске декомпозиције на неколико категорија.

Потреба за свеобухватном базом података у физици атомских сударних процеса постала је данас ургентна, када је ниво софистицираности у моделовању процеса у областима плазма физике (астрофизичке плазме, плазма процесирање и нагризање, ласери са гасним пражњењем, фузија) и/или медицинске физике (радијационо оштећење, радијациона заштита) достигао високи ниво прецизности преко укључивања многих атомских процеса.

5.2. Опис информационог система

База података и информациони систем се тренуно развијају у Београду. Логички модел информационог система у атомској сударној физици је развијен у заједничком раду са истраживачима са Универзитета у Крагујевцу [144]. Модел је имплементиран и недавно презентован као интернет потпомогнута платформа за структурирану претрагу података. Део везан за електронске сударне пресеке је развијен до пробне верзије у којој је омогућена претрага неколико примера диференцијалних и интегралних пресека за атоме метала. Главна препрека развоју успостављеног информационог система је проблем уноса података у којој се захтева од експерта да евалуира штампани рад и да издвоји релевантне податке и параметре било експеримента, било теоријског приступа.

Циљ логичког модела информационог система је да омогући анализу функције која се обавља у реалности и коју треба потпомоћи путем програма и одговарајућом методолошким процедурама као што су: процеси на глобалном нивоу, улазни и излазни проток података о процесима, околних ентитета и складиштење података. Логички модел сваког информационог система се састоји од модела процеса и модела података. Модел процеса је добијен на основу анализе реалних токова тако што је сваки процес формулисан према трансформацији од улазног тока података до излазног тока. Формиран је Дијаграм тока података (DFD) на свим нивоима декомпозиције процеса. На врху декомпозиционе пирамиде се налази општи DFD (тзв. контексни дијаграм) свеобухватне функције која је предмет компјутерске подршке. Модел података је са друге стране добијен анализом релевантних чињеница којима треба управљати у смислу прикупљања и складиштења у бази података, као и процесуирања до коначног захтеваног нивоа. Он се одвија искључиво у оквирима задатим моделом процеса. Зато је и модел података развијан истовремено са развојем модела процеса, како су подаци подвгнути трансформационој функцији преко које се одигравају процеси. Стога, не постоји директна процедура добијања модела података из модела процеса, као ни обрнуто, већ оба модела проистичу из свеобухватне анализе реалних догађаја које треба представити у информационом систему.



Слика 13. Контексни ниво дијаграма [145].

Функција “Истраживање у физици атомских судара (*Research in the physics of atomic collisions* – RPAC) је представљена на дијаграму на слици 13.

Експертска декомпозиција чланака представља концепт који је примењен у припреми модела података. Ово је постала важна идеја и јединствен концепт овог информационог система. Ми смо га назвали *Expert Decomposition of the Article* (EDA). Она носи семантичко значење анализираног текста, користећи бројне селектоване и универзалне одреднице које карактеришу поједину истраживачку област. EDA омогућава да се у информационом систему ускладиште најважнији подаци који карактеришу истраживање дефинисано у поједином чланку и она обухвата како нумеричке и графичке податке, тако и важне параметре, припрему, методологију, честице мете и пројектила, те библиографске и

остале податке. Овиме се избегава потреба за пуним текстом чланка који се може прибавити познатим начинима. Информациони систем омогућава ефикасно и селективно издвајање података као што су нумерички или графички резултати. Формирањем упита за претрагу кроз одреднице EDA, истраживач брзо долази до резултата и библиографских јединица. Тест имплементација информационог система са примерима декомпонованог текста научног чланка, потврдила је основна очекивања и оправдала фундаменталну структуру ИС.

Методологија коришћена у развоју информационог система је базирана на Методу структурне анализе система. Циљ је да се анализирају реалне функције одговарајућим методолошким процедурама као што су: процеси глобалног нивоа, улазни и излазни процеси тока података, ентитети окружења и складиштење података.

Користећи овај информациони систем, истраживач може да формира властиту (локалну) базу у којој чува ток истраживања, а користећи постојеће линкове између ентитета. Тиме има могућност увида у прогрес властитог истраживања (експеримента) као и у резултате из претходних фаза. С друге стране, користећи упите које сам дефинише, истраживач лако и брзо долази до селективног приступа информацијама из библиографије које су везане за текућа истраживања.

У установљавању категорија унутар експертске декомпозиције чланка руководимо се постојећом номенклатуром у најновијој литератури (нова истраживања непрестано се врше и употребљавају се нови термини). Како је декомпозиција чланака извршена преко великог броја атрибута, претраживање се не врши преко слободног текста већ преко тих атрибута што омогућава много бржу селекцију. Важно је напоменути да је систематизација података у РРАС омогућила употребу информационог система и у другим областима.

5.3. Преглед постојећих база података за атомску физику

Многобројне, али фрагментисане базе података у области атомске физике можемо поделити на нумеричке и библиографске. Примери нумеричких база података су следеће базе:

1. The NIST Reference on Constants, Units, and Uncertainty
<http://physics.nist.gov/cuu/index.html>
2. Energy levels, wavelengths and transition probabilities of atoms and ions, http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main_asd
3. Wavelength, energy level, oscillator strength, opacity, and photoionization cross sections, <http://astro.u-strasbg.fr/TOP.html>
4. Collisional data: NIFS, NIST, ALADDIN, <http://www-amdis.iaea.org/aladdin.html>

Примери библиографских база података су следећи:

1. Atomic Transition Probability Bibliography Database,
<http://physics.nist.gov/PhysRefData/Fvalbib/html/reffrm0.html>
2. Пресеци за атоме, јоне и молекуле (структура, судари фотона, електрона, и других атомских честица) <http://gaphyor.lpgp.u-psud.fr/>

Посебну групу система чине такозване претраживачке машине (*search engine*). То су пре свега:

1. GENIE - A General Internet Search Engine for Atomic Data, <http://www-amdis.iaea.org/GENIE/>
2. DANSE - Atomic and Molecular Bibliographic Data Search Engine - ICAMDATA –International Conference on Atomic and Molecular Data

Такође могуће је послати захтеве за on-line израчунавање појединих параметара у атомској физици:

1. Electron Impact Cross Section Calculations Using The Average Approximation, <http://www-amdis.iaea.org/AAEXCITE>
2. Effective ionization and recombination rate coefficients, <http://www-amdis.iaea.org/RATES/>

6. ЗАКЉУЧАК

Диференцијални пресеци за еластично и нееластично расејање електрона на атомима читавог низа атома метала представљени су овом раду, истакнут је значај и мотивација њиховог истраживања. Резултати су упоређени са постојећим теоријским резултатима и прорачунима. Дата је историјска перспектива истраживања наших истраживача у области електронске спектрометрије атома метала. Повезивањем основних истраживања (сударна атомска физика) са информационим технологијама оствариће се и ефекат преноса знања у остале области људских делатности.

ЗАХВАЛНИЦА

Овај рад је финансиран од стране Министарства за науку Републике Србије у оквиру пројекта 171020. Рад такође спада у делатности ESF/COST акције MP1002 Nano-IBCT– Nanoscale Insights into Ion Beam Cancer Therapy. Практичну имплементацију информационог система остварио је дипл. инж. Ђорђе Лазовић и фирма "BigByte".

7. ЛИТЕРАТУРА

- [1] Kurepa J. M., and Kurepa M. V., *Int. J. Electronics*, **18** 115 (1965).
- [2] Kurepa M. V. and Tošić D. D., *Int. J. Electronics*, **18** 125 (1965).
- [3] Vušković L., Cvejanović S. and Kurepa M., *Fizika* **2**, Suppl,1 26 (1970).
- [4] Kurepa M. V., Tasić M. D. and Kurepa J. M., *J. Phys. E: Sci. Instr.* **7** 940 (1974).
- [5] Kurepa M. V., Čadež I. M. and Pejčev V. M., *Fizika* **6** 185 (1974).

- [6] Kurepa M. V. and Vušković L., *J. Phys. B: At. Molec. Phys.* **8** 2067 (1975).
- [7] Vušković L., Kurepa M. V. and Bočvarski V., *Fizika* **7** 163 (1975).
- [8] Grujić P., *J. Phys. B: Atom. Mol.Phys.* **5** L137 (1972).
- [9] Grujić P., *J. Phys. B: Atom. Mol.Phys.* **6** 286 (1973).
- [10] Janev R. K. and Belkić Dž. S., *J. Phys. B: Atom. Mol.Phys.* **5** L237 (1972).
- [11] Janev R. K. and Belkić Dž. S., *J. Phys. B: Atom. Mol.Phys.* **6** 2613 (1973).
- [12] Janev R. K. and Belkić Dž. S., *J. Phys. B: Atom. Mol.Phys.* **6** 1020 (1973).
- [13] Asundi R. K., Craggs J. D. and Kurepa M. V., *Proc. Phys. Soc.* **82** 967 (1963).
- [14] Asundi R. K. and Kurepa M. V., *J. Sci. Instr.* **40** 183 (1963).
- [15] Asundi R. K. and Kurepa M. V., *J. Electronics and Control*, **15** 41 (1963).
- [16] Stamatović A. and Schulz G. J., *Rev. Sci. Instrum.* **39** 1752 (1968).
- [17] Stamatović A. and Schulz G. J., *Rev. Sci. Instrum.* **41** 423 (1970).
- [18] Stamatović A. and Schulz G. J., *Phys. Rev. A.* **7** 589 (1973).
- [19] Heddle D. W. O. and Kurepa M. V., *J. Phys. E: Sci. Instr.* **3** 552 (1970).
- [20] Cvejanović S. and Read F. H., *J. Phys. B: Atom. Mol.Phys.* **7** 1180 (1974).
- [21] Cvejanović S., Comer J. and Read F. H., *J. Phys. B: Atom. Mol.Phys.* **7** 468 (1974).
- [22] Cvejanović S. and Read F. H., *J. Phys. B: Atom. Mol.Phys.* **7** 1841 (1974).
- [23] Čadež I., Tronc M. and Hall R. I., *J. Phys. B: Atom. Mol.Phys.* **7** L132 (1974).
- [24] Čadež I., Tronc M. and Hall R. I., *J. Phys. B: Atom. Mol.Phys.* **8** L73 (1975).
- [25] Cvejanović S. and Grujić P., *J. Phys. B: Atom. Mol.Phys.* **8** L305 (1975).
- [26] Kurepa M. V., Pejčev V. M. and Čadež I. M., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **9** 481 (1976).
- [27] Vušković L. and Kurepa M., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **9** 837 (1976).
- [28] Cvejanović D., Adams A., Imhof R. E. and King G. C., *J. Phys. E: Sci. Instr.* **8** 809 (1975).
- [29] Ross K. J., Ottley T. W., Pejčev V. and Rassi D., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **9** 3237 (1976).
- [30] Pejčev V., Ross K. J., Rassi D. and Ottley T. W., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **10** 459 (1977).
- [31] Pejčev V., Rassi D. and Ross K. J., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **10** L629 (1977).
- [32] Pejčev V., Ross K. J. and Rassi D., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **10** L579 (1977).

- [33] Rassi D., Pejčev V. and Ross K. J., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **10** 3535 (1977).
- [34] Kavei G., Ottley T. W., Pejčev V. and Ross K. J., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **10** 2923 (1977).
- [35] Pejčev V., Rassi D. Ross K. J. and Ottley T. W., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **10** 1653 (1977).
- [36] Pejčev V. and Ross K. J., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **10** L291 (1977).
- [37] Pejčev V. and Ross K. J., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **10** 2935 (1977).
- [38] Rassi D., Pejčev V., Ottley T. W. and Ross K. J., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **10** 2913 (1977).
- [39] Pejčev V., Rassi D. and Ross K. J., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **13** L305 (1980).
- [40] Pejčev V., Ottley T. W., Rassi D. and Ross K. J., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **11** 531 (1978).
- [41] Trajmar S. and Williams W., “Electron-Metal Atom Collision Cross Sections” *Proc. VIII International Summer School on the Physics of Ionized Gases*, August 27 - September 3, 1976, Dubrovnik, Yugoslavia, Ed. B. Navinšek, Invited Lecture, pp. 199 – 215.
- [42] Vušković L., Trajmar S. and Register D. F., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15** 2517 (1982).
- [43] Srivastava S. K. and Vušković L., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **13** 2633 (1980).
- [44] Srivastava S. K. and Vušković L., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **13** 1980 (1980).
- [45] Vušković L., Maleki L. and Trajmar S., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **17** 2519 (1984).
- [46] Filipović D., *M. Sci. Thesis*, University of Belgrade, 1984.
- [47] Filipović D., Marinković B., Pejčev V. and Vušković L., *Phys. Rev. A.* **37** 356 (1988).
- [48] Cho H., McEachran R. P., Buckman S. J., Filipović D. M., Pejčev V., Marinković B. P., Tanaka H., Stauffer A. D. and Jung E. C., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39** 3781 (2006).
- [49] Filipović D., Pejčev V., Marinković B. and Vušković L., *Fizika* **20** 421 (1988).
- [50] Milosavljević A. R., Kelemen V. I., Filipović D. M., Kazakov S. M., Pejčev V., Šević D. and Marinković B. P., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38** 2195 (2005).
- [51] Filipović D., *Ph. D. Thesis*, University of Belgrade, 1989.
- [52] Panajotović R., Filipović D., Marinković B., Pejčev V., Kurepa M. V. and Vušković L., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30** 5877 (1997).
- [53] Filipović D., Marinković B., Pejčev V. and Vušković L., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** 677 (2000).
- [54] Filipović D., Marinković B., Pejčev V. and Vušković L., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** 2081 (2000).
- [55] Marinković B. P., *M. Sci. Thesis*, University of Belgrade, 1985.

- [56] Marinković B. P., Szmytkowski Cz., Pejčev V., Filipović D. and Vušković L., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **19** 2365 (1986).
- [57] Marinković B. P., Pešić Z. D., Panajotović R., Filipović D. M., Felfli Z. and Msezane A. Z., *Balkan Phys. Lett.* **6** 101 (1998).
- [58] Marinković B. P., Panajotović R., Pešić Z. D., Filipović D. M., Felfli Z. and Msezane M. S., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **32** 1949 (1999).
- [59] Marinković B. P., *Ph. D. Thesis*, University of Belgrade, 1989.
- [60] Marinković B. P., in “*Atomic Collision Processes and Laser Beam Interactions with Solids*”, Eds. M. Milosavljević and Z. Lj. Petrović, (Nova Science Publishers, Inc., New York, 1996). pp. 101 – 114.
- [61] Marinković B. P., Pejčev V., Filipović D. and Vušković L., *J. Phys. B: At. Molec. Phys.* **24** 1817 (1991).
- [62] Marinković B. P., Pejčev V., Filipović D., Čadež I. and Vušković L., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25** 5179 (1992).
- [63] Panajotović R., Pejčev V., Konstantinović M., Filipović D., Bočvarski V. and Marinković B. P., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26** 1005 (1993).
- [64] Panajotović R., *Ph. D. Thesis*, University of Belgrade, 1993.
- [65] Panajotović R., Šević D., Pejčev V., Filipović D. M. and Marinković B. P., *Int. J. Mass Spectrom.* **233** 253 (2004).
- [66] Fursa D. V., Bray I., Panajotović R., Šević D., Pejčev V., Filipović D. M. and Marinković B. P., *Phys. Rev. A* **72** 012706 (2005).
- [67] Predojević B., Šević D., Pejčev V., Marinković B. P. and Filipović D. M., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36** 2371 (2003).
- [68] Predojević B., Šević D., Pejčev V., Marinković B. P. and Filipović D. M., *Serbian Astronomical Journal* **169** 53 (2004).
- [69] Milisavljević S., Šević D., Pejčev V., Filipović D. M. and Marinković B. P., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37** 3571 (2004).
- [70] Milisavljević S., Šević D., Chauhan R. K., Pejčev V., Filipović D. M., Srivastava R. and Marinković B. P., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38** 2371 (2005).
- [71] Milisavljević S., *M. Sci. Thesis*, University of Belgrade, 2006.
- [72] Predojević B., Šević D., Pejčev V., Marinković B. P. and Filipović D. M., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38** 1329 (2005).
- [73] Predojević B., Šević D., Pejčev V., Marinković B. P. and Filipović D. M., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38** 3489 (2005).
- [74] Predojević B., *Ph. D. Thesis*, University of Belgrade, 2006.
- [75] Filipović D. M., Predojević B., Šević D., Pejčev V., Marinković B. P., Srivastava R. and D. Stauffer A., *Int. J. Mass Spectrom.* **251** 66 (2006).
- [76] Filipović D. M., Predojević B., Pejčev V., Šević D., Marinković B. P., Srivastava R. and D. Stauffer A., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39** 2583 (2006).
- [77] Predojević B., Pejčev V., Filipović D. M., Šević D. and Marinković B. P., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40** 1853 (2007).
- [78] Predojević B., Pejčev V., Filipović D. M., Šević D. and Marinković B. P., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41** 015202 (2008).

- [79] Predojević B., Pejčev V., † Filipović D. M., Šević D., Tomčik B. and Marinković B. P., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44** 055208 (2011).
- [80] Marinković B. P., Pejčev V., Filipović D. M., Šević D., Milisavljević S. and Predojević B., *Rad. Phys. Chem.* **76** 455 (2007).
- [81] Marinković B. P., Tošić S. D., Rabasović M. S., Šević D., Pejčev V., Predojević B. and Filipović D. M., “Measurements of Electron Interactions with Metal Vapour Atoms”, *Proc. 2nd Meeting on Electron Controlled Chemical Lithography (ECCL 2009)*, 4 – 9 June 2009, Sabani Üniversitesi, Istanbul, Turkey, Abstract Booklet, Oral Presentation, p.34.
- [82] Marinković B. P., “Electron scattering data on metal atoms”, *XX Europ. Conf. on the Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases (XX ESCAMPIG)*, Post conference “*Workshop on Atomic and Molecular data needs for lighting*” 13 – 17 July 2010, Novi Sad, Serbia.
- [83] Milisavljević, S., Rabasović, M. S., Šević, D., Pejčev, V., Filipović, D. M., Lalita Sharma, Rajesh Srivastava, Stauffer, A. D., Marinković B. P., *Phys. Rev. A*, **75**, 052713, (2007).
- [84] Milisavljević, S., Rabasović, M. S., Šević, D., Pejčev, V., Filipović, D. M., Lalita Sharma, Rajesh Srivastava, Stauffer, A. D., Marinković B. P., *Phys. Rev. A*, **76**, 022714, (2007).
- [85] Tošić S. D., Rabasović M. S., Šević D., Pejčev V., Filipović D. M., Sharma L., Tripathi A. N., Srivastava R. and Marinković B. P., *Phys. Rev. A* **77** 012725 (2008).
- [86] Marinković B. P., Filipović D. M., Pejčev V. and Šević D., *Int. J. Mass Spectrom.* **271** 76 (2008).
- [87] Rabasović M. S., Kelemen V. I., Tošić S. D., Šević D., Dovhanych M. M., Pejčev V., Filipović D. M., Remeta E. Yu. and Marinković B. P., *Phys. Rev. A* **77** 062713 (2008).
- [88] Rabasović M. S., Tošić S. D., Pejčev V., Šević D., Filipović D. M. and Marinković B. P., *Facta Universitatis, Series Phys. Chem. Technol.* **6** 119 (2008).
- [89] Rabasović M. S., Tošić S. D., Šević D., Pejčev V., Filipović D. M. and Marinković B. P., *Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B* **267** 279 (2009).
- [90] Tošić S. D., Kelemen V. I., Šević D., Pejčev V., Filipović D. M., Remeta E. Yu. and Marinković B. P., *Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B* **267** 283 (2009).
- [91] Bederson B., *Comments Atom. Mol. Phys.* **1** 41 (1969).
- [92] Fano U. and Macek J. H., *Rev. Mod. Phys.* **45** 553 (1973).
- [93] Bartschat K., *Phys. Rep.* **180** 1 (1989).
- [94] Andersen N., Gallagher J. W. and Hertel I. V., *Phys. Rep.* **165** 1 (1988).
- [95] Kessler J., *Polarized Electrons*, Springer Series on Atoms and Plasmas, 2nd edition, (1976).
- [96] Kessler J., Lucas C. B. and Vušković L., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **10** 847 (1977).
- [97] Marinković B. P. and Kurepa M. V., in *Free Electron Beams, Symposium Electron - The Centenary of the Discovery*, Vol.3, Ed. M.

- Kurepa, (Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade, 1997) pp.209-256 (in Serbian).
- [98] Andersen N., Bartschat K., Broad J. T. and Hertel I. V., *Phys. Rep.* **279** 251 (1997).
- [99] Zuo M., Jiang T. Y., Vušković L. and Bederson B., *Phys. Rev. A* **41** 2489 (1990).
- [100] Jiang T. Y., Ying C. H., Vušković L. and Bederson B., *Phys. Rev. A* **42** 3852 (1990).
- [101] Ying C. H., Perales F., Vušković L. and Bederson B., *Phys. Rev. A* **48** 1189 (1993).
- [102] Jiang T. Y., Zuo M., Vušković L. and Bederson B., *Phys. Rev.Lett.* **68** 915 (1992).
- [103] Jiang T. Y., Shi Z., Ying C. H., Vušković L. and Bederson B., *Phys. Rev. A* **51** 3773 (1995).
- [104] Tarnovsky V., Bunimovcz M., Vušković L., Stumpf B. and Bederson B., *J. Chem. Phys.* **98** 3894 (1993).
- [105] Shi Z., Ying C. H. and Vušković L., *Phys. Rev. A* **53** R16 (1996).
- [106] Shi Z., Ying C. H. and Vušković L., *Phys. Rev. A* **54** 480 (1996).
- [107] Tan W. S., Shi Z., Ying C. H. and Vušković L., *Phys. Rev. A* **54** R3710 (1996).
- [108] Tošić, S. D., Šević, D., Pejčev, V. and Marinković B. P., *Physics 2010*, Banja Luka (2011).
- [109] Brinkman, R. and T. Trajmar, S., *J. Phys. E: Sci. Instrum.*, **14**, 245, (1981).
- [110] Petruševski B. A., Šević D. and Marinković B. P., “User-friendly software for resolving some of the parameters in electron spectrometry experiments: scattering volume correction factor and metal vapour pressure curves”, in *Proc. 7th Radiation Damage in Biomolecular Systems – RADAM 2010*, 30th June – 2nd July 2010, Madrid, Spain, p.86.
- [111] Avdonina, N. B., Felfli, Z. and Msezane, A., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30** 2591 (1997).
- [112] Felfli, Z. and Msezane, A. Z., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31** L165 (1998).
- [113] Madison D. H., Bartschat K. and McEachran R. P., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25** 5199 (1992).
- [114] Predojević B., Pejčev V., Šević D., Lekić S. and Marinković B. P., 27th ICPEAC to be submitted (2011).
- [115] Forrest L. F., James G. K., Ross K. J. and Pejčev V., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **16** 4671 (1983).
- [116] Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., Lazur V. and Nagy E., *Phys. Rev. A* **79** 052709 (2009).
- [117] Brown D. O., Crowe A., Fursa D. V., Bray I. and Bartschat K. J. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38** 4123 (2005).
- [118] Brown D. O., Cvejanović D. and Crowe A., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36** 3411 (2003).
- [119] Fursa D. V. and Bray I., *Phys. Rev. A* **63** 032708 (2001).
- [120] Gregory D. and Fink M., *At. Data Nucl. Data Tables* **14** 39 (1974).

- [121] Khare S. P., Kumar Ashok and Vijayshri, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **18** 1827 (1985).
- [122] Kazakov S. M. and Kristoforov O. V., *Sov. Phys. Tech. Phys.* **30** 476 (1985).
- [123] Nikolić M. R. and Tančić A. R., 17th *Summer School and Int. Symposium on the Physics of Ionized Gases (Belgrade)*, ed. B. Marinkovic and Z. Petrović (Yugoslavia: Institute of Physics Belgrade), Contributed papers, p. 14 (1994).
- [124] Yuan J., *Phys. Rev. A* **52** 4647 (1995).
- [125] Kelemen V. I., Remeta E. Yu. and Sabad E. P., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28** 1527 (1995).
- [126] Remeta E. Yu., Shpenik O. B. and Bilak Yu. Yu., *Tech. Phys.* **46** 375 (2001).
- [127] Back C. G., White M. D., Pejčev V. and Ross K. J., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **14** 1497 (1981).
- [128] Madison D. H., Bartschat K. and Srivastava R., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24** 1839 (1991).
- [129] Albert K., Christian C., Heindeorff T., Reichert E. and Schoen S., *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **10** 2797 (1977).
- [130] Kazakov S. M., Korotkov A.I. and Shpenik O.B., *Zh. Eks. Teor. Fiz.* **78** 1687 (*Sov. Phys. JETP* **51** 847) (1980).
- [131] Ford M. J., Pejčev V., Smith D., Ross K. J. and Wilson M., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23** 4247 (1990).
- [132] Forrest L. F., Pejčev V., Smith D., Ross K. J. and Wilson M., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20** 3985 (1987).
- [133] James G. K., Pejčev V., Ross K. J. and Wilson M., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15** 1421 (1982).
- [134] Ford M. J., Forrest L. F., Pejčev V., Smith D., Sokhi R. S. and Ross K. J., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20** 4241 (1987).
- [135] Forrest L. F., Pejčev V., James G. K., Daniel G. J. and Ross K. J., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **18** 2601 (1985).
- [136] Pejčev V., Forrest L. F., James G. K., Kurepa M., Smith D. and Ross K. J., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **21** 2273 (1988).
- [137] J.,Forrest L. F., Sokhi R., Pejčev V., Ross K. J. and Wilson M., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **18** 4519 (1985).
- [138] Back C., Pejčev V., Ross K. J. and Wilson M., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **16** 2413 (1983).
- [139] Pejčev V., Back C. G., Ross K. J. and Wilson M., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **14** 4649 (1981).
- [140] Hein J. D., Kidwai S., Zetner P. W., Bostock C., Fursa D. V., Bray I., Sharma L., Srivastava R. and Stauffer A., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44** 015202 (2011).
- [141] Johnson P. V., Li Y., Zetner P. W., Csanak G., Clark R. E. H. and Abdallah J. Jr., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31** 3027 (1998).
- [142] Zetner P. W., Johnson P. V., Li Y., Csanak G., Clark R. E. H. and Abdallah J. Jr., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34** 1619 (2001).

- [143] ESF/COST Action: MP1002 Nano-IBCT– Nanoscale Insights into Ion Beam Cancer Therapy
http://w3.cost.eu/index.php?id=248&action_number=MP1002
- [144] Cvjetković V., Bilbija M., Marinković B. P., Bočvarski V. and Nikolić V., *Proc. Symposium YUINFO'2002*, Kopaonik, 11-15 March (2002).
- [145] Cvjetković V., Marinković B. P., Bočvarski V., Bilbija M. and Petrović V., *Proc. of the Fifth Gen. Conf. of Balkan Physical Union BPU-5*, Vrnjačka Banja, Serbia and Montenegro, August 25 – 29, 2003, Eds. S. Jokić, I. Milosević, A. Balaz and Z. Nikolić, (Belgrade: Serbian Physical Society) CD-ROM Abstract SO04 – 003, pp. 245 – 250 (2003).

ЈЕДАН МЕТОД ЗА КОРИГОВАЊЕ ЕФЕКТА САМОАПСОРПЦИЈЕ

С. Буквић

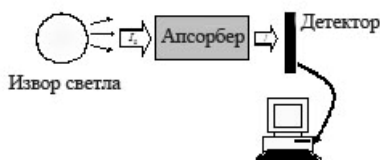
Физички факултет, Београд

Сажетак. Размотрени су најзначајнији узроци који доводе до појаве самоапсорпције и неколико стандардних начина за проверу да ли и у којој мери је самоапсорпција присутна у резултатима спектроскопских мерења. Као пример приказани су резултати мерења за HeII P_{α} (468.6nm) линију. Изложен је метод за процену самоапсорпције спектралних линија које припадају резонантним мултиплетима.

Abstract. We consider the most common sources which result in self absorption phenomenon of spectral lines as well as some standard procedures for estimating amount of self absorption present in spectroscopic data. As an example measurement data for HeII P_{α} (468.6nm) spectral line are shown. A novel method suitable for evaluation of self absorption magnitude for spectral lines belonging to the resonance multiplets is presented.

1. УВОД

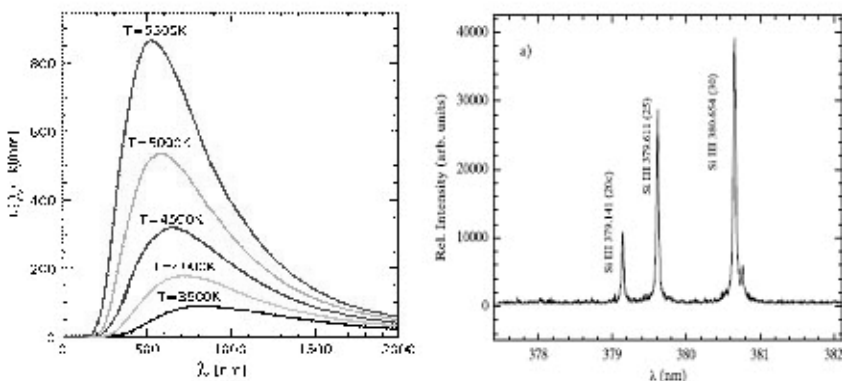
Апсорпција електромагнетног зрачења јавља се при проласку кроз материјалну средину. Од тога какав је извор електромагнетног зрачења,



Слика 1. Апсорпција светла

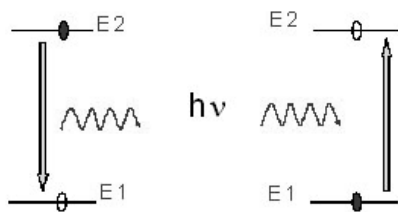
видљиве светлости у нашем случају, зависи начин на који се појава самоапсорпције испољава. Најједноставнији експеримент приказан је на слици 1. Услед апсорпције детектор мери интензитет I мањи од упадног интензитета I_0 . Извор светла може имати континуални спектар, као што су старе добре сијалице у домаћинству, међутим, спектар може бити и линијског типа. Такви извори се врло често користе у лабораторијама. У том случају емисија електромагнетног зрачења постоји само на одређеним

таласним дужинама, због чега су спектри добили назив линијски. На слици 2 приказана су два спектра, на левој страни је континуални спектар какав емитује обична сијалица за различите температуре волфрамског влакна. На десној страни слике 2 је типичан линијски спектар два пута јонизованог силицијума. Спектар је добијен тако што се кроз паре (гас) атома силицијума пропушта струја. Процес апсорпције зависи у великој мери од



Слика 2. Континуални и линијски спектар

особина материјала који врши апсорпцију. Намеће се питање како изгледа апсорпција ако је апсорбер гас који светлост апсорбује само на појединим таласним дужинама, поготово ако је гас који апсорбује зрачење исти као гас који се користи за извор светла. У том случају емисионе и апсорпционе линије налазиће се на истим таласним дужинама. Свака таласна дужина придружена је одређеном оптичком прелазу између горњег (E_2) и доњег (E_1) стања, видети слику 3. Лако је запазити да гас који врши емисију може, у исто време, и да апсорбује емитовану светлост. Таква појава назива се



Слика 3. Емисија и апсорпција светлости између истог горњег и доњег стања различитих атома

самоапсорпција зрачења и карактеристична је за гасове загрејане до високих температура. Проток струје кроз гас (јонизовани гас) такође чини да гас почиње да емитује светлост, али у том случају температура гаса не мора да буде значајно већа од собне температуре.

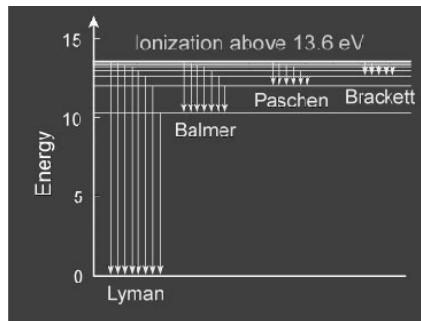
2. САМОАПСОРПЦИЈА

У сваком (јонизованом) гасу који емитује светлост постоји самоапсорпција зрачења, питање је у којој мери је присутна и на који начин присуство самоапсорпције може да се уочи. Величина која "мери" интензитет самоапсорпције назива се *оптичка дебљина* и дата је следећим изразом:

$$k_\lambda \cdot l = \frac{e^2 \lambda^2}{4\epsilon_0 m c^2} g_1 f_{12} n z(\lambda) \cdot l \quad (1)$$

l је дужина слоја плазме који емитује односно апсорбује зрачење, e је наелектрисање електрона, m маса, ϵ_0 је диелектричка пропустљивост вакуума, c брзина светлости у вакууму, λ је таласна дужина апсорбоване светлости, g_1 статистичка тежина горњег нивоа прелаза, f_{12} је сила осцилатора за дати прелаз, а $z(\lambda)$ је нормализовани профил спектралне линије $\int_{-\infty}^{+\infty} z(\lambda) = 1$; n је концентрација атома који се налазе у доњем стању посматраног оптичког прелаза. Ако је величина, $k_\lambda l \ll 1$ самоапсорпција је занемарљива, ако је $k_\lambda l \leq 1$ самоапсорпција је присутна, а ефекти које она изазива могу се кориговати. Коначно, за $k_\lambda l > 1$ самоапсорпција је изразита и ефекти које изазива не могу се кориговати. Треба уочити да је у једначини (1) једино концентрација атома у доњем стању прелаза n величина која карактерише јонизовани гас, све остале величине су табличне константе или карактеришу посматрани прелаз. Такође, оптичка дебљина је пропорционална дужини l слоја који апсорбује зрачење. На основу свега можемо закључити када ће постојати услови да самоапсорпција постане незанемарљив феномен:

- i) када су димензије плазме велике,
- ii) када је концентрација доњег стања посматраног прелаза велика, односно:
- iii) када се посматрају спектралне линије радног гаса,
- iv) када се посматрају линије примеса чије доње стање је основно или блиско основном стању.

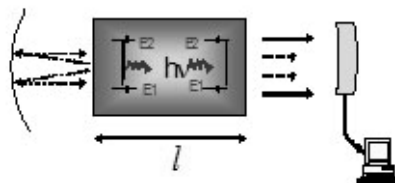


Слика 4. Дијаграм водоникових енергетских стања

На пример, линије Лајманове серије водониковог атома су најподложније самоапсорпцији, а у много мањој мери линије Балмерове и осталих серија, видети слику 4. Слично расуђивање важи и у случају када се посматра емисија било ког другог емитера, не само водоника.

3. НАЧИНИ ЗА ПРОВЕРУ САМОАПСОРПЦИЈЕ

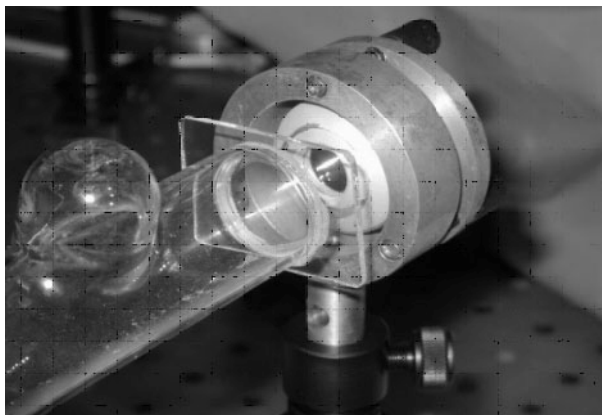
У литератури је описан низ различитих начина за проверу самоапсорпције [1]. Један је употреба „задњег“ огледала, које омогућава да део светлости



Слика 5. Шематски приказ поставке са задњим огледалом

два пута прође кроз плазму, видети слику 5. Ако самоапсорпције нема, профил емисионе линије снимљен са задњим огледалом биће интензивнији него без тог огледала и то у свакој тачки за исти износ. Ако самоапсорпција постоји, онда ће у центру линије појачање интензитета бити мање него на крилима линије управо због самоапсорпције која је у центру линије најинтензивнија. Овај метод може једноставно да се реализује у лабораторијским условима. Најбољи резултати постижу се употребом конкавног задњег огледала чије фокално растојање приближно одговара дужини плазме l . Треба уочити да у реалности интензитет спектралне линије са задњим огледалом никада не може достићи дупло већу вредност од интензитета измереног без огледала. На слици 6 приказано је задње огледало једне лабораторијске реализација описане поставке. Слика 7 представља спектралну линију Пашен алфа P_α (468.6nm) јонизованог хелијума снимљену са и без задњег огледала. Уочава се да је интензитет снимљен са задњим огледалом увећан за око 30% и представљен је сивом линијом. Упоредо је на десној страни слике 7 приказан количник интензитета линије снимљене са и без задњег огледала. Уочава се да количник не зависи од таласне дужине што сведочи о одсуству самоапсорпције за $HeII P_\alpha$ (468.6nm) линију при датим условима снимања. Увећано расипање тачака на крилима линије је нормална последица шума, који на крилима линије где интензитети теже нули, постаје доминантан. Иако врло једноставан и делотворан, метод са задњим огледалом није увек применљив, из више разлога. У многим ситуацијама није могуће поставити задње огледало, објекат који се проучава је удаљен (као што су астрофизички објекти), или су у питању други технички разлози. Осим тога, ако су спектралне линије врло уске са неповољним

односом сигнала и шума, резултати добијени овим методом су непоуздани, врло често и неупотребљиви. Алтернатива је метод „односа релативних интензитета“ који је изразито погодан ако се проучавају спектралне линије које припадају истом мултиплету. Суштина метода је да се израчунају



Слика 6. Експериментална реализација задњег огледала

односи *измерених* интензитета $R_{p,q}^m = \frac{I_p}{I_q}$ за сваки пар линија p, q и упореде

са теоријским односима $R_{p,q}^{th} = \frac{A_p g_p}{A_q g_q}$. Са A су означене вероватноће

прелаза, а са g статистичке тежине горњих стања прелаза. Ако

самоапсорпције нема, количник $Q_{p,q} = \frac{R_{p,q}^m}{R_{p,q}^{th}} = 1$ у идеалном случају. Због

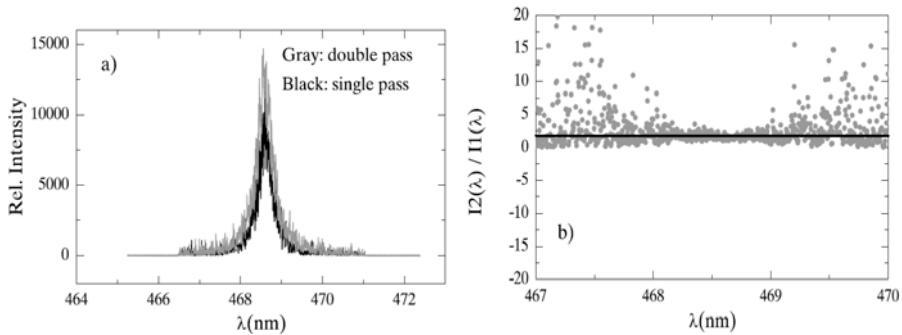
експерименталних грешака при мерењу интензитета и ограничене тачности табличних података, у реалности величине $Q_{p,q}$ ће у већој или мањој мери одступати од јединице. Неповољна околност је што и када су одступања количника $Q_{p,q}$ од јединице већа од очекиваних одступања узрокованих експерименталним грешкама, корекција добијених резултата није могућа. Размотрићемо конкретан пример, спектралне линије атома силицијума из прелаза $3s^2 3p^2 - 3s^2 3p4s$ приказане на слици 8. Интензитет сваке линије понаособ пропорционалан је површини "испод" линије, а

однос интензитета једнак је односу површина $R_{p,q}^m = \frac{I_p}{I_q}$. Таблични подаци

за вероватноће прелаза A и статистичке тежине g налазе се на: http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html. На основу табли-

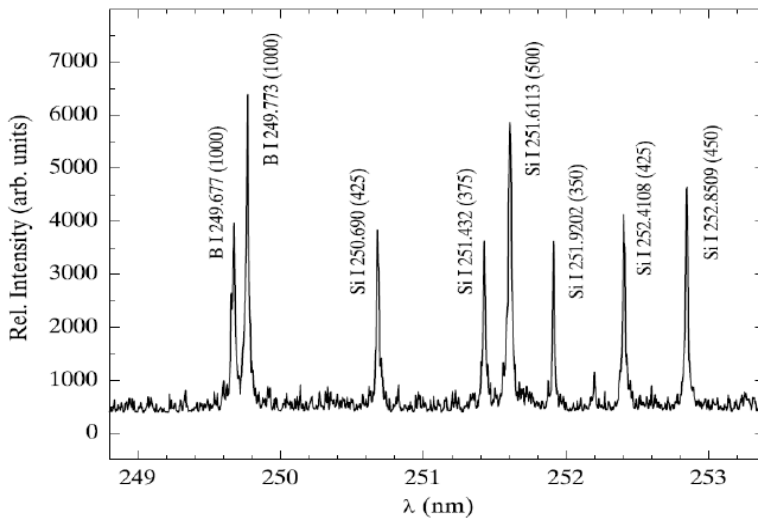
чних података лако се могу израчунати односи $R_{p,q}^{th} = \frac{A_p g_p}{A_q g_q}$ односно

количници $Q_{p,q} = \frac{R_{p,q}^m}{R_{p,q}^{th}}$. У табели 1 прегледно су приказани одговарајући резултати. Уочава се да одступања од јединице, идеалне вредности коли-



Слика 7. а) Профил HeII P_α (468.6nm) линије снимљен са и без задњег огледала б) количник односа интензитета линије снимљене са и без задњег огледала

чника $Q_{p,q}$ износе и до 30%. Мада велико, такво одступање и даље је у границама одређеним експерименталним и грешкама табличних података.



Слика 8. Спектар силицијума

Закључак није лак и једнозначан, могуће је да самоапсорпције има, а да због грешака у мерењу и табличних грешака ми то не видимо. Намеће се питање: који је то максималан износ самоапсорпције који, ако постоји, може бити маскиран споменути експерименталним грешкама?

Табела 1. Количници односа

p						
q	250.690	251.432	251.611	251.920	252.411	252.851
250.690	1					
251.432	0.87	1				
251.611	1.18	1.33	1			
251.920	-	-	-	1		
252.411	-	-	-	0.95	1	
252.851	-	-	-	0.95	1.18	1

4. КОРАК КА РЕШЕЊУ

Посматраћемо хомогени слој плазме дужине l . Интензитет зрачења на таласној дужини λ дат је изразом

$$I_\lambda = F_\lambda [1 - \exp(-k_\lambda l)] \quad (2)$$

где је F_λ емисивност слоја плазме [2] јединичне дужине у јединичном интервалу таласних дужина, а $k_\lambda = \frac{e^2 \lambda^2}{4 \epsilon_0 m c^2} g_1 f_{12} n z(\lambda)$ је коефицијент апсорпције дат изразом (1). Као што је раније било наглашено, ако је $k_\lambda l \ll 1$ самоапсорпција може да се занемари и у том случају $I_\lambda = F_\lambda l \equiv I_{0\lambda}$, интензитет зрачења сразмеран је са дужином слоја који зрачи. Ако је самоапсорпција присутна, а оптичка дебљина довољно мала (тако да експоненцијалну функцију $\exp(-k_\lambda l)$ можемо да представимо са три члана реда у развоју) израз (2) постаје (3)

$$I_\lambda = I_{0\lambda} \left[1 - \frac{k_\lambda l}{2} \right] \quad (3)$$

Величину $I_{0\lambda}$ интерпретирамо као "теоријску" вредност интензитета, а I_λ као измерени интензитет на таласној дужини λ који је нешто мањи због самоапсорпције. Ако сада уврстимо израз за коефицијент апсорпције у израз (3) и извршимо интеграцију по свим таласаним дужинама које припадају спектралној линији, имајући у виду да је $\int_{-\infty}^{+\infty} z(\lambda) d\lambda = 1$, добићемо

$$I = I_0 \left[1 - \frac{e^2 \lambda^2 l}{8 \epsilon_0 m c^2} g_1 f_{12} n \int_{-\infty}^{+\infty} [z^2(\lambda) d\lambda] \right] \quad (4)$$

Величина I представља измерени интензитет спектралне линије, а I_0 интензитет који би се добио да нема самоапсорпције. Дефинисаћемо величину $Z^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} [z^2(\lambda)d\lambda]$. За уобичајене профиле спектралних линија $Z^2 = (C \cdot W)^{-1}$ где W представља полуширину спектралне линије, а C је бездимензиона константа једнака 2π за Лоренцов профил, односно $\sqrt{\frac{2\pi}{\ln(2)}}$ за Гаусов. Обично $z(\lambda)$ није познато, али за слабу самоапсорпцију може се узети експериментална вредност за W , због чега се губи неколико процената у егзактности. Ако располажемо измереним интензитетима за две линије p и q које имају исти доњи ниво, однос њихових интензитета биће

$$\frac{I_p}{I_q} = \frac{I_{0p}}{I_{0q}} \left[\frac{1 - \frac{e^2 \lambda_p^2 l}{8 \varepsilon_0 m c^2} g_p f_p n Z_p^2}{1 - \frac{e^2 \lambda_q^2 l}{8 \varepsilon_0 m c^2} g_q f_q n Z_q^2} \right] \quad (5)$$

У једначини (5) искоришћене су поједностављене ознаке $f_p \equiv f_{12}^p$ и $f_q \equiv f_{12}^q$ односно $g_p = g_1^p$ и $g_q = g_1^q$. За линије из истог мултиплета $\frac{I_{0p}}{I_{0q}} = \frac{A_p g_p \lambda_p}{A_q g_q \lambda_q}$, где су A_p и A_q вероватноће прелазе за линије p и q . На основу једначине (5) могуће је концентрацију доњег нивоа n , заједничког за све прелазе, изразити на следећи начин:

$$n = \frac{Q_{p,q} - 1}{\left(Q_{p,q} \frac{1}{W_q} g_q f_q \lambda_q^2 - \frac{1}{W_p} g_p f_p \lambda_p^2 \right)} \frac{8C \varepsilon_0 m c^2}{e^2 l} \quad (6)$$

Величина $Q_{p,q} = \frac{I_p A_q g_q \lambda_p}{I_q A_p g_p \lambda_q}$ је већ дефинисана на страни 51, а вредности приказане у табели 1. Имајући у виду да су за исти мултиплет таласне дужине посматраних линија блиске, $\lambda_1 \sim \lambda_2 \sim \lambda_3 \dots = \lambda$, једначина (6) може упрошћено да се напише

$$n = \frac{Q_{p,q} - 1}{\left(Q_{p,q} \frac{1}{W_q} g_q f_q - \frac{1}{W_p} g_p f_p \right)} \frac{8C W_0 \varepsilon_0 m c^2}{e^2 l \lambda^2} \quad (7)$$

где су величине W_p и W_q бездимензиони бројеви којима су изражене полуширине линија p и q у пикометрима на следећи начин: $W_i = w_i W_0$ где је $i = \{p, q\}$, а $W_0 = 1 \times 10^{-12}$ m. Постоји $N=6$ независних

Табела 2. Процењене оптичке дебљине

λ (nm)	kl
250.690	0.087
251.432	0.087
251.611	0.26
251.920	0.21
252.411	0.29
252.851	0.37

вредности за количник Q за шест линија Si I датих у табели 1, због чега располажемо са 6 независних вредности за n , концентрацију заједничког доњег нивоа¹. У идеалном случају требало би свих шест вредности да су исте, међутим због експерименталних грешака у мерењу интензитета и нетачности табличних вредности за gf добићемо шест различитих вредности

за n . Лако можемо да израчунамо средњу вредност $\bar{n} = \sum_i \frac{n_i}{N}$ и да

проценимо одговарајућу грешку $\Delta n = \sqrt{\frac{\sum_i (\bar{n} - n_i)^2}{N(N-2)}}$, након што се уклоне

очигледни аутлејери. За податке из табеле 1, и узимајући² да је $C=4$, налазимо да је $\bar{n} = (0.95 \pm 0.83) \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$. На основу овог резултата можемо проценити оптичку дебљину за сваку од линија $k_\lambda \cdot l = \frac{e^2 \lambda^2}{4 \epsilon_0 m c^2} g_1 f_{12} \bar{n} z(\lambda) \cdot l$, видети табелу 2. Очигледно је да износ

самоапсорпције превасходно зависи од производа gf за сваки прелаз. За резонантне линије силицијума приказане у табели 1 оптичка дебљина се креће у интервалу $0.087 < k_\lambda l < 0.38$, што значи да је могуће извршити корекцију облика спектралних линија. Кориговани профил је близак профилу какав би се добио да самоапсорпције нема, односно да је

¹ У принципу за N линија постоји $N!(2(N-2)!)^2$ независних комбинација, међутим ми имамо две групе од три линије мерене на две различите температуре. Претпостављамо, обзиром да су температуре блиске, да је концентрација доњег стања иста на обе температуре.

² Константа C за Воитов профил мања је од 2π (за Лоренцов профил) и већа од $\sqrt{\frac{2\pi}{\ln(2)}}$ (за

Гаусов) и мора да се израчуна независно за конкретан профил.

занемарљива. На основу једначине (3) могуће је израчунати жељену корекцију $I_{0\lambda} = \frac{I_\lambda}{1 - \frac{k_\lambda I}{2}}$ где је I_λ измерена вредност интензитета

спектралне линије на таласној дужини λ , а $I_{0\lambda}$ вредност каква би се добила да самоапсорпције нема.

5. ЛИТЕРАТУРА

- [1] Escarguel, A., Ferhat, B., Lesage, A., & Richou, J., JQSRT, **64**, 353, (2000)
- [2] Hilborn, R., C., Am.J.Phys, **50**, 982,(1982)
- [3] Bukvić, S., Djeniže, S., Srećković, A., A&A, **508**, Issue 1, 491-500 (2009)

ВРЕМЕНСКИ ЗАВИСАН ОПИС АТОМСКИХ И МОЛЕКУЛСКИХ СУДАРНИХ И ФРАГМЕНТАЦИОНИХ ПРОЦЕСА

Н. Симоновић^{1,2}

¹*Институт за физику, Универзитет у Београду*

²*Природно-математички факултет Универзитета у Бањој Луци*

Сажетак. Описан је метод разложеног (еволуционог) оператора, базиран на брзом Фурије трансформу (FFT), као један од начина за нумеричко рачунање еволуције кохерентног стања. Показано је како се овај (временски зависан) метод може користити при испитивању сударних и фрагментационих процеса као и за одређивање спектра. Примена метода је представљена кроз неколико примера из атомске и молекуларне динамике као што су електрон-атом сударни процеси, рачунање вибрационих стања дво и тро-атомских молекула и њихових ширина, као и на симулацији расејања снопа брзих атома на површини кристалне решетке при малим упадним угловима.

Abstract. The split (evolution) operator method, based on the fast Fourier transform (FFT), as a way for numerical calculation of the evolution of a coherent state, is described. It is shown how this (time dependent) method can be used for analysis of collision and fragmentation processes as well as for evaluation of spectra. Application of the method is presented in several examples within the atomic and molecular dynamics, including electron-atom collisions processes, calculation of vibration states of two and three-atomic molecules and their decay widths, as well as for the simulation of scattering of the fast atom beam on a crystal surface under grazing angles.

1. УВОД

Израчунавање временске еволуције кохерентног (нестационарног) стања локализованог у простору (таласног пакета) се све више користи као алтернатива стационарном прилазу при испитивању сударних и фрагментационих процеса. Код временски зависног прилаза избор почетних услова или асимптотске форме таласне функције у многим случајевима није од пресудног значаја, што често поједностављује анализу. С друге стране, временски зависан прилаз се може користити и за

рачунање стационарних стања и својствених енергија. Он је посебно погодан код испитивања тзв. прелазних (распадајућих) стања пошто на једноставан начин (спектралном анализом тзв. аутокорелационе функције) омогућава одређивање њихових ширина односно времена живота. Тачност добијених резултата у принципу није осетљива на избор почетног таласног пакета чија се еволуција израчунава, за разлику од стандарних метода за рачунање спектра (дијагонализација, варијациони метод, итд.) чија тачност може значајно да зависи од избора базиса односно пробне функције. Временски зависан опис се већ дуже време користи при испитивању молекулских процеса, док је његова примена у атомским процесима још недовољно развијена, углавном због сингуларног и дугодометног карактера Кулоновог потенцијала. Прилаз се недавно показао веома погодним за симулирање сударних процеса сложенијих система као што је расејање атомског снопа на површини кристалне решетке.

Овде ће бити описан тзв. метод разложеног оператора (*split operator method*), базиран на тзв. брзом Фурије трансформу (*fast Fourier transform – FFT*), као елегантан и брз начин за рачунање еволуције кохерентног стања. Популарност метода лежи у његовој применљивости, са упоредивом ефикасношћу и тачношћу, на широку класу потенцијала, датих у аналитичкој форми или као скуп нумеричких података. Примена метода ће бити представљена на примерима из молекуларне динамике (рачунање вибрационих стања дво и тро-атомских молекула), затим код електрон-атом сударних процеса и симулацији расејања снопа брзих атома на површини кристалне решетке при малим упадним угловима.

2. НУМЕРИЧКИ МЕТОД

Еволуција квантног система (у тзв. Шредингеровој слици) је задата променом вектора стања (или таласне функције) са временом. Ако је познато стање система ψ у неком почетном тренутку (нпр. у $t = 0$), еволуција је потпуно одређена Шредингеровом једначином

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad (1)$$

где је \hat{H} хамилтонијан система. Еквивалентно, она је одређена познавањем тзв. еволуционог оператора $\hat{U}(t)$

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle. \quad (2)$$

Уколико хамилтонијан не зависи експлицитно од времена постоји формална веза

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}. \quad (3)$$

Ако хамилтонијан, осим тога, има уобичајен облик збира оператора кинетичке и потенцијалне енергије, тј. $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$, ради једноставнијег рачунања деловања $\hat{U}(t)$ на произвољно стање било би погодно, полазећи од (3), изразити еволуциони оператор као производ фактора који у експонентима појединачно садрже операторе \hat{T} и \hat{V} . Међутим, због некомутирања ових оператора следи $\hat{U}(t) \neq \exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{T}t) \exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{V}t)$.

2.1. МЕТОД РАЗЛОЖЕНОГ ОПЕРАТОРА

Разлагање еволуционог оператора се може приближно извршити уколико се изабере довољно мали временски интервал Δt . Ово је погодно код нумеричког рачунања еволуције. Нека је $\psi(0)$ произвољно кохерентно стање посматраног квантног система (таласни пакет) у почетном тренутку. Пропагација (еволуција) таласног пакета се израчунава тако што се време еволуције издели на довољно мале сегменте Δt , а затим се пропагација рачуна корак по корак: $\psi(0) \rightarrow \dots \rightarrow \psi(t) \rightarrow \psi(t + \Delta t) \rightarrow \dots$, при чему је

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = \hat{U}(\Delta t)|\psi(t)\rangle. \quad (4)$$

Показује се да за мали временски интервал Δt важи следећи развој [1]

$$\hat{U}(\Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t} = e^{-\frac{i}{\hbar^2}\hat{T}\Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar^2}\hat{T}\Delta t} + O[(\Delta t)^3]. \quad (5)$$

Чланови вишег реда по Δt укључени у $O[(\Delta t)^3]$ садрже вишеструке комутаторе оператора \hat{T} и \hat{V} . Уколико се изабере веома мала вредност за Δt ови чланови у изразу (5) се могу занемарити и он тада даје приближно разлагање еволуционог оператора. Нумеричко израчунавање еволуције кохерентног стања, користећи овај апроксимативни израз у једначини (4), назива се метод разложеног оператора (*split-operator method*) [1].

Метод је посебно погодан у случају када оператор кинетичке енергије има облик $\hat{T} = \sum_j \hat{p}_j^2 / 2m$, нпр. када \hat{p}_j представљају компоненте оператора импулса у картезијанском (Декартовом) координатном систему. У том случају се деловање оператора \hat{T} и \hat{V} на таласну функцију у импулсној односно координатној репрезентацији своди на обично множење. Тада се узастопно деловање експоненцијалних фактора у изразу (5) једноставно рачуна преласком из координатне у импулсну репрезентацију и обратно користећи дискретну Фуријеову трансформацију и FFT алгоритам (брзи Фурије трансформ) [2]. При нумеричком рачунању, таласна функција у координатној и импулсној репрезентацији је представљена одговарајућим скуповима вредности у дискретизованим

доменима (мрежама) у конфигурационом односно импулсном простору. Ако је координата x_j у оквиру координатне мреже ограничена на интервал дужине L_j који је подељен на N_j сегмената, онда је одговарајућа компонента импулса у импулсној мрежи ограничена на интервал $-\pi/L_j < p_j < \pi/L_j$ који такође има N_j сегмената. Према томе, величине одговарајућих сегмената су $\Delta x_j = L_j/N_j$ и $\Delta p_j = 2\pi/L_j$. Напоменимо да при коришћењу FFT алгоритма број сегмената било ког интервала мора бити 2^n (n је природан број).

У случају квантних система код којих везана стања нису једина могућа таласни пакет после неког времена може да стигне до границе нумеричког домена. Метод разложеног оператора базиран на FFT алгоритму има особину да делови пакета који достижу границу даље настављају пропацију са супротне границе домена. То значи да су у оквиру самог метода имплицитно уведени периодични услови $\psi(\dots, x_j + L_j, \dots; t) = \psi(\dots, x_j, \dots; t)$. Ова особина је погодна уколико се метод користи за рачунање простирања таласног пакета у периодичном потенцијалу, као што је нпр. потенцијал кристалне решетке. Међутим, да би се овај ефекат елиминисао када проблем не захтева периодичне услове, потенцијалу у близини граница домена мора бити додат један чисто имагинарни члан који делује као апсорбер и назива се апсорбујући потенцијал.

Коначно, уколико потенцијал V има негативни (атрактивни) сингуларитет, метод мора бити прилагођен да би се обезбедила коначност и непрекидност таласне функције у целом домену. Ово се може постићи фиксирајући вештачки вредност таласне функције $\psi = 0$ у тој тачки. Даље, ако се сингуларитет налази на некој од граница домена, због непрекидности таласне функције домен треба проширити симетрично, а таласну функцију антисиметрично, изван те границе.

2.2. АУТОКОРЕЛАЦИОНА ФУНКЦИЈА И ЕНЕРГИЈСКИ СПЕКТАР

Аутокорелациона функција је дефинисана као

$$c(t) = \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{U}(t) | \psi(0) \rangle. \quad (6)$$

Развијајући $\psi(t)$ преко својствених стања Хамилтонијана $|n\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle, \quad (7)$$

где су $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ и $a_n = \langle n | \psi(0) \rangle$, следи

$$c(t) = \sum_n |a_n|^2 e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \quad (8)$$

Аутокорелациона функција $c(t)$ садржи пуну информацију о енергијском спектру система, која се може издвојити користећи Фурије трансформ

$$F(E) = \text{FT}[c(t)] \equiv \int c(t) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} dt. \quad (9)$$

Својствене енергије (чисто дискретног спектра) се јављају као полови од $\text{FT}[c(t)]$

$$F(E) = \sum_n |a_n|^2 \int e^{-\frac{i}{\hbar}(E-E_n)t} dt = 2\pi\hbar \sum_n |a_n|^2 \delta(E - E_n). \quad (10)$$

Пошто Фурије трансформ може бити и комплексна функција, често се користи његов квадрат модула $I(E) = |F(E)|^2$ (тзв. “*power spectrum*”).

У случају прелазних (распадајућих или резонантних) стања својствене енергије су комплексне величине тако да аутокорелациона функција није чисто осцилаторна него пригушена осцилаторна функција. Ако је $|\psi_{\text{res}}\rangle$ неко прелазно (резонантно) стање у почетном тренутку, а $E_{\text{res}} = E_0 - i\Gamma/2$ одговарајућа комплексна својствена енергија ($\hat{H}|\psi_{\text{res}}\rangle = E_{\text{res}}|\psi_{\text{res}}\rangle$), онда је еволуција овог стања описна изразом

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |\psi_{\text{res}}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_{\text{res}}t} |\psi_{\text{res}}\rangle = e^{-\frac{1}{2\hbar}\Gamma t} e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} |\psi_{\text{res}}\rangle, \quad (11)$$

тако да је одговарајућа аутокорелациона функција $c(t) = \langle \psi_{\text{res}} | \psi(t) \rangle = e^{-\frac{1}{2\hbar}\Gamma t} e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}$. Очигледно, у питању је осцилаторна функција фреквенције E_0/\hbar са коефицијентом пригушења $\Gamma/2\hbar$. Фурије трансформ овог израза је $F(E) = \hbar[\Gamma/2 + i(E - E_0)]^{-1}$, а одговарајући “*power spectrum*”

$$I(E) = |F(E)|^2 = \frac{\hbar^2}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2/4}. \quad (12)$$

Последњи израз представља Лоренцов профил (тзв. лоренцијан) ширине Γ са центром (положајем) у E_0 и описује “резонанцу” у енергијском спектру која одговара посматраном прелазном стању.

2.3. ПРИМЕРИ

2.3.1. Линеарни хармонијски осцилатор (ЛХО)

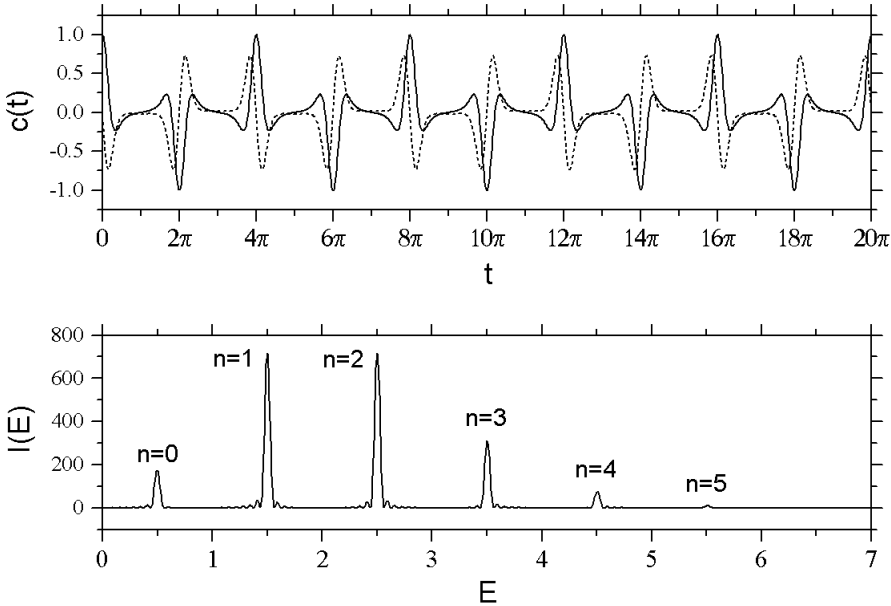
Хамилтонијан линеарног хармонијског осцилатора гласи

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (13)$$

Аутокорелациона функција осцилатора са параметрима $m = 1$, $\omega = 1$, добијена користећи почетни таласни пакет у облику гаусијана

$$\psi_0(x) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha(x-x_0)^2} \quad (14)$$

са параметрима $\alpha = 1/2$, $x_0 = 2$, као и одговарајући енергијски (*power*) спектар приказани су на слици 1.



Слика 1. Аутокорелациона функција (горе, реални и имагинарни део су представљени пуном односно испрекиданом линијом) и одговарајући енергијски (*power*) спектар (доле) ЛХО-а за $m = 1$ и $\omega = 1$. Почетни таласни пакет је гаусијан (14) са параметрима $\alpha = 1/2$, $x_0 = 2$.

Видимо да је добијени енергијски спектар у складу са формулом за енергијске нивое ЛХО-а, $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Интензитети пикова који одговарају различитим енергијским нивоима зависе од избора почетног таласног пакета, односно, као што се види из израза (10), од коефицијената a_n у развоју (7). Напоменимо да су коначне ширине пикова у овом случају (дакле, за везана стања) искључиво последица коначности временског интервала у коме је аутокорелациона функција нумерички рачуната. Што је време рачунања дуже, пикови ће имати мање ширине.

2.3.2. ЛХО спрегнут са параболичном баријером

Прелазна (распадајућа) стања се обично јављају код система са два или више степени слободе од којих бар један није везујући. Особине ових

стања су одређене облашћу око тзв. седласте тачке потенцијалне површи која је окарактерисана скупом фреквенција нормалних мода. Ове фреквенције су реалне за стабилне (везујуће) правце, а имагинарне за нестабилне (распадајуће) правце. Имагинарна фреквенција седласте тачке даје меру експоненцијалног одступања трајекторије (тзв. Љапуновљев експонент) са почетним условима у близини седла у одговарајућем нестабилном правцу. Са квантномеханичког становишта такви потенцијали не подржавају везана стања и очекује се да су времена живота постојећих прелазних стања у корелацији са (имагинарним) фреквенцијама нестабилних мода.

Пример таквог система са два степена слободе је ЛХО спрегнут са параболичном баријером описан хамилтонијаном

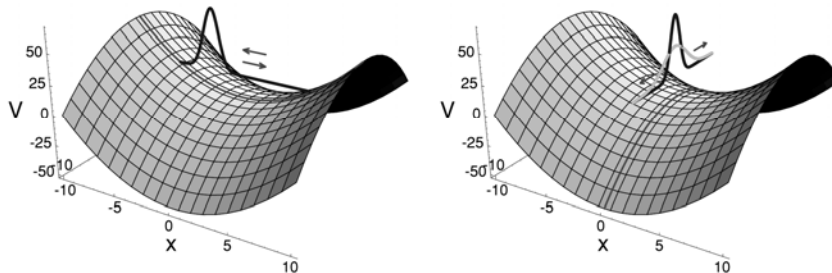
$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m(\omega^2 x^2 - \lambda^2 y^2). \quad (15)$$

У овом случају правац x представља стабилни (везујући) степен слободе док је правац y нестабилни (распадајући) степен слободе (слика 2). Систем се формално може третирати као 2Д осцилатор са једном реалном (ω) и једном имагинарном ($-i\lambda$) фреквенцијом. Пошто је хамилтонијан (15) сепарабилан, његове својствене енергије ће бити збир енергија одговарајућа два 1Д осцилатора, тј.

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - i\hbar\lambda\left(n' + \frac{1}{2}\right), \quad n, n' = 0, 1, 2, \dots \quad (16)$$

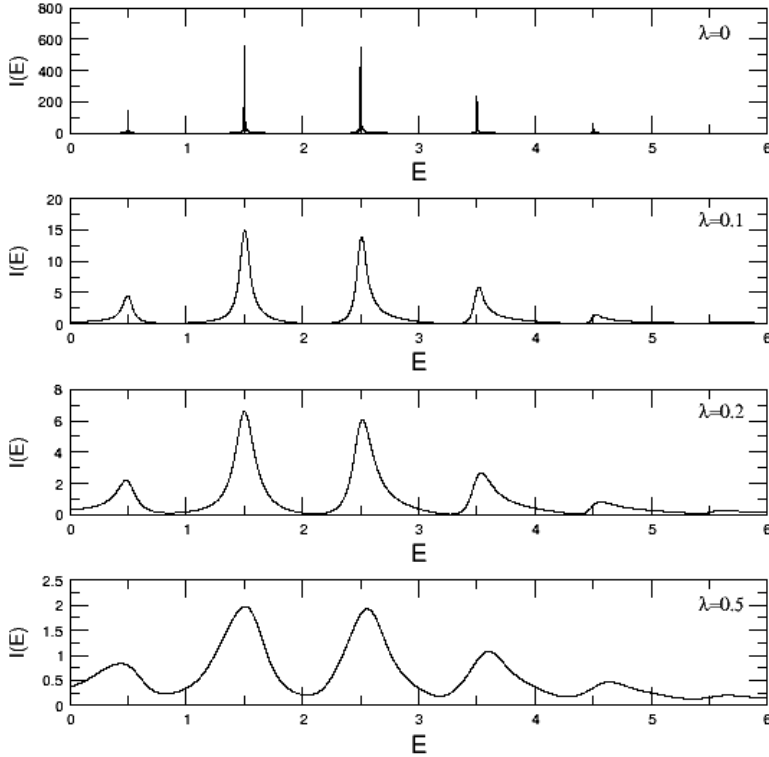
Као што се види из (16), својствене енергије су комплексне што је и очекивано за прелазна стања.

На слици 3. је приказан енергијски (*power*) спектар овог система за $\omega = 1$, $m = 1$ и различите вредности λ добијен методом пропагације таласног пакета. Резонанце (пикови коначне ширине) у спектру одговарају прелазним стањима (осим у специјалном случају $\lambda = 0$ који се своди на 1Д ЛХО). Фитовањем резонантних профила на лоренцијан (12) из спектра се



Слика 2. Стабилни (лево) и нестабилни (десно) правац на површи потенцијалне енергије ЛХО-а спрегнутог са параболичном баријером. На слици је скицирана и динамика таласног пакета дуж поменутих правца (осциловање дуж x и расплињавање дуж y правца).

извлачи информација о положајима (енергијама, E_n) и ширинама (Γ) прелазних стања. Фит даје: $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ и $\Gamma = \hbar\lambda$, тј. $E_{\text{res}} \equiv E_n - i\Gamma/2 = \hbar\omega(n + 1/2) - i\hbar\lambda/2$, што је у складу са формулом (16) за $n' = 0$.



Слика 3. Енергијски (power) спектар система описаног хамилтонијаном (15) за $\omega = 1$, $m = 1$ и различите вредности λ .

3. МОЛЕКУЛСКИ СИСТЕМИ

3.1 ВИБРАЦИОНО КРЕТАЊЕ ДВОАТОМСКОГ МОЛЕКУЛА

Морзеова крива

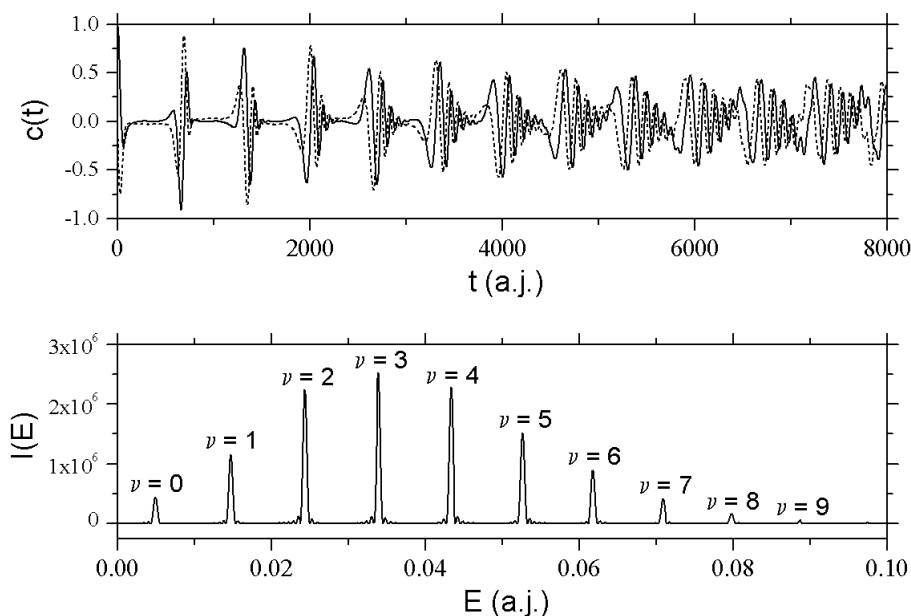
$$V(R) = D_e [1 - e^{-\beta(R-R_e)}]^2, \quad (17)$$

где је R међунуклеарно растојање, представља добру апроксимацију за ефективну потенцијалну енергију језгара двоатомског молекула (АВ). Овај модел је супериоран у односу на модел хармонијског осцилатора по томе што укључује анхармоничност и могућност дисоцијације молекула. D_e је

енергија досоцијације док је $\beta = \omega (\mu/2D_e)^{1/2}$, где су $\mathcal{O} = m_A m_B / (m_A + m_B)$ и ω_e редукована маса односно вибрациона фреквенција молекула. Временски независна Шредингерова једначина за Морзев осцилатор је егзактно решива и даје вибрационе енергије

$$E_\nu = \hbar \omega_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - \hbar \omega_e \chi \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (18)$$

где је $\chi = \hbar \omega_e / 4D_e$, а $\nu = 0, 1, 2, \dots, \nu_{\max}$ вибрациони квантни број. За разлику од хармонијског осцилатора Морзев потенцијал има коначан број енергијских нивоа ($\nu_{\max} \approx 2D_e/\omega_e$).



Слика 4. Аутокорелациона функција (горе, реални и имагинарни део су приказани пуном односно испрекиданом линијом) и одговарајући спектар (доле) молекула CO у моделу Морзевовог осцилатора.

Размотримо као пример молекул угљен монооксида (CO) у основном електронском стању ($^1\Sigma^+$). Параметри Морзеве криве за овај молекул су $D_e = 11.11 \text{ eV} = 0.4083 \text{ a.j.}$, $\beta = 1.228 \text{ a.j.}$, $R_e = 2.132 a_0$, док је редукована маса $\mu = m_C m_O / (m_C + m_O) \approx 6.857 \text{ a.j.m.} = 12589.7 \text{ a.j.}$ (где је a.j. = атомска јединица, нпр. a_0 (Боров радијус) = a.j. за дужину; a.j.m. = атомска јединица масе = $m_C/12$). Одавде су $\omega_e = 0.00989 \text{ a.j.}$ и $\chi = 0.00606 \text{ a.j.}$ На слици 4. су приказани аутокорелациона функција и одговарајући енергијски (вибрациони) спектар овог система, добијени методом пропагације таласног пакета. За почетни таласни пакет је изабран гаусијан са параметрима $\alpha = 10 \text{ a.j.}$, $R_0 = 0.5 a_0$. Пикови у “power” спектру су у складу са вредностима за вибрационе нивое које даје егзактна формула. Напоменимо да ови вибрациони нивои одговарају везаним стањима тако да

су коначне ширине пикова (као и у случају ЛХО-а) искључиво последица коначности временског интервала у коме је аутокорељациона функција нумерички рачуната.

3.2. СИМЕТРИЧНИ ТРОАТОМСКИ МОЛЕКУЛИ – ФОТОДИСОЦИЈАЦИЈА

Вибрациони спектри који се односе на дисоцијативна електронска стања молекула показују резонантну структуру која одговара прелазним стањима повезаним са облашћу око седласте тачке потенцијалне површи. Један од најједноставнијих примера је фотодисоцијација колинеарног симетричног троатомског молекула: $ABA+h\nu \rightarrow (ABA)^* \rightarrow AB+A$, где побуђени комплекс $(ABA)^*$ у оквиру колинеарног модела има један степен слободе који је везујући и један који то није (тзв. реакциона координата) [3]. Фрагментација троатомских молекула се обично анализира користећи колинеарни модел пошто је тзв. савијајућа мода (осцилације око равнотежне колинеарне конфигурације) у већини случајева стабилна па се реакције овог типа одвијају дуж радијалних праваца. Ако напишемо $R_{AB} = R_1$ и $R_{BA} = R_2$, хамилтонијан колинеарног АВА молекула гласи

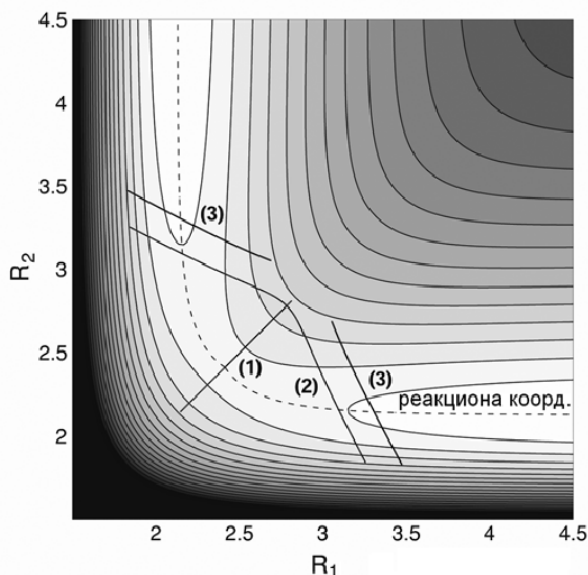
$$H = \frac{p_1^2 + p_2^2}{2\mu} - \frac{p_1 p_2}{m_B} + V(R_1, R_2), \quad (19)$$

где је $\mu = m_A m_B / (m_A + m_B)$. Дисоцијативна електронска стања таквог молекула се могу добро описати потенцијалима тзв. LEPS типа [4]. Користећи временски зависан прилаз особине прелазних стања се могу објаснити динамиком привременог заробљавања које се дешава у близини седласте тачке потенцијалне површи [5].

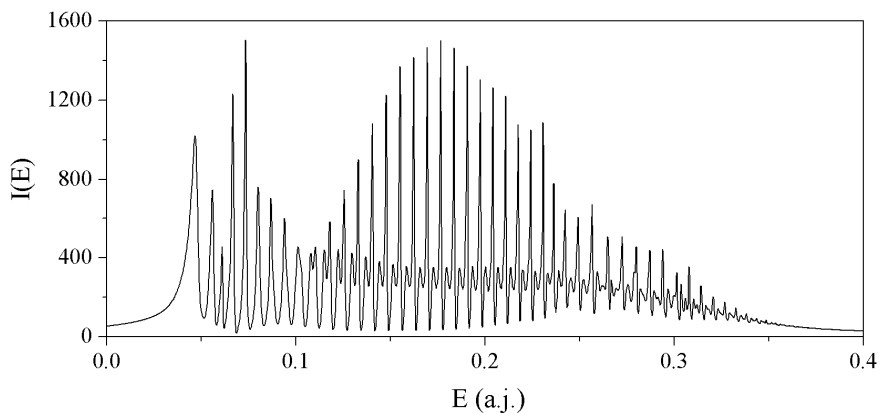
LEPS потенцијал (тзв. горња потенцијална површ) за случај молекула угљен диоксида (CO_2 , параметери су дати у реф. [6]) је приказан на слици 5. Одговарајући вибрациони спектар добијен методом пропагације таласног пакета је дат на слици 6. Као што је и очекивано, пошто су вибрациона стања која одговарају горњој површи потенцијалне енергије дисоцијативног карактера (прелазна), овим стањима одговарају резонанце у енергијском спектру.

Класични антипод прелазних стања је линија (трајекторија) која повезује две еквипотенцијалне тачке (дуж гребена потенцијала) и коју пресецају све реактивне трајекторије исте енергије [7]. У режиму ниских енергија, где је динамичко спрезање мало, постоји само једна (нестабилна) периодична орбита (ПО) локализована дуж гребена потенцијалне баријере и тада је класична динамика регуларна (није хаотична). Показује се да у том случају важи једноставна релација између резонантне ширине (Γ) и Љапуновљевог експонента орбите (λ): $\Gamma = \hbar\lambda$ [8]. Ова релација, међутим, не важи када је класична динамика хаотична (тада при датој енергији система постоји више (бесконачно) ПО-а).

Тако нпр. у процесима типа: $(ABA)^* \rightarrow AB+A$, једина ПО троатом-

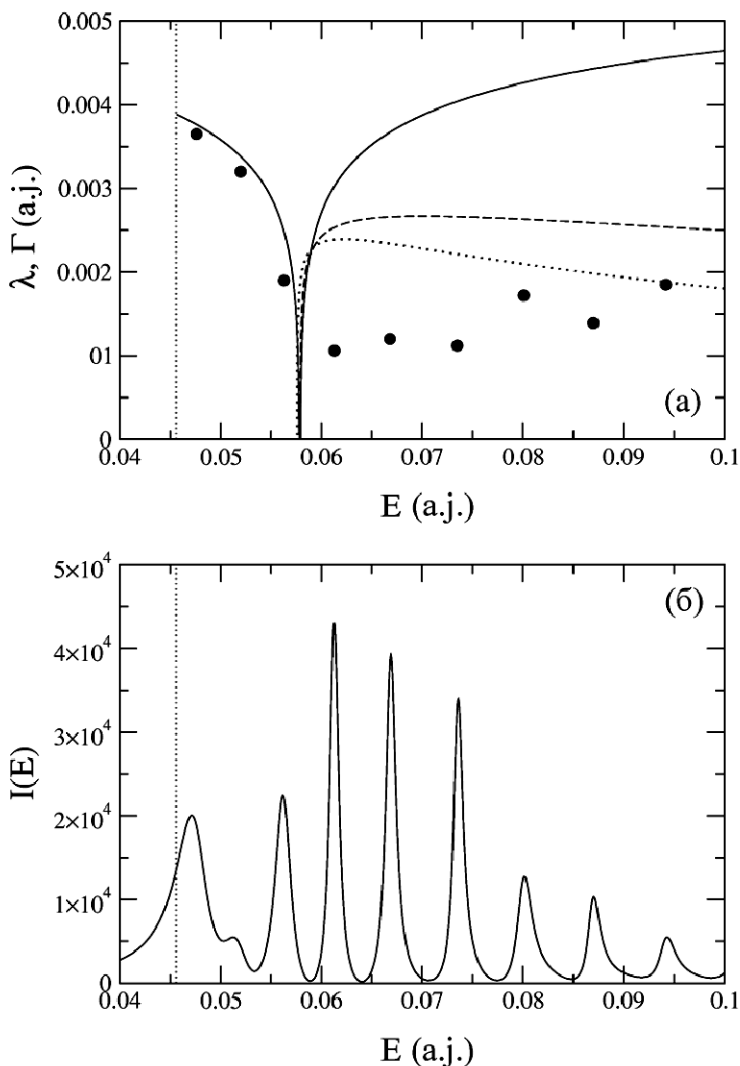


Слика 5. Дисоцијативна (горња) површ потенцијалне енергије $V(R_1, R_2)$ (LEPS типа) за колинеарни CO_2 молекул и фундаменталне периодичне орбите (ПО-е) при $E = 0.1$ а.ј.: (1) симетрично истежућа, (2) асиметрично истежућа и (3) 'ван-дијагоналне' ПО-е. Светлије области одговарају нижим вредностима потенцијалне енергије.



Слика 6. Вибрациони спектар који одговара дисоцијативном електронском стању CO_2 молекула задатом потенцијаном површи са слике 5. добијен методом пропације таласног пакета.

ског комплекса (АВА)* на нижим енергијама је симетрично истежућа ПО [9]. У случају CO_2 молекула ово се дешава на енергијама изнад седласте тачке потенцијалне баријере, $E = 1.24$ eV, али мањим од $E = 1.57$ eV. Најниже три резонанце падају у овај интервал енергија [9,10] и њихове ширине се добро слажу са одговарајућим вредностима Љапуновљевих експонената (слика 7). Око енергије $E = 1.57$ eV се дешавају две бифуркације које доводе до појаве три нове ПО-е кратког периода (две



Слика 7. (а) Љапуновљеви експоненти (λ) за фундаменталне периодичне орбите (ПО-е) CO_2 молекула као функције енергије – симетрично истежућа, асиметрично истежућа и 'ван-дијагоналне' ПО-е (пуна/испрекидана/тачкаста линија). (б) Део спектра добијен методом пропације таласног пакета. Почетни таласни пакет је изабран у облику као у реф. [9] са параметрима $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.2$ а.ј., $R_0 = 2.65 a_0$. Положаји и ширине резонанци су добијене фитовањем на Лоренцијан. Резонанце су ради поређења приказане на горњој слици (кружићи) заједно са Љапуновљевим експонентима. Вертикална тачкаста линија означава седласту тачку енергије потенцијалне баријере.

“ван-дијагоналне” ПО-е и тзв. асиметрично истежућа ПО), док симетрично истежућа ПО постаје стабилна у веома уском енергијском прозору [10]. Изнад ове енергије се појављује бесконачно много ПО-а тако да се ширине резонанци у овој области не могу повезати само са једном од њих.

4. АТОМСКИ СИСТЕМИ

4.1. МЕТОД РАЗЛОЖЕНОГ ОПЕРАТОРА И КУЛОНОВ ПОТЕНЦИЈАЛ

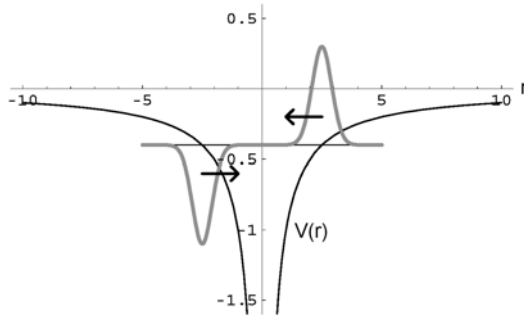
Пошто Кулонов потенцијал који описује интеракцију електрона са атомским језгром $V(r) = -Ze^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ има атрактивни сингуларитет у $r = 0$, да би се применио метод разложеног оператора за рачунање пропагације таласног пакета неопходно је, као што је поменуто на крају одељка 2.1., искључити сингуларну тачку из нумеричког рачуна фиксирајући вредност таласне функције у тој тачки: $\psi(0,t) = 0$ [11]. Поред тога, пошто је потенцијал коначан кад $r \rightarrow \infty$, таласни пакет (или његови делови) може да достигне границе изабраног нумеричког домена, па је на границама потребно додати апсорбујући потенцијал. Уколико се рачунање врши у Декартовом координатном систему, метод разложеног оператора се може (уз наведене додатке) директно применити пошто Лапласов оператор, који фигурише у оператору кинетичке енергије електрона $\hat{T} = -(\hbar^2/2m_e)\Delta$, тада има облик $\Delta = \sum_j \partial^2/\partial x_j^2$. С друге стране, ако се користе сферне координате (што је чешћи случај), Лапласов оператор, односно оператор кинетичке енергије, има облик који не дозвољава примену FFT алгоритма при рачунању дејства разложеног еволуционог оператора на таласну функцију, тако да се то мора реализовати на другачији начин [12]. Уколико се, међутим, проблем може свести на решавање радијалне компоненте кретања (нпр. у случају сферно-симетричних система), метод на бази FFT алгоритма је и даље применљив. У овом случају је, осим горе наведеног, још потребно проширити потенцијал $V(r)$ симетрично, а почетну таласну (радијалну) функцију $\psi(r,0)$ антисиметрично, на негативне вредности од r (слика 8) [11].

Размотрићемо као пример атом са једним електроном ван спољашњих сила. Систем је сферно-симетричан и познато је да се у том случају временски независна Шредингерова једначина разлаже на угаону и на радијалну једначину. Решења угаоне једначине су стандардна (сферни хармоници) док решења радијалне једначине (радијалне функције $R(r)$) зависе од облика (сферно-симетричног) потенцијала $V(r)$. Користећи уобичајену смену $u(r) = rR(r)$ радијална једначина се своди на облик

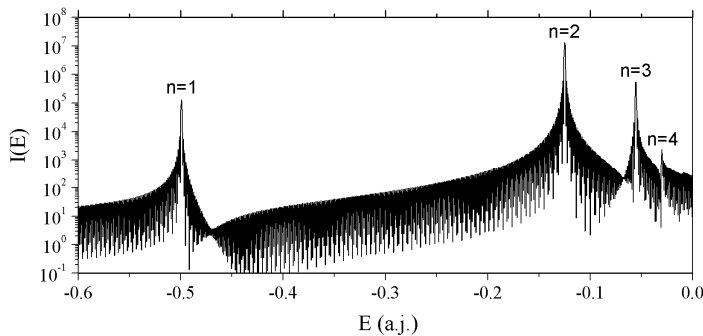
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} + V(r) \right] u(r) = E u(r). \quad (20)$$

Једначина се формално може третирати као временски независна Шредингерова једначина која описује 1Д кретање електрона у ефективном потенцијалу $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \hbar^2 l(l+1)/2m_e r^2$. Према томе, ако би се рачунала еволуција неког кохерентног стања у овом потенцијалу, својствене

енергије овог система би се могле добити из одговарајуће аутокорељационе функције. Знајући унапред да су енергијски нивои у случају Кулоновог потенцијала дегенерисани, тј. не зависе од орбиталног квантног броја l , довољно је посматрати случај $l = 0$.



Слика 8. Кулонов потенцијал $V(r)$ проширен симетрично (црне линије) и почетни таласни пакет проширен антисиметрично (сиве линије) на негативне вредности од r . Радијални проблем у овако проширеном домену је еквивалентан 1Д моделу атома водоника.



Слика 9. Енергијски (power) спектар 1Д водониковог атома добијен пропацијом почетног таласног пакета (21) са параметрима $r_0 = 3 a_0$, $\alpha = 0.01$ а.ј. Положаји пикова су у складу са формулом за енергијске нивое атома водоника $E_n = -1/(2n^2)$ (у атомским јединицама).

На слици 9 је приказан “power” спектар добијен пропацијом почетног таласног пакета изабраног у облику антисиметризованог гаусијана

$$\psi_0(r) \sim e^{-\alpha(r-r_0)^2} - e^{-\alpha(r+r_0)^2} \quad (21)$$

са параметрима $r_0 = 3 a_0$ и $\alpha = 0.01$ а.ј. у Кулоновом потенцијалу проширеном симетрично на област негативних вредности од r , тј. у потенцијалу $V(r) = -Ze^2/(4\pi\epsilon_0|r|)$, за $Z = 1$ (1Д атом водоника, слика 8). Коришћен је нумерички домен $-50 a_0 < r < 50 a_0$ са $N = 2^{11}$ сегмената и апсорбујући потенцијал $V_{\text{abs}} = -i0.03(|r| - 35a_0)^2$ за $|r| > 35a_0$. Пропагација је

рачуната са кораком $\Delta t = 0.005$ а.ј. у временском интервалу од 5000 а.ј. Пикови у спектру одговарају енергијским нивоима за различите вредности главног квантног броја n (интензитет је дат у логаритамској скали због диспропорције у амплитуди пикова). Може се видети да се положаји пикова добро слажу са формулом за енергијске нивое атома водоника $E_n = -1/(2n^2)$ (у атомским јединицама).

4.2. АТОМСКИ СИСТЕМИ У БЛИЗИНИ ПРАГА ЗА ДВОСТРУКУ ЈОНИЗАЦИЈУ

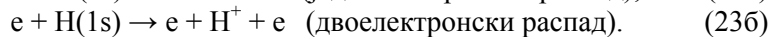
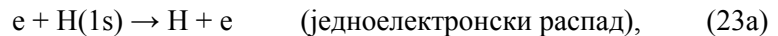
Код атома и јона, при енергијама у близини прага за двоструку јонизацију, два спољашња електрона (обележимо их са 1 и 2) теже због угаоних корелација да заузму колинеарну конфигурацију ($\theta_{12} = \pi$). Тада је $r_{12} \approx r_1 + r_2$, а на спољашње електроне се може применити апроксимација s-таласа (индивидуални угаони моменти електрона су једнаки нули). Према томе, динамика оваквог атомског система је приближно описана са два радијална степена слободе (r_1 и r_2). Ако је Z наелектрисање језгра (или атомског остатка) хамилтонијан система гласи

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_e} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_1 + r_2} \right). \quad (22)$$

Овакав колинеарни модел је добра апроксимација за опис атомских система у поменутој енергијској области, како изнад тако и испод прага за двоструку јонизацију. Према томе, модел се може применити код испитивања:

- 1) двоелектронских фрагментационих процеса (типа $e + A \rightarrow e + A^+ + e$) у близини прага;
- 2) високо двоструко-побуђених стања хелијуму сличних атома.

Као пример размотрићемо судар електрона са атомом водоника (e-H судар). Код ових судара (при енергијама изнад прага за двоструку јонизацију H⁻) могућа су два типа фрагментационих процеса:

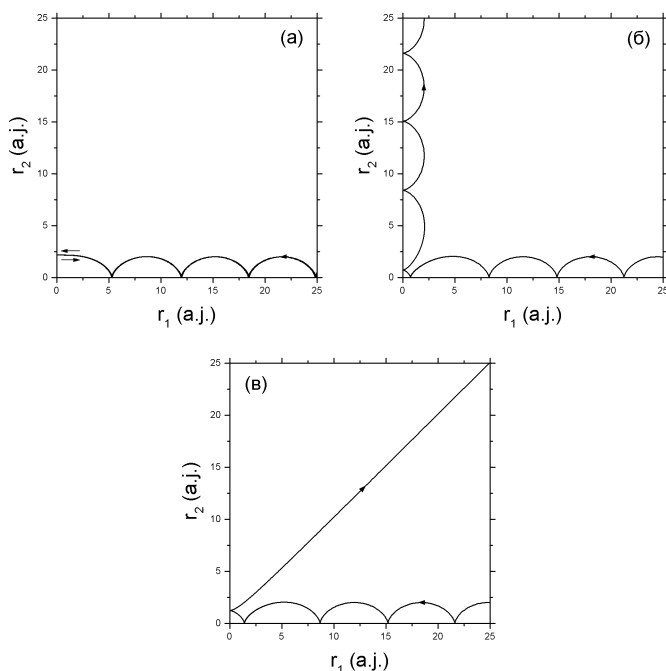


Пре него што пређемо на симулацију ових процеса користећи пропагацију таласног пакета, размотрићемо их прво примењујући класичну динамику.

4.2.1. Класични третман

Нумеричком интеграцијом одговарајућих класичних једначина кретања (нпр. Хамилтонових једначина за Хамилтонову функцију $H(p_1, p_2, r_1, r_2)$ типа (22)) добијају се дво-електронске трајекторије чији облик зависи

од задatih почетnih услова. На слици 10 су приказана три основна типа трајекторија које се добијају при малим позитивним енергијама система: (а) расејање упадног електрона на атому, (б) измена упадног и атомског електрона и (в) двоелектронски распад (јонизација атома упадним електро-



Слика 10. Три типа класичних трајекторија (процеса) приликом судара електрона са атомом водоника (у оквиру колинеарног модела) на малим позитивним енергијама: (а) расејање упадног електрона на атому, (б) измена упадног и атомског електрона и (в) двоелектронски распад. Упадни електрон полази према језгру са неког изабраног растојања, док други (атомски) електрон са њим чини везан систем вршећи осцилаторно кретање са његове супротне стране. Трајекторије на слици су добијене за укупну енергију $E_{\text{tot}} = 0.01$ а.ј. (енергију система), почетну енергију атомског електрона $E_2 = -0.5$ а.ј. (тада је почетна енергија упадног електрона $E_1 \approx 0.51$ а.ј.) и почетне положаје упадног односно атомског електрона: (а) $r_1 = 50.3$ а.ј., (б) $r_1 = 46.75$ а.ј., (в) $r_1 = 47.133$ а.ј. и $r_2 = 0$

ном). Једноелектронски распад укључује класичне случајеве (а) и (б). У сва три случаја упадни електрон креће према језгру са неког растојања које је довољно велико да је његова интеракција са језгром и другим електроном занемарљива, док се други електрон налази у близини језгра са супротне стране чинећи везан систем (линеарни Н атом). За почетну енергију овог система изабрана је управо енергија основног стања атома водоника, $E_2 = -0.5$ а.ј. Као што се види са слике 10, атомски електрон осцилује између језгра (где је $r_2 = 0$) и повратне тачке која се, кад је упадни електрон веома удаљен, налази на растојању од два Борова радијуса од језгра ($r_2 = 2a_0$). Приказане трајекторије су добијене за енергију система $E_{\text{tot}} = 0.01$ а.ј. (почетна енергија упадног електрона је према томе $E_1 \approx 0.51$ а.ј.).

Двоелектронски распад се дешава у малом интервалу почетних вредности који опада са E_{tot} . Наиме, за сваку (ма како малу) вредност $E_{\text{tot}} > 0$, трајекторија која сигурно доводи до двоелектронског распада је она код које се електрони у асимптотској области симетрично разилазе од језгра ($r_1 = r_2$, $p_1 = p_2$, $E_1 = E_2 = E_{\text{tot}}/2$) – тзв. водећа трајекторија. Таква је управо трајекторија приказана на слици 10(в). Међутим, и друге трајекторије које мање или више одступају од водеће могу довести до двоелектронског распада уколико за њих у асимптотској области важи $E_1 > 0$ и $E_2 > 0$. Очигледно је да се интервал почетних вредности који одговарају овим трајекторијама смањује уколико E_{tot} опада. Према томе, и вероватноћа (пресек) за дво-електронски распад при малим енергијама система је мала(и) и опада са овом енергијом. Ово је основна идеја тзв. Ванијеове теорије, која за двоелектронски распад у близини прага даје зависност пресека од енергије у облику $\sigma \sim E_{\text{tot}}^\kappa$ (тзв. закон прага) [13]. У случају процеса (23б) теорија даје $\kappa = 1.127$ што је и експериментално потврђено. Ванијеова теорија је уопштена на случај произвољног трочестичног кулонског система [14] као и на друге вишечестичне системе.

4.2.2. Квантномеханички третман

Полазећи од хамилтонијана (22) Шредингерова једначина за колинеарни двоелектронски систем има облик

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_e r_1^2} \frac{\partial}{\partial r_1} \left(r_1^2 \frac{\partial \psi}{\partial r_1} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_e r_2^2} \frac{\partial}{\partial r_2} \left(r_2^2 \frac{\partial \psi}{\partial r_2} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_1 + r_2} \right) \psi. \quad (24)$$

Користећи смену $\psi(r_1, r_2; t) = \Phi(r_1, r_2; t)/r_1 r_2$, једначина се трансформише

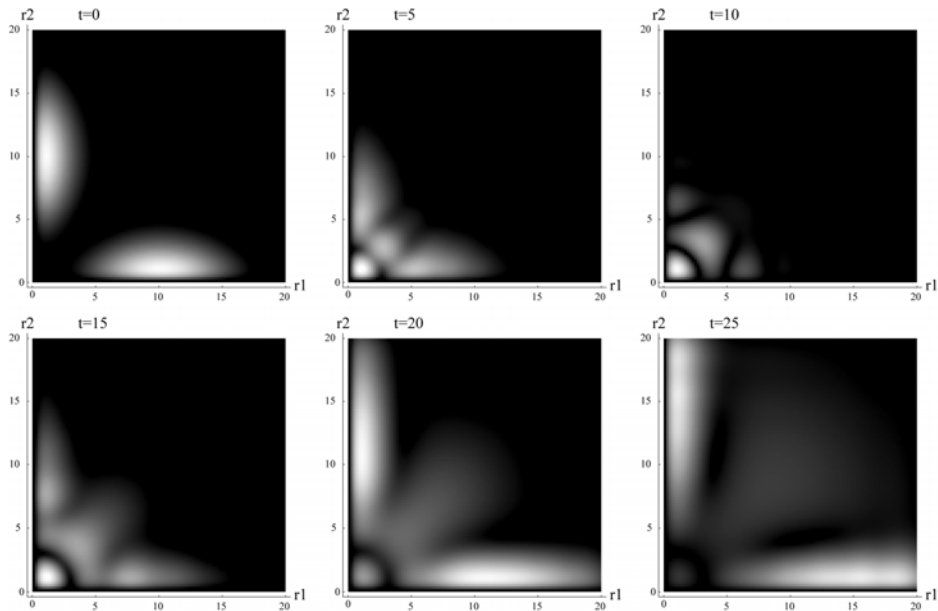
$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r_2^2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_1 + r_2} \right) \Phi \dots\dots (25)$$

У последњој једначини оператор кинетичке енергије има облик $\hat{T} = -\hbar^2 / 2m_e \sum_j \partial^2 / \partial r_j^2$ који је погодан за примену метода разложеног оператора базираног на FFT алгоритму. Према томе, (разложени) еволуциони оператор (5) ће у овом проблему деловати на функцију Φ .

На слици 11 је приказана динамика двоелектронског таласног пакета којом се симулирају процеси (23). Упадни електрон креће са растојања r_0 од атома водоника у основном стању

$$\varphi_2(r_2) = r_2 R_{10}(r_2) = 2a_0^{-3/2} r_2 e^{-r_2/a_0}. \quad (26)$$

Почетна таласна функција упадног електрона је представљена равним таласом таласног броја k_0 , модулисаног гаусијаном ширине b са центром у



Слика 11. Еволуција густине $|\Phi(r_1, r_2; t)|^2$ за симетризовано почетно стање (28) у интервалу $0 < t < 20$ а.ј.: Упадни електрон полази са средњом вредношћу импулса $k_0 = 1$ а.ј. у гаусијанском таласном пакету ширине $b = 2.5 a_0$ са центром на растојању $r_0 = 10 a_0$ од водениковог атома у основном стању. Вредност $k_0 = 1$ а.ј. обезбеђује да средња тотална енергија буде у близини прага за двоструку јонизацију.

r_0 , тј.

$$\varphi_1(r_1) = (2\pi b^2)^{1/4} \exp\left[-(r_1 - r_0)^2 / 4b^2\right] e^{-ik_0 r_1}. \quad (27)$$

Почетна двоелектронска (просторна) таласна функција је конструисана као симетризовани производ једноелектронских функција (синглетна симетрија)

$$\Phi(r_1, r_2; 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_1(r_1)\varphi_2(r_2) + \varphi_1(r_2)\varphi_2(r_1)]. \quad (28)$$

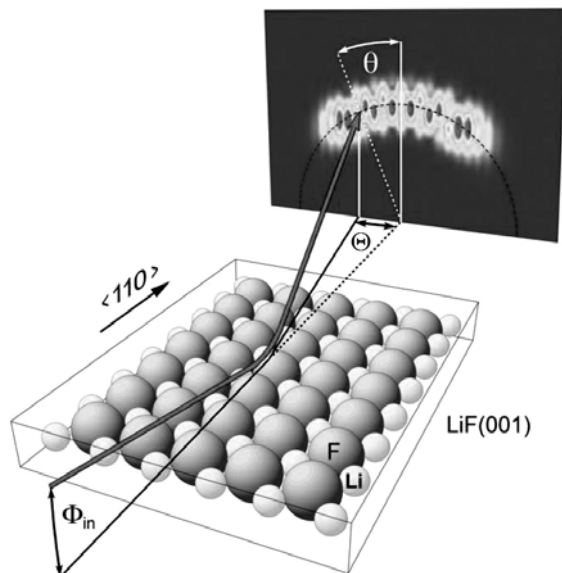
Технички, рачунање пропагације таласног пакета се мора извести у проширеном нумеричком домену [11]. Тада почетна таласна функција $\Phi(x_1, x_2; 0)$ има облик аналоган изразу (28) где су $\varphi_2(x_j) = 2a_0^{-3/2} x_j e^{-|x_j|/a_0}$, $\varphi_1(x_j) = \varphi_+(x_j) - \varphi_-(x_j)$ и $\varphi_{\pm}(x_j) = \exp\left[-(x_j \mp r_0)^2 / 4b^2\right] e^{-ik_0 x_j}$ (уз одговарајућу норму).

Поређећи еволуцију таласног пакета приказану на слици 11 са класичном симулацијом (слика 10) закључујемо да излазни талас ($t > 10$ а.ј.) представља суперпозицију таласа (стања) који одговарају процесима (23а) и (23б). Очигледно, вероватноћа за двоелектронски распад (описан таласом који се простира дуж дијагонале $r_1 = r_2$) је много мања од вероватноће за једноелектронски распад (таласи који се простиру

паралелно осама r_1 и r_2), што је у складу са Ванијеовом теоријом. Напоменимо да се процеси директног расејања и измене електрона, који се у класичном третману анализирају одвојено (слике 10(a) и 10(b)), у квантномеханичком прилазу због неразликовања електрона као идентичних честица морају третирали у оквиру суперпозиције која описује јединствен процес (једноелектронски распад). Резултујуће (суперпонирано) стање мора имати одређени тип симетрије који се одржава. У вези са тим је био и избор почетне таласне функције (28). Нумеричка симулација процеса на слици 11 је раније изведена користећи другачији метод [15].

5. СУДАРИ АТОМА СА ПОВРШИНАМА ПРИ МАЛИМ УПАДНИМ УГЛОВИМА

Недавни експерименти са расејањем снопа брзих атома (енергије $E_0 \sim 1 - 10$ keV) на површини LiF кристала при малим упадним угловима [16,17] су утврдили постојање интерференционих (дифракционих) образаца (слика 12) иако је де Брољева таласна дужина у том режиму енергија за око три реда величине мања од константе решетке. Објашњење за ово лежи управо у геометрији малих упадних углова (“*grazing incidence angles*“, $\Phi_{in} \sim 1^\circ$). Наиме, енергија компоненте кретања нормалне на површ (z -правац) $E_{\perp} = E_0 \sin^2 \Phi_{in}$ је веома мала у односу на E_0 (или енергију паралелне компоненте $E_{\parallel} = E_0 \cos^2 \Phi_{in} \approx E_0$) тако да је пројектована де Бро-



Слика 12. Скица расејања снопа брзих атома хелијума ($E_0 \sim 1$ keV) на LiF(001) површи при малим упадним угловима ($\Phi_{in} \sim 1^\circ$) дуж $\langle 110 \rangle$ правца и добијени интерференциони образац као последица дифракције снопа на кристалној решетки.

лева таласна дужина $\lambda_{\perp} = h/(2ME_{\perp})^{1/2}$ много већа и, што је најважније, упоредива са константом решетке $a \approx 7.6 a_0$ (за LiF). С друге стране, компонента кретања паралелна површи (x -правац) практично не осећа утицај решетке што омогућава увођење ефективног (тзв. “string”) потенцијала који је при малим упадним угловима константан дуж правца пројекције упадног снопа на површину (тзв. аксијално каналисање) [18]. Другум речима, кретање у x -правцу је слободно и према томе динамички распрегнуто од преостале две компоненте кретања (y и z). Одавде произилази да се проблем расејања при малим упадним угловима практично своди на динамику у (y, z)-равни у присуству ефективног 2Д (*string*) потенцијала $V_{\text{str}}(y,z)$. Ова чињеница значајно поједностављује извођење нумеричких симулација које су се показале веома успешним [17,19].

5.1. СИМУЛАЦИЈА РАСЕЈАЊА НЕ АТОМА НА LiF ПОВРШИ ПРИ МАЛИМ УПАДНИМ УГЛОВИМА

Ефективни потенцијал $V_{\text{str}}(y,z)$, који се користи у симулацији расејања у (y, z)-равни, добија се усредњавањем пуног (3Д) атом-површ потенцијала дуж пројекције правца упадног снопа на LiF(001) површ (x -правац) [20]. 3Д потенцијал се може за ту сврху добити рачунајући интеракцију између упадног атома и групе атома LiF површи користећи нумеричке рутине квантне хемије на бази мултиконфигурационог метода самоусаглашеног поља [21]. У експериментима се за правац упадног снопа најчешће бирају $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ правци LiF површи. У првом случају је растојање између хетеро-атомских низова (ширина канала) $d = a/2 \approx 3.8 a_0$, док је у другом случају ширина канала растојање између суседних низова атома исте врсте које је за LiF кристал $d = a/2^{1/2} \approx 5.37 a_0$.

Занемарујући геометријско (некохерентно) ширење, упадни снап се у принципу може описати равним таласом $\sim \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$. Пошто се симулација врши у (y, z)-равни посматраћемо само нормалну компоненту овог таласа $\sim \exp(-ik_{\perp} z)$, где је $k_{\perp} = 2\pi/\lambda_{\perp} = (2ME_{\perp})^{1/2}/\hbar$ (M је маса атома). Узимајући у обзир могућу кохерентну ширину упадног таласа, његова нормална компонента ће бити описана гаусијанским таласним пакетом (модулисани равни талас) [19]

$$\psi_0(x, y) = (\pi^2 \sigma_y \sigma_z)^{-1/4} e^{-y^2/2\sigma_y^2} e^{-(z-z_0)^2/2\sigma_z^2} e^{-ik_{\perp} z}, \quad (29)$$

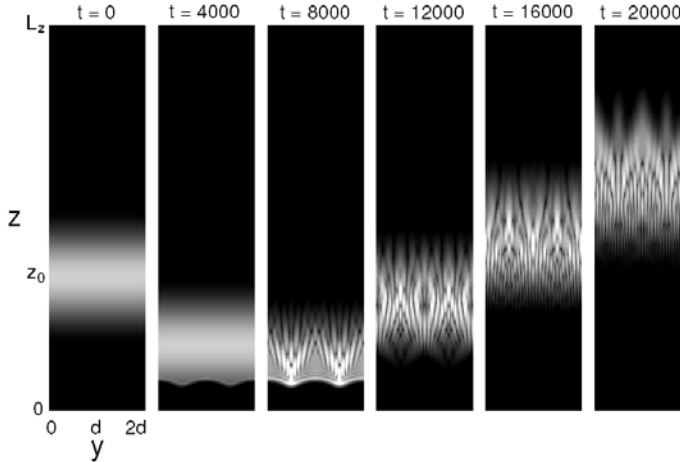
где је z_0 почетни положај центра пакета на z -оси, а σ_y и σ_z су његове кохерентне ширине. Оваква модулација равног таласа је уствари неопходна и због његове локализације (бар у z -правцу), јер је одговарајући нумерички домен, ма како био велики, увек ограничен. Попречне кохерентне ширине σ_y и σ_z се у експерименту контролишу ширином прореза колиматора и у

пракси су много веће од константе решетке. Према томе, упадни сноп је практично описан делокализованим равним таласом.

Код реалног расејања, међутим, због значајне размене импулса између атома снопа и атома решетке услед термалних вибрација последњих, долази до декохеренције расејаног таласа која има за последицу драстичну редукцију попречне кохерентне ширине дуж поларног (Φ) угла, $\sigma_z^{\text{out}} \ll \sigma_z^{\text{in}}$ [19]. Најједноставнији начин да се овај ефекат укључи у симулацију је да се почетна кохерентна ширина σ_z^{in} још у упадном таласу замени редукованом ширином σ_z^{out} . (Егзатнији начин који је описан у реф. [19] подразумева укључивање размене импулса у сам нумерички метод којим се симулира дифракција таласног пакета на решеци.) Супротно томе, σ_y^{out} остаје довољно велико тако да се (у апроксимацији $\sigma_y \rightarrow \infty$) таласни пакет (29) своди на равни талас модулисан само у z -правцу [20]

$$\psi_0(x, y) = (\sqrt{\pi} \sigma_z L_y)^{-1/2} e^{-(z-z_0)^2 / 2\sigma_z^2} e^{-ik_{\perp} z}. \quad (30)$$

У овом случају, узимајући у обзир периодичност усредњеног потенцијала $V_{\text{str}}(y, z)$, нумеричка симулација се може извршити у домену ограниченом у



Слика 13. Симулација расејања He атома ($E_0 = 1 \text{ keV}$) на LiF површи за упадни сноп усмерен дуж $\langle 110 \rangle$ правца ($d = a/2^{1/2} \approx 5.37 a_0$) при упадном углу $\Phi_{\text{in}} = 1.1^\circ$. Пројектовани упадни талас на (y, z) -раван ($E_{\perp} \approx 0.38 \text{ eV}$) је описан модулисаним таласом (30) са $\sigma_y \rightarrow \infty$, $\sigma_z = 5^{1/2} a.j.$ и $z_0 = 15 a_0$. Рачунање је спроведено у области величине $L_y \times L_z = 2d \times 43a_0$ подељеној на $N_y \times N_z = 64 \times 256$ сегмената.

у-правцу на један или неколико канала усредњеног потенцијала (видети претпоследњи пасус одељка 2.1.). На слици 13 је приказана симулација расејања атома хелијума енергије $E_0 = 1 \text{ keV}$ на LiF површи за упадни правац $\langle 110 \rangle$ и упадни угао $\Phi_{\text{in}} = 1.1^\circ$. Симулација је извршена у домену који обухвата два канала у y -правцу ($L_y = 2d$).

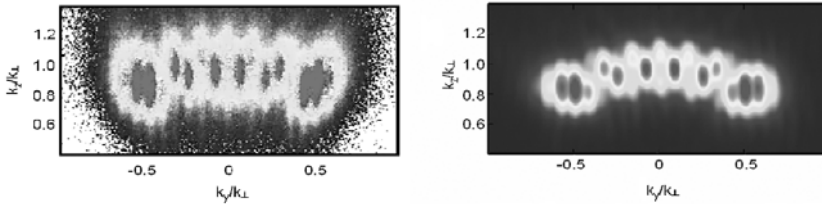
5.2. ДИФРАКЦИОНИ ОБРАСЦИ

На слици 14 (лево) је приказан дифракциони образац добијен у експерименту при расејању He атома енергије $E_0 = 1 \text{ keV}$ на LiF(001) површи за упадни правац $\langle 110 \rangle$ и упадни угао $\Phi_{in} = 1.1^\circ$ ($E_\perp \approx 0.38 \text{ eV}$) [16]. Пикови (максимуми интензитета расејаног снопа) одговарају интерференционим максимумима различитог реда. Положаји максимума дуж y -правца (азимутног угла Θ_{out}) се могу добити из услова за конструктивну интерференцију при расејању (дифракцији) на потенцијалу периодичном у y -правцу, $V_{str}(y+d, z) = V_{str}(y, z)$,

$$k_y = \frac{2\pi n}{d}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (31)$$

где је $\mathbf{k}_\perp^{(out)} = (k_y, k_z)$ пројектовани таласни вектор расејаног таласа на (y, z) -раван, док је n ред интерференционог максимума. За еластично расејање је $k_\perp^{(in)} = k_\perp^{(out)} = (k_y^2 + k_z^2)^{1/2}$ тако да дифракциони образац лежи на кружници константног полупречника. Напоменимо да се експериментално добијени дифракциони образац, који одговара некој расподели интензитета расејаног снопа у функцији поларног и азимутног угла, Φ_{out} и Θ_{out} , може директно поредити са рачунатим положајима пикова у импулсном простору (k_y, k_z) , јер у асимптотској области за мале углове важи $k_z/k_y = z/y \approx \Phi_{out}/\Theta_{out}$.

Да би се нумеричком симулацијом добила расподела интензитета расејаног таласа у асимптотској области, погодно је прећи на импулсну



Слика 14. Експериментални (реф. [16]) (лево) и израчунати (десно) дифракциони образци за расејање $E_0 = 1 \text{ keV}$ He на LiF површи за упадни правац $\langle 110 \rangle$ и упадни угао $\Phi_{in} = 1.1^\circ$ ($E_\perp \approx 0.38 \text{ eV}$). У нумеричкој симулацији, којом је добијен образац десно, је кориштен упадни талас облика (30) са $\sigma_z = 1 \text{ a.j.}$ и $z_0 = 15 a_0$, а симулација је спроведена у области величине $L_y \times L_z = 4d \times 43a_0$ подељеној на $N_y \times N_z = 256 \times 512$ сегмената.

репрезентацију таласне функције (дистрибуција $|\psi_{out}(k_y, k_z)|^2$ репродукује дифракциони образац). Како се деловање еволуционог оператора на таласну функцију у методу разложеног оператора реализује помоћу наизменичних прелазака из координатне у импулсну репрезентацију (користећи FFT алгоритам), овај метод аутоматски даје таласну функцију у обе репрезентације. Коначно, ради бољег поређења са експерименталним

результатима, положаје интерференционих пикова у нумерички добијеном обрасцу треба конволуирати за угао геометријске дивергенције снопа.

Дифракциони образац добијен нумеричком симулацијом расејања Не атома на LiF површи, користећи исте (горе наведене) параметре упадног снопа за које је добијен експериментални образац, је дат на слици 14 (десно). Процењено је да се добро слагање између образаца добија ако се при рачунању последњег изабере упади талас (30) са $\sigma_z \approx 1$ а.ј. Азимутне ширине интерференционих пикова у експерименталном дифракционом обрасцу одговарају дивергенцији (геометријском ширењу) снопа, док су оне у дифракционом обрасцу добијеном симулацијом накнадно укључене конволуцијом интензитета расејаног таласа (на Гаусов профил) за исти угао дивергенције. У поређењу са азимутним правцем, ширине пикова дуж поларног угла су много веће и не могу се објаснити дивергенцијом снопа. Штавише, у овом (z) правцу, пикови показују унутрашњу структуру (нпр. померање максимума интензитета са кружнице $k_{\perp} = \text{const}$ или присуство више максимума, видети слику 14), која се очигледно не може добити конволуцијом, већ је последица коначне кохерентне ширине σ_z^{out} услед декохеренције расејаног снопа [19]. Нагласимо да је ширина пикова дуж поларног угла обрнуто пропорционална кохерентној ширини σ_z^{out} , пошто је одговарајућа кохерентна ширина таласа у импулсној репрезентацији $1/\sigma_z^{\text{out}}$, а неодређеност z -компоненте импулса која одговара пуној ширини (пика) на половини максимума (FWHM), $\Delta k_z = 2(2\ln 2)^{1/2}/\sigma_z^{\text{out}}$.

Напоменимо на крају да, за разлику од положаја интерференционих максимума који су потпуно одређени ширином канала d (формула (31)), њихови релативни интензитети зависе од других параметара који дефинишу облик ефективног (а тиме и пуног 3Д) потенцијала [19,20]. Због велике осетљивости дифракционих образаца од облика потенцијала метод се може користити за реконструкцију потенцијала и дијагностику површи.

6. ЗАКЉУЧАК

Метод простирања таласног пакета (“*wave-packet propagation*”), као један од временски зависних прилаза (преко деловања еволуционог оператора), се показао погодним како за симулацију сударних процеса тако и за рачунање спектра квантних система. Овај прилаз је посебно погодан код испитивања прелазних стања јер на једноставан начин омогућава одређивање њихових ширина односно времена живота. Овде је описан тзв. метод разложеног (еволуционог) оператора, базиран на брзом Фурије трансформу (FFT) и демонстрирана његова примена у различитим областима физике. Поред пар општих примера, детаљније је обрађено неколико примера из атомске и молекулске физике. Код ових последњих, метод пропагације таласног пакета је већ дуже време у употреби, посебно код рачунања прелазних (дисоцијативних) стања. Овде је представљено израчунавање вибрационих спектра молекула угљен монооксида и угљен диоксида. Код овог последњег је рачунат вибрациони спектар који одговара дисоцијативном електронском стању молекула и добијене

ширине одговарајућих вибрационих стања. Примена метода код атомских система и процеса је још недовољно развијена, углавном због сингуларног и дугодометног карактера Кулоновог потенцијала. Овде је представљен један од начина како се може решити проблем сингуларитета. Поступак је примењен код решавања радијалног кретања једноелектронског атома и код симулације електрон-атом (водоник) сударног процеса. Демонстрирано је слагање са класичном (Ванијеовом) теоријом двоелектронског распада при малим енергијама. Коначно, уназад неколико година метод пропагације таласног пакета се користи за симулацију судара атома и молекула са површинама. Метод разложеног оператора базиран на FFT алгоритму се показао посебно ефикасним за анализу расејања (дифракције) снопа брзих атома на површини кристалне решетке при малим упадним угловима. Репродуковани су експериментални дифракциони обрасци, а због велике осетљивости резултата од облика потенцијала метод се може користити за реконструкцију потенцијала и дијагностику површи.

Аутор се захваљује организаторима Научног скупа "Physics 2010 BL" на позиву и Министарству науке и технологије Републике Српске на подршци. Рад је суфинансиран са пројекта 141029 Министарстава за науку и технолошки развој Републике Србије.

7. ЛИТЕРАТУРА

- [1] M. D. Feit and J. A. Fleck, Jr., *J. Chem. Phys.*, **78**, 301, (1983); *J. Chem. Phys.*, **80**, 2578, (1984).
- [2] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, Cambridge, (1986).
- [3] R.T. Pack, *J. Chem. Phys.*, **65**, 4765, (1976).
- [4] R. E. Weston, Jr., *J. Chem. Phys.*, **31**, 892, (1959).
- [5] E. J. Heller, *J. Chem. Phys.*, **68**, 3891, (1978).
- [6] K.C. Kulander and J.C. Light, *J. Chem. Phys.* **73**, 4337 (1980).
- [7] E. Pollak and P. Pechukas, *J. Chem. Phys.*, **69**, 1218, (1978).
- [8] N. S. Simonović, *J. Chem. Phys.*, **124**, 014108, (2006); такође у *Proc. 23rd SPIG, Book of Contributed Papers*, Institute of Physics, Belgrade, p.127, (2006).
- [9] R. Sadeghi and R.T. Skodje *J. Chem. Phys.*, **105**, 7504, (1996).
- [10] I. Burghardt and P. Gaspard, *Chemical Physics*, **225**, 259, (1997).
- [11] N. S. Simonović, in *Proc. 22th SPIG, Book of Contributed Papers*, Vinča Institute of Nuclear Sciences, Belgrade, p.97, (2004).
- [12] M. R. Hermann and J. A. Fleck, Jr., *Phys. Rev. A*, **38**, 6000, (1988).
- [13] G. H. Wannier, *Phys. Rev.*, **90**, 817, (1953).
- [14] N. Simonović and P. Grujić, *J. Phys. B*, **20**, 3427, (1987).
- [15] C. Bottcher, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **14**, L349, (1981).
- [16] A. Schüller, S. Wethekam, and H. Winter, *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 016103, (2007).

- [17] P. Rousseau, H. Khemliche, A.G. Borisov, and P. Roncin, *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 016104, (2007).
- [18] H. Winter, *Phys. Rep.*, **367**, 387, (2002).
- [19] F. Aigner, N. Simonović, B. Solleder, L. Wirtz, and J. Burgdörfer, *Phys. Rev. Lett.*, **101**, 253201, (2008); takođe u *Proc. 24th SPIG, J. Phys.: Conf. Ser.*, **133**, 012014, (2008).
- [20] A. Schüller, S. Wethekam, D. Blauth, H. Winter, F. Aigner, N. Simonović, B. Solleder, J. Burgdörfer, L. Wirtz, *Phys. Rev. A*, **82**, 062902, (2010).
- [21] H. Lischka et al, computer code COLUMBUS, Release 5.9 (2006).

УТИЦАЈ ГРАВИТАЦИОНИХ СОЧИВА НА СПЕКТАР КВАЗАРА

П. Јовановић, Л. Ч. Поповић
Астрономска опсерваторија Београд, Волгина 7, 11060 Београд,
Србија

Сажетак. У овом раду је дат кратак преглед најважнијих резултата истраживања утицаја гравитационих сочива на спектре квазара као једне врсте језгара активних галаксија. Добијени резултати показују да нам посматране спектралне линије, као што је на пример Fe K α , пружају могућност да изучимо структуру и физику унутрашњих области квазара, а такође и различите космолошке феномене као што су гравитациона сочива. Познавање ефеката у плазми који могу да утичу на облике ових спектралних линија је неопходно да бисмо их раздвојили од утицаја гравитационих микросочива која такође могу да изазову промене у облицима и интензитетима спектралних линија посматраних код квазара.

Abstract. In this paper we present a short overview of the most important results of our investigations of gravitational lensing effects on spectra of quasars, as a type of active galactic nuclei. Obtained results show that the observed spectral lines, such as e.g. Fe K α , enable us to study the structure and physics of inner parts of quasars, as well as different cosmological phenomena, such as gravitational lenses. Understanding the effects in plasma which may influence to shapes of the spectral lines is necessary in order to resolve them from gravitational microlensing effects, which could also cause variations in the shapes and intensities of the observed spectral lines of quasars.

1. КВАЗАРИ КАО ЈЕЗГРА АКТИВНИХ ГАЛАКСИЈА

Квазари представљају најмоћније изворе X-зрачења у Васиони који су до сада откривени. Осим у области X-зрака, они веома интензивно емитују и у широком енергијском опсегу од γ -зрака па до радио таласа. Због свог великог сјаја, то су и најудаљенији објекти до којих је људско око, потпомогнуто снажним телескопима, до сада досегнуло. Неки квазари су посматрани на растојању од 12 милијарди светлосних година, што је само неколико милијарди светлосних година далеко од границе нашег универзума. За овако моћно зрачење квазара одговорна је супермасивна црна рупа која се налази у њиховом центру, а око које се простире акрециони диск, из кога потиче ово зрачење. Акрециони диск може да има

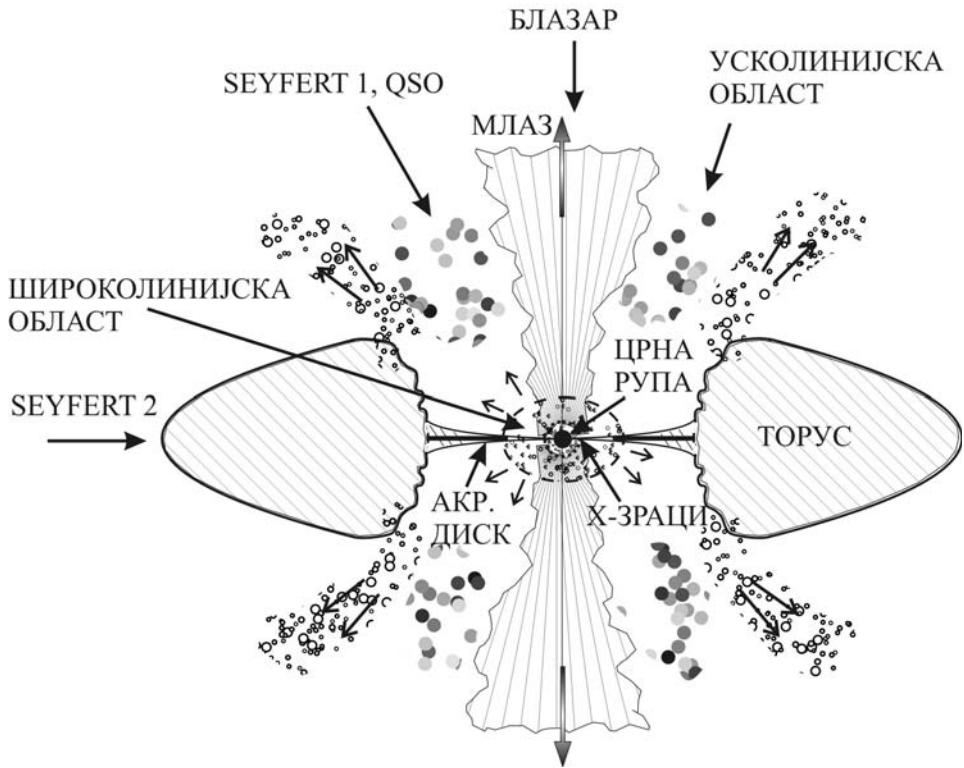
различите облике, димензије и наравно, различиту емисију у зависности од тога да ли се простире око неротирајуће (Шварцшилдова метрика) или ротирајуће (Керова метрика) црне рупе. На детектовано зрачење акреционог диска могу да утичу разни ефекти везани за плазму и нестабилност диска (видети на пример [1]), али одређени утицај могу да имају и гравитациона микросочива, нарочито код оних квазара који су већ под утицајем гравитационих макросочива, услед чега долази до настанака њихових вишеструких ликова.

По својој природи, квазари представљају једну врсту језгара активних галаксија, које се разликују од типичних галаксија по томе што су им језгра веома сјајна и променљива у односу на остатак галаксије. Осим квазара, постоје и друге врсте активних галактичких језгра (у даљем тексту АГЈ) као што су [2]: радио јаке галаксије, радио слабе галаксије, широколинијске радио галаксије, усколинијске радио галаксије, објекти типа BL Lac (блзари), галаксије типа Seyfert I, галаксије типа Seyfert II и LINERs-и (скраћено од енглеског "*Low-Ionization Nuclear Emission Regions*"). Све ове врсте АГЈ се на релативно задовољавајући начин могу описати једним обједињеним моделом, при чему се поједини типови разликују само на основу оријентације акреционог диска у простору, односно угла под којим га посматрач види. Шематски приказ обједињеног модела АГЈ дат је на Слици 1 [2]. Он подразумева постојање супермасивне црне рупе у центру АГЈ, чија се маса креће од 10^6 па до $10^{10} M_{\odot}$. Око црне рупе, почевши од свега неколико па све до неколико хиљада гравитационих радијуса (детаљније у §2.1), простире се акрециони диск који се састоји од материје у јонизованом стању. Унутрашњи дијаметар молекулског торуса који окружује управо описани центар АГЈ је реда неколико, а спољашњи неколико десетина парсека. Између центра језгра и гасног торуса, са обе стране акреционог диска, у области величине од 10^{-3} pc па до 0.1 pc, простиру се гасни облаци који су јонизовани услед зрачења диска и који се крећу брзинама реда величине неколико хиљада km/s. Ови облаци емитују широке емисионе линије, због чега се ова област назива широколинијска област. На већим растојањима од диска, у области величине 1 - 100 pc, простиру се гасни облаци који се крећу брзинама реда величине неколико стотина km/s и који емитују уже емисионе линије, због чега се та област назива усколинијска област. Између усколинијске и широколинијске области налази се врућа корона, у којој долази до расејавања зрачења у континууму и емисионим линијама. У правцу нормалном на раван акреционог диска, са његове обе стране, постоје снажни млазеви материје који су узроковани јаким магнетним пољем.

У зависности од просторне оријентације у односу на посматрача, поједини типови АГЈ се разликују на следећи начин (видети Сliku 1):

- блзари - ако је угао посматрања дуж осе млазева материје,
- квазари типа I и Seyfert I галаксије - ако угао посматрања није кроз млаз и ако молекулски торус не заклања акрециони диск, тако да су видљиве и усколинијска и широколинијска област,

- квазари типа II и Seyfert II галаксије - ако је широколинијска област заклоњена торусом па је видљива само усколинијска област



Слика 1. Обједињени модел активних галактичких језгара [2]

2. ЕМИСИЈА АКРЕЦИОНОГ ДИСКА АГЈ

Једини познати физички механизам који омогућава АГЈ да ослобађају огромну количину енергије, која је и до 10.000 пута већа него код "обичних" галаксија, представља акреција материје, тј. њено спирално падање ка централној супермасивној црној рупи кроз акрециони диск, при чему долази до ефикасног претварања гравитационе потенцијалне енергије у зрачење. Спектар зрачења које се емитује са површине акреционог диска АГЈ зависи од структуре диска и његове површинске температуре, а самим тим и од растојања у односу на централну црну рупу. Структура диска и укупна количина енергије која се ослобађа су у највећој мери одређени стопом акреције, тј. стопом прилива материје у диск на његовој спољашњој граници. Један од основних параметара акреционог диска је његова критична (Едингтонова) стопа акреције, за коју је укупна енергија која се ослобађа из диска једнака критичној (Едингтоновој) луминозности, у случају које сила притиска зрачења на потпуно јонизовану материју постаје једнака сили гравитације. Стандардни модел акреционог диска [3]

производи спектар релативно меког, квази-термалног зрачења којим доминира оптички и УВ домен, а присутно је и нешто слабије изражено меко Х-зрачење.

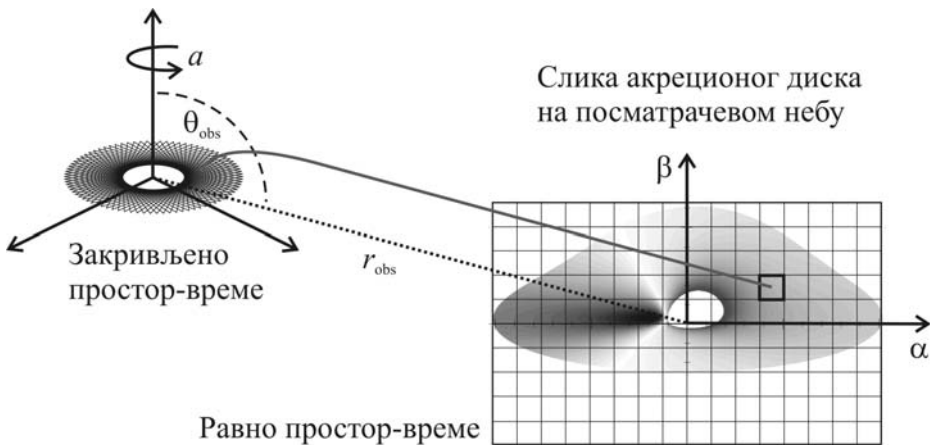
Код већине АГЈ однос флукса у Х и оптичком домену се приближава јединици и по томе се зрачење АГЈ драстично разликује од зрачења обичних галаксија и звезда. Х-зрачење АГЈ у континууму се састоји од две компоненте: меког Х-зрачења, којим доминира стрми спектар и тврдог Х-зрачења, којим доминира спектар у форми степеног закона. Обе компоненте највећим делом настају у унутрашњим областима АГЈ, близу централне супермасивне црне рупе. Осим у континууму, Х-зрачење из акреционог диска АГЈ се одвија и у спектралним линијама, од којих је једна од најдоминантнијих Fe K_α на 6.4 keV. Ова флуоресцентна/рекомбинациона линија представља важан показатељ акреционих токова око централних супермасивних црних рупа АГЈ јер настаје у унутрашњим областима њихових акреционих дискова.

Fe K_α линија је сама по себи прилично уска линија, али у случају када потиче из релативистички ротирајућег акреционог диска АГЈ долази до њеног ширења, као и до промене њеног облика (тј. профила) услед Доплеровог и гравитационог ефекта. Такво ширење ове линије је често посматрано код Seyfert-ових галаксија и представља један од главних доказа о постојању релативистичког акреционог диска који се простире дубоко у гравитациони потенцијал централне црне рупе. Када би ова линија потицала са неког произвољног радијуса нерелативистичког (кеплеровског) акреционог диска, она би услед Доплеровог ефекта имала симетричан профил са два пика: "плавим" који одговара емисији материјала са стране диска која се приближава ка посматрачу и "црвеним" који одговара емисији материјала са стране диска која се удаљава од посматрача. Најшири делови линије настају у унутрашњим областима диска, где је кретање материјала и најбрже. На основу посматрања ASCA сателита установљено је да у случају 14 Seyfert I галаксија, брзине које одговарају пуној ширини Fe K_α линије на половини њеног максимума износе FWHM ≈ 50.000 km/s [4]. У неким случајевима оне достижу чак и до 30% од брзине светлости. То значи да су у близини црне рупе орбиталне брзине материјала релативистичке, што доводи до појачања "плавог" пика линије. Када се посматра укупна емисија по свим радијусима релативистичког акреционог диска, добија се линија са асиметричним и јако проширеним профилем [5, 6]. "Плави" пик је тада врло узак и јако изражен, док је "црвени" широк и знатно слабији.

Једна од важнијих особина Х-зрачења АГЈ су његове промене које се крећу у распону од неколико делова једног сата па до неколико дана, што је условљено настанком овог зрачења у веома компактној области акреционог диска. Узрок тих промена могу бити, поред осталог, и гравитациона микросочива. У овом раду је дат преглед резултата наших истраживања варијација Х-зрачења, како у линији тако и у континууму, које настају управо услед утицаја гравитационих микросочива на емисију акреционог диска код АГЈ.

2.1. Нумеричке симулације зрачења акреционог диска АГЈ

Емисија диска је у нашим истраживањима анализирана користећи нумеричке симулације засноване на тзв. "методу праћења зрака" (енглески "ray-tracing") у Керовој метрици [2], при чему се у обзир узимају трајекторије само оних фотона који досежу до посматрачеве небеске равни (Слика 2). Небеска раван на посматрачевом небу се дели на одређени број малих елемената (пиксела), а затим се кроз све пикселе прате трајекторије фотона (тј. геодезици у Керовом простор-времену) и то уназад, све до њиховог пресека са равни акреционог диска. Знајући закон по коме диска зрачи, могуће је за сваки пиксел израчунати одговарајућу густину флукса зрачења, као и енергијски



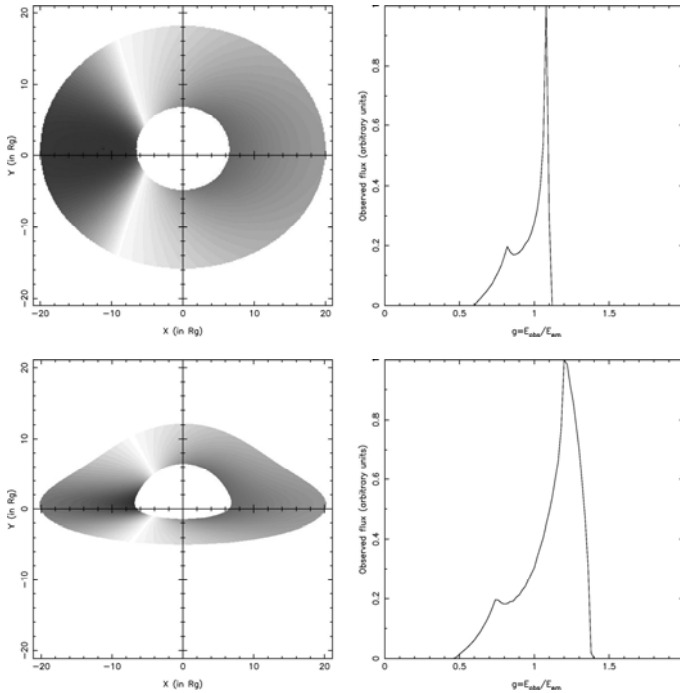
Слика 2. Илустрација метода праћења зрака у Керовој метрици [2]. Црвеном пуном кривој линијом је представљен један зрак светлости који је емитован из акреционог диска у референтном систему дефинисаном од стране ротирајуће црне рупе са угаоним моментом a , а који досеже до посматрачеве небеске сфере, где бива детектован у пикселу равног простор-времена чији су ударни параметри (тј. координате): α , β

помак фотона, тј. величину $g = E_{obs} / E_{em}$, где је E_{obs} - посматрана енергија фотона, а E_{em} - његова емитована енергија. Када се сви пиксели обоје у зависности од вредности енергијског помака g , добија се симулирана слика акреционог диска коју би удаљени посматрач видео помоћу телескопа високе резолуције, а када се направи расподела интензитета свих пиксела по g , добија се симулирани профил спектралне линије који одговара тој слици акреционог диска.

У нашим нумеричким симулацијама најчешће смо узимали да диск емитује по следећем степеном закону [2, 7, 8]:

$$\varepsilon(r) = \frac{\varepsilon_0}{4\pi} r^{-p}, \quad (1)$$

где је ϵ_0 - константа емисивности, p - индекс емисивности, а r - неки радијус акреционог диска између његовог унутрашњег (R_{in}) и



Слика 3. Две слике акреционог диска око стационарне црне рупе, тј. за $a = 0$ (лево) и њима одговарајући профили спектралне линије $Fe K_{\alpha}$ (десно), добијени помоћу нумеричких симулација заснованих на методу праћења зрака [5]. У оба случаја, унутрашњи радијус (R_{in}) диска се поклапа са радијусом маргинално стабилне орбите (R_{ms}) који у случају Шварцшилдове метрике износи $R_{ms} = 6 R_g$, док спољашњи радијус диска износи $R_{out} = 20 R_g$. Инклинација диска на горњем панелу је: $i = 35^{\circ}$, а на доњем панелу: $i = 75^{\circ}$

спољашњег радијуса (R_{out}). Ови радијуси су најчешће изражени у гравитационим радијусима: $R_g = G M / c^2$, где је M - маса централне црне рупе, G - Њутнова гравитациона константа, а c - брзина светлости. Осим већ поменутих параметара, за извођење нумеричких симулација неопходна су и следећа два: i - нагиб диска (инклинација), тј. угао под којим га посматрач види и a - спин, тј. угаони моменат (J) централне црне рупе, нормализован на њену масу: $a = J / M c$, при чему је: $0 \leq a \leq 1$. У случају стационарне црне рупе је $a = 0$, тј. Керова метрика се своди на Шварцшилдову. На Сlici 3 су приказана два примера симулираних слика акреционог диска и њима одговарајућих симулираних профила спектралне линије $Fe K_{\alpha}$.

Резултати наших истраживања показују да поређења овако добијених симулираних профила спектралних линија са одговарајућим профилима посматраним у спектрима АГЈ омогућавају да се одреде параметри акреционих дискова код тих АГЈ, као и масе и угаони моменти њихових

централних супермасивних црних рупа [5]. На тај начин, у могућности смо да добијемо неке суштинске информације о геометрији простор-времена и ефектима јаког гравитационог поља у непосредној околини супермасивних црних рупа у центрима АГЈ, као и о условима у плазми од које се састоје њихови акрециони дискови [5].

3. ГРАВИТАЦИОНА СОЧИВА

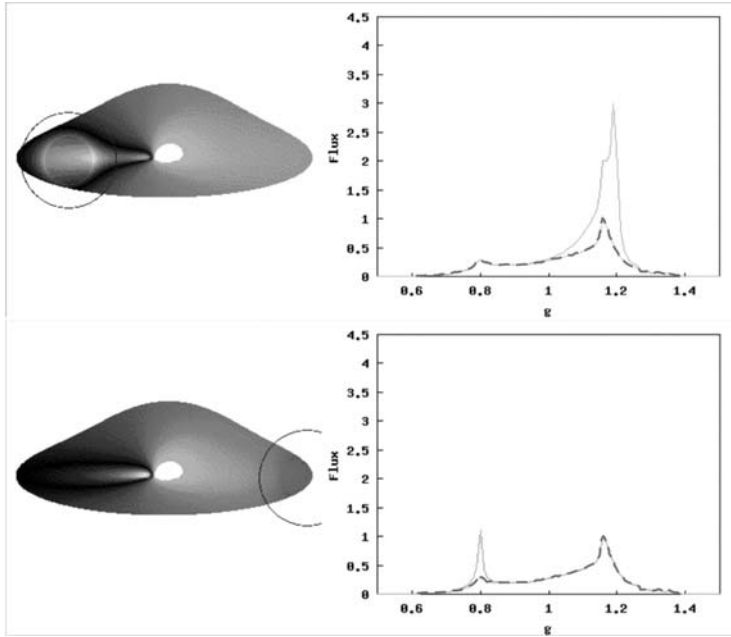
Гравитациона сочива представљају универзалну природну појаву чија је суштина у томе да гравитациона сила објекта који игра улогу сочива савија зраке светлости ка посматрачу и на тај начин доводи до појачања интензитета неког позадинског извора или до појаве његових вишеструких ликова. Угао раздвајања ликова позадинског извора зависи од масе сочива, па се вишеструки ликови могу посматрати само када улогу сочива има објекат велике масе, на пример галаксија, и тада се такво сочиво назива још и гравитационо макросочиво. У случају сочива мање масе, на пример звезде, не могу се уочити вишеструки ликови јер је угао раздвајања веома мали, већ само долази до појачања интензитета зрачења позадинског извора. Таква гравитациона сочива изазивају промене у кривој сјаја позадинског извора и називају се гравитациона микросочива. Она имају посебан значај јер представљају неку врсту природних телескопа, па се зато често користе, на пример, за детекцију планета око других звезда, као и за детекцију тамне материје [9].

Један од најважнијих параметара гравитационих сочива који, између осталог, одређује и да ли ће неко гравитационо сочиво да изазове појаву вишеструких ликова или је у питању микросочиво, је Ајнштајнов радијус. Његове вредности у равни сочива (ξ_0), у угловним јединицама (η_0), као и у равни извора (R_E) су дате следећим изразима [2, 10]:

$$\xi_0 = \sqrt{\frac{4GM}{c^2} \frac{D_{OD} D_{DS}}{D_{OS}}}, \quad \eta_0 = \frac{\xi_0}{D_{OD}}, \quad R_E = \frac{D_{OS}}{D_{OD}} \xi_0 = \sqrt{\frac{4GM}{c^2} \frac{D_{OS} D_{DS}}{D_{OD}}}, \quad (2)$$

где је M - маса објекта који има улогу сочива, а D_{OD} , D_{OS} и D_{DS} су космолошка растојања за угаоне радијусе и то између: посматрача и сочива, посматрача и извора и сочива и извора, редом.

Однос укупног интензитета свих ликова гравитационог сочива и одговарајућег непојачаног интензитета извора се назива коефицијент појачања. Имајући у виду да ликови скоро увек имају веома сложен облик, егзактан израз за коефицијент појачања се не може извести, али се могу извршити одговарајуће апроксимације, у зависности од врсте објекта који играју улогу сочива. У циљу испитивања утицаја гравитационих микросочива на посматране спектре АГЈ, ми смо у нашим досадашњим истраживањима развили три модела гравитационих микросочива, тј. апроксимације за њихов коефицијент појачања и то [7, 8, 10 - 16]: тачкасто микросочиво, каустик и квадруполно микросочиво.



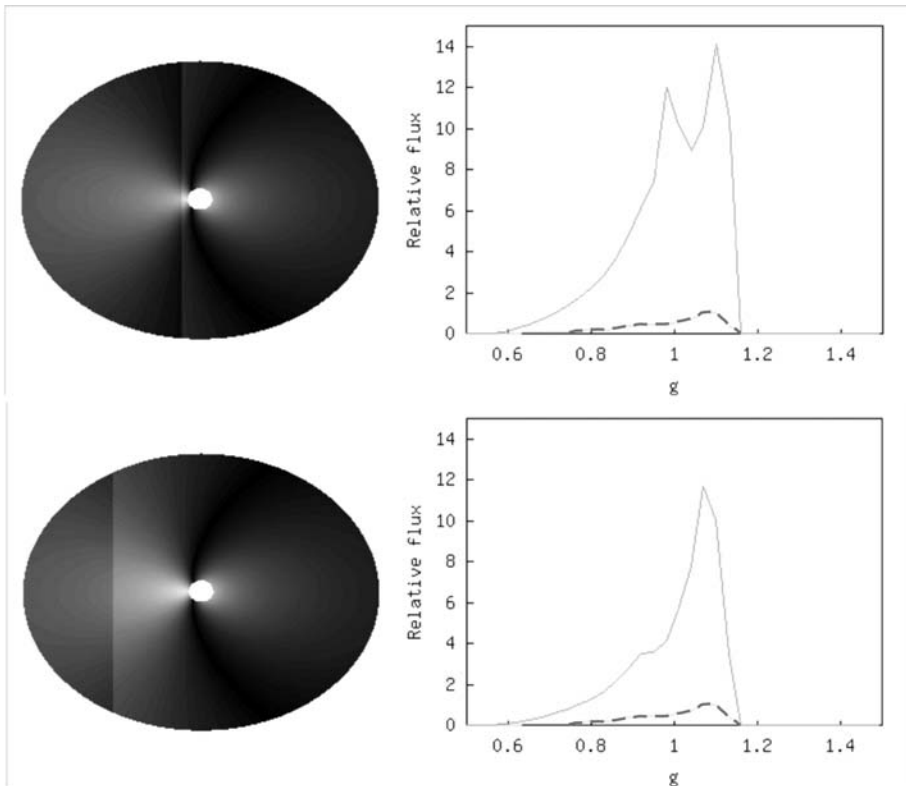
Слика 4. Два положаја тачкастог гравитационог микросочива приликом његовог преласка преко акреционог диска АГЈ (лево) и одговарајуће промене спектралне линије Fe K_α (десно). Испрекиданом линијом је означен облик спектралне линије без, а пуном са утицајем микросочива [11, 12]

Апроксимација тачкастим гравитационим микросочивом се врши у случају када улогу микросочива има неки изоловани компактни објект (нпр. звезда). Ако су X и Y тзв. ударни параметри који описују привидни положај (тј. координате) сваке тачке (пиксела) слике акреционог диска на небеској сфери коју би видео посматрач у бесконачности, тада је коефицијент појачања дат релацијом [7, 8, 10, 11]:

$$A(X, Y) = \frac{u^2(X, Y) + 2}{u(X, Y)\sqrt{u^2(X, Y) + 4}}, \quad u(X, Y) = \frac{\sqrt{(X - X_0)^2 + (Y - Y_0)^2}}{\eta_0}, \quad (3)$$

где $u(X, Y)$ представља угаоно растојање између сочива и извора изражено у Ајнштајновим радијусима η_0 , при чему су X_0 и Y_0 координате сочива у односу на центар диска. Илустрација преласка тачкастог гравитационог микросочива преко акреционог диска АГЈ је дата на Слици 4 (лево), а његов одговарајући утицај на спектралну линију Fe K_α на Слици 4 (десно).

У значајном броју реалних случајева ефекат гравитационог микросочива није изазван само једним изолованим компактним објектом,

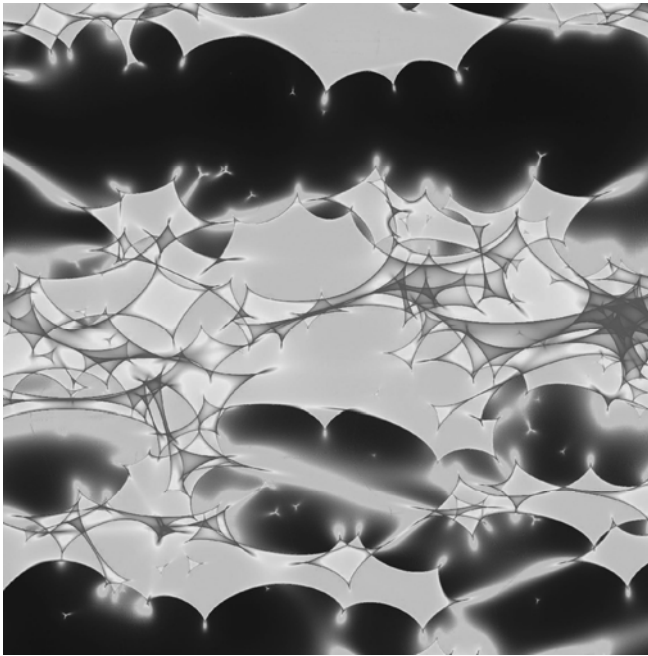


Слика 5. Два положаја каустика приликом његовог преласка преко акреционог диска (лево) и одговарајуће промене спектралне линије Fe K α (десно). Испрекиданом линијом је означен облик линије без, а пуном са утицајем каустика [11]

већ групом објеката, при чему је Ајнштајнов радијус таквог микросочива већи и од самог извора. На пример, то се дешава када нека група звезда у галаксији-макросочиву прелази преко извора и тако игра улогу микросочива. Такво микросочиво је најпогодније описати каустиком, чије појачање је дато следећим изразом [8, 10, 12]:

$$A(X, Y) = A_0 + \frac{K}{\sqrt{\kappa(\xi - \xi_c)}} \cdot H(\kappa(\xi - \xi_c)), \quad (4)$$

где је A_0 - појачање ван каустика, K - фактор појачања, ξ - растојање нормално на каустик, ξ_c - минимално растојање од центра извора до каустика, $H(x)$ - Heaviside-ова функција за коју важи $H(x) = 1$ за $x > 0$, а у супротном она је једнака 0, а $\kappa = \pm 1$ у зависности од смера кретања каустика. Илустрација прелазка каустика преко акреционог диска је дата на Слици 5 (лево), а одговарајући утицај на спектралну линију Fe K α на Слици 5 (десно). Као што се јасно може видети са Слика 4 и 5, параметри гравитационих микросочива, као што је на пример њихов положај, могу у значајној мери утицати на промене облика линије у спектрима АГЈ [10, 17].



Слика 6. Мапа појачања за лик A гравитационог сочива QSO 2237+0305, познатијег као "Ајнштајнов крст" [18]. Тамна боја означава најмање појачање, док је највеће појачање дуж ивица каустика

Најсложенији модел гравитационих микросочива који смо развили је тзв. квадруполно микросочиво, које се још назива и мапа појачања микросочива или мрежа каустика [2, 10, 13 – 16, 18]. Овај модел се примењује да би се добила расподела појачања у равни извора, изазваног од стране одређеног броја компактних објеката (најчешће звезда), који су на случајан начин распоређени у равни сочива и који имају тачно утврђену средњу површинску густину. Одговарајућа мапа појачања се добија користећи нумеричке симулације засноване на тзв. "методу гађања зрацима" (енглески "*ray shooting*"). У овим симулацијама се свака тачка (пиксел) у равни сочива "гађа" одређеним бројем зрака, који се затим савијају у гравитационом потенцијалу микросочива и након тога пролазе кроз раван извора. Појачање у свакој тачки (пикселу) равни извора је сразмерно релативном броју зрака који прођу кроз дату тачку. У случају када се посматра скуп од N компактних објеката, одређених својим векторима положаја \vec{x}_i и масама m_i , за сваки зрак се решава следећа једначина гравитационог сочива [2, 10, 16]:

$$\vec{y}(\vec{x}) = \begin{bmatrix} 1 - k_c - \gamma & 0 \\ 0 & 1 - k_c + \gamma \end{bmatrix} \vec{x} - \sum_{i=1}^N m_i \frac{\vec{x} - \vec{x}_i}{|\vec{x} - \vec{x}_i|^2}, \quad (5)$$

где је \bar{y} - вектор положаја у равни извора, k_c - средња површинска густина микросочива, γ - параметар шира (енглески "*shear*") који описује додатни утицај околне средине у којој се налазе микросочива, при чему други члан на десној страни горњег израза (сума) описује угао савијање зрака. На Слици 6 је приказан пример мапе појачања за лик А гравитационог макросочива QSO 2237+0305, познатијег као "Ајнштајнов крст". Величина мапе износи $16 R_E \times 16 R_E$, а добијена је за следеће вредности параметара: $k_c = 0.36$ и $\gamma = 0.4$.

3.1. Утицај гравитационих микросочива на спектре АГЈ

У нашим досадашњим истраживањима испитивали смо утицај сва три горе описана модела гравитационих микросочива на зрачење акреционог диска АГЈ, како у линији, тако и континууму. У случају зрачења у континууму, појачани интензитет на некој посматраној енергији E услед дејства гравитационог микросочива са коефицијентом појачања $A(X, Y)$ дат је помоћу [10, 15, 19]:

$$I_C(X, Y; E) = I_p(X, Y; E) \cdot A(X, Y), \quad (6)$$

а у случају зрачења у линији помоћу [8, 10, 11, 15, 19]:

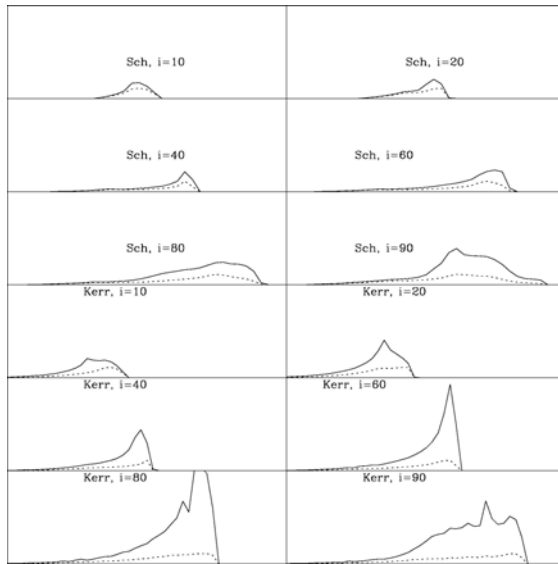
$$I_L(X, Y; E) = I_p(X, Y; E_0 \cdot g(X, Y)) \cdot \delta(E - E_0 \cdot g(X, Y)) \cdot A(X, Y), \quad (7)$$

где су X и Y ударни параметри, E_0 је енергија линије, а g је енергетски помак услед релативистичких ефеката, који је једнак количнику посматране и емитоване енергије. Укупан посматрани флуks за зрачење у континууму и линији је дат помоћу [10, 19]:

$$F(E) = \int_{image} [I_C(X, Y; E) + I_L(X, Y; E)] d\Omega, \quad (8)$$

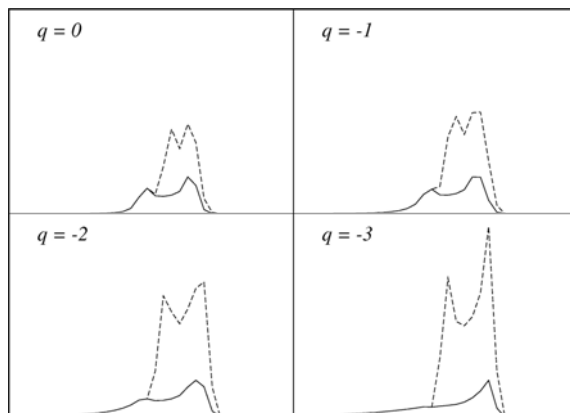
где је $d\Omega$ просторни угао који заклапа акрециони диск на посматрачевом небу, при чему се интеграција врши по целој емисионој области.

На Сликама 7 и 8, приказани су утицаји тачкастог гравитационог сочива и каустика на Fe K_α спектралну линију и то за различите инклинације диска у Шварцшилдовој и Керовој метрици, као и за различите индексе емисивности у степеном закону зрачења диска. Као што се види са ових слика, утицај гравитационих микросочива на зрачење диска у линији не зависи само од параметара самих микросочива, као што је на пример њихов положај, већ у значајној мери и од параметара акреционог диска, као што су његова инклинација и емисивност [10, 17].

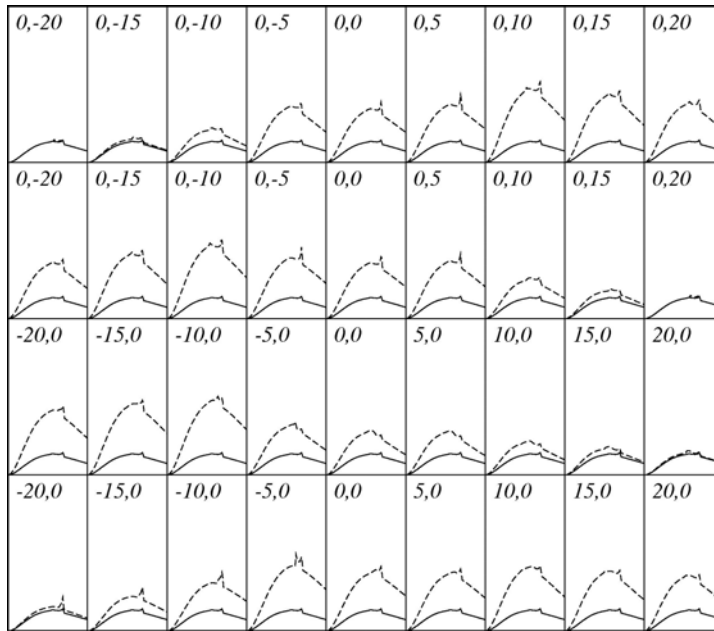


Слика 7. Профили $Fe K_{\alpha}$ линије за разне инклинације акреционог диска (испрекидана линија) и одговарајући деформисани профили (пуна линија) услед дејства тачкастог гравитационог микросочива [8]. Резултати су дати посебно за Шварцшилдову (Sch) и Керову метрику (Kerr) у случају скоро максимално ротирајуће црне рупе, тј. за $a = 0.998$. Релативни интензитет (y-оса) је дат у распону од 0 до 10, при чему је максимум интензитета непертурбоване линије нормализован на 1, а енергијски помак g (x-оса) је дат у распону од 0.4 до 1.8

На Слици 9 су представљене симулиране промене укупног емисионог спектра X-зрачења (тј. континуум + $Fe K_{\alpha}$ линија), током преласка каустика преко акреционог диска АГЈ у случају Шварцшилдове метрике. Као што се види са ове слике, не само да



Слика 8. Недеформисани (пуна линија) и деформисани профили (испрекидана линија) $Fe K_{\alpha}$ линије услед дејства каустика на зрачење акреционог диска са разним индексима емисивности ($q = -p$). Релативни интензитет (y-оса) је дат у распону од 0 до 5.5, а енергијски помак g (x-оса) у распону од 0.6 до 1.3 [11]



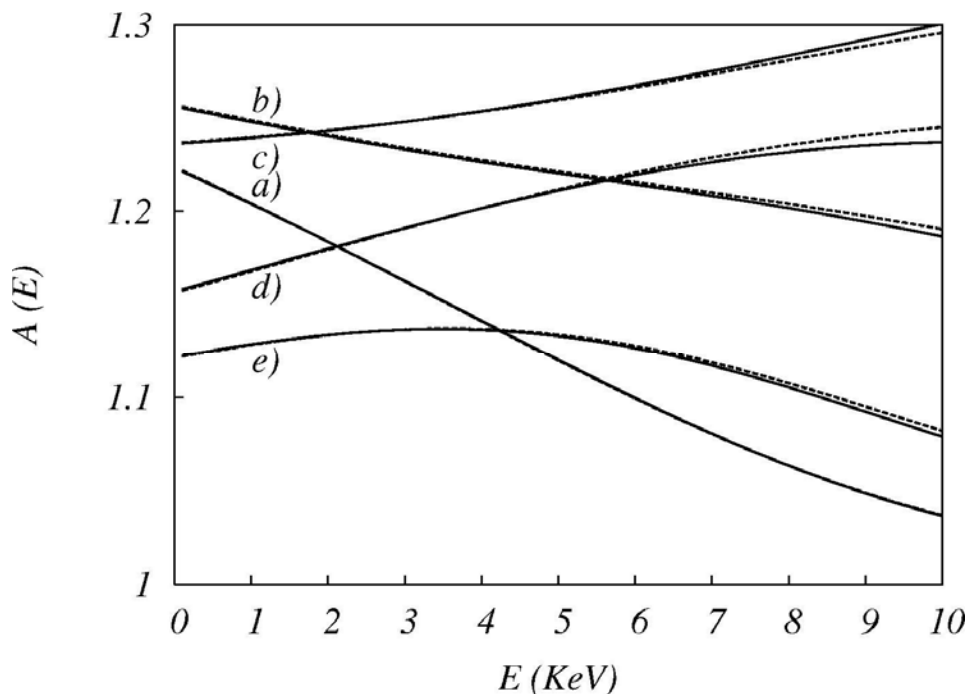
Слика 9. Симулације понашања промена континуума X-зрачења и Fe K_{α} линије (видљива као мали пик на континууму) услед преласка каустика преко акреционог диска у случају Шварцшилдове метрике [15]. Резултати се односе на преласке каустика нормално на осу ротације диска (први и други ред) и дуж осе ротације (трећи и четврти ред). Радијуси емисионих области континуума и линије су исти и износе: $R_{in} = R_{ms}$ и $R_{out} = 80 R_g$. Непертурбована емисија је представљена пуном, а пертурбована испрекиданом линијом. Релативни интензитет (y-оса) се креће у распону од 0 до 7, а енергија (x-оса) у распону од 0.1 до 10 keV

облик и интензитет линије могу бити значајно промењени услед дејства гравитационих микросочива, већ тај исти закључак важи и за зрачење у континууму [10, 15, 17].

3.2. Спектрална зависност појачања гравитационих микросочива

Гравитациона сочива су по својој природи ахроматска појава, тј. угао савијања зрака не зависи од таласне дужине зрачења [15]. Због тога је за очекивати да и појачање гравитационих микросочива не би требало да зависи од спектралног опсега зрачења на који она делују. Међутим, наша истраживања утицаја микросочива на зрачење из акреционог диска АГЈ су показала да у току преласка микросочива, њихово појачање зависи од локације емитера у диску. Како различитим радијусима акреционог диска одговарају различите вредности површинске температуре, одговарајући емитери ће давати различите доприносе посматраном флуксу зрачења на датим таласним дужинама, узрокујући спектралну зависност појачања гравитационих микросочива. Ови хроматски ефекти гравитационих микросочива у континууму X-зрачења су илустровани на Слици 10 [15], са које се види да се појачање разликује за различите посматране енергије.

Оно је највеће у случају када каустик прелази преко централног дела диска, а његове варијације могу да изазову одговарајуће промене у спектру континуума од чак 30% [15].

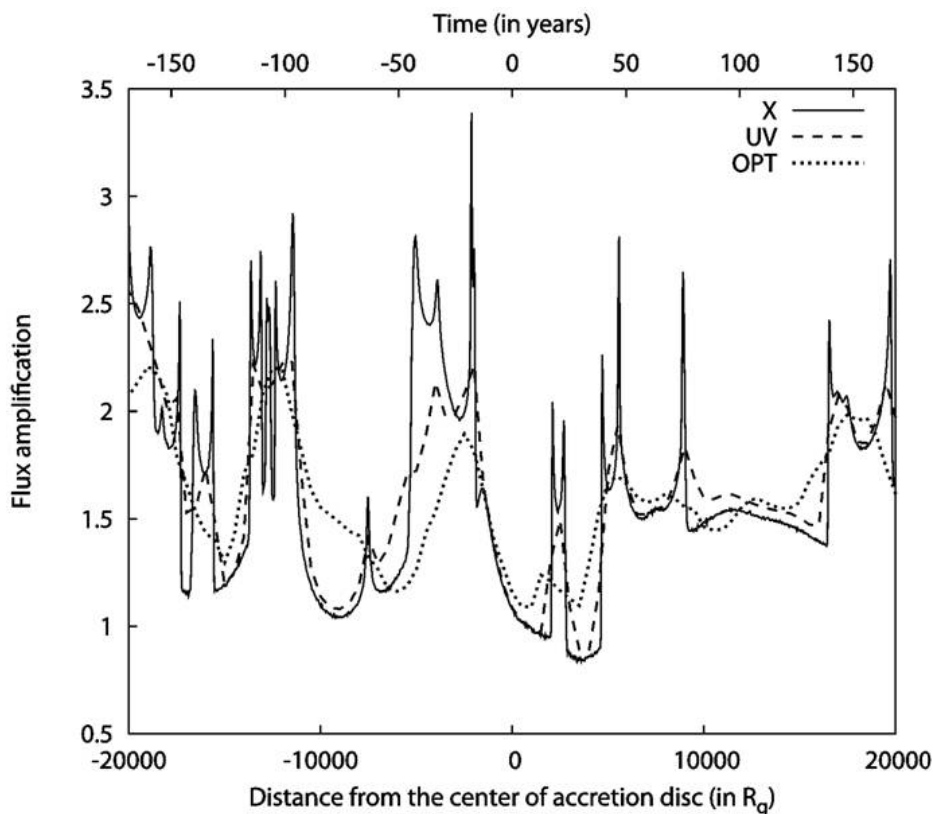


Слика 10. Појачање каустика као функција енергије приликом његовог преласка преко акреционог диска у Шварцшилдовој (пуна линија) и Керовој метрици (испрекидана линија), који емитује по модификованом закону зрачења црног тела [15]. Резултати одговарају следећим положајима каустика на X-оси: a) $X = 20 R_g$; b) $X = 10 R_g$; c) $X = 0 R_g$; d) $X = -10 R_g$ и e) $X = -20 R_g$.

3.3. Временске скале промена у континууму услед утицаја гравитационих микросочива

Поред утицаја гравитационих микросочива на X-зрачење из акреционог диска АГЈ, истраживали смо и њихов утицај на друге спектралне области, као што су оптичко и УВ зрачење [13 - 15]. У том циљу анализирали смо и временске скале промена у континууму изазваних од стране гравитационих микросочива. На Слици 11 су представљене симулиране криве сјаја које одговарају преласку акреционог диска по једној праволинијској путањи дуж мапе појачања за "типични" систем гравитационих сочива, тј. у случају када космолошки црвени помаци сочива и извора износе $z_d = 0.5$ и $z_s = 2$, редом. Као што се може видети са Слике 11, промене континуума X-зрачења имају највеће амплитуде, а такође су и најбрже. Одговарајуће временске скале се крећу од неколико месеци па до неколико година. Промене континуума у оптичкој и УВ

области су знатно спорије и имају мање амплитуде, а њихове временске скале се изражавају у деценијама [13, 14].



Слика 11. Симулиране криве сјаја које одговарају преласку акреционог диска по једној праволинијској путањи дуж мапе појачања за "типични" систем гравитационих сочива [13]

4. ЗАКЉУЧАК

Из наших досадашњих истраживања утицаја гравитационих сочива на спектре квазара, као и других типова АГЈ, произашла су два важна закључка:

1. спектралне линије посматране код АГЈ (на пример Fe K_α) нам омогућавају да изучимо структуру и физику унутрашњих области квазара, а такође и различите космолошке феномене као што су гравитациона сочива,
2. познавање ефеката у плазми који могу да утичу на облике ових спектралних линија је неопходно да бисмо их раздвојили од астрофизичких ефеката (на пример гравитационих сочива), који такође могу да утичу на облике тих линија.

ЗАХВАЛНОСТ

Овај рад је део пројеката 176003 - "Гравитација и структура космоса на великим скалама" и 176001 - "Астрофизичка спектроскопија вангалактичких објеката", финансираних од стране Министарства за науку и технолошки развој Републике Србије.

5. ЛИТЕРАТУРА

- [1] Jovanović P., Popović L. Č., Stalevski M., Shapovalova A. I., *The Astrophysical Journal*, **718**, 168-176, (2010).
- [2] P. Jovanović, L. Č. Popović, X-ray Emission From Accretion Disks of AGN: Signatures of Supermassive Black Holes, in *Black Holes and Galaxy Formation*, Nova Science Publishers Inc, Hauppauge NY, USA, 249-294, (2009) (arXiv:0903.0978).
- [3] Shakura, N. I., Sunyaev, R. A., *Astronomy & Astrophysics*, **24**, 337-355, (1973).
- [4] Nandra K., George I. M., Mushotzky R. F., Turner T. J., Yaqoob T., *The Astrophysical Journal*, **477**, 602-622, (1997).
- [5] Jovanović P., Popović L. Č., *Fortschritte der Physik*, **56**, Issue 4-5, 456-461, (2008).
- [6] Fabian, A. C., Iwasawa, K., Reynolds, C. S., Young, A. J., *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, Vol. 112, No. 775, 1145-1161, (2000).
- [7] Popović, L. Č., Mediavilla, E. G., Muñoz, J. A., Dimitrijević, M. S., Jovanović, P., *Serbian Astronomical Journal*, 164., 53-56, (2001).
- [8] Popović, L. Č., Mediavilla, E. G., Jovanović, P., Muñoz, J. A., *Astronomy & Astrophysics*, 398, 975-982, (2003).
- [9] Zakharov, F., Popović, L. Č., Jovanović, P., *Astronomy & Astrophysics*, 420, 881-888, (2004).
- [10] Jovanović, P., *Uticaј gravitacionih sočiva na spektre kvazara*, Biblioteka Dissertatio, Zadužbina Andrejević, Beograd, (2006).
- [11] Popović, L. Č., Jovanović, P., Mediavilla, E. G., Muñoz, J. A., *Astronomical and Astrophysical Transactions*, Vol. 22., Nos. 4-5, 719-725, (2003).
- [12] Popović, L. Č., Jovanović, P., Bon, E., Dimitrijević, M. S., *Publications of the Astronomical Observatory of Belgrade*, 73, 49-65, (2002).
- [13] Jovanović P., Zakharov A. F., Popović L. Č., Petrović T., *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 386, 397-406 (2008).
- [14] Popović, L. Č., Jovanović, P., Petrović, T., Shalyapin, V. N., *Astronomische Nachrichten*, 327, 981-984, (2006).
- [15] Popović, L. Č., Jovanović, P., Mediavilla, E. G., Zakharov, A. F., Abajas, C., Muñoz, J. A., Chartas, G., *The Astrophysical Journal*, 637, 620-630, (2006).

- [16] Jovanović, P., Popović, L. Č., Simić, S., *New Astronomy Reviews* 53, 156-161, (2009).
- [17] Jovanović, P., *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 118, 656-657, (2006).
- [18] P. Jovanović and L. Č. Popović, *Gravitational Lensing Statistics and Cosmology, Modern Trends in Strings, Cosmology and Particles*, *Publications of the Astronomical Observatory of Belgrade*, No. 88, eds. M. Ćirković, G. Djordjević, G. Senjanović, 91-100, (2010).
- [19] Jovanović, P., *Memorie della Società Astronomica Italiana - Supplementi*, Vol. 7, 56-59, (2005).

УТИЦАЈ СЕКУНДАРНЕ ЕМИСИЈЕ ЕЛЕКТРОНА НА ВРЕДНОСТ ПРОБОЈНОГ НАПОНА КОД ПРАЖЊЕЊА У АРГОНУ

*М. Савић, М. Радмиловић-Рађеновић
Институт за физику, Универзитет у Београду, Прегревица 118,
11080 Земун, Република Србија*

Сажетак. Разумевање и контролисање пробоја у простору између електрода је веома важно, како са научно-истраживачког становишта, тако и за бројне индустријске примене. Проучавање пробојног напона представља један од најстаријих проблема у физици гасних пражњења. Истовремено, пражњења са једносмерном струјом имају широк дијапазон примена у микроелектронској индустрији, код плазма екрана, депозиције танких филмова, код модификација површина, код третмана материјала, итд. Међутим, што се тиче пражњења у аргону, до недавно, у литератури је постојало велико неслагање између експерименталних резултата и резултата прорачуна. Phelps и Petrović су развили ревидирани модел за пробој у гасовима, узимајући у обзир могућност различитих извора секундарне емисије електрона, нехидродинамичке процесе који се одигравају у близини апсорбујућих и рефлектујућих електрода, ефекат просторног наелектрисања, а такође и линеарну и нелинеарну зависност приноса секундарних електрона од основних параметара пражњења. Овај рад садржи резултате феноменолошког модела базираног на ревидираној Таузендовој теорији, као и резултате опсежних симулација пробоја код пражњења са једносмерном струјом у аргону. Добијени резултати показују добро слагање са експерименталним резултатима и јасно указују на утицај секундарне емисије електрона на вредност пробојног напона.

Abstract. The understanding and control of electrical breakdown across the interelectrode gap is critically important both for a deeper understanding of fundamental plasma behaviour and for industrial applications. Ignition of the dc glow discharge represents one of the oldest problems in the study of low-pressure gas discharges. At the same time, dc and pulsed dc discharges are widely applied in the microelectronics industry, in plasma display panels, for depositing thin films, for semiconductor processing, surface

modification, waste treatment, etc. However, as far as dc argon breakdown is concerned, until recently in the literature there was an unsatisfactory agreement of the measured and calculated data. Phelps and Petrovic have developed a revised model of breakdown which included different sources of secondary electron emission, nonhydrodynamic processes close to absorbing and reflecting metal boundaries, space charge effects on Townsend discharges and also both linear and nonlinear dependence of secondary electron yields on basic discharge parameters. This paper contains results of a phenomenological model based on revised Townsend's theory and detailed simulation studies of the argon breakdown in uniform dc electric field. Our simulation results clearly show the effect of the secondary emission processes on the breakdown voltage and are in a good agreement with the available experimental data.

1. ОСНОВНА ФЕНОМЕНОЛОГИЈА

Премда је улога секундарних електрона у процесима електричних пробоја у гасовима стара научна дисциплина која датира још с' почетка прошлог века, сви њени аспекти још увек нису у потпуности проучени и разјашњени. У скорије време, утицај секундарне емисије електрона на карактеристике плазми је поново доживео ревизију и нова проучавања, како због значаја у фундаменталним истраживањима, тако и због широког дијапазона индустријских примена. У складу са Таузендовом теоријом, електронску емисију са површине катоде индукује бомбардовање њене површине јонима, што представља основни механизам продукције секундарних електрона [1]. Крајем XX века, Phelps и Petrović су извршили ревизију ове теорије полазећи од чињенице да основна претпоставка Таузендове теорије, да само јони индукују секундарну емисију електрона, важи у веома уском опсегу вредности редукованог електричног поља. У складу са теоријом коју су конципирали Phelps и Petrović, секундарни електрони могу настати услед дејства јона, атома, метастабилна, брзих неутрала и фотона на површину катоде [2].

Под термином гасно пражњење подразумева се протикање струје кроз гас. Како гас сам по себи представља непроводну средину неопходно је, да у њему, постоје наелектрисане честице тако да је у присуству довољно великог напона могуће остварити пробој у гасу. Сам пробој настаје када се укупна производња електрона у кружном току примарне лавине, повратне спреге и секундарне лавине изједначи са губицима електрона на аноди. Под секундарном лавином подразумевамо све електроне који настану из прве лавине [1-3]. Услови пробоја у гасу се могу одредити на основу кривих пробојног напона (познатих и као Пашенове криве) које диктирају зависност пробојног напона, за дати гас, од производа притиска гаса и растојања између електрода [4].

Једна од најзначајнијих појава везаних за физику електричних пражњења, које су у последње време доживеле ревизију и нова изучавања, је свакако секундарна емисија електрона са катоде услед удара различитих врста честица о површину катоде. Секундарна емисија електрона представља кључни процес у обезбеђивању пробоја односно самосталног пражњења. Ова појава се може описати тзв. приносом секундарних електрона дефинисаним као број електрона који избије свака поједина честица са површине катоде [3]. Број секундарних електрона зависи од стања катодне површине, вредности редукованог електричног поља, као и од упадне енергије честица [5].

Уопштено говорећи, електронска емисија са површине катоде индукована дејством различитих врста честица, сударна јонизација брзим јонима и атомима произведеним у ранијим лавинама, сударна јонизација електронима рефлектованим са аноде, као и фотојонизација гаса фотонима насталим у ранијим лавинама, представљају основне процесе продукције секундарних електрона [3]. Једна од егзактних техника која је коришћена за проучавање секундарне емисије електрона је Монте Карло техника, коју смо користили за одређивање парцијалних доприноса секундарних електрона насталих услед дејства сваког типа честице, понаособ. На основу анализе резултата наших прорачуна одређен је, не само допринос различитих врста честица, већ и утицај рефлексације електрона са електрода, на производњу секундарних електрона. У циљу што прецизнијег моделовања карактеристика плазме које зависе од процеса секундарне емисије неопходно је укључити допринос сваке од честица, понаособ. Занемаривање доприноса, било које од наведених честица, може резултирати у значајном одступању симулационих резултата од експерименталних података, не само за криве пробојног напона, већ и за велики број плазма карактеристика као што су, на пример, густина честица, флуks честица, расподеле честица по енергијама, итд. Ми ћемо ово илустровати, резултатима симулација за криве пробојних напона у аргону, код којих је остварено добро слагање са експерименталним резултатима, узимајући у обзир прецизан модел секундарне емисије електрона услед удара јона и електрона.

2. МОНТЕ КАРЛО СИМУЛАЦИЈА

Монте Карло, у најширем смислу, обухвата било какву симулацију физичког система у којој се користе случајни бројеви [6]. Ова метода је погодна када се симулирају сложенији системи који се, услед недостатка рачунарских ресурса не могу решити егзактним методама. У нашим Монте Карло симулацијама пратимо кретање електронског роја у гасу који је ограничен двома електродама под дејством електричног поља, уз претпоставку да је концентрација гаса толико мала да је кулоновска интеракција између електрона занемарљива [7]. У том случају, на кретање електрона утичу само спољашња поља и судари са тешким честицама гаса

кроз који се простире. Судари електрона са честицама гаса се могу описати преко одговарајућих ефикасних пресека.

Коришћени Монте Карло код се базира на следећим процедурама: генерисање случајних бројева; одређивање тренутка судара; одређивање врсте сударног процеса; израчунавање макроскопских величина. Предност нашег кода јесте у томе што је у могућности да прати сваку честицу посебно и то: електроне, неутрале, јоне и метастабиле. Фотони су пропраћени независним кодом.

3. РЕЗУЛТАТИ ДОБИЈЕНИ ПРИМЕНОМ МОНТЕ КАРЛО МЕТОДЕ

Пресеци за расејање честица су свакако основни податак потребан за моделовање плазме. Симулације су рађене за аргон. Неопходне пресеке за различите типове честица смо узели из литературе: за електроне, за еластичне и нееластичне процесе, као и за јонизацију користили смо податке добијене из личне комуникације [8] и рада [6]; за јоне, за пренос наелектрисања коришћени су подаци из рада [9]; за неутрале, за брзе неутрале коришћени су пресеци за еластично и нееластично расејање [10].

Вероватноћа да ће нека честица избацити електрон приликом удара у катоду рачуната је на основу израза које су аналитички израчунати и прадложени од стране Phelps-а и Petrović-а [2].

Разматрали смо два типа површина аноде: чисту и неочишћену. Под чистом површином подразумевамо електроду која је загревана на 2000 K у условима доброг вакуума, док се сама мерења коефицијента секундарне емисије електрона врше на собној температури и у веома високом вакууму. Неочишћеним катодним површинама се у радовима о пробоју сматрају чак и површине катода обрађене у радионици са стандардним механичким и хемијским техникама, па се потом излажу атмосферском гасу што може резултирати у оксидацији или неком другом контаминирајућем процесу у процесу пумпања до релативно ниског вакуума, као што је депозиција пара из пумпе.

Начин рачунања коефицијента секундарне емисије, γ , је следећи за различите типове честица:

3.1. Допринос јона

Секундарни електрони настају бомбардовањем површине катоде јонима различитих енергија. Вероватноћа да ће јон избацити електрон је дата следећим изразима (више детаља се може наћи у реф.[5]), за чисте површине:

$$\gamma_1^c = 0.07 + \frac{1 \times 10^{-5} (\varepsilon_i - 500)^{1.2}}{\left[1 + (\varepsilon_i / 70000)^{0.7} \right]} \quad (1)$$

и за неочишћене површине, респективно:

$$\gamma_i^d = \frac{0.006\varepsilon_i}{\left[1 + (\varepsilon_i/10)^{1.5}\right]} + \frac{1.05 \times 10^{-4} (\varepsilon_i - 80)^{1.2}}{\left[1 + (\varepsilon_i/8000)^{1.5}\right]} \quad (2)$$

где ε_i представља енергију јона изражену у eV. Из израза (1), за чисте површине може се уочити да енергија јона мора бити већа од 500 eV да би вероватноћа избацивања електрона била различита од нуле. За неочишћене површине та граница је 80 eV (видети израз (2)).

У Монте Карло коду можемо пратити сваки јон до тренутка удара у катоду. На основу његове тренутне енергије прерачунавамо γ_i које упоређујемо са случајним бројем и уколико је γ_i веће, са катоду се емитује секундарни електрон. Нама је за сада значајан једино број избачених секундарних електрона са катоду.

3.2. Допринос неутрала

За неутрале поступак је исти. Једначине које се користе за израчунавање вероватноће избацивања секундарног електрона за чисте (3) и неочишћене површине (4) су, такође, преузете из реф. [5]:

$$\gamma_a^c = 1 \times 10^{-5} (\varepsilon_a - 500)^{1.2} / \left[1 + (\varepsilon_a/70000)^{0.7}\right] \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \gamma_a^d = & 1 \times 10^{-4} (\varepsilon_a - 90)^{1.2} / \left[1 + (\varepsilon_a/8000)^{1.5}\right] + \\ & + 7.0 \times 10^{-5} (\varepsilon_a - 32)^{1.2} / \left[1 + (\varepsilon_a/2800)^{1.5}\right] \end{aligned} \quad (4)$$

са праговима на којима постоји нека вероватноћа, различита од нуле, да електрон бива избачен са катоду, 500 eV и 90 eV, за чисте и за неочишћене површине, респективно.

3.3. Допринос фотона

Што се тиче фотона, коришћен је још један мањи програм. Овај програм моделује прелазе између нивоа у аргону. Вероватноћа прелазу са k -тог на i -ти ниво је одређена преко Ајнштајнових коефицијената и дата је изразом:

$$W_{k,i} = \frac{A[k \rightarrow i]}{\sum_{j=0}^n A[k \rightarrow j]} \quad (5)$$

Словима i , k и j означени су одговарајући енергијски нивои у аргону. $A[k][i]$ је Ајнштајнов коефицијент који описује спонтану емисију са k -тог на i -ти ниво. Бројилац представља вероватноћу да електрон напусти ниво k , док именилац јесте вероватноћа да електрон пређе са нивоа k на ниво i . Уколико није дозвољен директни прелаз са k -тог на i -ти ниво, већ је могућ једино индиректни прелаз преко нивоа n , тада је вероватноћа за тај прелаз дата изразом (поједностављено):

$$W_{k,i} = W_{k,n} \times W_{n,i}, \quad (6)$$

где су $W_{k,i}$, $W_{k,n}$ и $W_{n,i}$ одговарајуће вероватноће. Да ли је дошло до одговарајућег прелаза између два нивоа одређујемо одабиром случајног броја и упоређивањем истог са одговарајућом вероватноћом прелаза. Уколико је вероватноћа прелаза већа, настаје фотон таласне дужине која одговара енергији прелаза. Укупан број насталих фотоелектрона, електрона насталих од фотона, израчунава се по формули:

$$\text{brojfotoelektrona} = \text{nastalofotona} \times \gamma_{ph}, \quad (7)$$

у којој фигуришу за чисте и неоћишчене површине:

$$\gamma_{ph}^c = \frac{0.0015(360/\lambda - 1)^4}{[1 + (110/\lambda)^{5.5}]} \quad (8)$$

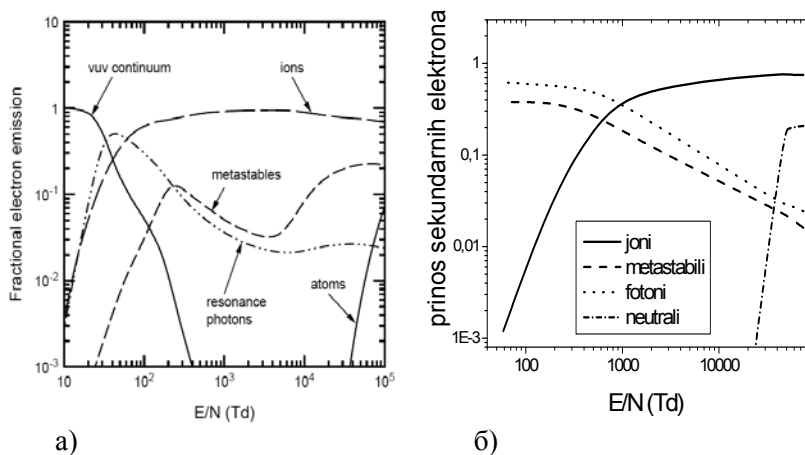
$$\gamma_{ph}^d = \frac{0.13}{[1 + (\lambda/110)^{13}][(35/\lambda)^{3.3} + 1]} \quad (9)$$

3.4 Допринос метастабилна

У овом раду метастабилни су праћени у склопу Монте Карло симулације као посебан тип честица. Продукција метастабилна је укључена преко директног побуђивања на два метастабилна нивоа, путем судара брзог неутрала са честицама позадинског гаса, судара атом-атом и релаксирањем већ побуђених електрона на метастабилно стање. За нестајање метастабилна користили смо два пресека: пресек за *quenching* [11], гашење или нестајање метастабилна, као и пресек за дифузију [11], моментум трансфер пресек.

Када метастабил дође на катоду, вероватноћа да избаци електрон једнака је 0.02 [2]. На овај начин смо одредили број секундарних електрона насталих бомбардовањем катоде метастабилима.

На сликама 1 и 2 дати су симулациони резултати за чисте и неочишћене површине, респективно, упоређени са одговарајућим резултатима из литературе [2]. Као што се може уочити, допринос јона производњи секундарних електрона је значајан на средњим вредностима



Слика 1: Парцијални принос различитих процеса продукцији секундарних електрона на катоди за Ar у пробоју за чисте површине: а) Резултати преузети из рада Phelps и Petrović [2] и б) резултати Монте Карло симулација за чисте површине.

редукованог електричног поља. На ниским вредностима овог поља, примарну улогу у производњи секундара имају резонантни фотони, а на још нижим не-резонантни фотони. На високим вредностима редукованог електричног поља мора се узети и допринос атома у гасној фази при чему су, ове честице, много ефикасније код неочишћених површина, док је утицај метастабилна релативно мали.

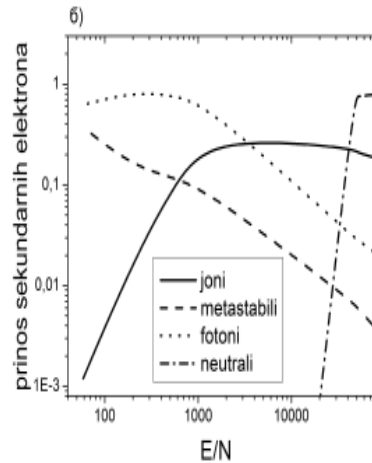
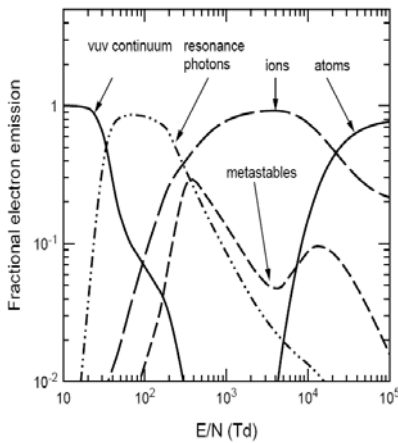
4. МОДЕЛОВАЊЕ ПРОБОЈА У ГАСУ

Коришћење некоректних вредности за принос секундарних електрона доводи до грешака у моделовању различитих карактеристика плазме. То се нарочито огледа у моделовању кривих пробојног напона. Секундарна емисија представља један од кључних процеса који доводе до пробоја. И не само то, секундарне карактеристике површина електрода имају слаб утицај на тзв. десну грану кривих, или на положај минимума, али веома снажно утичу на облик и вредности на левој страни криве пробојног напона.

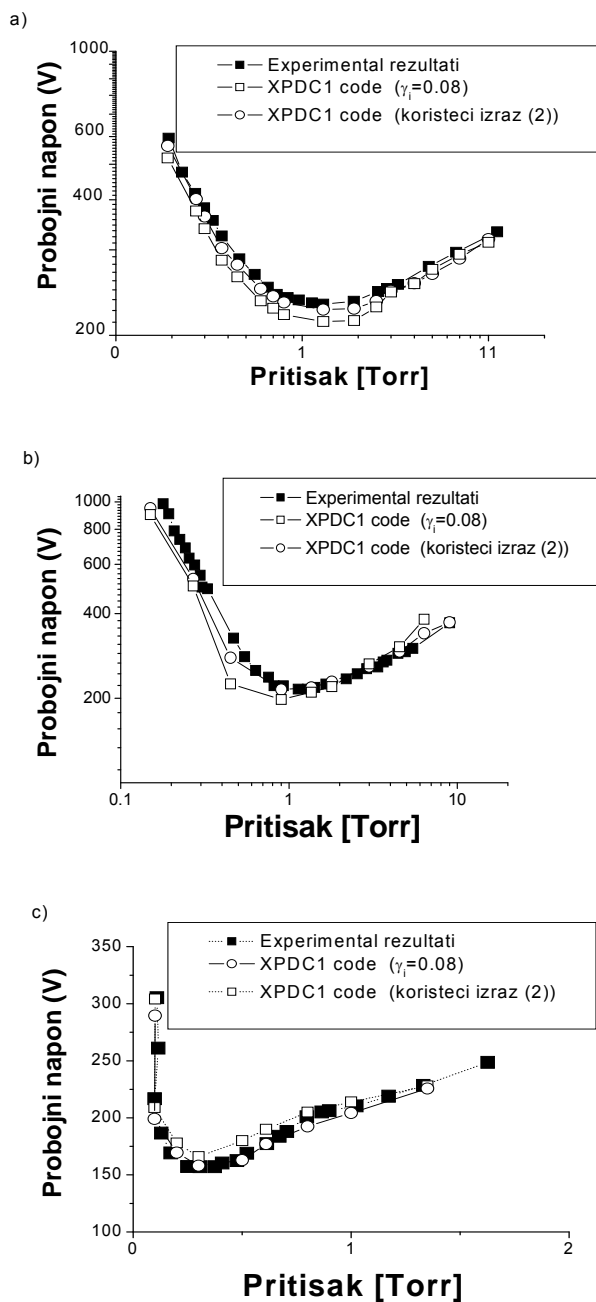
Ми смо моделовали криве пробојног напона у аргону коришћењем различитих модела за принос секундарних електрона [12]. На слици 3 приказана је зависност пробојног напона од притиска гаса, на различитим

вредностима растојања између електрода. Прорачуни су извршени за пражњење са једносмерном струјом у аргону. Резултати симулација су представљени отвореним симболима и упоређени су са експерименталним подацима преузетим из реф. [13] (слике 3а и 3б) и из реф. [14] (слике 3с) (пуни симболи). Прво што се може уочити је то да се резултати симулација добијени коришћењем константне вредности за γ_i (коришћењем претпостављене средње вредности од 0.08 за принос у аргону) (отворени квадрати) добро слажу са резултатима прорачуна добијеним коришћењем енергијске зависности за γ_i (у складу са изразом (2)) (отворени кругови). То се може објаснити чињеницом да претпостављена средња вредност 0.08 за принос у аргону, добро описује кинетику код пражњења са једносмерном струјом. Иако се резултати симулација добијени коришћењем оба модела за секундарну емисију добро слажу са експерименталним резултатима, ипак се може уочити да се имплементацијом енергиске зависности за принос секундарних електрона може остварити много боље слагање са резултатима мерења.

а)



Слика 2: Парцијални принос различитих процеса продукцији секундарних електрона на катоди за Ar у пробоју за неочишћене површин ϵ : а) Резултати преузети из рада Phelps и Petrović [2] и б) резултати Монте Карло симулација за неочишћене површине.



Слика 3: Пробојни напон у зависности од притиска гаса, код пражњења у аргону, на различитим растојањима између електрода: а) 0.9 cm, б) 1.1 cm и в) 2.3 cm резултати прорачуна су представљени отвореним симболима и упоређени са резултатима мерења (пуни симболи).

Овај рад је урађен у оквиру пројекта 141025 које финансира Министарство за науку и технологију Републике Србије.

5. ЛИТЕРАТУРА

- [1] Townsend J. S. (1910), *The Theory of Ionization of Gases by Collision*, Constable, London
- [2] Phelps A. V., Petrović Z. Lj., *Plasma Sourc. Sci. Technol.* 8, R1 (1999)
- [3] Loeb L. B. and Meek J. M. (1941), *The Mechanism of the Electric Spark*, Stanford University, Stanford
- [4] Paschen F., *Annalen der Physik*, **273** 69 (1889)
- [5] Druyvesteyn M. J. and Penning F.M., *Rev. Mod. Phys.* **12** 87 (1940)
- [6] Petrović Z. Lj. , Stojanović V. D., *J. Vac. Sci. Technol. A* (1998) **16** 329.
- [7] Z. Ristivojević and Z.Lj. Petrović, unpublished.
- [8] Hayashi M., *personal communication* (1992)
- [9] Phelps A. V., *J. Appl. Phys.*, **76** 747 (1994)
- [10] Phelps A. V., *Phys. Chem. Ref. Data*, **20** 557 (1991)
- [11] Smirnov B. M. (1981), *Physics of weakly ionized gases*, Mir Publishers: Moscow
- [12] Radmilović-Radjenović M., Petrović Z.Lj., Malović G.N., Marić D., Radjenović B., *C.J. Phys. B*, **56** B996 (2006)
- [13] Lisovskiy V.A., Yakovin S.D., Yegorenkov V.D., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **33** 2722 (2000)
- [14] Kropotov N.Yu., Kachanov Yu.A., Reuka A.G., Lisovskiy V.A., Erorenkov V.D., Farenik V., *Sov. Tech. Phys.Lett.*, **14** 159 (1988)

ИСТРАЖИВАЊА НА СИНХРОТРОНСКИМ ИЗВОРИМА ЗРАЧЕЊА НОВЕ ГЕНЕРАЦИЈЕ

А. Р. Милосављевић³

¹*Лабораторија за атомске сударне процесе, Институт за физику,
Универзитет у Београду, Прегревица 118, 11080 Београд, Србија*

Сажетак. Овај рад садржи прелиминарне резултате везане за фотојонизацију вишеструко протонисаних молекула цитохром с протеина (104 аминокиселина, приближно 12.4 kDa) добијених помоћу електроспреј јонског извора и изолованих у гасном стању помоћу линеарног квадруполног јонског трапа. Резултати су добијени на новом експерименталном систему за спектроскопију јона добијених електроспрејом и заробљених у јонском трапу, коришћењем синхротронског зрачења. Овај рад такође даје и неке основне појмове везане за синхротронска постројења и синхротронско зрачење, као и кратак опис и преглед основних карактеристика новог синхротрона треће генерације – „SOLEIL“ у Француској.

Abstract. The title of this paper is „Research on new generation synchrotron light sources”. The paper presents preliminary results on gas phase photoionization of electrospray-produced multiply protonated cytochrome *c* protein (104 amino acids, ≈ 12.4 kDa), which has been achieved with an experimental system for spectroscopy of electrosprayed ions in the ion trap using synchrotron radiation. The paper also gives some basic information about synchrotron light sources and synchrotron radiation, as well as basic information about the new French third generation synchrotron facility SOLEIL.

1. УВОД

Синхротронско зрачење је данас од огромне важности у веома широкој области фундаменталних и примењених истраживања. Примена синхротронског зрачења показала се изузетно успешном и омогућила значајна достигнућа у областима као што су хемија, физика, биологија,

³ Претходна адреса: *Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Saint Aubin, B.P. 48, 91192 Gif-sur-Yvette, France*

наука о материјалима, медицина и омогућила велики број индустријских апликација. Специфичне карактеристике синхротронског зрачења огледају се пре свега у могућности скановања унутар великог опсега енергије фотона, великој брилијанци (сјају), екстремно високој колимацији фотонског млаза, као и његовој селективној поларизацији и временској структури. Сматра се да је примена нових техника заснованих на коришћењу синхротронског зрачења одиграла кључну улогу у јако израженом развоју неких научних дисциплина, као што су структурна биологија, физика материјала и физика кондензованог стања [1].

Синхротрон представља један од акцелератора чији се рад заснива на коришћењу радиофреквентног (РФ) поља за убрзавање наелектрисаних честица. У суштини, овај уређај се може описати као низ магнета који приморавају наелектрисану честицу (нпр. електрон) да се креће унутар затвореног круга. На једном или више места унутар овог круга, честице пролазе кроз РФ поље одређене фреквенције под чијим дејством добијају убрзање [1]. Енергије електрона у модерним синхротронима су у области GeV, те се они могу сматрати ултрарелативистичким. Дакле, енергија E електрона масе m чија је брзина v , описује се чувеном Ајнштајновом формулом [2]:

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \gamma mc^2 \quad (1)$$

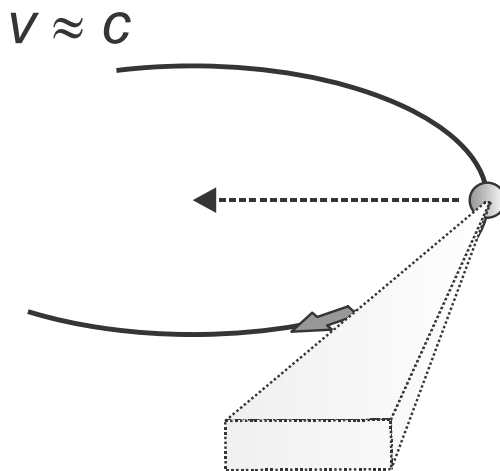
(c – брзина светлости; γ – Ајнштајнов релативистички фактор).

За енергију електрона од, на пример 5 GeV, количник брзине честице и брзине светлости је $v/c \approx 0.999999995$. Треба обратити пажњу на важну чињеницу, која проистиче из једначине (1), да на овако великим енергијама брзина електрона практично представља инваријанту, тј. занемарљиво мало се мења са променом енергије.

Наелектрисана честица која скреће унутар магнетног поља, тј. описује кружну путању са одређеним угаоним убрзањем, продукује електромагнетне таласе, у складу са законима електромагнетизма. Уколико је при томе брзина честице блиска брзини светлости (релативистичка), електромагнетно зрачење се емитује унутар малог просторног угла дефинисаног вектором брзине честице (слика 1) и може имати екстремно високе фреквенције.

Поред синхротронског зрачења које настаје при скретању електрона унутар диполног магнетног поља бендинг магнета који обезбеђују затворену кружну путању наелектрисаних честица у синхротронском прстену („*storage ring*”), модерни синхротрони поседују и велики број додатних извора зрачења, такозваних „убачених“ уређаја („*insertion devices*”) који су постављени унутар правих секција синхротронског прстена. Ови уређаји се састоје од праволинијски постављене периодичне

структуре диполних магнета. Електрон који пролази кроз овако формирано периодично магнетно поље има осцилаторну путању, што доводи до емитовања синхротронског зрачења. Постоје две врсте оваквих уређаја:



Слика 1. Емисија синхротронског зрачења при скретању релативистичке честице унутар диполног магнетног поља

виглери (*wigglers*) и ондулатори (*undulators*). Код виглера је магнетно поље јаче (осцилације веће амплитуде) и добијени спектар зрачења је сличан оном код диполног магнета, само интензивнији. Код ондулатора долази до интерференције таласа произведених при свакој осцилацији, што доводи до врло интензивног квазидискретног спектра зрачења, које се емитује унутар врло малог просторног угла.

Врло важна величина код синхротронског извора је брилијанца (сјај). Ова величина дефинише се као број емитованих фотона у секунди, у одређеном опсегу енергије фотона, по јединици просторног угла и површине извора [1]. Ова величина одређује колико ефикасно интензиван флуks фотона може да се фокусира на малу површину и са малом дивергенцијом.

Прва опсервација синхротронског зрачења остварена је 1947. године у *General Electric Research Laboratory, New York*, при пуштању у погон једног од првих синхротрона коришћених као честичних акцелератора [3]. Овај ефекат представља негативну појаву у физици акцелератора јер односи део енергије која се уноси у систем у циљу убрзавања честица. Тек више од десет година касније почело је са првим пројектима, конкретно везаним за коришћење синхротронског зрачења. Прву генерацију синхротрона, дакле, представљају паразитске активности на неким од тада постојећих машина конструисаних у циљу постизања великих сударних енергија честица. Тек друга генерација означава наменски конструисана постројења у циљу добијања и експлоатације синхротронског зрачења (једни од првих су: *SRS, Daresbury, UK (1981)*; *NSLS, Brookhaven, USA (1981)*; *Photon factory, Tsukuba, Japan (1982)*; *BESSY, Berlin, Germany*

(1982); *SuperACO, LURE, Orsay, France (1984)*). Трећа генерација синхротрона су извори конструисани за добијање високе брилијанце. Ово су физички велике машине са дугачким правим секцијама које омогућују уметање дугачких ондулатора.

Огроман број фотона по јединици времена, који се може колимисати и фокусирати унутар врло мале запремине, омогућује широку област примене синхротрона треће генерације и истраживања која раније нису била могућа. Један пример оваквог истраживања је дат у овом раду и односи се на коришћење вакуум ултравиолетног (VUV) синхротронског зрачења за спектроскопију јона великих биополимера (протеина, ДНК, ...) заробљених у јонском трапу.

2. Синхротронско постројење „SOLEIL“

Синхротрон SOLEIL – Source Optimisée de Lumière d’Energie Intermédiaire du LURE (француски: soleil – сунце) је ново француско синхротронско постројење треће генерације, које представља једну велику мултидисциплинарну истраживачку лабораторију [4]. SOLEIL се налази око 20 km југозападно од Париза (слика 2). Његов „*storage ring*“ је обима 354 m, са номиналном енергијом електрона од 2,75 GeV [5]. Максимална планирана струја електрона у рингу је 500 mA, док је тренутна номинална струја 400 mA. Синхротрон номинално ради у такозваном „*top-up*“ моду, што значи да се електронски пакети изнова убацују („*re-injection*“) у ринг сваких неколико минута како би се интензитет струје одржавао константним унутар $\pm 5\%$ од номиналне вредности. То обезбеђује практично константан фотонски флуks током рада. Средњи притисак у рингу је реда 5×10^{-10} mbar. При конструкцији синхротрона, посебна пажња је обрађена на постизање високе механичке и термалне стабилности, што обезбеђује и стабилан фотонски млаз при нормалним условима рада.

Укратко, SOLEIL синхротрон функционише на следећи начин [4]: 1) млаз електрона се у пакетима емитује помоћу електронског топа и убрзава помоћу 16 m дугачког линеарног акцелератора (LINAC) до енергије од 100 MeV; 2) након овог иницијалног убрзања, електронски млаз се убацује у мањи циркуларни акцелератор (BOOSTER) који подигне енергију електрона на оперативну вредност синхротрона једнаку 2,75 GeV; 3) електронски млаз се затим убацује у већи синхротронски прстен (STORAGE RING) обима 354 m, где кружи сатима; 4) синхротронско зрачење које се производи при проласку млаза кроз диполне магнете или ондулаторе се даље усмерава у линије за истраживања (BEAMLINES) које су постављене по тангенти у односу на прстен и представљају експерименталне станице које користе синхротронско зрачење за различите врсте истраживања. Енергија коју електрони губе у облику зрачења надокнађује се при проласку кроз резонантно РФ поље. SOLEIL „*storage ring*“ поседује 4x12 m, 12x7 m и 8x3,5 m правих секција које омогућују уметање виглера и ондулатора.



Слика 2. SOLEIL синхротронско постројење.
(GIF-sur-YVETTE CEDEX, France; <http://www.synchrotron-soleil.fr>)

SOLEIL синхротрон тренутно поседује 27 линија (*beamlines*) које раде или су у завршној фази конструкције. Свака линија је специјализована, пре свега, према опсегу енергије фотона у коме ради. Синхротрон SOLEIL покрива област енергија $\approx 4 \times 10^{-4} \text{ eV} - 1 \times 10^5 \text{ eV}$, односно $\approx 3 \text{ nm} - 0.012 \text{ nm}$, дакле, од далеког инфрацрвеног до тврдог X зрачења [6]. Свака линија се може користити за једну или више аналитичких техника, као што су дифракција и расејање X зрачења, спектроскопија, микроскопија итд. У овом раду биће показани прелиминарни резултати добијени на DESIRS линији, која је намењена раду у VUV области енергија.

3. VUV СПЕКТРОСКОПИЈА ЈОНА БИОПОЛИМЕРА ИЗОЛОВАНИХ У ЈОНСКОМ ТРАПУ

3.1. Увод – изазови и претходни резултати

Истраживање протеина или других великих биополимера изолованих у гасној фази, тако да нису под утицајем других молекула и јона у раствору, пружа могућност разумевања неких њихових фундаменталних молекулских особина. Међутим, коришћење вакуум ултраљубучастог (VUV) зрачења за спектроскопију јона заробљених у јонском трапу је тешко остварити и представља експериментални изазов. Разлог за ово је ограничен број јона који се ефикасно могу заробити у трапу због њиховог

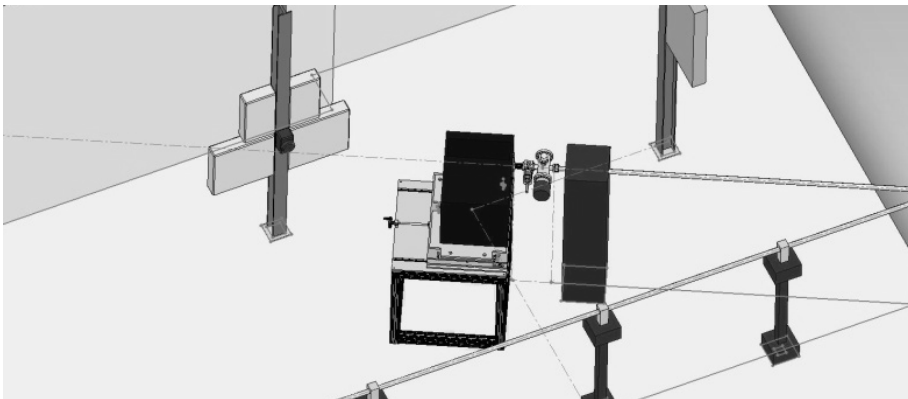
међусобног електростатичког одбијања („*space charge effect*“), као и ограничен флуks фотона који дају извори у овој области енергија. На синхротрону ELETTRA у Италији је 2006. године први пут показана изводљивост експеримента упаривања једног јонског трапа (FTICR) и синхротронског меког X зрачења [7]. Треба, међутим, рећи да су добијени веома мали сигнали који су захтевали дуготрајну аквизицију података како би се постигла иоле задовољавајућа статистика. Упаривање тродимензионог квадруполног јонског трапа са VUV синхротронским млазом и VUV спектроскопија негативних биополимера добијених електроспреј извором је први пут изведено на DESIRS линији SOLEIL синхротрона 2008. године [8]. Међутим, и код овог експеримента је сигнал мерених јонских фрагмената био врло мали, што је онемогућило рад са монохроматизованим синхротронским млазом, као и спектроскопију позитивних јона.

У овом раду представљени су прелиминарни резултати експерименталног истраживања фотојонизације вишеструко протонисаних молекула цитохром *c* протеина (104 аминокиселине, приближно 12,4 kDa) у гасном стању, добијених помоћу електроспреј извора и заробљених у јонском трапу. Мерења су урађена на новом систему за спектроскопију јона биополимера добијених електроспрејом, користећи синхротронско зрачење. Овај систем омогућио је по први пут спектроскопију како негативних тако и позитивних јона добијених електроспрејом и изолованих у линеарном квадруполном јонском трапу, и то коришћењем монохроматизованог фотонског млаза високе енергијске резолуције.

3.2. Опис експерименталног система

Експериментални систем за спектроскопију јона у трапу је монтиран на DESIRS [9] линију SOLEIL синхротронског постројења (слика 3). Зрачење које производи DESIRS ондулатор омогућује мерења у области енергије фотона од 4 eV до 40 eV, док је у овом експерименту коришћен само опсег од 4 eV до 20 eV. Таласна дужина зрачења селектована је помоћу монохроматора, при чему је коришћена решетка 200 gr mm^{-1} која обезбеђује велики флуks фотона ($10^{12} - 10^{13} \text{ photons/s}$), са типичном резолуцијом од 12 meV на енергији фотона од 10 eV, када је ширина излазног прореза (*exit slit*) 200 μm . Виши хармоници ондулаторског зрачења у фотонском млазу одстрањени су коришћењем гасног филтера, односно MgF_2 или супрасил прозора на нижим енергијама.

Основа експерименталног система је комерцијални линеарни квадруполни јонски трап (“*Thermo scientific LTQ XL*”), који укључује и електроспреј јонски извор (слика 4). Јони протеина у гасном стању се добијају из раствора ($\text{H}_2\text{O}/\text{ACN} - 75/25$) помоћу електроспреј извора и уводе са предње стране спектрометра у дводимензиони јонски трап (слика 5, лево) системом мултиполних сочива [10]. Запремина заробљених јона има цилиндрични облик што омогућује боље преклапање са синхротронским млазом, у односу на претходно коришћење тродимензионе трапове [7,8]. Млаз фотона се уводи у трап са задње стране



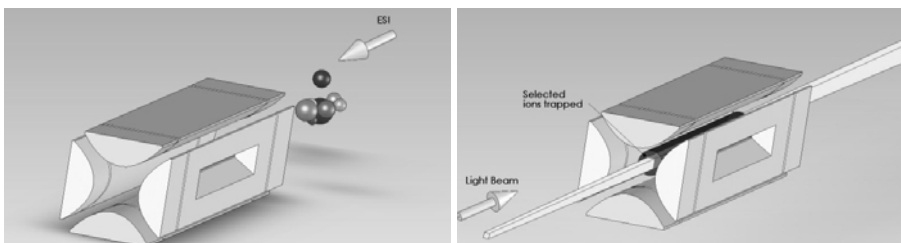
Слика 3. Монтажа масеног спектрометра „LTQ XL (Thermo Scientific)“ на DESIRS линију SOLEIL синхротронског постројења

спектрометра (слика 5, десно). Посебно конструисан механички систем омогућава фино подешавање позиције спектрометра у односу на млаз и тиме што боље преклапање са простором у коме се налазе јони. Такође је посебно дизајнирана и вакуумска станица са турбомолекуларном пумпом, која повезује комерцијални масени спектрометар (10^{-5} mbar) и синхротронску линију (10^{-8} mbar), чиме омогућује акомодацију разлике притисака. Ова станица такође укључује додатне елементе као што су прозор од супрасила за додатно филтрирање виших хармоника фотонског млаза, фотодиоду за калибрацију флукса зрачења у функцији енергије и ре-



Слика 4. Масени спектрометар „LTQ XL - Thermo SCIENTIFIC“

гулатор периода озрачивања (*beam shutter*). Оригиналан дизајн овог регулатора, са малим ротационим електромотором унутар вакуумске коморе, омогућује врло кратко и репродуцибилно време „одсецања“ млаза (око 1 ms), као и поуздан, дуг рад под условима високог вакуума.

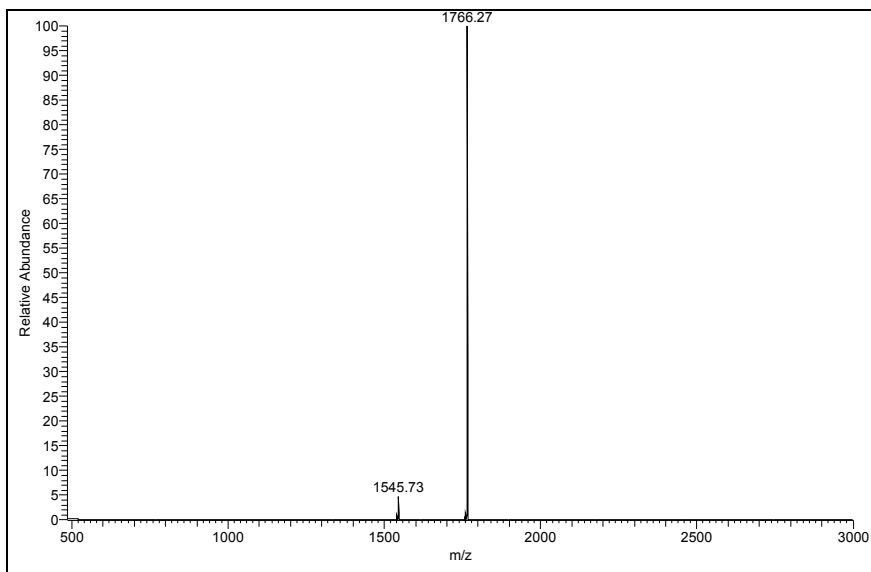


Слика 5. Линеарни квадруполни јонски трап. Јони добијени електроспрејом уводе се са предње стране (слика лево), док се фотонски млаз уводи са задње стране (слика десно)

3.3. Прелиминарни резултати за јонизацију протеина

Могућност и механизам јонизације великих молекула је дискутована ранијих година. Schlag и коаутори су у свом раду [11] сугерисали да интензитет јонизације молекула драстично опада са повећањем његове масе. Ова ефикасност би додатно требала да буде умањена у случају вишеструко наелектрисаних позитивних јона, због постојања Кулонове баријере. Први експериментални резултати који се односе на електронску јонизацију великих молекула (вишеструко протонисани пептиди молекулских маса до око 3,5 kDa) публиковани су почетком 2000-их у групи Романа Зубарева [12,13]. Међутим, колико је нама познато, фотојонизација великих молекула масе преко 10 kDa није досад објављена.

У овом раду, дати су прелиминарни резултати који показују веома



Слика 7. Електроспреј/фото-активациони тандем масени спектар цитохром ц протеина добијен након времена озрачивања од 80 ms, фотонским млазом енергије 15,5 eV. Доминантна линија на око 1766 одговара $[M+7H]^{7+}$ прекурзору изолованом у трапу

ефикасну фотојонизацију вишеструко протонисаног јона цитохром *c* протеина ($\approx 12,4$ kDa). На слици 7 приказан је тандем масени спектар снимљен након око 80 ms озрачивања 7 пута протонисаних јона цитохром *c* протеина $[M+7H]^{7+}$, који су изоловани у јонском трапу, фотонским млазом енергије 15,5 eV. Поред линије на око $m/z=1766$, која одговара прекурсор јону $[M+7H]^{7+}$, јасно се може видети и линија на око $m/z=1546$, која одговара радикалу, позитивном јону $[M+7H]^{\bullet 8+}$, формираном фотојонизацијом $[M+7H]^{7+}$ прекурсора.

4. ЗАКЉУЧАК

У овом раду дати су неки основни појмови везани за синхротронска постројења и синхротронско зрачење, као и кратак опис и преглед основних карактеристика новог синхротрона треће генерације – “SOLEIL” у Француској.

Као пример нових истраживања која ефикасно могу да се обаве на синхротронима нове генерације описан је нови експериментални систем за спектроскопију јона добијених електроспрејом и заробљених у јонском трапу, коришћењем синхротронског зрачења. Овај рад такође садржи и неке прелиминарне, колико је нама познато јединствене резултате, везане за фотојонизацију вишеструко протонисаних молекула цитохром *c* протеина.

ЗАХВАЛНИЦА

Развој система за спектроскопију јона изолованих у трапу помоћу синхротронског зрачења је финансиран од стране „Agence Nationale de la Recherche Scientifique, France“, у оквиру пројекта ANR-08-BLAN-0065. Такође, захваљујемо се за помоћ од стране господе Jocelyn Dupuis (Thermo Scientific, France) и August Specht (Thermo Scientific, USA). Захваљујемо се такође и установи „SOLEIL Synchrotron Radiation Facility“, где су урађена мерења. Посебно се захваљујем доктору Александру Ђулијанију (dr Alexandre Giuliani) који ме је позвао да учествујем на ANR-08-BLAN-0065 пројекту. Велику захвалност дугујем и колегама са линије DISCO: Matthieu Réfrégiers, Frank Wien, Frédéric Jamme, Valérie Rouam, Lavanya Premvardhan, линије DESIRS: Laurent Nahon, Gustavo Garcia, Nelson de Oliveira, Jean-François Gil, као и Christophe Nicolas (PLEIADES) за веома корисну дискусију и велику помоћ током мог рада на SOLEIL синхротрону. Најзад, захваљујем се Братиславу Маринковићу на подршци током овог рада, као и за помоћ од стране Министарства за науку и технолошки развој, у оквиру пројекта 141011.

ACKNOWLEDGEMENTS

Development of the system for spectroscopy of trapped ions by use of synchrotron radiation has been supported by the Agence Nationale de la Recherche Scientifique, France, under the project ANR-08-BLAN-0065. We also gratefully acknowledge the help of Jocelyn Dupuis from Thermo Scientific, France and August Specht from Thermo Scientific, USA. We acknowledge the SOLEIL Synchrotron Radiation Facility for providing beamtime. I am particularly grateful to Dr. Alexandre Giuliani (DISCO) for his invitation to participate the ANR-08-BLAN-0065 project. Also, I would like to acknowledge a very useful discussion and help from the colleagues from DISCO beam line: Matthieu Réfrégiers, Frank Wien, Frédéric Jamme, Valérie Rouam, Lavanya Premvardhan, DESIRS beamline: Laurent Nahon, Gustavo Garcia, Nelson de Oliveira and Jean-François Gil, as well as Christophe Nicolas (PLEIADES). I am also grateful to Bratislav Marinković from IP Belgrade for his support during this work and I acknowledge support by the Ministry of Science and Technological Development of Republic of Serbia under Project No. 141011.

5. ЛИТЕРАТУРА

- [1] Bilderback D. H., Elleaume P. and Weckert E., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **38**, S773–S797 (2005).
- [2] Einstein A., *Ann. Phys.*, **17**, 891 (1905)
- [3] <http://xdb.lbl.gov/>
- [4] <http://www.synchrotron-soleil.fr/>
- [5] <http://www.synchrotron-soleil.fr/portal/page/portal/SourceAccelérateur/ParamètresPrincipaux>
- [6] <http://www.synchrotron-soleil.fr/images/File/recherche/ligneslumiere/gamme-NRJ-A.pdf>
- [7] Thissen R, Bizau J M, Blancard C, Coreno M, Dehon C, Franceschi P, Giuliani A, Lemaire J and Nicolas C, *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 223001 (2008)
- [8] Giulliani A, Scuderi D, Lemaire J, Dehon C, Thissen R, Nicolas C, Dufлот D, Maitre P and Nahon L, *Proc. 57th ASMS Conf.*, Philadelphia (2009)
- [9] <http://www.synchrotron-soleil.fr/Recherche/LignesLumiere/DESIRS>
- [10] Shwartz J C, Senko M W, Syka J E P, *J. Am. Soc. Mass. Spectrom.*, **13**, 659 (2002)
- [11] Schlag E, Grottemeyer J and Levine R D, *Chem. Phys. Lett.* **190**, 521 (1992)
- [12] Budnik B A and Zubarev R A, *Chem. Phys. Lett.* **316**, 19 (2000)
- [13] Budnik B A, Tsubin Y O, Håkansson P and Zubarev R A, *J. Mass. Spectrom.*, **37**, 1141 (2002)

**Спектралне линије као алат за
истраживање у физици и астрофизици**

АНАЛИЗА КИНЕМАТИЧКИХ КАРАКТЕРИСТИКА ПЛАЗМЕ У ЦЕНТРАЛНИМ ДЕЛОВИМА АКТИВНИХ ГАЛАКСИЈА НА ОСНОВУ ЕМИТОВАНОГ СПЕКТРА

*Е. Бон, Н. Бон. и Л. Ч. Поповић
Астрономска опсерваторија, Волгина 7,
11060 Београд, Србија*

Сажетак. Присуство диска у емисионим линијама са једним пиком је веома тешко детектовати. У ту сврху развијен је метод за процену присуства зрачења диска у широким емисионим линијама код активних галактичких језгара. Развијен је двокомпонентни модел, који се састоји од емисије акреционог диска и околне области са изотропном расподелом брзина емитера. Анализирана су два узорка и добијени су слични резултати који указују да је код профила са једним пиком доминантнији допринос околног рагиона, али да је утицај диска у укупном флуксу линије упоредив, и не сме се тек тако занемарити. Добијено је да су инклинације диска релативно мале, са вредностима између 10 и 25 степени.

Abstract. Presence of the disk emission in the profiles of single peaked emission lines of active galaxies is hard to detect. For that reason, we developed a method for estimation of the disk flux in broad emission lines of active galaxies. We developed the two-component model containing of an accretion disk emission and emission of surrounding region with isotropic velocities of emitters. We tested the model on two different samples and got similar results, where we showed that the surrounding region is more dominant, but the disk flux was comparable, and must not be neglected. The region inclinations of the disk were relatively small with the values between 10 and 25 degrees.

1. УВОД

Око 10% укупног броја галаксија чине оне које су класификоване као активне. Међутим, још увек нема прецизне дефиниције шта се сматра активном галаксијом. Постоји велики број класа и подкласа активних галактичких језгара (АГЈ), које су временом увођене на основу разлика у карактеристикама зрачења (и ако те разлике нису довољно прецизно дефинисане). Тако на пример, неке Сејферт галаксије могу да имају већи

апсолутни сјај од неких квазара, тако да су ова два типа активних галактичких језгара готово истих карактеристика и да их класификујемо само на основу сјаја, при чему су квазари већег апсолутног сјаја од Сејферт галаксија. Ако би се Сејферт галаксије налазиле на већој космолошкој раздаљини, онда би биле класификоване као квазари. Дакле, први корак у унификацији је да су Сејферт галаксије заправо блиски квазари, али у већини случајева са мањом луминозношћу. Широко је распрострањено мишљење да огромни сјај активних галаксија и квазара заправо, потиче од зрачења из акреционог диска формираног око супермасивне црне рупе, која својом гравитацијом условљава да се гас, који пада у њу, убрзава до великих брзина и при томе емитује снажно зрачење. Једна од важних карактеристика ових објеката су широке емисионе линије у ултраљубичастом и видљивом делу спектра. Ове широке линије садрже информацију о кинематици и структури гаса централних региона ових галаксија.

АГЈ често карактерише појачана емисија диска у УВ и оптичком делу спектра, са израженим емисионим линијама, које могу бити веома проширене или мање проширене. Код проширених линија су такође присутне и уске компоненте, па су на основу међусобних јачина уских и широких компоненти у профилима емисионих линија, уведене подкласе активних галаксија, као што је већ описано раније (више о томе у [1], [2], [3], [4], [5] и [6]). Детаљнија студија о широколинијској области и могућим физичким, кинематичким или геометријским условима који ту област описују, дата је у раду [7].

Најзначајније сличности и различитости широких линија код активних галаксија могу се установити поређењем карактеристика као што су ширине линија, померај линије у односу на црвени помак саме галаксије, облик и асиметрија линија и слично ([8], [9], [10], [11]). Широке линије се разликују и у зависности од нивоа јонизације. Детаљна проучавања широких профила зависе од могућности да се издвоји чист (непрекривен другим линијама) профил саме широке компоненте, па се зато прво отклањања континуум, моделирају и отклањају оптичке (FeII) и ултраљубичасте јонизоване линије (FeII). Такође се отклањају уске компоненте линије, као и друге уске линије суперпониране на проширене профиле. Овако очишћени профили се моделирају разним геометријама широколинијског региона.

Постоји више модела којима је могуће описати широке линије у спектрима АГЈ:

- емисија акреционог диска ([12], [13]),
- емисија супротно усмерених млазева ([14], [15]),
- емисија убрзавајућег млаза материје [16],
- емисија из сферног система облака са случајно распоређеним кеплеровским орбитама [17],
- емисија двојне или вишеструке црне рупе у самом средишту АГЈ ([18], [19] и [20]).

Полазећи од претпоставке да је ротација акреционог диска одговорна за облик широких емисионих линија у спектрима активних галаксија и

квазара, дошло се до идеје да се теоријским моделом зрачења диска могу фитовати емисионе линије, и тако добити динамички параметри који описују стање, расподелу и кретање материје у диску. Постоје разни теоријски модели акреционих дискова као на пример, модел развијен за радио-галаксију 3C 390.3 ([21] и [22]), затим за Ayr 102B ([12] и [13]), за Сејферт галаксију Akn 120 [23], али и неки општи модели ([24] и [25]).

1. ДВОКОМПОНЕНТНИ МОДЕЛ ЕМИСИЈЕ ШИРОКОЛИНИЈСКЕ ОБЛАСТИ

У последњих неколико година, аргументи који подржавају присуство додатне компоненте око акреционог диска, као нпр. ветра из акреционог диска, такође успевају да објасне и многе друге феномене, као што су апсорпција у UV и Рендгенском-подручју спектра, облик емисионе линије, резултате реверберационог мапирања, као и још неке друге разлике између Сејфертових галаксија, квазара, широколинијских радио-галаксија (погледати [26]). Зато, смо увели модел са две кинематички различите области (диск + околни регион) које могу представљати вероватну конфигурацију широколинијске области. За овакав модел може се очекивати да су Балмерове линије јако асиметричне из више могућих разлога, попут постојања померених апсорпционих и емисионих линија из различитих области, систематског кретања гаса у ветровима или асиметрије која потиче због зрачења из самог диска. Овакви ефекти уочени су код објеката који имају изражено плаво крило у високојонизованој линији CIV $\lambda 1549$ [7] или код неколико усколинијских Сејфертових галаксија типа 1, које имају плаву асиметрију у крилима [ОП] $\lambda\lambda 4959, 5007$ линија ([27], [28]).

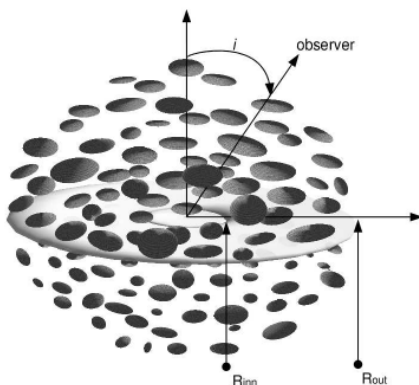
Уопштено речено, проширене емисионе линије могу бити подељене у две компоненте, једну која указује на постојање области из које потичу веома проширене линије (VBLR⁴) и области са умеренијим брзинама емитујућег гаса (ILR⁵). Наравно, различите геометрије могу бити узете у обзир за оба региона (видети нпр. [29]). Овде је узето у обзир да VBLR има дисколики облик, док ILR одговара околном региону који окружује диск, са изотропном расподелом брзина. Емисија из оваквих региона би одговарала профилима линија проширених због доплеровског ширења, па би одговарајући профил ових линија био Гаусијан. Овакав модел је представљен на слици 1.

Ово је указивало на структуру широколинијске области која је конзистентна са студијама о променљивости интензитета широких линија код Сејфертових галаксија (видети нпр. [30]). Просечно мање вредности за пуну ширину на половини висине (FWHM⁶) код ултраљубичастих емисионих линија упоређене са вредностима код H β указују на то да ILR

4 Енг. :Very Broad Line Region

5 Енг. :Intermediate Broad Line Region

6 Енг. :Full Width at Half Maximum



Слика 1. Двокомпонентни модел широколинијске области, код кога емисија једним делом потиче из акреционог диска, док други део потиче из околне области са изотропном расподелом брзина облака гаса [32].

емисија доприноси више у ултраљубичастим линијама, док VBLR доприноси више профилима Балмерових линија. Ово је такође случај код добро познатих АГЈ код којих су присутни емисиони профили са два пика, где је обично присутан профил Ly_α линије са једним пиком (видети нпр. случај Agn 102B [31]).

Крила проширених емисионих линија указују на постојање више од једне кинематички различите широколинијске области. Такође, код истраживања физичких услова у широколинијској области [33], нађена је индикација да је структура широколинијске области веома комплексна и да су региони који доприносе центру и крилима линије, вероватно различити. Многи аутори користили су разне врсте двокомпонентних модела, таквих да једна компонента модела доприноси централној компоненти профила линија са умереним ширинама (ILR), док друга веома широка компонента доприноси крилима линије (VBLR). Недавна истраживања су показала да геометрија диска може бити прихваћена као реалност у моделирањима веома проширеног емисионог региона (VLBR) (видети на пример [36] и [37]). Штавише, Ераклеус и Халперн су нашли да емисија диска добро описује профиле линија са два пика, али уједно и омогућава објашњење осталих особина оваквих АГЈ [37].

У овом раду двокомпонентни модел је развијан са следећим поставкама и карактеристикама:

- димензије диска изражене су у гравитационим радијусима (R_G).
- Параметар локалног ширења (σ), дефинисан је на основу тога што је δ -функција у извођењу емисије диска у моделу замењена гаусовском функцијом: $\delta \rightarrow \exp(-(\lambda - \lambda_0 - z_l)^2 / 2\sigma^2)$, где су z_l и σ померај и параметар ширења линије емисије из диска,
- помак (z_l) унутар диска је узет у обзир као у [12], [38], [39] и [40].

Околна емисиона области описана је као регион са изотропним брзинама, са параметром локалног ширења w_G и померајем z_G , па је на основу тога, профил ове емисије дат Гаусијаном.

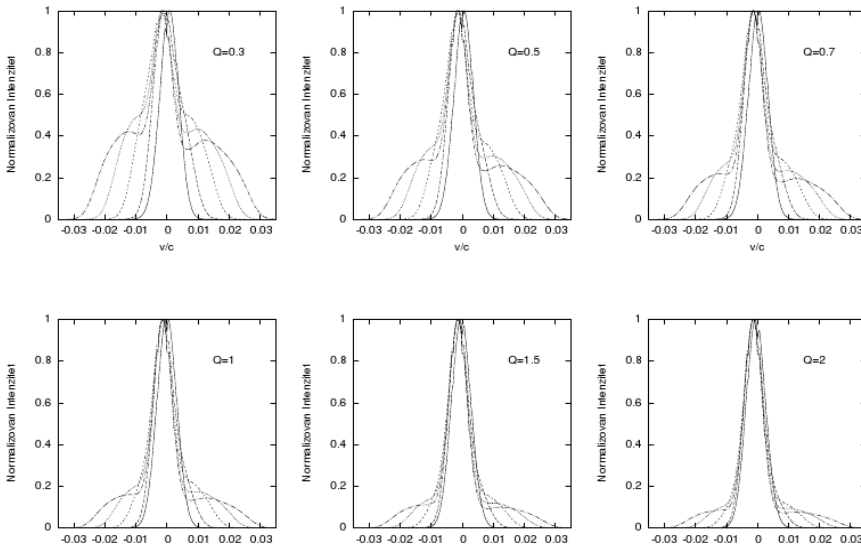
Профил линије се добија из:

$$I(\lambda) = I_{AD}(\lambda) + I_G(\lambda),$$

где су $I_{AD}(\lambda)$, $I_G(\lambda)$ емисије са акреционог диска и околног региона, редом.

Параметре за овакав модел је јако тешко одредити, како због великог броја слободних параметара, тако и због широког интервала у коме вредности параметара могу да се крећу. Да би ограничили број слободних параметара, као и интервал у коме се вредности параметара крећу, прво је урађено фитовање узорка од 14 галаксија двокомпонентним моделом ([29],[34],[32],[41]), где су сви параметри слободни.

Симулирани су профили за разне вредности параметара двокомпонентног модела, за разне вредности параметара диска и за различите вредности односа флукса двеју области, околног региона (F_S) и диска (F_D) су представљени на сл. 2.



Слика 2. Профили емисионих линија симулирани двокомпонентним моделом за различите параметре инклинације диска ($i = 1^\circ, 10^\circ, 20^\circ, 40^\circ$ и 60° , од најужег ка најширем профилу, редом), за параметре диска узето је да је унутрашњи радијус $R_{inn} = 400R_g$ и спољашњи радијус $R_{out} = 1200R_g$ и различите односе флукса диска и околне области $Q = F_S/F_D$, што је означено на свакој од слика (преузето из [32]).

Из ових симулација закључено је следеће [32]:

(i) да би се детектовала емисија диска из широколинијске области, однос емитованих флукса из околне области и диска треба да је $Q < 2$. У

случају профила код којих емисија диска значајно доприноси укупном профилу ($Q < 0.3$), детекција присуства диска се своди на уочавање два доминантна пика, те се фитовање профилом емисије диска може директно применити,

(ii) у случају посматрања директно на диск, односно нормално на површину диска, емисија диска производи малу асиметрију профила, у односу на гаусовску функцију, тако да врх профила бива померен мало у црвено, па је тешко детектовати присуство диска у оваквим случајевима, јер се он веома мало разликује од гаусовског профила,

(iii) допринос емисије диска зависи највише од инклинације и односа флуkseва ових емисионих области Q ,

(iv) на основу симулираних профила (за случајеве када је гаусовски профил фиксиран за систематски помак галаксије), мерена асиметрија је углавном позитивна $A_i > 0$ (изузев у случајевима јако малих инклинација), па се у овом смислу асиметрија може употребити при детектовању емисије диска.

Да би се нашле мерљиве вредности, које би се могле употребити за поређење симулираних профила са посматраним, реалним профилима, упоређивани су следећи параметри [32]:

i) Флуks диска (F_d) и флуks околног региона (F_s) и њихови удели у укупном флуksу линије (F_{tot}), уз претпоставку да само ова два регионадоприносе профилу емисионе линије. Праћене су промене односа флуkseва:

$$Q = F_s / F_d$$

где је укупни флуks (F_{tot}):

$$F_{tot} = F_s + F_d = (1 + Q) F_d .$$

Профил линије је конструисан као сума профила (сабирањем интензитета на разним таласним дужинама):

$$I_{tot}(\lambda) / F_d = I_d(\lambda) / F_d + Q \cdot I_s(\lambda) / F_s$$

где је $I(\lambda)$ интензитет у функцији таласних дужина. Да бисмо могли да упоређујемо профиле, извршено је њихово нормализовање на јединицу као:

$$\mathfrak{I}(\lambda) = I_{tot}(\lambda) / I_{tot}^{max}$$

где је I_{tot}^{max} максимални интензитет укупног профила линија.

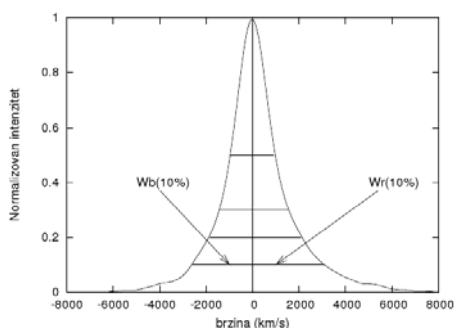
ii) За конструисан профил линије $\mathfrak{I}(\lambda)$ мерене су пуне ширине профила на 10%, 20%, 30% и 50% максимума интензитета, односно $w_{10\%}$,

$w_{20\%}$, $w_{30\%}$ i $w_{50\%}$. Затим су дефинисани коефицијенти k_j ($j = 10, 20, 30$) нормализовани на вредност пуне ширине на половини максималне висине (FWHM), као $k_{10} = w_{10\%}/w_{50\%}$, $k_{20} = w_{20\%}/w_{50\%}$ и $k_{30} = w_{30\%}/w_{50\%}$. Очигледно је да коефицијенти k_j зависе од параметра Q као и параметара диска.

iii) Мерена је и асиметрија (A_j) на $j = 10\%, 20\%, 30\%$ i 50% од максимума интензитета за симулиране, као и за реалне профиле, као:

$$A_j = \frac{w_j^R - w_j^L}{w_{50}}$$

где су w_j^R i w_j^L ширине црвене и плаве стране на висинама $j = 10\%, 20\%$ i 30% максимума интензитета, редом.



Слика 3. Широка компонента H_α линије код SDSS J1025+5140. На слици су означена мерења полу-ширина w_j^R и w_j^L , за $j = 10\%, 20\%, 30\%$ и 50% максималног интензитета.

Прво су измерене вредности код симулираних профила, па су формирани коефицијенти k_j на основу којих је конструисана мрежа модела као функција коефицијената ($\Phi(Q, k_j)$), затим су мерења реалних профила убацивана у мрежу добијену помоћу симулираних профила, и на основу ове мреже, очитаване су могуће вредности инклинације i , као и коефицијента односа флуксева Q , како би се одредио могући интервал параметара за двокомпонентни модел.

Модел диска обухвата више параметара (величину емитирујућег региона, емисивност средине, инклинацију диска, случајне брзине емитера у елементима диска). Такође, околни регион има неколико параметара који га дефинишу у оквиру модела (њему одговарајући Гаусијан је дефинисан са три параметра, интензитетом, померајем и ширином). Да би било могуће урадити нумеричке симулације, уводе се нека ограничења и апроксимације. Доплеровска ширења због локалних флуктуација у диску, као и због случајне расподеле брзина у околној области су међусобно повезани (видети више у [29] и [34]), односно веће брзине флуктуација у диску, повлаче веће случајне брзине у околном региону. На основу тога,

као прва апроксимација узето је да су ове брзине једнаке. Вредност им је фиксирана на 1000 km/s као средња вредност овог параметра при фитовању емисионих линија АГЈ (погледати [29] и [34]). Ово је у сагласности са другим студијама, у којима је нађено да је вредност параметра ширења у диску била реда величине 1000 km/s (видети нпр. [35]).

Разматран је широк опсег параметара диска, али се при том водило рачуна о неколико ограничења:

i) Инклинација диска утиче на количину флукса диска у линији. Посматрани флукс диска (F_d) је пропорционалан површини диска (S_d), и то на следећи начин: $F_d \sim S_{ef} \sim S_d \cdot \cos(i)$, где је i инклинација диска, а S_{ef} је ефективна емитујућа површина диска. Стога, није за очекивати да се добије велики удео диска у укупном флуксу, у случају ако диск видимо из перспективе ивице диска.

ii) Како је унутар $100 R_g$ од централне црне рупе температура плазме веома велика, онда из овог региона не треба очекивати емисионе линије нискојонизованих емитера, па из тог разлога ограничавамо параметар унутрашњег радијуса диска на $R_{inn} > 100 R_g$, тј. могуће је применити модел [13]. Модел је тестиран за вредности унутрашњег радијуса у интервалу од 100 до $1000 R_g$, и при тестирању показало се да за вредности мање од $300 R_g$ оваква анализа није била довољно осетљива, па је за даљу анализу параметар фиксиран на $R_{inn} = 400 R_g$, као средња вредност за овај параметар из фитовања и $R_{inn} = 600 R_g$ као средња вредност из резултата Ераклеуса и Халперна [35].

iii) Што се тиче фита линија са два пика за неколико АГЈ, добијене вредности коефицијената емисивности су се нашле у интервалу $p \sim 1.5-5$ [37], где је у највећем броју случајева та вредност била $p = 3$, па како за разне вредности овог параметра код овде анализираних нормализованих профила, разлике нису значајне, онда смо усвојили вредност $p = 3$, као константу у свим даљим анализама.

iv) Претходне оцене услова који доводе до настанка линија са два пика код АГЈ ([21], [13], [12],[42], [43], [37], [44], [45], [46], [47], [48], [49] и [50]) указују да су типичне димензије акреционог диска који емитује линије нискојонизованих емитера, реда величине неколико хиљада R_g . Из тог разлога смо при овој анализи тестирали модел за димензије спољашњег радијуса не већег од сто хиљада R_g , али како за те профиле није било значанијих разлика у облику нормализованих профила двокомпонентног модела, онда је овај параметар фиксиран на $3000 R_g$, као средња вредност из резултата фитовања (види [34] и [51]) и на $4000 R_g$, као средња вредност овог параметра добијена из резултата АГЈ објеката са два пика ([37]).

v) Код параметара околног региона анализирани су прво профили добијени доплеровским ширењем, са фиксираним помаком гаусијана за вредност систематског помераја галаксије (а касније је разматрана и могућност да је овај параметар слободан, у одељку где се анализира асиметрија).

2. ПОСМАТРАЧКИ ПОДАЦИ И ПРОЦЕДУРА ОБРАДЕ

Посматрачки подаци се односе на две групе изабраних објеката. Прва група садржи 14 АГЈ, од којих је 13 посматрано са Исак Њутн телескопом (INT), на Ла Палми (Канарска Острва, Шпанија) у периоду од 21 - 25. јануара 2002, по предлогу за посматрање ([29], [52], [34] и [41]), док је објекат III Zw2 снимљен 1998. на истој опсерваторији [33]. За објекат NGC 3516 коришћена су посматрања са HST⁷ из јануара 2000. године, снимљена са STIS⁸ инструментом. За посматрања са INT-а, коришћен је спектрограф IDS (Intermediate Dispersion Spectrograph) са EEV10 камером 235 у комбинацији две решетке R1200Y (за H α регион) и R1200B (за H β регион). Видно поље је било 1".1, а ширина прореза 1", изузев за III Zw2, где је ширина прореза 1".5. Спектрална резолуција је била приближно 1 Å. Објекти су претходно изабрани на основу уочене индикације присуства диска из анализе у Рендгенском-подручју спектра ([53], [54]), па је идеја била да се потраже индикатори присуства емисије акреционог диска у флуксу H α и H β емисионих линија. На овим спектрима, након уклањања сателитских уских емисионих линија и континуума, на широким компонентама емисионих линија урађено је фитовање двокомпонентним моделом. На основу закључака добијених из ових фитовања, урађена је анализа како би се увела ограничења параметара при анализи на већем узорку спектара.

Друга група садржи 90 објеката из SDSS⁹ DR3 каталога, које су Ла Мура и колаборатори [29] изабрали и обрадили у сврху својих истраживања. Како је за анализу модела из ове тезе био потребан већи број спектара, употребљен је овај узорак од 90 АГЈ, који је садржао спектре са емисионим линијама са једим пиком. Овај узорак спектара није фитован, као у случају прве групе спектара, већ је на основу метода који ће касније бити детаљно објашњен, упоређиван са моделираним синтетичким спектрима мерењем нормализованих ширина на одређеним висинама, како би се закључило за које интервале вредности параметара двокомпонентног модела се може очекивати значајно присуство емисије из акреционог диска.

Како би се тестирала детекција скривеног зрачења диска у проширеним профилима емисионих линија са једним пиком, у већем броју спектара АГЈ, користили смо још и узорак од 90 спектара активних галаксија Сеферт 1 типа преузетих из СДСС базе [29], које су имале следеће карактеристике:

(i) да је присутна H α линија у спектру, тј. да је црвени помак активне галаксије $z < 0.5$,

(ii) са циљем да се тачније измере коефицијенти k , изабрали смо спектре код којих је био добар однос сигнал/шум (S/N), тј. $S/N > 50$,

7 Hubble Space Telescope.

8 Space Telescope Imaging Spectrograph.

9 Sloan Digital Sky Survey.

(iii) да проширени профили емисионих линија (или барем линије H_{α}) нису под утицајем дисторзије или са неким вештачким изобличењима, на пример, лоши пиксели на CCD снимку или слично,

(iv) да профили имају један доминантан проширени пик.

Посматрања друге групе, која је садржала 90 спектара, су обављена у циљу прегледа неба са 2.5м ф/5 телескопом, на Апач Поинт опсерваторији у Новом Мексику. Посматрања су урађена са спектрографом чији сензори користе мозаик направљен од четири SITe/Tektronix 2048 x 2048 CCD-а, који покривају таласне дужине од 3800 Å до 9200 Å. Систем од 640 оптичких каблова дели видно поље телескопа, односно слика је састављена од 640 спектара у поменутом опсегу таласних дужина (тзв. 3D спектроскопска коцка података). Спектрална резолуција је у опсегу од 1850 до 2200. За потребе нашег истраживања, коришћени су делимично обрађени спектри од стране тима (види [29]).

За обраду и анализу спектара коришћени су IRAF и DIPSO програмски пакети. Прво је урађено одузимање континуума. Након тога су фитоване уске компоненте ових профила, користећи фитовање са више гаусијана са дефинисаним међусобним односима интензитета. Линије су затим нормализоване на јединични интензитет, а таласне дужине су претворене у скалу брзина: $\lambda \rightarrow X = (\lambda - \lambda_0) / \lambda_0$.

3. АНАЛИЗА

Прво је на мањем узорку рађено фитовање (симплекс методом), применом χ^2 минимизације. Тражена су решења симулираних профила са најмањим квадратним одступањем од посматраних спектара. Уочено је да резултати јако зависе од почетних вредности параметара. Како је број слободних параметара у оваквом фитовању прилично велики, било је потребно на неки начин ограничити њихов број и одредити почетне вредности параметара. Зато је уведена додатна претпоставка изведена на основу претходне гаусовске анализе, да се у профилима са једним пиком, језгро линије формира више у изотропној области, док у крилима линије доминира зрачење из дисколикoг региона. Као почетне вредности параметара гаусијана изотропног региона узето је решење за централни гаусијан, док су параметри померених компоненти ка црвеном и плавом делу спектра претпостављени да потичу из диска, те су уз коришћење претпоставке из [55] (видети и [33], [56]) процењени параметри диска који би одговарали овим компонентама, на основу релације (видети [56], за више детаља) $\sin i \approx \sqrt{2\Delta z R_{out}}$, где је Δz - разлика помераја између плавог и црвеног гаусијана, i инклинација диска, а R_{out} спољашњи радијус дат у гравитационим радијусима. Узимајући да је $\sin i \sim 1$, процењен је максимални спољашњи радијус. Из гаусовске анализе установљено је да $1000 \text{ km/s} \leq \Delta z \leq 4000 \text{ km/s}$, док је максимални спољашњи радијус у интервалу од неколико хиљада до неколико стотина хиљада гравитационих

радијуса за највеће инклинације. Ранија истраживања ([13], [45], [37]) указују да је спољашњи радијус диска типичних величина од неколико хиљада гравитационих радијуса.

Међутим, при овим фитовањима уочено је да велики број решења има приближно једнако добре фитове линија за потпуно различите вредности параметара. Као пример представљена су два фита објекта 3C 273 (слика 5) са различитим вредностима параметара. Параметри фита представљеног на слици 5a, прилично се разликују од вредности параметара добијених у подједнако добром фиту приказаном на слици 5b, иако сам облик синтетисаног спектра модела (фитујућег профила) јако добро описује профил линије спектра 3C 273 (видети вредности параметара испод слике 5). Ово указује на то да ако се фитује без ограничења параметара, онда је могуће добити веома различите процене параметара диска. Треба напоменути да је код линија са најмањом асиметријом, било јако тешко одредити параметре. Као што се може видети, профили могу бити фитовани са двокомпонентним моделом, али је при томе тешко једнозначно одредити параметре диска, тј. могуће су само процене интервала вредности параметара. Из тог разлога је било потребно увести ограничења за барем неке од параметара модела диска. Уједно, очигледно је да у спектрима из овог узорка, облици крила линија указују на могуће постојање дисколике геометрије.

Што се тиче диска, на основу анализе резултата добијених фитовањем, закључили смо следеће:

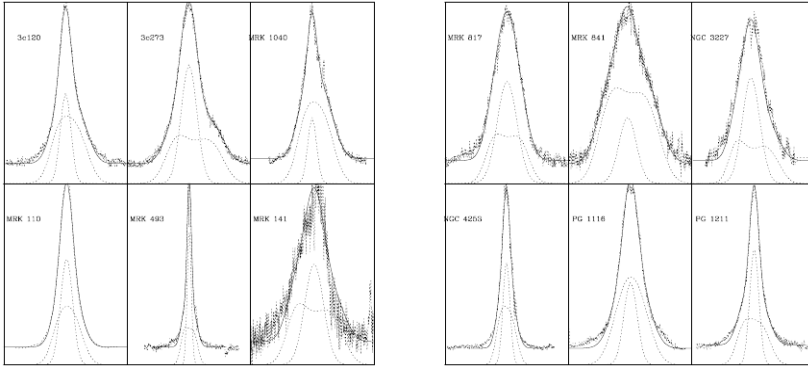
- максимални спољњи радијус је у интервалу од 10^4 до $10^5 R_g$,
- брзине локалног доплеровског ширења су различите од објекта до објекта и оне су у прилично разуђеном опсегу од ~ 300 km/s до 1700 km/s; тако да су локални помаци ($z_l \sim -780$ до +450 km/s),
- минимални унутрашњи радијус емитујућег диска је у интервалу од ~ 100 до $600 R_g$,
- инклинације су у опсегу $5^\circ \leq i < 50^\circ$, и преко половине објеката из узорка има $i < 30^\circ$.

Овакве вредности инклинација подржавају идеју да се чешће виде Сејферт 1 тип галаксија са малим инклинацијама, тзв. "face on" диск [57].

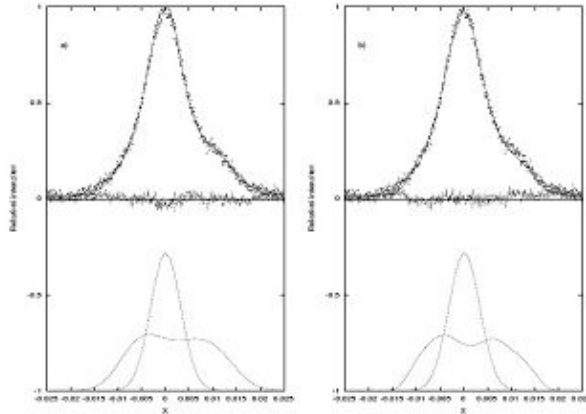
Код околног региона, можемо истаћи следеће:

- помаци су унутар 300 km/s у односу на космолошки помак галаксије
- доплеровско ширење је различито за различите објекте и креће се у опсегу ~ 400 до 1600 km/s.

Из ове анализе се може закључити да је компонента диска вероватно присутна у флуксу емисионих линија са једним пиком, али на основу ове анализе није могуће проценити стварне вредности параметара диска, већ само њихове процене.



Слика 4. Пример фитовања двокомпонентним моделом профила широке компоненте емисионих линија, добијених усредњавањем широких компоненти H_α и H_β емисионих линија, претходно очишћених од сателитских линија и нормираних на јединицу 12 \AA из првог узорка [32].



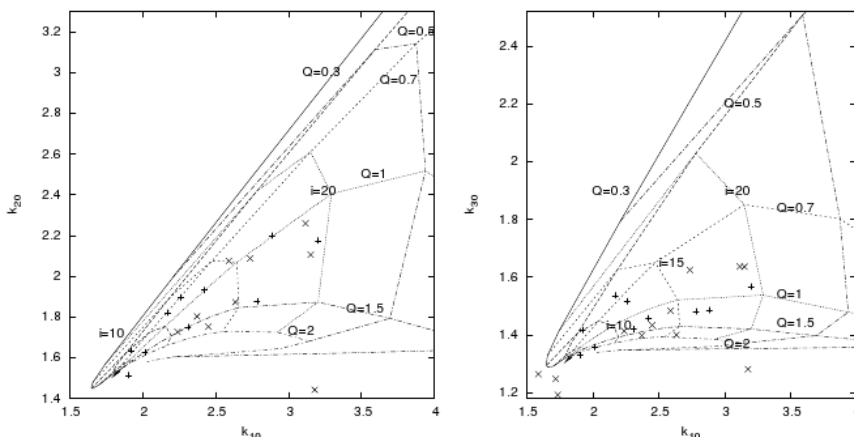
Слика 5. - Пример два фита 3C 273 са двокомпонентним моделом. Параметри диска су: a) $i = 14^\circ$, $R_{inn}=400 R_g$, $R_{out}=1420 R_g$, $W_d=1620 \text{ km/s}$, $p=3.0$ ($W_G=1350 \text{ km/s}$); b) $i = 29^\circ$, $R_{inn}=1250 R_g$, $R_{out}=15000 R_g$, $W_d=700 \text{ km/s}$, $p=2.8$ ($W_G=1380 \text{ km/s}$).

4. ПОРЕЂЕЊЕ СИМУЛИРАНИХ ПРОФИЛА ЕМИСИОНИХ ЛИНИЈА

Направили смо мрежу симулираних профила код којих смо мерили коефицијенте k_i . Мрежу модела смо прво применили на спектре 14 активних галаксија из првог узорка. Из анализе урађене на овом узорку спектра извршене су процене инклинација и односа флуксава.

Прво је рађена анализа на узорку од 14 објеката, са H_α и H_β профилима линија. На слици 6 представљени су односи k_{10} према k_{20} и k_{10}

према k_{30} , широких компоненти H_α и H_β линија сваког од изабраних објеката. Пуним и испрекиданим линијама су приказане вредности мерења коефицијената k_i симулираних профила за различите инклинације диска и односа флуксева, док



Слика 6. Односи мерених ширина k_{10} према k_{20} (лево) и k_{10} према k_{30} (десно) симулираних профила за различите односе флуксева Q (испрекидане линије), као и мерене вредности из првог узорка од 14 АГЈ (крстићи представљају мерења добијена из линије H_α док су плусевима означена мерења из H_β линије). Пуне линије представљају изолиније за исте инклинације. Односи флуксева приказани су за вредности $Q = 0.3, 0.5, 0.7, 1, 1.5$ и 2 , док су линије са инклинацијама $i = 10^\circ, 15^\circ, 20^\circ, 25^\circ$ и 30° .

је величина прстена у диску фиксирана тако да је $R_{inn}=400 R_g$ и $R_{out}=3000 R_g$. Као што се види на слици 6, највећи број тачака лежи у интервалу $0.5 < Q < 2$ и $10^\circ < i < 25^\circ$ (хистограми су представљени на слици 7).

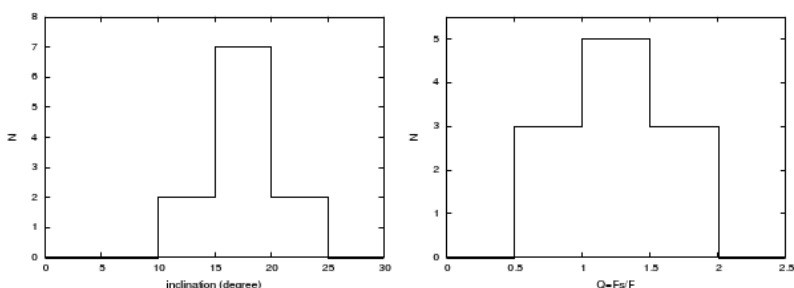
За сваки објекат узорка, инклинација диска и однос флуксева емисије околних региона и диска Q оцењени су на основу положаја у мрежи модела на пројекцијама k_{10} у односу на k_{20} и k_{10} у односу на k_{30} . Као критеријум за оцену грешке узето је одступање од средње вредности добијено на основу ове две мреже. Такође, за вредности које су на некој од пројекција излазила из домена мреже или су одступања од средње вредности за инклинацију била веће од 1° , односно флуксева Q већа од 0.3 , сматрано је да их модел недовољно добро описује па оне нису улазиле у даљу анализу.

Са графика се може видети да се овај метод може применити за читавање параметара двокомпонентног модела на реалним спектрима, уз напомену да је у неким случајевима било тешко отклонити уске компоненте линије и шум (нпр. у случајевима линија код Mrk 817, H_β профила код Mrk 1040, Mrk 141, Mrk 841 и H_α код 3C 273). Ова мерења су искључена из даље анализе због наведених проблема.

У случајевима код којих су обе линије (H_α и H_β) биле употребљиве за анализу, оцене инклинација су биле скоро исте за обе линије, док је однос флуксева Q варирао и до 30%. С обзиром да долазе из истог диска,

инклинације и треба да буду исте (као што се овде и показало), док однос флуксева ипак може да зависи од физичких услова у регионима у којима ове линије настају (нпр. на различитим радијусима у диску, или различитим висинама од диска) и самим тим се може десити да у неким случајевима имамо различите односе флуксева Q .

У поређењу са претходним резултатима добијеним помоћу фитовања за исти узорак АГЈ спектра ([29], [34], [51], [32]), резултати показују да су инклинације у већини случајева у интервалу оних добијених из фитовања. Овим приступом, након мерења коефицијената k_{10} , k_{20} и k_{30} , који одговарају различитим доприносима флукса диска и околног региона у симулираним спектрима, може се закључити да параметри k_j могу бити веома корисни за детекцију емисије диска. Чак и у случају да имамо проширене емисионе линије са доминантним једним пиком, и даље постоји могућност да је та-



Слика 7. Хистограм инклинација и (лево) и односа флуксева Q (десно).

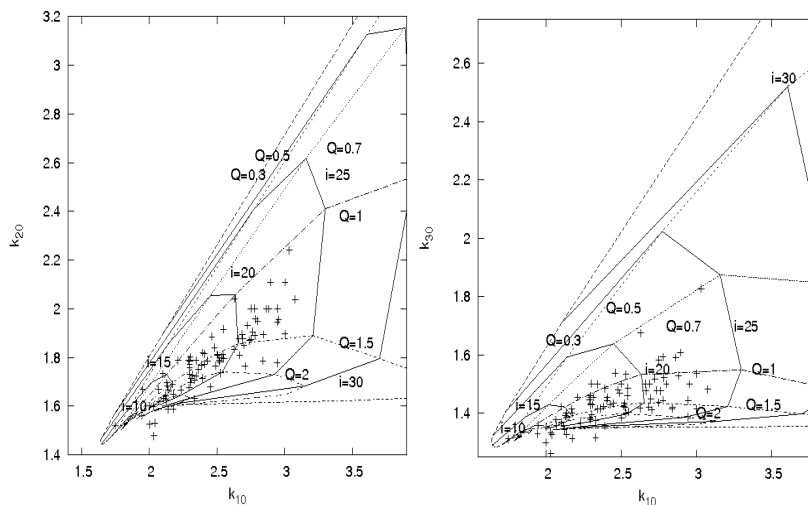
ква емисија присутна у овим профелима. Нађено је да је однос флуксева $2 > Q > 0.5$, док су инклинације $10^\circ < i < 25^\circ$.

Мрежа параметара двокомпонентног модела примењена је и на узорку од 90 АГЈ. За широку H_α линију мерене су ширине на 10%, 20%, 30% и 50% максималне висине, као и ширина на 90%, која је коришћена да се одреди центар линије (половина ове ширине). За оцену асиметрије мерене су и W_j^r и W_j^b (где је $j=10\%, 20\%, 30\%$). Из ових мерења рачунати су коефицијенти k_j и A_j .

На слици 8 представљени су k_{20} према k_{10} и k_{30} према k_{10} у широкај компоненти емисионе H_α линије за сваки АГЈ из узорка од 90 објетата. Линијама су представљена мерења добијена из симулираних профила за различите инклинације диска и однос флуксева Q , док је величина прстена у емитујућем диску за H_α линију узета као $R_{inn} = 600 R_g$ и $R_{out} = 4000 R_g$. Као што се може видети са слика 8 и 10, већина мерених тачака лежи између $1 < Q < 1.5$ и $10^\circ < i < 25^\circ$. При варирању унутрашњег и спољашњег радијуса, у оквиру предвиђених вредности, генерално није било великих промена у положају тачака.

Анализа асиметрија широке компоненте H_α емисионих линија из узорка од 90 АГЈ је представљена на слици 9. Линије представљају резултате добијене из симулираних профила за исте параметре диска ($R_{inn}=600 R_g$ и $R_{out}=4000 R_g$, $p=3$, $z_d=0$, $w_d=1000 \text{ km/s}$), док су инклинације

мењане у интервалу од 10° до 25° . Као што се може видети на слици 9, неке од тачака имају негативну асиметрију (око 14% АГЈ објеката из узорка од 90 објеката за које су мерене H_α линије). То се не може објаснити моделом код којег се узима да је изотропна компонента (гаусијан) фиксирана за космолошки црвени помак саме галаксије.

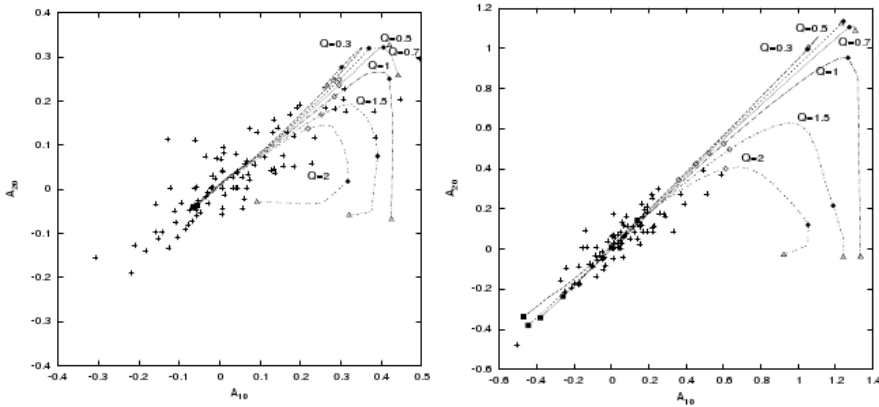


Слика 8. Односи мерених ширина на 10% и 20% (лево) и 10% и 30% (десно) максималног интензитета симулираних профила за различите односе флуkseва Q (испрекидане линије), као и реалних профила из узорка (крстићи). Пуне линије представљају изофоте за исте инклинације. Односи флуkseва приказани су за вредности $Q = 0.3, 0.5, 0.7, 1, 1.5$ и 2 , док су линије са инклинацијама $i = 10^\circ, 15^\circ, 20^\circ, 25^\circ$ и 30° .

Међутим, тестирањем модела за различите помаке изотропне компоненте у односу на систематски помак галаксије, добијено је да при плавим помацима у односу на космолошки помак галаксије, и те тачке могу бити описане оваквим моделом (види на слици 9 за параметре помака од -800 km/s). Ова анализа само указује да код једног дела АГЈ, изотропна област може имати кретање ка посматрачу, тј. да се може видети избацивање материје (ветар).

За сваки објекат оцењена је инклинација диска и односи флуkseва Q , на основу мерења k_j и њиховим упоређивањем са мерењима из симулираних спектра. Хистограми су представљени на слици 10, одакле се може видети да су готово сви објекти са релативно малим инклинацијама $i = 10^\circ$ - 25° , док им односи флуkseва, у највећем броју случајева, леже у опсегу $1 < Q < 1.5$. Ово указује на то да овакви објекти који поседују проширене емисионе профиле са једним пиком у највећем броју случајева имају мале инклинације, док им је флуks зрачења диска мањих или сличних вредности у односу на флуks зрачења из околног региона.

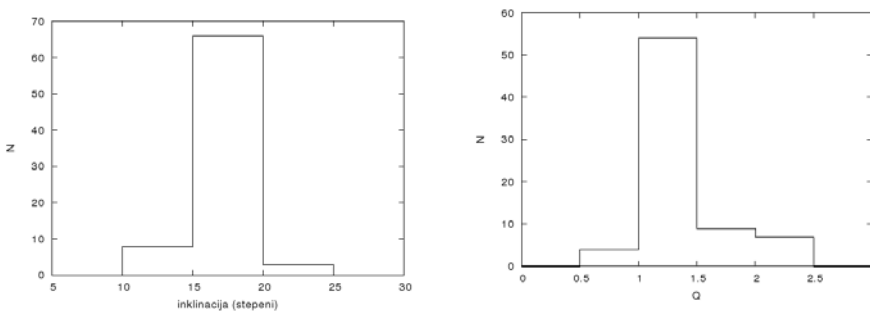
На слици 13, представљен је однос и према Q за узорак, као и за



Слика 9. Поређење асиметрије реалних профила код узорка од 90 објеката (крстићи) са асиметријом симулираних профила за разне инклинације, где свака линија представља различите односе флуksева ($Q = 0.3, 0.5, 0.7, 1, 1.5$ и 2) у двокомпонентном моделу. Параметри диска су узети тако да је унутрашњи радијус $600 R_g$, а спољашњи $4000 R_g$, док су приказане инклинације у распону $i = 0^\circ$ (пуни квадратићи), 10° (празни кружићи), 20° (попуњени кружићи), 30° (празни троуглићи). Може се видети да у случају кад помак гаусовске компоненте одговара црвеном помаку галаксије (леви график) симулиране вредности не покривају пордучја за све реалне профиле, за разлику од случаја са плавим помаком гаусовске компоненте од 800 km/s (десни график).

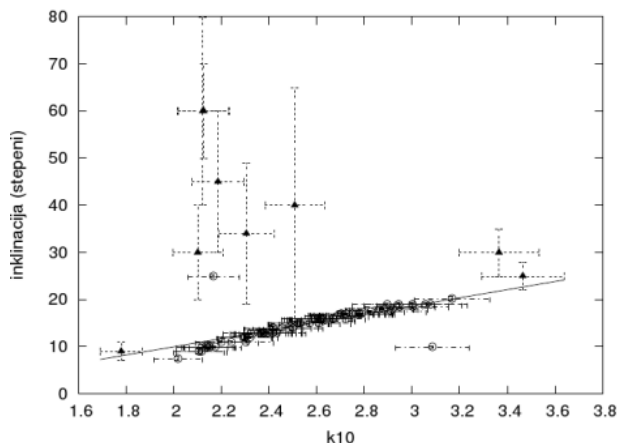
добро познате објекте који имају емисионе линије са два пика, из рада [37], уз претпоставку да је код њих присуство емисије околне компоненте мање од $Q = 0.1$. Овде је могуће уочити благо опадање вредности Q са порастом инклинације. Разлог за ово би могао бити у томе да сјај диска опада са инклинацијом, тј. да се диск велике инклинације може видети ако нема присуства околне емисионе области.

На слици 11 приказан је однос процењене инклинације у зависности



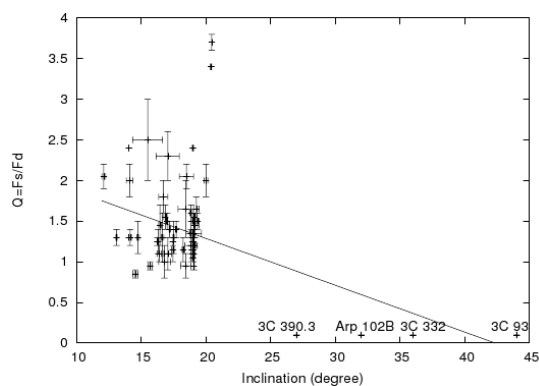
Слика 10. Хистограми инклинација (лево) и односа флуksева $Q = F_s/F_d$ (десно) за узорак од 90 објеката.

од параметра k_j , са унесеним грешкама. Објекте код којих постоји велика грешка процене инклинације и односа флуksева Q смо обележили троуглићима и уклонили из даље анализе, јер су указивали на велика одступања од модела.

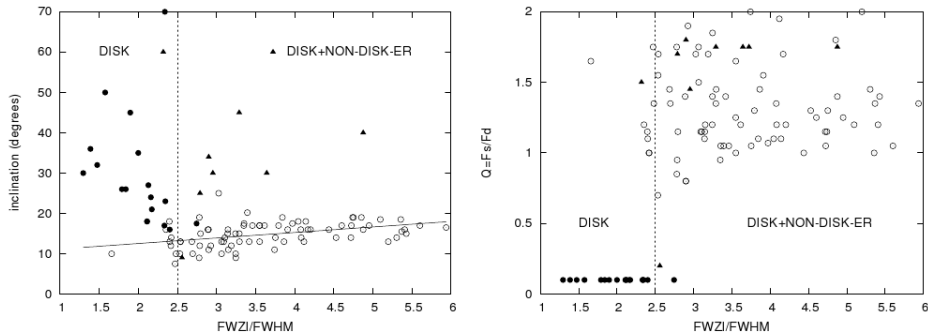


Слика 11. Однос инклинације и према мереним коефицијентима k_{10}

Као додатни тест за узорак од 90 АГЈ, упоређивана су мерења FWZI/FWHM (преузета из рада [29]), и процене инклинација и из овог рада и односа флуksева Q . Узорак је допуњен објектима са линијама са два пика чије су инклинације претходно одређене у раду [37]. Као што се може уочити на слици 13, постоји јасно разграничење између узорка са два пика (попуњени кружићи) и узорка са једним пиком (празни кружићи), изузев за тачке са великим грешкама односно одступањима од модела (пуни троуглићи).



Слика 12. Однос инклинације и према Q за узорак од 90 објеката, проширен са резултатима познатих инклинација објекта чији профили линија имају два широка пика [45], представљених на графику са претпоставком да је $Q < 0.1$.



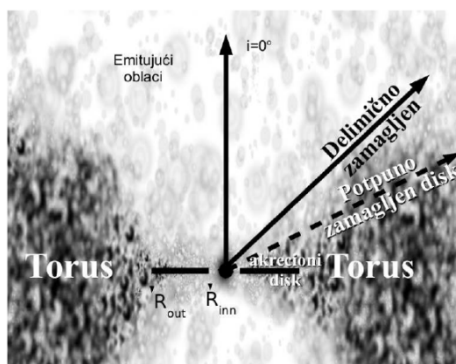
Слика 13. Однос инклинације (лево) према $FWZI/FWHM$ и Q (десно) према $FWZI/FWHM$ за узорак 90 објеката проширен са познатим АГЈ са линијама са два пика [37] и уз претпоставку $Q < 0.1$.

5. ДИСКУСИЈА

У претходном одељку направљена је мрежа модела са циљем да омогући детектовање трагова постојања зрачења диска у емисионим линијама. Нађено је да су инклинације и однос флуксева Q кључни параметри при формирању широких емисионих линија у спектрима АГЈ.

На основу симулираних профила закључено је да у неким случајевима, на пример у случају кад је флукс профила диска 3 пута мањи од флукса емисије изотропног региона, присуство диска постаје неуочљиво, како због несигурности у оцени нивоа континуума, тако и због нивоа шума или немогућности да се прецизно уклоне све компоненте које преклапају овакву широку линију. У случају где су очигледно присутна два широка пика у профилу емисионе линије, детекција присуства диска је тривијална.

На основу мреже модела добијене мерењем односа ширина $k_j = W_j/W_{1/2}$ из симулираних профила, оцењене су вредности инклинације и односа флуксева Q код реалних профила из узорка од 90 АГЈ, како би се процениле могуће вредности ових параметара, код оваквих емисионих профила АГЈ спектра у опште. Оваквом анализом установљено је да за највећи број објеката из узорка, мерене вредности указују на релативно малу инклинацију диска ($i < 25^\circ$) док је однос флуксева био приближно у опсегу $1 < Q < 1.5$. Ово указује на то да само при мањим инклинацијама двокомпонентни модел добро описује реалне спектре. Код већих инклинација су одступања од модела била значајно већа. Дакле, само при мањим инклинацијама се може очекивати чист допринос ове две компоненте, без утицаја покривања облацима из турса, како је предложено у унификационом моделу Јурија и Падованија [58]. Ово може указивати на границу инклинације изнад које можемо очекивати да утицај апсорпције у турсу постаје значајан (видети слику 14).



Слика 14. Покривеност емисије диска. Потпуно покривена емисија диска торусом (исрекидана линија), делимично закloњен акрециони диск (пуна линија), зрачење диска без утицаја заклањања торусом [32].

Другим речима, из наших истраживања у овој тези следи да непрозрачни торус има велики утицај на то да ли можемо да посматрамо диск у спектралним линијама. Као што је показано на слици 14, највероватније постоје три значајна правца посматрања у односу на раван торуса и акреционог диска (под претпоставком да су они у истој равни) и то:

1. Област торуса (види слику 14) где је потпуно апсорбована емисија из диска, али и из области око диска; посматрајући из тог правца, могу се уочити само АГЈ типа 2, или оне АГЈ код којих су присутне само уске линије. Ова област вероватно покрива диск са великим инклинацијама ($45^\circ - 90^\circ$).
2. Друга област је разређеног, тј. делимично оптички танког торуса (око $25^\circ - 45^\circ$), где облаци торуса нису тако густе, али још увек не можемо да детектујемо емисију диска. Међутим, пошто је мањи слој прашине који заклања околни регион, могуће је детектовати емисију из тог околног региона, са релативно проширеним емисионим линијама.
3. Трећа област ($0^\circ - 25^\circ$) где посматрач може детектовати емисију из диска. При томе треба водити рачуна да при јако малим инклинацијама ($0^\circ - 10^\circ$) можемо очекивати избацивање материје, и тај материјал може заклонити емисију оба региона (блзари или OVV објекти). Тако остаје један мали део инклинација од око 10° до око 25° , у коме се вероватно диск може посматрати. Резултати наших истраживања потврђују ову могућност.

Истакнимо овде да се добијени резултати оријентација диска, веома добро уклапају у шему унификационог (јединственог) модела АГЈ.

6. ЗАКЉУЧЦИ

У овом раду разматрали смо постојање скривене емисије диска код оних АГЈ где профили немају два пика (карактеристична за емисију диска). Да бисмо проценили да ли уопште постоји емисија диска код емисионих линија са једним пиком у спектрима АГЈ, овде смо развили двокомпонентни модел такав да се емисија у линији састоји од емисије акреционог диска и емисије околне емисионе области. Применом овог модела на посматрања 14 АГЈ (снимљених високом спектралном резолуцијом) дошли смо до следећих закључака:

- двокомпонентни модел, веома добро може описати профиле емисионих линија, али је веома тешко одредити параметре диска због јако великог броја слободних параметара,
- случајне брзине у околној емисионој области су сличне случајним брзинама у диску, што указује да су ова два региона повезана неким процесом попут ветра произведеног у акреционом диску.

Поред овога, користећи двокомпонентни модел направили смо мрежу симулираних профила за различите параметре диска и околног региона. Мрежу модела смо упоредили са посматрањима код узорака од 14 и од 90 АГЈ. На основу ових истраживања можемо закључити следеће:

- да је за највећи број објеката, однос флуксева региона са изотропним брзинама и акреционог диска $1 < Q < 1.5$, тј. да је емисија околног региона значајнија од емисије диска,
- инклинације су у највећем броју случајева $10^\circ < i < 25^\circ$ (при чему се код јако великих инклинација значајно повећавала грешка при процењивању), што може значити да улога торуца (који може заклањати делимично или потпуно акрециони диск) може бити важан фактор при детекцији диска у емисионим линијама,
- из анализе асиметрије, уочено је да у неким случајевима треба очекивати систематско кретање облака из равни диска, што се добро уклапа у теорију ветра са диска, а такође може указивати на постојање двојне црне рупе (видети нпр. [39], [40]).

Главни закључак овог рада је да у широким емисионим линијама код АГЈ можемо очекивати скривену емисију диска, чак и у случају профила са једним пиком.

7. ЛИТЕРАТУРА.

- [1] Osterbrock, D. E. & Koski, *ApJ*, 206, 898O, (1976)
- [2] Osterbrock, D., E., *ApJ* 215, 733, (1977)
- [3] Winkler, H., *MNRAS*, 257, 677, (1992)
- [4] Véron, P., Goncalves, A.C. & Véron-Cetty, M.-P., *A&A*, 384,826, (2002)
- [5] Antonucci, R. R. J., Miller J. S., *Ap. J.* 297,621, (1985)

- [6] Corbett, E. A.; Robinson, A.; Axon, D. J.; Young, S.; Hough, J. H., *RAS, MNRAS*, 296, 721, (1998)
- [7] Sulentic, J. W., Marziani, P. & Dultzin-Hacyan, D., *ARAA* 38, 521, (2000)
- [8] de Robertis, M., *ApJ* 289, 67, (1985)
- [9] Stype G. M., Byrn A. G., van Groningen E, *A&A* 200, 9, (1988)
- [10] Brotherton, M. S., *ApJS*, 102, 1, (1996)
- [11] Corbin, M., R., & Boroson, T., *ApJS*, 107, 69, (1996)
- [12] Chen, K. & Halpern, J., *ApJ*, 344, 115, (1989)
- [13] Chen, K., Halpern, J., Filipenko A.V., *ApJ*, 339, 742, (1989)
- [14] Zheng, W., Binette, L., Sulentic, J.W., *ApJ*, 365, 115, (1990)
- [15] Zheng, W., Veilleux, S., Grandi, S.A., *ApJ*, 381, 418, (1991)
- [16] Ilić, D., Popović, L. Č., Ciroi, S., Rafanelli, P., The Nuclear Region, Host Galaxy and Environment of Active Galaxies (Eds. Erika Benítez, Irene Cruz-González, & Yair Krongold) *Revista Mexicana de Astronomía y Astrofísica (Serie de Conferencias)*, *RevMexAA SS*, 32, 102., (2008)
- [17] Goad, M. & Wanders, I., *ApJ*, 469, 113, (1996)
- [18] Gaskell, C. M., *Proc. 24th Liege Intern. Ap. Colloquium, Univ. de Liege, Liege*, 473. (1983)
- [19] Gaskell, C. M., *ApJL*, 464, 107, (1996)
- [20] Popović, L. Č., Stanić N., Pavlović, R., Živkov V., Đurašević, G., Kubičela, A., *19th SPIG Contributed papers (eds. N. Konjevi, M. Ćuk & I Videnović), Faculty of physics, University of Belgrade, Belgrade*, 639, (1998)
- [21] Oke J. B., *Superluminal Radio Sources ed. J. A. Zensus and T. J. Pearson (Cambridge Univ. Press)* 267. (1987)
- [22] Perez, E., Mediavilla, E., Penston, M. V., Tadhunter, C., Moles, M., *MNRAS*, 230, 353, (1988)
- [23] Peterson, B. M., Mayers, K. A., Capriotti, E. R., Foltz, C. B., Wilkers, B. J. & Miller, H. R., *ApJ*. 292, 164, (1985)
- [24] Allion, D., Boisson, C., Pelat, D., *A&A*, 200,17, (1998)
- [25] Stype, G. M., van Groningen, E., Byrn, A. G., *A&A* 211, 310, (1998)
- [26] Murray, N. & Chiang, J., *ApJ*, 474, 91, (1997)
- [27] Boroson, T. A., *ApJ*, 585, 647, (2003)
- [28] Zamanov, R., Marziani, P., Sulentic, J.W., Calvani, M., Dultzin-Hacyan, D., Bachev, R., *ApJ*, 576, 9, (2002)
- [29] La Mura G., Popović, L. Č., Ciroi, S., Rafanelli, P., Ilić, D., *ApJ*, 671, 104, (2007)
- [30] Kollatschny, W., *A&A*, 407, 461, (2003)
- [31] Halpern, J., P., Eracleous, M., Filippenko, A., V., Chen, K., *ApJ*, 464, 704, (1996)
- [32] Bon, E., Popović, L. Č., Gavrilović, N., La Mura G., Mediavilla E. G., *MNRAS*, 400, 924, (2009)
- [33] Popović, L. Č., *ApJ*, 599, 140, (2003)
- [34] Bon, E., Popović, L. Č., Ilić, D., Mediavilla, E.G., *New. Ast. Rev.*, 50, 716, (2006)

- [35] Eracleous, M., *AGN Physics with the Sloan Digital Sky Survey (ASP Conf. Ser.)*, (astro-ph/0310649), (2003)
- [36] Wang, J.-M. Ho, L. C., Staubert, R., *A&A*, 409, 887, (2003)
- [37] Eracleous, M. & Halpern, J.P., *ApJ*, 599, 886, (2003)
- [38] Eracleous, M., Livio, M., Halpern, J. P., Storchi-Bergmann, T., *ApJ*, 438, (1995)
- [39] Boroson, T. A., Lauer, T. R., *Nature*, 458, 53, (2009)
- [40] Bogdanović, T., Eracleous, M., Sigurdsson, S., *ApJ*, 697, 288, (2009)
- [41] Bon, E., Gavrilović, N., La Mura G., Popović, L. Č., *NewAstRev*, 53, 121, (2009)
- [42] Storchi-Bergmann, T. & de Silva, R.N., Eracleous, M., *ASPC*, 290, 155, (2003)
- [43] Storchi-Bergmann, T., Nemmen, R., Eracleous, M., Halpern, J. P., Filippenko, A. V., Ruiz, M. T., Smith, R. C., Nagar, N., *ApJ*, 598, 956, (2003)
- [44] Storchi-Bergmann, T., Baldwin, J. A., Wilson, *ApJ*, 410L, 11S rew S., (1993)
- [45] Eracleous, M. & Halpern, J., P., *ApJS*, 90, 1, (1994)
- [46] Rodríguez-Ardila, A., Pastoriza, M.G., Bica, E., *ApJ*, 463, 522, (1996)
- [47] Livio, M. & Xu, C., *ApJ* 478, L63, (1997)
- [48] Ho, L., C., Rudnick, G., Rix, H.-W., et al., *ApJ* 541, 120, (2000)
- [49] Shields, J.C., Rix, H.-W., McIntosh, D.H. et al., *ApJ* 534, L27, (2000)
- [50] Strateva, I. V., Strauss, M. A., Hao, L., et al., *AJ*, 126, 1720, (2003)
- [51] Bon, E., *Serb. Astron. J.*, 177, 9, (2008)
- [52] Popović, L. Č., Mediavilla, E.G., Bon, E., Ilić, D., *A&A*, 423, 909, (2004)
- [53] Sulentic, J. W., Marziani, P., Zwitter, T., Calvani, M. & Dultzin-Hacyan, D., *ApJ*, 501, 54, (1998)
- [54] Nandra, K., George, I., M., Mushotzky, R., F., Turner, T., J. & Yaqoob, T., *Astrophys. J.* 477, 602, (1997)
- [55] Smak, J., *Acta Astron.*, 31, 395, (1981)
- [56] Popović, L. Č., Mediavilla, E.G., Kubičela, A., Jovanović, P., *A&A*, 390, 473, (2002)
- [57] Rokaki, E. & Boisson, C., *MNRAS* 307, 41, (1999)
- [58] Urry, M. C. & Padovani, P., *PASP* 107, 803, (1995)

ФИЗИЧКЕ ОСОБИНЕ ШИРОКОЛИНИЈСКОГ РЕГИОНА КОД АКТИВНИХ ГАЛАКТИЧКИХ ЈЕЗГАРА

Д. Илић¹, Л. Ч. Поповић²

¹*Математички факултет Универзитета у Београду, Србија*

²*Астрономска опсерваторија у Београду, Србија*

Сажетак. У овом раду представљамо неке од резултата истраживања емисионе плазме у широколинијској области активних галактичких језгара (АГЈ), користећи најинтензивније широке емисионе линије из АГЈ спектра. У циљу одређивања карактеристика плазме у овом региону, анализирамо флуксе Балмерових линија водоника (од H_α до H_ϵ) и линија хелијума из два суседна стања јонизације (He II $\lambda 4686$ и He I $\lambda 5876$). Емисионе линије, добијене уз помоћ програма CLOUDY за симулирање фотојонизационих спектра, су проучаване како би се пронашли услови у широколинијској области за које може да се примени Болцман-плот (БП) метод за дијагностику температуре. Пронашли смо да за један број моделираних спектра БП метод може да се примени. Ти спектри су коришћени за истраживање зависности параметара плазме (нпр. средње температуре, концентрације водоника, итд.) и односа линија хелијума He II $\lambda 4686$ и He I $\lambda 5876$.

Abstract. In this paper we give some results of the investigations of the emitting plasma in the broad line region (BLR) of active galactic nuclei (AGN), using the most intensive broad emission lines in AGN spectra. In order to probe the physical properties of the BLR plasma we analyze the fluxes of the hydrogen Balmer lines (H_α to H_ϵ) and the helium lines from two subsequent ionization levels (He II $\lambda 4686$ and He I $\lambda 5876$). The emission lines, obtained from the spectral synthesis photoionization code CLOUDY, are investigated in order to find conditions in the BLR where so-called Boltzmann-plot (BP) can be applied for the temperature diagnostics. We found that in a number of modeled spectra BP method is working. We used these spectra to explore the dependence between plasma parameters (e.g. the averaged temperature, hydrogen density, etc.) and the ratio between He II $\lambda 4686$ and He I $\lambda 5876$ lines.

1. УВОД

Активна галактичка језгра (АГЈ) су најсјајнији и најудаљенији објекти, и као такви спадају међу најинтригантније објекте у Свемиру. Тренутно је опште прихваћено да механизам стварања огромне количине енергије ових објеката представља акрецију материје у супермасивну црну рупу. Један од начина проучавања емисионих области АГЈ је анализа њихових широких емисионих линија. Ове линије потичу из тзв. широколинијске области, која се налази у близини црне рупе и чије физичке особине још увек нису у потпуности истражене (видети нпр. [1, 2]). Из флуксева и облика широких емисионих линија АГЈ закључује се да су физика и кинематика емисионих области код ових објеката комплексније него код емисионих маглина и региона где долази до експлозије и формирања звезда, тзв. Н II области, код којих се могу користити забрањене линије за дијагностику плазме [3, 4]. Напоменимо овде да је уобичајена ширина линија на половини висине око неколико хиљада километара у секунди, а код неких АГЈ са широким линијама, ширина на половини висине прелази и 10000 километара по секунди.

Главни механизам ексцитације у широколинијској области је фотојонизација, узрокована зрачењем ултраљубичастог и високоенергетског континуума који потиче из акреционог диска. Доказ за то је промењивост зрачења и у континууму и у линији, наиме уочено је да постоји директан одговор у интензитету широких емисионих линија на промене интензитета зрачења у континууму (видети нпр. [5]). До сада је велики број радова посвећен опису физичких процеса у широколинијској области и објашњењу излазног емисионог спектра користећи фотојонизационе моделе (видети нпр. [5, 6, 7, 8], итд.). Иако постоји знатан број комплексних програма за нумеричке симулације, ипак остало је неколико важних нерешених проблема везаних за широколинијску област [9]. Један од нерешених проблема је мали посматрани однос интензитета линија $L\gamma_{\alpha}$ и H_{β} (обично у опсегу 5 - 15), док фотојонизациони модели предвиђају знатно веће вредности (30 - 50) (видети [10] и референце у раду).

Широколинијска област је и кинематички и физички комплексна област која може да се подели на најмање две под-области различитих особина, нпр. на основу порекла "високо-јонизованих линија" и "слабо-јонизованих линија" (видети нпр. [1, 11]), али и на основу посматраних комплексних профила линија који не могу да се опишу једноставним кинематичким моделом (видети нпр. [2, 12]). Познато је да се широке емисионе линије стварају на различитим удаљеностима од централног извора континуума и под веома различитим физичким условима (нпр. [2]). Према томе сви процеси, као што су сударна ексцитација, само-апсорпција, апсорпција на прабини и компликовани проблеми радијативног преноса зрачења у линији и континууму, треба да се узму у обзир приликом рачунања спектра ових објеката, али и очигледна чињеница да је широколинијска област стратификована и са врло комплексном геометријом.

2. МЕТОДИ ЗА ДИЈАГНОСТИКУ ПЛАЗМЕ

Спектроскопија пружа различите методе за дијагностику емисионе плазме (видети нпр. [13]), али ове методе се не могу искористити за испитивање физичких услова који валадају у широколинијској области активних галаксија. Посебно је тешко наћи директан метод који би користио само посматране широке емисионе линије за одређивање температуре и концентрације широколинијске области. Постоје неке индикације да би температура овог региона требало да буде мања од 35,000 К пошто је посматрана емисија јонизованог гвожђа Fe II, јер би за више температуре Fe II скоро потпуно било јонизовано у Fe III [13]. Овде треба скренути пажњу да истраживања показују да Fe II емисија вероватно долази из тзв. прелазне области између широколинијског и усколинијског региона (видети нпр. [14, 15], и референце у раду). Према томе, горе поменути температурску границу треба узети са опрезом. Осим тога, постоје и границе за концентрацију које следе из посматраних емисионих линија. Из чињенице да се забрањене линије (нпр. [OIII] линије) не јављају у спектру широколинијске области, доња граница електронске концентрације износи око $n_e \approx 10^8 \text{ cm}^{-3}$, док горња граница следи из критичне концентрације за сударну деексцитацију неких широких линија, која износи $n_e \approx 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

До сада, у литератури постоје само два предложена метода за одређивање физичких особина широколинијске области која користе посматране широке емисионе линије [16, 17]. Marziani et al. [16] су пронашли, користећи CLOUDY за рачун фотојонизације, да је однос између емисионих линија из ултраљубичасте области спектра, Si III $\lambda 1892$ и C III $\lambda 1909$, добар показатељ електронске концентрације у опсегу $9.5 < \log n_e < 12$. А како је тај однос у корелацији са ширином H β линије, они дају релацију за процену електронске концентрације у широколинијској области користећи или однос ове две полу-забрањене линије или ширину широке компоненте H β линије [16]. Такође, Laor [17] је предложио метод који разматра утицај расејања електрона на облик линије и одређује физичке параметре широколинијске области из фитовања експоненцијалних крила емисионих линија, у случају АГЈ мале луминозности. Овај метод подразумева да експоненцијална крила линија настају услед оптички ретког, изотропног и термалног расејања електрона. У том случају, фитујући крила линија уз помоћ модела за расејање електрона може се проценити електронска концентрација и оптичка густина области [17]. Међутим, проблем овог директног метода је да се може применити само на линије са експоненцијалним крилима (нпр. у случају галаксије NGC 4395). Осим тога, проблем овог метода је и то што кинематика емисионог гаса јако утиче на профиле широких емисионих линија.

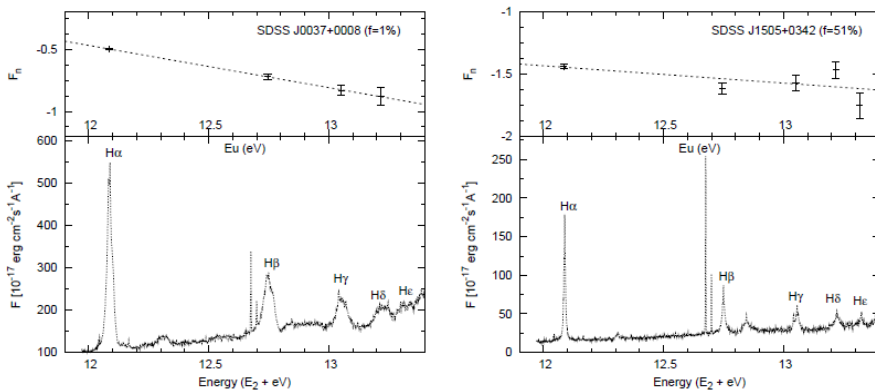
Са друге стране, Поповић [18, 19] предлаже да се Болцман-плот (БП) метод, који се широко примењује у дијагностици лабораторијске плазме [20], може користити и у случају широколинијске области код неких АГЈ (видети нпр. [21, 22]). БП метод користи односе флуксева једне серије

линија (као што је нпр. водоникова Балмерова серија) и атомске параметре одговарајуће линије за процену температуре екситације плазме која је барем у парцијалној локалној термодинамичкој равнотежи - ПЛТДР [20]. Плазма је у ПЛТДР ако је веза између насељености довољно високо екситованих нивоа и насељености следећег основног нивоа јонизације описана Саха-Болцмановом расподелом [23] или укупне насељености свих нивоа fine структуре основног стања [20]. Штавише, плазма у којој важи ПЛТДР за једну серију линија може бити нестационарна и/или дво-температурска плазма (за више детаља видети [23]).

Болцман-плот метод је добро познат метод за процену температуре екситације лабораторијске плазме [20, 24]. Ако пођемо од претпоставке да је област емисије линија оптички ретка и да за једну серију линија (као што је нпр. Балмерова серија) важи да су насељености горњих енергетских нивоа ($n \geq 3$) описане Саха-Болцмановом расподелом, што значи да је плазма барем у ПЛТДР, имамо да се флуks F_{ul} линијског прелаза са $u \rightarrow l$ може изразити као [20, 25]

$$\log_{10} F_n = B - AE_u \quad (1)$$

где је F_n тзв. нормализован флуks линије, где фактор нормализације зависи од атомских параметара одређеног атомског прелаза. Па је $F_n = F_{ul} \cdot \lambda / g_u A_{ul}$, где је λ таласна дужина прелаза, g_u статистичка тежина горњег енергетског нивоа, а A_{ul} је вероватноћа прелаза. Параметар $A = \log_{10}(e)/kT_{exc} \approx 5040/T_{exc}$ је индикатор температуре. Примењујући једначину (1) на једну серију линија и добијајући параметар A из фита, можемо проценити температуру екситације области одакле те линије потичу (за више детаља о БП методу видети [20] а за дискусију о примени на астрофизичку плазму видети [25, 22, 14]).



Слика 1. Примери спектра АГЈ на које БП метод може да се примени (лево) и где не даје валидне резултате (десно), преузети из [21]. Сваки график садржи спектар и Болцман-плот примењен на нормализоване флуksеве Балмерових линија. За анализу је коришћена само широка компонента Балмерових линија. Таласна дужина је претворена у енергетске јединице (eV), и померена за енергију доњег нивоа у балмеровој серији E_2 .

За једну групу АГЈ (нпр. NGC 5548 или Mrk 817, видети [22, 26]), је показано да БП метод може да се примени на Балмерову серију и да може да се користи за, барем грубу, процену физичких особина широколинијске области [18, 22].

Слика 1. даје примере спектра АГЈ на које БП метод може да се примени (лево) и где не даје валидне резултате (десно), преузети из [21]. Сваки график садржи спектар АГЈ и БП примењен на нормализоване флуksеве широких Балмерових линија.

Питање које се природно намеће је зашто БП ради за неке АГЈ са широким линијама у спектру а за неке не? Према томе, главна мотивација овог рада је да се истражи под којим условима би БП метод могао да се примени за испитивање физичких услова у широколинијској области, имајући у виду да се очекује да механизам фотојонизације одређује физичке особине. Проучавајући односе широких емисионих линија, пре свега линија водоника Балмерове серије (од H_α до H_ϵ) и линија хелијума $HeII \lambda 4686$ и $HeI \lambda 5876$, истражујемо температуру и ексцитацију широколинијске области, како бисмо пронашли одређену комбинацију физичких параметара који задовољавају фундаменталне претпоставке БП метода. За ово истраживање, израчунали смо неколико мрежа нумеричких симулација уз помоћ програма са синтезу спектра CLOUDY [27].

3. НУМЕРИЧКЕ СИМУЛАЦИЈЕ

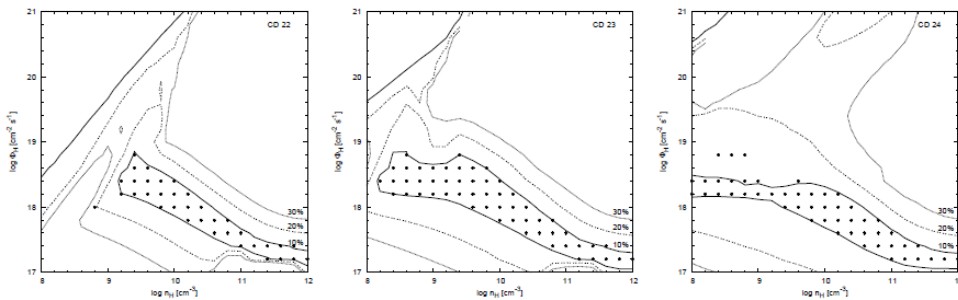
Да би проучили односе различитих емисионих линија, прво смо направили мреже фотојонизационих модела широколинијске области уз помоћ CLOUDY програма (верзија C07.02.01: [27, 28]). Улазни параметри за симулације су изабрани тако да одговарају неким стандарним условима у широколинијској области [8, 28, 29]. Емисиони линијски спектри су израчунати уз претпоставку сунчевог хемијског састава и константне концентрације водоника дуж области гаса, користећи узорак упадног континуалног зрачења, сличног облика као код типичне радио-слабе активне галаксије, за различите концентрације водоника n_H [cm^{-3}] и упадног јонизујућег флуksа Φ_H [$\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$]. Свака мрежа симулација је одрађена за широк опсег концентрације водоника и упадног јонизујућег флуksа, чак 4 реда величина, који почиње од $\log n_H = 8$, $\log \Phi_H = 17$ са кораком од 0.2, што је дало укупно 441 симулацију по мрежи. Линијска концентрација водоника N_H [cm^{-2}] је за сваку мрежу симулација фиксирана да буде константна. Многи аутори тврде да је највероватнија вредност линијске концентрације водоника у широколинијској области $N_H = 10^{23} \text{ cm}^{-2}$ (видети нпр. [30, 29, 8]). Будући да линијска концентрација одређује оптичку густину области, тако да за веће линијске густине оптичка густина у емисионим линијама расте, овде смо продуковали 5 мрежа модела за различиту линијску густину у опсегу $N_H = 10^{21} - 10^{25} \text{ cm}^{-2}$. Према томе, укупан број симулација је 2205.

Резултати CLOUDY мрежа симулација су велики број емисионих линија, од којих смо даље анализирали линије водоника Балмерове серије

(H_α до H_ϵ) и однос флуksева линија хелијума He II $\lambda 4686$ и He I $\lambda 5876$, дефинисан као $R=F(\text{He II } \lambda 4686)/F(\text{He I } \lambda 5876)$, где је F флуks линије. Ове две линије хелијума су посебно узете у разматрање из разлога што су то линије које потичу из истог елемента али из два суседна стања јонизације, па према томе њихов однос би требало да буде осетљив на промене електронске температуре и концентрације [20]. Осим тога, ове линије су у истом спектралном опсегу као и Балмерове линије, те су зато у исто време доступне у посматрањима. Из мрежа модела смо узели у обзир и средњу температуру, која одговара електронској температури усредњеној по целој области (T_{av} даље у тексту).

3.1 Анализа симулираних емисионих линија

За сваку мрежу модела анализирали смо флуksеве емисионих линија. Први корак у анализи је примена БП метода на Балмерове линије добијене CLOUDY симулацијама. У суштини, примењујући једначину (1) процењујемо параметар A , из којег даље одређујемо БП температуру, што је у ствари температура експитације (даље у тексту обележена са T_{BP}) области где се формирају Балмерове линије. Поред параметра A , из најбољег фита нормализованих флуksева добијамо и грешку БП фита (даље у тексту обележену са f). У већини случајева није добијен задовољавајући фит са једначином (1) и f има јако велике вредности. Ово је приметније у случају великих вредности концентрације водоника и упадног јонизујућег флуksа фотона, па смо зато нацртали график где је дата грешка БП фита f у равни концентрације водоника и упадног јонизујућег флуksа за свих 5 мрежа модела (Слика 2.). На Сlici 2. дате су само контуре унутар којих је f мање од 10%, 20% и 30%.



Слика 2. Грешка БП фита f у равни концентрације водоника и упадног јонизујућег флуksа за три различите линијске густине (N_H у опсегу $[10^{22} - 10^{24} \text{ cm}^{-2}]$) са контурама унутар којих је f мање од 10%, 20% и 30%. На графицима звездике представљају симулације које задовољавају сва три дефинисана ограничења (видети текст за детаље).

Са Сликe 2. се може видети да је опсег параметара за које је f мање од 10% сличан за различите вредности линијске концентрације, као и да постоји одређена правилност за улазне параметре n_H и Φ_H . Према томе,

може се узети да је БП метод примењив за случајеве кад је f мање од 10%, и то је прво ограничење које смо увели за моделоване спектре: $f < 10\%$. Будући да имамо фотојонизацију као главни механизам довођења енергије и претпоставку сунчевог хемијског састава, узимамо у обзир само оне моделе који имају T_{av} и T_{BP} мање од 20,000К. Поред тога, уводимо и треће ограничење да је $R < 2$ будући да је то вредност добијена из посматрања [31, 32] и теоријски очекивана вредност односа HeII $\lambda 4686$ и HeI $\lambda 5876$ за температуре и концентрације које користимо. Број симулација које задовољавају ове захтеве је смањен на 22, 34, 54, 48, 73 за линијске концентрације $N_H = 10^{21} - 10^{25} \text{ cm}^{-2}$, респективно. Из тих симулација смо формирали 5 узорака симулираних спектра једне линијске концентрације, који су обележени са CD21 за линијску концентрацију $N_H = 10^{21} \text{ cm}^{-2}$, итд. Модели који задовољавају ова три ограничења су презентовани звездицама на Слици 2.

4. РЕЛАЦИЈЕ ИЗМЕЂУ ЕМИСИОНИХ ЛИНИЈА И ФИЗИЧКИХ ПАРАМЕТАРА ШИРОКОЛИНИЈСКЕ ОБЛАСТИ

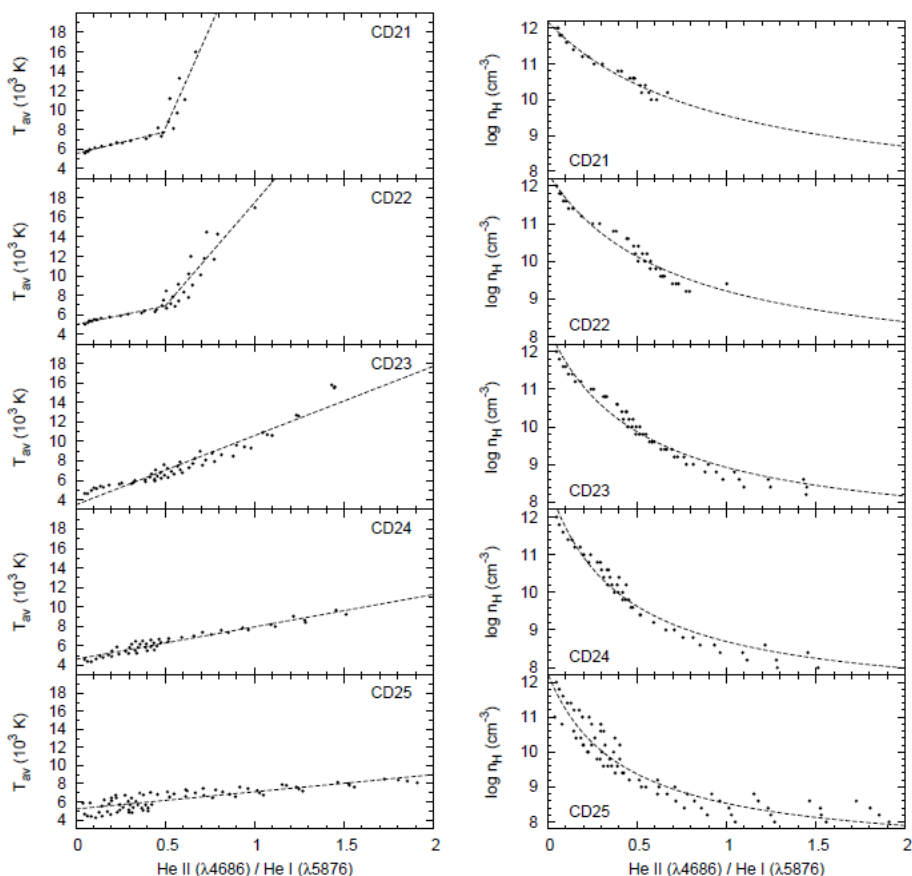
Претходно дефинисаних пет мрежа симулираних спектра су истраживане детаљније. Прво је нацртан график зависности средње температуре T_{av} у функцији односа R линија хелијума за свих пет узорака (Слика 3., лево), као и зависност концентрације водоника n_H од односа R (Слика 3., десно).

Табела 1. Параметри фитовања A_i и B_i функције $T_{av} = A_i + B_i \cdot R$, и параметри C_i и D_i функције $\log n_H = D_i/(C_i+R)$ за различите линијске концентрације водоника $N_H = 10^{21} - 10^{25} \text{ cm}^{-2}$. Резултати најбољег фита за $R > 0.5$ су дати у заградаи

$\log N_H$ [cm^{-2}]	A_i [K]	B_i [K]	D_i [cm^{-2}]	C_i
21	5556±102 (-12533±7747)	4478±346 (41351±13460)	5.04±0.22	0.97±0.05
22	4998±98 (-3721±1939)	3801±300 (21256±2872)	3.76±0.17	0.70±0.04
23	3486±200	7116±288	2.91±0.10	0.51±0.03
24	4634±87	3326±134	2.37±0.10	0.40±0.03
25	5208±119	1899±152	2.16±0.12	0.41±0.04

Уколико се енергетски нивои могу апроксимирати Саха-Болцмановом расподелом, очекујемо да узорци показују одређену зависност од T_{av} и n_H , па су зато подаци фитовани функцијама $T_{av} = A_i + B_i \cdot R$ и $\log n_H = D_i/(C_i + R)$, где је n_H дато у јединицама 10^7 cm^{-3} . Резултати фитовања су дати у Табели 1.

У случају малих линијских концентрација ($N_H = 10^{21}$ и 10^{22} cm^{-2}), узорак је подељен на два за границу $R=0.5$ у случају средње температуре, јер у околини те вредности постоји очигледан прекид, и фитовани су



Слика 3. Средња температура T_{av} (лево) и концентрација водоника (десно) као функција односа R између линија He II $\lambda 4686$ и He I $\lambda 5876$, за 5 изабраних мрежа симулираних спектра различитих линијских концентрација $N_H = 10^{21} - 10^{23} \text{ cm}^{-2}$.

Испрекидана линија даје најбољи фит функције $T_{av} = A_i + B_i \cdot R$ за средњу температуру и $\log n_H = D_i / (C_i + R)$ за концентрацију водоника. Назив сваке мреже симулација је дат на одговарајућем графику. У случају малих линијских концентрација $N_H = 10^{21}$ и 10^{22} cm^{-2} , узорак је подељен на два у случају средње температуре и фитовани су одвојено.

одвојено за добијање параметара (вредности фита за $R > 0.5$ су дате у Табели 1. у загради). Са Сlike 3. се види да чак и када се мења линијска концентрација, зависност концентрације од односа линија хелијума R се не мења. Заиста, однос ових линија хелијума представља однос насељености два суседна јонизациона стања, који би на основу Саха-Болцманове једначине требало да опада са електронском концентрацијом (у овом случају, пошто је водоник скоро потпуно јонизован $n_e \approx n_H$) као $R \sim 1/n_e$ и да расте са температуром, што се и види на Слици 3.

5. ДИСКУСИЈА И ЗАКЉУЧЦИ

У овом раду дајемо неке од резултата истраживања параметара широких емисионих линија у циљу одређивања физичких особина широколинијске области, тачније испитивања линија водоника Балмерове серије (H_α - H_ϵ) и линија хелијума из два суседна стања јонизације ($He II \lambda 4686$ и $He I \lambda 5876$).

Из анализе Балмерових линија уз помоћ БП метода, можемо рећи да БП метод даје добре резултате у случају кад је грешка фита f мања од 10%. То потврђују и CLOUDY симулације јер је опсег параметара за које важи $f < 10\%$ јасно ограничен и сличних вредности за различите линијске концентрације N_H (Слика 2.). Та област параметара обухвата ниже вредности упадног јонизујућег флукса и више вредности концентрације водоника, али у зависности од линијске густине та област се повећава задржавајући исти тренд између n_H и Φ_H . Према томе, за ту област параметара БП метод може да се примени за процену температуре екситације. То указује на то да за неке физичке услове, иако имамо фотојонизацију као главним механизам загревања широколинијске области, водоникове линије Балмерове серије се формирају на такав начин да задовољавају Саха-Болцманову једначину, односно плазма у овој области је барем у парцијалној локалној термодинамичкој равнотежи.

Физички параметри симулација за које важи БП метод ($f < 10\%$) прате одређене релације иако се мења линијска концентрација. Постоји линеарна релација између средње температуре T_{av} и односа хелијума R , као и концентрације водоника и односа хелијума R (Слика 3., Табела 1.). Имајући у виду проблеме као што су различите области формирања линија хелијума и водоника или комплексност једне широке емисионе линије, релације дате у Табели 1. се могу користити за грубу процену физичких параметара широколинијске области директно из измерених широких емисионих линија.

6. ЛИТЕРАТУРА

- [1] Sulentic J W, Marziani P and Dultzin-Hacyan D, *ARA&A*, **38**, 521, (2000).
- [2] Gaskell C M, *New Astronomy Review*, **53**, 140, (2009).
- [3] Osterbrock D E, *Astrophysics of Gaseous Nebulae and Active Galactic Nuclei*, Sausalito: University Science Books, (1989).
- [4] Krolik J H, *Active Galactic Nuclei: From the Central Black Hole to the Galactic Environment*, Princeton: Princeton University Press, (1999).
- [5] Peterson B M et al., *ApJ*, **613**, 682, (2004).
- [6] Davidson K and Netzer H, *RvMP*, **51**, 715, (1979).
- [7] Kwan J and Krolik J, *ApJ*, **250**, 478, (1981).
- [8] Korista K T and Goad M R, *ApJ*, **606**, 749, (2004).
- [9] Ferland G J, in *Quasars and Cosmology*, ASP Conf. Ser., vol. **162**, eds. G Ferland and J Baldwin, p. 147, (1999).

- [10] Netzer H, *MNRAS*, **171**, 395, (1975).
- [11] Baldwin J A, in *IAU Colloq. 159, Emission Lines in Active Galaxies: New Methods and Techniques*, ASP Conf. Ser., vol. **113**, eds. B M Peterson, F Cheng and A S Wilson, p. 80, (1997).
- [12] Popović L Č, Mediavilla E G, Bon E and Ilić D, *A&A*, **423**, 909, (2004).
- [13] Osterbrock D E and Ferland G J, *Astrophysics of Gaseous Nebulae and Active Galactic Nuclei (2nd ed.)*, Sausalito, California: University Science Books, (2006).
- [14] Ilić D, Kovačević J and Popović L Č, *New Astronomy Review*, **53**, 149, (2009).
- [15] Kovačević J, Popović L Č, Dimitrijević M S, *ApJS*, **189**, 15, (2010).
- [16] Marziani P, Sulentic J W, Zwitter T, Dultzin-Hacyan D and Calvani M, *ApJ*, **558**, 553, (2001).
- [17] Laor A, *ApJ*, **643**, 112, (2006).
- [18] Popović L Č, *ApJ*, **599**, 140, (2003).
- [19] Popović L Č, *ApJ*, **650**, 1217, (2006).
- [20] Griem H R, *Principles of plasma spectroscopy*, Cambridge: Cambridge University Press, (1997).
- [21] La Mura G, Popović L Č, Ciroi S, Rafanelli P and Ilić D, *ApJ*, **671**, 104, (2007).
- [22] Popović L Č, Shapovalova A I, Chavushyan V H, Ilić D, Burenkov A N, Mercado A, Ciroi S and Bochkarev N G, *PASJ*, **61**, 1, (2008).
- [23] van der Mullen J A M, Benoy D A, Fey F H A G, van der Sijde B and Vlcek J, *PhRvE*, **50**, 3925, (1994).
- [24] Konjević N, *PhR*, **316**, 339, (1999).
- [25] Popović L Č, *SerAJ*, **173**, 1, (2006).
- [26] Ilić D, Popović L Č, Bon E, Mediavilla E, Chavushyan V H, *MNRAS*, **371**, 1610, (2006).
- [27] Ferland G J, Korista K T, Verner D A, Ferguson J W, Kingdon J B and Verner E M, *PASP*, **110**, 761, (1998).
- [28] Ferland G J, Hazy, *A Brief Introduction to Cloudy 06.02*, University of Kentucky Internal Report, (2006).
- [29] Korista K T and Goad M R, *ApJ*, **536**, 284, (2000).
- [30] Dumont A-M., Collin-Souffrin S and Nazarova L, *A&A*, **331**, 11, (1998).
- [31] Kollatschny W, Bischoff K, Robinson E L, Welsh W F and Hill G J, *A&A*, **379**, 125, (2001).
- [32] Vanden Berk D E, Richards G T, Bauer A, Strauss M A, Schneider P et al., *AJ*, **122**, 549, (2001).

ДУГОПЕРИОДИЧНЕ ПРОМЕНЕ У ОПТИЧКОМ СПЕКТРУ АКТИВНИХ ГАЛАКТИЧКИХ ЈЕЗГАРА: ПРИМЕРИ NGC4151 И 3C390.3

А. Ковачевић¹, Л. Ч. Поповић², Д. Илић¹

¹Математички факултет Универзитета у Београду, Србија

²Астрономска опсерваторија у Београду, Србија

Сажетак. Активна галактичка језгра (АГЈ) често испољавају изразиту променљивост у спектралним линијама и континууму која нам служи да закључимо о унутрашњој структури ових објеката. На пример, промењивост широких емисионих линија нам даје информације о широколинијској области, која је у близини супер-масивне црне рупе, тако да знајући кинематику ове области можемо добити информацију о маси црне рупе. Једно од важних питања које није решено је да ли постоји периодичност или квази-периодичност у промењивости спектралних линија и континуума. У овом раду разматрамо могућу периодичност у спектралној промењивости активних галаксија. Конкретно применили смо метод непрекидних вејвлет трансформација за тражење периодичности у оптичком спектру објеката NGC4151 и 3C390.3.

Abstract. Active Galactic Nuclei (AGN) often show high variability in the spectral lines and continuum, which can be used to learn more about the inner structure of these objects. For example, the variability of the broad emission lines can give us the information about the structure of the broad line region, which is located in the vicinity of the super-massive black hole, thus knowing the kinematics of this region we can get the information about the mass of the black hole. One of the important unanswered questions is whether there is a periodicity or quasi-periodicity in the variability of the spectral lines and continuum. In this paper we consider the possible periodicity in the spectral variability of active galaxies. We have applied the method of continuous wavelet transform for searching the periodicity in the optical spectra of NGC4151 and 3C390.3.

1. УВОД

Активна галактичка језгра (АГЈ) представљају једне од наинтезивнијих извора енергије у Васиони. Један број ових објеката зрачи изузетно широке емисионе линије (ширине од неколико 1000 km/s), ти објекти се називају активне галаксије са широким емисионим линијама. Ове широке линије настају у широколинијској области (ШЛО) која се налази у близини супер-масивне црне рупе (око милијарду Сунчаних маса) и из њих се може сазнати о карактеристикама плазме у близини црне рупе, као и о геометрији ове области, која би требала да има облик диска (видети нпр. [1-4]) или комплекснију геометрију, нпр. диск и један емисиони регион који има приближно сферни облик (видети нпр.[5-7]).

Веома често ови објекти испољавају променљивост у широким емисионим линијама (ШЕЛ). Ова промењивост је изучавана са разних аспеката, а најзначајније да помоћу одговора промењивости линије на промењивост континуума можемо закључити о димензијама ШЛО, а после помоћу теореме виријала одредити и масу црне рупе. Стога дугорочно праћење промењивости у линијама и континууму представља веома значајан допринос истраживању ових објеката

Дугорочни програми спектралних посматрања језгара неких АГЈ показали су постојање временског кашњења у одговору ШЕЛ у односу на промене флукса у континууму. Ово кашњење зависи од величине, геометрије и физичких услова ШЛО.

Истраживање могућих корелација између промена континуума и променљивости флукса ШЕЛ, користи се за мапирање геометријске и динамичке структуре ШЛО (видети [8]). Осим тога, изучавање променљивости и у континууму и у ШЕЛ, као и њихових корелација може омогућити добијање информација о физици ШЛО [9].

Са друге стране, постоји питање да ли постоји одређена периодичност или квази-периодичност у овој промењивости спектралних линија и континуума. Нпр. ако имао емисију из акреционог диска, и ако је узрок промењивости везан за ротацију истог, да ли ћемо после извесног времена видети опет појачање (смањење) сјаја у линијама и континууму. У овом раду представљамо један од првих покушаја да посматрачки установимо квази-периодичну промењивост у спектралним линијама и континууму код АГЈ. Овде смо применом метода метод непрекидних вејвлет трансформација покушали да утврдимо периодичности у оптичком спектру објеката NGC4151 и 3C390.3

2. ПОСМАТРАЧКИ ПОДАЦИ

Спектри објеката NGC4151 (220 ноћи посматрања, у периоду од 1996. до 2006. године) и 3C390.3 (158 ноћи посматрања, у периоду од 1995. до 2007.) били су посматрани телескопима од 6m и 1m са Специјалне Астрофизичке Опсерваторије Руске Академије Наука (САО РАН), Русија

и са 2.1 m телескопом Гуљермо Харо опсерваторијом у Кананеи, Сонора, Мексико [3, 10].

Поменути инструменти су били опремљени са спектрографима и CCD камером. Типични интервал таласних дужина који је посматран био је од 4000 Å до 7500 Å, док је спектрална резолуција варирала између 5 Å и 15 Å. У континууму у близини H_{α} и H_{β} однос сигнала и шума (S/N) био је већи од 50.

Спектрофотометријске стандардне звезде биле су посматране сваке ноћи. Спектрофотометријска редукција података била је комплетирана коришћењем било програма развијених на САО РАН или IRAF пакета за спектре добијене у Мексику. Процес редукције слика укључивао је корекције “*bias*“ и “*flat-field*“ слика, отклањање космичког зрачења, 2Д линеаризација таласних дужина, одузимање спектра ноћног неба, као и калибрација релативних флуксева заснована на посматрањима стандардних звезда. Више детаља о редукцији података се може наћи у референцама [3, 10].

2. ИСТРАЖИВАЊЕ КВАЗИ-ПЕРИОДИЧНОСТИ У СПЕКТРУ NGC 4151 И 3С390.3

Потрага за (квази)периодичношћу је важан део изучавања променљивости АГЈ, јер ако се потврди периодичност то би значајно утицало на постављање могућих физичких модела и одређивању релевантних физичких параметара АГЈ.

Зато смо применили вејвлет трансформацију која је Морле типа, како бисмо истражили могуће постојање периодичности у континууму и емисионим линијама. Вејвлет анализа подразумева трансформацију из једнодимензионалне временске серије у дифузну дводимензионалну временско-фреквенцијску слику. На основу ње се може детектовати локализоване (псеудо) периодичне флуктуације једног дела посматране временске серије који одговара ограниченом временском интервалу [11].

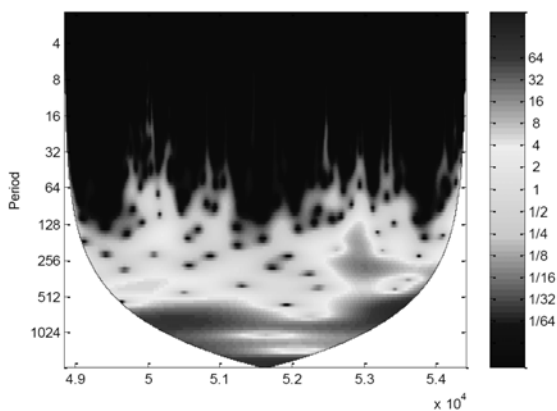
Применили смо стандардни вејвлет у циљу потраге за периодичношћу у оптичком кондитнууму и H_{β} линије. Морле тип вејвлет трансформација је погодан за анализу временских серија и већ дуже времена се успешно примењује у изучавању променљивости зрачења објекта [12]. Морле вејвлет је дефинисан следећим изразом

$$\Psi_t(s) = \pi^{-1/4} e^{ikt} e^{\frac{-t^2}{2s^2}} \quad (1)$$

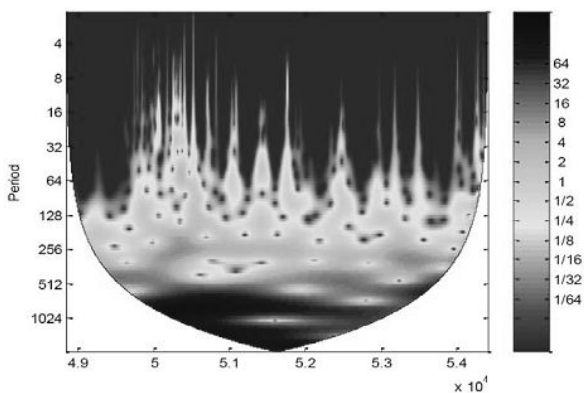
где је параметар t време, $\pi^{-1/4}$ је фактор нормализације, док су s и k параметри вејвлет скала и фреквенције осцилације, респективно. Параметар k има фиксирану вредност 6 како би се задовољио услов допуствости (више детаља видети у [11]).

Непрекидни вејвлет спектар је слика која може да има артефакте на њеним границама, зато што вејвлет није у потпуности локализован у времену. Корисно је увести конус утицаја (КОУ) у коме трансформација има поменуте граничне ефекте [11]. Према томе, периоди унутар КОУ су под утицајем граничних ефеката и могу бити неодређени.

На Сликама 1 и 2 приказани су непрекидни вејвлет спектри дуговремених линија у оптичком континууму и H_{β} линији АГЈ 3С390.3, редом. Као што се може видети, оба спектра имају дуговремену периодичност (2.36 и 2.8 година), изнад 95% нивоа поверења, али изван КОУ.



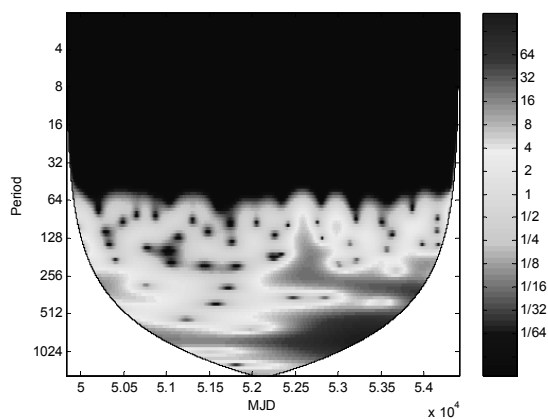
Слика 1. Непрекидна вејвлет трансформација оптичког континуума 3С390.3. Израчуната периодичност је 2.36 година. На оси x приказан је модификован јулијански дан, на оси y приказан је Фуријеов период у данима који одговара вејвлет скали приказаној на легенди на десној страни. Контура ограничава регион у коме је ниво поверења већи од 95%. Сигнал је јачи што је боја црвенија.



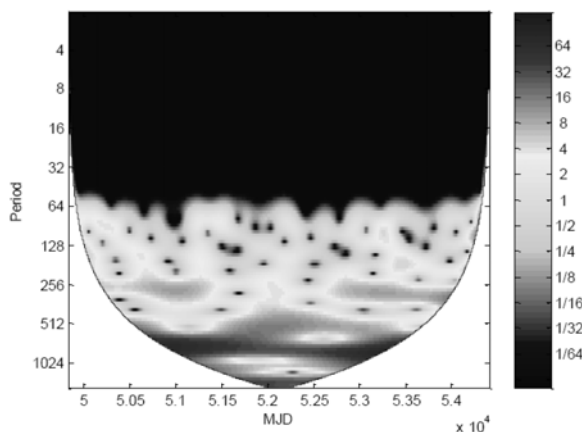
Слика 2. Исто као на Сlici 1. само за H_{β} линију објекта 3С390.3. Израчуната периодичност је 2.8 година.

Такође, уместо интерполације смо ресемпловали линије коришћењем полифазног филтера (који омогућава постављање вештачких посматрања не нарушавајући оригиналну расподелу посматрања) и добили резултате за континуум и H_{β} линију периодичност од 1.73 и 1.83 године (видети Сликe 3 и 4).

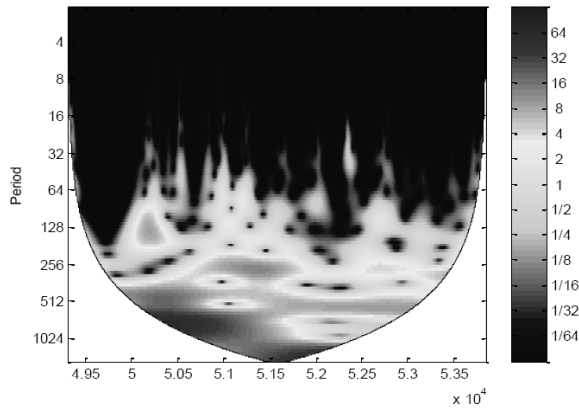
Исту методу смо применили на спектралне податке објекта NGC4151 и добили смо у континууму и H_{β} линији периодичност (Сликe 5 и 6) од 2.05 година и 2.12 година, редом. За овај објекат нисмо радили полифазно ресемпловање јер је покривеност посматрањима релативно добра, имајући у виду да је NGC4151 један од најбоље праћених објеката.



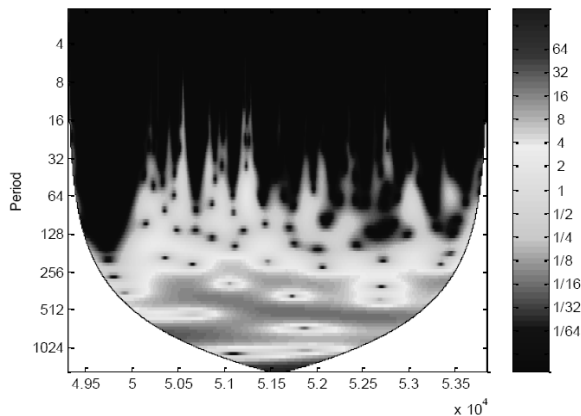
Слика 3. Непрекидна вејвлет трансформација ресемпловане континуум линије објекта 3C390.3. Израчуната периодичност је 1.73 година. На оси x приказан је модификован јулијански дан, на оси y приказан је Фуријеов период у данима који одговара вејвлет скали приказаној на легенди на десној страни. Контура ограничава регион у коме је ниво поверења већи од 95%. Сигнал је јачи што је боја црвенија



Слика 4. Исто као на Слици 3, само за H_{β} линију објекта 3C390.3. Израчуната периодичност је 1.83 година.



Слика 5. Непрекидна вејвлет трансформација континуума објекта NGC4151. Израчуната периодичност је 2.05 година. На оси x приказан је модификован јулијански дан, на оси y приказан је Фуријеов период у данима који одговара вејвлет скали приказаној на легенди на десној страни. Контура ограничава регион у коме је ниво поверења већи од 95%. Сигнал је јачи што је боја црвенија



Слика 6. Исто као на Слици 5, само за H_{β} линију објекта NGC4151. Израчуната периодичност је 2.12 година.

3. ЗАКЉУЧЦИ

У овом раду смо показали да постоји велика вероватноћа да дуговреме променљивости H_{β} линија и континуума централним деловима активних галаксија 3C390.3 и NGC4151. У случају 3C390.3 периодичност линија је вероватно повезана са ударним таласима у близини супермасивне црне рупе, који се шире у спољном делу диска (видети рад [4]). Ова квази-периодичност је између 1.7 и 2.8 година.

Код NGC4151 је мало теже објаснити квази-периодичност, пошто највероватније имамо избацивање материје, а утицај диска није толико

доминантан (видети [13, 14] итд.). Међутим, овде би ова промењивост опет била везана са диском, али овог пута са магнетним пољем диска. У сваком случају истраживања у овој области су у развоју и очекују се нови квалитативни резултати о структури АГЈ.

ЗАХВАЛНОСТ

Овај рад је део пројекта *Астрофизичка спектроскопија екстрагалактичких објеката* Министарства за науку и технолошки развој Републике Србије.

4. ЛИТЕРАТУРА

- [1] Eracleous, M., Halpern, J. P., *ApJS*, **90**, 1, (1994).
- [2] Eracleous, M., Halpern, J. P., *ApJS*, **150**, 181, (2004).
- [3] Shapovalova, A. I., Popović, L. Č., Burenkov, A. N., et al., *A&A*, **517**, 42, (2010).
- [4] Jovanović, P., Popović, L. Č., Stalevski, M., Shapovalova, A. I., *ApJ*, **718**, 168, (2010).
- [5] Popović L. Č., Mediavilla, E., Bon, E., Ilić, D., *A&A*, **423**, 909 (2004).
- [6] Popović L. Č., *SerAJ*, **173**, 1, (2006).
- [7] Bon, E., Popović, L. Č., Gavrilović, N., Mura, G. La, Mediavilla, E., *MNRAS*, **400**, 924, (2009).
- [8] Peterson, B. M., *PASP*, **105**, 207, (1993).
- [9] Shapovalova, A. I., Popović, L. Č., Bochkarev, N. G., et al., *NewAR*, **53**, 191, (2009).
- [10] Shapovalova, A. I., Popović, L. Č., Collin, S., et al., *A&A*, **486**, 99, (2008).
- [11] Torrence, C., & Compo, G. P., *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **79**, 61, (1998).
- [12] Lachowicz, P., Gupta, A. C., Gaur, H., & Wiita, P. J., *A&A*, **506**, L17, (2009).
- [13] Shapovalova, A. I., Popović, L. Č., Burenkov, A. N., et al., *A&A*, **509**, 106, (2010).
- [14] Ilić, D., Popović, L. Č., León-Tavares, J., Lobanov, A. P., Shapovalova, A. I.; Chavushyan, V. H., in *Memorie della Società Astronomica Italiana*, **79**, 1105, (2008).

ПРЕГЛЕД ИСТРАЖИВАЊА ФЕНОМЕНА ГАМА БЉЕСКОВА

С. Симић¹, Л. Ч. Поповић²

¹*Природно-математички факултет Универзитета у Крагујевцу*

²*Астрономска опсерваторија у Београду*

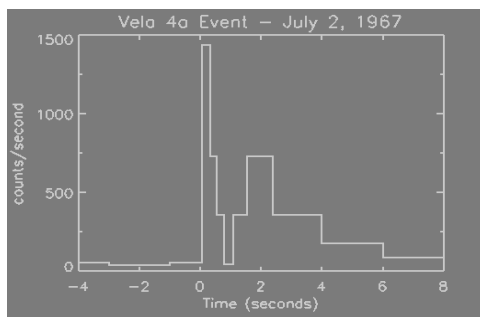
Сажетак. У овом раду смо дали тренутна сазнања и достигнућа у области астрофизике која се бави проучавањем гама бљескова. Хронолошки су представљене важне фазе у истраживању овог феномена које укључују најзначајније посматрачке податке добијене са истраживачких сателита, као и актуелни теоријски модели. Истакнути су кључни фактори који су довели до значајних пробоја и унапређења у укупном разумевању овог интересантног феномена. На крају су дате тренутне спекулације о самом иницијатору бљескова.

Abstract: In this paper we are presented current knowledge and achievements in the part of astrophysics which study gamma ray bursts (GRBs). We have given in chronological order important phases in history of phenomena research, which include most significant observational results from satellites as well as actual theoretical models. We emphasize key factors which bring us significant breakthrough and improvements in total understanding of these interesting phenomena. At the end we give current speculations about GRB progenitor.

1. УВОД

Истраживања у области гама бљескова трају већ више од три деценије. За то време било је доста продора у сазнањима везаним за овај феномен, али се и даље не може рећи са сигурношћу шта представљају ови интересантни догађаји. Наиме, оно што посматрачки уређаји детектују своди се на веома брзе и релативно краткотрајне флукуације у домену гама зрачења негде на небеској сфери. Те флукуације снимљене су први пут помоћу Америчког војног сателита Вела 4а (Слика 1), чија је намена била праћење поштовања споразума о забрани нуклеарних проба у Васиони. То случајно откриће било је чувано у тајности из војних разлога, више година, па се зато званично откриће овог феномена везује за интервал година од 1967 – 1973, када је објављено у раду Клебесадел и коаутори

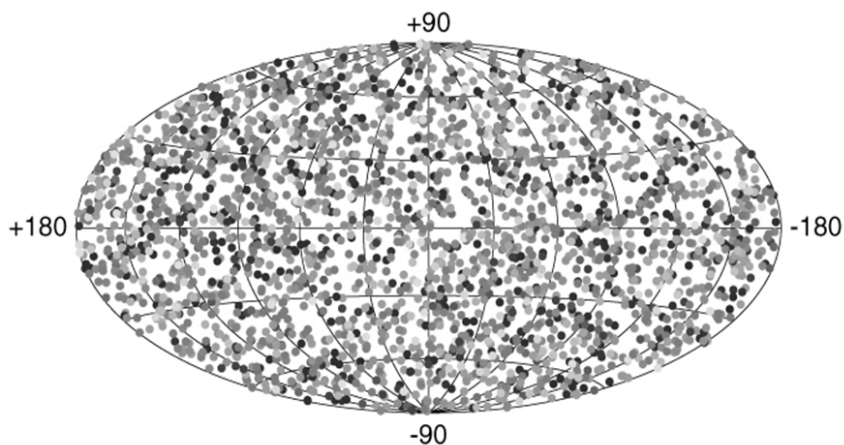
1973. Ово откриће потврђено је и посматрањима које је обавио совјетски војни сателит сличних намена, Конус 4.



Слика 1. Посматрање гама бљеска GRB02061967, сателитом Вела 4а

2. ОСНОВНЕ ОСОБИНЕ ГАМА БЉЕСКОВА

Дуго времена истраживачи у овој области нису имали јасну слику овог феномена. У једном моменту накупило се преко 120 различитих теорија које су на неки начин покушавале да објасне бљескове. Спекулације су се гомилале у веома широком домену од магнетских флерова, испаравање црних рупа, антимаеријска акреција, млазеви материје из активних галактичких језгара, судари неутронских звезда и црних рупа, па све до оних егзотичних као што су поруке ванземаљаца и томе слично.

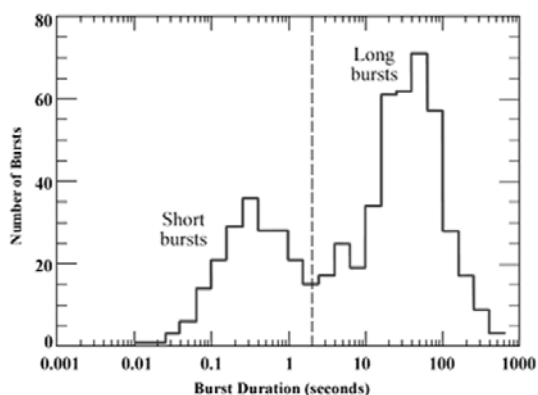


Слика 2. Хомогена расподела бљескова на небеској сфери

Прва посматрања су била ограничена, пре свега због ограничености опреме са којом се радило, па се укупан детектовани флуks сводио на високоенергетско гама зрачење. Стога је и јасно зашто је постојала оваква конфузија у оквиру теоријског разумевања феномена. Први велики продор у овој области десио се са лансирањем специјализоване опсерваторије за

посматрања у домену гама зрачења, која се звала CGRO (*Compton Gamma Ray Observatory*) или краће Комптонова обсерваторија, лансирана 1991. године, која је на себи носила више различитих детекторских система. Најважнији за гама бљескове био је BATSE (*Burst and Transient Spectrometer Experiment*) екперимент, састављен од 8 гама бројача размештених на све углове сателита, са којим се покривала целокупна небеска сфера, односно просторни угао од 4π .

Резултати посматрања овог сателита показују да је расподела гама бљескова на небеској сфери хомогена, (Слика 2.) тј., да нема груписања посматраних догађаја који би пратили обресе наше галаксије. Ово недвосмислено доводи до закључка да феномен гама бљескова не припада нашој галаксији, односно да је вангалактичког порекла, чиме се одбацују сви модели који претпостављају галактичко порекло. Овакав закључак довео је до још већих недоумица, јер у том случају гама бљескови припадају некој другој галаксији, а с обзиром на огромна међугалактичка растојања и познати флуks на месту посматрања, закључује се да је потребна огромна енергија за реализацију овог феномена.

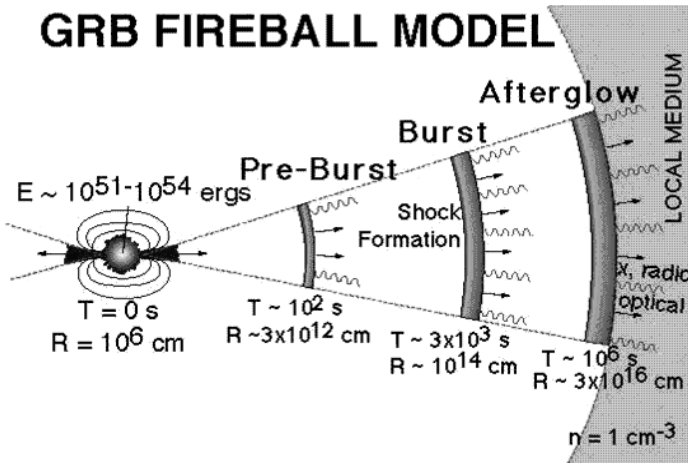


Слика 3. Две групе гама бљескова, дуги и кратки

Други веома важан резултат посматрања овог сателита представља разврставање феномена у две подгрупе, дуги ($T_{90} > 2$ сек) и кратки ($T_{90} < 2$ сек) бљескови (Слика 3). Ова подела произилази из зависности броја посматраних бљескова од дужине трајања T_{90} . Дуална природа бљескова највероватније долази од тога што се ради о два различита феномена, која имају сличну појавност. Наиме, претпоставља се да кратки бљескови потичу од судара масивних објеката, као што су црне рупе и неутронске звезде, а да је узрочник дугих бљескова колапс масивне звезде типа Волф-Раје, по сценарију сличном суперновама.

Још један важан продор у истраживању овог феномена догодио се након лансирања ВерроSAX сателита за посматрања у домену X и гама зрачења. Резултати овог сателита свде се на откриће зрачења на нижим енергијама у домену X зрака, што је по неким теоријским моделима било и предвиђено. Након овога открића, земаљским инструментима није било тешко да открију зрачење гама бљескова и у оптичком и радио домену.

GRB FIREBALL MODEL

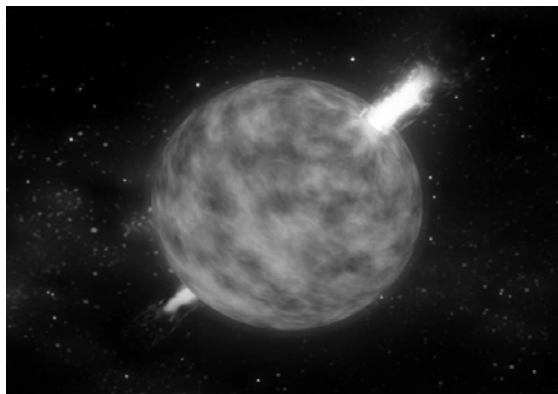


Слика 4. Скица модела ватрене лопте

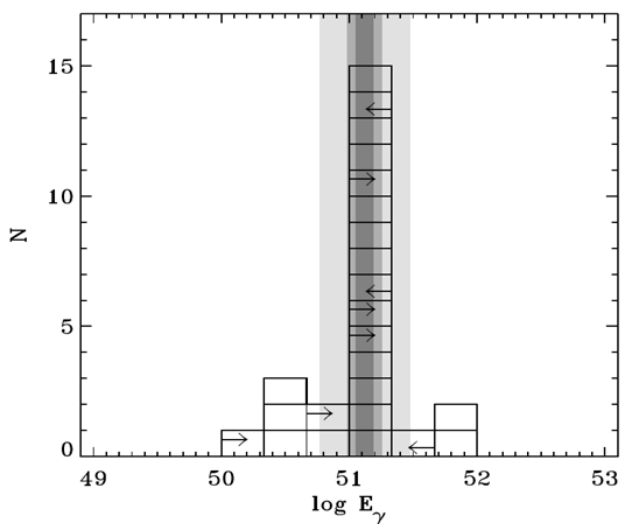
На основу ових посматрачких закључака дошло се до једног модела који се издвајао од осталих, модела ватрене лопте. Он предвиђа да узрочник гама бљеска, који је још увек мистерија, на неки начин избацује материју ултра релативистичких брзина изотропно на све стране од центра експлозије. Таква материја ствара ударни талас и емитује зрачење синхротронским механизмом. Уочена променљивост светлосне криве објашњава се међусобном интеракцијом брже и спорије материје у раној фази бљеска. Како се материја успорава, тако се и енергија зрачења смањује, па имамо скоро континуални прелазак са једног на други домен.

Мада на први поглед идеалан по слагању са посматрањима, модел ватрене лопте је имао својих недостатака. Пре свега ради се о изузетно великој енергији која је потребна да се овакав сценарио одигра, а која је реда половини масе мировања Сунца. Ако се још узме у обзир да су димензије догађања реда 10^6 до 10^8 cm, онда долазимо до великог проблема како сместити тако велику енергију на тако мали простор. Једноставно, не постоји задовољавајуће физичко објашњење процеса који омогућују овакав сценарио. Стога, је уведена мала корекција модела у смислу да је избачена релативистичка материја колимирана, тј., усмерена у одређени мали просторни угао θ_m . Оваква предпоставка доводи до знатног смањивања укупне потребне енергије, али доводи у питање посматрану учестаност догађања бљескова, која износи приближно 1 дневно. Уколико се усвоји колимирани модел, број бљескова би морао да буде већи за око 100 пута, што није у складу са предвиђеним бројем одумирујућих звезда по галаксији. Ипак, модел ватрене лопте, са колимацијом или не је тренутно најбоље што имамо као објашњење овог необичног феномена.

Досадашња посматрања показују да је укупна енергија гама бљескова, ако се усвоји колимирани модел реда око 10^{52} erg, (види Сliku б.) што за више редова величине премашује укупну енергију код експлозије супернових. Стога се сматра да бљесови представљају најбурније догађаје које познајемо у Васиони.



Слика 5. Уметничка визија колимације у језгру бљескова



Слика 6. Расподела бљескова по енергијама.

3. ПРОМЕНЉИВОСТ СВЕТЛОСНЕ КРИВЕ

Као што се може видети са Сlike 1. светлосна крива бљескова је састављена од више импулса различитих дужина трајања и интензитета. Она показује да се укупан флуks зрачења у првој фази експлозије веома брзо мења. По моделу ватрене лопте посматрана променљивост зрачења објашњава се међусобном интеракцијом релативистичких љуски које се шире од центра. У тренутку интеракције спорија љуска бива захваћена бржом, што нагло повећава број честица које емитују, као и њихову енергију, па се као резултат добија појачање зрачења, односно импулс.

Праћењем еволуције ударног таласа као и његове интеракције са споријим, може се доћи до теоријског модела који ће репродуковати синтетизовану светлосну криву бљескова. За такав случај узели смо као основне променљиве масу релативистичке љуске m_s , њен Лоренцов фактор

Γ и растојање од центра експлозије R . Једначине које еволуирају ове променљиве су (Симић и коаутори, 2007):

$$\begin{aligned}\frac{dR}{dt} &= c\sqrt{\Gamma^2 - 1} \left[\Gamma + \sqrt{\Gamma^2 - 1} \right] \\ \frac{d\Gamma}{dm} &= -\frac{\Gamma^2 - 1}{M_{ej} + 2(1 - \xi)\Gamma m + \xi m} \\ \frac{dm}{dt} &= 2\pi n m_p (1 - \cos\theta) \frac{R^2}{\Gamma^3} \left[3\Gamma \frac{dR}{dt} - 2R \frac{d\Gamma}{dt} \right]\end{aligned}\quad (1)$$

За описивање густине ударног таласа n користили смо:

$$n = n_0(4\Gamma + 3) \left(\frac{R_0}{R} \right)^s \left(1 + a \cdot \exp \left[- \left(\frac{R - R_c}{b} \right)^2 \right] \right) \quad (2)$$

где R_0 представља растојање на коме долази до интеракције, а параметри a и b одређују ширину и висину споријег ударног таласа или густинске баријере, n_0 је густина околног медијума. С обзиром на захтев за ултра релативистичко кретање наелектрисаних честица, за очекивати је да се формира снажно магнетно поље у простору где се честице крећу. Ми смо израчунали магнетну индукцију у референтном систему ударног таласа као удео ξ_b у укупној енергији ударног таласа који је у интервалу вредности од 0.1 до 0.2. Добија се:

$$B' = \sqrt{8\pi \xi_B n_0 \Gamma m_p c^2 (4\Gamma + 3) \left(\frac{R_0}{R} \right)^s \left[1 + a \cdot e^{-\left(\frac{R - R_c}{b} \right)^2} \right]} \quad (3)$$

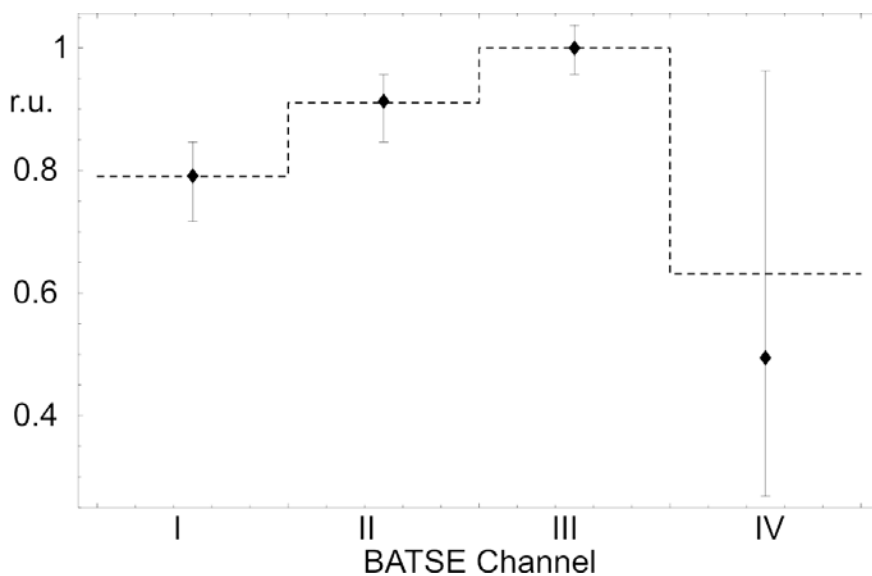
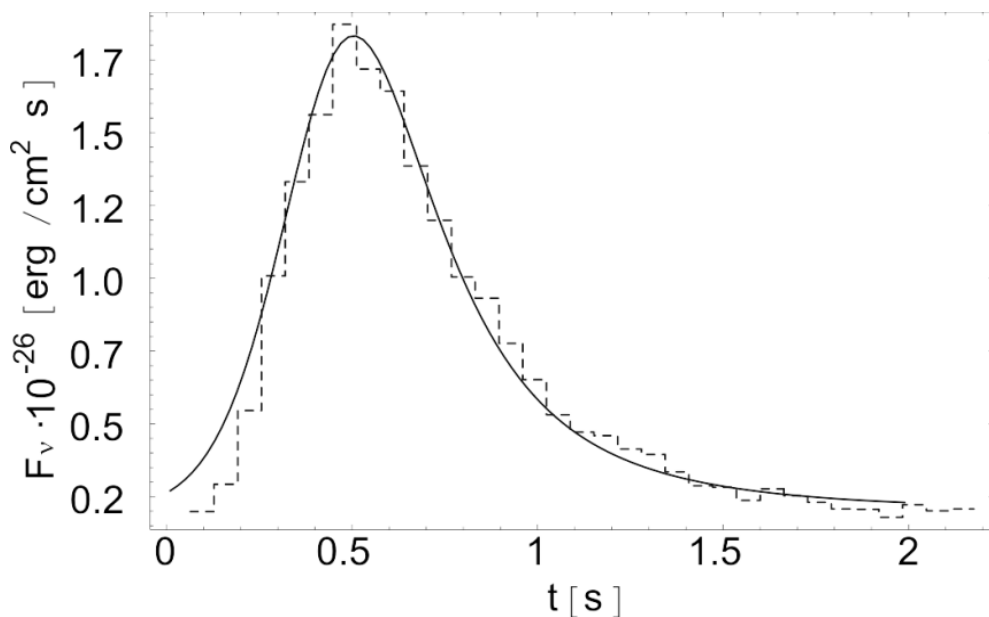
Зрачење наелектрисаних честица, пре свега електрона, добија се помоћу синхротронског механизма, при чему се наелектрисане честице спирално крећу дуж линија магнетних сила. С обзиром да честице могу имати различите енергије, ми смо претпоставили да је њихова енергија дата опадајућом степеном расподелом $f(N)$ у неком интервалу од γ_{emin} до γ_{emax} . У том случају, укупна израчена енергија у јединици времена ће бити:

$$P'_\nu = \frac{\sqrt{3} e^3 B'}{m_e c^2} \int_{\gamma_{emin}}^{\gamma_{emax}} f(N_e) \int_{\xi}^{\infty} K_{5/3}(\eta) d\eta d\gamma_e \quad (4)$$

где је $K_{5/3}(\eta)$ Беселова функција.

На основу изложеног модела могуће је добити појединачне импулсе у оквиру светлосне криве блескова (Слика 7), као и синтетизовану укупну светлосну криву зрачења (Слика 8).

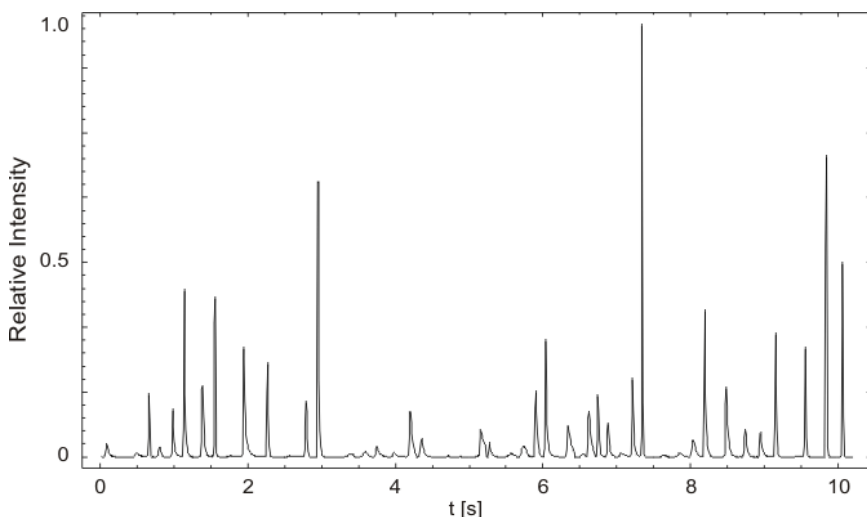
Видимо да модел добро фитује појединачне импулсе светлосне криве, што је посебно изражено за десни део када емисија опада. Тај део приближно прати опадајући експоненцијални закон и приметан је код



Слика 7. Моделовани импулс светлосне криве (горе) и пикови зрачења у сва четири БАТСЕ енергетска канала

већине посматраних импулса, с тим да је негде више, а негде мање изражен.

Импулси често могу да буду и знатно шири него што је приказано на Сликама 7 и 8. Таква ситуација добија се када бржи ударни талас налети на спорију густинску баријеру формирану нагомилавањем избачене материје.



Слика 8. Синтетизована светлосна крива добијена сукцесивним ређањем импулса.

Као резултат интеракције имамо импулс већег интензитета и трајања, који се у оквиру светлосне криве јављају углавном сами или у комбинацији са још пар мањих импулса.

4. ЗАКЉУЧАК

Овим кратким прегледом истраживања у области гама бљескова, хтели смо да укажемо на проблеме у изучавању овог феномена. Као закључак, можемо рећи, да иако већ тридесет година проучавамо јаке и краткотрајне изворе гама зрачења, још нисмо у стању да објаснимо све пропратне феномене. Нпр. питање огромне енергије која се ослободи током ових догађаја. Модел ударних таласа, представља до сада најбоље решење за описивање целог феномена, а у овом раду смо дали кратак опис овог модела и наш допринос у развоју истог.

На основу увида у досадашња истраживања, која су делимично представљена у овом раду, стиче се утисак да је у овој области доста неодређеног, а тиме и пуно отвореног простора за будућа истраживања.

5. ЛИТЕРАТУРА

- [1] Klebesadel, R. W., Strong, I. B., Olson, R. A., ApJ, 182, 85, (1973).
- [2] Simić, S., Popović, L. Č., Andersen, M. I. & Christensen, L., A&SS, 309, 173, (2007).

ШТАРКОВО ШИРЕЊЕ СПЕКТРАЛНИХ ЛИНИЈА ТЕШКИХ МЕТАЛА У АТМОСФЕРАМА ТОПЛИХ ЗВЕЗДА

З. Симић

*Астрономска опсерваторија Београд, Волгина 7,
11060 Београд, Србија*

Сажетак. Са развојем астрономских посматрања из свемира, сада је могуће посматрати у звезданим спектрима спектралне линије елемената који се налазе у траговима и то са добром резолуцијом. Овде, дајемо преглед рада у Београду о утицају Штарковог ширења спектралних линија тешких метала у звезданим спектрима и представљамо нова одређивања параметара Штарковог ширења неутралног телура. Такође, упоређене су одговарајуће Штаркове и Доплерове ширине у атмосферама топлих звезда.

Abstract. With the development of astronomical observations from space, spectral line of trace elements can now be observed in stellar spectra with good resolution, and atomic data for such atoms and ions have an increasing significance. We review here work in Belgrade on the influence of Stark broadening of heavy elements on stellar spectra and present new determinations of Stark broadening parameters of neutral tellurium. Also the corresponding Stark and Doppler widths are compared in hot star atmospheres.

1. УВОД

Штарково ширење спектралних линија неутралних атома и јона интересантно је не само за лабораторију, производњу ласера, фузију и испитивање технолошке плазме, већ и за астрофизичку плазму, посебно за синтезу и анализу спектра високе резолуције добијеног инструментима нове свемирске технологије.

Са развојем астрономских посматрања из свемира, сада је могуће посматрати у звезданим спектрима спектралне линије елемената који се налазе у траговима, што је од посебног значаја за моделирање атмосфера топлих звезда и њихове унутрашњости.

Упркос чињеници да је телур један од најмање заступљених елемената у Земљиној литосфери, његово космичко изобиље је веће него за било који елемент чији је редни број већи од 40. На пример, једна линија овог елемента идентификована је у фотосфери звезде Procyon [1] и

употребљена је за одређивање његовог изобиља. Такође испитивања спектра хладних белих патуљака DO типа HD 149499 B и HZ 21 показала су присуство телура у фотосферским областима [2].

Потреба за Штарковим подацима једноструко наелектрисаних емитера хрома, мангана, злата има посебан карактер и значај јер су детектовани у бројним астрофизичким спектрима [3-5].

Овде, дајемо преглед рада у Београду о утицају Штарковог ширења спектралних линија тешких метала у звезданим спектрима и представљамо нова одређивања параметара Штарковог ширења неутралног телура.

2. РЕЗУЛТАТИ И ДИСКУСИЈА

Параметри Штарковог ширења, ширина и помак спектралних линија неутралног телура одређени су у оквиру семикласичног прилаза [6-11] за густину пертурбера 10^{16} cm^{-3} и температуру у интервалу од 2500 до 150000 K. У Табели 1 представљамо резултате за два мултиплета телура услед електронског судара, комплетни прорачуни могу се видети у раду [12].

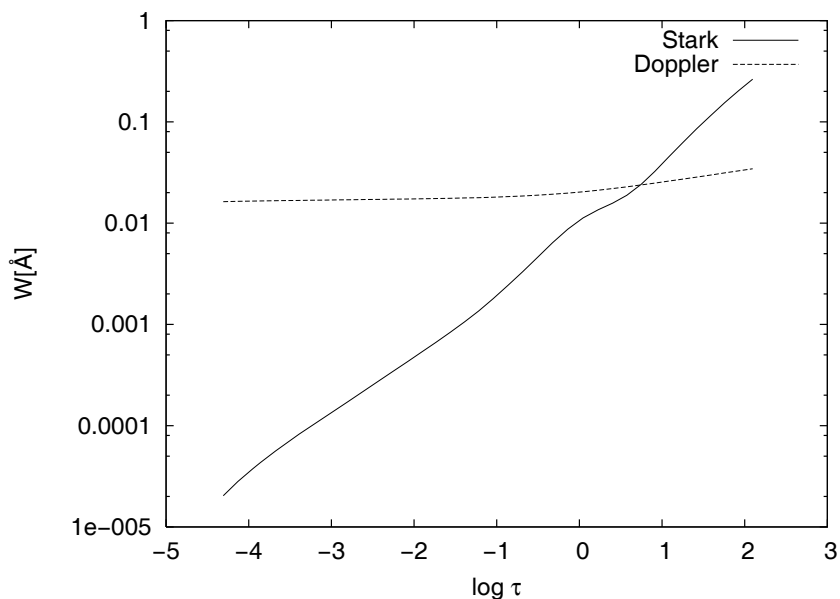
Табела 1. Ширина и помак спектралних линија неутралног телура. Ако се параметар C [$\text{cm}^{-3} \text{ \AA}$] [13] подели са пуном ширином на половини максимума, добија се процена максималне густине пертурбера до које се резултати могу поуздано применити.

Прелаз	$T(\text{K})$	$W_e(\text{\AA})$	$d_e(\text{\AA})$
Te I $6s^5S^{\circ}-7p^5P$ 5125.2 \AA $C = 0.57E+19$	2500	0.125	0.758E-01
	5000	0.146	0.912E-01
	10000	0.170	0.944E-01
	20000	0.196	0.894E-01
	30000	0.212	0.770E-01
	50000	0.230	0.638E-01
	100000	0.244	0.515E-01
Te I $6s^5S^{\circ}-6p^5P$ 9903.9 \AA $C = 0.99E+20$	150000	0.243	0.435E-01
	2500	0.143	-0.698E-01
	5000	0.151	-0.808E-01
	10000	0.170	-0.948E-01
	20000	0.194	-0.109
	30000	0.209	-0.113
	50000	0.226	-0.112
100000	0.243	-0.987E-01	
150000	0.249	-0.867E-01	

Утицај Штарковог ширења у атмосферама топлих звезда испитан је на моделу звездане атмосфере класе А [14], Слика 1. Штаркове ширине мултиплета 5125.2 \AA упоређене су са Доплеровим ширинама за модел $T_{eff} = 10000 \text{ K}$, $\log g = 4.5$. Приметимо да је Штарково ширење доминантно у дубљим слојевима звездане атмосфере, за $\log \tau > 0.8$. Штарково ширење профила линија може се описати Лоренцовом расподелом, а Доплерово

Гаусовом, зато, чак и када су мање ове ширине од Доплерових, Штарково ширење може бити од важности у крилима линије.

У случају неутралног телура не постоје други теоријски ни експериментални резултати са којим би се ови наши теоријски прорачуни ширине и помака упоредили.



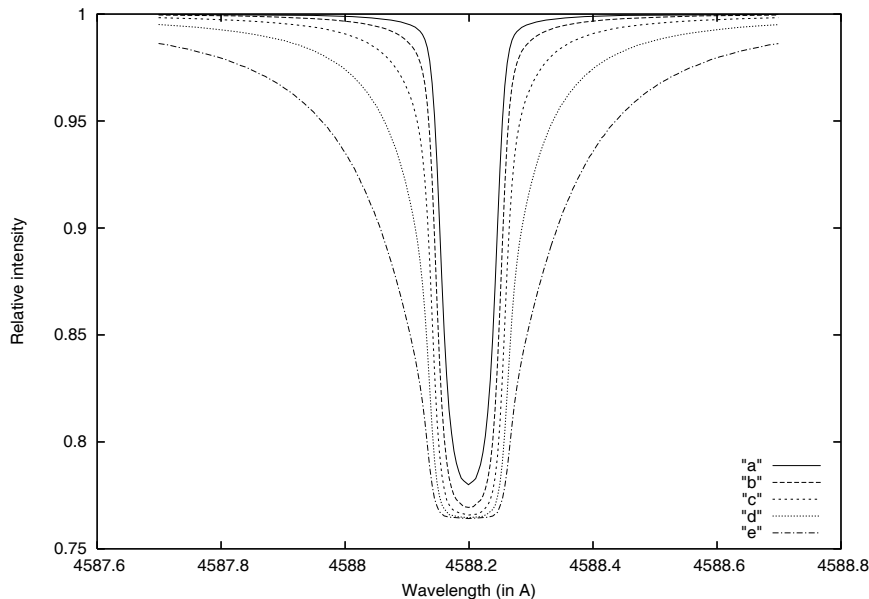
Слика 1. Штаркова и термална Доплерова ширина са спектралну линију $Te I 6s^5S^{\circ}-7p^5P 5125.2 \text{ \AA}$ у функцији логаритма Роселандове оптичке дубине, за модел $T_{eff} = 10000 \text{ K}$, $\log g = 4.5$

Истраживање утицаја Штарковог ширења у звезданим спектрима започето је у Београду 1988. године, када је утицај овог механизма анализиран на звезданој атмосфери типичне звезде касног Б типа са параметрима $T_{eff} = 13000 \text{ K}$, $\log g = 4.2$ [15]. Утицај Штарковог ширења у звезданим атмосферама хемијски необичних звезда А типа истраживан је у бројним радовима, на пример, за спектралне линије $Au II$ [16], $Co III$ [17], $Ge I$ [18], $Ga I$ [19] и $Cd I$ [20] и за сваки испитиван спектар нађен је атмосферски слој звезде где је допринос овог механизма доминантан или се не може занемарити.

У атмосферама магнетних, хемијски необичних звезда идентификован је велики број спектралних линија $Cr I$ и $Cr II$ у широком опсегу екситационих енергија. Применом семикласичне теорије [6-11] добијени су параметри Штарковог ширења седам најјачих $Cr II 4s-4p$ мултиплета за густину пертурбера 10^{14} cm^{-3} [21] и температуру у интервалу 2500 до 100000 К и девет резонантних $Cr II 3d^5-3d^44p$ мултиплета за густину пертурбера 10^{17} cm^{-3} и температуру у интервалу 2500 до 100000 К.

Да би приказали утицај Штарковог ширења, овде издвајамо пример на Слици 2, профил линије $Cr II 4588.2 \text{ \AA}$ синтетизован помоћу SYNTH

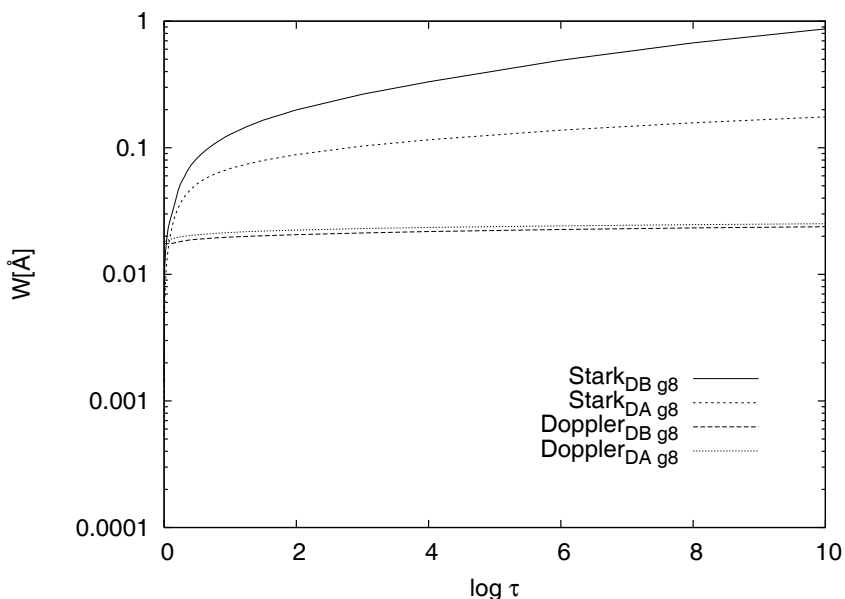
програма [22]. Прорачун је рађен за модел атмосфере $T_{eff} = 8750$ K, $\log g = 4.0$ за различите заступљености хрома. Као што се очекује, утицај Штарковог ширења расте у крилима линије и са порастом обиља хрома у звезданој атмосфери.



Слика 2. Профили линија Cr II 4588.2 Å: (“a”) без доприноса Штарковог ширења и са Штарковим ширењем али за различите заступљености хрома $\log Cr/H$; (“b”) код Сунца, (“c”) -3.75, (“d”) -3.25, (“e”) -2.75. Модел атмосфере $T_{eff} = 8750$ K, $\log g = 4.0$

Присуство мангана и његових јона нарочито је изражено у спектрима Hg-Mn звезда. Наши резултати прорачуна Штарковог ширења шест Mn II линија [23] од којих овде издвајамо један анализиран пример као илустрацију, Слика 3, добијени су применом семикласичне теорије [6-11] за густину пертурбера 10^{17} cm^{-3} и температуру у интервалу 5000 до 100000 K. На Сlici 3, упоређена је Штаркова и термална Доплерова ширина за спектралну линију Mn II a $^5S - z^5P^o$. Дакле, механизам Штарковог ширења апсолутно је доминантан у оба случаја DA и DB типа патуљака. Такође, примећујемо да је код DB типа патуљака Штарково ширење у дубљим слојевима и за ред величине веће него код DA типа патуљака, а до два реда величине према термалном Доплеровом ширењу.

За једанпут јонизовано злато постоје теоријски прорачуни Штарковог ширења [16] за осам мултиплета, које смо овде искористили за поређење са постојећим експерименталним подацима. Због комплексности спектра у прорачунима [16] коришћена је апроксимација jj везе у модификованом семиемпиријском прилазу. Такође, испитан је утицај Штарковог ширења у атмосферама топлих звезда [16]. Овде издвајамо као



Слика 3. Штаркова и термална Доплерова ширина за спектралну линију Mn II, а ${}^5S - z {}^5P^{\circ}$ у звезданим атмосферама белих патуљака DA и DB типа у функцији логаритма оптичке дубине, за модел $T_{\text{eff}} = 15000 \text{ K}$, $\log g = 8$

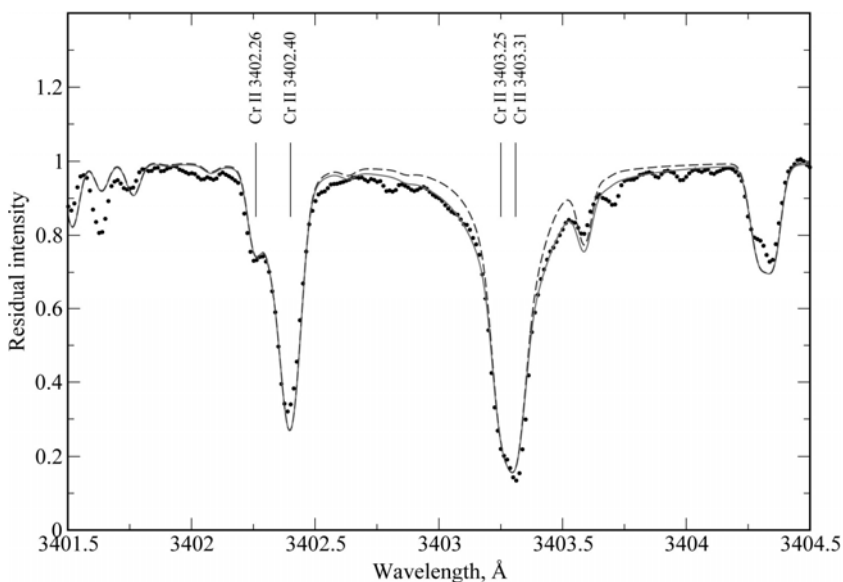
пример, Табела 2, поређење теоријских и експерименталних прорачуна за четири Au II мултиплета. Једина постојећа мерења до сада позната у литератури су Штаркове полуширине 26 спектралних линија Au II [24]. У научној сарадњи која постоји са овим ауторима добијена су нова мерења, која овде такође презентујемо у истој табели.

Табела 2. Поређење експерименталних и теоријских резултата: W_m/W_{th} однос мерења [24] и теоријских прорачуна [16], W_m'/W_{th} однос нових мерења и теоријских прорачуна.

$\lambda(\text{\AA})$	W_m	W_m/W_{th}	W_m'	W_m'/W_{th}
1921.00	0.0338	1.15	0.0173	0.96
2044.54	0.0372	1.12	0.0179	0.87
2215.64	0.0424	0.38	0.0759	1.10
2263.63	-	-	0.1006	1.16

У спектру HD 133792 идентификовано је 9 спектралних линија Cr I и 17 спектралних линија Cr II [25]. Профили Cr II у интервалу 3400-3425 \AA (мултиплета 3) спектра HD 133792 омогућавају да по први пут упоређујући посматрачке податке са теоријским прорачунима [26] на задовољавајући начин тестирамо њихов квалитет као и да критички проценимо тачност експерименталних података добијених у лабораторији [27]. На Слици 4, примећујемо добро слагање између посматрања и наших прорачуна, нарочито у крилима ових спектралних линија Cr II. Због тога важност

познавања Штаркових параметра има изузетан значај код Ар звезда јер је ефекат Штарковог ширења доминантан механизам ширења притиском у њиховој атмосфери.



Слика 4. Поређење између посматраног профила спектралне линије Cr II 3403.30 Å (тачкице), синтетичког прорачуна са Штарковим параметрима из овог рада (пуна линија) и прорачуна из рада [27] (испрекидана линија)

3. ЛИТЕРАТУРА

- [1] Yuschenko, A.V., Gopka, V.F., *Astron. Astrophys. Trans.*, **10**, 307, (1996).
- [2] Chayer, P., Vennes, S., Dupuis, J., Kruk, J.W., *ApJ*, **630**, L169, (2005).
- [3] Shevchenko, V.S., *Astron. Zh.*, **71**, 572, (1994).
- [4] Wahlgren, G.M., Hurbig, S., *A&A*, **418**, 1073, (2004).
- [5] Wahlgren, G.M., Lecrone, D.S., Johansson, S.G., Roseberg, M., Brage, T., *ApJ*, **444**, 438, (1995).
- [6] Sahal-Bréchet, S., *A&A*, **1**, 91, (1969a).
- [7] Sahal-Bréchet, S., *A&A*, **2**, 322, (1969b).
- [8] Fleurier, C., Sahal-Bréchet, S., Chapelle, J., *JQSRT*, **17**, 595, (1977).
- [9] Sahal-Bréchet, S., *A&A*, **245**, 322, (1991).
- [10] Dimitrijević, M.S., Sahal-Bréchet, S., Bomier, V., *A&AS*, **89**, 581, (1991).
- [11] Dimitrijević, M.S., Sahal-Bréchet, S., *Physica Scripta*, **54**, 50, (1996).
- [12] Simić, Z., *Štarkovo širenje spektralnih linija u hemijski neobičnim zvezdama*, Zadužbina Andrejević, Beograd, (2010).

- [13] Dimitrijević, M.S., Sahal-Bréchet, S., *JQSRT*, **31**, 301, (1984).
- [14] Kurucz, R.L., *ApJS*, **40**, 1, (1979).
- [15] Lanz, T., Dimitrijević, M.S., Artru, M.C., *A&A*, **192**, 249, (1988).
- [16] Popović, L.Č., Dimitrijević, M.S., Tankosić, D., *A&AS*, **139**, 617, (1999).
- [17] Tankosić, D., Popović, L. Č., Dimitrijević, M.S., *A&A*, **399**, 795, (2003).
- [18] Dimitrijević, M.S., Jovanović, P., Simić, Z., *A&A*, **410**, 735, (2003).
- [19] Dimitrijević, M.S., Dačić, M., Cvetković, Z., Simić, Z., *A&A*, **425**, 1147, (2004).
- [20] Simić, Z., Dimitrijević, M.S., Milovanović, N., Sahal-Bréchet, S., *A&A*, **441**, 391, (2005).
- [21] Dimitrijević, M.S., Ryabchikova, T., Simić, Z., Popović, L.Č., Dačić, M., *A&A*, **469**, 681, (2007).
- [22] Piskunov, N., In *Stellar Magnetism*, Eds. Yu. V. Glagolevskij, & I.I. Romanyuk, (St. Petersburg, Nauka), 92, (1992).
- [23] Popović, L. Č., Dimitrijević, M.S., Simić, Z., Dačić, M., Kovačević, A., & Sahal-Bréchet, S., *New Astronomy*, **13**, 85, (2008).
- [24] Ortiz, M., Mayo, R., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **38**, 3953, (2005).
- [25] Kochukhov, O., Tsymbal, V., Ryabchikova, T., Makaganyk, V., Bagnulo, S., *A&A*, **460**, 831, (2006).
- [26] Dimitrijević, M.S., Ryabchikova, T., Simić, Z., Popović, L. Č., Dačić, M., *A&A*, **469**, 681, (2007).
- [27] Kurucz, R.L., *CDROMs 13, 22, 23*, SAO, Cambridge, (1993).

Судари електрона са атомима и молекулима

ДИФЕРЕНЦИЈАЛНИ ПРЕСЕЦИ ЗА РАСЕЈАЊЕ ЕЛЕКТРОНА НА АТОМИМА СРЕБРА И ОЛОВА

С. Д. Тошић¹, Д. Шевић¹, В. Пејчев², Б. П. Маринковић¹

¹Институт за физику, Универзитет у Београду, Београд, Србија

²Природно математички факултет, Универзитет у Крагујевцу,
Крагујевац, Србија

Сажетак. У овом раду приказани су резултати експерименталног истраживања еластичног и нееластичног расејања електрона на атомима сребра и олова. У експерименту са укрштеним електронским и атомским млазом (моноенергијски млаз електрона се под правим углом расејава на млазу атома) измерени су диференцијални пресеци (*DCS*) за еластично расејање и ексцитацију неразложених резонантних линија сребра ($4d^{10}5p^2P_{1/2, 3/2}$) и олова ($6p7s^3P_{0,1}$) електронима упадних енергија (E_0) 10, 20, 40, 60, 80 и 100 eV у интервалу угла расејања од 1° до 150° за ексцитацију, односно од 10° до 150° за еластично расејање. Апсолутне вредности пресека су добијене нормирањем релативних вредности на оптичку јачину осцилатора (ексцитација) односно помоћу количника интензитета еластичног и нееластичног пика на одређеном углу расејања (еластично расејање). Експериментални резултати су поређени са постојећим теоријским прорачунима.

Abstract. Here we present results of our experimental investigations of the both elastic and inelastic electron scattering by silver and lead. The experimental investigation was based on crossed beam technique with effusive atomic beam being perpendicularly crossed by electron beam. Differential cross sections (*DCSs*) for elastic scattering and excitation of the unresolved $4d^{10}5p^2P_{1/2, 3/2}$ silver line and $6p7s^3P_{0,1}$ lead line were measured at electron-impact energies (E_0) of 10, 20, 40, 60, 80 and 100 eV and for a range of scattering angles (θ) from 1° up to 150° (excitation) and from 10° to 150° (elastic scattering). The absolute differential cross sections for excitation have been obtained through the normalization procedure to the optical oscillator strength, i.e. by using the elastic-to-inelastic (the unresolved silver resonant lines $4d^{10}5p^2P_{1/2, 3/2}$) intensity ratio at certain scattering angle. The experimental results have been compared with the corresponding calculations.

1. УВОД

Електрон атомски сударни процеси су несумњиво имали значајну улогу у развоју модерне физике. Резултати испитивања ових процеса представљају богат извор информација о динамици самог процеса, интеракцијама које владају међу атомима и молекулима као и о њиховој структури а колики је њихов значај говори и чињеница да су многи елементарни процеси не само у атомској и молекулској физици већ и у астрофизици, биофизици, атмосфереској физици, физици плазме и ласера, физици површина и ниских температура и у многим другим областима управо сударни процеси. Међутим, објашњење ових процеса није ни мало лако. Честице учесници судара интерагују у коначном делу простора, у тзв. интеракционој запремини при чему у већој или мањој мери мењају своје почетно квантно стање. Експериментално проучавање подразумева мерење и детекцију насталих промена под условом да је почетно стање познато (енергија, правац кретања, поларизација...). Ако имамо у виду да се у самом сударном процесу као последица корелације између електронског облака атома мете и упадног електрона, као и међусобних унутрашњих корелација јављају многи физички феномени и ефекти, долазимо до закључка да ни теоријски опис проблема није једноставан и да очигледно зависи од тога који се од наведених ефеката узима у обзир.

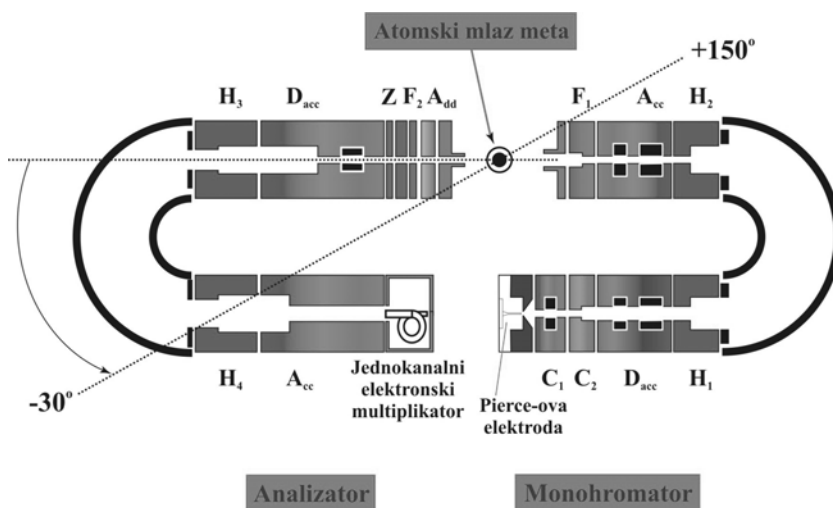
Процес расејања електрона се квантитативно описује тзв. диференцијалним пресеком који суштински представља вероватноћу да дође до интеракције, тј. судара. Експериментално одређивање диференцијалних пресека се своди на детекцију расејаних електрона после еластичног или нееластичног расејања на атому мети. Мерени сигнал пропорционалан броју тих електрона се применом одговарајућих корекционих фактора претвара у релативни диференцијални пресека а апсолутне вредности се добијају одговарајућим поступком нормирања.

Кроз експериментално истраживање сударних процеса електрона на атомима сребра и олова покушали смо да дамо свој допринос споменутој области [1-4]. У овом раду представљен је део резултата мерења диференцијалних пресека за еластично расејање електрона средњих енергија од 10 до 100 eV на атомима сребра и олова као и пресеци за електронску ексцитацију $4d^{10}5p \ ^2P_{1/2, 3/2}$ стања атома сребра и $6p7s \ ^3P_{0,1}$ стања атома олова. Осим експерименталних резултата Вилијамса и Трајмара [5] за еластично електрон-олово расејање и ексцитацију већ поменутог стања на једној јединој енергији упадних електрона енергији 40 eV, колико је познато ауторима овог рада не постоје други измерени пресеци ни за један од проучаваних сударних процеса ни на једној посматраној мети у датом опсегу енергија и углава расејања. Наше резултате поредили смо са овим постојећим експериментално добијеним вредностима на 40 eV, као и са постојећим теоријским прорачунима.

2. ЕКСПЕРИМЕНТ

2.1. Експериментални уређај

Резултати добијени у овом раду добијени су на електронском спектрометру ЕСМА у Лабораторији за физику атомских судара Института за физику у Земуну. Конфигурација експеримента заснива се на техници укрштених млазева у којој се моноенергијски млаз електрона расејава на млазу атома под правим углом. Само мерење се заснива на принципу бинарних судара у којима учествује једна честица пројектил (електрон) и једна честица мета (атом). Успешна реализација експеримента могућа је уз довољно добар вакуум у интеракционој комори, добро просторно и енергијски дефинисан млаз упадних електрона, ефузиони режим истицања пара метала који обезбеђује бољу колимисаност и одговарајућу честичну густину атомског млаза. С обзиром да је детаљни опис уређаја и експерименталне методе дат у низу публикација [1-4], овде ћемо приказати само најважније детаље.



Слика 1. Шематски приказ електронско-оптичког система

Шема електронско оптичког система приказана је на слици 1. Моноенергијски млаз електрона добија се вођењем, енергијском селекцијом и колимисањем електрона добијених термоелектронском емисијом из усијане катодe облика укоснице кроз монохроматор док се енергијска анализа и детекција расејаних електрона после расејања на атому мети врши анализатором. Електростатички дисперзиони елемент и код монохроматора и код анализатора је полусферни кондензатор, а контрола енергијске ширине и угла дивергенције млаза у складу са захтевима оптималног функционисања се обавља помоћу система цилиндричних електростатичких сочива. На крају анализатора налази се једноканални електронски мултипликатор који се користи за појединачно

бројање електрона, тј. као детектор. Сам анализатор може да ротира око осе која је нормална на раван расејања и пролази кроз интеракциону запремину при чему са истом заклапа углове од -30° до $+150^\circ$.

Атомски млаз је добијен загревањем метала у специјално конструисаној пећи направљеној од немагнетног нерђајућег челика која се греје помоћу два специјална отпорна коаксијална грејача. Један грејач се користи за грејање самог излазног канала, тј. горњег дела пећи, а други грејач за грејање доњег дела пећи, тј. талишта у коме се налази узорак метала који се греје. Горњи део пећи је загреван до нешто виших температура (разлика апроксимативно око 100°). Оваквим независним напајањем грејача спречено је кондензовање пара метала и запушавање излазног канала. За добијање довољног притиска пара метала олова и сребра постигнуте су радне температуре од око 1170 K за олово и 1300 K за сребро.

Сви елементи система налазе се у вакуумској комори од немагнетног нерђајућег челика која је од утицаја спољашњег магнетног поља заштићена облогама од μ -метала, а додатна заштита је спроведена употребом немагнетних материјала за израду свих елемената унутар ње. Предвакуум се постиже двостепеном механичком ротационом пумпом док две уљне дифузионе пумпе са траповима који се хладе течним азотом обезбеђују диференцијално пумпање саме коморе и електронско-оптичког система. На врху коморе, тачно изнад пећи (интеракционе запремине) налази се трап који се такође хлади течним азотом и чији је задатак хватање металних пара. Тако се спречава прљање коморе и напаравање метала на појединим деловима система.

2.2. Експериментална процедура и нормирање

Пре сваког мерења сниман је спектар губитака енергије како би се проверило да ли има двоструког (вишеструког) расејања или не, односно да ли су испуњени услови за бинарне сударе (двоструко расејање се манифестује у виду структуре на енергији једнакој двострукој енергији посматраног стања). Положај нултог угла расејања провераван је мерењем интензитета нееластично расејаних електрона на малим угловима расејања од -10° до $+10^\circ$ и провером симетричности угаоне расподеле. Снимљени одброји се коригују у зависности од положаја стварне нуле, а затим множе одговарајућим корекционим факторима за интеракциону запремину [6] у циљу добијања релативних пресека. Мерења на малим угловима карактеристична су за ексцитационе процесе док су у случају еластичног расејања, због утицаја примарног млаза, мерени одброји само на угловима већим од 10° .

Апсолутне вредности диференцијалних пресека добијене су нормирањем релативних пресека на функцију расејања унапред (ексцитација), односно помоћу количника интензитета еластичног и нееластичног пика у спектру губитака енергије на одређеном углу расејања (еластично расејање). Прву методу нормирања су предложили Авдонина и

сарадници [7], а детаљно је описана у раду чији су аутори Фелфли и Мсезане [8]. Користећи везу између генералисане јачине осцилатора (*GOS*) и диференцијалног пресека (*DCS*) [7]:

$$GOS(K, E_0) = \frac{\omega k_i}{2 k_f} K^2 DCS(E_0, \theta) \quad (1)$$

где је ω енергија ексцитације, k_i и k_f су импулси електрона пре и после судара, а K је интензитет пренесеног, тј. предатог импулса за који важи:

$$K^2 = 2E_0 \left[2 - \frac{\omega}{E_0} - 2\sqrt{1 - \frac{\omega}{E_0} \cos \theta} \right] \quad (2)$$

као и чињеницу да у граничном случају нултог преноса импулса генералисана јачина осцилатора постаје једнака оптичкој јачини осцилатора (*OOS*) (Ласетрова гранична теорема):

$$\lim_{k \rightarrow 0} GOS(K, E_0) = OOS \quad (3)$$

Фелфли и Мсезане [6] су описали процедуру за нормализацију диференцијалних пресека која је, за разлику од претходних, била применљива и за ниске енергије.

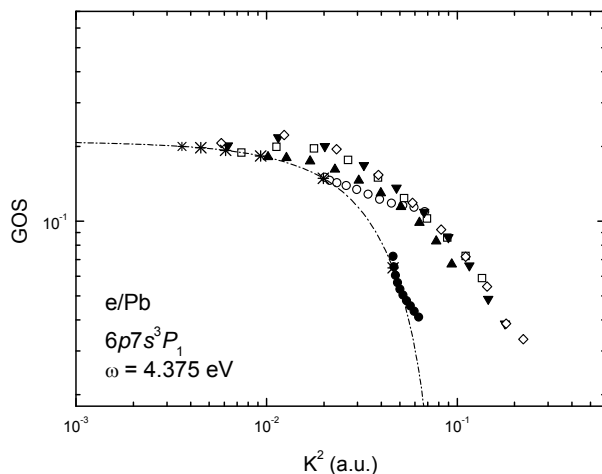
Први корак нормализационе процедуре је рачунање вредности генералисаних јачина осцилатора из мерених релативних пресека на малим угловима расејања (1). Затим се генералисане јачине осцилатора фитују, екстраполацијом се добија вредност која одговара нултом углу расејања (минимлан вредност K^2) и нормира се на функцију расејања унапред (*FSF*) која се добија стандардних поступком описаним у [8] помоћу одговарајуће вредности оптичке јачине осцилатора за посматрано стање. Ми смо у нашем раду користили вредности оптичких јачина за $6p7s \ ^3P_1$ стање олова $OOS=0.21$ и за $4d^{10}5p \ ^2P_{1/2, 3/2}$ стање атома сребра $OOS=0.67$ које смо преузели из НИСТ-ове базе података [10]. Из овако нормираних вредности генералисаних јачина се опет пређе на диференцијалне пресеке и том приликом се добијају апсолутне вредности пресека. Пресеци на већим угловима расејања се нормирају на тако израчунате апсолутне пресеке на неком углу (најчешће је то угао расејања 10°).

3. РЕЗУЛТАТИ

Еластично и нееластично расејање електрона на атомима сребра и олова је експериментално проучавано на енергијама упадних електрона 10, 20, 40, 60, 80 и 100 eV у опсегу углава расејања од 1° до 150° за

ексцитацију и од 10° до 150° за еластично расејање. У овом раду ће бити представљен део добијених резултата.

На слици 2 приказане су нормиране генерализисане јачине осцилатора за ексцитацију $6s^26p7s\ ^3P_1$ стања атома олова у функцији квадрата пренесеног импулса [9].



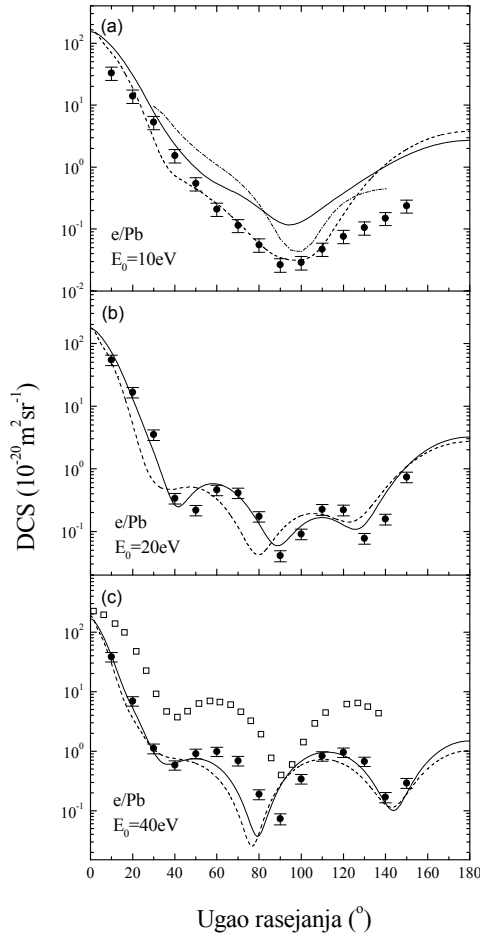
Слика 2. Нормиране генерализисане јачине осцилатора за $6p7s^3P_1$ стање атома олова у функцији квадрата пренесеног импулса на : ●, 10 eV; ○, 20 eV; ▲, 40 eV; □, 60 eV; ▼, 80 eV; ◇, 100 eV упадној енергији електрона; *, одговарајуће минималне вредности K^2 које одговарају нултом углу расејања; ---, функција за расејање унапред

Као што се види, GOS вредности које одговарају нултом углу расејања леже на FSF функцији и генерално брзо опадају са порастом K^2 . Такође је евидентно да је линеарна зависност најизраженија на нижим енергијама док се са порастом енергије линеарност смањује и покрива све мањи и мањи интервал углова што је у складу са поставкама описане нормализационе процедуре [6].

Пресеци за еластично расејање електрона на атому олова на енергијама упадних електрона 10 eV, 20 eV и 40 eV приказани су на слици 3 заједно са теоријским прорачунима урађеним у оквиру апроксимације оптичких потенцијала [2] и постојећим експерименталним резултатима [12]. Примењени теоријски приступ је метод оптичких потенцијала у оквиру кога су добијене две групе резултата, тј. ДФ и ХФ апроксимација (пресеци су израчунати решавањем Диракове једначине помоћу Дирак-Фокове и Хартри-Фокове таласне једначине).

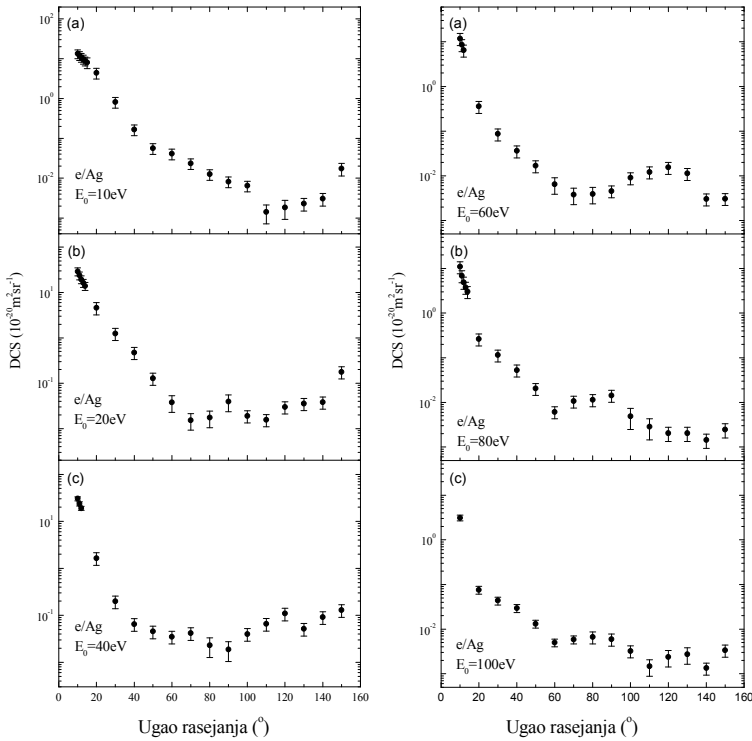
Може се видети да постоји релативно добро слагање са ДФ и ХФ [2] апроксимацијама како у погледу облика угаоне зависности тако и у погледу апсолутних вредности. На најнижој енергији слагање је боље са ДФ прорачуном. Са порастом енергије разлике између самих апроксимаци-

ја постају све мање и мање, па је и генерално слагање са експериментом боље. Резултати Вилијамса и Трајмара [5] одлично прате нашу експерименталну криву по облику, али су апсолутне вредности веће од наших што је по нашем мишљењу директна последица примењеног метода нормирања.



Слика 3. Диференцијални пресеци за еластично расејање електрона на атому олова на упадним енергијама електрона: (a) 10 eV; (b) 20 eV; (c) 40 eV: ●, експеримент; ---, ДФ прорачун [2]; —, XF прорачун [2]; -·-·-, пресеци на 11 eV [11, 12]; □, резултат Вилијамса и Трајмара [5]

Диференцијални пресеци за екситацију $4d^{10}5p^2P_{1/2, 3}$ стања атома сребра приказани су на слици 4. Може се видети да криве пресека на свим енергијама имају облик карактеристичан за дозвољене прелазе и расејање унапред. С обзиром да нема других експерименталних ни теоријских пресека за посматрани процес, није било могуће поредити добијене резултате.



Слика 4. Диференцијални пресеци за ексцитацију $4d^{10}5p^2P_{1/2, 3/2}$ стања атома сребра

3. ЗАКЉУЧАК

Диференцијални пресеци за еластично расејање електрона на атомима сребра и олова, као и за електронску ексцитацију $4d^{10}5p^2P_{1/2, 3/2}$ стања атома сребра $6p7s^3P_1$ стања атома олова мерени су на упадним енергијама 10, 20, 40, 60, 80 и 100 eV у опсегу углова расејања до 150° . Резултати су поређени са одговарајућим теоријским прорачунима и постигнут је добар степен слагања.

ЗАХВАЛНИЦА

Овај рад је финансиран од стране Министарства за науку Републике Србије у оквиру пројекта 141011. Аутори посебно истичу допринос недавно преминулог професора др Душана Филиповића овим мерењима.

4. ЛИТЕРАТУРА

- [1] Milisavljević, S., Rabasović, M. S., Šević, D., Pejčev, V., Filipović, D. M., Lalita Sharma, Rajesh Srivastava, Stauffer, A. D., Marinković B. P., , *Phys. Rev. A*, **76**, 022714, (2007).
- [2] Tošić, S. D., Rabasović, M. S., Šević, D., Pejčev, V., Filipović, D. M., Lalita Sharma, Triphati, A. N., Rajesh Srivastava, Marinković B. P., *Phys. Rev. A*, **77**, 012725 (2008).
- [3] Tošić, S. D., Kelemen, V. I., Šević, D., Pejčev, V., Filipović, D. M., Remeta, E. Y., Marinković B. P., *Nucl. Instr. and Meth.in Phys. Res. B*, **267**, 283 (2009).
- [4] Milisavljević, S., Rabasović, M. S., Šević, D., Pejčev, V., Filipović, D. M., Lalita Sharma, Rajesh Srivastava, Stauffer, A. D., Marinković B. P., *Phys. Rev. A*, **75**, 052713 (2007).
- [5] Williams, W., Trajmar, S., *J. Phys. B*, **8**, L50 (1975).
- [6] Brinkman, R. T., Trajmar, S., *J. Phys. E: Sci. Instrum.*, **14**, 245, (1981).
- [7] Avdonina, N. B., Felfli, Z., Msezane, A., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30** 2591 (1997).
- [8] Felfli, Z., Msezane, A. Z., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31** L165 (1998).
- [9] Lassette, E. N., Skerbele, A., Dillon, M. A., *J. Chem. Phys.*, **50**, 1829 (1969).
- [10] <http://physics.nist.gov/cgi-bin/ASD/lines1.pl>
- [11] Haberland, R., Fritsche, L., *J. Phys. B* **20**, 121 (1987).
- [12] F. Kaussen, F., Geesmann, H., Hanne, G. F., Kessler, J., *J. Phys. B* **20**, 151 (1987).

ПРОИЗВОДЊА И ПРИМЕНА КИСЕОНИЧНЕ ПЛАЗМЕ У ТРЕТИРАЊУ ПОВРШИНА МАТЕРИЈАЛА

Б. Томчик

*Институт за физику, Универзитет у Београду, Прегревица 118, 11080
Београд-Земун, Србија*

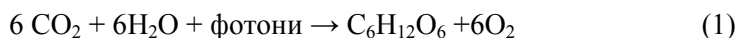
Сажетак. Кисеоник је саставни је део органског света, као део протеина, угљених хидрата и масти. Главна примена кисеоника је у добијању челика, пластике и текстила, као ракетног горива, у медицинским кисеоничким терапијама, за подржавање живота и за плазма технологије. За површински третман материјала се користи вакуумска кисеоничка плазма добијена у RF пражњењима или са вакуум ултравиолетним светлом на 172 nm. На атмосферском притиску се углавном користе коронаста пражњења са наизменичном побудом за третирање великих површина користећи озон или атомски кисеоник. Кисеонички плазма снопови у RF капацитивно спрегнутим пражњењима могу уклонити органске површинске резидуе и контролисати квашљивост – адхезију на супстрату. Код савремених фотоволтаичних и LCD стаклених и силицијумских панела се може подешавати адхезивност депонованих филмова.

Abstract. Oxygen is constituent of the organic world and is a part of proteins, carbohydrates and lipids. Main application of oxygen is in the steel, plastics and textile production, as a rocket fuel, in medical oxygen therapies, for the life sustaining applications and for plasma technologies. For the surface treatment of material vacuum oxygen plasma produced by RF discharges or by vacuum ultraviolet light at 172 nm is the most dominant type. At atmospheric pressure with ac corona discharge is possible to treat large surface areas using ozone and atomic oxygen. Oxygen plasma beams in RF capacitively coupled discharges can remove organic surface residues and control the wettability of the substrate. In photovoltaics and LCD panel production the glass and silicon substrate can be conditioned to exhibit best adhesion of the growing film.

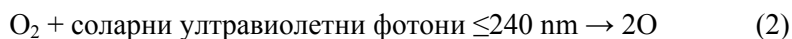
1. УВОД

Кисеоник је најзаступљенији елеменат по маси у земаљској кори, а у облику двоатомског гаса по запремини заузима око 20,8% земаљске атмосфере. Постоје више алотропских модификација кисеоника: а) основни двоатомски кисеоник O_2 , дужина међуатомске везе 121 pm, енергија везе 498 kJmol^{-1} , б) озон, O_3 , јавља се обично као загађивач и нуз-продукат сагорелих аутомобилских гасова, док у вишим слојевима атмосфере природно настаје UV фотодисоцијацијом кисеоника в) метастабилни четвороатомски O_4 , ромбохедрални кисеоник, снажни оксидатор у чврстом стању који настаје сабијањем O_2 на притисцима преко 20 GPa . На том притиску се понаша као изолатор, док даљим сабијањем на притисцима преко 96 GPa прелази у металну фазу која на ниским температурама показује суперпроводне особине.

У биосредини главни произвођач кисеоника су зелене алге и цијанобактерије. У поступку фотосинтезе:



потребна су четири фотона за дисоцијацију воде путем ланчаног процеса. Главни потрошачи кисеоника су аеробни организми који за ћелијско дисање у митохондријама користе кисеоник за добијање енергије и аденозин трифосфата. Људи у просеку, у току мировања потроше 1,8 – 2,4 грама кисеоника у минути. Један литар кисеоника у течном стању је еквивалентан са 840 литара кисеоника на атмосферском притиску и на 20 °C. Главна примена кисеоника је у добијању челика, пластике и текстила, као ракетног горива, у медицинским терапијама кисеоником, за подржавање живота у авионима, космичким летовима, подморницама и роњењу и за плазма технологије. У плазма применама третирања површина материјала од највеће важности су кисеоник у атомском стању и озон. Производња озона у горњем земљином омотачу се одвија преко реакције:



док је главни механизам деструкције путем рекомбинације са атомским кисеоником



У земаљским условима најчешће се производи озон: а) у тихим (коронастим) пражњењем између плочастих или цилиндричних електрода прикључених на наизменични напон од неколико kV у струји сувог ваздуха, обично на атмосферском притиску. Због одсуства водене паре у сувом ваздуху је смањена производња азотових оксида и азотне киселине б) код диелектричних баријерних пражњења - електрода са запречним

слојем. Кратко живећа микро гасна пражњења од неколико нано секунди се формирају између електрода од којих је барем једна прекривена изолаторским материјалом (кварц, стакло, керамика...). Густине електрона су око 10^{13} - 10^{15} cm^{-3} , температуре електрона су око неколико eV док је температура гаса амбијентална в) фотохемијским путем, у кисеоничкој атмосфери тј. без стварања азотових нуспродуката, нпр. коришћењем вакуум ултравиолетних некохерентних лампи. У процесној индустрији се користе углавном класични уређаји за добијање кисеоничког пражњења коришћењем микроталасне, нискофреквентне или радиофреквентне електричне побуде. У полупроводничкој индустрији где је потребан добро контролисан и репродуктивно вођен третман површина све више се примењују кисеонички плазма снопови јасно дефинисане енергије и густине снаге пражњења [1],[2].

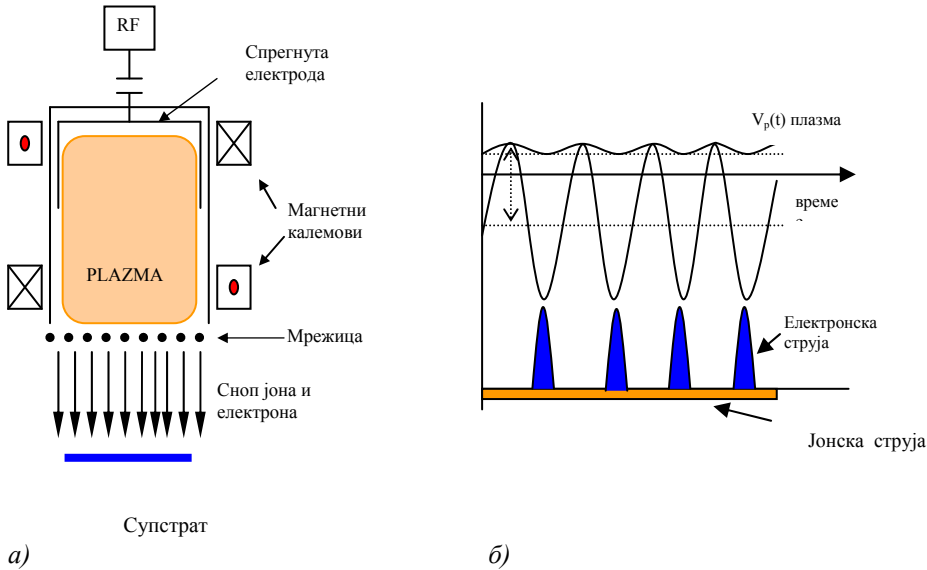
2. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНИ МЕТОДИ ДОБИЈАЊА КИСЕОНИЧНЕ ПЛАЗМЕ

2.1. Вакуумски поступци

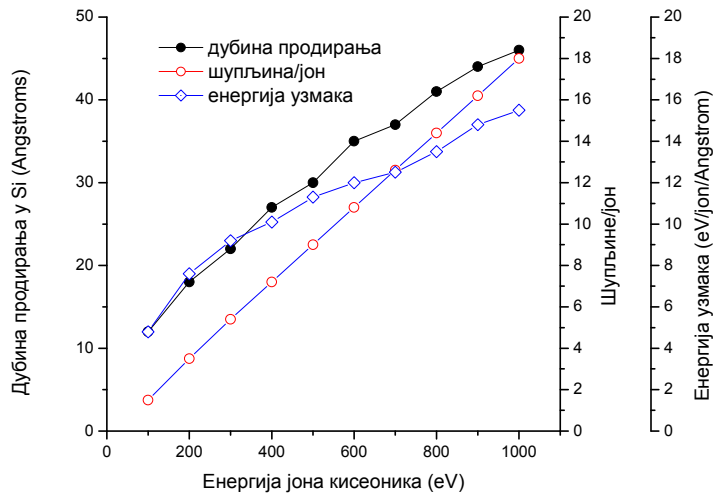
Коришћени радиофреквентни плазма извор је приказан на Слици 1. Радиофреквентно пражњење потпомогнуто спољним магнетним пољем, величине око $2,8 \times 10^{-2}$ Т се одвија између плочастих капацитивно спрегнутих електрода на притисцима кисеоника/сувог ваздуха између 5×10^{-3} - 10^{-4} mbar. Магнетно поље калемова, било у хиперболичној или паралелној конфигурацији, спречава електроне да дифундују ка зиду вакуум коморе присиљавајући их да се крећу по спиралним орбитама дуж магнетних линија. Профил суперпонираних магнетних поља је одговоран за радијалну стабилност плазме. Доња електрода је изграђена од металне мрежице са трансмисијом од око 70% и уземљена је тј. налази се на потенцијалу металног зида вакуум коморе. У току трајања једног RF периода највећи део времена кроз мрежицу пролазе јони кисеоника чија се енергија и густина струје могу мерити помоћу Фарадејеве чаше, електродама са запречним електричним пољем. У току врло кратког RF периода електронска компонента струје се такође екстрахује чинећи снап електрични неутралним у току целог RF периода. Овакви извори су посебно важни за третирање површина који су изолатори јер је нагомилавање наелектрисања на таквим површинама практично онемогућено [3].

Нискоенергетска имплантација кисеоника у различите материјале, нпр. силицијум, молибден, пасивизација материјала, одстрањивање и разлагање органских нечистоћа, микроструктурирање, уклањање фоторезиста је могуће извести користећи овакве кисеоничне снопове. Енергије кисеоничних јона су обично у интервалу од 100-500 eV, а густине јонских снопова до 1 mA/cm^2 . На Слици 2. су дати прорачуни домета јона кисеоника у кристалном силицијуму за упадне енергије јона од 100 до 1000 eV. Кроз бинарне сударе са атомима мете се упадна енергија јона смањује

са сваким наредним сударним процесом. Долази до стварању шупљина у кристалној решетки и олакшане интерстицијалне дифузије атома кисеоника у силицијуму. Преко низа каскадних судара упадна енергија јона се трансфером енергије ка атомима мете - њиховим узмаком смањи на вредност када кисеоник бива имплантиран.

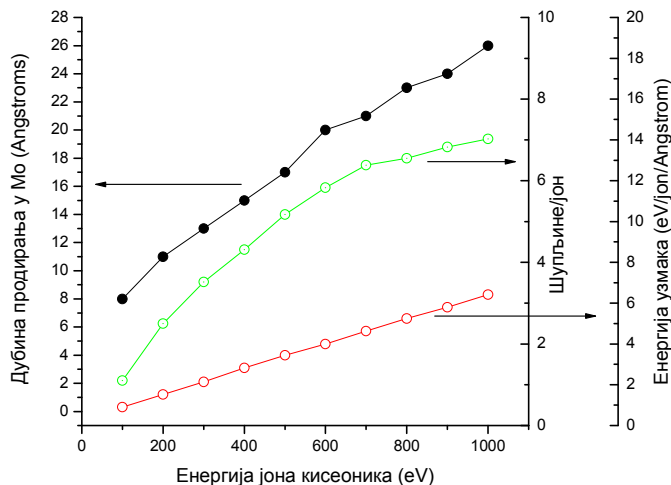


Слика 1. Радиофреквентни извор плазма снопа. а) шематски приказ кондензаторно спрегнутог RF плазма реактора б) временска расподела јонске и електронске компоненте плазма снопа у току трајања неколико RF периода. Површина испод јонске и електронске компоненте је иста у току једне RF периоде



Слика 2. Monte Carlo симулација интеракције јона кисеоника у силицијуму при упадним енергијама јона 100-1000 eV

Плазма извор може да има горњу, капацитивно спрегнуту электроду променљиве површине. Ако је горња електрода у облику базног цилиндра екстрахована енергија јона поседује минималне енергије, Слика 4. Енергија снопа се може подешавати у интервалима енергија од 50 eV до 1000 eV са простом променом површине горње електроде [4],[5]. Самоподешавајући



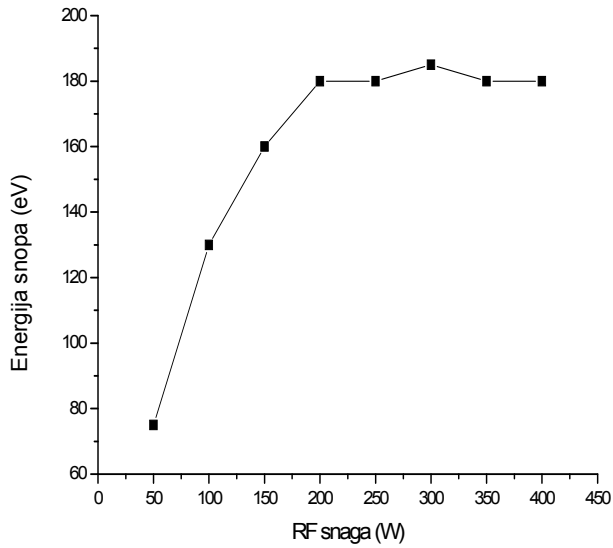
Слика 3. Monte Carlo симулација интеракције јона кисеоника са молибденом

потенцијал плазме у приелектродним областима је обрнуто пропорционалан површинама електрода. Енергију јонског снопа одређује приелектродни самоподешавајући плазма потенцијал око мрежице која има фиксну површину која са своје стране одређује радијалну ширину снопа. На Слици 5. је приказан домет јона кисеоника упадне енергије 200 eV и латерално расејање јона као последица колизионих каскада.

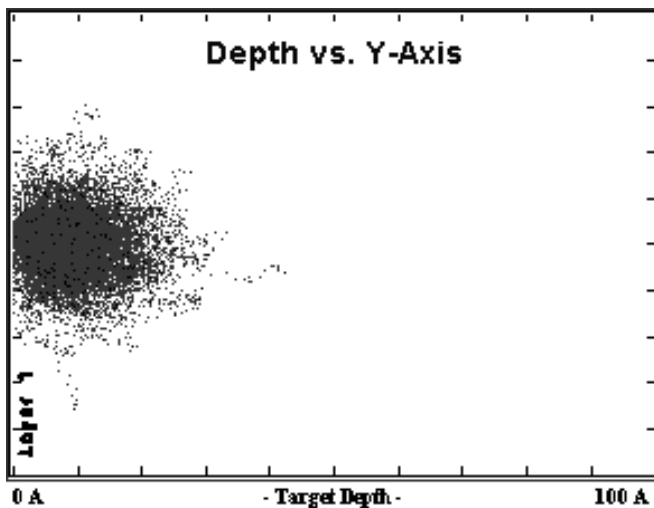
2.2. Атмосферски поступци генерисања озона са применама у стоматологији

Озон је изузетно ефикасан у убијању бактерија које проузрокују каријес како на површини зуба тако и у дентину. Због мале молекуларне величине дубина продирања озона кроз зубну глеђ и дентин може бити до 5 mm тако да се каријес у зубним фисурама и примарним каналима може безболно одстранити. У денталним применама се озон производи у ац генераторима који користе претходно осушени атмосферски ваздух. Сам зуб се прво прекрије капом од силикона која мора да добро пријања уз тело зуба. Силиконске капице се обично праве у 5 величина, у пречнику од 3 до 8 mm. Преко доводног и одводног силиконског црева кроз зуб се транспортује озон у концентрацији до 2100 ppm и протоку до 615 sccm [6]. Проток озона отпочиње пошто се прво успешно извакумира простор између силиконске капе и зуба. Проток се мери у доводној и повратној грани и уколико се установи његово цурење ван силиконске капице аутоматски се зауставља понуда озона. Недифундовани озон се исисава из

силиконске капице и у повратној грани пролази кроз рекомбинациони филтар и неутрализује се у двоатомски кисеоник. Течни pH балансер који садржи минерале, флуориде и цинк се после третмана наноси на зуб да неутрализује заосталу бактеријску киселину насталу као последица распада каријеса. Од виталне је важности приликом озонске терапије да се спречи цурење озона у дисајне путеве. Озон је изузетно



Слика 4. Зависност енергије снопа јона кисеоника од снаге RF пражњења. Енергија јона је израчуната из волт-амперске карактеристике снопа користећи Фарадејеву чашу



Слика 5. Monte Carlo симулација продора јона кисеоника енергије 200 eV у силицијуму. У рачуну је узето да 1000 јона удара у површину по правим углом.

канцероген и минималне дозвољене концентрације-дозвољени праг за експозицију је и даље ствар дебата у стручним круговима, Табела 1.

Табела 1. Утицај различитих концентрација озона у ваздуху на људско тело према подацима Светске здравствене организације.

Утицај озона на људе	
Концентрација озона у ваздуху (ppm)	Симптоми
0.1	Мирис на бели лук, као после грмљавине
0.1 - 1	Главобоља, пецкање очију, суво грло
1 - 100	Симптоми налик астми, пад апетита
>100	Хеморагични отоци на плућима

Озон је нестабилни гас и после око 40 минута од његове производње, зависно од средине и њене температуре, се рекомбинује у стабилни двоатомски молекул.

Озон је познати вирусни и микробни уништавач. Убија бактерије 3500 пута ефикасније од агената заснованих на хлору. Користи се за дезинфекцију отворених рана, разлагању микроорганизама из туморних ткива, лечењу кожних промена (акне, гнојна и гљивична оболења) и за убрзавање у залечивању рана.

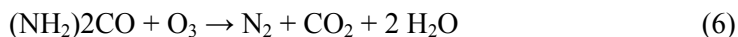
У зубарству се користи такође за деконтаминацију површина, хладну стерилизацију зубних инструмената, разлагање биофилмова и стерилизацију водених линија за испирање, белењу зуба и лечењу запаљења десни. Озонски третмани не траже примену анестетика, бушење и попуњавање зуба и представљају, поред употребе скувих ласера, праву револуцију у савременом зубарству. Каријес из оклузалних шупљина, фисура и канала зуба је посебно индикован за третман озонем. Нема споредних нуспојава после изведене реминерализације зуба и евентуални поновни третман озонем се такође може извести без ограничења.

2.3 Третман вода

Дезинфекција воде је једна од главних примена озона. Конверзија токсичних цијанида у хиљаду пута мање токсичне цијанате се може описати преко реакције



а елиминација мириса и укуса са разградњом урее тече преко реакције



Такође озон је делотворан у смањењу обојености воде, оксидацији/редукцији органских материја, оксидацији гвожђа и мангана као и у редукцији пестицида.

Секундарно и терцијално третиране отпадне воде се могу успешно третирати озоном ради дезинфекције. Као замена за хлор, озон се користи у дрвној и папирној индустрији (бељење, дезинфекција воде), текстилној, фармацеутској и полупроводничкој индустрији (третман отпадних вода, стерилизација дејонизованом водом...)

2.4 Производња озона VUV (вакуум ултравиолетним) светлом

Уз помоћ енергетски ефикасних VUV лампи које зраче на таласној дужини од 172 nm (енергија фотона 7.2 eV) могуће је добити озон из атмосферског ваздуха или из воде и користити га за дезинфекцију и пречишћавање воде. Принос озона може да буде изузетно велик, 82 g/kWh.

Фотоиндукована површинска активација пластичних маса и регулација угла квашења се одвија преко производње атомарног и озонарног кисеоника из сувог ваздуха.

Аблација пластичних маса се одвија фотодисоцијативним дејством VUV фотона као и утицајем генерисаног озона из ваздуха. Познат је комбиновани утицај UV (254 nm) и VUV (172 nm) фотона и озона при чишћењу кварцних кристала, металних површина и аблације пластичних маса. Инжењерске пластичне масе се обично третирају при сниженим притисцима (око 5 mbar) при протоку ваздуха. Брзине нагризања зависе од притиска, текстуре пластике, врсте гаса и израчене енергије. Нпр. при 30 mW/cm², ваздух на 5 mbar, 172 nm измерене вредности су:

PTFE (Teflon, polytetrafluorethylene)	1 μm/min
PMMA (Polymethylmetaacrylate)	0.15 μm/min
PI (Polyimide)	0.05 μm/min

Енергија везе између угљеникових, кисеоничних и азотних атома је много нижа од енергије VUV фотона. Нпр. унутар апсорпционе дубине од ≈1μm могу се ефикасно раскидати везе међу атомима:

C-C ковалентна веза у дијаманту (7.02 eV), C(sp³)-C(sp²) веза (3.6 eV), C-H веза (4.3 eV), C-N веза (3.16 eV), O-H веза (4.8 eV) и H-H веза (5.0 eV)[7].

3. ЗАКЉУЧАК

Са недавном појавом енергетски ефикасних вакуум ултравиолетних светлосних извора (VUV лампи на 172 nm) примена атомског кисеоника и

озона је успостављена и на традиционалним пољима-дезинфекцији вода и третману отпадних вода код којих су раније коришћени искључиво плазма реактори на атмосферском притиску, са коронарним пражњењем. Диелектрична баријерна пражњења представљају моћан извор VUV фотона помоћу којих су развијене многе технологије уништавања токсичног отпада и површинске модификације материјала у полупроводничкој индустрији.

4. ЛИТЕРАТУРА

- [1] J.J. Cuomo, S.M. Rossnagel, editors, Handbook of ion beam processing technology, Neues Publications, New Jersey, (1989).
- [2] H. Lueth, Surfaces and Interfaces of Solid Materials, 3rd Ed. Springer Verlag, Berlin, (1995).
- [3] H. Oechsner, nemački patent Nr.DE3708717819879.
- [4] J. Kessler, B. Tomcik, J. Waldorf and H. Oechsner, Vacuum, Vol.42/4 (1991).
- [5] J. Waldorf, Diplomski rad, Univerzitet u Kajzerslauternu, (1988).
- [6] <http://www.curozone.com/main.html>
- [7] R. Behrish, Sputtering by particle bombardment, Chemical sputtering, Band II, Springer Verlag 1983.

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, формирани 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:

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

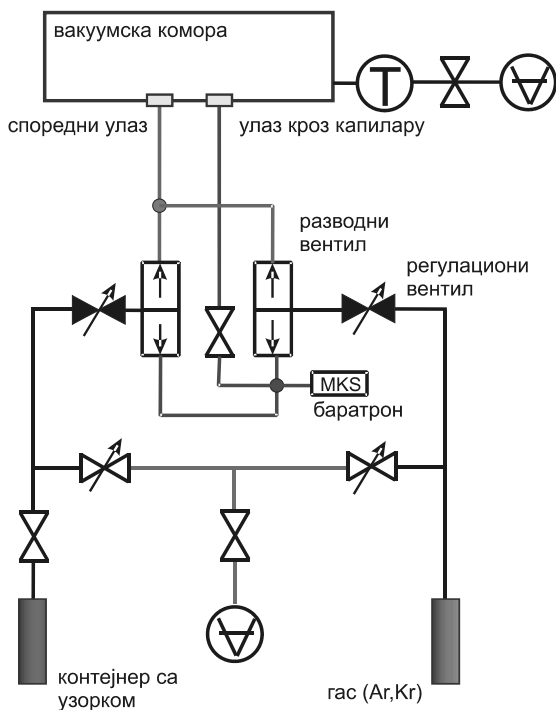
DCS_x, DCS_{ref} су апсолутни диференцијални пресеци за еластично расејање електрона на испитиваном и референтном гасу; N_x, N_{ref} су мерени интезитети сигнала; F_x, F_{ref} је мерени проток (*flow*) и M_x, M_{ref} су молекулске масе испитиваног и референтног гаса, респективно.

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 %.

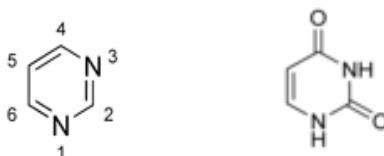


Слика 1. Гасни систем апаратуре УГПА

4. РЕЗУЛТАТИ

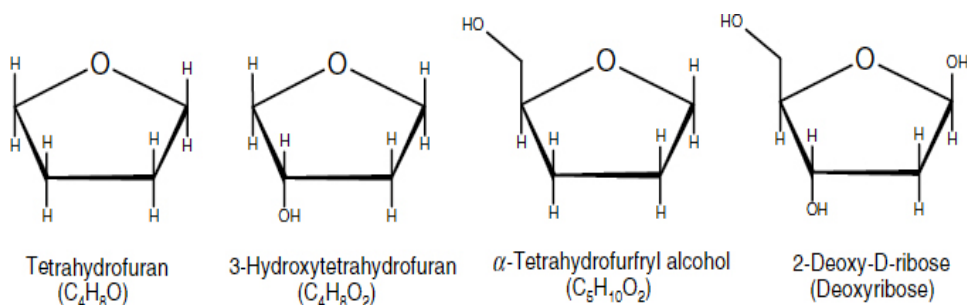
У овом раду биће представљен део резултата добијених за пиримидин (Пу), $C_4H_4N_2$ [8] и 3-хидрокситетрахидрофуран (3hTHF), $C_4H_8O_2$ [9].

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.



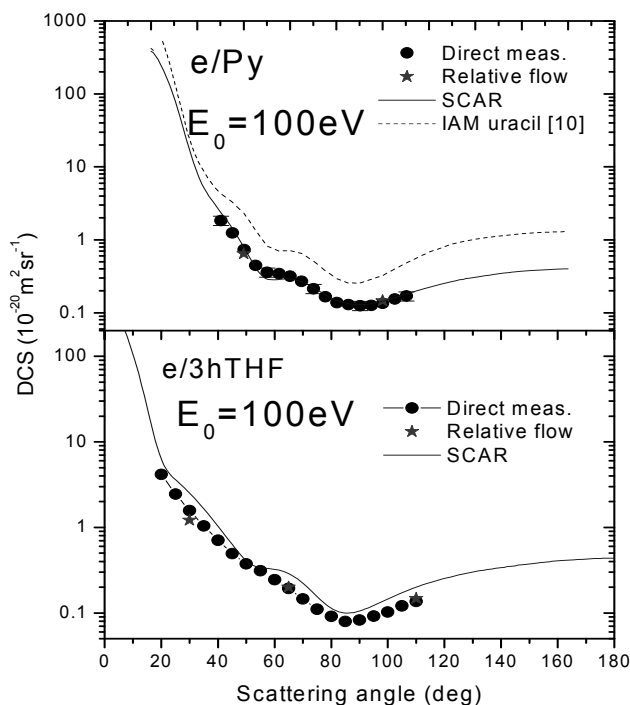
Слика 2. Структурна формуле за пиримидин ($C_4H_4N_2$) (лево) и урацил ($C_4H_4N_2O_2$) (десно)

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]

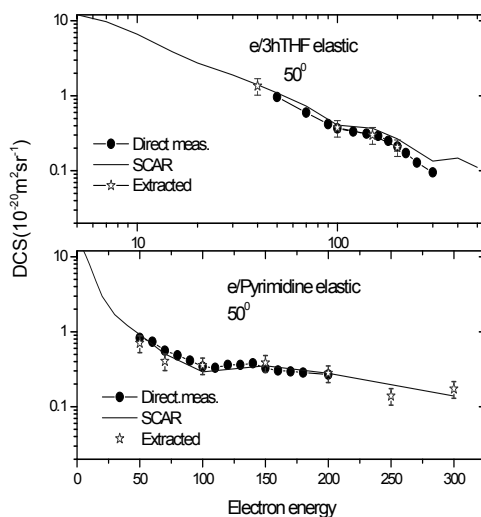
блиске онима за 3hTHF . Из овога се може закључити да су еластично расејани електрони у случају Py и 3hTHF као мета, слично редистрибуирани у интеракционој запремини.

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_α 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)

Физика плазме

УТИЦАЈ РАДИКАЛА НА ПРАЖЊЕЊА И У РЕАЛНИМ ПРИМЕНАМА

Ж. Никитовић

*Институт за физику Универзитета у Београду, Прегревица 118,
11080 Београд, Србија*

Сажетак. У овом раду представљени су електронски транспортни коефицијенти за електроне у CF_4 , CF , CF_2 , CF_3 , F и F_2 као и за смешу CF_4 , Ar и O_2 за услове који се користе у плазма технологијама за производњу полупроводничких елемената. Резултати су добијени за ниске вредности E/N . Показало се да је ефекат радикала на укупни транспорт релативно мали за абундансе испод 1%.

Abstract. In this work we present electron transport coefficients for electrons in CF_4 , CF , CF_2 , CF_3 , F and F_2 as and for mixtures CF_4 , Ar and O_2 for the conditions used in plasma assisted technologies for semiconductor production. These results are presented for low values of E/N . We have shown that effect of radicals to electron kinetics is relatively small for abundances below 1 %.

1. УВОД

CF_4 (угљеник тетрафлуорид) је један од највише коришћених гасова у данашњој полупроводничкој индустрији. Он се пре свега користи за нагризање SiO_2 као и за наношење флуоринисаних полимерних филмова. Нагризање диелектрика је процес на који одлази 80% активности при производњи интегрисаних кола.

CF_4 је неопходан и у технолошким применама, као што су развој технологије гасних прекидача [1], у технологији гасних детектора [2], затим за развој детектора честица [3, 4]. CF_4 нажалост може значајно да утиче на глобално загревање наше планете уколико се масовно користи. Његов полуживот у атмосфери се процењује на око 50 000 година. Због тога је веома важно испитивати ефикасност дисоцијације овог фреона из атмосфере применом плазме која би се индуковала фокусираним микроталасним зрачењем [5].

CF_4 има предност у односу на остале гасове пре свега због малог нивоа токсичности и релативно ниске цене. Како нема стабилних побуђених стања, у плазма поступцима долази до његове разградње где постаје извор реактивних честица (јона, неутрала, радикала).

У капацитивно спрегутој плазми (ССР) [6] и у индуктивно спрегутој плазми (ICP) [7] доминантан реактивни радикал је CF_2 . Недавна мерења [8] пресека за расејање електрона на радикалима CF_4 у домену енергија која се појављују у неравнотежним плазмама су проширена и показало се да су вероватноће многих процеса знатно веће него за сам CF_4 , па је чак могуће и да радикал CF_2 преузме доминантну улогу за неке процесе у плазми. Новим прорачунима за расејање електрона на радикалима CF_x је могуће створити прецизну квантитативну слику о брзинским коефицијентима реакција и побољшати контролу концентрације радикала како би се процеси оптимизовали.

2. ТРАНСПОРТНИ КОЕФИЦИЈЕНТИ - КАРАКТЕРИСТИКЕ РОЈА ЕЛЕКТРОНА

Рој је ансамбл честица које се крећу као колектив, међусобно не интерагују и њихово кретање је одређено само сударима са атомима и молекулима гаса кроз који се врши кретање и спољашњим електричним пољем. Понашање роја електрона при кретању у неутралном гасу се може описати помоћу транспортних коефицијената. Основни транспортни коефицијенти су: *брзина дрифта, дифузиони коефицијент, карактеристична енергија и коефицијент јонизације*. Транспортни коефицијенти се мере из два разлога: због директног коришћења тих резултата и због одређивања пресека за расејање.

Поступак одређивања пресека је сложен процес који се састоји из неколико корака [9]. Први корак представља сакупљање у што ширем опсегу E/N (редукована вредност електричног поља), сета експерименталних података (w - брзина дрифта, eD/μ - карактеристична енергија, јонизациони, ексцитациони и коефицијент захвата), максималне прецизности. Од ширине опсега E/N који је на располагању зависи који ће енергијски опсег бити покривен.

У следећем кораку се дефинише пробни скуп пресека. Одабере се комплетан сет пресека за све процесе који постоје у датим условима у енергијском опсегу од 0 eV па до десет пута веће енергије од максималне средње енергије електрона. Овај скуп је базиран на најбољим постојећим резултатима у литератури, који потичу од резултата са ројем или укрштеним млазевима, као и од теоријских прорачуна. Потребно је добро познавати карактеристике компоненти, знати реалне границе у којима је могуће варирање пресека и који су пресеци везани, односно који се мењају у истом смеру.

На овом месту је потребно дефинисати шта подразумевамо под комплетним скупом. Он мора да представи укупан (комплетан) баланс енергије и импулса. Дакле, у овом скупу је могуће да неки пресек у себи садржи и ефекте других процеса, па зато добијени резултати не морају бити једнозначни. Међутим, мерењем појединачних ексцитационих коефицијената за сваки процес се фиксира тај канал и тако се добија бољи систем пресека. У сваком случају комплетан сет пресека ако је добар, даје

добар баланс броја честица, преноса енергије и импулса, а самим тим и добре функције расподеле електрона.

3. КОМПЈУТЕРСКИ КОД *ЕЛЕНДИФ*

У овом раду коришћен је код *ЕЛЕНДИФ* [10] који се заснива на ГТ (*two term* engl. или апроксимација два члана у решавању Болцманове једначине) техници коју су развили [11] и касније [12]. У суштини, ради се о техници коначних разлика која дозвољава такву формулацију Болцманове једначине у коју се могу укључити многи процеси, као и временска еволуција функције расподеле. Код има ограничење због апроксимативне природе, али су та ограничења добро позната и изучавана [13, 14] и за проверу тако добијених резултата користимо егзактни Монте Карло код.

4. ДИСКУСИЈА РЕЗУЛТАТА

На слици 1. представљен је скуп ефективних пресека за сударе електрона са молекулима CF_4 [15, 16].

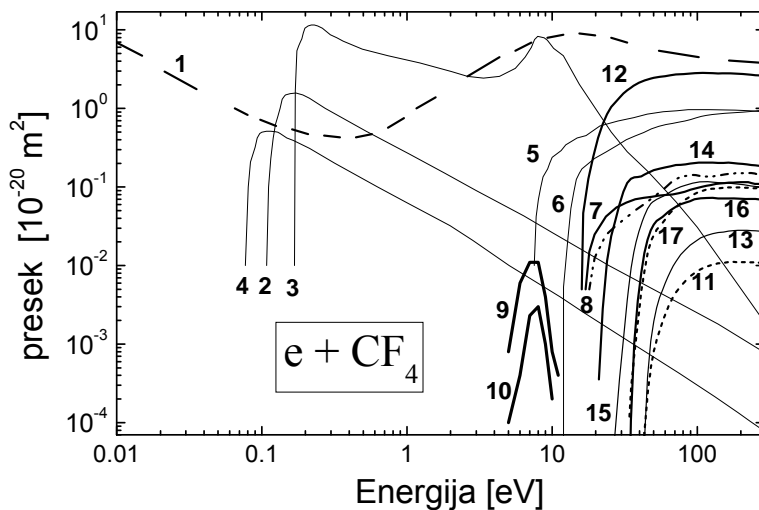
Комплетан сет пресека обухвата: пресек за укупни пренос импулса (сума еластичних и нееластичних пресека) (1), вибрационе ексцитације (2,3,4), електронске ексцитације (5), ексцитација CF_3 , CF_2 и CF (6,7,8), електронски захват (9) и јонизацију (10-16).

Пресеци за расејање електрона на радикалима су преузети из рада [8].

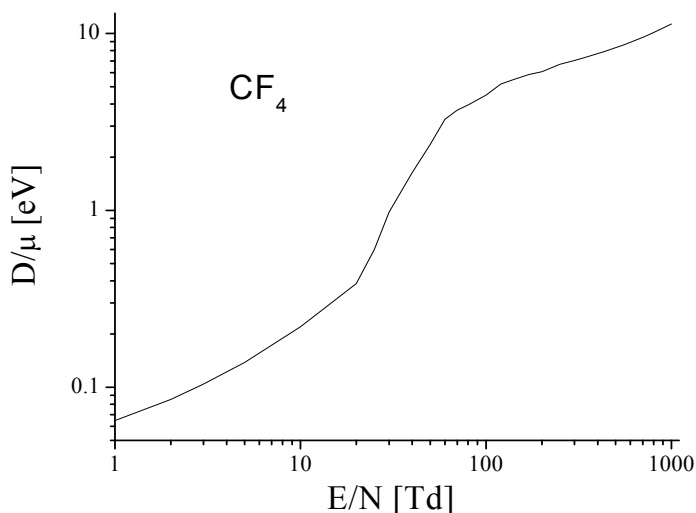
На слици 2. представљена је карактеристична енергија електрона у чистом CF_4 у зависности од редукованог електричног поља E/N . Ова величина даје грубу процену средње кинетичке енергије електрона, а може се и експериментално одредити. У области од 1 Td до 20 Td, услед наглог опадања броја судара који воде ка вибрационој ексцитацији долази до благог пораста карактеристичне енергије. Изнад 20 Td долази до наглог скока D/μ услед интензивних енергијских губитака у нееластичним процесима електронске ексцитације, дисоцијативне јонизације и дисоцијације у неутралне фрагменте молекула CF_4 .

На слици 3. је представљена брзина дрифта за смешу CF_4 , CF_2 и F_2 добијена кодом са два члана у развоју по сферним хармоницима (*елендиф*) и Монте Карло кодом у зависности од редукованог електричног поља E/N . Промене средње енергије додавањем радикала су веома мале, што значи да додати радикали веома мало мењају функцију расподеле електрона по енергијама (ЕЕДФ). Слагање у брзини дрифта је у оквирима очекиване грешке. Такође је показано да додавањем флуора не долази до било каквих промена због малог удела флуора у укупним пресецима за пренос импулса.

Сумарни коефицијенти за захват за смешу CF_4 , Ag и O_2 са додатком радикала CF , CF_2 , CF_3 , F и F_2 упоређени су са полазном смешом CF_4 , Ag и O_2 (10%:80%:10%) на слици 4. Види се да на абундансама које су реалне за

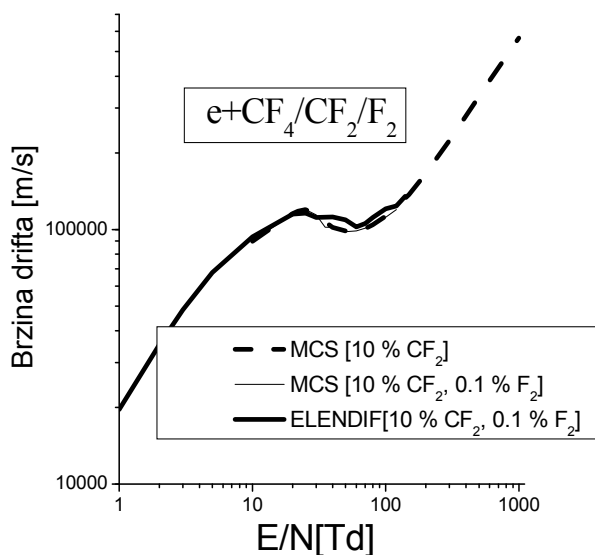


Слика 1. Комплетан сет пресека за расејање електрона у CF_4 . 1-укупни пресек за пренос импулса, 1E-еластични пресек за пренос импулса, 2-побуђивање $v=1$, 3-побуђивање $v=3$, 4- побуђивање $v=4$, 5-електронска ексцитација, електронска дисоцијација у продукте CF_3 (6), CF_2 (7), CF (8), 9-електронски захват, 10-16 тотални пресек за јонизацију раздвојен по продуктима (јон1-јон7).

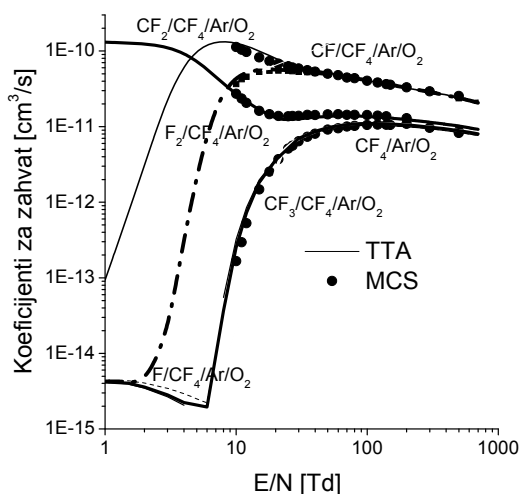


Слика 2. Карактеристична енергија за CF_4 у функцији редукованог електричног поља ($1 \text{ Td} = 10^{-21} \text{ Vm}^2$).

гасна пражњења ефекат радикала на укупни захват је веома значајан на ниским E/N .



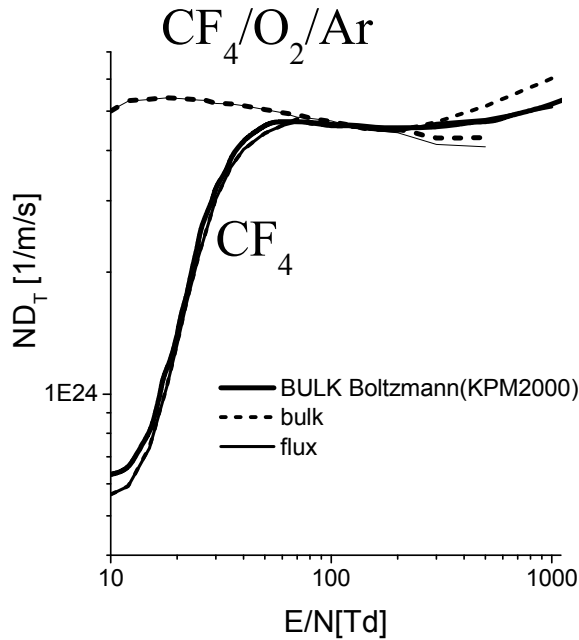
Слика 3. Брзина дрифта за смешу CF_4 , CF_2 и F_2 .



Слика 4. Тотални коефицијенти за захват за смешу CF_4 , Ar и O_2 са и без додатих радикала.

Пресеци за Ar су преузети из [17], а сет пресека за O_2 из [18], за F_2 из рада [19] и за F из [20].

На слици 5. представљен је трансверзални дифузиони коефицијент за смешу CF_4 , Ar и O_2 (10%:80%:10%) и резултати добијени за чист CF_4 . Резултати су добијени кодом *ЕЛЕНДИФ* и Монте Карло кодом, уочава се добро слагање.



Слика 5. Трансверзални дифузиони коефицијенти за смешу CF_4 , Ar и O_2 .

5. ЗАКЉУЧАК

У овом раду су одређени транспортни коефицијенти за CF_4 , CF_2 и F_2 као и за њихове смеше у условима у којима се доминантни утицај остварује како у сударима електрона са CF_4 , тако и у условима у којима је утицај радикала значајан [21]. Показано је да је ефекат радикала CF_2 и F_2 на укупни транспорт значајан, чак и за абундансе испод 1%. Велике вредности брзинских коефицијената за ексцитацију радијативних стања CF_2 и F_2 показују да је електронски индуковану емисију могуће детектовати изнад $E/N=1000$ Td.

Транспортни коефицијенти су дати и за смешу CF_4 , Ar и O_2 са и без утицаја радикала CF , CF_2 , CF_3 , F и F_2 [22, 23]. Ефекат радикала на укупни захват је веома значајан на ниским E/N што је и показано на слици 4.

ЗАХВАЛНИЦА

Овај рад је омогућен средствима Министарства за науку и Технологију Републике Србије пројекат 141025.

Захвалност дугујем и својим сарадницима др Зорану Јб. Петровићу, као и др Владимиру Стојановићу из Лабораторије за гасну електронику Института за физику из Београда.

6. ЛИТЕРАТУРА

- [1] Hunter, S.R., Carter, J.G., Christophorou, L.G., *J. Appl. Phys.* **58**, 3001-3015, (1985).
- [2] D.R. James., L.G. Christophorou, R.A. Mathis "New unitary and multicomponent gaseous dielectrics" in *Gaseous Dielectrics II* (ed. Christophorou L.G.) Pergamom, New York, 115, (1980).
- [3] Kopp, M.K., Valentine, K.H., Christophorou, L.G., Carter, J.G, *Nucl. Instrum. Methods* **201**, 395-401, (1982).
- [4] Yamashita, T., Kurashige, H., Morii, M.M., Nakamura, T.T., Nomura, T., Sasao, N., Shibata, K., Fukushima, Y., Ikegami, Y., Kobayashi, H., Taniguchi, T., *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **317**, 213-220, (1992).
- [5] S. Bzenić, S.S. Manola, Z.Lj. Petrović, *Proceedings of the 25th European Microwave Conference*, Swanley Nexus, Bologna, Italy, 856, (1995).
- [6] Nakano, T., Samukawa, S., *J.Vac. Sci. Technol. A* **17**, 686-691, (1999).
- [7] Hioki, K., Hirata, K., Nakano, N., Petrović, Z.Lj., Makabe T., *J.Vac. Sci. Technol. A* **18**, 864-872, (2000).
- [8] Rozum, I., Limão-Vieira, P., Eden, S., Tennyson, J., *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **35**, 267-284, (2006).
- [9] Crompton, R.W., *Adv.At. Mol.Opt.Phys.* **32**, 97-148, (1994).
- [10] Morgan, W.L., Penetrante, B.M., *Computer Physics Communications* **58**, 127-152, (1990).
- [11] Rockwood, S.D., *Phys.Rev.A* **8**, 2348-2358, (1973).
- [12] Elliot, C.J., Green, A.E., *J. Appl. Phys.* **47**, 2946-2953, (1976).
- [13] White, R.D., Robson, R.E., Schmidt, B., Morrison, M.A., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36**, 3125-3131, (2003).
- [14] Dujko, S., White, R.D., Ness, K.F., Petrović, Z.Lj., Robson, R.E., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39**, 4788-4798, (2006).
- [15] Kurihara, M., Petrović, Z.Lj., Makabe, T., *J.Phys.D: Appl. Phys.* **33**, 2146-2153, (2000).
- [16] Georgieva, V., Bogaerts, A., Gijbels, R., *J. Appl. Phys.* **93**, 2369-2379, (2003).
- [17] Hayashi M., personal communication (1992).
- [18] Phelps A.V.(2009)
<ftp://jila.colorado.edu/collisiondata/electronneutral/electron.txt>
- [19] Morgan, W. L., *Plasma Chemistry and Plasma Processing* **12**, 449-476, (1992).
- [20] Gudmundsson, J. T, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **35**, 328-341, (2002).
- [21] Nikitović, Ž., Stojanović, V., Booth, J. P., Petrović, Z. Lj., *Plasma Sources Sci. Technol.* **18** 035008 (2009).

- [22] Nikitović, Ž., Stojanović, V., Petrović, Z. Lj., *Acta Physica Polonica A*, **115**, 765-767, (2009).
- [23] Nikitović, Ž., Stojanović, V., Petrović, Z. Lj., Cvelbar, U., Mozetič, M., *EPL*, 91 55001, doi:10.1209/0295-5075/91/55001, (2010).

КОМПЛЕТИ ПРЕСЈЕКА ЗА РАСИЈАЊЕ ЕЛЕКТРОНА У ГАСОВИМА ДОБИЈЕНИ ТЕХНИКОМ РОЈЕВА

О. Шашић¹, С. Дупљанин^{2,1}, С. Дујко¹, J de Urquijo³, Ј. Јовановић¹ и З. Љ. Петровић¹

¹Институт за физику, Прегревица 118, Београд, Србија

²Природно-математички факултет, М. Стојановића 2, Бања Лука, Република Српска, Босна и Херцеговина

³Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, PO Box 48-3, 62251, Cuernavaca, Mor., México

Сажетак. У овом раду су приказани и дискутовани најновији комплети пресјека за расијање електрона у азот-субоксиду (N_2O) и тетрафлуороетану ($C_2H_2F_4$) добијени техником ројева. За прорачуне транспортних коефицијената кориштена су два компјутерска кода, Elendif – који се заснива на рјешавању Boltzmannове једначине у двочлавној апроксимацији (ТТА) и Monte Carlo (MC) кода који симулира транспорт великог броја наелектрисаних честица кроз неутралан позадински гас. Са коначним скупом пресјека, како за N_2O тако и $C_2H_2F_4$, израчунати су транспортни коефицијенти за N_2O/N_2 и $C_2H_2F_4/A_r$ смјесе различитих процентуалних састава. Примјењени су и закони за смјесе за прорачун транспортних коефицијената за N_2/A_r смјесе.

Abstract. In this paper we show and discuss the most recently derived sets of cross sections for electrons in nitrous oxid (N_2O) and tetrafluoroethane ($C_2H_2F_4$) obtained by swarm technique. We have used two computer codes to determine the distribution functions and calculate transport coefficients, Elendif – that solves the Boltzmann equation in two-term approximation (TTA) and a Monte Carlo (MC) code that simulates charge particle transport through background neutral gas. The derived cross section sets, were used in order to calculate transport parameters for electrons in N_2O/N_2 and $C_2H_2F_4/A_r$ mixtures. In addition, we have also used the gas mixture method to predict transport coefficients in N_2/A_r mixtures.

1. УВОД

Макроскопско стање неравнотежне, нискотемпературске плазме није једноставно описати без јасне слике о бројним процесима који се дешавају

на микроскопском нивоу. Сударни процеси могу бити многобројни и компликовани, али ако постоји конзистентан скуп ефективних пресека за те сударе, макроскопске карактеристике се могу квантитативно одредити моделовањем. Емпиријски модели добијени на основу макроскопских особина плазме не могу бити примјењени у високо развијеним технологијама какве имамо данас. Све бржи технолошки развој омогућава и тражи да се истраживања у овој области наставе и интензивирају, при чему плазма модели представљају незамјенљив алат.

Основу за примјену свих плазма модела чине комплетни скупови ефективних пресека и транспортних коефицијената. Циљ наших истраживања је обезбиједити што комплетније скупове пресека и транспортних коефицијената, за што већи број гасова од интереса са становишта могућих примјена. Метода коју при том користимо је тзв. метода ројева која је, у својој неколико деценија дугој историји, већ дала изузетно драгоцену базу података [1, 2], самостално или у комбинацији са резултатима експеримената са укрштеним сноповима [3, 4]. Техника ројева, њена достигнућа и предности у односу на друге технике, као и недостаци, њен садашњи статус и будућа улога у истраживањима нискотемпературске плазме, детаљно су описани у више прегледних радова [5, 6, 7]. Укратко, она представља итеративни поступак подешавања полазног скупа пресека до добијања што бољег степена слагања измјерених и израчунатих транспортних коефицијената. Јасно је да полазну основу за примјену ове технике чине измјерене вриједности што већег броја транспортних коефицијената, у што је могуће ширем опсегу вриједности редукованог електричног поља (E/N), тј. енергија, са што је могуће већом тачношћу [8]. У овом раду, у свим случајевима испитиваних молекуларних гасова и њихових смјеса, коришћени су експериментални резултати које је добила мексичка група професора J. de Urquija.

У тексту који слиједи биће приказани неки од резултата које смо добили у претходном периоду користећи се методом ројева: скупови ефективних пресека за расијање електрона у N_2O и $C_2H_2F_4$, транспортни коефицијенти за електроне у N_2O , $C_2H_2F_4$ као и у N_2O/N_2 и $C_2H_2F_4/A_r$ смјесама различитих процентуалних састава. Такође ће бити приказани резултати транспортних коефицијената за електроне у N_2/A_r смјесама који су добијени примјеном технике гасних смјеса, техником која умањује проблем нејединствености скупа пресека добијених методом ројева.

2. НУМЕРИЧКИ ПРОРАЧУНИ И ЕКСПЕРИМЕНТ

2.1 Прорачун транспортних коефицијената

За прорачун транспортних коефицијената приказаних у овом раду, кориштене су двије методе и два компјутерска кода, *Elendif* [9] – који се заснива на рјешавању Boltzmannове једначине у двочланој апроксимацији (ТТА) и *Monte Carlo* (MC) [10, 11] код који симулира транспорт великог броја наелектрисаних честица (у нашем случају електрона) кроз неутралан

позадински гас. Прва метода спада у приближне и њена примјенљивост је више пута дискутована [12, 13, 14], као и оправданост коришћења пресека добијених овом методом у плазма моделима [7]. Општи закључак је да ова метода обично није примјенљива у случају молекуларних гасова који се карактеришу израженим нееластичним процесима у зони Ramsauer-Townsendовог минимума у пресеку за пренос импулса, нити и у енергијској околини прагова за електронске ексцитације. У случају наших прорачуна транспортних коефицијента она је служила као “водич за очи” приликом бројних понављајућих кругова који су потребни у процесу прилагођавања почетног скупа пресека у циљу фитовања измјерених транспортних коефицијената. Поред тога, ову методу смо користили и зато што се без изузетка сви модели плазме данас раде овом приближном техником, па разлике између приближних и тачних резултата дају и грешку у плазма моделима. Друга метода, која се заснива на *Monte Carlo* техници, спада у егзактне, а МС код који смо користили је настао, развијен је и тестиран, у нашој лабораторији. У најкраћим цртама, заснива се на праћењу трајекторија једне или више наелектрисаних честица кроз неутралан позадински гас и нумеричкој интеграцији једначина за вјероватноће судара. Овај код даје вриједности тзв. “*bulk*” и “*flux*” транспортних коефицијената истовремено, који су различити усљед неконзервативне природе судара (промјена броја честица које се прате - настанак и нестанак електрона) [15]. У нашим симулацијама праћена је еволуција у простору и времену сваког од 5×10^5 почетних електрона под дејством константног електричног, као и укрштених, временски промјенљивих електричних и магнетских поља. Почетна функција расподеле електрона по енергијама је била *Maxwelloва*, са средњом енергијом од 1 eV. Густина гаса је била $3.54 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ што одговара притиску од 1 Torr (133.3 Pa) и температури од 273 K.

2.2 Експеримент

За одређивање транспортних коефицијената (брзине дрифта и ефективног коефицијента јонизације) група проф. Jaime de Urquija је користила уређај који се заснива на импулсној Townsendовој техници. Детаљан опис уређаја дат је у радовима de Urquija и сарадника [16, 17]. У простор унутар плочастог кондензатора уводи се испитивани гас, а његов централни дио налази се под дејством константног електричног поља. Помоћу UV ласера добијају се електрони који на свом путу до аноде јонизују честице гаса. Електрони, много лакши од јона, иза себе остављају облак спорих јона, па се ова техника заснива на мјерењу струје помјераја у анодном колу. Ако се занемаре дифузиони ефекти добија се релативно једноставан израз за одређивање брзине дрифта и коефицијента јонизације:

$$i_e(t) = \begin{cases} \frac{n_0 q_0}{T_e} \exp(\alpha W t) & 0 \leq t \leq T_e \\ 0 & t > T_e \end{cases}, \quad (1)$$

гдје је n_0 – почетни број фотоелектрона, q_0 - наелектрисање електрона, T_e - вријеме прелета електрона и α - коефицијент јонизације.

3. РЕЗУЛТАТИ

У овом дијелу је дат преглед резултата за ефективне пресјеке и транспортне коефицијенте електрона добијене методом ројева, а неки од њих се могу наћи и на веб адреси <http://mail.ipb.ac.rs/~cep/ipb-cnp/ionsweb/index.htm>.

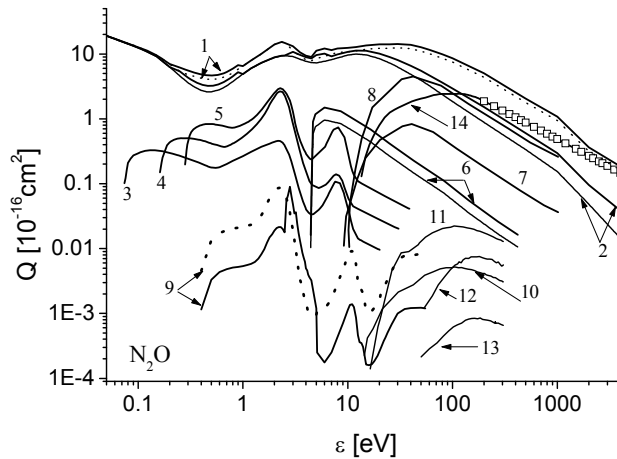
3.1 Ефективни пресјечи и транспортни коефицијенти за електроне у N_2O и N_2O-N_2 смјесама

Интересовање научне заједнице за сударне процесе електрона са молекулима азот-субоксида (N_2O) потиче од чињенице да је то гас који доприноси ефекту стаклене баште и који значајно утиче на глобално загријавање [18]. Са друге стране, нашао је примјену у савременим плазма технологијама, ласерској техници, користи се у медицини као анестетик а разматран је и као потенцијална замјена за гасове са много већим GWP (*Global Warming Potencial*) као што је SF_6 , који има широку примјену у електронској индустрији као гасни изолатор. Упркос томе, подаци о овом гасу који се могу наћи у литератури су или непотпуни, дати у веома уском опсегу енергија, или противуречни [19]. Ово је био довољан разлог да, полазећи од измјерених вриједности брзине дрифта и ефективног коефицијента јонизације де Урквија и сарадника примјенимо технику ројева и анализирамо постојеће пресјеке за расијање електрона доступне у литератури. Детаљи о почетним пресјецима и поступку модификација могу се видјети у [20]. Резултат нашег рада је препоручени скуп пресјека приказан на слици 3.1.1 (пуне линије), на којој се може посебно уочити значајна промјена пресјека за захват електрона.

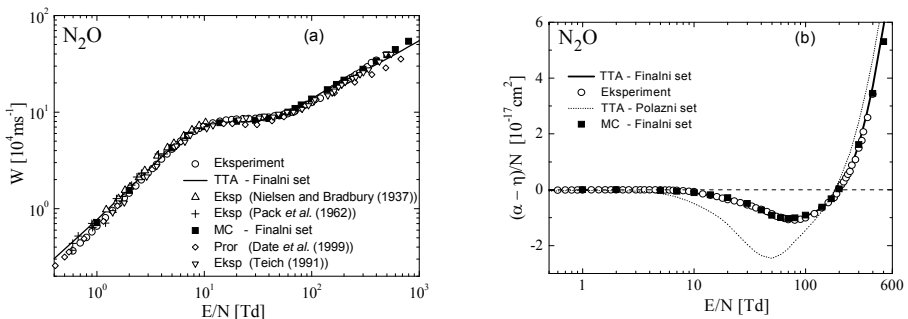
Ради поређења, на истој слици, испрекиданим линијама приказани су пресјечи прије модификације.

На слици 3.1.2. (а и б) су приказана поређења израчунатих и измјерених вриједности брзине дрифта (а) и ефективног коефицијента јонизације (б). Као што се са слика може видјети, резултат добијен модификованим сетом пресјека за N_2O доста добро фитује мјерене

вриједности на цијелом опсегу E/N , за разлику од резултата добијених полазним сетом.



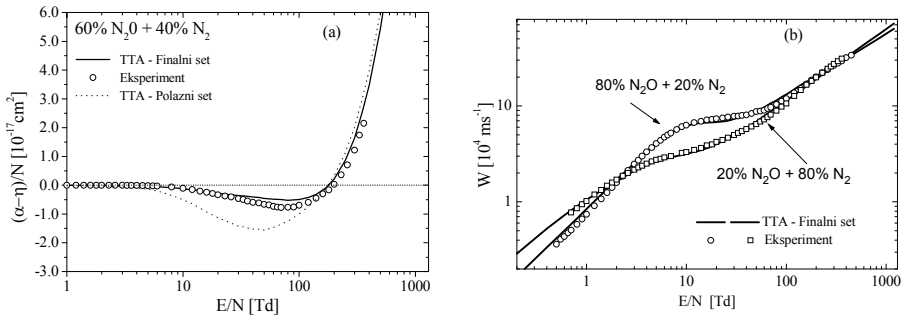
Слика 3.1.1. Препоручени скуп ефективних пресека за електроне у N_2O : тотални пресјек за пренос импулса (1), еластични пресјек за пренос импулса (2), вибрационе ексцитације (3,4,5), електронске ексцитације (6,7,8), дисоцијативни захват (9), дисоцијативне електронске ексцитације (10-13), јонизација (14). Испрекиданом линијама су приказани полазни пресеци прије скалирања



Слика 3.1.2: а) Брзина дрифта за електроне у N_2O у ϕ -ји E/N : поређење наших резултата (експеримент-празни кругови, МС прорачуни-пуни квадрати, ТТА прорачуни-пуна линија) са раније публикованим подацима из литературе, б) Ефективни јонизациони коефицијент: поређење израчунатих и измјерених вриједности у ϕ -ји E/N

Као тест извршених модификација на пресецима за N_2O послужиле су нам N_2O/N_2 смјесе различитог састава (20%, 40%, 60% и 80% N_2O у N_2), јер су пресеци за N_2 доста добро одређени и више пута тестирани, а ми смо их преузели из *Signalib* базе података која је саставни дио кода *Elendif*

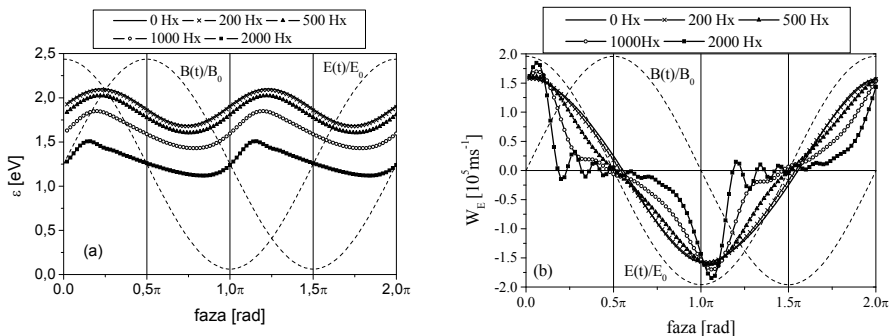
[9]. Степен слагања израчунatih транспортних коефицијената модификованим пресјецима за N_2O и измјерених коефицијената *de Urquija* је много бољи неголи онај добијен полазним пресјецима за N_2O , што оправдава извршене модификације, посебно пресјека за захват, имајући у виду да N_2 није електронегативан гас.



Слика 3.1.3. а) Поређење израчунatih (испрекидана линија-полазни скуп пресјека, пуна линија-препоручени скуп пресјека за N_2O) и измјерених вриједности (празни кругови) за 60% N_2O/N_2 смјесу, б) Поређење израчунatih и измјерених вриједности брзине дрифта за 80% и 20% N_2O/N_2 смјесу

Као илустрација овог закључка могу послужити слике 3.1.3 (а) и 3.1.3 (б) на којима је приказано поређење измјерених (симболи) и израчунatih (линије) ефективних коефицијената јонизације и брзина дрифта, редом, за различите смјесе.

Са препорученим сетом пресјека за N_2O (слика 3.1.1), помоћу MC кода, израчунали смо и комплетан скуп транспортних коефицијената у случају укрштених временски промјенљивих електричних и магнетских поља [21], имајући у виду чињеницу да овакви подаци нису постојали у литератури, а да опште прихваћене квази-статичке апроксимације ниско-



Слика 3.1.4. а) Временски профил средње енергије у функцији B/N . Фреквенција поља је 100 MHz а $E/N=100 \text{ Td}$., б) Временска зависност брзине дрифта у правцу електричног поља за различите вриједности B/N , за $E/N=100 \text{ Td}$ и $f=100 \text{ MHz}$

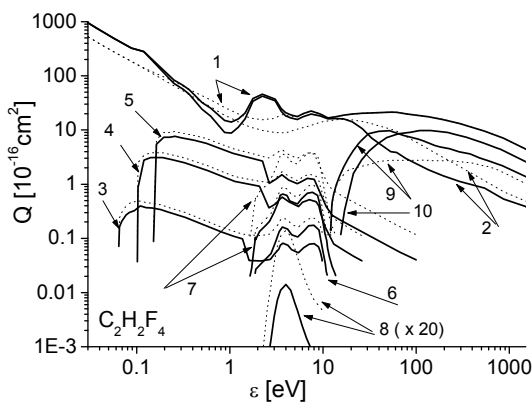
фреквентних поља и апроксимација ефективног поља не дају довољно добра рјешења за случај моделовања реалних плазма уређаја. Посебно је третиран утицај фреквенце поља, као и утицај интензитета магнетног поља [21], а овом приликом ће бити приказана само два добијена резултата на слици 3.1.4. (а и б).

На слици 3.1.4. (а) је приказан временски профил средње енергије у функцији фазе за различите вриједности B/N . Као што се са слике може видјети средња енергија се смањује како амплитуда B/N расте, што се приписује добро познатом ефекту хлађења магнетним пољем. У исто вријеме профил средње енергије на највишим B/N постаје асиметричан и троугласт са брзим порастом и споријим падом.

На слици 3.1.4.(б) приказан је временски профил лонгитудиналне компоненте дрифт брзине (W_E) у функцији фазе за различите вриједности B/N . За ниже B/N пик је широк и гладак са центром око нулте вриједности магнетског поља. Порастом B/N он постаје узак и фазно помјерен.

3.2 Ефективни пресјеци и транспортни коефицијенти за електроне у $C_2H_2F_4$ и $C_2H_2F_4/A_r$ смјесама

Тетрафлуороетан, структурне формуле $C_2H_2F_4$, алтернативних назива R-134a, HFC-134a, је гас који се врло често користи као расхладно средство, нема утицаја на озонски омотач, али утиче на глобално загријавање ($GWP=1.3$), као и на појаву киселих киша. Користи се у радијационим честичним детекторима [22], а предложен је и као средство у процесима депозиције материјала [23]. Упркос овако широким и бројним примјенама подаци о овом гасу практично не постоје, па нам је као полазни скуп пресејка послужио једини доступан скуп у литератури [24], који се



Слика 3.2.1. Препоручени скуп ефективних пресејка за електроне у $C_2H_2F_4$: тотални пресејек за пренос импулса (1), еластични пресејек за пренос импулса (2), вибрационе ексцитације (3,4,5,6,7), дисоцијативни захват (8), дисоцијативне електронске ексцитације (9), јонизација (10). Испрекиданом линијама су приказани полазни пресејци прије скалирања

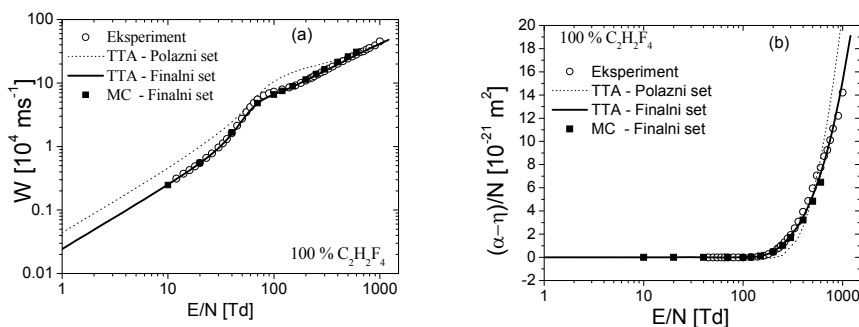
углавном заснива на екстраполацији пресека за C_2F_6 (слика 3.2.1, полазни пресеци су приказани испрекиданим линијама).

Аналізу овог скупа пресека извршили смо техником ројева полазећи од измјерених вриједности брзине дрифта и ефективног коефицијента јонизације *de Urquija* и сарадника, како за чист $C_2H_2F_4$, тако и за $C_2H_2F_4/A_r$ смјесе [25].

У циљу фитовања измјерених транспортних коефицијената било је неопходно извршити модификације тоталног и еластичног пресека за пренос импулса (линије 1 и 2), вибрационе ексцитације (линије 3-7), пресјек за захват (линија 8) и дисоцијативне ексцитације (линија 9). Коначан скуп пресека са којим је могуће репродуковати измјерене транспортне коефицијенте је приказан на слици 3.2.1., пуним линијама.

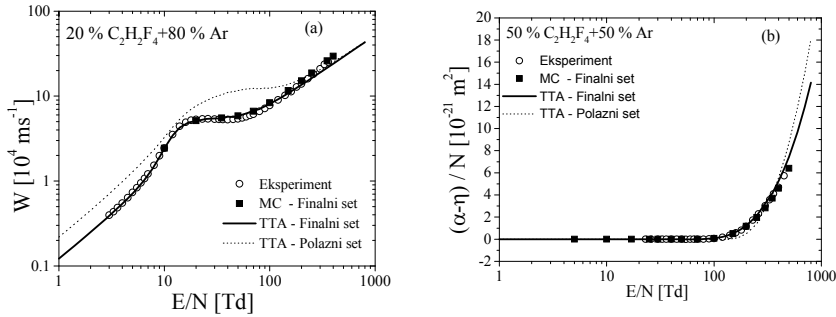
На слици 3.2.2. (а) и 3.2.2. (б) је приказано поређење израчунатих вриједности брзине дрифта и ефективног коефицијента јонизације у ТТА апроксимацији (испрекидана линија-полазни пресеци, пуна линија-финални пресеци), МС кодом (пуни квадрати), са измјереним вриједностима групе проф. *de Urquija* (празни кругови). Као што се са слика може видјети, са модификованим пресецима за $C_2H_2F_4$ (слика 3.2.1, пуне линије) могуће је фитовати оба транспортна коефицијента много боље неголи полазним пресецима (слика 3.2.1, испрекидане линије).

Као тест извршених модификација на пресецима за $C_2H_2F_4$ послужила су нам мјерења брзине дрифта и ефективног коефицијента јонизације у $C_2H_2F_4/A_r$ смјесама [25], и то 2%, 5%, 10%, 20% и 50% $C_2H_2F_4/A_r$ смјесе. Наиме, техника смјеса, где је једна



Слика 3.2.2. а) Брзина дрифта за електроне у $C_2H_2F_4$ у ф-ји E/N : поређење наших резултата (експеримент-празни кругови, МС прорачуни-пуни квадрати, ТТА прорачуни: испрекидана линија-полазни пресеци, пуна линија-финални пресеци), б) Ефективни јонизациони коефицијент: поређење израчунатих и измјерених вриједности у ф-ји E/N

компонента атомски гас поуздано утврђених пресека контролише баланс импулса, а друга компонента испитивани молекуларни гас у малој концентрацији контролише баланс енергије, омогућава побољшање јединствености добијеног скупа пресека [26, 27].



Слика 3.2.3. а) Поређење израчунатих вриједности брзине дрифта (испрекидана линија-полазни скуп пресека, пуна линија-препоручени скуп пресека за $C_2H_2F_4$, пуни квадрати-МС прорачуни) и измјерених вриједности (празни кругови) за 20% $C_2H_2F_4/A_r$ смјесу, б) Поређење израчунатих и измјерених вриједности ефективног коефицијента јонизације за 50% $C_2H_2F_4/A_r$ смјесу

Пресјеции за A_r су преузети из *Sigmalib* базе података [9]. Овдје ће бити приказани само неки од тих резултата. На слици 3.2.3. (а) и 3.2.3. (б) је приказано поређење израчунатих вриједности брзине дрифта и ефективног коефицијента јонизације у ТТА апроксимацији (испрекидана линија-полазни пресјеции, пуна линија-финални пресјеции за $C_2H_2F_4$) и МС кодом (пуни квадрати) са измјереним вриједностима (празни кругови).

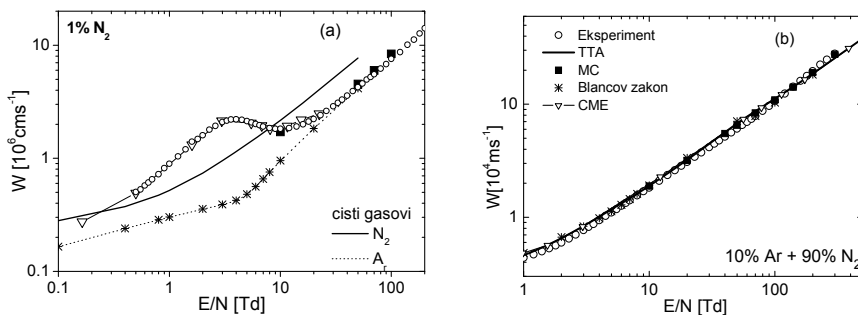
Види се да извршене модификације на $C_2H_2F_4$ пресјециима нису нарушиле степен слагања између израчунатих и измјерених вриједности транспортних коефицијената. Такођер, на слици 3.2.3. (а) се види и појава негативне диференцијалне проводности, што није био случај код чистог $C_2H_2F_4$.

3.3. Транспортни коефицијенти за електроне у A_r/N_2 смјесама добијени методом примјене закона за гасне смјесе

Метода примјене закона за гасне смјесе је метода која се користи за добијање транспортних коефицијената за смјесе гасова када су познати исти за чисте гасове, што је доста значајно јер се неравнотежне плазме често реализују у гасним смјесама или када су потребни подаци за чисте гасове, а мјерења су могућа само у смјесама.

Примјеном стандардног Власовог закона [28], и тзв. СМЕ (*Common mean energy*) [29, 30] процедуре израчунали смо брзине дрифта у A_r/N_2 смјесама различитих процентуалних састава. Овдје ће бити приказани само неки од њих а детаљније можете видјети у референцама [31, 32, 7].

На слици 3.3.1. (а) је приказано поређење прорачуна брзине дрифта за 99% A_r/N_2 смјесу са измјереним вриједностима *de Urquija*. Празним круговима су приказане измјерене вриједности и као што се са слике види постигнуто је доста добро слагање са нашим прорачунима МС кодом (пуни квадрати) и процедуром заједничке средње енергије (СМЕ - празни троуглови).



Слика 3.3.1. Поређење израчунатих вриједности брзине дрифта за 99% Ar/N_2 смјесу (а) и 10% Ar/N_2 смјесу (б), разним методама са измјереним вриједностима *de Urquija*

Опажа се појава негативне диференцијалне проводности, што стандардни Влансов закон (резултат приказан звијездом) не предвиђа. Ради поређења приказане су и вриједности брзине дрифта за чисте гасове (пуна линија N_2 , испрекидана линија Ar).

За разлику од 99% Ar/N_2 смјесе, 10% Ar/N_2 смјеса (слика 3.3.1. б) не показује појаву негативне диференцијалне проводности и постигнуто је јако добро слагање измјерених и израчунатих вриједности брзине дрифта, како МС кодом, тако и стандардним Влансовим законом, СМЕ процедуром и у ТТА апроксимацији.

4. ЗАКЉУЧАК

У овом раду је дат преглед резултата добијених техником ројева за различите гасове и гасне смјесе. За N_2O и $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4$ добијени су ефективни пресјечи за расијање електрона који су у могућности да репродукују најновија мјерења транспортних коефицијената, како у чистим гасовима, тако и у $\text{N}_2\text{O}/\text{N}_2$ и $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_4/\text{Ar}$ смјесама различитих процентуалних састава. На овај начин је формирана база података за пресјеке и транспортне коефицијенте који служе као улазни параметри за најдетаљније плазма моделе. Приказани су и резултати транспортних коефицијената за Ar/N_2 смјесе добијени примјеном закона за смјесе. Још једном је потврђено да техника која се заснива на комбиновању података за чисте гасове на истој вриједности средње енергије електрона да би се добили подаци за смјесе различитог састава (СМЕ процедура) даје боље резултате од оних који се добијају у случају комбиновања података на истој вриједности редукованог електричног поља (стандардни Влансов закон).

5. ЛИТЕРАТУРА

[1] Dutton, J., *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **4**, 577, (1975)

- [2] Gallagher, J. W., Beaty, E. C., Dutton, J., Pitchford, L. C., *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **12**, 109-152, (1983)
- [3] Hunter, S. R., Christophorou, L. G., *Electron Molecule interactions and their applications*, vol 2, ed L G Christophorou, (Academic Press, New York), (1984)
- [4] Sakai, Y., *Appl. Surf. Sci.*, **192**, 327-340, (2002)
- [5] Crompton, R. W., *Adv. At. Mol. Opt. Phys.*, **32**, 97, (1994)
- [6] Petrović, Z. Lj., Šuvakov, M., Nikitović, Ž., Dujko, S., Šašić, O., Jovanović, J., Malović, G., Sojanović, V., *Plasma Sourc. Sci. and Technol.*, **16**, S1-S12, (2007)
- [7] Petrović, Z. Lj., Dujko, S., Marić, D., Malović, G., Nikitović, Ž., Šašić, O., Jovanović, J., Stojanović, V., Radmilović-Radenović, M., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **42**, 194002, (33 pp), (2009)
- [8] Huxley, L. G. H., Crompton, R. W., *The Diffusion and Drift of Electrons in Gases*, (New York: Wiley Interscience), (1974)
- [9] Morgan, W. L., Penetrante, B. M., *Comp. Phys. Commun.*, **58**, 127, (1990)
- [10] Bzenić, S., *Doktorska disertacija*, Fizički fakultet, Beograd, (1997)
- [11] Bzenić, S., Raspopović, Z., Sakadžić, S., Petrović, Z. Lj., *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **27**, 78-79, (1999)
- [12] Robson, R. E., White, R. D., Morrison, M. A., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **36**, 4127, 1241, (2003)
- [13] Phelps, A. V., Pitchford, L. C., *Phys. Rev. A*, **31**, 2932, (1985)
- [14] White, R. D., Robson, R. E., Schmidt, B., Morrison, M. A., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **36**, 3125-3131, (2003)
- [15] Robson, R. E., *Aust. J. Phys.*, **44**, 685, (1991)
- [16] de Urquijo, J., Arriaga, C., Alvarez, I., Cisneros, C., *J. Phys. D*, **32**, 41, (1999a)
- [17] de Urquijo, J., Basurto, E., Hernández-Ávila, J. L., *J. Phys. D*, **34**, 2151-2159, (2001)
- [18] Graedel, T. E., Crutzen, P. J., *Atmospheric Change: An Earth System Prospective*, Freeman, New York, (1993)
- [19] Karwasz, G. P., Brusa, R. S., Zecca, A., *La Rivista del Nuovo Cimento*, **24**, 79, (2001)
- [20] Dupljanin, S., de Urquijo, J., Šašić, O., Basurto, E., Juárez, A. M., Hernández-Ávila, J. L., Dujko, S., Petrović, Z. Lj., *Plasma Sources Sci. Technol.*, **19**, 025005, (9 pp), (2010)
- [21] Šašić, O., Dupljanin, S., Dujko, S., Petrović, Z. Lj., *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, **267**, 377-381, (2009)
- [22] Abbrescia, M. et al., *Nucl. Phys. B Proc. Suppl.*, **177-178**, 293-296, (2008)
- [23] Labelle, C. B., Gleason, K. K., *J. Appl. Pol. Sci.*, **80**, (11), 2084-2092, (2001)
- [24] Biagi, S., <http://rjd.web.cern.ch/rjd/cgi-bin/cross?update>, (2007)
- [25] de Urquijo, J., Juárez, A. M., Basurto, E., Hernández-Ávila, J. L., *Eur. Phys. J. D*, **51**, 241-246, (2009)
- [26] Petrović, Z. Lj., O'Malley, T. F., Crompton, R. W., *J. Phys. B: At.*

- Mol. Opt. Phys.*, **28**, 3309-3323, (1995)
- [27] Petrović, Z. Lj., Crompton, R. W., *Aust. J. Phys.*, **40**, 347-353, (1987)
- [28] Blanc, A., *J. Phys.*, **7**, 825, (1908)
- [29] Chiflikyan, R. V., *Phys. Plasmas*, **2**, 3902-3909, (1995)
- [30] Jovanović, J. V., Vrhovac, S. B., Petrović, Z. Lj., *Eur. Phys. J. D*, **28**, 91-99, (2004)
- [31] Jovanović, J. V., Basurto, E., Šašić, O., Hernández-Ávila, J. L., Petrović, Z. Lj., de Urquijo, J., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **42**, 045202, (2009)
- [32] Šašić, O., de Urquijo, J., Juárez, A. M., Dupljanin, S., Jovanović, J. V., Hernández-Ávila, J. L., Basurto, E., Petrović, Z. Lj., *Plasma Sources Sci. Technol.*, **19**, 034003, (2010)

ОСОБИНЕ И МОГУЋЕ ПРИМЕНЕ МИКРОПРАЖЊЕЊА

Н. Шкоро¹, Д. Марић¹, Г. Маловић¹, З. Љ. Петровић¹
¹Институт за физику, Универзитет у Београду

Сажетак. У овом раду приказани су експериментални резултати мерења Пашенове криве и струјно-напонске карактеристике микропражњења са паралелним равним електродама на вишим притисцима. Резултати мерења за међуелектродна растојања од 200 и 500 μm упоређена су са резултатима за пражњења стандардних димензија на ниском притиску ($d = 1 \text{ cm}$, $p = 1 \text{ Torr}$) у циљу тестирања области важења закона скалирања. Такође је показана зависност понашања пражњења од облика Пашенове криве.

Abstract. In this paper we show experimental measurements of Paschen curve and voltage-current characteristics of parallel plate micro-discharge in pure argon at high pressures. Measurements performed for d 200 μm and 500 μm interelectrode distances are compared to a standard size ($d = 1.1 \text{ cm}$, $p = 1 \text{ Torr}$) discharge results in order to test scaling laws. Further, we attempted to establish a relationship between discharge behavior and shape of the Paschen curve, especially for low pd values.

1. УВОД

Карактеристични параметри плазме, укључујући просторну величину плазме, густину електрона, температуру и концентрацију неутралног гаса протежу се кроз неколико редова величина. У скорије време напредак у обради материјала је створио могућност реализације плазми у шупљинама микрометарских димензија (и до 10 μm) и запреминама испод једног нанолитра [1,2]. Тако је створена цела класа слабо-јонизоване нискотемпературне неравнотежне плазме у шупљинама номиналних димензија (d) између 1 μm и 1 mm познатих као пражњења у микрошупљинама (краће: микропражњења) или микроплазме. Код оваквих пражњења, неравнотежни услови се могу остварити и на атмосферским или већим притисцима. Наиме, од раније је познато да „макроскопска“ пражњења, центиметарских димензија, могу стабилно да раде у неравнотежном режиму на притисцима од неколико Torr-а што отприлике одговара интервалу 1-10 Torr \cdot cm параметра pd (где је p – притисак гаса, а d карактеристично међуелектродно растојање). Захваљујући законима pd скалирања, минијатуризацијом пражњења се исти услови могу остварити

на знатно већим притисцима. Испоставља се да је иста област pd интервала и област стабилног рада микропражњења, с тим што су за димнзије шупљине од око 100 μm притисци око 100 пута већи, тј. блиски атмосферском. Могућност рада на атмосферском притиску, без скуких вакуумских уређаја, фаворизује овај тип пражњења у случају примена. Поред тога, велике густине снаге микропражњења које су до сада биле реализоване једино у системима са импулсном побудом играју значајну улогу код технолошких примена. На пример, може се ефикасно добијати зрачење из атомских или молекулских краткоживећих стања побуђених у плазми.

Моделовање [3] и експерименти [4] са микроплазмама разних геометрија показује да је расподела функције енергије електрона не-Максвелова, са локалном температуром електрона од 5 eV и више, у зависности од услова екситације. Велике специфичне густине снаге карактеристичне за ове изворе плазме дају концентрације електрона (n_e) од типично 10^{14} - 10^{15} cm^{-3} у случају пражњења са једносмерном струјом, а иду и до 5×10^{16} cm^{-3} у случају импулсне побуде [5]. Температура неутралног гаса зависи од врсте гаса или гасне смеше као и од густине струје и геометрије шупљине. Спектроскопска мерења показују да се температура гаса у микропражњењима у племенитим гасовима креће од собне до 100-150 K изнад собне температуре за случај једносмерне побуде што је такође значајно код примена. Са друге стране, у другим типовима пражњења на атмосферском притиску температура гаса достиже и 2000 K.

Различити извори неравнотежне плазме довели су до низа нових примена. Већина ових уређаја могу се користити као интензивни и ефикасни извори или детектори егзимерског или УВ зрачења [6,7]. Матрице које садрже велики број микроплазми користе се у производњи екрана, а густина паковања шупљина са Si основом достиже 10^4 cm^{-2} [8]. Такође, овакви извори плазме имају већ раширену примену у биомедицини и у области очувања животне средине [1,4]. Пошто су оваква пражњења и минијатурни извори јона, побуђених честица и радикала, налазе примену и у селективном третману површина: чишћењу, модификацији, нагризању и депозицији [9] као и у нанотехнологијама [10].

Претпоставка за даљи развој бројних примена микропражњења, од којих смо само неке овде навели, је боље разумевање основних процеса који дефинишу особине пражњења. Неравнотежне плазме су до сада биле успешно проучаване на ниским притисцима. Да бисмо упоредили резултате добијене из пражњења стандардних (центиметарских) димензија са микропражњењима, потребно је испитати област важења закона сличности (скалирања) за конкретне параметре пражњења. Надаље, нарушавање закона сличности може указати на нове процесе који се појављују у пражњењу. Опште гледано, процеси који не задовољавају законе скалирања су загревање гаса и електрода, процеси у којима учествују побуђени молекули, процеси степенасте екситације и јонизације, рекомбинација јона и електрона. Поред ових процеса, у микро димензијама појављује се још неколико процеса који су кандидати за промену кинетике честица у пражњењу и нарушавање закона скалирања.

То су емисија електрона услед јаког поља, фазни прелази у гасу на високом притиску и ефекти тунеловања електрона. Показано је да ови процеси постају важни на међуелектродним растојањима мањим од неколико микрометара [11] и притисцима далеко већим од атмосферског.

Дакле, одређивање области важења закона сличности је важно за могућност екстраполације резултата стандардних пражњења на микропражњења. Са тим у вези, недавно су анализирани параметри сличности E/N , pd и j/p^2 у пражњењима на ниском притиску у области око минимума и лево од минимума на Пашеновој кривој [12]. Експеримент са микропражњењем конструисан је са циљем наставка проучавања области важења закона сличности на вишим притисцима. Микропражњење у нашем експерименту је реализовано у геометрији равних паралелних електрода. Мада је пражњење у оваквој геометрији нестабилније него, на пример пражњења са шупљом катодом, добијени резултати су једноставнији за интерпретацију и моделовање.

2. ОПИС ЕКСПЕРИМЕНТА

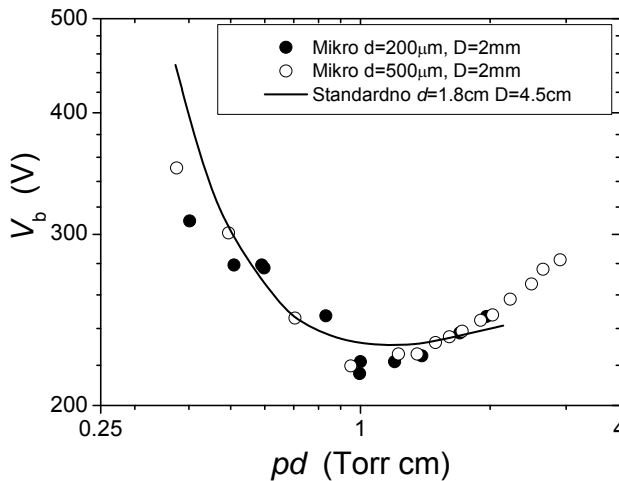
У комори за пражњење се налазе равне и паралелне електроде пречника $D = 2 \text{ mm}$ између којих се растојање може мењати. Експериментална мерења извршена су за растојања $d = 200 \text{ }\mu\text{m}$ и $d = 500 \text{ }\mu\text{m}$. Катода од нерђајућег челика и анода са проводним ИТО (Indium Tin Oxide) филмом окружене су непроводним зидом коморе. На овај начин избегнут је пробој на другим местима осим између електрода. Транспарентна анода омогућава снимање радијалних профила емисије из пражњења ICCD камером. Мерења су вршена у чистом аргону.

Пражњење се остварује у колу једносмерне струје. Електрично коло и систем за детекцију сигнала у експерименту конструисани су тако да омогуће поуздана и репродуцибилна мерења. Наиме, електрично коло омогућава снимање струјно-напонске карактеристике пражњења укључивањем напонског импулса на већ постојеће једносмерно слабострујно пражњење [12]. Тако се избегава загревање гаса и катоде и кондиционирање површине катоде услед дуготрајног рада пражњења на јаким струјама. Снимање профила камером синхронизовано је са напонским импулсом и системом за детекцију.

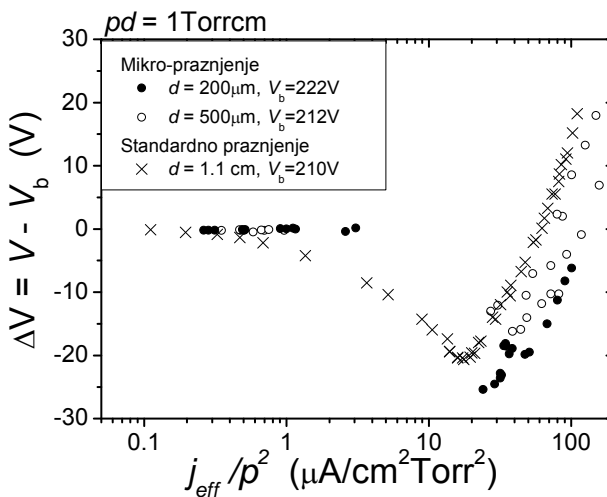
3. РЕЗУЛТАТИ И ДИСКУСИЈА

На слици 1 приказана је зависност пробојног напона у микропражњењу (V_b) од производа притисак-растојање електрода (pd), тј. Пашенова крива, за два међуелектродна растојања. Такође су приказани резултати центиметарског пражњења због поређења. Пробојни напони одређени су из слабострујног лимита струјно-напонских карактеристика (Таунзендовог режима). Иако су пробојни напони у случају

микропражњења нешто нижи постоји добро слагање са резултатима добијеним у пражњењу стандардних димензија. Облици кривих су врло слични у сва три случаја и код свих се минимум налази на истој pd вредности. Највеће разлике у пробојим напонима су у левој грани Пашенове криве пошто у овој pd области доминирају процеси производње секундарних електрона на површини катоде [13]. Према томе, закон скалирања за параметар pd важи у овој области електродног растојања микро-пражњења. Нису уочена значајна одступања од стандардног облика Пашенове криве као што је дато у [14].



Слика 1. Пашенове криве микропражњења и пражњења стандардних димензија

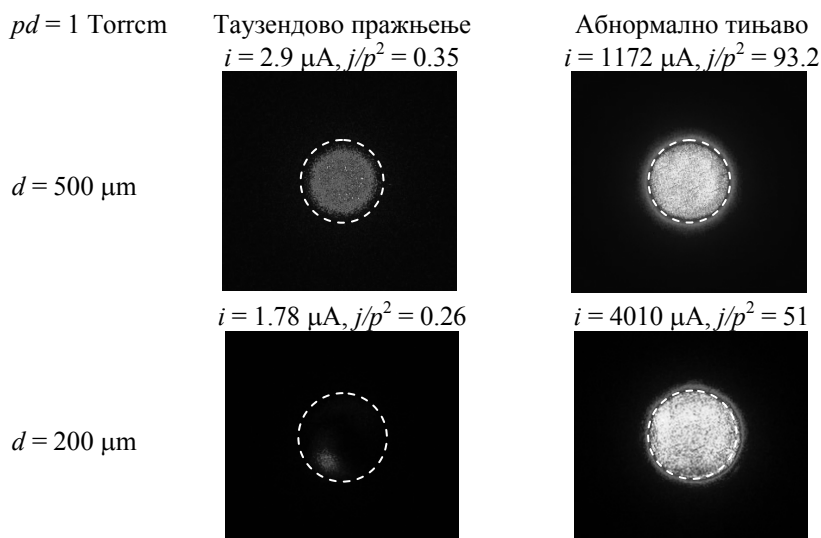


Слика 2. Зависност напона пражњења од параметра скалирања j/p^2 за $pd=1\text{Torr cm}$ за микро-пражњења са катодом од нерђајућег челика, у поређењу са пражњењем стандардних димензија са катодом од бакра

Струјно-напонска карактеристика микро-пражњења за два међуелектродна растојања и $pd = 1$ Torrcm приказана је на слици 2. На графику је дата зависност напона од параметра скалирања j/p^2 , где је густина струје (j) израчуната користећи ефективну површину пражњења како би се добио коректан параметар скалирања [15,16].

Ефективна површина пражњења одређена је из радијалних профила снимљених ICCD камером. Напон је представљен као разлика напона пражњења (V) и пробојног напона (V_b). На графику је, ради поређења, приказана и струјно-напонска карактеристика пражњења стандардних димензија са катодом од бакра.

Разлике у радним напонима микро и стандардног пражњења су мале у слабострујном режиму (Слика 2). Овај режим у микропражњењу одликује се веома малим негативним нагибом карактеристике, тј. негативне диференцијалне отпорности, у поређењу са пражњењем стандардне димензије. Радијална структура пражњења је такође другачија. Док је у случају $d = 500 \mu\text{m}$ пражњење дифузно, што је типично код стандардних пражњења на ниском притиску, на мањим растојањима, тј. већим притисцима пражњење је констриковано. На $d = 200 \mu\text{m}$ радијални профил је веома констрикован, чак и Таузендовом режиму рада (Слика 3). Самим тим и ефективна површина пражњења је знатно мања од површине катоде. Констрикција остаје на истом месту током целог напонског импулса, али понекад промени положај у наредним импулсима. Мале промене положаја на коме се формира пражњење нису утицале на облик струјно-напонске карактеристике. Констрикција пражњења у слабострујном домену је највероватније последица много мање дифузионе дужине на вишим притисцима у микропражњењима [16].



Слика 3. Радијални профили Таузендовог тамног и абнормалног тињавог пражњења за различита растојања међу електродама. Површина електроде је ограничена линијом

Празнина на струјно-напонској карактеристици (Слика 2) одговара осцилаторном режиму. Уласком у област тињавог пражњења нагиб карактеристике постаје позитиван, што одговара абнормалном тињавом режиму. Пражњење је дифузно и заузима целу површину катоде (Слика 3). У овом режиму радни напон микропражњења је нешто нижи него код центиметарског пражњења. Имајући у виду да су у питању разлике у димензијама од неколико редова величина, као и да су катодне површине различите, можемо рећи да микропражњења проучавана у овом раду задовољавају законе скалирања, односно, у пражњењима не учествују процеси који би довели до нарушавања скалирања.

Разумевање скалирања пражњења је од критичне важности, како за развој модела микропражњења, тако и за развој и оптимизацију апликација. У оквиру овог рада тестирали смо pd и j/p^2 скалирање пражњења у опсегу од центиметарских до микрометарских димензија. Показали смо да се закони сличности могу применити и у микрометарској области уколико се правилно одреде параметри скалирања. Посебну пажњу треба посветити прецизном одређивању ефективне површине пражњења, која може бити знатно мања од површине електрода на високим притисцима, где је дужина дифузије реда величине међуелектродног растојања.

4. ЛИТЕРАТУРА

- [1] Becker, K. H., Schoenbach, K. H., Eden, J. G., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **39**, R55–R70, (2006).
- [2] Park, S.-J., Chen, J., Wagner, C. J., Ostrom, N. P., Liu, C., Eden, J. G., *IEEE J. Sel. Topics Quantum Electron.*, **8**, 387–394, (2002).
- [3] Kushner, M. J., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **38**, 1633–1643, (2005).
- [4] Kogelschatz, U., *Contrib. Plasma Phys.*, **47**, No. 1-2, 80-88, (2007).
- [5] Moselhy, M., Petzenhauser, I., Frank, K., Schoenbach, K. H., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **36**, 2922–2927, (2003).
- [6] Sankaran, R. M., Giapis, K. P., Moselhy, M., Schoenbach, K. H., *Appl. Phys. Lett.*, **83**, 4728-4731, (2003).
- [7] Kurunczi, P., Shah, H., Becker, K., *J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys.*, **32**, L651- L658, (1999).
- [8] Eden, J. G., Park, S.-J., *Plasma Phys. Control. Fusion*, **47**, B83-B92, (2005).
- [9] Sankaran, R. M., Giapis, K. P., *Appl. Phys. Lett.*, **79**, 593-596, (2001).
- [10] Mariotti, D., Ostrikov, K., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **42**, 092002-092005, (2009).
- [11] Radmilović-Radenović, M., Lee, J. K., Iza, F., Park, G. Y., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **38**, 950-954, (2005).
- [12] Maric, D., Hartmann, P., Malović, G., Donko, Z., Petrović, Z. Lj., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **36**, 2639-2648, (2003).
- [13] Phelps, A. V., Petrović, Z. Lj., *Plasma Sources Sci. Technol.*, **8**, R21-R44, (1999).

- [14] Baars-Hibbe, L., Sichler, P., Schrader, C., Lucas, N., Gericke, K.-H., Buttgenbach, S., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **38**, 510-517, (2005).
- [15] Škoro, N., Marić, D., Petrović, Z. Lj., *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **36**, No.4, 994-995, (2008).
- [16] Petrović, Z. Lj., Škoro, N., Marić, D., Mahony, C. M. O., Maguire, P. D., Radmilović-Radjenović, M., Malović, G., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **41**, 194002-194006, (2008).

