

## PRORAČUN REDUKOVANOG KOEFICIJENTA JONIZACIJE I DEMONSTRACIJA DOBIJANJA SKUPOVA EFEKTIVNIH PRESJEKA METODOM ROJEVA NA PRIMJERU NEONA

Dragana Budiša<sup>1</sup>, Snježana Dupljanin<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>*ProCredit Bank, Franca Lehara bb, 71000 Sarajevo, BiH*

<sup>2\*</sup>*Univerzitet u Banjoj Luci, Prirodno-matematički fakultet, Mladena Stojanovića 2,  
78000 Banja Luka, Republika Srpska, BiH*

\***Autor za korespondenciju:** snjezana.dupljanin@pmf.unibl.org

### Sažetak

U radu je prikazana metoda rojeva za dobijanje skupova efektivnih presjeka na primjeru neona (Ne). Predstavljene su i diskutovane efektivne presjeci za  $e^-/\text{Ne}$  interakciju dostupne u LxCat bazi podataka. Odabrane su tri baze: Biagi-v7.1, Morgan i Siglo. Bolsig+ kodom izračunat je redukovani jonizacioni koeficijent ( $\alpha/N$ ), te su izračunate vrijednosti upoređene sa izmjerenim vrijednostima iz Dutton baze. Na primjeru  $\alpha/N$  demonstrirana je metoda rojeva, pri čemu je kao ulazni parametar za proračun koeficijenta korišten Morganov skup presjeka.

**Ključne riječi:** metoda rojeva, efektivni presjeci, baze podataka

### UVOD

Plazma je prirodni fenomen jer je više od 90% svemira u stanju plazme. S druge strane, plazma se može stvoriti vještački i kao takva pronašla je primjenu u tehnologiji, poput plazma ekrana i izvora svjetlosti. Za modifikaciju površina biomaterijala koristi se niskotemperaturna plazma, koja se ponekad naziva i hladnom. Karakteriše je nizak stepen jonizacije pri niskom ili atmosferskom pritisku. Niskotemperaturna plazma ima širok spektar primjene, od medicine gdje se između ostalog koristi u stomatologiji, dermatološkim tretmanima i sterilizaciji medicinske opreme, do proizvodnje i obrade materijala u industriji (Walschus i sar., 2011).

Jedan od načina razvoja plazma tehnologija jeste matematičko modelovanje samih procesa i interakcija sa različitim objektima, gdje je potrebno poznavanje ulaznih parametara plazma modela. Potreba za modelovanjem javila se usljed ekonomske neisplativosti i složenosti samih tehničkih postupaka vezanih za procese generisanja i primjene same plazme. Ulazni parametri za takve modele jesu skupovi efektivnih presjeka i transportni i brzinski koeficijenti (Dupljanin, 2016). Jedna od metoda za dobijanje skupova efektivnih presjeka jeste metoda rojeva (Dupljanin, 2016), koja je u ovom radu prikazana na primjeru neona.

Neon je jednoatomski gas za koji su eksperimentalni podaci lako dostupni. Peti je element po zastupljenosti u svemiru, a prisutan je u Zemljinoj atmosferi u veoma maloj koncentraciji. Najveća upotreba neona jeste u izradi neonskih reklama. U vakuumskoj cijevi za gasna pražnjenja neon svijetli crvenkastonarandžastom bojom, a samo crvene lampe zapravo sadrže čisti neon. Medicinski tretmani neonskom atmosferskom plazmom vrlo su efikasni za tretiranje mikroorganizama, odnosno velikog broja bakterija i gljivica, čak i u intervalima od 60 sekundi. Eksperimenti su pokazali da neonska plazma ima pozitivne efekte inaktivacije na gram negativne i pozitivne bakterije, ljudske patogene, patogene iz hrane i druge mikroorganizme (Tanišli i sar., 2016).

Cilj ovog rada jeste na primjeru redukovanoj jonizacionoj koeficijentu za elektrone koji se kreću u neonskom gasu pod dejstvom spoljašnjeg električnog polja prikazati metodu rojeva, kao jednu od metoda dobijanja skupova efektivnih presjeka, te analizirati postojeće podatke za presjeke iz LXcat baze podataka.

## MATERIJAL I METODE

Skupovi efektivnih presjeka za  $e^-/Ne$  interakciju preuzeti su iz LXCat baze podataka (<https://fr.lxcat.net>): Biagi-v7.1, Morgan i Siglo. Bolsig+ kodom (Hagelaar i Pitchford, 2005; <http://www.bolsig.laplace.univ-tlse.fr/>), koji se zasniva na rješenju Boltzmannove jednačine u dvočlanoj aproksimaciji (Boltzmann, 1872), izračunat je redukovani jonizacioni koeficijent ( $\alpha/N$ ) u širokom opsegu redukovanoj električnog polja ( $E/N$ ) od 1 do 1000 Td ( $1 \text{ Td} = 10^{-21} \text{ Vm}^2$ ). Na primjeru ovog koeficijenta prikazana je metoda rojeva.

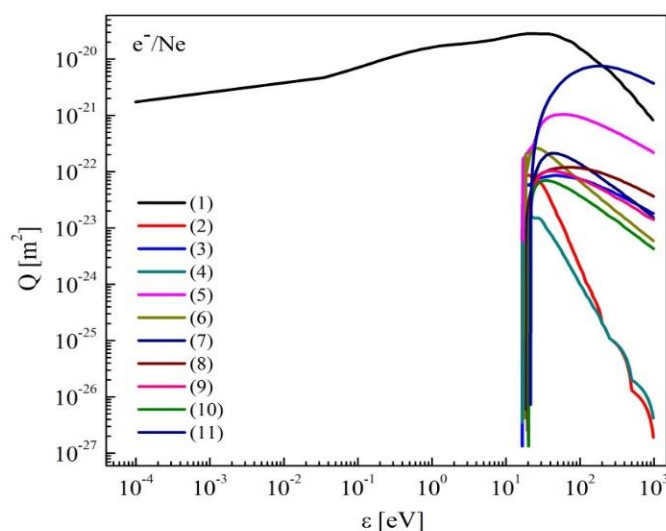
Metoda rojeva za određivanje presjeka sastoji se od nekoliko koraka: mjerenje parametara roja elektrona, kao što su brzina drifta, karakteristična energija, koeficijent jonizacije, itd; formiranje polaznog skupa presjeka za određeni ispitivani gas; određivanje funkcije raspodjele elektrona po brzinama (energijama) u zavisnosti od  $E/N$ ; računanje parametara roja, te njihovo upoređivanje sa izmjerenim vrijednostima u prvom koraku (Raju, 2006). Zatim se pristupa prilagođavanju odnosno modifikaciji polaznog skupa presjeka, a postupak se ponavlja dok se ne postigne zadovoljavajući stepen slaganja između izmjerenih i izračunatih vrijednosti transportnih parametara. Na taj se način ovom metodom dobija kompletan skup efektivnih presjeka koji predstavljaju mikroskopske karakteristike i skup transportnih koeficijenata koji predstavlja makroskopske karakteristike samog ispitivanog gasa. Ovaj skup jako je značajan jer predstavlja ulazni parametar koji `plazma modelatori` koriste prilikom ispitivanja primjena određene vrste niskotemperaturne plazme. Uspjeh same metode zavisi od polaznih podataka koje je potrebno obezbijediti, te od tačnosti sa kojom su izmjereni i izračunati transportni koeficijenti.

## REZULTATI I DISKUSIJA

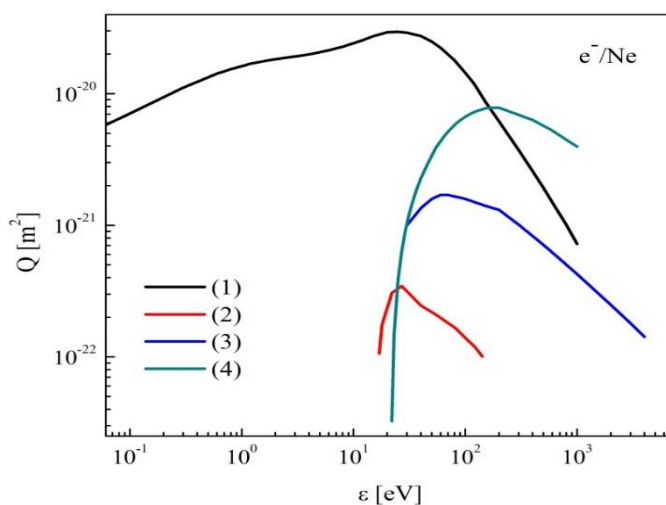
Na slici 1 prikazan je skup presjeka iz Biagi-v7.1 baze podataka (Biagi-v7.1 database) u zavisnosti od energije elektrona i uključuje jedan elastični presjek za prenos impulsa, devet ekscitacionih presjeka i presjek za jonizaciju.

Na slici 2 prikazan je skup presjeka iz Morgan baze podataka (Morgan database) u zavisnosti od energije elektrona i uključuje jedan elastični presjek za prenos impulsa, dva ekscitaciona presjeka i presjek za jonizaciju.

Na slici 3 prikazan je skup presjeka iz Siglo baze podataka (Siglo database) u zavisnosti od energije elektrona i uključuje jedan elastični presjek za prenos impulsa, dva ekscitaciona presjeka i presjek za jonizaciju.

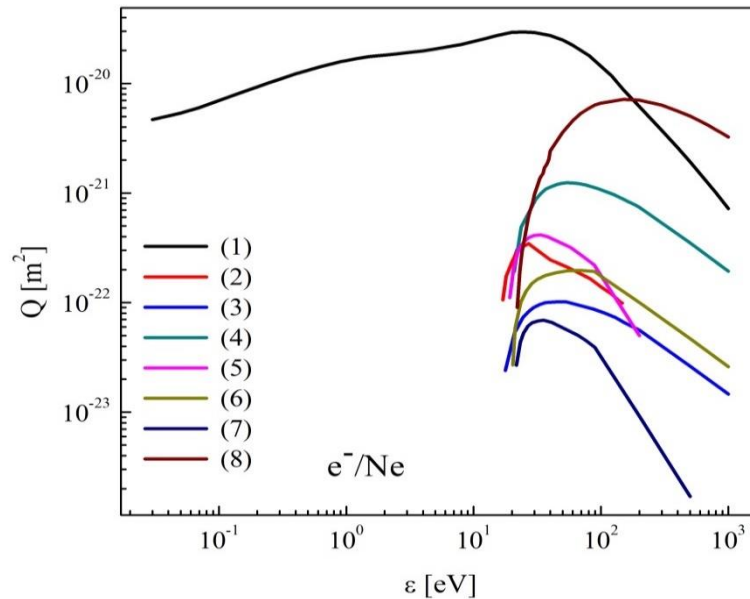


**Slika 1.** Skup presjeka za  $e^-/Ne$  interakciju (Biagi-v7.1 database): elastični presjek za prenos impulsa: (1); ekscitacioni presjeci: (2), (3), (4), (5), (6), (7), (8), (9) i (10); presjek za jonizaciju: (11)



**Slika 2.** Skup presjeka za  $e^-/Ne$  interakciju (Morgan database): elastični presjek za prenos

impulsa: (1); ekscitacioni presjeci: (2) i (3); presjek za jonizaciju: (4)



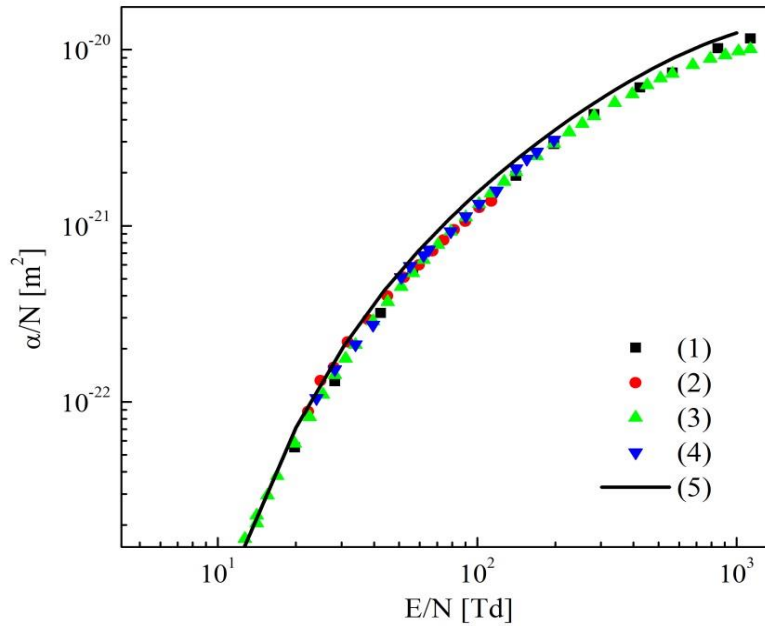
**Slika 3.** Skup presjeka za  $e^-/Ne$  interakciju (SIGLO database); Elastični presjek za prenos impulsa: (1); ekscitacioni presjeci: (2), (3), (4), (5), (6) i (7); presjek za jonizaciju: (8)

Za demonstraciju metode rojeva izabran je skup presjeka iz Morgan baze podataka prikazan na slici 2. Ovaj skup presjeka uključuje sljedeće procese:

- (1) Elastični presjek za prenos impulsa:  $e + Ne \rightarrow e + Ne$ ,
- (2) Ekscitacioni presjek za metastabilnu ekscitaciju:  $e + Ne \rightarrow e + Ne^*$  sa energijskim pragom  $\varepsilon = 16,62 \text{ eV}$ ,
- (3) Ekscitacioni presjek za totalnu ekscitaciju:  $e + Ne \rightarrow e + Ne^*$  sa energijskim pragom  $\varepsilon = 16,62 \text{ eV}$ ,
- (4) Presjek za jonizaciju:  $e + Ne \rightarrow e + e + Ne^+$  sa energijskim pragom  $\varepsilon = 21,56 \text{ eV}$ .

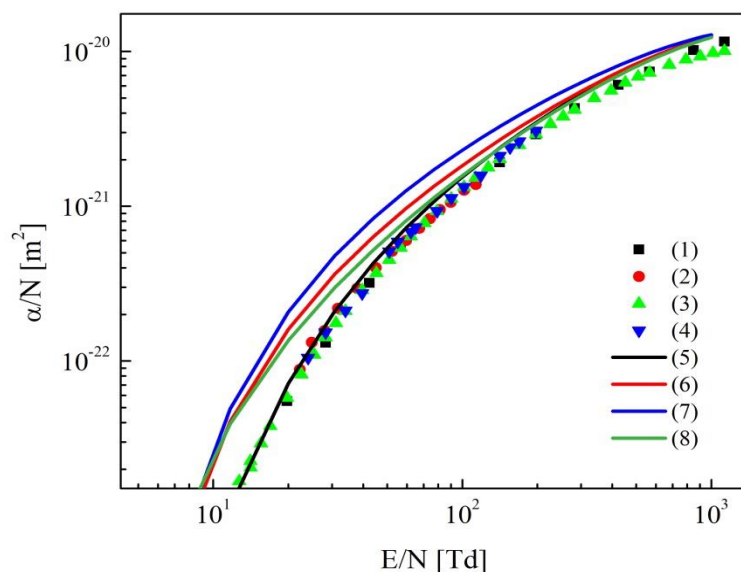
Bolsig+ kodom izračunat je redukovani jonizacioni koeficijent ( $\alpha/N$ ) u funkciji redukovanog električnog polja ( $E/N$ ) u opsegu 1–1000 Td sa Morganovim skupom presjeka kao ulaznim parametrom (Slika 2). Rezultati proračuna prikazani su crnom linijom na slici 4 gdje su simbolima prikazani i dostupni eksperimentalni rezultati preuzeti iz Dutton baze podataka (Dutton database). Vidi se da je slaganje izračunatih i izmjerenih vrijednosti zadovoljavajućeg stepena na cijelom razmatranom opsegu  $E/N$ .

Kako je neon gas za koji u različitim bazama podataka postoje pouzdani skupovi efektivnih presjeka, ovdje ćemo metodu rojeva prikazati idući „unazad“, računajući  $\alpha/N$  sa tri različita modifikovana Morganova skupa presjeka. S obzirom na to da je jonizacioni koeficijent najosjetljiviji na presjeke za elektronske ekscitacije, prva modifikacija izvršena je izuzimanjem ekscitacionog presjeka:  $e + Ne \rightarrow e + Ne^*$  sa energijskim pragom  $\varepsilon = 16,62 \text{ eV}$ , odnosno presjeka za metastabilnu ekscitaciju, iz polaznog Morganovog skupa (Slika 2). Na slici 5 rezultat tih proračuna prikazan je crvenom linijom, te se vidi da je stepen slaganja između izračunatih i izmjerenih vrijednosti  $\alpha/N$  značajno smanjen svugdje osim na najvišim vrijednostima  $E/N$ .



**Slika 4.** Redukovani koeficijent jonizacije ( $\alpha/N$ ) u funkciji  $E/N$  za elektrone u Ne gasu: simbolima (1), (2), (3) i (4) prikazane su izmjerene vrijednosti iz Dutton baze podataka (Dutton database), dok su crnom linijom (5) prikazane izračunate vrijednosti Bolsig+ kodom

Druga modifikacija izvršena je izuzimanjem drugog ekscitacionog presjeka:  $e + Ne \rightarrow e + Ne^*$  energijskog praga  $\varepsilon = 16,62 \text{ eV}$ , iz polaznog Morganovog skupa (Slika 2), gdje je u pitanju totalna ekscitacija. Rezultat proračuna  $\alpha/N$  sa tako modifikovanim skupom kao ulaznim parametrom prikazan je plavom linijom na slici 5. Vidi se da izuzimanje ovog ekscitacionog procesa dovodi do dodatnog pogoršanja stepena slaganja čak i na najvišim vrijednostima  $E/N$ . U trećoj modifikaciji korišten je nešto drugačije modifikovan skup presjeka iz Morganove baze podataka. Modifikacija je ovdje izvršena izmjenom energijskih pragova za ekscitacione presjeke, i to: za metastabilnu ekscitaciju umjesto energijskog praga  $\varepsilon = 16,62 \text{ eV}$  stavljeno je  $\varepsilon = 18,62 \text{ eV}$ , dok je za totalnu ekscitaciju umjesto energijskog praga  $\varepsilon = 16,62 \text{ eV}$  stavljen prag  $\varepsilon = 19,62 \text{ eV}$ . Presjek za prenos impulsa i presjek za jonizaciju unošeni su u kod bez promjena. Rezultat proračuna  $\alpha/N$  sa tako modifikovanim skupom presjeka kao ulaznim parametrom prikazan je zelenom linijom na slici 5. Kao što se vidi, ova promjena pragova ekscitacionih procesa dovodi takođe do pogoršanja stepena slaganja, ali za niže vrijednosti  $E/N$ , s obzirom na to da su izmijenjeni samo energijski pragovi procesa.



**Slika 5.** Redukovani koeficijent jonizacije ( $\alpha/N$ ) u funkciji  $E/N$  za elektrone u Ne gasu: simbolima (1), (2), (3) i (4) prikazane su izmjerene vrijednosti preuzete iz Dutton baze podataka (Dutton database) dok su linijama (5, 6, 7 i 8) prikazane izračunate vrijednosti Bolsig+ kodom sa polaznim (linija 5) i tri modificovana skupa presjeka (linije 6, 7 i 8)

## ZAKLJUČAK

Prikazano je i diskutovano nekoliko skupova efektivnih presjeka za  $e^-/Ne$  interakciju dostupnih u LXcat bazi podataka: Biagi-v7.1, Morgan i Siglo. BOLSIG+ kodom izračunat je redukovani jonizacioni koeficijent ( $\alpha/N$ ) sa Morganovim skupom presjeka kao ulaznim parametrom i upoređen sa izmjerenim vrijednostima dostupnim u Dutton bazi podataka. Stepem slaganja između izračunatih i izmjerenih vrijednosti zadovoljavajući je na cijelom razmatranom opsegu redukovanoeg električnog polja ( $E/N$ ).

Metoda rojeva demonstrirana je na primjeru redukovanoeg jonizacionog koeficijenta ( $\alpha/N$ ) u zavisnosti od redukovane jačine električnog polja ( $E/N$ ) za elektrone u Ne gasu. Vrijednosti ovog koeficijenta izračunate su korištenjem BOLSIG+ koda u kojem je za ulazni podatak korišten prvo izvorni, a zatim na tri različita načina modificovan skup presjeka iz Morganove baze podataka. U prvoj modifikaciji iz polaznog skupa presjeka isključen je proces metastabilnih elektronskih ekscitacija (linija 2 na slici 2), u drugoj modifikaciji isključen je proces totalnih ekscitacija (linija 3 na slici 2), dok su u trećoj modifikaciji izmijenjeni energijski pragovi ova dva ekscitaciona procesa. Svaka modifikacija dovela je do određenog stepena neslaganja sa izmjerenim vrijednostima transportnog koeficijenta, što je prikazano na slici 5 linijama 6, 7 i 8. Najveći stepen neslaganja izračunatih vrijednosti  $\alpha/N$ , na gotovo cijelom opsegu  $E/N$  uočavamo u drugoj modifikaciji, gdje je iz polaznog skupa izuzet presjek za totalnu ekscitaciju energijskog praga  $\varepsilon = 16,62 eV$ .

## LITERATURA

- Biagi-v7.1 database. Preuzeto sa: [www.lxcat.net](http://www.lxcat.net) (pristupljeno 20.04. 2021.).
- Boltzmann, L. (1872). Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen. *Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften*, 66, 275-370. (English translation: Boltzmann, L. (2003). Further Studies on the Thermal Equilibrium of Gas Molecules. *History of Modern Physical Sciences*, 1, 262–349. doi.org/10.1142/9781848161337\_0015
- Dupljanin, S. (2016). Primjena metode elektronskih rojeva za dobijanje kompletnih presjeka i transportnih koeficijenata za azot suboksid, tetrafluoroetan i dimetil etar. (Doktorska disertacija). Fizički fakultet, Beograd.
- Dutton database. Preuzeto sa: [www.lxcat.net](http://www.lxcat.net) (pristupljeno 22.04. 2021.).
- Hagelaar, G. J. M. i Pitchford, L. C. (2005). Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models. *Plasma Sources Science and Technology*, 14(4), 722–733. doi.org/10.1088/0963-0252/14/4/011
- LXCat database, Plasma Data Exchange Project. Preuzeto sa: <https://fr.lxcat.net> (pristupljeno 20. 04. 2019).
- Morgan database. Preuzeto sa: [www.lxcat.net](http://www.lxcat.net) (pristupljeno 20.04. 2021.).
- Raju, G. G. (2006). *Gaseous Electronics Theory and Practice*. Boca Raton, FL: Taylor & Francis Group LLC.
- Siglo database. Preuzeto sa: [www.lxcat.net](http://www.lxcat.net) (pristupljeno 20.04. 2021.).
- Tanišli, M., Mertadam, S., Poyraz, N., Şahin, N. i Demir, S. (2016). Inactivation of Microorganisms with Neon Plasma Jet at Atmospheric Pressure. *Journal of Pure and Applied Microbiology*, 10(3), 1897–1904.
- Walschus, U., Schröder, K., Finke, B., Nebe, B., Meichsner, J., Hippler, R., ... Schlosser, M. (2011). Application of Low Temperature Plasma Processes for Biomaterials. In Rosario Pignatello (Ed), *Biomaterials Applications for Nanomedicine*, (str.127–142). Rijeka, Hrvatska: InTech.

**Primljeno 08.03.2022.**  
**Prihvaćeno 08.04.2022.**