

UNIVERZITET U BEOGRADU

FIZIČKI FAKULTET

Jasmina M. Atić

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

doktorska disertacija

Beograd, 2022.

UNIVERSITY OF BELGRADE

FACULTY OF PHYSICS

Jasmina M. Atić

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

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2022.

## **Mentor**

Dr Saša Dujko, naučni savetnik  
Institut za fiziku Beograd, Institut od nacionalnog značaja za Republiku Srbiju  
Univerzitet u Beogradu

## **Članovi komisije za odbranu doktorske disertacije**

Dr Saša Dujko, naučni savetnik  
Institut za fiziku Beograd, Institut od nacionalnog značaja za Republiku Srbiju  
Univerzitet u Beogradu

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

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

**Datum odbrane:** \_\_\_\_\_

# Zahvalnica

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

Želela bih da se zahvalim svom mentoru dr Saši Dujku na definisanju teme istraživanja, rukovođenju, dragocenoj i nesebičnoj pomoći koju mi je pružio u svim fazama rada na ovoj disertaciji. U konstruktivnim razgovorima i tokom pripreme naučnih publikacija, puno sam naučila od svog mentora o fizici rojeva naelektrisanih čestica i modelovanju neravnotežnih plazmi. Želim da se zahvalim svom mentoru na idejama, inspiraciji i strpljenju, koji su na kraju rezultirali ovom disertacijom.

Veliku zahvalnost dugujem nekadašnjem rukovodiocu Laboratorije, akademiku dr Zoranu Lj. Petroviću. Zahvaljujući akademiku Petroviću, postala sam član Laboratorije i stekla značajno iskustvo u bavljenju naučno-istraživačkim radom. Kroz programom predviđenih predavanja na doktorskim studijama i kroz razgovore sa akademikom Petrovićem dobila sam brojne korisne savete i smernice za bavljenje naukom.

Želela bih da se zahvalim svojim kolegama iz kancelarije - dr Danku Bošnjakoviću i dr Iliji Simonoviću na nesebičnoj pomoći koju su mi pružili prilikom rešavanja velikog broja problema povezanih sa numeričkim proračunima i interpretacijom opaženih fenomena.

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

Veliku zahvalnost dugujem svojoj nastavnici fizike i elektrotehnike Mileniji Joksimović na prenetom interesovanju prema ovim granama nauka koje se kod mene razvilo već u prvim srednjoškolskim danima.

Jasmina M. Atić

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

**Rezime:** U prvom delu ove doktorske disertaciju proučavani su sudarni i transportni procesi elektrona u jako elektronegativnim gasovima. Osnovni motivacioni faktor za ova istraživanja je potraga za inovativnim rešenjima u pogledu zamene sumpor-heksafluorida ( $\text{SF}_6$ ) za izolaciju gasom u visokonaponskoj tehnologiji. Uz primenu tehnike rojeva naelektrisanih čestica, koja podrazumeva korišćenje numeričkih rešenja Bolcmanove jednačine i Monte Karlo simulacije, konstruisani su kompletni i samousaglašeni skupovi preseka za rasejanje elektrona u trifluorometil-jodidu ( $\text{CF}_3\text{I}$ ), 1,3,3,3 tetrafluoropropanu ( $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ ) i 2,3,3,3 tetrafluoro-2-(trifluorometil)propan-nitrilu ( $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ ). Na osnovu ovih preseka za rasejanje elektrona, izračunati su transportni koeficijenti u smešama ovih gasova sa Ar,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}_2$  i  $\text{SF}_6$ . Opaženo je opadanje srednje energije elektrona sa porastom električnog polja i negativna diferencijalna provodnost u balk brzini drifta za elektrone u gasovima  $\text{SF}_6$  i  $\text{CF}_3\text{I}$  i njihovim smešama. Ovi kinetički fenomeni su tumačeni na osnovu prostorno razloženih karakteristika roja, uključujući lokalnu srednju energiju i lokalne brzinske koeficijente za zahvat elektrona. Izračunata su kritična polja i razmatran je efekat pozitivne sinergije u smešama  $\text{SF}_6$  i  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ .

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

**Ključne reči:** sudarni preseki, transport elektrona, gasni dielektrici, pare metala, strimeri, Bolcmanova jednačina, Monte Karlo simulacije, fluidni modeli

**Naučna oblast:** fizika

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

**UDK broj:** 533.7+533.9+537.5

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

**Abstract:** In the first part of this doctoral dissertation, the collisional and transport processes of electrons in strongly electronegative gases are investigated. The main motivating factor for the study is the search for innovative solutions regarding the replacement of sulfur hexafluoride (SF<sub>6</sub>) for gas insulation in high voltage technology. Using a swarm method of deriving cross sections, the complete and self-consistent sets of cross sections for electron scattering in trifluoromethyl-iodide (CF<sub>3</sub>I), 1,3,3,3 tetrafluoropropane (C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>4</sub>) and 2,3,3,3 tetrafluoro-2-(trifluoromethyl)propane-nitrile (C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N) are developed. Derived cross-section sets are used as input to solve the Boltzmann equation and perform Monte Carlo simulations of electron transport in the mixtures of these gases with Ar, N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> and SF<sub>6</sub>. A reduction in mean electron energy with increasing electric field and negative differential conductivity in the bulk drift velocity of electrons in SF<sub>6</sub> and CF<sub>3</sub>I gases and their mixtures are observed. These kinetic phenomena are discussed on the basis of the spatially resolved characteristics of the swarm, including the local average energy and the local rate coefficients for electron attachment. Critical electrical fields are calculated and the positive synergy effect of the SF<sub>6</sub> and C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>4</sub> mixtures is discussed.

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

**Keywords:** cross sections, electron transport, gaseous dielectrics, metal vapors, streamers, Boltzmann equation, Monte Carlo simulations, fluid models

**Scientific area:** physics

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

**UDC number:** 533.7+533.9+537.5

# Sadržaj

<b>Uvod</b>	<b>1</b>
<b>1. Gasni dielektrici</b>	<b>9</b>
1.1 Uvod	9
1.2 Izolacija gasom u tehnologiji prenosa električne energije	9
1.3 Istorijski razvoj gasnih dielektrika	11
1.4 Osobine gasnih dielektrika	12
1.5 Očuvanje životne sredine	14
1.5.1 Protokol iz Montreala	14
1.5.2 Protokol iz Kjota	17
1.6 Gasni dielektrici poslednje generacije	18
1.7 Toksičnost gasova i njihovih produkata	20
1.8 Zaključak	21
<b>2. Transportna teorija rojeva elektrona u gasovima</b>	<b>22</b>
2.1 Uvod	22
2.2 Roj naelektrisanih čestica	22
2.3 Hidrodinamički režim i definicija transportnih koeficijenata	23
2.3.1 Jednačina kontinuiteta	23
2.3.2 Hidrodinamička aproksimacija	23
2.3.3 Definicije fluks i balk transportnih koeficijenata	24
2.4 Rešavanje Bolcmanove jednačine	25
2.4.1 Tretman ugaone zavisnosti funkcije raspodele: sferno-harmonijska dekompozicija	25
2.4.2 Tretman prostorne zavisnosti funkcije raspodele	26
2.4.3 Tretman zavisnosti funkcije raspodele od intenziteta brzine	26
2.4.4 Kolizioni operator	27
2.4.5 Transportni koeficijenti elektrona na osnovu momenata funkcije raspodele	28
2.5 Kinetičke jednačine i transportni koeficijenti	29
2.6 Monte Karlo metod	30
2.6.1 Generator slučajnih brojeva	31
2.6.2 Jednačine kretanja elektrona	32
2.6.3 Određivanje vremenskog trenutka i vrste sudara	33
2.6.4 Određivanje dinamičkih osobina elektrona nakon sudara	35
2.6.5 Izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona u Monte Karlo simulacijama	36
2.7 Zaključak	37

<b>3. Transport elektrona u trifluorometil-jodidu (<math>\text{CF}_3\text{I}</math>)</b>	<b>38</b>
3.1 Uvod . . . . .	38
3.2 Eksperimentalne tehnike za merenje transportnih koeficijenata elektrona . . . . .	38
3.3 Tehnika rojeva za razvoj i normalizaciju preseka . . . . .	39
3.4 Inicijalni skup preseka za $\text{CF}_3\text{I}$ . . . . .	41
3.5 Konačan skup preseka za $\text{CF}_3\text{I}$ . . . . .	42
3.5.1 Izračunavanje preseka za superelastične procese . . . . .	43
3.6 Transport elektrona u čistom $\text{CF}_3\text{I}$ na višim vrednostima redukovanoeg električnog polja	44
3.7 Transport elektrona u $\text{CF}_3\text{I-Ar}$ i $\text{CF}_3\text{I-CO}_2$ smešama . . . . .	48
3.7.1 $\text{CF}_3\text{I-Ar}$ smeša . . . . .	48
3.7.2 $\text{CF}_3\text{I-CO}_2$ smeša . . . . .	51
3.8 Zaključak . . . . .	53
<b>4. Tehnike reskaliranja rojeva elektrona u Monte Karlo simulacijama</b>	<b>54</b>
4.1 Uvod . . . . .	54
4.2 Efekti zahvata elektrona i tehnike reskaliranja . . . . .	54
4.3 Skupovi preseka i uslovi simulacija . . . . .	56
4.4 Tehnike reskaliranja elektrona . . . . .	57
4.5 Transportni koeficijenti elektrona u $\text{SF}_6$ i $\text{CF}_3\text{I}$ . . . . .	59
4.5.1 Srednja energija . . . . .	60
4.5.2 Brzina drifta . . . . .	62
4.5.3 Koeficijenti difuzije . . . . .	67
4.5.4 Koeficijenti jonizacije i zahvata . . . . .	69
4.6 Poređenje tehnika reskaliranja . . . . .	70
4.7 Transport elektrona u $\text{SF}_6\text{-CF}_3\text{I}$ smešama . . . . .	71
4.8 Zaključak . . . . .	75
<b>5. Transport elektrona u <math>\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4</math> gasu</b>	<b>76</b>
5.1 Uvod . . . . .	76
5.2 Fizičke i hemijske osobine $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ gasa . . . . .	76
5.3 Transport elektrona u hidrodinamičkim uslovima . . . . .	77
5.3.1 Inicijalni skup preseka za $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ . . . . .	77
5.3.2 Konačan skup preseka za $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ . . . . .	78
5.3.3 Transport elektrona u čistom $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ . . . . .	79
5.3.4 Transport elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{-Ar}$ smešama . . . . .	80
5.3.5 Transport elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{-N}_2$ smešama . . . . .	82
5.4 Transport elektrona u nehidrodinamičkim uslovima: efekti pritiska gasa . . . . .	85
5.4.1 Skup preseka za rasejanje elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ zavisano od pritiska . . . . .	85
5.4.2 Transport elektrona u čistom $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ na različitim pritiscima . . . . .	86
5.5 Transport elektrona u $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{-CO}_2$ i $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{-SF}_6$ smešama i efekti pozitivne sinergije	87
5.6 Zaključak . . . . .	92
<b>6. Transport elektrona u <math>\text{C}_4\text{F}_7\text{N}</math> gasu</b>	<b>93</b>
6.1 Uvod . . . . .	93
6.2 Fizičke i hemijske osobine $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ gasa . . . . .	93
6.3 Sudarne i transportne osobine elektrona u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ . . . . .	94
6.3.1 Inicijalni skup preseka za $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ . . . . .	94
6.3.2 Konačan skup preseka za $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ . . . . .	94
6.3.3 Transport elektrona u čistom $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ . . . . .	95
6.3.4 Transport elektrona u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N-Ar}$ smešama . . . . .	95
6.3.5 Transport elektrona u $\text{C}_4\text{F}_7\text{N-N}_2$ smešama . . . . .	98



6.4	Transport elektrona u $C_4F_7N-CO_2$ i $C_4F_7N-SF_6$ smešama . . . . .	102
6.5	Zaključak . . . . .	104
<b>7.</b>	<b>Negativni strimeri u jako elektronegativnim gasovima</b>	<b>105</b>
7.1	Uvod . . . . .	105
7.2	Fluidne jednačine . . . . .	105
7.3	Fluidni modeli strimera . . . . .	108
7.3.1	Klasičan fluidni model . . . . .	108
7.3.2	Korigovan fluidni model . . . . .	110
7.4	Numerička implementacija fluidnih modela . . . . .	112
7.5	Negativni strimeri u $CF_3I$ i smešama $CF_3I-SF_6$ . . . . .	113
7.5.1	Razvoj i propagacija strimera u funkciji spoljašnjeg električnog polja . . . . .	113
7.5.2	Osetljivost osobina strimera na način proračuna transportnih koeficijenata . . . . .	114
7.5.3	Poređenje osobina strimera u 1D i 1.5D . . . . .	116
7.5.4	Osetljivost osobina strimera na prirodu transportnih koeficijenata . . . . .	117
7.5.5	Brzina fronta strimera u čistom jako elektronegativnom gasu . . . . .	120
7.5.6	Razvoj i propagacija strimera u $CF_3I-SF_6$ gasnim smešama . . . . .	122
7.6	Zaključak . . . . .	123
<b>8.</b>	<b>Poređenje osobina gasova <math>CF_3I</math>, <math>C_3H_2F_4</math> i <math>C_4F_7N</math> sa <math>SF_6</math></b>	<b>124</b>
8.1	Uvod . . . . .	124
8.2	Poređenje molekularne strukture, fizičkih i hemijskih osobina gasova $CF_3I$ , $C_3H_2F_4$ i $C_4F_7N$ sa $SF_6$ . . . . .	124
8.3	Poređenje transportnih koeficijenata elektrona u $CF_3I$ , $C_3H_2F_4$ , $C_4F_7N$ i $SF_6$ . . . . .	126
8.4	Poređenje kritičnih električnih polja u $CF_3I$ , $C_3H_2F_4$ , $C_4F_7N$ i $SF_6$ i njihovim smešama . . . . .	127
8.5	Poređenje karakteristika strimera u $CF_3I$ , $C_3H_2F_4$ , $C_4F_7N$ i $SF_6$ i njihovim smešama . . . . .	129
8.6	Zaključak . . . . .	132
<b>9.</b>	<b>Transport elektrona u parama žive i indijuma</b>	<b>133</b>
9.1	Uvod . . . . .	133
9.2	Transport elektrona u parama žive . . . . .	133
9.2.1	Uvodne napomene i motivacija . . . . .	134
9.2.2	Preseci za rasejanje elektrona u parama žive . . . . .	134
9.2.3	Zavisnost transportnih koeficijenata elektrona od pritiska i NDC efekat . . . . .	134
9.2.4	Zavisnost transportnih koeficijenata elektrona od temperature para žive . . . . .	137
9.3	Transport elektrona u parama indijuma . . . . .	140
9.3.1	Uvodne napomene i motivacija . . . . .	140
9.3.2	Preseci za rasejanje elektrona u parama indijuma . . . . .	140
9.3.3	Transportni koeficijenti elektrona u parama indijuma . . . . .	143
9.3.4	Razvoj i propagacija strimera u parama indijuma . . . . .	147
9.4	Zaključak . . . . .	150
	<b>Zaključak</b>	<b>152</b>
	<b>Literatura</b>	<b>164</b>

# Uvod

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

Pored aplikacija u visokonaponskoj tehnologiji za izolaciju gasom, jako elektronegativni gasovi se koriste u mikroelektronici za depoziciju tankih filmova i nagrivanje površina [2, 3]. Primenjuju se kao izvori negativnih jona [4, 5], a u gasnim detektorima čestica visokih energija koriste se za kontrolu i sprečavanje pojave strimerskih i lučnih pražnjenja, koja mogu oštetiti brojačku elektroniku [6, 7]. Kada se koriste kao dielektrici u sistemima za prenos električne energije, jedan od najvažnijih gasova je svakako sumpor-heksafluorid ( $SF_6$ ). Ovaj gas ima izuzetne dielektrične karakteristike, jer veoma efikasno sprečava razvoj lavine elektrona i proboj u gasu do visokih vrednosti električnog polja. Međutim,  $SF_6$  negativno utiče na životnu sredinu i okruženje jer poseduje veliki potencijal za globalno zagrevanje i izuzetno dugo atmosfersko vreme života. Potraga za adekvatnom zamenom  $SF_6$  gasa u visokonaponskoj tehnologiji i drugim oblastima primenjene fizike i tehnologije jedan je od velikih izazova za savremenu nauku.

U okviru fizike gasnih dielektrika, koja se nalazi u preseku atomske i molekularne fizike, fizike rojeva naelektrisanih čestica i fizike električnih gasnih pražnjenja, postignut je značajan progres u poslednjih 35 godina. Ovaj napredak je posledica velikih napora koji su uloženi u razvoj metodologije za proučavanje sudarnih i transportnih procesa elektrona u gasovima i inkorporacije ovih novih znanja

i veština za razumevanje proboja u gasu, kako na niskom tako i na visokom pritisku. U domenu transporta elektrona u gasovima, postignuti su veliki prodori u razvoju teorija i numeričkih procedura za rešavanje Bolcmanove jednačine [8–10], a ništa manje važni doprinosi su postignuti u razvoju Monte Karlo tehnike [11–13]. Ukoliko se ograničimo na razumevanje proboja strimerskim mehanizmom, postignuti su fantastični uspesi koji su direktna posledica sve veće dostupnosti računarskih resursa visokih performansi [14]. Modelovanje strimera u tri dimenzije u kompleksnim geometrijama krivolinijskih elektroda u prisustvu ne samo primarnih interakcija elektrona i molekula, već i u prisustvu sekundarnih interakcija kao što su detačment elektrona sa negativnih jona, rekombinacija elektrona i pozitivnih jona i foton-molekularnih interakcija, nije više nedostižan cilj kao pre dvadeset godina, već legitiman predmet istraživanja savremene fizike neravnotežnih plazmi.

Rani doprinosi atomske i molekularne fizike, fizike rojeva naelektrisanih čestica, fizike električnih gasnih pražnjenja i fizike gasnih dielektrika su opisani u knjigama Fon Engela [15], Redera [16], Hakslija i Kromptona [17] i mnogim drugim. O ovim ranim doprinosima pisano je u velikom broju preglednih radova, od kojih svakako treba izdvojiti radove Kristoforoa i saradnika [18–21] i Pedersena [22]. Veoma važnu ulogu za razvoj fizike gasnih dielektrika imali su Međunarodni simpozijum o fizici gasnih dielektrika (engl. *The International Symposia on Gaseous Dielectrics*), Internacionalna konferencija o gasnim pražnjenjima i njihovim aplikacijama (engl. *The International Conference on Gas Discharges and Their Applications*) i IEEE Internacionalna konferencija o dielektričnim tečnostima (engl. *The IEEE International Conference on Dielectric Liquids*).

Današnji status fizike gasnih dielektrika prikazan je u knjigama Sjaoa [23], Arore i Moša [24] i Kinda i Karneraa [25]. Od preglednih radova treba izdvojiti one Beruala i Hadada [26], Sigera [27] i saradnika i Rabija i Frenka [28]. U ovim knjigama i preglednim radovima diskutuje se o različitim aspektima fizike gasnih dielektrika, od mikroskopskih procesa rasejanja i transporta elektrona, preko modelovanja proboja u okviru standardne Taunzend-Pašenove teorije i strimera, do izazova povezanih sa dizajnom i proizvodnjom opreme i uređaja u visokonaponskoj tehnologiji. U svim ovim radovima, starijeg i novijeg datuma, jedna od centralnih aktivnosti je potraga za zamenom SF<sub>6</sub> gasa, imajući u vidu negativan uticaj ovog gasa na životnu okolinu i okruženje. Ova potraga je intenzivirana u poslednjih 25 godina nakon *Protokola iz Kjota* i predstavlja značajan zamajac razvoja fizike gasnih dielektrika.

Električnom pražnjenju u gasu na visokom pritisku prethodi proces tranzicije lavine elektrona u strimer i propagacija strimera u sistemu koji se razmatra [6]. Razumevanje procesa razvoja i propagacije strimera u gasovima od ključnog je značaja za sprečavanje oštećenja komponenti i uređaja u sistemima za prenos električne energije, za čiju se izolaciju koriste jako elektronegativni gasovi. Prvi korak u numeričkom modelovanju razvoja i propagacije strimera jeste razumevanje sudarnih i transportnih procesa elektrona u neutralnim gasovima. Ovi procesi su predmet proučavanja fizike rojeva naelektrisanih čestica koja predstavlja osnovu za razvoj modela sudarno dominantnih neravnotežnih plazmi [9, 13, 29, 30]. Konstrukcija i razvoj skupova preseka za rasejanje elektrona nalazi se u temelju ovih istraživanja. Nije opravdano očekivanje da skup preseka koji je dobijen direktnom kompilacijom podataka iz literature za preseke pojedinačnih sudarnih procesa, obezbedi dobar balans broja naelektrisanih čestica, njihovog impulsa i energije u modelima strimerske plazme. Bez obzira na pouzdanost merenja/proračuna pojedinačnih preseka, neophodno je da skup preseka reprodukuje dobro slaganje sa eksperimentalno određenim transportnim koeficijentima rojeva elektrona. Ovo slaganje se može postići reskaliranjem skupa preseka uz primenu tehnike rojeva neelektrisanih čestica [13, 29]. U ovoj iterativnoj proceduri, polazeći od inicijalnog skupa preseka i ustanovljenog neslaganja sa referentnim eksperimentalnim podacima, pristupa se modifikaciji preseka sve dok se ne postigne zadovoljavajuće slaganje između eksperimentalno određenih i teorijski izračunatih transportnih koeficijenata. Ova tehnika je razvijena šezdesetih godina prošlog veka u radovima Kromptona, Felpsa i njihovih saradnika [17, 31–33], a na mnogo različitih aspekata je usavršena u radovima Petrovića i saradnika [13, 29, 34, 35]. Ova metoda ima svoje prednosti i nedostatke u odnosu na druge tehnike za određivanje preseka za rasejanje naelektrisanih čestica na neutralnim atomima/molekulima gasa.

Danas se smatra da je tehnika rojeva naelektrisanih čestica nezavisna i komplementarna metoda u odnosu na direktna eksperimentalna merenja sudarnih preseka i teorijske proračune. Veoma važnu ulogu ima ne samo za određivanje i normalizaciju preseka za rasejanje elektrona, već i u domenu pozitivnih i negativnih jona [36–38]. Sa druge strane, što se tiče rojeva elektrona, ova metoda igra veoma važnu ulogu u oblastima niskih energija elektrona, imajući u vidu da eksperimentalne tehnike za direktno merenje preseka imaju čitav niz poteškoća, od kojih je nedovoljna energijska rezolucija snopova elektrona jedna od najočiglednijih.

Imajući u vidu veliku osetljivost funkcije raspodele elektrona na prisustvo drugih atoma i/ili molekula, od posebnog interesa za metodu rojeva elektrona je korišćenje eksperimentalno određenih transportnih koeficijenata u gasnoj smeši koju čine ispitivan gas i druga komponenta čije preseke dobro poznajemo. Na ovaj način je moguće precizno odrediti preseke za individualne sudarne procese ispitivanog gasa u onoj oblasti energija u kojoj ovi procesi ne postoje u nosećem gasu čije preseke dobro poznajemo. Na ovaj način se može odrediti presek za zahvat elektrona molekula jako elektronegativnog gasa u smešama sa nekim od plemenitih gasova [39–51]. Prisustvo male količine elektronegativnog gasa ne menja funkciju raspodele elektrona, ali omogućava proračun brzinskog koeficijenta za zahvat elektrona. Na osnovu zavisnosti brzinskog koeficijenta za zahvat elektrona od primenjenog električnog polja, inverzijom je moguće konstruisati presek za zahvat elektrona u funkciji energije elektrona.

Transportni procesi elektrona u neutralnim gasovima mogu se proučavati na osnovu numeričkih rešenja Bolcmanove jednačine [9,52–54], simulacija baziranih na Monte Karlo metodi [11,55–58] i u okviru teorije prenosa impulsa [9,59–61]. U literaturi postoji veliki broj radova u kojima je osnova za rešavanje Bolcmanove jednačine sferno-harmonijski razvoj funkcije raspodele u brzinskom prostoru i odsecanje ovog razvoja na prva dva člana [52,62]. Iako je dobro poznato da je aproksimacija dva člana validna procedura isključivo za lake naelektrisane čestice koje se pretežno elastično sudaraju sa atomima/molekulima pozadinskog gasa, mnogo puta je ova aproksimacija korišćena u situacijama u kojima neelastični sudari kontrolišu ponašanje roja [13]. Nekonzervativni sudarni procesi u kojima dolazi do promene broja naelektrisanih čestica u roju ubrajaju se u neelastične sudare. U jako elektronegativnim gasovima, koji su predmet istraživanja u ovoj disertaciji, nekonzervativni sudarni procesi su od ključnog značaja, jer upravo ovi procesi su odgovorni za dielektrične osobine gasova. U tom smislu, od velikog je značaja proučavanje domena primenljivosti aproksimacije dva člana i drugih aproksimativnih teorija za rešavanje Bolcmanove jednačine.

Savremene metode za numeričko rešavanje Bolcmanove jednačine za elektrone u jako elektronegativnim gasovima veoma često imaju poteškoće u uslovima kada postoje veliki gubici niskoenergijskih elektrona, posebno u situacijama koje mogu voditi ka grejanju roja zahvatom elektrona (engl. *attachment heating*). U ovim uslovima dolazi do bušenja rupe u niskoenergijskom delu funkcije raspodele, odnosno do depopulacije niskoenergijskih elektrona i pomeranja balka funkcije raspodele ka višim energijama. Ovo rezultuje veoma sporim opadanjem visokoenergijskog dela funkcije raspodele u odnosu na Maksvelovu funkciju raspodele. Upravo su ovakvi fenomeni opaženi prilikom proučavanja transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima u ovoj disertaciji. U ovim situacijama numeričko rešavanje Bolcmanove jednačine zahteva nerealno veliki broj bazisnih funkcija za precizan tretman zavisnosti funkcije raspodele od intenziteta brzine i/ili nerealno dugo vreme za proračune. Upravo zbog ovih razloga, u ovoj disertaciji je veoma često korišćena aproksimacija dva člana za rešavanje Bolcmanove jednačine, imajući u vidu da je ona manje zahtevna pre svega u pogledu trošenja procesorskog vremena. Sa druge strane, Monte Karlo simulacije koje se smatraju egzaktnom tehnikom za izračunavanje transportnih koeficijenata, korišćene su u svim fazama rada na ovoj disertaciji, pa ne postoji bojazan da su napravljeni propusti u metodološkom smislu.

U prisustvu nekonzervativnih sudara, razlikuju se dve familije transportnih koeficijenata: fluks i balk. Dualna priroda transportnih koeficijenata je prepoznata u okviru hidrodinamičke kinetičke teorije transporta naelektrisanih čestica početkom 1990-tih [63], iako su radovi iz 1970-ih od suštinskog značaja za razumevanje prirode transportnih koeficijenata [64–67]. U ovim istim ranim radovima,

prepoznato je da priroda transportnih veličina zavisi od načina observacije roja naelektrisanih čestica u eksperimentima sa rojevima naelektrisanih čestica. U hidrodinamičkim uslovima, dakle u oblastima daleko od graničnih površina, izvora i ponora naelektrisanih čestica, opaženo je da se fluks i balk transportni koeficijenti mogu međusobno kvantitativno razlikovati od nekoliko procenata do nekoliko redova veličina [66, 67]. Ove dve familije transportnih koeficijenata se mogu i kvalitativno razlikovati, i u tom smislu ove se kvalitativne razlike često svrstavaju u kinetičke fenomene transporta elektrona [68, 69]. U dosadašnjoj praksi, opaženo je nekoliko kinetičkih fenomena u jako elektronegativnim gasovima koji su direktno povezani sa eksplicitnim uticajem zahvata elektrona. Negativna apsolutna mobilnost elektrona opažena je u smeši Ar i F<sub>2</sub> u statičkim [68] i vremenski promenljivim poljima [69], ali i u stacionarnom Taunzendovom eksperimentu u smeši Ar i NF<sub>3</sub> [70]. U ove fenomene ubrajamo efekte hlađenja i grejanja roja zahvatom elektrona [71] i anomalne fazne pomeraje brzine drifta u radiofrekventnim električnim poljima [72]. Još jedan od primera je negativna diferencijalna provodnost koja je indukovana trojnim zahvatom elektrona u molekularnom kiseoniku [62]. U okviru ove disertacije, opaženo je nekoliko kinetičkih fenomena u transportu elektrona u jako elektronegativnim gasovima koji do sada nisu zabeleženi u literaturi.

Simulacije bazirane na Monte Karlo metodi takođe imaju svoje specifičnosti kada je u pitanju ispitivanje transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima. Intenzivnim gubitkom elektrona u procesu zahvata od strane molekula jako elektronegativnog gasa veoma često dolazi do smanjenja statističke pouzdanosti veličina koje figurišu u izrazima za izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona. U ekstremnim slučajevima, simulacije mogu biti potpuno zaustavljene pre dostizanja stacionarnog stanja zbog prevelikog, ili potpunog gubitka elektrona. Jedan od načina za kompenzaciju gubitka velikog broja elektrona u simulaciji je upotreba tehnika reskaliranja [73]. Ovim tehnikama se obezbeđuje održavanje broja elektrona u simulaciji na nivou unapred zadatog početnog broja elektrona, čime je omogućeno dostizanje stacionarnog stanja sistema u kome izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona jedino ima smisla. Nadoknađivanje broja elektrona mora biti sprovedeno na način kojim se ne menja funkcija raspodele, što zahteva sprečavanje pojave indukovanih gradijenata u konfiguracionom prostoru koji nisu posledica realnih fizičkih procesa, već su povezani sa ograničenjima numeričkog tretmana roja naelektrisanih čestica. U javno dostupnim Monte Karlo kodovima kao što su METHES [74], MAGBOLTZ [75] i drugi, tehnike za reskaliranje nisu implementirane. Ovo znači da ovi Monte Karlo kodovi nisu u mogućnosti da simuliraju transport elektrona u jako elektronegativnim gasovima u uslovima kada zahvat elektrona kontroliše ponašanje roja. Ukoliko se pogledaju profili transportnih koeficijenata u SF<sub>6</sub> gasu prikazanih u radu Rabija i Frenka [74], mogu se uočiti oscilacije i oštri pikovi koji nemaju fizički smisao i direktna su posledica nedostatka tehnike za kompenzaciju elektrona u simulaciji.

S obzirom na značaj pronalaska zamene za SF<sub>6</sub> gas u industriji prenosa električne energije, u ovoj disertaciji biće sistematski upoređene sudarne i transportne osobine elektrona u SF<sub>6</sub> gasu sa onima u čistim gasovima trifluorometil-jodidu (CF<sub>3</sub>I), 1,3,3,3 tetrafluoropropanu (C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>4</sub>) i 2,3,3,3 tetrafluoro-2-(trifluorometil)propan-nitrilu (C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N) i njihovim smešama sa argonom (Ar), azotom (N<sub>2</sub>) i ugljen-dioksidom (CO<sub>2</sub>). Veoma važno mesto ovim proučavanjima ima analiza tranzicije lavine elektrona u strimer i propagacija negativnih strimera u ovim gasovima. Strimeri su uski kanali neravnotežne plazme čija je dinamika kontrolisana ostrim gradijentom koncentracije elektrona na frontu propagacije i efektima prostornog naelektrisanja. Radi se o nelinearnom, nehidrodinamičkom, nestacionarnom i nelokalnom fenomenu, koji zahteva sofisticirano modelovanje i poznavanje kako sudarnih tako i transportnih osobina naelektrisanih čestica. U dosadašnjoj praksi, strimeri su modelovani u SF<sub>6</sub> gasu [76–79] i njegovim smešama sa N<sub>2</sub> [80, 81]. U najvećem broju slučajeva, strimeri su modelovani u sintetičkom vazduhu (smeša N<sub>2</sub>:O<sub>2</sub>=80:20) [82–87] sa ciljem interpretacije eksperimentalnih rezultata koji su dobijeni u električnim merenjima, metodama optičke spektroskopije ili snimanjem ICCD kamerama [14].

Jedan od načina za numeričko modelovanje razvoja i propagacije strimera jeste rešavanje sistema parcijalnih diferencijalnih jednačina, koje opisuje balanse koncentracije, impulsa i energije naelek-

trisanih čestica [88]. Ove jednačine se moraju spregnuti sa Puasonovom jednačinom da bi se opisali efekti prostornog naelektrisanja i obezbedio koncept samousaglašenog polja. Jednačine balansa koncentracije, impulsa i energije mogu se dobiti na osnovu prvih principa ili integracijom Bolcmanove jednačine u brzinskom prostoru. Sistem fluidnih jednačina se mora zatvoriti primenom neke od fenomenoloških aproksimacija, kao što je aproksimacija lokalnog polja. Modeli koji su koncipirani na ovaj način obično se kolokvijalno nazivaju fluidni modeli, imajući u vidu da se strimerska plazma posmatra kao kontinualna sredina. Pored fluidnih modela, važno mesto u modelovanju strimera imaju modeli Particle in Cell / Monte Carlo (PIC/MC) [84, 89] i hibridni modeli koji kombinuju fluidne jednačine, kojima se opisuje kinetika sporih elektrona i jona, i Monte Karlo metodu kojom se prate brzi neravnotežni elektroni na frontu strimera [83, 90].

U ovoj disertaciji, biće razmatran razvoj i propagacija strimera u jednoj dimenziji (1D) i jednoj i po dimenziji (1.5D). U 1.5D, jednačine balansa se rešavaju u 1D, a Puasonova jednačina se rešava uz podrazumevanje aksijalne simetrije, pri čemu je raspodela naelektrisanja duž radijalnog pravca uniformna. Primenom klasičnog fluidnog modela koji je baziran na drift-difuzionoj aproksimaciji, biće izračunate koncentracije naelektrisanih čestica, raspodela električnog polja i brzina propagacije strimera u jako elektronegativnim gasovima. Ovi se rezultati testiraju korigovanim fluidnim modelom prvog reda, koji je baziran na razvoju izvornog člana u drift-difuzionoj aproksimaciji u stepeni red po gradijentima koncentracije elektrona. Korigovani fluidni model bolje opisuje nelokalne efekte nekonzervativnih sudara i superiorniji je u pogledu opisa prostorne nelokalnosti ovih procesa. Istovremeno, ovaj model nema nedostataka u pogledu implementacije transportnih koeficijenata, jer je u potpunosti konzistentan kako sa fluks tako i sa balk transportnim podacima, u svoje dve ekvivalentne realizacije. U ovoj disertaciji se po prvi put modeluju strimeri u jako elektronegativnim gasovima na osnovu ovog modela. Korigovani fluidni model je prvi put korišćen u modelovanju strimerskog pražnjenja u detektorima sa ravnim pločastim elektrodama [91]. U svakom slučaju, na osnovu klasičnog i korigovanog modela, biće ispitana osetljivost propagacije strimera na prirodu transportnih koeficijenata i način njihovog proračuna. Standardna analiza uključuje proučavanje propagacije strimera u funkciji spoljašnjeg električnog polja, koje mora biti veće od kritičnog polja da bi uopšte došlo do tranzicije lavine elektrona u strimer.

Proučavanja transporta elektrona i propagacije strimera u gasnim smešama od posebnog su značaja. U prošlosti su opaženi efekti pozitivne sinergije u gasnim smešama koje čine SF<sub>6</sub> gas i drugi gasovi [92–94]. Ovaj efekat podrazumeva porast kritičnog polja uz istovremeno smanjivanje koncentracije SF<sub>6</sub> gasa u gasnoj smeši, pri čemu je kritično polje druge komponente znatno manje u odnosu na čist SF<sub>6</sub> gas. Primeri uključuju gasne smeše C<sub>3</sub>F<sub>6</sub> i SF<sub>6</sub>, SO<sub>2</sub> i SF<sub>6</sub>, CCl<sub>2</sub>F<sub>2</sub> i SF<sub>6</sub> i C<sub>3</sub>F<sub>8</sub> i SF<sub>6</sub> [92–94]. U ovoj disertaciji je opažen efekat pozitivne sinergije u smeši C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>4</sub> i SF<sub>6</sub>, čime je potvrđeno opažanje grupe sa ETH univerziteta u Cirihi [95].

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

a sa druge strane odgovorni su za sintezu jedinjenja koja se u procesu depozicije nagomilavaju na elektrodama detektora, čime se u značajnoj meri kvare karakteristike detektora.

Dok se pojava strimerskih pražnjenja u sistemima za prenos električne energije mora ograničiti i kontrolisati primenom gasnih dielektrika koji minimalno doprinose globalnom zagrevanju planete, sa druge strane, u ovoj disertaciji su razmotrena strimerska pražnjenja u metalnim parama, čije razumevanje je od ključnog značaja za razvoj i optimizaciju izvora svetlosti koji funkcionišu na principima električnih gasnih pražnjenja. Jedan od ključnih problema u ovoj aktivnosti fizičara plazme je potraga za adekvatnom zamenom žive (Hg) u gasnim smešama koje se koriste u lampama različite konstrukcije u pogledu prenosa snage u sistem na niskom i visokom pritisku [96]. Upotreba žive u Evropskoj uniji je dozvojena u različitim tipovima gasnih lampi, ali u manjim i zakonom ograničenim količinama. U tom smislu, danas se ulažu veliki napor za pronalazak adekvatne zamene žive u izvorima svetlosti, uključujući fluorescentne lampe i lampe velike izlazne snage fluksa zračenja, kao što su lampe sa parama metalnih halida [96–98]. U ovim izvorima svetlosti prisustvo atoma žive omogućuje postizanje povoljnijih uslova za proboj u gasu, imajući u vidu da metastabilni atomi žive u sudarima sa atomima druge gasne komponente podržavaju procese jonizacije. Istovremeno, deksitacijom pobuđenih atoma žive emituju se fotoni sa talasnom dužinom od 253.7 nm, a upravo na ove fotone je osetljiv fosfor kojim je premazana unutrašnjost lampe i koji dalje belu vidljivu svetlost. Iz očevidnih razloga, razumevanje sudarnih i transportnih procesa elektrona u parama žive je od ključnog značaja za razvoj i optimizaciju izvora svetlosti.

U literaturi se mogu pronaći skupovi preseka za rasejanje elektrona u parama žive različitog nivoa pouzdanosti i preciznosti [99–101]. Transportni koeficijenti rojeva elektrona se takođe mogu pronaći u literaturi, ali može se uočiti nekoliko sistemskih nedostataka ovih podataka. Prvo, efekat termalnog kretanja atoma žive na transport elektrona je u najvećem broju slučajeva zanemaren, iako su temperature u parama žive za neke izvore svetlosti veoma visoke, ponekad i nekoliko hiljada Kelvina. Drugo, u dosadašnjim proračunima transportnih koeficijenata sistematski je zanemarena dualna priroda transportnih koeficijenata i obično su isključivo fluks transportni koeficijenti prikazivani u funkciji spoljašnjeg električnog polja. Konačno, sistematski je zanemareno nehidrodinamičko ponašanje transportnih koeficijenata rojeva elektrona koje se ogleda u njihovoj zavisnosti od temperature i pritiska gasa. Pored činjenice da je u najvećem broju slučajeva transport elektrona proučavan primenom aproksimacije dva člana za rešavanje Bolcmanove jednačine, svi ovi nedostaci u ranijim istraživanjima zapravo su bili motivacioni faktori za ovu disertaciju.

Potencijalni kandidati za zamenu žive u izvorima svetlosti su indijum-bromid [102] i smeša gasova koju čine halogeni elementi i metalna para indijuma u prisustvu argona [103–105]. Upravo zbog ovih razloga postoji očigledna potreba za razumevanjem sudarnih i transportnih osobina elektrona u parama indijuma. Ništa manje važna potreba postoji za razumevanjem razvoja i propagacije strimera u parama ovog metala. Međutim, u literaturi ne postoje skupovi preseka za rasejanje elektrona u ovom gasu već samo preseki za individualne sudarne procese. Malobrojni rezultati koji se odnose na transportne koeficijente za elektrone u ovom gasu nisu dobijeni uzimanjem u obzir činjenice da sa porastom temperature gasa dolazi do povećanja koncentracije gasnih atoma indijuma koji se nalaze u prvom pobuđenom metastabilnom stanju  $(5s^25p)^2P_{3/2}$ . Preseki za rasejanje elektrona prvog pobuđenog metastabilnog stanja razlikuju se u odnosu na one sa osnovnog stanja atoma i moraju biti uključeni u skup ulaznih podataka prilikom razmatranja transporta elektrona i propagacije strimera na visokim temperaturama pare ovog metala.

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

Ova doktorska disertacija je koncipirana na sledeći način.

Prvo poglavlje ove doktorske disertacije sadrži sistematski pregled gasova koji se koriste kao gasni dielektrici u sistemima za prenos električne energije. Nakon definicije električnog proboja u gasovima i diskusije koja se odnosi na pojedinačne faze u razvoju strimerskog pražnjenja, biće istaknuti mehanizmi kojima se ovaj proces može kontrolisati i suzbiti u cilju sprečavanja oštećenja industrijske opreme. Jedan od najčešće korišćenih gasova u ovoj ulozi je sumpor-heksafluorid ( $\text{SF}_6$ ) koji se, pored izvanrednih dielektričnih osobina, odlikuje izrazito velikim potencijalom globalnog zagrevanja i izuzetno dugim atmosferskim vremenom života. Polazeći od fizičkih i hemijskih osobina gasova, njihovog atomskog sastava, molekularne strukture, tipova hemijskih veza između atoma koji ih čine kao i toksičnosti kako gasova tako i njihovih produkata, biće date smernice za odabir potencijalnih kandidata za zamenu  $\text{SF}_6$  u ulozi gasnog dielektrika u sistemima za prenos električne energije.

Drugo poglavlje ove disertacije je posvećeno transportnoj teoriji naelektrisanih čestica u gasu, sa posebnim akcentom na rojeve elektrona. Za definicijom roja i hidrodinamičkog režima, sledi opis dualne prirode transportnih koeficijenata, koja je posledica eksplicitnih efekata nekonzervativnih sudara elektrona i molekula gasa. Dalje prikazujemo osnovne elemente teorije za rešavanje Bolcmanove jednačine koja je bazirana na razvoju funkcije raspodele u više članova u brzinskom prostoru i osnovne korake numeričkih simulacija baziranih na Monte Karlo metodi.

U trećem poglavlju doktorske disertacije ispituje se transport elektrona u trifluorometil-jodidu ( $\text{CF}_3\text{I}$ ), jednom od potencijalnih zamena za  $\text{SF}_6$ . Osim u čistom gasu, transport elektrona će biti simuliran i u njegovim smešama sa argonom i ugljen-dioksidom u opsegu električnih polja u kome postoje rezultati eksperimentalnih merenja transportnih koeficijenata. Primenom tehnike rojeva naelektrisanih čestica konstruisani su skupovi preseka za rasejanje elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$  i  $\text{CO}_2$ , koji kada se koriste kao ulazni podaci za rešavanje Bolcmanove jednačine ili u Monte Karlo simulacijama, obezbeđuju slaganja sa referentnim eksperimentalnim podacima za transportne koeficijente. Pored ove dve originalne metode, koje su razvijene u Laboratoriji za neravnotežne procese i primenu plazme Instituta za fiziku, u ovoj disertaciji je korišćen javno dostupan kompjuterski kod BOLSIG+, koji je zasnovan na aproksimaciji dva člana za rešavanje Bolcmanove jednačine.

Četvrto poglavlje je posvećeno tehnikama za reskaliranje rojeva elektrona u Monte Karlo simulacijama transportnih procesa u jako elektronegativnim gasovima. Prikazane su, diskutovane i analizirane tri različite tehnike: tehnika diskretnog reskaliranja, tehnika dupliranja roja, kao i tehnika kontinualnog reskaliranja rojeva elektrona, koja je razvijena u okviru ove disertacije. Transportni koeficijenti elektrona biće izračunati u gasovima  $\text{SF}_6$ ,  $\text{CF}_3\text{I}$ , kao i u njihovim smešama. Posebna pažnja je posvećena analizi kinetičkih fenomena u transportu elektrona koji su indukovani eksplicitnim uticajem zahvata elektrona.

U petom poglavlju disertacije je ispitivan transport elektrona u 1,3,3,3 tetrafluoropropanu ili HFO-1234ze ( $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ ), jednim od gasova iz poslednje generacije gasnih dielektrika koji se odlikuju ultra niskim potencijalom za globalno zagrevanje. Razvijen je skup preseka za rasejanje elektrona u ovom gasu koji obezbeđuje slaganje sa eksperimentalnim vrednostima transportnih koeficijenata na fiksnom pritisku gasa. Pored toga, prikazana je dopunska verzija preseka koja dobro opisuje nehidrodinamičko ponašanje brzinskog koeficijenta efektivne jonizacije, a koje se ogleda u zavisnosti ovog transportnog koeficijenta od pritiska. Transportni koeficijenti rojeva elektrona izračunati su na osnovu numeričkih rešenja Bolcmanove jednačine i u Monte Karlo simulacijama koje su opisane u trećem poglavlju disertacije kako u čistom gasu tako i u njegovim smešama sa Ar,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}_2$  i  $\text{SF}_6$ .

U šestom poglavlju disertacije je prikazan razvoj skupa preseka za rasejanje elektrona u 2,3,3,3 tetrafluoro-2-(trifluorometil)propan-nitrilu ( $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ ), još jednom od gasova sa ultra niskim potencijalom za globalno zagrevanje. Ova gasna supstanca se odlikuje izuzetno visokim kritičnim poljem, približno 2.5 puta većim od onoga za  $\text{SF}_6$  gas. Transportni koeficijenti rojeva elektrona u čistom gasu i njegovim smešama sa Ar,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}_2$  i  $\text{SF}_6$  analizirane su sa ciljem razumevanja dielektričnih osobina ovih gasova i njihove potencijalne primene za izolaciju srednjenaponskih i visokonaponskih komponenti u sistemima za prenos električne energije.

U sedmom poglavlju disertacije sumirani su rezultati modelovanja razvoja i propagacije nega-



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

U osmom poglavlju su sumirane i upoređene različite osobine gasova  $CF_3I$ ,  $C_3H_2F_4$ ,  $C_4F_7N$  sa  $SF_6$  gasom koje su od značaja sa stanovišta primena u domenu srednjenaponske i visokonaponske tehnologije. Ovo poglavlje će predstavljati detaljnu analizu formirane baze podataka o sudarnim i transportnim podacima elektrona i interpretaciju rezultata modelovanja razvoja i propagacije strimera u ispitivanim gasovima. Na osnovu poređenja sudarnih i transportnih osobina elektrona u ovim gasovima, kao i na osnovu analize propagacije strimera u ovim gasovima, biće predložene alternative za  $SF_6$  gas.

Deveto poglavlje doktorske disertacije je posvećeno ispitivanju transporta elektrona u parama žive i indijuma. Na osnovu skupa preseka za rasejanje elektrona u parama žive, koji je konstruisan u ovoj disertaciji, analiziraće se uticaj dimera žive na transport elektrona na različitim pritiscima gasa. U okviru ovog poglavlja biće prikazan skup preseka za rasejanje elektrona u parama indijuma imajući u vidu potrebu za zamenom toksične žive u izvorima svetlosti koji rade na principima električnih gasnih pražnjenja. Pored skupa preseka za rasejanje elektrona sa osnovnog energijskog nivoa, biće prikazan skup preseka za rasejanje elektrona sa prvog pobuđenog metastabilnog stanja atoma indijuma u gasnoj fazi, s obzirom na to da se veliki broj atoma nalazi u ovom stanju u oblasti temperatura gasa koje su od interesa za izvore svetlosti. Radi ispravnog izračunavanja transportnih koeficijenata elektrona na visokim temperaturama pare indijuma (reda veličine nekoliko hiljada K), u skup preseka će biti uključeni i preseki za superelastične sudare izračunati principom detaljnog balansa. Razvoj i propagacija strimera u parama indijuma ispitivaće se klasičnim fluidnim modelom u 1D i 1.5D konfiguraciji, a posebna pažnja biće posvećena proučavanju osetljivosti parametara strimerske plazme na prisustvo metastabilnih gasnih atoma indijuma.

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

# Poglavlje 1

## Gasni dielektrici

### 1.1 Uvod

U ovom poglavlju je najpre definisan električan proboj u gasu, faze njegovog razvoja i mehanizmi kontrole ovog procesa. Vodeći se pomenutim mehanizmima, uzimajući u obzir fizičke i hemijske osobine gasova, njihovu molekularnu strukturu, atomski sastav i međusobnu zavisnost ovih parametara, date su smernice za odabir gasova i gasnih smeša koje su potencijalna zamena SF<sub>6</sub> gasa u ulozi dielektrika u sistemima za prenos električne energije. Posebna pažnja je skrenuta na očuvanje životne sredine, jednu od tema koja je u fokusu istraživanja naučnika širom sveta u cilju smanjenja efekta staklene bašte i zaštite ozonskog omotača planete Zemlje.

### 1.2 Izolacija gasom u tehnologiji prenosa električne energije

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

Dielektrici se mogu javiti u tri agregatna stanja. Upotreba dielektrika u gasovitom agregatnom stanju u sistemima za prenos električne energije donosi velike benefite. Mala masa, relativno jednostavan dizajn industrijske opreme, potpun povratak performansi sistema na početan nivo nakon elek-

tričnih pražnjenja, mogućnost ugradnje pokretnih delova u sistem i pristupačna cena neke su od najznačajnijih prednosti koje se postižu primenom dielektrika u gasovitom agregatnom stanju u odnosu na primenu tečnih i čvrstih dielektrika.

Proces proboja u gasu nastaje kao posledica pojave parcijalnog pražnjenja (engl. *partial discharge*) [106]. U pitanju je lokalizovan električni proboj koji se dešava u jednom segmentu gasa a kojim nije zahvaćen celokupan prostor među elektrodama. Parcijalna pražnjenja su strimeri i korone - električna pražnjenja na pritiscima blizu atmosferskog i višim od atmosferskog [23], koja nastaju usled nesavršenosti metalnih elektroda, depozicije materijala, neadekvatnih metalnih kontakata i prisustva čestica metalne prašine [106]. Nabrojene nesavršenosti kreiraju jaka električna polja u svojoj blizini kojima se slobodni elektroni ubrzavaju do visokih energija. Ti visokoenergijski elektroni u procesu jonizacije gasa imaju sposobnost kreiranja novih slobodnih elektrona. Kada njihov broj poraste iznad kritične vrednosti, u gasu se javlja električni proboj. Dakle, električni proboj je posledica brze sekvence ireverzibilnih događaja kojima se gas prevodi iz svog normalnog (neprovodnog) stanja u provodno stanje [21]. Ovaj proces se odigrava na vremenskim skalama reda ns do ms.

Električni proboj u gasu je kompleksan proces koji karakterišu tri faze:

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

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

Inženjerska praksa je takva da se kontrola procesa multiplikacije slobodnih elektrona postiže podešavanjem geometrije i dimenzija industrijske opreme, podešavanjem pritiska u njoj, utiče se na homogenost polja u opremi, biranjem odgovarajućeg sistema elektroda uz posebnu pažnju na njihovu površinu a vodi se računa i o sprečavanju kontaminacije gasa nepoželjnim česticama [107, 108]. Konstruisanje industrijske opreme za izolaciju gasovima vrši se na osnovu sprege prethodno navedenih parametara i podataka o razvoju i propagaciji strimera u uslovima prostorno homogenog i nehomogenog električnog polja na atmosferskom pritisku [89, 109, 110], ali i na višim pritiscima i na većim međuelektrodnim rastojanjima. Na pritiscima do nekoliko stotina tora ( $1 \text{ Torr} = 133.32 \text{ Pa}$ ) i u geometriji sa paralelnim elektrodama, Taunzend-Pašenovom teorijom se mogu dobiti podaci o probojnim naponima gasova u funkciji proizvoda pritiska gasa i međuelektrodnog rastojanja [111–114].

Pored navedenih načina, kontrola multiplikacije elektrona postiže se optimizacijom postojećih i razvojem novih gasnih dielektrika. U razvoju novih gasnih dielektrika, važnu ulogu imaju fizika rojeva naelektrisanih čestica, fizika električnih gasnih pražnjenja i atomska i molekularna fizika. Poznavanjem sudarnih i transportnih karakteristika elektrona u gasovima od interesa i razumevanjem metoda za njihovu manipulaciju, mogu se obezbediti potrebne osobine gasova, među kojima su dielektrične osobine što je u fokusu ovog doktorata. Ova tema je odavno prepoznata od strane velikog broja istraživača kao uspešan način za obezbeđivanje optimalnog dizajna industrijske opreme, uz kontrolu i unapređivanje efikasnosti gasnih dielektrika. Elementarna fizika gasnih dielektrika je tema mnogih publikacija [16, 17], preglednih radova [21, 22, 115] i predavanja na međunarodnim skupovima.

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

### 1.3 Istorijski razvoj gasnih dielektrika

Prva ideja o upotrebi gasova u svrhu dielektrika predložena je 1937. godine kada je objavljen patent o primeni gasa  $\text{CCl}_2\text{F}_2$  u sistemima za prenos električne energije [116]. Već godinu dana kasnije objavljen je patent kojim se predlagala upotreba novog sintetičkog gasa sumpor-heksafluorida ( $\text{SF}_6$ ) u istu svrhu. Industrijska proizvodnja ovog gasa je započeta 1953. godine kada je u Sjedinjenim Američkim Državama konstruisan prvi komercijalan prekidač struje izolovan  $\text{SF}_6$  gasom [117].

$\text{SF}_6$  je široko primenljiv gas već nekoliko decenija. U pitanju je gas relativno velike mase (146.06 g/mol), bez boje i mirisa, koji je hemijski inertan, netoksičan i nezapaljiv. Odlikuju ga visoko kritično polje od 361 Td ( $1 \text{ Td} = 10^{-21} \text{ Vm}^2$ ) i niska tačka ključanja od  $-64 \text{ }^\circ\text{C}$ . Ovaj gas ima veliki broj primena [41], uključujući proizvodnju poluprovodnika procesom nagrizanja podloga od silicijuma i jedinjenja galijuma i arsena, u procesu reciklaže aluminijuma ima ulogu reaktivnog gasa.  $\text{SF}_6$  je donor fluora u eksimer laserima koji koriste smešu halida i plemenitih gasova, koristi se za termalnu i akustičnu izolaciju, primenjuje se kao kontrastni agens u ultrasoničnim snimanjima, ovim gasom se pune avionske gume, primenjuje se u oftamologiji pri hirurškom lečenju ablacije retine. Jedna od globalno najpoznatijih primena  $\text{SF}_6$  gasa je u sistemima za prenos električne energije u kojoj se koristi kao gasni dielektrik. Iako je  $\text{SF}_6$  tek drugi predložen gasni dielektrik, od početka njegove upotrebe pa sve do današnjih dana, ovaj gas je gotovo nezamenljiv u ovoj ulozi.

$\text{SF}_6$  u izuzetno velikoj meri utiče na Zemljinu atmosferu. On je snažan apsorber zračenja iz infracrvenog dela spektra, što ima za posledicu višestruko veći faktor globalnog zagrevanja u odnosu na  $\text{CO}_2$  (22800, za stogodišnji interval). Visok faktor globalnog zagrevanja uz izuzetno dugo atmosfersko vreme života ovog gasa (3200 godina) definišu  $\text{SF}_6$  kao gas sa ekstremno snažnim efektom staklene bašte. Gustina  $\text{SF}_6$  gasa je aproksimativno pet puta veća od gustine vazduha. Prirodna koncentracija ovog gasa u atmosferi je 0.4 ppt (engl. *parts per trillion*, ppt). Zbog svoje mase, u slučaju oslobađanja u atmosferu,  $\text{SF}_6$  ostaje u slojevima blizu tla. Osnovni način na koji se  $\text{SF}_6$  može ukloniti iz troposfere je njegovo premeštanje u mezosferu u kojoj se disosuje u interakciji sa slobodnim elektronima i solarnim UV fotonima.

Masovna globalna upotreba  $\text{SF}_6$  gasa dovela je do toga da je njegova godišnja svetska proizvodnja u 1993. godini iznosila 7000 tona, od čega je čak 80% korišćeno upravo u industriji prenosa električne energije [118]. Merenja u vremenskom intervalu od 1978. do 1996. godine su pokazala da je koncentracija  $\text{SF}_6$  u atmosferi rasla za 7% godišnje. U 2002. godini je ustanovljeno da emisija  $\text{SF}_6$  iz industrije prenosa električne energije u Sjedinjenim Američkim Državama iznosi 589 metričkih tona. Ukoliko se ova brojna vrednost izrazi preko  $\text{CO}_2$  gasa, ona je jednaka vrednosti od 14.1 miliona metričkih tona  $\text{CO}_2$ , što iznosi 25% ukupne emisije gasova sa efektom staklene bašte iz industrijskih postrojenja ove države [119].

Usled sve veće svesti stručne i naučne zajednice o štetnom uticaju gasova na atmosferu naše planete i život na njoj, ukazala se potreba za pronalaskom zamene za  $\text{SF}_6$  u industriji prenosa električne energije [120, 121]. Kako bi nov gasni dielektrik i dalje imao potrebna svojstva za ovu primenu, dok bi se koncentracija  $\text{SF}_6$  gasa smanjila, prvo se nametnula ideja o upotrebi smeša ovog gasa ( $\text{SF}_6\text{-N}_2$ ,  $\text{SF}_6\text{-CO}_2$ ,  $\text{SF}_6\text{-CF}_4$ ). Međutim, ovakvim predlogom se  $\text{SF}_6$  ne izbacuje u potpunosti iz upotrebe. Radiklaniji predlog se odnosi na zamenu  $\text{SF}_6$  gasa prirodnim gasovima kao što su  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}_2$ , suvi vazduh ili sintetički elektronegativni gasovi sa znatno manjim efektom staklene bašte.

Uzimajući u obzir predložene prirodne gasove,  $\text{CO}_2$  ima najbolje dielektrične osobine [122, 123]. Međutim, one su inferiorne u poređenju sa osobinama  $\text{SF}_6$  gasa [123, 124], pa bi sistemi punjeni ugljen-dioksidom trebalo da rade na jako visokim pritiscima reda  $10^{15}$  bara ( $1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$ ). Postojeća oprema za izolaciju gasom koja se koristi u sistemima za prenos elektrine struje ne može se koristiti na ovako visokim pritiscima. Pored toga, ukoliko bi se  $\text{CO}_2$  upotrebljavao kao gasni dielektrik, komore koje bi se punile ovim gasom morale bi biti većih dimenzija, debljih zidova, dok bi minimalna radna temperatura morala da bude viša [27]. U cilju rešavanja nabrojenih problema,  $\text{CO}_2$  i ostali pogodni prirodni gasni dielektrici se ne mogu samostalno koristiti u sistemima za transport električne energije, već u vidu smeše sa drugim adekvatnim gasovima.

Ukoliko bi se umesto prirodnih koristili sintetički elektronegativni gasovi, njihova znatno viša tačka ključanja u odnosu na SF<sub>6</sub> onemogućila bi upotrebu sistema za transport električne energije u predelima kao što su Antartik, Grenland, Aljaska, Kanada ili Rusija, u kojima se temperatura vazduha spušta na izuzetno niske vrednosti. Za upotrebu u ovako hladnim predelima, kao bafer gas u visokonaponskoj tehnologiji koristi se CO<sub>2</sub> (tačka ključanja -78.5 °C), dok se u srednjenaponskoj opremi može koristiti i vazduh u kombinaciji sa C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O [125, 126].

Sintetički gas CF<sub>3</sub>I jedan je od pogodnijih kandidata za zamenu SF<sub>6</sub>. Ovaj gas je prvenstveno uveden kao zamena CF<sub>3</sub>Br gasa, koji ima veliku moć razaranja ozona, a koji se koristio kao agens za suzbijanje požara i inertan gas u tankovima sa gorivom za punjenje aviona. Danas se CF<sub>3</sub>I primenjuje u procesu nagrizanja plazmom u industriji proizvodnje poluprovodnika. ODP faktor ovog gasa (engl. *Ozone Depletion Potential*, ODP) kreće se u opsegu 0.006-0.017 [127–129], a kako je njegova tačka ključanja (-22.5 °C) znatno viša od SF<sub>6</sub>, CF<sub>3</sub>I bi se mogao koristiti kao gasni dielektrik u smešama sa CO<sub>2</sub> ili N<sub>2</sub> (tačka ključanja -195.8 °C) [130, 131], čime bi se obezbedile izuzetne dielektrične osobine uz praktično zanemarljiv uticaj na atmosferu. CF<sub>3</sub>I podleže snažnoj fotolizi usled slabe C-I veze, koja se razara pod dejstvom ultraljubičastog zračenja (engl. *ultraviolet*, UV), [127] usled čega je atmosfersko vreme života ovog gasa svega 1.8 dana. Postojanje joda u strukturi molekula je nepoželjno zbog depozicije ovog metala u unutrašnjosti opreme prilikom pojave električnih lukova i pražnjenja. Takođe, nataložen jod redukuje dielektrične performanse opreme [132, 133]. Oksidacija metalnih površina zbog prisustva joda u ovom molekulu i činjenica da je CF<sub>3</sub>I potencijalan mutagen [134] pokazuju da nije najpovoljnije da se ovaj gas koristi samostalno već u smeši sa drugim pogodnim gasovima.

Ispitivanjem kompleksnijih sintetičkih molekularnih gasova stiže se utisak da se C5-perfluoroketon (C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O) [135] i C4-perfluoronitril (C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N) [136] izdvajaju kao najprihvatljivije zamene SF<sub>6</sub> gasa. U odgovarajućoj smeši sa N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> ili vazduhom ovi gasovi zadovoljavaju potrebe gasnog dielektrika za primenu u visokonaponskoj ili srednjenaponskoj tehnologiji uz jako malu potrebnu za redizajnom uređaja koji se već koriste u sistemima za prenos električne energije.

## 1.4 Osobine gasnih dielektrika

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

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

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

Osim potrebe za snažnim procesom zahvata elektrona, važno je da molekularan gas ne poseduje

mogućnost oslobađanja zahvaćenog elektrona (engl. *electron detachment*). Jednom kada slobodan elektron biva zahvaćen i iskorišćen za formiranje negativnog jona, taj jon treba da ostane u svom stanju bez mogućnosti oslobađanja elektrona.

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

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

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

U industrijskoj primeni se jedan deo gasnog dielektrika izbacuje u atmosferu direktnim putem, dok se manji deo gasa oslobađa prilikom nepoželjnog curenja iz opreme (engl. *leaking*). Kada dospe u atmosferu, gas može apsorbovati energiju iz infracrvenog dela spektra zračenja, stupiti u hemijsku reakciju sa ozonom ili ostati nepromenjen usled hemijske inertnosti. GWP faktor je relativna mera količine toplote koju određena masa gasa zadržava u atmosferi u poređenju sa istom masom referentnog gasa CO<sub>2</sub>. Ovaj faktor se određuje za vremenski interval od 20, 100 ili 500 godina i njegova vrednost za referentan gas iznosi 1. Gasovi okarakterisani velikim GWP faktorom su odgovorni za pojavu efekta staklene bašte i kao takvi spadaju u listu nepoželjnih gasova. ODP faktor je odnos potencijala za razaranje ozona koji ima ispitivan gas i potencijala referentnog gasa trihloro-fluorometana (CCl<sub>3</sub>F, poznatog pod nazivom Freon-11), kome je dodeljen ODP faktor vrednosti 1. Ekološki prihvatljiv gasni dielektrik treba da poseduje ODP faktor što bliži nuli. Atmosfera planete Zemlje bi trebalo da sadrži samo one gasove koji se prirodno nalaze u njenom sastavu (~78% azota, ~20% kiseonika, ~1% argona i male primese drugih gasova), dok svako prisustvo drugih gasova treba svesti na minimum. Poželjno je da se gasni dielektrik na što brži način ukloni iz atmosfere, odnosno da je njegovo atmosfersko vreme života što kraće.

Sumirajući prethodno, dolazimo do spiska karakteristika koje molekularan gas mora posedovati kako bi bio okarakterisan kao dobar gasni dielektrik:

1. poželjni su halogeni elementi u strukturi gasa,
2. poželjan je veliki dijametar molekula gasa,
3. molekul gasa treba sadržati dvostruku ili trostruku kovalentnu vezu u svojoj strukturi,
4. poželjan je snažan proces zahvata elektrona uz istovremeno neispoljavanje procesa detačmenta,
5. poželjno je da molekul gasa poseduje velike preseke za elektronske ekscitacije, vibracione i rotacione ekscitacije,
6. molekularan gas bi trebalo da ima što nižu jonizaciju sa što većim pragom za njeno nastajanje,
7. poželjni su visoko kritično polje i niska tačka ključanja,

8. potrebno je da gas nema izražen efekat staklene bašte, da ne reaguje sa ozonskim omotačem i da poseduje kratko atmosfersko vreme života,

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

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

Evidentna je kompleksnost zahteva koje dobar dielektrik mora ispuniti. Posebno otežavajuću okolnost unosi međusobna zavisnost pomenutih parametara. Na primer, gasovi velike molekularne mase obično imaju visoko kritično polje, dok im je istovremeno tačka ključanja visoka. Ova visoka vrednost tačke ključanja je nepoželjna u slučaju upotrebe opreme u ekstremno hladnim podnebljima [44]. Veliki broj atoma vodonika u gasovima obezbeđuje kratko atmosfersko vreme života molekularnog gasa ali povećava njegovu zapaljivost. Zato su zasićeni (molekularni gasovi nastali od alkana) hidrofluorokarbonati (engl. *hydrofluorocarbons*, HFC) sa malim brojem atoma fluora relativno kratkoživeći i zapaljivi u odnosu na dugoživeće i nezapaljive perfluorokarbonate (engl. *perfluorocarbons*, PFC). Hemijska inertnost gasa, kao što je SF<sub>6</sub>, poželjna je osobina dok se gas nalazi u sistemu za provođenje struje (ne dolazi do korozije metalnih delova sistema), dok ta ista osobina pokazuje svoju negativnu stranu onda kada gas bude ispušten u atmosferu (hemijska inertnost odgovara dugom atmosferskom vremenu života). Kratkoživeći gasovi su molekularni gasovi male hemijske stabilnosti koja je posledica velikog broja veza u molekularnoj strukturi gasa. Nepoželjna karakteristika ovih gasova je ta da mogu da učestvuju u formiranju smoga, dok dodatno, produkti njihove dekompozicije ulaze u vodeni ekosistem [137, 138]. Pokazano je da je GWP faktor molekula sa C-F vezama veliki, a da se zamenom jedne ili više veza C-O grupom ovaj faktor značajno smanjuje [139, 140]. Takođe je poznato da u molekularnim gasovima iste structure GWP raste sa porastom broja atoma fluora [141] iako je povećana koncentracija fluora odgovorna za nezapaljivost gasa.

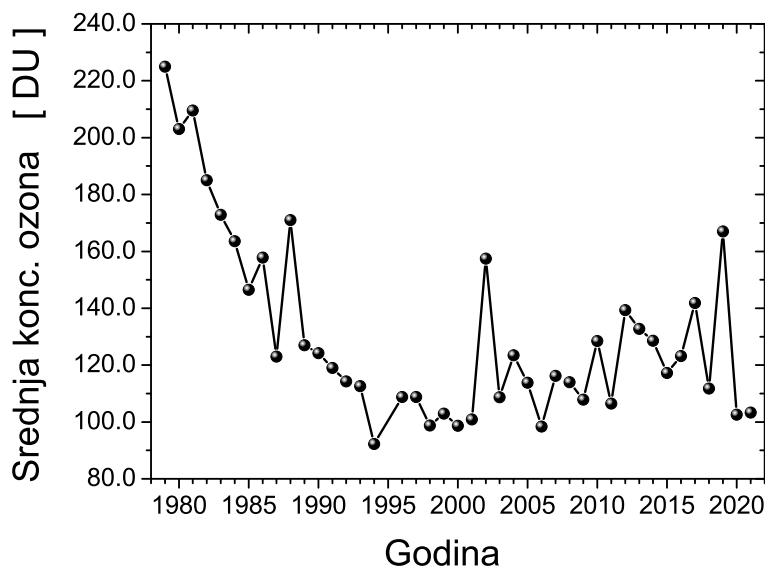
Pored ove kompleksne zavisnosti jednih parametara od drugih, potrebno je obratiti pažnju na još neke bitne činjenice. Za razliku od SF<sub>6</sub>, molekularni gasovi sa velikim brojem hemijskih veza i nekoliko različitih atoma u svojoj strukturi disocijacijom grade veliki broj različitih produkata bez mogućnosti rekombinacije u svoju prvobitnu molekularnu formu. Time nastaje čitav spektar novih produkata od kojih je svaki okarakterisan individualnim GWP i ODP faktorom, atmosferskim vremenom života i ostalim karakteristikama. Pojedini molekularni gasovi u kontaktu sa kišom, oblacima ili morskom vodom u procesu hidrolize formiraju trifluoroacetičnu kiselinu (engl. *trifluoroacetic acid*, TFA). Ova izuzetno jaka kiselina je toksična po ljudski organizam prilikom inhalacije ili dodira sa kožom, a ima i dugoročne toksične efekte za vodene organizme čak i u jako niskim koncentracijama [142, 143]. Kada se jednom nađe u životnom okruženju, ova kiselina se ne može ukloniti [144]. Vidimo da specifične osobine molekularnih gasova, kao i složen međusoban uticaj parametara gasa, zahtevaju izuzetno veliku pažnju pri odabiru pogodnih gasnih dielektrika za potencijalnu zamenu SF<sub>6</sub> gasa.

## 1.5 Očuvanje životne sredine

Nepoželjne karakteristike SF<sub>6</sub> gasa su izuzetno ozbiljne i dobro poznate. Emisija ovog gasa se mora strogo kontrolisati jer on, uz druge grupe štetnih gasova, snažno utiče na atmosferu planete Zemlje i život na njoj. U svrhu kontrole emisije štetnih gasova, postignuta su dva međunarodna sporazuma od izuzetnog globalnog značaja. U pitanju su Protokol iz Montreala iz 1987. godine i Protokol iz Kjota iz 1997. godine.

### 1.5.1 Protokol iz Montreala

Protokol iz Montreala (engl. *Montreal Protocol*) je međunarodan sporazum o zaštiti ozonskog omotača, koji se zalaže za ukidanje proizvodnje i izbacivanje iz upotrebe supstanci koje razaraju ozon.



Slika 1.1: Srednja koncentracija ozona u stratosferi južne hemisfere u vremenskom intervalu od 1979. do 2021. godine [145].

Ovim protokolom se pre svega skreće pažnja na štetnost hlorofluorokarbonata (engl. *Chlorofluorocarbons*, CFC) i hidrohlorofluorokarbonata (engl. *Hydrochlorofluorocarbons*, HCFC) (tabela 1.1, supstance iz Aneksa A, B i C). U pitanju su jedinjenja hlora ili broma koja su, zbog prisustva ovih atoma, izuzetno destruktivna prema ozonu u stratosferi. N<sub>2</sub>O se ne kontroliše ovim protokolom iako produkti ovog gasa predstavljaju katalizatore za razaranje ozona [146]. Ovim protokolom se takodje ne ograničava proizvodnja i upotreba SF<sub>6</sub> pošto on ne reaguje sa ozonom. Kao rezultat poštovanja Protokola iz Montreala, ustanovljeno je postepeno smanjivanje ozonske rupe iznad Antarktika [147] uz predviđanje da će se u intervalu između 2050. i 2070. godine ozonski omotač vratiti na nivo iz 1980. godine (slika 1.1), koji je iznosio približno 200 DU (engl. *Dobson Unit*, DU), odnosno 2 mm. Ovaj protokol je potpisalo 196 zemalja sveta kao i članice Evropske unije. Srbija je ratifikovala Protokol iz Montreala 1990. godine.

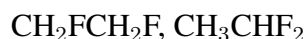
HCFC se razlažu u nižim slojevima atmosfere i imaju niži ODP (0.01-0.5) i GWP (76-2270) u odnosu na CFC grupu gasova (ODP: 0.6-1, GWP: 4680-10720). Ipak, zemlje potpisnice Protokola iz Montreala su se obavezale da će koristiti HFC grupu gasova u zamenu za CFC i HCFC gasove. I pored uvođenja ove zamenske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

Tabela 1.1: Supstance i proizvodi koji sadrže supstance definisane Aneksima Protokola iz Montreala [148]

<b>Aneksi Protokola iz Montreala</b>	<b>Supstance i proizvodi koji sadrže supstance definisane Aneksima Protokola iz Montreala</b>
<b>Supstance iz Aneksa A</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Grupa I (CFC): CFCl<sub>3</sub>, CF<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>F<sub>3</sub>Cl<sub>3</sub>, C<sub>2</sub>F<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>F<sub>5</sub>Cl</li> <li>• Grupa II (haloni): CF<sub>2</sub>BrCl, CF<sub>3</sub>Br, C<sub>2</sub>F<sub>4</sub>Br<sub>2</sub></li> </ul>



<b>Supstance iz Aneksa B</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Grupa I (CFC): CF<sub>3</sub>Cl, C<sub>2</sub>FCl<sub>5</sub>, C<sub>2</sub>F<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>FCl<sub>7</sub>, C<sub>3</sub>F<sub>2</sub>Cl<sub>6</sub>, C<sub>3</sub>F<sub>3</sub>Cl<sub>5</sub>, C<sub>3</sub>F<sub>4</sub>Cl<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>F<sub>5</sub>Cl<sub>3</sub>, C<sub>3</sub>F<sub>6</sub>Cl<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>F<sub>7</sub>Cl</li> <li>• Grupa II: CCl<sub>4</sub></li> <li>• Grupa III: C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>3</sub></li> </ul>
<b>Supstance iz Aneksa C</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Grupa I (HCFC): CHFCl<sub>2</sub>, CHF<sub>2</sub>Cl, CH<sub>2</sub>FCl, C<sub>2</sub>HFCl<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>HF<sub>2</sub>Cl<sub>3</sub>, C<sub>2</sub>HF<sub>3</sub>Cl<sub>2</sub>, CHCl<sub>2</sub>CF<sub>3</sub>, C<sub>2</sub>HF<sub>4</sub>Cl, CHFClCF<sub>3</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>FCl<sub>3</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>F<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>F<sub>3</sub>Cl, C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>FCl<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>CFCl<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>F<sub>2</sub>Cl, CH<sub>3</sub>CF<sub>2</sub>Cl, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>FCl, C<sub>3</sub>HFCl<sub>6</sub>, C<sub>3</sub>HF<sub>2</sub>Cl<sub>5</sub>, C<sub>3</sub>HF<sub>3</sub>Cl<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>HF<sub>4</sub>Cl<sub>3</sub>, C<sub>3</sub>HF<sub>5</sub>Cl<sub>2</sub>, CF<sub>3</sub>CF<sub>2</sub>CHCl<sub>2</sub>, CF<sub>2</sub>ClCF<sub>2</sub>CHClF, C<sub>3</sub>HF<sub>6</sub>Cl, C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>FCl<sub>5</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>3</sub>Cl<sub>3</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>5</sub>Cl, C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>FCl<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>F<sub>2</sub>Cl<sub>3</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>F<sub>3</sub>Cl<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>F<sub>4</sub>Cl, C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>FCl<sub>3</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>F<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>F<sub>3</sub>Cl, C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>FCl<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>F<sub>2</sub>Cl, C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>FCl</li> <li>• Grupa II (HBFC): CHF<sub>2</sub>Br, CH<sub>2</sub>FBr, C<sub>2</sub>HFB<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>HF<sub>2</sub>Br<sub>3</sub>, C<sub>2</sub>HF<sub>3</sub>Br<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>HF<sub>4</sub>Br, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>FBr<sub>3</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>F<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>F<sub>3</sub>Br, C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>FBr<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>F<sub>2</sub>Br, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>FBr, C<sub>3</sub>HFB<sub>6</sub>, C<sub>3</sub>HF<sub>2</sub>Br<sub>5</sub>, C<sub>3</sub>HF<sub>3</sub>Br<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>HF<sub>4</sub>Br<sub>3</sub>, C<sub>3</sub>HF<sub>5</sub>Br<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>HF<sub>6</sub>Br, C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>FBr<sub>5</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>2</sub>Br<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>3</sub>Br<sub>3</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>4</sub>Br<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>5</sub>Br, C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>FBr<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>F<sub>2</sub>Br<sub>3</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>F<sub>3</sub>Br<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>F<sub>4</sub>Br, C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>FBr<sub>3</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>F<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>F<sub>3</sub>Br, C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>FBr<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>F<sub>2</sub>Br, C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>FBr</li> <li>• Grupa III (HBFC): CH<sub>2</sub>BrCl</li> </ul>
<b>Aneks D: proizvodi koji sadrže supstance iz Aneksa A</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Klima-uređaji u automobilima i kamionima</li> <li>• Domaći i komercijalni uređaji: frižideri, zamrzivači, ovlaživači vazduha, aparati za led, aparati za hlađenje vode, toplotne pumpe</li> <li>• Aerosoli sa izuzetkom medicinskih aerosola</li> <li>• Prenosni aparati za gašenje požara</li> <li>• Izolacione ploče, paneli i omotači za cevi</li> </ul>
<b>Supstance iz Aneksa E</b>	CH <sub>3</sub> Br
<b>Supstance iz Aneksa F</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Grupa I (HFC): CHF<sub>2</sub>CHF<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>FCF<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>FCHF<sub>2</sub>, CHF<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CF<sub>3</sub>, CF<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CF<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, CF<sub>3</sub>CHFCF<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>FCF<sub>2</sub>CF<sub>3</sub>, CHF<sub>2</sub>CHFCF<sub>3</sub>, CF<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CF<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>FCF<sub>2</sub>CHF<sub>2</sub>, CF<sub>3</sub>CHFCHFCF<sub>2</sub>CF<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>, CHF<sub>2</sub>CF<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>CF<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>F,</li> </ul>



• Grupa II:



### 1.5.2 Protokol iz Kjota

Protokol iz Kjota (engl. *Kyoto Protocol*) je međunarodan sporazum o redukciji upotrebe i emisije gasova sa efektom staklene bašte. Ovaj sporazum je sastavljen 1997. godine, a 2005. godine je postao međunarodni zakon. Ukupno 192 države su se obavezale da u vremenskom intervalu 2008-2012 redukuju emisiju GWP gasova za 5.2% u odnosu na emisiju iz 1990. godine. Evropska komisija je predložila regulativu kojom bi se u Evropskoj uniji redukovala emisija gasova sa efektom staklene bašte za 80-95% do 2050. godine u odnosu na prethodno pomenut referentni nivo. Zemlje potpisnice ovog protokola su dužne da redukuju emisiju šest gasova (tabela 1.2) i postepeno predju na korišćenje takozvanih čistih tehnologija. Kako je  $\text{SF}_6$  gas sa najvećim GWP faktorom u poređenju sa ostalim navedenim gasovima, potraga za njegovom zamenom je neodložan zadatak. Ovaj protokol je u Republici Srbiji stupio na snagu 2008. godine.

NOAA/ESRL laboratorija [149] je 1995. godine započela proces globalnog merenja prisustva  $\text{SF}_6$  u atmosferi. Njihovi su rezultati pokazali značajnu kontaminaciju atmosfere ovim gasom. Agencija za zaštitu životne sredine (engl. *Environmental Protection Agency*, EPA) je 1999. godine stvorila partnerstvo među članicama Američke industrije električne energije u cilju identifikacije, izlaganja predloga i implementacije rešenja za redukciju emisije  $\text{SF}_6$ . Godine 2006. doneta je regulativa Evropske unije o izveštavanju, praćenju, reciklaži i pravilnom odlaganju gasova sa efektom staklene bašte navedenih u Protokolu iz Kjota. Kako su stručnjaci iz različitih oblasti nauke i tehnike sve više postajali svesni o neophodnosti pronalaska zamene gasa  $\text{SF}_6$ , istraživanja su se preusmerila na čitav spektar molekularnih gasova. Francuska kompanija *ALSTOM* i kompanija *3M* iz Sjedinjenih Američkih Država zajedno su predstavile gas  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  okarakterisan  $\text{C}\equiv\text{N}$  grupom dok je Švajcarsko-Švedska kompanija *ABB* predstavila svoje gasove  $\text{C}_5\text{F}_{10}\text{O}$  i  $\text{C}_6\text{F}_{12}\text{O}$ , kojima je zajedničko postojanje  $\text{C}=\text{O}$  grupe u strukturi. Ovi gasovi bi mogli biti potencijalna zamena za  $\text{SF}_6$  u ulozi gasnog dielektrika u tehnologiji prenosa električne energije.

Gasovi sa efektom staklene bašte utiču na povećanje temperature na Zemlji. Procene [150] upozoravaju na porast globalne temperature za  $1.5\text{ }^\circ\text{C}$  -  $4.5\text{ }^\circ\text{C}$  ukoliko se koncentracija  $\text{CO}_2$  u atmosferi (što je, da podsetimo, referentan gas u odnosu na koji se definiše GWP) duplira u odnosu na nivo iz perioda pre industrijalizacije. Iako ovakav porast temperature možda deluje bezazleno, posledice bi bile izuzetno dramatične sa više aspekata.

Porast temperature na Zemlji u navedenom opsegu stepeni bi doveo do daleko ozbiljnijih posledica u odnosu na one koje se već javljaju. Zbog toga je jedan od osnovnih ciljeva Protokola iz Kjota zadržavanje globalnog porasta temperature ispod  $2\text{ }^\circ\text{C}$  do kraja ovog veka [151]. Međutim, čak i ovaj graničan porast srednje globalne temperature predstavlja veliku brigu za naučnike i stanovništvo uopšte. Porast temperature tla dovodi do većeg isparavanja vlage sa zemljišta čime se povećava količina padavina a samim tim i nivo vodenih površina. Posledice su izuzetno dramatične: javljaju se poplave, erozije zemljišta, kontaminacija pitke vode slanom morskom vodom, uragani [152]. Neki od svetskih gradova kao što su Njujork, Los Anđeles ili Sidnej locirani su uz samu obalu okeana pa je populacija koja živi u njima direktno pogođena porastom nivoa vodenih površina. Ustanovljeno je [153] da godišnji porast nivoa mora iznosi 1.7 milimetara, što je u vremenskom intervalu od 1900. do 2010. godine dovelo do srednjeg globalnog porasta nivoa mora za 0.19 metara. Međuvladin panel o klimatskim promenama (engl. *Intergovernmental Panel on Climate Change*, IPCC) ukazuje na srednji globalni porast nivoa mora za 0.5 do 0.98 metara do kraja 21. veka, dok agencija NOAA (engl. *National Oceanic and Atmospheric Administration*, NOAA) procenjuje da će do 2100. godine srednji nivo mora porasti za 2 metra.

Porast temperature na Zemlji utiče na topljenje santi leda. Ledeni pokrivači na Antarktiku i Gren-

Tabela 1.2: GWP faktori gasova definisanih u Protokol iz Kjota. Vrednosti GWP faktora se odnose na stogodišnji vremenski interval.

Zabranjeni gasovi po Kyoto protokolu	GWP [/]
CO <sub>2</sub>	1
CH <sub>4</sub>	28
N <sub>2</sub> O	265
HFC grupa gasova	4-12400
PFC grupa gasova	6630-11100
SF <sub>6</sub>	22800

landu sadrže skoro 99% leda od ukupne količine na Zemlji. Procenjeno je da bi topljenje leda sa Antarktika dovelo do porasta nivoa mora za 1 metar do 2100. godine i za čak 15 metara do 2500. godine ukoliko emisija gasova sa efektom staklene bašte bude nastavljena današnjim tempom [154].

Kontaminacija pitke vode dovodi do otežanog navodjavanja useva što negativno utiče na prinos hrane. Poplave i suša takođe dovode do nestašice hrane, primoravajući stanovništvo da se iseljava iz kriznih područja. Zbog toga će veliki problem postati prenaseljenost oblasti koje su udaljene od rečnih tokova.

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

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

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

## 1.6 Gasni dielektrici poslednje generacije

U gasne dielektrike poslednje generacije spadaju hidrofluoroolefini (engl. *hydrofluoroolefines*, HFO) i ranije pomenuti perfluoroketoni i perfluoronitrili. Gasovi koji imaju potencijalnu primenu u ulozi gasnih dielektrika u sistemima za prenos električne energije su 1,3,3,3-tetrafluoropropan hemijske formule C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>4</sub>, čija je oznaka HFO-1234ze, i već spomenuti gasovi 1,1,1,3,4,4,4-heptafluoro-3-(trifluorometil)-2-butanon (C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O) i 2,3,3,3-tetrafluoro-2-(trifluorometil)propan-nitril (C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N). Kritično električno polje gasa HFO-1234ze iznosi 193.0 Td, dok su odgovarajuće vrednosti C5-perfluoroketona i C4-perfluoronitrila višestruko veće od one za SF<sub>6</sub> (781.9 Td i 969.4 Td, respektivno). Ovo je jedan od pokazatelja da su C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O i C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N potencijalno bolji dielektrici u odnosu na SF<sub>6</sub>. Ova tri dielektrika poslednje generacije imaju potencijal za razaranje ozona blizak ili jednak nuli. Stogodišnji potencijal globalnog zagrevanja gasa HFO-1234ze je jednak vrednosti 6, njegova vrednost u slučaju C5-perfluoroketona iznosi 1 a za C4-perfluoronitril uzima vrednosti iz opsega 1490-3646.

Rabi i saradnici [155] su primenili empirijsku teoriju za procenu  $(E/n_0)_{lim}$  i tačke ključanja kompleksnih molekularnih gasova koji se svojim osobinama kvalifikuju da budu razmotreni u ulozi gasnih dielektrika u visokonaponskoj tehnologiji. Li i saradnici [156] kao i Zou i saradnici [157] ispitivali su uticaj pritiska gasova i udela komponenata u gasnim smešama C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N-N<sub>2</sub> i C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N-CO<sub>2</sub> na razvoj pozitivnih i negativnih strimera u jako neuniformnom električnom polju. Pored toga, ispitivan je probojni napon različitih smeša gasova. Ova i druga brojna ispitivanja gasnih dielektrika poslednje generacije imala su veliki značaj koji se ogledao u formiranju baze podataka za najperspektivnije alternative SF<sub>6</sub> gasa u sistemima za prenos električne energije.

Tabela 1.3: Karakteristike gasova i gasnih smeša koje se koriste u visokonaponskoj (HV) i srednjenaponskoj (MV) opremi za prenos električne energije [27].

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

Ukoliko bi se ustanovilo da je u sistemima za prenos električne energije najpogodnije koristiti smešu gasova umesto čistog  $SF_6$ , onda bi taj sastav zavisio kako od vrste opreme u kojoj bi se smeša koristila tako i od minimalne temperature na kojoj bi oprema radila. Različite gasne smeše su od značaja u srednjenaponskoj i visokonaponskoj opremi (tabela 1.3). Na osnovu pomenute tabele se vidi da je molarna koncentracija gasova  $C_5F_{10}O$  i  $C_4F_7N$  u smeši manja ili jednaka vrednosti od 13% osim kod smeše koja se koristi u srednjenaponskoj industriji a sadrži  $C_4F_7N$ . Potrebno je obratiti pažnju da se u slučaju gasne smeše za visokonaponsku industriju koja koristi  $C_5F_{10}O$ , osim  $CO_2$  smeši dodaje i kiseonik kako bi se redukovalo nastajanje štetnih produkata kao što su ugljen-monoksid ili čađ [158].

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

Teorijska i laboratorijska ispitivanja pomenutih gasnih dielektrika poslednje generacije i njihovih smeša su rezultovala konstrukcijom pilot opreme za prenos električne energije. Prve instalacije koje koriste gas  $C_4F_7N$  su GIL sistem (engl. *Gas Insulated Lines*, GIL) od 420 kV u mestu Selindž u Engleskoj [159] i GIS sistem (engl. *Gas Insulated Substation*, GIS) od 145 kV na planini Etzel u Švajcarskoj [160]. U nekoliko evropskih zemalja planirana je instalacija opreme koja bi bila izolovana smešom  $C_4F_7N$ - $CO_2$  [161] uključujući 145 kV GIS opremu za unutrašnju primenu u Švajcarskoj, spoljašnji transformator struje od 245 kV u Nemačkoj i 420 kV GIL sistem za spoljašnju upotrebu u Engleskoj [161, 162]. Što se tiče gasa  $C_5F_{10}O$ , visokonaponska instalacija koja ga koristi uspešno je instalirana u Švajcarskoj [163, 164] i Nemačkoj 2015. godine [165].

Tabela 1.4: Gasovi i gasne smeše koje imaju ulogu dielektrika u sistemima za prenos električne energije i produkti njihove disocijacije u vazduhu [166].

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

Tabela 1.5: Pregled posledica koje disocijativni produkti gasnih dielektrika ostavljaju na ljude, životnu sredinu i industrijsku opremu [167].

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

## 1.7 Toksičnost gasova i njihovih produkata

Već je istaknuto da pronalazak zamene SF<sub>6</sub> gasa nije nimalo jednostavan zadatak. Ne može se olako proglasiti superiornost jednog potencijalnog alternativnog gasa u odnosi na drugi kako zbog nedostatka kompletnih podataka o dielektričnim, fizičkim, hemijskim, ekološkim karakteristikama gasa, tako i zbog nedovoljno podataka o disocijativnim produktima ovih gasova. Osim jednostavnog utvrđivanja disocijativnih produkata, neophodno je ustanoviti njihovu toksičnost prema živom svetu i industrijskoj opremi. Brojni autori su se posvetili ispitivanju termalne dekompozicije molekularnih gasova i dekompoziciji koja nastaje u toku električnih pražnjenja. Neki od radova posvećenih ovoj temi se odnose na dielektrik nove generacije C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N [168–170] i njegove smeše sa CO<sub>2</sub> [21].

Kada je reč o disocijaciji gasa SF<sub>6</sub>, većina produkata koji nastaju u procesu električnog pražnjenja u ovom gasu (tabela 1.4) veoma je toksična, ali je njihova koncentracija jako mala zahvaljujući veoma efikasnoj sposobnosti rekombinacije koju ovaj gas poseduje. Za razliku od njega, dekompozicija kompleksnih molekularnih gasova C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N i C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O i gasnih smeša rezultuje stvaranjem čitavog spektra produkata, kako gasovitih tako i čvrstih. Mnogi od njih nisu poželjni (tabela 1.5): na primer, SO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>

je, pored toksičnog dejstva na ljudski organizam prilikom udisanja ili gutanja, veoma toksičan i za vodeni ekosistem dok za gasove CS<sub>2</sub> i CO postoji nagoveštaj da onemogućavanju proces začeca i imaju negativan uticaj na nerođen plod.

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

## 1.8 Zaključak

Vodeći se velikim naporima u pronalaženju zamene SF<sub>6</sub> gasa u ulozi dielektrika u sistemima za prenos električne energije, u ovom poglavlju smo dali pregled fizičkih i hemijskih osobina gasova, njihove molekularne strukture, atomskog sastava. Istaknuta je međusobna zavisnost ovih karakteristika pa su na osnovu njih date smernice za pravilan odabir gasova i gasnih smeša koji mogu biti alternativa ovom jako elektronegativnom gasu koji snažno utiče na povećanje efekta staklene bašte. Istaknuti su gasni dielektrici poslednje generacije koji se odlikuju ultra niskim GWP faktorom. Trenutna istraživanja pokazuju da su ovo najperspektivniji gasovi za zamenu SF<sub>6</sub>, što je upravo i razlog konstruisanja pilot opreme gasno izolovane dielektricima poslednje generacije. Skrenuta je pažnja na toksičnost produkata dekompozicije ovih kompleksnih molekularnih gasova, te je naglašeno da je neophodan maksimalan oprez pri radu sa njima ali kao i dodatna istraživanja ne bili se ubudućnosti sprečila potreba za pronalaženjem novih gasnih dielektrika za ovu istu ulogu.

# Poglavlje 2

## Transportna teorija rojeva elektrona u gasovima

### 2.1 Uvod

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

### 2.2 Roj naelektrisanih čestica

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

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

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

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

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

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

## 2.3 Hidrodinamički režim i definicija transportnih koeficijenata

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

### 2.3.1 Jednačina kontinuiteta

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

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

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

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

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

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

### 2.3.2 Hidrodinamička aproksimacija

Pod hidrodinamičkim režimom se podrazumeva kretanje elektrona u beskonačnom prostoru daleko od fizičkih površina, izvora i ponora elektrona. Navedeni uslovi obezbeđuju da u sistemu ne postoje veliki gradijenti u koncentraciji elektrona. U hidrodinamičkom režimu se može pratiti vremenska



relaksacija roja sve do dostizanja stacionarnog stanja. U stacionarnom stanju postoji balans energije koji je postignut između energijskih dobitaka usled ubrzanog kretanja elektrona u električnom polju i gubitaka usled sudara sa neutralnim atomima/molekulima pozadinskog gasa. Nakon dostizanja stacionarnog stanja, transportne osobine elektrona se opisuju prostorno i vremenski nezavisnim transportnim koeficijentima.

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

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

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

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

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

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

### 2.3.3 Definicije fluks i balk transportnih koeficijenata

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

$$\Gamma(\mathbf{r}, t) = \mathbf{W}_F(t)n_e(\mathbf{r}, t) - \mathbf{D}_F(t) \cdot \nabla n_e(\mathbf{r}, t), \quad (2.8)$$

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

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

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

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

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

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \mathbf{W}_B(t) \cdot \nabla n - \mathbf{D}_B(t) : \nabla \nabla n_e = -R_{\text{eff}}(t)n_e, \quad (2.11)$$

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

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

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

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

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

Dualnost transportnih koeficijenata, odnosno postojanje balk i fluks transportnih koeficijenata, je posledica anizotropne prostorne raspodele lokalne srednje energije duž roja. Energijska zavisnost nekonzervativnih procesa (jonizacije, zahvata elektrona) utiče na prostono neuniformno stvaranje i nestajanje elektrona u roju [54]. Balk brzina drifta opisuje kretanje centra mase roja čiji se položaj menja kako dejstvom spoljašnjeg polja, tako i eksplicitnim uticajem nekonzervativnih sudara. Sa druge strane, fluks brzina drifta predstavlja srednju vrednost brzine pojedinačnih elektrona u roju na čiju vrednost utiče spoljašnje polje, a nekonzervativni sudari implicitno, preko funkcije raspodele. Na osnovu ovoga se zaključuje da su fluks i balk transportni koeficijenti identični u odsustvu nekonzervativnih procesa. U suprotnom, razlike među njima mogu biti u opsegu od par procenata do nekoliko redova veličina [13]. O postojanju dve familije transportnih koeficijenata elektrona mora se voditi računa ne samo u fizici rojeva već i u modelovanju plazme. U eksperimentima sa rojevima se mere balk transportni koeficijenti, dok se u fluidnim modelima plazme rešavaju fluidne jednačine u kojima se koriste kako fluks tako i balk transportni koeficijenti u zavisnosti od tipa električnog pražnjenja i uslova koji se razmatraju.

## 2.4 Rešavanje Bolcmanove jednačine

Bolcmanovu jednačinu je razvio austrijski fizičar Ludvig E. Bolcman (1844 - 1906), razmatrajući dinamiku idealnog gasa u kome se atomi međusobno isključivo elastično sudaraju [171]. Iako je ova jednačina razvijena pre 150 godina, u međuvremenu je našla primenu u različitim oblastima fizike, a njen oblik je ostao nepromenjen do današnjih dana.

Rešiti BE znači izračunati faznu funkciju raspodele  $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$ . Postoje dva glavna pristupa u numeričkom rešavanju BE. BE se može rešiti direktnom integracijom u konfiguracionom i brzinskom prostoru, što postaje sve popularniji metod u poslednje vreme, imajući u vidu porast performansi modernih računara [172]. Drugi način za rešavanje BE je metod koji u svojoj osnovi ima razvoj funkcije raspodele po ortogonalnim polinomima u brzinskom prostoru i razvoj funkcije raspodele u stepeni red po gradijentima koncentracije elektrona. Ova tehnika za rešavanje BE se veoma često naziva momentna metoda (engl. *moment method*) ([52, 53, 62]). U praksi, BE se ne može analitički rešiti osim za model konstantne kolizione učestalosti u prisustvu isključivo elastičnih sudara.

### 2.4.1 Tretman ugaone zavisnosti funkcije raspodele: sferno-harmonijska dekompozicija

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

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

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

Ukoliko se razvoj (2.15) ograniči do  $l = 1$ , dobija se aproksimacija dva člana (engl. *two-term approximation*, TTA). Neophodno je voditi računa o domenu primenljivosti ove aproksimacije: ona

je validna samo u slučaju rojeva lakih čestica (elektrona i pozirona) koji se isključivo elastično sudaraju sa atomima/molekulima pozadinskog gasa. Elastični sudari dovode do male razmene energije ali velike razmene impulsa, čime funkcija raspodele postaje skoro idealno izotropna u brzinskom prostoru. Zbog toga su za opis ugaone zavisnosti funkcije raspodele dovoljna samo dva člana razvoja (2.15). U slučajevima kada neelastični sudari počinju da igraju važnu ulogu, TTA ne daje zadovoljavajuće rezultate. Kod neelastičnih sudara se neznatno menja intenzitet brzine čestica nakon sudara, ali energijski transfer postaje značajan pa se favorizuju pojedini pravci rasejanja čestica. Time se narušava kvaziizotropan karakter funkcije raspodele u brzinskom prostoru odnosno, funkcija raspodele postaje izrazito anizotropna. U ovom slučaju, za njen opis je potreban veći broj sfernih harmonika. Takođe, primena TTA nije adekvatna ni za opis rojeva jona koji doživljavaju isključivo elastične sudare sa neutralima pozadinskog gasa. Usled sličnijih masa, pri elastičnim sudarima jona sa neutralima pozadinskog gasa dolazi do velikog transfera energije, pri čemu funkcija raspodele postaje izrazito anizotropna u brzinskom prostoru [52]. Zbog toga, ne postoje javno dostupni kodovi za rešavanje BE za transport jona a samo nekoliko istaknutih istraživača u fizici rojeva se bavi ovom tematikom [173].

### 2.4.2 Tretman prostorne zavisnosti funkcije raspodele

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

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

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

### 2.4.3 Tretman zavisnosti funkcije raspodele od intenziteta brzine

Treći korak momentne metode je opis zavisnosti funkcije raspodele od intenziteta brzine. Ovo se može postići na nekoliko različitih načina, ali u ovom radu je prćena tradicionalna kinetička teorija, prema kojoj se momenti funkcije raspodele razvijaju u red po Sonine polinomima oko težinske funkcije, koja je u našem slučaju Maksvelova funkcija raspodele. Razvoj je prikazan izrazom [52]:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \sum_{\nu'=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} \left( \partial_t \delta_{\nu\nu'} \delta_{ll'} + n_0 J_{\nu\nu'}^l(\alpha) \delta_{ll'} - R_{\text{eff}}(t) \delta_{\nu\nu'} \delta_{ll'} + ia(t) \alpha (l' m 10 | lm) \langle \nu l || K^{[1]} || \nu' l' \rangle \right. \\ \left. - n_0 J_{0\nu'}^0(\alpha) F(\nu l 0 | 00; \alpha, t) \times (1 - \delta_{s0} \delta_{\lambda 0}) \delta_{l'0} \delta_{m0} \right) F(\nu' l m | s\lambda; \alpha, t) = \bar{X}(\nu l m | s\lambda; \alpha t) \end{aligned} \quad (2.23)$$

U ovoj jednačini figurišu koncentracija čestica pozadinskog gasa  $n_0$ , koeficijent efektivne jonizacije  $R_{\text{eff}}(t)$ , ubrzanje  $a(t)$ , Klebš-Gordonov koeficijent  $(l' m 10 | lm)$ , redukovani matrični elementi izvoda brzine  $\langle \nu l || K^{[1]} || \nu' l' \rangle$  u bazu koji čine Sonine polinomi i čija je eksplicitna vrednost data u radu [174].

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

#### 2.4.4 Kolizioni operator

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

$$J(f, f_0) = J_{\text{WUB}}(f, f_0) + J_{\text{A}}(f, f_0) + J_{\text{I}}(f, f_0) + \dots \quad (2.24)$$

Elastični, neelastični i superelastični sudarni procesi elektrona definisani su putem Vang-Čang, Ulenbek, De Bur semiklasičnog kolizionog operatora [175] čija je forma:

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

gde je  $\sigma(jk; g\chi)$  diferencijalan presek za sudarni proces  $(j, \mathbf{c}, \mathbf{c}_0) \rightarrow (k, \mathbf{c}', \mathbf{c}'_0)$ , dok je  $\cos \chi = \mathbf{g} \cdot \mathbf{g}'$  pri čemu  $\mathbf{g}$  predstavlja relativnu brzinu ( $\mathbf{g} = \mathbf{c} - \mathbf{c}_0$ ). Veličine uz koje je napisan simbol ' odnose se na stanje nakon sudara. Pozadinski gas nije perturbovan česticama roja zbog čega su  $f_{0j}(\mathbf{c}_0)$  i  $f_{0k}(\mathbf{c}'_0)$

opisani Maksvelijanom za neutrane u internim stanjima  $j$  i  $k$ . Kada je  $k = j$ , radi se o elastičnom sudaru, dok se u slučaju kada je  $k > j$ , odnosno  $k < j$ , radi o neelastičnom odnosno superelastičnom sudarnom procesu, respektivno.

Kolizionni operator za procese zahvata elektrona definisan je na sledeći način [176]:

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

gde je  $\sigma_A(j; g)$  diferencijalan presek za proces zahvata elektrona od strane neutrala koji se nalaze u stanju  $j$ . Generalan oblik člana kolizionog operatora kojim se uzima u obzir proces jonizacije [176] ima nešto komplikovaniji oblik od (2.26). Razlog leži u činjenici da nakon procesa jonizacije dolazi do stvaranja slobodnog elektrona što zahteva posmatranje sistema sačinjenog od tri čestice. Oblik ovog člana kolizionog operatora je:

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

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

#### 2.4.5 Transportni koeficijenti elektrona na osnovu momenata funkcije raspodele

Transportni koeficijenti su povezani sa koeficijentima razvoja  $F(\nu lm | s\lambda; \alpha, t)$  momenata funkcije raspodele  $f(lm | s\lambda; c, t)$  po Sonine polinomima oko Maksvelijana (2.17) [52, 72]:

$$R_{\text{eff}}(t) = n_0 \sum_{\nu'=0}^{\infty} J_{0\nu'}^0(\alpha) F(\nu' 00 | 00; \alpha, t), \quad (2.28)$$

$$W(t) = \frac{i}{\alpha} F(010 | 00; \alpha, t) - i n_0 \sum_{\nu'=1}^{\infty} J_{0\nu'}^0(\alpha) F(\nu' 00 | 11; \alpha, t), \quad (2.29)$$

$$D_L = -\frac{1}{\alpha} F(010 | 11; \alpha, t) - n_0 \sum_{\nu'=1}^{\infty} J_{0\nu'}^0(\alpha) \left( F(\nu' 00 | 20; \alpha, t) - \sqrt{2} F(\nu' 00 | 22; \alpha, t) \right), \quad (2.30)$$

$$D_T = -\frac{1}{\alpha} F(011 | 11; \alpha, t) - n_0 \sum_{\nu'=1}^{\infty} J_{0\nu'}^0(\alpha) \left( F(\nu' 00 | 20; \alpha, t) + \frac{1}{\sqrt{2}} F(\nu' 00 | 22; \alpha, t) \right), \quad (2.31)$$

$$\varepsilon(t) = \frac{3}{2} k T_b \left( 1 - \sqrt{\frac{2}{3}} F(100 | 00; \alpha, t) \right). \quad (2.32)$$

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

$$\gamma(t) = \frac{3}{2} k T_b \left( i \sqrt{\frac{2}{3}} F(100 | 11; \alpha, t) \right). \quad (2.33)$$

U prethodnim izrazima figurišu koncentracija čestica pozadinskog gasa  $n_0$  i kolizionna matrica  $J_{0\nu'}^0$ .

U svim prethodnim izrazima, članovi koji su uzeti u obzir u sabircima pod sumom unose u izraz efekte nekonzervativnih sudara. Na taj način, izrazi za balk komponente brzine drifta i difuzionih koeficijenata koji su dati izrazima (2.29), (2.30) i (2.31) odnose se na balk koeficijente, dok se izrazi za fluks koeficijente dobijaju kada se izrazi pod sumom izjednače sa nulom.

## 2.5 Kinetičke jednačine i transportni koeficijenti

Transportni koeficijenti su definisani u hidrodinamičkom režimu u kome razvoj funkcije raspodele ima oblik (2.5). Za funkciju  $f^{(k)}(\mathbf{c}, t)$  važe dva normalizaciona uslova [177]:

$$\int f^{(0)}(\mathbf{c}, t) d\mathbf{c} = 1, \quad (2.34)$$

$$\int f^{(k)}(\mathbf{c}, t) d\mathbf{c} = 0, \quad k \geq 1. \quad (2.35)$$

Kada se izraz za hidrodinamički razvoj funkcije raspodele (2.5) zameni u BE (2.1), zatim se iskoristi izraz za generalisanu vremenski zavisnu difuzionu jednačinu (2.9) i izjednače članovi uz isti stepen gradijenta koncentracije, dobija se hijerarhija kinetičkih jednačina za funkciju  $f^{(k)}(\mathbf{c}, t)$ :

$$\left( \frac{q\mathbf{E}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}} + J \right) f^{(0)}(\mathbf{c}, t) = -\omega^{(0)} f^{(0)}(\mathbf{c}, t), \quad (2.36)$$

$$\left( \frac{q\mathbf{E}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}} + J \right) f^{(k)}(\mathbf{c}, t) = \mathbf{c} f^{(k-1)}(\mathbf{c}, t) - \sum_{j=0}^k \omega^{(j)} f^{(k-j)}(\mathbf{c}, t), \quad k \neq 0. \quad (2.37)$$

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

Kolizioni operator  $J$  se može napisati kao suma kolizionog operatora koji se odnosi na konzervativne  $J^C$  i reaktivne (nekonzervativne) procese  $J^R$ . Kada se prva jednačina (2.36) prointegrira u prostoru brzina i iskoristi pretpostavku da je svaka  $f^{(j)}$  jednaka nuli na granicama integracije, kao i to da je integral konzervativnog dela kolizionog operatora u prostoru brzina jednak nuli, dobija se:

$$\omega^{(0)} = - \int J^R f^{(0)}(\mathbf{c}, t) d\mathbf{c}. \quad (2.38)$$

Integracijom druge jednačine (2.37) uz identične pretpostavke dobija se izraz za balk transportne koeficijente višeg reda:

$$\omega^{(j)} = - \int \mathbf{c} f^{(j-1)}(\mathbf{c}, t) d\mathbf{c} - \int J^R f^{(j)}(\mathbf{c}, t) d\mathbf{c}. \quad (2.39)$$

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

$$R_{\text{eff}} = \omega^{(0)} = - \int J^R f^{(0)}(\mathbf{c}, t) d\mathbf{c}, \quad (2.40)$$

$$\mathbf{W}_B = \omega^{(1)} = \int \mathbf{c} f^{(0)}(\mathbf{c}, t) d\mathbf{c} - \int J^R f^{(1)}(\mathbf{c}, t) d\mathbf{c}, \quad (2.41)$$

$$\mathbf{D}_B = \omega^{(2)} = \int \mathbf{c} f^{(1)}(\mathbf{c}, t) d\mathbf{c} - \int J^R f^{(2)}(\mathbf{c}, t) d\mathbf{c}. \quad (2.42)$$

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

$$\Gamma^{(k)} = \int \mathbf{c} f^{(k-1)}(\mathbf{c}, t) d\mathbf{c}, \quad k \geq 1, \quad (2.43)$$

dok se korekcije na prisustvo nekonzervativnih sudara definišu izrazom:

$$\mathbf{S}^{(k)} = \int J^R f^{(k)}(\mathbf{c}, t) d\mathbf{c}. \quad (2.44)$$

Fluks brzina drifta i fluks difuzioni tenzor, na osnovu (2.43) imaju oblik:

$$\mathbf{W}_F = \int \mathbf{c} f^{(0)}(\mathbf{c}, t) d\mathbf{c}, \quad (2.45)$$

$$\mathbf{D}_F = \int \mathbf{c} f^{(1)}(\mathbf{c}, t) d\mathbf{c}. \quad (2.46)$$

Na osnovu jednačina (2.40) i (2.45) možemo uočiti da je za proračun efektivnog koeficijenta jonizacije i fluks brzine drifta neophodna prostorno homogena komponenta funkcije raspodele, odnosno momenti nultog reda. Za proračun balk brzine drifta (2.41) i fluks difuzionog tenzora (2.46) neophodno je razmotriti varijacije funkcije raspodele prvog reda. Konačno, ukoliko želimo da proučavamo eksplicitne efekte nekonzervativnih sudara na difuzioni tenzor (2.42), neophodno je da razvijemo funkciju raspodele do članova drugog reda u hidrodinamičkom razvoju.

## 2.6 Monte Karlo metod

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

Prednosti MC simulacija u odnosu na numeričko rešavanje Bolcmanove jednačine su očigledne u domenu nehidrodinamičkih studija transporta naelektrisanih čestica. U odnosu na numeričko rešavanje Bolcmanove jednačine, u MC simulacijama se na jednostavniji i transparentniji način može proučavati transport elektrona u blizini graničnih površina i u uslovima prostorno nehomogenih polja [57, 178, 179]. MC simulacije su veoma dobar metodološki pristup za proučavanje kinetičkih fenomena indukovanih vremenskom [13, 29, 180, 181] i prostornom nelokalnošću transporta elektrona, posebno u situacijama u kojima se pojavljuju efekti rezonanci [179]. MC simulacije su praktično jedini način za proučavanje nastanka relativističkih lavina bežećih elektrona u planetarnim atmosferama [182]. Modelovanje interakcije antimaterije i materije kao i modelovanje uređaja za proizvodnju i akumulaciju antimaterije u značajnoj meri je zasnovano na MC simulacijama [183, 184]. Konačno, proširenje metodologije proučavanja transporta elektrona iz domena neutralnih gasova u domen soft-kondenzovane materije takođe je lakše postići generalizacijom i proširenjem postojećih MC kodova, koji su inicijalno dizajnirani za proučavanje u neutralnim gasovima [185]. Jednom rečju, Monte Karlo metoda je pouzdana i fleksibilna metoda kojom se mogu proučavati kompleksni problemi u savremenoj fizici.

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

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

U jednoj tipičnoj MC simulaciji transporta elektrona prati se prostorno-vremenska evolucija velikog broja čestica (reda  $10^6$  ili više) korišćenjem generatora slučajnih brojeva. Nezavisno od vrste čestica čija se evolucija prati, a u ovoj doktorskoj disertaciji su u pitanju elektroni, MC metoda se sastoji od nekoliko osnovnih koraka [52, 55, 58]. Na početku simulacije elektroni imaju određenu srednju početnu energiju i raspodelu brzina. Bitno je naglasiti da odabir početne srednje energije elektrona ne utiče na konačne vrednosti transportnih koeficijenata elektrona već samo na vreme potrebno za njihovu relaksaciju u stacionaran režim. Početna srednja energija elektrona u našim MC simulacijama obično ima vrednost od 1 eV, dok se pravci kretanja elektrona u početnom trenutku izračunavaju na osnovu Maksvelove raspodele brzina elektrona (engl. *Maxwell*). Smatra se da su pravci kretanja elektrona nepromenljivi sve do trenutka sudara sa česticama pozadinskog gasa. Kretanje svakog pojedinačnog elektrona se prati u toku vremenskog intervala dužine  $\Delta t$  rešavanjem jednačina kretanja. Ukoliko je u tom vremenskom periodu elektron doživeo sudar sa atomom/molekulom pozadinskog gasa, vrsta sudarnog procesa se utvrđuje slučajnim brojem na osnovu parcijalnih sudarnih verovatnoća za sve sudarne procese na tekućoj energiji elektrona. Ukoliko elektron nije učestvovao u sudaru, njegova evolucija nastavlja da se prati u narednom vremenskom intervalu. Nakon utvrđivanja vrste sudarnog procesa, izračunavaju se parametri rasejanja elektrona: novi pravci elektrona (određivanjem uglova rasejanja za čije izračunavanje su potrebni novi slučajni brojevi) i njegova nova energija koja se određuje u zavisnosti od toga da li se elektron sudario elastično ili neelastično sa neutralnom česticom gasa. Na kraju svakog intervala  $\Delta T$ , koji se unapred određuje kao ulazni parametar simulacije, vrši se usrednjavanje vrednosti dinamičkih karakteristika roja elektrona, uključujući srednje koordinate, srednje komponente brzine, srednju energiju i druge veličine koje su neophodne za izračunavanje transportnih osobina elektrona u posmatranom gasu. Bitno je naglasiti značaj pravilnog odabira vremenskog koraka  $\Delta t$  za pomeranje elektrona. Pre svega, ovaj vremenski korak ne sme biti korelisan za izborom vremenskog koraka  $\Delta T$  za izračunavanje dinamičkih karakteristika roja. U slučaju kretanja rojeva elektrona u vremenski konstantnom električnom polju, korak  $\Delta t$  se procenjuje na osnovu srednje kolizione frekvence elektrona. Ukoliko na roj deluju vremenski promenljivo električno i magnetsko polje, potrebno je razmotriti i vremenski korak koji odgovara periodu ciklotronskih rotacija elektrona. Detaljan opis svakog pojedinačnog koraka MC [52, 55–57] je dat u narednim poglavljima.

### 2.6.1 Generator slučajnih brojeva

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

U naš Monte Karlo kod je implementiran generator pseudoslučajnih brojeva *ran3* koji je predložio Knut [186]. Ovaj generator proizvodi korelacije petog reda koje se efikasno otklanjaju razdvajanjem generatora za različite procese (određivanje vremena sudara, vrste sudarnog procesa itd.) od kojih svaki ima nezavisan ulazni parametar koji se naziva *seme* (engl. *seed*). Uticaj korelacije



pseudoslučajnih brojeva generisanih *ran3* generatorom na transportne koeficijente izračunate MC simulacijama je detaljno analiziran u radu [187].

## 2.6.2 Jednačine kretanja elektrona

Prvi od tri osnovna koraka MC simulacija je određivanje trajektorije elektrona na osnovu jednačina kretanja. Na kretanje elektrona između dva sudara utiče Lorencova sila, dok se vremenska promena brzine kretanja elektrona opisuje drugim Njutnovim zakonom <sup>1</sup>:

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

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

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

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

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

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

Još jedna tehnika koja se često primenjuje za određivanje kretanja elektrona u prisustvu električnog i magnetskog polja je *Borisova rotacija* [188]. U pitanju je tehnika koja je jednako uspešna za reprezentovanje kretanja elektrona u prisustvu kako vremenski konstantnih tako i vremenskih promenljivih polja. Ova tehnika je veoma precizna a ujedno i izuzetno efikasna kada je u pitanju korišćenje računarskih resursa. Prvi korak u algoritmu zasnovanom na ovoj tehnici je izračunavanje ubrzanja elektrona pod dejstvom električnog polja u toku polovine vremenskog koraka  $\Delta t$ :

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

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

$$v_x := v_x + sv'_y, \quad (2.52)$$

$$v_y := v_y - sv'_x, \quad (2.53)$$

pri čemu je

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

dok se brzine  $v'_x$  i  $v'_y$  izračunavaju na osnovu izraza:

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

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

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

u kojima je  $\theta$  ugao rotacije vektora brzine pod dejstvom magnetskog polja čija je vrednost

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

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

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

Položaj elektrona nakon vremenskog koraka  $\Delta t$  se definiše izrazima:

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

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

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

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

U kompjuterskom kodu koji je korišćen u ovoj disertaciji, za opis kretanja elektrona u električnim i magnetskim poljima koristi se Borisova rotacija. Ova procedura je detaljno testirana u domenu kako vremenski statičkih tako i vremenski promenljivih ukrštenih električnih i magnetskih polja. U slučaju vremenski promenljivih polja, jednačina kretanja se može rešiti primenjujući kombinovane metode bazirane na metodi konačnih razlika i Runge-Kuta metoda [189, 190].

### 2.6.3 Određivanje vremenskog trenutka i vrste sudara

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

#### Određivanje vremenskog trenutka sudara

Verovatnoća da elektron neće doživeti sudar do trenutka  $t$  izračava se jednačinom [55]

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

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

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

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

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

Trenutak sudara  $t_c$  se određuje izjednačavanjem verovatnoće da slučajan broj  $\xi_1$  uzima vrednost iz uniformne raspodele u intervalu od 0 do 1 i verovatnoće da slučajna veličina  $t_c$  pripada intervalu  $[t_0, t_c]$ :

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

Generalno, prethodna jednačina je analitički nerešiva pošto je totalna kolizionna frekvenca komplikovana funkcija energije i vremena. Egzaktno trenutak sudara  $t_c$  se može dobiti numeričkom integracijom jednačine (2.65) [191] ili primenom metode nultih sudara [192].

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

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

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

Putem metode nultih sudara (engl. *null - collision method*) [192], jednačina (2.65) se analitički rešava nakon obezbeđivanja vremenske nepromenljivosti kolizionne frekvence  $\nu_T(\epsilon(t))$ . Ovaj uslov se zadovoljava uvođenjem fiktivnog procesa za nulti sudar koji ne menja energiju elektrona. Njegova kolizionna frekvenca se bira tako da suma totalne kolizionne frekvence  $\nu_T(\epsilon(t))$  i kolizionne frekvence nultih sudara  $\nu_{\text{null}}(\epsilon(t))$  bude konstantna u vremenu i jednaka maksimalnoj vrednosti  $\nu_{\text{max}}$ :

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

Uvođenjem ovog izraza u jednačinu (2.65), izračunava se vreme sudara biranjem slučajnog broja  $\xi_1$  iz uniformne raspodele na intervalu od 0 do 1:

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

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

Metoda nultih sudara je jednostavna i brza metoda za izračunavanje trenutka sudara. Zahvaljujući svojoj jednostavnosti, preciznosti i primenljivosti kako u hidrodinamičkim tako i u nehidrodinamičkim uslovima [52], implementirana je u javno dostupnim MC kodovima (MAGBOLTZ, METHES). Međutim, ova metoda može osetno usporiti računarski kod ukoliko elektroni doživljavaju veliki broj nultih sudara. Primer za to je transport elektrona u plementim gasovima čiji presek za elastične sudare na malim energijama ima Ramzauer-Taunzendov minimum, kao i transport elektrona pod dejstvom vremenski promenljivih polja.

## Određivanje vrste sudara

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

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

Bira se slučajan broj  $\xi_2$  iz uniformne raspodele na intervalu (0,1) i utvrđuje za koje  $j = k$  je zadovoljena relacija:

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

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

#### 2.6.4 Određivanje dinamičkih osobina elektrona nakon sudara

Sledeći važan korak u MC simulacijama je utvrđivanje komponenti vektora brzine i energije elektrona nakon sudara. U ovoj disertaciji, smatra se da je rasejanje elektrona na čestici pozadinskog gasa uniformno kako po azimutalnom uglu  $\varphi$ , tako i po uglu rasejanja  $\theta$  koje novi smer kretanja elektrona zahvata sa električnim poljem. Drugim rečima, u ovoj disertaciji se razmatra izotropan model rasejanja. Kako se smatra da je ugao  $\varphi$  uzima vrednost iz uniformne raspodele u intervalu  $[0, 2\pi]$ , njegova vrednost je određena na osnovu slučajnog broja  $\xi_3$  koji je uniforman na intervalu (0,1):

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

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

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

pri čemu i slučajan broj  $\xi_4$  uzima vrednost iz uniformne raspodele u granicama (0,1). Umesto totalnog preseka za elastično rasejanje, u modelu izotropnog rasejanja je potrebno koristiti presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima. Što se tiče preseka za neelastične sudare, u ovom modelu se mogu koristiti totalni preseki, imajući u vidu minimalan transfer impulsa u ovim sudarima. Ukoliko je neophodno uzeti u obzir anizotropiju rasejanja, ugao rasejanja je dat diferencijalnim presekom na tekućoj energiji elektrona. U ovom slučaju, za proračun totalne kolizione frekvence koja je neophodna za određivanje tačnog trenutka sudara, neophodno je koristiti totalni presek za elastične sudare koji se može dobiti integracijom diferencijalnih preseka. Anizotropno rasejanje ima važnu ulogu na visokim energijama elektrona, na kojima rasejanje unapred postaje dominantno, ili u limitu malih energija za molekule sa velikim dipolnim momentum. Pored direktne implementacije diferencijalnih preseka, postoji više načina za tretman ugaone raspodele rasejanja. Uticaj ugaone raspodele rasejanja u elastičnim sudarima na transport elektrona se može proučavati na osnovu algoritama koje su predložili Okrimovski, Longo i Jansen sa saradnicima [193–195]. U svim ovim modelima ugaonog rasejanja, neophodno je fiksirati transfer impulsa u elastičnim sudarima.

Pravac rasejanja elektrona nakon sudara definisan je uglovima  $\varphi$  i  $\theta$ , dok se intenzitet brzine određuje na osnovu energije elektrona nakon sudara:

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

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

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

u kome se oznaka  $\varepsilon_0$  odnosi na energiju elektrona pre sudara, dok su  $m$  i  $M$  masa elektrona i masa neutralnih čestica od kojih je sačinjen pozadinski gas, respektivno. Ukoliko elektron doživi neelastičan sudar sa metom čiji je energijski prag  $\varepsilon_{\text{thresh}}$ , onda se energija elektrona nakon ovakvog sudara izračunava izrazom:

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

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

Elektron može učestvovati i u nekonzervativnim sudarima. U pitanju su procesi u kojima se ne održava broj elektrona u sistemu. Primer su jonizacija, zahvat elektrona (engl. *attachment*) od strane neutrala pozadinskog gasa i rekombinacija elektrona i pozitivnih jona. Prilikom jonizacije nastaje nov elektron dok se energija inicijalnog elektrona umanjuje za vrednost praga ovog procesa. Daljnje energije između inicijalnog i novonastalog elektrona može biti rešeno na nekoliko načina. Oba elektrona mogu dobiti po polovinu energije koja preostaje nakon jonizacije, inicijalan elektron može zadržati svu energiju ili, kao što je to rešeno u našem MC kodu, deljenje energije može se odvijati na potpuno slučajnan način biranjem slučajnog broja  $\xi_5$  koji uzima vrednost iz uniformne raspodele na intervalu (0,1). Ukoliko elektron učestvuje u drugim navedenim nekonzervativnim sudarima (zahvat ili rekombinaciju sa pozitivnim jonom), on se u MC simulacijama jednostavno uklanja iz roja.

### 2.6.5 Izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona u Monte Karlo simulacijama

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

Jednačinama (2.40), (2.41), (2.42), (2.45), (2.46) se izračunavaju transportni koeficijenti elektrona. Međutim, ove jednačine nisu direktno primenljive u Monte Karlo simulacijama već je neophodna njihova diskretizacija.

Kao što je objašnjeno u potpoglavlju 2.6, kretanje pojedinačnih elektrona se prati u toku vremenskog intervala dužine  $\Delta t$ , dok se nakon svakog vremenskog koraka  $\Delta T$  vrši usrednjavanje vrednosti dinamičkih karakteristika roja elektrona. Te dinamičke karakteristike su prostorne koordinate i komponente brzina elektrona na osnovu kojih se, nakon svakog  $\Delta T$ , izračunavaju transportni koeficijenti elektrona. Srednja energija elektrona se izračunava na sledeći način:

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

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

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

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

U ovim se formulama simbol  $\langle \rangle$  odnosi na usrednjavanje po ansamblu elektrona, a  $\mathbf{r}^* = \mathbf{r} - \langle \mathbf{r} \rangle$ . Fluks brzina drifta i fluks difuzioni tenzor se izračunavaju kao:

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

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

Efektivan koeficijent jonizacije se u Monte Karlo simulacijama izračunava putem:

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

gde je  $N$  broj elektrona u trenutku  $t$ .

## 2.7 Zaključak

U ovom poglavlju su prikazani osnovni elementi hidrodinamičke kinetičke teorija za opis transporta elektrona u neutralnim gasovima. Definisan je roj elektrona, uveden je pojam hidrodinamičkog režima, uz čiju pretpostavku je funkcija raspodele prikazana preko razvoja po gradijentima koncentracije elektrona. Identifikovani su i definisani fluks brzina drifta i fluks difuzioni tenzor, koji figurišu u vremenski zavisnoj fluks-gradijentnoj relaciji, kao i balk brzina drifta elektrona i balk difuzioni tenzor u vremenski zavisnoj difuzionoj jednačini. Dati su osnovni koraci momentne metode za rešavanje Bolcammnove jednačine, kojom se funkcija raspodele razvija po specijalnim funkcijama. Na osnovu momenata funkcije raspodele, dati su eksplicitni izrazi za transportne koeficijente koji su izračunati u narednim poglavljima ovog rada.

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

## Poglavlje 3

# Transport elektrona u trifluorometil-jodidu ( $\text{CF}_3\text{I}$ )

### 3.1 Uvod

U ovom poglavlju je analiziran transport elektrona u trifluorometil-jodidu ( $\text{CF}_3\text{I}$ ) i njegovim smešama sa argonom i ugljen-dioksidom. Transportni koeficijenti elektrona su izračunati u opsegu redukovanih električnih polja u kojima postoje eksperimentalni rezultati. Polazeći od inicijalnog skupa preseka za  $\text{CF}_3\text{I}$ , konstruisan je kompletan i samousaglašen konačan skup preseka za rasejanje elektrona u ovom gasu primenom tehnike rojeva. Na isti način konstruisan je i skup preseka za rasejanje elektrona u  $\text{CO}_2$ , imajući u vidu potrebu za proračunom transportnih koeficijenata elektrona u smešama dva pomenuta molekularna gasa. Ovi proračuni su izvršeni našim numeričkim kodovima baziranim na Monte Karlo metodi, rešenjima Bolcmanove jednačine koja su bazirana na razvoju funkcije raspodele u više članova u brzinskom prostoru, kao i javno dostupnim kodom BOLSIG+.

### 3.2 Eksperimentalne tehnike za merenje transportnih koeficijenata elektrona

Transportni koeficijenti elektrona u gasovima se mogu meriti u različitim tipovima eksperimenata. Stacionarni Taunzendov eksperiment (engl. *steady-state experiment*, SST) je prvenstveno razvijen za merenje prvog Taunzendovog (engl. *Townsend*) koeficijenta jonizacije  $\alpha$  koji opisuje električno pražnjenje [23]. Potom je ustanovljeno da se karakteristike pražnjenja kod jako elektronegativnih gasova u značajnoj meri razlikuju od atomskih i elektropozitivnih molekularnih gasova, pa je SST eksperiment iskorišćen i za merenje koeficijenta zahvata  $\eta$ . Ovim eksperimentom se meri struja elektrona koja se razvija između sistema pločastih elektroda u paralelnoj konfiguraciji. Inicijalni elektroni

se emituju sa katode pod dejstvom UV zračenja kojim se ona pobuđuje a izmeren strujni signal je u korelaciji sa rastojanjem između elektroda. Pošto je pritisak gasa u ovom eksperimentu manji od nekoliko kPa, može se smatrati da je izbegnuta sekundarna emisija elektrona sa površine katode. Na taj način, izmeren strujni signal zavisi isključivo od procesa primarne jonizacije i zahvata elektrona. Fitovanjem odgovarajuće analitičke formule na ovaj strujni signal, dobijaju se vrednosti koeficijenata  $\alpha$  i  $\eta$ .

Eksperimentom u impulsnom Taunzendovom režimu (engl. *pulsed – Townsend experiment*, PT) se pored  $\alpha$  i  $\eta$  koeficijenata mogu izmeriti brzina drifta elektrona i longitudinalan koeficijent difuzije [23]. I u ovoj eksperimentalnoj postavci, jonizaciona komora se sastoji od međusobno paralelnih pločastih elektroda. Anoda je uzemljena a katoda se napaja potencijalom čime se u prostoru između elektroda formira uniformno električno polje. Primarni elektroni se generišu laserskom pobudom fotosenzitivne ćelije unutar metalne katode. Osnovni zahtev PT eksperimenta je da katoda emituje približno  $10^7$  primarnih elektrona. Brzina drifta elektrona se dobija na osnovu poznatog rastojanja među elektrodama i precizno utvrđenog tranzijentnog vremena elektrona. Od preciznosti određivanja brzine drifta elektrona zavisi preciznost ostalih transportnih koeficijenata koji se dobijaju PT eksperimentom. Efektivan koeficijent jonizacije, jednak razlici koeficijenta jonizacije i zahvata, izračunava se na osnovu fitovanja strujnog signala i izračunate brzine drifta elektrona. Konačno, na osnovu ova dva transportna koeficijenta elektrona i analitičkog izraza za izmerenu struju u ovom eksperimentu, izračunava se longitudinalan koeficijent difuzije [196].

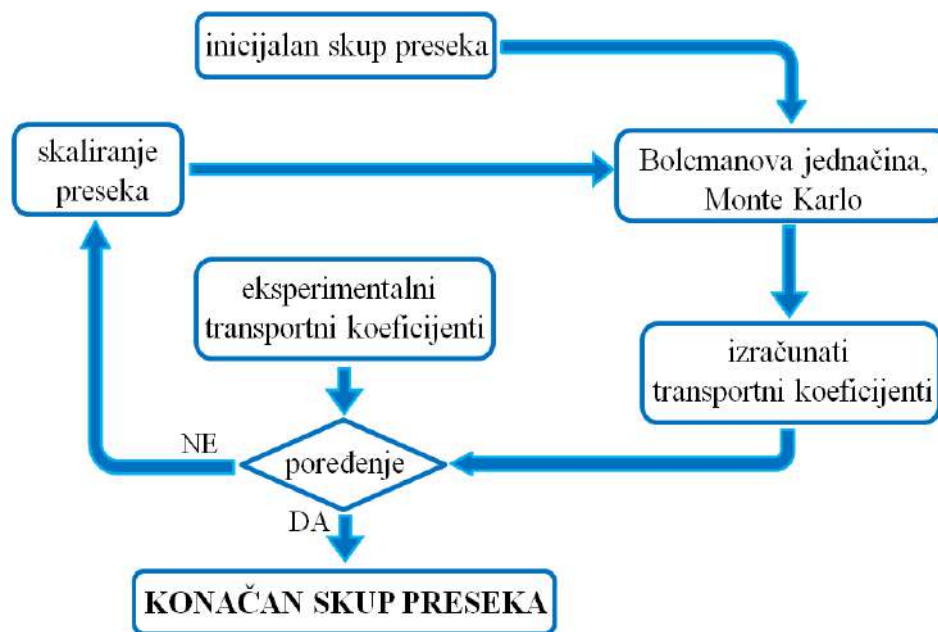
U eksperimentu zasnovanom na merenju vremena preleta elektrona (engl. *time of flight*, TOF), laserski impuls iz UV oblasti spektra pogađa fotoemisionu elektrodu integrisanu u katodi. Generisan snop inicijalnih elektrona putuje ka mernoj elektrodi dejstvom ubrzavajućeg vremenski konstantnog polja [197]. Tokom eksperimenta se podešava rastojanje između elektroda i meri struja elektrona koja odgovara svakom od ovih rastojanja. Izmerena struja je proporcionalna koncentraciji elektrona koja je u korelaciji sa brzinom drifta elektrona, njihovom difuzijom i efektivnim koeficijentom jonizacije. Tri navedena transportna koeficijenta se dobijaju fitovanjem analitičkog izraza za koncentraciju elektrona na strujne profile izmerene pri svim podešenim međuelektrodnim rastojanjima. Poređenjem referentnih transportnih podataka (koje možemo dobiti rešavanjem Bolcmanove jednačine ili Monte Karlo simulacijama na osnovu poznatog skupa preseka za rasejanje elektrona u ispitivanom gasu) sa podacima dobijenim opisanom tehnikom fitovanja, mogu se izračunati korekcionni faktori naftovanih transportnih koeficijenata elektrona.

### 3.3 Tehnika rojeva za razvoj i normalizaciju preseka

Tehnika rojeva je iterativna procedura kojom se inicijalan skup preseka za rasejanje elektrona u ispitivanom gasu modifikuje u cilju postizanja zadovoljavajućeg slaganja između izračunatih i eksperimentalno izmerenih transportnih koeficijenata elektrona. Inicijalno razvijena od strane Felpsa [31] i Kromptona [32], tehnika rojeva je postala prihvaćena, kompetitivna i komplementarna tehnikama za dobijanje individualnih preseka za rasejanje elektrona, kao što su eksperimenti sa ukrštenim snopovima i eksperimenti sa totalnom atenuacijom snopova elektrona. Tehnika rojeva ima najveći značaj u oblasti niskih energija elektrona u kojoj druge eksperimentalne tehnike imaju čitav niz sistematskih poteškoća od kojih je nedovoljna energijska rezolucija snopa elektrona jedna od ključnih.

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





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

formiranju ulaznih podataka ovih modela [13, 29].

Postupak konstruisanja konačnog skupa preseka tehnikom rojeva je šematski prikazan na slici 3.1. Polazeći od inicijalnog skupa preseka za rasejanje elektrona u ispitivanom gasu, transportni koeficijenti elektrona se izračunavaju numeričkim rešavanjem BE ili MC simulacijama a zatim se upoređuju sa referentnim eksperimentalnim transportnim koeficijentima elektrona. Ukoliko nije postignut unapred određen stepen slaganja između pomenutih podataka, vrši se skaliranje individualnih preseka. Time se formira korigovan skup preseka na osnovu koga se izračunavaju novi transportni koeficijenti elektrona i porede sa istim referentnim eksperimentalnim podacima. Opisan postupak se ponavlja sve dok se ne dostigne željeno slaganje između izračunatih i izmerenih transportnih koeficijenata elektrona u ispitivanom gasu. Ovim se dobija konačan, odnosno normiran skup preseka na eksperimentalne podatke koji su referentni u ovoj iterativnoj proceduri.

Uspeh tehnike rojeva zavisi od nekoliko faktora. Pre svega, mora se voditi računa o načinu sastavljanja inicijalnog skupa preseka. On bi trebao da sadrži što pouzdanije preseke za individualne sudarne procese koji su eksperimentalno izmereni ili izračunati teorijskim putem. Takođe, preseki bi trebali da se odnose na različite vrste individualnih procesa i da obuhvataju što širi opseg energija elektrona. Drugi bitan faktor su inherentne osobine metode za izračunavanje transportnih koeficijenata. Veoma je važno da se primenjuje što preciznija tehnika kako bi ovaj korak iterativnog postupka na najmanji mogući način uticao na razliku između izračunatih i izmerenih transportnih koeficijenata. Što se tiče skupa transportnih koeficijenata koji predstavlja referentne eksperimentalne podatke, važno je koristiti što veći broj različitih transportnih koeficijenata kako bi se obezbedila jedinstvenost finalnog skupa preseka. Od izuzetne je važnosti da se u ovom skupu nalaze transportni koeficijenati koji se mere sa velikom preciznošću (brzina drifta, karakteristična energija, koeficijenti jonizacije i zahvata elektrona). Ukoliko se kao referentni eksperimentalni podaci koriste transportni koeficijenti elektrona u smešama, tehnikom rojeva se može povećati pouzdanost konačnog skupa preseka putem preciznijeg određivanja pojedinačnih preseka, imajući u vidu veliku osetljivost funkcije raspodele elektrona na prisustvo drugih gasova. Metoda gasnih smeša se zasniva na analizi smeše malog procenta ispitivanog gasa koji se dodaje gasu sa pouzdanim preseccima [48, 198–200]. Bitno je da se kod

ovog nosećeg gasa ne javljaju sudarni procesi u oblasti energija u kojoj želimo da precizno odredimo preseke ispitivanog gasa. Metodom gasnih smeša se najčešće određuju preseki ispitivanog gasa na niskim i srednjim energijama.

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

Jedan od nedostataka tehnike rojeva je nejedinstvenost skupa preseka. Ona se ogleda u mogućnosti konstruisanja više međusobno različitih skupova preseka koji obezbeđuju jednako dobro slaganje sa istim referentnim eksperimentalnim podacima. Ovaj nedostatak se u značajnoj meri može prevazići primenom metode gasnih smeša ili korišćenjem većeg broja transportnih koeficijenata u proceduri fitovanja. Veći broj eksperimentalno određenih transportnih koeficijenata se može dobiti u prisustvu električnih i magnetskih polja [201], a mogu se koristiti i transportni koeficijenti trećeg reda [202–205].

Takođe, jedinstvenost skupa preseka se može obezbediti uvođenjem fiktivnih sudarnih procesa [64, 206, 207]. Na primer, poznato je da se preseki za elektronsku ekscitaciju (i disocijaciju u slučaju molekularnih gasova) najčešće eksperimentalno određuju sa ne tako velikom pouzdanošću. Takođe, poznato je da je koeficijent jonizacije jako osetljiv upravo na ovaj presek. Na osnovu toga, pouzdanost konačnog skupa preseka se povećava uvođenjem efektivnog ekscitacionog preseka (i efektivnog disocijativnog preseka) koji dobro reprezentuje referentan koeficijent jonizacije. Koeficijent jonizacije elektrona je, naravno, izuzetno osetljiv i na presek za jonizaciju, međutim, pošto se ovaj presek meri sa velikom pouzdanošću on se po pravilu nikada ne modifikuje. Drugi nedostatak ove iterativne tehnike je ograničena rezolucija. Još jedan nedostatak tehnike rojeva se odnosi na usrednjavanje ugaone raspodele u rasejanju elektrona. To znači da ne postoji mogućnost određivanja diferencijalnih preseka za rasejanje elektrona. Ovaj nedostatak je izražen u situacijama kada transportni podaci zavise od ugla pod kojim se elektroni rasejavaju nakon sudara. Kao što je rečeno, u proučavanju transporta elektrona u ovoj doktorskoj disertaciji smatra se da se u svim sudarnim procesima elektroni rasejavaju izotropno u prostoru pa ovaj nedostatak tehnike rojeva nije od uticaja na kvalitet konstruisanih skupova preseka. Još jedna karakteristika tehnike rojeva se može navesti kao njen nedostatak a to je indirektna priroda tehnike kojom se preseki za rasejanje elektrona dobijaju posredstvom eksperimentalnih transportnih koeficijenata elektrona.

Uprkos navedenim nedostacima, određivanje nepoznatih individualnih preseka i normalizacija skupova preseka za rasejanje elektrona ima važnu ulogu u fizici rojeva naelektrisanih čestica i u modelovanju neravnotežnih plazmi. U poslednje vreme, klasične iterativne numeričke procedure se sve češće zamenjuju savremenim metodama baziranim na veštačkoj inteligenciji i mašinskom učenju. Na ovaj način se drastično smanjuje vreme i mogući subjektivni elementi koji se unose u iterativnu proceduru za normalizaciju preseka. Metode mašinskog učenja su nedavno upotrebljene za razvoj i normalizaciju preseka za rasejanje elektrona u biomolekulima  $C_4H_8O$  [208] i  $C_5H_{10}O$  [209], kao i molekulu  $NO$  [210].

### 3.4 Inicijalni skup preseka za $CF_3I$

U literaturi su publikovana tri skupa preseka za rasejanje elektrona u  $CF_3I$ . U pitanju su skupovi Kimure i Nakamure [211], Kočetova i saradnika [212] kao i skup preseka koji su razvili Kavaguči i saradnici [213].

Skup preseka Kimure i Nakamure [211] je konstruisan fitovanjem inicijalnog skupa preseka na

eksperimentalne podatke koji su uključivali  $\alpha/n_0$  i  $\eta/n_0$  u čistom  $\text{CF}_3\text{I}$  dobijene u SST eksperimentu i transportne koeficijente  $W$ ,  $n_0 D_L$  i  $(\alpha - \eta)/n_0$  iz TOF eksperimenta [214]. Transportni koeficijenti elektrona su izračunati rešavanjem Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana (u oznaci TTA-BE) a dobijen skup preseka je definisan u opsegu energija od 0.01 eV do 100 eV.

Kočetov i saradnici [212] su svoj skup preseka dobili fitovanjem na eksperimentalne transportne koeficijente elektrona u smeši  $\text{CF}_3\text{I-N}_2$ , koje su izmerili Urkiho i saradnici u PT eksperimentu [130]. Kao i u prethodnom slučaju, transportni koeficijenti su izračunati rešavanjem TTA-BE, a dobijen skup preseka definisan je u opsegu [0.01, 100] eV.

Skup preseka koji su razvili Kavaguči i saradnici [213] nije dobijen fitovanjem na merenja jednog referentnog autora. Transportni koeficijenti elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$  su izračunati MC simulacijama nakon čega su upoređeni sa eksperimentalnim podacima dobijenim u PT eksperimentu De Urkiha i saradnika [130], SST eksperimentu Kimure i saradnika [211], kao i u SST eksperimentu Hasegave i saradnika [215]. Skup preseka Kavagučija i saradnika je definisan u opsegu energija od 0.01 eV do 1000 eV.

Pored ovih skupova preseka, koji se u dobroj meri mogu okarakterisati kao kompletni i samousaglašeni, postoje i preporučeni preseki za individualne sudarne procese koje su predložili Kristoforou i Oltof [41]. Međutim, ovaj skup pojedinačnih preseka nije normiran na referentne transportne koeficijente elektrona, već predstavlja skup najboljih preseka za individualne sudarne procese koji se, kao takvi, ne mogu direktno koristiti u modelovanju pre njihove normalizacije.

Za potrebe ove doktoske disertacije je kao inicijalan skup preseka odabran je onaj koji su razvili Kimura i Nakamura [211]. Iako je ovaj skup preseka po svojoj prirodi kompletan, on nije konzistentan sa eksperimentalnim vrednostima transportnih koeficijenata koji su izmereni u PT eksperimentu De Urkiha i saradnika [130]. Na osnovu eksperimentalnih transportnih koeficijenata elektrona u čistom  $\text{CF}_3\text{I}$  i njegovim smešama sa argonom (Ar) i ugljen-dioksidom ( $\text{CO}_2$ ) koje je u PT eksperimentu izmerila grupa pomenutih autora, i skupa preseka Kimure i Nakamure [211] koji smo koristili kao inicijalan skup preseka, konstruisan je konačan skup preseka za rasejanje elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$  gasu primenom tehnike rojeva.

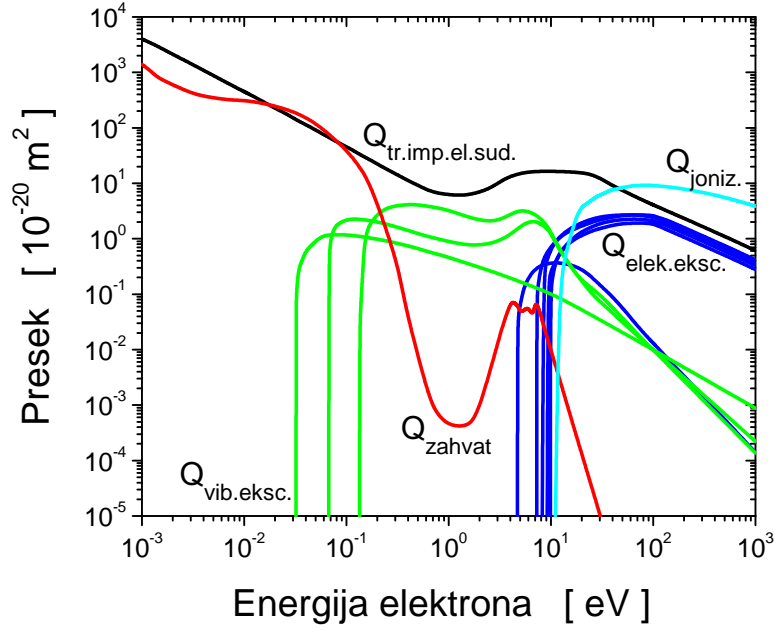
### 3.5 Konačan skup preseka za $\text{CF}_3\text{I}$

U cilju konstruisanja konačnog skupa preseka za rasejanje elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$ , modifikacija skupa preseka Kimure i Nakamure [211] izvršena je na sledeći način:

1. smanjena je veličina preseka za totalni transfer impulsa u opsegu [4, 20] eV, dok je na energijama manjim od  $10^{-2}$  eV presek izračunat metodom logaritamske ekstrapolacije,
2. svi preseki za elektronsku ekscitaciju su skalirani faktorom 1.17, nakon čega su dalje modifikovani,
3. povećan je presek za vibracionu ekscitaciju sa najvećim pragom u opsegu [4, 6] eV,
4. presek za zahvat elektrona je najpre dopunjen vrednostima autora Alajajian i saradnika [216] na najnižim energijama, dok je u opsegu [0.5, 3] eV izvršena rekonstrukcija preseka na osnovu predloženih podataka autora Kristoforou i Oltof [41],
5. za vrednosti preseka za jonizaciju na energijama većim od 45 eV uzeti su teorijski podaci Antonija i saradnika [217], dok je za energijski prag uzeta vrednost najnižeg jonizacionog kanala iz [218].

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

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



Slika 3.2: Skup preseka za rasejanje elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$ . Skup sadrži:  $Q_{tr.imp.el.sud.}$  presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, tri  $Q_{vib.eksc.}$  preseka za vibracionu ekscitaciju, pet  $Q_{elek.eksc.}$  preseka za elektronsku ekscitaciju,  $Q_{zahvat}$  presek za zahvat elektrona i  $Q_{joniz.}$  presek za jonizaciju.

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

### 3.5.1 Izračunavanje preseka za superelastične procese

U slučaju potrebe za izračunavanjem transportnih koeficijenata elektrona u gasu na nenuljoj temperaturi, osim preseka za rasejanje elektrona na atomima/molekulima gasa u osnovnom stanju, moraju se uzeti u obzir i sudari elektrona sa pobuđenim atomima/molekulima gasa. U ovim sudarima, elektroni mogu dobiti energiju od atoma/molekula pobuđenog gasa, a verovatnoća za ove procese je data presecima za superelastične sudare.

Kod jednostavnijih gasova, čiji molekuli imaju dipolan ili kvadrupolan moment, mogu se primeniti poznate teorije za izračunavanje preseka za superelastične sudarne procese (Takayanagi [219] i Gerjouy i Stein [220] teorija, respektivno). Za razliku od njih, kod komplikovanih gasova koji se ne mogu okarakterisati jednim od ovih momenata ili kod gasova za koje ne postoje podaci o fizičkim veličinama koje figurišu u izrazima ovih teorija, može se primeniti princip detaljnog balansa za izračunavanje preseka za superelastične procese.

Prema ovom principu, stopostotan presek za superelastičan proces  $q_S$  na energiji  $\varepsilon$  izračunava se na osnovu stopostotnog preseka za odgovarajuć neelastičan proces  $q_J$ :

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

$\varepsilon_J$  je energijski prag za dešavanje neelastičnog procesa dok su  $P_0$  i  $P_J$  statističke težine nultoj i  $J$ -tog nivoa respektivno, izračunate prema jednačini

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

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

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

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

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

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

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

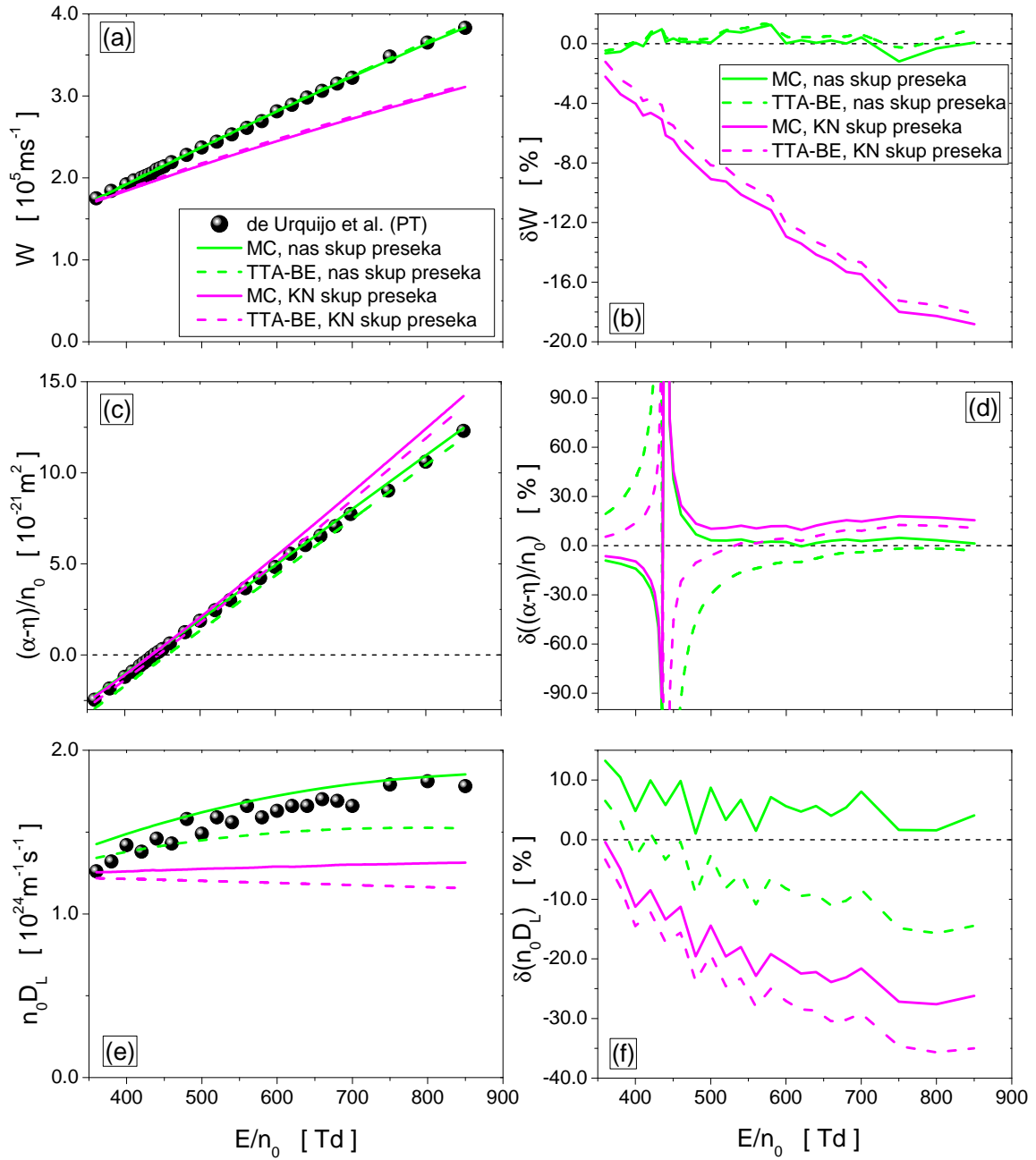
### 3.6 Transport elektrona u čistom CF<sub>3</sub>I na višim vrednostima redukovano električnog polja

U ovom potpoglavlju su prikazana poređenja izračunatih i eksperimentalno određenih transportnih koeficijenata elektrona u CF<sub>3</sub>I na onim vrednostima redukovano električnog polja ( $E/n_0$ ) na kojima postoje ovi eksperimentalni podaci.

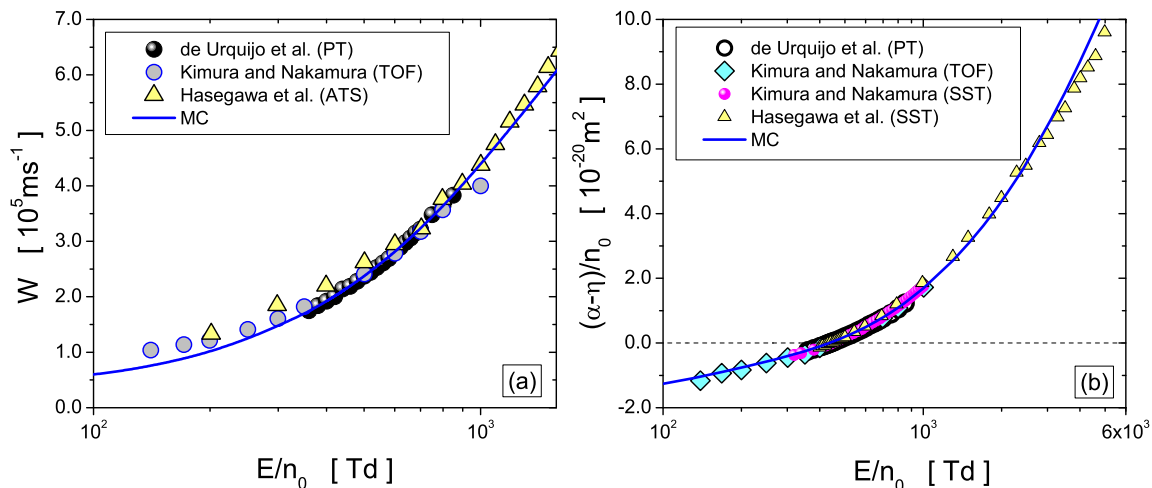
Kvalitet skupa preseka se utvrđuje upravo pomenutim poređenjima. Na levim panelima slike 3.3 prikazane su eksperimentalne vrednosti brzine drifta elektrona  $W$  (a), efektivnog koeficijenta jonizacije  $(\alpha - \eta)/n_0$  (c) i longitudinalnog koeficijenta difuzije  $n_0 D_L$  (e) u funkciji  $E/n_0$  izmerene u PT eksperimentu od strane De Urkiha i saradnika [130]. Osim ovih veličina, na istima panelima su prikazani i rezultati naših MC simulacija i TTA-BE rešenja, korišćenjem našeg skupa preseka i konačnog skupa preseka iz rada Kimure i Nakamure [211] (u oznaci *KN skup preseka*). Na odgovarajućim desnim panelima iste slike prikazana su procentualna odstupanja svih grupa naših proračuna od referentnih eksperimentalnih merenja.

Sa panela (a) se uočava da obe numeričke tehnike daju mnogo bolje slaganje sa eksperimentalnim  $W$  ukoliko se u proračunima koristi naš skup preseka za rasejanje elektrona u CF<sub>3</sub>I. Iskazano preko relativnog odstupanja, sa panela (b) se vidi da ono kreće u opsegu od 2%, dok u slučaju korišćenja KN skupa preseka odstupanje dostiže vrednost od blizu 20% na najvišim ispitivanim poljima. Brzina drifta elektrona je jako osetljiva na promenu preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima. Kako smo pri formiranju našeg skupa preseka smanjili vrednost  $Q_{tr.imp.el.sud.}$  u potrebnom opsegu energija, upravo se u njemu odgovarajućem intervalu polja povećala vrednost brzine drifta elektrona u odnosi na onu koju daje KN skup preseka.

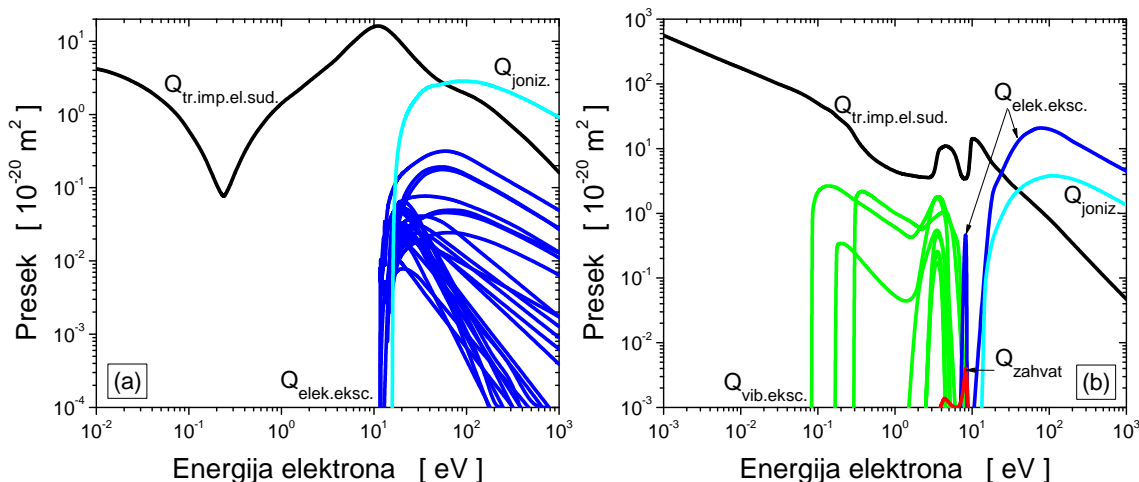
Sa panela (c) slike 3.3 vidi se da naš skup preseka bolje reprezentuje eksperimentalan koeficijent  $(\alpha - \eta)/n_0$  nego KN skup preseka. Ovo poboljšanje slaganja, koje je najuočljivije na poljima višim od 600 Td, postignuto je pri formiranju našeg skupa preseka: povećani su svi preseki za elektronsku ekscitaciju i presek za vibracionu ekscitaciju za najvišim pragom. Kako su u oblasti energija počevši od 4 eV povećani preseki u kojima elektroni gube svoju energiju dok je koeficijent zahvata ostao nepromenjen, smanjila se mogućnost dostizanja praga za jonizaciju CF<sub>3</sub>I molekula. Samim tim, opala je i vrednost efektivnog koeficijenta jonizacije elektrona u odnosu na vrednost koja se dobija KN skupom preseka. Procentualnim odstupanjima sa panela (d) numerički se potvrđuje poboljšanje slaganja sa eksperimentalnim rezultatima ukoliko se u proračunima koristi naš skup preseka za CF<sub>3</sub>I. Pored toga, sa istog panela se vidi i sledeće: ukoliko u proračunima koristimo naš skup preseka, MC numerička tehnika daće mnogo bolje slaganje sa eksperimentalnim  $(\alpha - \eta)/n_0$  (do 5%) u odnosu



Slika 3.3: Poređenje izračunatih i eksperimentalnih vrednosti brzine drifta  $W$ , efektivnog koeficijenta jonizacije  $(\alpha - \eta)/n_0$  i longitudinalnog koeficijenta difuzije  $n_0 D_L$  za elektrone u  $\text{CF}_3\text{I}$  u funkciji  $E/n_0$ . Paneli (a), (c) i (e) prikazuju poređenje izračunatih transportnih koeficijenata dobijenih polazeći od našeg skupa preseka i preseka Kimure i Nakamure sa eksperimentalnim vrednostima De Urkiha i saradnika, dok je na panelima (b), (d) i (f) prikazano procentualno odstupanje svih proračuna od eksperimentalnih podataka. Legenda sa panela (a) se odnosi i na panele (c) i (e), dok se legenda sa panela (b) odnosi i na panele (d) i (f).



Slika 3.4: Poređenje Monte Karlo proračuna sa dostupnim eksperimentalnim vrednostima brzine drifta elektrona (a) i efektivnog koeficijenta jonizacije (b) u  $\text{CF}_3\text{I}$  u funkciji  $E/n_0$  merenih u različitim eksperimentalnim postavkama.

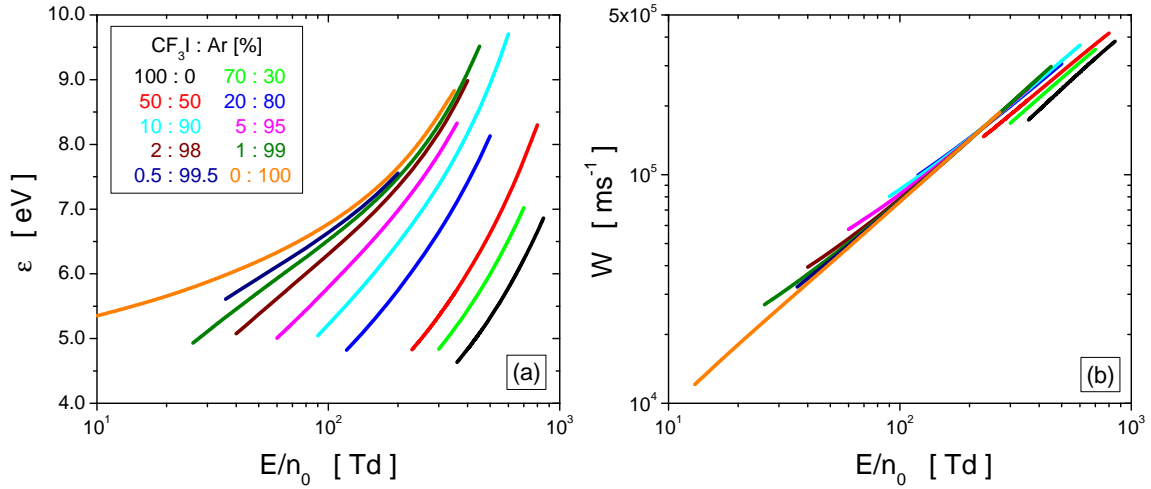


Slika 3.5: Skupovi preseka za rasejanje elektrona u argonu (a) i ugljen-dioksidu (b) konstruisanom za potrebe ove doktorske disertacije. Skup preseka za rasejanje elektrona u argonu sadrži presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, dvadeset pet preseka za elektronsku ekscitaciju i presek za jonizaciju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

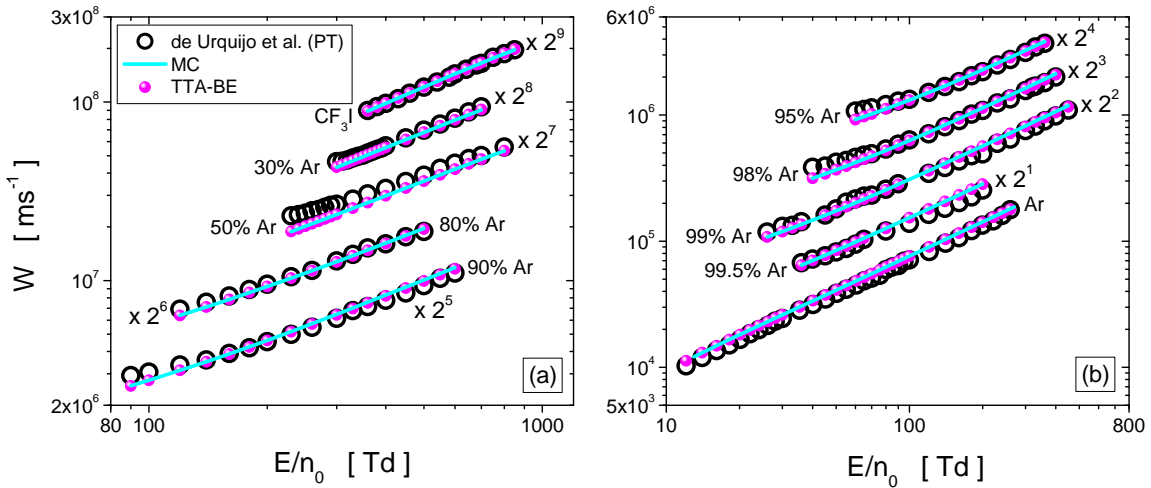
na TTA-BE tehniku. Velika procentualna odstupanja koja se javljaju u okolini nulte vrednosti efektivnog koeficijenta jonizacije nisu zabrinjavajuća jer su posledica malih razlika između izračunatih i izmerenih vrednosti ovog koeficijenta koji se međusobno razlikuju po apsolutnoj vrednosti.

Naš skup preseka za rasejanje elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$  u dobroj meri reprodukuje trend eksperimentalnih tačaka koeficijenta  $n_0 D_L$  (slika 3.3(e)). Dok se procentualna odstupanja rezultata KN skupa preseka u odnosu na referentna merenja (panel (f)) kreću do  $\sim 40\%$ , našim skupom preseka se redukuje ovo odstupanje na upola manju vrednost na najvišim ispitivanim poljima. Dodatno, ukoliko se kao numerička tehnika za proračun ovog koeficijenta koriste MC simulacije, odstupanje se kreće u granicama od  $10\%$ . Iako se ovo odstupanje čini velikim, treba imati na umu da se koeficijent difuzije uglavnom meri sa velikom eksperimentalnom greškom koja veoma često značajno prelazi vrednost od  $10\%$ . U svakom slučaju, na osnovu rezultata naših proračuna u čistom  $\text{CF}_3\text{I}$  gasu, prikazanim na

slici 3.3, zaključuje se da naš skup preseka na zadovoljavajuć način reprodukuje referentna eksperimentalna merenja De Urkiha i saradnika [130].



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



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

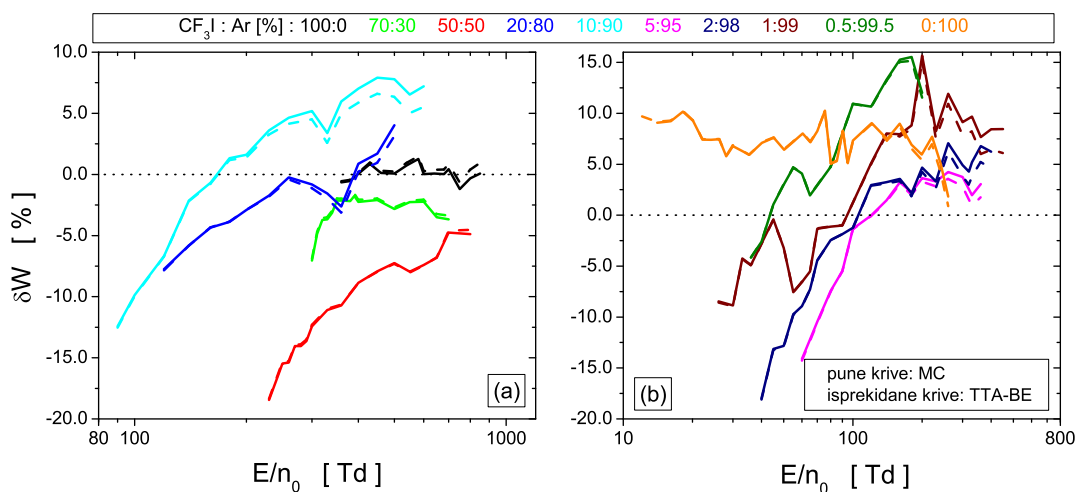
Osim transportnih koeficijenata elektrona u  $CF_3I$  izmerenih PT eksperimentom [130], koji su iskorišćeni za dobijanje našeg skupa preseka, u literaturi se mogu naći i drugi eksperimentalni podaci. Na slici 3.4 je prikazano poređenje MC rezultata brzine drifta i efektivnog koeficijenta jonizacije u  $CF_3I$  (dobijenih našim skupom preseka) sa merenjima u različitim eksperimentima. Brzine drifta elektrona izračunate našim MC simulacijama dobro reprezentuju eksperimentalne podatke svih prikazanih autora (panel (a)). Na poljima nižim od 800 Td, slaganje naših rezultata sa merenjima Kimure i Nakamure u TOF eksperimentu je unutar 20%, dok se nešto lošije slaganje postiže sa rezultatima Hasegave i saradnika postignutim ATS eksperimentom (do 25%). Na poljima višim od 800Td je poboljšano slaganje između rezultata naših proračuna i podataka Hasegave i saradnika (manje od 2.5%). Efektivan koeficijent jonizacije (panel (b)) prati trend svih prikazanih eksperimentalnih rezultata. Na poljima



nižim od 400 Td, naši MC rezultati odstupaju za manje od 7.5% od merenja Kimure i Nakamure u TOF eksperimentu odnosno za manje od 6% u odnosu na merenja istih autora ali u SST eksperimentu. Odstupanje od merenja Hasegave i saradnika iznosi maksimalno 9%.

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

U ovom potpoglavlju je analiziran transport elektrona u smešama  $\text{CF}_3\text{I}$  gasa sa Ar i  $\text{CO}_2$ . Rezultati MC i TTA-BE proračuna su upoređeni sa merenjima De Urkiha i saradnika u PT eksperimentu. Korišćen je skup preseka za rasejanje elektrona u Ar koji je razvio Hajaši i koji je dostupan na LxCat bazi podataka [221] (slika 3.5(a)). Što se tiče skupa preseka za rasejanje elektrona u  $\text{CO}_2$ , modifikovali smo inicijalan skup preseka koji su razvili Felps i saradnici [222] (slika 3.5(b)) primenom tehnike rojeva kako bi dobili dobro slaganje sa referentnim merenjima De Urkiha i saradnika izmerenim u PT eksperimentu [196].



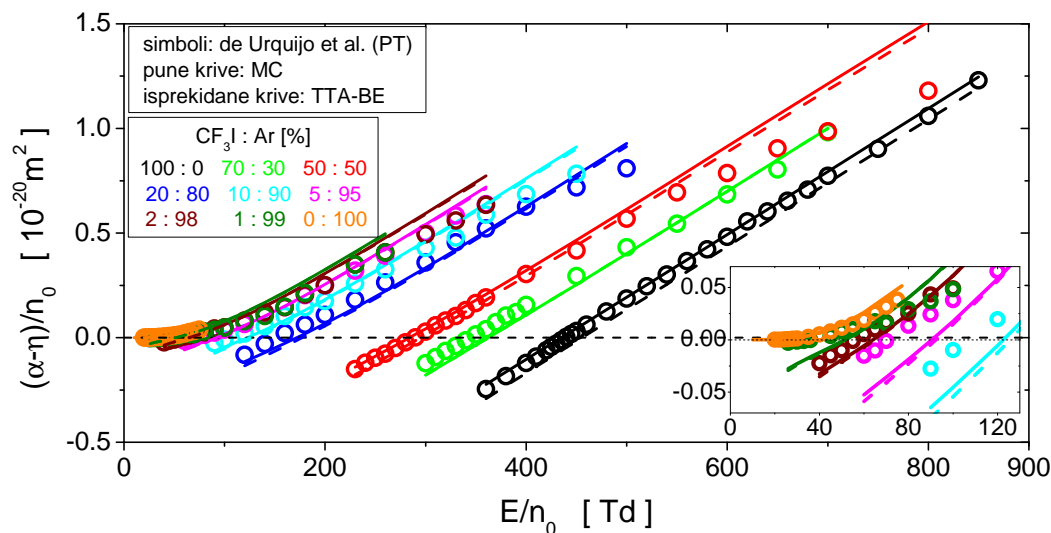
Slika 3.8: Procentualno odstupanje brzine drifta elektrona u  $\text{CF}_3\text{I-Ar}$  smešama od eksperimentalnih podataka De Urkiha i saradnika izmerenih u PT eksperimentu. Proračuni su izvršeni na osnovu Monte Karlo simulacija i rešavanja Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Panel (a) prikazuje rezultate u smešama sa koncentracijom Ar do 90% dok panel (b) prikazuje rezultate u smešama sa većom koncentracijom Ar. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).

#### 3.7.1 $\text{CF}_3\text{I-Ar}$ smeša

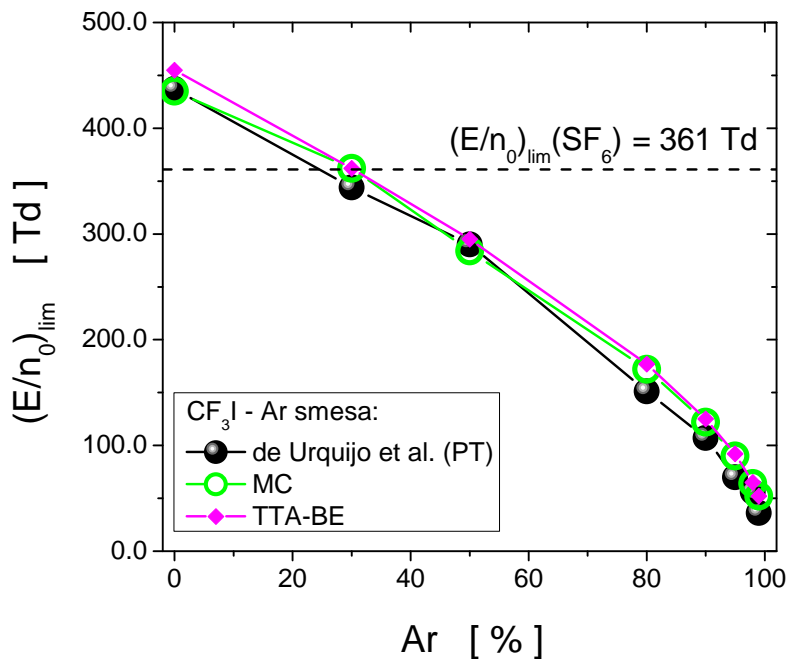
Na slici 3.6 su prikazane srednja energija i brzina drifta elektrona u  $\text{CF}_3\text{I-Ar}$  smešama u funkciji  $E/n_0$ . U pitanju su rezultati MC simulacija koji su, za svaku od smeša, izračunati u opsegu polja u kojima postoje eksperimentalni podaci za  $W$  i  $(\alpha-\eta)/n_0$ . Sa panela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

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

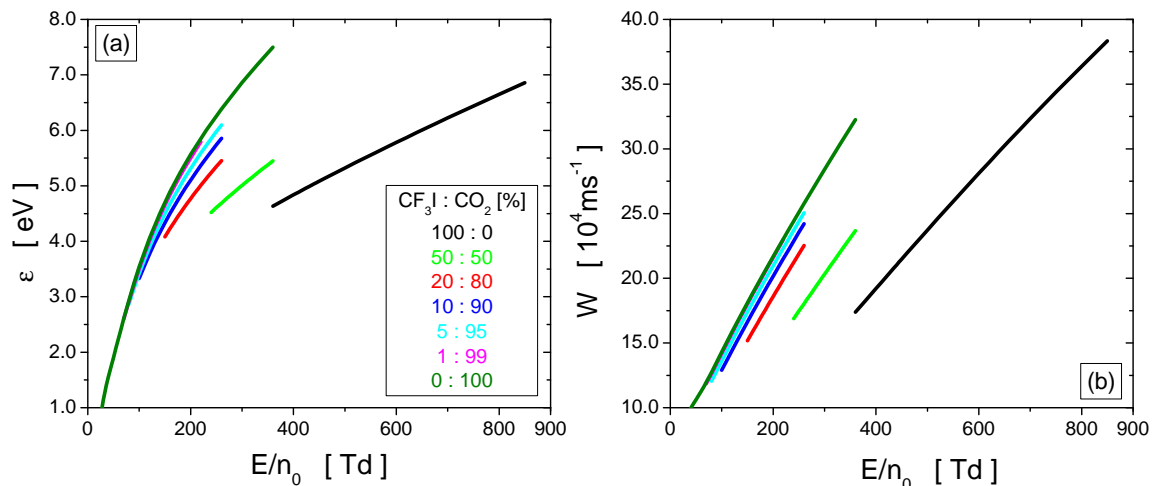
proračuna od eksperimentalnih vrednosti brzina drifta elektrona. Na osnovu svih prikazanih gasnih smeša vidi se da se odstupanja kreću u opsegu (-20, 15)%. Pre svega, ovo odstupanje je posledica skupa preseka za rasejanje elektrona u Ar (slika 3.5(a)) koji ne reprodukuje merenja autora sa kojim se poredimo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



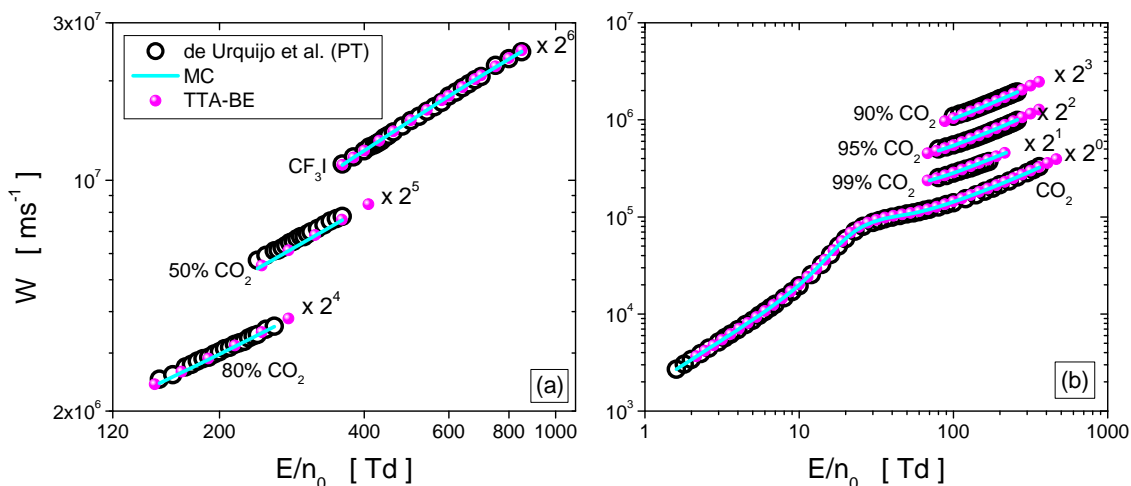
Slika 3.9: Efektivan koeficijent jonizacije u  $\text{CF}_3\text{I}$ -Ar smešama u funkciji  $E/n_0$ . Eksperimentalne vrednosti De Urkiha i saradnika su upoređene sa našim proračunima Monte Karlo metodom i rešenjima Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana.



Slika 3.10: Kritično polje gasne smeše  $\text{CF}_3\text{I}$ -Ar u funkciji koncentracije  $\text{CF}_3\text{I}$  gasa. Rezultati su dobijeni na osnovu eksperimentalnih i numerički izračunatih efektivnih jonizacionih koeficijenata elektrona u funkciji  $E/n_0$  prikazanih na slici 3.9.



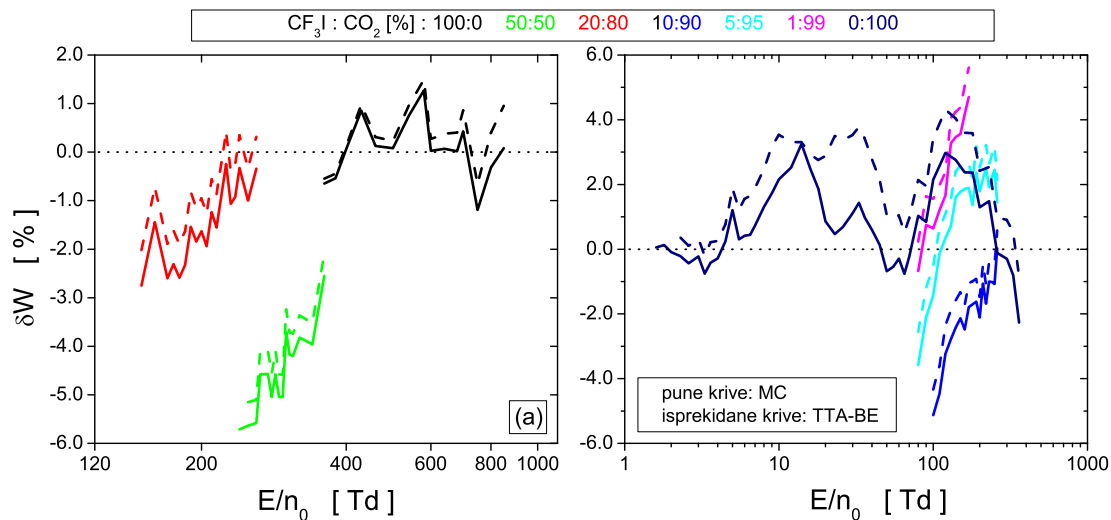
Slika 3.11: Srednja energija (a) i brzina drifta elektrona (b) u  $\text{CF}_3\text{I}-\text{CO}_2$  smešama u funkciji  $E/n_0$  izračunate Monte Karlo simulacijama. Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panel (b).



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

Slika 3.9 prikazuje efektivan koeficijent jonizacije u  $\text{CF}_3\text{I}-\text{Ar}$  smešama u funkciji  $E/n_0$ . Rezultati MC i TTA-BE numeričkih proračuna su prikazani zajedno sa eksperimentalnim podacima De Urkiha i saradnika. Procentualna odstupanja ova dva skupa rezultata u odnosu na eksperimentalne vrednosti su namerno izostavljena radi preglednosti. Naime, u okolini nulte vrednosti efektivnog koeficijenta jonizacije javljaju se velika procentualna odstupanja, slično kao na slici 3.3. Ona bi, uz veliki broj krivih koje se odnose na svaku od posmatranih smeša, uticale na napreglednost rezultata i davale pogrešan utisak o kvalitetu dobijenih rezultata. Sa slike 3.9 se vidi da se međusobno slaganje proračuna sa referentnim merenjima poboljšava sa opadanjem koncentracije Ar na vrednosti niže od 50%. U tim smešama su adekvatno reprodukovane i vrednosti  $(E/n_0)_{lim}$  tj. polja u kojima koeficijent  $(\alpha - \eta)/n_0$  prolazi kroz nulu. Kada koncentracija Ar u smeši postane veća od 50%, ne samo da slaganje proračuna sa merenjima postaje lošije već se i izračunate vrednosti  $(E/n_0)_{lim}$  znatno razlikuju od onih koje se dobijaju na osnovu eksperimentalnih koeficijenata  $(\alpha - \eta)/n_0$  (videti umetnut panel slike 3.9). Iako je osnovni uzrok neslaganja naših proračuna sa referentnim merenjima posledica či-

njenice da Hajašijev skup preseka za Ar ne reprodukuje De Urkihova merenja u ovom plemenitom gasu, pažljivije podešavanje preseka za neelastične sudarne procese elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$  u kombinaciji sa unapređenim skupom preseka za rasejanje elektrona u Ar bi uticalo na poboljšanje stepena slaganja između izračunatih i izmerenih vrednosti  $(\alpha - \eta)/n_0$ .



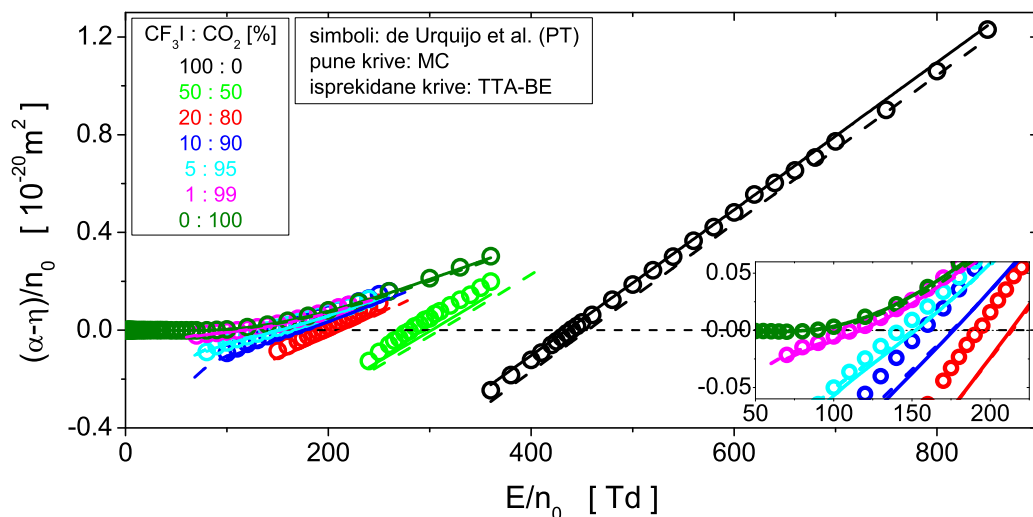
Slika 3.13: Procentualno odstupanje brzine drifta elektrona u  $\text{CF}_3\text{I-CO}_2$  smešama od eksperimentalnih podataka De Urkiha i saradnika izmerenih u PT eksperimentu. Proračuni su izvršeni na osnovu Monte Karlo rezultata i rešenja Bolzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Panel (a)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

Na slici 3.10 su prikazane vrednosti  $(E/n_0)_{lim}$  koje su određene na osnovu rezultata prikazanih na slici 3.9. Kritično električno polje smeše raste sa opadanjem koncentracije Ar u  $\text{CF}_3\text{I}$ . Može se primetiti da pri dostizanju koncentracije Ar od 25% (prema eksperimentalnim podacima) odnosno od 30% (prema proračunima),  $(E/n_0)_{lim}$  smeše postaje uporedivo sa vrednošću koja se odnosi na čist  $\text{SF}_6$ . Kako je jedan od osnovnih ciljeva ove doktorske disertacije potraga za adekvatnom zamenom  $\text{SF}_6$  u ulozi gasnog dielektrika u sistemima za prenos električne struje, na osnovu ovog rezultata se zaključuje da smeša sa približno 30% Ar u  $\text{CF}_3\text{I}$  ima dielektrične osobine jednake  $\text{SF}_6$  gasu, bar u pogledu vrednosti kritičnog električnog polja.

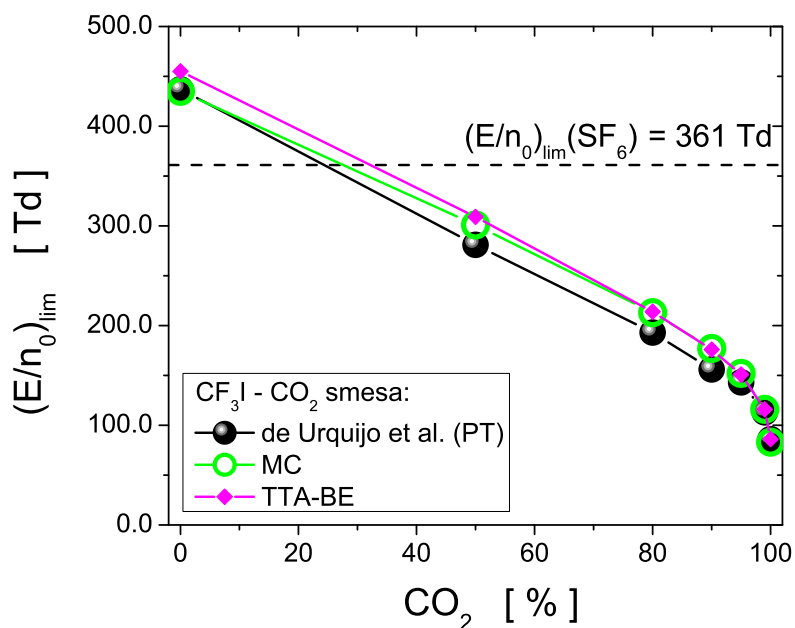
### 3.7.2 $\text{CF}_3\text{I-CO}_2$ smeša

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

Na slici 3.12 su prikazani isti rezultati kao na slici 3.11(b), samo što su u ovom slučaju svi rezultati skalirani faktorom  $2^n$ . Na slici 3.13 je prikazano procentualno odstupanje naših MC i TTA-BE brzina drifta elektrona u  $\text{CF}_3\text{I-CO}_2$  smešama u odnosu na eksperimentalne rezultate De Urkiha i saradnika. Za razliku od  $\text{CF}_3\text{I-Ar}$  smeše, u ovom slučaju je ostvareno mnogo bolje slaganje proračuna sa referentnim podacima: procentualna odstupanja se kreću u opsegu (-6, 4)%. Ovo malo odstupanje je posledica fitovanja skupa preseka za  $\text{CO}_2$  (slika 3.5(b)) upravo na eksperimentalne podatke De Urkiha i saradnika.



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



Slika 3.15: Kritično polje gasne smeše  $\text{CF}_3\text{I}-\text{CO}_2$  u funkciji koncentracije  $\text{CF}_3\text{I}$  gasa. Rezultati su dobijeni na osnovu eksperimentalnih i numerički izračunatih efektivnih jonizacionih koeficijenata elektrona u funkciji  $E/n_0$  prikazanih na slici 3.14.

Slika 3.14 prikazuje efektivan koeficijent jonizacije u smešama  $\text{CF}_3\text{I}$  i  $\text{CO}_2$  u funkciji  $E/n_0$ . Pored naših MC i TTA-BE proračuna, prikazane su i referentne eksperimentalne vrednosti ovog koeficijenta. Ukoliko se zanemare veća odstupanja u okolini  $(E/n_0)_{lim}$  (videti umetnut panel), vidi se da su odstupanja u okviru 10% u smešama sa koncentracijom  $\text{CO}_2$  višom od 90%. Zbog istog razloga kao u slučaju gasne smeše  $\text{CF}_3\text{I}-\text{Ar}$ , izostavljena je slika sa prikazom procentualnih odstupanja između izračunatih i izmerenih vrednosti efektivnih koeficijenata jonizacije. Kvalitet dobijenih rezultata se može tumačiti na osnovu slike 3.15 na kojoj je prikazano kritično električno polje u  $\text{CF}_3\text{I}-\text{CO}_2$  smešama u funkciji  $E/n_0$  određeno na osnovu rezultata sa slike 3.14. Kao i u slučaju smeše  $\text{CF}_3\text{I}-\text{Ar}$ ,

uočava se da se pri određenoj koncentraciji  $\text{CO}_2$  u smeši nadmašuje kritično polje  $\text{SF}_6$ . Smanjujući koncentraciju  $\text{CO}_2$  u smeši na 25% (na osnovu eksperimentalnih podataka), 28% (na osnovu MC proračuna) odnosno 32% (na osnovu TTA-BE proračuna), gasna smeša postaje uporediva sa  $\text{SF}_6$  gasom po pitanju mogućnosti sprečavanja razvoja električnog proboja u gasu.

### 3.8 Zaključak

Ovo poglavlje je posvećeno ispitivanju transporta elektrona u trifluorometil-jodidu ( $\text{CF}_3\text{I}$ ) u opsegu redukovanih električnih polja u kome postoje eksperimentalni rezultati. Jedan od najvažnijih doprinosa ovog poglavlja je razvoj skupa preseka za rasejanje elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$ . Primenjena je tehnika rojeva, navedene su njene prednosti i nedostaci, uz načine za prevazilaženje ovih nedostataka. Kvalitet razvijenog skupa preseka je potvrđen dobrim slaganjima naših proračuna sa rezultatima merenja u PT eksperimentu kako u čistom gasu tako i u smešama sa Ar i  $\text{CO}_2$ . Proračuni su vršeni numeričkim kodovima MC i TTA-BE razvijenim u našoj laboratoriji.

Pored razvoja skupa preseka za ovaj gas, u cilju proračuna transportnih koeficijenata elektrona u  $\text{CF}_3\text{I-CO}_2$  smešama, modifikovan je inicijalan skup preseka za rasejanje elektrona u  $\text{CO}_2$  sa ciljem boljeg slaganja sa PT merenjima De Urkiha i saradnika.

Kvalitet razvijenog skupa preseka za rasejanje elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$  gasu je potvrđen i na osnovu dobrog slaganja kritičnog električnog polja različitih  $\text{CF}_3\text{I-Ar}$  i  $\text{CF}_3\text{I-CO}_2$  smeša određenih na osnovu naših proračuna sa vrednostima određenim na osnovu ekperimentalnih podataka. Uočeno je da, u slučaju obe ispitivane gasne smeše, sa koncentracijom Ar ili  $\text{CO}_2$  nižom od  $\sim 30\%$  dielektrične osobine gasne smeše postaju uporedive sa  $\text{SF}_6$ , ukoliko se kao kriterijum poređenja dielektričnih osobina razmatraju isključivo vrednosti  $(E/n_0)_{lim}$ .

# Poglavlje 4

## Tehnike reskaliranja rojeva elektrona u Monte Karlo simulacijama

### 4.1 Uvod

Ovo poglavlje je posvećeno Monte Karlo simulacijama transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima. U cilju pravilnog opisa transporta elektrona u oblastima električnog polja u kojima zahvat elektrona kontroliše ponašanje roja, neophodno je primeniti tehnike reskaliranja rojeva elektrona. Objasnjene su tri tehnike koje su implementirane u naš MC kod: tehnika diskretnog reskaliranja, tehnika dupliranja roja i tehnika kontinualnog reskaliranja, razvijena za potrebe ove doktorske disertacije. Transport elektrona je proučavan u jako elektronegativnim gasovima SF<sub>6</sub> i CF<sub>3</sub>I, primenom ove tehnike za reskaliranje. Sa ciljem verifikacije i provere numeričkog integriteta ovih tehnika, rezultati MC simulacija su upoređeni sa rezultatima javno dostupnog koda BOLSIG+, namenjenog rešavanju Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana.

### 4.2 Efekti zahvata elektrona i tehnike reskaliranja

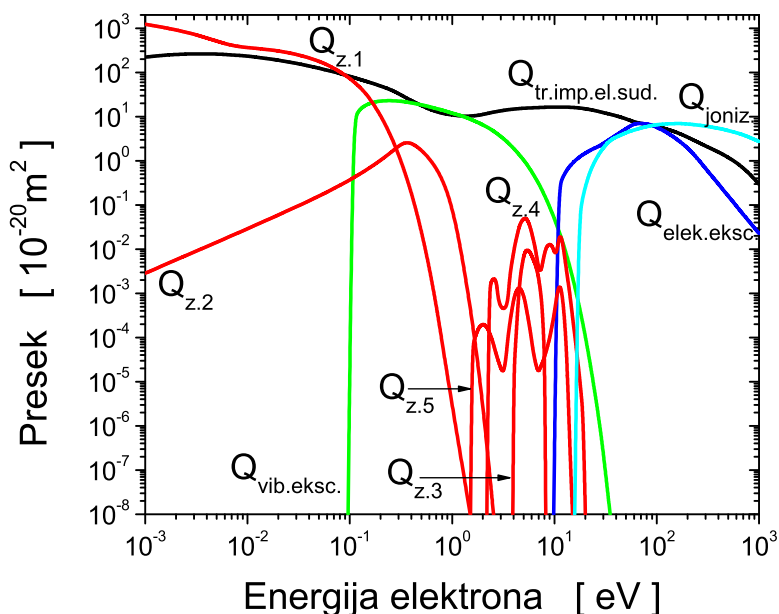
Intenzivan gubitak slobodnih elektrona u jako elektronegativnim gasovima indukuje čitav spektar karakterističnih fenomena. Neki od njih su grejanje i hlađenje roja elektrona [71, 176], negativna apsolutna fluks mobilnost [69, 70], anomalni fazni pomeraj brzine drifta u vremenski promenljivim električnim poljima [72], negativna diferencijalna provodnost (engl. *negative differential conductivity*, NDC) [62] kao i dualnost transportnih koeficijenata elektrona [9, 13, 63, 223]. Poslednji od nabrojanih fenomena se ogleda u postojanju dve različite familije transportnih koeficijenata elektrona, balk i fluks koeficijenata. Njihova razlika, koja je posledica eksplicitnih efekata procesa jonizacije i zahvata elektrona, može iznositi od nekoliko procenata do nekoliko redova veličina. Zbog toga je neophodna velika pažnja pri korišćenju transportnih koeficijenata elektrona u modelovanju električnih gasnih pražnjenja.

U literaturi se mogu pronaći transportni koeficijenti elektrona u SF<sub>6</sub> gasu i njegovim smešama koji su izračunati numeričkim rešavanjem Bolcmanove jednačine [40, 224–230]. Nedavno su objavljeni transportni koeficijenti elektrona u CF<sub>3</sub>I gasu koji su takođe dobijeni na osnovu numeričkih rešenja Bolcmanove jednačine [231, 232]. U većini slučajeva, ovi transportni koeficijenti su izračunati na osnovu aproksimacije dva člana za rešavanje Bolcmanove jednačine zanemarujući eksplicitne efekte zahvata elektrona. Na ovaj način, transport elektrona je analiziran isključivo na osnovu fluks transportnih koeficijenata. Takođe, ove teorije zanemaruju eksplicitne efekte procesa zahvata elektrona, čime je transport elektrona uglavnom analiziran na osnovu fluks podataka. U slučaju SF<sub>6</sub>, u literaturi se ne mogu pronaći podaci na poljima nižim od 50 Td. Momentna metoda za rešavanje BE [9, 53] takođe nailazi na velike poteškoće. One su posebno izražene u uslovima intenzivnih gubitaka elektrona malih energija čime se indukuje porast srednje energije roja, odnosno nastaje tzv. grejanje zahvatom (engl. *attachment heating*). Pod ovim uslovima, centar mase roja je pomeren ka višim energijama, javlja se porast broja elektrona na začelju funkcije raspodele čiji profil dobija oblik koji se u značajnoj meri razlikuje od ravnotežnog Maksvelijana. Ovo je upravo slučaj koji se javlja kod jako elektronegativnih gasova SF<sub>6</sub> i CF<sub>3</sub>I u opsegu niskih vrednosti  $E/n_0$ . Pri ovim ekstremnim uslovima, momentna metoda za rešavanje BE zahteva veliki broj bazisnih funkcija za opis brzinske zavisnosti funkcije raspodele, imajući u vidu velika odstupanja ove funkcije od Maksvelijana i/ili ne-realno dugo vreme izračunavanja transportnih koeficijenata elektrona. Rešavanje ovih problema nije moguće u okviru standardnih numeričkih procedura koje su implementirane za rešavanje Bolcmanove jednačine.

Zbog prethodno navedenih razloga, istraživanje koje je prikazano u ovom poglavlju disertacije u svom najvećem delu ograničeno je na Monte Karlo metodu. U literaturi se mogu naći rezultati ovih simulacija koji se odnose na smeše SF<sub>6</sub> [226, 233–236] i CF<sub>3</sub>I [237] sa drugim gasovima u cilju poboljšanja dielektričnih karakteristika smeša gasova. Međutim, i simulacije bazirane na MC metodi se susreću sa poteškoćama pri analizi transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima. Ovo je posebno izraženo u oblasti niskih  $E/n_0$ , u kojoj dominira proces zahvata elektrona. Broj elektrona u roju jako opada, čime se drastično povećavaju fluktuacije veličina koje se izračunavaju ovom tehnikom. Fluktuacije postaju tako izražene da se sumnja u validnost rezultata simulacija, dok u ekstremnim situacijama dolazi do prekida simulacije zbog nestanka svih elektrona pre uspostavljanja stacionarnog stanja. Kao jedan od načina rešavanja ovog problema nameće se ideja o zadavanju velikog broja inicijalnih elektrona u simulaciji. Međutim, ovim se drastično povećava računsko vreme kao i potreba za memorijskim resursima. U cilju zadržavanja računarskih resursa na optimalnom nivou, istraživači su razvili dve tehnike za kompenzaciju zahvaćenih elektrona. Prva tehnika se svodi na dodavanje novih elektrona u roj putem uniformnog skaliranja postojećih elektrona u roju u određenim vremenskim koracima u hidrodinamičkim uslovima [58, 71] ili u određenim prostornim koracima u uslovima SST eksperimenta [70]. Dodavanje novih elektrona u roj se vrši onda kada njihov broj dostigne unapred zadatu minimalnu vrednost. Drugu grupu tehnika čine one kojima se broj elektrona u roju održava približno konstantnim u toku celokupnog trajanja simulacije tako što se reskaliranje vrši pre nego što se dostigne minimalna broj elektrona. Ovakvo reskaliranje je obezbeđeno implementacijom fiktivnog procesa jonizacije u skup preseka za rasejanje elektrona u posmatranom gasu. Koliziona frekvencija ovog procesa se bira tako da koeficijent jonizacije fiktivnog procesa bude približno jednak koeficijentu zahvata elektrona [233]. Važno je imati na umu da se analogno reskaliranje može primeniti kod gasova sa izraženim presecima za jonizaciju kod kojih broj elektrona u roju značajno nadmašuje unapred zadatu vrednost maksimalnog broja elektrona [238]. U prvoj grupi tehnika reskaliranja se nalaze tehnika diskretnog reskaliranja elektrona i tehnika dupliranja roja, dok drugoj grupi pripada tehnika kontinualnog reskaliranja elektrona.

Jedan od ciljeva ovog poglavlja disertacije je opis modifikacija tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona koju su razvili Jusfi i saradnici [233]. Modifikacija se odnosi na definisanje vremenski zavisne koliziona frekvencije fiktivnog procesa jonizacije. Poboljšanje u odnosu na postojeću tehniku se ogleda u simultanom podešavanju koliziona frekvencije fiktivnog procesa u svakom vremenskom





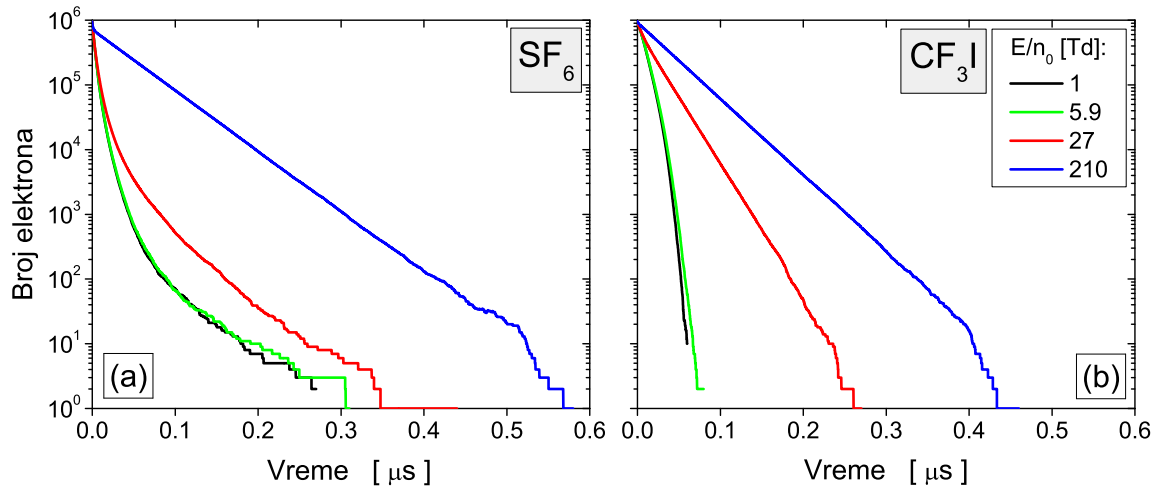
Slika 4.1: Skup preseka za rasejanje elektrona u SF<sub>6</sub> gasu [227]. Skup sadrži:  $Q_{mom.tr.el.sud.}$  presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima,  $Q_{vib.eksc.}$  presek za vibracionu ekscitaciju,  $Q_{elek.eksc.}$  presek za elektronsku ekscitaciju,  $Q_{z.1}$  presek za formiranje jona SF<sub>6</sub><sup>-</sup> pri zahvatu elektrona,  $Q_{z.2}$  presek za formiranje jona SF<sub>5</sub><sup>-</sup> pri zahvatu elektrona,  $Q_{z.3}$  presek za formiranje jona F<sub>2</sub><sup>-</sup> pri zahvatu elektrona,  $Q_{z.4}$  presek za formiranje jona F<sup>-</sup> pri zahvatu elektrona,  $Q_{z.5}$  presek za formiranje jona SF<sub>4</sub><sup>-</sup> pri zahvatu elektrona i  $Q_{joniz.}$  presek za jonizaciju.

koraku, čime se obezbeđuje da se trenutni broj elektrona u roju ne razlikuje za više od ~10% u odnosu na inicijalna broj elektrona. Važno je naglasiti da je naša tehnika kontinualnog reskaliranja elektrona detaljno testirana [73] i da njenom primenom ne dolazi do perturbacije funkcije raspodele elektrona po energijama kao ni njene prostorne ni vremenske evolucije.

### 4.3 Skupovi preseka i uslovi simulacija

U našim istraživanjima je korišćen skup preseka za rasejanje elektrona u SF<sub>6</sub> koji su razvili Ito i saradnici [227] (slika 4.1). Ovaj skup je inicijalno bio baziran na publikovanim eksperimentalnim presecima za individualne sudarne procese nakon čega je modifikovan tehnikom rojeva u cilju postizanja boljeg slaganja između izračunatih i izmerenih transportnih koeficijenata elektrona u ovom gasu. Za izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona u CF<sub>3</sub>I korišćen je skup preseka razvijen u našoj laboratoriji za potrebe ove doktorske disertacije [239] (slika 3.2).

Smatra se da su svi individualni sudarni procesi elektrona u SF<sub>6</sub> i CF<sub>3</sub>I izotropni pa presek za elastično rasejanje elektrona odgovara preseku za transfer impulsa u elastičnim sudarima. Simulacije su vršene u opsegu redukovanih električnih polja od 1 Td do 1000 Td. Pritisak pozadinskog gasa je 1 Torr, dok je temperatura 300 K. U našem MC kodu posebna pažnja je posvećena adekvatnom opisu termalnog kretanja molekula pozadinskog gasa i njihovom uticaju na elektrone. Ovo je izuzetno značajno u oblasti niskih polja, u kojoj je srednja energija elektrona uporediva sa termalnom energijom pozadinskog gasa [240].



Slika 4.2: Opadanje broja elektrona u funkciji vremena u SF<sub>6</sub> (a) i CF<sub>3</sub>I (b). Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama na različitim vrednostima spoljašnjeg redukovanoeg električnog polja su dobijeni bez primene tehnika reskaliranja elektrona. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panle (a).

#### 4.4 Tehnike reskaliranja elektrona

Neophodnost primene tehnika reskaliranja elektrona u MC simulacijama pri ispitivanju jako elektronegativnih gasova može se objasniti rezultatima sa slike 4.2. Na njoj je prikazano opadanje broja elektrona u funkciji vremena u SF<sub>6</sub> i CF<sub>3</sub>I pri evoluciji roja elektrona. U pitanju su rezultati MC simulacija dobijeni bez korišćenja tehnika reskaliranja elektrona. Inicijalan broj elektrona je 10<sup>6</sup>, dok se proračuni odnose na različite vrednosti  $E/n_0$ . Kod oba gasa se primećuje da je opadanje broja elektrona najintenzivnije na najnižem ispitivanom  $E/n_0$  kome odgovaraju male vrednosti srednje energije elektrona. Ovo je jasan pokazatelj da koliziona frekvenca za zahvat elektrona raste sa opadanjem  $E/n_0$ . Neutralni molekuli CF<sub>3</sub>I gasa kontinualno zahvataju slobodne elektrone pri čemu njihov broj eksponencijalno opada sa vremenom. Ista zavisnost je vidljiva i kod SF<sub>6</sub> na 210 Td, dok se na nižim ispitivanim poljima javlja brže opadanje broja slobodnih elektrona. Upoređivanjem gasova SF<sub>6</sub> i CF<sub>3</sub>I zaključuje se da je zahvat elektrona dominantiji u SF<sub>6</sub> u ranijim fazama simulacije. Za razliku od ovoga, u poslednjoj fazi simulacije, pre gubitka svih elektrona iz roja, njihov broj se intenzivnije smanjuje u CF<sub>3</sub>I. U svakom slučaju, kod oba gasa dolazi do gubitka svih slobodnih elektrona pre uspostavljanja stacionarnog režima, čime se simulacija zaustavlja. Broj elektrona opada za šest redova veličina u vremenskom intervalu kraćem od 0.6  $\mu$ s kod oba ispitivana jako elektronegativna gasa.

U cilju kompenzacije efekata snažnog procesa zahvata elektrona, u naš MC kod (poglavlje 2.6) su implementirane tri tehnike reskaliranja elektrona:

1. Tehnika zasnovana na uniformnom generisanju novih elektrona čije se inicijalne karakteristike biraju na osnovu preostalih elektrona iz roja. Na ovaj način se održava već postignuta ravnoteža [58]. Kako bi ova procedura bila efikasna, tj. kako bi se izbegli gubici populacija elektrona iz uskih opsega energija, dozvoljeno je odstupanje broja elektrona u roju u intervalu između  $N_1$  i  $N_0$ , pri čemu važi da je  $N_1 > N_0$ , dok je njihova razlika relativno mala.  $N_0$  je minimalan dozvoljeni broj elektrona u simulaciji a  $N_1$  je maksimalan dozvoljeni broj elektrona u simulaciji nakon reskaliranja broja elektrona;

2. Tehnika zasnovana na uniformnom skaliranju roja elektrona faktorom 2 ili 3 u određenim vremenskim [71] ili prostornim [70] koracima u zavisnosti od uslova simulacije. Verovatnoća skaliranja svakog pojedinačnog elektrona je jednaka jedinici;

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

elektorna u ispitivanom gasu [233, 238]. Koliziona frekvencija ovog procesa je konstantna i približno jednaka kolizionoj frekvenciji procesa zahvata elektrona. Reskaliranje elektrona se vrši uniformnim dupliranjem postojećih elektrona u roju. Novi (dupliran) elektron dobija iste početne karakteristike (koordinate, brzinu, energiju) kao elektron čijom je duplikacijom nastao, dok se njegova prostono-vremenska evolucija odvija na osnovu nezavisno odabranih slučajnih brojeva.

Poređenjem prve dve tehnike reskaliranja vidi se da među njima ne postoji suštinska razlika. Jedina razlika se ogleda u činjenici da se dupliranje elektrona u drugoj tehnici vrši nad svim elektronima u roju, dok se verovatnoća dupliranja elektrona kod prve tehnike određuje na osnovu razlike između željenog i trenutnog broja elektrona u roju pri čemu se željeni broj elektrona unapred zadaje. Sa druge strane, fiktivnim procesom jonizacije iz treće tehnike reskaliranja generiše se novi elektron na istoj poziciji i sa istom energijom i brzinom kao elektron na osnovu koga je dupliran ali koji ne mora nužno biti elektron koji je zahvaćen od strane jako elektronegativnog gasa. Prvu tehniku reskaliranja nazvaćemo *diskretno reskaliranje* pošto se tehnika primenjuje u diskretnim vremenskim koracima. Druga tehnika biće nazvana *dupliranje roja*, dok treću tehniku imenujemo kao *kontinualno reskaliranje* ne bismo li istakli da se reskaliranje elektrona u roju vrši u toku celokupnog trajanja simulacije. Neophodan zahtev koji tehnike reskaliranja moraju obezbediti jeste odsustvo perturbacije funkcije raspodele ni njene evolucije. Li i saradnici [238] su pokazali da tehnika kontinualnog reskaliranja obezbeđuje ovaj zahtev. Ukoliko se tehnika diskretnog reskaliranja elektrona primenjuje nad simetričnom situacijom okarakterisanom velikim porastom broja elektrona u roju usled intenzivne jonizacije, ne bi se sa sigurnošću moglo zaključiti da je reskalirana funkcija raspodele dobra reprezentacija originalne raspodele [241]. Ovo je, naravno, obezbeđeno kada je uspostavljeno stacionarno stanje [242].

Ukoliko analizirano tehniku kontinualnog reskaliranja a vodimo se radovima Jusfi i saradnika [233] i Lija i saradnika [238], Boltzmanova jednačina za faznu funkciju raspodele  $f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$  bez reskaliranja i funkcija  $f^*(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t)$  sa reskaliranjem dobija oblik:

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

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

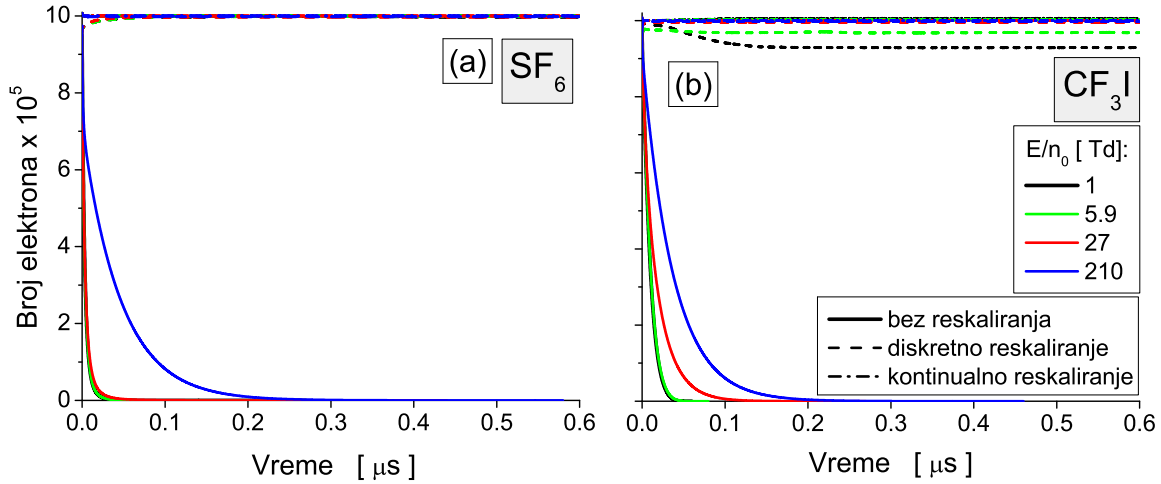
pri čemu je  $\mathbf{a}$  ubrzanje usled spoljašnjeg polja,  $\mathbf{c}$  je vektor brzine,  $J(f)$  je kolizioni operator koji opisuje sudare između elektrona i neutrala, dok je  $\nu_{fi}$  vremenski zavisani brzinski koeficijent fiktivnog procesa jonizacije. Ukoliko je kolizioni operator linearan,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

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

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

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

Za razliku od Lija i saradnika [238], koliziona frekvencija fiktivnog procesa jonizacije je sada vremenski zavisna funkcija. U smislu numeričke implementacije, jedina razlika između naše tehnike kontinualnog reskaliranja i one opisane u [233, 238] je ta da u našoj tehnici ne postoji potreba za određivanjem koliziona frekvencije fiktivnog procesa pre početka simulacije. Umesto toga, koliziona frekvencija fiktivnog procesa jonizacije se na početku simulacije u našoj tehnici kontinualnog reskaliranja izjednačuje sa frekvencom koja odgovara procesu zahvata elektrona. U daljem toku simulacije, frekvencija fiktivnog procesa se podešava u fiksnim vremenskim koracima tako da odgovara trenutnoj vrednosti koliziona frekvencije procesa zahvata elektrona. Na ovaj način se obezbeđuje da se broj elektrona u toku simulacije ne razlikuje od inicijalnog broja elektrona za više od 10%. Važno je naglasiti



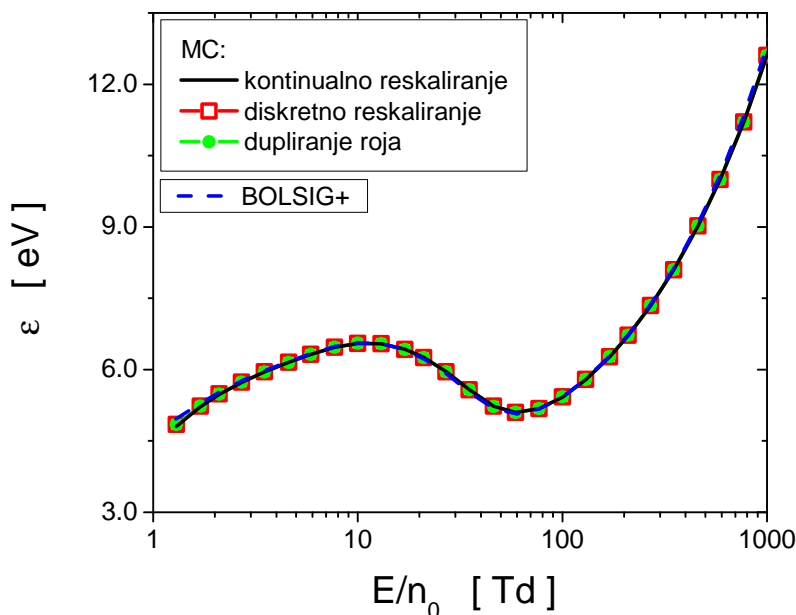
Slika 4.3: Poređenje promene broja elektrona u Monte Karlo simulacijama sa i bez tehnika reskaliranja u SF<sub>6</sub> (a) i CF<sub>3</sub>I (b) na različitim vrednostima spoljašnjeg redukovanog električnog polja. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).

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

Na slici 4.3 je prikazana vremenska promena broja elektrona u SF<sub>6</sub> i CF<sub>3</sub>I dobijena u MC simulacijama bez tehnika reskaliranja i uz njihovu primenu na različitim vrednostima  $E/n_0$ . Efikasnost tehnika je izražena kroz sposobnost održavanja broja elektrona na vrednost što bližu vrednosti početnog broja elektrona u simulacijama. Na najnižem ispitivanom polju od 1 Td, tehnika diskretnog reskaliranja u CF<sub>3</sub>I obezbeđuje da broj elektrona u roju bude za 10% niži od one koju obezbeđuje tehnika kontinualnog reskaliranja. Pomenuta razlika iznosi  $\sim 5\%$  na polju od 5.9 Td, dok je broj elektrona na višim poljima približno jednak početnom broju elektrona. U slučaju tehnike kontinualnog reskaliranja, broj elektrona u roju se održava u okviru početno zadate vrednosti na svim poljima. U gasu SF<sub>6</sub>, obe ispitivane tehnike reskaliranja imaju gotovo identičnu efikasnost na svim ispitivanim poljima. Najvažnija činjenica koja se vidi na ovoj slici je ta da upotreba tehnika reskaliranja pri simulaciji transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima obezbeđuje relaksaciju roja elektrona tj. dostizanje stacionarnog stanja u kome je omogućeno izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona.

#### 4.5 Transportni koeficijenti elektrona u SF<sub>6</sub> i CF<sub>3</sub>I

Izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona u jako elektronegativnim gasovima SF<sub>6</sub> i CF<sub>3</sub>I predstavlja dobar način testiranja tehnika reskaliranja, posebno u oblasti niskih vrednosti  $E/n_0$  u kojoj dominira proces zahvata elektrona. Pored poređenja različitih tehnika, cilj ovog potpoglavlja je prikazivanje i fizička interpretacija fenomena u profilima srednje energije, brzine drifta i koeficijenta difuzije indukovanih ovim nekonzervativnim procesom. Dodatno, skrenuće se pažnja na razlike između balk i fluks transportnih koeficijenata. U ovom segmentu rada je izostavljeno poređenje naših proračuna sa eksperimentalnim rezultatima transportnih koeficijenata elektrona iz nekoliko razloga. Pre svega, akcenat tumačenja narednih rezultata nije na utvrđivanju kvaliteta skupa preseka za rasejanje elektrona u ispitivanim gasovima. Dodatno, ne postoje eksperimentalni podaci o transportnim koeficijentima u opsegu niskih vrednosti  $E/n_0$ . Konkretno, uslučaju gasa SF<sub>6</sub>, u literaturi se ne mogu pronaći podaci o eksperimentalnim transportnim koeficijentima elektrona na poljima nižim od 50 Td. Takođe, na ovako niskim poljima se ne može očekivati validnost numeričkih rešenja Bolcmanove jednačine koja su bazirana na razvoju funkcije raspodele u više članova u brzinskom prostoru pošto je, usled intenzivnog zahvata elektrona, otežana konvergencija rezultata ove tehnike. Upravo zbog ovih



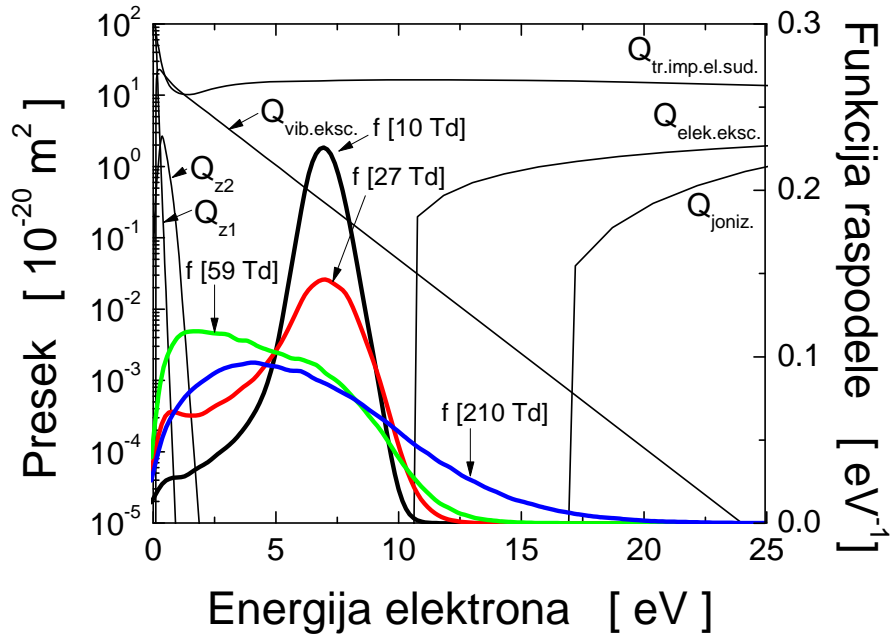
Slika 4.4: Srednja energija elektrona u SF<sub>6</sub> u funkciji  $E/n_0$ . Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama sa različitim tehnikama reskaliranja i upoređeni su sa rezultatima koda BOLSIG+.

razloga, rezultati koji su dobijeni na osnovu ove metode za rešavanje Bolcmanove jednačine neće biti prikazani na slikama koje slede.

#### 4.5.1 Srednja energija

Na slici 4.4 je prikazana srednja energija elektrona u SF<sub>6</sub> u funkciji  $E/n_0$ . Odmah se može uočiti izuzetno slaganje rezultata koji su dobijeni primenom različite tehnike reskaliranja. Ovo je jasan pokazatelj da su sve tri tehnike reskaliranja jednako validne za izračunavanje srednje energije roja elektrona u SF<sub>6</sub>. Dodatno, rezultati numeričkog koda BOLSIG+ se jako dobro slažu sa rezultatima MC simulacija. U oblasti niskih  $E/n_0$ ,  $\varepsilon$  raste sa porastom polja, dostiže svoj maksimum u okolini 10 Td, nakon čega počinje da opada. Minimalna vrednost srednje energije se dostiže u okolini 60 Td. Na poljima višim od ove vrednosti,  $\varepsilon$  monotono raste sa porastom  $E/n_0$ . Pojava opadanja srednje energije elektrona sa porastom  $E/n_0$  je opažena kod Ar [243] i O<sub>2</sub> [244] u prisustvu snažnog magnetskog polja. Međutim, na slici 4.4 se uočava opadanje srednje energije elektrona sa porastom  $E/n_0$  koje nastaje u odsustvu magnetskog polja. Ovakvo ponašanje srednje energije može se tretirati kao anomalno jer je u suprotnosti sa dosadašnjim observacijama. U prisustvu električnog polja i kada elektroni nisu u termodinamičkoj ravnoteži sa molekulima pozadinskog gasa, srednja energija roja elektrona je monotono rastuća funkcija  $E/n_0$  bez obzira na prirodu gasa. Međutim, zbog kombinovanog efekta hlađenja roja usled zahvata elektrona u prisustvu neelastičnih sudara, srednja energija u jako elektronegativnom gasu može opadati sa porastom  $E/n_0$ . Ovaj efekat predstavlja jedan od značajnijih kinetičkih fenomena koji su opaženi u ovoj disertaciji.

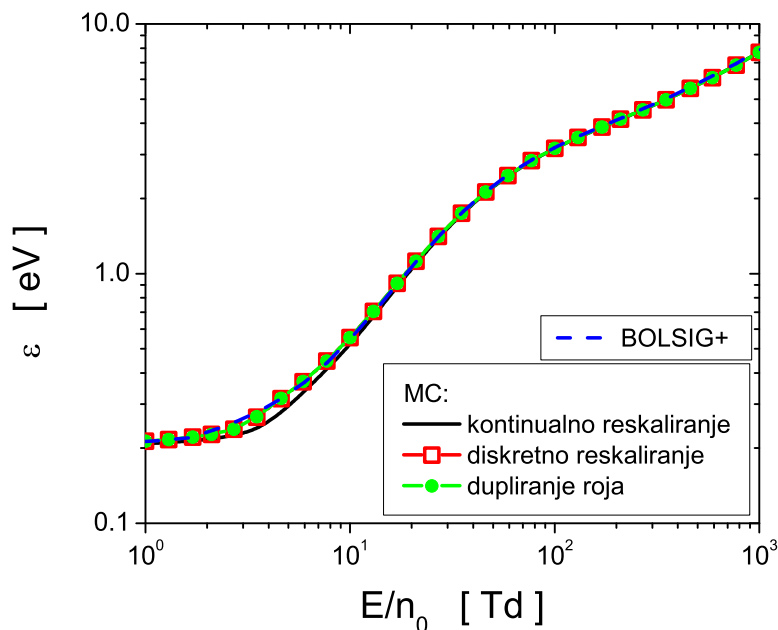
Kako bi se razumeo uzrok nastanka ovog fenomena, na slici 4.5 je prikazana funkcija raspodele energije elektrona u SF<sub>6</sub> na poljima 10 Td, 27 Td, 59 Td i 210 Td. Pored ovoga, na slici su predočeni i preseki za najznačajnije sudarne procese u prikazanom opsegu srednjih energija elektrona. Radi preglednosti, izostavljeni su preseki za zahvat elektrona koji dovode do formiranja jona SF<sub>4</sub><sup>-</sup>, F<sub>2</sub><sup>-</sup> i F<sup>-</sup>. Na poljima od 10 Td i 27 Td jasno se uočava efekat *bušenja rupa* u profilima funkcije raspodele energije elektrona. Ovaj fenomen je uočen i detaljno predstavljen za elektrone u O<sub>2</sub> [245, 246] i njegovim smešama [62, 247] pod uslovima koji dovode do pojave apsolutne negativne mobilnosti



Slika 4.5: Funkcije raspodele energije elektrona izračunate Monte Karlo simulacijama na poljima od 10 Td, 27 Td, 59 Td i 210 Td (crna, crvena, zelena i plava kriva) u međusobnom odnosu sa preseccima za rasejanje elektrona u SF<sub>6</sub> gasu (tanke crne krive). Prikazani su  $Q_{tr.imp.el.sud.}$  presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima,  $Q_{vib.eksc.}$  presek za vibracionu ekscitaciju,  $Q_{elek.eksc.}$  presek za elektronsku ekscitaciju,  $Q_{joniz.}$  presek za jonizaciju,  $Q_{z1}$  presek za formiranje jona SF<sub>6</sub><sup>-</sup> i  $Q_{z2}$  presek za formiranje jona SF<sub>5</sub><sup>-</sup>.

elektrona [69, 70], kao i za elektrone u smeši gasova C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>F<sub>4</sub>, izomera C<sub>4</sub>H<sub>10</sub> i SF<sub>6</sub>, koja se koristi u detektorima sa ravnim pločastim elektrodama u eksperimentima fizike čestica visokih energija u CERN-u [248]. U slučaju elektrona u SF<sub>6</sub>, koliziorna frekvencija za zahvat elektrona opada sa porastom energije, uslovljavajući to da sporiji elektroni sa začelja roja postaju dominantno zahvaćeni od strane SF<sub>6</sub> neutrala. Na ovaj način dolazi do redistribucije unutar roja: elektroni sa najnižim energijama nestaju iz roja, a začelje roja se pomera ka višim energijama. Ovim procesom dolazi do *grejanja roja zahvatom elektrona*, što je fenomen opažen kako za modelne [71, 176], tako i za realne gasove [62, 248]. U oblasti najnižih ispitivanih polja srednja energija elektrona dostiže neočekivano visoku vrednost od skoro 5 eV (slika 4.4). Kod većine molekularnih gasova,  $\epsilon$  je značajno redukovana u oblasti niskih  $E/n_0$  usled velikih gubitaka energije elektrona u velikom broju neelastičnih sudara koji mogu voditi ka rotacionoj, vibracionoj i elektronskoj ekscitaciji molekula.

Sa daljim porastom  $E/n_0$ , srednja energija elektrona raste zbog ubrzavanja elektrona u jakom spoljašnjem polju. Međutim, u slučaju SF<sub>6</sub> javlja se opadanje  $\epsilon$  sa porastom polja iznad 10 Td. Ovo atipično ponašanje je posledica kombinacije efekata grejanja roja zahvatom elektrona i *hlađenja roja neelastičnim procesima*. Sa slike 4.5 se vidi da na poljima od 27 Td i 59 Td elektroni sa začelja funkcije raspodele imaju dovoljno energije da učestvuju u procesu elektronske ekscitacije molekula SF<sub>6</sub>. U ovom procesu elektroni gube energiju jednaku vrednosti praga ovog procesa (9.8 eV), prelazeći tako u niskoenergijsku oblast funkcije raspodele. Na ovaj način se kompenzuje efekat bušenja rupa i repopuliše funkcija raspodele na niskim energijama. Kombinacija efekata grejanja roja zahvatom, hlađenja roja neelastičnim procesima i repopulacija funkcije raspodele u opsegu niskih energija ima veći uticaj na održavanje balansa energije od dobitaka energije od strane spoljašnjeg polja i gubitaka energije prilikom odvijanja sudarnih procesa. Presek za vibracionu ekscitaciju sa pragom od 0.098 eV nije od velikog uticaja na balans energije, imajući u vidu vrednost srednje energije elektrona koja odgovara ovim redukovanim električnim poljima. Na poljima višim od 60 Td,



Slika 4.6: Srednja energija elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$  u funkciji  $E/n_0$ . Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama sa različitim tehnikama reskaliranja i upoređeni sa rezultatima koda BOLSIG+.

balansu energije najviše doprinosi dobitak energije od strane spoljašnjeg polja, dok su zagrevanje roja zahvatom i indukovani fenomeni od manjeg značaja. Zato se primećuje porast  $\varepsilon$  sa porastom  $E/n_0$  u ovoj oblasti polja.

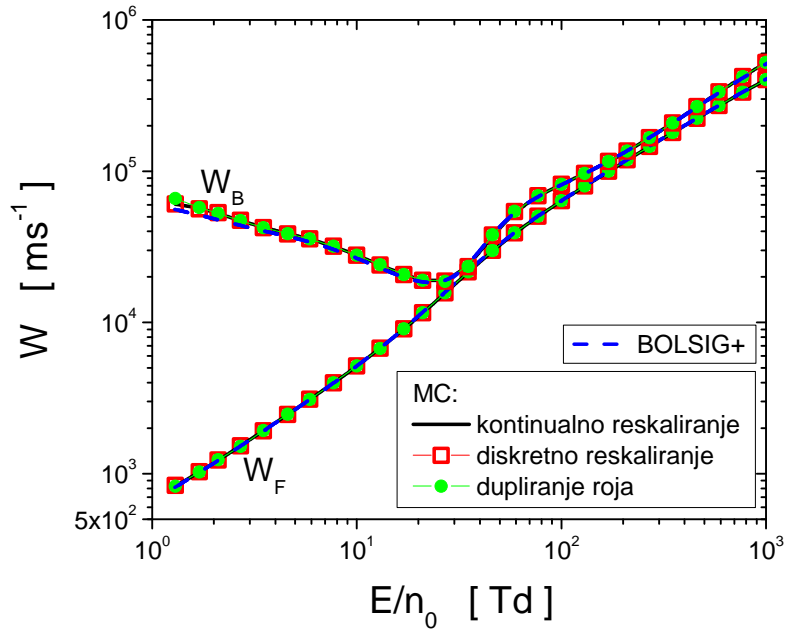
Na slici 4.6 je prikazana promena srednje energije sa  $E/n_0$  za elektrone u  $\text{CF}_3\text{I}$ . Pre svega, primećuje se dobro međusobno slaganje rezultata različitih tehnika reskaliranja. Neslaganje između tehnike kontinualnog reskaliranja i preostalih tehnika vidljivo je u opsegu polja od 3 Td do 20 Td. Za razliku od srednje energije u  $\text{SF}_6$ , u  $\text{CF}_3\text{I}$  gasu se uočava njen monoton rast sa  $E/n_0$  u čitavom ispitivanom opsegu polja. Pažljivim posmatranjem rezultata sa slike se mogu izdvojiti tri oblasti polja:

1. U najnižoj oblasti polja, srednja energija raste relativno sporo sa porastom  $E/n_0$  zbog velikih energijskih gubitaka pri vibracionim ekscitacijama molekula pozadinskog gasa. Srednja energija elektrona je veća od termalne energije usled intenzivnog grejanja roja zahvatom elektrona;
2. U oblasti polja između 5 Td i 50 Td, srednja energija elektrona oštro raste sa porastom polja pošto elektroni uspevaju da napuste energijsku oblast u kojoj dominira proces vibracione ekscitacije;
3. Oblast sporijeg rasta srednje energije sa poljem se javlja na  $E/n_0$  višim od 50 Td. Ovakav način rasta  $\varepsilon$  je posledica hlađenja roja elektronskim ekscitacijama i jonizacijom.

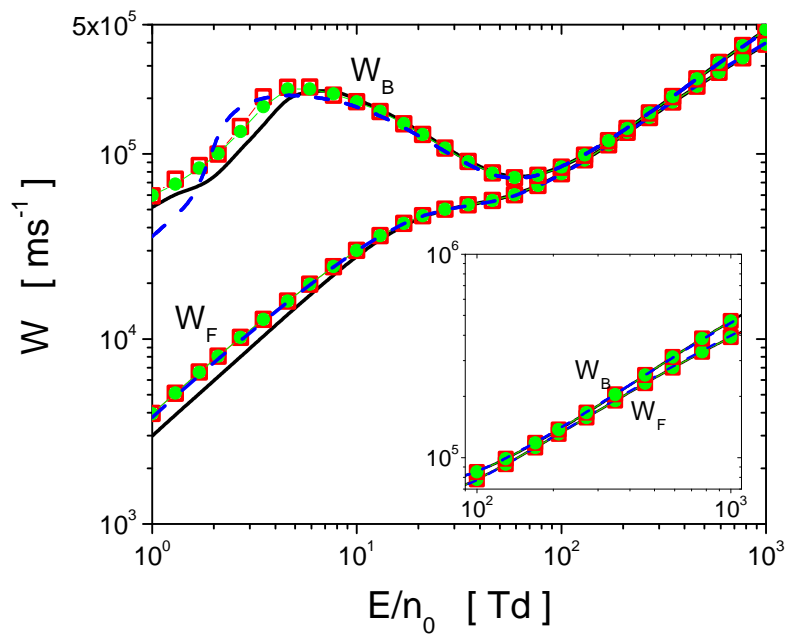
Zaključuje se da priroda sudarnih procesa elektrona sa molekulima  $\text{CF}_3\text{I}$ , njihova energijska zavisnost, kao i međusoban uticaj ovih faktora ne favorizuju razvoj anomalnog ponašanja srednje energije elektrona sa promenom  $E/n_0$  kakva je viđena kod  $\text{SF}_6$ .

#### 4.5.2 Brzina drifta

Na slikama 4.7 i 4.8 su prikazane promene balk i fluks brzine drifta sa  $E/n_0$  za elektrone u  $\text{SF}_6$  i  $\text{CF}_3\text{I}$ , respektivno. U slučaju  $\text{SF}_6$  gasa primećuje se odlično međusobno slaganje rezultata različitih tehnika kako kod balk, tako i kod fluks brzine drifta u celokupnom prikazanom opsegu  $E/n_0$ . Rezultati koda BOLSIG+ su neznatno manje vrednosti u odnosu na rezultate preostalih tehnika kada je u pitanju balk brzina drifta elektrona u opsegu najnižih prikazanih polja. U slučaju gasa  $\text{CF}_3\text{I}$ , razlike između



Slika 4.7: Brzina drifta elektrona u funkciji  $E/n_0$  za elektrone u  $\text{SF}_6$ . Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama sa različitim tehnikama reskaliranja i upoređeni sa rezultatima koda BOLSIG+.

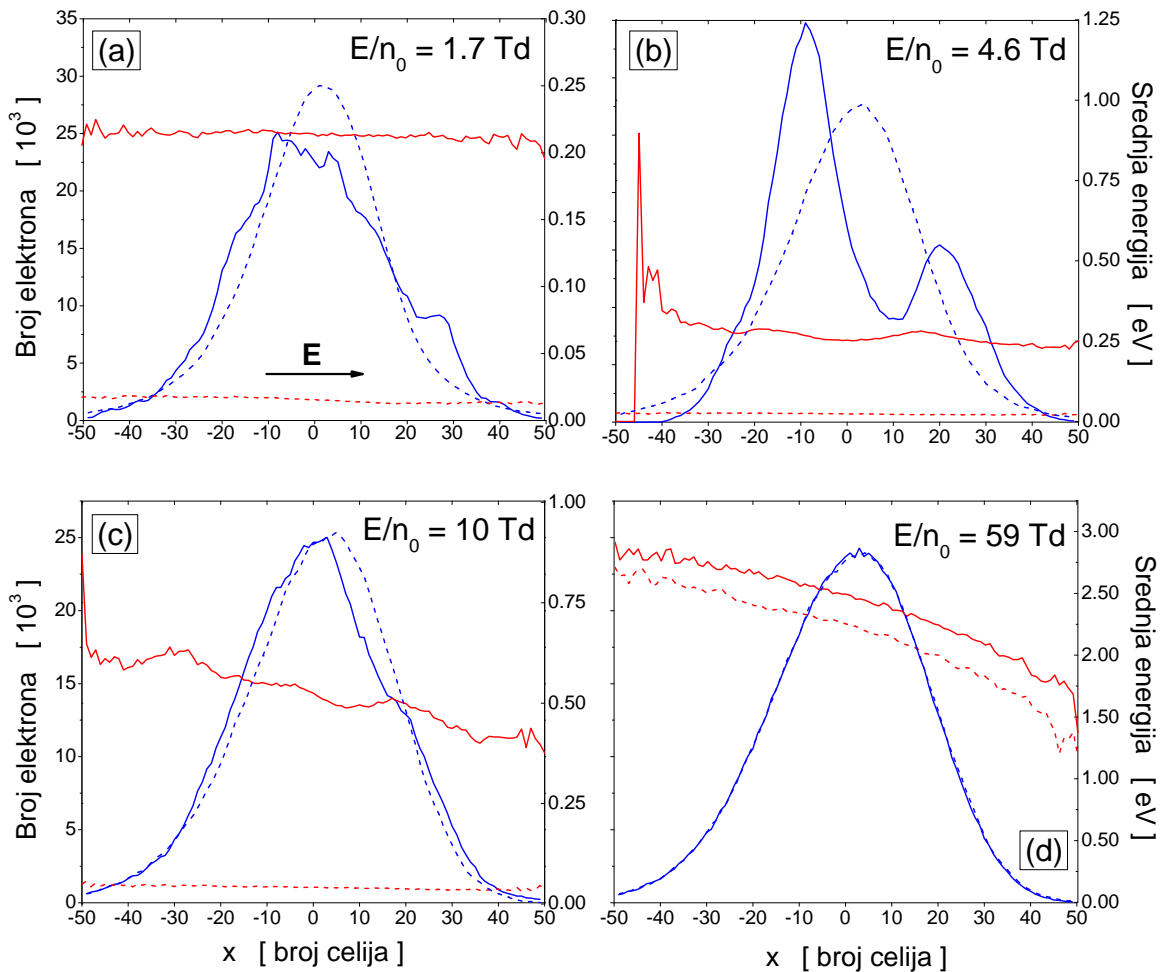


Slika 4.8: Brzina drifta elektrona u funkciji  $E/n_0$  za elektrone u  $\text{CF}_3\text{I}$ . Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacija sa različitim tehnikama reskaliranja i upoređeni sa rezultatima koda BOLSIG+.

Oznake krivih i simbola su iste kao na slici 4.7.

rezultata različitih numeričkih tehnika su neznatne na poljima višim od 10 Td, dok su značajnije na poljima nižim od ove vrednosti. Kod oba gasa se vidi da je balk brzina veća od odgovarajućih fluks vrednosti u celokupnom prikazanom opsegu polja. Ovakav odnos je posledica veoma intenzivnog grejanja roja zahvatom kada je u pitanju opseg niskih polja, kao i eksplicitnih efekata jonizacije na višim  $E/n_0$ . Kao što je pomenuto, kada grejanje roja zahvatom značajno utiče na transport elektrona, neutrali gasa intenzivnije zahvataju sporije elektrone sa začelja roja u odnosu na brže elektrone sa





Slika 4.9: Prostorna raspodela broja elektrona (plave krive) i prostorno razložena lokalno srednja energija elektrona (crvene krive) u  $\text{CF}_3\text{I}$  na različitim vrednostima redukovanoeg električnog polja  $E/n_0$ . Rezultati su dobijeni podrazumevajući da je proces zahvata elektrona nekonzervativan proces (pune krive), odnosno konzervativan proces sa nultim pragom (isprekidane krive). Rezultati Monte Karlo simulacija sa  $10^6$  elektrona dobijeni su korišćenjem tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Smer električnog polja obeležen na panelu (a) odnosi se i na ostale panele.

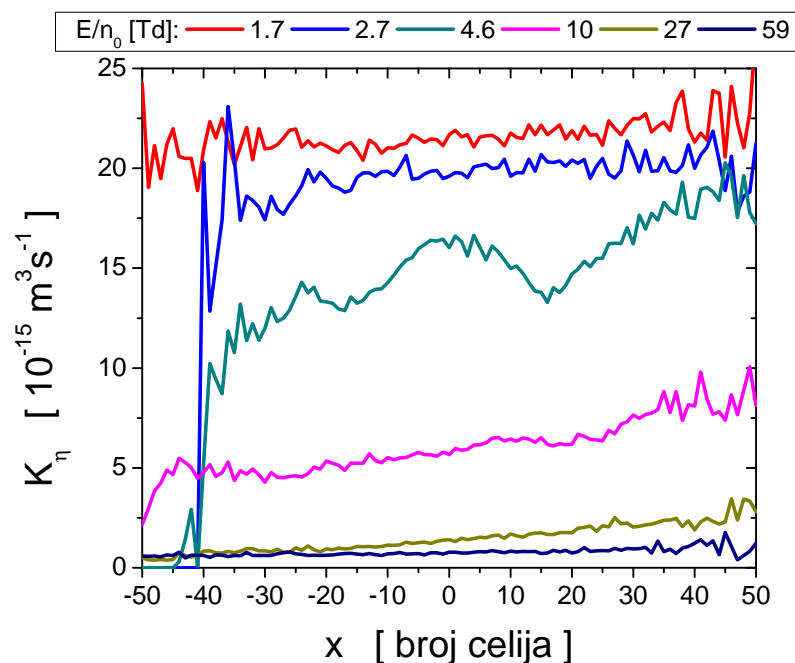
fronta roja. Tako, zahvat elektrona pomera centar mase roja ka frontu čime balk brzina postaje veća od fluks vrednosti. Jonizacija pozadinskog gasa se pre svega javlja u oblasti fronta roja u kojoj su elektroni viših energija. Time se povećava ukupan broj elektrona na frontu roja i to u većoj meri nego na začelju roja. I na ovaj način se centar mase roja pomera ka frontu pa je balk brzina veća od fluks brzine i u opsegu viših polja. Naravno, prethodno objašnjenje je validno samo u slučaju kada je koliziona frekvencija procesa jonizacije rastuća funkcija energije elektrona, što je upravo slučaj kod gasova  $\text{SF}_6$  i  $\text{CF}_3\text{I}$ . Neophodno je naglasiti da su eksplicitni efekti zahvata elektrona u  $\text{SF}_6$  i  $\text{CF}_3\text{I}$  snažniji od efekata jonizacije. Kada je jonizacija dominantan nekonzervativan proces, razlika između dualnih vrednosti brzine drifta ne prelazi 30% u slučaju oba ispitivana gasa. Međutim, kada je roj pod dejstvom snažnog procesa zahvata elektrona, razlika između balk i fluks brzine drifta iznosi skoro dva reda veličine, kao što se vidi na primeru  $\text{SF}_6$  gasa u oblasti najnižih polja.

U profilima balk brzine drifta u  $\text{SF}_6$  i  $\text{CF}_3\text{I}$  primećuje se snažan NDC efekat, dok odgovarajuće fluks brzine monotono rastu sa porastom  $E/n_0$ . Ovakvo ponašanje brzine drifta je slično nedavno uočenom NDC efektu za pozitivne u molekularnim gasovima [249, 250], kod kojih formiranje pozitronijuma ima ulogu analognu zahvatu elektrona.

Da bismo razumeli NDC efekat u profilima balk brzine drifta, na slici 4.9 su prikazani prostorne

raspodele broja elektrona (plave krive) i prostorno razložene lokalno srednje energije elektrona (crvene krive) u  $\text{CF}_3\text{I}$  na različitim vrednostima  $E/n_0$ . U pitanju su rezultati MC simulacija koji su dobijeni korišćenjem tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Rezultati se odnose na scenario u kome je zahvat elektrona tretiran kao konzervativan proces sa nultim energijskim gubitkom (isprekidane krive) i na scenario u kome je zahvat tretiran na standardan način, kao pravi nekonzervativan proces (pune krive). Prvi scenario je analiziran kako bi se uvidelo da NDC nije prvenstveno posledica oblika preseka za zahvat elektrona već da nastaje usled sinergije eksplicitnih i implicitnih efekata procesa koji utiču na promenu broja elektrona u roju.

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

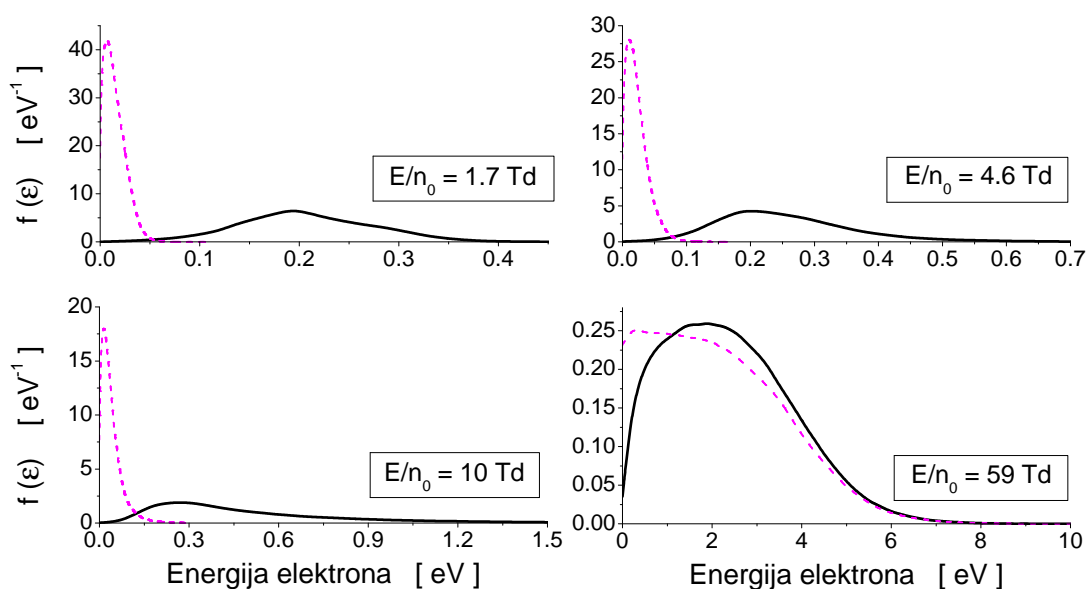


Slika 4.10: Prostorno razloženi brzinski koeficijenti zahvata elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$  na različitim električnim poljima. Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona.

Kada se zahvat elektrona tretira na standardan način, kao nekonzervativan proces, profil raspodele broja elektrona i prostorno razložene lokalno srednje energije se drastično menja. Na svim prikazanim poljima se primećuje veća vrednost prostorno razložene lokalno srednje energije u odnosu na slučaj kada se zahvat elektrona smatra konzervativnim procesom. Ovo je potpuno očekivan rezultat imajući u vidu da nekonzervativan proces zahvata uklanja niskoenergijske elektrone iz roja. Profili prostornih raspodela broja elektrona na poljima od 1.7 Td i 4.6 Td u značajnoj meri se razlikuju od Gausijana. Na 1.7 Td javlja se neznatna prostorna varijacija lokalno srednje energije duž roja. Profil prostorne raspodele broja elektrona na 4.6 Td je izrazito nesimetričan i pomeren u smeru suprotnom od spoljašnjeg polja. Ovaj pomeraj približno odgovara razlici između balk brzina drifta u dva pomenuta scenarija. Pik u profilu ove veličine koji se nalazi na začelju roja (desni pik) značajno je manji od drugog pika. Pri tome je lokalno srednja energija u roju praktično nepromenjena. Na frontu roja se primećuje značajan porast lokalno srednje energije koji je praćen naglim opadanjem vrednosti ove veličine. Pik na frontu roja u profilu prostorne raspodele elektrona odgovara većem broju elektrona nego što to odgovara profilu oblika Gausijana, koji se odnosi na slučaj kada se zahvat elektrona smatra

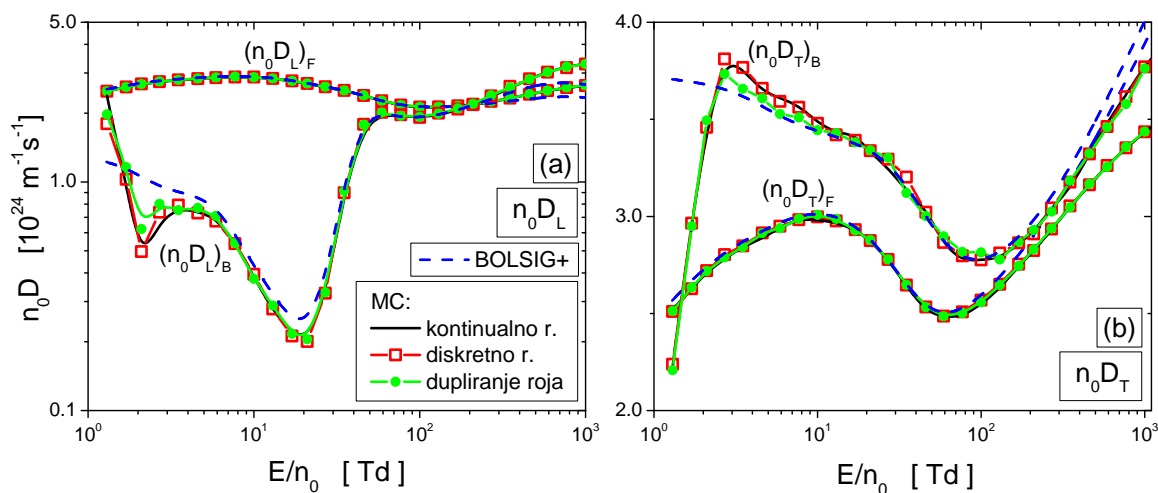
konzervativnim neelastičnim procesom. Na dva najviša ispitivana polja su i dalje uticajni eksplicitni efekti zahvata elektrona ali su značajno manje izraženi. Prostorna zavisnost lokalno srednje energije na 10 Td je približno linearna sa malim porastom na frontu roja. Poređenjem funkcija raspodele elektrona na 4.6 Td i 10 Td u opsegu začelja roja zaključuje se da se umanjeње pika na začelju roja javlja u manjoj meri na polju 10 Td. Ovo pokazuje da je sa porastom polja sve manje elektrona zahvaćeno neutralnim molekulima  $\text{CF}_3\text{I}$  gasa. Prostorna raspodela broja elektrona na najvišem analiziranom polju od 59 Td ima profil koji je identičan profilu dobijenom u slučaju kada je zahvat elektrona smatran konzervativnim neelastičnim procesom.

Na slici 4.10 su prikazani prostorno razloženi brzinski koeficijenti zahvata elektrona. U pitanju su rezultati MC simulacija dobijeni uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Pre svega se uočava da brzinski koeficijenti ovog procesa imaju najveću vrednost na začelju roja u čijoj oblasti se nalaze elektroni najmanjih energija. Sa porastom polja opada brzinski koeficijent ovog procesa, dok se, takođe, uočava linearno opadanje vrednosti ovog koeficijenta od začelja ka frontu roja. Elektroni na frontu roja imaju dovoljno energije da jonizuju molekule  $\text{CF}_3\text{I}$ , čime je značajno umanjen eksplicitan efekat zahvata elektrona na ponašanje roja. Kao posledica, NDC nestaje iz profila balk brzine drifta.



Slika 4.11: Funkcija raspodele energije elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$  na različitim električnim poljima izračunata pri tretiranju procesa zahvata elektrona kao nekonzervativan (pune krive) i kao konzervativan neelastičan proces sa nultim pragom (isprekidane krive). Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona.

Pored eksplicitnih efekata zahvata elektrona, javljaju se i implicitni efekti usled gubitaka energije elektrona, koji modifikuju raspodelu energije duž roja i time indirektno utiču na fluks roja. Generalno govoreći, ne postoji mogućnost razdvajanja eksplicitnih i implicitnih efekata, osim u slučaju kada se analiza vrši sa procesom i bez procesa zahvata elektrona u skupu preseka ispitivanog gasa. U cilju pojašnjenja prethodne činjenice, na slici 4.11 je prikazana funkcija raspodele energije za elektrone u  $\text{CF}_3\text{I}$ , izračunata u slučaju kada je zahvat elektrona tretiran na standardan način, kao nekonzervativan proces (pune krive) i kao konzervativan neelastičan proces (isprekidane krive). U pitanju su rezultati MC simulacija na poljima 1.7 Td, 4.6 Td, 10 Td i 59 Td dobijeni korišćenjem tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Kao u slučaju gasa  $\text{SF}_6$  (slika 4.5), uočen je efekat *bušenja rupa* u profilima funkcija raspodele koje odgovaraju standardnom načinu tretiranja procesa zahvata elektrona. Ovaj efekat je jedan od najilustrativnijih primera implicitnih efekata. Deo profila funkcije raspodele koji odgovara visokoenergijskim elektronima jako sporo opada sa porastom energije, sporije nego



Slika 4.12: Promena longitudinalnog (a) i transverznog koeficijenta difuzije (b) za elektrone u SF<sub>6</sub> u funkciji  $E/n_0$ . Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama sa različitim tehnikama reskaliranja i upoređeni sa rezultatima koda BOLSIG+. Oznake krivih sa panela (a) odnose se i na panel (b).

kod Maksvelijana. Upravo u ovim uslovima, kada je zbog grejanja roja zahvatom elektrona funkcija raspodele depopulisana u niskoenergijskom delu i sporo opadajuća u oblasti većih energija, numeričke šeme koje se koriste za rešavanje Boltzmanove jednačine u okviru momentne metode veoma često ne uspevaju da obezbede konvergenciju transportnih koeficijenata. U slučaju kada se zahvat elektrona tretira kao konzervativan neelastičan proces, funkcija raspodele je populisana niskoenergijskim elektronima, dok visokoenergijski deo naglo opada. Sa porastom  $E/n_0$ , kada se zahvat elektrona tretira na standardan način, efekat bušenja rupa u funkciji raspodele je značajno redukovano, a visokoenergijski deo ove funkcije poklapa se sa funkcijom koja se odnosi na slučaj u kome se proces zahvata smatra konzervativnim neelastičnim procesom.

### 4.5.3 Koeficijenti difuzije

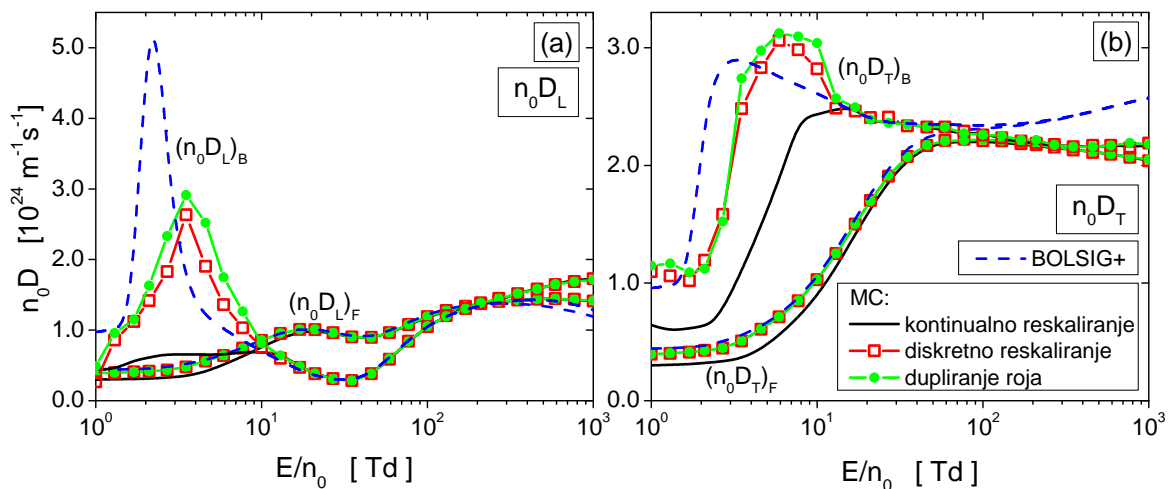
Na slici 4.12 je prikazana promena longitudinalnog i transverznog koeficijenta difuzije sa  $E/n_0$  za elektrone u SF<sub>6</sub>. Na osnovu profila fluks koeficijenata vidi se jako dobro međusobno slaganje različitih tehnika reskaliranja elektrona u MC simulacijama. Što se tiče balk koeficijenata, dobro međusobno slaganje pomenutih tehnika se uočava u oblasti srednjih i najviših ispitivanih polja.

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

Profili longitudinalnog koeficijenta difuzije na niskim i srednjim  $E/n_0$  pokazuju interesantnu karakteristiku. Za razliku od brzine drifta (slika 4.7) i transverznog koeficijenta difuzije (slika 4.12(b)), balk  $n_0D_L$  je manji od odgovarajuće fluks vrednosti. Ovo je indikacija da opadanje broja elektrona, usled procesa njihovog zahvata, umanjuje difuziju duž pravca spoljašnjeg polja. Kao što

je već primećeno, gubitak slobodnih elektrona sa začelja roja pomera centar mase roja ka frontu, što dovodi do porasta balk brzine drifta i srednje energije. Isti efekti dovode do porasta fluks longitudinalne difuzije. Na najvišim ispitivanim poljima, na kojima postaje značajan uticaj jonizacije, dolazi do porasta difuzije u pravcu spoljašnjeg polja, odnosno balk  $n_0 D_L$  postaje veća od odgovarajuće fluks komponente. Ovakav odnos koeficijenata longitudinalne difuzije javlja se u slučajevima kada je koliziorna frekvencija procesa jonizacije rastuća funkcija energije elektrona.

Balk transverzalni koeficijent difuzije (slika 4.12(b)) je veći od odgovarajuće fluks vrednosti u celokupnom ispitivanom opsegu  $E/n_0$ . Jedino se u limitu najnižih polja primećuje suprotan odnos ovih koeficijenata. Za razliku od longitudinalne difuzije, širenje roja elektrona u pravcu transverzalnom u odnosu na pravac spoljašnjeg polja potpuno je određeno termalnim kretanjem elektrona. Visokoenergijski elektroni najviše doprinose transverzalnom širenju roja. Zato, zahvat elektrona dovodi do porasta balk transverzalnog difuzionog koeficijenta.



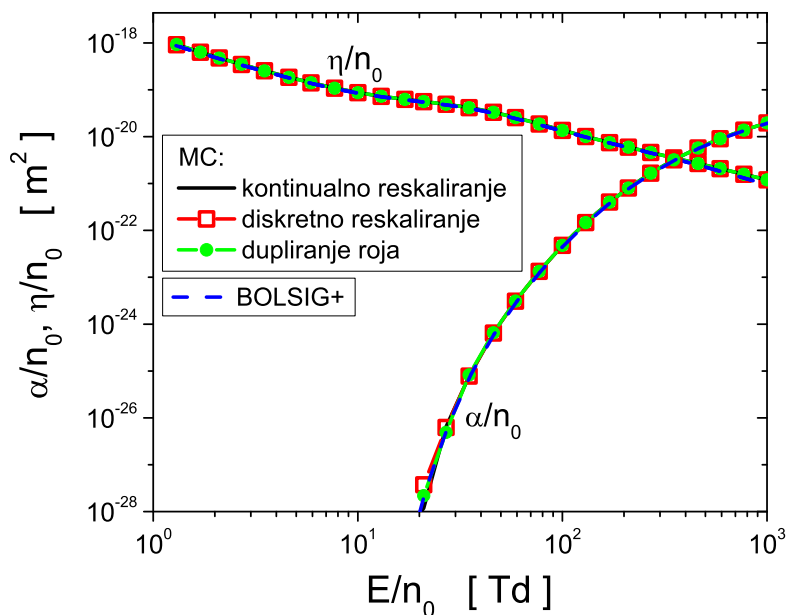
Slika 4.13: Promena longitudinalnog (a) i transverzalnog koeficijenta difuzije (b) u  $\text{CF}_3\text{I}$  u funkciji  $E/n_0$ . Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama sa različitim tehnikama reskaliranja i upoređeni sa rezultatima koda BOLSIG+. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).

Na slici 4.13 je prikazana promena longitudinalnog i transverzalnog koeficijenta difuzije sa  $E/n_0$  za elektrone u  $\text{CF}_3\text{I}$ . Međusobno slaganje koeficijenata  $(n_0 D_L)_B$  izračunatih različitim tehnikama reskaliranja elektrona je u okviru 12% na poljima između 10 Td i 400 Td. Isto važi i za fluks komponentu ovog koeficijenta. Ovo međusobno slaganje je lošije na nižim  $E/n_0$ , posebno kod balk komponente.

Ukoliko poredimo rezultate kodova MC i BOLSIG+, vidimo da je njihova međusobna razlika najveća na nižim i najvišim poljima. Za razliku od  $\text{SF}_6$ ,  $\text{CF}_3\text{I}$  ima brzorastući presek za vibracionu ekscitaciju, koji odgovara istoj energijskoj oblasti u kojoj opada presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima. Pod ovim uslovima je povećana razmena energije tokom sudara elektrona i molekula pozadinskog gasa i izdvajaju se dominantni pravci rasejanja elektrona. Drugim rečima, funkcija raspodele postaje znatno različita od izotropne raspodele u brzinskom prostoru, a upravo u ovakvim uslovima, aproksimacija dva člana za rešavanje BE postaje problematična sa stanovišta preciznosti proračuna.

Razlika između profila balk i fluks koeficijenata difuzije mnogo je složenija nego u slučaju  $\text{SF}_6$  gasa. Kod  $n_0 D_L$  se vidi da je balk koeficijent veći od odgovarajućeg fluks koeficijenta na nižim i višim poljima, dok je odnos ovih koeficijenata suprotan u srednjoj oblasti polja. Ponašanje transverzalnog koeficijenta difuzije je jednostavnije: balk vrednosti su veće od fluks vrednosti u celokupnom prikazanom opsegu polja.

Kao što se vidi na prethodnim slikama, mnogo je komplikovanije objasniti ponašanje balk i fluks koeficijenata difuzije nego brzine drifta. Ovo potiče od kompleksnosti faktora koji utiču na koefi-



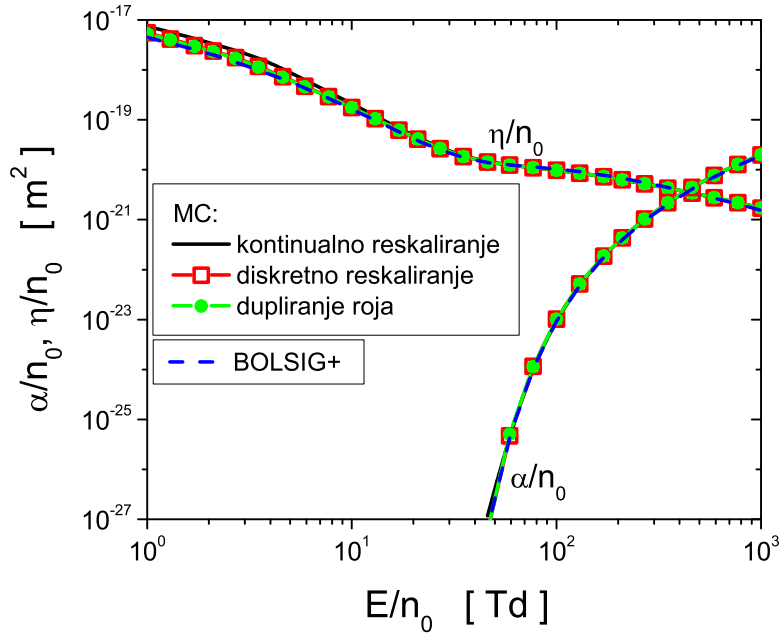
Slika 4.14: Koeficijenti jonizacije i zahvata elektrona u  $\text{SF}_6$  u funkciji redukovanog električnog polja  $E/n_0$ . Rezultatusu dobijeni Monte Karlo simulacijama sa različitim tehnikama reskaliranja i upoređeni sa rezultatima koda BOLSIG+.

cijente difuzije. Dva najznačajnija faktora su: 1) efekat termalne anizotropije, koji se javlja zbog različitog kretanja elektrona u različitim pravcima i 2) efekat anizotropije indukovana spoljašnjim poljem, koji se javlja usled prostorne varijacije srednje energije i lokalne usrednjene brzine duž roja koja deluje tako da pojačava ili kompenzuje difuziju elektrona. Dodatni faktori uključuju efekte rasejanja, totalnu kolizionu frekvencu zavisnu od energije, kao i prisustvo nekonzervativnih sudara. Uzajamno dejstvo ovih faktora je uvek prisutno, pa upravo zbog toga veoma česti nije jednostavno razumeti osnovne trendove u ponašanju difuzionih koeficijenata. Konačno, da bi se mnogo bolje razumeli efekti nekonzervativnih sudara na difuziju elektrona, potrebno je razmotriti prostorne varijacije drugog reda srednje energije duž roja. Ovakva analiza bi zahtevala mnogo više prostora u ovoj disertaciji, od onoga koji nam je bio na raspolaganju, i svakako izlazi van okvira ovog rada.

#### 4.5.4 Koeficijenti jonizacije i zahvata

Na slici 4.14 je prikazana promena koeficijenata jonizacije i zahvata sa  $E/n_0$  za elektrone u  $\text{SF}_6$ . U slučaju oba prikazana koeficijenta je dobijeno veoma dobro međusobno slaganje rezultata različitih tehnika reskaliranja elektrona u MC kodu i rezultata koda BOLSIG+. Važno je naglasiti da je dobro slaganje postignuto i u domenu najnižih razmatranih polja u kome je funkcija raspodele elektrona pod snažnim uticajem procesa zahvata elektrona. Koeficijenti se menjaju sa porastom polja na očekivan način: koeficijent  $\alpha/n_0$  raste dok koeficijent  $\eta/n_0$  opada. U preseku krivih koje se odnose na ova dva koeficijenta se dobija vrednost kritičnog električnog polja gasa  $\text{SF}_6$  koja iznosi  $\sim 360$  Td što je u izuzetnom slaganju sa rezultatima eksperimentalnih merenja [251].

Na slici 4.15 je prikazana promena koeficijenata jonizacije i zahvata sa  $E/n_0$  za elektrone u  $\text{CF}_3\text{I}$ . Postignuto je izuzetno međusobno slaganje između rezultata različitih tehnika reskaliranja i koda BOLSIG+ u slučaju koeficijenta  $\alpha/n_0$ . Na poljima nižim od  $\sim 10$  Td, tehnika kontinualnog reskaliranja elektrona daje veće vrednosti koeficijenta  $\eta/n_0$  u odnosu na preostale scenarije proračuna. Presek ovih koeficijenata se nalazi u okolini polja od 440 Td, što je u jako dobrom slaganju sa eksperimentalnim merenjima u SST [211, 215] i PT eksperimentu [130], kao i sa rezultatima na osnovu



Slika 4.15: Koeficijenti jonizacije i zahvata elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$  u funkciji redukovanog električnog polja  $E/n_0$ . Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama sa različitim tehnikama reskaliranja i upoređeni sa rezultatima koda BOLSIG+.

teorijskih proračuna koeficijenata  $\alpha/n_0$  i  $\eta/n_0$  [231, 237].

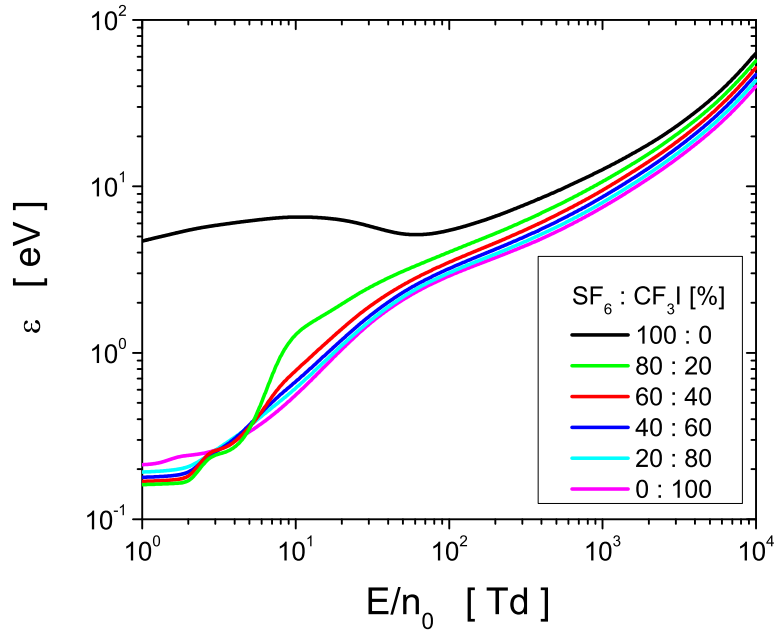
## 4.6 Poređenje tehnika reskaliranja

Ovde ćemo se osvrnuti na glavne karakteristike tehnika reskaliranja elektrona u MC simulacijama, njihovu implementaciju u numerički kod i dati preporuke za primenu najoptimalnije tehnike u zavisnosti od vrste gasa i željenih performansi procesa simulacije.

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

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

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



Slika 4.16: Srednja energija elektrona u SF<sub>6</sub>-CF<sub>3</sub>I smešama u funkciji  $E/n_0$ . Rezultati su dobijeni u Monte Karlo simulacijama uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona.

Poređenje rezultata različitih tehnika nadoknađivanja elektrona u MC simulacijama sa rešenjima Bolcmanove jednačine pokazuje da su tehnike reskaliranja izuzetno pouzdane. Neophodno je naglasiti da jedino numerička rešenja Bolcmanove jednačine koja su bazirana na razvoju funkcije raspodele u više članova u brzinskom prostoru mogu biti merodavna u ovoj proceni. Ograničenja aproksimacije dva člana za rešavanje BE su više puta isticana u literaturi [9, 13], posebno kada je u pitanju izračunavanje koeficijenata difuzije.

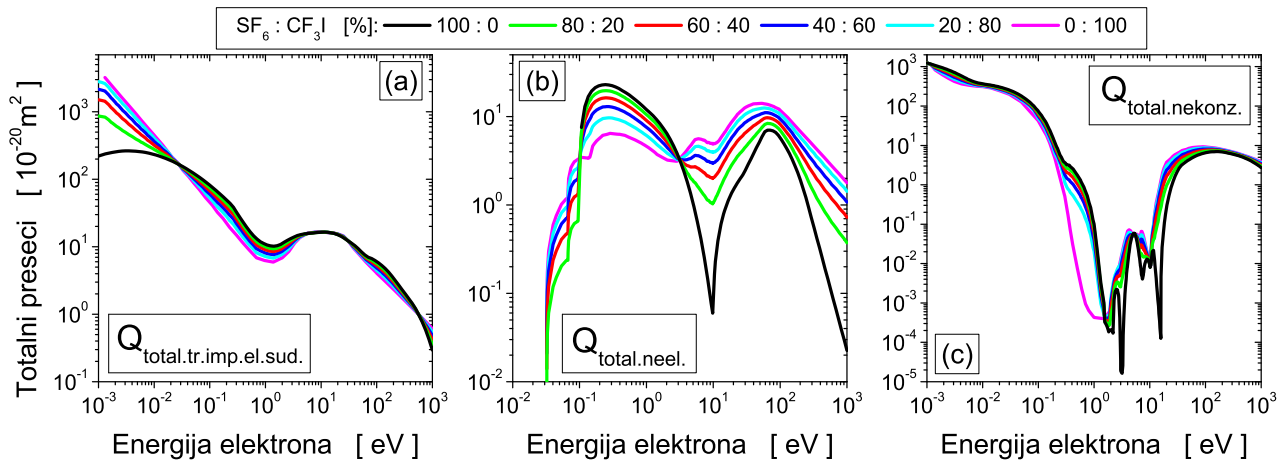
Dakle, u cilju analize transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima putem MC simulacija, neophodna je primena tehnika reskaliranja elektrona kako bi se obezbedilo pravilno izračunavanje transportnih koeficijenata elektrona u oblasti energija u kojima dominiraju preseki za zahvat elektrona.

#### 4.7 Transport elektrona u SF<sub>6</sub>-CF<sub>3</sub>I smešama

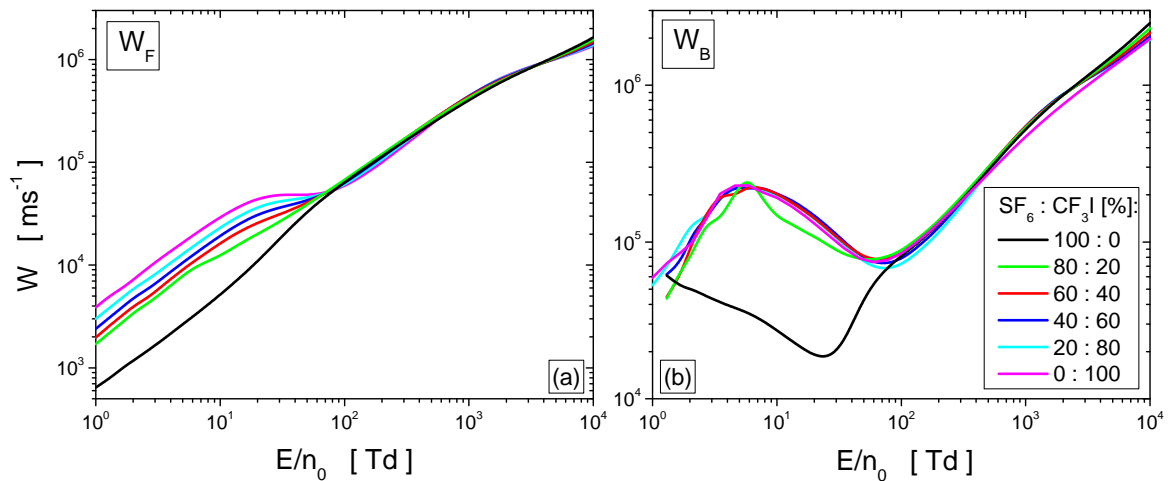
U ovom potpoglavlju analizira se transport elektrona u smešama jako elektronegativnih gasova SF<sub>6</sub> i CF<sub>3</sub>I. U pitanju su rezultati MC simulacija dobijeni korišćenjem tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona razvijene za potrebe ove doktorske disertacije. Radi preglednosti, sa svih narednih slika su izostavljeni rezultati koda BOLSIG+.

Na slici 4.16 je prikazana srednja energija elektrona u SF<sub>6</sub>-CF<sub>3</sub>I smešama u funkciji  $E/n_0$ . Ova veličina ima različit trend sa porastom polja koji zavisi kako od oblasti polja, tako i od koncentracije gasova u smeši. Ukoliko se izuzmu smeša 80%SF<sub>6</sub>-20%CF<sub>3</sub>I i čist SF<sub>6</sub>, a međusobno uporede trendovi srednje energije elektrona u preostalim smešama na poljima višim od  $\sim 7$  Td, vidi se da su oni gotovo identični. Njihova međusobna razlika je u veličini srednje energije koja raste sa opadanjem koncentracije CF<sub>3</sub>I u smeši. Za ovakvo ponašanje  $\varepsilon$  na srednjim i visokim poljima su, pre svega, odgovorni preseki za elektronsku ekscitaciju i jonizaciju. Na slici 4.17 su prikazani totalni preseki za rasejanje elektrona u elastičnim, neelastičnim i nekonzervativnim sudarnim procesima elektrona u SF<sub>6</sub>-CF<sub>3</sub>I smešama. Ovde treba imati u vidu da totalnom preseku za elastično rasejanje odgovara presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, imajući u vidu da mi koristimo model izotropnog rasejanja. Izračunati su na osnovu skupova preseka za rasejanje elektrona u ova dva gasa (slike 4.1 i





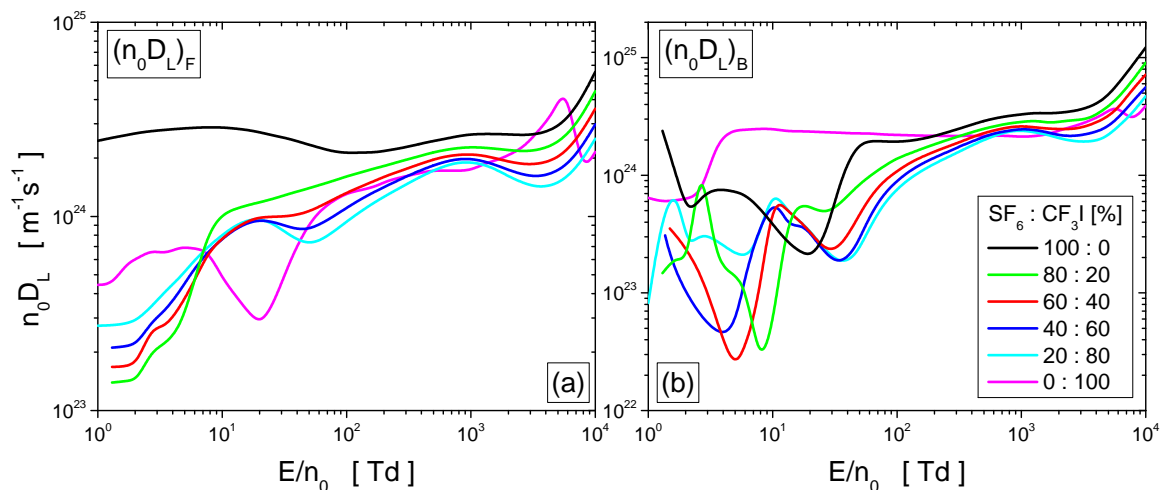
Slika 4.17: Totalni preseki za rasejanje elektrona u SF<sub>6</sub>-CF<sub>3</sub>I smešama: totalni presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima (a), totalni presek za neelastične sudare (b) i totalni presek za nekonzervativne sudare (c).



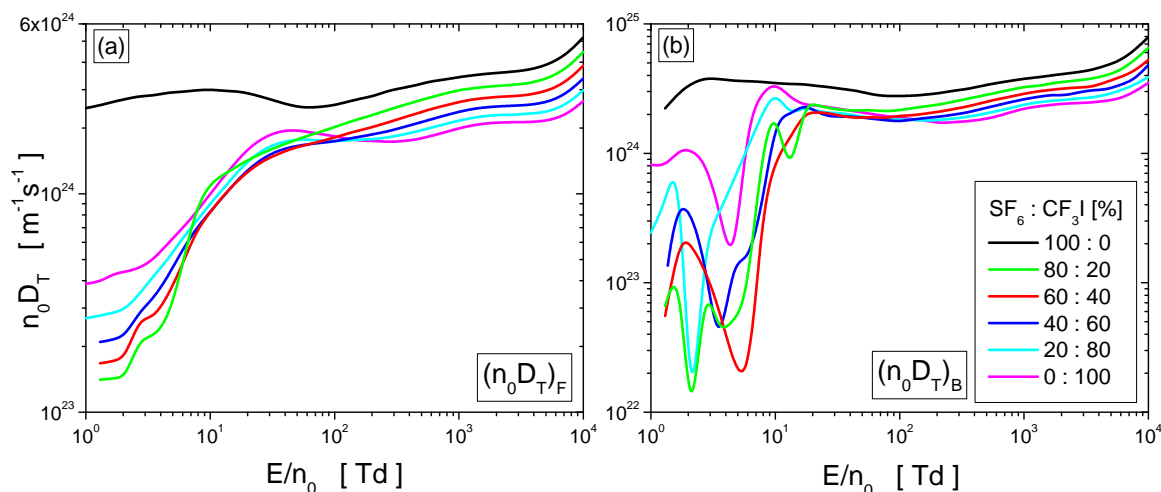
Slika 4.18: Fluks (a) i balk brzina drifta elektrona u SF<sub>6</sub>-CF<sub>3</sub>I smešama u funkciji  $E/n_0$ . Rezultati su dobijeni u Monte Karlo simulacijama uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).

3.2) kao suma preseka za odgovarajuće sudarne procese koji su otežinjani koncentracijom gasova u smeši. Sa panela (b) i (c) ove slike se vidi da totalni preseki za neelastične i nekonzervativne sudare opadaju sa opadanjem koncentracije CF<sub>3</sub>I u smeši na poljima višim od  $\sim 7$  Td. Time se sve manje oseća efekat *hlađenja roja* pa se  $\varepsilon$  ponaša na opisan način. Ukoliko se izuzme čist SF<sub>6</sub>, u oblasti najnižih ispitivanih polja (slika 4.16) se primećuje da  $\varepsilon$  opada sa opadanjem koncentracije CF<sub>3</sub>I u smeši. U ovoj oblasti  $E/n_0$ , vrednosti  $\varepsilon$  su više od termalnih vrednosti usled *grejanja roja* zahvatom elektrona (slika 4.17(c)). U opsegu polja od  $\sim 3$  Td do  $\sim 7$  Td,  $\varepsilon$  pokazuje manju osetljivost na sastav smeše.

Na slici 4.18 je prikazana fluks i balk brzina drifta elektrona u SF<sub>6</sub>-CF<sub>3</sub>I smešama u funkciji  $E/n_0$ . Kao u slučaju čistih gasova (slike 4.7 i 4.8), balk brzina drifta je veća od fluks brzine u svim smešama u celokupnom prikazanom opsegu polja. Što se tiče  $W_F$ , njena vrednost raste sa porastom polja u svim prikazanim smešama ali uz različit trend u različitim oblastima  $E/n_0$ . Na poljima nižim od  $\sim 50$  Td,  $W_F$  opada sa opadanjem koncentracije CF<sub>3</sub>I u smeši. Presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima najviše utiče na ponašanje brzine drifta. Ovom opsegu polja odgovaraju srednje energije iz intervala  $\sim (2, 5)$  eV (slika 4.16), u čijem opsegu raste  $Q_{total.tr.imp.el.sud.}$  (slika 4.17(a)), što upravo dovodi do prikaznog ponašanje fluks brzine drifta sa promenom polja. Na višim električnim poljima  $W_F$  je slabo



Slika 4.19: Promena fluks (levi panel) i balk (desni panel) longitudinalnog koeficijenta difuzije sa  $E/n_0$  za elektrone u  $\text{SF}_6$ - $\text{CF}_3\text{I}$  smešama. Rezultati su dobijeni u Monte Karlo simulacijama uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Oznake krivih sa desnog panela se odnose i na levi panel.

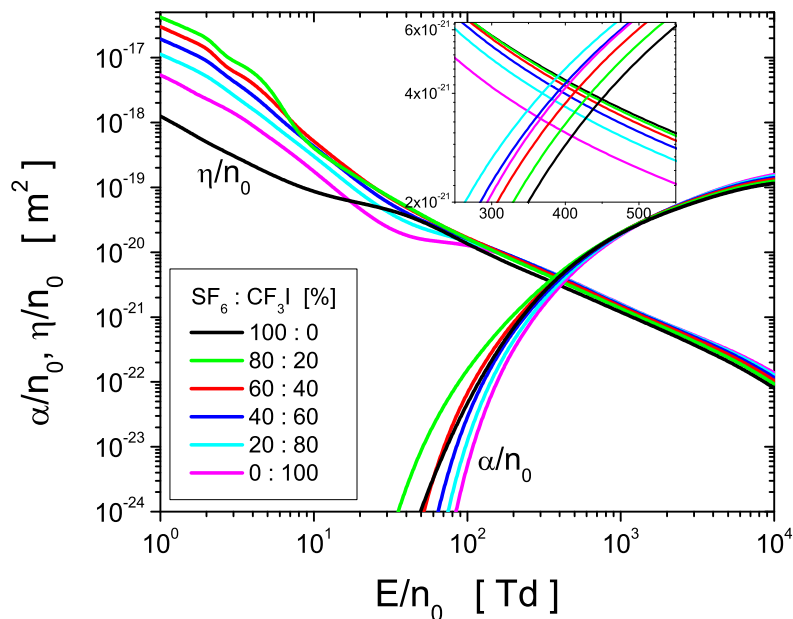


Slika 4.20: Promena fluks (levi panel) i balk (desni panel) transverzalnog koeficijenta difuzije sa  $E/n_0$  za elektrone u  $\text{SF}_6$ - $\text{CF}_3\text{I}$  smešama. Rezultati su dobijeni u Monte Karlo simulacijama uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Oznake krivih sa desnog panela se odnose i na levi panel.

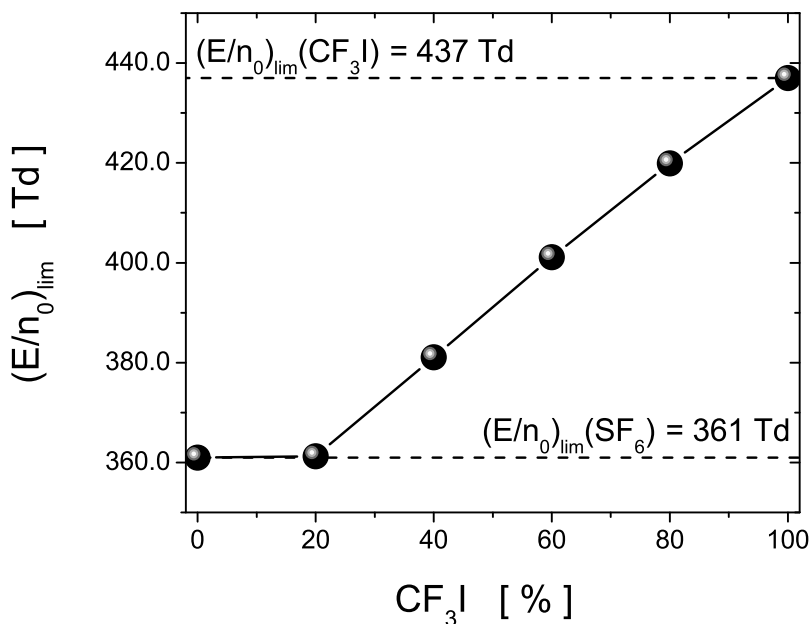
osetljiva na sastav gasne smeše: razlike između vrednosti brzine su u opsegu od maksimalno  $\sim 12\%$ . Balk brzina drifta monotono raste sa poljem u intervalu od  $\sim 70$  Td do  $10^4$  Td, dok se na nižim poljima uočava NDC. Za razumevanje ovog fenomena u smešama  $\text{SF}_6$  i  $\text{CF}_3\text{I}$  mogu se koristiti slični fizički argumenti kao i u slučaju čistih gasova.

Na slici 4.19 su prikazani fluks i balk longitudinalni koeficijenti difuzije u  $\text{SF}_6$ - $\text{CF}_3\text{I}$  smešama izračunati MC simulacijama uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Na poljima višim od  $\sim 30$  Td uočava se da koeficijent  $(n_0 D_L)_F$  opada sa porastom koncentracije  $\text{CF}_3\text{I}$  u smeši. Od opisanog ponašanja odstupa kriva koja se odnosi na čist  $\text{CF}_3\text{I}$ . Ovaj koeficijent ima suprotan trend na poljima nižim od  $\sim 7$  Td: raste sa porastom koncentracije  $\text{CF}_3\text{I}$  u smeši, od čega odstupa trend čistog  $\text{SF}_6$ . Kada se posmatraju rezultati koji se odnose na koeficijent  $(n_0 D_L)_B$ , jedina pravilnost se uočava na poljima višim od  $\sim 40$  Td: balk koeficijent longitudinalne difuzije opada sa porastom koncentracije  $\text{CF}_3\text{I}$  u smeši.

Na slici 4.20 su prikazani fluks i balk transverzalni koeficijenti difuzije u  $\text{SF}_6$ - $\text{CF}_3\text{I}$  smešama



Slika 4.21: Koeficijenti jonizacije i zahvata elektrona u SF<sub>6</sub>-CF<sub>3</sub>I smešama u funkciji  $E/n_0$ . Rezultati su dobijeni u Monte Karlo simulacijama uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona.



Slika 4.22: Kritično polje gasne smeše SF<sub>6</sub>-CF<sub>3</sub>I u funkciji koncentracije CF<sub>3</sub>I gasa. Rezultati su dobijeni na osnovu rezultata prikazanih na slici 4.21.

izračunati MC simualcijama uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Koeficijent  $(n_0 D_T)_F$  opada sa porastom koncentracije CF<sub>3</sub>I u smeši na poljima višim od  $\sim 200$  Td dok, ukoliko izuzmemo čist SF<sub>6</sub>, ovaj koeficijent ima suprotan trend ponašanja na poljima nižim od  $\sim 7$  Td. Kao i kod koeficijenta  $(n_0 D_T)_F$ , balk vrednosti ovog koeficijenta opadaju sa porastom koncentracije CF<sub>3</sub>I na poljima višim od  $\sim 200$  Td.

Slika 4.21 prikazuje koeficijente jonizacije i zahvata elektrona u SF<sub>6</sub>-CF<sub>3</sub>I smešama u funkciji  $E/n_0$ . U celokupnom prikazanom opsegu polja, koeficijenti  $\alpha/n_0$  rastu, dok koeficijenti  $\eta/n_0$  opadaju

sa porastom električnog polja, što je, kao i kod čistih gasova, posledica opsega električnih polja u okviru koga se oseća uticaj preseka za jonizaciju i zahvat elektrona, respektivno. U presecima prikazanih krivih, kao što to prikazuje umetnut panel slike 4.21, dobijaju se vrednosti  $(E/n_0)_{lim}$ . Sa porastom koncentracije  $CF_3I$  u smeši, kritično električno polje raste (slika 4.22), čime se poboljšavaju karakteristike ove gasne smeše u pogledu dielektričnih osobina do viših vrednosti redukovano električnog polja.

## 4.8 Zaključak

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

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

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

# Poglavlje 5

## Transport elektrona u $C_3H_2F_4$ gasu

### 5.1 Uvod

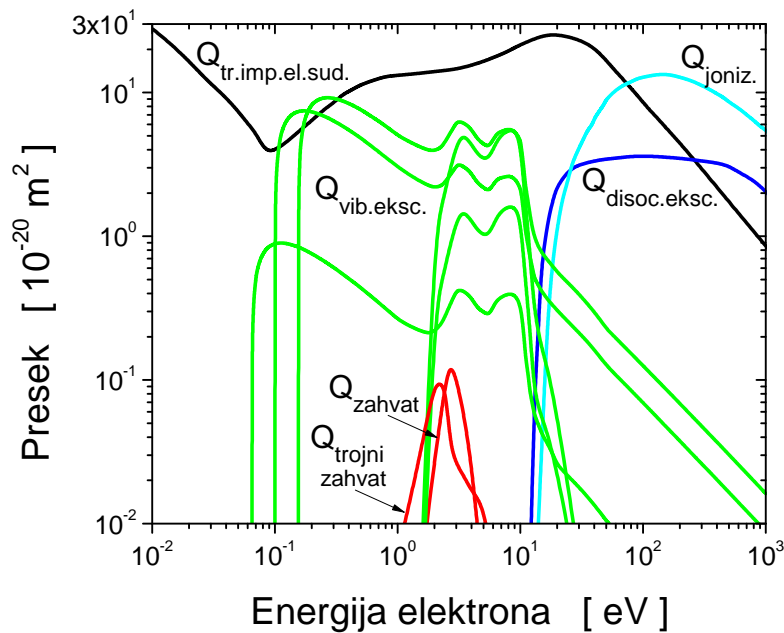
Ovo poglavlje je posvećeno analizi transporta elektrona u  $C_3H_2F_4$  i njegovim smešama sa argonom (Ar), azotom ( $N_2$ ), ugljen-dioksidom ( $CO_2$ ) i sumpor-heksafluoridom ( $SF_6$ ). Polazeći od dostupnih podataka o sudarnim procesima elektrona u gasovima sličnih karakteristika kao  $C_3H_2F_4$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

### 5.2 Fizičke i hemijske osobine $C_3H_2F_4$ gasa

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

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

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



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

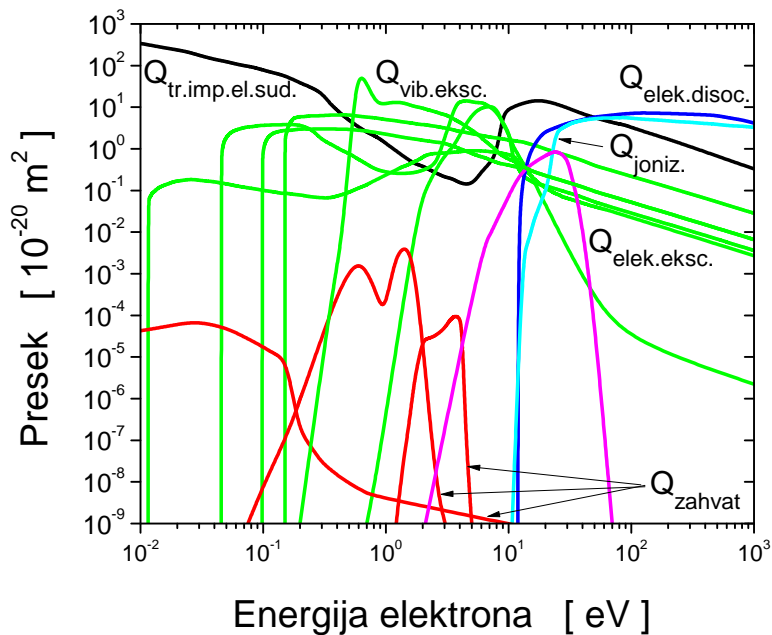
globalnog zagrevanja (GWP=6 za stogodišnji interval) i potencijalom za razaranje ozona jednakim nuli. Pre svega zbog ovih karakteristika, potencijalan je kandidat za zamenu  $SF_6$  u industriji prenosa električne energije [252, 253]. Već se koristi kao alternativan rashladni fluid umesto hidrofluorokarbonata  $C_2H_2F_4$  (poznatog i pod nazivom Freon-134a).  $C_3H_2F_4$  se odlikuje atmosferskim vremenom života od približno tri nedelje, pri čemu produkti njegove degradacije nisu štetni po životnu sredinu. Kritično polje ovog gasa je  $\sim 190$  Td.

### 5.3 Transport elektrona u hidrodinamičkim uslovima

Ovo potpoglavlje je posvećeno analizi transporta elektrona u  $C_3H_2F_4$ , čiji su preseki za rasejanje elektrona nezavisni od pritiska gasa. Na osnovu inicijalnog skupa preseka, sastavljen je konačan skup preseka za rasejanje elektrona u  $C_3H_2F_4$  primenom tehnike rojeva. Na osnovu ovog skupa preseka su izračunati transportni koefijenti elektrona u čistom gasu i značajnim gasnim smešama.

#### 5.3.1 Inicijalni skup preseka za $C_3H_2F_4$

Na osnovu detaljnog pregleda literature ustanovljeno je sledeće: 1) nema publikovanih rezultata za individualne sudarne preseke za rasejanje elektrona u  $C_3H_2F_4$ , 2) ne postoje predlozi ekstrapolacija poznatih preseka za rasejanje elektrona u drugim gasovima u domen  $C_3H_2F_4$  gasa, odnosno nije bilo pokušaja da se konstruiše kompletan skup preseka koji bi omogućio reprodukciju i dobro slaganje sa izmerenim transportnim koeficijentima. Korišćenjem ovih činjenica, kao i sličnost u pogledu fizičkih i hemijskih osobina, za inicijalni gas, čiji će preseki biti modifikovani i prilagođeni, odabran je oktafluoropropan ( $C_3F_8$ ). Skup preseka za rasejanje elektrona u  $C_3F_8$  je preuzet iz javno dostupnog Monte Karlo koda MAGBOLTZ [254]. Ovaj skup preseka je prikazan na slici 5.1 i korišćen je kao inicijalan skup preseka za fitovanje eksperimentalno određenih transportnih koeficijenata u PT eksperimentu.



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

### 5.3.2 Konačan skup preseka za $C_3H_2F_4$

Skup preseka za rasejanje elektrona u  $C_3H_2F_4$  je konstruisan tako da daje dobra slaganja sa eksperimentalnim podacima De Urkiha i saradnika, izmerenim u PT eksperimentu u čistom gasu i smešama sa Ar i  $N_2$  [255].

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

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

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

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

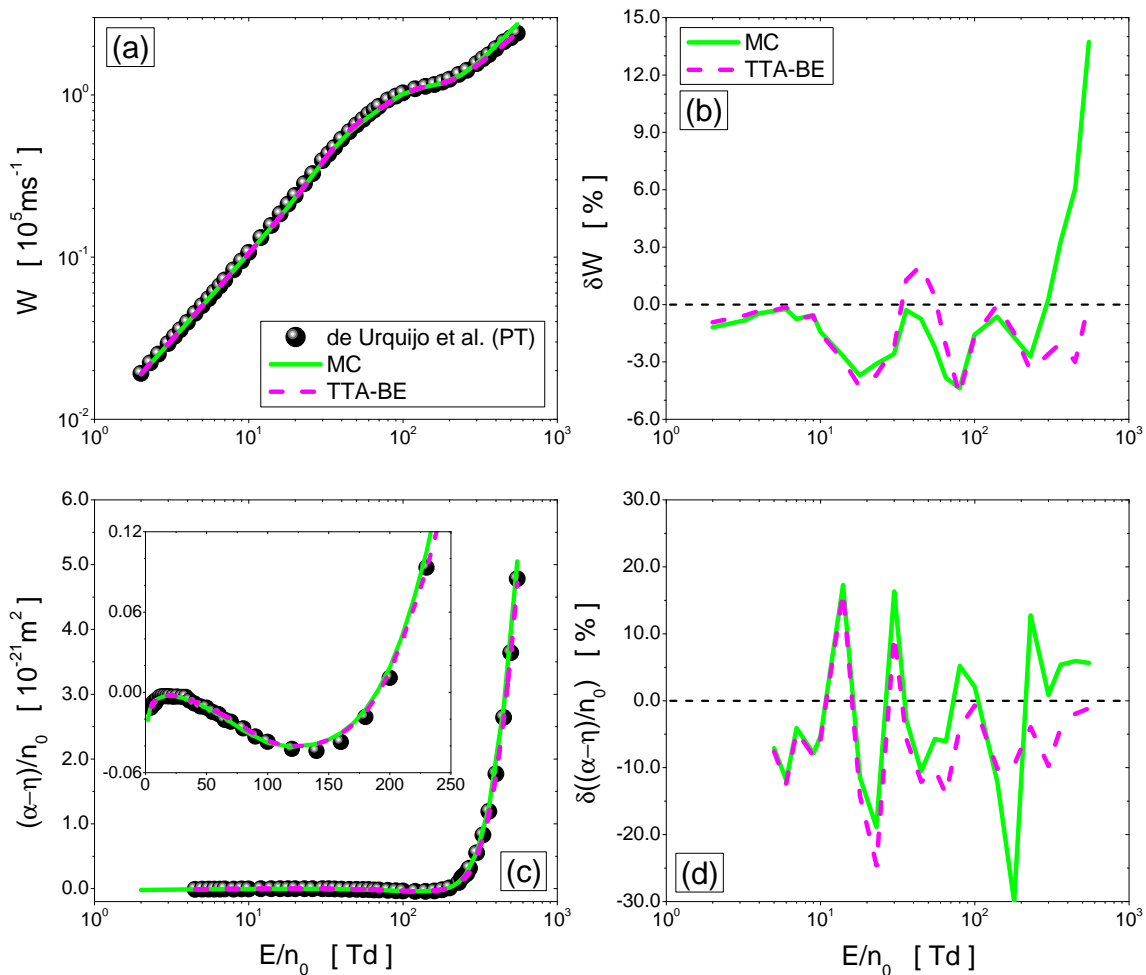
4. Modifikovan je prag preseka  $Q_{elek.disoc.}$  sa 11.8 eV na 11.0 eV, trend ponašanja preseka sa energijom elektrona je neznatno izmenjen, dok se najveća promena ogleda u povećanju veličine preseka u lokalnom maksimumu;

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

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

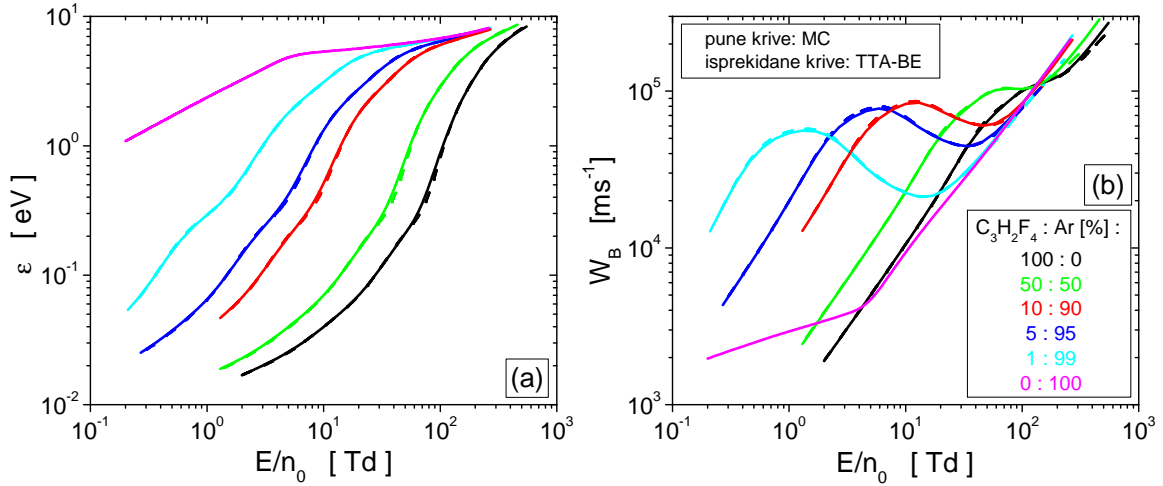
### 5.3.3 Transport elektrona u čistom $C_3H_2F_4$

U ovom potpoglavlju su prikazani rezultati transportnih koeficijenata elektrona u čistom  $C_3H_2F_4$  u oblasti električnih polja u kojoj postoje eksperimentalni podaci. Rešenja naših MC simulacija uz tehniku diskretnog reskaliranja elektrona i rezultati TTA-BE upoređeni su sa eksperimentalnim podacima De Urkiha i saradnika izmerenim u PT eksperimentu [255].



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





Slika 5.4: Srednja energija (a) i balk brzina drifta elektrona (b) u  $C_3H_2F_4$ -Ar smešama u funkciji  $E/n_0$ . Rezultati su dobijeni u Monte Karlo simulacijama i na osnovu rešenja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).

Panel (a) slike 5.3 prikazuje poređenje naših proračuna  $W$  u  $C_3H_2F_4$  sa referentnim eksperimentalnim podacima, dok je na panelu (b) prikazano procentualno odstupanje ovih proračuna od pomenutih referentnih vrednosti. Pre svega, uočava se jako dobro međusobno slaganje rezultata dve numeričke tehnike u gotovo čitavom ispitivanom opsegu polja. Značajnije razilaženje ovih rezultata je vidljivo samo na najvišim poljima. U pogledu slaganja proračuna sa eksperimentalnom  $W$ , odstupanja iznose maksimalno 4%, osim na najvišim poljima na kojima rezultati MC simulacija za 14% odstupaju od rezultata PT eksperimenta.

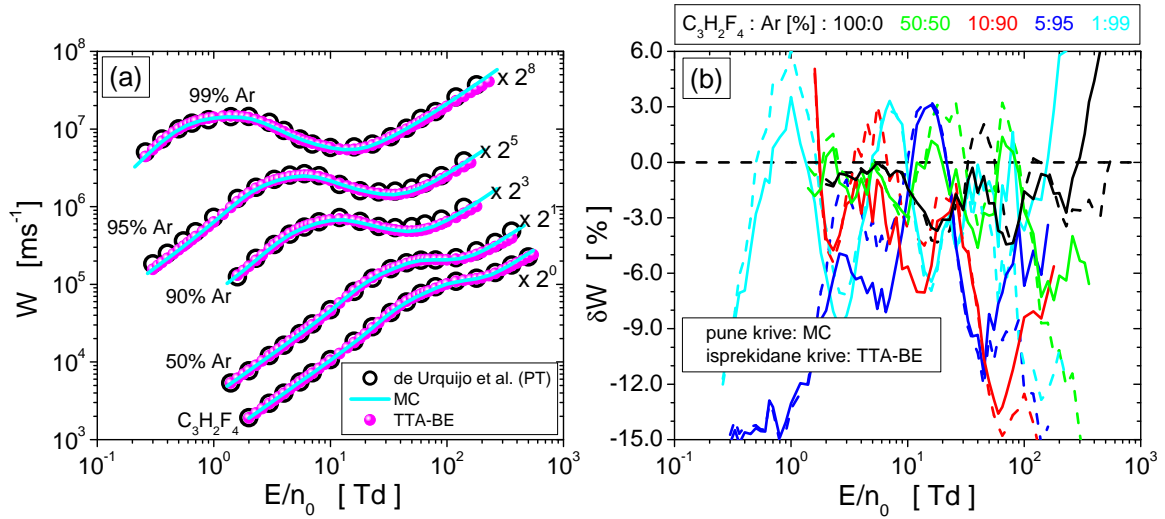
Paneli (c) i (d) slike 5.3 prikazuju analogne rezultate koji se, u ovom slučaju, odnose na koeficijent  $(\alpha - \eta)/n_0$ . Proračunima putem numeričkih tehnika MC i TTA-BE dobijaju se gotovo identični rezultati. Procentualna odstupanja proračuna od eksperimentalnih podataka kreću se u opsegu od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

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

### 5.3.4 Transport elektrona u $C_3H_2F_4$ -Ar smešama

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

Na slici 5.4 su prikazani rezultati MC simulacija i rešenja TTA-BE za  $\varepsilon$  i  $W_{Bulk}$  u  $C_3H_2F_4$ -Ar smešama u funkciji  $E/n_0$ .  $\varepsilon$  je monotono rastuća funkcija električnog polja u svim prikazanim smešama. Porast srednje energije sa povećanjem koncentracije Ar u smeši je posledica smanjenja energijskih gubitaka elektrona u velikom broju neelastičnih sudara sa molekulom  $C_3H_2F_4$ . U odnosu

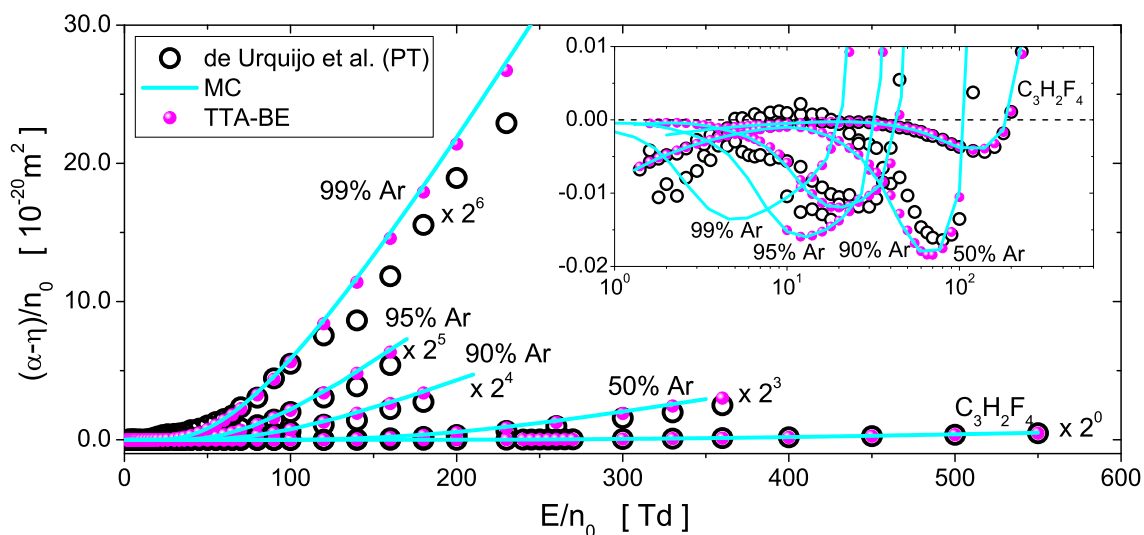


Slika 5.5: Brzina drifta elektrona (a) i procentualna odstupanja proračuna u odnosu na eksperimentalne podatke De Urkiha i saradnika izmerene u PT eksperimentu (b). Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama i rešavanjem Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana u  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$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

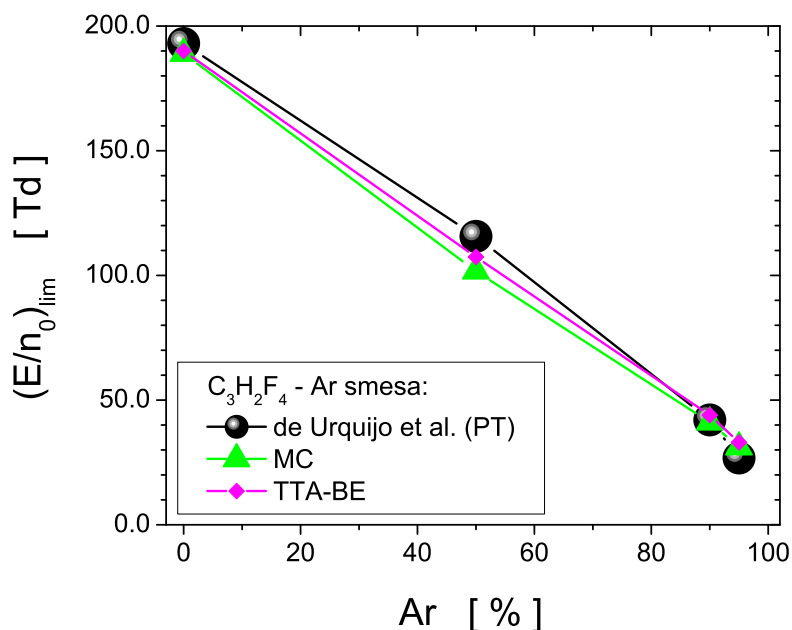
na  $\varepsilon$ ,  $W$  ima komplikovanije ponašanje sa promenom  $E/n_0$ . Na poljima nižim od  $\sim 2$  Td i višim od  $\sim 160$  Td,  $W$  raste sa porastom koncentracije Ar u smeši. U opsegu polja (106, 160) Td, ponašanje balk brzine drifta je suprotno opisanom ponašanju, dok se u centralnoj oblasti polja uočava NDC efekat u sve četiri dvokomponentne smeše. Ovaj fenomen je izraženiji sa porastom koncentracije Ar u smeši, što jasno ukazuje na činjenicu da NDC fenomen nije indukovano eksplicitnim uticajem zahvata elektrona, kao što je to bio slučaj u gasovima  $\text{CF}_3\text{I}$  i  $\text{SF}_6$ . U ovom slučaju, NDC nastaje zbog rapidne promene načina na koji elektroni gube svoju energiju u velikom broju elastičnih sudara. NDC fenomen u smešama plemenitih i molekularnih gasova je opažen mnogo puta do sada [35, 256].

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

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



Slika 5.6: Efektivan koeficijent jonizacije u  $C_3H_2F_4$ -Ar smešama u funkciji  $E/n_0$ . Poređenje rezultata Monte Karlo simulacija i rešavanja Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana sa eksperimentalnim vrednostima De Urkiha i saradnika izmerenim u PT eksperimentu. Radi preglednosti, rezultati su skalirani faktorom  $2^n$  (osim rezultata na umetnutom panelu).

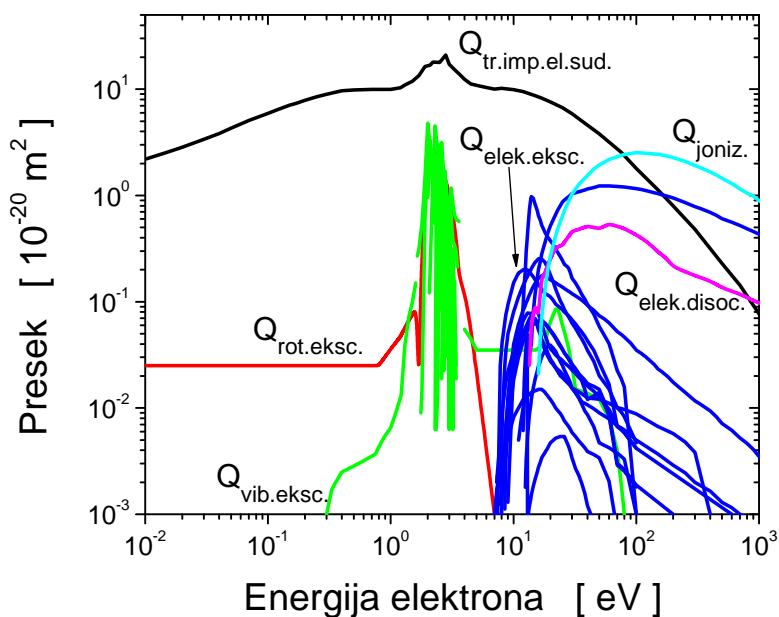


Slika 5.7: Kritično polje gasne smeše  $C_3H_2F_4$ -Ar u funkciji koncentracije argona. Rezultati su dobijeni na osnovu eksperimentalnih i numerički izračunatih efektivnih koeficijenata jonizacije prikazanih na slici 5.6.

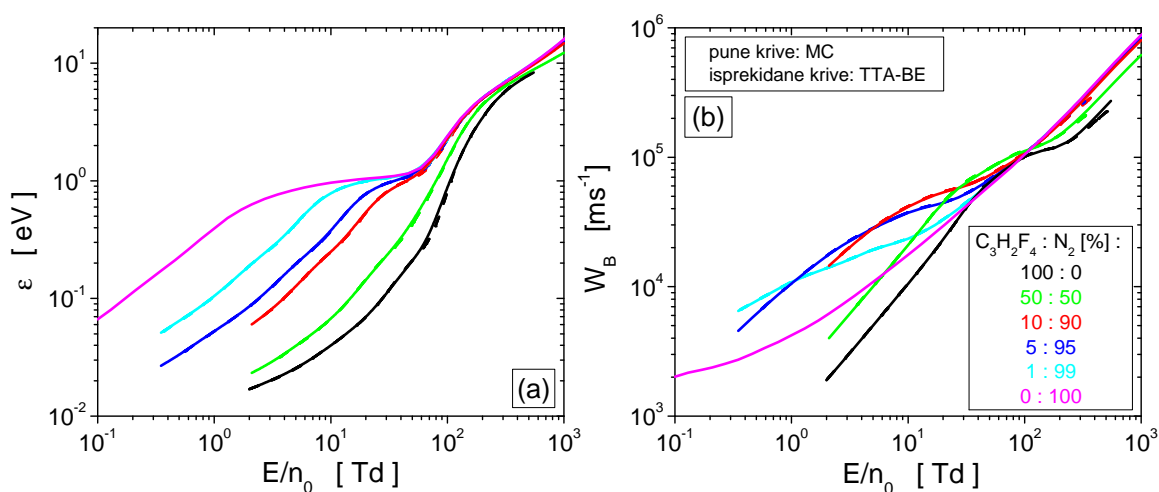
### 5.3.5 Transport elektrona u $C_3H_2F_4$ - $N_2$ smešama

Za potrebu izračunavanja transportnih koeficijenata elektrona u  $C_3H_2F_4$ - $N_2$  smešama je korišćen skup preseka za rasejanje elektrona u  $N_2$  (slika 5.8) koji su konstruisale kolege iz naše laboratorije [257]. Proračuni transportnih koeficijenata elektrona u ovoj gasnoj smeši su izvršeni u opsegu  $E/n_0$  u kome postoje eksperimentalni rezultati De Urkiha i saradnika.

Na slici 5.9 su prikazani rezultati MC simulacija i TTA-BE rešenja za veličine  $\varepsilon$  i  $W_B$  u smešama  $C_3H_2F_4$ - $N_2$  u funkciji  $E/n_0$ . Kao i u prethodno analiziranoj gasnoj smeši,  $\varepsilon$  je monotono rastuća



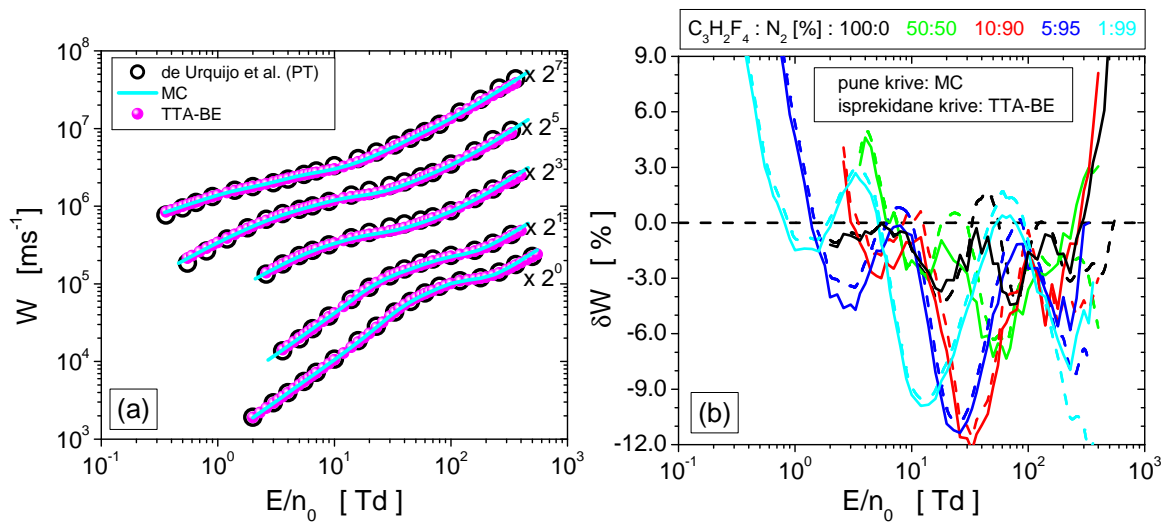
Slika 5.8: Skup preseka za rasejanje elektrona u azotu konstruisan u našoj laboratoriji. Skup sadrži:  $Q_{tr.imp.el.sud.}$  presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima,  $Q_{rot.eksc.}$  presek za rotacionu ekscitaciju, devet  $Q_{vib.eksc.}$  preseka za vibracionu ekscitaciju, trinaest  $Q_{elek.eksc.}$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



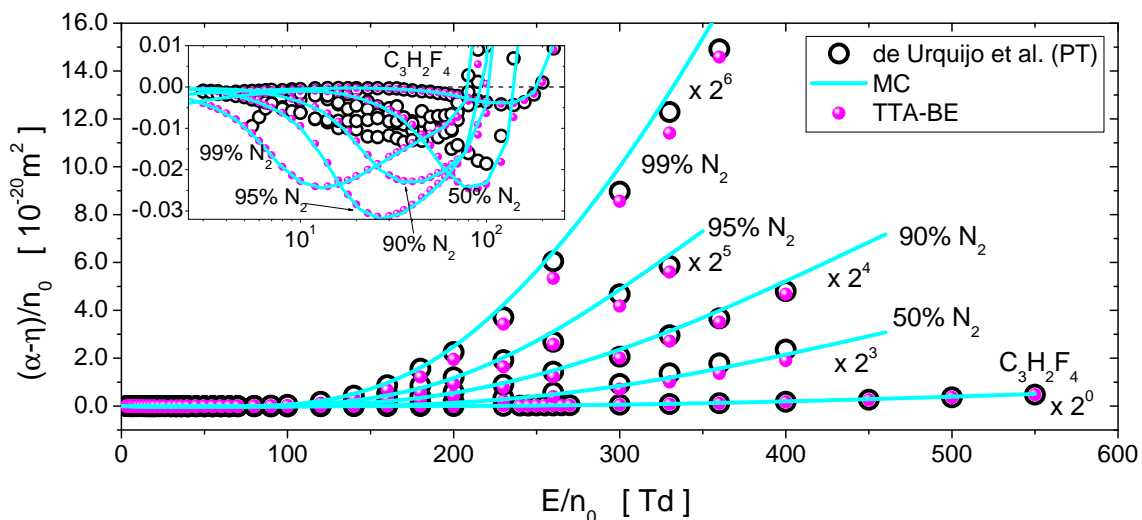
Slika 5.9: Srednja energija (a) i balk brzina drifta elektrona (b) u  $C_3H_2F_4-N_2$  smešama u funkciji  $E/n_0$ . Rezultati su dobijeni u Monte Karlo simulacijama i na osnovu rešenja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).

funkcija polja koja na fiksnom  $E/n_0$  dobija veću vrednost sa porastom koncentracije  $N_2$  u smeši.  $\varepsilon$  je neznatno zavisna od sastava gasne smeše na poljima višim od  $\sim 50$  Td, posebno u slučaju smeša sa koncentracijom  $N_2$  većom od 50%.  $W_B$  takođe monotono raste sa porastom polja uz promenu trenda brzine porasta sa promenom  $E/n_0$ . Za redukovana električna polja približno veća od  $\sim 100$  Td uočava se pravilnost ponašanja  $W_B$ : njena vrednost raste sa porastom koncentracije  $N_2$  u smeši.

Na slici 5.10(a) su prikazani isti rezultati kao na slici 5.9(b), samo što su, u ovom slučaju, otežnjeni faktorima  $2^n$  kako bi se povećala preglednost rezultata. Na panelu (b) slike 5.10 su prikazana procentualna odstupanja naših rezultata od referentnih vrednosti. Ona se kreću u opsegu od  $\pm 5\%$ , dok



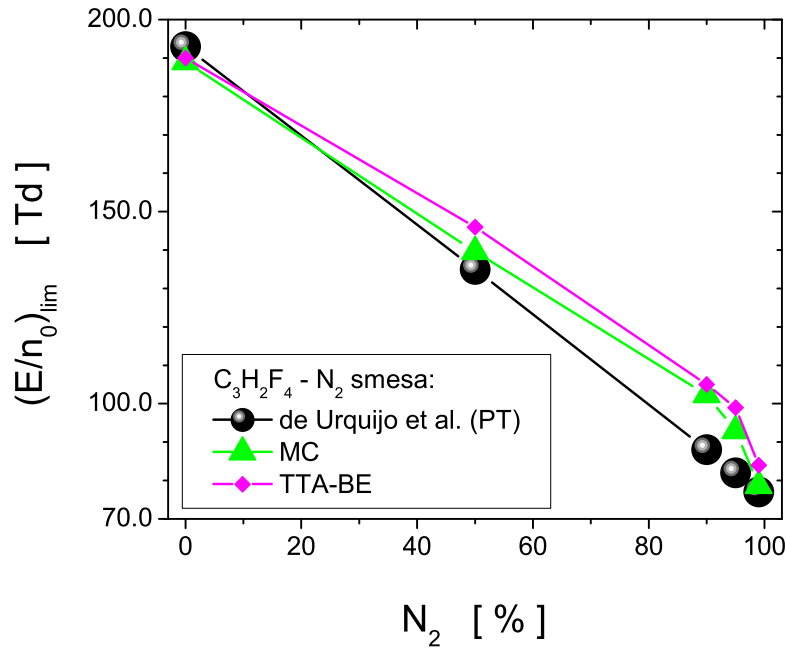
Slika 5.10: Brzina drifta elektrona (a) i procentualna odstupanja proračuna u odnosu na eksperimentalne podatke De Urkiha i saradnika izmerene u PT eksperimentu. Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama i rešavanjem Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana u  $C_3H_2F_4-N_2$  smešama su prikazani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



Slika 5.11: Efektivan koeficijent jonizacije u  $C_3H_2F_4-N_2$  smešama u funkciji  $E/n_0$ . Poređenje rezultata Monte Karlo simulacija i rešavanja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana sa eksperimentalnim vrednostima De Urkiha i saradnika izmerenim u PT eksperimentu. Radi preglednosti, rezultati su skalirani faktorom  $2^n$  (osim rezultata na umetnutom panelu).

u pojedinim poljima iznose do -12%. Opažena odstupanja su posledica nepotpune konzistentnosti skupa preseka za rasejanje elektrona u  $N_2$  i eksperimentalnih merenja transportnih koeficijenata u istom gasu od strane De Urkiha i saradnika.

Na slici 5.11 je prikazan efektivan koeficijent jonizacije u smešama  $C_3H_2F_4-N_2$  u funkciji  $E/n_0$ . U pitanju su rezultati naših MC simulacija i TTA-BE rešenja pored kojih su prikazani i referentni podaci. Na poljima višim od  $\sim 200$  Td odstupanja TTA-BE rezultata od eksperimentalnih podataka su u okviru 20%. Kao i u okviru rezultata kod smeša  $C_3H_2F_4-Ar$ , izostavljeno je prikazivanje procentualnih odstupanja između izračunatih i izmerenih vrednosti efektivnog koeficijenta jonizacije kako se ne bi stekao pogrešan utisak o kvalitetu skupa preseka za ispitivan gas. Za  $E/n_0$  manje od približno 200 Td, slaganja između izračunatih i eksperimentalnih vrednosti su mnogo lošija (videti umetnut panel). Upravo zbog ovog neslaganja između izračunatih i eksperimentalno određenih vrednosti efektivnog



Slika 5.12: Kritično polje gasne smeše  $C_3H_2F_4-N_2$  u funkciji koncentracije azota. Rezultati su dobijeni na osnovu eksperimentalnih i numerički izračunatih efektivnih koeficijenata jonizacije prikazanih na slici 5.11.

koeficijenta jonizacije, mogu se opaziti neslaganja između kritičnih polja koja su prikazana u funkciji koncentracije  $N_2$  (slika 5.12). U svakom slučaju, generalan trend ponašanja  $(E/n_0)_{lim}$  sa porastom koncentracije  $N_2$  je identičan, kako sa jedne strane za proračune MC i TTA-BE, tako i sa druge strane za eksperimentalne rezultate.

## 5.4 Transport elektrona u nehidrodinamičkim uslovima: efekti pritiska gasa

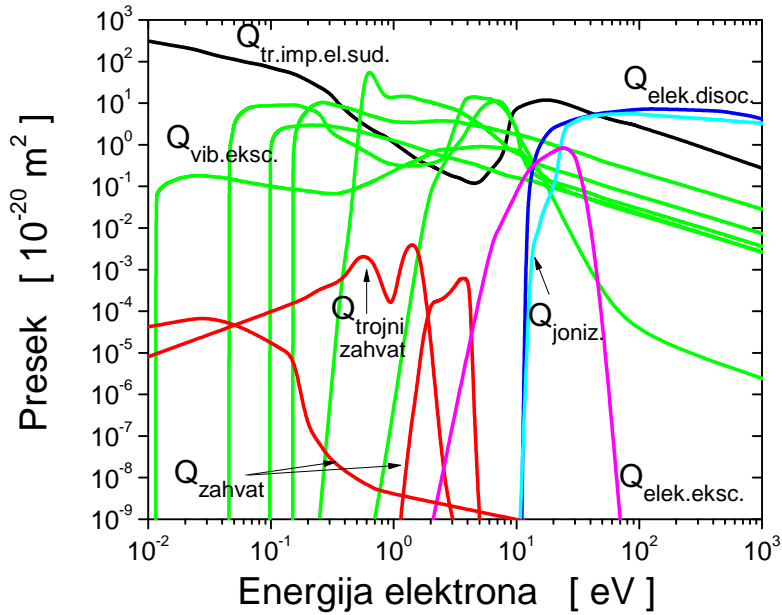
U ovom potpoglavlju se bavimo analizom transporta elektrona u  $C_3H_2F_4$  na različitim pritiscima. Na osnovu druge verzije skupa preseka za ovaj gas, u kome je presek za zahvat elektrona zavisao od pritiska, izračunati su transportni koeficijenti elektrona u  $C_3H_2F_4$ . Rezultati MC simulacija (dobijeni uz korišćenje tehnike diskretnog reskaliranja elektrona) i rešenja TTA-BE proračuna u opsegu polja u kome postoje eksperimentalni podaci upoređeni su i sa referentnim merenjima Čačereua i saradnika izmerenim u PT eksperimentu [253].

### 5.4.1 Skup preseka za rasejanje elektrona u $C_3H_2F_4$ zavisao od pritiska

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

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

1.  $Q_{tr.imp.el.sud}$  je dobijen skaliranjem odgovarajućeg preseka iz inicijalnog skupa faktorom 0.83;



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

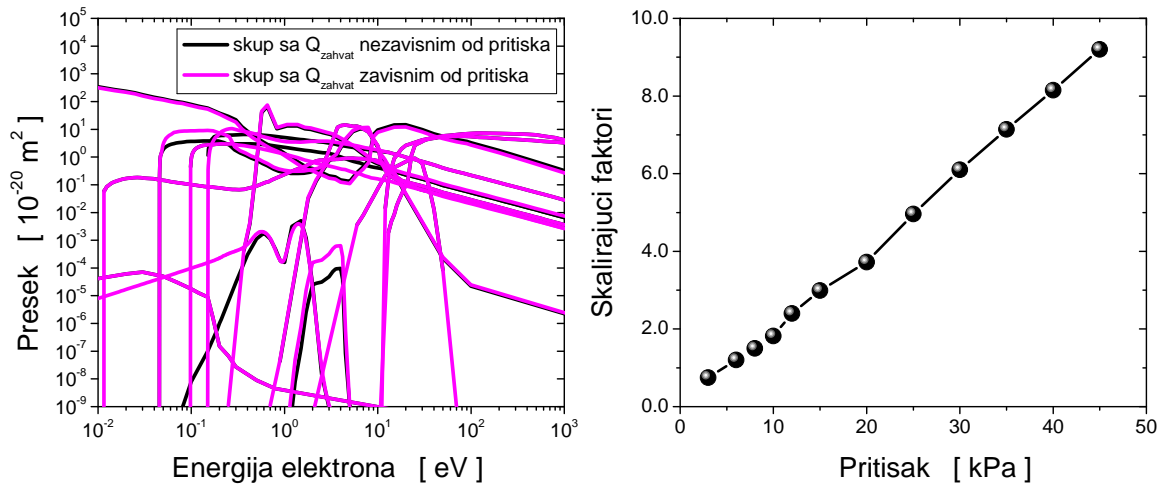
2.  $Q_{vib.eksc.}$  sa pragom 0.045 eV je skaliran faktorima iz intervala (1.1, 2.5) u opsegu energija od 0.049 eV do 2.27 eV.  $Q_{vib.eksc.}$  sa pragom 0.097 eV je skaliran faktorima iz intervala (0.35, 0.9) u opsegu energija od 0.3 eV do poslednje tačke preseka.  $Q_{vib.eksc.}$  sa pragom 0.15 eV je skaliran faktorima iz intervala (0.3, 1.7) počevši od praga do 12.06 eV;

3. Iz preseka  $Q_{zahvat}$  sa pragom 0.08 eV su izbačene tačke niže od 0.15 eV (čime je ova vrednost proglašena za novi prag) nakon čega je celokupan presek skaliran faktorima iz opsega (0.75, 11250). Dodatno, za ovaj presek je ustanovljena zavisnost od pritiska iskazana skalirajućim faktorima (slika 5.14(b));

4.  $Q_{zahvat}$  sa pragom od 0.8 eV je skaliran faktorima (3.1, 3.3) u celokupnom opsegu definisanosti.

#### 5.4.2 Transport elektrona u čistom $C_3H_2F_4$ na različitim pritiscima

Na slici 5.15(a) su prikazani rezultati naših MC simulacija i rešenja TTA-BE za brzinu drifta elektrona u  $C_3H_2F_4$  zajedno sa rezultatima referentnih merenja. Generalno govoreći, rezultati obe numeričke tehnike prate trend eksperimentalnih rezultata uz odstupanja u odnosu na njih u opsegu od  $\pm 4\%$  (slika 5.15(b)). Rezultati kodova MC i TTA-BE gotovo su identični na poljima višim od  $\sim 100$  Td. Razlike između ovih rezultata na nižim poljima potiču od neadekvatnosti TTA-BE proračuna u opsegu energija u kome se oseća uticaj  $Q_{vib.eksc.}$ . Što se tiče koeficijenta  $n_0 D_L$  (panel (c)), rezultati naših proračuna ne odgovaraju trendu eksperimentalnih podataka. Ukoliko međusobno poredimo MC i TTA-BE rezultate, MC simulacijama se dobijaju vrednosti  $n_0 D_L$  koje su za 5% veće od TTA-BE rezultata. Odstupanja rezultata obe numeričke tehnike od referentnih merenja se kreću u opsegu od -20% do -70% (panel (d)).



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

U ovom potpoglavlju, fokus je stavljen na rekonstrukciju brzinskog koeficijenta efektivne jonizacije ( $K_{eff}$ ) u čistom  $C_3H_2F_4$  na različitim pritiscima. Rezultati naših MC simulacija i TTA-BE rešenja (slika 5.16(a)) gotovo savršeno prate trendove eksperimentalnih podataka na svim pritiscima. Ukoliko se zanemare odstupanja u nekoliko tačaka na poljima nižim od 40 Td i na najvišim prikazanim poljima (slika 5.16(b)), onda se može reći da naši proračuni ne odstupaju za više od 5% od eksperimentalnih podataka (umetnut panel slike 5.16(b)). Prikazano slaganje je rezultat pravilnog odabira preseka za zahvat elektrona koji reprezentuje trojni zahvat kao i rezultat ispravnih skalirajućih faktora ovog preseka na različitim pritiscima (slika 5.14(b)). Neophodno je naglasiti da upoređujući naše proračune sa slike 5.16(a) sa proračunima iz rada A. Čačereua i saradnika (slika 11 u [253]), vidi se da se naši rezultati na svim pritiscima mnogo bolje slažu sa odgovarajućim eksperimentalnim vrednostima od proračuna koje su objavili ovi autori.

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

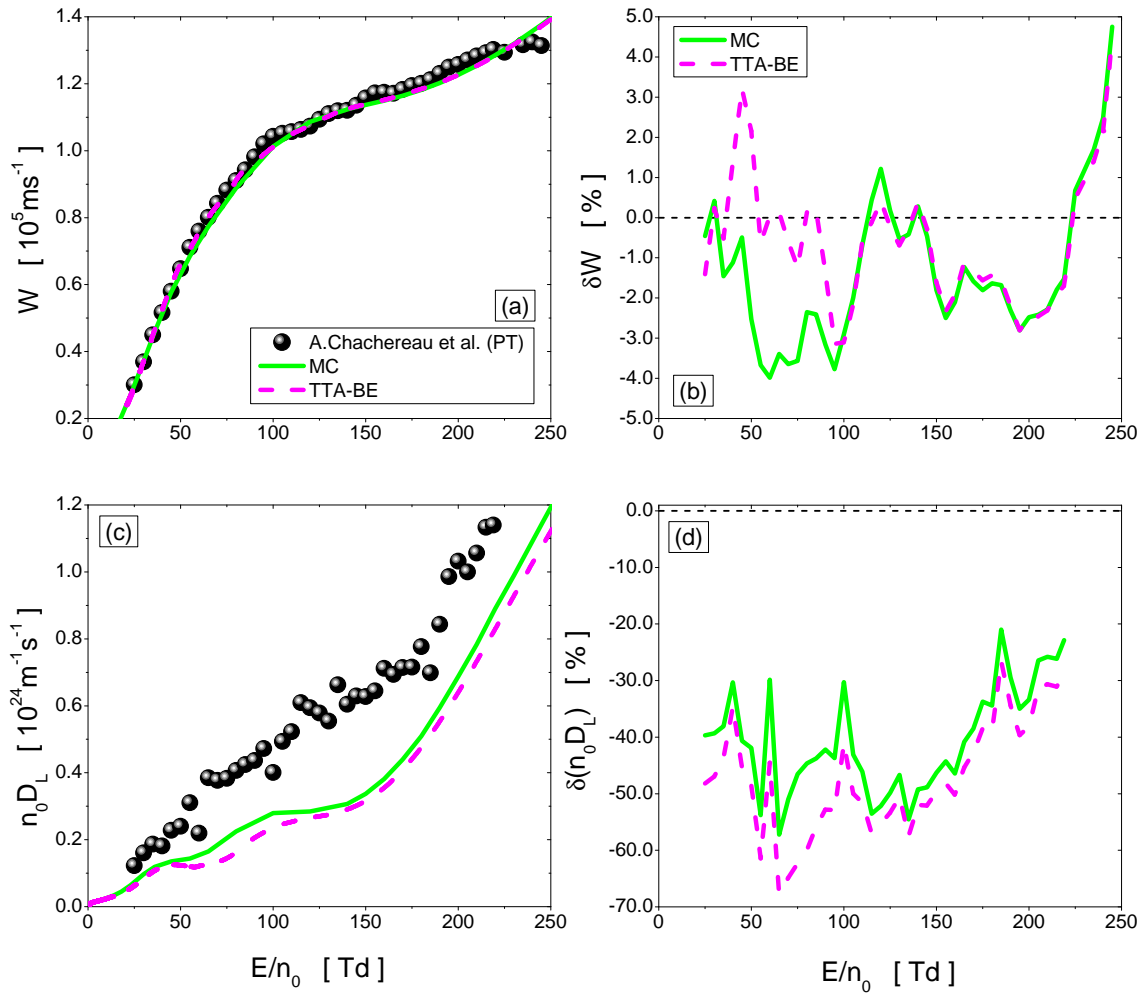
## 5.5 Transport elektrona u $C_3H_2F_4-CO_2$ i $C_3H_2F_4-SF_6$ smešama i efekti pozitivne sinergije

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

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

Na slici 5.18 su prikazane vrednosti  $(E/n_0)_{lim}$  u smeši  $C_3H_2F_4-CO_2$  dobijene na osnovu rezultata MC simulacija za koeficijent  $(\alpha - \eta)/n_0$  u funkciji koncentracije  $CO_2$  (nije prikazano u disertaciji). Kako je  $CO_2$  slabiji dielektrik u odnosu na  $C_3H_2F_4$ , očekivano je opadanje vrednosti  $(E/n_0)_{lim}$  sa



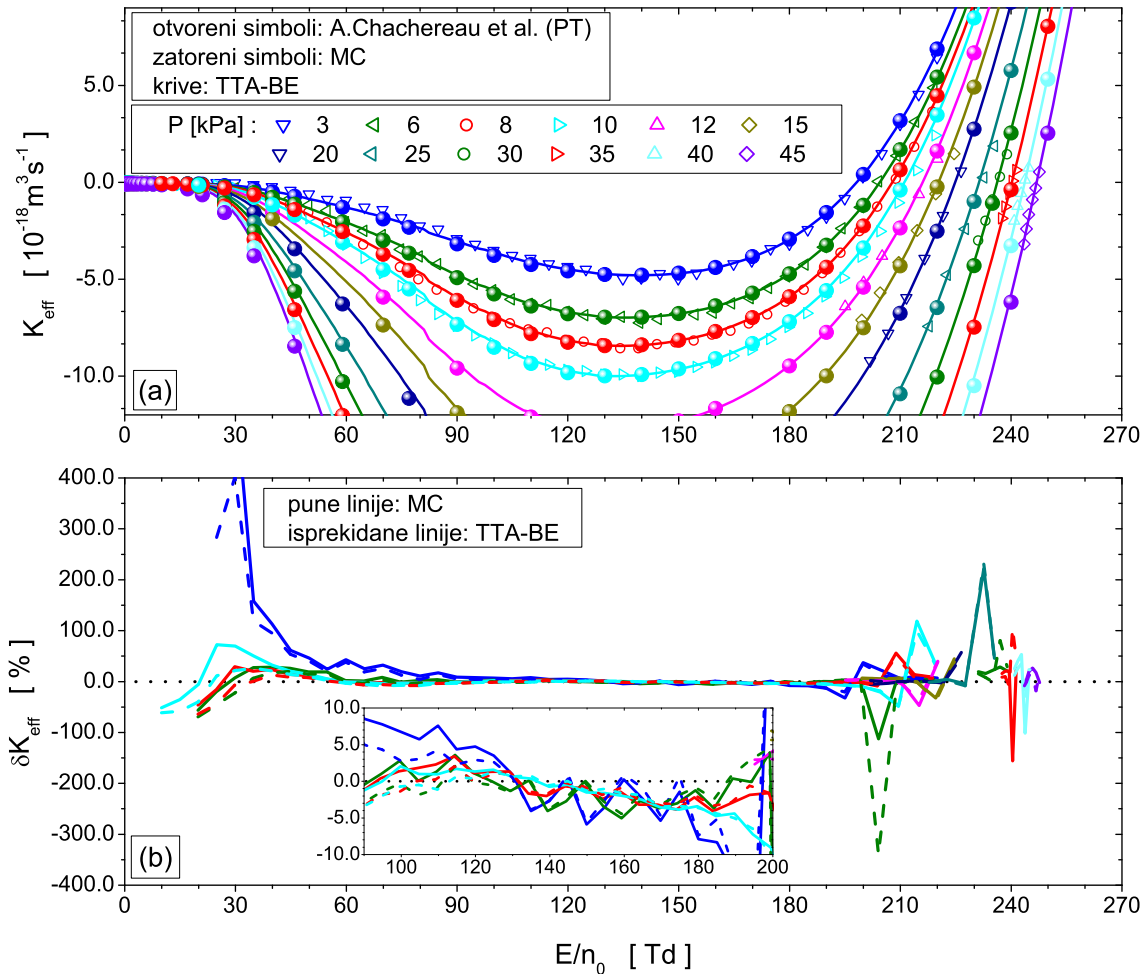


Slika 5.15: Transportni koeficijenti elektrona u  $C_3H_2F_4$  u funkciji  $E/n_0$ . Poređenje rezultata Monte Karlo simulacija i rešavanja Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana sa eksperimentalnim podacima A. Čačereua i saradnika za koeficijente  $W$  i  $n_0 D_L$ , respektivno (paneli (a) i (c)). Procentualno odstupanje proračuna od referentnih vrednosti pomenutih transportnih koeficijenata (paneli (b) i (d))). Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panel (c) dok se oznake krivih sa panela (b) odnose i na panel (d).

porastom koncentracije ugljen-dioksida u smeši. Kritična polja smeša su za (50, 70)% manja od vrednosti kojom se odlikuje  $SF_6$ . Ipak, niska vrednosti faktora GWP ovog gasa je jedna od činjenica koju treba imati u vidu u potrazi za alternativama  $SF_6$  gasa.

Tipični zahtevi u srednjenaponskoj opremi za transport električne energije su pritisak gasa od 140 kPa na 293 K i minimalna radna temperatura od 258 K. Na osnovu karakteristika  $C_3H_2F_4$  zaključuje se da ove zahteve može obezbediti smeša sa koncentracijom  $C_3H_2F_4$  od maksimalnih 95%. U visokonaponskoj opremi, u kojoj je potreban pritisak gasa od 600 kPa na 293 K i minimalna temperatura od 248 K, koncentracija  $C_3H_2F_4$  u smeši ne sme preći vrednost od 15% ([258]). Kao što je pomenuto, iako se  $C_3H_2F_4$  odlikuje višestruko nižim  $(E/n_0)_{lim}$  u odnosu na  $SF_6$ , ekstrapolacijom rezultata sa slike 5.17 do vrednosti od 140 kPa dobija se kritično polje od  $\sim 360$  Td. Činjenica da kritično polje  $C_3H_2F_4$  dostiže vrednost kojom se odlikuje  $SF_6$  veoma je optimistična u smislu upotrebe ovog dielektrika poslednje generacije u srednjenaponskoj opremi za transport električne energije.

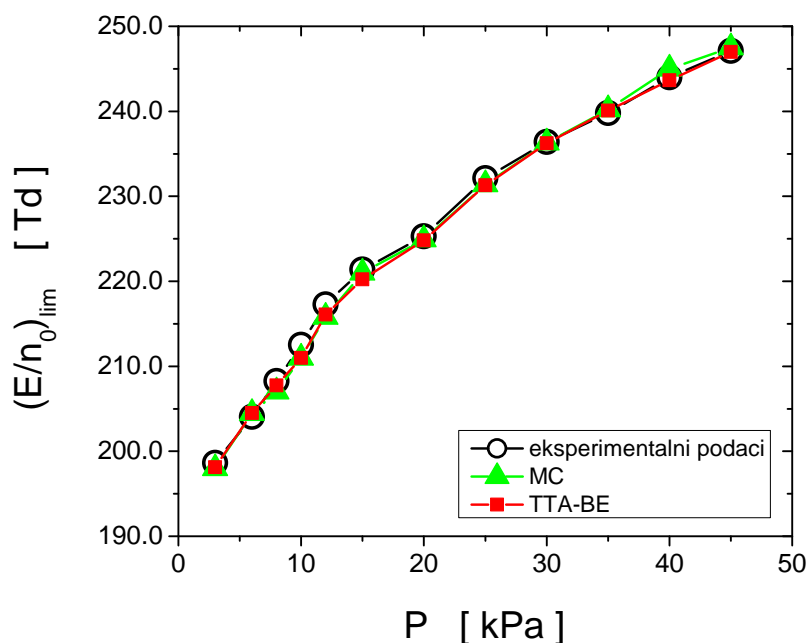
Na slici 5.19 su prikazana kritična električna polja  $C_3H_2F_4$ - $SF_6$  smeše u funkciji koncentracije  $SF_6$ . Rezultati su dobijeni na osnovu koeficijenta  $(\alpha - \eta)/n_0$  koji je izračunat MC simulacijama (nije prikazano u disertaciji). Na slici se vidi atipično ponašanje  $(E/n_0)_{lim}$ : umesto očekivanog rasta ili opadanja sa porastom koncentracije jedne komponente gasne smeše, u opsegu koncentracija  $SF_6$  od



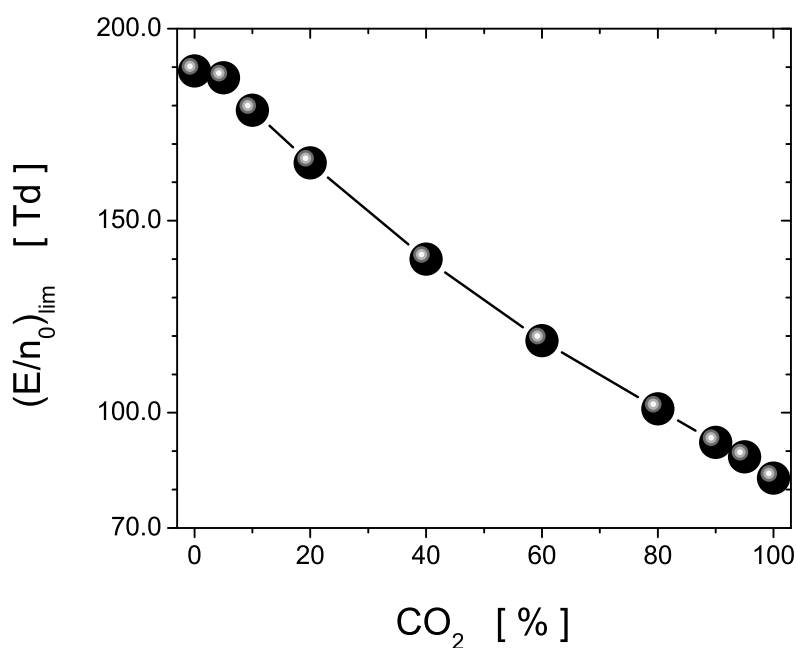
Slika 5.16: Brzinski koeficijent efektivne jonizacije u  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  u funkciji  $E/n_0$  na različitim pritiscima. Poređenje rezultata Monte Karlo simulacija i rešavanja Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana sa eksperimentalnim merenjima A. Čačereua u PT eksperimentu (a). Procentualno odstupanje proračuna u odnosu na eksperimentalne podatke (b).

$\sim 40\%$  do  $\sim 90\%$  uočava se porast  $(E/n_0)_{\text{lim}}$  iznad vrednosti kojima se odlikuju čiste komponente ove smeše. Prikazana pojava, poznata pod nazivom *efekat pozitivne sinergije*, već je uočena u binarnim gasnim smešama. Džejs [92] i Vuton [93] su 1980. godine uočili ovaj efekat u smešama  $1\text{-C}_3\text{F}_6$  i  $\text{SF}_6$ ,  $c\text{-C}_4\text{F}_8$  i  $1\text{-C}_3\text{F}_6$ ,  $\text{SO}_2$  i  $\text{SF}_6$ ,  $\text{SO}_2$  i  $1\text{-C}_3\text{F}_6$ ,  $\text{SF}_6$  i  $1\text{-C}_3\text{F}_6$ . Džejs i saradnici su pretpostavili da efekat nastaje kao posledica elektronske termalizacije u gasovima sa dvostrukom kovalentnom vezom dok su Vuton i saradnici tvrdili da je uzrok ovog efekta distorzija funkcije raspodele energija elektrona. U dodatnim analizama novih gasnih smeša ( $\text{CCL}_2\text{F}_2\text{-SF}_6$ ,  $\text{C}_3\text{F}_8\text{-SF}_6$ ) je takođe uočen efekat pozitivne sinergije ali u znatno manjoj meri. Hanter [259] i Kristoforou [260] su na osnovu svojih istraživanja zaključili da je uzrok ovog efekta zahvat elektrona koji je zavisao od pritiska. Svoj zaključak su izveli ispitivanjem smeša u kojima je bar jedan molekularan gas posedovao presek za zahvat elektrona koji zavisi od pritiska.

Hasl i saradnici su uočili efekat pozitivne sinergije u  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{-SF}_6$  smešama i objavili ga u svom radu [261]. Autori ovog rada su objasnili ovaj efekat činjenicom da elektroni veoma efikasno gube energiju u velikom broju neelastičnih sudara koji vode ka vibracionoj ekscitaciji molekula  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i na taj način se prevode u energijsku oblast u kojoj budu zahvaćeni molekulom  $\text{SF}_6$ . Tačnost ovog objašnjenja se može videti na osnovu funkcija raspodele energija elektrona u  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4\text{-SF}_6$  smešama koje su izračunate za  $E/n_0$  od 361 Td (slika 5.20). Povećanjem koncentracije  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  u smeši, funkcija raspodele energija elektrona sve manje podseća na Maksvelovu raspodelu. Najveći broj



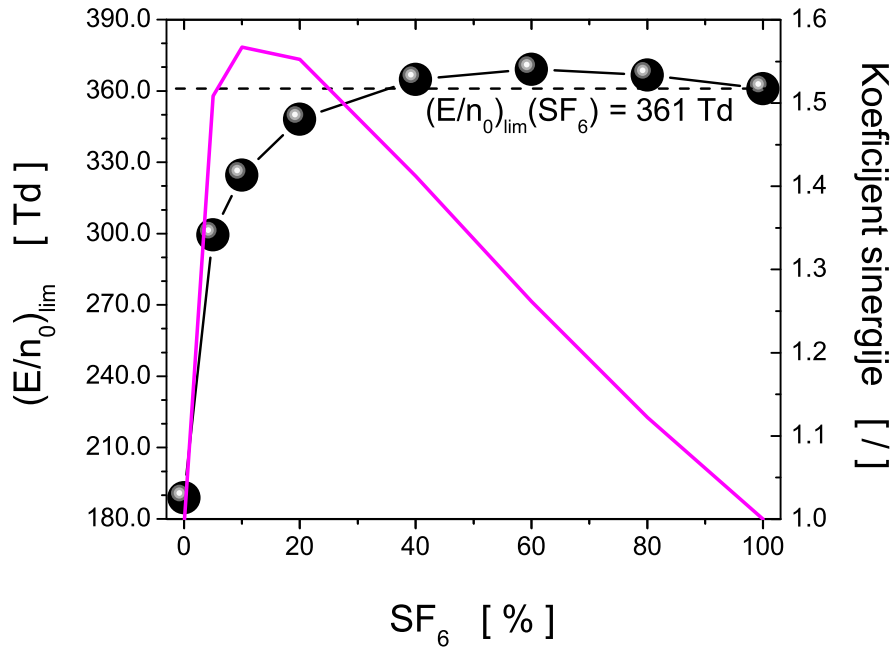
Slika 5.17: Kritično polje  $C_3H_2F_4$  u funkciji pritiska gasa. Eksperimentalni podaci A. Čačereua dobijeni u PT eksperimentu su upoređeni sa našim proračunima baziranim na Monte Karlo simulacijama i aproksimaciji dva člana za rešavanje Boltzmanove jednačine.



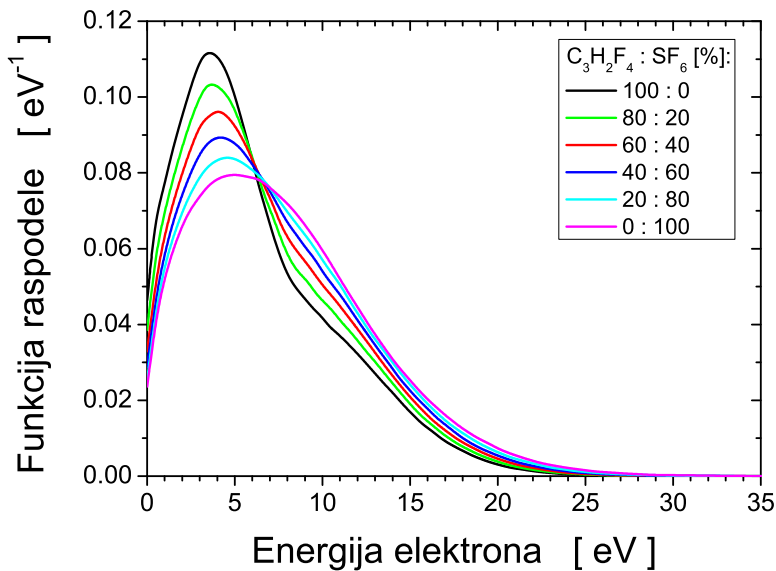
Slika 5.18: Kritično polje gasne smeše  $C_3H_2F_4-CO_2$  u funkciji koncentracije ugljen-dioksida. Rezultati su dobijeni na osnovu efektivnih koeficijenata jonizacije izračunatih Monte Karlo simulacijama.

elektrona se nalazi u oblasti energija oko 4 eV, u kojoj svi preseki za vibracionu ekscitaciju gasa  $C_3H_2F_4$  (osim preseka sa pragom 0.097 eV i maksimumom u okolini 6 eV) imaju maksimum svog intenziteta (slika 5.13). Upravo se ovim sudarnim procesima umanjuje energija elektrona i povećava efikasnost zahvata elektrona putem  $SF_6$  gasa.

Na slici 5.19 je takođe prikazan i koeficijent sinergije. Ovaj koeficijent je izračunat kao odnos kritičnog polja gasne smeše i zbira kritičnih polja komponenata smeše otežinjenih koncentracijom gasova u smeši. Sa slike se vidi da je ovaj koeficijent najveći u smeši koja sadrži oko 10%  $SF_6$ . Na



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



Slika 5.20: Funkcija raspodele energija elektrona u  $C_3H_2F_4$ - $SF_6$  smešama. Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama na polju od 361 Td.

osnovu rezultata sa ove slike se vidi da  $C_3H_2F_4$ - $SF_6$  smeša može biti pogodan kandidat za zamenu  $SF_6$  u ulozi dielektrika u sistemima za prenos električne energije. Ne samo da se na ovaj način ostvaruje značajna redukcija  $SF_6$  već se, upravo efektom pozitivne sinergije, povećava  $(E/n_0)_{lim}$  smeše iznad vrednosti kojom se odlikuje ovaj gas sa velikim faktorom GWP.

Efekat sinergije koji su Hasl i saradnici prikazali u svom radu [261] je snažniji od onoga koji smo mi dobili MC simulacijama. Razlog leži u fitovanju našeg skupa preseka za rasejanje elektrona u čistom  $C_3H_2F_4$  na PT merenja istraživača sa ETH Univerziteta u Cirihu. Za razliku od čistog gasa,

proračuni u  $C_3H_2F_4$ - $SF_6$  smešama su vršeni bez prethodnog fitovanja na eksperimentalne podatke pošto nisu bili objavljeni u doba kada smo vršili proračune.

## 5.6 Zaključak

U ovom poglavlju je analiziran transport elektrona u hidrofluoroolefinu  $C_3H_2F_4$  i njegovim smešama sa Ar,  $N_2$ ,  $CO_2$  i  $SF_6$ . Jedan od osnovnih doprinosa ovog poglavlja doktorske disertacije je razvoj kompletnog i samousaglašenog skupa preseka za rasejanje elektrona u  $C_3H_2F_4$ . Ovaj presek je razvijen u dve varijante od kojih druga varijanta reprodukuje nehidrodinamičko ponašanje brzinskog koeficijenta efektivne jonizacije koje je eksperimentalno utvrđeno.

Kvalitet konstruisanih skupova preseka je potvrđen dobrim slaganjima izračunatih kritičnih električnih polja  $C_3H_2F_4$  i njegovih smeša sa eksperimentalnim vrednostima. Među značajnim zaključcima koji se iz njih donose, izdvaja se podatak o tome da kritično električno polje  $C_3H_2F_4$  gasa (koje iznosi  $\sim 190$  Td na atmosferskom pritisku) dostiže vrednost kojom se karakteriše  $SF_6$  ukoliko se pritisak poveća na 140 kPa. Ova činjenica je vrlo optimistična kada je u pitanju potencijalna primena  $C_3H_2F_4$ - $CO_2$  smeša u srednjenaponskoj opremi za transport električne struje.

U ovom poglavlju je uočen fenomen pozitivne sinergije u smeši  $C_3H_2F_4$ - $SF_6$  koji se odlikuje povećanjem  $(E/n_0)_{lim}$  iznad vrednosti kritičnog polja pojedinačnih komponenti smeše. Ovim su omogućena dva značajna benefita pri korišćenju gasne smeše  $C_3H_2F_4$ - $SF_6$ . Ne samo da se smanjuje koncentracija  $SF_6$  okarakterisanog visokim faktorom GWP i time sprečava dalji porast efekta staklene bašte na Zemlji, već gasna smeša obezbeđuje bolje dielektrične osobine od samog  $SF_6$ .

# Poglavlje 6

## Transport elektrona u $C_4F_7N$ gasu

### 6.1 Uvod

U ovom poglavlju je konstruisan kompletan i samousaglašen skup preseka za rasejanje elektrona u  $C_4F_7N$  gasu. Na osnovu skupa preseka, proučavan je transport elektrona u ovom gasu i njegovim smešama sa argonom (Ar), azotom ( $N_2$ ), ugljen-dioksidom ( $CO_2$ ) i sumpor-heksafluoridom ( $SF_6$ ). Kritična polja u čistom  $C_4F_7N$  gasu i njegovim smešama sa Ar,  $N_2$ ,  $CO_2$  i  $SF_6$  su dobijena na osnovu izračunatih vrednosti efektivnih koeficijenata jonizacije.

### 6.2 Fizičke i hemijske osobine $C_4F_7N$ gasa

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

$C_4F_7N$  je bezbojan, nezapaljiv gas bez mirisa. Toksičan je pri udisanju i izaziva promrzline u kontaktu sa kožom i očima. U pitanju je izolacioni gas koji ima isključivo industrijsku primenu uz strogu zabranu korišćenja u medicinske svrhe. Kompatibilan je sa najčešće korišćenim industrijskim metalima (Al i Cu), zahvaljujući čemu se može koristiti u različitim uređajima bez bojazni od korozije [262]. Pošto je njegova osnovna namena izolacija uređaja za transport električne energije, gas je testiran kako u laboratorijskim uslovima, tako i u samim instalacijama u srednjenaponskim i visokonaponskim uređajima. Odlikuje se molekularnom masom od 195.04 g/mol, tačkom ključanja od  $-4.7$  °C na atmosferskom pritisku i pritiskom pare od 253 kPa na 20 °C.

$C_4F_7N$  je nezasićen molekularan gas (alkin) u kome je atom azota vezan za ugljenični niz putem trostruke kovalentne veze. Spada u grupu rashladnih gasova četvrte generacije.  $C_4F_7N$  ne razara ozon (ODP = 0), ali je njegov faktor GWP (za stogodišnji interval) prilično visok (procenjena vrednost je između 1490 i 3646), dok je atmosfersko vreme života od 22 do 47 godina [160]. I pored ovako

visokog faktora GWP, njegov nulti faktor ODP, visoko kritično polja (približno 970 Td, preko dva ipo puta više od SF<sub>6</sub>) i niska tačka ključanja su obećavajuće karakteristike za potencijalnu upotrebu C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N u cilju zamene SF<sub>6</sub> u industriji prenosa električne energije [263]. Preporučljiva je upotreba C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N u smeši sa CO<sub>2</sub> sa molarnom koncentracijom nižom od 10% kako bi se u što manjoj meri osetio visok faktor GWP ovog gasa.

## 6.3 Sudarne i transportne osobine elektrona u C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N

### 6.3.1 Inicijalni skup preseka za C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N

C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N je jedan od gasnih dielektrika poslednje generacije. Laboratorijska istraživanja rasejanja i transportnih procesa elektrona u ovom gasu su strogo kontrolisana od strane proizvođača. Prvi podaci za sudarne procese elektrona i molekula C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N objavljeni su tokom rada na ovoj disertaciji [264]. Transportni koeficijenti elektrona su izmereni u impulsnom Taunzendovom eksperimentu u grupi profesora Džejmi De Urkiha [255]. Ovi transportni koeficijenti su korišćeni za modifikaciju inicijalnog skupa preseka i fitovanje eksperimentalno određenih transportnih koeficijenata. Nedavno su publikovana merenja u SST eksperimentu [265] i u impulsnom Taunzendovom eksperimentu [160] grupe sa ETH Univerziteta u Cirihi.

Za inicijalan skup preseka, korišćeni su podaci za rasejanje elektrona u 1,1,1,3,4,4,4-heptafluoro-3-(trifluorometil)-2-butanonu (C<sub>5</sub>F<sub>10</sub>O). Ovaj skup preseka je razvijen u saradnji sa grupom profesora Džejmi De Urkiha sa Nacionalnog Univerziteta u Meksiku na komercijalnom projektu sa jednom od vodećih multinacionalnih kompanija koja posluje u domenu tehnologije za prenos električne energije.

### 6.3.2 Konačan skup preseka za C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N

Konačan skup preseka za rasejanje elektrona u C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N je konstruisan tehnikom rojeva. Modifikacijom oblika i veličine preseka za pojedinačne sudarne procese i izbacivanjem nekoliko preseka iz inicijalnog skupa, obezbeđeno je slaganje između izračunatih transportnih koeficijenata elektrona i referentnih eksperimentalnih rezultata De Urkiha i saradnika.

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

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

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

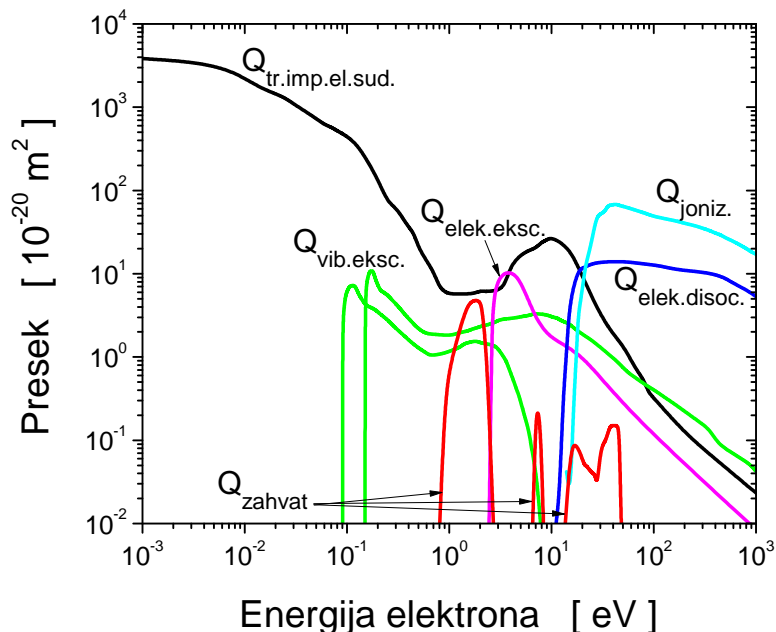
3. Prag preseka  $Q_{elek.eksc.}$  je transliran na 2.4 eV, a njegov lokalni maksimum na 4.0 eV;

4. Neznatno je izmenjen intenzitet preseka  $Q_{elek.disoc.}$ ;

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

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

Konačan skup preseka za rasejanje elektrona u C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N je prikazan na slici 6.1.



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

### 6.3.3 Transport elektrona u čistom $C_4F_7N$

U ovom potpoglavlju su prikazani transportni koeficijenti elektrona u čistom  $C_4F_7N$  u funkciji  $E/n_0$  u opsegu električnih polja u kome postoje eksperimentalni podaci. Rezultati naših Monte Carlo simulacija (MC) i numerička rešenja Bolcmanove jednačine bazirane na aproksimaciji dva člana (TTA-BE) upoređeni su sa eksperimentalnim rezultatima De Urkiha i saradnika koji su dobijeni u impulsnom Taunzendovom eksperimentu [160].

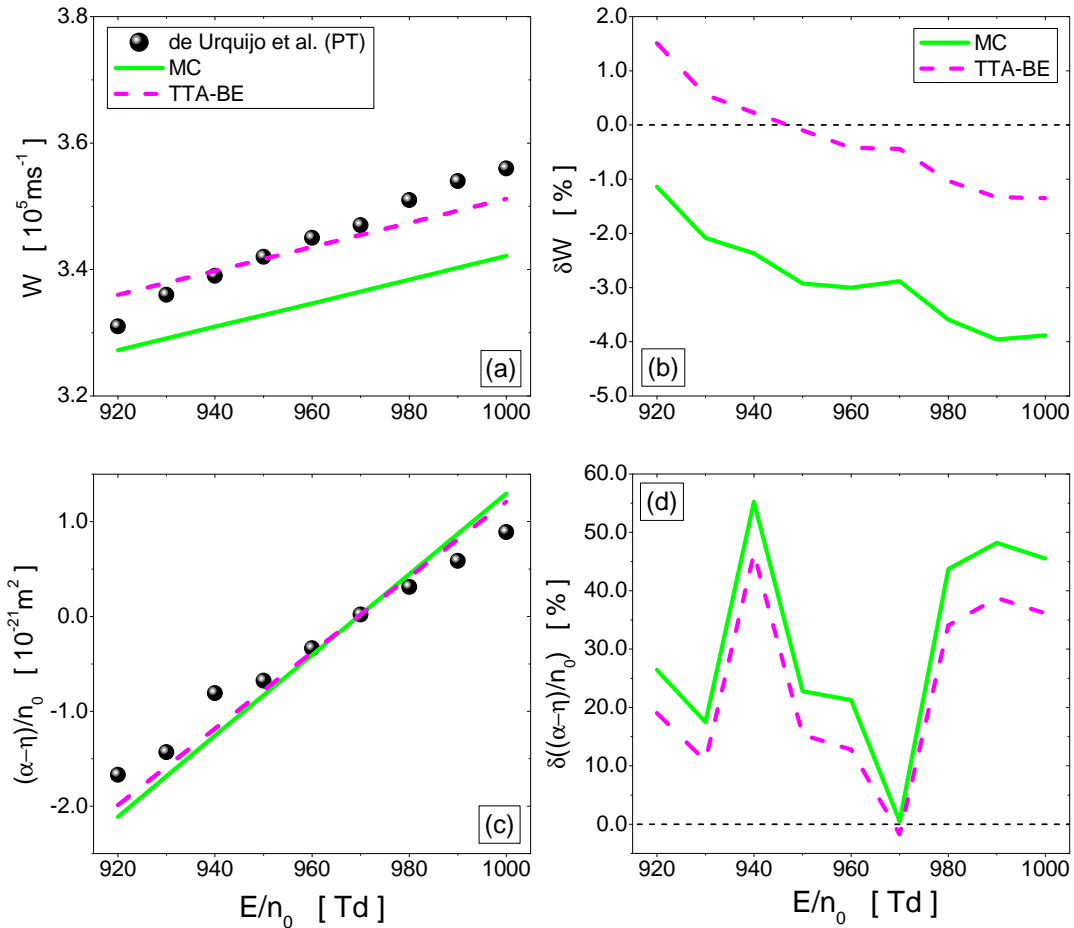
Na slici 6.2(a) je prikazano poređenje naših proračuna za brzinu drifta  $W$  sa eksperimentalnim podacima, dok je na panelu (b) iste slike prikazano procentualno odstupanje proračuna od pomenutih referentnih vrednosti. Paneli (c) i (d) prikazuju isti skup rezultata koji se, u ovom slučaju, odnosi na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

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

### 6.3.4 Transport elektrona u $C_4F_7N$ -Ar smešama

Kao i u čistom gasu, transportni koeficijenti elektrona u  $C_4F_7N$ -Ar smešama su izračunati u opsegu  $E/n_0$ , u kome postoje referentni rezultati De Urkiha i saradnika dobijeni u PT eksperimentu. Pri proračunima je korišćen skup preseka za rasejanje elektrona u Ar autora Hajašija i saradnika (slika



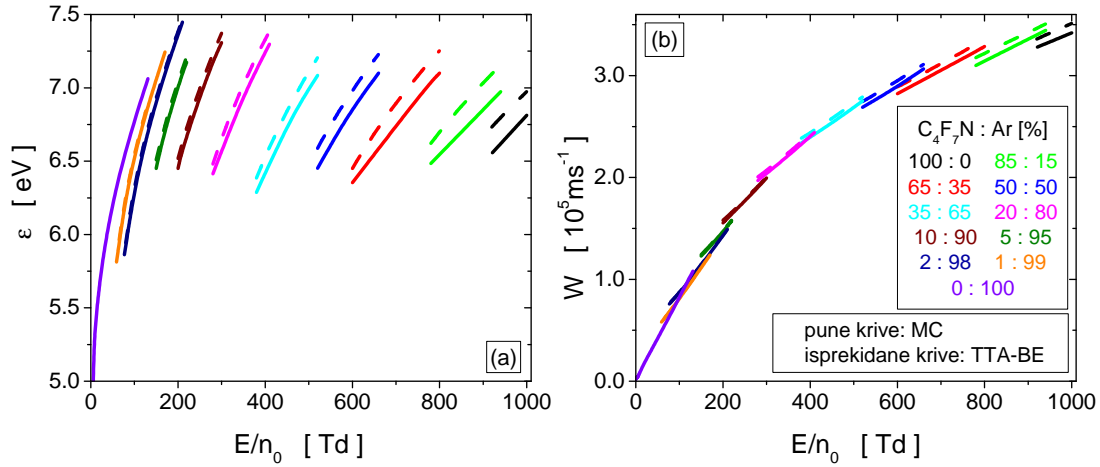


Slika 6.2: Poređenje izračunatih i eksperimentalnih vrednosti brzine drifta  $W$  i efektivnog koeficijenta jonizacije  $(\alpha - \eta)/n_0$  za elektrone u  $C_4F_7N$  u funkciji  $E/n_0$ . Proračuni su izvršeni Monte Karlo simulacijama i rešavanjem Bolzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Paneli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

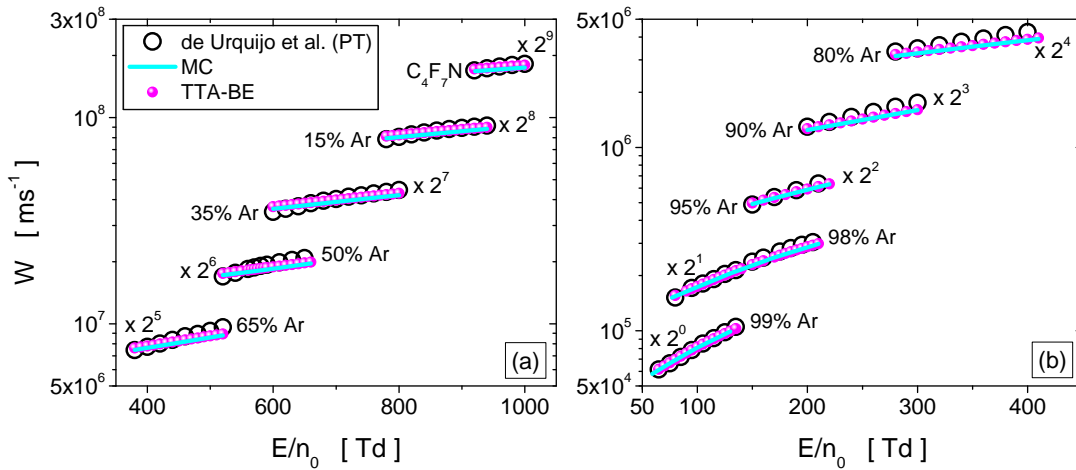
3.5(a)).

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

Na slici 6.4 je prikazano poređenje MC i TTA-BE proračuna  $W$  u  $C_4F_7N$ -Ar smešama sa referentnim podacima dobijenim u PT eksperimentu. U pitanju su isti rezultati kao na slici 6.3(b), s tim što su u ovom slučaju, skalirani faktorom  $2^n$ . Međusobno slaganje ovih rezultata je brojčano izraženo procentualnim odstupanjima (slika 6.5). Rezultati kodova MC i TTA-BE prate trendove



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

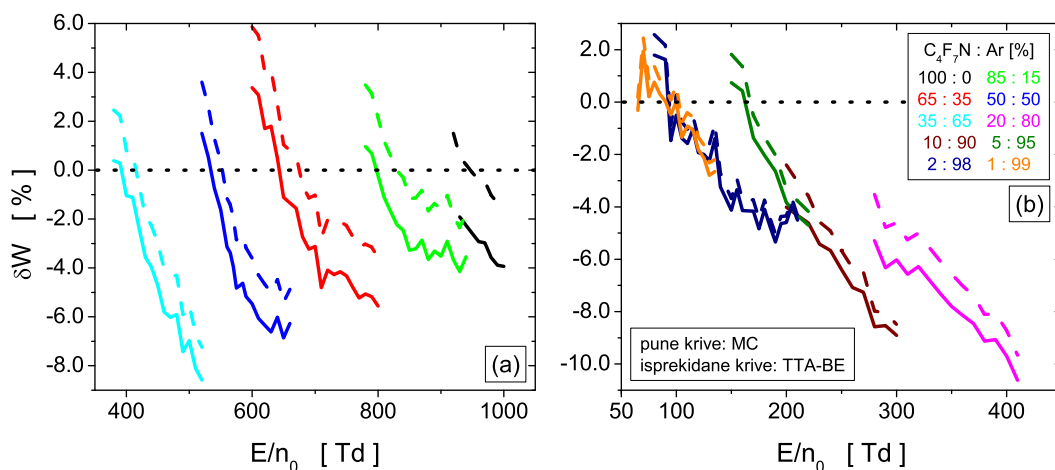


Slika 6.4: Brzina drifta elektrona u  $C_4F_7N$ -Ar smešama u funkciji  $E/n_0$ . Poređenje eksperimentalnih vrednosti sa rezultatima Monte Karlo simulacija i rešenjima Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Panel (a) prikazuje rezultate u smešama sa koncentracijom Ar do 65% dok panel (b) prikazuje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

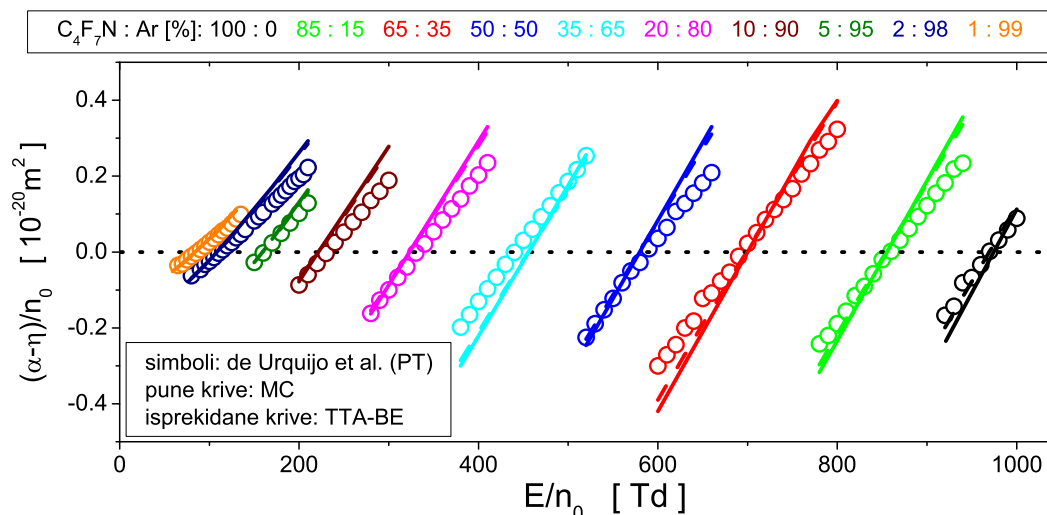
eksperimentalnih podataka uz odstupanje u odnosu na njih u opsegu od -10% do 6%.

Na slici 6.6 su prikazani rezultati naših MC simulacija i TTA-BE rešenja efektivnog koeficijenta jonizacije u  $C_4F_7N$ -Ar smešama zajedno sa referentnim eksperimentalnim vrednostima. Usled uske oblasti polja u kojoj postoje referentni podaci, i pored najboljeg mogućeg fitovanja skupa preseka za rasejanje elektrona u  $C_4F_7N$ , javljaju se odstupanja izračunatih koeficijenta  $(\alpha - \eta)/n_0$  od eksperimentalnih vrednosti od  $\sim 50\%$ . Kao i u slučaju prethodno analiziranog gasa  $C_3H_2F_4$ , izostavljen je prikaz procentualnih odstupanja izračunatog koeficijenta  $(\alpha - \eta)/n_0$  od eksperimentalnih vrednosti u smešama  $C_4F_7N$ -Ar i  $C_4F_7N$ - $N_2$ . Ovaj transportni koeficijent je pažljivo rekonstruisan u okolini svoje nulte vrednosti:  $(E/n_0)_{lim}$  vrednosti dobijene na osnovu naših proračuna odstupaju za manje od 1% od vrednosti dobijenih na osnovu eksperimentalnih podataka (slika 6.7), dok je pri 60% Ar u  $C_4F_7N$  odstupanje približno 3%.

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



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



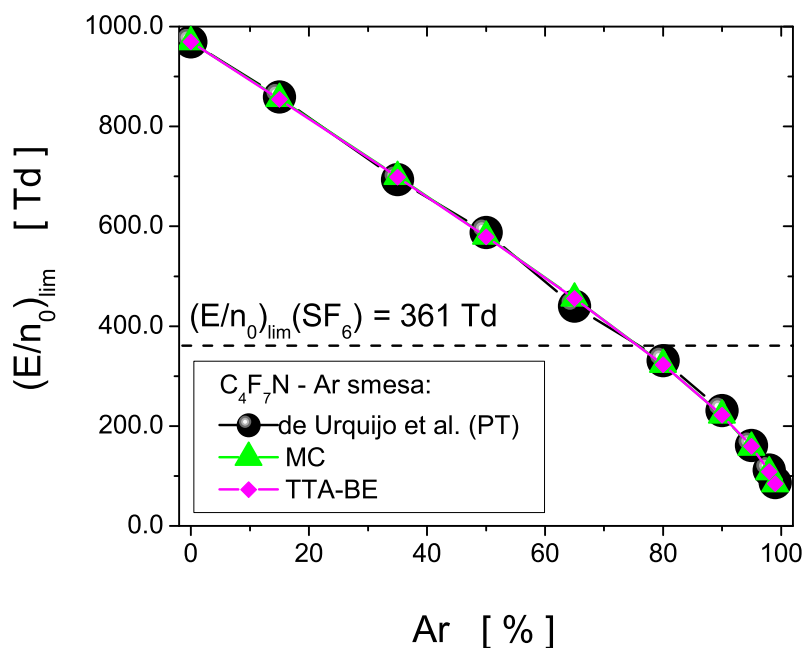
Slika 6.6: Efektivan koeficijent jonizacije u  $C_4F_7N$ -Ar smešama u funkciji  $E/n_0$ . Poređenje rezultata Monte Karlo simulacija i rešavanja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana sa eksperimentalnim vrednostima De Urkiha i saradnika izmerenim u PT eksperimentu.

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

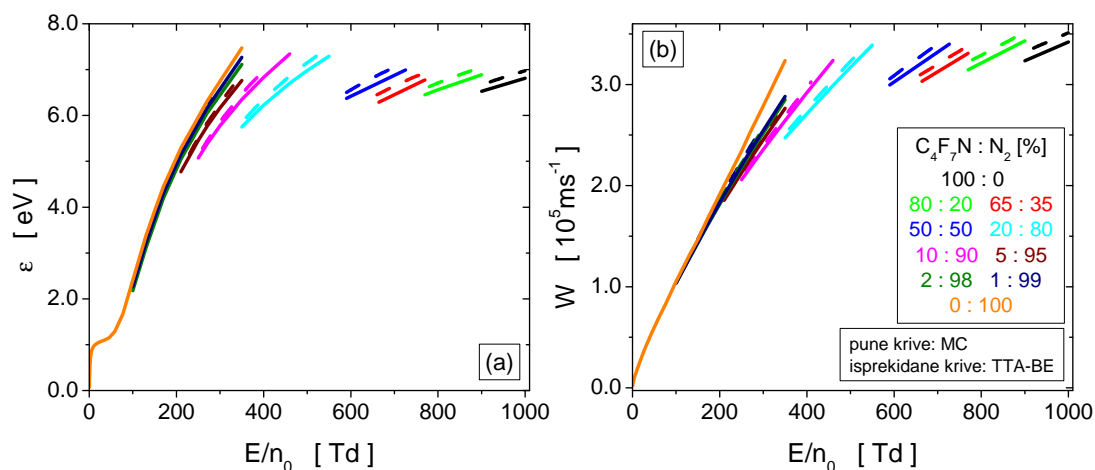
### 6.3.5 Transport elektrona u $C_4F_7N$ - $N_2$ smešama

U ovom potpoglavlju su prikazani transportni koeficijenti elektrona u smešama  $C_4F_7N$  i  $N_2$  izračunati Monte Karlo simulacijama i rešavanjem Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. U proračunima je korišćen skup preseka za rasejanje elektrona u  $N_2$  (slika 5.8), koji je konstruisan u Laboratoriji za neravnotežne procese i primenu plazme Instituta za fiziku u Beogradu [257], dok su proračuni vršeni u opsegu polja definisanom eksperimentalnim podacima. Referentne podatke su izmerili De Urkiho i saradnici u PT eksperimentu [255].

Na slici 6.8(a) je prikazana  $\varepsilon$  za elektrone u  $C_4F_7N$ - $N_2$  smešama. U pitanju su rezultati MC simu-



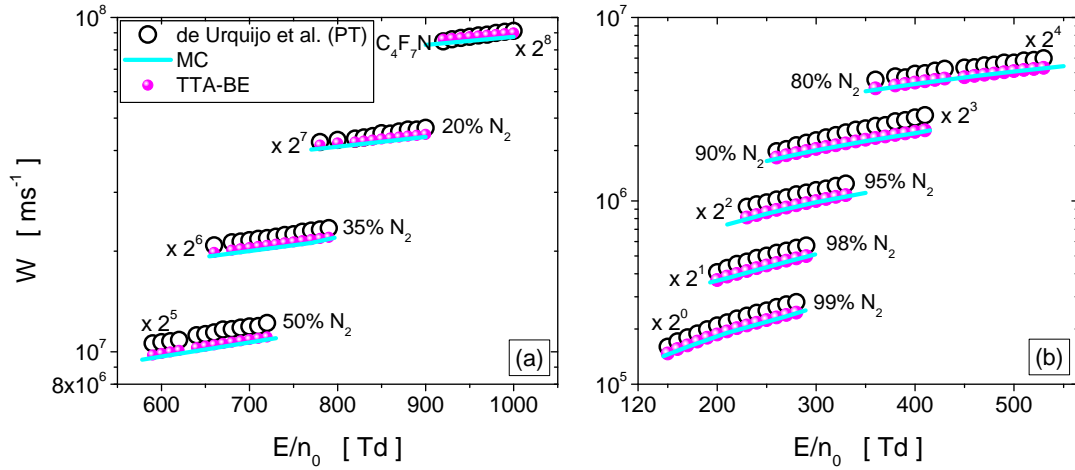
Slika 6.7: Kritično polje gasne smeše  $C_4F_7N$ -Ar u funkciji koncentracije argona. Rezultati su dobijeni na osnovu eksperimentalnih i numerički izračunatih efektivnih koeficijenata jonizacije prikazanih na slici 6.6.



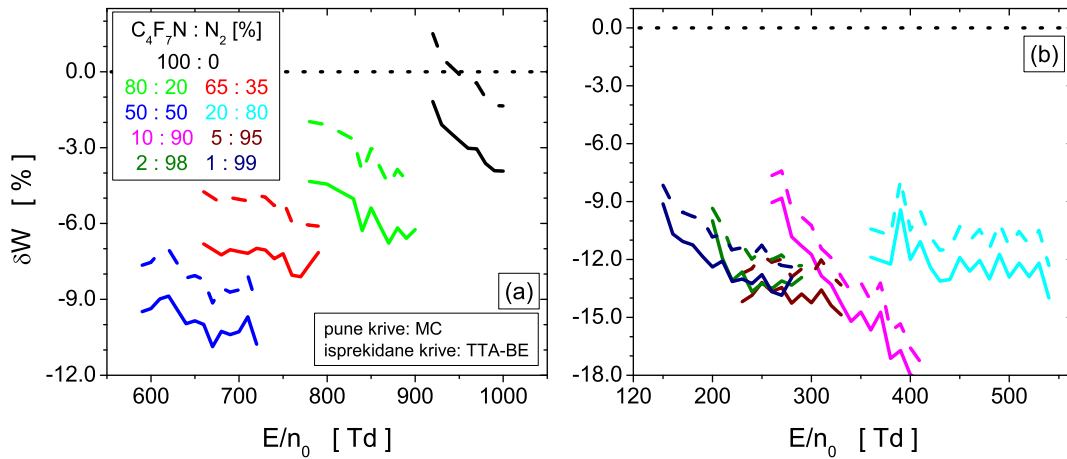
Slika 6.8: Srednja energija (a) i brzina drifta elektrona (b) u  $C_4F_7N$ - $N_2$  smešama u funkciji  $E/n_0$ . Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama i upoređeni sa numeričkim rešenjima Boltzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).

lacija i TTA-BE rešenja u funkciji  $E/n_0$ . Dve numeričke tehnike daju vrednosti  $\varepsilon$  koje se međusobno razlikuju za maksimalno 2%. Ovako male razlike su prihvatljive, imajući u vidu ograničenja aproksimacije dva člana u pogledu preciznosti proračuna transportnih koeficijenata. Na panelu (b) iste slike prikazani su rezultati MC simulacija i TTA-BE numeričkih proračuna za brzinu drifta  $W$ . I u ovom slučaju su vidljive razlike između rezultata ovih tehnika, koje su, takođe, izraženije sa opadanjem koncentracije  $N_2$  u smeši. Zbog uske oblasti polja u kojoj su vršeni proračuni, na osnovu ove slike se malo može reći o trendovima ponašanja  $\varepsilon$  i  $W$  sa promenom  $E/n_0$  i koncentracijom  $N_2$  u gasnoj smeši.

Na slici 6.9 je prikazana  $W$  elektrona u  $C_4F_7N$ - $N_2$  smešama. Prikazani su rezultati numeričkih proračuna kodova MC i TTA-BE u funkciji  $E/n_0$ . U pitanju su rezultati sa slike 6.8(b) koji su skali-



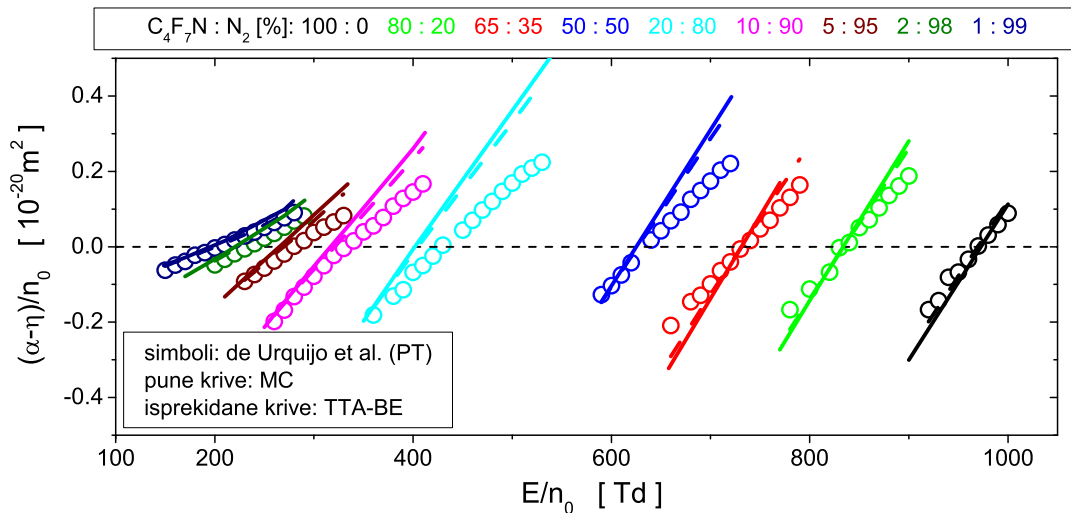
Slika 6.9: Brzina drifta elektrona u  $C_4F_7N$ - $N_2$  smešama u funkciji  $E/n_0$ . Poređenje eksperimentalnih vrednosti sa rezultatima Monte Karlo simulacija i rešenjima Bolzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Panel (a) prikazuje rezultate u smešama sa koncentracijom  $N_2$  do 50% dok panel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



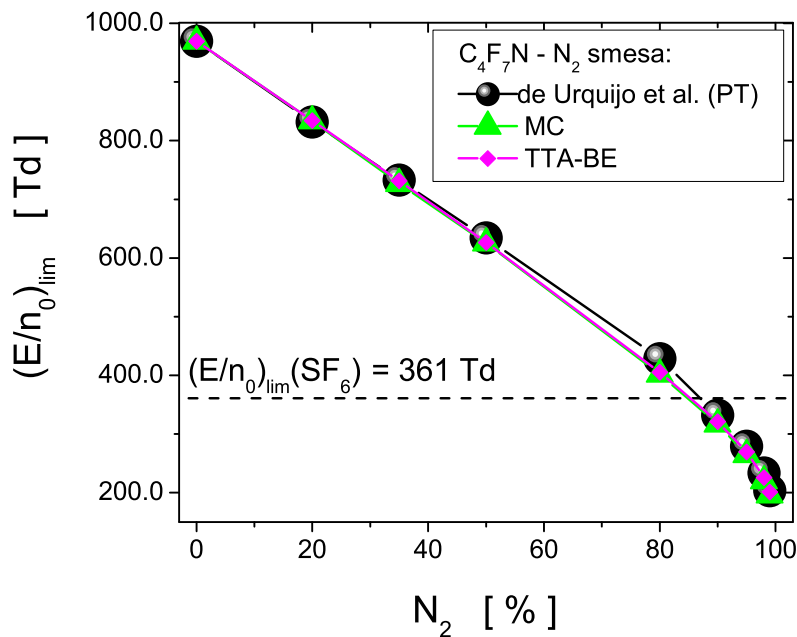
Slika 6.10: Procentualno odstupanje brzine drifta elektrona u  $C_4F_7N$ - $N_2$  smešama od eksperimentalnih podataka De Urkiha i saradnika izmerenih u PT eksperimentu. Proračuni su izvršeni na osnovu Monte Karlo simulacija i rešavanja Bolzmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Panel (a) prikazuje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

rani faktorom  $2^n$ . Međusobno slaganje prikaznih proračuna sa referentnim podacima je izraženo procentualnim odstupanjima (slika 6.10). Vidi se da se manja odstupanja javljaju u smešama sa manjom koncentracijom  $N_2$ . Ovo jasno pokazuje veću konzistentnost skupa preseka za rasejanje elektrona u  $N_2$  sa merenjima De Urkiha i saradnika u odnosu na  $C_4F_7N$ .

Na slici 6.11 je prikazan  $(\alpha - \eta)/n_0$  u  $C_4F_7N$ - $N_2$  smešama u funkciji  $E/n_0$ . U pitanju su rezultati MC simulacija i proračuna TTA-BE kao i referentni eksperimentalni podaci. Kao i kod  $C_4F_7N$ -Ar smeša, ni u ovoj gasnoj smeši nije reprodukovano trend  $(\alpha - \eta)/n_0$  na najbolji način. Jedan od razloga je uska oblast polja u kojoj postoje eksperimentalni podaci, što onemogućava pravilnu rekonstrukciju preseka za pojedinačne sudarne procese u širokom opsegu energija. Ipak,  $(\alpha - \eta)/n_0$  je dosta preciznije naitovan u okolini svoje nulte vrednosti čime je obezbeđeno da se  $(E/n_0)_{lim}$  izračunat na osnovu naših proračuna slaže sa podacima dobijenim na osnovu referentnih merenja u okviru 1.5%,



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



Slika 6.12: Kritično polje gasne smeše  $C_4F_7N-N_2$  u funkciji koncentracije azota. Rezultati su dobijeni na osnovu eksperimentalnih i numerički izračunatih efektivnih koeficijenata jonizacije prikazanih na slici 6.11.

osim u smeši sa 80%  $N_2$ , u kojoj je odstupanje približno 6.5% (slika 6.12).

Smeša gasova  $C_4F_7N$  i  $N_2$  pokazuje izuzetna dielektrična svojstva u pogledu vrednosti  $(E/n_0)_{lim}$ . U smešama sa 85%  $N_2$ , kritično polje dostiže vrednost kojom se karakteriše  $SF_6$  dok daljim opadanjem koncentracije ovog gasa  $(E/n_0)_{lim}$  linearno raste. Ipak, uzevši u obzir tačku ključanja  $C_4F_7N$  ( $-4.7 \text{ }^\circ\text{C}$  na atmosferskom pritisku), ovaj gasni dielektrik poslednje generacije može da se nađe u smeši sa  $N_2$  u koncentraciji od 7% do 13% kako bi se zadovoljili zahtevi koje dielektrik mora da poseduje kako bi se koristio u industriji prenosa električne energije [266].

## 6.4 Transport elektrona u $C_4F_7N-CO_2$ i $C_4F_7N-SF_6$ smešama

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

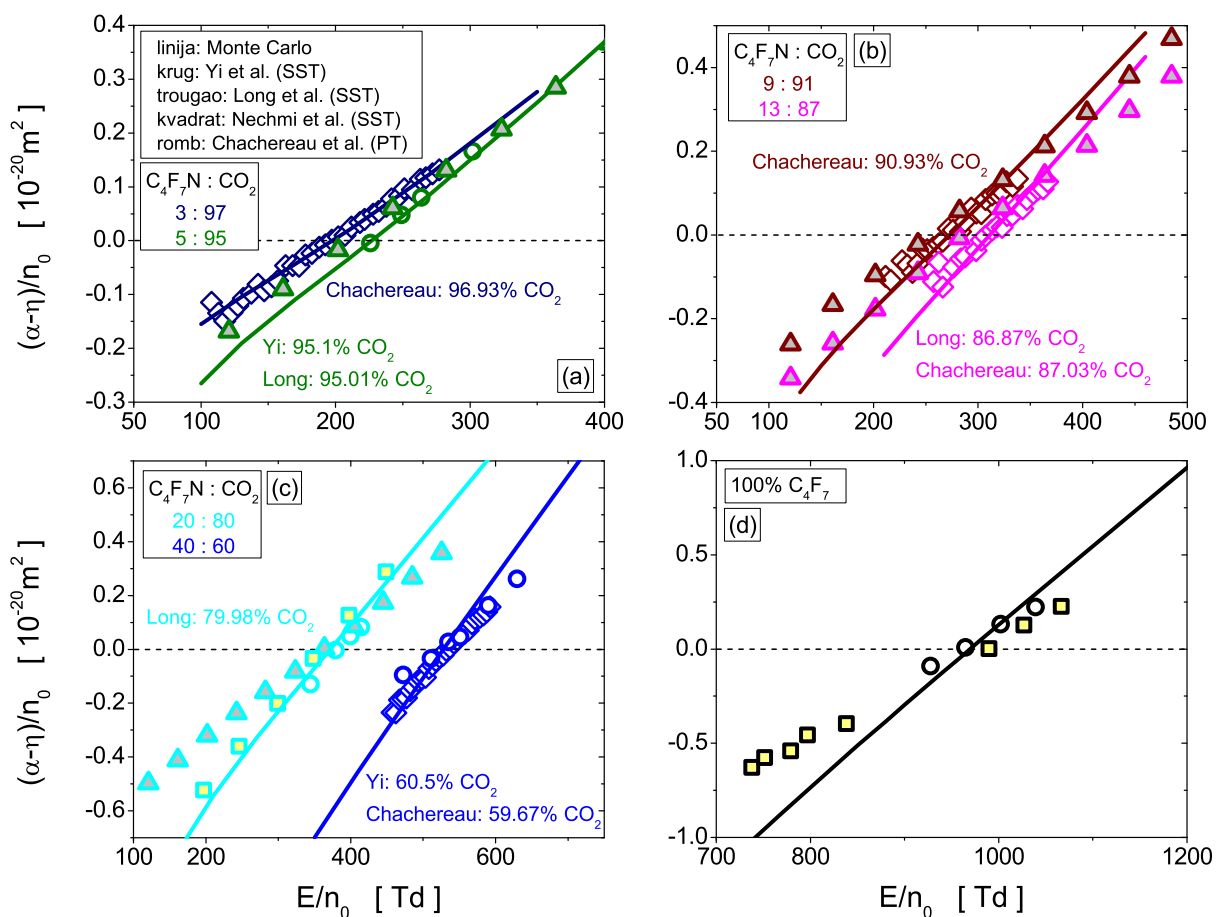
Jedna od najznačajnijih smeša  $C_4F_7N$  gasa je smeša sa ugljen-dioksidom. U literaturi se mogu naći podaci o dielektričnim karakteristikama ove smeše [267, 268] na osnovu kojih je ispitivana njihova upotreba u GIL sistemima u poljima jednosmernih struja [269, 270]. Nečmi i saradnici [271] su SST eksperimentom merili karakteristike pražnjenja u čistom  $C_4F_7N$  i  $C_4F_7N-CO_2$  smešama sa koncentracijom  $CO_2$  većom od 80%, dok su Čačereu i saradnici [160] objavili rezultate PT eksperimenta u smešama sa koncentracijom  $CO_2$  većom od 40.33%. Ji i saradnici [265] su u SST eksperimentu merili efektivne koeficijente jonizacije na osnovu kojih su izračunavali kritična polja ove smeše gasova. Long i saradnici [266] su izmerili Taunzendov prvi jonizacioni koeficijent  $\alpha/n_0$  i koeficijent zahvata elektrona  $\eta/n_0$  u SST eksperimentu. Autori su se takođe posvetili istraživanju uticaja pritiska na tačku ključanja  $C_4F_7N-CO_2$  smeša, što je jedan od važnijih aspekata u potrazi za alternativama  $SF_6$  gasa u visokonaponskoj tehnologiji.

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

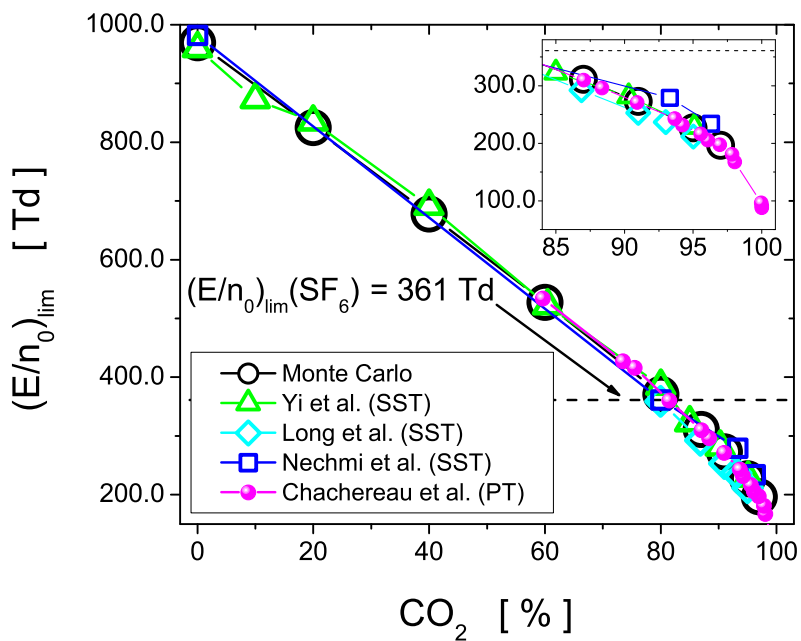
Na slici 6.14 je prikazano kritično električno polje  $(E/n_0)_{lim}$  u funkciji koncentracije  $CO_2$  u smeši  $C_4F_7N-CO_2$ . Rezultati dobijeni na osnovu naših MC simulacija za svega par procenata odstupaju od merenja autora označenih na slici. Najveće odstupanje se javlja pri koncentracijama 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

Nečmi i saradnici [271] su svojim merenjima utvrdili da, kao što i naši proračuni pokazuju, smeša sa 80%  $CO_2$  ima kritično polje ekvivalentno  $SF_6$  gasu. Do sličnog zaključka je došla i grupa saradnika na čelu sa Čačereuom [160]: pri koncentraciji  $CO_2$  od  $\sim 81.5\%$ , smešu  $C_4F_7N-CO_2$  karakteriše  $(E/n_0)_{lim}$  gotovo identično vrednosti čistog  $SF_6$ . Na osnovu rezultata Jia i saradnika [265] se vidi da smeše sa manje od 80%  $CO_2$  imaju kritična polja koja nadmašuju vrednost kojom je okarakterisan  $SF_6$ . Rezultat Longa i saradnika [266] je jako sličan prethodno navedenom rezultatu: autori ističu da smeši sa 79.98%  $CO_2$  odgovara kritično polje  $SF_6$  gasa. Ova grupa autora naglašava da smeša sa 86.87%  $CO_2$  dostiže 80% vrednosti kritičnog polja  $SF_6$ , dok smeša sa 91%  $CO_2$  prevazilazi 70% vrednost  $(E/n_0)_{lim}$  gasa  $SF_6$ . Na osnovu navedenih činjenica se zaključuje da se gasne smeše sa (87-91)%  $CO_2$  u  $C_4F_7N$  mogu razmatrati kao potencijalna zamena za  $SF_6$  u ulozi gasnog dielektrika.

Pregledom literature, utvrđeno je da ne postoje objavljeni radovi o merenjima i analizi smeša gasova  $C_4F_7N$  i  $SF_6$ . Kako smeša ovih gasova pruža mogućnost smanjenja koncentracije  $SF_6$  uz obezbeđivanje kritičnog polja koje može biti 361 Td ili veće, ona je bila predmet našeg interesovanja. Od svih dobijanih rezultata izdvojićemo i prikazaćemo samo vrednosti  $(E/n_0)_{lim}$  u funkciji sastava

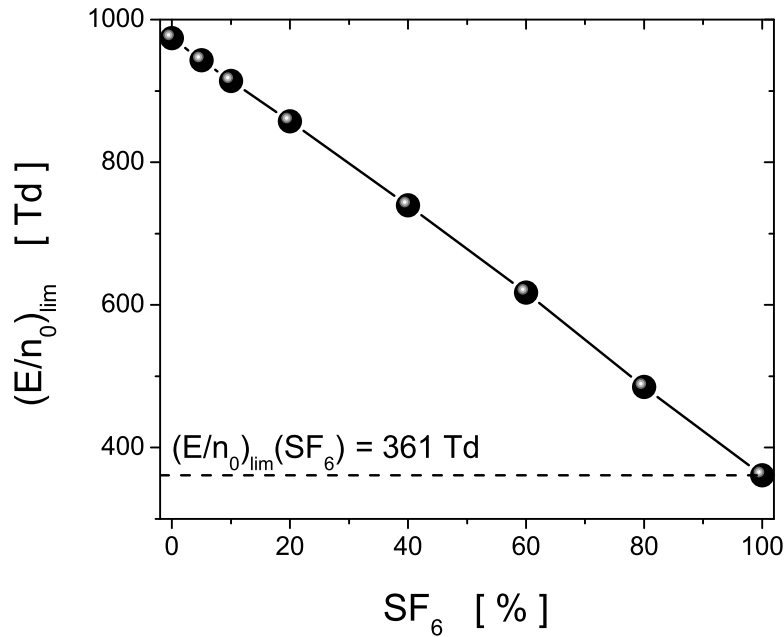


Slika 6.13: Efektivan koeficijent jonizacije u  $C_4F_7N$ - $CO_2$  smešama. Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama i upoređeni sa eksperimentalnim podacima iz literature. Oznake krivih na panela (a) se odnose i na ostale panele.



Slika 6.14: Kritično polje gasne smeše  $C_4F_7N$ - $CO_2$  u funkciji koncentracije ugljen-dioksida dobijeno na osnovu rezultata sa slike 6.13.





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

gasne smeše izračunate na osnovu rezultata naših MC proračuna. Sa slike 6.15 se vidi očekivana zavisnost  $(E/n_0)_{lim}$  od koncentracije  $SF_6$  u smeši: kritično polje smeše raste sa opadanjem koncentracije ovog gasa. Iako se  $(E/n_0)_{lim}$  povećava dodavanjem male količine  $C_4F_7N$  u  $SF_6$ , potrebna su detaljna ispitivanja ove gasne smeše. Pre svega, cilj pronalaska alternative gasa  $SF_6$  podrazumeva da se ovaj gas u potpunosti izbaci iz upotrebe a, ukoliko to nije moguće, onda smanji u značajnoj meri. Međutim,  $C_4F_7N$  se odlikuje prilično visokim faktorom GWP i dugim atmosferskim vremenom života, što ne ide u prilog karakteristikama koje bi trebao da ima alternativan gasni dielektrik. Osim toga, tačka ključanja ovog gasa nije odgovarajuća kako bi oprema za izolaciju gasovima bila upotrebljiva u podnebljima u kojima su niske temperature.

## 6.5 Zaključak

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

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

# Poglavlje 7

## Negativni strimeri u jako elektronegativnim gasovima

### 7.1 Uvod

Ovo poglavlje je posvećeno analizi razvoja i propagacije negativnih strimera u jako elektronegativnim gasovima. Za simulacije strimera su korišćeni fluidni modeli u jednoj dimenziji (1D) i jednoj i po dimenziji (1.5D), a kao ulazni podaci su upotrebljeni transportni koeficijenti rojeva elektrona koji su dobijeni Monte Karlo simulacijama i na osnovu numeričkih rešenja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana. Zbog ograničenog prostora, u ovom poglavlju su prikazani rezultati u  $\text{CF}_3\text{I}$  gasu i njegovim smešama sa  $\text{SF}_6$ . Sa druge strane, treba imati u vidu da se rezultati simulacija i fizika procesa u drugim gasovima koji su razmatrani u ovoj disertaciji u značajnoj meri ponavljaju, pa nisu uključeni u ovo poglavlje.

### 7.2 Fluidne jednačine

U ovoj doktorskoj disertaciji, za modelovanje razvoja i propagacije strimera su korišćeni fluidni modeli. Ovi modeli počivaju na jednačinama balansa koncentracije naelektrisanih čestica, njihovog impulsa i energije. Ove jednačine se mogu dobiti na osnovu prvih principa, ili integracijom Bolcmanove jednačine u brzinskom prostoru. U integraciji Bolcmanove jednačine, jednačine balansa, koje se ponekad nazivaju i momentne jednačine, dobijaju se množenjem Bolcmanove jednačine funkcijama  $\phi(c)$  koje sadrže različite stepene brzina. Nakon integracije u brzinskom prostoru, dobijaju se srednje vrednosti tih funkcija.

Posmatrajmo sistem koji sadrži jednu grupu čestica (npr. elektrone) i smatrajmo da na sistem deluje samo električno polje. Elektroni se ubrzano kreću u električnom polju, a energiju koju akumuliraju disipiraju u sudarima sa molekulima gasa. Ukoliko se zanemare sudari između naelektrisanih

čestica, Bolcmanova jednačina ima oblik (2.1) (koji ćemo ovde ponoviti):

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

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

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

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

$$n_e(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c} \quad (7.3)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n_e} \int \mathbf{c} f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}. \quad (7.4)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_e m \mathbf{v}) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (n_e m \langle \mathbf{c} \mathbf{c} \rangle) - en_e \mathbf{E} = \int m \mathbf{c} J d\mathbf{c}. \quad (7.5)$$

Ukoliko se uvedu tenzor pritiska:

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

u kome se oznaka  $\langle \rangle$  odnosi na usrednjavanje po brzinskom prostoru, i konvektivan vremenski izvod:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}}, \quad (7.7)$$

prethodna jednačina postaje:

$$n_e m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = en_e \mathbf{E} - \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{P} + C_{mc} - m\mathbf{v}C_1. \quad (7.8)$$

Upravo je tenzor pritiska nova nepoznata veličina, pored dve prethodno navedene. Analogno, jednačina balansa energije se dobija množenjem BE funkcijom koja ima oblik energije ( $\phi_3(\mathbf{c}) = 1/2 m \mathbf{c}^2$ ) i integracijom u brzinskom prostoru. Jednačina balansa ukupne energije, koja uključuje energiju usmerenog kretanja i energiju haotičnog kretanja glasi:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} n_e m \mathbf{v}^2 + \frac{3}{2} n_e k \mathbf{T} \right) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[ \left( \frac{1}{2} n_e m \mathbf{v}^2 + \frac{3}{2} n_e k \mathbf{T} \right) \mathbf{v} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{q} \right] \\ - en_e \mathbf{E} \mathbf{v} = \int \frac{1}{2} m \mathbf{c}^2 J d\mathbf{c}. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Pored prethodno navedenih nepoznatih veličina, u ovoj jednačini figuriše i temperaturski tenzor  $\mathbf{T}$ , kao i vektor toplotnog provođenja  $\mathbf{q}$ :

$$\mathbf{q} = \frac{1}{2} m \int (\mathbf{c} - \mathbf{v})^2 (\mathbf{c} - \mathbf{v}) f d\mathbf{c}. \quad (7.10)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} n_e m \mathbf{v}^2 \right) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left( \frac{1}{2} n_e m \mathbf{v}^2 \mathbf{v} \right) + (\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{P}) \cdot \mathbf{v} - en_e \mathbf{E} \mathbf{v} = \int m \left( \mathbf{v} \mathbf{c} - \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 \right) J d\mathbf{c}, \quad (7.11)$$

i balans haotičnog (tj. termalnog) kretanja:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{3}{2} n_e k \mathbf{T} \right) + \nabla_r \cdot \left( \frac{3}{2} n_e k \mathbf{T} \mathbf{v} + \mathbf{q} \right) + \mathbf{P} \cdot (\nabla_r \cdot \mathbf{v}) = \int \frac{1}{2} m (\mathbf{c} - \mathbf{v})^2 J d\mathbf{c}. \quad (7.12)$$

U literaturi postoji mali broj radova u kojima su strimeri modelovani uključujući jednačinu balansa energije [88, 272]. Međutim, imajući u vidu da su strimeri izrazito neravnotežan i nelokalan fenomen, Dujko i saradnici su u model uključili i jednačinu balansa energijskog fluksa [88]. Jednačina balansa energijskog fluksa se dobija množenjem Bolcmanove jednačine funkcijom  $\phi_4(\mathbf{c}) = 1/2mc^2\mathbf{c}$ . Ova jednačina balansa ima sledeći oblik:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[ \left( \frac{1}{2} n_e m \mathbf{v}^2 + \frac{3}{2} n_e k \mathbf{T} \right) \mathbf{v} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{q} \right] \\ & + \nabla \cdot \left[ \left( \frac{1}{2} n_e m \mathbf{v}^2 + \frac{3}{2} n_e k \mathbf{T} \right) \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + 2\mathbf{v} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{Q}) + 2\mathbf{v} \mathbf{q} + \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 \mathbf{P} + \mathbf{Q} : \mathbf{v} + \mathbf{S} \right] \\ & - \frac{e}{m} \left( \frac{1}{2} n_e m \mathbf{v}^2 + \frac{3}{2} n_e k \mathbf{T} \right) \mathbf{E} - e n_e (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) \mathbf{E} \\ & - \frac{e}{2m} \mathbf{P} \cdot \mathbf{E} = \int \frac{1}{2} m c^2 \mathbf{c} J d\mathbf{c}, \end{aligned} \quad (7.13)$$

gde su dodatne nepoznate veličine tenzor energijskog fluksa višeg reda  $\mathbf{Q}$  i tenzor pritiska višeg reda  $\mathbf{S}$ , čije se komponente izračunavaju na sledeći način:

$$\mathbf{Q} = n_e m \langle (\mathbf{c} - \mathbf{v})(\mathbf{c} - \mathbf{v})(\mathbf{c} - \mathbf{v}) \rangle \quad (7.14)$$

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} n_e m \langle (\mathbf{c} - \mathbf{v})(\mathbf{c} - \mathbf{v})^2 (\mathbf{c} - \mathbf{v}) \rangle. \quad (7.15)$$

Povećanjem stepena brzine u funkcijama  $\phi(\mathbf{c})$ , ovaj proces izvođenja jednačina balansa se može nastaviti u beskonačnost. Iako bi rešavanje ovog beskonačnog sistema jednačina balansa bilo jedino ekvivalentno direktnom izračunavanju funkcije raspodele, recimo rešavanjem Bolcmanove jednačine, u praksi se zadržava konačan broj jednačina balansa, odnosno vrši se odsecanje beskonačnog sistema fluidnih jednačina. Odsecanjem sistema fluidnih jednačina, neminovno se gubi deo informacija koje su u potpunosti dostupne ukoliko se reši Bolcmanova jednačina. Međutim, bez obzira na kom nivou, odnosno na kojoj jednačini balansa se ovo odsecanje izvrši, u sistemu uvek postoji veći broj nepoznatih u odnosu na broj jednačina. Zbog toga je neophodno zatvoriti sistem fluidnih jednačina, što se može postići uvođenjem fenomenoloških pretpostavki koje se odnose na veličine koje se pojavljuju u modelu, ili tako što se tzv. momenti višeg reda izraze pomoću momenata nižeg reda. Ovde treba naglasiti da se zadržavanjem većeg broja jednačina balansa u modelu, pojavljuju se sve komplikovanije tenzorske veličine čija interpretacija uopšte nije jednostavna.

Pored odsecanja i zatvaranja sistema jednačina balansa, kao i interpretacije momenata višeg reda, jedan od ključnih problema u fluidnim modelima je tretman sudarnih procesa naelektrisanih čestica i molekula gasa. Sa desne strane fluidnih jednačina pojavljuju se kolizioni integrali koji se moraju rešiti. Za razliku od Monte Karlo simulacija i Bolcmanove jednačina, gde se sudarni procesi opisuju na prilično jasan i transparentan način, u fluidnim jednačinama to nije slučaj. U ovim jednačinama, sudarni procesi se opisuju na razne načine koji nisu nužno konzistentni sa podacima koji se mere u eksperimentima, kao što su sudarni preseki ili transportni koeficijenti. Kao ilustrativan primer u ovom kontekstu može se navesti veoma čest opis sudarnih članova putem srednjih vrednosti fizičkih veličina pri čemu usrednjavanje u brzinskom prostoru podrazumeva Maksvelovu funkciju raspodele. Jedan od načina da se ovakav problematičan pristup za opis sudarnih procesa izbegne, jeste korišćenje teorije prenosa impulsa (engl. *momentum transfer theory*, MTT) [59, 61]. U ovoj teoriji se kolizione frekvence za sudarne procese razvijaju u Tejlorov red po srednjoj energiji. Kolizioni integrali

za elastične i neelastične sudare se izračunaju pretpostavljajući da samo prvi član u ovom razvoju dominantno doprinosi, dok je za nekonzervativne interakcije neophodno uzeti u obzir prva dva člana u razvoju kolizionih frekvenci za ove procese. Ova procedura omogućava da se jednačine balansa sa sudarnim članovima napišu u hidrodinamičkom režimu, što onda omogućava da se izračunaju fluks i balk transportni koeficijenti [37, 59, 61].

## 7.3 Fluidni modeli strimera

### 7.3.1 Klasičan fluidni model

U klasičnom fluidnom modelu prvog reda važno je razmotriti jednačinu balansa broja čestica (7.2) i jednačinu balansa impulsa čestica (7.5). Ukoliko se iskoristi identitet:

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{r}} \cdot (n_e m \langle \mathbf{c} \mathbf{c} \rangle) &= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (n_e m (\mathbf{v} \mathbf{v} + \mathbf{v} \langle \mathbf{c} - \mathbf{v} \rangle + \langle \mathbf{c} - \mathbf{v} \rangle \mathbf{v} + \langle (\mathbf{c} - \mathbf{v}) (\mathbf{c} - \mathbf{v}) \rangle)) \\ &= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (n_e m \mathbf{v} \mathbf{v}) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (n_e m \langle (\mathbf{c} - \mathbf{v}) (\mathbf{c} - \mathbf{v}) \rangle),\end{aligned}\quad (7.16)$$

i uvede konvektivan izvod (7.7), jednačina za balans impulsa (7.5) poprima oblik (7.8), koji ćemo zbog kompletnosti i značaja navesti još jednom:

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

Oznaka  $C_1$  se odnosi na integral sa desne strane jednačine (7.2), dok je  $C_{mc}$  oznaka za desnu stranu jednačine (7.8). Kako bi sistem ove dve jednačine balansa bio rešiv, potrebno je razmotriti tenzor pritiska. Ukoliko posmatramo sistem lakih naelektrisanih čestica kao što su elektroni, onda je raspodela haotičnih brzina približno izotropna, što znači da su dijagonalni elementi tenzora pritiska  $\mathbf{P}$  jednaki i odgovaraju vrednostima skalarnog kinetičkog pritiska  $p$ :

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

gde je  $k$  Bolcmanova konstanta,  $T$  je temperatura elektrona  $T$ , dok je  $\mathbf{I}$  jedinični tenzor.

Sledeći korak u našoj analizi je razmatranje kolizionih integrala. Kolizioni integral koji opisuje transfer impulsa aproksimativno se može napisati u sledećem obliku:

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

u kome figuriše efektivna koliziona frekvencija za transfer impulsa  $\nu_{eff}$  koja se dominantno odnosi na elastične sudare, dok se razmena impulsa u neelastičnim sudarima zanemaruje (imajući u vidu da se brzina drifta, odnosno brzina usmerenog kretanja elektrona, relaksira uglavnom u velikom broju elastičnih sudara). Na osnovu ovih pretpostavki, jednačina balansa impulsa postaje:

$$n_e m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = en_e \mathbf{E} - \nabla_{\mathbf{r}} n_e kT - n_e m \nu_{eff} \mathbf{v}. \quad (7.20)$$

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

$$\mathbf{\Gamma} = n_e \mathbf{v} = n_e \mu \mathbf{E} - D \nabla_{\mathbf{r}} n_e, \quad (7.21)$$

u kome figurišu mobilnost elektrona  $\mu$  i difuziona konstanta  $D$ :

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

Spomenuto je da aproksimacija (7.18) važi kada je raspodela haotičnih brzina približno izotropna. Ova aproksimacija postaje problematična na frontu strimera, gde se zbog lokalnog pojačanja električnog polja i velikog gradijenta koncentracije elektrona indukuje jak gradijent pritiska. U ovoj situaciji, raspodela haotične komponente brzina nije izotropna pa su fluktuacije brzine velike. Ukoliko ponovo posmatramo slučaj u kome je srednja brzina elektrona stacionarna, a transfer impulsa u neelastičnim sudarima zanemarljiv, jednačina (7.17) postaje:

$$mn_e\nu_{eff}\mathbf{v} = en_e\mathbf{E} - \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{P}, \quad (7.23)$$

dok fluks elektrona (uz prethodno definisanu mobilnost elektrona) postaje:

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

Upoređujući ovu jednačinu sa (7.21), može se definisati sledeća veličina:

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

koja podseća na difuzioni tenzor. Kada  $\nu_{eff}$  ne zavisi od energije, ova veličina se svodi na difuzionu konstantu  $D$ . Ovde je važno istaći da korišćenje veličine  $\mathbf{D}^*$  u jednačini za fluks elektrona (7.21) ne bi bilo ispravno. Sa druge strane, generalizacija difuzione konstante  $D$  na difuzioni tenzor  $\mathbf{D}$  je dobrodošao korak, imajući u vidu da se longitudinalni i transverzalni difuzioni koeficijenti mogu značajno razlikovati.

Kad se jednačina za fluks elektrona (7.21) uvrsti u jednačinu balansa broja čestica (7.2), dobija se drift-difuziona jednačina za opis transporta naelektrisanih čestica:

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

U prethodnoj jednačini je nepoznat izvorni član  $\int Jd\mathbf{c}$ . On se obično ne izvodi iz Bolcmanove jednačine već se uvodi fenomenološki polazeći od oblika jednačine kontinuiteta (jednačine balansa broja čestica) sa izvornim članom. Kako se u klasičnom fluidnom modelu smatra da izvorni član zavisi od lokalne koncentracije čestica i od lokalnog električnog polja, kao i da se drift i difuzija jona mogu zanemariti na vremenskim skalama koje su relevantne za razvoj i propagaciju strimera, ovaj model je opisan jednačinama:

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

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

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

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

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

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

U prethodnim jednačinama su figurisale koncentracije pozitivnih i negativnih jona u oznakama  $n_p$  i  $n_n$ , respektivno, i kolizione frekvence za jonizaciju i zahvat elektrona u oznakama  $\nu_i$  i  $\nu_a$ , respektivno.

Jednačine (7.27), (7.28) i (7.30) reprezentuju klasičan fluidni model, ili fluidni model prvog reda. Ovde je veoma važno istaći da iako transportni koeficijenti po svojoj definiciji nisu funkcije koordinata, u ovom modelu prilikom numeričke implementacije, ove veličine jesu funkcije koordinata jer se električno polje menja u vremenu i prostoru, a prema aproksimaciji lokalnog električnog polja ove veličine su funkcije lokalnog električnog polja. Na osnovu ovog modela se ne može ništa reći o prirodi transportnih koeficijenata koji su neophodni za rešavanje ovog sistema fluidnih jednačina. Ukoliko je kriterijum za adekvatnu primenu transportnih koeficijenata konzistentnost u metodološkom pristupu koji je korišćen za dobijanje ovih jednačina, onda je neophodno koristiti fluks transportne koeficijente, imajući u vidu da su fluks transportni koeficijenti zapravo integrali odgovarajućih veličina i funkcije raspodele u brzinskom prostoru. Sa druge strane, aproksimacije koje su korišćene za izvođenje klasičnog fluidnog modela bile su drastične, pa je u tom smislu veoma težak zadatak dati preporuku koje transportne koeficijente koristiti u modelu. U dosadašnjoj praksi modelovanja strimera, kao ulazni podaci u klasičnom fluidnom modelu obično su korišćeni fluks transportni koeficijenti [88, 273], ali u literaturi se mogu naći i izuzeci gde su upotrebljeni balk transportni koeficijenti [7, 274]. Još jedan od razloga koji govore u prilog korišćenju fluks transportnih koeficijenata je povezan sa činjenicom da oblik izvornog člana u drift-difuzionoj jednačini (7.27) ništa ne govori o prostornim gradijentima kolizionih frekvenci za nekonzervativne procese. Drugim rečima, u ovom modelu se koriste prostorno homogene vrednosti brzinskih koeficijenata za zahvat elektrona i jonizaciju, pa je u tom smislu adekvatnije koristiti fluks transportne koeficijente.

### 7.3.2 Korigovan fluidni model

Imajući u vidu da klasičan fluidni model ne uzima u obzir prostornu zavisnost brzinskih koeficijenata za zahvat elektrona i jonizaciju, u ovoj disertaciji je korišćen korigovan fluidni model. U osnovi korigovanog modela je razvoj fluksa naelektrisanih čestica (2.6) i izvornog člana (2.7) u jednačini kontinuiteta (2.2) u red po gradijentima koncentracije naelektrisanih čestica. Odsecanjem ovih razvoja na drugom članu, dobija se:

$$\Gamma(\mathbf{r}, t) = \mathbf{W}_F n_e(\mathbf{r}, t) - \mathbf{D}_F \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n_e(\mathbf{r}, t), \quad (7.31)$$

$$S(\mathbf{r}, t) = S^{(0)} n_e(\mathbf{r}, t) - \mathbf{S}^{(1)} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n_e(\mathbf{r}, t) + \mathbf{S}^{(2)} : \nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{r}} n_e(\mathbf{r}, t). \quad (7.32)$$

Oznake  $\mathbf{W}_F$  i  $\mathbf{D}_F$  predstavljaju *fluks* brzinu elektrona i *fluks* difuzioni tenzor, respektivno. Kada se ova dva razvoja uvrste u jednačinu kontinuiteta (2.2), dobija se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_e(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{W}_F n_e(\mathbf{r}, t) - \mathbf{D}_F \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n_e(\mathbf{r}, t)) \\ = S^{(0)} n_e(\mathbf{r}, t) - \mathbf{S}^{(1)} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n_e(\mathbf{r}, t) + \mathbf{S}^{(2)} : \nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{r}} n_e(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (7.33)$$

koja se može napisati i u obliku:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_e(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{W}_B n_e(\mathbf{r}, t) - \mathbf{D}_B \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n_e(\mathbf{r}, t)) \\ = S^{(0)} n_e(\mathbf{r}, t) + \left( \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{S}^{(1)} \right) n_e(\mathbf{r}, t) - (\nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{S}^{(2)}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n_e(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (7.34)$$

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

$$\mathbf{W}_B = \mathbf{W}_F + \mathbf{S}^{(1)}, \quad \mathbf{D}_B = \mathbf{D}_F + \mathbf{S}^{(2)}. \quad (7.35)$$

Jednačine (7.33) i (7.34) su ekvivalentne. U slučaju homogenog električnog polja, dakle bez efekata prostornog naelektrisanja, ove jednačine se svode na difuzionu jednačinu. U prisustvu nehomogenog

električnog polja jednačine (7.33) i (7.34) konstituišu korigovan fluidni model u kome treba voditi računa da su brzine drifta i difuzion tenzor sada funkcije koordinata.

Ako se pretpostavi da važi

$$\nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{S}^{(1)} n_e(\mathbf{r}, t) - \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{S}^{(2)} \nabla_{\mathbf{r}} n_e(\mathbf{r}, t) \approx 0, \quad (7.36)$$

što je ispunjeno u homogenom električnom polju tokom lavinske faze razvoja strimera, jednačina (7.34) se svodi na:

$$\frac{\partial n_e(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{W}_B n_e(\mathbf{r}, t) - \mathbf{D}_B \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n_e(\mathbf{r}, t)) = S^{(0)} n_e(\mathbf{r}, t). \quad (7.37)$$

Ova jednačina ima isti matematički oblik kao drift-difuziona aproksimacija (7.27), ali se u ovom slučaju strogo koriste balk transportni koeficijenti kao ulazni podaci. Ovde treba imati u vidu da veličina  $S^{(0)}$  predstavlja prostorno homogeni efektivan koeficijent jonizacija. Ukoliko se jednačina (7.37) spregne sa jednačinama oblika (7.28) i Puasonovom jednačinom (7.29), odnosno (7.30), onda ove jednačine konstituišu klasičan fluidni model sa balk transportnim koeficijentima. Na isti način se dobija korigovan model, ali za korigovani model je neophodno poznavanje koeficijenta razvoja izvornog člana koji figurišu u jednačinama (7.32)-(7.34).

Neka se korigovan model zasniva na jednačini (7.33). Pored *fluks* transportnih koeficijenata, potrebno je poznavati i korekcije  $\mathbf{S}^{(k)}$  koje se javljaju u razvoju izvornog člana. Ukoliko se ovi koeficijenti, prema jednačini (7.35), izračunaju kao razlika *balk* i *fluks* transportnih koeficijenata elektrona, onda se njihova brojna vrednost odnosi na ukupan doprinos nekonzervativnih sudara. Ukoliko je potrebno da se pojedinačno prati koncentracija pozitivnih i negativnih jona, ovi koeficijenti se razdvajaju na one koji se odnose na doprinos jonizacije  $\mathbf{S}_i^{(k)}$  i doprinos zahvata  $\mathbf{S}_a^{(k)}$ .

Na osnovu definicije izvornog člana

$$S(\mathbf{r}, t) = \int (\nu_i - \nu_a) f(\mathbf{r}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c}, \quad (7.38)$$

u kojoj figurišu kolizione frekvence za jonizaciju  $\nu_i$  i zahvat elektrona  $\nu_a$ , kao i na osnovu hidrodinamičkog razvoja funkcije raspodele (2.5), izvorni član se zapisuje u obliku:

$$S(\mathbf{r}, t) = S_i(\mathbf{r}, t) - S_a(\mathbf{r}, t), \quad (7.39)$$

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

$$S_m(\mathbf{r}, t) = S_m^{(0)} n_e(\mathbf{r}, t) - \mathbf{S}_m^{(1)} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} n_e(\mathbf{r}, t) + \mathbf{S}_m^{(2)} : \nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{r}} n_e(\mathbf{r}, t), \quad (7.40)$$

$$S_m^{(0)} = \langle \nu_m \rangle, \quad (7.41)$$

$$\mathbf{S}_m^{(1)} = \langle \nu_m \mathbf{r}^* \rangle, \quad (7.42)$$

$$\mathbf{S}_m^{(2)} = \frac{1}{2} \langle \nu_m (\mathbf{r}^* \mathbf{r}^* - \langle \mathbf{r}^* \mathbf{r}^* \rangle) \rangle. \quad (7.43)$$

Proizvoljna funkcija koordinate  $\psi(\mathbf{r})$  se usrednjava na sledeći način:

$$\langle \psi(\mathbf{r}) \rangle(t) = \frac{1}{N_e(t)} \int \psi(\mathbf{r}) n_e(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}, \quad (7.44)$$

gde je  $N_e$  ukupan broj elektrona koji se dobija kao

$$N_e(t) = \int n_e(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}. \quad (7.45)$$



## 7.4 Numerička implementacija fluidnih modela

Kao što je pomenuto, u fluidnim modelima u jednoj i po dimenziji se jednačina kontinuiteta rešava u jednodimenzionom slučaju. Električno polje je orijentisano duž x-ose  $\mathbf{E} = E\vec{e}_x$ , pri čemu je  $\vec{e}_x$  jediničan vektor x-ose. U jednoj dimenziji jednačina (7.27) ima oblik:

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

Brzina drifta elektrona je definisana kao pozitivna veličina, dok se  $\operatorname{sgn}(E)$  odnosi na signum funkciju. Svi transportni koeficijenti koji figurišu u ovoj jednačini su dati u funkciji intenziteta električnog polja  $|E(x, t)|$ . Koncentracije pozitivnih i negativnih jona se izračunavaju jednačinama

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

koje podrazumevaju stacionarnost ovih čestica. Ova pretpostavka je opravdana imajući u vidu da je pokretljivost jona manja za dva do tri reda veličine u odnosu na elektrone. Ovo znači da su joni stacionarni na vremenskim skalama za propagaciju negativnih strimera koje su razmatrane u ovoj disertaciji.

Što se tiče električnog polja, spomenuto je da se u 1.5-dimenzionom fluidnom modelu ono izračunava u dve dimenzije. Smatramo stoga da se prostorno naelektrisanje nalazi unutar cilindra poluprečnika  $R_0$  čija osa odgovara x-osi koordinatnog sistema. Pri tome se smatra da koncentracija elektrona i jona ne zavisi od radialne koordinate ni azimutalnog ugla, već samo od aksijalne koordinate  $x$ . U ovakvoj konfiguraciji, električno polje duž x-ose ima vrednost [275]:

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

pri čemu se  $E_0$ ,  $d$ ,  $e_0$  i  $\epsilon_0$  odnose na spoljašnje električno polje, prostor integracije, elementarno naelektrisanje i permitivnost vakuuma, respektivno.

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

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

i početne uslove za elektrone i jone:

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

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

$N_0$  se odnosi na početan broj elektrona Gausove raspodele centrirane u  $x_0$ . Za numeričku diskretizaciju prostornih izvoda se koriste centralne konačne razlike drugog reda dok se za vremensku integraciju primenjuje klasična Runge-Kuta 4 šema četvrtog reda (engl. *Runge-Kutta*). Za ovaj numerički metod postoje najmanje dva potrebna uslova stabilnosti za vremenski korak [276]:

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

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

u kojima je  $\Delta x$  korak prostorne mreže dok su  $C_a$  i  $C_d$  Kurantovi brojevi (engl. *Courant*) [277] koji zavise od prostorne diskretizacije i konkretne šeme za vremensku integraciju. U našim proračunima se koristi korak prostorne rešetke koji zadovoljava oba uslova.

Korigovan klasični model je na identičan način, kao i klasčan model, implementiran u 1D i 1.5D. Korekcije izvornog člana se izračunavaju na sledeći način:

$$S_m = S_m^{(0)} n_e(x, t) + S_m^{(1)} \operatorname{sgn}(E) \frac{\partial n_e(x, t)}{\partial x} + S_{L,m}^{(2)} \frac{\partial^2 n_e(x, t)}{\partial x^2} \quad (m = i, a), \quad (7.54)$$

pri čemu se  $S_m^{(0)}$  i  $S_m^{(1)}$  izračunavaju na osnovu (7.41) i (7.42), dok se  $S_{L,m}^{(2)}$  komponenta u pravcu električnog polja izračunava izrazom (7.43). Sistem jednačina korigovanog jednog i po dimenzionog fluidnog modela čini još i jednačina za izračunavanje električnog polja (7.48).

## 7.5 Negativni strimeri u $\text{CF}_3\text{I}$ i smešama $\text{CF}_3\text{I-SF}_6$

U ovom potpoglavlju biće prikazani rezultati fluidnog modelovanja razvoja i propagacije strimera u čistom  $\text{CF}_3\text{I}$  gasu i njegovim smešama sa  $\text{SF}_6$ . Karakteristike pražnjenja u smešama gasova  $\text{CF}_3\text{I}$  i  $\text{SF}_6$  biće analizirane na osnovu rezultata simulacija razvoja i propagacije strimera u ovim gasovima. Bitno je naglasiti da se ove karakteristike pražnjenja na izvestan način pojavljuju i ponavljaju i u drugim jako elektronegativnim gasovima koji su razmatrani u disertaciji.

Uspostavljeni su jedinstveni uslovi simulacija kako bi bilo moguće tumačenje rezultata u različitim gasovima i gasnim smešama. Zadato je rastojanje između granica integracije od 3 mm, poluprečnik snopa elektrona od 0.1 mm, prostor između granica integracije je podeljen na 5000 ćelija, vreme trajanja simulacije je 9 ns.

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

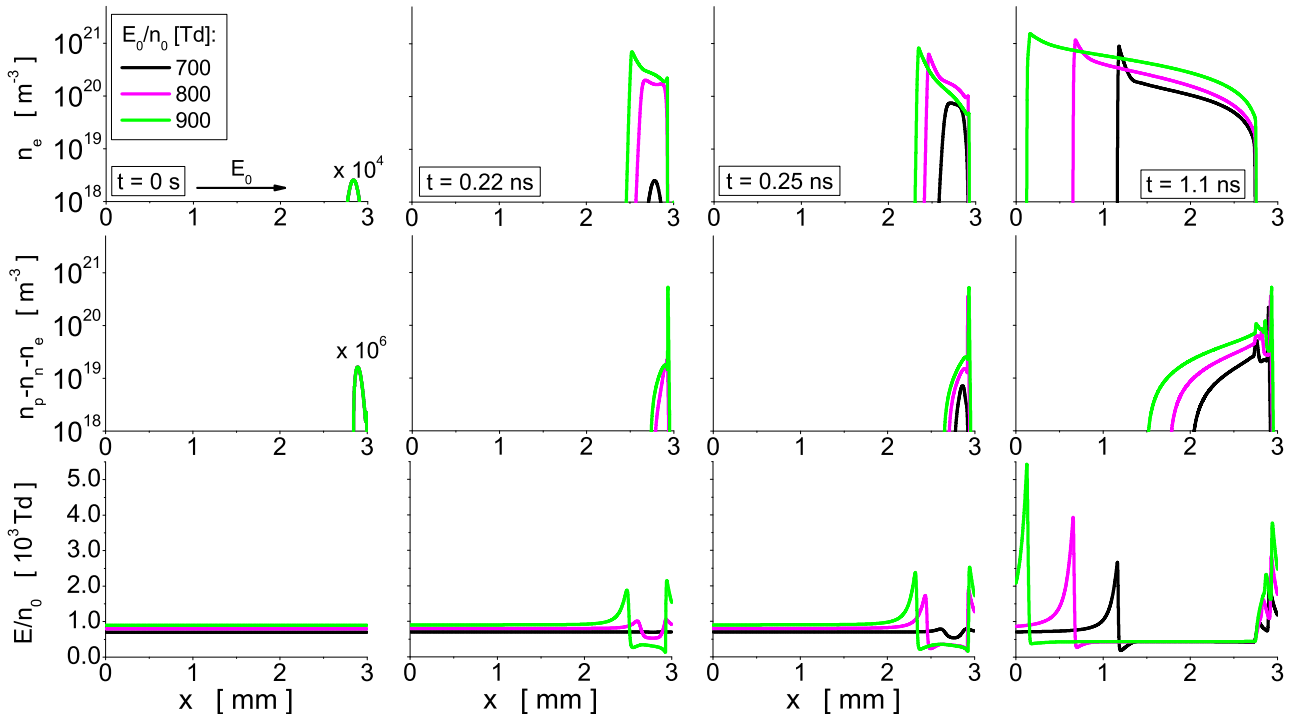
### 7.5.1 Razvoj i propagacija strimera u funkciji spoljašnjeg električnog polja

U ovom potpoglavlju diskutuje se na koji način spoljašnje električno polje  $E_0/n_0$  utiče na razvoj i propagaciju strimera. Rezultati klasičnog fluidnog modela u 1.5D sa balk transportnim koeficijentima koji su dobijeni u MC simulacijama prikazani su na slici 7.1.

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

Slika 7.1 prikazuje rezultate simulacije za koncentracije elektrona, ukupnog naelektrisanja (definisano razlikom koncentracije pozitivnih jona i sume koncentracija negativno naelektrisanih čestica) i električnog polja unutar lavine elektrona odnosno strimera. Rezultati koji se odnose na nulti vremenski trenutak definisani su početnim uslovima: koncentracija elektrona i pozitivnih jona ima oblik Gausijana, dok je električno polje neperturbovano odnosno jednako spoljašnjem električnom polju.

U prvom narednom prikazanom trenutku (0.22 ns), profil koncentracija elektrona i ukupnog naelektrisanja na najmanjem električnom polju (700 Td) i dalje ima oblik Gausijana, dok je električno polje još uvek neperturbovano. Sa porastom  $E_0/n_0$ , koncentracije čestica i električno polje menjaju svoje profile. Na 800 Td se uočava porast koncentracije elektrona u lavini i modifikacija profila ove veličine. Na najvišem ispitivanom električnom polju (900 Td) potpuno je formiran strimer koji se odlikuje karakterističnim profilom obeleženim zelenom krivom. Dok inicijalan Gausijan raste usled jonizacije, dolazi do razdvajanja naelektrisanja unutar strimera kao posledica kretanja naelektrisanja suprotnog znaka u suprotnim smerovima. Stvara se unutrašnje električno polje čime ukupno električno polje, koje je homogeno na početku simulacije, postaje zaklonjeno u unutrašnjosti strimera.



Slika 7.1: Razvoj i propagacija negativnih strimera u  $\text{CF}_3\text{I}$  u funkciji spoljašnjeg električnog polja.

Rezultati su dobijeni klasičnim fluidnim modelom sa balk transportnim koeficijentima koji su izračunati u Monte Karlo simulacijama. Vektor spoljašnjeg električnog polja je orijentisan sa leva na desno, pa negativni strimeri propagiraju u suprotnom smeru, sa desna na levo.

Ovo se upravo vidi u profilu električnog polja:  $E/n_0$  opada unutar strimera, pri čemu na frontu dolazi do pojačanja električnog polja, što je inherentna osobina strimerskog pražnjenja. Polje u strimerskom kanalu opada na vrednost kritičnog električnog polja ovog gasa (437 Td), dok je dvostruko povećano na frontu. Sporiji elektroni se nalaze u unutrašnjosti strimera, odnosno u strimerskom kanalu i ovi elektroni mogu biti zahvaćeni, ali isto tako i jonizovati molekule  $\text{CF}_3\text{I}$ .

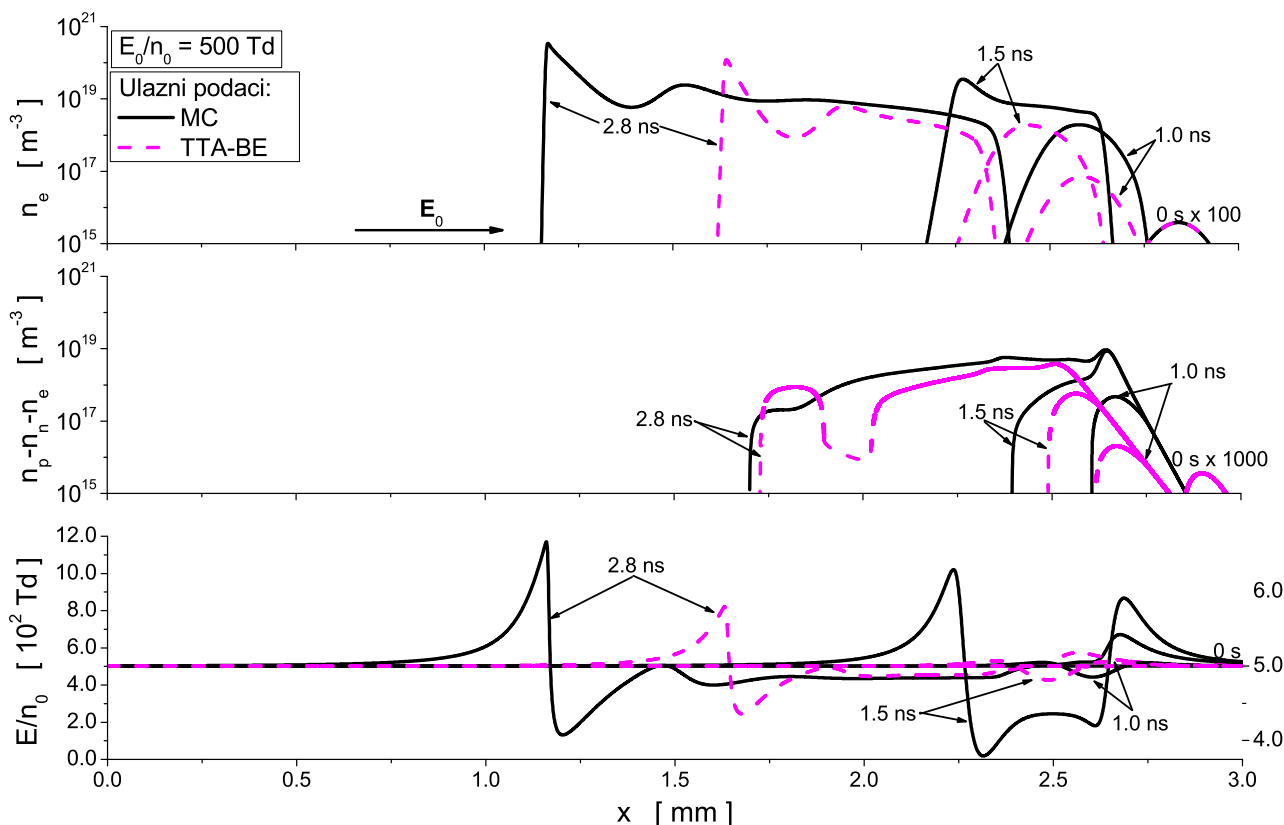
U sledećem vremenskom trenutku (0.25 ns), lavina elektrona i jona je transformisana u strimer i pri jačini spoljašnjeg električnog polja od 800 Td. Nakon 1.1 ns od početka simulacije, strimer je razvijen i pri najnižem ispitivanom električnom polju. Polje u kanalu opada na vrednost 437 Td u slučaju sve tri vrednosti  $E_0/n_0$ , dok je električno polje na frontu strimera pojačano preko tri puta pri električnom polju od 700 Td, skoro pet puta pri električnom polju od 800 Td, odnosno preko šest puta pri najvišoj vrednosti  $E_0/n_0$ . Na ovom primeru se može uočiti da su strimeri samoorganizujuće strukture, koje dovode do pojačanja električnog polja.

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

Na osnovu rezultata sa slike 7.1, može se zaključiti da sa porastom spoljašnjeg električnog polja  $E_0/n_0$  dolazi do brže tranzicije lavine elektrona u negativan strimer. Ovo je posledica činjenice da sa porastom  $E_0/n_0$  raste koeficijent jonizacije i produkcija novih elektrona, što doprinosi većem pojačanju električnog polja na frontu strimera i bržoj transformaciji lavine u strimer.

## 7.5.2 Osetljivost osobina strimera na način proračuna transportnih koeficijenata

Na slici 7.2 je prikazan razvoj i propagacija strimera u  $\text{CF}_3\text{I}$  pri spoljašnjem električnom polju od 500 Td koje je približno za 15% veće od kritičnog električnog polja u ovom gasu. Upoređeni su rezultati klasičnog fluidnog modela u 1.5D sa balk transportnim koeficijentima koji su dobijeni u MC



Slika 7.2: Razvoj i propagacija negativnih strimera u  $\text{CF}_3\text{I}$  pri spoljašnjem električnom polju jačine 500 Td. Rezultati klasičnog fluidnog modela u 1.5D sa balk transportnim koeficijentima koji su dobijeni u Monte Karlo (MC) simulacijama su upoređeni sa onima koji su dobijeni na osnovu aproksimacija dva člana za rešavanje Bolzmanove jednačine (TTA-BE). Vrednosti električnog polja sa leve ose se odnose na vremenski trenutak 2.8 ns dok se desna osa odnosi na sva tri ranija vremenska trenutka.

simulacijama i na osnovu aproksimacije dva člana za rešavanje Bolzmanove jednačine (TTA-BE).

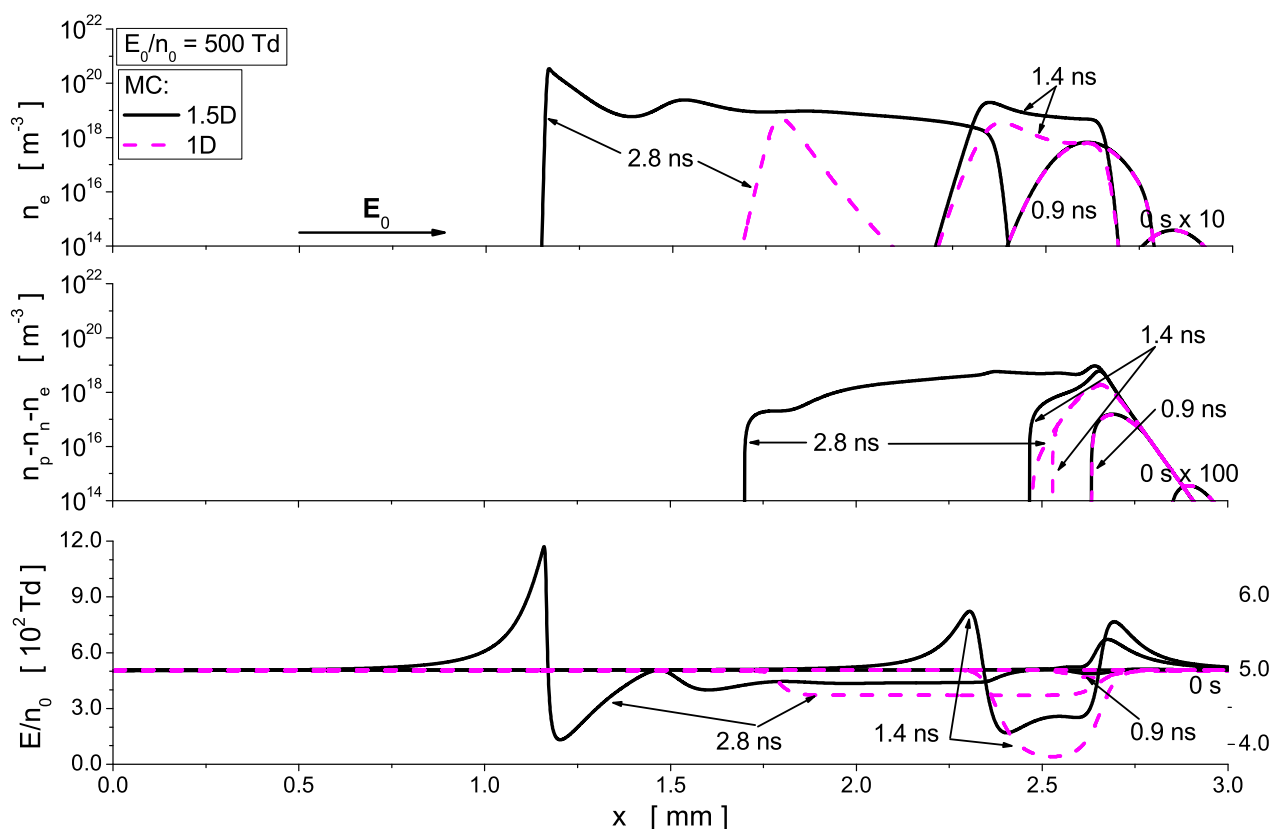
Nakon 1 ns od početka simulacije, koncentracije čestica rastu za približno pet redova veličina u odnosu na one u početnom trenutku. Polje unutar lavine opada na vrednost od  $\sim 420$  Td pri korišćenju MC ulaznih podataka, odnosno ostaje nepromenjeno pri korišćenju TTA-BE ulaznih podataka. Nakon 1.5 ns od početka simulacije, broj čestica u lavini postaje još veći. Ovaj porast iznosi približno dva (TTA-BE ulazni podaci), odnosno tri reda veličine (MC ulazni podaci). Dodatno, u ovom drugom slučaju se uočava tranzicija lavine u strimer. Polje u strimerskom kanalu opada na  $\sim 480$  Td (TTA-BE ulazni podaci) odnosno  $\sim 440$  Td (MC ulazni podaci). Električno polje na frontu strimera raste za preko 20% ukoliko se koriste MC ulazni podaci, dok je ovaj porast neznan u slučaju primene TTA-BE ulaznih podataka. Nakon 2.8 ns od početka simulacije, strimer je potpuno razvijen bez obzira na numeričku tehniku kojom su izračunati transportni koeficijenti elektrona. Polje u strimerskom kanalu opada na vrednost od  $\sim 450$  Td (TTA-BE ulazni podaci) odnosno na vrednost 437 Td što je jednako vrednosti kritičnog električnog polja ovog gasa (MC ulazni podaci). Pojačanje električnog polja za preko 60% (TTA-BE ulazni podaci) odnosno za preko 100% (MC ulazni podaci) je vidljivo na frontu strimera.

Na osnovu prikazanih poređenja rezultata dobijenih korišćenjem MC i TTA-BE ulaznih podataka zaključuje se da se strimer brže razvija ukoliko se u 1.5D fluidnom klasičnom modelu prvog koriste ulazni podaci izračunati MC simulacijama. Sa stanovišta ispitivanja dielektričnih osobina gasova, potrebno je razmotriti činjenicu da su osobine strimera i njihiva brzina osetljivi na način na koji se izračunavaju transportni koeficijenti. U tom smislu, ukoliko se klasičnim fluidnim modelom u 1.5D konfiguraciji ispituje razvoj strimera u nekom gasu, u fluidni model je potrebno uneti MC ulazne

podatke. Na osnovu dobijenih rezultata se dalje mogu izvesti zaključci o rastojanju koje je neophodno da elektroni pređu kako bi došlo do tranzicije lavine u strimer, o jačini spoljašnjeg električnog polja i drugim parametrima.

### 7.5.3 Poređenje osobina strimera u 1D i 1.5D

Ovo potpoglavlje je posvećeno proučavanju razlike u rezultatima fluidnih modela koji su definisani u 1D i 1.5D konfiguraciji. MC balk transportni koeficijenti su korišćeni kao ulazni podaci fluidnih modela. Proračuni su vršeni pri spoljašnjem električnom polju jačine 500 Td.



Slika 7.3: Razvoj i propagacija negativnih strimera u  $\text{CF}_3\text{I}$  pri spoljašnjem električnom polju jačine 500 Td. Poređenje rezultata klasičnog fluidnog modela u 1D i 1.5D konfiguraciji uz korišćenje balk transportnih koeficijenata elektrona izračunatih Monte Karlo simulacijama. Vrednosti električnog polja sa leve ose se odnose na vremenski trenutak 2.8 ns dok se desna osa odnosi na sva tri ranija vremenska trenutka.

U početnom trenutku,  $t = 0$  s, inicijalna raspodela naelektrisanih čestica je Gausova, a električno polje je uniformno i jednako spoljašnjem električnom polju (slika 7.3). Koncentracije čestica u trenutku 0.9 ns su za približno četiri reda veličine veće od koncentracija u početnom trenutku, dok njihov prostorni profil i dalje ima približan oblik Gausove raspodele. Polje koje odgovara ovoj lavinskoj fazi je opalo za svega 4%. Nakon 1.4 ns od početka simulacije je uočljiva tranzicija lavine u strimer koja je nešto brža uoiko se koristi fluidni model u 1.5D konfiguraciji. Opisano ponašanje se vidi kako u koncentraciji elektrona tako i u profilima koji definišu ukupno naelektrisanje. Unutar još uvek neformiranog strimera, električno polje je opalo na  $\sim 440$  Td u 1.5D konfiguraciji, pri čemu je na frontu poraslo za 16%. U 1D konfiguraciji električno polje unutar ove strukture je opalo na vrednost od  $\sim 370$  Td. Strimer je potpuno razvijen u obe konfiguracije u najkasnijem prikazanom vremenskom trenutku (2.8 ns). Koncentracija elektrona je za približno šest redova veličine veća od one u  $t = 0$  s. Električno polje u strimerskom kanalu u 1.5D konfiguraciji opada na vrednost od 437 Td, što se poklapa sa kritičnim električnom poljem  $\text{CF}_3\text{I}$ , dok je električno polje na frontu strimera poraslo za

preko 100% u odnosu na vrednost spoljašnjeg električnog polja. Fluidan model u 1D konfiguraciji daje nižu vrednost električnog polja u strimerskom kanalu,  $\sim 370$  Td.

U fluidnim simulacijama razvoja i propagacije negativnih strimera u 1D u elektropozitivnim gasovima, kao što je  $N_2$ , opaženo je da je električno polje u unutrašnjosti strimera u potpunosti zaklonjeno, a da je energija elektrona termalna [88, 90, 273, 278]. Ovaj rezultat je posledica inherentnih karakteristika 1D modela i činjenice da je  $N_2$  gas koji ne poseduje zahvat elektrona. U ovim simulacijama, koncentracija elektrona iza propagirajućeg fronta je dovoljno velika da u potpunosti zakloni spoljašnje električno polje. Za precizan opis osobina strimera, uključujući i električno polje u unutrašnjosti strimera, neophodne su simulacije u 2D ili 3D. Brzina opadanja električnog polja u strimerskom kanalu zavisi od poluprečnika zakrivljenosti glave strimera. U 1D modelu se ne može govoriti o zakrivljenosti glave strimera, pa je u tom smislu i raspodela električnog polja nedovoljno precizno opisana. U svakom slučaju, na osnovu rezultata prikazanih u ovoj disertaciji, može se uočiti da električno polje u 1D modelu ima vrednost oko 370 Td.

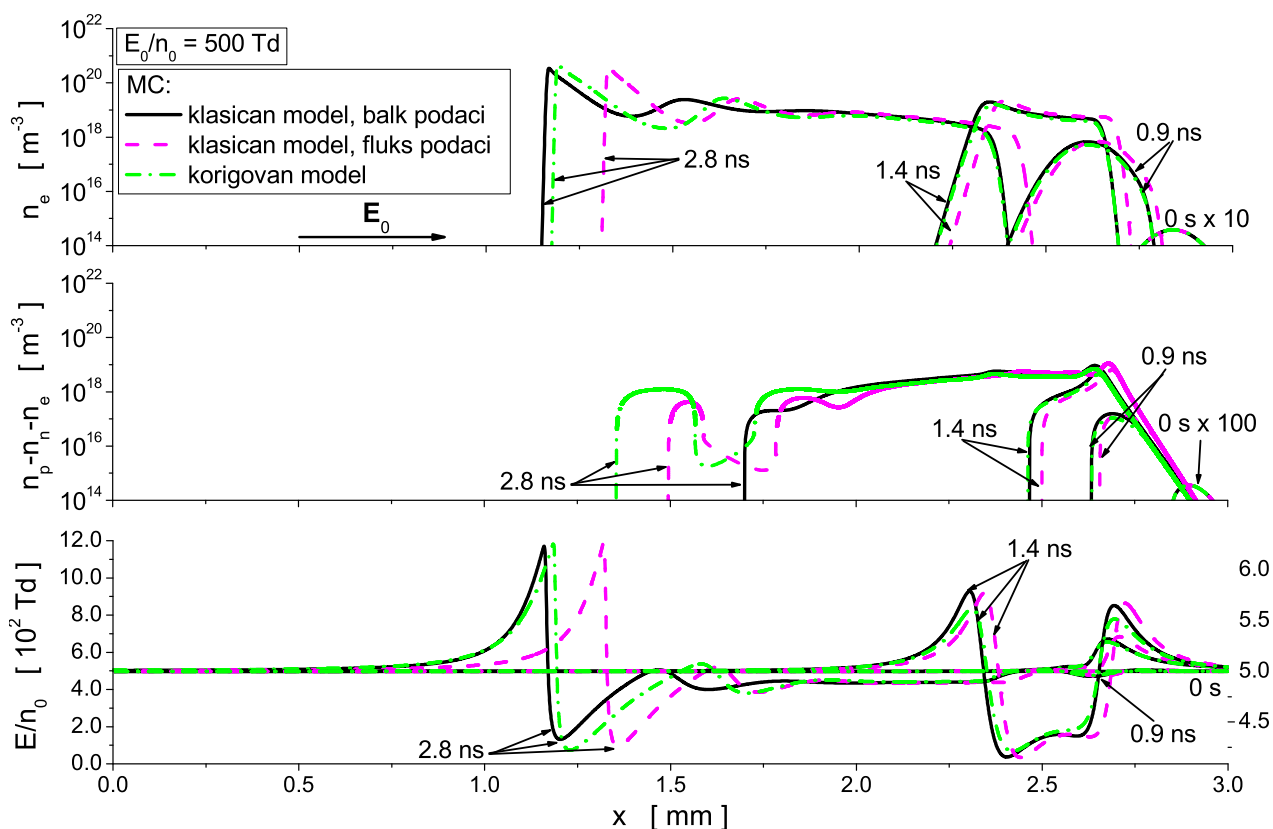
Upoređujući rezultate koji se dobijaju modelima u 1D i 1.5D konfiguraciji, može se uočiti da je brzina tranzicije lavine elektrona u strimer brža u 1.5D modelu. Nakon 2.8 ns od početka simulacije, strimer u 1.5D konfiguraciji prelazi rastojanje od 1.85 mm (strimer se kreće sa desne strane slike ka levoj), dok u 1D konfiguraciji, za isto vreme, strimer prelazi rastojanje koje je kraće za  $\sim 1$  mm. Jedan od važnih kriterijuma dielektričnih osobina strimera je brzina tranzicije lavine elektrona u strimer i rastojanje koje strimeri prelaze u nekom unapred zadatom vremenu. 1.5D modeli bolje obezbeđuju procene ovih osobina strimera, imajući u vidu da ovi modeli obezbeđuju precizniju raspodelu električnog polja i koncentracije elektrona kako na frontu, tako i u unutrašnjosti strimera.

#### 7.5.4 Osetljivost osobina strimera na prirodu transportnih koeficijenata

Na slici 7.4 je prikazano poređenje rezultata različitih fluidnih modela u 1.5D konfiguraciji. U pitanju su klasični fluidni modeli sa balk i fluks podacima i korigovan model. Pomenuti modeli koriste MC ulazne podatke. Korigovanim modelom je postignuta bolja kontrola u pogledu korektne implementacije transportnih koeficijenata u modelovanju strimera. Naime, ne postoji jednoznačan odgovor na pitanje da li je potrebno koristiti balk ili fluks podatke u klasičnom fluidnom modelu. Na osnovu prethodnih simulacija strimera u 1D, opaženo je da klasičan fluidni model sa balk transportnim koeficijentima bolje opisuje brzinu propagacije, koncentraciju elektrona i električno polje na frontu strimera. Sa druge strane, korišćenjem fluks transportnih koeficijenata postiže se precizniji opis koncentracije elektrona i električnog polja u unutrašnjosti strimera [88, 273]. Sa druge strane, u korigovanom fluidnom modelu, izvorni član se razvija u stepeni red po gradijentima koncentracije elektrona u drift-difuzionoj jednačini. Na ovaj način su bolje opisani eksplicitni uticaj nekonzervativnih sudara i njihova nelokalna raspodela tokom evolucije lavine elektrona i strimera.

U korigovanom fluidnom modelu se unose balk i fluks transportni koeficijenti elektrona kao i koeficijenti u razvoju izvornog člana po gradijentima koncentracije elektrona, koje ćemo u nastavku diskusije nazivati *S koeficijenti*. Na slici 7.5 su prikazni *S koeficijenti* koji su izračunati MC simulacijama putem izraza (7.42) i (7.43). Vidi se da je doprinos zahvata elektrona najizraženiji u oblasti niskih električnih polja, u kojima je srednja energija elektrona niža od 2 eV (slika 4.6), dok doprinos jonizacije dominira na višim  $E/n_0$ . Upravo će ovakav doprinos različitih sudarnih procesa u različitim oblastima električnih polja imati uticaj na rezultate izračunate korigovanim fluidnim modelom.

Na slici 7.4 se može uočiti da je u trenutku  $t = 0$  s, baš kao u svim drugim simulacijama, inicijalna raspodela elektrona Gausova, a električno polje homogeno. U 0.9 ns,  $E/n_0$  neznatno opada, tj. i dalje ima vrednost blisku spoljašnjem električnom polju, dok su koncentracije elektrona porasle za približno četiri reda veličine. Srednje energije elektrona se kreću od 5 eV do 6 eV u ovom opsegu električnih polja (videti slike 3.2, 4.6, 4.8). U ovom intervalu energija deluje proces zahvata elektrona, ali je njegov intenzitet manji od preseka za sve ostale konkurentne sudarne procese. Takođe, u ovom opsegu energija ne odvija se jonizacija pošto elektroni još uvek ne dostižu prag ovog procesa. Drugim



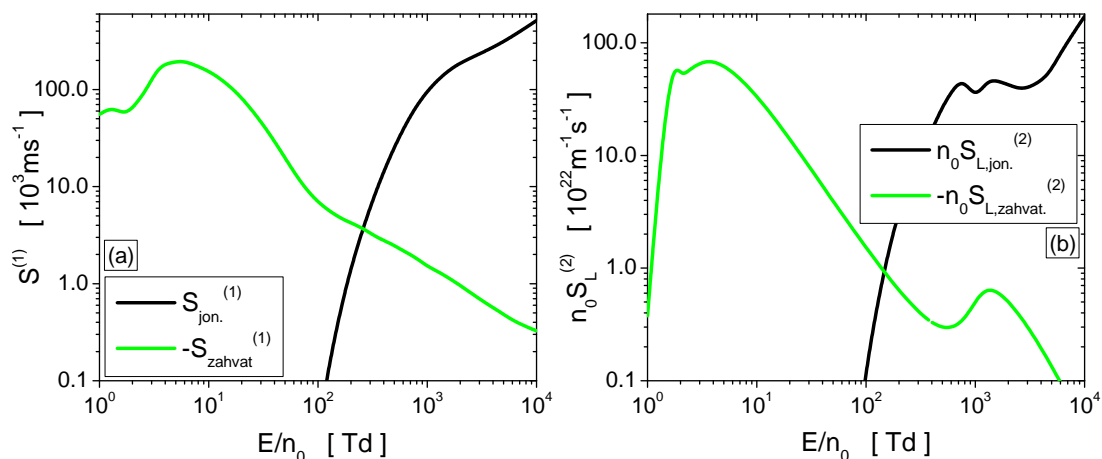
Slika 7.4: Razvoj i propagacija negativnih strimera u  $\text{CF}_3\text{I}$  u pri spoljašnjem električnom polju jačine 500 Td. Prikazani su rezultati klasičnog fluidnog modela sa balk i fluks podacima su upoređeni sa rezultatima korigovanog fluidnog modela. Ulazni podaci su izračunati Monte Karlo simulacijama dok su fluidni modeli u 1.5D konfiguraciji. Vrednosti električnog polja sa leve ose se odnose na vremenski trenutak 2.8 ns dok se desna osa odnosi na sva tri ranija vremenska trenutka.

rečima, doprinos nekonzervativnih sudara je zanemarljiv što se vidi i na slici 7.5. Kako se korigovani model ne razlikuje od klasičnog fluidnog modela sa balk podacima u slučaju kada se doprinos nekonzervativnih sudara može zanemariti, očekivano je dobro međusobno slaganje rezultata ova dva modela. Za razliku od njih, rezultati klasičnog modela sa fluks podacima prikazuju nešto sporiji rast lavine elektrona, što je, pre svega, posledica manje  $W_F$  u odnosu na  $W_B$  (slika 4.8).

U narednom vremenskom trenutku (1.4 ns) lavina elektrona je promenila svoj profil: umesto oblika Gausijana, na frontu profila koncentracija čestica se generišu novi elektroni. Strimer i dalje nije formiran, ali električno polje opada na  $\sim 440$  Td, dok električno polje na frontu ansambla elektrona dostiže vrednost iz opsega [560-580] Td u zavisnosti od primenjenom fluidnog modela. I u ovom vremenskom trenutku se jako dobro slažu rezultati korigovanog fluidnog modela i klasičnog modela sa balk podacima. Model koji koristi fluks podatke daje sporiju tranziciju lavine u strimer i manji porast  $E/n_0$  na frontu strimera.

U najkasnijem prikazanom vremenskom trenutku od 2.8 ns strimeri su formirani u sva tri scenarija. Najbrži je strimer koji odgovara rezultatima klasičnog modela sa balk podacima, od njega je neznatno sporiji strimer koji odgovara korigovanom modelu, dok najkraće rastojanje prelazi strimer koji se odnosi na klasičan fluidan model sa fluks podacima. Polje u strimerskom kanalu dostiže vrednost kritičnog električnog polja  $\text{CF}_3\text{I}$  (437 Td).

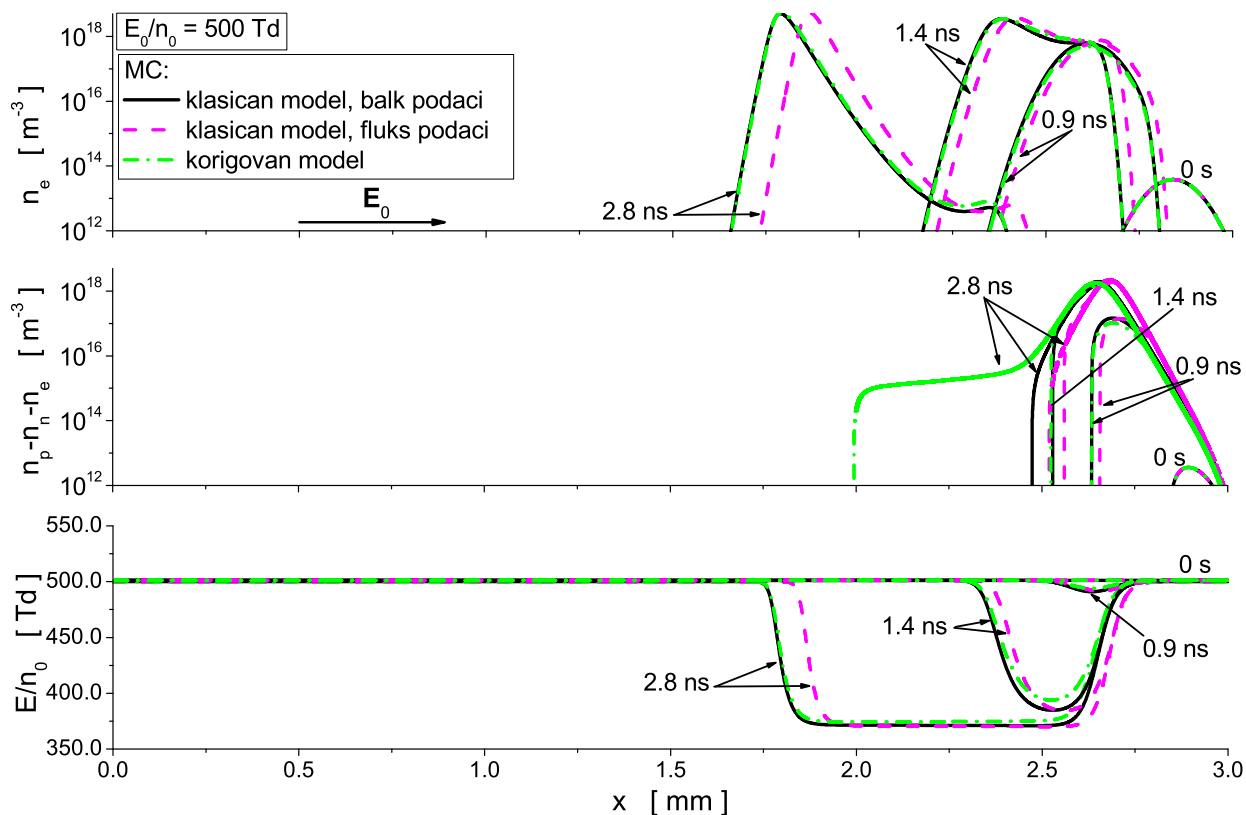
Na slici 7.6 je prikazan isti skup rezultata kao na slici 7.4, koji se, u ovom slučaju, odnosi na rezultate fluidnih modela u 1D konfiguraciji. I ovi rezultati prikazuju već uočenu pravilnost: međusobno slaganje rezultata korigovanog modela i klasičnog modela sa balk koeficijentima kao i sporiji razvoj strimera u odnosu na rezultate pomenutih modela ukoliko se proračuni vrše klasičnim modelom sa fluks podacima. Polje u strimerskom kanalu opada na vrednost 371 Td (klasičan model sa balk



Slika 7.5: Koeficijenti prvog (panel (a)) i drugog reda (panel (b)) za zahvat elektrona i jonizaciju u razvoju izvornog člana transportne jednačine za elektrone u korigovanom modelu. Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama transporta elektrona u CF<sub>3</sub>I.

podacima), 370 Td (klasičan model sa fluks podacima) odnosno 374 Td (korigovan model).

Kao što je već pomenuto, jedna od osnovnih karakteristika gasnog dielektrika je sprečavanje razvoja i propagacije strimera u sredini u kojoj se primenjuje. Na osnovu rezultata sa slika 7.4 i 7.6 može se utvrditi kolika rastojanja prelaze lavine elektrona pre nego što dođe do njihove tranzicije u strimer, što je važan podatak za razumevanje dielektričnih osobina gasova.

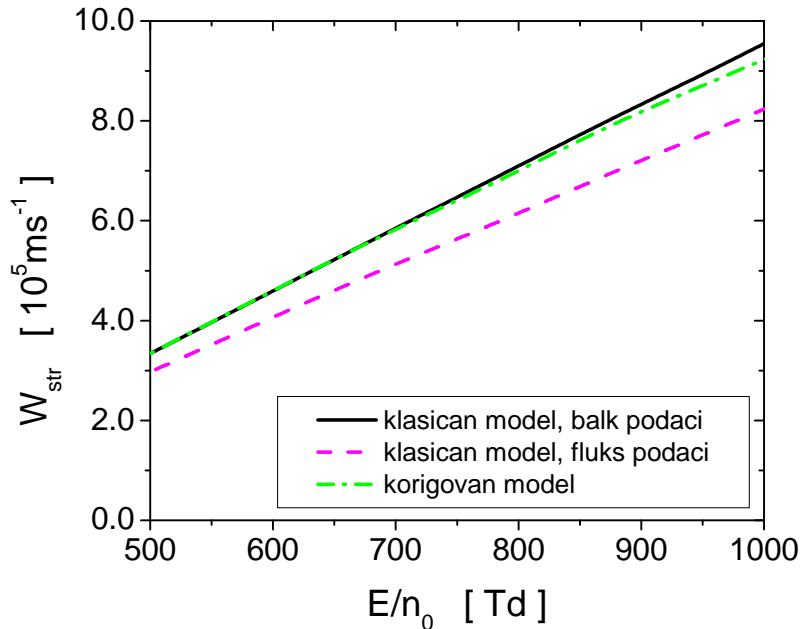


Slika 7.6: Razvoj i propagacija negativnih strimera u CF<sub>3</sub>I pri spoljašnjem električnom polju jačine 500 Td. Prikazani su rezultati klasičnog fluidnog modela sa balk i fluks podacima i rezultati korigovanog fluidnog modela. Ulazni podaci su izračunati Monte Karlo simulacijama dok su fluidni modeli u 1D konfiguraciji.



### 7.5.5 Brzina fronta strimera u čistom jako elektronegativnom gasu

Na slici 7.7 je prikazana brzina fronta strimera u  $\text{CF}_3\text{I}$  u funkciji  $E/n_0$ . U pitanju su rezultati različitih fluidnih modela u 1D konfiguraciji u koje su uneti MC ulazni podaci. Brzina fronta strimera je izračunavana praćenjem kretanja tačke maksimuma koncentracije elektrona, počevši od vremenskog trenutka u kome prestane ubrzano kretanje strimera.



Slika 7.7: Brzina fronta strimera u funkciji električnog polja u  $\text{CF}_3\text{I}$  izračunata na osnovu rezultata fluidnog modelovanja u 1D konfiguraciji. Poređenje rezultata različitih fluidnih modela čiji su ulazni podaci transportni koeficijenti elektrona izračunati Monte Karlo simulacijama.

Pre svega, sa slike se vidi da je brzina fronta strimera rastuća funkcija električnog polja bez obzira na fluidni model na osnovu čijih rezultata je izračunata. Sa porastom  $E/n_0$  raste brzina drifta i koeficijent jonizacije elektrona. Brzina propagacije strimera zavisi od brzine drifta elektrona, koeficijenta jonizacije i longitudinalnog koeficijenta difuzije. Difuzioni fluks, koji je posledica oštrog gradijenta koncentracije elektrona na frontu, takođe značajno doprinosi brzini propagacije strimera.

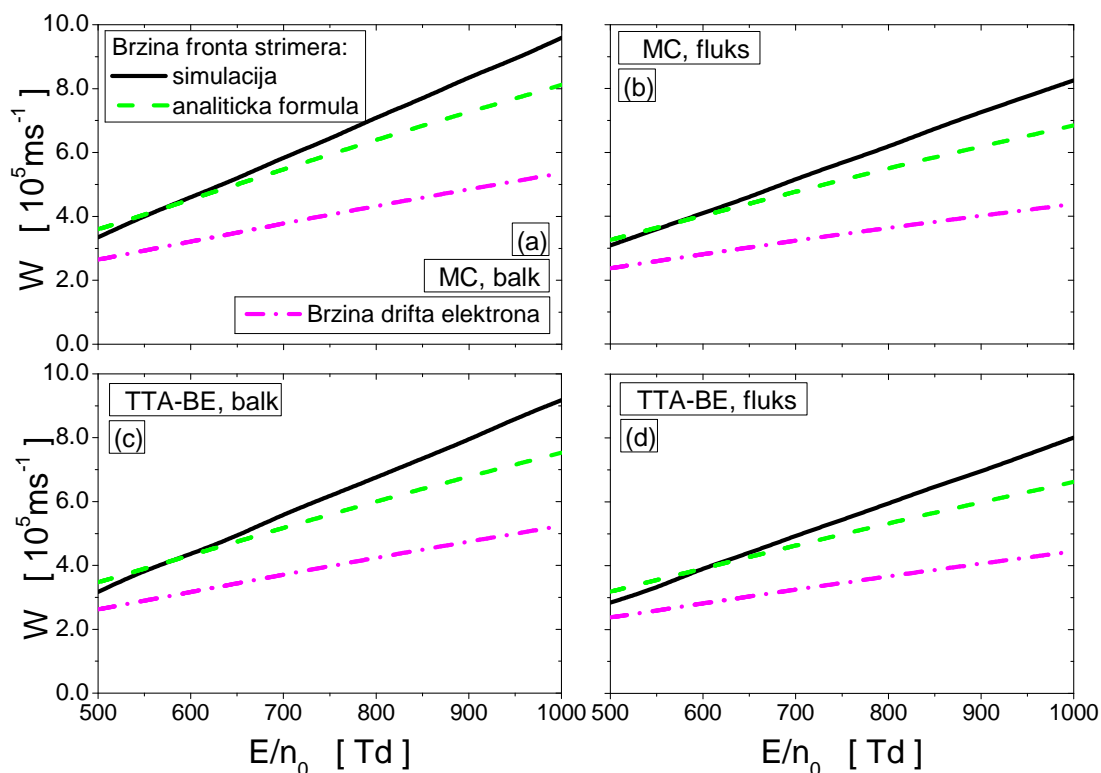
Brzina fronta strimera izračunata na osnovu rezultata klasičnog fluidnog modela sa balk podacima se poklapa sa rezultatima korigovanog modela sve do 800 Td, nakon čega je maksimalna razlika ova dva rezultata približni 4%. Brzina fronta strimera izračunata klasičnim modelom sa fluks podacima je manja od pomenutih brzina za (12-16)% u opsegu električnih polja prikazanih na slici. Ovakav odnos brzina fronta strimera je očekivan na osnovu rezultata sa slike 7.6.

Na slici 7.8 je prikazno poređenje brzine fronta strimera i brzine drifta elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$  u funkciji  $E/n_0$ . Rezultati su izračunati klasičnim fluidnim modelima na osnovu različitih ulaznih podataka (balk ili fluks, kao što je obeleženo na svakom panelu slike) koji su izračunati Monte Karlo tehnikom (MC) ili na osnovu aproksimacije dva člana za rešavanje Bolcmanove jednačine (TTA-BE). Pored već opisanog načina, brzina fronta strimera se može izračunati i analitičkim putem [278–281]. U tu svrhu se primenjuje izraz

$$W_{str} = \mu(E)|E| + 2\sqrt{D_L(E)\mu(E)|E|\alpha(E)}, \quad (7.55)$$

u kome je brzina fronta strimera obeležena oznakom  $W_{str}$ ,  $\mu$  je mobilnost elektrona,  $E$  je jačina električnog polja,  $D_L$  je longitudinalan koeficijent difuzije, dok je  $\alpha$  Taunzenov koeficijent jonizacije.

Sa slike 7.8 se vidi da brzina fronta strimera, izračunata jednačinom (7.55), odstupa od brzine fronta, koja je izračunata na osnovu rezultata fluidnog modela. Odstupanje je od 7% na najnižim do



Slika 7.8: Brzina fronta strimera u funkciji električnog polja u  $\text{CF}_3\text{I}$  izračunata na osnovu rezultata klasičnog fluidnog modela u 1D konfiguraciji. Ulazni podaci su različiti skupovi podataka kao što je označeno na panelima slike. Radi poređenja su prikazane i brzine fronta strimera izračunate analitičkom formulom (7.55) kao i brzine drifta elektrona. Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na ostale panele.

18% na najvišim prikazanim električnim poljima. Jedan od razloga ovog odstupanja su ograničenja analitičke teorije kojom se tretira propagacija planarnih jonizacionih frontova i izbor početnih uslova u simulaciji. Procesi difuzije elektrona i zahvata elektrona u ovim analitičkim teorijama nisu reprezentovani na adekvatan način. Za razliku od indijuma [274], u kome je međusobno odstupanje brzina fronta strimera manje od 5% u prikazanom opsegu električnih polja,  $\text{CF}_3\text{I}$  je jako elektornegativan gas, što predstavlja dodatan razlog za neadekvatnost primene analitičke jednačine (7.55).

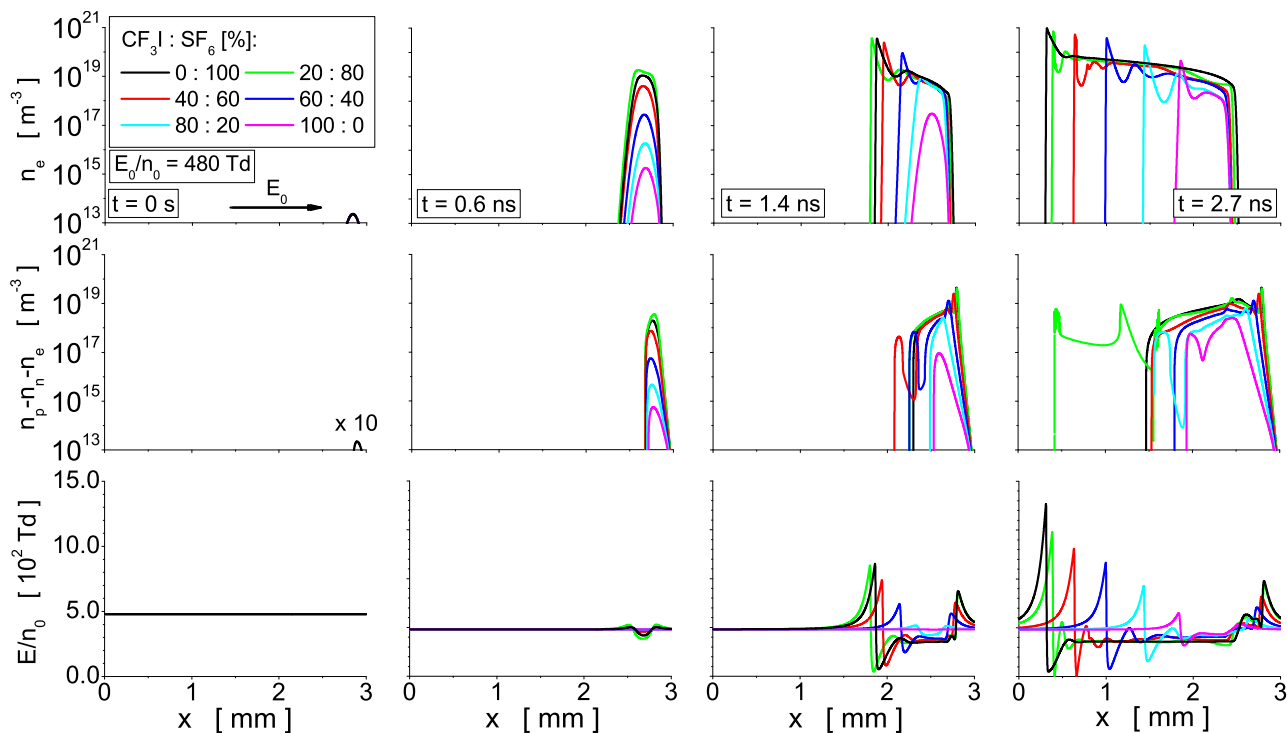
Uporedimo rezultate dobijene istom numeričkom tehnikom, na primer MC simulacijama, koji se odnose na različitu prirodu transportnih koeficijenata elektrona (paneli (a) i (b)). Sa ovih panela se vidi da brzine fronta strimera kao i brzine drifta elektrona imaju veće vrednosti ukoliko su ovom tehnikom izračunati balk transportni koeficijenti elektrona. Razlike između balk i fluks rezultata, kako brzina fronta strimera tako i brzine drifta elektrona, kreću se od 8% na najnižem električnom polju do 16% na najvišem prikazanom električnom polju. Isti odnos odgovarajućih skupova rezultata se dobija i u slučaju poređenja balk i fluks rezultata izračunatih TTA-BE numeričkom tehnikom (paneli (c) i (d)). Ovakav odnos između brzina fronta strimera izračunatih na osnovu balk i fluks ulaznih podataka je očekivan na osnovu propagacija strimera sa slike 7.6.

Uporedimo rezultate dobijene različitim numeričkim tehnikama koji se odnose na istu prirodu podataka, npr. balk (paneli (a) i (c)). Razlike između odgovarajućih brzina fronta strimera i brzina drifta elektrona iznose svega 5% u korist balk podataka u celokupnom prikazanom opsegu električnih polja. Slična razlika se javlja i kod fluks podataka (paneli (b) i (d)). Odnos odgovarajućih skupova rezultata je očekivan na osnovu propagacija strimera sa slike 7.2. Iako ova slika prikazuje rezultate u 1.5D konfiguraciji, na osnovu odnosa rezultata u 1.5D i 1D konfiguraciji sa slike 7.3 znamo da će se i u 1D konfiguraciji strimeri brže razvijati i propagirati ukoliko se koriste MC ulazni podaci umesto TTA-BE podataka.

Na svakom od panela slike 7.8 se vidi da je brzina fronta strimera veća od brzine drifta elektrona bez obzira na numeričku tehniku korišćenu pri izračunavanju transportnih koeficijenata elektrona a ni prirodu transportnih koeficijenata (balk ili fluks). Pomenuta razlika je u opsegu od približno 25% na najnižim električnim poljima do čak 80% na najvišim prikazanim električnim poljima. Ovo je jedna od karakteristika strimera u neutralnim gasovima [88, 273, 282] i atomskim tečnostima [185]. Kao što smo već diskutovali, brzina propagacije fronta strimera se može na izvestan način prikazati kao suma brzine drifta i članova koji opisuju doprinos longitudinalne difuzije i jonizacije, kao i doprinosa koji su posledica difuzionog fluksa koji potiče od oštrog gradijenta koncentracije elektrona na frontu strimera.

### 7.5.6 Razvoj i propagacija strimera u $\text{CF}_3\text{I-SF}_6$ gasnim smešama

Na slici 7.9 je prikazan razvoj i propagacija strimera u  $\text{CF}_3\text{I-SF}_6$  gasnim smešama. U pitanju su rezultati klasičnog fluidnog modela sa balk podacima koji su izračunati MC simulacijama. U cilju prikazivanja ovog skupa rezultata u gasovima sa različitim kritičnim električnim poljima, kao spoljašnje električno polje u fluidnom modelovanju je odabrana vrednost koja je veća od  $(E/n_0)_{lim}$  obe komponente smeše. U pitanju je vrednost od 480 Td, koja je za  $\sim 10\%$  veća od kritičnog električnog polja  $\text{CF}_3\text{I}$ , odnosno za  $\sim 33\%$  veća od kritičnog električnog polja  $\text{SF}_6$ .



Slika 7.9: Razvoj i propagacija negativnih strimera u  $\text{CF}_3\text{I-SF}_6$  gasnim smešama. Prikazani su rezultati klasičnog fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji pri spoljašnjem električnom polju jačine 480 Td. Ulazni podaci su balk transportni koeficijenti elektrona izračunati Monte Karlo simulacijama.

Oznake krivih sa gornjeg levog panela se donose i na ostale panele.

Na početku simulacije ( $t = 0$  s), bez obzira na sastav gasne smeše, koncentracije čestica imaju oblik Gausijana, a električno polje unutar lavine elektrona je jednako spoljašnjem električnom polju. Nakon 0.6 ns primećuje se porast koncentracije čestica u lavini koji je intenzivniji sa porastom koncentracije  $\text{SF}_6$  u smeši. Ovaj porast koncentracija iznosi od tri reda veličine do skoro šest redova veličine u odnosu na koncentraciju na početku simulacije. Prema trendu rezultata bi se očekivalo da je koncentracija čestica najveća u čistom  $\text{SF}_6$ . Međutim, kako ovaj i naredni vremenski trenutak od 1.4 ns predstavljaju tranzijentan proces (proces tranzicije iz lavine u strimer), smeša sa 20%  $\text{CF}_3\text{I}$  i

čist SF<sub>6</sub> odstupaju od očekivanog ponašanja. Za razliku od ovoga, u posljednjem prikazanom vremenskom trenutku (2.7 ns), u kome je strimer razvijen u svim smešama, vidi se upravo ponašanje koje je očekivano: strimer se najbrže kreće u čistom SF<sub>6</sub>. Ovaj rezultat je potpuno intuitivan ukoliko se zna da je kritično električno polje SF<sub>6</sub> (361 Td) manje od kritičnog električnog polja CF<sub>3</sub>I (437 Td).

Što se tiče  $E/n_0$ , električno polje unutar lavine elektrona opada na minimalnu vrednost od 383 Td (za smešu sa 20% CF<sub>3</sub>I) u trenutku 0.6 ns, dok se u 1.4 ns, u smešama u kojima se razvio strimer, električno polje u strimerskom kanalu spušta na vrednosti kritičnog električnog polja datih smeša (slika 4.22). Na frontu strimera, električno polje je pojačano za 52% (40% SF<sub>6</sub> u smeši), za 102% (60% SF<sub>6</sub> u smeši), za 136% (80% SF<sub>6</sub> u smeši) odnosno za 140% (čist SF<sub>6</sub>) u odnosu na vrednost spoljašnjeg električnog polja. U 2.7 ns, električno polje u strimerskom kanalu opada na vrednost kritičnog električnog polja odgovarajućih smeša, dok su električna polja na frontu strimera višestruko pojačana u odnosu na spoljašnje električno polje.

U cilju upoređivanja karakteristika gasova CF<sub>3</sub>I i SF<sub>6</sub>, na osnovu ove slike se zaključuje da se strimer sporije razvija ukoliko opada koncentracija SF<sub>6</sub> u smeši. Drugim rečima, CF<sub>3</sub>I je komponenta koja popravlja dielektrična svojstva ove smeše gasova. Ovde naravno treba biti oprezan imajući u vidu da ukupna dielektrična svojstva nekog gasa ili gasne smeše zavise od velikog broja faktora, a ne samo od karakteristika strimera. Upravo je ovakav holistički pristup problemu pronalaska adekvatne zamene SF<sub>6</sub> gasa predmet proučavanja u narednom poglavlju.

## 7.6 Zaključak

U ovom poglavlju su predstavljeni osnovni elementi fluidnih modela koji su korišćeni u simulacijama razvoja i propagacije negativnih strimera u jako elektronegativnim gasovima. Na osnovu jednačina balansa koncentracije elektrona i njihovog impulsa, izveden je klasičan i korigovan fluidni model. Izračunati su koncentracija elektrona, naelektrisanje, raspodela električnog polja i brzina propagacije strimera. Proučavana je osetljivost propagacije strimera na prirodu transportnih koeficijenata i način njihovog proračuna. Upređene su karakteristike strimera koje su dobijene u 1D i 1.5D, a kao primer proučavanja strimera u gasnim smešama, analizirana je propagacija negativnih jonizacionih frontova u smešama CF<sub>3</sub>I i SF<sub>6</sub>.

# Poglavlje 8

## Poređenje osobina gasova $\text{CF}_3\text{I}$ , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ i $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ sa $\text{SF}_6$

### 8.1 Uvod

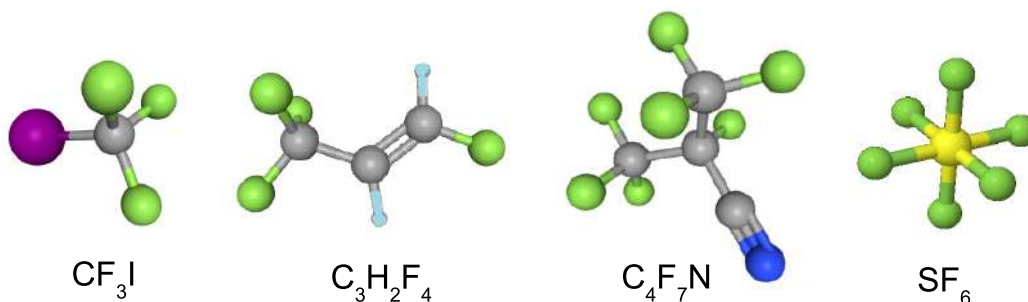
Tema ovog poglavlja je analiza gasova  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  i  $\text{SF}_6$  iz nekoliko različitih uglova. Najpre su protumačene osobine gasova koje direktno zavise od njihove molekularne strukture i atomskog sastava. Analizirane se fizičke i hemijske osobine gasova, uz predlaganje kompromisnog rešenja u cilju izdvajanja najpovoljnijeg gasa za potencijalnu zamenu  $\text{SF}_6$  u ulozi gasnog dielektrika u sistemima za prenos električne energije. Na kraju poglavlja upoređene su dielektrične osobine ispitivanih gasova na osnovu rezultata simulacija razvoja i propagacija strimera u njima.

### 8.2 Poređenje molekularne strukture, fizičkih i hemijskih osobina gasova $\text{CF}_3\text{I}$ , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ i $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ sa $\text{SF}_6$

Potruga za zamenom  $\text{SF}_6$  gasa u sistemima za prenos električne energije je izuzetno kompleksan zadatak. Neophodno je da gasovi i njihove smeše ispunjavaju čitav spektar zahteva kako bi bili uzeti u obzir kao potencijalni kandidati za pomenutu ulogu. Jedan od zahteva se odnosi na molekularnu strukturu gasa. Različiti tipovi hemijskih veza između atoma koji ulaze u satav gasa utiču na fizičke, hemijske, ekološke ali i dielektrične osobine gasa.

Na slici 8.1 su prikazani modeli gasova  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ ,  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  i  $\text{SF}_6$  preuzeti sa internet stranice PubChem [167]. U  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  postoji po jedna dvostruka, odnosno trostruka kovalentna veza respektivno, koja, kao što je pomenuto u potpoglavlju 2.4, obezbeđuje veću sklonost ka disocijaciji u odnosu na onu kojom su okarakterisani zasićeni gasovi (kao što su  $\text{CF}_3\text{I}$  i  $\text{SF}_6$ ). Iako se nezasićeni gasovi jednostavnije uklanjaju iz atmosfere putem foto-disocijacije molekula, što je poželjno u

Oznake boja: ugljenik, fluor, jod, sumpor, vodonik, azot



Slika 8.1: Molekularna struktura gasova  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ ,  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  i  $\text{SF}_6$ . Atomi su obeleženi odgovarajućim bojama prema legendi sa slike.

ekološkom smislu, njihovo razlaganje na produkte manje mase i jednostavnije strukture ne znači da su novonastali molekularni gasovi bezopasni za atmosferu i živa bića. U najvećem broju slučajeva, atmosfersko vreme života ovih gasovitih produkata nije kraće od vremena kojim su okarakterisani inicijalni gasovi. Dakle, na osnovu molekularne strukture i atomskog sastava ispitivanih gasova mogu se dobiti podaci o gasovima koji zadovoljavaju stroge ekološke norme. Iako ovi podaci predstavljaju značajne smernice za selekciju potencijanih kandidata za zamenu  $\text{SF}_6$ , dodatna analiza gasova obuhvata utvrđivanje njihovih fizičkih i hemijskih osobina.

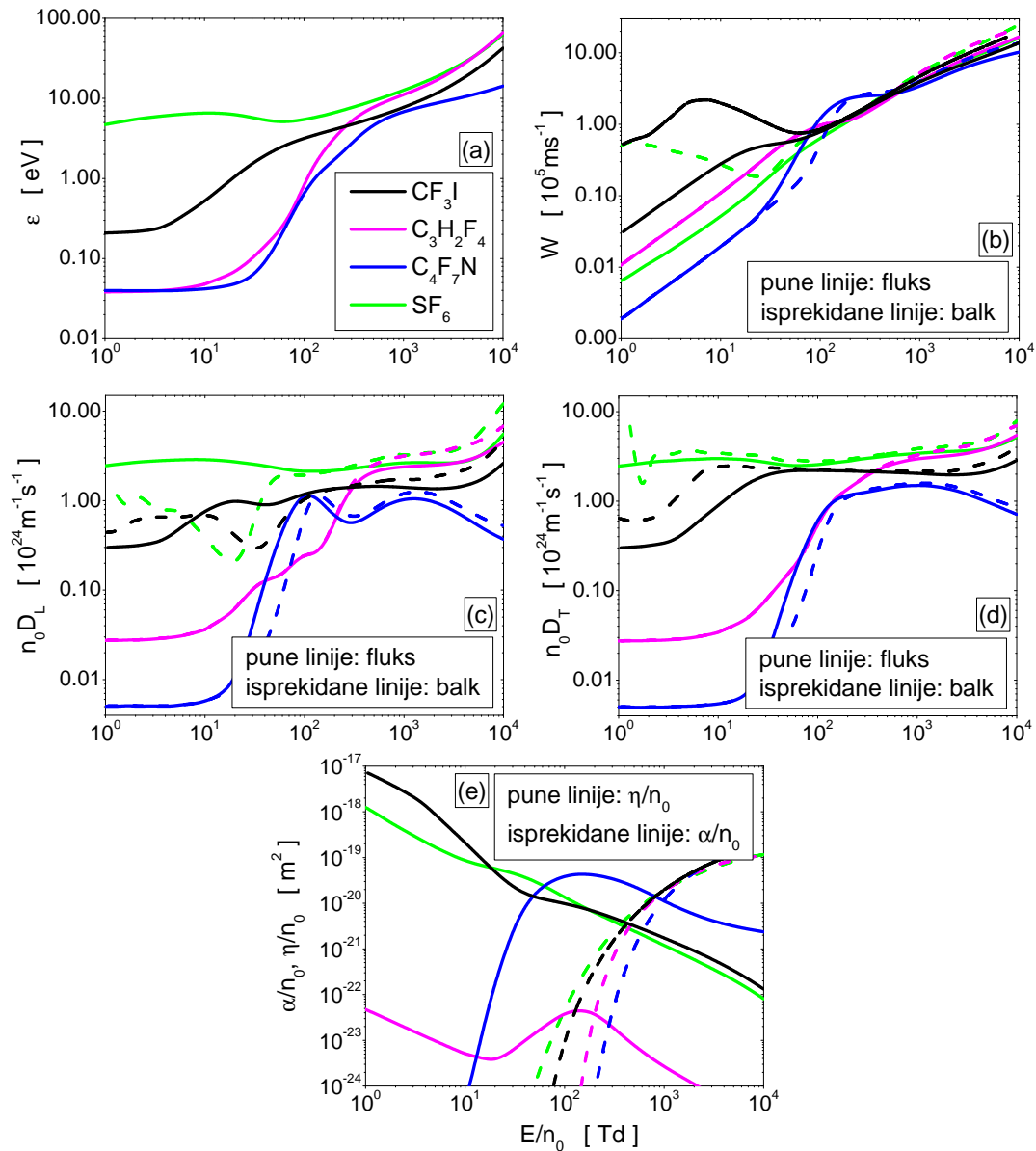
Tabela 8.1: Fizičke i hemijske osobine gasova  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ ,  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  i  $\text{SF}_6$ .

Osobine gasova	Gasovi			
	$\text{CF}_3\text{I}$	$\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$	$\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$	$\text{SF}_6$
Molekularna težina [amu]	195.91	114.04	195.04	146.06
Tačka ključanja [ $^{\circ}\text{C}$ na 1 atm]	-22.5	-19.0	-4.7	-64.0
Napon pare [Torr na $21^{\circ}\text{C}$ ]	3294.3	3975.3	1900.0	16100.0
Kritično polje [Td]	437.0	193.0	969.4	361.0
GWP [ref. $\text{CO}_2$ , 100 god.]	0.4	6	1490-3646	22800
ODP [ref. $\text{CCl}_3\text{F}$ ]	0.07-0.5	0	0	0
Atmosfersko vreme života	1.8 d.	3 ned.	22-47 g.	3200 g.

U tabeli 8.1 su upoređene fizičke i hemijske osobine  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  sa gasom  $\text{SF}_6$ . Potencijalan kandidat za zamenu  $\text{SF}_6$  gasa mora biti u gasovitom agregatnom stanju u širokom opsegu temperatura kako bi bio primenljiv i u hladnijim podnebljima. Zbog toga bi, tačka ključanja gasa bi trebala da bude uporediva ili čak niža od vrednosti kojom se odlikuje  $\text{SF}_6$ . Upoređivanjem ove vrednosti, vidi se da su tačke ključanja ispitivanih gasova više od vrednosti kojom je okarakterisan  $\text{SF}_6$  za bar 2.8 puta. Ipak, nedovoljno niska tačka ključanja se može nadomestiti formiranjem smeša sa pogodnim gasovima. Iako  $\text{SF}_6$  ima odgovarajuću tačku ključanja, njegov faktor GWP je za nekoliko redova veličina veći od vrednosti preostalih ispitivanih gasova, što je jedan od osnovnih motiva potrage za njegovom zamenom. Isti zaključak se donosi poređenjem atmosferskog vremena života ovih gasova. Ukoliko se analiziraju kritična električna polja, uočava se da se  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  ubedljivo izdvaja od ostalih gasova. Ovaj gas zadržava svoja dielektrična svojstva, odnosno sprečava razvoj strimera na tipičnim radnim uslovima koji se javljaju u sistemima za prenos električne energije (tabela 1.3). Ipak, ova izuzetna karakteristika  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  je u senci nedovoljno niske tačke ključanja i relativno dugog atmosferskog vremena života. Zaključuje se da se nijedan od ispitivanih gasova ne izdvaja u odnosu na ostale po pitanju svih ispitivanih karakteritika. Ovo je jasan pokazatelj da se potraga za zamenom  $\text{SF}_6$  ne može svesti na posmatranje pojedinačnih karakteristika gasova već na njihovu međusobnu zavisnost koja zahteva uvođenje kompromisa u pogledu ispunjavanja različitih zahteva.

### 8.3 Poređenje transportnih koeficijenata elektrona u $\text{CF}_3\text{I}$ , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ , $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ i $\text{SF}_6$

U cilju dodatne analize gasova, na slici 8.2 su međusobno upoređeni transportni koeficijenti elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ ,  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  i  $\text{SF}_6$  u funkciji električnog polja. U pitanju su rezultati MC simulacija uz korišćenje tehnike kontinualnog reskaliranja elektrona. Rezultati za  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  su dobijeni korišćenjem skupa preseka za rasejanje elektrona koji daje dobro slaganje sa merenjima De Urkiha i saradnika (poglavlje 5.3).



Slika 8.2: Transportni koeficijenti elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ ,  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  i  $\text{SF}_6$  u funkciji  $E/n_0$ : srednja energija elektrona (a), fluks i balk brzina drifta (b), fluks i balk longitudinalan (c) kao i transverzalan koeficijent difuzije (d), koeficijenti jonizacije  $\alpha/n_0$  i zahvata elektrona  $\eta/n_0$  (e). Prikazani su rezultati Monte Karlo simulacija uz tehniku kontinualnog reskaliranja elektrona. Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na ostale panele.

Srednja energija elektrona (panel (a)) je monotono rastuća funkcija  $E/n_0$  kod svih gasova osim kod  $\text{SF}_6$  u čijem profilu se uočava opadanje  $\varepsilon$  sa porastom polja. Ovaj zanimljiv fenomen je diskutovan u poglavlju 4.5.1. U domenu najnižih prikazanih polja, srednja energija elektrona se razlikuje od vrednosti referentnog gasa  $\text{SF}_6$  za 95.5% u slučaju  $\text{CF}_3\text{I}$ , odnosno za približno 99% u slučaju preostala

dva gasa. U domenu najviših prikazanih polja, pomenuta razlika iznosi 29.1% za  $\text{CF}_3\text{I}$ , 4.6% za  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i 77.8% za  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ .

Brzina drifta elektrona (panel b) je takođe monotono rastuća funkcija električnog polja osim kod balk brzine u  $\text{CF}_3\text{I}$  (u oblasti od približno (7-70) Td) i  $\text{SF}_6$  (u oblasti od najnižih prikazanih polja do 25 Td) kod kojih se može opaziti veoma izražen NDC efekat. Na najnižim prikazanim poljima, fluks brzina drifta je najveća u  $\text{CF}_3\text{I}$  a najmanja u  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  sve do polja od približno 45 Td. Elektroni se kreću najmanjom fluks brzinom u  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  i to za 71.6% sporije od elektrona u  $\text{SF}_6$ , dok elektroni imaju veće brzine u preostala dva gasa. Na najnižem prikaznom polju, balk brzina drifta u  $\text{CF}_3\text{I}$  je skoro izjednačena sa brzinom u referentnom gasu, dok su od nje manje balk brzine drifta u  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  (za 98.1%) i u  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  (za 99.7%). Na poljima višim od približno 500 Td ni balk ni fluks brzine drifta elektrona u ova četiri gasa ne odstupaju jedne od drugih u značajnijoj meri.

Panel (c) slike 8.2 prikazuje poređenje fluks i balk longitudinalnog koeficijenta difuzije u ispitivanim gasovima u funkciji  $E/n_0$ . Uočljiva je komplikovana zavisnost od polja kako kod fluks tako i u balk koeficijenta. Ukoliko upoređujemo fluks koeficijente na najnižim i najvišim prikazanim poljima, elektroni najbrže difunduju u pravcu polja ukoliko se kreću u referentnom gasu  $\text{SF}_6$ , dok su najsporiji u  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ . Na najnižim poljima, sporija od ove je difuzija u  $\text{CF}_3\text{I}$  (za 87.4%), nakon nje sledi difuzija u  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  (za 98.9%) pa u  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  (za 99.8%).  $(n_0 D_L)_F$  u  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  na najvišem prikazanom polju je jednaka onoj u referentnom gasu, dok je od nje manja difuzija u  $\text{CF}_3\text{I}$  (za 48.2%) i u  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  (za 92.9%).  $(n_0 D_L)_B$  je takođe najveća u referentnom gasu kako na najnižem tako i na najvišem prikaznom polju. U oblasti najviših polja balk komponente nadjačavaju odgovarajuće fluks komponente za prosečno 40%. Na najnižim poljima balk i fluks  $n_0 D_L$  su izjednačeni u gasovima  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ .

Transverzalan koeficijent difuzije, prikazan na panelu (d), ponaša se jako slično koeficijentu  $n_0 D_L$ . Dodatno, posmatranjem najniže oblasti prikazanih polja, vidi se da su fluks transverzalni difuzioni koeficijenti skoro izjednačeni sa svojim odgovarajućim fluks longitudinalnim koeficijentima usled čega se može smatrati da je fluks difuzija izotropna u svakom od ova četiri gasa u oblasti termalnih energija.

Na panelu (e) su prikazani koeficijenti jonizacije i zahvata elektrona. Koeficijent  $\eta/n_0$  opada sa porastom polja kod  $\text{CF}_3\text{I}$  i  $\text{SF}_6$ .  $E/n_0$ -profil ove veličine za  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  izgleda kao kod slabo elektronegativnih gasova. Ova veličina prvo raste, dostiže maksimum a onda počinje da opada sa daljim porastom  $E/n_0$ . Što se tiče  $\eta/n_0$  u  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ ,  $E/n_0$ -profil u velikoj meri podseća na profil ove veličine koji su opaženi u  $\text{O}_2$  na pritiscima gde trojni zahvat igra glavnu ulogu. Atipično ponašanje ovog koeficijenta kod  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  je posledica odsustva procesa zahvata elektrona na termalnim energijama (slika 6.1). Koeficijent jonizacije raste sa porastom  $E/n_0$  kod svih ispitivanih gasova, što je direktna posledica porasta odgovarajućeg preseka za jonizaciju sa porastom energije elektrona.

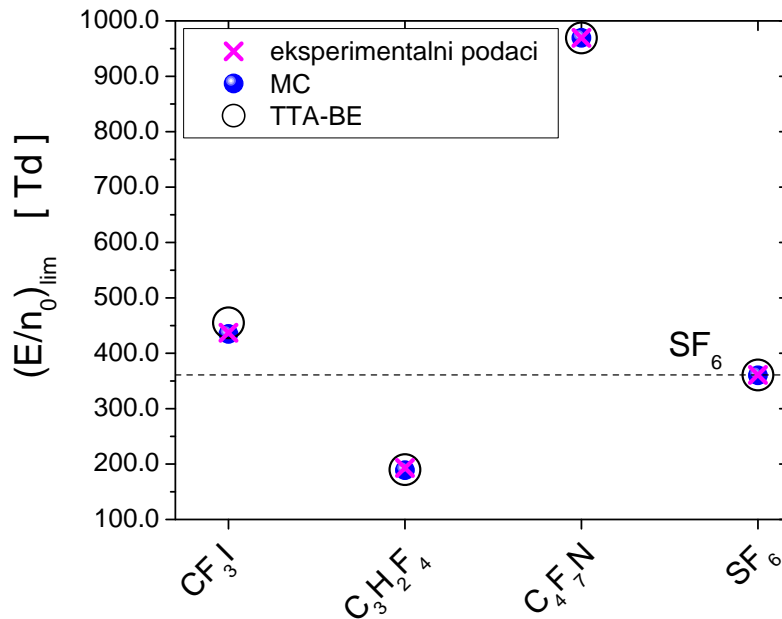
## 8.4 Poređenje kritičnih električnih polja u $\text{CF}_3\text{I}$ , $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ , $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ i $\text{SF}_6$ i njihovim smešama

U ovom potpoglavlju je prikazano poređenje kritičnih električnih polja čistih gasova i njihovih smeša u cilju ocene dielektričnih osobina gasova  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ ,  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  u odnosu na  $\text{SF}_6$ .

Na slici 8.3 su prikazana kritična električna polja u  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ ,  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  i  $\text{SF}_6$ . Rezultati su dobijeni u preseku krivih sa slike 8.2(e), kada su u pitanju MC rezultati, odnosno u preseku analognih krivih koje se odnose na eksperimentalna merenja i TTA-BE rezultate. Pre svega, uočava se izuzetno slaganje naših proračuna sa eksperimentalnim rezultatima u gasovima  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  [255],  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  [160] i  $\text{SF}_6$  [196], osim u  $\text{CF}_3\text{I}$  gasu kod koga TTA-BE rezultat odstupa od ekseprimentalnih rezultata [130] za svega 4.6%. Prikazani rezultati su pokazatelj da su skupovi preseka za rasejanje elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ , koji su konstruisani u ovoj disertaciji, dobro reprodukuju referentna eksperimentalna merenja, posebno u oblasti kritičnih električnih polja.

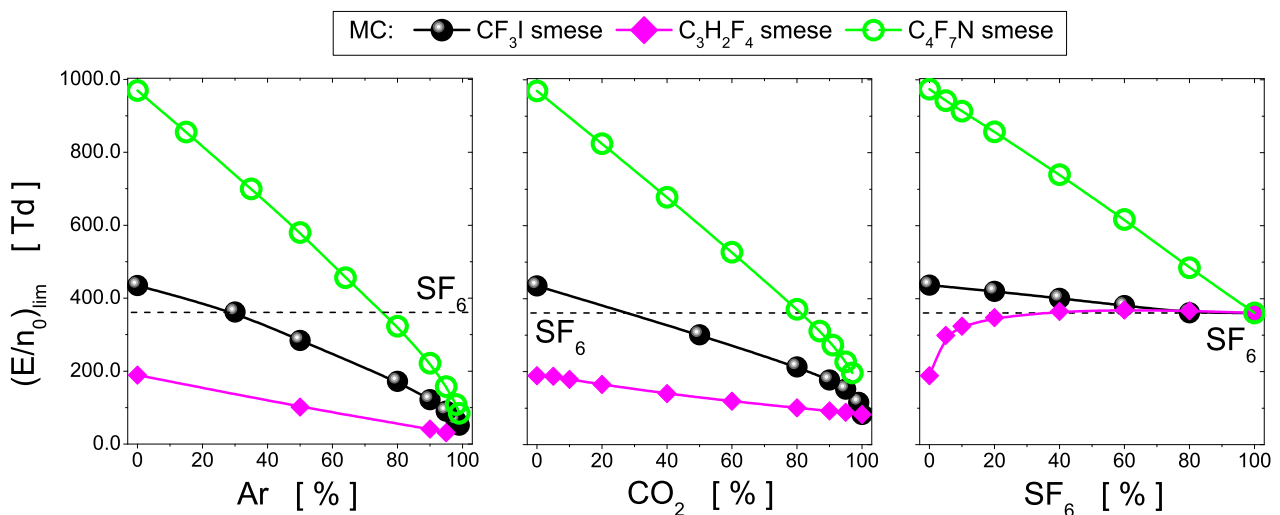
Što se tiče međusobnog odnosa kritičnih polja ispitivanih gasova, sa slike se vidi da je  $(E/n_0)_{lim}$  gasa  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  približno trostruko veće od referentne vrednosti kojom je okarakterisan  $\text{SF}_6$ . Kritično





Slika 8.3: Kritična električna polja u  $CF_3I$ ,  $C_3H_2F_4$ ,  $C_4F_7N$  i  $SF_6$ . Poređenje rezultata dobijenih na osnovu eksperimentalnih podataka, Monte Karlo simulacija i rešavanja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana.

polje  $CF_3I$  je za  $\sim 20\%$  veće od  $SF_6$ , dok je vrednost koja se odnosi na  $C_3H_2F_4$  za  $\sim 90\%$  manja od vrednosti pomenutog referentnog gasa. Ukoliko je kriterijum za opis dielektrika kritično električno polje čistog gasa, onda je  $C_4F_7N$  najbolji iz ove grupe ispitivanih gasova.



Slika 8.4: Kritična električna polja u smešama gasova  $CF_3I$ ,  $C_3H_2F_4$  i  $C_4F_7N$  sa Ar,  $CO_2$  i  $SF_6$ . Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama.

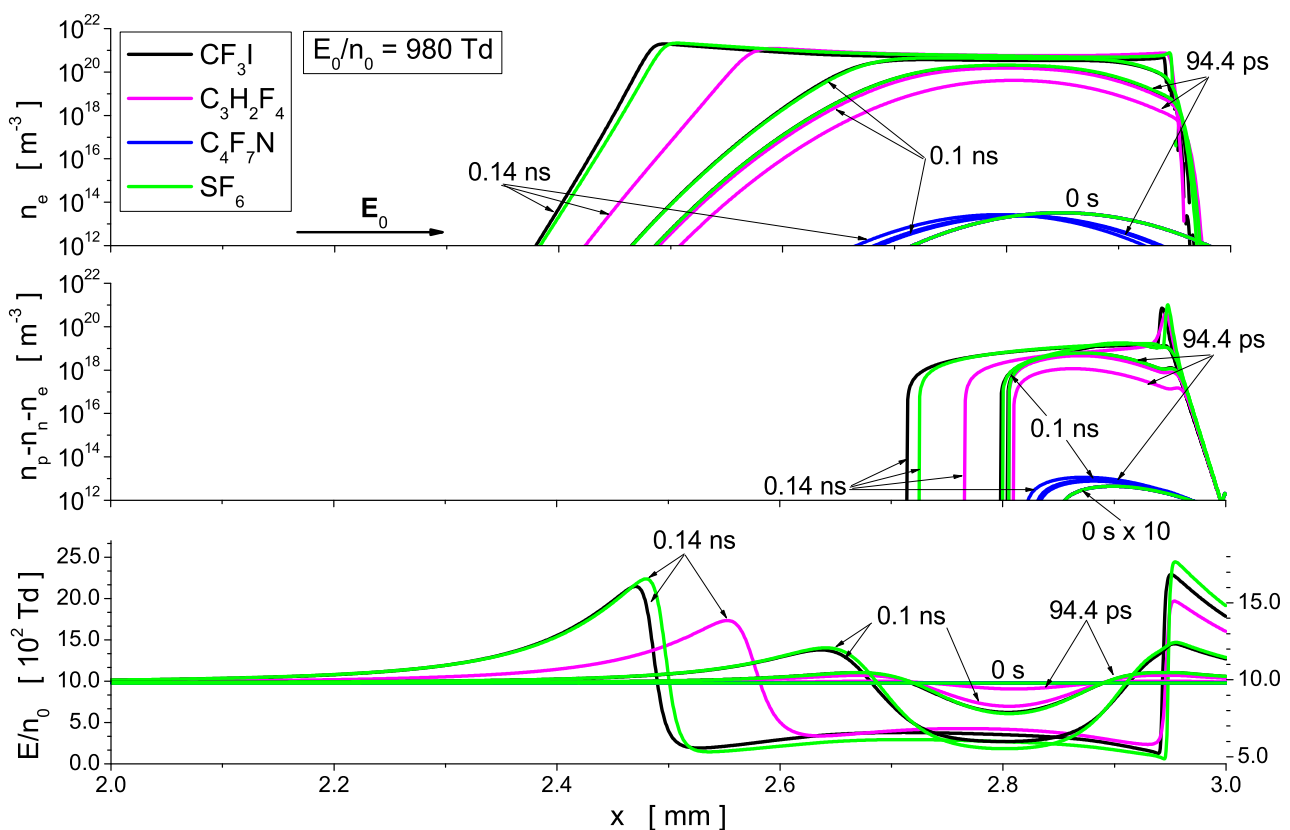
Ukoliko se pored kritičnih električnih polja u čistim gasovima za ocenu dielektrika uzimaju u obzir i kritična polja u smešama, onda se analiza ispitivanih gasova može izvršiti na osnovu rezultata sa slike 8.4. Prikazane su vrednosti  $(E/n_0)_{lim}$  gasova  $CF_3I$ ,  $C_3H_2F_4$  i  $C_4F_7N$  i to u smešama sa Ar (levi panel),  $CO_2$  (srednji panel) i  $SF_6$  (desni panel). Sa levog panela se uočava da smeša  $CF_3I$ -Ar ima veće kritično polje od  $SF_6$  ukoliko se koncentracija Ar u smeši zadrži do vrednosti od 20%. Ukoliko smešu čine gasovi  $C_4F_7N$  i Ar a koncentracija Ar ima vrednost manju od 80%, takve smeše će nadjačati vrednosti  $(E/n_0)_{lim}$  referentnog gasa  $SF_6$ . Poslednja ispitivana smeša sa ovog panela

slike ( $C_3H_2F_4$ -Ar) ima vrednosti kritičnih polja koja su manja od 361 Td (kritično polje za  $SF_6$ ) bez obzira na sastav smeše.

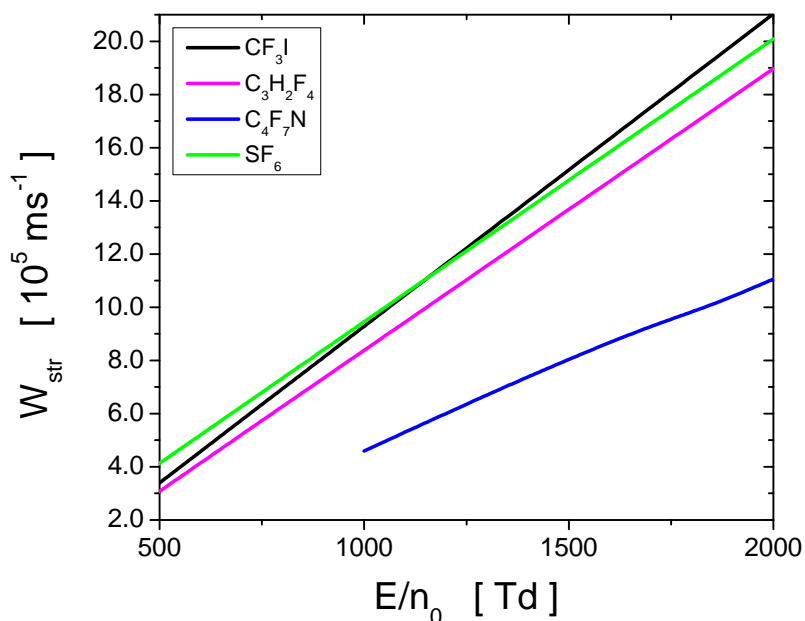
Sa srednjeg panela ove slike se donosi isti zaključak u vezi sa smešom sa  $C_3H_2F_4$ : ovaj gas ima niže vrednosti  $(E/n_0)_{lim}$  od  $SF_6$  bez obzira na njegovu koncentraciju u smeši sa  $CO_2$ . Smeša  $CF_3I$ - $CO_2$  ima veću vrednost kritičnog polja od 361 Td ukoliko je koncentracija  $CO_2$  niža od 20%. Maksimalna koncentracija  $CO_2$  u smeši sa  $C_4F_7N$  koja obezbeđuje veću vrednost  $(E/n_0)_{lim}$  u odnosu na  $SF_6$  je 80%. Poređenjem rezultata sa levog i srednjeg panela slike vidi se da se gasovi  $CF_3I$ ,  $C_3H_2F_4$  i  $C_4F_7N$  na gotovo identičan način ponašaju u smešama sa Ar i  $CO_2$ .

Na desnom panelu slike prikazane su smeše ispitivanih gasova sa  $SF_6$ . U slučaju  $CF_3I$  i  $C_4F_7N$ , kritična električna polja imaju vrednosti koje su više od 361 Td bez obzira na koncentraciju  $SF_6$  u ovim smešama. Za razliku od njih, u smeši  $C_3H_2F_4$ - $SF_6$  se javlja efekat pozitivne sinergije koji je detaljno analiziran u poglavlju 5.5. Primećuje se da je kritično električno polje veće od 361 Td u svim smešama prikazanim na ovom panelu osim u  $C_3H_2F_4$ - $SF_6$  smeši u kojoj je koncentracija  $SF_6$  manja od 40%. Dakle, moguće je formirati gasne smeše svakog od ispitanih gasova čija će kritična polja biti veća od onog u čistom  $SF_6$  gasu. Imajući u vidu veoma kratko atmosfersko vreme života i nisku tačku ključanja  $C_3H_2F_4$  gasa, smeša ovog gasa i  $SF_6$  je od posebnog interesa za primene u sistemima za prenos električne energije.

## 8.5 Poređenje karakteristika strimera u $CF_3I$ , $C_3H_2F_4$ , $C_4F_7N$ i $SF_6$ i njihovim smešama



Slika 8.5: Razvoj i propagacija negativnih strimera u  $CF_3I$ ,  $C_3H_2F_4$ ,  $C_4F_7N$  i  $SF_6$  pri spoljašnjem polju jačine 980 Td. Prikazani su rezultati korigovanog fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji uz korišćenje transportnih koeficijenata elektrona izračunatih Monte Karlo simulacijama. Vrednosti električnog polja sa leve ose se odnose na vremenski trenutak 0.14 ns dok se desna osa odnosi na sva tri ranija vremenska trenutka.

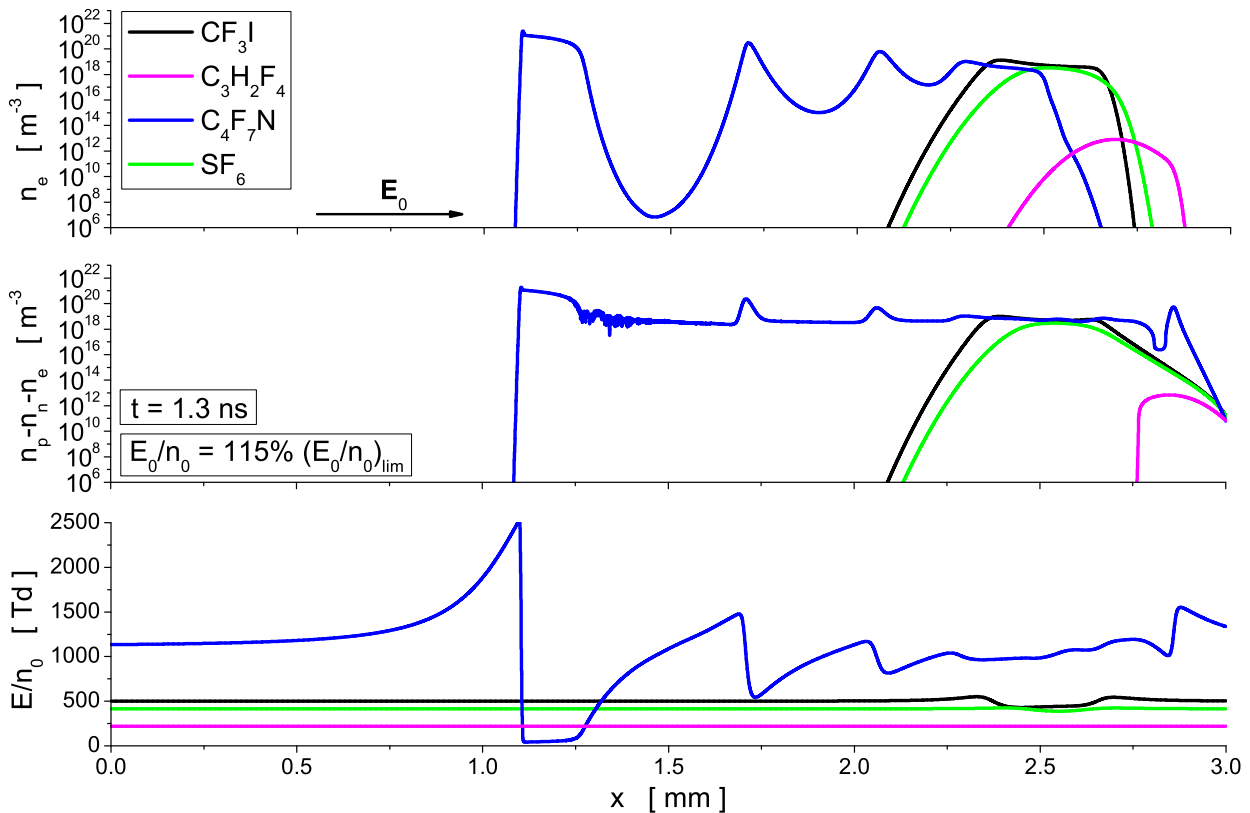


Slika 8.6: Brzina fronta strimera u CF<sub>3</sub>I, C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>4</sub>, C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N i SF<sub>6</sub>. Prikazani su rezultati korigovanog fluidnog modela u 1D konfiguraciji čiji su ulazni podaci transportni koeficijenti elektrona izračunati Monte Karlo simulacijama.

U ovom potpoglavlju su analizirane dielektrične osobine gasova na osnovu poređenja razvoja i propagacije strimera. Razvoj i propagacija negativnih strimera u CF<sub>3</sub>I, C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>4</sub>, C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N i SF<sub>6</sub> su proučavani i međusobno upoređeni na dva načina: (1) spoljašnje redukovano električno polje je fiksirano na jednu konkretnu vrednost, i (2) spoljašnje redukovano električno polje je za svaki gas drugačije, ali za isti procenat veće od kritičnog polja svakog gasa.

Na slici 8.5 je prikazano poređenje razvoja i propagacije strimera u CF<sub>3</sub>I, C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>4</sub>, C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N i SF<sub>6</sub>. U pitanju su rezultati korigovanog fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji, u kome su ulazni podaci transportni koeficijenti elektrona izračunati u MC simulacijama. Kao spoljašnje električno polje je odabrana vrednost od 980 Td koja je veća od  $(E/n_0)_{lim}$  sva četiri ispitivana gasa. Sa slike se vidi da se u CF<sub>3</sub>I gasu strimer najbrže razvija i prelazi najveće rastojanje. Ovakav rezultat je posledica transportnih koeficijenata elektrona u ispitivanim gasovima, pre svega  $\alpha/n_0$  i  $W$ . Ukoliko pogledamo sliku 8.2(e), vidimo da je koeficijent jonizacije na 980 Td najveći u CF<sub>3</sub>I. Ovim je obezbeđeno efikasno generisanje novih elektrona i povećanje njihove koncentracije u lavini, čime se najefikasnije dostiže uslov strimerskog proboja upravo u ovom gasu. Bez obzira na nešto nižu balk brzinu drifta elektrona u CF<sub>3</sub>I u odnosu na C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>4</sub> i SF<sub>6</sub> (slika 8.2(b)), fluks brzina drifta je najveća u CF<sub>3</sub>I, što obezbeđuje najbrže kretanje elektrona u pravcu polja u ovom gasu. Dakle, ukoliko se kao kriterijum poređenja dielektričnih karakteristika gasova posmatra razvoj i propagacija strimera na istoj vrednosti spoljašnjeg električnog polja (koja je veća od  $(E/n_0)_{lim}$  svih ispitivanih gasova), onda se zaključuje da CF<sub>3</sub>I nije idealno rešenje pošto se strimer najbrže razvija upravo u ovom gasu. Istim poređenjem se zaključuje da C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N ima odlična dielektrična svojstva pošto se broj elektrona ne povećava u značajnijoj meri u ovom gasu (gornji panel), što ima za posledicu da nema ekraniranja spoljašnjeg električnog polja unutar lavine čestica (donji panel). Sve ovo ima za posledicu da je tranzicija lavine elektrona u strimer u C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N spor i otežan proces koji se odvija na dužim vremenskim skalama u poređenju sa ostalim gasovima. Razlog je intenzivan gubitak elektrona u procesima zahvata elektrona, čime je u velikoj meri smanjena provodnost strimera.

Na slici 8.6 je prikazana brzina fronta strimera u CF<sub>3</sub>I, C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>F<sub>4</sub>, C<sub>4</sub>F<sub>7</sub>N i SF<sub>6</sub> izračunata na osnovu rezultata korigovanog fluidnog modela u 1D konfiguraciji. Kako su rezultati ovog fluidnog modela analogni onima sa slike 8.5 koji se odnose na 1.5D konfiguraciju modela, očekivana je prikazana



Slika 8.7: Propagacija negativnih strimera u  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ ,  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  i  $\text{SF}_6$  pri spoljašnjim poljima koja su, za svaki gas, za 15% veća od kritičnog polja posmatranog gasa. Prikazani su rezultati korigovanog fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji uz korišćenje transportnih koeficijenata elektrona izračunatih Monte Karlo simulacijama. Rezultati u vremenskom trenutku 1.3 ns. Oznake krivih sa gornjeg panela se odnose na sve panele.

zavisnost brzine fronta strimera od primenjenog  $E/n_0$ . Najsporiji su strimeri u  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ , brži od njih su strimeri u  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ , dok su najbrži oni koji se kreću u  $\text{SF}_6$  (na poljima do  $\sim 1200$  Td) odnosno u  $\text{CF}_3\text{I}$  (na poljima većim od približno 1200 Td). Potrebno je obratiti pažnju, da se strimeri razvijaju na poljima koja su veća od  $(E/n_0)_{lim}$  ispitivanog gasa. Zbog toga se brzina fronta strimera u  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  može izračunati na poljima manjim od  $\sim 980$  Td.

Poređenje dielektričnih osobina gasova može se izvršiti i na drugačiji način. Kako se kritična električna polja gasova  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ ,  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  i  $\text{SF}_6$  osetno razlikuju, propagacija strimera se može analizirati na poljima koja su za jednak procenat veća od  $(E/n_0)_{lim}$  svakog pojedinačnog gasa. Na slici 8.7 su prikazani rezultati pomenute analize u gasovima  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ ,  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  i  $\text{SF}_6$ . Rezultati se odnose na vremenski trenutak od 1.3 ns a izračunati su pri spoljašnjem električnom polju od 500 Td, 218.5 Td, 1116 Td i 415 Td, respektivno. I u ovom slučaju, rezultati simulacija mogu biti interpretirani na osnovu zavisnosti  $\alpha/n_0$  i  $W$  od električnog polja. Na slici 8.2(e) se vidi da je  $\alpha/n_0$  na 1116 Td (za  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ ) veći od odgovarajućih koeficijenata jonizacije na 500 Td (za  $\text{CF}_3\text{I}$ ), 218.5 Td (za  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ ) i 415 Td (za  $\text{SF}_6$ ) od jednog reda veličine do čak tri reda veličine. Ne samo da je  $\alpha/n_0$  izrazito veći u  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  u odnosu na ostale gasove već se sličan odnos dobija i poređenjem brzine drifta elektrona.  $W$  na 1116 Td (za  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ ) je za iznos od 50% do čak 300% veća od brzine drifta na poljima koja odgovaraju preostalim ispitivanim gasovima. Sa druge strane, iako je difuzija u  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  na 1116 Td manja od istog koeficijenta na odgovarajućim poljima u ostalim ispitivanim gasovima, strimer se ipak najbrže kreće u  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ . Drugim rečima, difuzija elektrona ne utiče na parametre strimera na značajniji način. Poređenjem propagacije strimera pri spoljašnjim poljima koja su za isti iznos veća od  $(E/n_0)_{lim}$  svakog pojedinačnog gasa zaključuje se da  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  pokazuje u najmanju ruku problematična dielektrična svojstva. Za razliku od njega,  $\text{C}_3\text{H}_3\text{F}_4$  se odlikuje najboljim dielektričnim

osobinama pošto se strimer najsporije kreće upravo u ovom gasu.

Rezultati sa slika 8.5 i 8.7 opisuju dielektrike na različite načine. Poređenjem ova četiri ispitivana gasa pri identičnim uslovima (slika 8.5), zaključuje se da  $C_4F_7N$  pokazuje najbolje dielektrične osobine pošto ne dolazi do razvoja strimera u ovom gasu. Međutim, ukoliko se strimer ipak razvije (slika 8.7), onda se najmanje intenzivna parcijalna pražnjenja javljaju u  $C_3H_2F_4$ . Negativan strimer koji nastaje u ovom gasu se sporo kreće, prelazi mala rastojanja, odlikuje ga mala provodnost i efekti pojačanja polja na frontu. Ukoliko se, dakle, ograničimo na scenario da je strimer nastao u svakom od ovih gasova, onda  $C_3H_2F_4$  pokazuje dobre dielektrične osobine.

## 8.6 Zaključak

U ovom poglavlju disertacije su diskutovane i analizirane dielektrične osobine gasova  $CF_3I$ ,  $C_3H_2F_4$ ,  $C_4F_7N$  i  $SF_6$  iz nekoliko različitih uglova. Prvo smo i kratkim crtama naglasili da najpoželjniji gasni dielektrici dolaze iz grupe nezasićenih molekularnih gasova, jer se lako mogu disosovati u atmosferi. Poređenjem fizičkih i hemijskih osobina gasova ustanovljeno je da se ne može na jednostavan način izdvojiti jedan od ovih gasova kao najprikkladnija potencijalna zamena za  $SF_6$ . Što se tiče kritičnih električnih polja čistih gasova,  $C_4F_7N$  je ubedljivo najbolji dielektrik, dok se na osnovu analiza ovog parametra u gasnim smešama utvrđuje da smeše gotovo svih ispitivanih gasova sa  $SF_6$  mogu obezbediti veću vrednost kritičnog polja od 361 Td. Na osnovu analize razvoja i propagacije strimera u  $CF_3I$ ,  $C_3H_2F_4$ ,  $C_4F_7N$  i  $SF_6$  zaključeno je da se, pri istim uslovima, strimer najteže razvija u  $C_4F_7N$ , što je svakako poželjna karakteristika gasnih dielektrika. Sa druge strane, ukoliko se strimer razvije u gasu, onda je najpovoljnije da se kao dielektrik u nekom od uređaja u sistemu za prenos električne energije koristi  $C_3H_2F_4$ . Negativan strimer koji nastane u  $C_3H_2F_4$  sporo se kreće i prelazi relativno mala rastojanja od mesta gde je iniciran i odlikuje ga mala provodnost zbog velikih gubitaka elektrona procesom zahvata. Iz prethodne analize se zaključuje da je ispitivanje dielektričnih osobina gasova izuzetno kompleksan i sveobuhvatan proces. Nije moguće proceniti kvalitet gasnog dielektrika na osnovu jednog parametra. Veoma često se kao najvažniji parametar navodi kritično polje, iako smo videli u ovom poglavlju da postoje i drugi kriterijumi koje je neophodno razmotriti. U svakom slučaju, jedino se na osnovu jedne ovako detaljne analize, koja je prikazana u ovom poglavlju, mogu zadovoljiti električni, fizički, hemijski, termalni, toksikološki, ekološki i finansijski zahtevi, čime bi se opravdalo korišćenje novog gasa ili gasne smeše umesto  $SF_6$  u sistemima za prenos električne energije.

# Poglavlje 9

## Transport elektrona u parama žive i indijuma

### 9.1 Uvod

Poslednje poglavlje ove doktorske disertacije je posvećeno proučavanju sudarnih i transportnih osobina elektrona u metalnim parama. Ova proučavanja su od velikog značaja u modelovanju izvora svetlosti koji rade na principu električnih gasnih pražnjenja. U prvom delu ovog poglavlja, razmatrane su sudarne i transportne osobine elektrona u parama žive. Konstruisan je kompletan i samousaglašen skup preseka za rasejanje elektrona u parama žive na osnovu koga je ispitana zavisnost transportnih koeficijenata elektrona od pritiska i temperature pozadinskog gasa. Uočeno je da se razlike u trendovima profila transportnih koeficijenata javljaju usled prisustva dimera žive na visokim pritiscima.

U drugom delu ovog poglavlja je ispitivan transport elektrona i dinamika negativnih strimera u parama indijuma. Konstruisan je skup preseka za rasejanje elektrona na gasnim atomima ove metalne pare koji se nalaze u osnovnom i prvom pobuđenom metastabilnom stanju. Ispitivanje je vršeno u širokom opsegu električnih polja na različitim temperaturama.

### 9.2 Transport elektrona u parama žive

Poznavanje podataka o transportu elektrona u parama žive pod dejstvom električnog polja je od značaja je za modelovanje svetlosti koji rade na principu električnih gasnih pražnjenja [283–285], lasera [286, 287], ali i u specijalnim namenama kao što je jonski potisnik za svemirski pogon [288]. U literaturi se mogu naći podaci o presecima za rasejanje elektrona u parama žive i transportnim koeficijentima elektrona u ovom gasu [99, 100, 289]. Radžu je dao pregled eksperimentalnih i teorijski izračunatih sudarnih preseka i preporučio najpouzdaniju brzinu drifta i koeficijent jonizacije u

ovom gasu [50, 51]. Objavljeni su kompletni skupovi preseka za rasejanje elektrona u parama žive [290–294]. Vinkler i saradnici [295, 296] kao i Jusfi i saradnici [297] su dali značajan doprinos razvoju baze podataka posvećenoj sudarnim i transportnim podacima elektrona u parama ovog metala uzevši u obzir kinetiku ekscitovanih stanja i Peningovu jonizaciju (engl. *Pennning*) u svojim modelima fluorescentnih lampi. Istraživačka grupa profesora Tagašire se posvetila ispitivanju uticaja metastabila žive na transport elektrona kako u čistom gasu, tako i u njegovim smešama sa Ar i Kr [293, 298, 299]. Ispitivan je uticaj termalnog kretanja gasovite žive na transport elektrona [300] i efekat ukrštenih električnih i magnetskih polja na transportne koeficijente elektrona u ovom gasu [301].

U pomenutim publikacijama je zanemareno nehidrodinamičko ponašanje transportnih koeficijenata elektrona u parama žive, koje se ogleda u njihovoj zavisnosti od pritiska i temperature gasa. Dodatno, često je zanemareno termalno kretanje atoma ovog gasa, a ni dualnost transportnih koeficijenata elektrona (balk i fluks koeficijenti) nije razmatrana. Neophodno je istaći da su mnoga istraživanja rezultat rešavanja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana iako su njena ograničenja dobro poznata [13, 302].

### 9.2.1 Uvodne napomene i motivacija

Prethodno diskutovane činjenice su bili motivacioni faktori za istraživanje koje je prikazano u ovom potpoglavlju. Transportni koeficijenti elektrona su izračunati u Monte Karlo simulacijama i na osnovu numeričkih rešenja Bolcmanove jednačine koja su bazirana na razvoju funkcije raspodele u više članova u brzinskom prostoru. Konstruisan je kompletan i samousaglašen skup preseka za rasejanje elektrona u parama žive i proučavani su kinetički fenomeni u transportu elektrona.

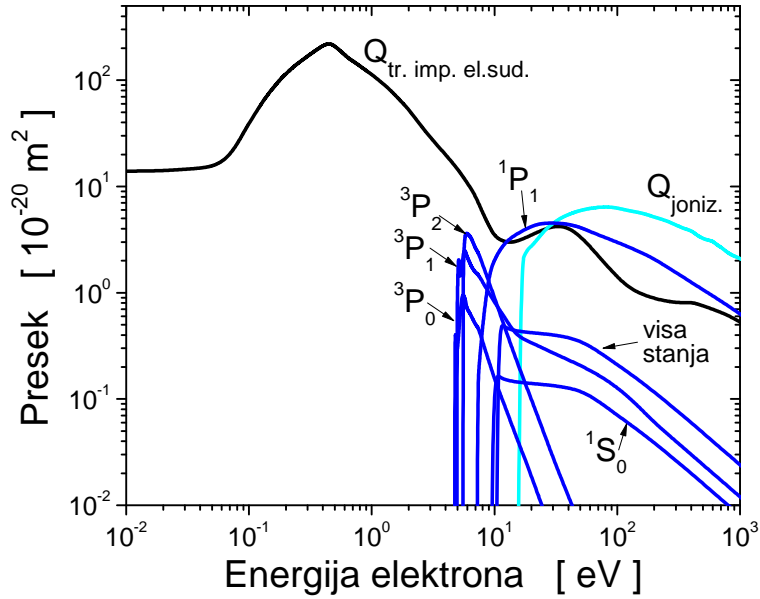
### 9.2.2 Preseci za rasejanje elektrona u parama žive

Na slici 9.1 je prikazan konačan skup preseka za rasejanje elektrona u parama žive. Njegova konstrukcija je izvedena na sledeći način. Na niskoenergijski eksperimentalan presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima Englanda i Elforda [303] dodat je visokoenergijski presek preuzet iz koda MAGBOLTZ [254]. Preseci za elektronsku ekscitaciju na stanja  $^3P_0$ ,  $^3P_1$  i  $^3P_2$  su preuzeti iz [304], dok je MAGBOLTZ iskorišćen kao izvor preseka za preostale kanale ovog sudarnog procesa. Presek za jonizaciju je preuzet iz [305]. Ovako formiran skup preseka je modifikovan u cilju postizanja boljeg slaganja između izračunatih i izmerenih transportnih koeficijenata elektrona [306]. Ove modifikacije podrazumevaju veoma male promene preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima ne bi li se postigla dobra slaganja između izračunatih i eksperimentalno određenih vrednosti brzine drifta. Preseci za elektronsku ekscitaciju su takođe minimalno modifikovani da bi se postiglo dobro slaganje za koeficijent jonizacije. Ove modifikacije preseka se nisu značajno reflektovale na totalni presek za rasejanje.

### 9.2.3 Zavisnost transportnih koeficijenata elektrona od pritiska i NDC efekat

Ovaj segment rada je posvećen ispitivanju zavisnosti transportnih koeficijenata elektrona od pritiska usled postojanja dimera žive ( $Hg_2$ ) u gasu sačinjenom od monomera ovog metala (Hg). Proračuni transportnih koeficijenata elektrona su vršeni MC simulacijama na 573 K i različitim pritiscima što odgovara uslovima eksperimentalne postavke Englanda i Elforda [303].

Prisustvo  $Hg_2$  u parama žive na osetan način utiče na gubitke energije elektrona prilikom rotacionih i vibracionih ekscitacija ovih molekula. Zato je presek za sudare elektrona sa dimerima žive opisan efektivnim presekom koji reprezentuje pomenute neelastične procese. U skup preseka za rasejanje elektrona u parama žive (slika 9.1) je dodat ovaj efektivan presek, čime je, između ostalog, obezbeđeno slaganje izračunate brzine drifta elektrona sa eksperimentalnim vrednostima Elforda i saradnika [303, 307]. Pri konstrukciji efektivnog preseka za rasejanje elektrona na dimerima žive korišćene su sledeće pretpostavke:



Slika 9.1: Skup preseka za rasejanje elektrona u parama žive. Skup sadrži: presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima  $Q_{tr.imp.el.sud}$ , šest preseka za elektronsku ekscitaciju sa osnovnog stanja na stanje  $^3P_0$ ,  $^3P_1$ ,  $^3P_2$ ,  $^1P_1$ ,  $^1S_0$  i na viša stanja kao i presek za jonizaciju  $Q_{joniz.}$ .

1. dimeri žive su uvek prisutni u parama žive, pri čemu je njihova koncentracija proporcionalna koncentraciji atoma žive,
2. sa ciljem pravilnog opisa koncentracije dimera žive, veličinu efektivnog preseka je potrebno skalirati njihovom frakcionom populacijom,
3. u parama žive važi jednačina stanja idelanog gasa.

Prema [303], efektivan presek za dimere žive se izračunava:

$$\sigma(\epsilon) = 8.3\sigma_i(\epsilon)\Delta(p, T), \quad (9.1)$$

pri čemu vrednost 8.3 predstavlja maksimalnu vrednost ovog preseka pri populaciji dimera od 1 ppm. Oznaka  $\sigma_i(\epsilon)$  predstavlja presek za dimere žive, dok je  $\Delta(p, T)$  frakciona populacija dimera na pritisku  $p$  i temperaturi  $T$ . Presek za dimere  $\sigma_i(\epsilon)$  je funkcija energije elektrona, izražen je u jedinici  $\text{Å}^2$  ( $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$ ), a preuzet je iz [303]. Uz prethodne pretpostavke i frakcionu populaciju dimera u iznosu od  $21.8 \times 10^{-6}$ , koja se odnosi na uslove 1 kPa i 573 K, dobija se

$$\frac{\Delta(p, T)}{\Delta_1(p_1, T_1)} = \frac{n_e}{n_{e1}} = \frac{p}{p_1} \frac{T_1}{T}, \quad (9.2)$$

odnosno

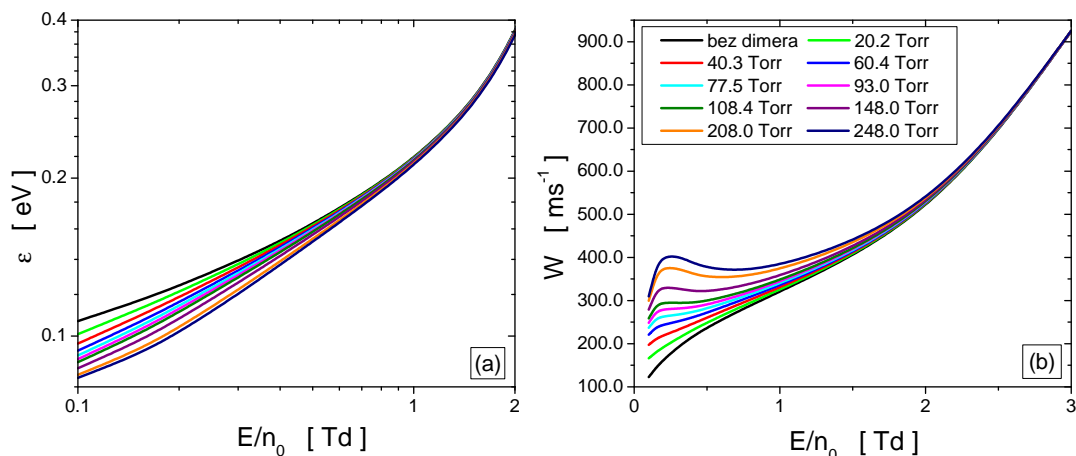
$$\Delta(p, T) = 21.8 \times 10^{-6} \frac{p}{1 \text{ kPa}} \frac{573 \text{ K}}{T}. \quad (9.3)$$

Kombinacijom jednačina (9.1) i (9.3) dolazi se do izraza za presek za rasejanje elektrona na dimerima žive na pritisku  $p$  i temperaturi  $T$ :

$$\sigma(\epsilon) = 180 \times 10^{-6} \frac{p}{1 \text{ kPa}} \frac{573 \text{ K}}{T} \sigma_i(\epsilon). \quad (9.4)$$

Na osnovu ove jednačine se jasno vidi da presek za rasejanje elektrona na dimerima žive zavisi od odnosa  $p/T$ . Ovaj efektivan presek raste sa porastom pritiska pri fiksnoj temperaturi. Sa druge strane,





Slika 9.2: Srednja energija (a) i brzina drifta elektrona (b) u parama žive u funkciji redukovano električnog polja. Prikazani su rezultati Monte Karlo simulacija na 573 K i različitim pritiscima. Oznake krivih sa panela (b) se odnose i na panel (a).

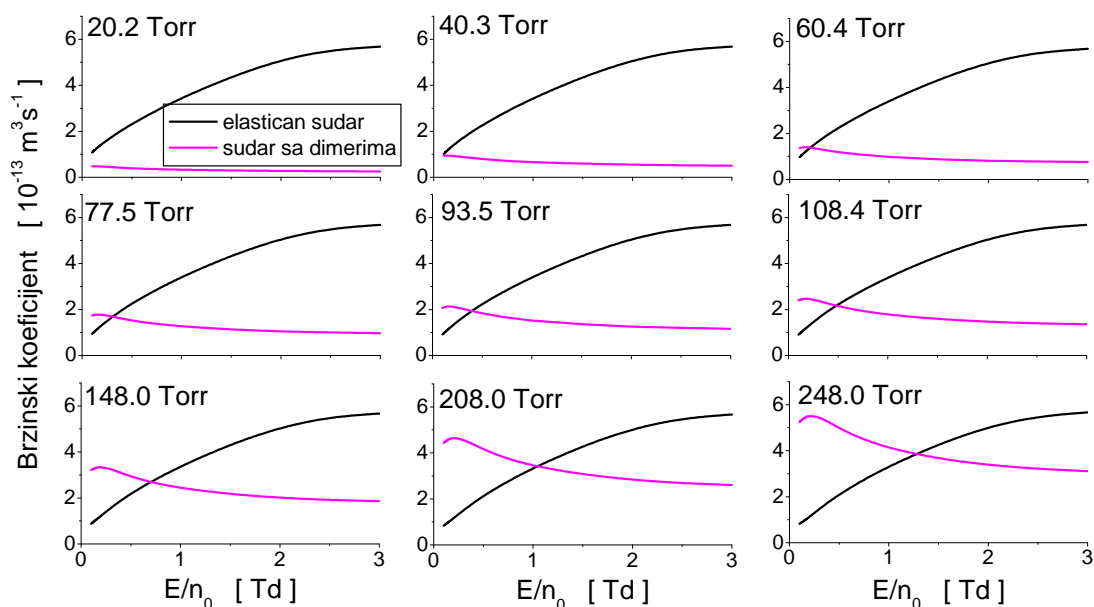
porast temperature dovodi do opadanja ovog preseka pri fiksnom pritisku. Ipak, treba imati u vidu uslove u kojima je živa u gasovitom agregatnom stanju. Na temperaturi od 573 K, pritisak koji dovodi do saturacije žive iznosi 33 kPa ( $\sim 248$  Torr). Drugim rečima, kako bi se naši proračuni na 573 K odnosili na živu u gasovitom agregatnom stanju, pritisak gasa ne sme biti viši od 33 kPa.

U cilju pravilnog izračunavanja transportnih koeficijenata elektrona u parama žive na 573 K mora se voditi računa i o dobicima energije elektrona pri sudarima sa monomerima i dimerima žive. Zbog toga su preseki za superelastične sudarne procese elektrona u parama žive su izračunati za svaki pojedinačan neelastičan proces putem principa detaljnog balansa (poglavlje 3.5.1).

Na slici 9.2 su prikazani srednja energija  $\varepsilon$  i brzina drifta  $W$  elektrona u parama žive na 573 K i različitim pritiscima u funkciji  $E/n_0$ . Srednja energija elektrona je rastuća funkcija polja i ona opada sa porastom pritiska. Prikazana zavisnost od pritiska je očekivana na osnovu jednačine (9.4): rast preseka za rasejanje elektrona na dimerima žive sa porastom pritiska gasa utiče na porast energijskih gubitaka pri ovom neelastičnom procesu, čime opada srednja energija elektrona.

Brzina drifta elektrona (slika 9.2(b)) raste sa porastom pritiska u oblasti najnižih ispitivanih polja dok se njena osetljivost na promene ovog parametra smanjuje sa porstom  $E/n_0$ . Prikazan trend brzine drifta sa promenom pritiska posledica je preseka za rasejanje elektrona na dimerima žive. Kako što je rečeno, ovaj presek reprezentuje neelastične gubitke elektrona nakon kojih porast električnog polja utiče na povećanje komponente brzine elektrona u pravcu tog polja. Drugim rečima, postojanje neelastičnih procesa utiče na porast  $W$ . Počevši od 108.4 Torr, u profilima  $W$  se uočava efekat NDC koji je izraženiji na višim pritiscima. Njegova pojava je direktna posledica preseka za rasejanje elektrona na dimerima žive. Porastom električnog polja dolazi do tranzicije roja elektrona iz oblasti sa dominantnim neelastičnim u oblast sa dominantnim elastičnim mehanizmima gubitaka energije elektrona, što izaziva pojavu efekta NDC [306, 308, 309].

Porast pritiska ne utiče samo na povećanje preseka za rasejanje elektorna na  $\text{Hg}_2$  već i na povećanje brzinskog koeficijenta ovog procesa. Na slici 9.3 su prikazani brzinski koeficijenti koji odgovaraju ovom neelastičnom procesu (skalirani faktorom  $10^5$ ), kao i elastičnim sudarima elektrona sa monomerima žive. Porast električnog polja dovodi do porasta brzinskog koeficijenta za elastične sudare kao i do opadanja koeficijenta koji se odnosi na neelastične sudare sa  $\text{Hg}_2$ . Ovakvo ponašanje brzinskih koeficijenata pogoduje razvoju NDC efekta. Iako se analizirani brzinski koeficijenti razlikuju za više redova veličina u korist elastičnih procesa, velike razlike postoje i u energijskim gubicima pri ovim sudaranim procesima ( $10^{-7}$ - $10^{-6}$  eV pri elastičnim sudarima, 0.04 eV pri sudarima sa  $\text{Hg}_2$ ). Drugim rečima, i pored višestruko manjeg brzinskog koeficijenta za sudare elektrona sa dimerima žive u odnosu na koeficijent koji odgovara elastičnim sudarima, veliki energijski gubici u ovim neela-



Slika 9.3: Brzinski koeficijenti za elastične sudare elektrona i sudare za dimerima žive u funkciji električnog polja. Rezultati su dobijeni u Monte Karlo simulacija na 573 K. Brzinski koeficijenti koji se odnose na dimere žive su skalirani faktorom  $10^5$ .

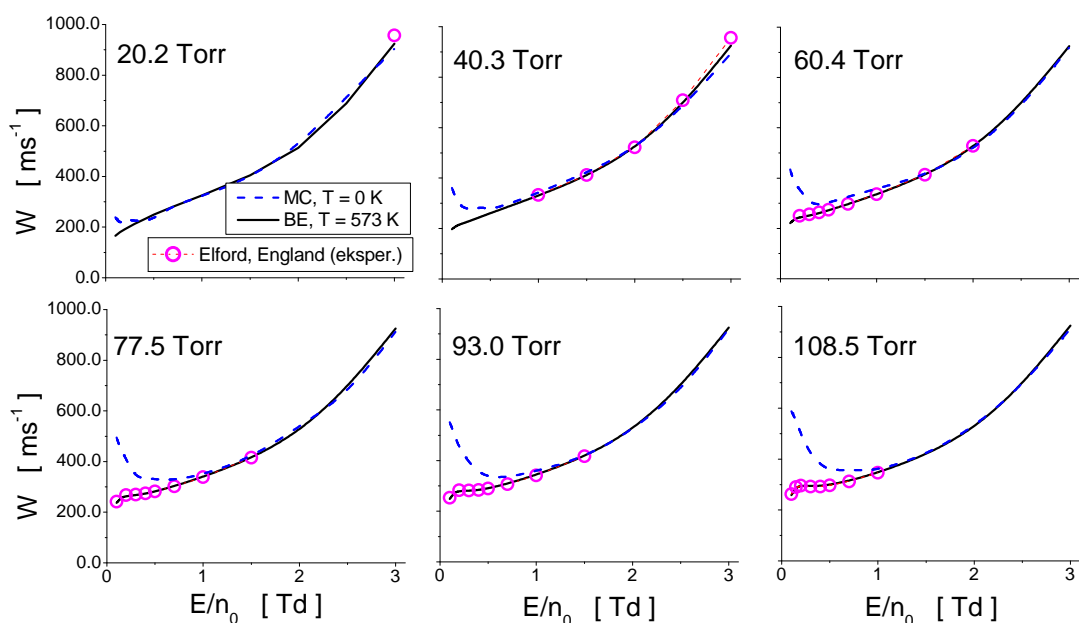
stičnim procesima su odgovorni za njihov snažan uticaj na funkciju raspodele energije elektrona. Na pritiscima nižim od približno 100 Torr, koncentracija dimera (jednačina (9.3)) je mala pa su ukupni energijski gubici u ovim procesima zanemarljivi u odnosu na one u elastičnim sudarima. Usled toga ne dolazi do razvoja NDC efekta u profilima brzine drifta elektrona na pritiscima manjim od pomenute granične vrednosti (slika 9.2(b)).

#### 9.2.4 Zavisnost transportnih koeficijenata elektrona od temperature para žive

U ovom potpoglavlju je analiziran uticaj termalnog kretanja pozadinskog gasa na transportne koeficijente elektrona. Pored MC simulacija, transportni koeficijenti su izračunati na osnovu numeričkih rešenja BE, gde je primenjen razvoj funkcije raspodele u više članova.

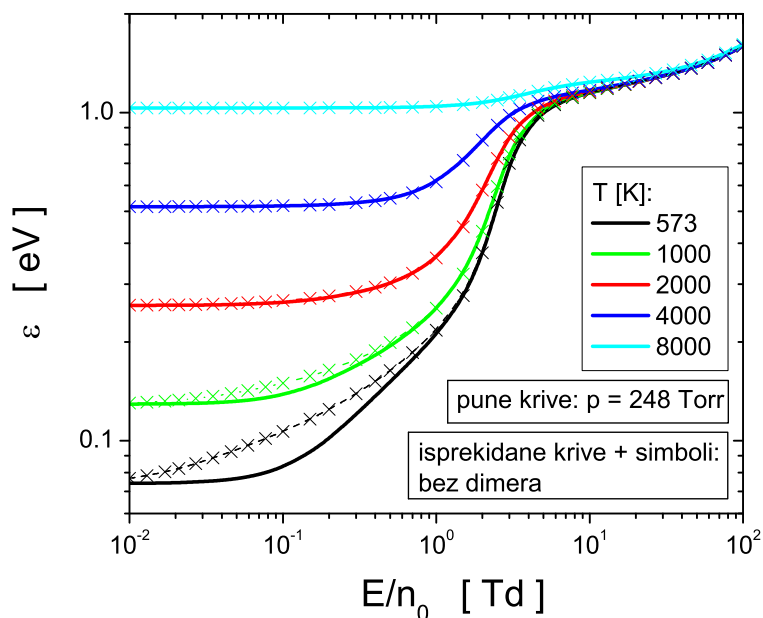
Rezultati sa slike 9.4 prikazuju značaj pravilnog opisa termalnog kretanja atoma i molekula žive pri proračunu brzine drifta elektrona u opsegu najnižih električnih polja. Prikazani su rezultati MC simulacija u uslovima kada termalno kretanje čestica nije uzeto u obzir ( $T = 0$  K), rešenja BE na 573 K dobijena razvojem funkcije raspodele u više članova kao i eksperimentalne vrednosti brzine drifta elektrona [303] na istoj nenuljoj temperaturi. Na svakom panelu slike, koji odgovara označenoj vrednosti pritiska gasa, vidi se da se slaganje sa eksperimentalnim podacima postiže ukoliko se uzme u obzir termalno kretanje čestica. Na svim pritiscima, MC rezultati daju pogrešne profile i strukture koje podsećaju na efekat NDC, a koje su sve izraženije sa porastom pritiska. Pojava efekta NDC u profilima brzine drifta je posledica neopravdane primene aproksimacije hladnog gasa ( $T = 0$  K) na niskim  $E/n_0$ . Sa porastom pritiska je sve izraženije neslaganje između MC rezultata i eksperimentalnih podataka. Ovo neslaganje je posledica razlike između skupa preseka za rasejanje elektrona koji uključuje i isključuje prisustvo dimera žive.

Naredne slike prikazuju zavisnost transportnih koeficijenata elektrona od temperature pozadinskog gasa u širokom opsegu polja. Radni uslovi simulacija su u velikoj meri konzistentni sa operativnim uslovima izvora svetlosti sa parama žive. Prikazani rezultati se odnose na rešenja BE dobijena razvojem funkcije raspodele u više članova a koji su dobijeni u dva slučaja: u prisustvu dimera žive na pritisku od 248 Torr i u slučaju kada se zanemaruje prisustvo  $Hg_2$ . Važno je naglasiti da se prvi scenario ne može analizirati na temperaturama nižim od 573 K kako gasovita živa ne bi promenila



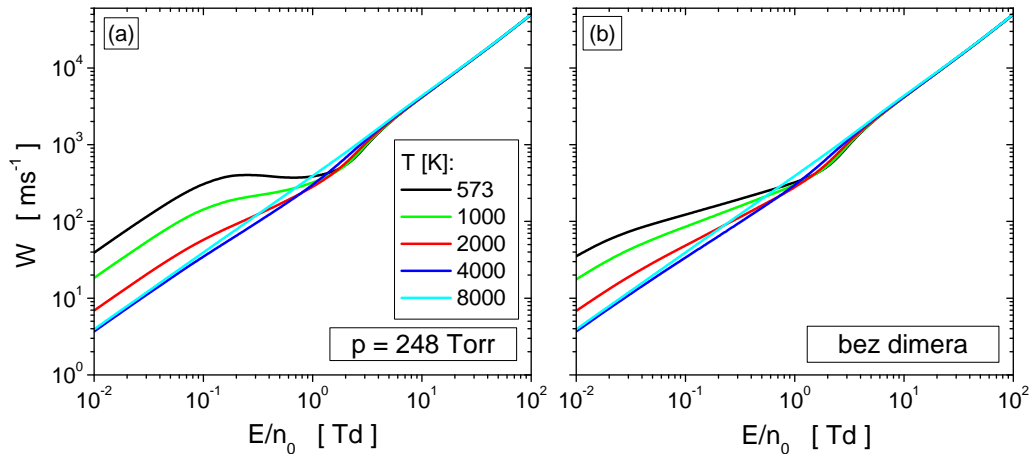
Slika 9.4: Brzina drifta elektrona u parama žive u funkciji električnog polja. Poređenje rezultata Monte Karlo simulacija na 0 K, numeričkih rešenja Bolcmanove jednačine na 573 K gde je primenjen razvoj funkcije raspodele u više članova i eksperimentalnih podataka iz literature.

svoje agregatno stanje. Rezultati dva pomenuta scenarija razdvajaju uticaj termalnih efekata od onih koje indukuju dimeri žive.



Slika 9.5: Srednja energija elektrona u parama žive u funkciji električnog polja. Prikazana su numerička rešenja Bolcmanove jednačine nakon razvoja funkcije raspodele u više članova u brzinskom prostoru koja se odnose na različite temperaturame u dva scenarija: sa prisustvom i bez prisustva dimera žive.

Na slici 9.5 je prikazana promena srednje energije elektrona sa električnim poljem u parama žive na različitim temperaturama u dva pomenuta scenarija. Na fiksnoj temperaturi, srednja energija elektrona je monotono rastuća funkcija polja.  $\varepsilon$  je termalna i ne zavisi od  $E/n_0$  u opsegu najnižih



Slika 9.6: Balk brzina drifta elektrona u parama žive u funkciji električnog polja. Prikazana su numerička rešenja Boltzmanove jednačine nakon razvoja funkcije raspodele u više članova u dva scenarija: (a) sa prisustvom i (b) bez prisustva dimera žive. Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panel (b).

prikazanih polja. Ovo znači da je brzinska funkcija raspodele termalni Maksvelijan. Pomenuto ponašanje je vidljivo na tri najviše temperature, dok bi, za dostizanje termalnih srednjih energija na preostale dve temperature, bilo potrebno proširiti oblast polja ka nižim vrednostima (ovakvi proračuni su izostavljeni zbog otežane relaksacije transportnih koeficijenata elektrona na niskim poljima). Porast temperature dovodi do rasta  $\varepsilon$  na fiksnom  $E/n_0$ . Razlike u vrednostima srednje energije elektrona su veće na nižim poljima. Na dve najniže temperature se uočava da  $\varepsilon$  dobija veće vrednosti ukoliko se zanemari postojanje  $\text{Hg}_2$  u parama žive. Prikazan rezultat je očekivan imajući u vidu gubitke energije elektrona pri ovom neelastičnom procesu. Na preostale tri temperature se ne vidi uticaj dimera usled smanjenja veličine preseka sa porastom temperature (jednačina (9.4)). Neosetljivost  $\varepsilon$  na promenu temperature u opsegu najviših prikazanih polja je posledica neosetljivosti funkcije raspodele na prisustvo dimera žive. Istovremeno, efekti električnog polja postaju dominantni u odnosu na efekte termalnog kretanja gasnih atoma/molekula žive na balans energije elektrona.

Na slici 9.6 je prikazana balk brzina drifta elektrona u funkciji električnog polja na različitim temperaturama živinih para. Na panelu (a) su prikazani rezultati dobijeni u prisusvu dimera žive na pritisku od 248 Torr, dok su na panelu (b) prikazani rezultati u odsustvu ovih čestica. Na 573 K i pritisku od 248 Torr, u profilu brzine drifta se može opaziti efekat NDC, kao što to prikazuje slika 9.5(b). Ovaj efekat nestaje sa porastom temperature, što je posledica zavisnosti efektivnog preseka koji opisuje prisustvo dimera od temperature (jednačina (9.4)). Takođe, smanjenje preseka za dimere sa porastom temperature gasa je uzrok međusobno sličnih rezultata brzine drifta u dva ispitivana scenarija na temperaturama počevši od 1000 K. Na osnovu prikazanih rezultata se zaključuje da se pojava efekta NDC može kontrolisati promenom temperature živinih para.

Brzina drifta elektrona opada sa porastom temperature u opsegu najnižih prikazanih polja, dok se odstupanje od ove pravilnosti uočava na 8000 K. Naime, brzina drifta na toj temperaturi ima veće vrednosti od onih koje se odnose na 4000 K. Razlog ovakvog ponašanja leži u preseccima za rasejanje elektrona u parama žive (slika 9.1). Srednja energija elektrona na 8000 K ima vrednosti koje se nalaze u opsegu energija u kojima opada presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima, dok se elektroni na 4000 K, u srednjem najviše elastično sudaraju u oblasti energija gde je presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima rastuća funkcija energije. Porast preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima utiče na smanjenje brzine drifta elektrona, što se upravo vidi na prikaznim rezultatima. Brzina drifta elektrona u opsegu od 1 Td do 10 Td ima kompleksnu zavisnost od električnog polja, koja je posledica kombinovanih efekata u elastičnim i neelastičnim sudarima. Brzina drifta elektrona ne nezavisi od temperature gasa u opsegu najviših prikazanih polja, već je isključivo kontrolisana elek-

tričnim poljem.

## 9.3 Transport elektrona u parama indijuma

### 9.3.1 Uvodne napomene i motivacija

Indijum je drugi metal koji je analiziran u ovom poglavlju disertacije. U pitanju je materijal čiji je potencijal prepoznat u različitim tehnološkim primenama. Na primer, indijum-kalaj oksid (engl. *indium tin oxide*, ITO) ima više namena: koristi se za proizvodnju transparentnih elektroda u ekranima na bazi tečnih kristala (engl. *liquid – crystal display*, LCD) [310], solarnih ćelija, služi kao reflektivan sloj u automobilskim farovima i izvorima svetlosti punjenim natrijumom, dovođenje napona na tanak sloj ovog materijala na vetrobranima aviona omogućava njihovo odmrzavanje pri niskim atmosferskim temperaturama. Indijum ima i brojne primene u poluprovodničkoj industriji: InAs i InSb se koriste u niskotemperaturnim, a InP u visokotemperaturnim tranzistorima [311], dok se jedinjenja InGaN i InGaP primenjuju u svetlosnoemisionim i laserskim diodama [312].

Pored razmatranja ovih značajnih primena indijuma, istraživanje iz ovog potpoglavlja ima za cilj modelovanje i optimizaciju izvora svetlosti koji rade na principu električnih gasnih pražnjenja u parama žive [295–297]. Kako je upotreba toksične žive u izvorima svetlosti strogo ograničena u zemljama Evropske Unije i mnogim drugim zemljama, postoji velika potreba za pronalaskom alternative ovog metala.

Jedan od osnovnih ciljeva ovog potpoglavlja je razvoj kompletnog skupa preseka za rasejanje elektrona u parama indijuma. Pri tome, uzeta je u obzir popunjenost pobuđenih energijskih nivoa indijuma na različitoj temperaturi. Zbog toga, ne samo da je sastavljen skup preseka koji se odnosi na indijum na osnovnom već i na prvom pobuđenom metastabilnom energijskom nivou, koji je popunjen u značajnijoj meri na temperaturama pare indijuma značajnim za modelovanje izvora svetlosti.

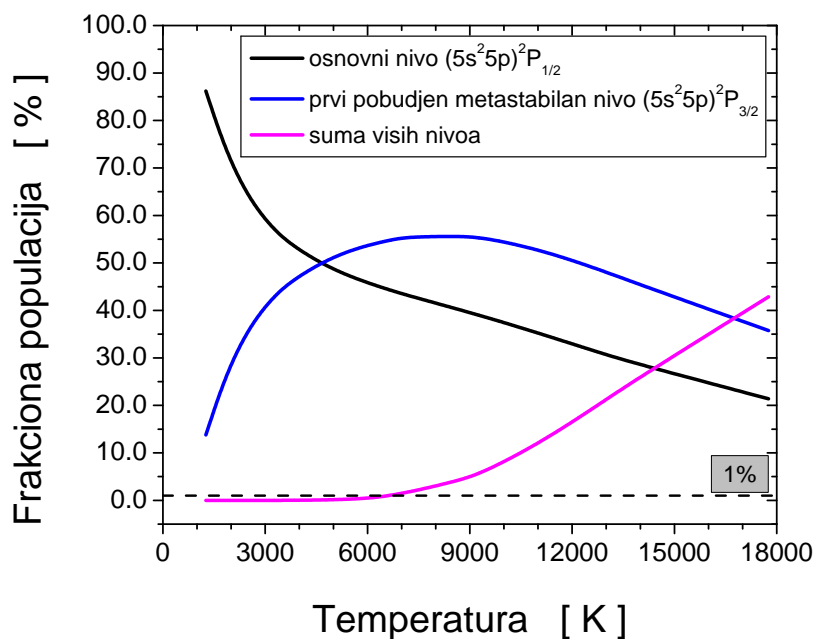
### 9.3.2 Preseci za rasejanje elektrona u parama indijuma

Skup preseka za rasejanje elektrona u parama indijuma je konstruisan za gasne atome indijuma koji se nalaze u osnovnom stanju  $(5s^25p)^2P_{1/2}$  i atome koji se nalaze u prvom pobuđenom metastabilnom stanju  $(5s^25p)^2P_{3/2}$ .

Proces sastavljanja skupa preseka je započet prikupljanjem i poređenjem dostupnih eksperimentalnih i teorijskih integralnih preseka za elastično rasejanje elektrona u ovom gasu. Upoređeni su sledeći podaci: eksperimentalni podaci Rabasovićeve i saradnika [313], teorijski proračuni istih autora na osnovu SEPASo modela, proračuni Hamiltona i saradnika [314] različitim numeričkim metodama (relativistički SEP, neralativistički OP1 i OP2, relativistički RCCC-75, DBSR-214 metod). Na osnovu njih je formiran preporučeni integralni presek za elastično rasejanje elektrona u parama indijuma, koji predstavlja rezultate DBSR-214 teorijske metode u opsegu energija od 0.001 eV do 100 eV, kombinovane sa OP1 rezultatima u opsegu energija od 100 eV do 10000 eV skaliranim faktorom 1.025. Procenjeno je da je nesigurnost ovog preseka približno  $\pm 20\%$  za energije manje od 3 eV, odnosno približno  $\pm 15\%$  na većim energijama elektrona.

Što se tiče preseka za elektronsku ekscitaciju sa osnovnog nivoa  $(5s^25p)^2P_{1/2}$ , u literaturi postoje podaci koji su dobijeni OP1, OP2, RCCC-75 i DBSR-214 proračunima. Na osnovu njih, preporučeni preseci su formirani kombinacijom DBSR-214 rezultata od praga do 100 eV i RCCC-75 rezultata u opsegu od 100 eV do 10000 eV skaliranih faktorom 0.7694. Procenjena nesigurnost ovih preseka iznosi  $\pm 20\%$  u celokupnom opsegu energija. Na ovakav način su sastavljeni preseci za 21 ekscitacioni kanal sa osnovnog energijskog nivoa.

Totalni presek za jonizaciju gasovitog indijuma je u [314] izračunat putem OP1, OP2, BEB, BEB+autojonizacija, RCCC-75 i DBSR-214 metode. Osim ovih podataka, u literaturi postoje eksperimentalni preseci Vajnštejna i saradnika [315] i Šola i saradnika [316]. Dodatni teorijski rezultati koji su javno dostupni odnose se na poluempirijske proračune autora Lotsa [317], proračune autora Kima



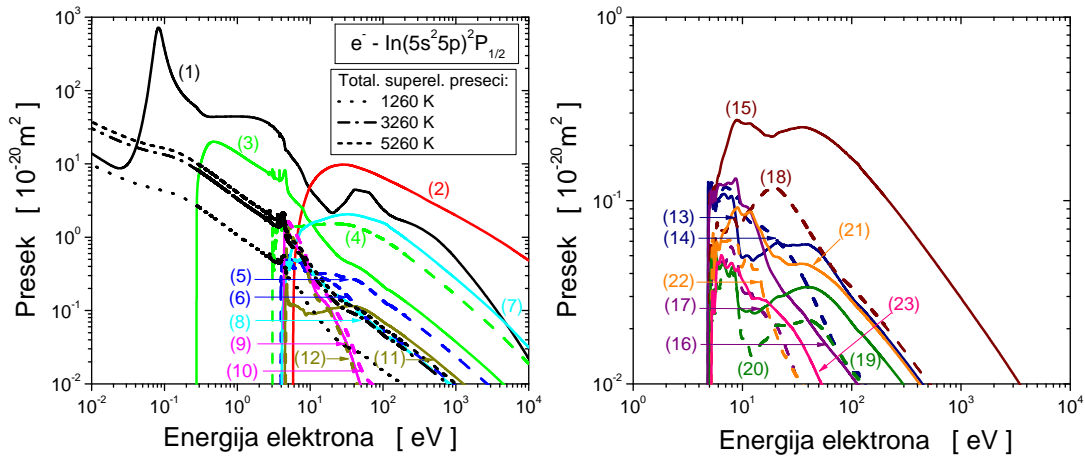
Slika 9.7: Frakciona populacija atoma indijuma na osnovnom nivou  $(5s^25p)^2P_{1/2}$ , prvom pobuđenom metastabilnom nivou  $(5s^25p)^2P_{3/2}$  i suma populacija na višim nivoima u funkciji temperature gasa.

i Stona [318], totalnu jednostuku jonizaciju (koja rezultuje stvaranjem jona  $\text{In}^+$ ) [319], proračune putem metode Dojč-Merk [320]. Naš preporučeni presek za jonizaciju je sastavljen na osnovu srednjih vrednosti eksperimentalnih podataka, počevši od praga do 200 eV, na koje su nadovezani rezultati OP1 metode skalirani faktorom 1.014. Procena nesigurnosti ovog preseka iznosi približno  $\pm 22\%$ .

U našim numeričkim kodovima koji se zasnivaju na rešavanju BE ili na MC simulacijama je potreban je presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima. Konstrukcija ovog preseka se zasniva na presecima koji su korišćeni pri dobijanju integralnog preseka za elastično rasejanje elektrona na indijumu. Presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima predstavlja kombinaciju: 1) DBSR-214 rezultata u opsegu [0.001-100] eV, 2) RCCC-75 rezultata u opsegu od 100 eV do 7000 eV skaliranih faktorom 0.9564 i 3) OP1 rezultata u opsegu energija [7000, 10000] eV skaliranih faktorom 2.653. Nesigurnost ovog preseka je jednaka nesigurnosti integralnog preseka za elastično rasejanje elektrona u parama indijuma.

Kako bi se opisao uticaj temperature gasa na transport elektrona u indijumu, potrebno je uzeti u obzir superelastične sudare između elektrona i indijuma u pobuđenom metastabilnom stanju. Ove smo preseke izračunali na osnovu detaljnog balansa, polazeći od odgovarajućih neelastičnih procesa (poglavlje 3.5.1). Kako bi se pri proračunima transportnih koeficijenata elektrona u indijumu uzeli u obzir svi energijski nivoi ovog gasa koji su značajnije popunjeni na posmatranoj temperaturi, izračunate su frakcione populacije različitih energijskih nivoa putem Maksvel-Bolcmanove statistike. Kao što se vidi na slici 9.7, do  $\sim 5000$  K su dominantno popunjeni osnovan energijski nivo  $(5s^25p)^2P_{1/2}$  i prvi pobuđeni (metastabilan) nivo  $(5s^25p)^2P_{3/2}$ . Viši energijski nivoi su popunjeni u jako maloj koncentraciji pri čemu suma njihovih frakcionih populacija doprinosi ukupnoj populaciji sa manje od 1%. Zbog toga su ovi viši energijski nivoi do pomenute temperature zanemareni u analizi transporta elektrona u indijumu.

Ispitivanje transporta elektrona u parama indijuma je vršeno na temperaturama nižim od pomenute granične vrednosti: na 0 K, 1260 K, 3260 K i 5260 K. Na svakoj od ovih temperatura su izračunati superelastični preseki za sve pojedinačne neelastične sudarne procese (elektronske ekscitacije). Na osnovu njih su izračunati totalni preseki za superelastične sudare (jednaki sumi preseka za superelastične procese na datoj temperaturi) koji su, na svakoj od temperatura, otežinjani frakcionim po-



Slika 9.8: Integralni preseki za rasejanje elektrona u parama indijuma sa atomima na osnovnom nivou  $(5s^2 5p)^2 P_{1/2}$ . Na levom panelu su prikazani preseki za transfer impulsa u elastičnim sudarima (1), totalnu jonizaciju (2) i veličina koje su dobijene množenjem totalnih preseka za superelastične sudare frakcionim populacijama osnovnog nivoua na temperaturi 1260 K, 3260 K odnosno 5260 K. Pored njih, prikazani su diskretni ekscitacioni prelazi sa osnovnog nivoua na nivo  $(5s^2 5p)^2 P_{3/2}$  (3),  $(5s^2 6s)^2 S_{1/2}$  (4),  $(5s^2 6p)^2 P_{1/2}$  (5),  $(5s^2 6p)^2 P_{3/2}$  (6),  $(5s^2 5d)^2 D_{3/2}$  (7),  $(5s^2 5d)^2 D_{5/2}$  (8),  $(5s^2 4p)^2 P_{1/2}$  (9),  $(5s^2 4p)^2 P_{3/2}$  (10),  $(5s^2 7s)^2 S_{1/2}$  (11) i  $(5s^2 4p)^2 P_{5/2}$  (12). Na desnom panelu su prikazani diskretni ekscitacioni prelazi sa sa osnovnog nivoua na nivo  $(5s^2 7s)^2 P_{1/2}$  (13),  $(5s^2 7s)^2 P_{3/2}$  (14),  $(5p^2 6d)^2 D_{3/2}$  (15),  $(5p^2 6d)^2 D_{5/2}$  (16),  $(5p^2 4f)^2 F_{7/2}$  (17),  $(5p^2 4f)^2 F_{5/2}$  (18),  $(5p^2 8s)^2 S_{1/2}$  (19),  $(5p^2 8s)^2 P_{1/2}$  (20),  $(5s^2 7d)^2 D_{3/2}$  (21),  $(5s^2 7d)^2 D_{5/2}$  (22) i  $(5s^2 8p)^2 P_{3/2}$  (23).

pulacijama osnovnog energijskog nivoua na toj posmatranoj temperaturi. Ovako pripremljen skup preseka za rasejanje elektrona na atomima indijuma na osnovnom energijskom nivou  $(5s^2 5p)^2 P_{1/2}$  je prikazan na slici 9.8.

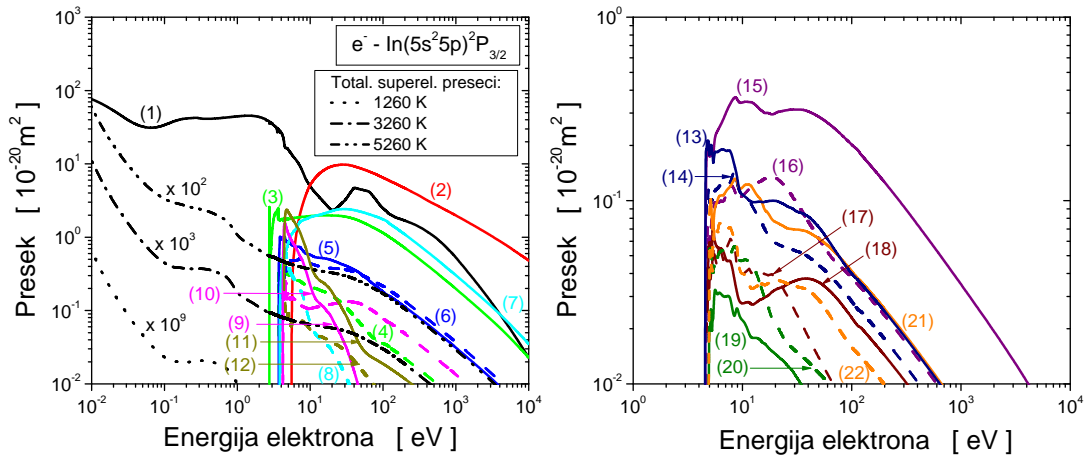
Kao što je spomenuto, na ispitivanim temperaturama je u značajnoj meri popunjen prvi pobuđeni (metastabilan) energijski nivo  $(5s^2 5p)^2 P_{3/2}$ . Preciznije rečeno, na 1260 K se  $\sim 86\%$  atoma indijuma nalazi u osnovnom, a  $\sim 14\%$  na prvom pobuđenom nivou. Na 3260 K je  $\sim 57\%$  atoma indijuma na osnovnom, dok je  $\sim 43\%$  na prvom nivou. Na temperaturi od 5260 K se oko 48% atoma nalazi na osnovnom a približno 52% atoma na prvom pobuđenom nivou. Zato je sastavljen i skup preseka za rasejanje elektrona na atomima indijuma na prvom pobuđenom energijskom nivou. Ovaj skup preseka je konstruisan polazeći od odgovarajućih preseka za osnovni energijski nivo (slika 9.8).

Presek za transfer impulsa u elastičnim sudarima elektrona sa atomima indijuma na pobuđenom energijskom nivou  $(5s^2 5p)^2 P_{3/2}$  je dobijen na osnovu integralnog preseka za elastično rasejanje elektrona na atomima indijuma na ovom nivou a koji je dobijen analognim postupkom primenjenim kod izračunavanja integralnog elastičnog preseka za osnovni nivo. Ovako dobijen presek je skaliran odnosom preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima i integralnog preseka za elastično rasejanje elektrona, pri čemu se oba pomenuta preseka odnose na osnovni energijski nivo [314].

Preseci za elektronsku ekscitaciju sa pobuđenog nivoua su dobijeni na istu način i sa istom nesigurnošću kao preseki za ovaj tip sudarnih procesa koji se odnose na osnovni nivo. Postoji ukupno dvadeset preseka za elektronsku ekscitaciju sa metastabilnog nivoua.

Totalni presek za jonizaciju atoma indijuma koji je na pobuđenom nivou ima identičan profil kao odgovarajući presek koji se odnosi na osnovni nivo, osim što je "transliran" ka nižim energijama za vrednost energije ovog pobuđenog (metastabilnog) nivoua (0.2743 eV). Na taj način, prag totalnog preseka za jonizaciju indijuma koji je na nivou  $(5s^2 5p)^2 P_{3/2}$  postaje 5.512 eV.

Preseci za superelastične sudarne procese elektrona sa atomima indijuma na pobuđenom nivou na tri ispitivane temperature su izračunati postupkom koji je isti kao u proračunima ovih preseka za osnovni energijski nivo. Izračunati preseki su takođe otežinjani frakcionim populacijama ovog ener-



Slika 9.9: Integralni preseki za rasejanje elektrona u parama indijuma sa atomima na prvom pobuđenom metastabilnom nivou  $(5s^2 5p)^2 P_{3/2}$ . Na levom panelu su prikazni preseki za transfer impulsa u elastičnim sudarima (1), totalnu jonizaciju (2) i veličina koje su dobijene množenjem totalnih preseka za superelastične sudare frakcionim populacijama prvog pobuđenog metastabilnog nivoa na temperaturi 1260 K, 3260 K odnosno 5260 K. Dodatno, ovi preseki su pomnoženi faktorima  $10^9$ ,  $10^3$  i  $10^2$ , respektivno. Pored njih, prikazani su diskretni ekscitacioni prelazi sa osnovnog nivoa na nivo  $(5s^2 6s)^2 S_{1/2}$  (3),  $(5s^2 6p)^2 P_{1/2}$  (4),  $(5s^2 6p)^2 P_{3/2}$  (5),  $(5s^2 5d)^2 D_{3/2}$  (6),  $(5s^2 5d)^2 D_{5/2}$  (7),  $(5s^2 4p)^2 P_{1/2}$  (8),  $(5s^2 4p)^2 P_{3/2}$  (9),  $(5s^2 7s)^2 S_{1/2}$  (10),  $(5s^2 4p)^2 P_{5/2}$  (11) i  $(5s^2 7s)^2 P_{1/2}$  (12). Na desnom panelu su prikazani diskretni ekscitacioni prelazi sa prvog pobuđenog metastabilnog nivoa na nivo  $(5s^2 7s)^2 P_{3/2}$  (13),  $(5p^2 6d)^2 D_{3/2}$  (14),  $(5p^2 6d)^2 D_{5/2}$  (15),  $(5p^2 4f)^2 F_{7/2}$  (16),  $(5p^2 4f)^2 F_{5/2}$  (17),  $(5p^2 8s)^2 S_{1/2}$  (18),  $(5p^2 8s)^2 P_{1/2}$  (19),  $(5s^2 7d)^2 D_{3/2}$  (20),  $(5s^2 7d)^2 D_{5/2}$  (21) i  $(5s^2 8p)^2 P_{3/2}$  (22).

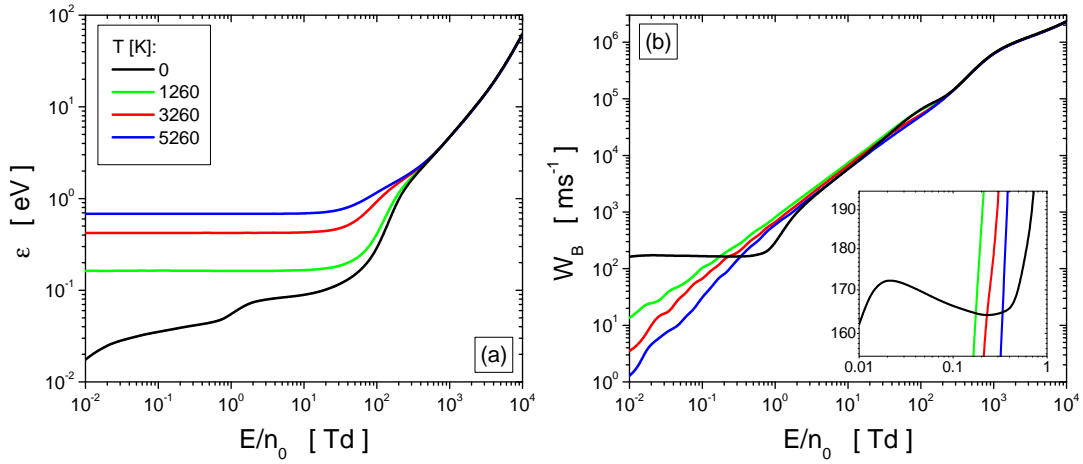
gijskog nivoa na posmatranoj temperaturi. Za svaku temepraturu je izračunat totalni superelastičan presek kao suma 20 pojedinačnih preseka. Skup preseka za rasejanje elektrona u parama indijuma sa atomima na prvom pobuđenom energijskom nivou je prikazan na slici 9.9.

Tabelirani preseki za sudare elektrona sa atomima indijuma koji su na osnovnom i pobuđenom energijskom novou se mogu naći u Excel tabelama koje su sastavni deo rada [314]. Neophodno je naglasiti da je proračun transportnih koeficijenata elektrona u parama indijuma vršen u smeši gasovitog indijuma na osnovnom i prvom pobuđenom energijskom nivou kako bi se uzela u obzir značajna populacija oba pomenuta nivoa na posmatranim temperaturama. Na svakoj temperaturi, svi pojedinačni preseki za rasejanje elektrona u In na oba pomenuta energijska nivoa su otežinjani populacijom odgovarajućeg nivoa (pored već otežinjenih sumiranih superelastičnih preseka prikazanih na slikama 9.8 i 9.9).

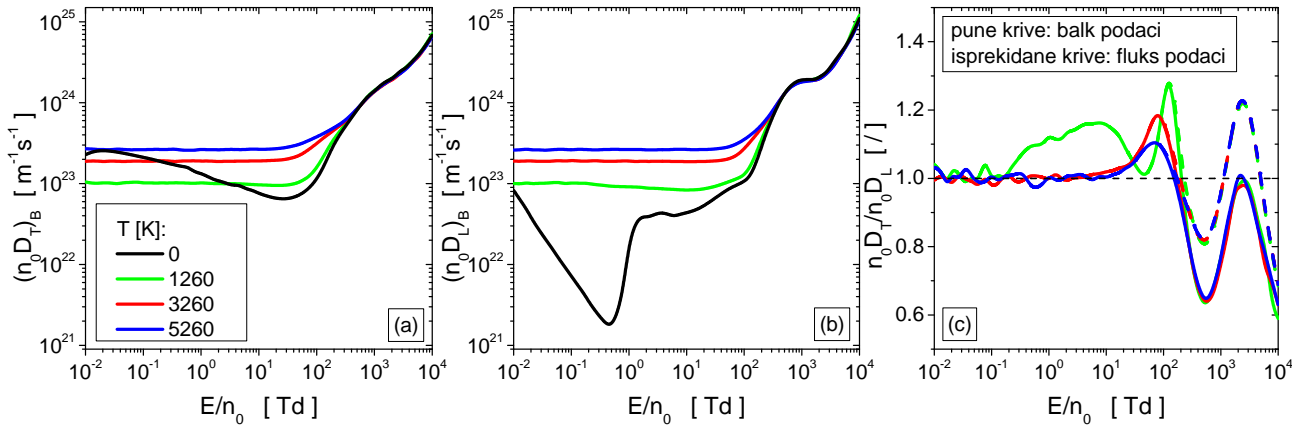
### 9.3.3 Transportni koeficijenti elektrona u parama indijuma

Transportni koeficijenti elektrona u parama indijuma su izračunati MC simulacijama u širokom opsegu  $E/n_0$  u funkciji temperature gasa. Na slici 9.10(a) je prikazana srednja energija elektrona na različitim temperaturama.  $\varepsilon$  na 0 K ima monotono rastuću zavisnost od  $E/n_0$  uz promenljivu brzinu rasta koja reflektuje energijsku zavisnost preseka za elastično i neelastično rasejanje elektrona na gasnim atomima indijuma. Srednja energija ima termalnu vrednost sve do polja od  $\sim 10$  Td za  $T = 1260$  K,  $T = 3260$  K i  $T = 5260$  K. Ovo je jasan znak da su elektroni u termalnoj ravnoteži sa parom indijuma odnosno da je njihova funkcija raspodele termalni Maksvelijan. Ova oblast niskih  $E/n_0$  može se označiti kao *režim pare*. Energija elektrona raste sa porastom polja, čime oni prestaju biti u termalnoj ravnoteži sa okolnim gasom. Time njihova funkcija raspodele postaje različita od termalnog Maksvelijana, dok temperatura gasa i dalje utiče na ponašanje elektrona. Ova oblast srednjih polja se prostire od  $\sim 10$  Td do  $\sim 400$  Td. Na još višim vrednostima  $E/n_0$ ,  $\varepsilon$  dobija mnogo veće vrednosti





Slika 9.10: Srednja energija (a) i balk brzina drifta elektrona (b) u parama indijuma u funkciji redukovano električnog polja na različitim temperaturama. Prikazani rezultati su dobijeni u Monte Karlo simulacijama. Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panel (b).

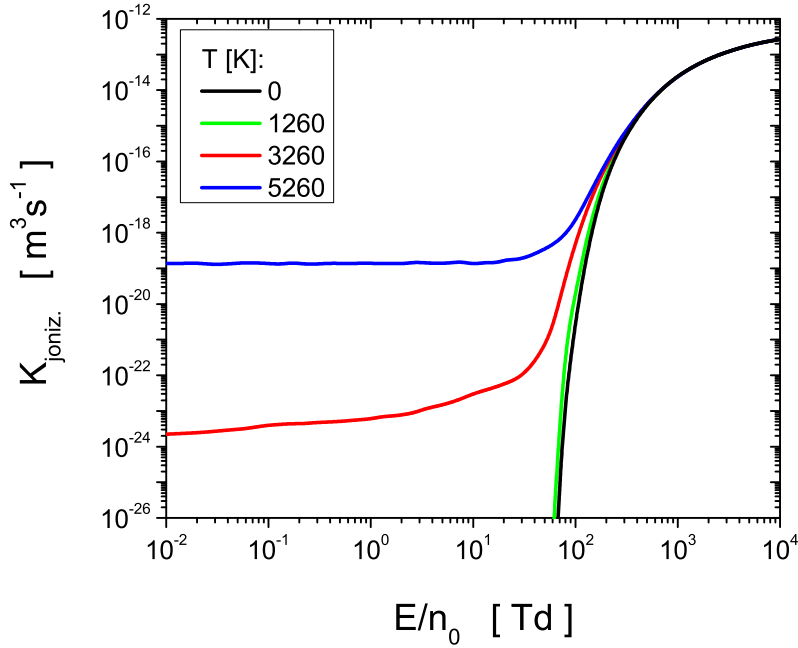


Slika 9.11: Balk vrednosti longitudinalnog (a), i transverzalnog (b) koeficijenta difuzije i odnos tranverzalnog i longitudinalnog koeficijenta difuzije (c) izračunat kako za balk tako i za fluks vrednosti. Prikazani su rezultati Monte Karlo simulacija u parama indijuma u funkciji redukovano električnog polja na različitim temperaturama. Oznake krivih sa panela (a) se odnose i na panele (b) i (c).

od termalnih. Uticaj temperature indijumove pare na srednju energiju elektrona je zanemarljiv pa se oblast ovih polja naziva *režim polja*.

Na panelu (b) slike 9.10 prikazana je balk brzinu drifta elektrona u funkciji  $E/n_0$  na različitim temperaturama para indijuma. Na prvi pogled se čini da balk brzina drifta ne menja svoju vrednosti sa promenom  $E/n_0$  na nultoj temperaturi u oblasti najnižih polja. Međutim, umetnut panel prikazuje da se u oblasti polja između 0.03 Td i 0.3 Td javlja NDC efekat u profilu brzine drifta. Ova oblast polja odgovara opsegu srednjih energija elektrona u kome se javlja tranzicija iz dominantnog neelastičnog u elastični režim gubitaka energije. Sa daljim porastom srednje energije elektrona, balk brzina drifta na  $T = 0$  K monotono raste sa poljem. Balk brzina drifta je rastuća funkcija polja u celokupnom prikazanom opsegu polja na temperaturama 1260 K, 3260 K i 5260 K. Oscilacije u profilima ovih veličina u oblasti najnižih polja su rezultat statističke nesigurnosti veličina koje su izlaz našeg MC koda.  $W$  opada sa porastom temeprature indijumove pare u ovoj i u oblasti srednje visokih  $E/n_0$ , dok u oblasti najviših vrednosti  $E/n_0$  temperatura praktično ne utiče na ponašanje ovog transportnog koeficijenta.

Na slici 9.11 su prikazani koeficijenti difuzije u parama indijuma u funkciji  $E/n_0$  na različitim



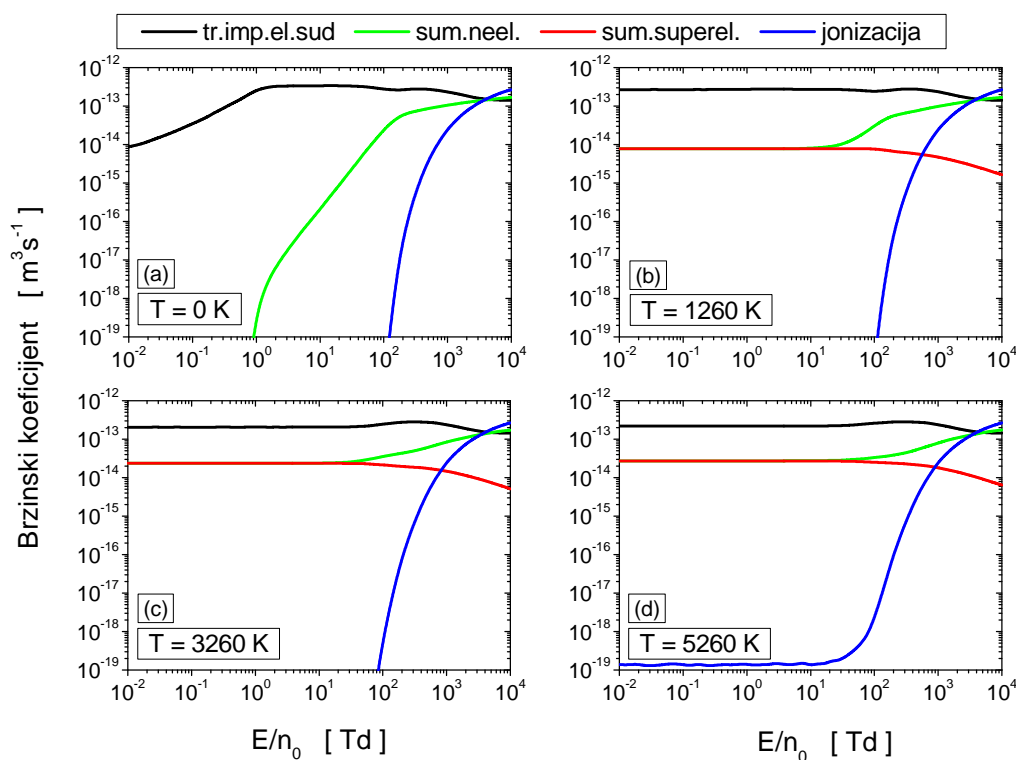
Slika 9.12: Brzinski koeficijent jonizacije u parama indijuma u funkciji redukovanog električnog polja na različitim temperaturama. Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama.

temperaturama. Na panelima (a) i (b) su prikazane balk vrednosti transverznog i longitudinalnog koeficijenta difuzije, respektivno. Na fiksnom  $E/n_0$  u opsegu najnižih  $E/n_0$ ,  $n_0 D_T$  raste sa porastom nenulte vrednosti temperature, dok koeficijent na 0 K odstupa od opisanog trenda. Na ovoj temperaturi se uočava opadanje vrednosti  $n_0 D_T$  sa porastom  $E/n_0$ , kao i minimum u okolini 30 Td. Ovo opadanje vrednosti koeficijenta difuzije je posledica naglog porasta preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima kao i preseka za ekscitaciju atoma indijuma. Koeficijent  $n_0 D_T$  je neosetljiv na promenu temperature na najvišim prikazanim poljima. Koeficijent  $n_0 D_L$  na tri najviše temperature ima slično ponašanje kao  $n_0 D_T$  do polja od  $\sim 100$  Td. Osim toga, oba koeficijenta se neznatno menjaju u ovom opsegu  $E/n_0$  pri fisnoj temperaturi, što znači da dostižu svoje termalne vrednosti.

Na slici 9.11(c) je prikazan odnos transverznog i longitudinalnog koeficijenta difuzije. Ovaj odnos pruža informaciju o anizotropiji difuzije elektrona u parama indijuma. Kao što se očekuje, termalne vrednosti  $n_0 D_T$  i  $n_0 D_L$  su približno jednake na svim nenultim temperaturama odnosno difuzija je približno izotropna u opsegu  $E/n_0$  do  $\sim 10$  Td. Na višim vrednostima  $E/n_0$  i svim analiziranim temperaturama, razlika između koeficijenata  $n_0 D_T$  i  $n_0 D_L$  ne prelazi  $\sim 30\%$ . Na srednjim vrednostima  $E/n_0$  je primetno opadanje razlike između koeficijenata difuzije sa porastom temperature para indijuma. Interesantno je da se na vrednostima  $E/n_0$  višim od  $\sim 200$  Td uočavaju veće balk vrednosti  $n_0 D_L$  u odnosu na odgovarajuće vrednosti transverznog koeficijenta, što nije slučaj ukoliko se uporede fluks koeficijenti.

Na slici 9.12 je prikazan brzinski koeficijent jonizacije u funkciji  $E/n_0$  na različitim temperaturama indijumovih para. Porast  $K_{joniz.}$  sa  $E/n_0$  je posledica energijske zavisnosti preseka za jonizaciju (slike 9.8 i 9.9). Na dve najniže temperature, ovaj koeficijent ima trend koji je tipičan za mnoge gasove. Za razliku od toga, srednja energija elektrona na dve najviše temperature ima takve vrednosti (slika 9.10(a)) da najbrži elektroni iz funkcije raspodele imaju dovoljno energije da jonizuju atome indijuma na osnovnom i metastabilnom nivou. Zbog toga,  $K_{joniz.}$  ima veliku vrednost u oblasti nižih  $E/n_0$ .

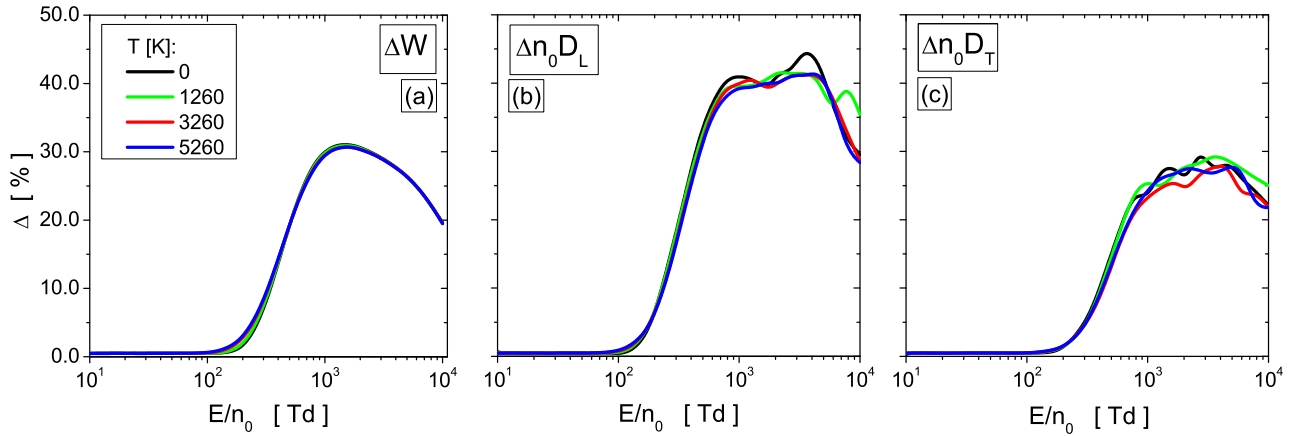
Na slici 9.13 su prikazani brzinski koeficijenti različitih sudarnih procesa u funkciji  $E/n_0$  na četiri različite temperature para indijuma. Atomi indijuma se nalaze na osnovnom stanju na temperaturi od 0 K (panel (a)) pa u ovom slučaju ne postoje superelastični sudarni procesi i odgovarajući brzinski



Slika 9.13: Brzinski koeficijenti za transfer impulsa u elastičnim sudarima, sumu neelastičnih procesa, sumu superelastičnih procesa i jonizaciju. Koeficijenti predstavljaju sume odgovarajućih koeficijenata za osnovni i pobuđen energijski nivo. Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacijama u funkciji redukovanoeg električnog polja na različitim temperaturama indijumovih para.

koeficijenti. Brzinski koeficijent za transfer impulsa u elastičnim sudarima na 0 K raste do  $\sim 1$  Td, nakon čega opada. Na tri nenulte temperature, trend ovog koeficijenta je približno konstantan do dostizanja maksimuma u okolini 500 Td. Približno konstantne vrednosti ovog koeficijenta na nižim i srednjim poljima su posledica postojanja preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima koji se odnosi na atome indijuma u pobuđenom stanju. Brzinski koeficijent sume neelastičnih procesa na temperaturi od 0 K oštro raste sa  $E/n_0$  sve do  $\sim 200$  Td kada jonizacija postaje konkurentan proces procesima elektronske ekscitacije u pogledu gubitka energije u sudarima. Na preostale tri temperature, ponašanje ovog brzinskog koeficijeta podseća na koeficijent za transfer impulsa u elastičnim sudarima. Razlog leži u srednjoj energiji elektrona u opsegu (0.15, 0.6) eV, u okviru koje se dostiže prag za ekscitaciju In sa osnovnog stanja na stanje  $(5s^25p)^2P_{3/2}$  (proces (3) sa slike 9.8). Vrednosti brzinskih koeficijenata sume superelastičnih procesa na tri nenulte temperature na najnižim i srednjim poljima su jednake onima koje se odnose na sumu neelastičnih procesa. Ova jednakost koeficijenata je posledica principa detaljnog balansa i činjenice da su elektroni u termalnoj ravnoteži sa pozadinskim gasom. Na poljima višim od  $\sim 20$  Td (na 1260 K),  $\sim 30$  Td (na 3260 K), odnosno  $\sim 40$  Td (na 5260 K), ovi koeficijenti dobijaju međusobno različite vrednosti. Brzinski koeficijenti procesa jonizacije imaju identičan trend ponašanja na svim ispitivanim temperaturama: dominiraju u oblasti najviših ispitivanih polja sa čijim porastom i sami rastu.

Eksplicitan uticaj nekonzervativnog procesa jonizacije na transportne koeficijente elektrona se može prikazati putem procentualnih razlika između njihovih balk i fluks vrednosti. Na slici 9.14 su prikazane procentualne razlike između vrednosti fluks i balk vrednosti za brzinu drifta (a), longitudinalni koeficijent difuzije (b) i transverzalni koeficijent difuzije (c) na različitim temperaturama. Sva tri prikazana koeficijenta su neosetljiva na proces jonizacije do polja od  $\sim 200$  Td. Iako brzinski koeficijent jonizacije na 3260 K i 5260 K ima visoku vrednost u režimu pare (slika 9.12), u ovoj oblasti postoje i procesi ekscitacije kao i superelastični procesi (slika 9.13) koji kompenzuju uticaj ovog



Slika 9.14: Procentualna razlika između balk i fluks brzine drifta (a), longitudinalnog (b) i transverznog koeficijenta difuzije elektrona (c) u parama indijuma. Rezultati su dobijeni Monte Karlo simulacija u funkciji redukovano električnog polja na različitim temperaturama indijumovih para.

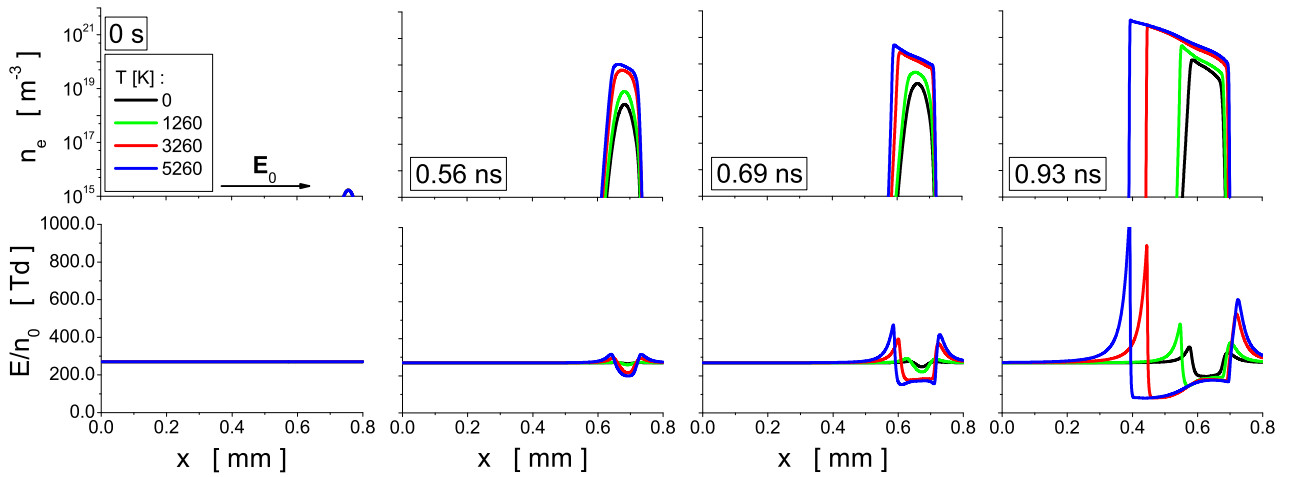
neKonzervativnog procesa. Zato je procentualna razlika između dualnih vrednosti sva tri prikazana transportna koeficijenta manja od 1%. Na poljima višim od  $\sim 200$  Td uočava se značajna razlika između balk i fluks transportnih koeficijenata: njena vrednost dostiže  $\sim 30\%$  u slučaju brzine drifta elektrona i transverznog koeficijenta difuzije, odnosno  $45\%$  u slučaju koeficijenta  $n_0 D_L$ . Dakle, porast broja elektrona u parama indijuma usled procesa jonizacije atoma ovog gasa utiče na porast balk transportnih koeficijenata u odnosu na odgovarajuće fluks koeficijente, dok, istovremeno, promena temperature indijumovih para ne menja vrednosti ovih koeficijenata u značajnijoj meri.

### 9.3.4 Razvoj i propagacija strimera u parama indijuma

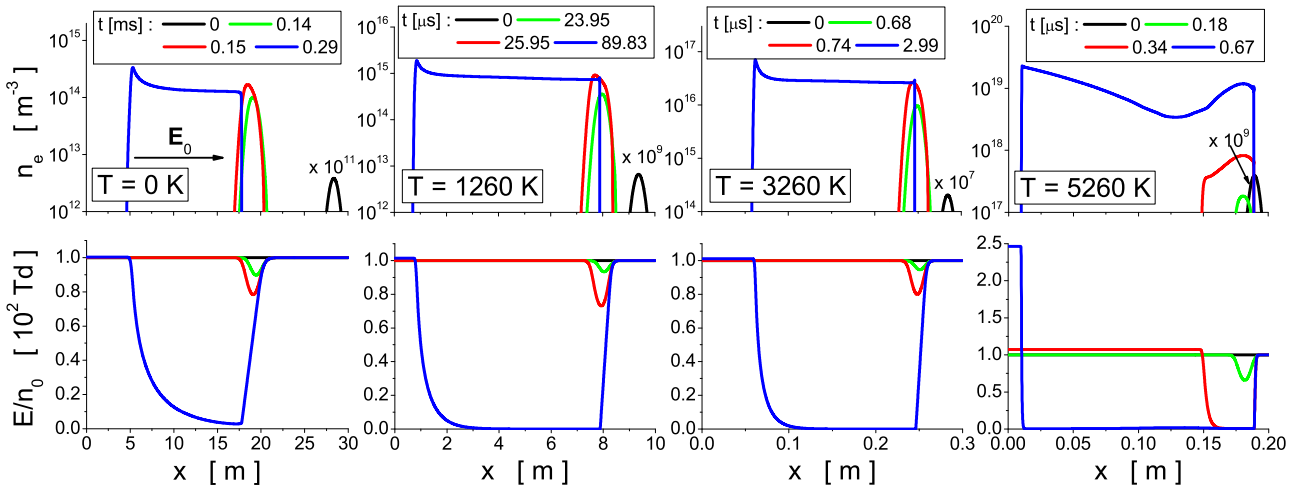
U ovom potpoglavlju su proučavani razvoj i propagacija negativnih strimera u parama indijuma na različitim temperaturama. Proračuni su vršeni klasičnim fluidnim modelom u 1D i 1.5D konfiguracijama u kojima su kao ulazni podaci korišćeni transportni koeficijenti elektrona iz prethodnog potpoglavlja. Na osnovu narednih rezultata se vidi da prisustvo atoma indijuma u prvom pobuđenom metastabilnom stanju  $(5s^25p)^2P_{3/2}$  značajno utiče na karakteristike strimera.

Na slici 9.15 su prikazani razvoj i propagacija strimera u parama indijuma pri spoljašnjem električnom polju od 270 Td na različitim temperaturama. U pitanju su rezultati klasičnog fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji. Profil koncentracije elektrona na početku simulacije ima oblik Gausijana, dok je električno polje jednako vrednosti spoljašnjeg polja. Koncentracija elektrona raste u ranoj fazi razvoja strimera (0.56 ns), pri čemu profili na 3260 K i 5260 K počinju da se transformišu u oblik koji podseća na strimer. Električno polje u kanalu ove strukture je zaklonjeno za maksimalnih 26.2% (na 5260 K) u odnosu na vrednost spoljašnjeg polja, dok je polje na frontu pojačano za 16.7% u odnosu na istu referentnu vrednost. Sa daljim protokom vremena, u trenutku 0.69 ns, koncentracija elektrona raste na račun povećanja polja na frontu formiranih struktura. Na ovoj većoj vrednosti polja je veći brzinski koeficijent jonizacije (slika 9.13), a to doprinosi daljem povećanju koncentracije elektrona na frontu formiranih struktura. Strimer je potpuno formiran na 3260 K i 5260 K u ovom vremenskom trenutku, dok je u 0.93 ns razvijen i na dve niže temperature.

U cilju boljeg razumevanja efekta temperature, na slici 9.16 je prikazan razvoj i propagacija strimera pri spoljašnjem električnom polju od 100 Td. U pitanju su rezultati klasičnog fluidnog modela u 1D konfiguraciji. Svaki panel sa koncentracijom elektrona i njemu odgovarajućim električnim poljem predstavlja rezultat razvoja i propagacije strimera na datoj temperaturi u četiri karakteristična vremenska trenutka. Pre svega, primećuje se da se razvoj i propagacija strimera dešavaju na različitim prostornim i vremenskim skalama na svakoj od analiziranih temperatura indijumovih para. U profi-



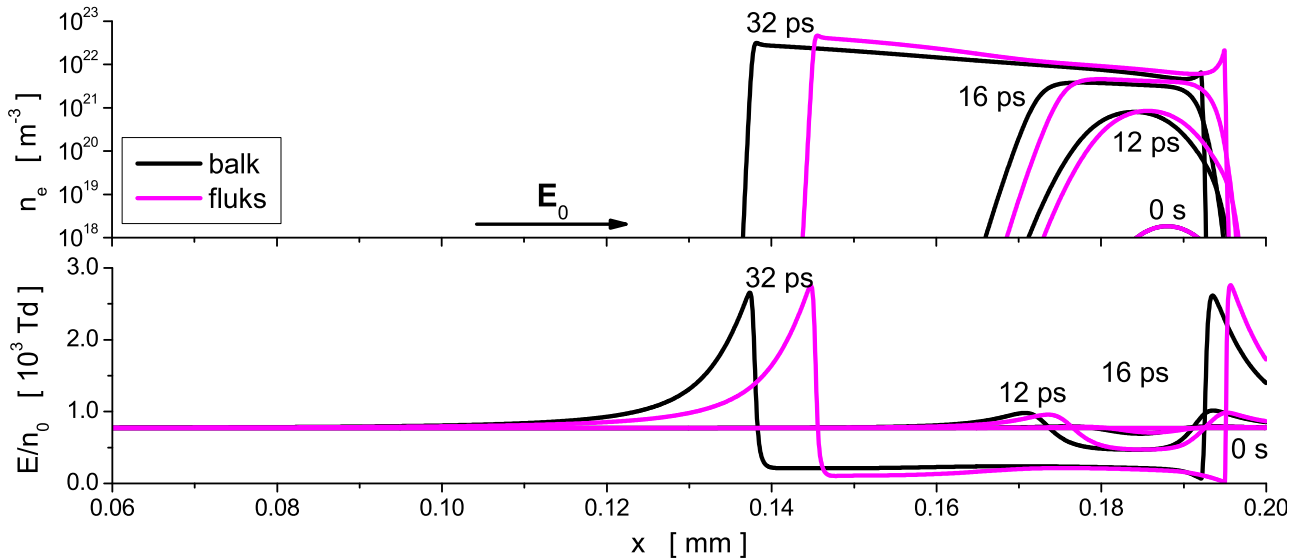
Slika 9.15: Razvoj i propagacija strimera u parama indijuma u funkciji električnog polja od 270 Td na različitim temperaturama pare indijuma. Rezultati su dobijeni na osnovu klasičnog fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji uz korišćenje balk transportnih koeficijenata elektrona izračunatih Monte Karlo simulacijama. Vektor spoljašnjeg električnog polja je orijentisan sa leva na desno, kao što je prikazano na prvom gornjem panelu, pa negativni strimeri propagiraju sa desna na levo.



Slika 9.16: Razvoj i propagacija strimera u parama indijuma u funkciji električnog polja na 100 Td na različitim temperaturama. Rezultati su dobijeni na osnovu klasičnog fluidnog modela u 1D konfiguraciji uz korišćenje balk transportnih koeficijenata elektrona izračunatih MConte Karlo simulacijama.

lima  $n_e$  potpuno formiranih strimera (tamno plave krive) uočava se karakteristično povećanje koncentracije elektrona na frontu, a odstupanje od ovakvog ponašanja primećuje se u rezultatu na 5260 K. Na toj temperaturi se javlja porast koncentracije elektrona na začelju strimera kako u trenutku kada je strimer potpuno formiran ( $0.67 \mu\text{s}$ ), tako i u ranijoj fazi njegovog razvoja ( $0.34 \mu\text{s}$ ). Istovremeno, potpuno je zaklonjeno električno polje strimera u ova dva vremenska trenutka. Prikazano ponašanje je posledica velikog  $K_{joniz.}$  na 5260 K na niskom  $E/n_0$  (slika 9.12), čime je omogućena jonizacija atoma indijuma na osnovnom i u pobuđenom energijskom stanju. Upravo su jonizacije u oblasti začelja strimera odgovorne za povećanje koncentracije elektrona.

Na slici 9.17 je prikazan razvoj i propagacija strimera u 1.5D konfiguraciji uz pretpostavku dva skupa ulaznih veličina u simulaciji, balk i fluks transportne koeficijente. Spoljašnje električno polje je fiksirano na 770 Td a temperatura pare indijuma je 1260 K. U svim prikazanim fazama razvoja strimera (osim u  $t = 0$  s) uočava se da strimer prelazi veće rastojanje od inicijalnog položaja ukoliko se kao ulazni podaci fluidnog modela koriste balk transportni koeficijenti. Sa druge strane, koncen-



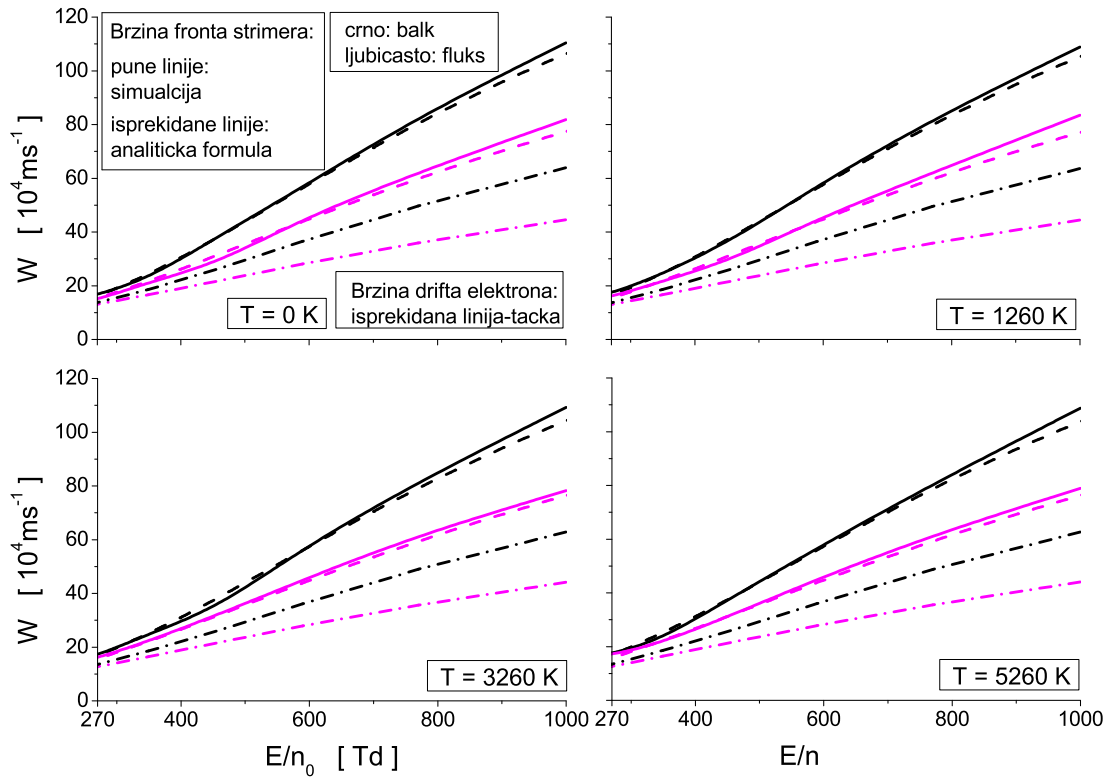
Slika 9.17: Razvoj i propagacija strimera u parama indijuma u funkciji električnog polja na 770 Td i 1260 K. Prikazani su rezultati klasičnog fluidnog modela u 1.5D konfiguraciji uz korišćenje balk i fluks transportnih koeficijenata elektrona izračunatih Monte Karlo simulacijama.

tracija elektrona i polje imaju manju vrednost u maksimumu svojih profila u odnosu na vrednosti koje se dobijaju prilikom korišćenja fluks podataka. Slični rezultati u pogledu osetljivosti propagacije strimera na dualnu prirodu transportnih koeficijenata su uočeni u azotu [88, 273, 282]. Kako je  $K_{joniz.}$  jedinstven (ne postoji balk i fluks koeficijent), rezultati sa ove slike se mogu objasniti većom vrednošću balk brzine drifta i balk longitudinalnog koeficijenta difuzije u odnosu na odgovarajuće fluks vrednosti (slika 9.14, paneli (a) i (b)).

Rezultati sa slike 9.18 prikazuje poređenje brzina fronta strimera u parama indijuma na različitim temperaturama. U pitanju su rezultati dobijeni na osnovu rešenja klasičnog fluidnog modela u 1D konfiguraciji i analitičkog proračuna brzine fronta strimera (jednačina (7.55)). Pri tome su kao ulazni podaci korišćeni balk i fluks transportni koeficijenti elektrona izračunati MC simulacijama. Pored ovoga su prikazane balk i fluks brzine drifta elektrona. Ukoliko se obrati pažnja na odnos brzina fronta strimera i brzina drifta elektrona, primećuje se da on iznosi bar 50% u korist brzine fronta strimera. Ovaj odnos je približno jednak bez obzira na dualnu prirodu transportnih koeficijenata i temperaturu indijumovih para. U pitanju je već ustanovljena činjenica koja je potvrđena kako u neutralnim gasovima [88, 273, 282], tako i u atomskim tečnostima [185]. Razlog leži u tome što na brzinu propagacije strimera utiče ne samo brzina drifta, koeficijent jonizacije i longitudinalni koeficijent difuzije, već i difuzioni fluks koji je posledica velikog gradijenta koncentracije elektrona na frontu strimera.

Ukoliko međusobno poredimo brzine fronta strimera koje su izračunate na različite načine (na osnovu rezultata klasičnog fluidnog modela i analitičke formule), vidimo da se međusobno odstupanje ovih rezultata zadržava u okviru 3.5% na svim analiziranim temperaturama u slučaju kada se koriste fluks, i u slučaju kada se koriste balk transportni koeficijenti kao ulazni podaci. Ovaj rezultat pokazuje da se brzina fronta strimera u indijumovim parama u prikazanom opsegu polja može izračunavati sa velikom preciznošću i putem analitičke formule. Za razliku od ovog gasa, kod jako elektornegativnih gasova je primećeno veliko međusobno odstupanje brzina fronta strimera izračunatih na dva pomenuta načina (slika 7.8), što je posledica efekta zahvata elektrona, koji nisu razmotreni u izgradnji analitičke teorije za propagaciju planarnog jonizacionog fronta.

Brzina fronta strimera koja je izračunata korišćenjem balk transportnih koeficijenata elektrona ima veće vrednosti od one koja se dobija korišćenjem fluks koeficijenata. Ovaj međusoban odnos je vidljiv na svim prikazanim poljima, na svim temperaturama kao i pri oba načina izračunavanja brzine fronta strimera. Upoređujući rezultate sa svih panela slike 9.18 se uočava da brzina fronta strimera neznatno zavisi od temperature indijumovih para u celokupnom prikazanom opsegu  $E/n_0$ . Razlog



Slika 9.18: Brzina fronta strimera u parama indijuma u funkciji električnog polja na različitim temperaturama. Rezultati su dobijeni na osnovu klasičnog fluidnog modela u 1D konfiguraciji i analitičke formule uz korišćenje balk i fluks transportnih koeficijenata elektrona izračunatih Monte Karlo simulacijama. Radi poređenja, prikazane su i balk i fluks brzine drifta elektrona. Oznake krivih sa gornjeg levog panela se odnose i na preostale panele.

leži u činjenici da se brzina fronta strimera računa praćenjem kretanja tačke na frontu ove strukture kojoj odgovaraju takve vrednosti  $E/n_0$  na kojima ne postoji značajnija zavisnost koeficijenata  $W$  (slika 9.10(b)),  $K_{joniz.}$  (slika 9.12) i  $n_0 D_L$  (slika 9.11(b)) od temperature indijumovih para.

## 9.4 Zaključak

U ovom poglavlju su proučavani sudarni i transportni procesi elektrona, razvoj i propagacija strimera u metalnim parama. Prikazani rezultati su od značaja u raznim oblastima primenjene fizike i tehnologije, ali iznad svega ovi rezultati se mogu direktno koristiti u modelovanju izvora svetlosti koji funkcionišu na principima električnih gasnih pražnjenja.

Prvi deo poglavlja je posvećen proučavanju sudarnih i transportnih osobina elektrona u parama žive. Konstruisan je skup preseka za rasejanje elektrona u pari ovog metala, gde je prisustvo dimera žive opisano jednim efektivnim presekom, koji na izvestan način opisuje neelastične sudare elektrona i ove čestice. Prisustvo dimera žive, čija se koncentracija u gasu povećava sa porastom pritiska, u značajnoj meri utiče na ponašanje transportnih koeficijenata elektrona. Opažena je negativna diferencijalna provodnost u profilu brzine drifta i analizirani su sudarni procesi koji kontrolišu ovaj kinetički fenomen. Proučavan je uticaj termalnog kretanja gasnih atoma žive i temperature pare na transport elektrona. Transportni koeficijenti su izračunati u širokom opsegu redukovano električnog polja i temperature pare žive, koji se u velikoj meri preklapaju sa operativnim uslovima izvora svetlosti koji funkcionišu na principu električnih gasnih pražnjenja.

U drugom delu ovog poglavlja su prikazani najznačajniji rezultati proučavanja transporta elektrona i propagacije negativnih strimera u parama indijuma. Prvi korak je bio konstrukcija skupova preseka za rasejanje elektrona na atomu indijuma koji se nalazi u osnovnom stanju  $(5s^25p)^2P_{a/2}$  i

prvom pobuđenom metastabilnom stanju  $(5s^25p)^2P_{3/2}$ . Proračun transportnih koeficijenata elektrona u smešama gasnih atoma koji se nalaze u osnovnom stanju i gasnih atoma koji se nalaze u prvom pobuđenom metastabilnom stanju je od ključnog značaja za razumevanje kinetike elektrona u parama indijuma čije se temperature kreću do  $\sim 5000$  K. Skupove preseka, između ostalih, čine i kanali za pojedinačne superelastične sudarne procese koji utiču na balans srednje energije elektrona. Generisana baza transportnih podataka je iskorišćena kao skup ulaznih parametara za klasičan fluidni model u 1D i 1.5D konfiguracijama, na osnovu kojih su ispitivani razvoj i proagacija strimera u ovom gasu. Opaženo je da brzina propagacije strimera u parama indijuma raste sa porastom temperature gasa i da su ove iste brzine veće ukoliko se koriste balk transportni koeficijenti, u poređenju sa strimerima koji su dobijeni u simulacijama gde se koriste fluks transportni koeficijenti.



# Zaključak

Jako elektronegativni gasovi su supstance čiji molekuli pokazuju veliku sposobnost za zahvat slobodnih elektrona i formiranje negativnih jona. Zahvaljujući ovoj osobini, jako elektronegativni gasovi se samostalno, ili u smeši sa drugim gasovima, koriste u visokonaponskoj tehnologiji za izolaciju pojedinačnih komponenti i uređaja u sistemima za prenos električne energije. U ove uređaje spadaju gasne transmisionne linije, transformatori, podstanice i različiti tipovi prekidača. Jako elektronegativni gasovi se koriste kao izvori negativnih jona, a u detektorima čestica visokih energija upotrebljavaju se za kontrolu i sprečavanje pojave korona i strimera, koji mogu dovesti do oštećenja brojačke elektronike. U mikroelektronici, jako elektronegativni gasovi se veoma često koriste kao noseći gasovi u reaktorima plazme koji služe za depoziciju i nagrizanje poluprovodničkih uzoraka.

U domenu visokonaponske tehnologije, najvažniji gasni dielektrik je sumpor-heksafluorid ( $\text{SF}_6$ ). Ovaj gas ima izuzetne dielektrične karakteristike i veoma dugu i bogatu tradiciju u pogledu njegove primene kako u visokonaponskoj tehnologiji, tako i u drugim oblastima primenjene fizike i tehnologije. Na žalost, kada se ovaj gas nađe u atmosferi, on značajno utiče na globalno zagrevanje naše planete. Potencijal za globalno zagrevanje  $\text{SF}_6$  gasa je 22800 puta veći od referentne jedinične vrednosti  $\text{CO}_2$  gasa, a njegovo atmosfersko vreme života je 3200 godina. Detaljna analiza je pokazala da tehnologija za prenos električne energije koja se u značajnoj meri oslanja na upotrebu  $\text{SF}_6$  gasa, učestvuje sa približno 25% nastajanju efekta staklene bašte u odnosu na ukupan učinak industrije za proizvodnju i transport električne energije. Zbog toga se danas ulažu veliki naponi za pronalazak inovativnih rešenja koja bi omogućila zamenu  $\text{SF}_6$  gasa u industriji.

Razvoj gasnih dielektrika koji bi eventualno mogli zameniti  $\text{SF}_6$  gas u sistemima za prenos električne energije u direktnoj je vezi sa razumevanjem sudarnih i transportnih osobina elektrona u jako elektronegativnim gasovima. Ništa manje važan zahtev je razumevanje strimerskih pražnjenja, imajući u vidu da strimeri predstavljaju osnovni mod za proboj u gasu na visokim pritisku i velikim zapreminama gasa, što je od posebnog interesa u visokonaponskoj tehnologiji. Strimeri su uski kanali neravnotežne plazme čija je dinamika u potpunosti određena ostrim gradijentom koncentracije naelektrisanih čestica na propagirajućem frontu i efektima prostornog naelektrisanja. U dosadašnjoj praksi, modelovanje strimerskih pražnjenja je bilo ograničeno na  $\text{SF}_6$  gas i njegove smeše sa azotom ( $\text{N}_2$ ) i ugljen-dioksidom ( $\text{CO}_2$ ) u različitim geometrijama i konfiguracijama električnih polja. U ovoj disertaciji, istraživanja su ograničena na vremenski statička i prostorno homogena električna

polja, iako su proučavanja strimerskog mehanizma u uslovima vremenski promenljivih i prostorno nehomogenih polja takođe od velikog značaja za modelovanje eksperimenata i različitih tipova uređaja. U metodološkom smislu, istraživanja strimerskih pražnjenja su ograničena na fluidne modele u 1 dimenziji (1D) i 1.5 dimenziji (1.5D). Strimerska pražnjenja se mogu modelovati u Particle in Cell / Monte Carlo simulacijama (PIC/MC) ili na osnovu hibridnih modela koji kombinuju fluidne jednačine za spore elektrone i jone i Monte Karlo metod za brze i neravnotežne elektrone na frontu strimera. Modelovanje strimera u 2D i 3D zahteva napredno multiskalirajuće matematičko modeliranje koje je samo po sebi veoma komplikovan numerički problem i zahteva kompleksan matematički aparat za rešavanje parcijalnih diferencijalnih jednačina kako u fluidnim i PIC/MC modelima, tako i u hibridnom pristupu. U ovoj disertaciji, fokus je bio na razumevanju mikroskopskih procesa rasejanja i transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima i procedurama za korektnu implementaciju ovih procesa u fluidnim modelima strimerske plazme.

Rasejanje elektrona na molekulima jako elektronegativnih molekula je opisano skupovima preseka koji moraju zadovoljiti uslove kompletnosti i preciznosti u pogledu reprodukcije eksperimentalno izmerenih transportnih koeficijenata. U ovoj disertaciji je primenjena tehnika rojeva naelektrisanih čestica za razvoj i normalizaciju skupova preseka za rasejanje elektrona u jako elektronegativnim gasovima. Ova tehnika podrazumeva modifikaciju inicijalnog skupa preseka, sve dok se ne postigne zadovoljavajuće slaganje između teorijski izračunatih i eksperimentalno određenih transportnih koeficijenata, ne samo u čistom gasu koji je predmet istraživanja, već i u njegovim smešama sa drugim gasovima čije preseke dobro poznajemo. Kao rezultat ove procedure, u ovom radu su dobijeni kompletni i samousaglašeni skupovi preseka koji se direktno mogu koristiti kao ulazni podaci u kinetičkim modelima plazme. Zbog nedostataka teorijski izračunatih ili eksperimentalno određenih preseka za individualne sudarne procese elektrona sa gasnim molekulima poslednje generacije dielektrika, u ovoj disertaciji su razvijeni skupovi efektivnih preseka za neke od razmatranih gasova. Uprkos činjenici da se mogu očekivati značajne razlike između skupa efektivnih preseka i skupa preseka koji bi bio dobijen kompilacijom teorijski izračunatih i/ili eksperimentalno određenih preseka za individualne sudarne procese, skupovi efektivnih preseka koji su razvijeni u ovoj disertaciji obezbeđuju dobar balans broja naelektrisanih čestica, njihovog impulsa i energije u modelima neravnotežnih plazmi, uključujući i strimere. Sa druge strane, skupovi efektivnih preseka se ne mogu koristiti u plazmahemijским modelima, jer ovi modeli zahtevaju precizne preseke za svaki individualni sudarni proces i odgovarajuće brzinske koeficijente.

Fluidni modeli neravnotežne plazme, uključujući i plazmu koja nastaje u strimerskom pražnjenju, zahtevaju poznavanje transportnih koeficijenata naelektrisanih čestica u funkciji redukovanog električnog polja. Transportni koeficijenti se mogu izračunati na osnovu numeričkih rešenja Bolcmanove jednačine, u Monte Karlo simulacijama ili u okviru teorije prenosa impulsa. Osnovni metodološki pristup za proračun transportnih koeficijenata u ovoj disertaciji je numeričko rešavanje Bolcmanove jednačine i Monte Karlo simulacije. Transport jona nije razmatran, a Bolcmanova jednačina za elektrone je rešavana primenom momentne metode koja je bazirana na algebri ireducibilnih sfernih tenzora. Srednja energija, brzina drifta, koeficijenti difuzije i brzinski koeficijenti za zahvat elektrona i jonizaciju izračunati su u trifluorometil-jodidu ( $\text{CF}_3\text{I}$ ), 1,3,3,3 tetrafluoropropanu ( $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ ), 2,3,3,3 tetrafluoro-2-(trifluorometil)propan-nitrilu ( $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ ) i  $\text{SF}_6$  gasovima i smešama ovih gasova sa Ar,  $\text{N}_2$  i  $\text{CO}_2$ . Posebna pažnja je posvećena gasnim smešama  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  sa  $\text{SF}_6$ , imajući u vidu da je  $\text{SF}_6$  najvažniji gasni dielektrik u visokonaponskoj tehnologiji. Za ove gasove i gasne smeše su izračunata kritična polja na osnovu brzinskih koeficijenata za zahvat elektrona i jonizaciju. U smeši  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i  $\text{SF}_6$  opažen je efekat pozitivne sinergije, koji se ogleda u porastu kritičnog polja sa porastom koncentracije  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  u odnosu na kritično polje  $\text{SF}_6$  gasa, iako je kritično polje  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  približno dva puta manje od onog za  $\text{SF}_6$  gas.

Razvoj i propagacija negativnih strimera su proučavani klasičnim i korigovanim fluidnim modelima. U ovim simulacijama nije razmatran uticaj elektroda i graničnih površina. Sudarni procesi druge vrste, uključujući rekombinaciju elektrona i pozitivnih jona, rekombinaciju pozitivnih i nega-

tivnih jona, detačment elektrona sa negativnih jona i foton-molekularne interakcije, nisu razmatrani u ovoj disertaciji. Fokus u istraživanju prikazanom u ovoj disertaciji je bio stavljen na razvoj procedura za korektnu implementaciju transportnih koeficijenata u fluidne modele strimera i na razvoj metodologije za prevazilaženje ograničenja klasičnog fluidnog modela. Na osnovu rezultata za tranziciju lavina elektrona u strimer i njegovu propagaciju u  $\text{CF}_3\text{I}$  gasu i njegovim smešama sa  $\text{SF}_6$  gasom, analizirane su opšte i generičke osobine strimera u jako elektronegativnim gasovima. Detaljna analiza propagacije strimera u svim gasovima i njihovim smešama sa drugim gasovima nije bila moguća zbog ograničenog prostora ove disertacije.

Značajna pažnja u ovoj disertaciji je posvećena proučavanju sudarnih i transportnih osobina elektrona u parama žive i indijuma. Neki od motivacionih faktora za ovo istraživanje su razvoj matematičkih modela izvora svetlosti koji funkcionišu na principima električnih gasnih pražnjenja. Pošto je upotreba žive za proizvodnju izvora svetlosti kako na niskom tako i na visokom pritisku ograničena zakonskom regulativom u velikom broju država, danas postoji snažan podsticaj da se pronađe manje toksičan materijal kao alternativa živi. Jedna od opcija za izvore svetlosti na niskom pritisku je korišćenje gasnih smeša halogeno-indijumovih jedinjenja i argona. Koliziono-radijativni modeli električnih pražnjenja u ovim izvorima svetlosti zahtevaju poznavanje sudarnih preseka za rasejanje elektrona, transportnih koeficijenata i brzinskih koeficijenata za ekscitaciju i jonizaciju gasnih atoma. Od velikog je značaja razumevanje interakcije elektrona i gasnih atoma indijuma u osnovnom i pobuđenom stanju. Ništa manje važno je razumevanje drifta i difuzije elektrona u parama indijuma u funkciji električnog polja i temperature gasa. Imajući u vidu da ovakvih istraživanja nema u literaturi, sve ove činjenice su bile uzete u obzir prilikom trasiranja puta za istraživanje koje je prikazano u ovoj disertaciji.

Doktorska disertacija sadrži devet poglavlja, Uvod, Zaključak, Rezime i Literaturu. U Uvodu je u kratkim crtama dat pregled stanja fizike gasnih dielektrika, sa posebnim akcentom na jako elektronegativne gasove. Opisana je metoda rojeva naelektrisanih čestica za razvoj i normalizaciju sudarnih preseka elektrona u gasovima. Identifikovani su aktuelni problemi, propusti i nekonzistentnosti u dosadašnjem istraživačkom radu. Razmatrana su ograničenja standardne teorije za rešavanje Bolcmanove jednačine koja je bazirana na aproksimaciji dva člana. Ukazano je na sistematsko zanemarivanje dualne prirode transportnih koeficijenata i negativnu praksu prema kojoj se transportni procesi opisuju isključivo fluks transportnim koeficijentima. Skrenuta je pažnja da većina javno dostupnih Monte Karlo kodova ne poseduje procedure za reskaliranje elektrona, što u značajnoj meri ograničava i sprečava njihovu primenu na gasove u kojima zahvat elektrona kontroliše ponašanje roja. U domenu modelovanja strimera, analizirana su ograničenja klasičnog fluidnog modela u pogledu nejasne situacije koja postoji sa implementacijom transportnih koeficijenata. Ovi problemi bili su direktna motivacija za rad na ovoj disertaciji. Na sličan način, u Uvodu je ukazano na ograničenja dosadašnjih istraživanja i nedostatak podataka za sudarne i transportne procese elektrona u parama metala, što u značajnoj meri limitira razvoj i modelovanje izvora svetlosti koji funkcionišu na principima električnih gasnih pražnjenja.

U prvom poglavlju disertacije je razmatran strimerski mehanizam za proboj u gasu. Opisani su načini za kontrolu i sprečavanje pojave strimera u gasovima koji se koriste za izolaciju. Nakon kratkog prikaza istorijskog razvoja gasnih dielektrika, diskutovani su zahtevi koje elektronegativan gas treba ispuniti da bi se mogao uzeti u obzir za ulogu gasnog dielektrika u visokonaponskoj tehnologiji. Jedno potpoglavlje je posvećeno zakonskoj regulativi i međunarodnim sporazumima koji se odnose na upotrebu gasnih dielektrika sa štetnim dejstvom na atmosferu naše planete. Značajna pažnja je posvećena gasnim dielektricima poslednje generacija sa ultra niskim potencijalima za globalno zagrevanje. Predstavljene su u kratkim crtama njihove fizičke i hemijske osobine, a poseban akcenat je stavljen na analizu njihove toksičnosti.

U drugom poglavlju su prikazani osnovni elementi hidrodinamičke kinetičke teorije transporta naelektrisanih čestica u gasovima. Definisani su roj naelektrisanih čestica, hidrodinamički režim i transportni koeficijenti. Ukazano je na dualnu prirodu transportnih koeficijenata i interpretirane su

razlike između fluksa i balk vrednosti. U nastavku su predstavljeni osnovni elementi teorije za numeričko rešavanje Boltzmanove jednačine koja je bazirana na razvoju funkcije raspodele u više članova u brzinskom prostoru. Ovi elementi uključuju sferno-harmonijsku dekompoziciju Boltzmanove jednačine, tretman prostornih zavisnosti funkcije raspodele i razvoj funkcije raspodele po Sonine polinomima oko Maksvelijana, čime je opisana zavisnost funkcije raspodele od intenziteta brzine. U kratkim crtama su opisane osobine kolizionog integrala i numeričko rešavanje Boltzmanove jednačine. Na kraju su dati eksplicitni izrazi za izračunavanje transportnih koeficijenata na osnovu momenata funkcije raspodele. U nastavku drugog poglavlja diskutovan je Monte Karlo metod i opisane su najvažnije procedure koje su implementirane u kompjuterski kod. Pored generatora slučajnih brojeva, opisane su procedure za integraciju jednačina kretanja, određivanje trenutka i vrste sudara, izračunavanje dinamičkih karakteristika elektrona nakon sudara i, konačno, za izračunavanje fluksa i balk transportnih koeficijenata.

U trećem poglavlju je detaljno opisana metoda rojeva naelektrisanih čestica za razvoj i normalizaciju preseka za rasejanje elektrona u gasovima. Predstavljeni su inicijalni i konačan skup preseka za rasejanje elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$  gasu i koraci koji su preduzeti sa ciljem konstrukcije kompletnog i samousaglašenog skupa preseka za ovaj gas. Izračunati su transportni koeficijenti i kritična polja u čistom  $\text{CF}_3\text{I}$  gasu i njegovim smešama sa Ar i  $\text{CO}_2$ .

U četvrtom poglavlju je analizirana tehnika kontinualnog reskaliranja roja elektrona u Monte Karlo simulacijama. Ova numerička procedura je automatizovana, izvršava se u toku rada simulacije i bazirana je na implementaciji fiktivnog procesa jonizacije, čija koliziona frekvencija ne zavisi od energije elektrona u posmatranom trenutku vremena. Ova numerička procedura je testirana primenom tehnike diskretnog reskaliranja i dupliranja roja elektrona, ali isto tako i primenom aproksimacije dva člana za rešavanje Boltzmanove jednačine. U nastavku poglavlja, proučavan je transport elektrona u  $\text{SF}_6$  i  $\text{CF}_3\text{I}$  gasovima i njihovim smešama u širokoj oblasti redukovanog električnog polja. Razmotreni su opaženi kinetički fenomeni na osnovu prostorno razloženih karakteristika roja, uključujući lokalno srednje energije i brzinske koeficijente za zahvat elektrona.

U petom poglavlju je konstruisan kompletan skup efektivnih preseka za rasejanje elektrona u  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  gasu. Za opis nehidrodinamičkog ponašanja efektivnog koeficijenta jonizacije, koje se ogleda u zavisnosti ove veličine od pritiska, konstruisan je dopunski skup preseka koji odlično reprodukuje ponašanje ove veličine sa promenom pritiska. Transport elektrona je posmatran u čistom  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  gasu i smešama ovog gasa sa Ar,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}_2$  i  $\text{SF}_6$ . Izračunata su kritična polja u svim gasnim smešama, a efekat pozitivne sinergije je opažen u smeši  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i  $\text{SF}_6$ .

U šestom poglavlju je konstruisan skup efektivnih preseka za rasejanje elektrona u  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ . Transportni koeficijenti elektrona i kritična polja su izračunati u čistom  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  gasu i njegovim smešama sa Ar,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}_2$  i  $\text{SF}_6$ .

Na osnovu jednačine balansa koncentracije naelektrisanih čestica i njihovog impulsa, u sedmom poglavlju su izvedene jednačine klasičnog fluidnog modela koji je upotrebljen za simulaciju strimera u jako elektronegativnim gasovima. Nedostaci klasičnog fluidnog modela su prevaziđeni razvojem korigovanog fluidnog modela na osnovu generalizacije jednačine kontinuiteta i fluksa gradijentne relacije na uslove prostorno nehomogenih električnih polja. Modeli su numerički implementirani u 1D i 1.5D i razvoj i propagacija strimera su simulirani u  $\text{CF}_3\text{I}$  gasu i njegovim smešama sa  $\text{SF}_6$  gasom.

U osmom poglavlju su razmotrene i upoređene dielektrične osobine  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  gasova sa  $\text{SF}_6$  gasom. Pokazano je da je veoma teško direktno odgovoriti na pitanje koji gasni dielektrik je najbolji. Na osnovu poređenja transportnih koeficijenata i kritičnih polja,  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  je superioran. Sa druge strane, ukoliko je strimer kreiran u ovim gasovima, najmanja rastojanja prelazi strimer u  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i ujedno se odlikuje se relativno malom provodnošću u odnosu na strimere u drugim gasovima. Dodatno, u smešama  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i  $\text{SF}_6$  je opažen efekat pozitivne sinergije, a to znači da je ova smeša gasova jedan od kandidata za zamenu  $\text{SF}_6$  gasa u sistemima za prenos električne struje.

U devetom poglavlju su analizirani sudarni i transportni procesi elektrona u parama žive i indijuma. Konstruisani su kompletni skupovi preseka za rasejanje elektrona u ovim parama metala

i izračunati su transportni koeficijenti u funkciji redukovanog električnog polja i temperature gasa. Negativna diferencijalna provodnost je opažena u parama žive na visokom pritisku zbog prisustva dimera žive i velikih energijskih gubitaka elektrona u neelastičnim sudarima sa neutralima ovog gasa. U pari indijuma je proučavana tranzicija lavine elektrona u negativan strimer i njegova propagacija u funkciji spoljašnjeg električnog polja i temperature gasa.

## Osnovni naučni doprinosi postignuti u okviru doktorske disertacije

Prvo su prikazani originalni i najvažniji naučni doprinosi disertacije, a u nastavku su data detaljna obrazloženja i dodatna pojašnjenja.

1. Primenom tehnike rojeva naelektrisanih čestica, konstruisan je kompletan i samousaglašen skup preseka za rasejanje elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$ , koji dobro reprodukuje eksperimentalne vrednosti transportnih koeficijenata dobijenih u impulsnom Taunzendovom eksperimentu, kako u čistom gasu, tako i u njegovim smešama sa  $\text{N}_2$  i  $\text{CO}_2$ .

2. Tehnika kontinualnog reskaliranja rojeva naelektrisanih čestica u Monte Karlo simulacijama je razvijena, testirana i implementirana u kompjuterski kod.

3. Koristeći tehniku kontinualnog reskaliranja u Monte Karlo simulacijama i numerička rešenja Bolcmanove jednačine u aproksimaciji dva člana, izračunati su transportni koeficijenti rojeva elektrona u čistim  $\text{SF}_6$  i  $\text{CF}_3\text{I}$  gasovima, i u njihovim smešama. U čistom  $\text{SF}_6$  gasu je opaženo opadanje srednje energije sa porastom električnog polja u energijskoj oblasti u kojoj zahvat elektrona kontroliše ponašanje roja. U oba gasa je primećen fenomen negativne diferencijalne provodnosti isključivo u balk brzini drifta, bez znakova istog efekta u profilima fluks brzine drifta. Ovi kinetički fenomeni su prvi put opaženi za elektrone u neutralnim gasovima, a za njihovu interpretaciju su korišćene prostorno razložene karakteristike roja elektrona, uključujući lokalno srednje energije i brzinske koeficijente za zahvat elektrona.

4. Konstruisan je kompletan i samousaglašen skup efektivnih preseka za rasejanje elektrona u  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ , koji dobro reprodukuje eksperimentalne vrednosti transportnih koeficijenata dobijenih u impulsnom Taunzendovom eksperimentu, kako u čistom gasu, tako i u njegovim smešama sa Ar,  $\text{N}_2$  i  $\text{CO}_2$  na fiksiranom pritisku. Pored ovog osnovnog skupa preseka, razvijen je i dodatni skup preseka, koji dobro opisuje nehidrodinamičko ponašanje brzinskog koeficijenta efektivne jonizacije sa promenom pritiska. Postignuto je izuzetno dobro slaganje između eksperimentalno vrednosti i rezultata za efektivan koeficijent jonizacije dobijenih u ovoj disertaciji, što je omogućilo veoma precizan proračun kritičnih polja u čistom  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i njegovim smešama sa Ar,  $\text{N}_2$  i  $\text{CO}_2$ .

5. Transportni koeficijenti elektrona su izračunati u smešama  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i  $\text{SF}_6$ . U ovoj smeši je opažen efekat pozitivne sinergije, koji se ogleda u porastu kritičnog polja u odnosu na  $\text{SF}_6$  sa porastom koncentracije  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  u smeši, iako je kritično polje  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  skoro dva puta manje od onog za  $\text{SF}_6$ . Efekat je interpretiran uz razmatranje energijske zavisnosti sudarnih procesa i funkciju raspodele elektrona u ovim smešama.

6. Konstruisan je kompletan i samousaglašen skup efektivnih preseka za rasejanje elektrona u  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$ . Ovaj skup efektivnih preseka dobro reprodukuje eksperimentalne vrednosti transportnih koeficijenata dobijenih u impulsnom Taunzendovom eksperimentu, u čistom gasu i u njegovim smešama sa Ar i  $\text{N}_2$ .

7. Na osnovu jednačina balansa za koncentraciju naelektrisanih čestica i njihovog impulsa, izvedene su jednačine klasičnog fluidnog modela. Model je proširen i generalizovan razvojem izvornog člana u jednačini kontinuiteta u red po gradijentima koncentracije elektrona. Na ovaj način je formulisana korigovan fluidan model, a koeficijenti razvoja izvornog člana su izračunati u Monte Karlo

simulacijama. Tranzicija lavine elektrona i propagacija strimera je proučavana u čistom  $\text{CF}_3\text{I}$  gasu i njegovim smešama sa  $\text{SF}_6$  gasom. Opažena je zavisnost karakteristika strimera, uključujući koncentraciju naelektrisanih čestica, raspodelu električnog polja i brzinu propagacije, od prirode transportnih koeficijenata i preciznosti metode koja je korišćena za njihov proračun. Osobine strimera se razlikuju u 1D i 1.5D, imajući u vidu različit način proračuna električnog polja u ove dve konfiguracije. Porastom koncentracije  $\text{CF}_3\text{I}$  gasa u smešama sa  $\text{SF}_6$  gasom, opažena je sporija tranzicija lavine u strimer i generalno bolje dielektrične osobine, uključujući manje koncentracije elektrona, slabije izražen efekat pojačanja polja na frontu strimera i manju provodnost u unutrašnjosti strimera.

8. Na osnovu međusobnog poređenja transportnih koeficijenata i kritičnih polja u  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  gasovima sa onima u  $\text{SF}_6$  gasu, utvrđeno je da  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  ima superiorne dielektrične osobine u odnosu na druge ispitivane gasove. Utvrđeno je da je kritično polje ovog gasa približno dva i po puta veće od onog za  $\text{SF}_6$  gas. Tranzicija lavine u negativan strimer se najteže i najsporije odigrava upravo u ovom gasu. Međutim, ukoliko dođe do tranzicije lavine u strimer, najsporija propagacija strimera je opažena u  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  gasu. Strimer u ovam gasu prelazi najmanja rastojanja u odnosu na inicijalan položaj i odlikuje ga veoma mala provodnost u svojoj unutrašnjosti.

9. Konstruisan je kompletan i samousaglašen skup preseka za rasejanje elektrona u parama žive. Ovaj skup preseka dobro reprodukuje eksperimentalne vrednosti transportnih koeficijenata. Posebna pažnja je posvećena proučavanju nehidrodinamičkih efekata koji se ogledaju u zavisnosti transportnih koeficijenata sa porastom pritiska i temperature. Utvrđeno je da su dimeri žive odgovorni za ovo ponašanje i konstruisan je efektivan presek koji opisuje energijske gubitke elektrona kao posledicu neelastičnih sudara sa ovim česticama. Opažen je efekat negativne diferencijalne provodnosti u profilu brzine drifta sa promenom pritiska, a interpretacija fenomena je bazirana na razmatranju izračunatih energijskih gubitaka elektrona u elastičnim i neelastičnim sudarima sa promenom pritiska pare žive.

10. Konstruisani su kompletni skupovi preseka za rasejanje elektrona na gasnim atomima indijuma koji se nalaze u osnovnom stanju  $(5s^25p)^2P_{1/2}$  i prvom pobuđenom metastabilnom stanju  $(5s^25p)^2P_{3/2}$ . Na osnovu ovih preseka i preseka za superelastične sudare koji su dobijeni na osnovu principa detaljnog balansa, izračunati su transportni koeficijenti elektrona na temperaturama od 0 K, 1260 K, 3260 K i 5260 K u funkciji redukovanoeg električnog polja.

11. Na osnovu izračunatih transportnih koeficijenata u funkciji redukovanoeg električnog polja i temperature pare indijuma, proučavani su razvoj i propagacija negativnih strimera u okviru klasičnog fluidnog modela. Ovo je prva simulacija strimerskog pražnjenja u parama indijuma. Opažena je brža tranzicija lavine elektrona u strimer sa porastom temperature pare indijuma. Koncentracija elektrona, pojačanje polja na frontu strimera i brzina propagacije strimera pokazuju značajnu osetljivost na temperaturu pare indijuma, odnosno na koncentraciju gasnih atoma indijuma koji se nalaze u prvom pobuđenom metastabilnom stanju, naručito u oblasti nižih vrednosti spoljašnjeg električnog polja.

U do sada publikovanim radovima mogu se pronaći skupovi preseka za rasejanje elektrona u  $\text{CF}_3\text{I}$  gasu različitog nivoa pouzdanosti. Ovi skupovi preseka nisu u mogućnosti da dobro reprodukuju transportne koeficijente koji su nedavno izmereni u impulsnom Taunzendovom eksperimentu De Urkiha i saradnika. Transportni koeficijenti elektrona, uključujući brzinu drifta, longitudinalan koeficijent difuzije i koeficijent jonizacije, koji su izmereni u ovom eksperimentu, predstavljaju referentan skup podataka koji je korišćen u ovoj disertaciji za analizu i razvoj kompletnog skupa preseka primenom tehnike rojeva naelektrisanih čestica. Na osnovu aproksimacije dva člana za rešavanje Bolcammnove jednačine i automatizovane procedure koja je napisana u MATLAB-u, modifikovan je inicijalan skup preseka koji se u dobroj meri sastoji od preseka koje su predložili Kimura i Nakamura. Za energije elektrona između 0.5 eV i 3 eV, presek za zahvat elektrona je zamenjen onim koji su razvili Alađadān i saradnici, a na većim energijama elektrona korišćeni su podaci Kristoforoua i Oltofa. Za vrednosti preseka za jonizaciju do 45 eV upotrebljene su vrednosti Kimure i Nakamure, a

na većim energijama korišćeni su teorijski proračuni Entonija i saradnika. Nakon reskaliranja preseka za transfer impulsa u elastičnim sudarima i preseka za elektronsku ekscitaciju, preseki su ekstrapolirani na veće energije i detaljno testirani. Fina podešavanja konačnog skupa preseka su urađena na osnovu Monte Karlo simulacija, imajući u vidu ograničenja u pogledu preciznosti proračuna aproksimacija dva člana za rešavanje Bolcmanove jednačine. Postignuto je odlično slaganje sa eksperimentalno određenim transportnim koeficijentima De Urkiha i saradnika u impulsnom Taunzendovom eksperimentu, ne samo u čistom gasu, već i u njegovim smešama sa Ar i CO<sub>2</sub>. Rezultujući skup preseka je kompletan, jer sadrži sve relevantne preseke za rasejanje elektrona, i samousaglašen jer dobro reprodukuje eksperimentalno određene transportne koeficijente u impulsnom Taunzendovom eksperimentu De Urkiha i saradnika i u drugim merenjima.

Jedan od velikih izazova za Monte Karlo metod u transportu elektrona u jako elektronegativnim gasovima je intenzivan gubitak čestica zbog velikih preseka za zahvat elektrona. U jako elektronegativnim gasovima nije neobično da dođe do nestanka svih elektrona u simulaciji i prekida izvršenja koda. Verovatnoća za ovakav scenario raste sa porastom pritiska pozadinskog gasa, jer sa jedne strane raste koliziorna frekvencija za zahvat elektrona, a sa druge strane veličina preseka za trojni zahvat u najvećem broju slučajeva raste sa porastom pritiska. Da bi se izbegao scenario u kome svi elektroni nestaju u simulaciji, u ovoj disertaciji je razvijena tehnika kontinualnog reskaliranja rojeva elektrona u Monte Karlo simulacijama. U literaturi postoji samo jedan rad u kome je predstavljena slična ideja. Ipak, tehnika kontinualnog reskaliranja koja je implementirana u naš Monte Karlo kompjuterski kod je originalna ideja, imajući u vidu da je za razliku od prethodno pomenute, ona potpuno automatizovana i po svojoj prirodi mnogo naprednija. U našoj metodi nije potrebno unapred podešavati kolizionu frekvenciju za fiktivan proces jonizacije, već se ovo podešavanje izvršava automatski tokom izvršenja kompjuterskog koda (engl. *on – the – fly*). U vremenskim trenucima u kojima se vrši izračunavanje dinamičkih karakteristika roja, koliziorna frekvencija za fiktivan proces jonizacije se bira da bude što je moguće bliže kolizionoj frekvenciji za zahvat elektrona. Nakon toga se vrši uniformno skaliranje roja, biranjem elektrona koji će biti duplirani, uz korišćenje slučajnih brojeva. Metoda je testirana na osnovu aproksimacije dva člana za rešavanje Bolcmanove jednačine i primenom dve preostale tehnike reskaliranja, koje smo za potrebe ove disertacije nazvali *tehnika diskretnog reskaliranja* i *tehnika dupliranja roja elektrona*. Ove dve tehnike su implementirane u kompjuterski kod, ali one ne počivaju na originalnim idejama u ovom radu, ranije su više puta pominjane u literaturi, i u tom smislu nisu detaljno diskutovane u ovoj disertaciji.

Nakon implementacije tehnika reskaliranja rojeva elektrona u kompjuterski kod, u ovoj disertaciji su po prvi put izračunati transportni koeficijenti elektrona u SF<sub>6</sub> i CF<sub>3</sub>I gasovima u oblastima redukovanih električnih polja u kojima zahvat elektrona kontroliše ponašanje roja. Činjenica da do sada u literaturi nisu izračunati transportni koeficijenti elektrona u jednom od najvažnijih industrijskih gasova kakav je SF<sub>6</sub> za redukovana polja manja od 30 Td je fascinantna, u najmanju ruku iznenađujuća. Opaženi su novi kinetički fenomeni u transportu elektrona u SF<sub>6</sub> i CF<sub>3</sub>I gasovima: (1) opadanje srednje energije elektrona sa porastom električnog polja u SF<sub>6</sub> gasu, i (2) negativna diferencijalna provodnost isključivo u balk brzini drifta u oba gasa, uz istovremeno odsustvo bilo kakvog znaka ovog fenomena u profilima fluksa brzine drifta. Oba kinetička fenomena su interpretirana na osnovu prostorno razloženih karakteristika roja elektrona, uključujući lokalno srednje energije i brzinske koeficijente za zahvat elektrona. Ove veličine su izračunate na sledeći način. Prostor u kome se prati evolucija roja je ograničen i podeljen u prostorne ćelije. Svaka ćelija sadrži 100 tačaka u kojima su izračunate lokalno srednje karakteristike roja elektrona. Kompjuterski kod je koncipiran na način da je moguće praćenje roja elektrona u realnom prostoru i prostoru koji je normiran na  $6\sigma$ , gde je  $\sigma$  standardna devijacija Gausove raspodele u prostoru. Na ovaj način, izračunavanjem srednje energije, srednje brzine i brzinskih koeficijenata za bilo koji sudarni proces u svakoj ćeliji, moguće je dobiti prostorne profile ovih veličina duž roja. Upravo su lokalno srednje energije i brzinski koeficijenti za zahvat elektrona omogućili da se opaženi kinetički fenomeni vizuelizuju i objasne.

U disertaciji su primenom tehnika rojeva naelektrisanih čestica predloženi kompletni skupovi

efektivnih preseka za rasejanje elektrona u  $C_3H_2F_4$  i  $C_4F_7N$ . Oba gasa pripadaju poslednjoj generaciji gasnih dielektrika. Istovremeno,  $C_3H_2F_4$  se odlikuje ultra niskim potencijalom za globalno zagrevanje, a imajući u vidu da je tačka ključanja ovog gasa relativno niska u odnosu na druge kandidate za zamenu  $SF_6$ , ovaj gas privlači sve više pažnje inženjera u visokonaponskoj tehnologiji. Za oba gasa, u literaturi se ne mogu pronaći preseki za individualne sudarne procese. U završnoj fazi pripreme ove disertacije objavljena su dva rada u kojima se mogu naći preseki za jonizaciju u  $C_4F_7N$ . Transportni koeficijenti elektrona u  $C_3H_2F_4$  su izmereni u dva nezavisna impulsa Taunzendovana eksperimenta, u grupama Džejmi De Urkiha i saradnika sa Nacionalnog Autonomnog Univerziteta Meksika i Krišćan Frenka i saradnika sa ETH Univerziteta u Cirihi. Obe grupe izmerenih transportnih koeficijenata su korišćena u ovoj disertaciji za razvoj kompletnog skupa efektivnih preseka za rasejanje elektrona u ovom gasu. Razvijen skup preseka dobro reprodukuje izmerene transportne koeficijente i kritična polja, ne samo u čistom  $C_3H_2F_4$  gasu već i njegovim smešama sa Ar i  $N_2$ . Pored osnovnog skupa preseka, razvijen je i dopunski skup efektivnih preseka koji odlično reprodukuje nehidrodinamičko ponašanje brzinskog koeficijenta efektivne jonizacije, kao posledica zavisnosti preseka za trojni zahvat od pritiska. Ukoliko se uporede rezultati koji su dobili Frenk i saradnici na modelovanju ove zavisnosti i rezultati ove disertacije, može se uočiti mnogo bolje slaganje rezultata postignutih u ovoj disertaciji sa eksperimentalno određenim koeficijentima jonizacije na raznim pritiscima.

U disertaciji su izračunati transportni koeficijenti i kritična polja u smešama  $C_3H_2F_4$  sa  $CO_2$  i  $SF_6$ . Analogno, ove veličine su izračunate u smešama  $C_4F_7N$  sa  $CO_2$  i  $SF_6$ . Za čist  $C_4F_7N$  gas, potvrđena je eksperimentalna vrednost visokog kritičnog električnog polja od 970 Td. Ovo je do sada najviša vrednost kritičnog električnog polja koja je zabeležena u literaturi, bez obzira na prirodu gasa. U odnosu na  $SF_6$  gas, kritično električno polje  $C_4F_7N$  gasa je približno dva i po puta veće. U smešama  $C_4F_7N$  sa  $CO_2$  i  $SF_6$ , kritično polje monotono opada sa smanjivanjem koncentracije  $C_4F_7N$  u smeši. Sa druge strane, u smešama  $C_3H_2F_4$  i  $SF_6$  je opažen efekat pozitivne sinergije. Ovaj efekat je veoma interesantan sa stanovišta transportne teorije elektrona, ali istovremeno i veoma važan za primene ove gasne smeše za izolaciju uređaja u sistemima za prenos električne energije. U ovoj disertaciji je pokazano da porastom koncentracije  $C_3H_2F_4$ , počevši od 40%  $SF_6$  u smeši, kritično električno polje gasne smeše raste, bez obzira na činjenicu da je kritično električno polje  $C_3H_2F_4$  približno dva puta manje u odnosu na  $SF_6$ . Ovo je veoma važan rezultat ukoliko uzmemo u obzir činjenicu da je tačka ključanja ovog gasa  $-19\text{ }^\circ\text{C}$ , što je jasan pokazatelj da se ova gasna smeša mora ozbiljno razmotriti kao alternativa čistom  $SF_6$  gasu u visokonaponskoj tehnologiji. Što se tiče mehanizma za nastanak efekta pozitivne sinergije, on je u priličnoj meri očigledan kada se razmotre energijska zavisnost preseka za rasejanje elektrona u ova dva gasa. Porastom koncentracije  $C_3H_2F_4$  u smeši, elektroni sve više dispiraju svoju energiju u velikom broju neelastičnih sudara koji vode ka vibracionoj ekscitaciji ovog molekula. Nakon što izgube svoju energiju, elektroni budu zahvaćeni od strane molekula  $SF_6$ , imajući u vidu da su preseki za zahvat ovog molekula značajno veći od preseka za zahvat elektrona molekula  $C_3H_2F_4$ . Ova fizička slika se reflektuje u funkciji raspodele koja je izračunata za gasne smeše  $C_3H_2F_4$  i  $SF_6$  i prikazana u ovoj disertaciji.

Na osnovu jednačina balansa za koncentraciju naelektrisanih čestica i njihovog impulsa, koje su dobijene integracijom Bolcmanove jednačine u brzinskom prostoru, izvedene su jednačine klasičnog fluidnog modela. Klasičan fluidni model je baziran na drift-difuzionoj aproksimaciji za koncentraciju elektrona, za jone se smatra da su stacionarni, efekti prostornog naelektrisanja u razvoju strimera su inkorporirani na osnovu numeričkih rešenja Puasonove jednačine, i konačno, sistem fluidnih jednačina je zatvoren primenjujući aproksimaciju lokalnog polja. Prema aproksimaciji lokalnog polja, transportni koeficijenti koji se koriste kao ulazni podaci u ovom modelu su funkcije lokalnog električnog polja. Ovo je opravdano ukoliko se uzme u obzir da je vreme relaksacije impulsa i energije elektrona značajno manje od vremenskih konstanti koje opisuju propagaciju strimera. Ovo je posledica visokog pritiska pozadinskog gasa, ali u nekim slučajevima kao što su strimeri u plemenitim gasovima, aproksimacija lokalnog polja nije adekvatna. Tada je potrebno razmotriti propagaciju



strimera na osnovu fluidnih modela višeg reda ili u PIC/MC simulacijama zbog nemogućnosti da elektroni relaksiraju svoju energiju i impuls na propagirajućem frontu.

U ovoj disertaciji je analiziran korigovan fluidni model strimera. Ovaj model je razvijen imajući u vidu nedostatke klasičnog modela. Zbog drastičnih aproksimacija koje su pretpostavljene tokom izvođenja jednačina klasičnog modela, nije jasno koja familija transportnih koeficijenata, fluks ili balk, treba biti upotrebljena za ulazne podatke. Činjenica da se fluks i balk transportni koeficijenti mogu razlikovati i do nekoliko redova veličine čine ovaj problem ozbiljnim naučnim izazovom, u najmanju ruku ovo je ozbiljano pitanje u domenu modelovanja neravnotežne plazme. Ovaj problem se može rešiti razvojem izvornog člana u jednačini kontinuiteta u red po gradijentima koncentracije. Ova jednačina je jednako validna za hidrodinamičke i nehidrodinamičke situacije koje se, u ovde razmatranom kontekstu, svode na prostorno uniformna i prostorno neuniformna električna polja. U slučaju prostorno neuniformnih polja, generalizacija ove jednačine podrazumeva numeričku implementaciju gde su transportni koeficijenti funkcije koordinata. U hidrodinamičkim situacijama to nije slučaj, pa se rezultujuća difuziona jednačina može i analitički rešiti za neke standardne početne uslove za koncentraciju elektrona. U svakom slučaju, korigovan model može koristiti kako fluks tako i balk transportne koeficijente, ali izvorni član u jednačini kontinuiteta ima drugačiji oblik za ove dve familije transportnih koeficijenata. Zajedničko za oba ova slučaja je neophodnost da se izračunaju koeficijenti razvoja izvornog člana po gradijentima koncentracije elektrona. U disertaciji su ove veličine razdvojene, imajući u vidu različite doprinose koje potiču od zahvata elektrona i jonizacije, i izračunate se u Monte Karlo simulacijama. Ovo je bilo neophodno s obzirom na prirodu sudarnih nekonzervativnih procesa u jako elektronegativnim gasovima.

Klasični i korigovni fluidni modeli za proučavanje razvoja i propagacije strimera u jako elektronegativnim gasovima su u ovoj disertaciji numerički implementirani u 1D i 1.5D. Drift-difuziona aproksimacija u klasičnom fluidnom modelu i generalizovana jednačina kontinuiteta u korigovanom fluidnom modelu imaju identičan matematički oblik. Ove jednačine se numerički rešavaju u 1D, a jedina razlika koja postoji između 1D i 1.5D konfiguracija je tretman električnog polja. Numerička rešenja Puasonove jednačine nisu jednaka u 1D i 1.5D i zbog toga se makroskopske osobine strimera razlikuju. U disertaciji su ove razlike proučavane u slučaju razvoja i propagacije strimera u smešama  $\text{CF}_3\text{I}$  i  $\text{SF}_6$ . Opažena je značajna osetljivost strimera na prirodu transportnih koeficijenata. Poređenjem rezultata klasičnog fluidnog modela sa balk transportnim koeficijentima i korigovanog fluidnog modela, pokazano je da se brzine propagacije strimera odlično slažu, baš kao i koncentracije elektrona na frontu strimera. Sa druge strane, što se tiče koncentracije elektrona u unutrašnjosti strimera, iza propagirajućeg fronta gde je spoljašnje električno polje zaklonjeno električnim poljem prostornog naelektrisanja, bolje slaganje je opaženo između klasičnog modela sa fluks transportnim koeficijentima i korigovanog fluidnog modela. Na osnovu rezultata klasičnog fluidnog modela, opažena je značajna osetljivost osobina strimera na razlike između transportnih koeficijenata koje su izračunate na osnovu aproksimacije dva člana za rešavanje Bolcmanove jednačine i onih dobijenih u Monte Karlo simulacijama.

Na osnovu poređenja transportnih koeficijenata elektrona i kritičnih polja između  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$  i  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  gasova sa jedne strane i  $\text{SF}_6$  gasa sa druge, utvrđeno je da  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  ima superiorne dielektrične osobine. Kritično polje ovog gasa je 970 Td, što je približno dva i po puta veće kritično polje u odnosu na  $\text{SF}_6$  gas. Međutim, ovaj gas ima visoku tačku ključanja od  $-4.7$  °C i relativno visok potencijal globalnog zagrevanja koji se nalazi u opsegu između 1490 i 3646 u odnosu na jediničnu vrednost  $\text{CO}_2$  gasa. Ovo znači da se ovaj gas mora koristiti u gasnim smešama sa  $\text{N}_2$  i  $\text{CO}_2$  za primene u visokonaponskoj tehnologiji. U gasnim smešama sa Ar,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}_2$  i  $\text{SF}_6$ , kritično polje monotono opada sa porastom koncentracije ovih gasova u smeši. Efekti pozitivne sinergije nisu opaženi u smešama  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  i drugih gasova.

Na osnovu rezultata fluidnog modelovanja razvoja i propagacije negativnog strimera u  $\text{CF}_3\text{I}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_2\text{F}_4$ ,  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  i  $\text{SF}_6$ , ustanovljeno je da je tranzicija lavine elektrona u strimer veoma otežana u  $\text{C}_4\text{F}_7\text{N}$  gasu, imajući u vidu njegovo izuzetno visoko kritično polje. Dakle, da bi uopšte došlo do

tranzicije lavine elektrona u strimer, potrebna su električna polja reda veličine oko 1000 Td. Ovde treba biti oprezan, jer ovaj rezultat važi za idealizovane uslove naših simulacija i isključivo za negativne strimere. Pozitivni strimeri u realnim *point – to – plane* geometrijama mogu biti inicirani na mnogo manjim električnim poljima u odnosu na kritično polje. Ako se uporede osobine formiranih strimera u ovim gasovima, što se može postići u nezavisnim proračunima gde spoljašnje električno polje ima drugačiju vrednost za svaki gas, ali tako da bude za određeni procenat veće od kritičnog polja za svaki gas, onda dobre dielektrične osobine pokazuje  $C_3H_2F_4$ . Za propagaciju strimera u ovom gasu potrebna su mnogo manja električna polja u odnosu na druge gasove, a to znači da su koeficijent jonizacije i brzina drifta elektrona značajno manji u odnosu na druge gasove, pa negativni strimeri u ovom gasu prelaze najmanja rastojanja u odnosu na inicijalan položaj i odlikuju se relativno malom provodnošću u strimerskom kanalu.

U drugom delu disertacije razmatrani su sudarni i transportni procesi elektrona u parama žive i indijuma. Osnovni motivacioni faktori za ova proučavanja su modelovanje izvora svetlosti koji funkcionišu na principima električnih gasnih pražnjenja u smešama plemenitih gasova, para metala i drugih gasova. U literaturi se mogu pronaći skupovi preseka za rasejanje elektrona u pari žive različitog nivoa pouzdanosti. U ovoj disertaciji je razvijen kompletan i samousaglašen skup preseka za rasejanje elektrona u parama žive na osnovu podataka za preseke individualnih sudarnih procesa koji su dobijeni u *ab initio* teorijskim proračunima i eksperimentalnim merenjima presaka, kao i na osnovu rezultata koji su dobijeni primenom tehnike rojeva naelektrisanih čestica. Ovaj skup preseka dobro reprodukuje eksperimentalne vrednosti transportnih koeficijenata na nižim pritiscima pare žive. Opaženo neslaganje na višim pritiscima i temperaturama je bilo motivacija za dodatna istraživanja. Utvrđeno je da porastom pritiska pare žive raste koncentracija dimera žive, a elektroni u neelastičnim sudarima sa ovim česticama veoma efikasno gube svoju energiju. Prisustvo dimera je modelovano implementacijom efektivnog preseka koji na izvestan način opisuje sudarne procese sa dimerima žive. Uključivanjem ovog preseka u originalan skup, postignuto je odlično slaganje između eksperimentalno izmerenih brzina drifta i naših proračuna na raznim pritiscima i temperaturama, čime je nedvosmisleno demonstrirana ispravnost naše procedure. Opažena je negativna diferencijalna provodnost u profilima brzine drifta na višim pritiscima. Ovaj fenomen je objašnjen razmatranjem odnosa energijskih gubitaka elektrona u elastičnim i neelastičnim sudarima sa promenom pritiska. Proučavan je uticaj termalnog kretanja gasnih atoma žive na transport elektrona i uočeni su različiti režimi ponašanja transportnih koeficijenata u zavisnosti od temperature gasa.

U ovoj disertaciji su po prvi put konstruisani kompletni skupovi preseka za rasejanje elektrona na gasnim atomima indijuma koji se nalaze u osnovnom stanju  $(5s^25p)^2P_{1/2}$  i prvom pobuđenom metastabilnom stanju  $(5s^25p)^2P_{3/2}$ . U saradnji sa kolegama koji se bave teorijskim proračunima i eksperimentalnim merenjima preseka, sudarni preseki za individualne procese su konstruisani, skalirani i ekstrapolirani. Kompletni skupovi preseka za rasejanje elektrona na gasnim atomima indijuma sadrže preseke za transfer impulsa u elastičnim sudarima, preseke za elektronske ekscitacije i elektronsku sudarnu jonizaciju. Da bi se na validan način opisao uticaj termalnog kretanja gasnih atoma indijuma na transport elektrona, bilo je neophodno izračunati preseke za superelastične sudare. Preseki su izračunati na osnovu principa detaljnog balansa, koji podrazumeva poznavanje frakcionih populacija pobuđenih stanja. Ove populacije su izračunate na osnovu Maksvel-Bolcmanove statistike.

Transport elektrona u pari indijuma je proučavan u funkciji redukovano električnog polja i temperature gasa. Razmatrani opsezi električnih polja i temperatura gasa su [0.01 Td - 10000 Td] i [0 K - 5260 K], respektivno. Utvrđeno je da se na temperaturi pare indijuma od 1260 K, 86% gasnih atoma nalazi u osnovnom stanju  $(5s^25p)^2P_{1/2}$ , a 14% u prvom pobuđenom metastabilnom stanju  $(5s^25p)^2P_{3/2}$ . Na temperaturi od 3260 K, 57% atoma se nalazi u osnovnom stanju, a 43% u prvom pobuđenom metastabilnom stanju. Na temperaturi od 5260 K, 48% atoma indijuma se nalazi u osnovnom stanju, a 52% u prvom pobuđenom metastabilnom stanju. U razmatranom opsegu temperature pare indijuma, koncentracije viših pobuđenih stanja atoma indijuma su manje od 1% i nisu uzete u obzir u proračunima transportnih koeficijenata.

Opažena su tri režima u transportu elektrona u pari indijuma. U režimu pare, elektroni se nalaze u termodinamičkoj ravnoteži sa gasnim atomima indijuma i njihove funkcije raspodele su termalni Maksvelijani. U režimu pare, transportni koeficijenti se ne menjaju sa promenom električnog polja i upadljivo zavise od temperature gasa. U prelaznom režimu, elektroni više nisu u termodinamičkoj ravnoteži sa gasnim atomima indijuma, ali njihove vrednosti i dalje zavise od temperature. Konačno, u režimu polja, transportni koeficijenti ne zavise od temperature gasa, a njihovo ponašanje u potpunosti kontroliše električno polje. U režimu pare, na fiksiranom redukovanom električnom polju, sa porastom temperature srednja energija i difuzioni koeficijenti takođe rastu, a brzina drifta opada. Transportni koeficijenti koji su dobijeni u aproksimaciji hladnog gasa ( $T = 0$  K) pokazuju složenije ponašanje. Jedan od primera ovog složenijeg ponašanja je negativna diferencijalna provodnost u profilu brzine drifta.

Na osnovu izračunatih transportnih koeficijenata u funkciji redukovanog električnog polja i temperature pare indijuma, proučavani su tranzicija lavine elektrona u negativan strimer i njegova propagacija u okviru klasičnog fluidnog modela. Opažena je brža tranzicija lavine elektrona u strimer sa porastom temperature pare indijuma. Koncentracija elektrona, pojačanje polja na frontu strimera i brzina propagacije strimera pokazuju značajnu osetljivost na temperaturu pare indijuma, odnosno na koncentraciju gasnih atoma indijuma koji se nalaze u prvom pobuđenom metastabilnom stanju, naročito u oblasti nižih vrednosti spoljašnjeg električnog polja.

Ova disertacija otvara mogućnosti za nova istraživanja u bliskoj budućnosti. U domenu razvoja preseka za rasejanje elektrona, skupovi efektivnih preseka za rasejanje elektrona u  $C_3H_2F_4$  i  $C_4F_7N$  gasovima se mogu unaprediti implementacijom budućih preseka za individualne sudarne procese koji će biti dobijeni u teorijskim proračunima ili u direktnim eksperimentalnim merenjima preseka. Drugi način za unapređenje ovih preseka biće korišćenje budućih merenja transportnih koeficijenata za rojeve elektrona u širim oblastima redukovanih električnih polja. Unapređeni skupovi preseka će omogućiti precizniji proračun transportnih koeficijenata i kritičnih polja ne samo u čistim  $C_3H_2F_4$  i  $C_4F_7N$  gasovima, već i njihovim smešama sa drugim industrijski relevantnim gasovima.

Buduća proučavanja transporta elektrona u jako elektronegativnim gasovima zahtevaju optimizaciju numeričkih procedura za numeričko rešavanje Bolcmanove jednačine. Jedan od načina da se ovo postigne u domenu momentne metode je napuštanje koncepta razvoja funkcije raspodele u brzinskom prostoru po Sonine polinomima. Ovaj koncept i asociirane numeričke tehnike za integraciju kolizionog operatora i proračun matričnih elemenata nije dovoljno pouzdan kada funkcija raspodele jako odstupa od ravnotežnog Maksvelijana, pogotovo u prisustvu efekta grejanja roja zahvatom niskoenergijskih elektrona. U ovoj situaciji, zbog preraspodele elektrona u brzinskom prostoru, funkcija raspodele je depopulisana u niskoenergijskom delu, a sa druge strane jako sporo opada u oblastima visokih energija. Traganje za adekvatnom numeričkom tehnikom za prevazilaženje ovog problema u rešavanju Bolcmanove jednačine je svakako jedan od mogućih pravaca istraživanja u kontekstu razvoja metodologije za proučavanje transporta naelektrisanih čestica u jako elektronegativnim gasovima.

Transport elektrona u jako elektronegativnim gasovima se može u bliskoj budućnosti proučavati u ukrštenim električnim i magnetskim poljima. Dodatna kontrola dielektričnih osobina jako elektronegativnih gasova može se postići menjanjem intenzitet magnetskog polja i ugla između električnog i magnetskog polja. Bilo bi jako zanimljivo proučavati sinergiju magnetnog polja i nekonzervativnih procesa i videti na koji način se može postići dodatna kontrola kritičnih polja i drugih parametara koji su od interesa za gasne dielektrike.

Transport elektrona u jako elektronegativnim gasovima se može u bliskoj budućnosti proučavati u vremenski promenljivim električnim i magnetskim poljima. Bilo bi zanimljivo analizirati efekte vremenske nelokalnosti u prisustvu veoma snažnog zahvata elektrona. Prisustvo vremenski zavisnog magnetnog polja koje se nalazi pod proizvoljnim uglom i pod proizvoljnom fazom u odnosu na električno polje zakomplikovaće dodatno celu situaciju. Međutim, upravo ovaj scenario je bitan u modelovanju induktivno spregnutih plazmi, gde se velika prostorna neuniformnost električnog i magnetnog polja, kao i uglova i faza između njih, upravo može modelovati na ovaj način. Jedan od

mogućih pravaca istraživanja je modelovanje transporta elektrona u prostorno periodičnim poljima, što je scenario od interesa za proučavanja strijacija u jako elektronegativnim gasovima. Na istoj liniji istraživanja, proučavanje transporta elektrona u stacionarnom Taunzendovom eksperimentu bilo bi jako korisno, jer se upravo ovi eksperimenti koriste za određivanje koeficijenata jonizacije i zahvata elektrona u gasovima.

Buduća istraživanja strimerskih pražnjenja u jako elektronegativnim gasovima od posebnog su interesa. Jedan od prvih koraka u budućem radu je razmatranje detačmenta elektrona sa negativnih jona, imajući u vidu veliki broj negativnih jona koji nastaje procesom zahvata elektrona. Na istoj liniji budućeg rada potrebno je razmotriti rekombinaciju pozitivnih i negativnih jona i rekombinaciju pozitivnih jona i elektrona sa ciljem realističnijeg opisa koncentracije naelektrisanih čestica koje će neminovna uticati na dinamiku propagacije strimera. Fluidni modeli strimerskih pražnjenja u jako elektronegativnim gasovima dalje se mogu unaprediti razvojem sofisticiranih modela višeg reda. Pored jednačina balansa za koncentraciju naelektrisanih čestica i njihovog impulsa, fluidni modeli višeg reda uključuju jednačine balansa za srednju energiju, a ukoliko je neophodno i jednačine balansa momenata višeg reda. Fluidni modeli višeg reda se zatvaraju aproksimacijom srednje energije, a ulazne veličine su kolizione frekvence za različite sudarne procese upravo u funkciji srednje energije. Fluidni modeli višeg reda mogu biti upotrebljeni za proučavanje nelokalnih efekata, kako na frontu propagacije, tako i u unutrašnjosti strimera u situacijama u kojima su vremenske skale za propagaciju uporedive sa vremenskim konstantama za relaksaciju energije i impulsa elektrona.

Razvoj fluidnih, PIC/MC i hibridnih modela u 2D i 3D u jako elektronegativnim gasovima je od velikog značaja za modelovanje eksperimenata i situacija koje se mogu sresti u uređajima za prenos električne energije koje je potrebno gasno izolovati. Posebno je važno razmotriti problem inicijalizacije pozitivnih i negativnih strimera i njihove propagacije u jako elektronegativnim gasovima u tzv. *point – to – plane* geometriji. Poseban izazov u modelovanju propagacije pozitivnih strimera jeste razvoj modela foto-jonizacije u jako elektronegativnim gasovima, mada se ovaj problem može prevazići uključivanjem odgovarajućeg nivoa pozadinske jonizacije. Modelovanje strimera u ovoj geometriji u 3D zahteva veoma kompleksan matematički aparat za rešavanje parcijalnih diferencijalnih jednačina. Softverska okruženja i numeričke platforme kao što je AMREX ili CHOMBO sa implementiranom blok-strukturiranom adaptivnom mrežom za rešavanje parcijalnih diferencijalnih jednačina mogu biti od velike koristi u ovim budućim aktivnostima.

Što se tiče budućih istraživanja u domenu modelovanja transporta elektrona u parama metala, jedna od budućih aktivnosti je konstrukcija kompletnih i samousaglašenih skupova preseka za rasejanje elektrona u metalnim parama natrijuma, magnezijuma, cinka i cezijuma. Razumevanje sudarnih i transportnih osobina elektrona u ovim parama metala od velikog su značaja u modelovanju izvora svetlosti. Na istoj liniji budućih istraživanja, potrebno je razmotriti sudarne i transportne procese u parama indijum-jodida i indijum-bromida. Kod lampi sa induktivno spregnutom plazmom, obećavajuće rezultate je pokazala vodena para, pa je svakako od velikog značaja razmotriti transport elektrona u vodenoj pari u ukrštenim električnim i magnetskim poljima.

# Literatura

- [1] Christophorou L G. *Adv. Electron. Electron Phys.*, 46:55, (1978).
- [2] Liebermann M A and Lichtenberg A J. *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing*. New York: John Wiley and Sons, (1994).
- [3] Granier A, Nicolazo F, Vallee C, Gouillet A, Turban G, and Grolleau B. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 6:147, (1997).
- [4] Sheehan D P and Rynn N. *Rev. Sci. Instrum.*, 59:1369, (1988).
- [5] Grisham L R and Kwan J W. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A*, 606:83, (2009).
- [6] Bošnjaković D, Petrović Z Lj, and Dujko S. *J. Instrum.*, 9:P09012, (2014).
- [7] Bošnjaković D, Petrović Z Lj, and Dujko S. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 49:405201, (2016).
- [8] White R D, Ness K F, and Robson R E. *Appl. Surf. Sci.*, 192:26, (2002).
- [9] White R D, Robson R E, Dujko S, Nicoletopoulos P, and Li B. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 42:194001, (2009).
- [10] Loffhagen D and Sigener F. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 18:034006, (2009).
- [11] Petrović Z Lj, Raspopović Z M, Dujko S, and Makabe T. *Appl. Surf. Sci.*, 192:1, (2002).
- [12] Longo S. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 15:S181, (2006).
- [13] Petrović Z Lj, Dujko S, Marić D, Malović G, Nikitović Ž, Šašić O, Jovanović J, Stojanović V, and Radmilović-Rađenović M. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 42:194002, (2009).
- [14] Nijdam S, Teunissen J, and Ebert U. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 29:103001, (2020).
- [15] von Engel A. *Ionized Gases*. Oxford: Clarendon, (1965).
- [16] Raether H. *Electron Avalanches and Breakdown in Gases*. London: Butterworth, (1964).
- [17] Huxley L G H and Crompton R W. *The Diffusion and Drift of Electrons in Gases*. London: Wiley, (1974).
- [18] Christophorou L G and Hunter S R. *Electron-Molecule Interactions and Their Applications*, volume 2. New York: Academic Press, (1984).

- [19] Christophorou L G and Dale S J. *Encyclopedia of Physical Science and Technology*, volume 4. New York: Academic Press, (1987).
- [20] Christophorou L G. *Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res.*, A268:424, (1988).
- [21] Christophorou L G and Pinnaduwege L A. *IEEE Trans. Electr. Insul.*, 25:55, (1990).
- [22] Pedersen A. *IEEE Trans. Electr. Insul.*, 24:721, (1989).
- [23] Xiao D. *Gas Discharge and Gas Insulation*. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University Press, Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, (2016).
- [24] Arora R and Mosch W. *High Voltage and Electrical Insulation Engineering*. New Jersey: Wiley, IEEE Press, (2011).
- [25] Kind D and Karner H. *High Voltage Technology*. Springer, (2016).
- [26] Beroual A and Haddad A M. *Energies*, 10:1216, (2017).
- [27] Seeger M, Smeets R, Yan J, Ito H, Claessens M, Dullni E, Franck C M, Gentils F, Hartmann W, Kieffel Y, Jia S, Jones G, Mantilla J, Pawar S, Rabie M, Robin-Jouan P, Schellekens H, Spencer J, Uchii T, Lia X, and Yanabu S. *ELECTRA*, CIGRE's bimonthly digital magazine, April (2007).
- [28] Rabie M and Franck C. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 25:649, (2018).
- [29] Petrović Z Lj, Šuvakov M, Nikitović Ž, Dujko S, Šašić O, Jovanović J, Malović G, and Stojanović V. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 16:S1, (2007).
- [30] White R D, Dujko S, Robson R E, Petrović Z Lj, and McEachran R P. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 19:034001, (2010).
- [31] Phelps A V. *Rev. Mod. Phys.*, 40:399, (1968).
- [32] Crompton R W. *Adv. At. Mol. Opt. Phys.*, 32:97, (1994).
- [33] Hake R D and Phelps A V. *Phys. Rev*, 158:70, (1967).
- [34] Šašić O, Dujko S, Makabe T, and Petrović Z Lj. *Chem. Phys.*, 398:154, (2012).
- [35] Šašić O, Dupljanin S, de Urquijo J, and Petrović Z Lj. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 46:325201, (2013).
- [36] Petrović Z Lj, Raspopović Z M, Stojanović V D, Jovanović J V, Malović G, Makabe T, and de Urquijo J. *Appl. Surf. Sci.*, 253:6619, (2007).
- [37] Jovanović J V, Vrhovac S B, and Petrović Z Lj. *Eur. Phys. J. D*, 21:335, (2002).
- [38] Jovanović J V, Stojanović V, Raspopović Z, de Urquijo J, and Petrović Z Lj. *Plasma Sources Sci. Technol.*, (2019).
- [39] Christophorou L G, McCorkle D L, and Anderson V E. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 4:1163, (1971).
- [40] Phelps A V and van Brunt R J. *J. Appl. Phys.*, 64:4269, (1988).
- [41] Christophorou L G and Olthoff J K. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 29:267, (2000).

- [42] Jarvis G K, Kennedy R A, and Mayhew C A. *Int. J. Mass Spectrom.*, 205:253, (2001).
- [43] Dahl D A and Franck C M. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 46:445202, (2013).
- [44] Rabie M and Franck C. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 22:296, (2015).
- [45] Christophorou L G and Olthoff J K. *Fundamental Electron Interactions with Plasma Processing Gases*. New York: Springer, (2004).
- [46] Hunter S R and Christophorou L G. *J. Chem. Phys.*, 80:6150, (1984).
- [47] Novak J P and Frechette M F. *J. Appl. Phys.*, 63:2570, (1988).
- [48] Petrović Z Lj, Wang W C, and Lee L C. *J. Appl. Phys.*, 64:1625, (1988).
- [49] Petrović Z Lj, Wang W C, Suto M, Han J C, and Lee L C. *J. Appl. Phys.*, 67:675, (1990).
- [50] Raju G G. *Gaseous Electronics: Theory and Practice*. Boca Raton: CRC Press Taylor & Francis (2006).
- [51] Raju G G. *Gaseous Electronics: Tables, Atoms, and Molecules*. Boca Raton: CRC Press Taylor & Francis (2012).
- [52] Dujko S. PhD thesis, James Cook University, Townsville, Australia, (2009).
- [53] Dujko S, White R D, Petrović Z Lj, and Robson R E. *Phys. Rev. E*, 81:046403, (2010).
- [54] Dujko S, White R D, Petrović Z Lj, and Robson R E. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 20:024013, (2011).
- [55] Dujko S, Raspopović Z M, and Petrović Z Lj. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 38:2952, (2005).
- [56] Dujko S, White R D, Ness K F, Petrović Z Lj, and Robson R E. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 39:4788, (2006).
- [57] Dujko S, White R D, and Petrović Z Lj. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 41:245205, (2008).
- [58] Raspopović Z M, Sakadžić S, Bzenić S, and Petrović Z Lj. *IEEE Trans. Plasma Sci.*, 27:1241, (1999).
- [59] Vrhovac S and Petrović Z Lj. *Phys. Rev. E*, 53:4012, (1996).
- [60] Robson R E, White R D, and Petrović Z Lj. *Rev. Mod. Phys.*, 77:1303, (2005).
- [61] Robson R E. *J. Chem. Phys.*, 85:4486, (1986).
- [62] Dujko S, Ebert U, White R D, and Petrović Z Lj. *Jap. J. Appl. Phys.*, 50:08JC01, (2011).
- [63] Robson R E. *Aust. J. Phys.*, 44:685, (1991).
- [64] Thomas W R L. *J. Phys. B*, 2:551, (1969).
- [65] Thomas R W L and Thomas W R L. *J. Phys. B*, 2:562, (1969).
- [66] Tagashira H, Sakai Y, and Sakamoto S. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 10:1051, (1977).
- [67] Taniguchi T, Tagashira H, and Sakai Y. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 10:2301, (1977).

- [68] Dyatko N A, Napartovich A P, Petrović Z Lj, Raspopović Z M, and Sakadžić S. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 33:375, (2000).
- [69] Dujko S, Raspopović Z M, Petrović Z Lj, and Makabe T. *IEEE Trans. Plasma Sci.*, 31:711, (2003).
- [70] Dyatko N A and Napartovich A P. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 32:3169, (1999).
- [71] Nolan A M, Brennan M J, Ness K F, and Wedding A B. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 30:2865, (1997).
- [72] White R D, Robson R E, and Ness K F. *Phys. Rev. E*, 60:7457, (1999).
- [73] Mirić J, Bošnjaković D, Simonović I, Petrović Z Lj, and Dujko S. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 25:065010, (2016).
- [74] Rabie M and Franck C M 203 (2016) 268. *Comp. Phys. Commun.*, 203:268, (2016).
- [75] Biagi S F. *Nucl. Instrum. Methods A*, 421:234, (1999).
- [76] Morrow R. *Phys. Rev. A*, 35:1778, (1987).
- [77] Morrow R. *J. Appl. Phys.*, 63:5171, (1988).
- [78] Dhali S K and Pal A K. *J. Appl. Phys.*, 63:1355, (1988).
- [79] Gao Q, Niu C, Adamiak K, Yang A, Rong M, and Wang X. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 27:115001, (2018).
- [80] Luo B, He H, Cheng C, Xia S, Du W, Bian K, and Chen W. *IEEE Trans. Dielectr. Electric. Insul.*, 27:782, (2020).
- [81] Wu C and Kunhardt E E. *Phys. Rev. A*, 37:4396, (1988).
- [82] Wormeester G, Pancheshnyi S, Luque A, Nijdam S, and Ebert U. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 43:505201, (2010).
- [83] Li C, Ebert U, and Hundsdorfer W. *J. Comput. Phys.*, 231:1020, (2012).
- [84] Chanrion O and Neubert T 227 (2008) 7222. *J. Comput. Phys.*, 227:7222, (2008).
- [85] Luque A, Ratushnaya V, and Ebert U. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 41:234005, (2008).
- [86] Bagheri B, Teunissen J, Ebert U, Becker M M, Chen S, Ducasse O, Eichwald O, Loffhagen D, Luque A, Mihailova D, Plewa J M, van Dijk J, and Yousfi M. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 27:095002, (2018).
- [87] Francisco H, Teunissen J, Bagheri B, and Ebert U. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 30:115007, (2021).
- [88] Dujko S, Markosyan A H, White R D, and Ebert U. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 46:475202, (2013).
- [89] Teunissen J and Ebert U. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 25:044005, (2016).
- [90] Li C, Ebert U, and Hundsdorfer W. *J. Comp. Phys.*, 229:200, (2010).
- [91] Bošnjaković D. PhD thesis, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija, (2016).



- [92] James D, Christophorou L, and Mathis R. *New unitary and multicomponent gaseous dielectrics, Gaseous dielectrics II*. Amsterdam: Elsevier (1980). pp. 115.
- [93] Wootton R, Dale S, and Zimmerman N. *Electric strength of some gases and gas mixtures, Gaseous dielectrics II*. New York, Oxford, Toronto, Sydney, Paris, Frankfurt: Pergamon Press (1980). pp. 137.
- [94] Pace M, Christophorou L, James D, Pai R, Mathis R, and Bouldin D. *IEEE Trans. Electr. Insul.*, EI-13:31, (1978).
- [95] Egüz E A, Pachin J, and Franck C M. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 55:315203, (2022).
- [96] Kitsinelis S, Zissis G, and Fokitis E. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 42:045209, (2009).
- [97] Friedl R and Fantz U. *New J. Phys.*, 14:043016, (2012).
- [98] Uhrlandt D, Bussiahn R, Gorchakov S, Lange H, Loffhagen D, and Notzold D. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 38:3318, (2005).
- [99] Garamoon A A and Abdelhaleem A S. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 12:2181, (1979).
- [100] Braglia G L, Diligenti M, Wilhelm J, and Winkler R. *Il Nuovo Cimento*, 12:257, (1990).
- [101] Liu J and Raju G G. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 25:167, (1992).
- [102] Mulders H C J. PhD thesis, Eindhoven University of Technology, Eindhoven, Netherlands, (2010).
- [103] Hayashi D, Hilbig R, Körber A, Schwan S, Scholl R, Boerger M, and Huppertz M. *Appl. Phys. Lett.*, 96:061503, (2010).
- [104] Ögün C M, Truong W, Kaiser C, Kling R, and Heering W. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 47:285202, (2014).
- [105] Fedorov P P, Popov A I, and Simoneaux R L. *Russ. Chem. Rev.*, 86:240, (2017).
- [106] Hikita M, Ohtsuka S, Okabe S, and Ueta G. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 16:1413, (2009).
- [107] Okabe S, Hayakawa N, Murase H, Hama H, and Okubo H. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 13:327, (2006).
- [108] Bujotzek M and Seeger M. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 20:845, (2013).
- [109] Hayakawa N, Hatta K, Okabe S, and Okubo H. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 13:842, (2006).
- [110] Li C, Teunissen J, Nool M, Hundsdorfer W, and Ebert U. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 21:055019, (2012).
- [111] Škoro N, Marić D, Malović G, Graham W G, and Petrović Z Lj. *Phys. Rev. E*, 84:055401(R), (2011).
- [112] Torres C, Rayes P G, Castillo F, and Martinez H. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 370:012067, (2012).
- [113] Marić D, Savić M J, Škoro N, Radmilović-Rađenović M, Malović G, and Petrović Z Lj. *Eur. Phys. J. D*, 68:155, (2014).

- [114] Sivoš J, Marić D, Malović G N, and Petrović Z Lj. *Eur. Phys. J. D*, 74:64, (2020).
- [115] Okubo H and Beroual A. *IEEE Electr. Insul. Magaz.*, 27:34, (2011).
- [116] Cooper F S. *Gas-insulated electric device*. United States Patent Office US2221670, (1937).
- [117] Brenninkmeijer C A. *Environ. Sci. Technol.*, 32:3077, (1998).
- [118] Dervos C and Vassiliou P. *J. Air Waste Manage. Assoc.*, 50:137, (2000).
- [119] Blackman J and Kantamaneni R. *Gaseous Dielectr.*, 10:457, (2004).
- [120] Niemeyer L. *Gaseous Dielectrics*, 8:459, (1998).
- [121] Christophorou L G, Olthoff J K, and Green D S. US Department of Commerce, Technology Administration, National Institute of Standards and Technology. (1997).
- [122] Uchii T, Hoshina Y, Kawano H, Suzuki K, Nakamoto T, and Toyoda M. In *Proceedings of International Symposium on Eco Topia Science ISETSO7*.
- [123] Stoller P, Seeger M, Iordanidis A, and Naidis G. *IEEE Trans. Plasma Science*, 41:2359, (2013).
- [124] Juhre K and Kynast E. In *14th Int. Symp. High Voltage Eng.(ISH)*, volume 1, (2005).
- [125] Saxegaard M, Kristoffersen M, Sroller P, Seeger M, Hyrenbach M, and Landsverk H. In *23rd International Conference on Electricity Distribution*, June (2015).
- [126] Hyrenbach M, Hintzen T, Müller P, and Owens J. In *23rd International Conference on Electricity Distribution*, June (2015).
- [127] Solomon S, Burkholder J B, Ravishankara A R, and Garcia R R. *J. Geophys. Res. Atmos.*, 99:20929, (1994).
- [128] Li Y, Patten K, Youn D, and Wuebbles D. *Atmos. Chem. Phys.*, 6:4559, (2006).
- [129] Youn D, Patten K, Wuebbles D, Lee H, and So C-W. *Atmos. Chem. Phys.*, 10:10129, (2010).
- [130] de Urquijo J. *J. Phys. Conf. Ser.*, 86:012008, (2007).
- [131] Katagiri H, Kasuya H, Mizoguchi H, and Yanabu S. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 15:1424, (2008).
- [132] Ngoc M N, Denat A, Bonifaci N, Lesaint O, Daoud W, and Hassanzadeh M. In *IEEE Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena (CEIDP)*, volume 557, (2009).
- [133] Takeda T, Matsuoka S, Kumada A, and Hidaka K. (2011), 131:859.
- [134] McCain W C and Macko J. In *Halon Options Technical Working Conference*, page 242, (1999).
- [135] 3m<sup>TM</sup> novoc<sup>TM</sup> 5110 dielectric fluid: Technical data sheet (2015).
- [136] 3m<sup>TM</sup> novoc<sup>TM</sup> 4710 dielectric fluid: Technical data sheet (2015).
- [137] Calm J M. *Int. J. Refrig.*, 31:1123, (2008).
- [138] Papasavva S, Luecken D J, Waterland R L, Taddonio K N, and Andersen S O. *Env. Sci. technol.*, 43:9252, (2009).

- [139] Elrod M J. *J. Chem. Educ.*, 76:1702, (1999).
- [140] Yu J K. *Chem. Propell. Polymeric Mater.*, 10:41, (2012).
- [141] Chen G, Tu Y, Wang C, Wang J, Yuan Z, Ma G, Wang J, Qi B, and Li C. *CSEE J. Power Energy Syst.*, 7:510, (2021).
- [142] Taniguchi N, Wallington T, Hurley M, Guschin A, Molina L, and Molina M. *J. Phys. Chem. A*, 107:2674, (2003).
- [143] Wallington T J, Schneider W F, Worsnop D R, Nielsen O J, Sehested J, Debruyne W J, and Shorter J A. *Environ. Sci. Technol.*, 28:320A, (1994).
- [144] Boutonnet J C, Bingham P, Calamari D, de Rooij C, Franklin J, Kawano T, Libre J-M, McCulloch A, Malinverno G, Odom J M, Rusch G M, Smythe K, Sobolev I, Thompson R, and Tiedje J M. *Hum. Ecol. Risk Assess.*, 5:59, (1999).
- [145] <https://ozonewatch.gsfc.nasa.gov>.
- [146] Revell L E, Tummon F, Salawitch R J, Stenke A, and Peter T. *Geophys. Res. Lett.*, 42:10048, (2015).
- [147] Ewenfeldt B. Ozonlagret mir battre. *Arbetarbladet*, september (2014). p.10.
- [148] <https://ozone.unep.org/treaties/montreal-protocol/articles/annex-controlled-substances>.
- [149] <https://www.esrl.noaa.gov>.
- [150] <https://www.climate.gov/news-features/climate-qa/how-much-will-earth-warm-if-carbon-dioxide-doubles-pre-industrial-levels>.
- [151] Mele A, Paglialunga E, and Sforza G. *Socio-Econ. Plan. Sci.*, 75:100942, (2021).
- [152] <https://www.c2es.org/content/hurricanes-and-climate-change>.
- [153] Climate change 2013: The physical science basis, contribution of working group I to the fifth assessment report of the intergovernmental panel on climate change. Cambridge, United Kingdom and New York: Cambridge University Press, (2013).
- [154] DeConto R M and Pollard D. *Nature*, 531:591, (2016).
- [155] Rabie M, Dahl D A, Donald S M A, Reiher M, and Franck C M. *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 20:856, (2013).
- [156] Li Y, Zhang X, Chen Q, Mingli F, Zhuo R, Xiao S, Chen D, and Tang J. *IEEE Access*, 6:42868, (2018).
- [157] Zhou W, Zhang T, and Wang L. *IEEE Access*, 8:29291, (2020).
- [158] Mantilla J D et al. Environmentally friendly perfluoroketones-based mixture as switching medium in high voltage circuit breakers. In *CIGRE*, volume A3, (2016).
- [159] Laruelle E, Ficheux A, Kieffel Y, and Waldron Mr. *Cigre Sci. Eng.*, 7:102, (2017).
- [160] Chachereau A, Hösl A, and Franck C M. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 51:495201, (2018).
- [161] Kieffel Y, Irwin T, Ponchon P, and Owens J. *IEEE Power Energy Mag.*, 14:32, (2016).

- [162] Gautschi D. *CIGRE*, B3:106, (2016).
- [163] Tehlar D, Diggelmann T, Müller P, Buehler R, Ranjan N, and Doiron Ch. *CIGRE Colloquium*, (2015).
- [164] Müller P. Gis anwenderforum, (2016).
- [165] Engel M. Gis anwenderforum, (2016).
- [166] Xianglian Y, Keli G, Zhibing L, Jie H, Yu Z, Shizhuo H, and Wenjun Z. In *4th International Conference on Electric Power Equipment - Switching Technology (ICEPE-ST)*, (2017).
- [167] <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>.
- [168] Fu Y, Yang A, Wang X, and Rong M. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 52:245203, (2019).
- [169] Chen L, Zhang B, Xiong J, Li X, and Murphy A B. *J. Appl. Phys.*, 126:163303, (2019).
- [170] Chen L, Zhang B, Yang T, Deng Y, Li X, and Murphy A B. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 53:055502, (2020).
- [171] Boltzmann L. *Wien. Ber.*, 66:275, (1872).
- [172] Zabelok S, Arslanbekov R, and Kolobov V. *J. Comp. Phys.*, 30:455, (2015).
- [173] Goeringer D E and Viehland L A. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 38:4027, (2005).
- [174] Kumar K. *Aust. J. Phys.*, 20:205, (1967).
- [175] Wang-Chang C S, Uhlenbeck G E, and de Boer J. *Studies in Statistical Mechanics*, volume v.II. New York: Wiley, (1964). p.241.
- [176] Ness K F and Robson R E. *Phys. Rev. A*, 34:2185, (1986).
- [177] Kumar K, Skullerud H R, and Robson R E. *Aust. J. Phys.*, 33:343, (1980).
- [178] Moratz T J, Pitchford L C, and Bardsley J N. *J. Appl. Phys.*, 61:2146, (1987).
- [179] Albert A, Bošnjaković D, Dujko S, and Donko Z. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 54:135202, (2021).
- [180] Maeda K, Makabe T, Nakano N, Bzenić S, and Petrović Z Lj. *Phys. Rev. E*, 55:5901, (1997).
- [181] Bzenić S, Petrović Z Lj, Raspopović Z M, and Makabe T. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 38:6077, (1997).
- [182] Dwyer J R and Babich L P. *J. Geophys. Res.*, 116:A09301, (2011).
- [183] Marjanović S, Banković A, Cassidy D, Cooper B, Deller A, Dujko S, and Petrović Z Lj. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 49:215001, (2016).
- [184] Petrović Z Lj, Marjanović S, Dujko S, Banković A, Malović G, Buckman S, Garcia G, White R, and Brunger M. *Appl. Radiat. Isotop.*, 83:148, (2014).
- [185] Simonović I, Garland N A, Bošnjaković D, Petrović Z Lj, White R D, and Dujko S. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 28:015006, (2019).
- [186] Press W H, Teukolsky S A, Vetterling W T, and Flannery B P. *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press (1994).

- [187] Sakadžić S. Master's thesis, Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu, (2000).
- [188] Birdsall C K and Langdon A B. *Plasma Physics Via Computer Simulation*. New York: McGraw-Hill (1974).
- [189] Aoneas M M, Vojnović M M, Ristić M M, Vičić M D, and Poparić G B. *Phys. Plasmas*, 24:023502, (2017).
- [190] Ristić M M, Aoneas M M, Vojnivić M M, Galijaš S M D, and Poparić G B. *Plasma Chem. Plasma Process*, 38:903, (2018).
- [191] Itoh H and Musha T. *J. Phys. Soc. Jpn*, 15:1675, (1960).
- [192] Skullerud H R. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 1:1568, (1968).
- [193] Okhrimovskyy A, Bogaerts A, and Gijbels R. *Phys. Rev. E*, 65:037402, (2002).
- [194] Longo S and Capitelli M. *Plasma Chem. Plasma Process.*, 14:1, (1993).
- [195] Janssen J F J, Pitchford L C, Hagelaar G J M, and van Dijk J. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 25:055026, (2016).
- [196] Hernandez-Avila J L, Basurto E, and de Urquijo J. *J. Phys.D: Appl. Phys.*, 35:2264, (2002).
- [197] Vass M, Egüz E, Chachereau A, Hartmann P, Korolov I, Hösl A, Bošnjaković D, Dujko S, Donko Z, and Franck C M. *J. Phys.D: Appl. Phys.*, 54:035202, (2021).
- [198] Engelhardt A G and Phelps A V. *Phys. Rev.*, 133:A375, (1964).
- [199] Haddad G N and Crompton R W. *Aust. J. Phys.*, 33:975, (1980).
- [200] Petrović Z Lj, O'Malley T F, and Crompton R W. *J. Phys B: At. Mol. Opt. Phys.*, 28:3309, (1995).
- [201] Schmidt B. *Comm. At. Mol. Phys.*, 28:379, (1993).
- [202] Simonović I, Bošnjaković D, Petrović Z Lj, White R D, and Dujko S. *Eur. Phys. J. D*, 74:63, (2020).
- [203] Simonović I, Bošnjaković D, Petrović Z Lj, Stokes P, White R D, and Dujko S. *Phys. Rev. E*, 101:023203, (2020).
- [204] Simonović I, Bošnjaković D, Petrović Z Lj, White R D, and Dujko S. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 31:015003, (2022).
- [205] Stokes P, Simonović I, Philippa B, Cocks D, Dujko S, and White R D. *Scientific Reports*, 8:2226, (2018).
- [206] Specht L T, Lawton S A, and DeTemple T A. *J. Appl. Phys.*, 51:166, (1980).
- [207] Jacob J H and Mangano J A. *Appl. Phys. Lett.*, 51:467, (1976).
- [208] Stokes P W, Casey M J E, Cocks D G, de Urquijo J, Garsia G, Brunger M J, and White R D. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 29:105008, (2020).
- [209] Stokes P W, Foster S P, Casey M J E, Cocks D G, Gonzalez-Magana O, de Urquijo J, Garsia G, Brunger M J, and White R D. *J. Chem. Phys.*, 154:084306, (2021).

- [210] Stokes P W, White R D, Campbell L, and Brunger M J. *J. Chem. Phys.*, 155:084305, (2021).
- [211] Kimura M and Nakamura Y. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 43:145202, (2010).
- [212] Kochetov I V, Napartovich A P, Vagin N P, and Yuryshev N N. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 42:055201, (2009).
- [213] Kawaguchi S, Satoh K, and Itoh H. *Eur. Phys. J. D*, 68:100, (2014).
- [214] Kimura M. Master's thesis, Keio university, Tokyo, Japan, (2002).
- [215] Hasegawa H, Date H, Shimosuma M, and Itoh H. *Appl. Phys. Lett.*, 95:101504, (2009).
- [216] Alajajian S H, Man K-F, and Chutjian A. *J. Chem. Phys.*, 94:3629, (1991).
- [217] Antony B K, Joshipura N K, and Mason N J. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 38:189, (2005).
- [218] Kawada M K, Sueoka O, and Kimura M. *Chem. Phys. Lett.*, 330:34, (2000).
- [219] Takayanagi K. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 21:507, (1966).
- [220] Gerjuoy S and Stein S. *Phys. Rev.*, 97:1671, (1955).
- [221] Hayashi database, [www.lxcat.net](http://www.lxcat.net).
- [222] Lowke J J, Phelps A V, and Irwin B W. *J. Appl. Phys.*, 44:4664, (1973).
- [223] Dujko S, White R D, Raspopović Z M, and Petrović Z Lj. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, 279:84, (2012).
- [224] Yousfi M, Segur P, and Vassiliadis T. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 18:359, (1985).
- [225] Itoh H, Miurat Y, Ikuta N, Nakao Y, and Tagashira H. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 21:922, (1988).
- [226] Itoh H, Kawaguchi M, Satoh K, Miura Y, Nakano Y, and Tagashira H. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 23:299, (1990).
- [227] Itoh H, Matsumura T, Satoh K, Date H, Nakano Y, and Tagashira H. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 26:1975, (1993).
- [228] Frechette M F and Novak J P. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 20:438, (1987).
- [229] Pinheiro M J and Loureiro J. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 35:3077, (2002).
- [230] Tezcan S S, Akcayol M A, Ozerdem O C, and Dincer M S. *IEEE Trans. Plasma Sci.*, 38:2332, (2010).
- [231] Deng Y and Xiao D. *Japan J. Appl. Phys.*, 53:096201, (2014).
- [232] Li X, Zhao H, Wu J, and Jia S. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 46:345203, (2013).
- [233] Yousfi M, Hennad A, and Alkaa A. *Phys. Rev. E*, 49:3264, (1994).
- [234] Dincer M S and Gaju G R. *J. Appl. Phys.*, 54:6311, (1983).
- [235] Dincer M S, Ozerdem O C, and Bektas S. *IEEE Trans. Plasma Sci.*, 35:1210, (2007).
- [236] Satoh K, Itoh H, Nakano Y, and Tagashira H. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 21:931, (1988).

- [237] Kawaguchi S, Satoh K, and Itoh H. *Eur. Phys. J. D*, 68:100, (2014).
- [238] Li Y M, Pitchford L C, and Moratz T J. *Appl. Phys. Lett.*, 54:1403, (1989).
- [239] Mirić J, Šašić O, Dujko S, and Petrović Z Lj. In *Proc. 27th Summer School and Int. Symp. on the Physics of Ionized Gases (SPIG2014)*, page p.122. Belgrade: Institute of Physics, (2014).
- [240] Ristivojević Z and Petrović Z Lj. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 21:035001, (2012).
- [241] Kline L and Siambis J. *Phys. Rev. A*, 5:794, (1972).
- [242] Kunhardt E and Tzeng Y. *J. Comput. Phys.*, 67:279, (1986).
- [243] Ness K F and Makabe T. *Phys. Rev. E*, 62:4083, (2000).
- [244] White R D, Robson R E, Ness K F, and Makabe T. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 38:997, (2005).
- [245] Skullerud H R. *Aust. J. Phys.*, 36:845, (1983).
- [246] McMahon D R A and Crompton R W. *J. Chem. Phys.*, 78:603, (1983).
- [247] Hegerberg R and Crompton R W. *Aust. J. Phys.*, 36:831, (1983).
- [248] Bošnjaković D, Petrović Z Lj, White R D, and Dujko S. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 47:435203, (2014).
- [249] Banković A, Dujko S, White R D, Marler J P, Buckman S J, Marjanović S, Malović G, Garcia G, and Petrović Z Lj. *New J. Phys.*, 14:035003, (2012).
- [250] Banković A, Dujko S, White R D, Buckman S J, and Petrović Z Lj. *Nucl. Instrum. Methods B*, 279:92, (2012).
- [251] Aschwanden T. *Gaseous Dielectrics IV*. New York: Pergamon (1984). p.24.
- [252] Koch M and Franck C M. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 48:055207, (2015).
- [253] Chachereau A, Rabie M, and Franck C. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 25:045005, (2016).
- [254] <https://magboltz.web.cern.ch/magboltz/>.
- [255] privatna komunikacija J. de Urquijo et al. (2018).
- [256] de Urquijo J, Basurto E, Juarez A M, Ness K F, Robson R E, Brunger M J, and White R D. *J. Chem. Phys.*, 141:014308, (2014).
- [257] Stojanović V D and Petrović Z Lj. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 31:834, (1998).
- [258] Chachereau A and Franck C. In *20th International Symposium on High Voltage Engineering (ISH 2017)*, volume 257, (2017).
- [259] Hunter S and Christophorou L. *J. Appl. Phys.*, 57:4377, (1985).
- [260] Christophorou L, Sauers I, James D, Rodrigo H, Pace M, Carter J, and Hunter S. *IEEE Trans. Electr. Insul.*, 6:550, (1984).
- [261] Hösl A, Pachin J, Egüz E, Chachereau A, and Franck C. *IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul.*, 27:322, (2020).

- [262] [www.3m.com/novec](http://www.3m.com/novec).
- [263] Seeger M, Smeets R, Yan J, Ito H, Claessens M, Dullni E, Falkingham L, Franck C M, Gentils F, Hartmann W, Kieffel Y, Jia S, Jones G, Mantilla J, Pawar S, Rabie M, Robin-Jouan P, Schellekens H, Spencer J, Uchii T, Li X, and Yanabu S. *Plasma Phys. Techn.*, 20:1, (2017).
- [264] Ranković M, Chalabala J, Zawadzki M, Kočišek J, Slavíček P, and Fedor J. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 21:16451, (2019).
- [265] Yi C, Yuan Z, Tu Y, Zhang Y, and Wang C. *IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul.*, 27:1015, (2020).
- [266] Long Y, Guo L, Shen Z, Chen C, Chen Y, and Li F. *IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul.*, 26:1358, (2019).
- [267] Zhao H, Li X, Tang N, Jiang X, Guo Z, and Lin H. *IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul.*, 25:1332, (2018).
- [268] Nechmi H, Beroual A, Girodet A, and Vinson P. *IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul.*, 23:2587, (2016).
- [269] Tu Y, Cheng Y, Wang Y, Ai C, Chen G, and Zhou F. *IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul.*, 25:1324, (2018).
- [270] Wang C, Cheng Y, Tu Y, Chen G, Yuan Z, Xiao A, Owens J, Zhang A, and Mi N. *IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul.*, 25:1351, (2018).
- [271] Nechmi H, Beroual A, Girodet A, and Vinson P. *IEEE Trans. Dielect. Electr. Insul.*, 24:886, (2017).
- [272] Kanzari Z, Yousfi M, and Hamani A. *J. Appl. Phys.*, 84:4161, (1998).
- [273] Markosyan A H, Dujko S, and Ebert U. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 46:475203, (2013).
- [274] Dujko S, Atić J, Bošnjaković D, White R D, Stokes P, Hamilton K R, Zatsarinny O, Bartschat K, Rabasović M S, Šević D, Marinković B P, Fursa D V, Bray I, McEachran R P, Blanko F, Garcia G, Jones D B, Campbell L, and Brunger M J. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 30:115019, (2021).
- [275] Davies A J, Evans C J, and Jones F L. In *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.*, volume 281, page 164, (1964).
- [276] Hundsdorfer W and Verwer J. *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*, volume v.33. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, (2003).
- [277] Courant R, Friedrichs K, and Lewy H. *Math. Ann.*, 100:32, (1928).
- [278] Li C, Brok W J M, Ebert Ute, and van der Mullen J J A M. *J. Appl. Phys.*, 101:123305, (2007).
- [279] Li C. PhD thesis, Eindhoven University of Technology, Eindhoven, Netherlands, (2009).
- [280] Ebert U, van Saarloos W, and Caroli C. *Phys. Rev. E*, 55:1530, (1997).
- [281] Lagarkov A N and Rutkevich I M. *Ionisation Waves in Electrical Breakdown of Gases*. Berlin: Springer (1994).
- [282] Markosyan A H, Teunissen J, Dujko S, and Ebert U. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 24:065002, (2015).



- [283] Lister G G, Lawler J E, Lapatovich W P, and Godyak V A. *Rev. Mod. Phys.*, 76:541, (2004).
- [284] Flesch P. *Light and light sources*. Berlin: Springer, (2006).
- [285] Samukawa S, Hori M, Rauf S, Tachibana K, Bruggeman P, Kroesen G, Whitehead J C, Murphy A B, Gutso A F, Starikovskaia S, Kortshagen U, Boeuf J P, Sommerer T J, Kushner M J, Czarnetzki U, and Mason N. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 45:25300, (2012).
- [286] Fetzer G J and Rocca J J. *IEEE J. Quantum Electron*, 28:1941, (1992).
- [287] Little C E. *Metal vapour lasers: physics, engineering and applications*. Chichester: Wiley (1999).
- [288] Ahedo E. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 53:124037, (2011).
- [289] Liu J and Raju G G. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 25:167, (1992).
- [290] Rockwood S D. *Phys. Rev. A*, 8:2348, (1973).
- [291] Nakamura Y and Lucas J. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 11:325, (1978).
- [292] Nakamura Y and Lucas J. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 11:337, (1978).
- [293] Sakai Y, Sawada S, and Tagashira H. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, (1989).
- [294] Suzuki S, Kuzuma K, and Itoh H. *J. Plasma Fusion Res. Series*, 7:314, (2006).
- [295] Winkler R B, Wilhelm J, and Winkler R. *Ann. Phys. (Leipzig)*, 40:90, (1983).
- [296] Winkler R B, Wilhelm J, and Winkler R. *Ann. Phys. (Leipzig)*, 40:119, (1983).
- [297] Yousfi M, Zissis G, Alkaa A, and Damelin court J J. *Phys. Rev. A*, 42:978, (1990).
- [298] Sawada S, Sakai Y, and Tagashira H. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 22:282, (1989).
- [299] Sakai Y, Sawada S, and Tagashira H. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 24:283, (1991).
- [300] Winkler R, Wilhelm J, Braglia G L, and Diligenti M. *Il Nuovo Cimento*, 12:975, (1990).
- [301] Liu J and Raju G G. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 25:465, (1992).
- [302] White R D, Robson R E, Schmidt B, and Morrison M A. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 36:3125, (2003).
- [303] England J P and Elford M T. *Aust. J. Phys.*, 44:647, (1991).
- [304] Bartschat K. In *Third Int. Conf. on Atomic and Molecular Data and their Applications*. New York: American Institute of Physics (2003).
- [305] Kieffer J and Dunn G H. *Rev. Mod. Phys.*, 38:1, (1966).
- [306] Mirić J, Simonović I, Petrović Z Lj, White R D, and Dujko S. *Eur. Phys. J. D*, 71:289, (2017).
- [307] Elford M T. *Aust. J. Phys.*, 33:231, (1980).
- [308] Petrović Z Lj, Crompton R W, and Haddad G N. *Aust. J. Phys.*, 37:23, (1984).
- [309] Robson R E. *Aust. J. Phys.*, 37:35, (1984).

- [310] Šević D, Rabasović M, Pejčev V, and Marinković B P. *Experimental study of indium atom using electron and optical spectroscopy*, chapter Chapter 8 in Monography: Indium: Properties, Technological Applications and Health Issues. New York: Nova Science Publishers (2013).
- [311] Azad Malik M and O'Brien P. *III–V and Related Semiconductor Materials*, chapter Chapter 10 in: The Group 13 Metals Aluminium, Gallium, Indium and Thallium: Chemical Patterns and Peculiarities. New York: Wiley (2011).
- [312] Nakamura S. *Rev. Mod. Phys.*, 87:1139, (2015).
- [313] Rabasović M S, Kelemen V I, Tošić S D, Šević D, Dovhanych M M, Pejčev V, Filipović D M, Remeta E Yu, and Marinković B P. *Phys. Rev. A*, 77:62, (2008).
- [314] Hamilton K R, Zatsarinny O, Bartschat K, Rabasović M S, Šević D, Marinković B P, Dujko S, Atić J, Fursa D V, Bray I, McEachran R P, Blanco F, Garcia G, Stokes P Q, White R D, Jones D B, Campbell L, and Brunger M J. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 50:013101, (2021).
- [315] Vainshtein A, Golovach D G, Ochkur V I, Rakhovskii V I, Romyantsev N M, and Shustryakov V M. *Sov. Phys. JETP*, 66:36, (1987).
- [316] Shul J, Wetzel R C, and Freund R S. *Phys. Rev. A*, 39:5588, (1989).
- [317] Lotz W. *Z. Phys. A*, 232:101, (1970).
- [318] Kim Y-K and Stone P M. *Phys. Rev. A*, 64:052707, (2001).
- [319] Talukder R, Bose S, Patoary M A R, Haque A K F, Uddin M A, Basak A K, and Kando M. *Eur. Phys. J. D*, 46:281, (2008).
- [320] Margreiter D, Deutsch H, and Märk D T. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Proc.*, 139:127, (1994).

## **Biografija**

Jasmina M. Atić (rođena Mirić) je rođena 3. februara 1987. godine u Prizrenu. Prvih šest razreda osnovne škole je završila u rodnom gradu dok je nastavak osnovnog i srednje obrazovanje završila u Beogradu. Osnovne studije na Elektrotehničkom fakultetu Univerziteta u Beogradu je upisala 2005/2006. godine na odseku za Fizičku elektroniku i smeru za Biomedicinski i ekološki inženjering. Diplomirala je školske 2011/2012. godine sa prosečnom ocenom 8.62 odbranivši završni rad pod nazivom "Upotreba gipsanih ploča za zaštitu od Rentgenskog zračenja" pod mentorstvom prof. dr Predraga Marinkovića. Iste školske godine je upisala master studije koje je, na pomenutom odseku i smeru, završila u roku od godinu dana sa prosečnom ocenom 10.0. Master rad pod nazivom "Primena transportnih koeficijenata rojeva elektrona u modelovanju izvora svetlosti" urađen je na Institutu za fiziku u Beogradu pod mentorstvom dr Saše Dujka. Doktorske studije na Fizičkom fakultetu Univerziteta u Beogradu je upisala školske 2013/2014. godine na smeru Fizika jonizovanih gasova, plazme i tehnologija plazme.

Od februara 2014. godine je zaposlena kao istraživač pripravnik u Laboratoriji za neravnotežne procese i primenu plazme Instituta za fiziku u Beogradu dok je u zvanje istraživač saradnik izabrana aprila 2017. godine. Bila je angažovana na projektima OI 171037 "Fundamentalni procesi i primene transporta čestica u neravnotežnim plazmama, trapovima i nanostrukturama" i III 41011 "Primena niskotemperaturnih plazmi u biomedicini, zaštiti čovekove okoline i nanotehnologijama" Ministarstva nauke, prosvete i tehnološkog razvoja Republike Srbije pod mentorstvom dr Saše Dujka.