

UNIVERZITET U BEOGRADU
ELEKTROTEHNIČKI FAKULTET

Dorđe R. Lazarević

RADIJACIONA OTPORNOST FILMOVA
INDIJUM OKSIDA U STANJU IZOLATORA
SA KUPEROVIM PAROVIMA

doktorska disertacija

Beograd, 2013.

UNIVERSITY OF BELGRADE
FACULTY OF ELECTRICAL ENGINEERING

Dorđe Lazarević

RADIATION HARDNESS OF INDIUM
OXIDE FILMS IN THE COOPER-PAIR
INSULATOR STATE

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2013

Mentor:

dr **Predrag Osmokrović**, redovni profesor
Univerzitet u Beogradu, Elektrotehnički fakultet

Članovi komisije:

dr Koveljka Stanković, doc.
(Elektrotehnički fakultet Univerziteta u Beogradu)

dr Aleksandra Vasić-Milovanović, vanr. prof.
(Mašinski fakultet Univerziteta u Beogradu)

dr Nenad Cakić, vanr. prof.
(Elektrotehnički fakultet Univerziteta u Beogradu)

dr Miloš Vujisić, doc.
(Elektrotehnički fakultet Univerziteta u Beogradu)

Datum odbrane: _____

RADIJACIONA OTPORNOST FILMOVA INDIJUM OKSIDA U STANJU IZOLATORA SA KUPEROVIM PAROVIMA

Rezime

U radu "Radijaciona otpornost filmova indijum-oksida u stanju izolatora sa Kuperovim parovima" sagledava se ponašanje filmova indijum-oksida u različitim radijacionim sredinama, za različite jone, energije zračenja i fluense, kao i pojava pojedinih radijacionih efekata u filmovima predviđenih teorijskim modelom.

Efekti jonizujućeg zračenja analizirani su primenom Monte Karlo simulacije. Kombinovanom teorijskom i numeričkom analizom u radu je prikazano da promene u filmovima indijum-oksida prouzrokovane zračenjem mogu značajno uticati na njihove karakteristike.

U uvodnim poglavljima rada navodi se razlog zašto je potrebno da se ispituju efekti zračenja na savremene elektronske komponente koje pod određenim uslovima prelaze u stanje izolatora. Takođe, definisane su osnovne osobine materije, dielektričnih materijala i izolatora, kao i efekti koji nastaju prolaskom zračenja kroz materijale. U poglavljima koji slede prikazana je struktura izolatora sa Kuperovim parovima sa osvrtom na indijum-oxid filmove i razmotrene su Monte Carlo metode za uzorkovanje slučajnih veličina korišćene za kompjuterske simulacije prolaska zračenja kroz materijale. U sledećem poglavlju prikazani su postignuti rezultati za efekte interakcije zračenja sa tankim filmovima indijum oksida, a sledi poglavlje sa diskusijom dobijenih rezultata.

Na samom kraju prodiskutovana je kompatibilnost izolatora sa Kuperovim parovima pri izlaganju zračenju i konstatovano je da su rezultati dobijeni simulacijom i njihova povezanost sa teorijskim očekivanjima u skladu sa prethodno iznesenim razmatranjima.

Ključne reči: izolatorski materijali, indijum-oxid, izolator sa Kuperovim parovima, radijaciona oštećenja, Monte Karlo simulacija

Naučna oblast: Elektrotehnika

Uža naučna oblast: Nuklearna tehnika, elektrotehnički materijali

UDK broj: 621.3

RADIATION HARDNESS OF INDIUM OXIDE FILMS IN THE COOPER-PAIR INSULATOR STATE

Abstract

The dissertation "Radiation Hardness of Indium Oxide Films in the Cooper-pair Insulator State" presents a behavior of indium-oxide films in a variety of radiation environments for different ions, energies and fluences of incident radiation, and occurrence of some radiation damages in films predicted by the theoretical model.

Radiation effects were analyzed by Monte Carlo simulations. Combined theoretical and numerical analysis in dissertation shows that radiation-induced changes in indium-oxide films could significantly affect their characteristics.

Introductory chapters provide the reason why it is necessary to investigate the radiation effects on modern electronic components that under certain conditions convert to insulator state. They also define basic characteristics of the material, dielectric and insulators, as well effects arising due to the transport of the radiation through materials. The next chapters give structure of the Cooper-pair insulator state with emphasis on the indium oxide films and describe the Monte Carlo methods for random sampling used for computer simulation of a particle transport inside materials. The next chapter provides obtained results for the effects of the radiation interaction with thin indium oxide films, followed by the chapter that discusses these results.

The final part of the dissertation deals with the compatibility of the insulator with Cooper pairs when exposed to radiation field and concludes that the results from numerical experiments and their correlation with the theoretical expectations are consistent with previously reported observations.

Keywords: insulators, indium oxide, Cooper-pair insulator, radiation damage, Monte Carlo simulation

Scientific field: Electrical Engineering

Special topic: Nuclear Engineering, Materials in Electrical Engineering

UDK No: 621.3

SADRŽAJ

1. UVOD.....	1
2. STRUKTURA MATERIJE.....	3
2.1. Opšte osobine atoma i atomske strukture.....	4
2.2. Kvantnomehanički atomski model.....	9
2.3. Hemijske osobine atoma.....	15
3. IZOLATORSKI MATERIJALI.....	17
3.1. Osobine izolatorskih materijala.....	17
3.1.1. Energetski procep.....	17
3.1.2. Specifična električna otpornost i električna susceptibilnost.....	19
3.1.3. Podela električnih materijala.....	22
3.2. Osobine dielektričnih materijala i dielektrični materijali.....	24
3.2.1. Relativna dielektrična konstanta.....	24
3.2.2. Kompleksna dielektrična permitivnost.....	26
3.2.3. Faktor dielektričnih gubitaka.....	28
3.2.4. Specifična električna otpornost.....	29
3.2.5. Dielektrična čvrstoća.....	30
3.2.6. Podela dielektričnih materijala.....	32
3.3. Izolatori sa Kuperovim parovima.....	34
3.3.1. Superprovodnost.....	34
3.3.2. Kuperovi parovi.....	45
3.3.3. Džozefsonov efekat i spoj.....	47
3.3.4. Indijum oksid (InO) u stanju izolatora sa Kuperovim parovima – struktura i osobine.....	51
4. INTERAKCIJA ZRAČENJA SA MATERIJALIMA.....	60
4.1. Prolaz čestičnog zračenja kroz materijal.....	60
4.1.1. Efikasni presek.....	62
4.1.2. Gubitak energije naelektrisanih čestica u sudarima.....	65
4.1.3. Gubitak energije naelektrisanih čestica na radijacije.....	69

4.2. Prolaz elektromagnetnog zračenja kroz materijal	72
4.2.1. Fotoelektrični efekat	73
4.2.2. Komptonovo rasejanje	75
4.2.3. Proizvodnja parova	77
4.2.4. Tomsonovo rasejanje, Rejljevo rasejanje i nuklearni fotoefekt.....	78
4.3. Dozimetrija jonizujućeg zračenja	79
4.4. Teorija radijacionih efekata u izolatorima.....	81
4.4.1. Zapreminska radijaciona oštećenja u izolatorima.....	82
5. NUMERIČKA SIMULACIJA TRANSPORTA ČESTICA ZRAČENJA KROZ INDIJUM OKSID FILMOVE U STANJU IZOLATORA SA KUPEROVIM PAROVIMA.....	89
5.1. Osnovne postavke Monte Carlo metoda.....	89
5.2. Uzorkovanje slučajnih veličina	90
5.2.1. Metod inverzne funkcije	90
5.2.2. Metod odbacivanja.....	91
5.2.3. Metod supstitucije.....	92
5.2.4. Metod stacionarnih raspodela lanaca Markov-a	93
5.2.5. Algoritmi za generisanje slučajnih veličina	93
6. REZULTATI NUMERIČKIH SIMULACIJA TRANSPORTA ZRAČENJA KROZ INDIJUM OKSID FILMOVE.....	98
7. ANALIZA EFEKATA ZRAČENJA U FILMOVIMA INDIJUM OKSID	122
8. ZAKLJUČAK.....	126
LITERATURA.....	128

1. UVOD

Savremena elektronska kola i komponente su u sve većoj meri rasprostranjeni u mnogobrojnim sistemima, zbog čega su neprestano izloženi različitim vrstama zračenja prirodnog i veštačkog tipa. Sa porastom stepena integracije elektronskih sistema raste i osetljivost na delovanje zračenja. Pouzdanost, ispravan rad i izdržljivost elektronskih sistema u velikoj meri zavisi od vrste i karakteristike zračenja kome su izloženi. Isto tako zavise i od tehnike i materijala koji se koriste u izradi pojedinačnih kola i komponenti koje čine elektronski sistem. Zato se proučavanju radijacione otpornosti elektronskih komponenti u današnje vreme pridaje veliki značaj čak i kada se sistemi koje čine elektronska kola i komponente ne izlažu veštačkim izvorima zračenja. Mnoge primene elektronskih sistema podrazumevaju njihovu izloženost jonizujućem zračenju, čiji uticaj posebno dolazi do izražaja kod korišćenja u blizini svemirskih sistema, nuklearnih i akceleratorskih sistema. U svim ovim sistemima značaj izolatora u integrisanim kolima je veliki.

Pošto su do sada korišćeni izolatori pokazali velike nedostatke po pitanju kompatibilnosti sa savremenim integrisanim kolima, trenutna istraživanja na ovom polju usmerena su na pronalaženje novih izolatorskih materijala koji bi zamenile postojeće.

U ispitivanjima uslova za korišćenje materijala koji poseduju superprovodna svojstva na bazi temperaturne aktivacije Kuperovih parova, uočeno je da određeni materijali u sličnim uslovima mogu preći u izolatorsko stanje. Potrebno je da debljina materijala, primenjeni napon, jačina magnetnog polja i koncentracija magnetnih nečistoća u materijalu imaju vrednosti unutar precizno definisanih opsega kako bi materijali mogli da pređu iz stanja superprovodnosti u stanje izolatore sa elektronima uparenim u tzv. Kuperove parove. Jedan od prvih materijala kod kojih je uočeno da se pod određenim uslovima ponašaju kao izolatori sa Kuperovim parovima jeste indijum oksid.

Cilj ovog rada je da se teorijskom analizom i numeričkom simulacijom izvedu praktični zaključci o radijacionoj otpornosti tankih filmova indijum oksida u fazi izolatora sa Kuperovim parovima, koji mogu imati široku primenu u uslovima izloženosti zračenju.

U teorijskom delu radu date su atomska struktura materije, izolatorski materijali i interakcija zračenja sa materijalom.

Programskim paketom zasnovanim na Monte Karlo simulaciji dobijeni su i izanalizirani specifični rezultati interakcije zračenja teških jona sa ovom izolatorskom fazom za različite debljine filmova i uslove ozračivanja. Za simulaciju izabrani su upadni joni i energije tako da odgovaraju poljima zračenja koja se sreću u savremenoj medicinskoj, naučno-istraživačkoj, tehnološkoj i industrijskoj praksi.

Indijum oksid filmovi u stanju izolatora sa Kuperovim parovima opisani su preko granularne strukture lokalizovanih parova elektrona u centrima nečistoća ili defekata. Prisustvo superprovodne faze lokalizovane unutar ostrva u granularnoj strukturi dokazano je eksperimentima sa negativnom magnetootpornošću na izolatorskoj strani u blizini prelaza superprovodnik-izolator. Struktura međusobno povezanih superprovodnih ostrva u indijum oksid filmovima prikazana je dvodimenzionalnim nizovima Džozefsonovih spojeva. Ova struktura u materijalu se u specijalnim uslovima narušava i zavisi od hemijskog sastava materijala i blizine prelaza izolatora u normalno metalno stanje. Istanjivanje filmova materijala dovodi do povećanja neuređenosti strukture koja je uzrok prelaza iz superprovodnog u stanje nulte provodnosti.

Na osnovu razmotrenih teorijskih podataka i rezultata numeričkih simulacija prolaska zračenja kroz ove materijale, u zaključku rada sagledano je ponašanje filmova indijum oksida pri izlaganju zračenjima, za različite vrste, energije i fluense jona.

2. STRUKTURA MATERIJE

Najveći deo prirodnih pojava, kao i sama struktura materije određeni su karakteristikama atomskog jezgra. Prve karakteristike jezgra koje su određene bile su njegove dimenzije, naelektrisanje i masa. Međutim, za upoznavanje i razumevanje suštine materije i njene strukture, odnosno od čega je ona sačinjena, neophodno je detaljno proučavanje atomskog jezgra. [1]

Prema planetarnom modelu, atomi se sastoje od pozitivno naelektrisanog jezgra i negativno naelektrisanih elektrona, a njihova ukupna količina elektriciteta, jednaka je količini elektriciteta jezgra. Međutim, planetarna struktura atoma ne može da objasni diskretni spektar zračenja iz atoma, a pored toga je i paradoksalna je sa stanovišta klasične fizike. Elektroni koji kruže u električnom polju jezgra bi, prema zakonima klasične fizike, kontinualno bi gubili energiju zračenjem, što bi uslovalo kontinualni spektar zračenja iz atoma. Posledica toga bi bilo smanjivanje poluprečnika putanje elektrona koji bi, na kraju, pali u jezgro, odnosno elektron kao čestica bi nužno predao energiju polju. [1,2]

Diskretni spektar atoma pokazuje da je priroda atoma nije samo korpuskularna. Kvantna mehanika je pokazala da ta svojstva atoma proističu iz talasne prirode njihovih elektrona. Ako se krene od toga da čvrstoća materije predstavlja posledicu jednog tipično kvantnog efekta, u tom slučaju kad god je neka čestica ograničena na mali prostor, ona na to sputavanje odgovara kretanjem, i to na takav način da što je manja oblast na koju je ograničena, to će se čestica u njoj brže kretati. Tada u atomu postoje dve sile koje se nadmeću. S jedne strane, elektroni su vezani za jezgro električnim silama koje nastoje da ih privuku što bliže, a s druge strane, oni na to sputavanje odgovaraju kovitlajući naokolo, i što su čvršće vezani za jezgro, to će njihova brzina biti veća. Sputavanje elektrona u atomu dovodi do velikih brzina koje dostižu hiljadu kilometara u sekundi. Te brzine su nepromenljive, kao i pravci i ravni u kojima se kretanje odvija, odnosno mogu se menjati samo skokovito na tačno određen način. Time je omogućeno da atom izgleda kao čvrsta sfera, slično kao što propeler, koji kada se brzo okreće, izgleda kao čvrsti disk. [3,4]

2.1. Opšte osobine atoma i atomske strukture

Prvi pokušaj da se napravi model atoma predstavlja Tomsonov model atoma iz 1903. godine, ali je on vrlo brzo zamenjen Raderfordovim modelom. To je planetarni model atoma prema kome se atom svakog hemijskog elementa u neutralnom stanju sastoji od električno pozitivnog atomskog jezgra, u kome je skoncentrisana gotova sva masa atoma i određenog broja elektrona, koji se okreću oko atomske jezgre i čine omotač atoma. [4]

Kako su na osnovu velikog broja sakupljenih eksperimentalnih podataka o spektru vodonika uočene određene pravilnosti, Johan Balmer je 1885. godine predložio empirijsku formulu za izračunavanje četrnaest linija vodonikovog spektra, koje se nalaze u vidljivoj oblasti talasnih dužina. Četiri godine kasnije, Johanes Ridberg je uopštio Balmerovu formulu, tako da ona bude primenljiva za proračun svih linija u spektru vodonika, a ne samo onih u vidljivoj oblasti. Ridbergova formula je ukazivala na pravilnost u spektru vodonika, a pokušao je da protumači Nils Bor u periodu između 1913. i 1915. [5]

Bor je predložio model atoma nastao spajanjem Plankove kvantne teorije sa Raderfordovim planetarnim modelom. Borov model atoma počiva na sledećim postulatima:

1. Atom poseduje određen broj kvantnih stanja, u kojima ne dolazi do emisije zračenja. Ova stanja se nazivaju stacionarnim i odgovaraju kretanju elektrona oko jezgra po koncentričnim kružnim orbitama različitih radijusa. Pri kretanju po orbiti elektron ne gubi energiju emitovanjem zračenja.
2. Emisija ili apsorpcija zračenja odgovara prelasku atoma iz jednog stacionarnog stanja u drugo, odnosno prelasku elektrona s jedne orbite na drugu. Zračenje se emituje ili apsorbuje u vidu energetske kvanta – fotona, čija je energija jednaka razlici energija stacionarnih stanja.
3. Moguća (dozvoljena) stacionarna stanja atoma određena su celobrojnom kvantizacijom (kvantnim brojem) ugaonog momenta orbitirajućeg elektrona.

Deo ideja za ove postulate uzet je iz klasične mehanike, ali je u isto vreme drugi deo u direktnoj kontradikciji s njom. Dinamička ravnoteža sistema u stacionarnom stanju

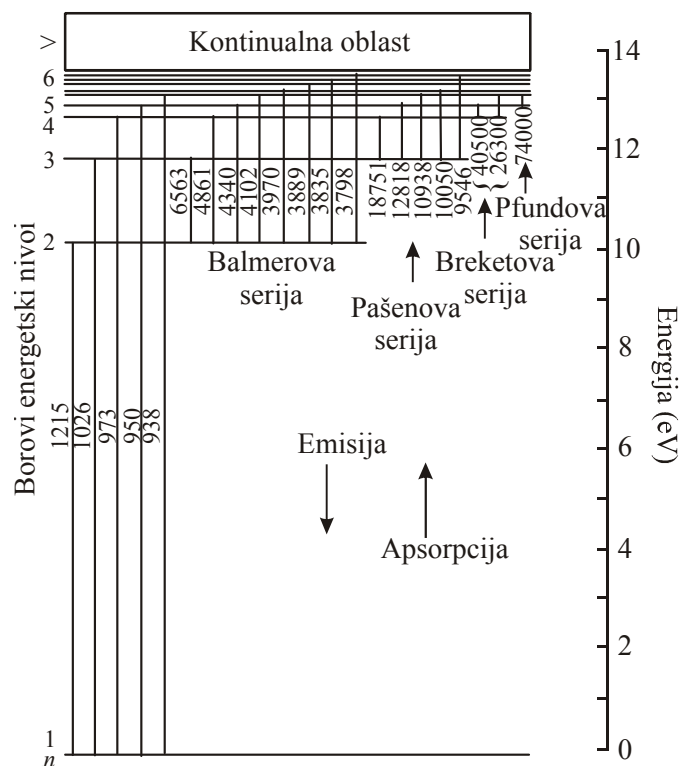
opisana je na osnovu klasičnih zakona mehanike, koji ne važe pri prelasku iz jednog stanja u drugo. [6]

Na osnovu Borovih postulata moguće određivanje energija stacionarnih stanja jednoelektronskog atoma, odnosno energija elektrona na dozvoljenim orbitama. Pokazano je se da većem kvantnom broju odgovara veća vrednost energije nivoa. Najnižu vrednost energije ima nivo za vrednost kvantnog broja 1, koji odgovara prvoj orbiti i poznat je kao osnovno ili nepobuđeno stanje, pri kome se atom nalazi u stanju minimalne potencijalne energije. U ovom stanju atom je najstabilniji. Stanja sa vrednošću kvantnog broja većom od 1 nazivaju se pobuđenim (eksitovanim). Prelaz sa osnovnog na neko pobuđeno stanje moguć je samo onda kada atom apsorbuje dovoljnu energiju. [6]

Stacionarna stanja i spektralne linije vodonika grafički se predstavljaju pomoću dijagrama energetske nivoa kao na slici 2.1. Stacionarni energetski nivoi su predstavljeni horizontalnim linijama. Prema vrhu dijagrama razmak među nivoima opada i teži nuli kada vrednost kvantnog broja teži beskonačnosti, a na samom vrhu se nalazi kontinualni spektar elektrona koji su napustili atom. Spektralna linija je rezultat prelaska atoma s jednog energetskog nivoa na drugi i predstavljena je linijom koja spaja ta dva nivoa. Spektri drugih elemenata se mogu predstaviti sličnim dijagramima, ali sa većim brojem nivoa i prelaza. [4,5,6]

Orbitalni Borov model je, pored emisionog spektra, objašnjavao i apsorpcioni spektar. Orbitalni elektron može da apsorbuje foton svetlosti, kojoj je atom izložen, samo ako ga energija fotona pobuđuje u neko dozvoljeno više stanje. Kao rezultat toga, u spektru svetlosti, kojoj je izložen atom, nedostajace talasne duzine, koje odgovaraju linijama emisionog spektra atoma. [6]

Elektron atoma vodonika u najstabilnijem osnovnom stanju ima tačno određenu energiju veze koja iznosi 13,6 ev. Orbitalni elektron ostaje veoma kratko vreme u pobuđenom stanju (oko 10^{-8} sekundi), pa se vraća se ka osnovnom emitujući razliku energije u vidu elektromagnetnog zračenja. S obzirom da su moguća energetska stanja tačno određena, energije emitovanog zračenja mogu da imaju samo vrednosti koje odgovaraju razlikama energija orbitalnih elektrona pre i posle prelaza. [6]



Slika 2.1. Dijagram energetske nivoa i spektralnih linija vodonika. [6]

Po Borovoj teoriji se može izračunati radijus kome odgovara najverovatnija udaljenost elektrona od protona, a koja iznosi $0,53 \times 10^{-8}$ cm. Ova vrednost se može uzeti kao mera veličine atoma vodonika. Kvantna mehanika ne priznaje Borove putanje, ali ih je pogodno koristiti pri šematskom predstavljanju atoma, s tim da treba imati na umu da to nije tačna slika. Kod težih atoma elektroni se slažu u ljuske (orbite), gde svaka ljuska može da primi određeni broj elektrona, s tim da u svakoj ljusci elektroni imaju drugačije energije veze. Elektroni u K-ljusci koji su najbliži jezgru imaju najveću energiju veze. U K-ljusku staju samo dva elektrona, oba iste energije. L-ljuska je sledeća dalja od jezgra i u nju može da stane osam elektrona. U L-ljusci elektroni imaju manju energiju veze od K-ljuske i mogu se energetske podeliti u tri podljuske L_1 , L_2 i L_3 među kojima postoji mala energetska razlika. Iznad slede M, N, O, P ljuske sa opadajućim energijama veze i tačno određenim maksimalnim brojem elektrona. [6,7]

Jačim sudarom sa nekom upadnom česticom u atomu može doći do pobuđivanja, ali se iz atoma može izbaciti i elektron iz bilo koje ljuske, tako da atom tada postaje pozitivni jon. Upraznjeno mesto se spontano popunjava elektronom iz dalje ljuske u kojoj je elektron slabije vezan. Prelazeći u ljusku sa većom energijom veze, emituje se

razlika energije. U skladu s tim, najveća razlika se emituje prilikom popunjavanja praznina u K-ljusci. Zračenje koje nastaje popunjavanjem praznina u unutrašnjim ljuskama naziva se karakteristično X-zračenje. Ako je elektron izbačen iz neke unutrašnje ljuske, preskakanje elektrona iz udaljenije ljuske u upražnjeno mesto ekvivalentno je pomeranju praznine ka periferiji.

Masa atoma predstavlja zbir mase jezgra i mase Z elektrona – energije veze elektrona (u jedinicama mase). Masa elektrona je nekoliko hiljada puta manja od mase jezgra, tako da je najveći deo mase atoma u njegovom jezgru (približno nalazi 99,975% mase atoma). Jedan mali deo mase elektrona odlazi na vezivanje, ali on je neznatan i često može da se zanemari. [8,9]

Između jezgra i omotača atoma deluju isključivo elektromagnetne sile. Elektron nije osetljiv na nuklearne sile koje su ograničene na jezgro. Može se reći da u atomu i njegovoj neposrednoj blizini deluje električno polje, koje stvaraju pozitivni protoni u jezgru i negativni elektroni oko njega. Najjače polje je neposredno uz samo jezgro, s obzirom da na tom mestu na naelektrisanu česticu deluje celo pozitivno naelektrisanje jezgra. Povećanjem rastojanja od jezgra pozitivno polje opada, kako zbog veće udaljenosti, tako i zbog efekta zaklanjanja. Na primer, ako se između neke naelektrisane čestice i jezgra nalaze K-elektroni, oni deluju u suprotnom smeru od sile jezgra i umanjuju njegovo dejstvo. Dalje prema periferiji atoma sve više elektrona zaklanja jezgro i efektivno smanjuje njegovo polje. Na česticu izvan atoma deluje isti broj pozitivnih i negativnih naelektrisanja, tako da ukupni efekat teži nuli. [9,10]

Veličina atoma određena je putanjama elektrona u omotaču. Na najudaljeniji elektron deluje polje jezgra $+Ze$ umanjeno za polje $(Z-1)$ ostalih elektrona koji ga zaklanjaju, tako da se ono svodi na $Z_{et} \cdot e \approx 1 \cdot e$. Efektivno na njega deluje ista sila, kao na elektron u vodonikovom atomu. Zbog toga će distanca na kojoj se periferni elektron kreće biti istog reda veličina kao u vodonikovom atomu. Dimenzije svih atoma biće reda 10^{-8} cm. Povećanjem broja elektrona kod težih atoma ne dolazi do proporcionalnog rasta dimenzija, jer se elektroni uglavnom slažu prema unutra.

Zatvorene ljuske, koje su karakteristične za plemenite gasove, imaju najmanje dimenzije, jer su ti elektroni najbolje vezani. Nasuprot tome, u slučaju da ima samo jedan elektron u ljusci, kao što je kod alkalnih elemenata, on je slabo vezan i nalazi se na relativno većoj udaljenosti.

Na elektrone iz slojeva koji su bliži jezgru deluje sve veće efektivno polje Z_{ef} . Može se uzeti da su oni približno za Z_{ef} puta bliže jezgru. U teškom atomu srednja udaljenost elektrona od jezgra iznosi:

$$\frac{0,53 \times 10^{-8} \text{ cm}}{Z^{1/3}} \quad (2.1)$$

K-elektroni koji su najbliže jezgru nalaze se najčešće na udaljenosti

$$R_k \cong \frac{0,53 \times 10^{-8} \text{ cm}}{Z} \quad (2.2)$$

Za teške atome to iznosi nešto preko 10^{-11} cm, što je još uvek blizu 10 puta veće od radijusa jezgra.

Periferni elektron na koga zbog zaklanjanja deluje efektivni količina naelektrisanja od jednog naelektrisanja ima energiju veze istog reda veličine kao u vodonikovom atomu, 14 eV. Detaljnije razlike unosi popunjenost orbita, kao i kod radijusa atoma. Najčvršće su vezani periferni elektroni u plemenitim gasovima, a najslabije u alkalnim, kao što se vidi iz tabele 2.1.

Tabela 2.1. Energije veze perifernih elektrona

Element	He	Ne	Ar	Kr	Xe	Li	Na	K	Rb	Cs
eV	24,6	21,6	15,8	14	12,1	5,4	5,1	4,3	4,2	3,9

U istoj grupi vezanost opada sa težinom. Ostali elementi imaju energije vezivanja perifernog elektrona, između gornjih, dakle od 4 do 24.

Vezanost elektrona u ostalim orbitalama raste sa kvadratom efektivnog polja. Zavisnost je kvadratna zbog toga što je sila kojom jezgro privlači zavisna od Z_{ef} , ali su elektroni bliži jezgru takođe za faktor Z_{ef} . Energija veze elektrona u K-ljusci iznosi:

$$B_k \approx 13,6 \cdot Z^2 \text{ eV} \quad (2.3)$$

Kao primer može se navesti uran čije energije veze iznose u eV:

K	L ₁	M ₁	N ₁	O ₁	O ₁	jonizacija
115 040	21 757	5 546	1 439	322	95	4

Ukupna energija veze svih elektrona u atomu iznosi približno

$$15Z^{7/3} \text{ eV} \quad (2.4)$$

Za uran to je još uvek svega oko 400 keV, dakle 20 puta manje od energije kojom je jedan nukleon vezan u jezgro. [11]

Vežanost u atomu opada idući od jezgra ka periferiji. Kod nekog teškog elementa relativna vežanost jezgra – K ljuska – periferija ima proporciju $10^6:10^4:1$. [8]

Značajna karakteristika atoma je brzina elektrona. Elektron u vodonikovom atomu, kada se nalazi u osnovnom stanju ima brzinu:

$$\frac{c}{137} = 2,2 \times 10^8 \text{ cm/s} \quad (2.5)$$

što je nešto manje od stotog dela brzine svetlosti. Za jednu sekundu elektron obiđe oko jezgra $7 \cdot 10^{15}$ puta. Ako vodonikov elektron pređe u uzbuđeno stanje, on se kreće dalje od jezgra, sa nekoliko puta manjom brzinom. Ostajući pri tom stanju 10^{-8} sekunde on još uvek uspe da obiđe jezgro 10^6 puta. [10]

Kod težih atoma periferni elektroni će imati gornju brzinu, dok će unutrašnjim da raste sa efektivnim naelektrisanjem. Brzina K-elektrona biće:

$$\frac{Zc}{137} = Z \cdot 2,2 \times 10^8 \text{ cm/s} \quad (2.6)$$

2.2. Kvantnomehanički atomski model

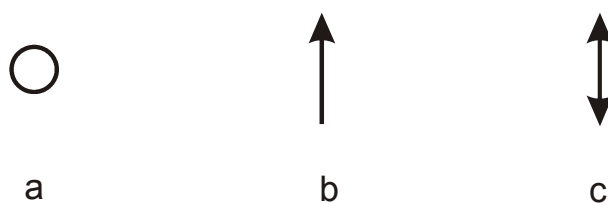
Borov model atoma predstavlja jednu izuzetno grubu šemu, za koji se može reći da je ispravna samo u slučaju atoma vodonika. Sve više novih eksperimentalnih podataka o raslojavanju spektralnih linija teško je bilo moguće objasniti ovom šemom.

Raderfordovi eksperimenti su pokazali da se atomi, umesto da budu čvrsti i neuništivi, sastoje od ogromnog prostora u kojem se kreću izuzetno male čestice formirajući sistem koji liči na planetarni. Prema kvantnoj teoriji čestice koje čine atom nisu ni iz daleka poput čvrstih objekata klasične fizike. Međutim, osnovni problem s prihvatanjem ideja kvantne fizike je taj što subatomske sačinioce materije ukazuju na dvojnost u ponašanju, zavisno od toga kako ih posmatramo. Oni se ponekad javljaju kao čestice, a ponekad kao talasi, a čemu treba dati posebno ime: kvant.

Prilikom prelaska iz oblasti klasične fizike u oblast kvantne fizike ne menjaju se opšta strukturalna svojstva prostora i vremena, već svojstva fizičkih objekata. Objekti kvantne fizike postoje pojedinačno, ali bez jedinstvenog i sasvim određenog položaja, pa im nije moguće tačno određeno mesto. Na primer, može se reći da je elektron u

atomu na više mesta odjednom, tako je teško posmatrati male, međusobno nezavisne komadiće. Kvantnomehantički posmatrano, svaki pojedinačni položaj koji čestica može imati predstavlja jednu od mogućnosti koja joj je na raspolaganju. Kombinovanjem svih mogućnosti, dobija se opis kvantnog stanja čestice. Kvantno stanje se opisuje talasnom funkcijom čestice. Ta pojava predstavlja posledicu činjenice da se prisustvu fizičkih objekata na nekom mestu pripisuje verovatnoća, pa se može tvrditi da se određeni objekat nalazi na određenom mestu uz isvesnu neodređenost. Prema formalizmu kvantne mehanike, zamućenost položaja čestica u prostoru i vremenu, odnosno neodređenost, naziva se disperzija i izražava se kao verovatnoća povezana sa matematičkim veličinama koje uzimaju oblik talasa. To nisu stvarni, trodimenzionalni talasi, to su talasi verovatnoće, apstraktne matematičke veličine sa svim karakterističnim svojstvima talasa, veličine koje su povezane sa verovatnoćama da će se čestice naći na određenim mestima u određenim trenucima. [5,6,12]

Pored mase i naelektrisanje, osnovno svojstvo elektrona je i spin. Spin predstavlja odgovarajući kvantni broj magnetnog momenta elektrona, koji potiče od rotacije elektrona oko svoje ose. Jedan od načina za predstavu spina jeste da se čestice zamisle kao čigre koje se okreću oko svoje ose, s tim da treba imati u vidu da u kvantnoj mehanici čestice i nemaju neku određenu osu. Spin čestica zapravo govori kako čestice izgledaju posmatrano iz raznih pravaca. Čestica sa spinom nula odgovara tački, tj. ona izgleda isto iz svih pravaca. Čestica sa spinom jedan odgovara streli, tj. ona ima različit izgled iz raznih pravaca, odnosno izgleda isto samo ako se okrene za ceo krug (360°). Čestica sa spinom dva odgovara dvostrukoj streli, tj. ona izgleda isto ako se okrene za pola kruga (180°) (slika 2.2). Slično tome, čestice sa većim spinom izgledaju isto, ako se okrenu za srazmerno manji deo punog kruga. Izuzetak predstavlja činjenica da postoje čestice koje ne izgledaju isto kada se okrenu samo za jedan krug, odnosno u tom cilju ih je potrebno okrenuti za dva puna kruga i za njih kažemo da imaju spin jednak jednoj polovini. [6,13,14]



Slika 2.2. Simetrija spina: $a = 0$, $b = 1$, $c = 2$.

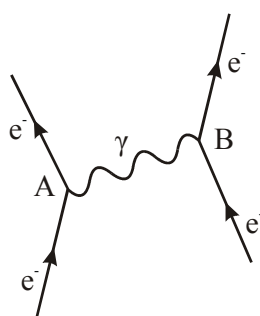
Pre uvođenja spina, Pauli je ustanovio da su za opis stanja elektrona u atomu potrebna četiri kvantna broja. Ta pretpostavku je izvedena iz činjenice da bi bilo nemoguće razlikovati dva elektrona istih kvantnih brojeva unutar jednog atoma, imajući u vidu učestalost ponavljanja hemijskih osobina u Periodnom sistemu elemenata. Atomska stanja se mogu u potpunosti odrediti skupom četiri broja koji se nazivaju kvantni brojevi, a koji ukazuju na položaj i oblik elektronskih orbita. Prvi kvantni broj je broj orbite i određuje energiju koju elektron mora da ima da bi bio na toj orbiti. Drugi i treći kvantni broj određuju detaljan oblik orbite elektrona i povezani su sa brzinom i smerom njihovog kretanja. Ovi kvantni brojevi imaju celobrojne vrednosti, što znači da elektron svoje stanje kretanja može da menja samo skokovito, odnosno da su atomu svojstvena diskretna stanja kretanja. Četvrti kvantni broj, spin, karakteriše čestice i kada nisu deo kvantnomehantičkog sistema. Na osnovu tog razmatranja definisan je Paulijev princip izuzimanja, prema kome u jednom atomu ne mogu postojati dva elektrona sa sva četiri ista kvantna broj, odnosno unutar jednog kvantnomehantičkog sistema ne mogu postojati dve iste čestice jednakih kvantnih brojeva. Paulijev princip izuzimanja je od fundamentalnog značaja pošto objašnjava zbog čega ne dolazi do kolabiranja čestica materije u stanje veoma velike gustine pod dejstvom interakcija/sila čiji su nosioci čestice celobrojnog spina. Naime, kada bi se dve čestice razlomljenog spina našle na istom mestu, one bi, prema Paulijevom principu, morale imati različite brzine, a to bi uslovalo njihov brzi razlaz. Zahvaljujući principu izuzimanja, čestice materije obrazuju zasebne i sasvim određene celine (kvantnomehantičke sisteme). [6,13]

Da bi se opisale interakcije subatomske čestice, na subatomskom nivou ideja klasične teorije polja kombinuje se sa idejama kvantne mehanike. Zbog složenosti matematičke forme Opšte teorije relativnosti, takva kombinacija još uvek nije u potpunosti ostvarena kad je u pitanju gravitacija, ali druga klasična teorija polja sjedinjena je sa kvantnom mehanikom u tzv. kvantnu elektrodinamiku, koja opisuje sve elektromagnetne interakcije subatomske čestice. Ta teorija u sebi sadrži i teoriju relativnosti i kvantnu mehaniku. Upadljiva novina u kvantnoj elektrodinamici proističe iz kombinacije pojava elektromagnetnog polja i fotona kao čestičnih manifestacija elektromagnetnih talasa. Kako su fotoni takođe i elektromagnetni talasi, a pošto ti talasi predstavljaju vibrirajuća polja, to sledi da fotoni moraju biti manifestacije

elektromagnetnih polja. Odatle pojam kvantnog polja, odnosno polja koje može uzeti oblik kvanta ili čestice. U kvantnim teorijama polja potpuno je prevaziđen klasični kontrast između čestica i prostora koji ih okružuje. Kvantno polje se sagledava kao fundamentalna fizička veličina u obliku kontinualnog medijuma prisutnog svugde u prostoru. Čestice su lokalna zgrušavanja toga polja i predstavljaju koncentracije energije, koje nastaju i nestaju, gubeći time svoj individualni karakter i rastapajući se u polje koje leži u njihovoj osnovi. [6,15]

Pojam polja prvobitno se odnosio na pojam sile, što je ostao i u kvantnoj teoriji polja. Elektromagnetno polje se, prema tom novom tumačenju, može ispoljavati ili kao slobodno polje u obliku putujućih talasa (fotona), ili može igrati ulogu polja sila između naelektrisanih čestica. U ovom drugom slučaju, ta se sila ispoljava kao razmena fotona između čestica koje su u interakciji.

Proces razmene fotona je prikazan na prostorno-vremenskom dijagramu (slika 2.3), gde se nalaze dva elektrona koji se približavaju jedan drugome, od kojih jedan emituje foton u tački A, a drugi ga apsorbira u tački B. Kada prvi elektron emituje foton, on obrće svoj smer kretanja u skladu sa zakonima održanja količine kretanja, a isto čini i drugi elektron kada apsorbira foton. Na kraju, ta dva elektrona se razleću odbijajući jedan drugog razmenom fotona. Ukupna interakcija ova dva elektrona složenija je i odvija se putem niza razmena fotona tako da se na kraju dobija da elektroni odbijaju jedan drugog duž pravilnih krivih. [6,16]



Slika 2.3. Međusobno odbijanje dva elektrona posredstvom razmene jednog fotona. [6]

U terminima klasične fizike se kaže da elektroni jedni prema drugima ispoljavaju silu odbijanja. To, međutim, savremena fizika smatra vrlo nepreciznim načinom opisivanja ove situacije. Nijedan od ova dva elektrona ne oseća silu kada se približi

drugome. Sve što oni čine jeste da stupaju u interakciju preko razmene fotona. Sila time nije ništa drugo do zbirni makroskopski efekat višestrukih fotonskih razmena. U subatomskom svetu ne postoje takve sile, već samo interakcije čestica posredovane poljima, tj. drugim česticama. Stoga se danas u fizici govori o interakcijama, a ne o silama.

Nuklearne sile se, takođe, mogu na zadovoljavajući način opisati poljem koje predstavlja stanje koje se menja kontinualno u prostoru i vremenu. Poznavanjem polja moguće je odrediti zakon po kome se intenzitet i smer sile menjaju u prostoru njenog dejstva. Paralelno s razvojem teorije polja, u proučavanju nuklearnih sila došlo se do novih stanovišta. Verovatnoća i brzina dešavanja radioaktivnih raspada ukazuju da sila odgovorna za β -raspad mora biti daleko manjeg intenziteta od jake nuklearne sile koja spaja nukleone u jezgru. Enriko Fermi je izneo teoriju β -raspada zasnovanu na idejama kvantne elektrodinamike, dela kvantne teorije polja koji opisuje interakciju naelektrisanih čestica. Na osnovu Fermijevog opisa β -raspada, neutron se pri ovom raspadu transformiše u proton, emitujući elektron i elektronski antineutrino. Nakon što je otkriven mion i ustanovljeno da se on raspada na elektron, elektronski antineutrino i mionski neutrino, u procesu veoma sličnom raspadu neutrona, nastala je ideja o univerzalnoj slaboj sili koja deluje na leptone i hadrone, izazivajući njihove transformacije. [6]

Uzajamno dejstvo jedne čestice na drugu, odnosno njihova međusobna interakcija, odvija u vidu jednog od sledeća četiri tipa:

- 1) Gravitacione interakcije, koje su poznate iz klasične fizike zbog sile dugog (neograničenog) dometa, za koje važi zakon opadanja intenziteta s kvadratom rastojanja.
- 2) Elektromagnetne interakcije, koje su poznate iz klasične fizike, dugog (neograničenog) dometa. One uključuju sile između naelektrisanja u mirovanju i u kretanju, kao i dejstva električnog i magnetnog polja na naelektrisanje.
- 3) Slabe interakcije, koje opisuju nastajanje i ponašanje leptona (na primer, kod β -raspada), kao i proces raspada većine čestica poznatih pod imenom čudne čestice.
- 4) Jake interakcije, gde se specifično javljaju nuklearne sile između nukleona, odgovorne su za vezivanje tih čestica u nekom jezgru.

Slabe i jake interakcije su kratkog dometa, reda dimenzije jezgra, te se, zbog toga, ne pojavljuju u makroskopskim efektima, koji su vezani za gravitacione i električne sile, odnosno one se manifestuju jedino u eksperimentima na nuklearnom nivou. Gravitaciona interakcija između čestica potpuno je zanemarljiva za atomske i nuklearne čestice, u poređenju s drugim interakcijama. Identifikacija ostalih interakcija, tj. elektromagnetnih, slabih i jakih interakcija, omogućava dalju klasifikaciju čestica zavisno od njihove uloge. Elektromagnetna i slaba interakcija uspešno su ujedinjene u tzv. elektroslabu interakciju, a radi se i na njenom ujedinjenju s jakim interakcijama. [6]

Čestice koje su nosioci fundamentalnih sila, kao što je već rečeno, nazivaju se bozoni i imaju celobrojni spin. One su same sebi antičestice. Poznati i teorijski predviđeni bozoni su:

- a) Foton, koji prenosi elektromagnetne sile.
- b) W i Z bozoni, koji prenose slabe nuklearne sile.
- c) Gluoni, koji prenose jake nuklearne sile (indirektno pokazani).
- d) Higsov bozon, koji daje mase česticama (još uvek nije uočen).
- e) Graviton, koji prenosi gravitacione sile (još uvek nije uočen).

Sve navedene interakcije ograničene su opštim principima. Osnovni među njima su zakoni očuvanja mehaničkih veličina: totalne energije, linearnog momenta i ugaonog (angularnog) momenta. To su klasične veličine, za koje je poznato da mogu da imaju kontinualan niz vrednosti u makroskopskoj fizici. Kada postoji potreba za primenom kvantne mehanike, tj. kada De Broljeva talasna dužina čestice nije više zanemarljiva u poređenju s dimenzijama sistema ili dela prostora gde se javlja, pretpostavlja se da Zakon očuvanja energije i linearnog momenta još uvek važi, mada granice date relacijom neodređenosti postaju značajne u specijalnim slučajevima. Kod mnogih problema kao što je prosti harmonijski oscilator ili atom vodonika, energija i ugaoni moment imaju diskretne vrednosti, tj. kvantovane su na način koji se ne sreće u klasičnoj fizici. Ti zakoni očuvanja se mogu povezati sa izvesnim specijalnim osobinama sistema prostora i vremena u kojem se proces događa.

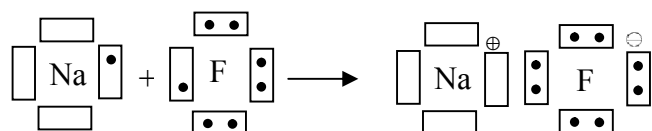
Na makroskopskom nivou, sila privlačenja između pozitivnog i negativnog naelektrisanja odgovorna je za strukturnu raznolikost među raznim vrstama materijala. Posledično dolazi do spajanja atoma u molekule – najmanje stabilne čestice materije, koje sadrže njene hemijske osobine.

2.3. Hemijske osobine atoma

Priroda hemijske veze ne može se opisati klasičnom fizikom već kvantnom mehanikom. Ona pokazuje da približavanjem dva atoma dolazi do koncentracije negativnog naelektrisanja između njih. Ovo negativno naelektrisanje može da privuče jezgra i nadvlada njihovu odbojnu silu. Do spajanja atoma u molekule dolazi, pre svega, zbog toga što je energetska stanja molekula niže od sume energetskih stanja izolovanih atoma. [17]

Dva osnovna tipa hemijske veze su kovalentni i jonski. Ako se posmatra najprostiji model, polazi se od pretpostavke da atomi izmenom elektrona iz spoljašnjih ljuski formiraju elektronske konfiguracije slične plemenitim gasovima, tj. dolazi do popunjavanja ljuske. Do toga može doći bilo prebacivanjem valentnih elektrona - jonska veza, bilo da dva atoma koriste isti elektron - kovalentna veza. Vezivanje kojim se formiraju hemijske veze šematski se može prikazati, ako se pođe od činjenice da glavne grupe elemenata mogu da imaju u spoljašnjoj ljusci do 8 elektrona, i njihov broj za svaki element prikaže sa tačkama u četiri kocke oko simbola elemenata.

Za jonsku vezu karakteristično je prebacivanje elektrona, kao što se može videti na primeru jedinjenja NaF.



Natrijum je izgubio jedini elektron u spoljašnjoj ljusci, koji prelazeći fluoru, popunjava njegovu ljusku. Nakon toga i natrijuma i fluor imaju zatvorene ljuske, dakle najstabilnije konfiguracije. Natrijum je postao pozitivni, a fluor negativni jon. Jonsku vezu ima znatan broj jedinjenja, kao što su na primer soli, baze i metalni oksidi.

Približavanjem atoma po dva elektrona iz po dva atoma se udružuju. Popunjavanje ljuski dobija se time što vezujuće elektrone koriste po dva atoma. Ovako deljenje elektrona dovodi do povećane koncentracije negativnog naelektrisanja između jezgra, što privlači jezgra i održava atome na okupu. [18]

Kada je u gasovitom stanju, materija se nalazi u čvrstom molekularnom obliku. U kondenzovanim stanjima, kao što je tečno i naročito čvrsto stanje, susreću se novi oblici vezivanja atoma u stabilne konfiguracije. Nije svejedno kako će se atomi i molekuli

slagati jedno pored drugoga pri kondenzovanju. Pravilnim slaganjem u uređene kristalne strukture dobijaju se najstabilnije konfiguracije. Za vezivanje u kristale odgovorne su iste električne sile koje dovode do formiranja molekula i može se očekivati da će vezivna energija kristala biti uglavnom manja od molekularne. [19]

Jonske kristale formiraju isti elementi koji se udružuju u jonske molekule. Međutim, kada su u kristalu oni nisu sparni u molekule, već kao joni smešteni su u određene geometrijske strukture. U kristalu na jedan jon deluju svi ostali oko njega. Vezivanje je zbog toga čvršće nego u molekulu. Na primer, KCl ima molekularnu energiju veze 4,4 eV, a sjedinjavanjem u kristal dobija se još 2,22 eV. Na sličan način kovalentna veza daje atomske kristale, u kojima opet nema izdvojenih molekula već su to atomi poređani u pravilne strukture i ceo kristal izgleda kao neka ogromna molekula.

Postoje i molekularni kristali u kojima su molekuli zadržali svoju individualnost, a drže se na okupu zahvaljujući takozvanim Van der Valsovim silama. One se objašnjavaju polarizacijom molekula u električnom polju koje stvaraju naelektrisane čestice oko nje. Molekuli se tada ponašaju kao električni dipoli, a oni se međusobno privlače. Ove sile imaju vrlo kratak domet, tako da je njima jedan molekul vezan za samo nekoliko susednih. One su relativno slabe. Kao primer može se uzeti kiseonik, koji se održava u čvrstom stanju samo na niskoj temperaturi. Energija koja veže molekule kiseonika iznosi oko 1% energije veze atoma u molekulu.

3. IZOLATORSKI MATERIJALI

3.1. Osobine izolatorskih materijala

Ako se posmatra ponašanje u električnom polju, uočavaju se dva tipa materijala – elektroprovodni (materijali koji razdvajaju različite potencijale, odnosno provode električno naelektrisanje; skraćeno provodnici) i elektroneprovodni (materijali koji ne provode električno naelektrisanje; skraćeno neprovodnici).

Neprovodni materijali se dodatno dele na poluprovodnike i dielektrike (izolatore). Od fundamentalnih karakteristika materijala, energetskog procepa, zavisi kojoj grupi pripada neki materijal. Električne materijale možemo podeliti i prema ponašanju u spoljašnjem električnom polju. Ova podela je istorijski starija, ali se isto često primenjuje kao i podela prema energetskom procepu.

3.1.1. Energetski procep

Svako čvrsto telo sadrži elektrone. Okolnosti pod kojima se deo elektrona u primenjenom električnom polju ponaša kao da je delimično slobodan je od velikog značaja za električnu provodnost. Elektroni u kristalu su smešteni u energetske zone odvojene intervalima energije u kojima nije dozvoljeno ni jedno energetsko stanje elektrona. Takve zabranjene oblasti se nazivaju energetskim procepima ili zabranjenim zonama. Ukoliko je broj elektrona u kristalu takav da su dozvoljene energetske zone ili popunjene ili prazne, tada se elektroni ne mogu kretati u električnom polju i kristal se ponaša kao izolator. U slučaju da su jedna ili više zona delimično popunjene (između 10 i 90 procenata), kristal se ponaša kao metal. Ako su sve zone potpuno popunjene, sem jedne ili dve zone za koje se može reći da su vrlo malo popunjene ili vrlo malo prazne, kristal je poluprovodnik.

Ako se kod modela slobodnog elektrona uzme u obzir periodičnu rešetku čvrstog tela, pojavljuje se mogućnost postojanja zabranjene zone. Po modelu slobodnog elektrona dozvoljene vrednosti energije protežu se kontinualno od nule do beskonačnosti. Jedna od tipičnih odlika talasnog kretanja u kristalima je Bragova refleksija, što dovodi do energetskih procepa. To znači da se mogu pojaviti energije za

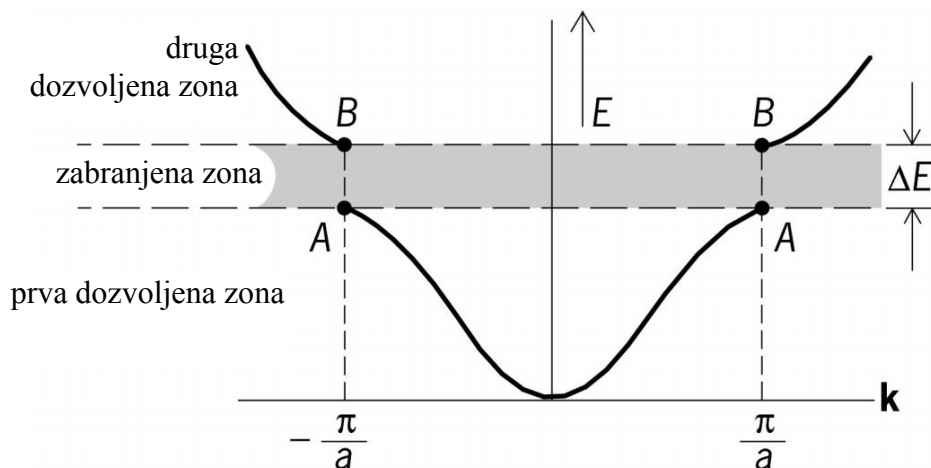
koje rešenja Šredingerove jednačine u obliku talasa ne postoje. Ti energetske procepi su od odlučujućeg značaja i određuju da li je čvrsto telo izolator ili provodnik.

Kako su u kristalu rastojanja takva da postoji značajna međusobna interakcija svih atoma koji pripadaju tom jedinstvenom sistemu, to dovodi do cepanja kvantnih stanja.

U mnogim slučajevima zonska struktura kristala se može objasniti modelom skoro slobodnih elektrona, kod koga se zonski elektroni tretiraju kao da su samo slabo perturbovani periodičnim potencijalom jona. Ovim modelom često mogu biti objašnjene opšte zonske strukture i zamršeni detalji opaženih Fermijevih površi. Ako posmatramo prost problem jednodimenzionalne rešetke, sa konstantom rešetke a , prema Bragovom zakonu difrakcije, elektroni pridruženog talasnog broja $n\pi/a$ ($n = \pm 1, \pm 2, \dots$) ne mogu prostirati kroz kristal, tj. ne mogu postojati u njemu (slika 3.1). U skladu sa navedenim može se zaključiti da su talasni brojevi $\pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{2\pi}{a}, \dots$ zabranjeni za kvazislobodne

elektrone u kristalu sa kubnom rešetkom parametara a . Refleksija za $k = \pm \frac{\pi}{a}$ se pojavljuje, jer dolazi do konstruktivne interferencije talasa reflektovanog od jednog atoma jednodimenzionalne rešetke sa talasom reflektovanim od najbližeg susednog atoma. Za te dve vrednosti k razlika u fazi reflektovanih talasa je upravo $\pm 2\pi$. Oblasti vrednosti talasnog broja k pri kojima se energija elektrona menja neprekidno, a na granicama doživljava prekid nazivamo Brillouinove zone. Zbog periodičnosti kristala nema potrebe razmatrati strukturu i fenomene u svim Brillouinovim zonama, s obzirom da se sve mogu svesti na prvu Brillouinovu zonu: $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$. [20,21,22]

Zonska struktura materije se može svesti na dozvoljenu valentnu zonu, zabranjenu zonu i dozvoljenu provodnu zonu, Razlika između dozvoljene valentne i dozvoljene provodne zone je u tome što su u provodnoj zoni elektroni još više kolektivizovani i pod dejstvom spoljašnjih polja, lako učestvuju u provođenju toplote i naelektrisanja. Energetski procep predstavlja razliku energetskog nivoa dna provodne zone i vrha valentne zone, odnosno širinu zabranjene zone. [23]



Slika 3.1. Grafik energije u funkciji talasnog vektora za elektron u jednoatomskoj jednodimenzionoj rešetki konstante a . [23]

Ako energetske zone materijala posmatramo u funkciji talasnog broja elektrona k , možemo razlikovati direktni i indirektni tip eneretskog procepa. Ukoliko su minimum provodne zone i maksimum valentne zone na istoj vrednosti talasnog broja elektrona k , govorimo o direktnom eneretskom procepu, jer taj slučaj odgovara mehanizmu direktnog zonskog prelaza. Kada su minimum provodne zone i maksimum valentne zone na različitim vrednostima talasnog broja elektrona k , dolazi do indirektnog zonskog prelaza, što odgovara indirektnom eneretskom procepu. Zbog toga je direktni zonski prelaz se lakše se odvija od indirektnog, jer mehanizam pripada tipu interakcije dve čestice, dok se kod indirektnog radi o interakciji tri čestice. [23,24]

3.1.2. Specifična električna otpornost i električna susceptibilnost

Interakcija spoljašnjeg električnog polja i materije se može svesti na pomeranje konstitutivnih naelektrisanih čestica materije u pravcu polja. To pomeranje može biti makroskopsko i mikroskopsko. Makroskopsko pomeranje je javlja u slučaju braunovskog kretanja nekih konstitutivnih naelektrisanih čestica materije, koje su označene kao slobodne. U smislu teorije zonalne strukture materije, ekvivalentan uslov je postojanje naelektrisanih čestica u provodnoj zoni. Mikroskopsko pomeranje se javlja u slučaju da su sve konstitutivne naelektrisane čestice materije vezane, tako da osciluju oko stabilnih

ravnotežnih položaja, što rezultuje stvaranjem dipola na nivou strukturnih jedinica. Ovaj efekat se naziva polarizacija. Ova dva tipa pomeranja se javljaju istovremeno kod svih oblika materije. Materijale sa dominantnim usmerenim kretanjem slobodnih naelektrisanih čestica pod dejstvom spoljašnjeg električnog polja, smatramo elektroprovodnim i makroskopski karakterišemo veličinom pod imenom specifična električna otpornost (ρ). Ona predstavlja koeficijent proporcionalnosti između spoljašnjeg električnog polja i gustine električne struje. Materijale sa dominantnim efektom polarizacije pod dejstvom spoljašnjeg električnog polja, smatramo elektroneprovodnim i makroskopski karakterišemo veličinom poznatom pod imenom električna susceptibilnost (χ_e). Ona predstavlja koeficijent proporcionalnosti između gustine polarizacije i spoljašnjeg električnog polja. Specifična električna otpornost je recipročna vrednost specifične električne provodnosti $\rho=1/\sigma$. [25,26] Specifična električna provodnost materijala predstavlja odnos gustine električne struje (j) i spoljašnjeg električnog polja (E), pa je $\sigma=j/E$.

Impuls slobodnog elektrona povezan je sa talasnim vektorom preko $mv = \hbar k$. U električnom polju \mathbf{E} i magnetnom polju \mathbf{B} , sila koja dejstvuje na elektron naelektrisanja e je $-e[\mathbf{E} + (1/c)\mathbf{v} \times \mathbf{B}]$, tako da drugi Njutnov zakon kretanja postaje:

$$F = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (3.1)$$

U odsustvu sudara Fermijeva sfera u \mathbf{k} -prostoru se pomera uniformno pod uticajem primenjenog električnog polja. Integraljenjem relacije (3.1) sa $\mathbf{B} = 0$ dobija se

$$\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0) = -e\mathbf{E}t / \hbar. \quad (3.2)$$

Ukoliko se, u trenutku $t=0$, primeni sila $\mathbf{F}=-e\mathbf{E}$ na elektronski gas, koji ispunjava Fermijevu sferu, sa centrom u koordinatnom početku \mathbf{k} -prostora, tada će u kasnijem trenutku δt sfera i njen centar biti pomereni za

$$\delta\mathbf{k} = -e\mathbf{E}t / \hbar. \quad (3.3)$$

Zbog sudara elektrona sa primesama, nesavršenostima rešetke i fononima pomerena sfera može da se održava u stacionarnom stanju u električnom polju. Ako je vreme između sudara τ , pomeraj Fermijeve sfere u stacionarnom stanju je dat relacijom (3.3) sa $t = \tau$. Taj pomeraj daje svakom elektronu dodatnu driftovsku brzinu $\mathbf{v} = \hbar\delta\mathbf{k} / m = -e\mathbf{E}\tau / m$. Ukoliko je konstantno električno polje \mathbf{E} i ima n elektrona po jedinici zapremine, svaki naelektrisanja $-e$, gustina električne struje je

$$\mathbf{j} = nq\mathbf{v} = ne^2\tau\mathbf{E}/m \quad (3.4)$$

Dobijen je Ohmov zakon. Električna provodnost σ je definisana preko $\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E}$, te je

$$\sigma = ne^2\tau/m \quad (3.5)$$

Specifična električna otpornost ρ je definisana kao recipročna vrednost provodnosti, pa je

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{m}{ne^2\tau} \quad (3.6)$$

Proteklo naelektrisanje proporcionalno gustini naelektrisanja ne ; faktor e/m se pojavljuje jer je ubrzanje u datom električnom polju proporcionalno sa e i obrnuto proporcionalno masi m ; vreme τ opisuje slobodan interval vremena u kome polje deluje na nosioca (pretpostavljamo da se elektron posle sledećeg sudara ponaša kao da nije imao driftovsku brzinu). [23]

Električna susceptibilnost predstavlja odnos gustine polarizacije materije i spoljašnjeg električnog polja. Usled delovanja spoljašnjeg električnog polja, dolazi do razdvajanja pozitivnih i negativnih nosilaca naelektrisanja u dielektriku, jer se pozitivni nosioci naelektrisanja pomeraju u smeru delovanja električnog polja, a negativni nosioci u suprotnom smeru. Tako razdvojena naelektrisanja izvedena iz ravnotežnog položaja predstavljaju električni dipol. Električni dipol se opisuje preko vektora polarizacije \mathbf{P} koji predstavlja sumu dipolnih momenata \mathbf{p} u jedinici zapremine materijala, izraz je

$$\mathbf{P} = N\mathbf{p} \quad (3.7)$$

gde je N broj čestica u jedinici zapremine. [5,8]

Srednji dipolni moment zavisi od jačine lokalnog električnog polja \mathbf{E}_{lok} koje deluje na bilo koji atom:

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}_{\text{lok}} \quad (3.8)$$

gde je α atomska ili jonska osobina koja se naziva polarizabilnost. Sledi:

$$\mathbf{P} = N\alpha \mathbf{E}_{\text{lok}} \quad (3.9)$$

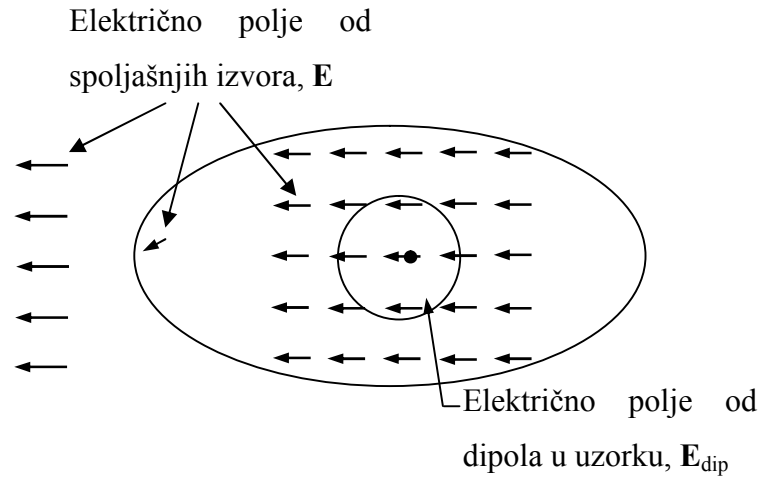
Lokalno polje \mathbf{E}_{lok} predstavlja zbir električnog polja od spoljašnjih izvora.

S obzirom na to da na posmatrani dipol deluje pored spoljašnjeg električnog polja i polje koje potiče od dipola u uzorku \mathbf{E}_{dip} , ukupno polje (Slika 3.2) je suma:

$$\mathbf{E}_{\text{lok}} = \mathbf{E} + \mathbf{E}_{\text{dip}} \quad (3.10)$$

Integracijom polja od dipola u čitavom uzorku zapremine V :

$$\mathbf{E}_{\text{dip}} = \frac{1}{V} \int_V \mathbf{E} dV \quad (3.11)$$



Slika 3.2. Lokalno električno polje koje deluje na atom u kristalu. [22]

dobija se:

$$\mathbf{E}_{\text{dip}} = \frac{N \alpha \mathbf{P}}{3 \varepsilon_0} \quad (3.12)$$

odakle iz prethodnih relacija dobijamo:

$$\mathbf{P} = \frac{N \alpha}{1 - \frac{N \alpha}{3 \varepsilon_0}} \mathbf{E} = \chi_e \mathbf{E}. \quad (3.13)$$

gde je $\chi_e = \mathbf{P} / \mathbf{E}$ električna susceptibilnost. [23,26]

3.1.3. Podela električnih materijala

Podelu električnih materija možemo izvršiti prema ponašanju u spoljašnjem električnom polju ili prema veličini energetsom procepu.

Vrednosti specifične električne otpornosti je parametar na kome se bazira podela električnih materijala prema ponašanju u spoljašnjem električnom polju. Kako se specifična električna otpornost veoma lako određuje i za provodne i za neprovodne materijale, to je ona prihvatljiviji parametar od električne susceptibilnosti, koja se ne može jednostavno odrediti za provodne materijale. Materijale čije se vrednost specifične

električne otpornosti nalazi između $10^{-6} \Omega\text{m}$ i $10^{-8} \Omega\text{m}$ smatramo za provodne materijale. Kod poluprovodnih materijala ta vrednost je između $10^{-6} \Omega\text{m}$ i $10^{10} \Omega\text{m}$, a kod izolatora između $10^6 \Omega\text{m}$ i $10^{18} \Omega\text{m}$. [27,28]

S obzirom da dolazi do preklapanja vrednosti specifične električne otpornosti karakteristične za poluprovodne materijale i izolatorske materijale, savremena podela električnih materijala se bazira na vrednosti energetskog procepa jer je taj kriterijum pouzdaniji.

U Tabeli 3.1. date karakteristične vrednosti za neke električne materijale čija je podela izvršena prema kriterijumu veličine energetskog procepa.

Tabela 3.1. Vrednosti specifične električne otpornosti za nekoliko karakterističnih predstavnika provodnika, poluprovodnika i izolatora [26]

Vrsta materijala	Materijal	Specifična električna otpornost, ρ, Ωm
Provodnici	Bakar	1.68×10^{-8}
	Aluminijum	2.82×10^{-8}
	Srebro	1.59×10^{-8}
	Zlato	2.44×10^{-8}
Poluprovodnici	Silicijum	6.40×10^2
	Germanijum	4.6×10^{-1}
	Galijum-arsenid	$5 \times 10^{-7} - 10 \times 10^{-3}$
	Selen	12×10^4
Izolatori	Staklo	$10 \times 10^{10} - 10 \times 10^{14}$
	Sumpor	1×10^{15}
	Kvarc	7.5×10^{17}
	Teflon	$10 \times 10^{22} - 10 \times 10^{24}$

3.2. Osobine dielektričnih materijala i dielektrični materijali

Za razliku od provodnika dielektrici imaju sklonost ka polarizaciji pod dejstvom električnog polja, što je i njihova glavna karakteristika. Kod dielektrika je širina zabranjene zone veća od 3,5 eV, a vrednost specifične električne otpornosti između $10^6 \Omega\text{m}$ i $10^{18} \Omega\text{m}$. [24,25]

Kao posledica fizičkih osobina dielektrika, kao njegove najvažnije karakteristike se izdvajaju: relativna dielektrična konstanta, faktor dielektričnih gubitaka, specifična unutrašnja i specifična površinska električna otpornost i dielektrična čvrstoća. Izbor dielektričnog materijala za konkretnu namenu presudno zavisi od ovih karakteristika, kao i od odgovarajućih neelektričnih osobina. Osnovni faktori koji mogu uticati na pomenute osobine su frekvencija, vreme, temperatura, vlažnost i mehaničke deformacije.

3.2.1. Relativna dielektrična konstanta

Makroskopsko električno polje \mathbf{E} u Maksvelovim jednačinama je definisano kao prostorna srednja vrednost električnog polja u materijalu, usrednjena po zapremini veličine bar jedne elementarne ćelije. Dielektrični pomeraj \mathbf{D} je definisan kao

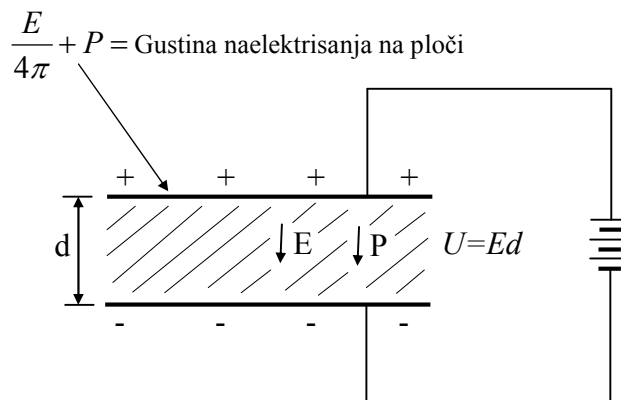
$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (3.14)$$

Merenje polarizacije \mathbf{P} ili dielektrične propustljivosti ε se vrši merenjem kapaciteta $C=Q/U$ kondenzatora ispunjenog dielektrikom (slika 3.3). U odsustvu dielektrika pretpostavka je da je polje između ploča kondenzatora E' , tako da je površinska gustina naelektrisanja na svakoj ploči $\pm E'/4\pi$. Kada se stavi dielektrik, površinska gustina polarizacionih naelektrisanja $\pm P$ se pojavljuje na njegovoj površi i ta naelektrisanja se neutralizuju proticanjem naelektrisanja kroz kolo na ploče kondenzatora. Prostorna srednja vrednost polja u unutrašnjosti dielektrika jednaka je zbiru polja $E_1=-4\pi P$ koje potiče od polarizacionih naelektrisanja na dielektriku i $E_0=E'+4\pi P$ koje potiče od prvobitnih i neutrališućih naelektrisanja na pločama. Prema tome za ovakav kondenzator srednja vrednost polja po zapremini u dielektriku je

$$E=E_0+E_1=E'+4\pi P-4\pi P=E'. \quad (3.15)$$

i

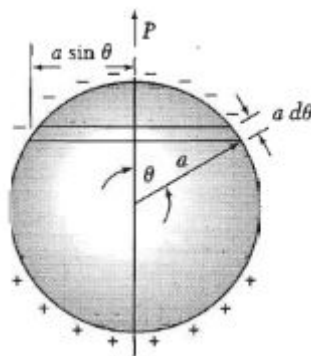
$$E_{\text{lok}} = E_0 + E_1 + E_2 + E_3 \quad (3.16)$$



Slika 3.3 Makroskopsko E je srednja vrednost po zapremini mikroskopskog električnog polja. [22]

gde je E_2 polje koje potiče od polarizacionih naelektrisanja na površi fiktivne šupljine i koje nazivamo Lorencovo polje po naučniku koji ga je prvi izračunao. Ako je θ polarni ugao (slika 3.4) u odnosu na smer polarizacije kao osu, površinska gustina naelektrisanja na površi šupljine je $-P \cos \theta$. Električno polje u centru sferične šupljine poluprečnika a je

$$E_2 = P / 3\epsilon_0. \quad (3.17)$$



Slika 3.4 Proračun polja u sferičnoj šupljini u homogeno polarizovanoj sredini. [23]

Polje E_3 koje potiče od dipola u unutrašnjosti šupljine je jedini član koji zavisi od kristalne strukture. U slučaju kubične simetrije, kada se svi atomi zamene tačkastim dipolima paralelni jedni drugima, $E_3 = 0$. [23,30]

Tako je

$$\mathbf{E}_{lok} = \mathbf{E} + \frac{1}{3\epsilon_0} \mathbf{P}. \quad (3.18)$$

Relacija (3.18) predstavlja Lorencovu relaciju: polje koje deluje na atom u kubičnoj oblasti je makroskopsko polje E plus doprinos $P/3\epsilon_0$ od polja koje potiče od polarizacije drugih atoma u uzorku. [23,30]

Relativna dielektrična konstanta (permitivnost) ϵ_r sredine koja je izotropna ili kubična je relativna u odnosu na vakuum i definisana za makroskopsko električno polje kao:

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}}{\epsilon_0 \mathbf{E}} = 1 + \frac{\mathbf{P}}{\epsilon_0 \mathbf{E}}. \quad (3.19)$$

a električna susceptibilnost

$$\chi = \frac{\mathbf{P}}{\epsilon_0 \mathbf{E}} = \epsilon_r - 1. \quad (3.20)$$

3.2.2. Kompleksna dielektrična permitivnost

U naizmeničnom električnom polju, koje je prostoperiodična funkcija vremena, mogući su svi procesi polarizacije kao i u konstantnom električnom polju, kada je vreme odigravanja ovih procesa kraće od vremena trajanja poluperiode spoljašnjeg električnog polja. Kada se dielektrik nalazi u spoljašnjem prostoperiodičnom električnom polju $E=E_0 e^{i\omega t}$, pomeranje svakog elektrona pojedinačno, ekvivalentno je harmonijskim oscilacijama harmonijskog oscilatora za koji važi jednačina

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + \omega_0^2 m x = e E_0 e^{i\omega t} \quad (3.21)$$

gde je E_0 amplituda spoljašnjeg prostoperiodičnog električnog polja. Za rešenje jednačine harmonijskog oscilatora $x = x_0 e^{i\omega_0 t}$ iz jednačine (3.21) za amplitudu oscilovanja dobija se

$$x_0 = \frac{e}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} E_0 \quad (3.22)$$

gde je ω_0 sopstvena učestanost oscilovanja elektrona oko ravnotežnog položaja. Iz jednačina (3.9) i (3.22) sledi

$$P = \frac{Ne^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} E_0 \quad (3.23)$$

Za relativnu dielektričnu konstantu iz (3.19) i (3.23) dobija se

$$\varepsilon_r = 1 + \frac{Ne^2}{m\varepsilon_0(\omega_0^2 - \omega^2)}. \quad (3.24)$$

Kod realnih dielektrika kojima su svojstveni dielektrični gubici, relativna dielektrična konstanta je kompleksna veličina, pa važi da je

$$\varepsilon_r = 1 + \frac{Ne^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) + i\gamma\omega} \quad (3.25)$$

gde γ predstavlja disipacionu konstantu.

Kada se izvrši razdvajanje realnog i imaginarnog dela u (3.25) za realni deo relativne dielektrične konstante dobija se izraz

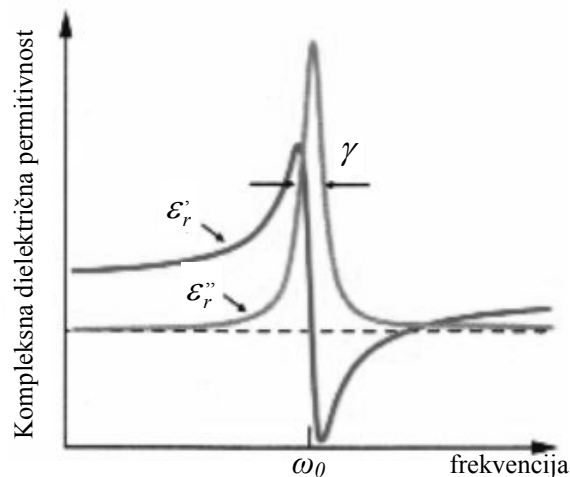
$$\varepsilon_r' = 1 + \frac{Ne^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2}, \quad (3.26)$$

a imaginarni deo relativne dielektrične konstante je

$$\varepsilon_r'' = \frac{Ne^2}{m\varepsilon_0} \cdot \frac{\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2} \quad (3.27)$$

gde je N broj elektrona u jedinici zapremine. [23,30]

Na slici 3.5 data je zavisnost realnog i imaginarnog dela relativne dielektrične konstante od učestanosti naizmeničnog električnog polja. Sa smanjenjem učestanosti naizmeničnog električnog polja od ω_0 ka $\omega \rightarrow 0$, realni deo kompleksne dielektrične konstante raste od vrednosti koju ima za $\omega = \omega_0$, dostiže svoju maksimalnu vrednost i zatim se smanjuje do vrednosti koja je veća od jedinice za $\omega = 0$. Kada se učestanost naizmeničnog polja povećava od učestanosti $\omega = \omega_0$ do učestanosti $\omega \rightarrow \infty$, realni deo kompleksne dielektrične konstante se smanjuje od vrednosti koju ima za učestanost $\omega = \omega_0$, prolazi kroz minimum i zatim se povećava vrednost realnog dela kompleksne dielektrične konstante težeći jedinici za $\omega \rightarrow \infty$. Imaginarni deo kompleksne dielektrične konstante raste sa porastom učestanosti, dostiže svoju maksimalnu vrednost, a zatim opada vrednost imaginarnog dela kompleksne dielektrične konstante sa porastom učestanosti naizmeničnog električnog polja težeći nuli kada $\omega \rightarrow \infty$. [31]



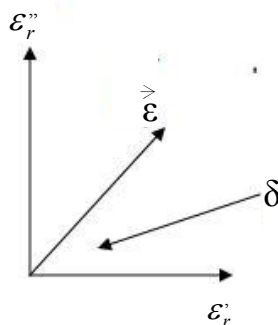
Slika 3.5 Zavisnost realnog i imaginarnog dela relativne dielektrične konstante od učestanosti naizmeničnog električnog polja. [31]

3.2.3. Faktor dielektričnih gubitaka

Dielektrični gubici nastaju usled zagrevanja dielektrika u konstantnim električnim poljima, koje se javlja kao posledica proticanja električne struje u dielektriku. Kada se dielektrik nalazi u promenljivom električnom polju, posledica su neprestanog pomeranja nosilaca naelektrisanja, koja teže da prate promenu spoljašnjeg električnog polja. Kada se spoljašnje električno polje menja sporo, pomeranje nosilaca naelektrisanja u dielektriku uspeva da sledi spore promene električnog polja, a fazni pomeraj između polarizacije i spoljašnjeg električnog polja je jednak nuli, pa su i dielektrični gubici u dielektriku jednaki nuli. Dielektrični gubici su različiti od nule u slučaju kada pomeranje nosilaca naelektrisanja ne može da sledi promene električnog polja, a fazni pomeraj između polarizacije i spoljašnjeg električnog polja je različit od nule. Najčešće se dielektrični gubici u dielektriku izražavaju kao tangens ugla faznog pomeraja δ ($\text{tg}\delta$) između polarizacije i spoljašnjeg električnog polja. [32,33]

Tangens ugla dielektričnih gubitaka ($\text{tg}\delta$) definiše se kao odnos imaginarne i realne komponente kompleksne dielektrične konstante (slika 3.6):

$$\text{tg}\delta = \frac{\varepsilon''_r(\omega)}{\varepsilon'_r(\omega)} \quad (3.28)$$



Slika 3.6 Uz objašnjenje fazorskog dijagrama. [31]

3.2.4. Specifična električna otpornost

Proces polarizacije dielektrika je praćen pomeranjem vezanih nosilaca naelektrisanja, a kao posledica pomeranja nosilaca naelektrisanja u dielektriku se javljaju polarizacione električne struje do uspostavljanja ravnotežnog stanja u dielektriku. Polarizacione električne struje poznate i kao struje pomeraja su kratkotrajne kod nekih vrsta polarizacija dielektrika. Na primer, kod elektronske jonske polarizacije dielektrika, uspostavljanje polarizacionih električnih struja je toliko kratkog trajanja da se one praktično vrlo teško mogu meriti. Dok se kod relaksacione polarizacije javljaju apsorpcione električne struje pomeraja kao posledica usporenih polarizacija. Ako se dielektrik podvrgne dejstvu jednosmernog napona apsorpcione električne struje javljaju se samo u trenutku uključivanja napona, a kada se dielektrik nalazi u naizmeničnom električnom polju apsorpcione električne struje u dielektriku protiču sve dok je dielektrik izložen dejstvu naizmeničnog električnog polja.

Prisustvo malog broja slobodnih nosilaca naelektrisanja u dielektricima uslovljava pojavu zapreminskih električnih struja provodnosti, koje su vrlo male jačine u dielektricima. Ukupna gustina električne struje u dielektriku jednaka je zbiru gustine električne struje provodnosti j_{pr} i gustine električne struje pomeraja j_{pm} ,

$$j = j_{pr} + j_{pm} \quad (3.29)$$

Gustine električne struje pomeraja određena je brzinom promene vektora električnog pomeraja \mathbf{D} ,

$$j_{pm} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (3.30)$$

gde su električne pomeraju D uzeti u obzir trenutni i usporeni pomeraji nosilaca naelektrisanja u dielektriku. Kada gustina električne struje opada sa vremenom, električna provodnost dielektrika je posledica prisustva primesa, a u toku proticanja jednosmerne električne struje vrši se „električno čišćenje“ dielektrika. Ako su nosioci naelektrisanja u dielektriku sami izgrađivači dielektrika (joni, atomi ili molekuli), gustina električne struje u dielektriku raste sa povećanjem vremena proticanja. U ovom slučaju proboj dielektrika može da bude posledica „starenja“ dielektrika pod uticajem električnog polja. [32]

Električna provodnost dielektrika zavisi od agregatnog stanja dielektrika, vlažnosti, temperature i u izvesnoj meri od jačine električnog polja u kome se nalazi dielektrik.

3.2.5. Dielektrična čvrstoća

Pod dejstvom homogenog električnog polja može doći do proboja dielektrika, jer se usled intenziteta ili trajanja spoljašnjeg električnog polja u dielektriku pokrenu provodni mehanizmi. Kako u tom slučaju dielektrični materijali mogu da izgube sposobnost da razdvajaju potencijale, kroz njih se ostvaruje kratak spoj. Minimalna vrednost homogenog električnog polja pri kojoj dolazi do proboja dielektrika predstavlja dielektričnu čvrstoću. Ona se u praksi određuje eksperimentalno i odnosi se isključivo na trenutni (čisto električni) proboj dielektričnih materijala, jer se dielektrik stavlja između elektroda koje obezbeđuju pseudohomogeno električno polje.

Veličina kojom se opisuje svojstvo dielektričnog materijala u odnosu na električni proboj je probojni napon U_{pr} . Probojni napon određenog dielektrika zavisi od oblika i vrste materijala kao i od spoljašnjih uslova. Zato je uz probojni napon potrebno precizno definirati uslove pri kojima je određen. Ako je dielektrični materijal izložen delovanju homogenog električnog polja onda je dielektrična čvrstoća:

$$E_{pr} = \frac{U_{pr}}{d} \left[\frac{kV}{mm} \text{ ili } \frac{MV}{m} \right] \quad (3.31)$$

U zavisnosti od agregatnog stanja dielektrika različiti su uzroci i posledice električnog proboja. Proboj dielektrika može biti trenutni ili odloženi. Odloženi proboj dielektrika se može javiti kod dielektrika u čvrstom ili tečnom agregatnom stanju. Pod dejstvom električnog polja kod dielektrika u čvrstom agregatnom stanju dolazi do

termičkog proboja, jer je pojava povezana sa procesom zagrevanja materijala. Kod čvrstih dielektrika pod dejstvom električnog polja, kritična vrednost gustine električne struje kroz dielektrik se formira emisionim i jonizacionim putem, posle čega dolazi do proboja. [20]

Takođe, električni proboj kod gasovitih dielektrika pod delovanjem jakog električnog polja nastaje usled udara koji izaziva jonizaciju. U jakom električnom polju naelektrisanim česticama (elektroni ili joni), između dva sudara, toliko poraste kinetička energija da pri sudaru s neutralnim molekulom izazovu njegovu jonizaciju. Kada energija udarnog elektrona nije dovoljna za jonizaciju on izaziva eksitaciju neutralnog molekula. Vraćanje molekula u osnovno stanje praćeno je emisijom fotona koji može izazvati jonizaciju nekog drugog molekula. Dielektrična čvrstoća gasovitog dielektrika značajno zavisi od temperature i pritiska. Sa porastom pritiska smanjuje se srednja dužina slobodnog puta elektrona pa raste dielektrična čvrstoća. Smanjenjem pritiska opada i dielektrična čvrstoća. Pri vrlo niskim pritiscima gas je toliko razređen da je malo verovatna jonizacija molekula, pa raste dielektrična čvrstoća. Sa porastom temperature smanjuje se gustina gasa, odnosno povećava se srednja dužina slobodnog puta elektrona i opada dielektrična čvrstoća gasovitog dielektrika. Na dielektričnu čvrstoću gasovitog dielektrika utiču primese i vlažnost, dok je uticaj frekvencije slabo izražen. Gasoviti dielektrici se regenerišu posle proboja. Prilikom proboja formira se kanal jonizovanog gasa između elektroda; prvo nastaje iskra koja pri dovoljno visokom naponu prelazi u električni luk. [20]

U čistim tečnim dielektricima električni proboj nastaje udarnom jonizacijom slično kao kod gasovitih dielektrika. Tečni dielektrici imaju veću dielektričnu čvrstoću od gasovitih dielektrika jer je manja dužina srednjeg slobodnog puta elektrona koji vrše jonizaciju. Realni tečni dielektrični materijali sadrže primese (vodu, plinove, čvrste čestice) pa dielektrična čvrstoća zavisi od njihove količine. Uticaj pritiska i temperature na dielektričnu čvrstoću čistih tečnih dielektričnih materijala nema praktični značaj. Tečni dielektrici se regenerišu posle proboja.

Pored pomenutih, u dielektricima se mogu javiti i elektrohemijski proboj koji nastaje kad se električna otpornost dielektrika smanji zbog hemijskih promena prouzrokovanih jakim električnim poljem. U nekim slučajevima jaka električna polja mogu dovesti do elektrolize materijala, pojavu ozona na površini materijala i sl.

Opadanjem dielektrične čvrstoće pri delovanju jakog električnog polja koje izaziva hemijske promjene u dužem vremenskom periodu, dolazi do starenja dielektrika.

3.2.6. Podela dielektričnih materijala

Klasifikaciju dielektričnih materijala vršimo na više načina, i to prema: agregatnom stanju, poreklu, dielektričnim svojstvima, nameni, zavisnosti vektora dielektričnog pomeraja od vektora električnog polja, tipu polarizacije, vrsti polarizacije, mehanizmu polarizacije i reverzibilnosti dielektričnih svojstava nakon proboja.

Agregatno stanje utiče na podelu dielektrika na čvrste, tečne i gasovite. Prema strukturi čvrstih dielektrika, oni se mogu podeliti na čvrste dielektrike sa monokristalnom, polikristalnom, amorfnom, polimernom ili tečnokristalnom strukturom. Dielektrike prema poreklu delimo na neorganske i organske. Oba tipa dielektrika mogu biti prirodni ili sintetički.

Kada se posmatraju dielektrična svojstva, podela dielektrika se vrši na slabe, dobre i odlične izolatore. Uporedne vrednosti ovakvih izolatora date su u Tabeli 3.2.

Tabela 3.2. Redovi veličine dielektričnih parametara slabih, dobrih i odličnih izolatora, kao i ekstremnih vrednosti tih parametara [28]

Parametri	Slabi izolatori	Dobri izolatori	Odlični izolatori	Ekstremne vrednosti
Specifična električna otpornost, ρ , Ωcm	$10^8 - 10^{12}$	$10^{12} - 10^{16}$	$>10^{16}$	10^{20}
Faktor dielektričnih gubitaka, $\text{tg } \delta$, $\times 10^{-4}$	>100	<100	>10	<1 (čvrsti i tečni) $<10^{-4}$ (gasoviti)
Relativna dielektrična konstanta, ϵ_r	>10	<10	<3	15000
Dielektrična čvrstoća, E_{kr} , kV/mm	<25	25-50	≥ 50	160 (folija); 800 (film)

U skladu namenom dielektrika, delimo ih na aktivne i pasivne. Aktivni dielektrici se mogu koristiti kao izolacioni materijal, ali i u elektronskim komponentama, kao što

su kondenzatorima ili pretvarači, dok pasivni dielektrici mogu poslužiti samo kao izolacioni materijali.

Dielektrike prema zavisnosti vektora dielektričnog pomeraja od vektora električnog polja, delimo na linearne i nelinearne. Dielektrik linearan u slučaju kada je vektor dielektričkog pomeraja linearna funkcija vektora električnog polja. U suprotnom, reč je o nelinearnom dielektriku.

Prema tipu polarizacije, podela dielektrika je izvršena na dielektrike sa dominantnom orijentacionom, neelastičnom i elastičnom polarizacijom. Frekventne karakteristike dielektrika utiču na razlikama između tipova polarizacije.

Vrsta polarizacije određuje da li su dielektrici polarni i nepolarni. Polarni (dipolni) dielektrici su oni koji poseduju dipole i onda kada nema spoljašnjeg polja. Prilikom dejstva električnog polja, kod njih dolazi samo do orijentacije već postojećih dipola. Nepolarni (neutralni) dielektrici su oni kod kojih nema električnih dipola u odsustvu delovanja spoljašnjeg električnog polja.

Prema mehanizmu polarizacije, podela dielektrika je izvršena na dielektrike sa elastičnom, orijentacionom i dielektrike sa međuslojnom polarizacijom. Elastična polarizacija se javlja samo dok postoji spoljašnje električno polje. Orijetaciona (relaksaciona, toplotna) polarizacija je karakteristika za polarnih dielektrika, kod kojih dolazi do orijentacije dipola u smeru delovanja spoljašnjeg električnog polja. Ako na polarni dielektrik deluje spoljašnje električno polje. Međuslojna (Maksvel-Vagnerova) polarizacija nastaje usled nagomilavanja slobodnih nosilaca naelektrisanja na granicama nejednorodnosti i na mestima strukturne oštećenosti dielektrika, što dovodi do distorzije makroskopskog polja. Zapreminsko naelektrisanje koje je nastalo na taj način dovodi do stvaranja dipolnih momenata i povećanja kapacitivnosti električnog kondenzatora i vrednosti relativne dielektrične konstante.

Reverzibilnost dielektričnih svojstava nakon proboja utiče na to da se dielektrici dele na reverzibilne i ireverzibilne. Kod reverzibilnim dielektrika nakon električnog proboja dolazi po povraćaja dielektričnih svojstava koja su postojala pre električnog proboja. Ireverzibilnim dielektricima se ne vraćaju dielektrična svojstva, odnosno kod njih se električnim probom formiraju provodni mostovi. O reverzibilnim dielektricima se može govoriti samo uslovnoj, jer potpuno reverzibilni dielektrici teorijski postoje samo teorijski. [34,35]

3.3. Izolatori sa Kuperovim parovima

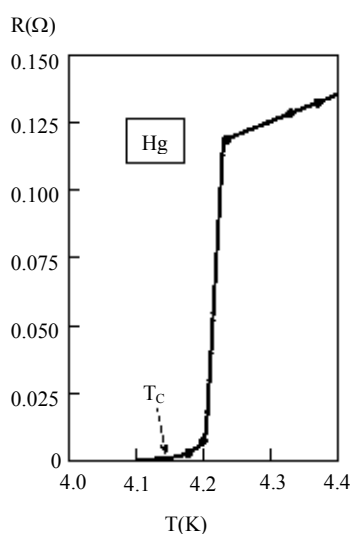
Električni provodnici i izolatori predstavljaju suprotne krajnosti. Kod obe vrste materijala procesi provođenja su kvantnomehaničke prirode, ali se detalji ovih procesa u mnogome razlikuju. U izolatorima je, npr. na temperaturi apsolutne nule kretanje elektrona u velikoj meri sputano odnosno koncentracija kvazislobodnih elektrona je zanemarljivo mala. S druge strane, u nekim provodnicima je moguća nulta otpornost na ekstremno niskim temperaturama, koja se javlja zbog kolektivnog kvantnog stanja elektrona koje se protivi rasejanju bilo kog od elektrona, a time i pojavi otpornosti. Na niskim temperaturama i u slabom magnetnom polju nulte jačine, ovakvi materijali nemerljivo niske otpornosti predstavljaju superprovodne materijale. Ovi materijali u specijalnim situacijama, za određene debljine i strukturna uređenja filmova, primenjene napone i magnetna polja, mogu da pređu iz stanja superprovodnosti u stanje izolatore sa elektronima uparenim u tzv. Kuperove parove. Ovakav prelaz superprovodnik-izolator sa Kuperovim parovima smatra se kontinualnim kvantnim faznim prelazom [36,37] i predmet je mnogobrojnih skorašnjih studija, kako teoretskih [38,39] tako i eksperimentalnih [40-44]. Objašnjenje za ovaj prelaz nalazi se u lokalizaciji Kuperovih parova, koji čine osnovu superprovodnog stanja i promeni mehanizma provođenja, tj. energetskog pobuđivanja ovih parova.

Očigledno je da je za opis izolatora sa Kuperovim parovima neophodno najpre izanalizirati superprovodno stanje.

3.3.1. Superprovodnost

Otkriće superprovodnosti kod nekih materijala pri niskim temperaturama, koje su najčešće oštro određene temperature, izazvalo je veliku pažnju u svetu nauke. Za to otkriće je najzaslužniji holandski fizičar Kamerling Onnes (Kamerlingh-Onnes), koji je 1911. godine započeo eksperimente koji su trebali razrešiti pitanje ponašanja električne otpornosti na niskim temperaturama. U ono doba fizičari su imali razna mišljenja za otpornost metala blizu apsolutne nule (neki su smatrali da se zaustavlja tok elektrona i da na apsolutnoj nuli potpuno prestaje, to jest da materijal postaje izolator, a neki su smatrali da i na vrlo niskim temperaturama otpornost postoji, ali da kontinualno opada,

konačno postojalo je i mišljenje, da na nekoj niskoj temperaturi, otpornost dostiže minimalnu vrednost, pri čemu struja teče s malim ili ni sa kakvim otporom). Kamerling Ones 1911. godine vrši merenja otpornosti žive, čiju je temperaturu pomoću tečnog helijuma održavao na nekoliko stepeni iznad apsolutne nule, te je primetio da se smanjenjem temperature otpornost smanjuje i da blizu 4,2K njena otpornost naglo pada na nulu (slika 3.7), što je opisao rečima: "Živa je prešla u novo stanje, koje se zbog svojih izuzetnih električnih osobina može nazvati superprovodno stanje".[45] Kamerling Ones ovom fenomenu savršene provodnosti daje ime superprovodnost. To otkriće je manifestacija prve, bitne osobine superprovodnosti: hlađenje ispod neke određene (kritične) temperature T_c , električna otpornost materijala postaje nula; struja kroz superprovodnu petlju teče bez primenjene razlike potencijala i bez gubitaka, praktično beskonačno dugo. 1913. godine Kamerling Ones nagrađen je Nobelovom nagradom u fizici za proučavanje ponašanja materije na niskim temperaturama i topljenje helijuma.

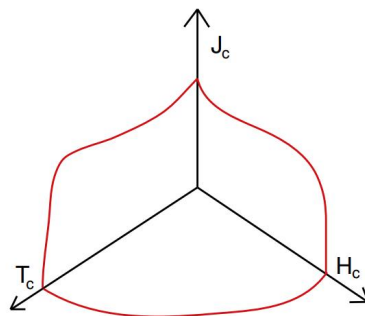


Slika 3.7 Prikaz zavisnosti otpornosti žive od temperature (originalan grafik koji je objavio Kamerling Ones) [10]

Nakon otkrića superprovodnosti svi su bili svesni velike mogućnosti praktične primene ovog otkrića. Kamerling Ones zatim pokušava da iskoristi superprovodnike za dobijanje jakih magnetskih polja, ali tada poznati superprovodni materijali nisu podnosili veliku gustinu struje, pa je već slabo magnetno polje, stvoreno prolazom struje, razbijalo superprovodno stanje. Na taj način je Kamerling Ones definisao

zavisnost superprovodnosti od tri parametra (Slika 3.8). To su: kritična temperatura (T_c), kritično magnetno polje (H_c) i kritična gustina struje (J_c). Svaki od parametra jako zavisi od preostala dva, i samo ako su svi manji od kritičnih vrednosti za određeni materijal, materijal će biti u superprovodnom stanju (npr. pojava superprovodnosti nastaje samo ako je gustina struje dovoljno niska, pređe li kritičnu vrednost, električna otpornost metala se ponovo uspostavlja). [46]

1933. godine Hans Majsner i Robert Oksenfeld ispitivanjem magnetnih karakteristika superprovodnih materijala, otkrili su da magnetno polje može nestati unutar materijala u superprovodnom stanju u situaciji kada se unese u magnetno polje na temperaturi T nižoj od odgovarajuće T_c . Na površini materijala u superprovodnom stanju indukuju se struje koje stvaraju takvo magnetno polje da se poništava spoljašnje magnetno polje, pa je u unutrašnjosti materijala u superprovodnom stanju magnetno polje nula. Taj fenomen se naziva *Majsnerovim efektom*. Osim toga, ovi materijali su gubili svoja superprovodna svojstva iznad određene temperature u zavisnosti od kritičnog magnetnog polja $B_c(T)$. [47]



Slika 3.8. Zavisnost superprovodnosti od kritične temperature (T_c), kritičnog magnetnog polja (H_c), i kritične gustine struje (J_c)

Ako se dovoljno rashlađen superprovodni materijal unese u magnetno polje više vrednosti jačine od jačine kritičnog polja neće doći do Majsnerovog efekta. U tom slučaju materijal će izgubiti superprovodna svojstva. S tim u vezi u zavisnosti od vrste superprovodnog materijala koji su u obliku žice i ose paralelne sa primenjenim magnetnim poljem mogu se uočiti dva tipa ponašanja. Ovi materijali dele se na superprovodne materijale I i II vrste. [47]

U tabeli 3.3. date su kritične temperature nekih superprovodnih elemenata klasifikovanih kao superprovodni materijali I vrste. Među navedenim elementima nema bakra, srebra i zlata koji su odlični električni provodnici na uobičajenim temperaturama, ali ne pokazuju superprovodna svojstva. Pomenuti superprovodni materijali I vrste predstavljaju meke superprovodnike, njihova kritična magnetna polja su isuviše mala da bi bili pogodni za tehničku primenu u namotajima za superprovodne magnete.[48]

U primenjenom magnetnom polju B , vrednost kritične temperature T_c se smanjuje sa povećanjem magnetnog polja kao što je prikazano za nekoliko tipova superprovodnih materijala I vrste na slici 3.9. Kada magnetno polje poraste iznad kritične vrednosti B_c , superprovodno stanje nestaje i materijal se vraća u provodno stanje. Vrednost kritičnog magnetnog polja varira sa temperaturom prema sledećem empirijskom izrazu:

$$B_c(T) = B_c(0) \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right] \quad (3.32)$$

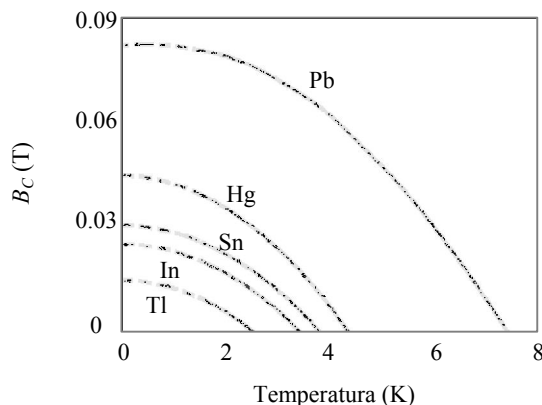
gde $B_c(0)$ predstavlja kritično polje materijala u superprovodnom stanju na $T = 0$ K.[48]

Tabela 3.3. Kritične temperature i kritična magnetna polja (na $T = 0$ K) za neke superprovodne elemente [48]

Superprovodnik	T_c [K]	$B_c(T=0)$ [T]
Al	1.140	0.0105
Ga	1.091	0.0051
Hg	4.153	0.0412
In	3.404	0.0293
Nb	9.50	0.1980
Pb	7.193	0.0803
Sn	3.722	0.0309
Ta	4.483	0.0830
Ti	0.39	0.0100
V	5.38	0.1420
W	0.012	0.000107
Zn	0.875	0.0053

Kao što se može videti iz jednačine (3.32), vrednost B_c je maksimalna na 0 K. Vrednost $B_c(0)$ nalazi se određivanjem B_c na nekoj konačnoj temperaturi i onda ekstrapoliranjem nazad do temperature 0 K koja se ne može postići u laboratorijskim

uslovima. Kritično polje je ograničeno maksimalnom strujom koja može biti održana u superprovodnim materijalima I vrste.



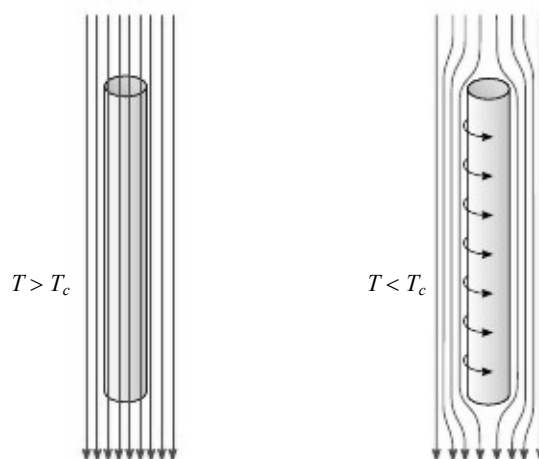
Slika 3.9 Zavisnost vrednosti kritičnog magnetnog polja od kritične temperature za nekoliko tipova superprovodnih materijala I vrste. Ekstrapolacijom ovih polja do 0 K dobijaju se vrednosti kritičnih magnetnih polja date u Tabeli 3.4. Za date metale, materijal je superprovodan za magnetna polja i temperature ispod kritičnih vrednosti. [48]

Prema Faradejevom zakonu o magnetnoj indukciji, ako bi se savršeni provodnik ohladio ispod svoje kritične temperature u prisustvu primenjenog magnetnog polja, polje bi trebalo da ostane zarobljeno u unutrašnjosti provodnika čak i nakon što se provodnik izvuče iz polja. Krajnje stanje savršenog provodnika u primenjenom magnetnom polju trebalo bi da zavisi od toga da li je prvo provodnik unet u magnetno polje ili je ohlađen ispod kritične temperature. Ukoliko bi provodnik bio unet u polje nakon što je ohlađen ispod svoje kritične temperature, polje bi trebalo da iščezne iz superprovodnika. U suprotnom, ako bi provodnik bio unet u polje pre nego što je ohlađen do ispod kritične temperature, polje ne bi trebalo da nestane u superprovodniku posle hlađenja ispod T_c . [47]

Međutim, naučnici 1930tih su prilikom eksperimentisanja i ispitivanja magnetnih osobina superprovodnih materijala došli do potpuno suprotnih rezultata. Majsner i Oksfeld su otkrili da kada je metal postao superprovodan u prisustvu slabog magnetnog polja, polje je kompletno nestalo ($B = 0$) u unutrašnjosti superprovodnika. Isto stanje $B = 0$ je postignuto u oba slučaja pre i posle hlađenja materijala ispod

njegove kritične temperature. Na slici 3.10 prikazan je ovaj efekat za materijal u obliku dugačkog cilindra. Polje protiče kroz cilindar kada je temperatura cilindra veća od kritične (slika 3.10a), dok kada je temperatura niža od kritične, linije polja spontano nestaju iz unutrašnjosti superprovodnog materijala (slika 3.10b). Iz ovoga se zaključuje da su superprovodni materijali I vrste ne samo savršeni provodnici ($\rho = 0$) nego su i savršeni dijamagnetici ($B = 0$). Pored nulte otpornosti ovo je fundamentalna karakteristika koja pokazuje da magnetizam ima značajnu ulogu za superprovodne materijale I vrste. Ako je primenjeno magnetno polje dovoljno jako ($B > B_c$), ono razara superprovodno stanje i polje prodire kroz uzorak.[47,49]

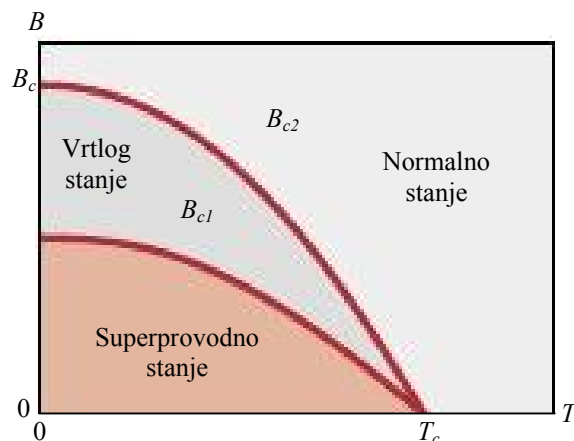
Superprovodni materijal kao savršeni dijamagnetik permanentno odbija magnet, što znači da stalni magnet levitira iznad superprovodnika.



Slika 3.10 Superprovodni materijal I vrste u obliku cilindra u spoljašnjem magnetnom polju. a) Na temperature iznad T_c , linije polja prodiru kroz uzorak; b) Kada je cilindar ohlađen do $T < T_c$ na kojoj postaje superprovodan, magnetni fluks je isključen iz unutrašnjosti usled indukcije površinskih struja. [49]

Superprovodni materijali II vrste su uglavnom legure ili prelazni metali sa velikom električnom otpornošću u normalnom stanju, što znači da im je srednji slobodni put elektrona mali. Ovi materijali su u čistom superprovodnom stanju, ali se kod njih usled postepenog prelaza iz superprovodnog u provodno stanje javlja mešano stanje, i za njih su karakteristična dva kritična magnetna polja B_{c1} i B_{c2} . U magnetnom polju jačine polja manje od prvog (donjeg) kritičnog polja $B < B_{c1}(T)$ (slika 3.11) materija će kompletno

ostati u superprovodnom stanju i magnetni fluks neće prodrći u materijal kao kod superprovodnih materijala I vrste. Dok u magnetnom polju jačine polja veće vrednosti od drugog (gornjeg) kritičnog polja $B > B_{c2}(T)$ magnetni fluks potpuno prodire u materijal i superprovodno stanje nestaje isto kao kod superprovodnih materijala I vrste. Kada je jačina magnetnog polja leži između 2 kritične vrednosti $B_{c1}(T) < B < B_{c2}(T)$, magnetni fluks delimično prodire u materijal, koji prelazi u mešano stanje poznatije kao vrtložno stanje zbog pojave vrtložnih struja. U vrtložnom stanju dolazi do stvaranja složene pravilne mikroskopske strukture u materijalu, tj. naizmenično su raspoređene superprovodne i provodne oblasti. Vrtložni regioni mogu se predstaviti kao vlakna materijala koja prolaze kroz uzorak kada je prisutno magnetno polje veće od nižeg kritičnog polja. Sa povećanjem jačine spoljašnjeg magnetnog polja, broj vlakana se povećava i kad polje dostigne gornju kritičnu vrednost, uzorak pređe u provodno stanje.[50]



Slika 3.11 Kritično magnetno polje u funkciji od temperature za superprovodne materijale II vrste. Ispod B_{c1} , materijali se ponašaju kao superprovodni I vrste.

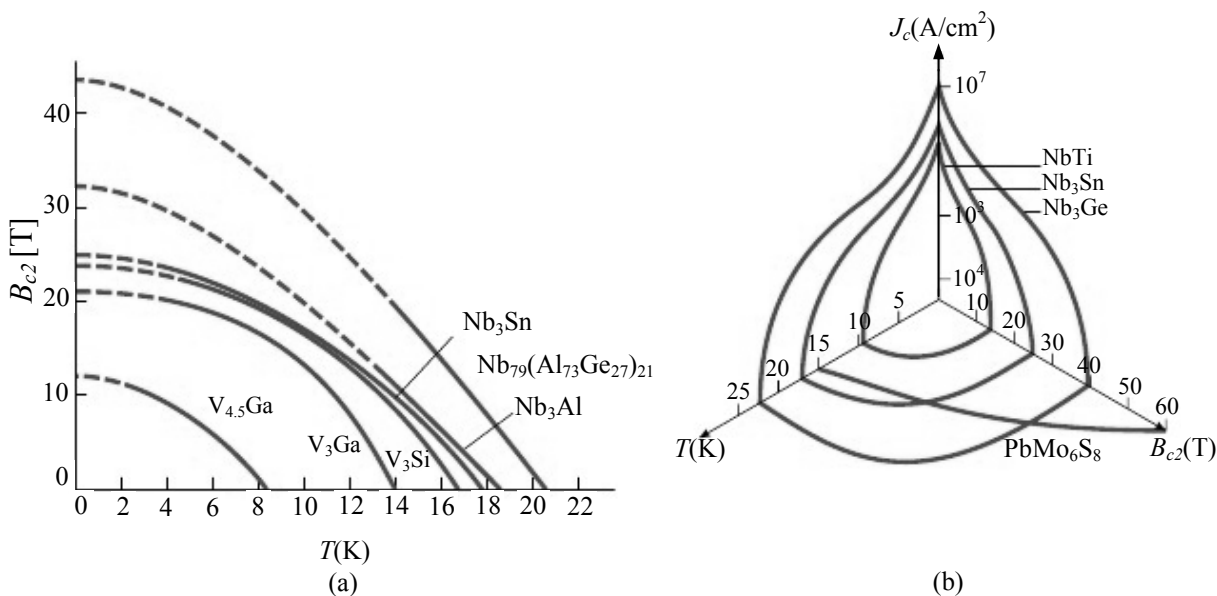
Iznad B_{c2} , materijali se ponašaju kao normalni provodnici. Između ova dva polja, superprovodni materijal je u vrtložnom (mešanom) stanju. [50]

U tabeli 3.4 date su kritične temperature i vrednosti B_{c2} za nekoliko tipova superprovodnih materijala II vrste. Vrednosti B_{c2} su veoma velike u poređenju sa vrednostima B_c za superprovodne materijale I vrste. Zbog toga su superprovodni materijali II vrste dobri za konstrukciju superprovodnih magneta visokih polja. Na primer, korišćenjem legura NbTi, superprovodni solenoidi mogu biti iskorišćeni za proizvodnju magnetnih polja u opsegu od 5 do 10 T. Osim toga, nije potrebna nikakva

snaga za održavanje ovih polja. Gvozdena jezgra elektromagneta retko prelaze preko 2 T i troše snagu za održavanje polja. Na slici 3.12a) grafički je prikazana zavisnost B_{c2} od temperature, a na 3.12b) prikazan je trodimenzionalni grafik varijacija B_{c2} i kritične gustine struje J_c od kritične temperature.[51]

Tabela 3.4 Kritične temperature i kritična magnetna polja (na $T = 0$ K) nekih superprovodnih elemenata [51]

Superprovodnik	T_c [K]	$B_c(T=0)$ [T]
Nb ₃ Al	18.7	32.4
Nb ₃ Sn	18.0	24.5
Nb ₃ Ge	23.2	38
NbN	15.7	1.5
NbTi	10	15
Nb ₃ (AlGe)	20.7	44
V ₃ Si	16.9	2.35
V ₃ Ga	14.8	2.1
PbMoS	14.4	6.0



Slika 3.12 a) zavisnost B_{c2} od temperature za nekoliko tipova superprovodnika II vrste, b) trodimenzionalni grafik varijacija B_{c2} i kritične gustine struje J_c od kritične temperature za nekoliko tipova superprovodnika II vrste [52]

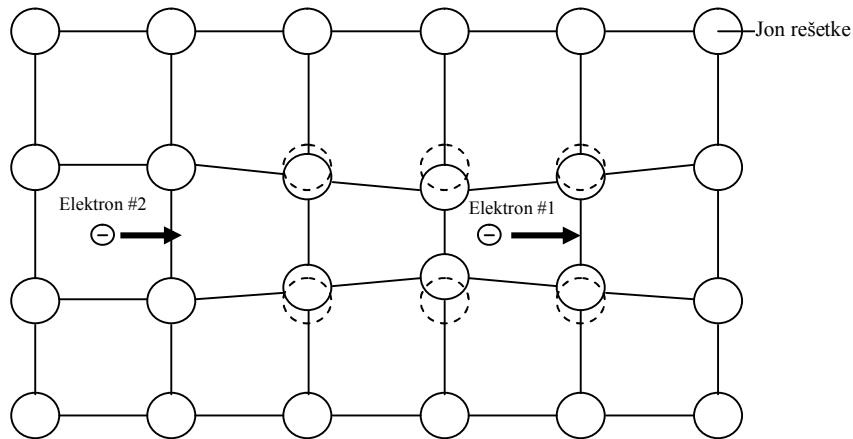
Za superprovodne materijale I vrste, kada je temperatura ispod T_c , kritična vrednost jačine magnetnog polja B_c je $\sim 0,1$ T, dok za superprovodne materijale II vrste kritična vrednost jačine magnetnog polja B_{c2} može dostići 100 T.

Kada je superprovodni materijal II vrste u vrtložnom stanju, dovoljno velike struje mogu da izazovu da vrtlozi pomere normalu u pravcu struje. Ovo vrtložno kretanje odgovara promeni fluksa sa vremenom i proizvodi otpornost u materijalu. Dodavanjem nečistoća ili drugih primesa, vrtlozi se efektivno mogu fiksirati i preduprediti njihovo kretanje (pomeranje), kako bi se proizvela nulta otpornost u vrtložnom stanju. Kritična struja za superprovodne materijale II vrste je struja koja kada se pojača fluksom u vrtlozima, daje Lorencovu silu koja nadvladava silu fiksiranja. [53]

Opštu kvantnu teoriju superprovodnosti dali su John Bardeen, Leon N. Cooper i J. Robert Schrieffer 1957. godine klasičnim člankom i ova teorija je nazvana BCS po inicijalima prezimena pomenutih naučnika. [54] Prema ovoj teoriji superprovodnost je posledica stvaranja parova elektrona, tzv. Kuperovi parovi, uz pomoć vibracija kristalne rešetke (fonona), elektroni su tako kondenzovani u osnovnom kvantnom stanju i koherentno se dalje kreću. Odnosno uzajmano dejstvo elektron-rešetka-elektron je privlačno i može da prevlada Kulonovo odbijanje elektrona. Interakcija dovodi do pojave superprovodnog stanja. Mehanizam indirektno interakcije je u sledećem: elektron 1 uzajamno deluje sa jonima rešetke koju deformiše što dovodi do blagog povećanja koncentracije pozitivnog naelektrisanja, elektron 2 „koristi“ deformaciju rešetke da smanji svoju potencijalnu energiju i biva privučen u tom području pre nego što se joni rešetke vrate u svoj ravnotežni položaj (slika 3.13). Kao rezultat toga drugi elektron uzajamno deluje sa prvim elektronom preko deformacije rešetke ili fononskog polja. To je omogućeno otkrićem da jonska rešetka odnosno masa jona M utiče da se kritična temperatura izotopa metala smanjuje sa njenim povećanjem (izotopski efekat), čime je dokazano da rešetka ima suštinsku ulogu u nastajanju superprovodnog stanja. Eksperimentalni rezultati za svaku vrstu izotopa mogu biti predstavljeni u obliku relacije:

$$M^\alpha T_c = const \quad (3.33)$$

Često se dobija za $\alpha = 1/2$. Na primer u slučaju žive, $T_c = 4.161$ K za izotop ^{199}Hg , 4.153 K za ^{200}Hg i 4.126 K za ^{204}Hg . [49]



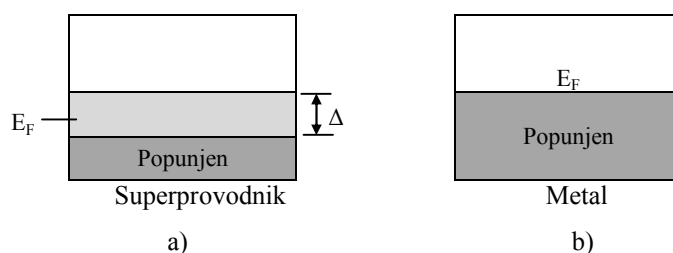
Slika 3.13. Interakcija između elektrona preko deformacije rešetke. Elektron 1 privlači pozitivne jone ka sebi čime ih povlači iz njihovog ravnotežnog stanja (isprekidani kružići). Ovo zakrivljenje rešetke formira pozitivno naelektrisanje koje privlači elektron 2 ka tom području.

Ključna karakteristika BCS teorije je formiranje stanja vezanih elektrona u parovima, poznatiji kao Kuperovi parovi. Godine 1962. Brian D. Josephson predvideo je struju tunelovanja između dva superprovodnika odvojenih tankim ($<2\text{mm}$) izolacionim barijerama, gde je struja formirana od uparenih elektrona. Ubrzo nakon toga, Džozefsonove pretpostavke su potvrđene i danas postoji čitava oblast fizike uređaja zasnovana na Džozefsonovom efektu. J. Georg Bednorz i Karl A. Müller 1986. godine pružili su dokaz o superprovodnosti u oksidima lantanuma, barijuma i bakra na temperaturi od oko 30 K. Ovo je bila glavna prekretnica za superprovodnost zato što je najviša poznata vrednost T_c u to vreme bila je 23 K u jedinjenjima niobijuma i germanijuma. Ovo izuzetno otkriće označilo je početak nove ere visokotemperaturne superprovodnosti, čime je privučena svetska pažnja u naučnoj zajednici i u poslovnom svetu. Najnovija istraživanja pokazuju da kod kompleksa metalnih oksida kritične temperature za superprovodnost idu i preko 150 K. [55]

BCS teorijom su veoma uspešno objašnjene karakteristične osobine superprovodnosti nulta otpornost i nestajanje fluksa. Sa kvalitativne tačke gledišta, može se reći da bi se smanjio moment Kuperovog para usled rasejanja, neophodno je da se istovremeno smanji moment svih ostalih parova, drugim rečima, to je sve ili ništa situacija. Ne može da se promeni brzina jednog Kuperovog para bez promene brzine i

svih ostalih. Nesavršenosti i vibracije rešetke, koje praktično rasejavaju elektrone u normalnim metalima, nemaju nikakav uticaj na Kuperove parove. U odsustvu rasejanja otpornost je nula, a struja postoji zauvek. To je čudno, i možda neverovatno da mehanizam vibracija rešetke, koji je odgovoran (delimično) za otpornost normalnih metala omogućava interakciju iz koje proizilazi superprovodnost. Dakle, bakar, srebro i zlato, kod kojih su prisutna mala rasejanja u rešetki na sobnoj temperaturi nisu superprovodnici, dok olovo, kalaj, živa, i ostali skromni provodnici kod kojih su izražena rasejanja u rešetki na sobnoj temperaturi postaju superprovodnici na niskim temperaturama.[51,54]

Kao što je pomenuto, superprovodno stanje je ono u kom Kuperovi parovi deluju kolektivno, a ne samostalno. Kondenzacija svih parova u isto kvantno stanje, dokazuje da superprovodno stanje predstavlja kao kvantno-mehaničku pojavu na makroskopskom nivou. Kondenzat svih Kuperovih parova predstavlja se koherentnom talasnom funkcijom Ψ koja se proteže preko cele zapremine superprovodnika. Stabilnost superprovodnog stanja je kritično zavisno od jačine korelacije između Kuperovih parova. U stvari, teorija superprovodno ponašanje objašnjava preko energetskih nivoa neke vrste "makromolekula" i postojanja energetskog procepa Δ između osnovnog i pobuđenog stanja sistema, kao na slici 3.14a. Kod normalnih provodnika ne postoji energetski procep (slika 3.14b).[50,51,56]



Slika 3.14 a) Jednostavna struktura energetskih zona za superprovodnik.

Energetski procep je između niži popunjenih stanja i gornjih nepopunjenih stanja. b) Energetska struktura za normalni provodnik nema energetski procep. Na $T = 0$ K, sva stanja ispod Fermijevog su popunjena i sva stanja iznad su nepopunjena [48]

U normalnom provodniku Fermijeva energija E_F predstavlja najveću moguću kinetičku energiju slobodnih elektrona na 0 K. Energetski procep u superprovodniku je veoma mali reda $k_B T_c$ ($\approx 10^{-3}$ eV) na 0 K u poređenju sa energetskim procepom u

poluprovodniku (≈ 1 eV) ili Fermijevom energijom u metalu (≈ 5 eV). Energetski procep predstavlja potrebnu energiju za raskidanje Kuperovog para. Prema BCS teoriji na $T = 0$ K je:

$$\Delta = 3.53k_B T_c \quad (3.34)$$

Stoga superprovodnici koji imaju veliki energetski procep imaju relativno visoke kritične temperature. Vrednosti za energetski procep predviđenih jednačinom (3.34) su u dobroj saglasnosti sa eksperimentalnim vrednostima iz tabele 3.5 (korišćeno tunelovanje za dobijanje ovih vrednosti je opisano kasnije). [48,49]

Tabel 3.5 Energetski procepi za neke superprovodne materijale na $T = 0$ K [13]

Superprovodnik	Δ (meV)
Al	0.34
Ga	0.33
Hg	1.65
In	1.05
Pb ¹	2.73
Sn	1.15
Ta	1.4
Zn	0.24
Mo	0.27
La	1.9
V	1.6
Nb	3.05

3.3.2. Kuperovi parovi

U prethodnom poglavlju navedeno je prema teoriji BCS da pri kretanju elektrona u kristalnoj rešetki privlačna sila između elektrona i pozitivnih centara rešetke dovodi do lokalne deformacije rešetke i do povećanja koncentracije pozitivnog naelektrisanja u tom području, što rezultira privlačnim dejstvom između dva elektrona. Elektron koji je izazvao deformaciju kristalne rešetke deluje posredstvom te iste rešetke na drugi elektron unutar razdaljine ξ , koja se naziva rastojanje koherencije. Za čisti metal ovo rastojanje je reda veličine 10^{-4} cm što znači da obuhvata veliki broj elektrona.

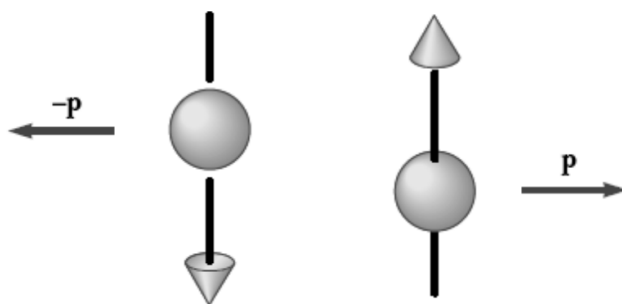
Daljim proučavanjem može se uočiti da je elektron koji je izazvao deformaciju kristalne rešetke interaguje samo sa elektronima sa jednakim impulsom suprotnog smera (Slika 3.15). Razloga za takvo ponašanje elektrona ima više:

1. Zbog toga što u međusobnom delovanju učestvuju samo elektroni iz tanke ljuske oko Fermijevog nivoa E_F , a širina tog nivoa određena je energijom koju elektron u proseku daje i prima od kristalne rešetke. To znači da se u interakciji mogu menjati smerovi impulsa elektrona, ali im iznosi moraju ostati isti.

2. Drugi razlog je zakon održanja impulsa, po kom u superprovodnoj interakciji mora biti očuvan ukupni impuls:

$$p_1 + p_2 = p_1' + p_2'$$

gde su: p_1 i p_2 impulsi prvog i drugog elektrona pre interakcije, a p_1' i p_2' impulsi prvog i drugog elektrona posle interakcije. [50]



Slika 3.15 Elektroni sa jednakim impulsima suprotnog smera.

Kuperov par nije trajna veza između dva određena elektrona, privlačenje je rezultat velikog broja kratkotrajnih međusobnih delovanja sa razmenom impulsa među elektronima unutar rastojanja koherencije ξ . Kao rezultat tog privlačenja, veća je verovatnoća nalaženja elektrona sa suprotnim impulsima dostiže maksimum unutar rastojanja koje određuje veličinu Kuperovog para ξ .

Eksperimentima je utvrđeno da je pad toplotne provodnosti pri prelasku elementarnih metala u superprovodno stanje utoliko veći što je temperatura niža od kritične. Snižavanjem temperature sve je više elektrona vezano u Kuperove parove, tj. sve je manje elektrona koji slobodno interaguju sa kristalnom rešetkom. Zaključuje se da elektroni u Kuperovim parovima prelaze u stanje u kojem se kroz kristalnu rešetku kreću bez izmene energije sa sredinom. Nesavršenosti i vibracije kristalne rešetke na

kojima se elektroni u normalnom stanju materijala rasejavaju ne utiču na Kuperove parove.

Dokaz da su elektroni u superprovodniku vezani u Kuperove parove i da tako povezani mogu tunelovati kroz tanku barijeru od izolatorskog materijala koja odvaja dva superprovodnika, dao je naučnik Džozefson (Josephson) 1962. i taj efekat je dobio ime po njemu.

3.3.3. Džozefsonov efekat i spoj

Energetski procepi u superprovodnim materijalima mogu se izmeriti veoma precizno eksperimentima pomoću jednočestičnog tunelovanja u koje su uključeni elektroni. Tunelovanje je fenomen u kvantnoj mehanici da čestica može da prođe kroz potencijalnu barijeru čak i kad ne poseduje dovoljno energije da prevaziđe tu barijeru. Ako su dva metala razdvojena izolatorom, izolator se normalno ponaša kao prepreka za tok provodnih elektrona iz jednog metala u drugi. Međutim, ukoliko je izolator dovoljno tanak (manje od 2nm), postoji znatna verovatnoća za superprovodne elektronske parove pri prelasku iz jedne u drugu superprovodnu elektrodu.[50,55,57]

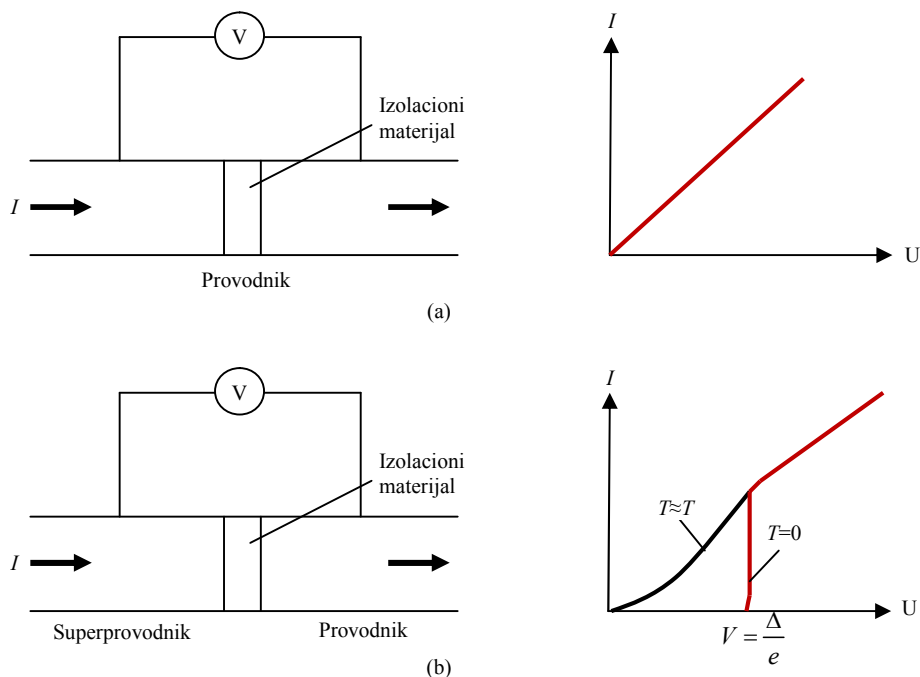
Kada su oba metala normalni provodnici odvojeni tankom izolacionom barijerom, U-I karakteristika tunelskog spoja je omska pri niskim naponima, sa strujom direktno proporcionalnom primenjenom naponu (slika 3.16a). Međutim, ukoliko se jedan metal zameni superprovodnikom na temperaturi ispod kritične T_c , U-I karakteristika se menja od prave linije u krivu (slika 3.16b). Na apsolutnoj nuli struja ne može da protiče, dok primenjeni napon ne postane:

$$V = E_g / 2e = \Delta / e \quad (3.35)$$

gde Δ predstavlja polovinu energetskog procepa. (Izvor napajanja snabdeva potrebnom energijom za raskidanje Kuperovog para i tunelovanje elektrona. Jedna polovina dolazi iz činjenice da se radi o jednočestičnom tunelovanju i da je potrebna energija jednaka jednoj polovini energije para 2Δ). Tako da u slučaju $eV \geq 0.5E_g$ do tunelovanja može doći između normalnog provodnika i superprovodnika.[57]

Prema tome, jednočestično tunelovanje omogućava direktno eksperimentalno merenje energetskog procepa. Dosadašnji postignuti rezultati su u saglasju sa BCS teorijom. Na temperaturama različitim od nule postoji mala struja čak i pri niskim

naponima zbog toga što u superprovodniku ima elektrona, koji su termalno aktivirani preko energetskog procepa.



Slika 3.16 Strujno-naponska karakteristika za tunelovanje elektrona kroz tanki izolatorski sloj: a) između dva provodnika. Karakteristika je linearna za male struje i napone. b) između superprovodnika i provodnika. Karakteristika je nelinearna i vrlo je izražena zavisnost od temperature. [58]

Drugi eksperiment koji je korišćen za merenja energetskih procepa superprovodnih materijala je vršen apsorpcijom elektromagnetnog zračenja. U superprovodnim materijalima fotoni mogu biti apsorbovani u materijalu kad im je energija veća od energije procepa. Elektroni u valentnoj zoni poluprovodnika apsorbuju upadne fotone, pobuđuju se i prelaze u provodnu zonu. Na sličan način, superprovodni materijali apsorbuju fotone kada im je energija veća od energije procepa, 2Δ . Za energije fotona manje od 2Δ , ne dolazi do apsorpcije. Prilikom apsorpcije fotona, u superprovodnom materijalu dolazi do raskidanja Kuperovih parova. [59]

Prethodno je opisano jednočestično tunelovanje od normalnog provodnika kroz tanku izolacionu barijeru u superprovodni materijal. Tunelovanje između dva superprovodnika odvojenih tankih izolatorom razmotrio je Džozefson, te se ovaj efekat naziva Džozefsonov efekat. Kod ovog efekta pretpostavka je da Kuperovi parovi mogu tunelovati kroz takav spoj bez otpornosti, proizvodeći jednosmernu struju kada je

primenjeni napon nula i naizmeničnu struju kada je primenjen jednosmerni napon na spoju. Kada se fazna koherencija parova uzme u obzir, pod odgovarajućim uslovima, verovatnoća tunelovanja para kroz spoj može se uporediti sa jednočestičnim tunelovanjem. U stvari, kada je dovoljno tanka (oko 1nm) izolaciona barijera između dva superprovodnika, Džozefsonov efekat tunelovanja se može posmatrati kao jednočestično tunelovanje. [59]

U spoju dve superprovodne legure razdvojene tankim slojem oksida, oko 1-2 nm (slika 3.17) poznatijim kao Džozefsonov spoj, Kuperove parove u spoju možemo opisati talasnom funkcijom $\Psi = \Psi_0 e^{i\phi}$, gde je ϕ faza i ista za svaki par. Ako superprovodnik levo od izolacione barijere ima fazu ϕ_1 , a desni fazu ϕ_2 , za nulti primenjeni napon na spoju struja tunelovanja opisana je sledećom relacijom:

$$I_s = I_{\max} \sin(\phi_2 - \phi_1) = I_{\max} \sin \delta \quad (3.36)$$

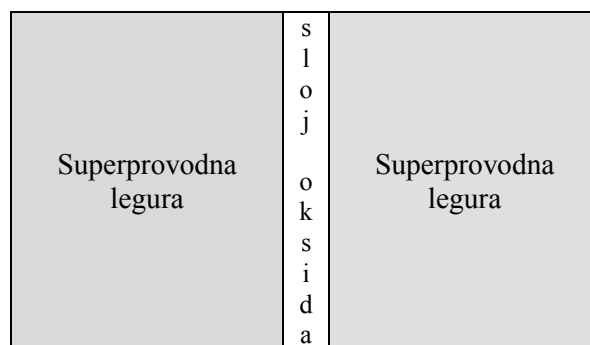
gde je I_{\max} maksimalna struja kroz spoj pod uslovom nultog napona. Vrednost ove struje zavisi od površine svake superprovodnik-oksid veze i eksponencijalno se smanjuje sa debljinom sloja oksida. [59]

Kada je primenjen jednosmerni napon na Džozefsonov spoj, dolazi do formiranja naizmenične struje date relacijom:

$$I = I_{\max} \sin(\delta + 2\pi ft) \quad (3.37)$$

gde je δ konstanta jednaka fazi u $t = 0$ i f frekvencija Džozefsonove struje iz izraza:

$$f = \frac{2eV}{h} \quad (3.38)$$

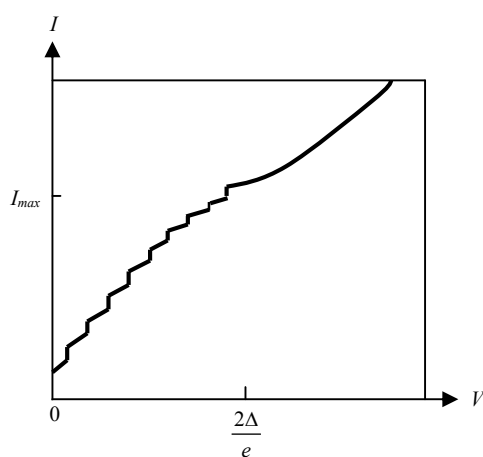


Slika 3.17 Džozefsonov spoj čine dve superprovodne legure odvojene tankim izolatorom. Kuperovi parovi mogu tunelovati kroz izolacionu barijeru u odsustvu primenjenog napona uspostavljajući jednosmernu struju. [59]

Jednosmerni napon od $1\mu\text{V}$ daje struju frekvencije od 483.6MHz . Precizna merenja frekvencije i napona omogućila su dobijanje odnosa e/h do jedinstvene preciznosti. [59]

Džozefsonov efekat sa naizmeničnom strujom demonstriran je na više načina. Jedan način je primenom jednosmernog napona i detektovanjem elektromagnetnog zračenja nastalog u spoju. Drugi način je ozračivanjem spoja spoljašnjim zračenjem frekvencije f' . U tom slučaju, zavisnost jednosmerne struje od napona ima korake kada naponi odgovaraju Džozefsonovim frekvencijama f koje su integral višestrukih eksternih frekvencija f' odnosno $V = hf/2e = nhf'/2e$ (slika 3.18). Zbog različitog kvantnog stanja dve strane spoja, spoj se ponaša kao atom koji prelazi iz jednog u drugo stanje apsorpcijom ili emisijom zračenja. U stvari, prolaz Kuperovog para kroz spoj je foton frekvencije $f = 2eV/h$ emitovan ili apsorbovan od strane sistema. [59]

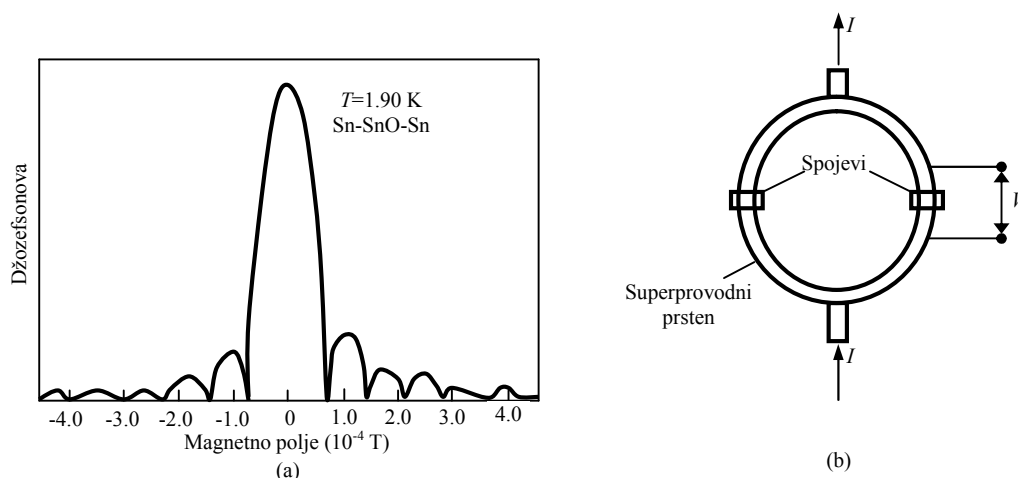
Kada je Džozefsonov spoj u magnetnom polju, maksimalna kritična struja u spoju zavisi od magnetnog fluksa kroz spoj. Ovo ponašanje tunelovane struje u prisustvu spoljašnje magnetnog polja predstavlja superprovodnu kvantnu interferenciju. Tunelovana struja pod ovim okolnostima je predodređena da bude periodična u broju kvanata fluksa kroz spoj.



Slika 3.18 Grafik za jednosmernu struju u funkciji napona za Džozefsonov spoj u elektromagnetnom polju.

Na slici 3.19a prikazana je maksimalna tunelovana struja u funkciji magnetnog polja u Sn-Sn O-Sn spoju na $1,90\text{K}$. Može se primetiti da struja zavisi od periodičnosti

magnetnog fluksa. Za tipične spojeve, periodičnost magnetnog polja je oko 10^{-4} T. Ovo je karakteristično za kvantnu prirodu magnetnog fluksa. [56]



Slika 3.19 a) Maksimalna Džozefsonova struja tunelovanja u funkciji primenjenog magnetnog polja u spoju Sn-SnO-Sn (b) Dva Džozefsonova paralelno vezana spoja.[56]

Ako je superprovodno kolo konstruisano od dva paralelno vezana Džozefsonova spoja, npr. u prsten (slika 3.19b), može se primetiti interferencija talasnih funkcija struja koje tuneluju kroz Džozefsonove spojeve slična interferenciji svetlosnih talasa u Jungovom eksperimentu sa dva proreza. U ovom slučaju, ukupna struja zavisi od faza talasnih funkcija Kuperovih parova i primenjenog napona. [56]

3.3.4. Indijum oksid (InO) u stanju izolatora sa Kuperovim parovima – struktura i osobine

Određeni superprovodni materijali u specijalnim okolnostima prelaze u stanje izolatora sa Kuperovim parovima kao nosiocima. Ovu izolatorsku fazu odlikuje granularna struktura koju čine superprovodna ostrva u kojima se lokalizuju Kuperovi parovi. Pri smanjivanju debljine filma, Kuperovi parovi spontano se lokalizuju u ostrvima usled povećane neuređenosti. Stoga se ova pojava prelaza superprovodnog materijala u izolator smatra kontinualnim faznim prelazom prouzrokovanim neuređenošću. U ovakve materijale spadaju tanki filmovi indijum oksida (InO).

Tanki filmovi indijum oksida (InO) predstavljaju tipičan primer materijala sa lokalizovanim superprovodnim parovima i mogu da posluže kao dokaz koncepta Bose-ovog izolatora, objašnjenog u studiji o Bose-Einstein-ovoj kondenzaciji. [60,61]

Superprovodni indijum oksid je disipativni medijum sa ravnotežnom koncentracijom Kuperovih parova - izolator sa lokalizovanim parovima. Ovakva predstava zasniva se pre svega na Berezinski-Kosterlitz-Thouless (BKT) prelazu, kod kog je koncentracija Kuperovih parova ravnotežna sa obe strane prelaza iz metalnog stanja u stanje bez disipacije. Kao drugo, osim ranije opisane BCS teorije o superprovodnosti, postoji model koji superprovodnost tretira kao Bose-Einstein-ovu kondenzaciju (BEC). Upotreba ovog modela ili neke od njegovih modifikacija je opravdana barem pri niskim koncentracijama elektrona.[62] BEC model takođe sadrži parove elektrona (bozone) i oni postoje sa obe strane prelaza u stanje kondenzata. Nakon što se prihvati pretpostavka da elektronski parovi koji nisu u međusobnoj korelaciji mogu postojati u disipativnoj sredini, prirodno je pretpostaviti da oni mogu biti lokalizovani.

Prisustvo superprovodne faze lokalizovane unutar ostrva u granularnoj strukturi dokazano je eksperimentima sa negativnom magnetnootpornošću na izolatorskoj strani u blizini prelaza superprovodnik-izolator, merenjima gustine stanja u blizini Fermijevog nivoa u ovim izolatorima, kao i merenjima efektivne zapremine lokalizovanog para. Lokalizacija Kuperovih parova uslovljena je prevashodno: 1) specifičnim statističkim karakteristikama slučajnog potencijala (prostorne raspodele zavisnosti potencijalne energije) koji je određen hemijskim sastavom materijala i 2) blizinom prelaza izolatora u normalno metalno stanje.[63]

Za elektron koji je lokalizovan na defektu ili centru zahvata talasna funkcija eksponencijalno opada na velikim rastojanjima r od defekta:

$$\psi = \psi_0 e^{-r/\Lambda}, \quad r \ll \Lambda \quad (3.39)$$

gde Λ označava domen lokalizacije. Za izolovani defekt, domen lokalizacije se uglavnom poistovećuje sa Borovim radijusom, koji se označava sa a_B . Pošto se lokalizacija odvija u prisustvu potencijala koji ima slučajan karakter, energije elektrona u svim centrima se blago razlikuju. Međutim, za konačnu temperaturu $T \neq 0$ elektron može skokovito da pređe iz jednog centra u drugi, pri čemu je zakon održanja energije zadovoljen pratećim procesima, kao što su emisija ili apsorpcija fotona. Ovakvi

preskoci elektrona čine osnov provodnosti. Na niskim temperaturama, provodnost putem skokova σ_h izražava se kao:

$$\sigma_h = \sigma_{h0} \exp\left[-(T_1/T)^{1/\nu}\right], \quad \nu=1, 2, 3 \text{ i } 4 \quad (3.40)$$

gde vrednost ν zavisi od konkretne vrste provodnosti putem preskoka, gustine stanja $g(E)$ blizu Fermijevog nivoa E_F i dimenzionalnosti.[63]

Kada se eksponencijalni krajevi talasnih funkcija elektrona lokalizovanih na različitim defektima preklapaju, domen lokalizacije se povećava i postaje veći od a_B . Ova vrsta preklapanja se uvek uočava prilikom približavanja prelazu izolator-provodnik. Kada se prilazi ovom prelazu, domen lokalizacije Λ se povećava i pred sam prelaz teži beskonačnosti, tako da je:

$$a_B \leq \Lambda \leq \infty \quad (3.41)$$

Interakcija između lokalizovanih elektrona u opštem slučaju ne vodi preklapanju njihovih talasnih funkcija. Moguće je, recimo, pretpostaviti, da se između dva takva elektrona javlja dodatna superprovodna interakcija, tj. da oni razmenjuju virtuelne fonone tako da se energija i jednog i drugog smanjuje za Δ_L . Da bi ovakva razmena mogla da se javi, razlika između energetske nivoa elektrona, određena njegovim domenom lokalizacije, mora da bude manja od energije fonona. Za takvu interakciju, uvodi se talasna funkcija za lokalizovani elektronski par. Ona takođe slabi eksponencijalno na velikim rastojanjima:

$$\psi_2 = \psi_{20} \exp(-r/\Lambda_2), \quad r \gg \Lambda_2 \quad (3.42)$$

sa karakterističnom dužinom Λ_2 za koju u blizini prelaza izolator-superprovodnik važi nejednakost slična izrazu (3.41):

$$a_{2B} \leq \Lambda_2 \leq \infty \quad (3.43)$$

Provodnost putem preskoka je moguća i u izolatoru sa uparenim elektronima, ukoliko se dogodi jedan od sledeća dva procesa: oba elektrona prelaze skokovito ka novim centrima istovremeno i ostaju vezani; ili jedan elektron skoči i prepusti svom parnjaku dopunsku energiju Δ_L . Doprinos provodnosti od ove vrste skokovitog prelaza sa rasparivanjem uključuje dodatni faktor:

$$\Delta\sigma_h^{(2)} \sim \Delta\sigma_h \exp(-\Delta_L/T). \quad (3.44)$$

U svakom slučaju, za očekivati je da je aktivirana provodnost (tj. provodnost koja počiva na energetskom pobuđivanju nosilaca preko određene energije aktivacije) manja kod izolatora sa uparenim nosiocima naelektrisanja nego kod običnog izolatora.[63]

Razmatranje lokalizacije Kuperovih parova u metalima sa granularnom strukturom (superprovodnih ostrva u izolatorskoj matrici) polazi od pretpostavke da je prosečna veličina ostrva b takva da važi:

$$\Delta / \delta E = \Delta g_F b^3 \gg 1, \quad (3.45)$$

gde je Δ superprovodni energetski procep, $\delta E = (g_F b^3)^{-1}$ razlika energetskih nivoa elektrona, dok je g_F gustina stanja na Fermijevom nivou provodnika u normalnom stanju. Prisustvo energetskog procepa Δ u relativno gustom sistemu elektronskih nivoa dopušta da se ostrva smatraju superprovodnim. Na osnovu leve strane izraza (3.45) možemo zaključiti da je potrebno da broj Kuperovih parova u svakom ostrvu bude veliki:

$$(g_F \Delta) b^3 \gg 1. \quad (3.46)$$

Superprovodno stanje je kolektivno stanje svih Kuperovih parova i opisuje se jedinstvenom talasnom funkcijom:

$$\Psi(r) = |\Psi| e^{i\varphi(r)}, \quad (3.47)$$

čiji modul je jednak energiji veze Kuperovih parova, tj. $|\Psi| = \Delta$ i čija faza $\varphi(r)$ karakteriše koherentnost Kuperovih parova. Kada nema struje u superprovodniku, važi da je $\varphi(r) = \text{const.}$ [63]

Prenos naelektrisanja sa jednog ostrva na drugo je moguć samo tunelovanjem. Da se ovaj prenos naelektrisanja vrši preko Džozefsonove struje Kuperovih parova, faze parametra uređenja u svim ostrvima bile bi korelisane i uspostavilo bi se makroskopsko superprovodno stanje u materijalu. Međutim, Džozefsonova struja može biti potisnuta, na primer previsokom otpornošću barijere između ostrva, $\rho \gg \hbar/e^2$, kada do prenosa naelektrisanja između ostrva dolazi tunelovanjem pojedinačnih pobuđenih čestica, čija je gustina n_1 u ostrvima mala zbog postojanja superprovodnog energetskog procepa:

$$n_1 \propto \exp(-\Delta/T). \quad (3.48)$$

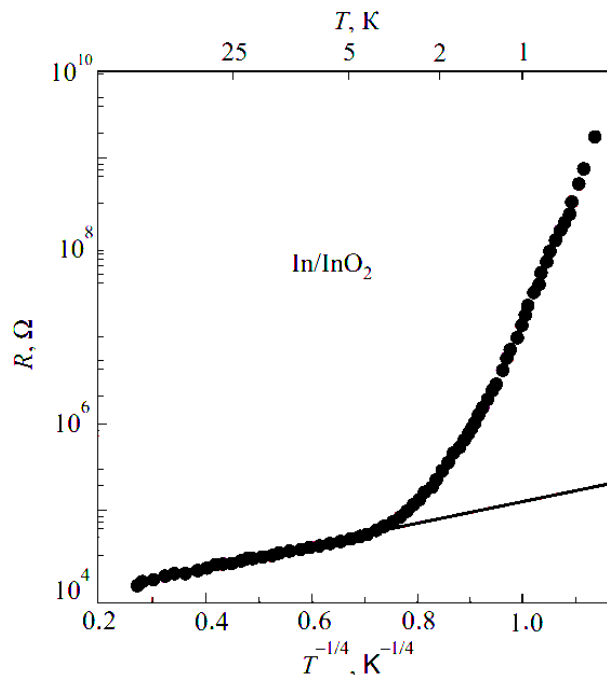
Pod ovim uslovima, superprovodnost se uspostavlja u svakom ostrvu nezavisno, odnosno parovi se lokalizuju u svojim ostrvima i domen lokalizacije je jednak veličini ostrva $\Lambda_2 = b$. [63]

Ove karakteristike prikazane su na slici 3.20, gde je otpornost granularne strukture In/InO filmova data u funkciji temperature. Na temperaturama iznad kritične temperature prelaza u superprovodno stanje, otpornost $R \equiv R_n$ se povećava kako temperatura opada kao kod običnog izolatora. Kriva $R(T)$ ima određenu osetljivost na prelaz u superprovodno stanje, ali na temperaturama nižim od T_c otpornost $R \equiv R_{SC}$ se ne smanjuje, već raste mnogo brže. Ovaj efekat je razumljiv sa kvalitativnog stanovišta. Pored uobičajenih procesa koji određuju otpornost izolatora na konačnim temperaturama, jednočestična pobuđivanja u superprovodnim ostrvima, koja su u stanju da proizvedu tunel efekat, su inhibirana, na šta ukazuje relacija (3.48). Zato se u izrazu za R_{SC} pojavljuje dodatni faktor: $R_{SC} = R_n \exp(\Delta T)$.

Kada se magnetno polje koristi za narušavanje superprovodnog stanja u ostrvima, broj jednočestičnih pobuđivanja na Fermijevom nivou se povećava, a otpornost vraća na vrednost R_n . Ova analiza ukazuje na prisustvo negativne magnetnootpornosti, koja je izraženija na nižim temperaturama:

$$R(B, T) / R(0, T) \approx \exp(-\Delta / T) , \quad B > B_C, \quad (3.49)$$

gde je B_c kritično magnetno polje. [63]



Slika 3.20 Temperaturna zavisnost otpornosti u granularnoj strukturi InO filma. [64]

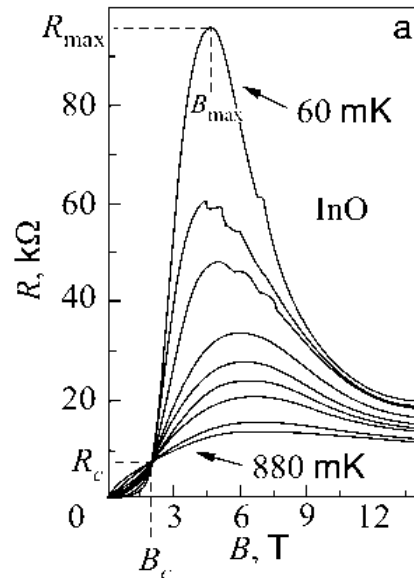
Za očekivati je da se prisustvo lokalizovanih parova uoči kod materijala koji postaju izuzetno otporni nakon raspada superprovodnosti, tj. u blizini prelaza superprovodnik-izolator. Postoje dve grupe ovakvih materijala: ultratanki filmovi čija debljina b služi kao kontrolni parametar (superprovodnik za veliko b , a izolator za malo b) i materijali sa promenljivim sastavom koji se na određene načine može kontrolisati. U drugoj grupi, kontrolni parametar uglavnom je koncentracija elektrona i/ili nivo neuređenosti. Kod obe grupe materijala, magnetno polje B se koristi kao kontrolni parametar.

Negativna magnetootpornost sa lokalizacijom parova elektrona u centrima nečistoća ili defekata po prvi put je zabeležena u amorfnim InO filmovima, bez posebne tehnološke obrade kako bi se postigla granularna struktura.[65] Na slici 3.21 je prikazana zavisnost otpornosti od magnetnog polja $R(B)$ u filmovima InO. Na kritičnoj vrednosti magnetnog polja B_c krive za različite temperature međusobno se presecaju. Za vrednosti polja $B < B_c$ film je u superprovodnom stanju, a fazni prelaz dešava se na B_c . Otpornost R_c za kritično magnetno polje je istog reda veličine kao i normalna otpornost filma.

Za polja neznatno veća od polja B_c , InO film je u kritičnoj blizini faznog prelaza. Povećanjem magnetnog polja (do B_{max} na slici na slici 3.21) stanje filma se određuje ekstrapolacijom [66,67]:

$$R^{-1}(T) \equiv \sigma(T) \rightarrow \sigma(0) \quad (3.50)$$

Prema slici 3.21 ova ekstrapolacija implicira da oblast izolatora prelazi u oblast provodnika pri polju od 10 T.



Slika 3.21 Negativna magnetootpornost u InO filmovima [66]

Osobine rezultujućeg izolatorskog stanja mogu se iskazati odnosom R_{max}/R_c na nekoj dovoljno niskoj temperaturi. Za tanki film InO na koji se odnosi slika 3.21, na temperaturi od 70 mK otpornost se povećava za nešto više od jednog reda veličine. Kod drugih InO filmova na 70 mK je uočen porast otpornosti od čak 5 redova veličine u poređenju sa kritičnom $R_c \approx 5 \text{ k}\Omega$. [67]

Temperaturna zavisnost otpornosti ima aktivacioni karakter u širokom opsegu magnetnih polja:

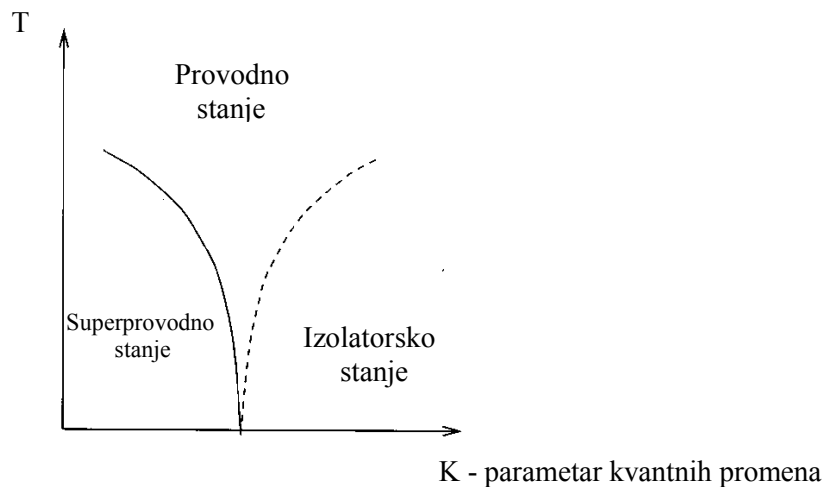
$$R(T) = R_0 \exp(T_0 / T) \quad (3.51)$$

Energija aktivacije T_0 zavisi od magnetnog polja B i dostiže maksimum od oko 1,7 K pri B_{max} , nakon čega postepeno opada sa povećanjem polja u oblasti $B > B_c$. [63]

Amorfni, kvaziuniformni (tj. ngranularni) filmovi InO ponašaju se, dakle, na sledeći način:

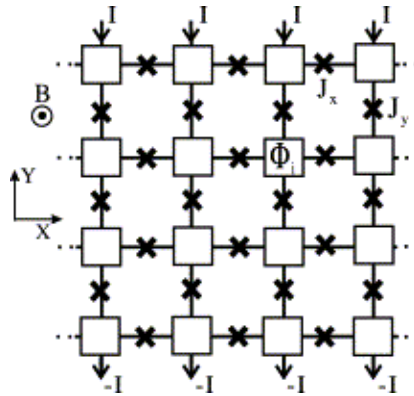
- postaju izolatori sa Kuperovim parovima nakon razaranja superprovodnosti od strane magnetnog polja i ostaju takvi u širokom opsegu polja;
- u jačem polju, provodnost ovih filmova izazvana temperaturom (tj. termičkom pobudom nosilaca) postepeno se smanjuje;
- pri dovoljno jakom polju dolazi do prelaza izolator-provodnik ili se film nalazi veoma blizu provodnog stanja;
- otpornost u jakom polju vraća se na nivo kritične R_c . [63]

Eksperimentalne studije prelaza superprovodnik-izolator (SIT) (Slika 3.22) u tankim neuređenim superprovodnim filmovima pokazale su da obrazovanje kolektivnog izolatorskog stanja dovodi do termički aktivirane provodnosti koja se opisuje Arenijusovim zakonom na nižim vrednostima naponima i vrednostima između napona praga i napona nastajanja neuređenosti. [67-70] Ispod napona praga V_T , film ulazi u fazu nulte provodnosti, a naglo se prebacuje u režim konačne provodnosti kada napon dostigne V_T .



Slika 3.22 Fazni dijagram za prelaz superprovodnik-izolator[71]

Struktura međusobno povezanih superprovodnih ostrva u InO filmovima predstavlja se 2D nizom Džozefsonovih spojeva (Slika 3.23) Prednost niza Džozefsonovih spojeva kao modela je ta što omogućava teorijski opis strujno-naponskih karakteristika i prelaza superprovodnik-izolator. Ponašanje napona praga u superprovodnim filmovima pokazuje zavisnost od dužine niza Džozefsonovih spojeva, kao i od temperature na kojoj dolazi do povećanja neuređenosti T_0 . [68,70,72] Takođe postoji zavisnost energije aktivacije $k_B T_0$ od veličine uzorka. [71]



Slika 3.23 Predstava granularne strukture izolatora sa Kuperovim parovima pomoću 2D niza Džozefsonovih spojeva. Superprovodna ostrva predstavljena su u vidu kvadrata, a Džozefsonove slabe veze u vidu linija [73]

Strujno-naponske karakteristike izolatora sa Kuperovim parovima dobijaju se razmatranjem 2D niza Džozefsonovih spojeva. [74-77] Svaki spoj karakteriše Džozefsonova energija veze $E_J = \hbar I_c / 2e$, gde I_c predstavlja kritičnu struju spoja. Spoj opisuju još i energija naelektrisanja E_c koja se odnosi na kapacitivnost između ostrva i energija naelektrisanja E_{c0} povezana sa kapacitivnošću prema uzemljenju. Za održavanje stanja izolatora sa Kuperovim parovima mora da važi $E_c, E_{c0} \gg E_J$ i $\Delta > E_c$, gde je Δ superprovodni energetski procep. [78,79] Čitav niz karakteriše energetski procep Δ_c , koji predstavlja kolektivnu Kulonovsku barijeru. Strujno-naponska karakteristika za niske napone, u intervalu temperatura $E_c < k_B T < \Delta_c$, ima oblik:

$$I \propto \exp\left[-\frac{(\Delta_c - eV)^2}{2\Delta_c k_B T}\right] \quad (3.52)$$

Postoje dva režima: prvi sa prenosom termički aktiviranih naelektrisanja sa otpornošću

$$R \propto \exp[\Delta_c / (2k_B T)] \quad (3.53)$$

za $eV \ll \Delta_c$, i drugi, za $V \approx V_T \approx \Delta_c / e$, gde aktivirana provodnost prelazi u neaktivirani prenos.

U 2D nizu Džozefsonovih spojeva važi:

$$\Delta_c \approx E_c \ln(L/d) \quad (3.54)$$

gde L predstavlja dužinu niza, a d je dimenzija elementarne ćelije niza.

4. INTERAKCIJA ZRAČENJA SA MATERIJALIMA

Svaki eksperiment sa zračenjem predstavlja u suštini interakciju zračenja sa materijom. Proučavanje procesa interakcije zračenja sa materijom napredovalo je zajedno sa razvojem fizike. Naročito kritičnu ulogu u odbacivanju klasične interpretacije i stvaranja nove kvantne fizike igrali su procesi interakcije elektromagnetnog zračenja sa materijom.

U velikom broju eksperimenata iz interakcije zračenja sa materijom prisutna su tri elementa:

1. Upadni snop čestica ili elektromagnetnog zračenja dobijen iz nekog izvora.
2. Materijal kroz koji zračenje prolazi i izaziva niz interakcionih procesa.
3. Detektor zračenja.

Dok su prva dva elementa uvek prisutna treći ne mora da bude.

Kada zračenje prolazi kroz materiju, može doći do više vrsta interakcija koje se mogu razvrstati u tri grupe: neelastična rasejanja na elektronima u atomskom omotaču, neelastična i elastična rasejanja na jezgru.

Otkriće prirodno radioaktivnih nuklida i nuklearnog zračenja je uslovalo klasifikaciju zračenja na: alfa čestice, beta čestice (elektroni i pozitroni), gama zrake (kvante elektromagnetnog zračenja) i neutrone. Dok su alfa i beta čestice skretale na različite strane u električnom i magnetnom polju, gama zračenje nije menjalo trajektoriju. U niskoenergetskoj fizici uobičajena je podela na zračenje lakih (elektroni, pozitroni) i teških (protoni, alfa čestice, fisioni fragmenti) čestica, a u fizici visokih energija se zračenja dele na ona koje jako ili slabo interaguju sa jezgrima atoma. [80]

4.1. Prolaz čestičnog zračenja kroz materijal

Prolaz naelektrisane čestice kroz materijal može se smatrati kao niz sudara upadnih čestica sa strukturnim česticama materijala. Sudar predstavlja osnovni element analize.

U sudaru dolazi do razmene energije. Kinetičku energiju donosi snop upadnih čestica (projektila) i predaje u sudarima sa elektronima i atomskim jezgrima mete. Prema zakonu o održanju energije ukupna energija posle sudara je jednaka ukupnoj energiji pre sudara. Deo kinetičke energije projektila, prebačen na metu može da zadrži

istu formu, ili da se pretvori u neki drugi vid energije. U prvom slučaju radi se o elastičnom sudaru. Sudarom je čestica-meta stavljena u pokret, a njena kinetička energija zajedno sa kinetičkom energijom projektila jednaka je kinetičkoj energiji projektila pre sudara, jer je tada meta mirovala. Ako meta utroši deo dobijene energije na promenu stanja atoma, kao što je recimo odvajanje elektrona od jezgra, sudar je neelastičan.

U sudaru projektila sa nekom slobodnom metom koja miruje, verovatnoća da će doći do prenosa energije zavisi od više faktora, količine naelektrisanja koju nosi projektil, brzine projektila, količine naelektrisanja u meti, mase mete, itd.

Maksimalni mogući prenos energije određen je zakonima održanja impulsa i energije. Do njega dolazi u takozvanom čeonom sudaru, kad projektil naiđe direktno na metu. Ako je masa projektila manja od mase mete, u čeonom sudaru projektil se vraća nazad, a ako je veća nastavlja u istom pravcu. Prenos zavisi od masa projektila m i mete M , po formuli

$$\frac{\text{Energija projektila posle čeonog sudara}}{\text{Energija projektila pre čeonog sudara}} = \left(\frac{M - m}{M + m} \right)^2 \quad (4.1)$$

Iz gornje formule se vidi da maksimalni mogući prenos energije zavisi od kvadrata razlike masa. Za iste mase razlika je nula, projektil se zaustavio, jer je svu energiju predao meti. Ukoliko je razlika masa veća maksimalni mogući prenos je manji. Kvadrat razlike znači ne samo da prenos naglo opada sa razlikom, već i da nije važno da li je masa mete ili projektila veća. Ako je M mnogo veće od m desna strana izraza teži jedinici, što znači da energija projektila posle čeonog sudara ostaje približno ista kao i pre sudara, a prenos je zanemarljiv. [81]

Maksimalna energija koju meta može da dobije iznosi

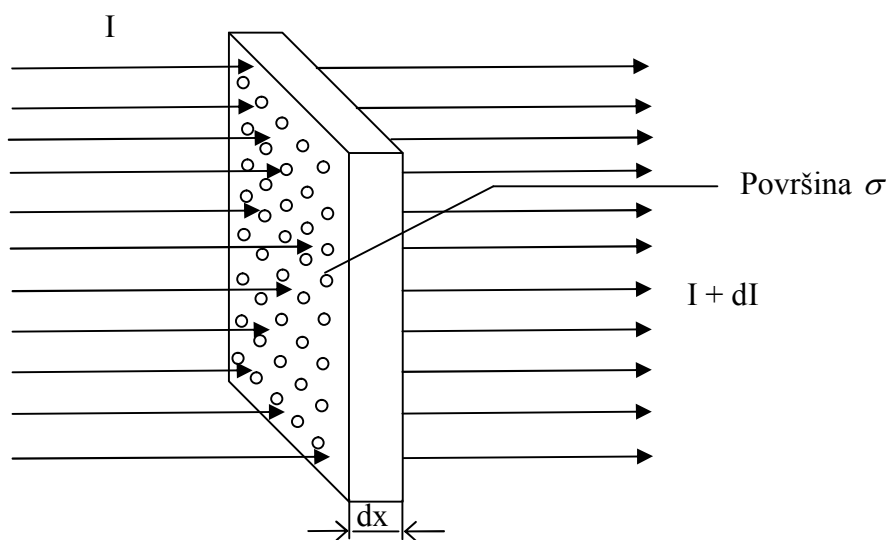
$$\text{Energija mete posle čeonog sudara} = E \text{ projektila} \times \frac{4 M m}{(M + m)^2} \quad (4.2)$$

Iz ove formule sledi da u sudaru sa jezgrom atoma zlata alfa čestica može maksimalno da izgubi deseti deo svoje kinetičke energije, a elektron samo koji stohiljaditi deo. Treba imati u vidu da je čeon sudar veoma redak. On je, na primer, 10^5 puta manje verovatan od skretanja za 6° . Granični prenos energije određen čeonim sudarom znatno je veći od prenosa energije koji se najčešće dešavaju. [81]

4.1.1. Efikasni presek

Kao što je već navedeno čestica upadnog snopa ili kvant elektromagnetnog zračenja može se elastično i neelastično rasejati na jezgru ili elektronu iz omotača atoma mete. Verovatnoća za bilo koje rasejanje meri se efikasnim presekom σ . Da bi se razumela uloga efikasnog preseka, razmotrićemo snop monoenergetskih čestica intenziteta I koji pada na površinu mete, pri čemu ona sadrži N jezgra po cm^3 . [82,83] Neka je debljina mete dx . Proizvod $N \cdot dx$ predstavlja broj jezgara po cm^2 koji će biti mogući centri interakcije sa upadnim snopom. Kada snop monoenergetskih čestica prođe kroz metu biće oslabljen za dI . Promena intenziteta snopa dI proporcionalna je početnom intenzitetu I , broju jezgara po cm^2 ($N \cdot dx$) i faktoru proporcionalnosti σ , što se može predstaviti na sledeći način:

$$dI = -\sigma \cdot I \cdot N \cdot dx \quad (4.3)$$



Slika 4.1. Uz obrazloženje efikasnog preseka

Faktor proporcionalnosti σ ili efikasni presek, predstavlja jediničnu površinu interakcije. Drugim rečima, efikasni presek pokazuje koji deo jedinične površine mete interaguje sa upadnim zračenjem. Prema tome, verovatnoća interakcije se može napisati u sledećoj formi:

$$P = \sigma \cdot N \cdot dx \quad (4.4)$$

Kada čestica iz upadnog monoenergetskog snopa pretrpi interakciju u meti, biva eliminisana iz snopa. Intenzitet upadnog snopa se menja za vrednost datu jednačinom (4.3). Integracijom ove jednačine, pod uslovom da je efikasni presek σ konstantan, dobija se intenzitet upadnog snopa nakon prolaska kroz metu, u sledećoj formi:

$$I_x = I_0 \cdot e^{-\mu x} \quad (4.5)$$

gde je I_0 početni intenzitet upadnog snopa zračenja, x debljina mete, $\mu = N\sigma = 1/\lambda$ je linearni atenuacioni koeficijent, koji je jednak recipročnoj vrednosti srednje slobodne putanje. Srednja slobodna putanja predstavlja onu debljinu mete koja je potrebna da redukuje početni intenzitet monoenergetskog snopa upadnog zračenja na vrednost $1/e$. Umesto linearnog atenuacionog koeficijenta μ , često se daje maseni atenuacioni koeficijent μ/ρ ; gde je ρ gustina mete. Treba napomenuti da je broj jezgara atoma po jedinici zapremine identičan broju atoma, pa se linearni atenuacioni koeficijent može predstaviti sa

$$\mu = N \cdot \sigma = \rho N_A \sigma / A \quad (4.6)$$

gde je N_A Avogardov broj i A atomska težina mete. Da bi se eliminisala zavisnost μ preko ρ od temperature, pritiska i faze, koristi se maseni atenuacioni koeficijent

$$\frac{\mu}{\rho} = \frac{N_A \sigma}{A} \text{const} \cdot \sigma \quad (4.7)$$

U tom slučaju debljina mete se izražava kao ρx u atenuacionom izrazu

$$I_x = I_0 \cdot e^{\left[-\left(\frac{\mu}{\rho}\right) \cdot (\rho x)\right]} \quad (4.8)$$

Interakcija će, u daljem tekstu, biti zamenjena terminom sudar. Dakle, elastični sudar nastaje u slučaju kada se totalna kinetička energija sistema ne menja, dok se neelastični sudar dešava kada bilo koja ili obe čestice apsorbuju, odnosno emituju energiju (npr. unutrašnje kretanje ili radijacija). Promena kinetičke energije sistema je data sa

$$\Delta T = T_i - T_f \quad (4.9)$$

gde i (*initial*) označava početno, a f (*final*) konačno stanje. Elastični sudar je, prema tome, okarakterisan sa $\Delta T = 0$, a neelastični pozitivnom, ili negativnom vrednošću ΔT .

Elastični i neelastični sudar može se dogoditi između svih naelektrisanih i nanaelektrisanih čestica. Ako se između čestica dogodi elastični sudar, verovatnoća

takvog procesa određuje se efikasnim presekom za elastično rasejanje i obeležava se sa σ_{el} . Posledica elastičnog sudara se manifestuje u skretanju čestica u odnosu na prvobitni pravac. Broj čestica po jedinici površine i u jediničnom vremenu koji se elastično raseje dat je izrazom

$$-dI_{el} = I_0 \sigma_{el} N \cdot dx \quad (4.10)$$

Odgovarajući broj neelastično rasejanih čestica može se izraziti kao

$$-dI_{neel} = I_0 \sigma_{neel} N \cdot dx \quad (4.11)$$

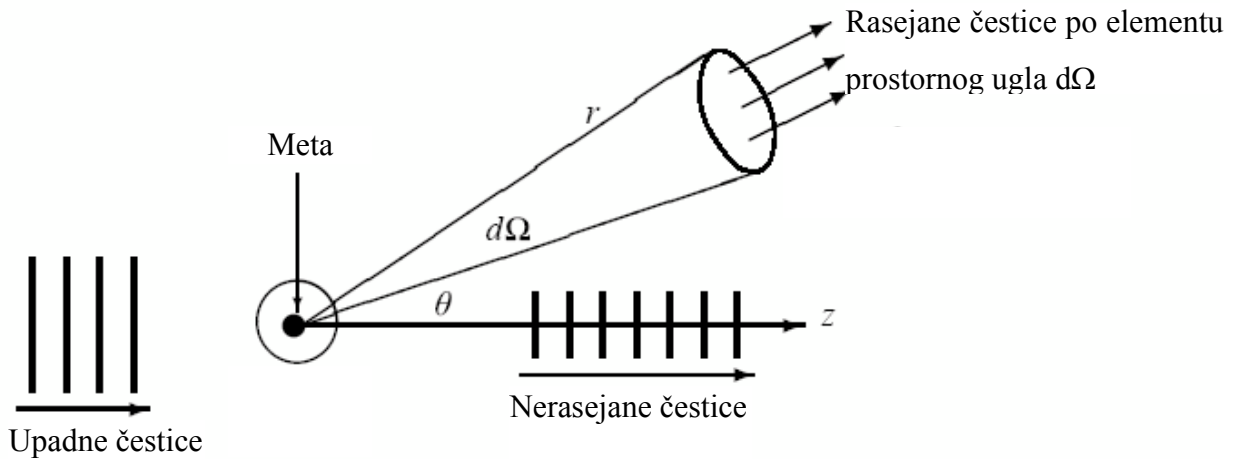
Kada se oba procesa mogu odigrati uporedo, totalna atenuacija će biti

$$-dI = -(dI_{el} + dI_{neel}) = I_0 (\sigma_{el} + \sigma_{neel}) N \cdot dx \quad (4.12)$$

Na osnovu poslednja dva izraza može se napisati izraz za totalni efikasni presek elastično i neelastično rasejanih čestica na meti

$$\sigma_{tot} = \sigma_{el} + \sigma_{neel} \quad (4.13)$$

Posle elastičnog i neelastičnog sudara snop naelektrisanih čestica se ne rasejava izotropno. Usled toga se uvodi diferencijalni efikasni presek da opiše koliko je čestica rasejano po elementu prostornog ugla $d\Omega$ u odnosu na upadni pravac snopa, definisan uglom ψ (Slika 4.2).



Slika 4.2. Prikaz rasejanja po elementu prostornog ugla $d\Omega$.

Diferencijalni efikasni presek se definiše na sledeći način

$$d\sigma = \sigma(\psi) d\Omega \quad (4.14)$$

Ako raspodela rasejanih čestica ne zavisi od azimutalnog ugla, element prostornog ugla ima oblik

$$d\Omega = 2\pi \sin \psi d\psi \quad (4.15)$$

i diferencijalni efikasni presek će biti

$$d\sigma = 2\pi \sin \psi \cdot \sigma(\psi) d\psi \quad (4.16)$$

Integracijom prethodne jednačine u granicama od 0 do π , dobija se totalni efikasni presek

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\pi} \sigma(\psi) \sin \psi d\psi \quad (4.17)$$

Član $\sigma(\psi) = d\sigma/d\Omega$ iz jednačine $d\sigma = \sigma(\psi)d\Omega$ definiše ugaonu distribuciju rasejanih čestica izraženu u cm^2 po centru rasejanja.[84,85,86]

U specijalnom slučaju, kada je raspodela rasejanih čestica izotropna, presek ima sledeći oblik

$$\sigma = 4\pi \cdot \sigma(\psi) \quad (4.18)$$

4.1.2. Gubitak energije naelektrisanih čestica u sudarima

Kada naelektrisana čestica prolazi kroz neki materijal, ona može da interaguje sa elektronima iz atomskog omotača i sa jezgrom u vidu elastičnog i neelastičnog sudara. U neelastičnom sudaru sa elektronima naelektrisana čestica prenosi deo svoje kinetičke energije na elektrone. Preneta energija gubi se na savlađivanje veze elektrona u omotaču atoma odnosno na jonizaciju ili ako veza nije raskinuta, već samo oslabljena, radi se o eksitaciji (pobuđivanju) atoma. Ukoliko je sudarom elektron potpuno izbačen atom ostaje jonizovan.

Procesi eksitacije ili pobuđivanja atoma veoma su raznovrsni i zavise od sistema u kojima se atomi nalaze. Čvrsto stanje takođe ima svoje posebne vidove eksitacije. Mi ćemo se zadržati uglavnom na eksitaciji izolovanog atoma, jer je to polazna tačka za izračunavanje ostalih složenijih procesa. Eksitacija atoma je kvantni proces u kome elektron pređe u neko od stanja slabije vezanih za jezgro, u kojima ima raspoloživih mesta. Jedan elektron iz K-ljuske ne može da preskoči u L-ljusku, ako je ova popunjena, već mora da ide dalje ka periferiji dok ne nađe neko slobodno mesto. Zbog toga je

energija eksitacije bliska energiji jonizacije. Ako se eksitira elektron iz periferne ljuske njemu ne treba mnogo energije da pronade slobodno mesto. Energija eksitacija opada dakle isto kao energija veze od unutrašnjih ljuski ka periferiji. S obzirom da je manji prenos energije verovatniji od većeg, eksitacija perifernog elektrona ima najveću verovatnoću.

Pobuđen atom se spontano vraća ka najslabijem stanju. Ako je pobuđen periferni elektron on se sam vraća nazad i pri tome emituje razliku energije u vidu fotona. Upraznjeno mesto u unutrašnjosti može da se popuni elektronom iz susedne ljuske. Time se upražnjeno mesto seli ka periferiji.

Vreme za koje atom ostane u pobuđenom stanju veoma je kratko. Deeksitacija je najbrža za K-ljusku i dešava se u težem atomu posle približno 10^{-14} sekundi. Idući ka periferiji energije eksitacije su manje i vreme deeksitacije se produžava, da bi periferni elektron bio oko 10^{-8} sekundi.

Pored emisije fotona pomenućemo još dva načina deeksitacije. Jedan je da atom direktno prenosi energiju na sistem koji je blizu njega, bilo da se radi o sudaru u gasu ili da su atomi blisko upakovani u kondenzovanom stanju. Drugi način je karakterističan za molekul, naročito ako je sastavljen od više atoma. On može da se deeksitira, trošeći energiju na rastavljanje-disocijaciju.

Efikasni presek za jonizacije najveći je za slabo vezane periferne elektrone i opada prema unutrašnjim slojevima. Ako dođe do jonizacije nekog unutrašnjeg sloja praznina „putuje“ prema vani, jer je popunjava elektron iz nekog udaljenog sloja. Pri tome dolazi do emisije fotona ili Ožeovog efekta.

Koliko dugo će atom ili molekul ostati u jonizovanom stanju zavisi od raspoloživih elektrona oko njega. Neutralizacija jona biće znatno sporija u razređenom gasu, nego u metalu, gde su atomi okruženi slobodnim elektronima i vreme neutralizacije isto onako kratko kao vreme deeksitacije.

Elektroni izbačeni jonizacijom mogu da imaju dovoljno visoku kinetičku energiju da i sami jonizuju. To se zove sekundarnom jonizacijom, za razliku od primarne koju je naelektrisana čestica direktno proizvela.

Gubitak energije dE za dužinu prodiranja dx se definiše kao zaustavna moć ili linearni gubitak energije, $-dE/dx$. Naelektrisana čestica prolazeći kroz materiju deluje

svojim električnim poljem na veliki broj atoma. Samo relativno mali deo njih pretrpi zbog toga neku konačnu promenu svog stanja.[80,81,86]

Snop upadnih čestica (projektila) koji pod identičnim uslovima prodire kroz materiju, gubitak energije dE za neki put dx za određenu energiju E , biće različit i po zakonima statistike raspoređen među njima. Tada se upotrebljavaju srednje vrednosti. U eksperimentima se redovno radi sa snopovima čestica, a merenjima se dobijaju srednje vrednosti.

Pošto se radi o srednjem gubitku energije u većem broju sudara, formula za $-dE/dx$ sadrži faktor

$$\frac{2\pi Z_1^2 e^4}{m_0 V^2} \quad (4.19)$$

iz kog proizilazi da je moć zaustavljanja srazmerna kvadratu naelektrisanja jonizujuće čestice Z_1^2 , ne zavisi od mase jonizujuće čestice, odnosno u izrazu figuriše samo masa elektrona m_0 na koji upadna čestica prenosi energiju i obrnuto je srazmerna sa kvadratom brzine upadne jonizujuće čestice.

Ovaj faktor koji je karakterističan za izolovani sudar treba pomnožiti faktorom koji predstavlja količinu elektrona u apsorbtentu. Pretpostavimo da snop čestica prolazi kroz lim sa N atoma po cm^3 . Broj elektrona po cm^3 iznosiće NZ_2 . Time se dobija opšti faktor koji se susreće u svim izrazima za srednji gubitak energije po jedinici puta (cm , ako se uzme da je N broj atoma u cm^3) i glasi

$$\frac{4\pi N Z_2 Z_1^2 e^4}{m_0 V^2} \quad (4.20)$$

Za numerička izračunavanja ovaj faktor se piše u formi

$$\frac{4\pi N Z_2 Z_1^2 e^4}{m_0 V^2} = 0,307 \left(\rho Z_2 Z_1^2 / A\beta^2 \right) \text{ MeV/cm} \quad (4.21)$$

Pored gornjeg faktora, izraz za moć zaustavljanja sadrži još jedan faktor do koga se teorijski složenije dolazi. Taj drugi faktor koji ćemo označiti sa B zavisi od teorijskih aproksimacija i nije isti za elektrone kao za teže čestice. Za opšte razmatranje dovoljno je uzeti B koji važi za teže čestice i glasi

$$B = \ln \frac{2 m_0 V^2}{I} + \ln \frac{1}{1 - \beta^2} - \beta^2 \quad (4.22)$$

radi lakše analize izražava se u sledećoj formi

$$B = \left(\ln \frac{2 m_0 c^2 \beta^2}{1 - \beta^2} - \beta^2 \right) - \ln I \quad (4.23)$$

Prvi član zavisi samo od brzine čestice i jednostavan je za izračunavanje. Na manjim brzinama ovaj član raste sa brzinom, ali vrlo sporo.

Drugi član karakteriše materijal. U njemu faktor I predstavlja srednju energiju jonizacije i eksitacije za dati atom. Preko njega se vodi računa o elektronima u atomu koji menjaju svoje stanje u sudaru sa naelektrisanom česticom.

Prilikom razmatranja energetske gubitaka alfa čestica i drugih teških čestica uobičajenih energija ($E < 10\text{MeV}$) na sudare važi da je zbog velike mase gubitak na zakočno zračenje zanemarljiv. Gubitak u sudarima sa jezgrom može se zanemariti za $E > 0,5\text{MeV}$ jer je preko 500 puta manji od gubitka na jonizacije i eksitacije. Na energijama ispod 1-2 MeV alfa čestica zahvata elektrone i gubi ih, tako da je efektivno naelektrisanje manje od $Z = 2$. Teorijsko tretiranje ovog procesa dosta je složeno zbog toga se u ovom energetskom predelu kao osnova uzimaju eksperimentalni podaci.

Moć zaustavljanja sastoji se, dakle, samo od gubitka energije u neelastičnim sudarima sa elektronima, a teorijske formule važe za energije veće od 2MeV. U domenu od 1-2 MeV, kompletna teorijska formula za gubitak energije alfa čestica glasi:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4 \pi Z_1^2 e^4}{m_0 V^2} N Z_2 \left\{ \ln \frac{2 m_0 V^2}{I^2} + \ln \frac{1}{1 - \beta^2} - \beta^2 - \frac{C}{Z} \right\} \quad (4.24)$$

Ovaj izraz se razlikuje od (4.20) i (4.22) samo za korekcionni faktor C/Z koji vodi računa o „neučestvujućim“ elektronima omotača. Osnovna formula za gubitak energije izračunava se uz pretpostavku da su brzine upadnih čestica znatno veće od brzine elektrona. To međutim ne važi za unutrašnje slojeve težih atoma, pogotovo ako su energije niske. Alfa čestica treba da ima energiju znatno veću od $0,025 Z^2 \text{ MeV}$ da bi mogla da jonizuje K -elektrone. Ta granica za aluminijum iznosi 4MeV. Na manjim energijama i u težim elementima u jonizaciji i eksitaciji ne učestvuju samo K , već i L i M elektroni.

Za grubu procenu dovoljna je formula:

$$-\frac{dE}{dx} = 0,96 \frac{Z_2 N}{E} \left[\ln \left(\frac{E}{Z_2} + a - 1,38 \right) \right] \quad (4.25)$$

gde je Z_2 atomski broj apsorbenta, N broj atoma/cm³, E energija alfa čestice u MeV. Konstanta a odabrana je da bi se dobila saglasnost sa eksperimentom. Verovatna greška ove formule iznosi $\pm 10\%$. Ona se nešto povećava za energije manje od $Z_2/5$ MeV, a ne treba je koristiti za energije manje od 2MeV.

Za elektrone i pozitrone, čija energija može da iznosi do nekoliko MeV srednji gubitak energije na jonizacije ima relativističku formulu

$$-(dE/dx)_j = 0,153 \rho \cdot Z / A \frac{1}{\beta^2} \cdot B \quad (4.26)$$

$$B = \ln \frac{E(E + m_0 c^2)^2 \beta^2}{2 \cdot l^2 m_0 c^2} + (1 - \beta^2) - \left(2\sqrt{1 - \beta^2} - 1 + \beta^2 \right) \ln 2 + \frac{1}{8} \left(1 - \sqrt{1 - \beta^2} \right)^2$$

Kako su u pitanju lake naelektrisane čestice koje na niskim energijama mogu da imaju vrlo krivudav trag, potrebno je naglasiti da se dx u ovom odeljku meri duž traga elektrona i razlikuje se od dubine prodiranja, koja može biti manja. [85,87]

Na energijama do 1 MeV $(dE/dx)_j$ opada zbog porasta $\beta = v/c$, koje od vrednosti $\beta = 0,06$ za 10 keV dostiže 0,94 na 1 MeV. Za veće energije $\beta \approx 1$ i varijacija $(dE/dx)_j$ počinje da zavisi od porasta E , koja se nalazi u logaritmu, pa slabo utiče i porast je spor. Minimum jonizacije lakih naelektrisanih čestica nalazi se na energiji oko 1,5 MeV.

4.1.3. Gubitak energije naelektrisanih čestica na radijacije

Električna sila kojom jezgro deluje na upadnu naelektrisanu česticu izaziva ubrzanje a koje je jednako naelektrisanju podeljenom sa masom čestice: $a = Z_1 Z_2 e^2 / m$. Pod uticajem ovog ubrzanja čestica skreće elektron ka jezgru, a alfa čestica od jezgra. Klasična elektrodinamika predviđa da naelektrisana čestica kad je ubrzana zrači srazmerno kvadratu ubrzanja. Intenzitet elektromagnetnog zračenja treba da je srazmeran sa $a^2 = Z_1^2 Z_2^2 e^4 / m$. Ovo navodi na zaključak da intenzitet zračenja naglo opada ukoliko čestica ima veću masu. Ono je milion puta slabije za alfa čestice nego za elektrone i druge lake naelektrisane čestice. Zbog toga se uzima u obzir jedino kod lakih naelektrisanih čestica. Takođe, intenzitet zračenja značajno raste ukoliko je materijal teži. Ovo zračenje je poznato pod nekoliko imena: zakočno zračenje, „bremsstrahlung“ i kontinualno X-zračenje. [88]

Pravilnu teorijsku interpretaciju zakočnog zračenja ne daje klasična, već kvantna elektrodinamika. To je kvantni proces u kome elektron može da emituje jedan foton čija energija može da bude između nule i energije elektrona. Verovatnija je emisija manje, nego veće energije. Do emisije ne može doći ako je elektron slobodan, jer ne bi bilo po zakonima istovremenog održanja impulsa i energije. Potrebno je prisustvo nekog trećeg tela kao što je jezgro ili elektron da učestvuju u održanju impulsa i energije. Elektron uvek skreće u njihovom polju, a do emisije dolazi samo ponekad. U tome je razlika između kvantne teorije i klasične, koja predviđa da je svako skretanje praćeno emisijom. Po kvantnoj teoriji verovatnoća zračenja raste sa energijom čestice. Na manjim energijama elektrona, energija se uglavnom gubi na jonizaciju i eksitaciju, dok zračenje odnosi znatno manji deo. Sa porastom energije udeo zračenja raste. Gubitak energije na zračenje dostiže i izjednačava se sa gubitkom na jonizaciju i eksitaciju energije od 9MeV, kada je apsorber olovo, a tek na 100MeV u vazduhu. Iznad tih energija sve više prevladava gubitak na zračenje, da bi na visokim energijama bio glavni način gubitka energije elektrona.

Naelektrisana čestica prolazeći pored jezgra može da ga dovede u neko od njegovih pobuđenih stanja. Jezgro čiji pobuđeni nivo ima energiju E_I preći će u pobuđeno stanje ako apsorbuje foton energije E_I . Naelektrisana čestica interaguje sa jezgrom preko virtuelnih fotona koji imaju kontinualan spektar. U tom spektru može da se nađe foton energije E_I čija apsorpcija dovodi jezgro u pobuđeno stanje. Ovakva vrsta neelastičnog sudara naelektrisanih čestica sa jezgrom naziva se Kulonova eksitacija jezgra. Kulonova eksitacija jezgra izučava se pomoću težih naelektrisanih čestica, čije su energije ispod vrednosti Kulonove barijere jezgra. Tipični preseki za Kulonovu eksitaciju reda su milibarna što je za milijardu puta manje od preseka za jonizaciju atoma. Zbog toga se pri razmatranju rasipanja snopa naelektrisanih čestica kroz materiju može Kulonova eksitacija da zanemari.

Zakočno zračenje je jedini vid neelastičnog sudara sa jezgrom koji može primetno da doprinese gubitku energije i to za lake čestice (elektrone), visoke energije ($E_e \gg m_e c^2$). Gubitak energije na zakočno zračenje srazmeran je sa Z^2 materijala mete. To važi za tanke mete, dok u slučaju debelih meta ukupna izračena energija ima drugačiju zavisnost. Količina materije kroz koju prođe elektron zavisi od dometa, a ovaj je na niskim energijama, gde je glavni vid gubitka energije jonizacija, približno određen

ukupnim brojem elektronskih sudara. Za datu gustinu orbitalnih elektrona broj atoma biće obostrano srazmeran sa Z . Pošto je efikasni presek zračenja u sudaru sa jednim atomom srazmerna sa Z^2 , a broj takvih sudara duž traga srazmeran je približno sa $1/Z$, ukupna izračena energija biće srazmerna sa Z .

Ukupna energija koju izrači jedan elektron početne energije E srazmerna je sa E^2 . Približna formula za srednju vrednost energije koju izrači elektron energije $E(\text{MeV})$ oblika je:

$$I_{zz} = 5,8 \times 10^{-4} ZE^2 \quad (4.27)$$

Ovaj izraz koristi se za monoenergetske elektrone do 2,5MeV i tačnost mu je oko 30 %.

Za kontinualni beta spektar važi ista zavisnost od Z i E , ali je konstanta oko 5 puta manja i zavisi od forme beta spektra. Izraz za energiju I_{EB} koju jedan čisti beta emiter maksimalne energije E_{max} gubi u debeloj meti ima sledeći oblik:

$$I_{EB} = 5,8 \times 10^{-4} SZE_{max}^2 \quad (4.28)$$

gde S ima sledeće vrednosti za razne beta emitere:

^{32}P	$^{90}(\text{Sr} + \text{Y})$	^{85}Kr	^{204}Tl	^{147}Pm	^3H
0,2	0,2	0,2	0,144	0,074	0,138

Za dva najčešće korišćena beta emitera (^{32}P i $^{90}\text{Sr} + \text{Y}$) I_{EB} iznosi $1,2 \times 10^{-4} ZE_{max}^2$ (MeV) u fotonima po beta raspadu.

Ovom zakočnom zračenju, koje možemo nazvati eksternim, može se dodati i interno, koje beta čestice proizvode izlazeći iz jezgra u kome su nastale. Interno zakočno zračenje ne zavisi od Z i može se grubo izraziti kao

$$I_B = 3,7 \times 10^{-4} E_{max}^2 \quad (4.29)$$

Za beta emitere kao $(\text{Sr} + \text{Y})^{90}$ čiji je $S = 0,2$ ukupna energija izračena zakočnim zračenjem iznosiće prema tome

$$I_B = 1,2 \times 10^{-4} (Z + 3) E_{max}^2 \quad (4.30)$$

Ako meta sadrži više elemenata, umesto Z koristi se Z_{ef} , koje se definiše kao

$$Z_{ef} = \frac{\sum \alpha Z_{\alpha}^2}{\sum \alpha Z_{\alpha}} \quad (4.31)$$

gde je α deo od ukupne količine atoma čiji je atomski broj A_{α} . [83,88]

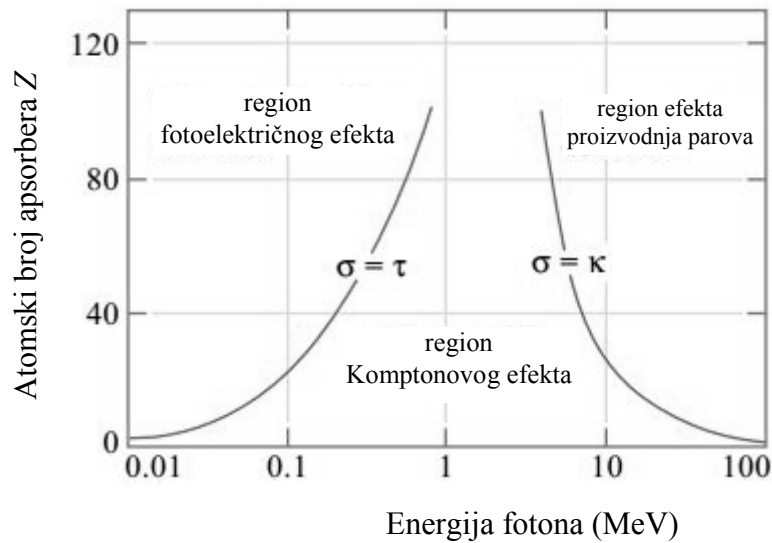
4.2. Prolaz elektromagnetnog zračenja kroz materijal

Postoji veći broj mehanizama interakcije elektromagnetnog zračenja sa materijalom. Fotoni elektromagnetnog zračenja u interakciji sa atomskim jezgrom i elektronima mogu da nestanu predajući celu svoju energiju ili da se rasejavaju elastično i neelastično. U interakciji sa elektronima mogu se javiti Komptonovo (Compton) neelastično rasejanje, fotoelektrični efekat, Tomsonovo (Thompson) elastično nekoherentno rasejanje, Rejljevo (Rayleigh) elastično koherentno rasejanje. U interakciji sa jezgrom, javlja se nuklearni fotoefekat, a u interakciji sa elektromagnetnim poljem jezgra ili elektrona dolazi do proizvodnje para elektron - pozitron, ukoliko je energija upadnog fotona veća od 1,02MeV (odnosno 2,04MeV za slučaj interakcije sa električnim poljem elektrona), što je energetski prag za ovu vrstu interakcije. I pored postojanja svih navedenih mehanizama, samo tri od njih su značajna, dok su ostali znatno manje zastupljeni. To su fotoelektrični efekat, Komptonovo rasejanje i proizvodnja para. Na slici 4.3. prikazana je relativna zastupljenost ovih tipova interakcije u zavisnosti od energija upadnog fotona i atomskog broja apsorbujućeg materijala.[80,84,89]

Da bi se dobio ukupni efikasni presek za interakciju, potrebno je sabrati efikasne preseke za pojedine tipove interakcija:

$$\sigma = \sigma_c + Z\sigma_p + \sigma_{pp} \quad (4.32)$$

Ovde je σ_p efikasni presek za fotoefekat, σ_c za Komptonov efekat, a σ_{pp} za proizvodnju para elektron - pozitron. Efikasni presek za Komptonov efekat je pomnožen sa atomskim brojem apsorbera Z , jer se radi o interakciji sa pojedinim elektronima, a ne sa celim atomom. Vrednost efikasnog preseka za Komptonov efekat mora se umanjiti u slučaju da preneti moment elektrona uzima vrednosti, koje su blizu $(2m_e E_\nu)^{1/2}$, gde je E_ν energija veze elektrona, jer se tada elektron ne može smatrati slobodnim. Međutim, najčešće preneti moment elektrona značajno prevazilazi vrednost $(2m_e E_\nu)^{1/2}$, tako da se on može smatrati slobodnim.[80,84]



Slika 4.3. Relativna zastupljenost tri najvažnija tipa interakcije elektromagnetnog zračenja sa materijalom u zavisnosti od energije upadnog fotona i atomskog broja apsorpcionog materijala. [89]

Prolaz elektromagnetnog zračenja bitno se razlikuje od prolaza naelektrisanih čestica kroz materijal, pre svega ovde se javlja apsorpcija, a broj sudara u kojima se gubi relativno veći deo energije je znatno manji.

4.2.1. Fotoelektrični efekat

Fotoelektričnim efektom naziva se proces u kome foton interaguje sa elektronom u omotaču atoma nakon čega nestaje, a oslobađa se elektron. Energija fotona jednim delom troši se na oslobađanje elektrona iz vezanog stanja u atomu, a ostatak prelazi u energiju oslobođenog elektrona. Ovakva preraspodela energije opisana je Ajnštajnovom relacijom za energiju oslobođenog elektrona:

$$E_e = h\nu - E_v \quad (4.33)$$

U ovoj relaciji, $h\nu$ je energija upadnog fotona, a E_v je energija veze elektrona u atomu. Često se dešava da je energija upadnog fotona znatno veća od energije veze elektrona (reda veličine eV). Međutim, jednostavno tretiranje fotoelektričnog efekta

moguće je samo ukoliko su fotoelektroni (drugi naziv za elektrone koji se emituju prilikom fotoelektričnog efekta) nerelativističkih energija, dakle relativno malih brzina.

U slučaju prolaska fotona energija ispod $\sim 100\text{keV}$ kroz materijal, fotoelektrični efekat je dominantan vid interakcije. Diferencijalni efikasni presek za ovaj vid interakcije, u slučaju u kome važi da je $E_v < E_{\text{fotona}} < m_{\text{elektrona}}c^2$, dat je Hajtlerovim (Heitler) izrazom, dobijenim na osnovu Dirakove nerelativističke teorije, i glasi:

$$d\sigma_p = k_{\text{fs}}^4 r_0^2 Z^5 \left(\frac{m_e c^2}{E_f} \right)^{7/2} f(\theta) d\Omega \quad (4.34)$$

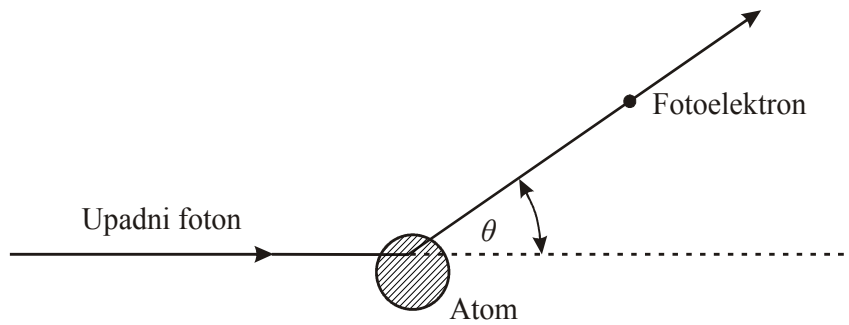
Ovde je E_v energija veze elektrona u K - ljusci, θ ugao između pravca upadnog fotona i pravca kretanja izbačenog fotoelektrona, slika 4.4.

$$k_{\text{fs}} = \frac{\mu_0 c e^2}{2h} \quad (4.35)$$

$$f(\theta) = \frac{4 \sin^2 \theta}{(1 - \beta \cos \theta)^4} \quad (4.36)$$

$$r_0 = \frac{\mu_0 e^2}{4\pi m_e} \quad (4.37)$$

U izrazu (4.36), β je veličina koja se sporo menja u zavisnosti od energije upadnog fotona E_f i ima vrednosti od 0 do 1/3. U izrazima (4.33) i (4.37), h je Plankova konstanta, a μ_0 magnetna permeabilnost vakuuma.



Slika 4.4. Fotoefekat.

Ukupni efikasni presek za izbijanje fotoelektrona po svim uglovima dobija se integracijom diferencijalnog efikasnog preseka po čitavom prostornom uglu Ω uz $d\Omega = 2\pi \sin(\theta) d\theta$. Tada se, u slučaju nižih energija (kada je $\beta \approx 0$), dobija ukupni presek u sledećem obliku:

$$\sigma_{\text{pL}} = \frac{32\pi}{3} k_{\text{is}}^4 r_0^2 Z^5 \left(\frac{m_e c^2}{E_f} \right)^{7/2} \quad (4.38)$$

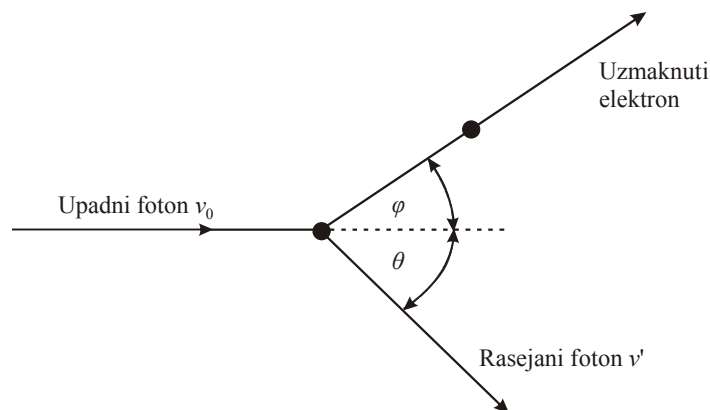
Međutim, u slučaju viših energija fotona, kada je $E_f \gg m_e c^2$, ukupni efikasni presek se nalazi na osnovu Dirakove relativističke teorije i ima oblik:

$$\sigma_{\text{pH}} = \frac{3\pi}{2} k_{\text{is}}^4 r_0^2 Z^5 \frac{m_e c^2}{E_f} \quad (4.39)$$

Izostanak podudarnosti izraza (4.38) i (4.39) stvara potrebu da se formira aproksimativni izraz koji se može koristiti u svim oblastima energija. Pokazuje se da se, kao dobra aproksimacija, može napisati da je $\sigma_p = \text{const.} \cdot (Z^n/E_f^m)$ gde je n veličina između 4 i 5, a m je između 1 i 3,5. Oba parametra variraju u zavisnosti od energije fotona. [80,89]

4.2.2. Komptonovo rasejanje

Komptonovim efektom ili rasejanjem naziva se proces interakcije fotona sa slobodnim elektronom u kome foton predaje deo svoje energije. Posle sudara elektron i foton se kreću pod nekim uglovima u odnosu na početni pravac fotona. U cilju nalaženja veze između veličina, koje karakterišu Komptonovo rasejanje, može se pretpostaviti da je elektron na koji foton nailazi bio u miru (referentni sistem se vezuje za njega). Tada se proces Komptonovog rasejanja može grafički prikazati kao na slici 4.5.



Slika 4.5 Komptonovo rasejanje.

Na osnovu slike 4.5, primenom zakona očuvanja linearnog momenta i energije, mogu se postaviti sledeći izrazi:

$$\frac{h\nu_0}{c} = \frac{h\nu'}{c} \cos \theta + p \cos \phi \quad (4.40)$$

$$p \sin \phi = \frac{h\nu'}{c} \sin \theta \quad (4.41)$$

$$h\nu_0 = h\nu' + E_k \quad (4.42)$$

$$p^2 c^2 = E_k + (E_k + 2mc^2) \quad (4.43)$$

Iz ovih izraza, eliminisanjem ϕ i p , dobija se promena talasne dužine $\lambda' - \lambda_0$:

$$\frac{c}{\nu'} - \frac{c}{\nu_0} = \lambda' - \lambda_0 = \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta) \quad (4.44)$$

Energija rasejanog fotona data je sa:

$$h\nu' = \frac{h\nu_0}{1 + \frac{h\nu_0}{mc^2} (1 - \cos \theta)} \quad (4.45)$$

a kinetička energija uzmaknutog elektrona je:

$$E_k = h(\nu_0 - \nu') = h\nu_0 \frac{\frac{h\nu_0}{mc^2} (1 - \cos \theta)}{1 + \frac{h\nu_0}{mc^2} (1 - \cos \theta)} \quad (4.46)$$

Maksimalna kinetička energija koju elektron može da stekne odgovara čeonom rasejanju, kada se γ foton rasejava unatrag, odnosno pod uglom $\theta = \pi$. [80,89]

$$E_{k,\max} = h\nu_0 \frac{2 \frac{h\nu_0}{mc^2}}{1 + 2 \frac{h\nu_0}{mc^2}} \quad (4.47)$$

Verovatnoća Komptonovog rasejanja zavisi od detalja interakcije fotona i elektrona, na primer veze između smera polarizacije zračenja i smera momenta spina rasejanog elektrona. Formula Klajn - Nišina (Klein - Nishina) daje diferencijalni efikasni presek za Komptonovo rasejanje, odnosno verovatnoću rasejanja fotona u prostorni ugao $d\Omega$ sa energijom $h\nu'$:

$$d\sigma_c = \frac{r_0^2}{4} \left(\frac{\nu'}{\nu_0} \right)^2 \left(\frac{\nu_0}{\nu'} + \frac{\nu'}{\nu_0} - 2 + 4 \cos^2 \zeta \right) d\Omega \quad (4.48)$$

gde je r_0 klasičan poluprečnik elektrona (dat izrazom (4.37)), a ζ je ugao između vektora polarizacije upadnog i rasejanog zračenja. U slučaju nepolarizovanog upadnog zračenja, ukoliko se obavi usrednjavanje izraza (4.48) duž svih smerova polarizacije za upadno zračenje i rasejanje, dobija se diferencijalni efikasni presek za Komptonovo rasejanje pod uglom θ :

$$d\sigma_{c(\text{nep})} = \frac{r_0^2}{2} \left(\frac{v_0}{v'} + \frac{v'}{v_0} - \sin^2 \theta \right) d\Omega \quad (4.49)$$

Ova se formula može primeniti za nalaženje broja fotona izmerenih pod uglom rasejanja θ . Totalni efikasni presek za Komptonovo rasejanje dobija se integracijom izraza (4.49), kada se ugao θ menja od 0 do π . Tako dobijen rezultat ima smisao verovatnoće uklanjanja fotona iz snopa putem Komptonovog rasejanja. Formula Klajn - Nišina dobro se slaže sa eksperimentalnim rezultatima.

4.2.3. Proizvodnja parova

Proizvodnja para elektron - pozitron moguća je u polju naelektrisane čestice, verovatnije jezgra a manje verovatno elektrona, u slučaju da je energija fotona veća od praga koji iznosi $2m_e c^2 = 1,02$ MeV ako je proces prizvodnje para u polju jezgra a $4m_e c^2$ ako je u polju elektrona. U ovom procesu dolazi do potpune apsorpcije energije elektromagnetnog zračenja koja se delom troši na formiranje elektrona i pozitrona, dok ostatak prelazi u njihovu kinetičku energiju, prema izrazu:

$$E_f = 2m_e c^2 + E_{e^-} + E_{e^+} \quad (4.50)$$

gde je E_f energija upadnog fotona, $2m_e c^2$ zbirna energija mirovanja pozitrona i elektrona, E_{e^-} kinetička energija elektrona, a E_{e^+} pozitrona. [80,84,89]

Za relativističke energije, na osnovu kvantnomehantičke teorije, dobija se izraz za totalni presek za proizvodnju parova, koji glasi:

$$\sigma_{pp}(E_f) = r_0^2 Z^2 \frac{\mu_0 c e^2}{2h} \ln \frac{2E_f}{m_e c^2} \quad (4.51)$$

4.2.4. Tomsonovo rasejanje, Rejljevo rasejanje i nuklearni fotoefekt

Tomsonovo elastično rasejanje je rasejanje fotona malih energija na slobodnom elektronu, koje se može opisati zakonima klasične mehanike i klasične elektromagnetike. Diferencijalni efikasni presek po jednom elektronu dat je izrazom:

$$d\sigma_T = \left(\frac{\mu_0 e^2}{4\pi m_e} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} d\Omega \quad (4.52)$$

Totalni efikasni presek dobija se uvođenjem $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ i izraza (4.37) u (4.52), integraljenjem (4.52), pri čemu se θ menja od 0 do π . Dobija se:

$$\sigma_T = \frac{8r_0^2 \pi}{3} \quad (4.53)$$

Rejljevo elastično rasejanje je rasejanje fotona na elektronima vezanim u atomu, pri čemu elektroni ne dobijaju dovoljno energije za napuštanje atoma ili prelaz na viši energetski nivo. Kao rezultat, javlja se uzmak čitavog atoma, energija fotona se ne menja, a rasejanje se javlja pod malim uglovima. Diferencijalni efikasni presek za Rejljevo rasejanje dat je izrazom:

$$d\sigma_R = \frac{r_0^2 (1 + \cos 2\theta)}{2} |F(\theta)|^2 d\Omega \quad (4.54)$$

gde je $F(\theta)$, takozvani, atomski form - faktor za rasejanje:

$$F = 4\pi \int_0^\infty \frac{\rho(r) \sin(rp) r^2}{rp} dr \quad (4.55)$$

Ovde je $\rho(r)$ sferna raspodela naelektrisanja, a p je linearni moment dat izrazom:

$$p = \frac{E_f \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)}{hc} \quad (4.56)$$

presek za Rejljevo rasejanje zavisi od Z^2 . Sa porastom energije, opada zastupljenost ovog tipa rasejanja. Nuklearni fotoefekat je zasnovan na interakcijama upadnog fotona sa jezgrom atoma, što je u ukupnim procesima atenuacije zastupljeno sa manje od 10%, te se ovaj efekat često zanemaruje.[80,90]

4.3. Dozimetrija jonizujućeg zračenja

Dozimetrija jonizujućeg zračenja je naučna oblast o merenju doza i posledica primljenih doza bez koje nema istraživanja ni primene zračenja. Da bi doza mogla da se izmeri potrebno je kvantitativno opisati izlaganje jonizujućim zračenjima, odnosno opisati relaciju primljena doza - efekat interakcije zračenja sa materijalom.

Široka upotreba izvora jonizujućeg zračenja nosi sa sobom i određene rizike, zbog mogućih štetnih posledica, a čija je verovatnoća pojavljivanja proporcionalna primljenoj dozi zračenja. U daljem tekstu date su definicije dozimetrijskih veličina i mernih jedinica.

Sistem dozimetrijskih veličina i jedinica koristi se za kvantifikaciju izlaganja jonizujućim zračenjima.

Zračenje predaje (deponuje) energiju u materijalu sa kojim interaguje, zbog čega se menjaju svojstva zračenja i svojstva ozračenog materijala. Samo ona energija koju je zračenje deponovalo uzrokuje niz pojava u materijalu i menja njegova svojstva. Energija predana materijalu je pokazatelj učinka zračenja, ona predstavlja dozu zračenja i polazna je dozimetrijska veličina.

Rezultat interakcije zračenja sa materijalom ne zavisi samo od deponovane energije, nego i od vrste zračenja i vrste materijala. Konačni rezultati interakcije zračenja sa materijalom zavise od niza drugih činioca: od načina ozračivanja (jednokratno ili višekratno, stalno ili promenljivo), od toga da li je izloženi materijal okružen materijalom iste ili druge vrste, da li je izvor zračenja u materijalu ili izvan materijala, itd. Ista apsorbovana doza različite vrste i energije jonizujućeg zračenja proizvodi u istom materijalu različite efekte. Da bi se procenio efekat zračenja s obzirom na sveukupne okolnosti, apsorbovana doza se koriguje tzv. koeficijentima konverzije. Tek je tako dobijena doza pravi pokazatelj efekta određenog zračenja na određeni materijal.

Da bismo definisali dozimetrijske veličine moramo krenuti od opisivanja polja razmatranog jonizujućeg zračenja. Prvi korak u opisivanju polja jonizujućeg zračenja je pridruživanje neke konačne zapremine svakoj tački u prostoru. Najjednostavniji slučaj je sferna zapremina sa centrom u posmatranoj tački, sferna zapremina može biti različite veličine. Fizička veličina za opisivanje polja svih tipova zračenja je fluens (Φ), odnosno

za detaljnu karakterizaciju polja zračenja neophodna je informacija o broju i energiji fotona kao i o njihovoj prostornoj i vremenskoj distribuciji.

Fluens, Φ , je količnik broja fotona dN i površine poprečnog preseka sfere da na koju padaju fotoni,

$$\Phi = \frac{dN}{da} \quad (4.57)$$

jedinica je m^{-2} . Distribucija fotona u zavisnosti od energije data je izrazom,

$$\Phi_E = \frac{d\Phi}{dE} \cdot \frac{dN}{da \cdot dE} \quad (4.58)$$

Φ_E je odnos fluensa $d\Phi$ fotona u intervalu energija $E, E + dE$. Na osnovu izraza (4.57) i (4.58) dobija se izraz za fluens energije Ψ_E :

$$\Psi_E = E \cdot \Phi_E = E \cdot \frac{dN}{da \cdot dE} \quad (4.59)$$

gde je dN broj fotona u istom energetsom intervalu ($E, E + dE$) koji padaju na sferu površine poprečnog preseka da . Jedinica za fluens energije je (J/m^2). [91,92]

Dozimetrijske veličine koje se izvode iz fizičkim merenja u korelaciji sa trenutnim ili potencijalnim efektima su u osnovi produkt veličina koje opisuju radijaciono polje i koeficijena interakcije.

Interakcija zračenja sa materijom predstavlja niz događaja u kojima se energija čestice zračenja konvertuje i konačno deponuje u materiji. Dozimetrijske veličine koje opisuju ove procese odnose se na karakterizaciju konverzije i depozicije energije.

Energija koju jonizujuće zračenje deponuje u nekom materijalu je osnovna dozimetrijska veličina stohastičke prirode. Srednja deponovana energija definiše se kao:

$$\varepsilon = R_{in} - R_{out} + \sum Q \quad (4.60)$$

gde je R_{in} zbir kinetičkih energija svih čestica upadnog zračenja koje ulaze u zapreminu materijala, R_{out} zbir kinetičkih energija svih oslobođenih čestica koje izlaze iz materijala, a $\sum Q$ zbir svih energetskih promena jezgra i elementarnih čestica nastalih u interakciji zračenja i materijala. [91,92]

Količnik srednje deponovane energije i elementa mase materijala daje apsorbovanu dozu:

$$D = \frac{d\bar{\varepsilon}}{dm} \quad (4.61)$$

4.4. Teorija radijacionih efekata u izolatorima

Kao što je objašnjeno u poglavlju 3. izolatori su veoma raznovrsna klasa materijala pa su i radijacioni efekti u ovim materijalima brojni u pogledu izmene strukture i svojstava materijala, od izmeštanja atoma u materijalu do promene u ponašanju elektronske konfiguracije. Upadne naelektrisane čestice (projektili) tokom prolaska kroz materijale gube svoju energiju na sudare sa elektronima i jezgrom ili mogu predati energiju za emitovanje drugih zračenja (radijacioni gubici).

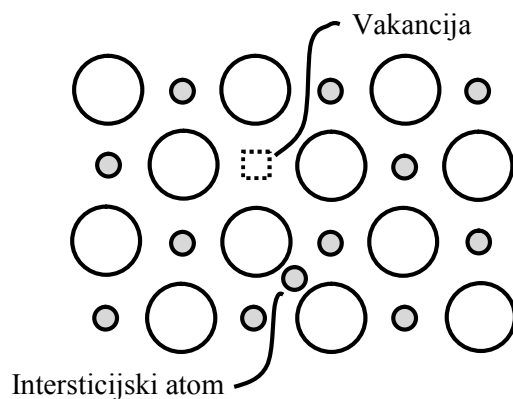
U potpoglavlju 4.1.2 opisana je zaustavna moć teških jona pri prolazu kroz materijal, ovde će dalje biti izloženo takozvano zapreminsko oštećenje pri kom dolazi do elastičnog rasejanja naelektrisane čestice ili jona na jezgru atoma u kristalnoj rešetki, a preneti energija pobuđuje atome iz ravnotežnog položaja (fononi) ili dovodi do izmeštanja atoma iz položaja rešetke. Zapreminska radijaciona oštećenja nastala delovanjem različitih vrsta zračenja, različitih energija i mehanizama interakcije sa čvrstim dielektricima, zasniva se na hipotezi nejonizujućeg gubitka energije (NIEL akronim od: Non Ionizing Energy Loss). Ova hipoteza podrazumeva da su promene u materijalu usled izmeštanja atoma linearno srazmerna ukupnoj energiji predatoj u elastičnim sudarima sa izmeštenim atomima. [93,94]

S obzirom da su za teške naelektrisane čestice u opsegu energija koji je razmatran u ovom radu radijacioni gubici energije zanemarljivi, samo su preostala dva vida gubitka energije relevantna pri prolazu jonskog snopa kroz izolator: gubici na jonizacije i eksitacije elektrona (zaustavna moć ili linearni gubitak energije) i nejonizujući gubici (NIEL) na eksitacije (fononi) i izmeštanje atoma. Gubici energije na jonizacije ne dovode do izmena kristalne rešetke i značajni su samo za površinska oštećenja u filmovima oksida, u kojima nosioci naelektrisanja nastali jonizacijom mogu da budu trajno zarobljeni. U filmovima u stanju izolatora sa Kuperovim parovima gubici energije na jonizacije doprinose raskidanju parova i na taj način narušavanju ovog stanja. [93,94]

Nejonizujući gubici izazivaju promene, oštećenja u materijalu koja su linearno srazmerna ukupnoj energiji predatoj u elastičnim sudarima sa atomima, nezavisno od prostorne raspodele proizvedenih oštećenja, i nezavisno od različitih procesa otpuštanja koji se odvijaju po nastanku oštećenja.

4.4.1. Zapreminska radijaciona oštećenja u izolatorima

Elektronska mikroskopska struktura pruža potrebne informacije strukturne i hemijske analize materijala nakon elastičnih i neelastičnih interakcija upadnih čestica zračenja i atoma materijala. Radijacioni efekti kod izolatora izražavaju se preko procesa defekata direktnog atomskog izmeštanja iz rešetke i/ili eksitacije elektrona. Primarni defekti u kristalnoj rešetki nastali usled izlaganja zračenju su neuređenost rešetke od izolovanih defekata u vidu Frenkelovih parova vakancija (upražnjeno mesto u rešetki) i intersticijalnih atoma (atom između čvorova rešetke) (Slika 4.6). Većina ovih defekata u vidu Frenkelovih parova su kratkog života i anihiliraju u procesu rekombinacije intersticijalni atom - vakancija i ne doprinose formiranju zapreminskih oštećenja u rešetki. Neki od defekata, s druge strane, mogu doživeti dimerizaciju, odnosno nagomilavanjem formiraju klastere ili od intersticijalnih atoma ili od vakancija, kao što su divakancije i diintersticijalni kompleksi, petlje izmeštanja, ili multivakancije. Preostali defekti koji se nisu rekombinovali ni dimerizovali, difunduju u materijalu i grade komplekse sa drugim defektima ili primesama. [95,96]



Slika 4.6 Frenkelov par čine vakancija i intersticijalni atom.

Neuređenost rešetke nastaje iz fizičkih procesa odgovornih za usporavanje upadnih jona koji pritom zauzimaju mesta između čvorova rešetke. Usporavanju upadnih jona doprinose sudari sa jezgrom i elektronima atoma materijala. U sudarima sa jezgrom su mnogo veći gubici energije od sudara sa elektronima iz omotača, kao i ugaona skretanja upadnih jona sa upadne trajektorije. Ova razlika je relativna jer sa povećanjem energije i

masenog broja upadnih čestica raste značaj gubitaka energije na rasejanje sa elektronima atoma materijala.

Ukupna zaustavna moć naelektrisanih čestica (projektila) S_u može se predstaviti i kao suma elektronske (S_e) i nuklearne (S_n) zaustavne moći.

$$S_u = S_e + S_n \quad (4.62)$$

Nuklearna zaustavna moć opisuje gubitak energije projektila u sudarima sa jezgrom i za snopove čestica masenog broja M_1 i atomskog broja Z_1 u materijalu atoma masenog broja M_2 i atomskog broja Z_2 može se izračunati sa velikom tačnošću pomoću Ziegler, Biersack i Littmark (ZBL) formule [97]:

$$S_n(E) = \frac{8,462Z_1Z_2M_1S_n(\varepsilon)}{(M_1 + M_2)(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} \left[\frac{\text{eVcm}^2}{10^{15} \text{atom}} \right] \quad (4.63)$$

gde je efikasni presek za rasejanje upadne čestice na jezgru dobijen iz

$$S_n(\varepsilon) = \frac{0.5 \ln(1 + 1.1383\varepsilon)}{(\varepsilon + 0.01321\varepsilon^{0.21226} + 0.19593\varepsilon^{0.5})} \quad \text{za } \varepsilon_{ZBL} \leq 30 \quad (4.64)$$

i

$$S_n(\varepsilon) = \frac{\ln(\varepsilon)}{2\varepsilon} \quad \text{za } \varepsilon_{ZBL} > 30 \quad (4.65)$$

ZBL gubitak energije je dobijen iz izraza

$$\varepsilon_{ZBL} = \frac{32.53M_1M_2(E/M_1)}{Z_1Z_2(M_1 + M_2)(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} \quad (4.66)$$

gde je E izraženo u keV. Značaj ovog izraza za gubitak energije upadne čestice u sudaru sa jezgrom atoma materijala je u tome što se odnosi na sve moguće kombinacije atoma upadnih čestica i atoma materijala. [97]

Za elektronsku zaustavnu moć, S_e , koja opisuje gubitak energije proton kao upadnih čestica u sudarima sa elektronima atoma materijala kroz koji se kreću, koristimo poluempirijski izraz izveden od strane iste grupe naučnika (ZBL) koji predstavlja funkciju energije protona $E(\text{keV})$ i atomskog broja atoma materijala mete Z_2 . Za energije protona do 10MeV ovaj izraz je

$$\frac{1}{S_e} = \frac{1}{S_{LOW}} + \frac{1}{S_{HIGH}} \quad (4.67)$$

gde je

$$S_{LOW} = A_1E^{A_2} + A_3E^{A_4} \quad (4.68)$$

i

$$S_{HIGH} = \frac{A_5 \ln\left(\frac{A_6}{E} + A_7 E\right)}{E^{A_8}} \quad (4.69)$$

i koeficijenti A_i za svaki element atomskog broja Z_2 dati su u programu TRIM koji je korišćen za simulaciju u ovom radu i opisan u poglavlju 6. Za energije protona preko 10MeV do 2GeV izraz ima oblik

$$S_e = A_9 + A_{10}\left(\frac{\ln E}{E}\right) + A_{11}\left(\frac{\ln E}{E}\right)^2 + A_{12}\left(\frac{E}{\ln E}\right) \quad (4.70)$$

gde su takođe koeficijenti A_i iz programa TRIM. [98]

Za teže jone od protona, elektronska zaustavna moć u materijalu kroz koji se kreće jon izvedena je iz elektronske zaustavne moći protona u istom materijalu u vidu sledeće relacije

$$S_e = \frac{S_e^{ref} (\gamma Z_1)^2}{(Z_1^{ref})^2} \quad (4.71)$$

gde se S_e^{ref} i Z_1^{ref} odnose na referentni proton za istu energiju po nukleonu kao projektil za koji se računa S_e , γZ_1 je efektivno naelektrisanje upadne teške naelektrisane čestice.[97,98] Na slici 4.7 prikazan je primer kako se sa energijom upadne čestice (Kr) menjaju efikasni preseki za njeno rasejanje na jezgru i elektronima atoma (Cu) mete.

Elektronska zaustavna moć alfa čestice data izrazom (4.71) važi za energije $>4\text{keV}$. Dalje se ukupna zaustavna moć za alfa čestice dobija iz izraza (4.62) i (4.63).

Domet upadnih čestica energije E_0 u materijalu dobija se iz izraza

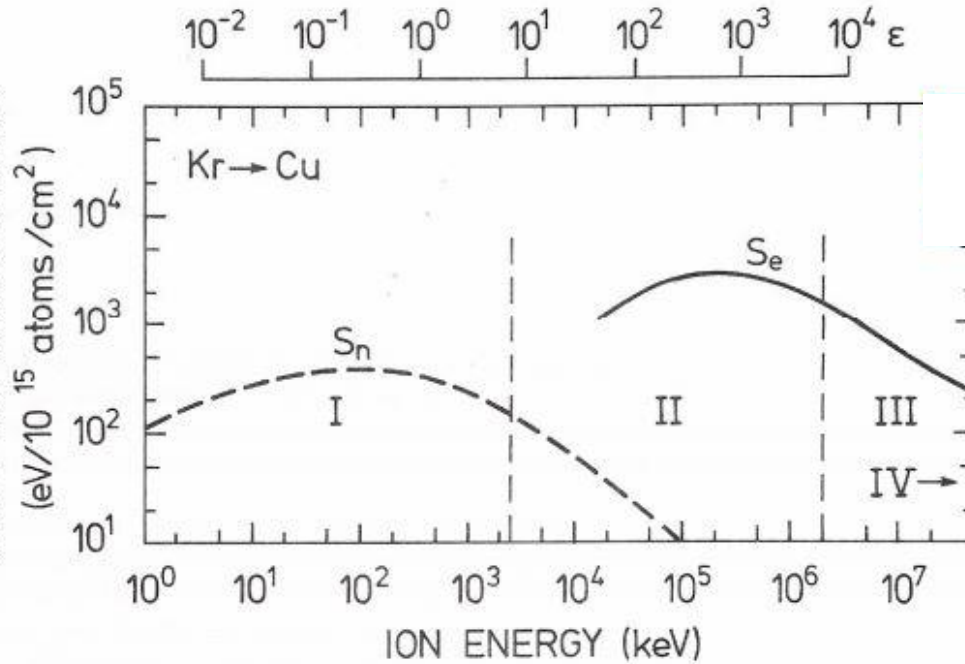
$$R(E_0) = \int_0^{E_0} S_u^{-1} dE \quad (4.72)$$

koji se takođe može izvesti u obliku

$$R(E_0) = R(E_1) + \int_{E_1}^{E_0} S_u^{-1} dE \quad (4.73)$$

Češće se određuje srednji pređeni put čestice R_p ($R_p < R$ zbog značajnog ugaonog skretanja upadne čestice).[97] Simulacija TRIM korišćena u ovom radu sadrži algoritam za određivanje R_p iz sledećeg izraza

$$R_p(E_0 + \Delta E_0) = R_p(E_0) + \left[\frac{4E^2 - 2E\mu S_n + \mu Q_n R_p(E_0)}{2(2ES_u - \mu Q_n)} \right] \frac{\Delta E_0}{E} \quad (4.74)$$



Slika 4.7. Nuklearna i elektronska zaustavna moć za različite energije upadne čestice Kr u materijalu od atoma Cu. [97]

gde je $\mu = \frac{M_1}{M_2}$, a početna vrednost R_p je određena na energiji $E_1=10\text{eV/nukleonu}$ kao

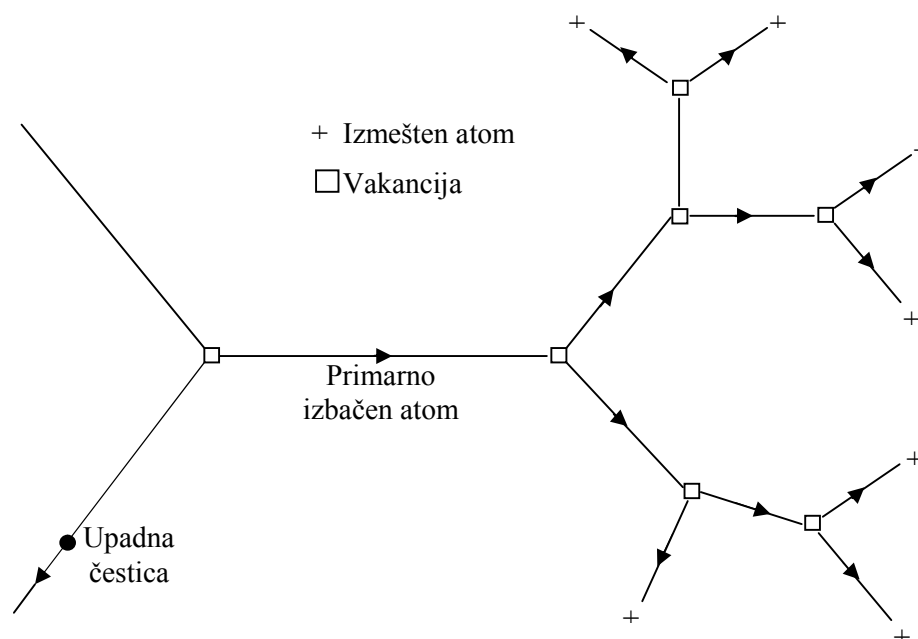
$$\frac{2E_1}{1.2S_u + \mu S_n} \quad (4.75)$$

a Q_n je drugi impuls gubitka energije upadne čestice u sudaru sa jezgrom [(eV)²/Å], i dobija se iz izraza

$$Q_n = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2(4 + 0.197\varepsilon^{-1.691} + 6.684\varepsilon^{-1.0494})} \frac{0.6022\rho}{M_2} \left(\frac{f_s}{f_\varepsilon} \right) \quad (4.76)$$

gde je ρ gustina materijala mete, f_s faktor multiplikacije $S_n(\varepsilon)$ u izrazu (4.63) i f_ε je faktor multiplikacije $\left(\frac{E}{M_1} \right)$ u izrazu (4.66). [97,98]

Izmešteni atomi iz kristalne rešetke nastali usled sudara upadnih čestica i njihovog gubitka energije se nazivaju primarno izbačeni atomi (primary knock-on atoms ili PKA). Ukoliko primarno izbačeni atom primi dovoljno energije da može izazvati izmeštanje niza sekundarnih atoma koji dalje mogu da vrše izmeštanja atoma nastaje kaskada atomskih rasejanja (Slika 4.8). Ovaj proces dovodi do distribucije vakancija, intersticijalnih atoma, odnosno Frenkelovih parova, kao i drugih tipova neuređenosti rešetke u regionu oko putanje upadne čestice. Izmešteni atomi pojavljuju se razgranato u materijalu čime formiraju stablo izmeštanja. Ovi atomi gube energiju duž svojih putanja na jonizacije, fononska pobuđivanja i izmeštanja drugih atoma. Oko polovine energije utroše na jonizacije, dok nejonizujuća rasejanja dominiraju pri kraju putanje svog kretanja kad preostane oko 5-10% primljene kinetičke energije. Na krajevima stabala izmeštanja formiraju se visoke koncentracije Frenkelovih parova poznati kao završni klasteri. Kaskada od jednog primarno izbačenog atoma sadrži oko 2-3 završna klastera, a čitavo stablo se formira u vrlo kratkom roku od 1 ns. Defekti koji nastaju duž putanje izmeštenih atoma, kao i klasteri defekata na krajevima ovih putanja, čine osnov radijacionih oštećenja unutar izolatora. [96]



Slika 4.8. Šema kaskade rasejanja [99]

Parametar koji se obično koristi da dovede u vezu oštećenje prouzrokovano od različitih tipova zračenja iz okruženja je ukupan broj izmeštanja po atomu. Kinchin i Pease [100] su među prvima uspeli da utvrde broj izmeštanja po atomu tokom ozračivanja. Modifikovana verzija njihovog modela poznatog kao NRT model [101] je opšte prihvaćena kao međunarodni standard za kvantifikovanje broja atomskih izmeštanja u ozračenom materijalu. Prema modelu NRT, broj Frenkelovih parova N_d nastao od primarni izbačenih atoma (PKA) dobija se iz relacije:

$$N_d = \frac{k(E_p - E_e)}{2E_d} \quad (4.77)$$

gde je E_p energija primarno izbačenog atoma umanjena za E_e energiju izgublenu na eksitaciju elektrona, E_d energija praga za izmeštanje atoma iz rešetka i k koeficijent efikasnosti izmeštanja (obično se uzima 0,8). Modifikovana Kinchin-Pease relacija za izolatore izgleda:

$$N_d = \begin{cases} 1 & \text{za } E_d < E_p < 2E_d / 0.8 \\ \frac{0.8(E_p - E_c)}{2E_d} & \text{za } E_p > 2E_d / 0.8 \end{cases} \quad (4.78)$$

E_d zavisi od jačine veze atoma u rešetki, dostupnog prostora za smeštanje intersticijalnog atoma u strukturi, kao i od forme međuprostora u rešetki. [99]

Srednja energija primarno izbačenog atoma pri Rutherford-ovom rasejanju iznosi približno:

$$\bar{E}_p \approx \frac{E_d \Delta E_{\max}}{\Delta E_{\max} - E_d} \ln \frac{\Delta E_{\max}}{E_d} \quad (4.79)$$

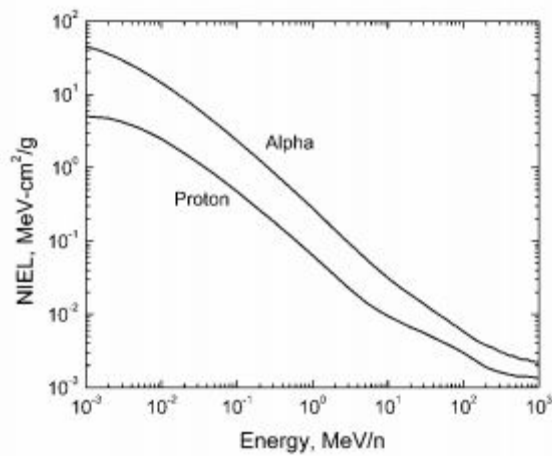
gde je ΔE_{\max} maksimalan prenos energije sa čestice na jezgro određen iz relacije (4.2) pri čeonom sudaru. Svaka upadna čestica koja izazove primarno izmeštanje, predaje uzmaklom atomu određenu energiju E_p , a zatim u zavisnosti od te energije deo se troši na nova sekundarna izmeštanja.

Energetski gubici upadne čestice na izmeštanja i time proizvedeni defekti dovode se u vezu (NIEL hipoteza) kako bi se moglo predvideti funkcionisanje materijala u uslovima izloženosti zračenju. Preko energije primarno izbačenog atoma E_p koja se dalje troši na izmeštanja moguće je odrediti nejonizujući gubitak energije u vidu funkcije oštećenja, koja predstavlja presek za oštećenja izmeštanjem:

$$NIEL(E) = \frac{N_A}{A} \int_0^{\Delta E_{\max}} (E_p - E_e) \left(\frac{d\sigma}{dE_p} \right)_E dE_p \quad (4.80)$$

gde je E energija upadne čestice, N_A Avogardov broj, A atomski broj atoma materijala mete, a $\frac{d\sigma}{dE_p}$ predstavlja presek (verovatnoću) za nastajanje primarno izbačenog atoma energije E_p . [102]

NIEL za alfa i protone kao upadne čestice energija 1keV-10GeV po nukleonu u silicijumu dati su na slici 4.9.



Slika 4.9. NIEL za alfa čestice i protone energija od 10^{-3} - 10^3 MeV/nukleonu. [103]

5. NUMERIČKA SIMULACIJA TRANSPORTA ČESTICA ZRAČENJA KROZ INDIJUM OKSID FILMOVE U STANJU IZOLATORA SA KUPEROVIM PAROVIMA

5.1. Osnovne postavke Monte Carlo metoda

Monte Karlo metod je teško precizno, koncizno i kompletno definisati, ovaj metod predstavlja numerički metod rešavanja složenih matematičkih, statističkih, fizičkih problema koji u svim svojim varijantama uključuje procese slučajnog odabiranja. Cilj ovog metoda zasniva se na konceptu dobijanja uzoraka iz osnovne populacije čija obeležja želimo da odredimo. Uzorci se dobijaju pomoću specijalnih tehnika uzorkovanja zasnovane na principima teorije verovatnoće i matematičke statistike. Statističkom analizom podataka dobijenih uzorkovanjem donose se zaključci o karakteristikama populacije koja je od interesa. Prednost Monte Karlo metoda jeste jednostavno rešavanje čak i veoma složenih matematičkih problema, za koje najčešće ne postoji analitičko rešenje; njegov nedostatak je veliki broj potrebnih ponavljanja računarskih eksperimenata da bi se postigla željena tačnost. Nove generacije računara čine ovaj nedostatak sve manji te je Monte Karlo metoda sve prisutnija u različitim naučnim i tehničkim disciplinama.

U zavisnosti od izbora fizičko matematičkog modela kojim se opisuju slučajni procesi u sistemu i načina na koji se stohastički obrađuju dobijeni uzorci, razlikuje se nekoliko varijanti Monte Karlo metoda. U nekim slučajevima fizičko matematički model slučajnih procesa je potpuno veštački i konstruisan u specijalne svrhe, tj. za rešavanje određenog problema. Ova varijanta Monte Karlo metoda, mada često veoma interesantna, nije od šireg interesa zbog svoje ograničenosti u primeni.

Najpopularniju i za razumevanje najjednostavniju varijantu Monte Karlo metoda predstavlja tzv. analogna tehnika ili direktna simulacija. Fizički model koji se implementira u analognu tehniku identičan je onome kome se pokoravaju slučajni procesi u realnom sistemu. Na taj način procesi koji se simuliraju Monte Karlo metodom predstavljaju apstraktnu analogiju procesa u realnom sistemu, te se veoma često ova simulacija naziva i numeričkim eksperimentom, numeričkom simulacijom.

Imajući u vidu napred rečeno, jasno je da se Monte Karlo metod temelji na stohastici prirodnih procesa, čija su stanja određena zakonima verovatnoće. Mera stohastičke prirode određene pojave opisuje se slučajnom veličinom u nekom intervalu sa verovatnoćom koju opisuje gustina raspodele te slučajne veličine. Teorijske predstave o pojavama koje simuliraju slučajne veličine iz njihovih poznatih raspodela na takav način da njena srednja vrednost po verovatnoći teži njenom matematičkom očekivanju čine osnovu primene Monte Karlo metoda u numeričkim simulacijama. Gustina raspodele zbira slučajnih veličina teži gustini normalne raspodele kada se broj realizacija slučajne veličine neograničeno uvećava. Time metode Monte Karlo simulaciju fizičkih procesa približavaju numeričkom eksperimentu u kome se greška može kontrolisati, odnosno numerička simulacija fizičkog procesa ovom metodom može se izvesti sa predviđenom greškom.

5.2. Uzorkovanje slučajnih veličina

Uzorkovanjem slučajne veličine ξ iz njene gustine raspodele verovatnoće $f(x)$, simulira se fizički proces metodom Monte Karlo da bi se kao rezultat dobio skup slučajnih brojeva u , čija empirijska raspodela verovatnoće $F(x)$ odgovara raspodeli slučajnih brojeva koje uzorkujemo. Ovaj se postupak naziva još i simulacijom, modelovanjem ili realizacijom date slučajne veličine. Postoji veliki broj metoda i razrađenih algoritama za simulaciju, ovde će biti izloženi oni koji se najčešće koriste i ilustruju glavne principe u uzorkovanju slučajnih brojeva.[104,105]

5.2.1. Metod inverzne funkcije

Neka je kontinualna slučajna veličina ξ definisana funkcijom raspodele gustine verovatnoće $f(x)$ i odgovarajućom kumulativnom (integralnom) funkcijom raspodele verovatnoće

$$F(x) = \int_a^x f(t)dt \quad a \leq x \leq b \quad (5.1)$$

pri čemu je

$$F(a) = 0 \text{ i}$$

$$F(b) = 1.$$

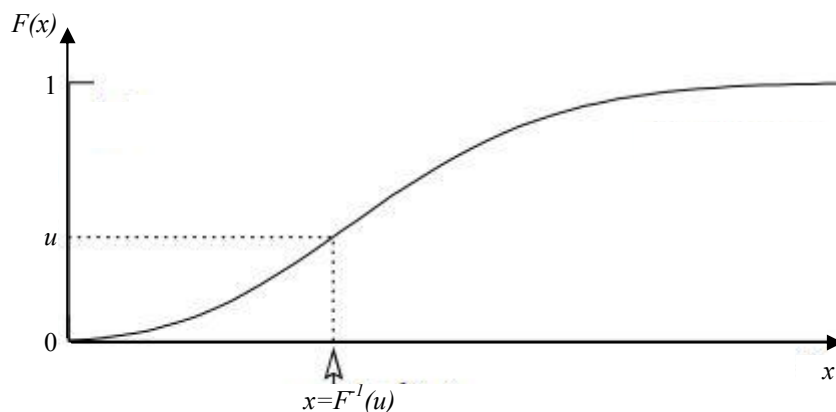
Uzorkovanje ovako definisane kontinualne veličine se može izvršiti rešavanjem jednačine po x preko

$$F(x) = \int_a^x f(t) dt = u \quad (5.2)$$

i zatim inverznom funkcijom

$$x = F^{-1}(u); \quad u \in (0,1) \quad (5.3)$$

se dobija realizacija slučajne veličine ξ , pri čemu se podrazumeva da je moguće naći inverznu funkciju $F^{-1}(x)$ (slika 5.1) i rešiti prethodnu jednačinu. Zbog svoje jednostavnosti ovaj metod se često koristi i naziva metod inverzne funkcije. Kako mnoge funkcije gustine raspodele nisu integrabilne i kako se za mali broj funkcija raspodele može naći inverzna funkcija, koriste se numeričke metode za integraljenje jednačine (5.2).



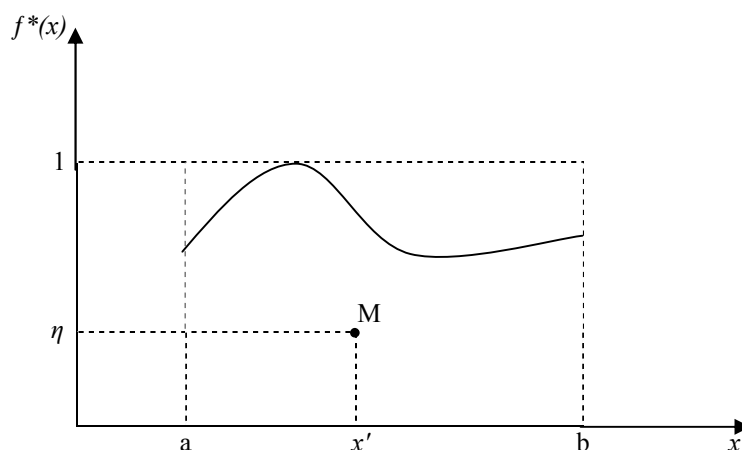
Slika 5.1. Ilustracija inverzne metode

5.2.2. Metod odbacivanja

Ovaj metod je pogodan u slučajevima kada se uzorkovanje vrši pomoću funkcije gustine raspodele verovatnoće $f(x)$, a nije moguće naći analitičko rešenje raspodele ili se ne može analitički izraziti inverzna funkcija raspodele.

Polazi se od pretpostavke da je funkcija $f(x)$ ograničena i normirana na jedinicu. Definiše se funkcija $f^*(x) = f(x)/f_m(x_m)$, gde je $f_m(x_m)$ maksimalna vrednost funkcije $f(x)$

u intervalu $[a,b]$. Definiše se slučajna tačka $M(x',\eta)$ (slika 5.2), gde je $x'=a+\gamma(b-a)$, a γ i η slučajni brojevi. Ukoliko je $f^*(x') > \eta$, odnosno tačka M je ispod krive $f^*(x)$, vrednost x' prihvata se kao realizacija slučajne promenljive ξ , u suprotnom se odbacuje i opisani postupak ponavlja sve do uspešne realizacije.



Slika 5.2. Ilustracija metoda odbacivanja

Nedostatak ovog metoda je ponavljanje postupka što usporava uzorkovanje. Mera efikasnosti metoda odbacivanja predstavlja odnos uspešnog prema ukupnom broju pokušaja realizacije i jednak je količniku površine ispod $f^*(x)$ i površine pravougaonika sa stranicama dužine $(b-a)$ i 1 , efikasnost je jednaka $1/(b-a)f_m(x_m)$. [106] Kod efikasnosti reda 80% i više, ovaj metod je konkurentan ostalim metodama simulacije.

5.2.3. Metod supstitucije

Gustina raspodele slučajne veličine $f(x)$ često ima više od jednog člana zbog stohastičke prirode pojave čiju verovatnoću opisuje ili zato što je dobijena aproksimacijom eksperimentalnih ili numeričkih podataka. Da bi se primenila metoda supstitucije, funkcija f se razvija u obliku zbira funkcija $f(x) = c_1q(x) + c_2r(x) + c_3s(x) + \dots$. Kada se na takvu funkciju primeni metoda inverzne funkcije, moguća su razna ograničenja, te metoda supstitucije u mnogim slučajevima omogućava da se do tog rezultata dođe na zaobilazan način. Modelovanje slučajne veličine ovim metodom svodi se prvo na pronalaženje težinskih koeficijenata c_1, c_2, c_3, \dots a zatim da se prema zadatoj

verovatnoći odredi neka od raspodela $q(x)$, $r(x)$, $s(x)$... i na kraju iz raspodela za datu verovatnoću odredi se vrednost slučajne veličine opisanim metodama odbacivanja ili inverznom funkcijom. Ova metoda ima dobre osobine i vrlo je efikasna za uzorkovanje slučajne veličine iz složene gustine raspodele, jer ma koliko bila složena ona se uvek može prikazati u obliku zbira za integraciju i inverziju pogodnih članova.

5.2.4. Metod stacionarnih raspodela lanaca Markov-a

Metod raspodele lanaca Markov-a je metoda koja je zasnovana na funkciji gustine raspodele verovatnoće lanaca Markov-a, koji imaju osobinu da im je ravnotežna raspodela jednaka nekoj raspodeli čiji se uzorak želi generisati. Stanje lanca posle velikog broja koraka se dalje koristi kao uzorak željene raspodele. Kvalitet uzorka poboljšava se većim brojem koraka. Ova metoda za generisanje lanaca Markov-a sa željenom raspodelom slučajnih veličina se uopšteno sastoji od sledećih koraka:

(i) Usvoje se inicijalne vrednosti slučajnih promenljivih koje su komponente slučajne veličine, odnosno x_1 i θ_1

(ii) Koristeći ovaj metod nastavlja se sa generisanjem slučajne promenljive po pravilu $x_i \sim f(x | \theta_{i-1}, y)$ i $\theta_i \sim f(\theta | x_i, y)$.

Na ovaj način dobija se lanac Markov-a $\{x_i, \theta_i\}_{i=1}^n$ čija raspodela konvergira ka željenoj raspodeli. Ova raspodela se naziva aperiodična, ireducibilna, stacionarna ili invarijantna raspodela pozitivnog rekurentnog lanca Markov-a.[107] Metoda stacionarnih raspodela lanaca Markov-a služi kao osnova algoritama poput Metropolis za generisanje slučajnih brojeva.

5.2.5. Algoritmi za generisanje slučajnih veličina

Algoritmi za generisanje slučajnih veličina koriste vrednosti slučajnih veličina različitih gustina raspodele. Za svaku neophodnu gustinu raspodele, postoji više mogućih algoritama, različite složenosti, brzine i tačnosti. Za vremenski kritične aplikacije, ovi algoritmi mogu da se kodiraju u liniji za uklanjanje značajnih opštosti sa kojima se često susreće pri pozivanju određenih funkcija. U nastavku teksta opisane su

raspodele iz kojih se prema matematičkoj teoriji verovatnoće i statistike slučajna veličina može dobiti iz uniformne raspodele. Njene osnovne osobine su da je slučajna vrednost na intervalu (0,1), da je gustina raspodele $p(x) = 1$, da je raspodela $F(x) = x$, da je matematičko očekivanje 1/2 i standardno odstupanje 1/12. Vrednosti slučajne veličine sa uniformnom raspodelom (0,1) dobijane su različitim generatorima slučajnih brojeva: od skupova brojeva koje generišu fizičke naprave do numeričkih metoda. U daljem tekstu date su značajne gustine raspodela i načini modelovanja slučajne veličine.

Eksponencijalna raspodela: Za ovu raspodelu uobičajeno se koristi metod inverzne funkcije, kao i činjenica da ako je uniformna raspodela slučajne veličine ξ u intervalu $[0,1]$ onda je i $1-\xi$ u istom intervalu sa istom raspodelom. Funkcija gustine raspodele

$$f(t) = (1/\tau)e^{-t/\tau} \quad (5.4)$$

skraćena tako da leži između dve vrednosti, a i b, i onda re-normirana na ceo prostor. Da bi se odredilo vreme raspada t prema funkciji gustine raspodele prvo se odredi

$$\alpha = e^{-a/\tau} \text{ i } \beta = e^{-b/\tau} \quad (5.5)$$

onda se generiše slučajna veličina ξ i dobija

$$t = -\tau \ln(\beta + \xi(\alpha - \beta)). \quad (5.6)$$

Za $(a,b) = (0, \infty)$, jednostavno se piše $t = -\tau \ln \xi$.

Gausova (normalna) raspodela: Kada su uniformne raspodele slučajnih brojeva ξ_1 i ξ_2 na intervalu (0,1), onda su

$$z_1 = \sin(2\pi\xi_1)\sqrt{-2 \ln \xi_2} \text{ i } z_2 = \cos(2\pi\xi_1)\sqrt{-2 \ln \xi_2} \quad (5.7)$$

nezavisne i sa Gausovom raspodelom za koju važi da su joj parametri očekivana vrednost $\mu = 0$ i varijansa $\sigma^2 = 1$.

Postoji mnogo varijanti ovog osnovnog algoritma od kojih neke mogu učiniti algoritam bržim. Na primer, za generisane slučajne brojeve ξ_1 i ξ_2 izračunaju se vrednosti slučajnih brojeva $v_1 = 2\xi_1 - 1$ i $v_2 = 2\xi_2 - 1$ koji su sa uniformnom raspodelom na intervalu (-1,1). Ukoliko za $r^2 = v_1^2 + v_2^2$ važi da je $r^2 > 1$, ponovi se procedura. Ako je $r^2 < 1$ i uniforman na intervalu (0,1), uvodi se novi par slučajnih brojeva:

$$z_1 = v_1 \sqrt{\frac{-2 \ln r^2}{r^2}} \text{ i } z_2 = v_2 \sqrt{\frac{-2 \ln r^2}{r^2}} \quad (5.8)$$

nezavisnih i izabranih iz normalne raspodele sa $\mu = 0$ i $\sigma^2 = 1$.

χ^2 raspodela: Za generisanje slučajnih promenljivih ove raspodele za n stepeni slobode, koristi se gama raspodela sa $k = n/2$ i $\lambda = 1/2$ na sledeći način:

Gama raspodela: Svi od sledećih algoritama dati su za $\lambda = 1$. Za $\lambda \neq 1$ rezultujući slučajni broj deli se sa λ .

- Za $k = 1$ (eksponecijalna raspodela), prihvata se $x = -\ln u$.
- Za $0 < k < 1$, postupak se inicijalizuje sa $v_1 = (e + k) / e$ (sa $e = 2.71828\dots$ kao baza prirodnog logaritma). Zatim se generišu uniformni slučajni brojevi u_1, u_2 , i izračuna $v_2 = v_1 u_1$.

Slučaj 1: $v_2 \leq 1$. Definiše se $x = v_2^{1/k}$. Ako je $u_2 \leq e^{-x}$, prihvata se x i zaustavlja postupak, ako nije onda se postupak ponovi ispočetka sa novim u_1, u_2 .

Slučaj 2: $v_2 > 1$. Definiše se $x = -\ln((v_1 - v_2) / k)$. Ako je $u_2 \leq x_k^{-1}$, prihvata se x i zaustavlja postupak, ako nije postupak se ponovi ispočetka generisanjem novih u_1, u_2 . Za $k < 1$, gustina verovatnoće ima pol na $x=0$, tako da vraćanje vrednosti nula usled potkoračenja (broj je manji od najmanjeg dozvoljenog broja) mora biti prihvaćeno ili na drugi način rešeno.

- Ako je $k > 1$, postupak se inicijalizuje sa $c = 3k - 0.75$. Generiše se slučajni broj u_1 i izračunava $v_1 = u_1(1 - u_1)$ i $v_2 = (u_1 - 0.5)\sqrt{c/v_1}$. Ako je $x = k + v_2 - 1 \leq 0$, vraća se postupak na početak i generiše novi slučajni broj u_1 ; ukoliko se generiše slučajni broj u_2 , izračuna se $v_3 = 64 v_1^3 u_2^2$. Ukoliko je $v_3 \leq 1 - 2v_2^2/x$ ili $\ln v_3 \leq 2 \{[k-1] \ln[x/(k-1)] - v_2\}$, prihvata se x i zaustavlja postupak, u suprotnom se postupak vraća na početak i generiše se novi slučajni broj u_1 .

Binomna raspodela: Počinje sa $k = 0$ i generiše se slučajni broj u koji ima uniformnu raspodelu u intervalu $[0,1)$. Izračuna se $P_k = (1-p)^n$ i upiše se u B . Ukoliko je $u \leq B$ prihvata se $r_k = k$ i zaustavlja se procedura. U suprotnom, povećava se k za 1; izračunava se sledeći P_k kao $P_k * [p/(1-p)] * (n-k)/(k+1)$ i upiše se u B . Ukoliko je dalje, $u \leq B$, prihvata se $r_k = k$ i zaustavlja se procedura, u suprotnom iteracija se ponavlja do prihvatljive vrednosti. Ako je $p > 1/2$, biće efikasnije generisanje r iz $f(r; n, q)$, tj. međusobna zamena p i q , i dalje određivanje $r_k = n - r$.

Poisson-ova raspodela: Kod ove raspodele, iterativni postupak se vrši dok se ne napravi uspešan izbor. Počinje sa $k = 1$ i postavlja se $A=1$ na početku. Generiše se slučajan broj u , zatim zamenjuje A sa uA . Ukoliko je $A < e^{-\mu}$, gde je μ Poisson-ov parametar, prihvata se $n_k = k - 1$ i zaustavlja operacija. Ukoliko nije, k se povećava za 1, generiše se novi slučajan broj u i ponavlja postupak. Uvek procedura počinje sa vrednošću A koja je ostala od prethodnog postupka.

Student-ova t raspodela: Generišu se slučajni brojevi u_1 i u_2 koji imaju uniformnu raspodelu u intervalu $(0,1)$, zatim $t = \sin(2\pi u_1)[n(u_2^{-2/n}-1)]^{1/2}$ sledi Student-ova t raspodela za $n > 0$ stepeni slobode (n ne mora da bude ceo broj).

Alternativno, generiše se x iz Gausove raspodele sa parametrima $\mu = 0$ i $\sigma^2=1$. Dalje se generiše y , nezavisna gama slučajna promenljiva prema Gama raspodeli sa parametrima $\lambda=1/2$ i $k=n/2$. Dalje je $z = x/\sqrt{y/n}$ raspodela kao t sa n stepeni slobode.

U posebnom slučaju za $n=1$, Breit-Wigner-ova raspodela, generišu se slučajni brojevi u_1 i u_2 , postavlja se $v_1=2u_1-1$ i $v_2=2u_2-1$. Ako je $v_1^2+v_2^2 \leq 1$ prihvata se $z=v_1/v_2$ kao Breit-Wigner-ovu raspodelu za jediničnu površ sa centrom u 0 i punom širinom na polovini maksimuma (FWHM)=2,0. U suprotnom, postupak se ponavlja ispočetka. Za centar u M_0 i FWHM Γ , koristi $W = z\Gamma/2+M_0$.

Beta raspodela: Bira se odgovarajući algoritam za generisanje beta raspodele slučajnih brojeva u zavisnosti od parametara α i β . Za npr. $\alpha=1$ koristi se metod transformacije za nalaženje $x=1-u^{1/\beta}$ i slično, za $\beta=1$ nalazi se $x=u^{1/\alpha}$.

Mera stohastičke prirode neke pojave je verovatnoća da neka veličina ima vrednost između x i $x+dx$. Ova verovatnoća opisuje gustinu raspodele slučajne veličine $p(x)$. Za prolaz zračenja kroz materijale, ta verovatnoća odnosi se na diferencijalni efikasni presek koji je objašnjen u poglavlju 4.1. Integral diferencijalnog efikasnog preseka po odgovarajućoj promenljivoj u granicama fizičke prirode te promenljive naziva se totalni efikasni presek (relacija 4.17). Gustina raspodele slučajne veličine ili efikasni presek data je sa određenim korakom slučajne veličine u datom opsegu da numeričke vrednosti što vernije opišu raspodelu. S druge strane, korak je promenljiv i tako odabran da se lakše koriste uobičajene metode interpolacije ili rekonstrukcije preseka u pojedinim oblastima koje su važne za tok gustine raspodele u tim oblastima. Modelovanje slučajnih veličina iz gustina raspodele složena je numerička tehnika. Kada se simulira transport neke čestice metodom Monte Karlo ne može se govoriti o simulaciji, a da se

ne obuhvate svi procesi koji odgovaraju pretpostavkama o njima. Tako na primer, za računanje broja upadnih čestica koje su prošle kroz materijal nemoguće je dobiti fizički prihvatljiv rezultat, ako se pri tome ne uračunaju dominantni procesi sudara sa atomima materijala, ali i sudari sekundarnih čestica formiranih u sudarima upadnih i atoma materijala.

Algoritmi zasnovani na metodama Monte Karlo koriste vrednosti slučajnih veličina različitih gustina raspodele i da bi se izračunala vrednost bilo koje slučajne veličine, dovoljno je imati jednu vrednost slučajne veličine. Ta slučajna veličina može se odabrati tako da ima zahtevanu gustinu raspodele, odnosno standardnu gustinu raspodele. Kao standardna gustina raspodele uzima se uniformna raspodela na intervalu $(0,1)$.

6. REZULTATI NUMERIČKIH SIMULACIJA TRANSPORTA ZRAČENJA KROZ INDIJUM OKSID FILMOVE

Pomoću Monte Carlo simulacije stohastička priroda procesa interakcije čestica direktnog jonizujućeg zračenja sa strukturnim jedinicama ispitivanog materijala daje informacije o efektima zračenja u materijalu kroz koji prolazi, a ti efekti mogu biti trajni i prolazni. Za razliku od realnih fizički eksperimenata određenih procesa, numerička simulacija metodama Monte-Carlo izvodi se sa unapred očekivanom nesigurnošću.

U ovom radu korišćen je program TRIM (akronim: Transport of Ions in Matter) modul programskog paketa SRIM (akronim: The Stopping and Range of Ions in Matter) za simulaciju monoenergetski snopova različitih jona koji prolaze kroz ispitivani materijal. Rezultati postignuti ovim programom do sada su pokazali značajnu usaglašenost sa rezultatima postignutim realnim eksperimentima. Konstantnim nadogradnjama tokom protekle decenije programski paket SRIM je postao najistaknutiji alat za numeričku analizu interakcije zračenja sa materijom u skladu sa teorijskim predviđanjima.

TRIM je grupa programa zasnovana na Monte Carlo simulaciji prolaza upadnih jona kroz materijal i iz koje se dobija detaljan proračun energije koja se prenosi sudarima na atome mete. kao i za zaustavljanje i dubinu prodiranja jona (10 eV - 2 GeV po atomskoj jedinici mase) u materijalu. U pitanju je kvantno-mehanička obrada jon-atom sudara, gde su joni upadne čestice, a atomi sastavni elementi materijala mete. Ovaj proračun je veoma efikasan u korišćenju statističkih algoritama koji omogućavaju da se uračuna svaki rezultat jonskog delovanja između proračunatih sudara, a potom dobije prosečan broj sudara prolaza jona kroz metu u zadatim uslovima. Tokom sudara jona i atoma zanemarena je Kulonova sila, uključujući interakcije razmene i korelacija između elektronskih ljuski koje se preklapaju. Prodiranje jona i stvaranje elektronskih eksitacija i plazmona u meti pomoću kolektivne elektronske strukture mete i strukture međuatomskih veza opisani su u podešavanjima simulacije. Stanje naelektrisanog jona unutar mete je opisano korišćenjem koncepta efektivnog naelektrisanja, koji obuhvata zavisnost brzine stanja naelektrisanja i projekcije dubine prodiranja u elektronskoj strukturi mete. TRIM je sveobuhvatan program po pitanju zadavanja strukturnog sastava mete, prihvatajući do osam slojeva, gde svaki može biti od različitog materijala.

Ovim programom se dobija konačna 3D raspodela jona i sve kinetičke pojave u vezi sa gubitkom energije jona u meti na: oštećenja, izbijanje atoma sa površine mete, jonizacije, i fononska pobuđivanja. Sve atomske kaskade u meti se prate detaljno. Programi su napravljeni tako da se mogu prekinuti u svakom trenutku i nastaviti kasnije. Distribucija jona i brz proračun broja izmeštanja vrši se statističkom procenom zasnovanom na Kinchin - Pease formalizmu i dobijaju se sledeći rezultati: konačna raspodela jona u meti, jonizacioni gubici energije jona u meti, preneti energija na izmeštene atome, rasejani i stvoreni joni. Generatori slučajnih brojeva za jone i izmeštene atome su odvojeni. Izmešteni atomi se formiraju dok energija upadnog jona ne padne ispod vrednosti za najnižu energiju izmeštanja jednog atoma mete. Dakle, sva izmeštanja prouzrokovana sudarima u meti se analiziraju. Za proračun oštećenja prouzrokovanih od lakih jona, protona ili alfa čestica, program koristi karakteristiku "monoslojnog sudara", odnosno jona koji ima sudar u svakom pojedinačnom sloju mete. Ovim se izostavlja upotreba slobodne putanje, i svaki sudar se proračunava bez aproksimacija. Rezultati korišćenja ove opcije na kraju daju iste prosečne vrednosti za domet, jonizacije, oštećenja, itd. Ova vrsta proračuna je od suštinskog značaja za specijalne aplikacije kao što su izmeštanje atoma sa površine mete od strane upadnih jona, a generiše podatke o svakom mogućem sudaru.[108]

Energija oštećenja u meti u programu TRIM se izražava preko vrednosti energije izmeštanja atoma u meti, energije veze atoma u rešetki i površinske energije veze atoma. Energija izmeštanja je dobijena kao energija potrebna da atom napusti oblast rešetke jer ukoliko ne napusti pretpostavka je da će se vratiti na prvobitno mesto i da se radi o fononskom gubitku energije. U poglavlju 4.4.1. *Zapreminska radijaciona oštećenja* date su tipične vrednosti energije praga za izmeštanja atoma različitih elemenata. Za mete sastavljene od više slojeva istog elementa, mogu se koristiti različite energije izmeštanja za elemente u različitim slojevima. Površinska energija veze je ključni parametar za dobijanje broja izmeštenih atoma sa površine mete, dok je energija veze u rešetki energija koju izmešteni atomi gube na nova izmeštanja nakon napuštanja rešetke. Kaskada izmeštanja atoma dobija se u Programu proračunom svakog izmeštenog atoma mete koji može da izazove sopstvena pod-kaskadna oštećenja u meti. Na ovaj način dobijaju se detalji i tipovima oštećenja u materijalu prouzrokovana upadnim jonima. Pomoću programa dobijaju se između ostalih i energetske gubici jona

na elektrone iz mete, odnosno zaustavna moć elektrona ($eV/\text{\AA}$, $\text{\AA}=10^{-10}\text{ nm}$ - Angstrom). Zatim moguća je identifikacija izmeštenih atoma koji započinju kaskadu zajedno sa energijom izmeštanja. Svaka kaskada je podeljena na sledeće događaje: sudare sa izmeštanjem, proizvodnju vakancija, sudare sa zamenom atoma i intersticijalne atome. Broj sudara sa izmeštanjem pokazuje koliko atoma mete je izmešteno sa energijom iznad vrednosti energije praga za izmeštanja. Broj vakancija predstavlja broj izmeštenih atoma umanjen za broj onih atoma koji su usled gubitka energije na izmeštanja zauzeli mesto izbačenog atoma. Mehanizam sudara sa zamenom može smanjiti broj vakancija do 30%. Intersticijalni atomi predstavljaju broj formiranih vakancija umanjen za broj atoma koji su napustili materijal mete. Za proračun kaskada, izmeštanja u meti, sudara sa zamenom, itd. TRIM čini određene pretpostavke i to: upadni jon je atomskog broja Z_1 i energije E . Atomi mete su atomskog broja Z_2 . Nakon sudara, upadnom jonu preostaje energija E_1 . Prethodno su definisane energije praga za izmeštanje atoma mete E_d , energije veze atoma u rešetki E_b i konačna upadna energija E_f . [108]

Do izmeštanja dolazi ako je $E_2 > E_d$, vakancija se formira ako je $E_1 > E_d$ i $E_2 > E_d$. Oba atoma imaju dovoljno energije da napuste oblast rešetke i postaju atomi kaskade. Energija E atoma Z_2 je umanjena za E_b pre narednog sudara. Ako je $E_2 < E_d$, onda izbačeni atom nema dovoljno energije, vibrira a onda se vraća na svoje prvobitno mesto, što prouzrokuje oslobađanje energije E_2 u obliku fononskih pobuđivanja. [98,108]

Ako su $E_1 < E_d$ i $E_2 > E_d$ i $Z_1 = Z_2$ onda pogođeni atom mete ostaje na svom mestu i radi se o sudaru sa zamenom prilikom kog dolazi do oslobađanja energije E_1 ponovo u vidu fononskih pobuđivanja. Atom u rešetki zamenjuje se istim atomom kod sudara sa zamenom koji se obično javljaju kod jednočestičnih meta sa velikom kaskadom izmeštanja. Ako je $E_1 < E_d$ i $E_2 > E_d$ i $Z_1 \neq Z_2$, onda Z_1 postaje zaustavljeni intersticijalni atom. [98,108]

Ako su $E_1 < E_d$ i $E_2 < E_d$, onda Z_1 postaje intersticijalni atom i $E_1 + E_2$ se oslobađa u formi fononskih pobuđivanja. Ako je meta sastavljena od velikog broja različitih elemenata i svaki ima različit prag za izmeštanja, onda se E_d menja za svaki atom kaskade. [98,108]

TRIM omogućava pretpostavku da je materijal na nultoj temperaturi pre izlaganja što ovaj program čini odgovarajućom alatkom za modelovanje radijacionih efekata u filmovima u stanju izolatora sa Kuperovim parovima, koji egzistiraju na veoma niskim

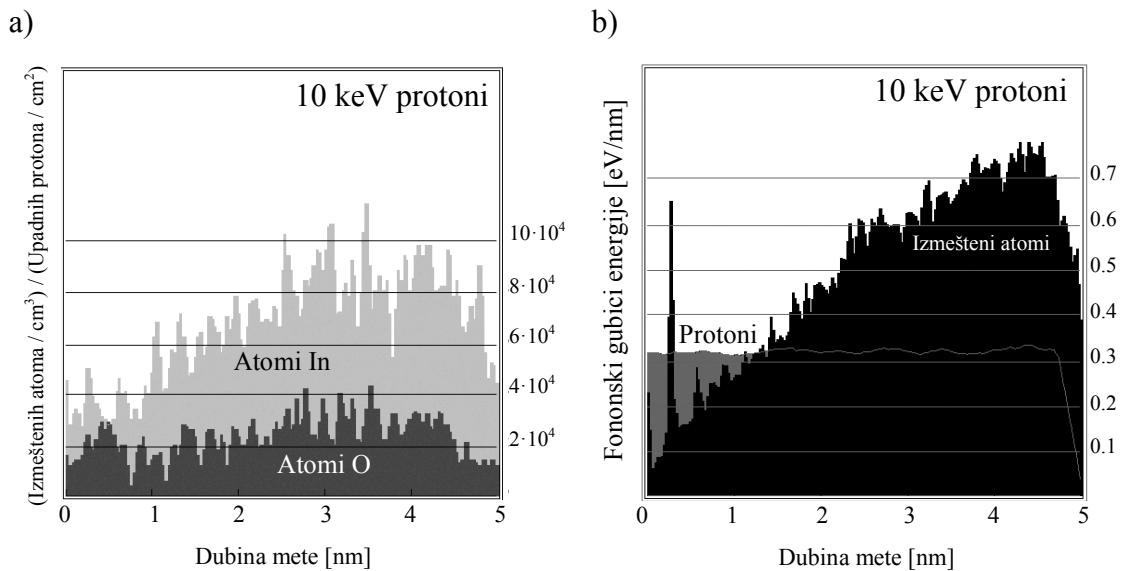
temperaturama, tako da se termalna difuzija i otpuštanje izmeštenih atoma mogu zanemariti. Druga postojeća aproksimacija u TRIM je da ne postoji nagomilavanje oštećenja, tj. za svaki upadni jon zanemaruju se oštećenja nastala od prethodnih jona. Dakle, ovim Programom je moguće računanje za jedan jon zračenja čime se postiže preciznija procena fizike sudara upadnog jona i čestice materijala mete. Tačnost simulacije zavisi od zadatog broja jona upadnog zračenja. Kalkulacijom sa 1000 jona upadnog zračenja tačnost će biti bolja za 10%.

U ovom radu simulacijom su testirani filmovi InO_x različitih debljina (5 nm do 20 nm). Sadržaj kiseonika je varirao od $x = 0.95$ do $x = 1.05$ čime je održana amorfna struktura InO_x filmova. Upadno zračenje prilikom depozicije energije izaziva jonizacije, fononsko eksitovanje rešetke i izmeštanja atoma InO_x filmova što dovodi do specifičnih promena fizičkih osobina filmova u stanju izolatora sa Kuperovim parovima. Zapreminska radijaciona oštećenja sa izmeštanjem iz rešetke podrazumevaju neuređenost rešetke od defekata u vidu Frenkelovih parova vakancija i intersticijalnih atoma. Broj Frenkelovih parova proračunava se iz modifikovane relacije Kinchin-Pease (4.65), što u isto vreme znači i broj nastalih vakancija.

Za računanje gubitka energije jonizacije uzeta je energija disocijacije Kuperovih parova u ostrvima unutar granularne strukture InO_x filmova.

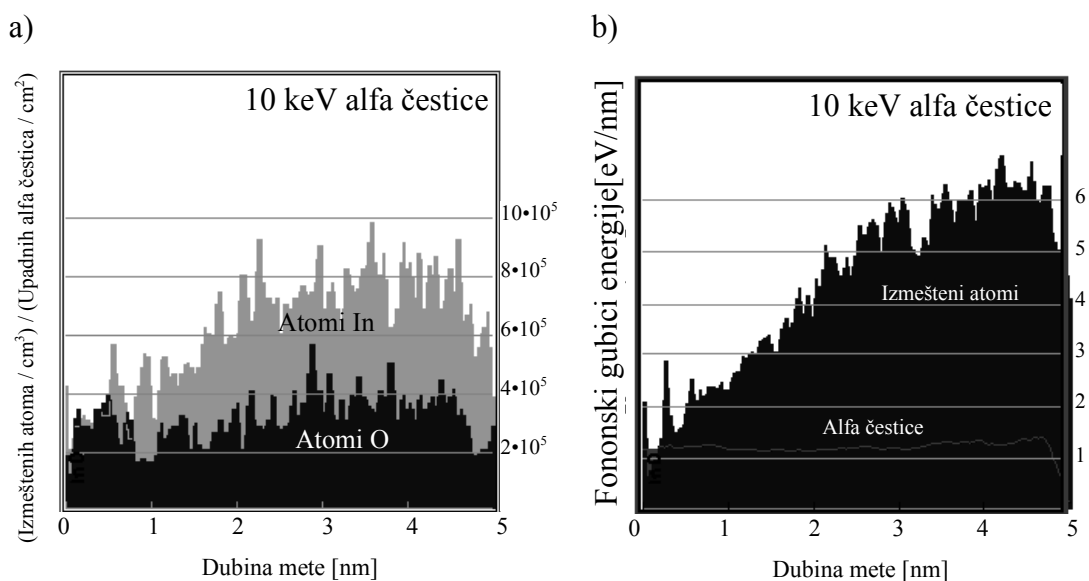
Za simulaciju izabrana su polja zračenja jona kojima mogu biti izloženi u sklopu tehnologije proizvodnje tankih filmova ili u sklopu primene kao sastavnih delova elektronskih komponenti. To su joni protona, alfa čestica, bora, arsena, gvožđa i fosfora.

Na slikama od 6.1. do 6.24. prikazani su grafički rezultati dobijeni simulacijom. Prikazane su raspodele procesa nastalih jonizacijom (srazmerno razdvajanjima Kuperovih parova), fononskim pobuđivanjem i izmeštanjem atoma, kao i tragovi upadnih jona i izmeštanja u filmovima InO .



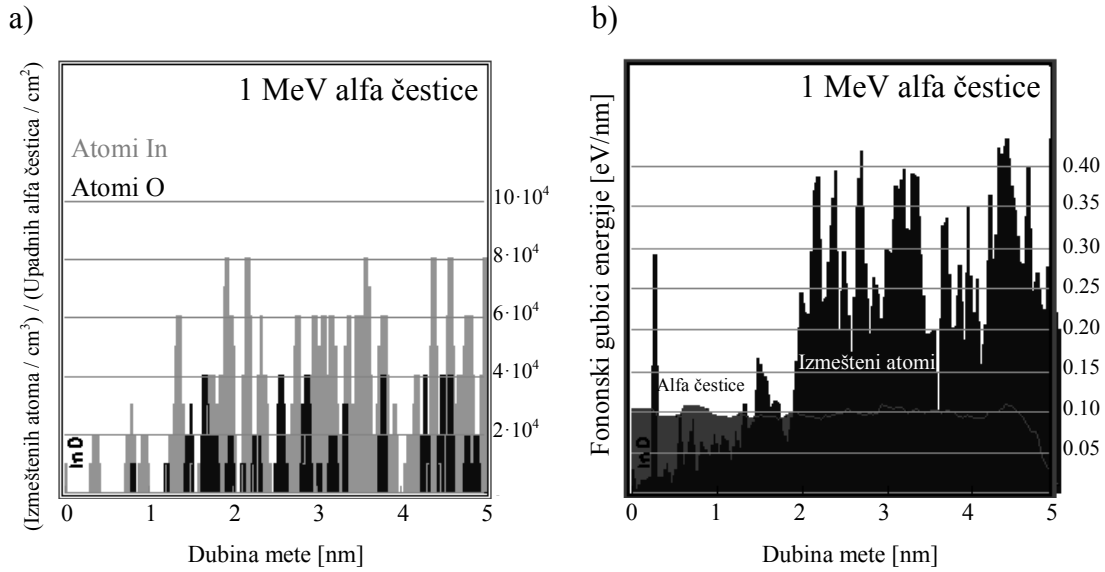
Slika 6.1. Rezultati ozračivanja InO filma debljine 5 nm upadnim snopom od 10^5 protona od 10keV.

- a) Izmešteni atomi indijuma i kiseonika.
 b) Gubitak energije protona i izmeštenih atoma na fononske eksitacije po dubini mete.



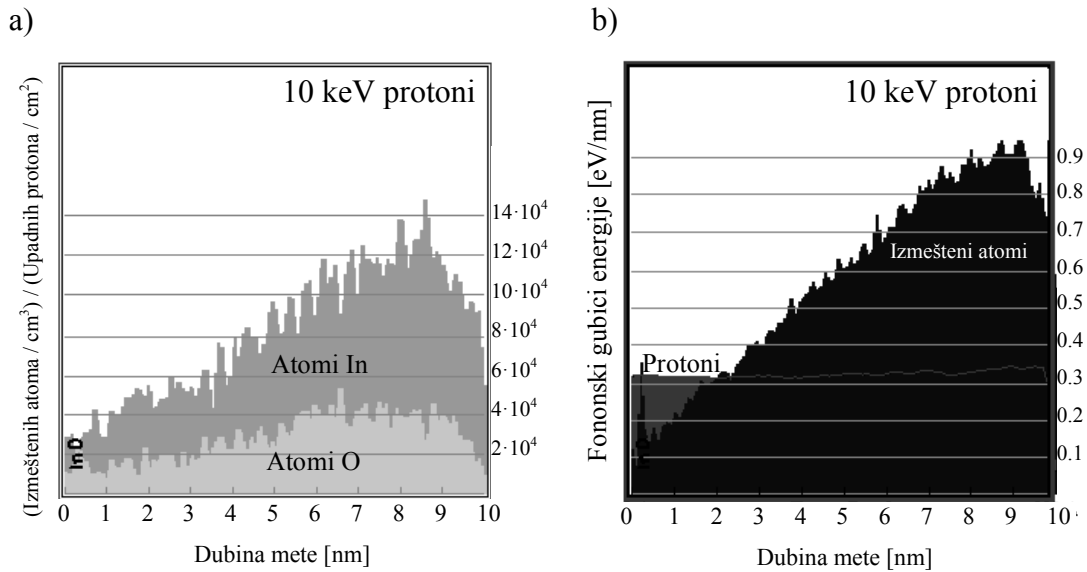
Slika 6.2. Rezultati ozračivanja InO filma debljine 5 nm snopom od 10^4 alfa čestica od 10keV.

- a) Izmešteni atomi indijuma i kiseonika po jedinici fluensa alfa čestica.
 b) Gubitak energije alfa čestica i izmeštenih atoma na fononske eksitacije po dubini mete.



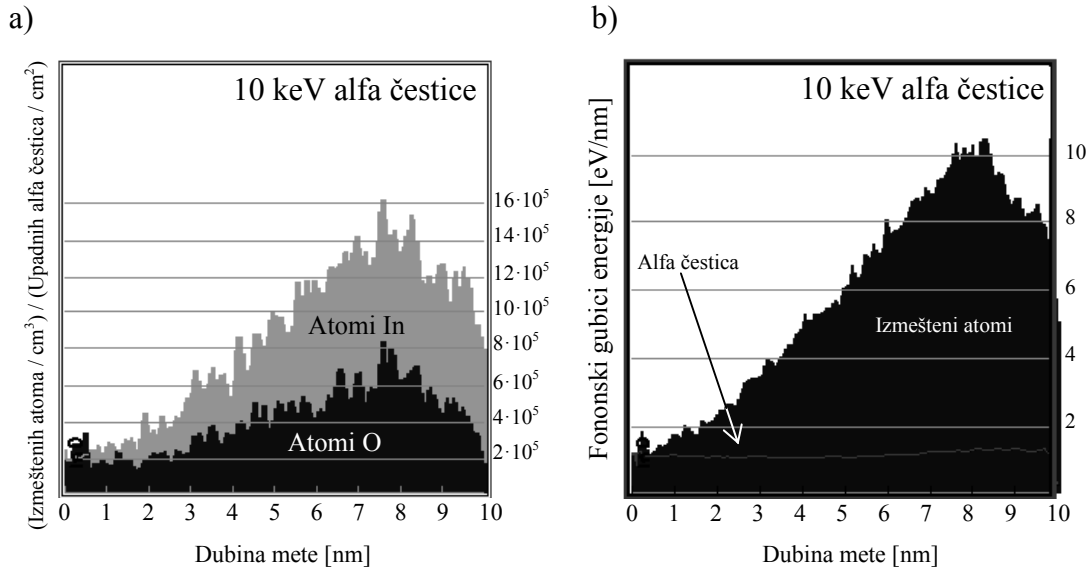
Slika.6.3. Rezultati ozračivanja InO filma debljine 5 nm snopom od 10^4 alfa čestica od 1MeV.

- a) Izmešteni atomi indijuma i kiseonika.
b) Gubitak energije alfa čestica i izmeštenih atoma na fononske eksitacije po dubini mete.



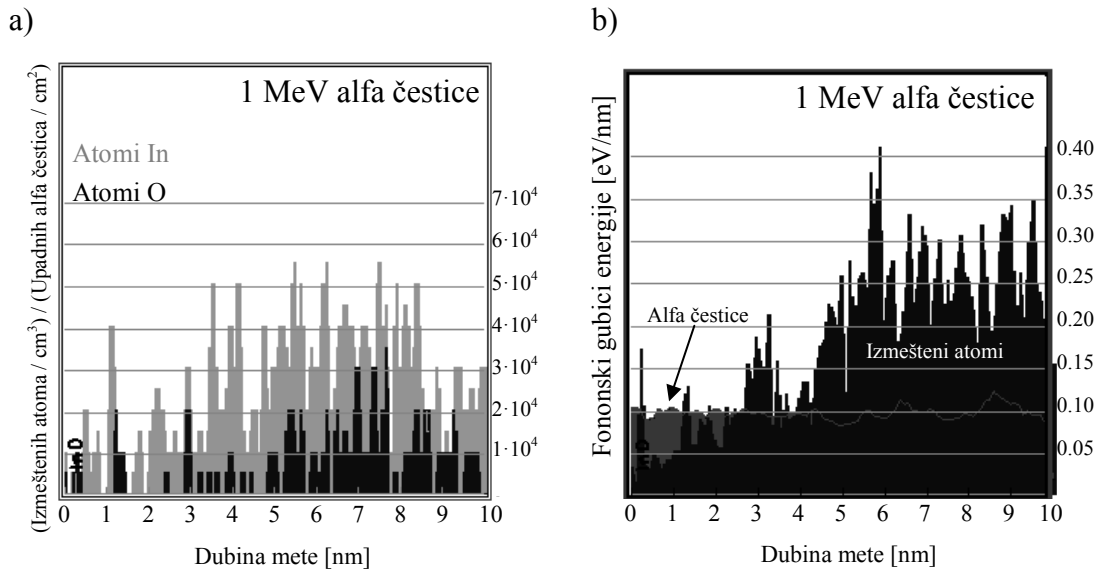
Slika 6.4. Rezultati ozračivanja InO filma debljine 10 nm upadnim snopom od 10^5 protona od 10keV.

- a) Izmešteni atomi indijuma i kiseonika.
b) Gubitak energije protona i izmeštenih atoma na fononske eksitacije po dubini mete.



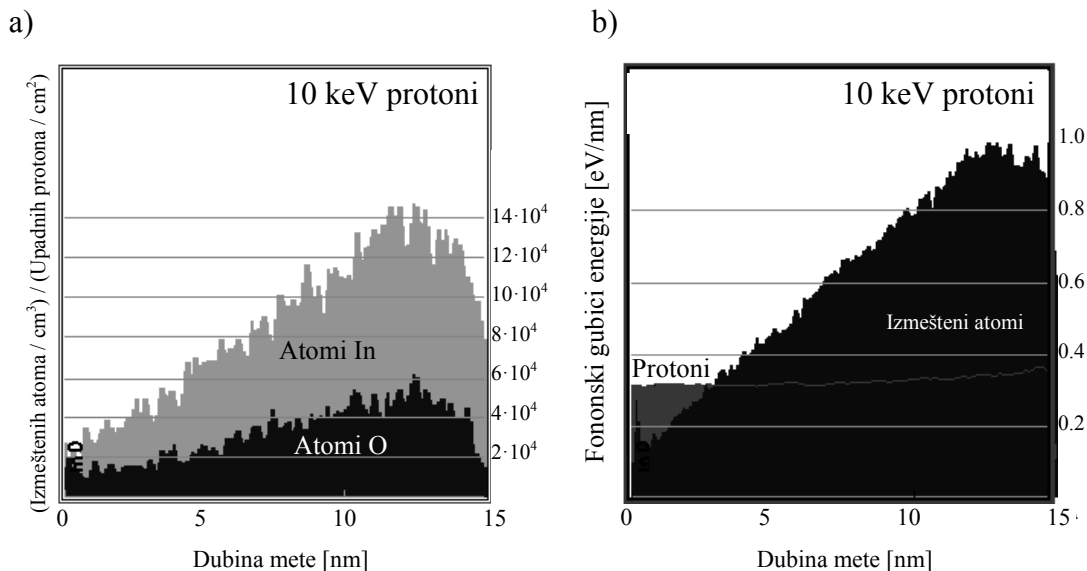
Slika 6.5. Rezultati ozračivanja InO filma debljine 10 nm upadnim snopom od 10^4 alfa čestica od 10keV.

- a) Izmešteni atomi indijuma i kiseonika.
 b) Gubitak energije alfa čestica i izmeštenih atoma na fononske eksitacije po dubini mete.



Slika 6.6. Rezultati ozračivanja InO filma debljine 10 nm upadnim snopom od 10^4 alfa čestice od 1 MeV.

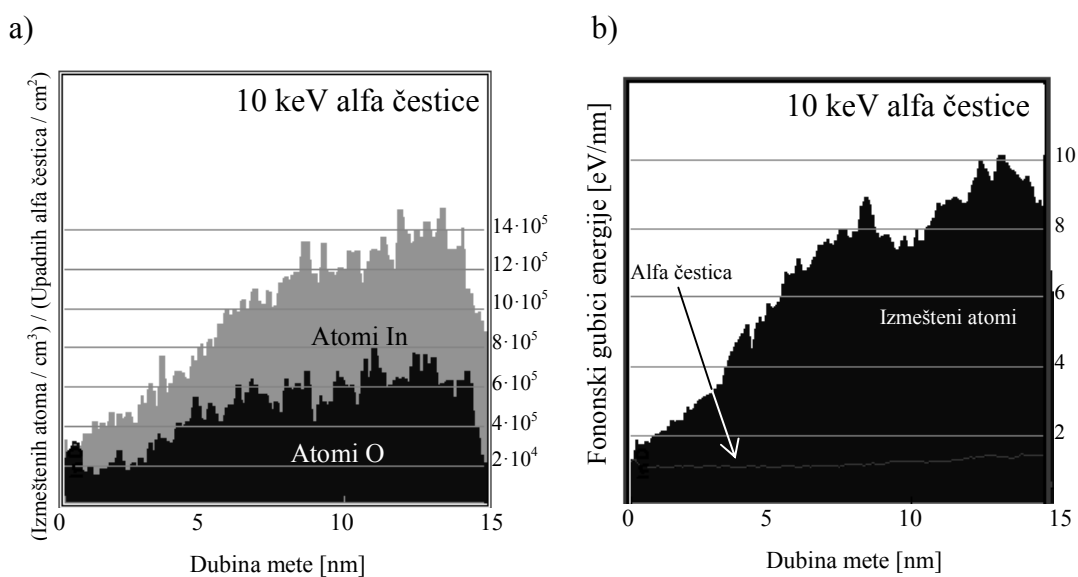
- a) Izmešteni atomi indijuma i kiseonika.
 b) Gubitak energije alfa čestica i izmeštenih atoma na fononske eksitacije po dubini mete.



Slika 6.7. Rezultati ozračivanja InO filma debljine 15 nm upadnim snopom od 10^5 protona od 10keV.

a) Izmešteni atomi indijuma i kiseonika.

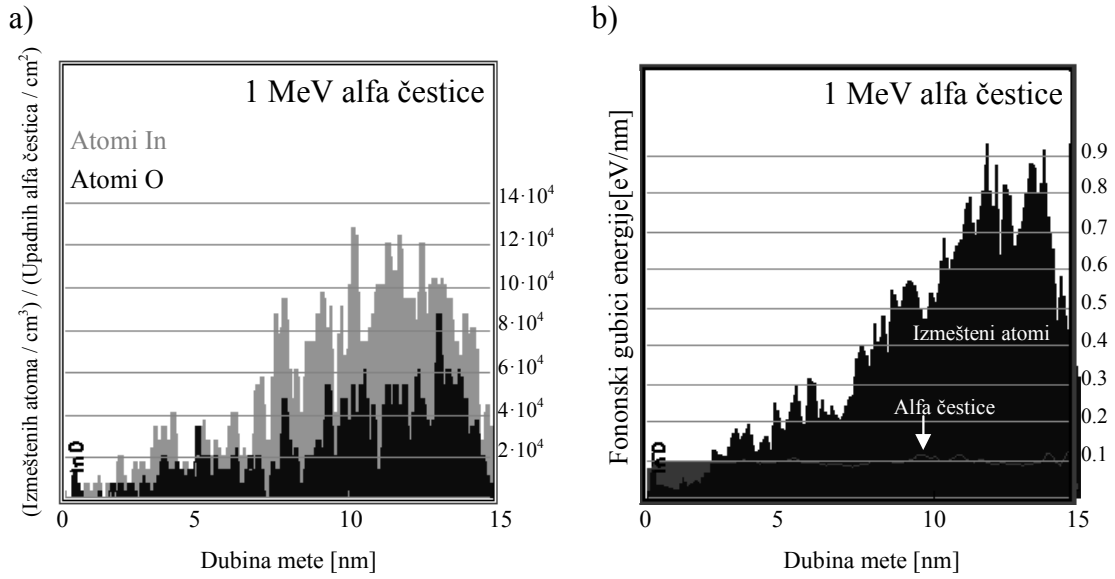
b) Gubitak energije protona i izmeštenih atoma na fononske eksitacije po dubini mete.



Slika 6.8. Rezultati ozračivanja InO filma debljine 15 nm upadnim snopom od 10^4 alfa čestice od 10keV.

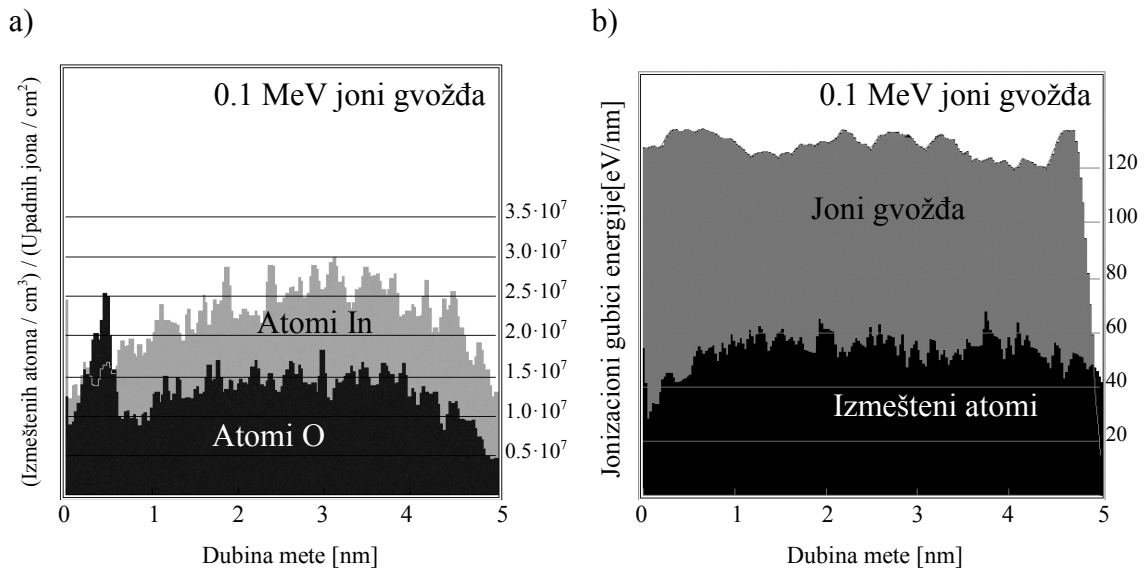
a) Izmešteni atomi indijuma i kiseonika.

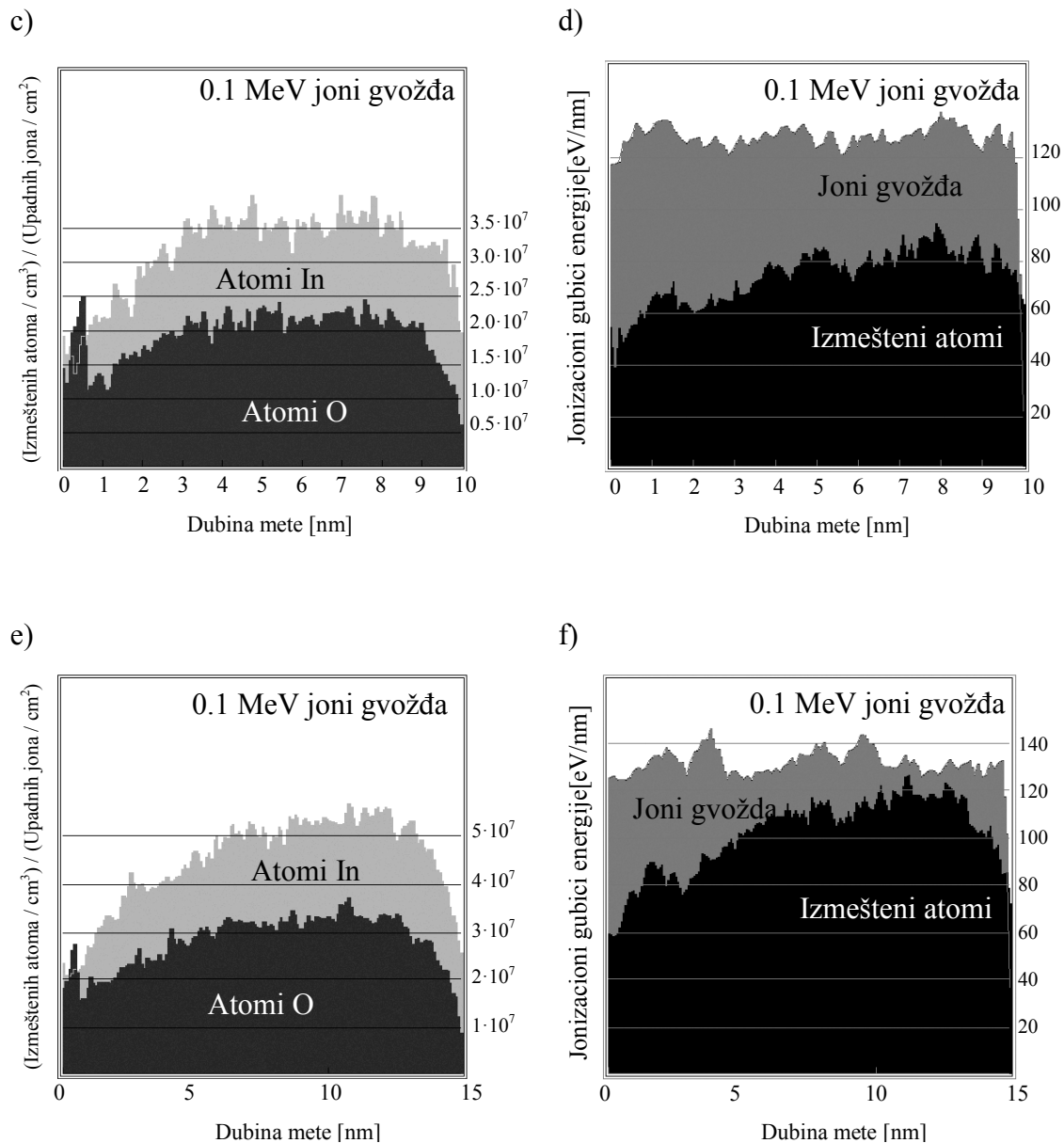
b) Gubitak energije alfa čestica i izmeštenih atoma na fononske eksitacije po dubini mete.



Slika 6.9. Rezultati ozračivanja InO filma debljine 15 nm snopom od 10^4 alfa čestica od 1 MeV.

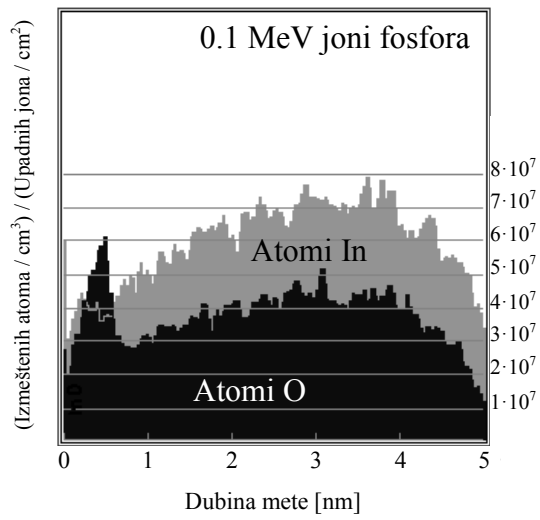
- a) Izmešteni atomi indijuma i kiseonika po jedinici fluensa alfa čestica.
b) Gubitak energije alfa čestica i izmeštenih atoma na fononske eksitacije po dubini mete.



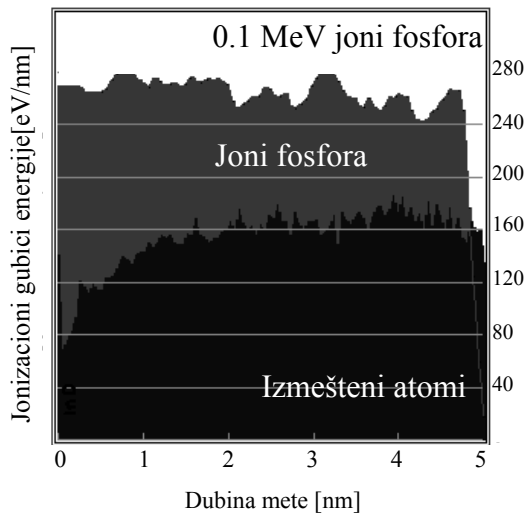


Slika 6.10. Raspodele za upadni snop od 10^3 jona gvožđa od 0.1 MeV. Izmešteni atomi po jedinici jonskog fluensa i gubitak energije na jonizacije po dubini mete za različite debljine filmova InO: 5 nm (a i b), 10 nm (c i d) i 15 nm (e i f).

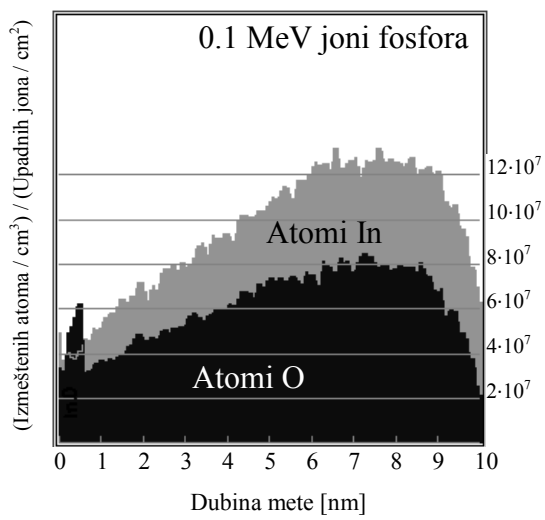
a)



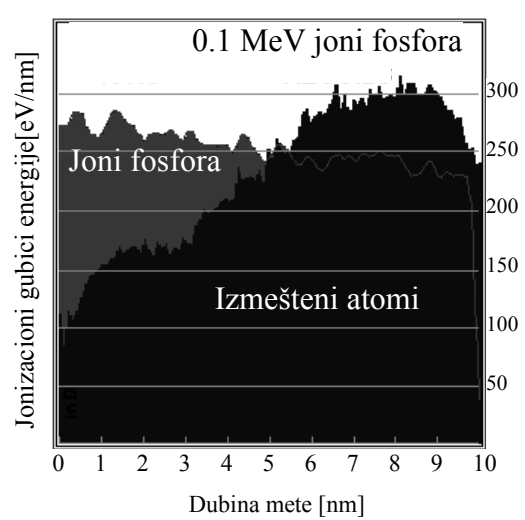
b)

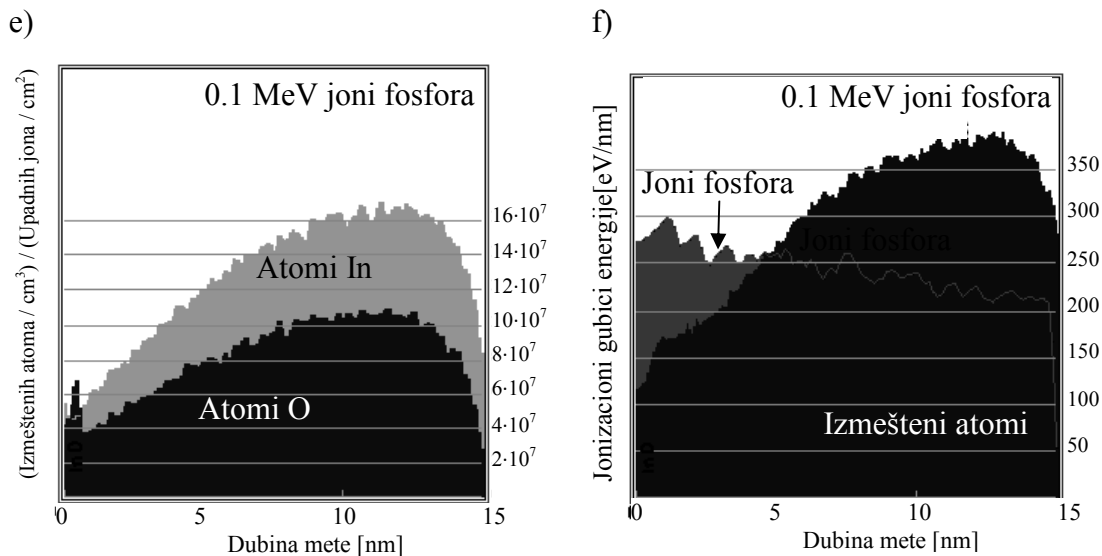


c)



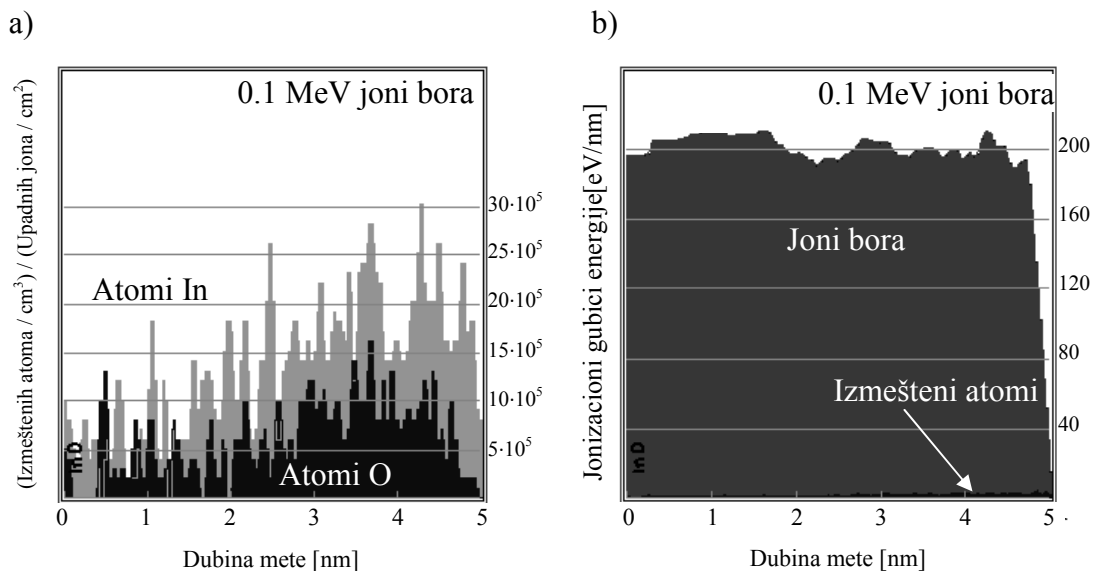
d)

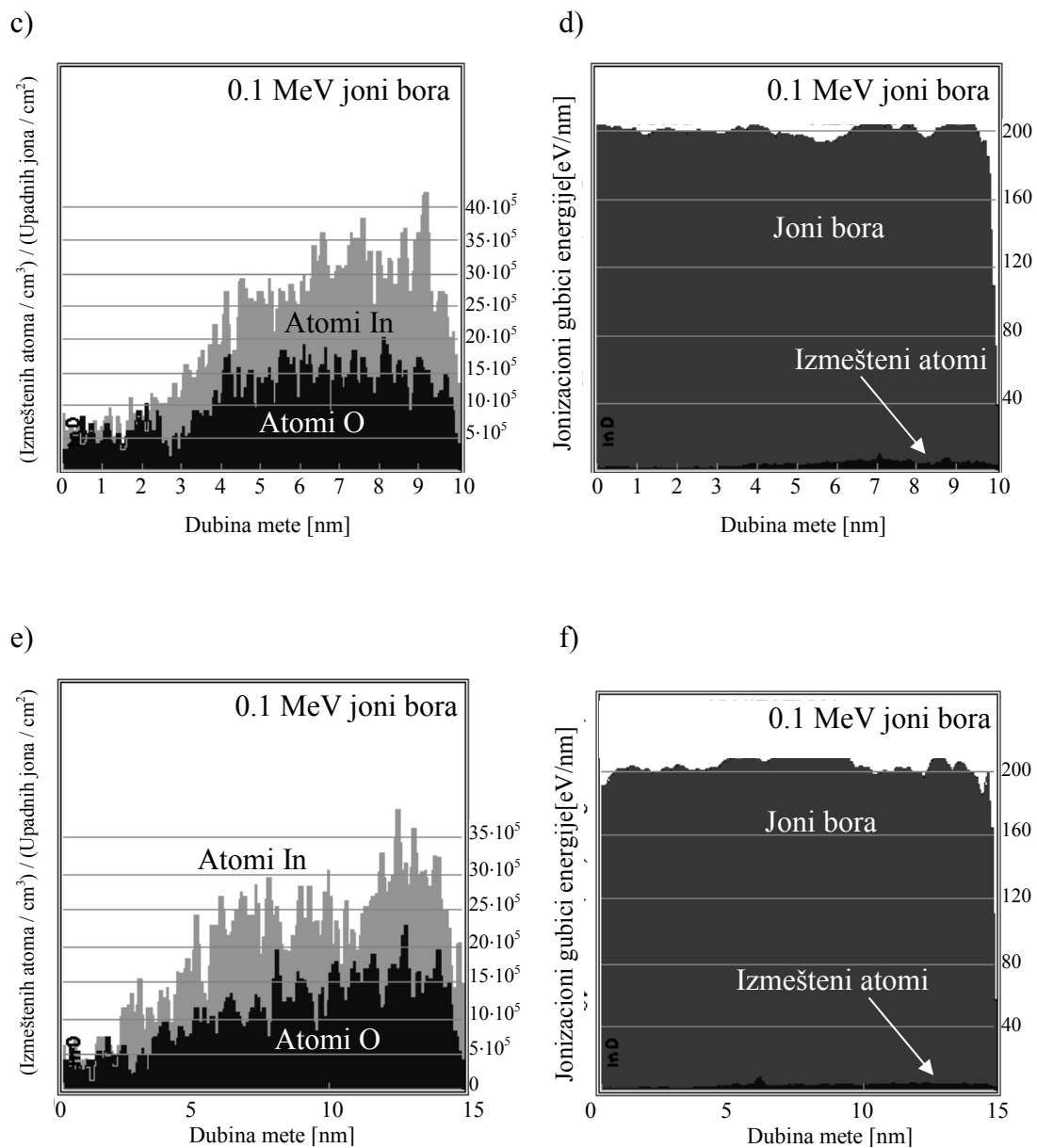




Slika 6.11. Raspodele za upadni snop od 10^3 jona fosfora od 0.1 MeV. Izmešteni atomi po jedinici jonskog fluensa i gubitak energije na jonizacije po dubini mete za različite debljine filмова InO:

5 nm (a i b), 10 nm (c i d) i 15 nm (e i f).

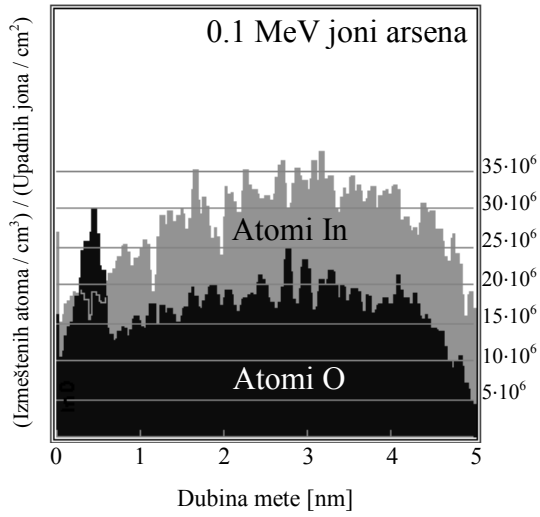




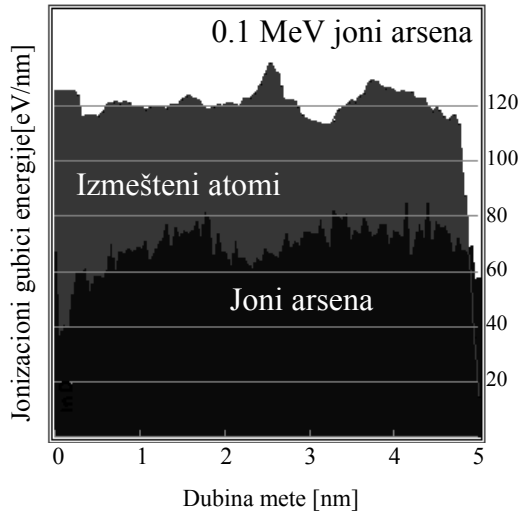
Slika 6.12. Raspodele za upadni snop od 10^3 jona bora od 0.1 MeV. Izmešteni atomi po jedinici jonskog fluensa i gubitak energije na jonizacije po dubini mete za različite debljine filmova InO:

5 nm (a i b), 10 nm (c i d) i 15 nm (e i f).

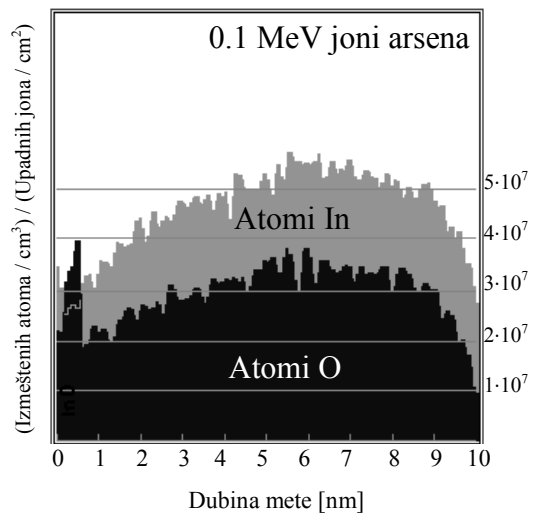
a)



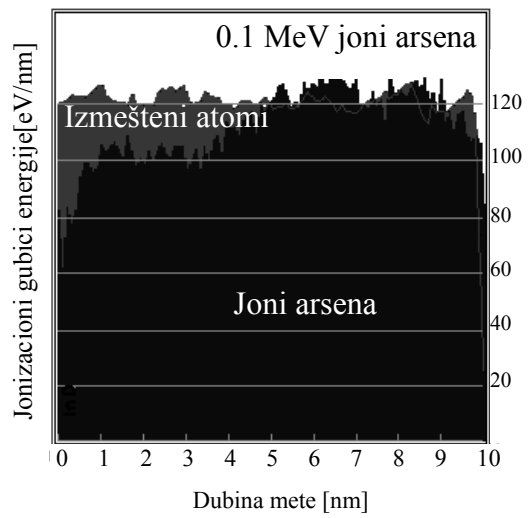
b)

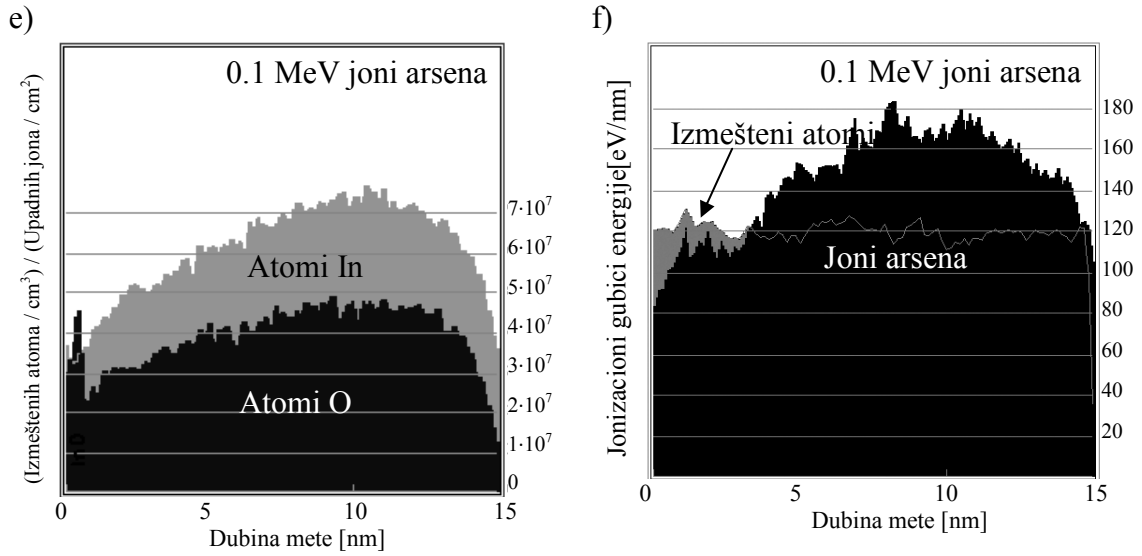


c)



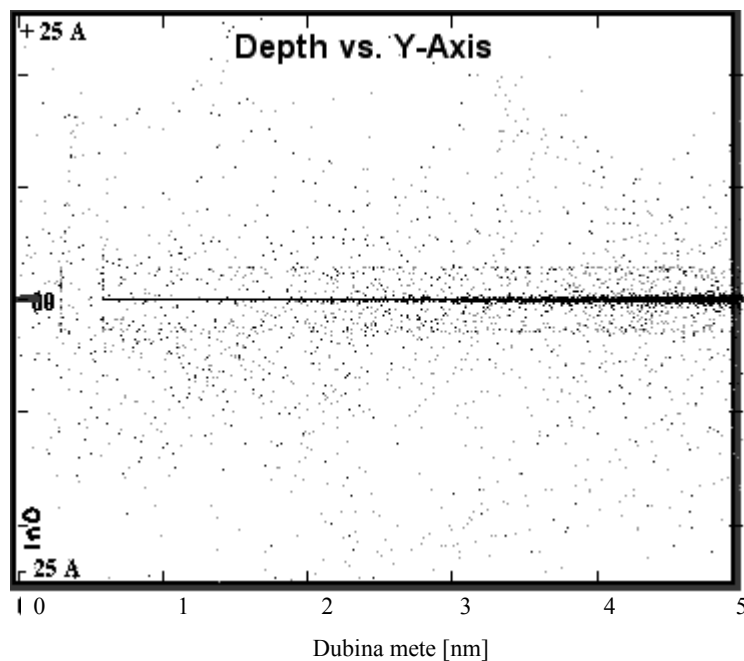
d)



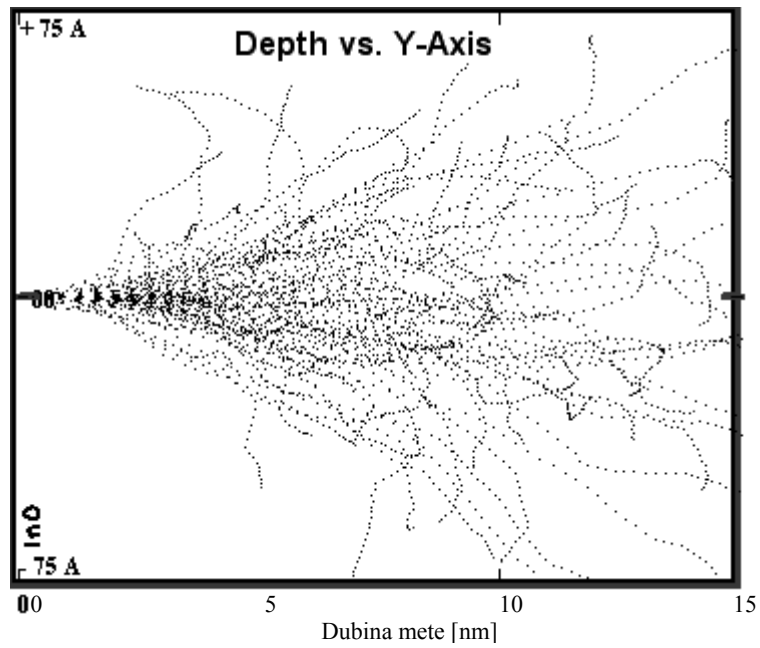


Slika 6.13. Raspodele za upadni snop od 10^3 jona arsena od 0.1 MeV. Izmešteni atomi po jedinici jonskog fluensa i gubitak energije na jonizacije po dubini mete za različite debljine filmova InO:

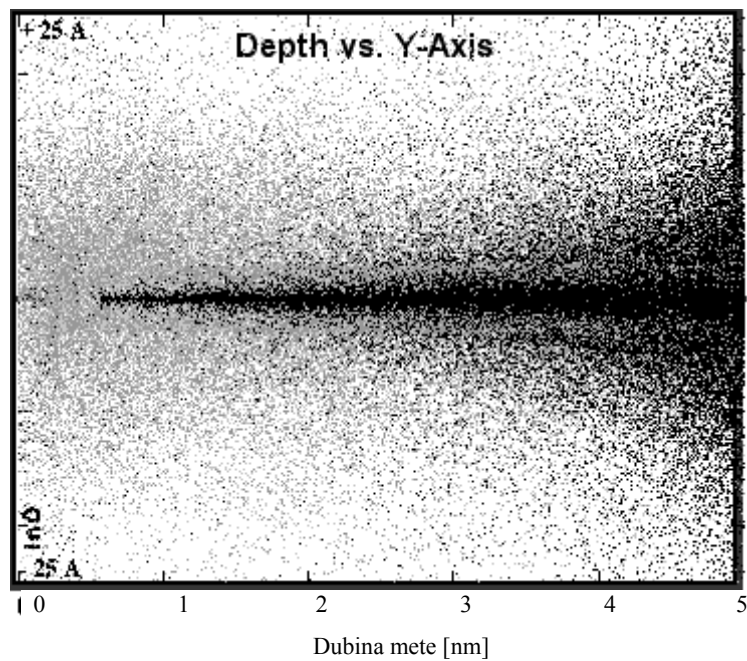
5 nm (a i b), 10 nm (c i d) i 15 nm (e i f).



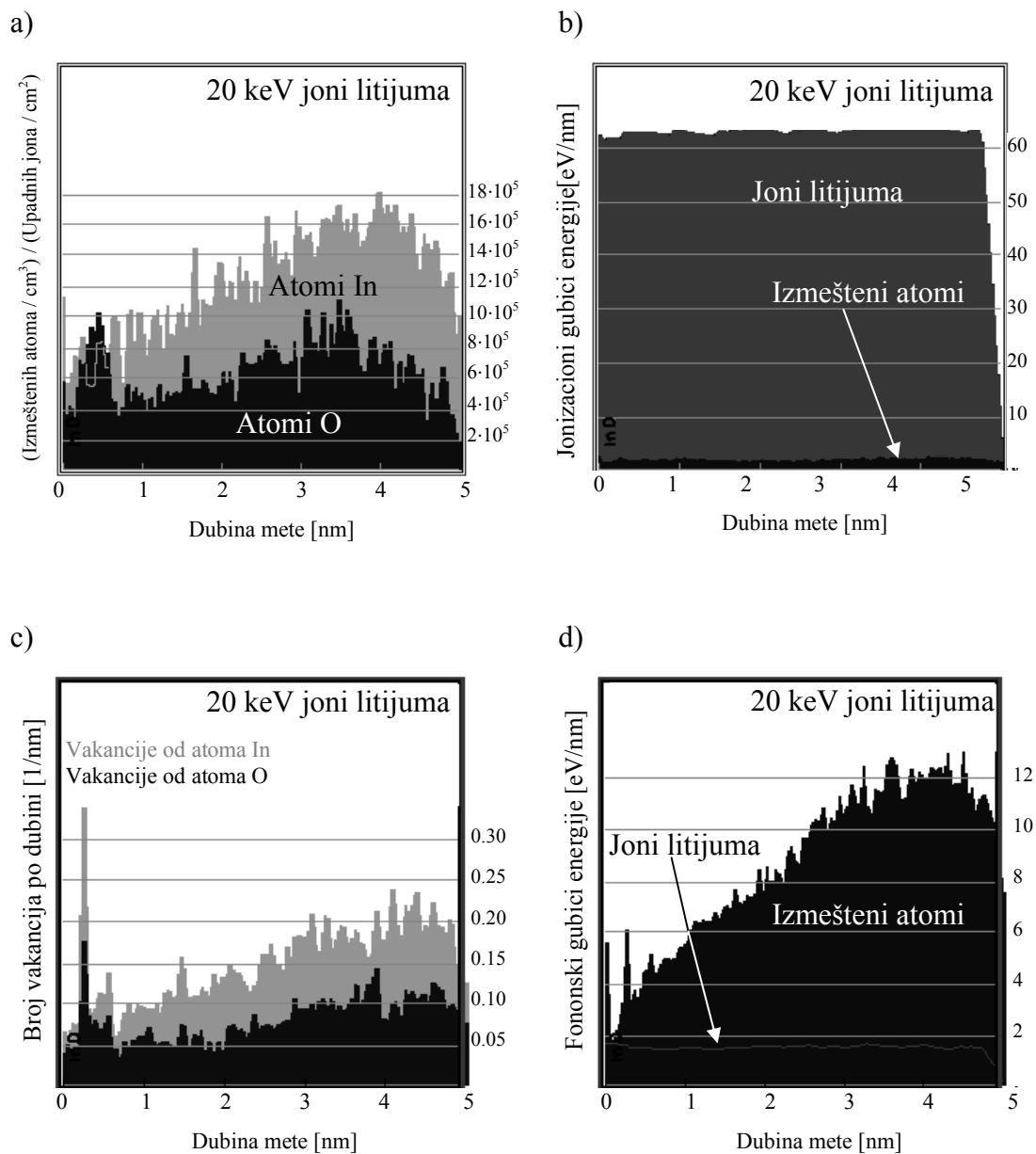
Slika 6.14. Trag upadnih čestica za snop od 10^4 alfa čestica od 1 MeV u InO filmu debljine 5 nm. Tamnije tačkice su tragovi protona, a svetlije tačkice jona izmeštenih atoma In i O.



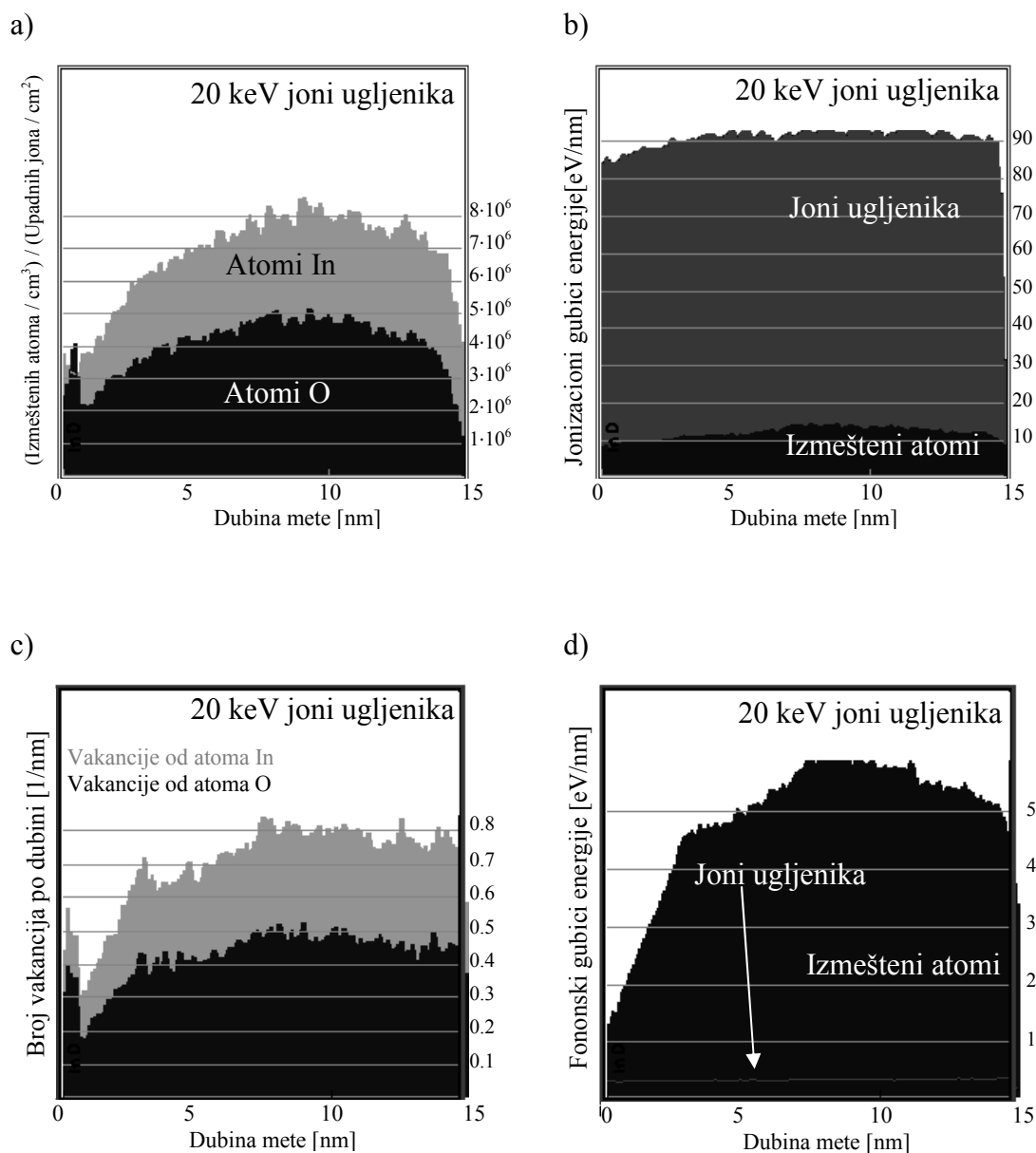
Slika 6.15. Trag upadnih čestica za snop od 100 jona olova od 10 keV u InO filmu debljine 15nm. Tamnije tačkice su tragovi jona olova, a svetlije tačkice jona izmeštenih atoma In i O.



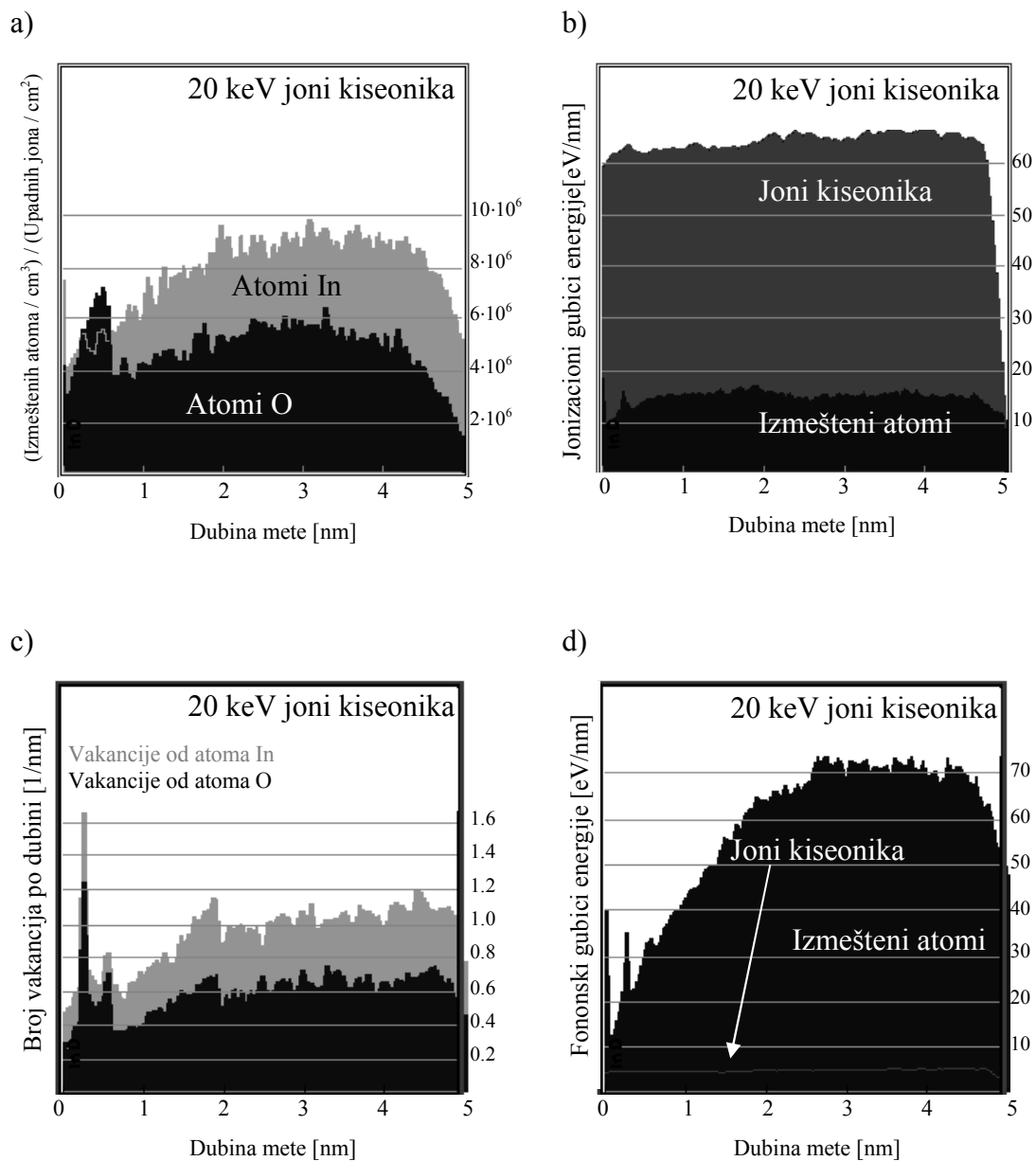
Slika 6.16. Trag upadnih čestica za snop od 10^5 protona od 10 keV u InO filmu debljine 5nm. Tamnije tačkice su tragovi jona olova, a svetlije tačkice jona izmeštenih atoma In i O.



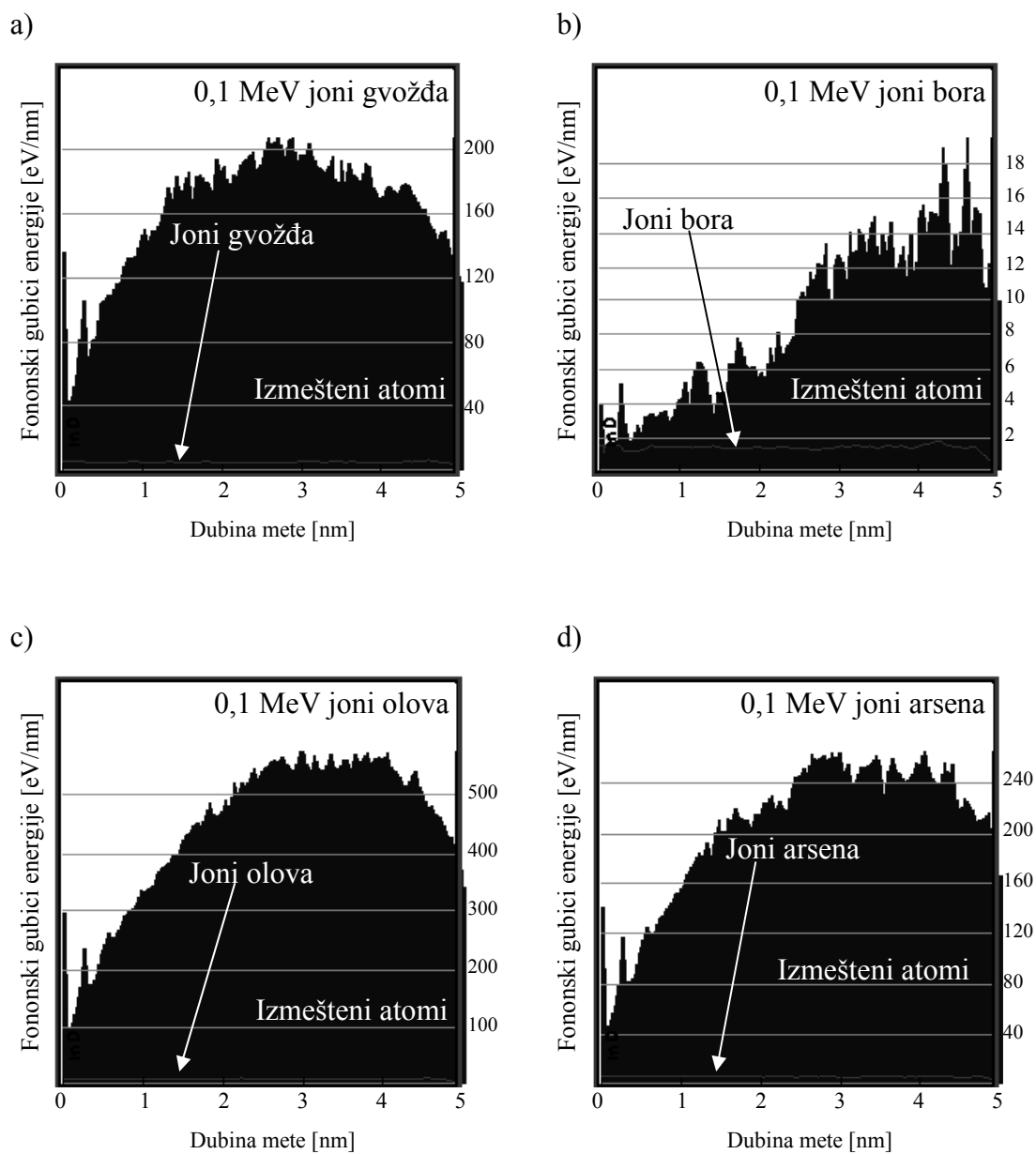
Slika 6.17. Raspodele za upadni snop od 10^4 jona litijuma od 20 keV u InO filmu debljine 5 nm: a) Izmešteni atomi In i O, b) Gubitak energije na jonizacije jona litijuma i izmeštenih atoma In i O, c) Vakancije nastale usled izmeštanja atoma In i O, d) Gubitak energije na fononske eksitacije jona litijuma i izmeštenih atoma In i O.



Slika 6.18. Raspodele za upadni snop od 10^4 jona ugljenika od 20 keV u InO filmu debljine 15 nm: a) Izmešteni atomi In i O, b) Gubitak energije na jonizacije jona ugljenika i atoma izmeštanja In i O, c) Vakancije nastale usled izmeštanja atoma In i O, d) Gubitak energije na fononske eksitacije jona ugljenika i izmeštenih atoma In i O.

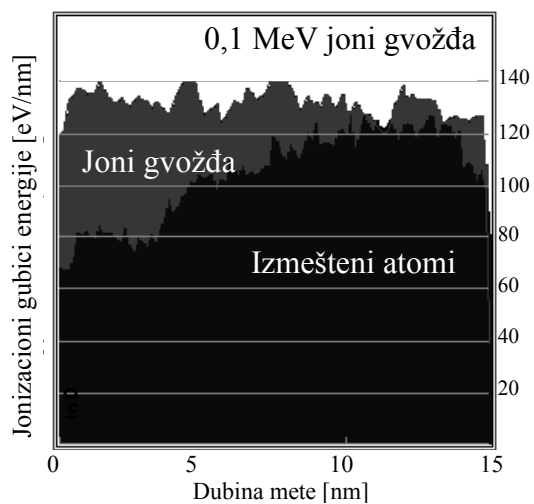


Slika 6.19. Raspodele za upadni snop od 10^4 jona kiseonika od 10 keV u InO filmu debljine 5 nm: a) Izmešteni atomi In i O, b) Gubitak energije na jonizacije jona kiseonika i atoma izmeštanja In i O, c) Vakancije nastale usled izmeštanja atoma In i O, d) Gubitak energije na fononske eksitacije jona kiseonika i izmeštenih atoma In i O.

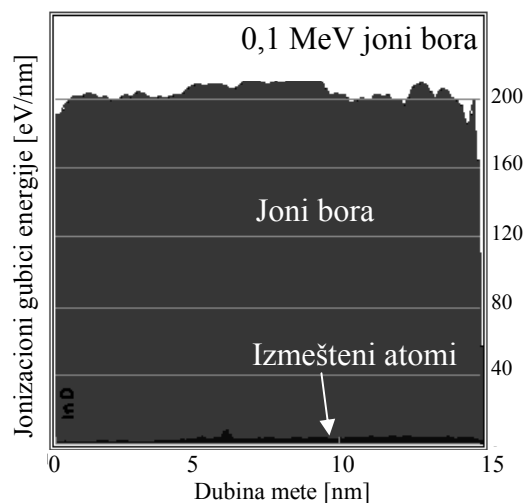


Slika 6.20. Gubitak energije na fononske eksitacije jona i izmeštenih atoma In i O u InO filmu debljine 5 nm ozračenim snopom od
a) 10^3 jona gvožđa od 0,1 MeV, b) 10^3 jona bora od 0,1 MeV,
c) 10^3 jona olova od 0,1 MeV, d) 10^3 jona arsena od 0,1 MeV.

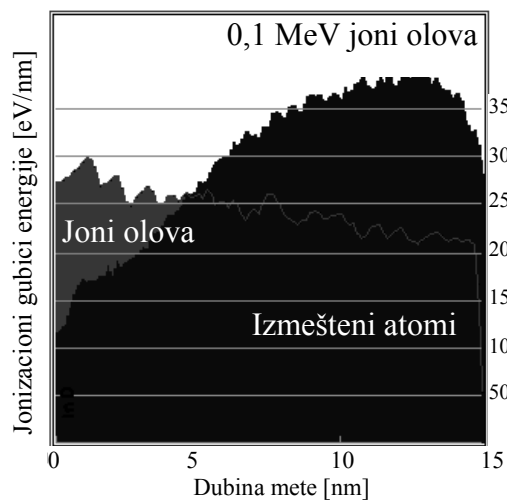
a)



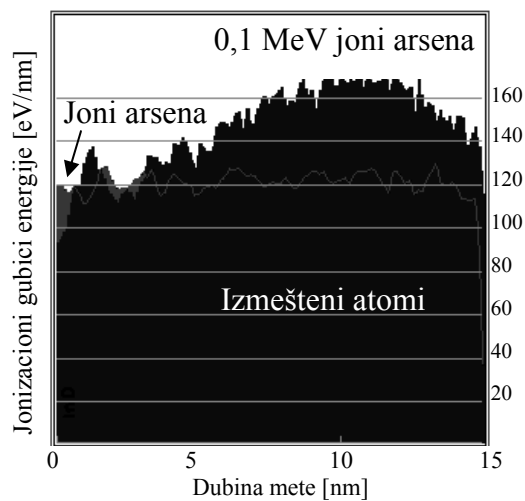
b)



c)



d)

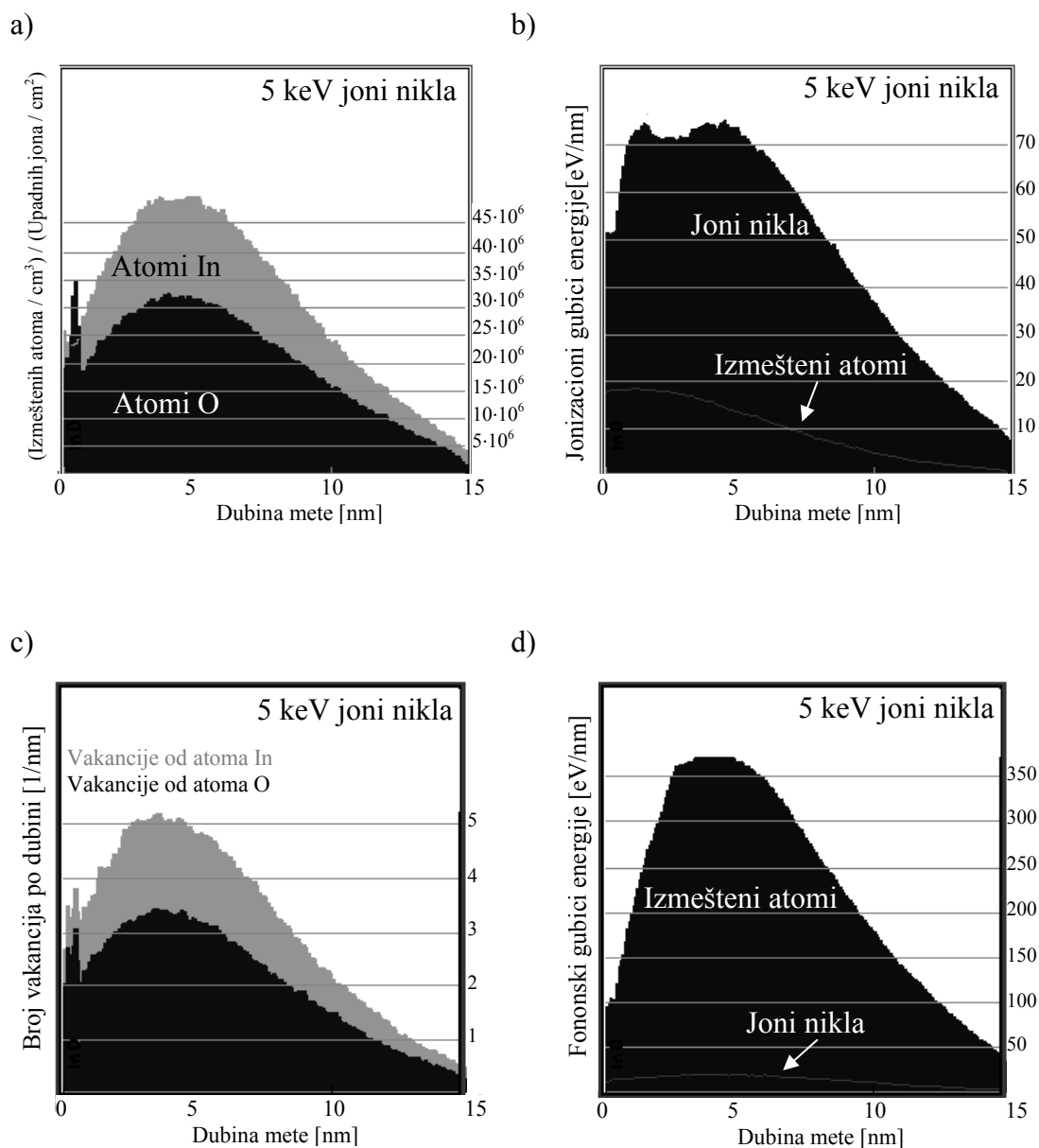


Slika 6.21. Gubitak energije na jonizacije jona i izmeštenih atoma In i O

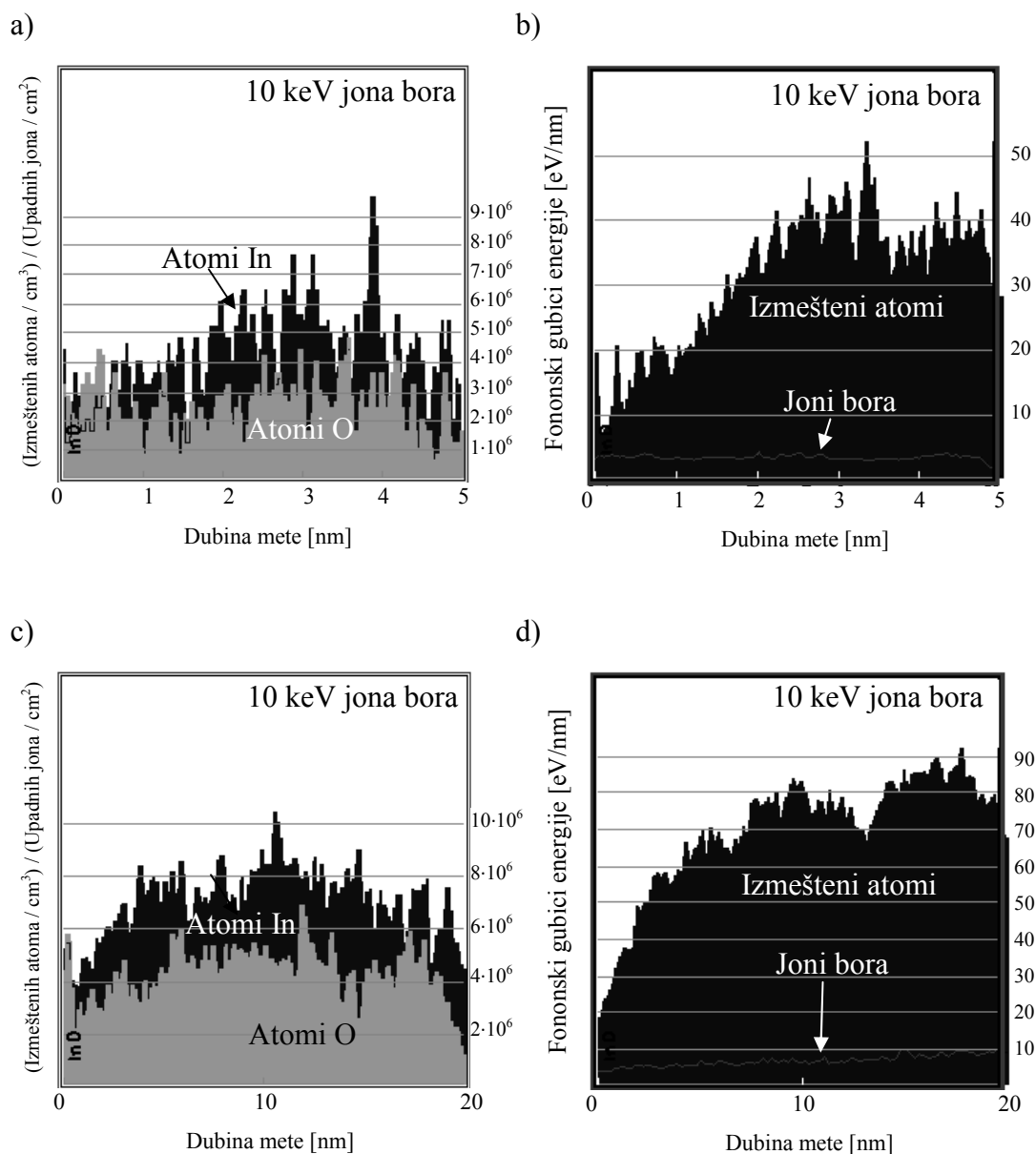
u InO filmu debljine 15 nm ozračenim snopom od:

a) 10^3 jona gvožđa od 0,1 MeV, b) 10^3 jona bora od 0,1 MeV,

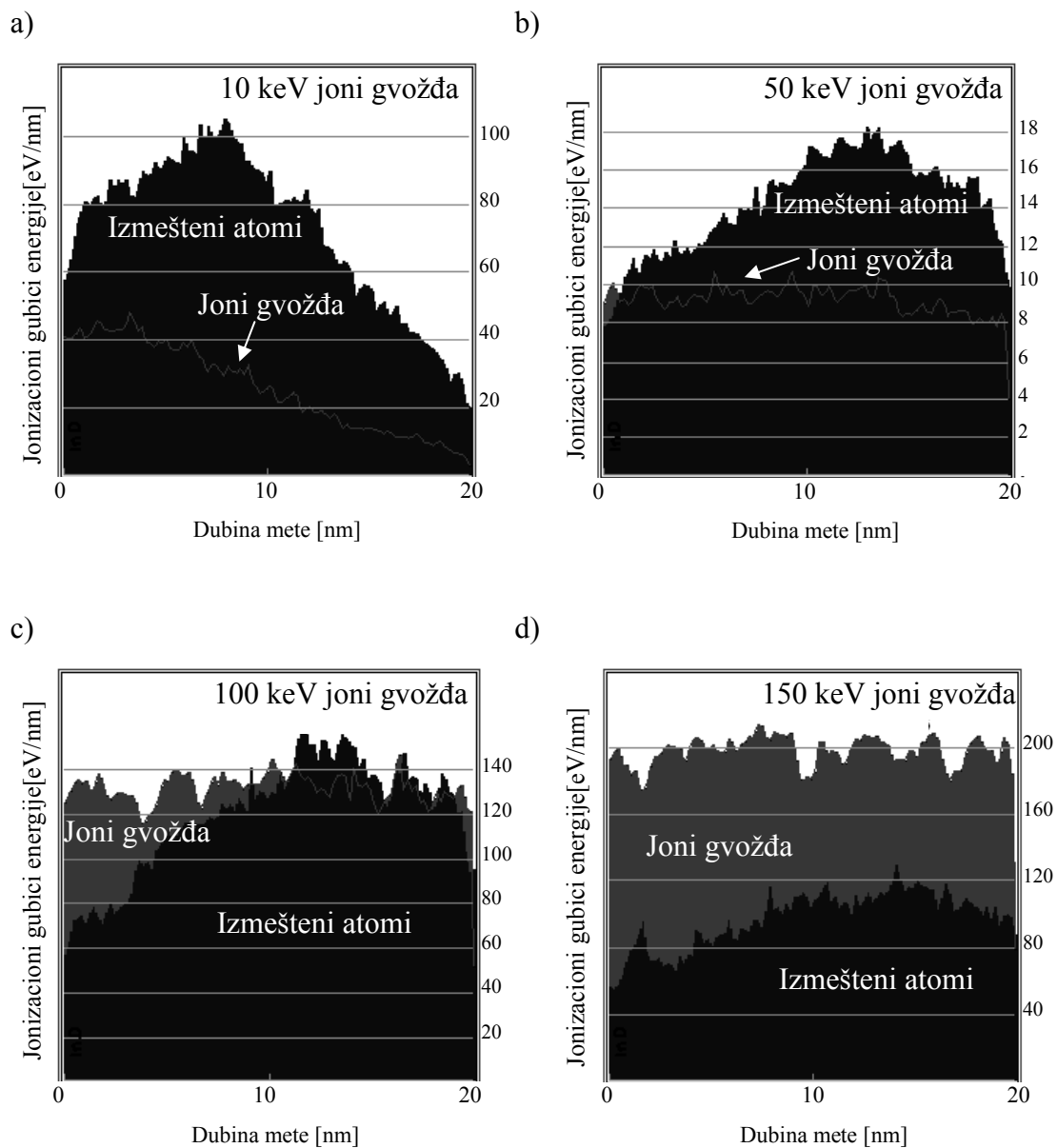
c) 10^3 jona olova od 0,1 MeV, d) 10^3 jona arsena od 0,1 MeV.



Slika 6.22. Raspodele za upadni snop od 10^4 jona nikla od 5 keV u InO filmu debljine 15 nm: a) Izmešteni atomi In i O, b) Gubitak energije na jonizacije jona nikla i atoma izmeštanja In i O, c) Vakancije nastale usled izmeštanja atoma In i O, d) Gubitak energije na fononske eksitacije jona nikla i atoma izmeštanja In i O.



Slika 6.23. Raspodele za upadni snop od 500 jona bora od 10 keV u InO filmu debljine: 5 nm: a) Izmešteni atomi In i O, b) Gubitak energije na fononske eksitacije jona bora i atoma izmeštanja In i O; 20 nm: c) Izmešteni atomi In i O, d) Gubitak energije na fononske eksitacije jona bora i atoma izmeštanja In i O.



Slika 6.24. Gubitak energije na jonizacije jona i izmeštenih atoma In i O u InO filmu debljine 20 nm ozračenim snopom od:

- a) 500 jona gvožđa od 10 keV, b) 500 jona gvožđa od 50 keV,
 c) 500 jona gvožđa od 100 keV, d) 500 jona gvožđa od 150 keV.

7. ANALIZA EFEKATA ZRAČENJA U FILMOVIMA INDIJUM OKSID

Na datim slikama prikazani su najrelevantniji rezultati dobijeni simulacijama prolaska teških jona kroz tanke filmove InO u stanju izolatora sa Kuperovim parovima. Prikazani su raspodela izmeštanja i vakancija atoma In i O za različite upadne jonske snopove, njihove fluense i energije, zatim raspodela jonizacionih gubitaka upadnih jona (koji su srazmerni raskidanju Kuperovih parova) i atoma In i O koji energiju primaju prilikom izmeštanja, kao i raspodela nejonizujućih gubitaka (fononske pobude i atomska izmeštanja) jona i atoma In i O. Takođe su dati prikazi tragova za neke upadne jone i izmeštene atome In i O simulirani u filmovima InO različite debljine.

Simulacija prolaska zračenja kroz filmove InO pokazuje da se za teže jone, na određenim energijama snopa, javlja znatan broj izmeštanja atoma indijuma i kiseonika. Ukoliko je veći fluens, odnosno broj jona u upadnom snopu, i broj izmeštanja je veći. Pored jona upadnog snopa, izmešteni atomi takođe učestvuju u narušavanju Kuperovih parova u superprovodnim ostrvima, što je kvantifikovano kroz gubitak energije ovih atoma na jonizacije.

Izmešteni atomi zauzimanjem intersticijalnih položaja obrazuju prostorno naelektrisanje u filmovima InO. Kako se iz rezultata simulacije može zaključiti da su izraženija izmeštanja atoma (tj. jona) indijuma, koji su pozitivnog naelektrisanja, sveukupan predznak prostornog naelektrisanja je pozitivan, što dovodi do pada energije naelektrisavanja E_c Džozefsonovih spojeva. Vrednost ove energija je od suštinskog značaja za opstanak izolatorskog stanja. Pad energije E_c ispod vrednosti $k_B T$ prouzrokuje promene kolektivne kulonovske barijere Δ_c , shodno jednačini (3.73), koje dovode do nestabilnosti stanja izolatora sa Kuperovim parovima. Iz ovoga sledi da radijacioni efekti izazvani jonskim snopom u filmovima InO mogu da dovedu film u obično metalno stanje. Efekti izmeštanja atoma dovode do trajnih oštećenja u InO filmovima.

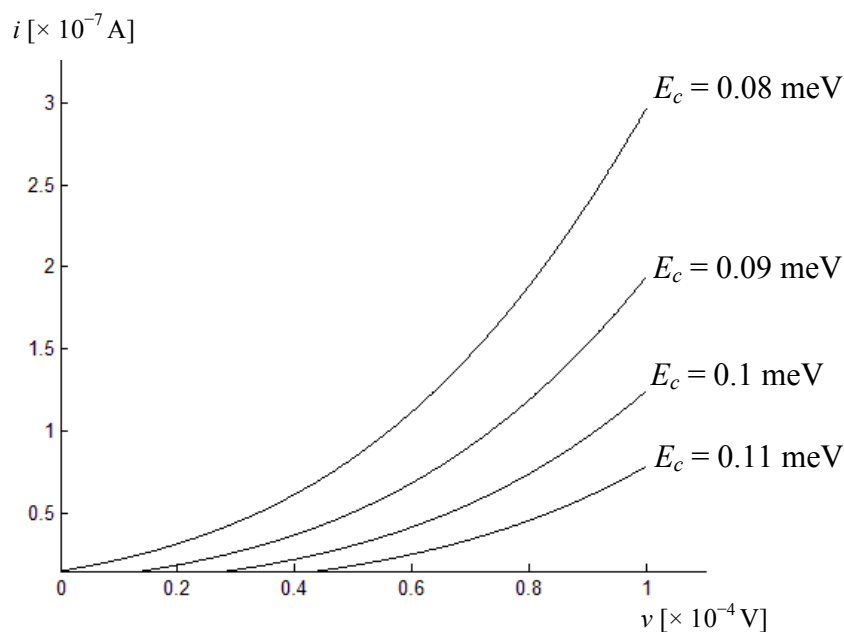
Usvajanjem jonizacionih gubitaka upadnih i izmeštenih jona za meru disocijacije Kuperovih parova, moguće je zaključiti da dejstvom zračenja na film indijum oksida dolazi do smanjenja koncentracije Kuperovih parova, što pri dovoljno velikoj apsorbovanoj dozi može da prouzrokuje nestanak ovog specifičnog izolatorskog stanja. Ukoliko ostali uslovi ostanu neizmenjeni, po prestanku izlaganja materijala zračenju

može da dođe do obnavljanja Kuperovih parova, tj. ponovnog uparivanja elektrona pobuđenih u jednoelektronska stanja. Disocijacija Kuperovih parova u lokalizovanim ostrvima je prolazan (tranzijentni) radijacioni efekat, koji dozvoljava mogućnost vraćanja filma InO u stanje izolatora sa Kuperovim parovima.

Rezultati numeričkih eksperimenata dodatno ukazuju da se deo energije upadnog zračenja pretvara u fonone, tj. vibracionu pobudu rešetke indijum oksida. Fononski energetske gubici upadnog zračenja povećavaju efektivnu temperaturu InO filma. Nakon što zračenje deponuje dovoljnu količinu energije u filmu, njegova temperatura može da postane veća od temperature praga za održavanje stanja izolatora sa Kuperovim parovima ($T > \Delta_c/k_B$) ili čak veća od kritične temperature za opstanak superprovodnog stanja ($T > \Delta/k_B$). Kao i u slučaju jonizacije, efekti prouzrokovani fononskim gubicima zračenja mogu da budu reverzibilni, pod uslovom da su po prestanku izlaganja film zračenju ostvareni svi ostali uslovi neophodni za uspostavljanje stanja izolatora sa Kuperovim parovima.

Kao što rezultati prikazani u poglavlju 6 pokazuju, gubici na jonizacije i izmeštanja atoma In i O postaju izraženiji sa porastom debljine filma. Jonizacioni gubici energije (tj. gubici na raskidanje Kuperovih parova) izraženiji su za atome In i O nego za upadne jone na energijama upadnog snopa nižim od 100 keV i za debljine filmova preko 15 nm. Sa povećanjem energije upadnih jona raste gubitak energije na jonizacije ovih čestica i postaje izraženiji u odnosu na jonizacione gubitke izmeštenih atoma In i O. Izmešteni atomi po pravilu daju veći doprinos fononskom pobuđivanju rešetke nego upadni joni.

Promena energije naelektrisanja E_c Džozefsonovih spojeva u 2D nizu, usled formiranja prostornog naelektrisanja izmeštenih jona, dovodi do promene strujno-naponske karakteristike za film InO (Slika 7.1). Krive strujno-naponske karakteristike na slici dobijene su prema izrazima (3.52) i (3.54) za četiri različite vrednosti E_c , debljinu filma $L = 15$ nm, $d = 1$ nm, $I_c = 10$ μ A i $T = 0,3$ K.[109]



Slika 7.1 Strujno-naponske karakteristike za film InO u stanju izolatora sa Kuperovim parovima, koje odgovaraju promeni energije naelektrisanja E_c prouzrokovanoj dejstvom zračenja. [109]

Značajan uticaj na radijacionu otpornost izolatora sa Kuperovim parovima pri njegovom izlaganju zračenju bi mogla imati podloga na kojoj je izrađen film InO, kao i slojevi koji bi ga okruživali u sklopu neke složenije mikro- ili nanoelektronske strukture. Rezultati simulacija iz poglavlja 6 pokazuju da osetljivost filmova u stanju izolatora sa Kuperovim parovima na uticaj zračenja generalno opada sa smanjenjem debljine filma, jer su tada svi uočeni efekti zračenja manje izraženi, pogotovo pri MeV-skim energijama upadnog zračenja.

Fononski gubici energije protona i alfa čestica manji su od fononskih gubitaka izmeštenih atoma. Dok je specifični gubitak energije protona i alfa čestica na fononske pobude rešetke približno konstantan po čitavoj dubini ozračenog filma, fononski gubici In i O ispoljavaju izražen pik fononskih gubitaka na strani filma dalje od površine izložene snopu. Ova pojava može se pripisati činjenici da protoni i alfa čestice pri sudarima sa atomima rešetke dovode do njihovog izmeštanja prevashodno "unapred", tj. u pravcu i smeru upadnog snopa.

Pri izlaganju filmova InO snopovima jona male i srednje mase, npr. bora (B) ideo jonizacionih gubitaka energije izmeštenih atoma u ukupnim gubicima ovog tipa je

zanemarljivo mali, nezavisno od debljine filma. Dominantan doprinos jonizacionim gubicima, a time i raskidanju Kuperovih parova daju upravo upadni joni bora.

Osim intersticijalnih atoma, na karakteristike InO u stanju izolatora sa Kuperovim parovima znatno utiče i koncentracija vakancija nastalih dejstvom zračenja. Kao što rezultati numeričkih eksperimenata pokazuju čak i pri veoma malim debljinama InO filmova koncentracija radijaciono generisanih vakancija može da bude znatna i zavisi od energije upadnog zračenja.

Posebno je zanimljivo u uočiti razliku radijacionih efekata u klasičnim izolatorima (dielektricima) i izolatorima sa Kuperovim parovima. Na osnovu već spomenute analogije između jonizacionih gubitaka u običnim izolatorima i energetske gubitke na disocijacije Kuperovih parova, moguće je zaključiti da dejstvom zračenja u dielektricima koncentracija kvazislobodnih nosilaca naelektrisanja (elektrona i šupljina) raste, dok kod izolatora sa Kuperovim parovima zračenje smanjuje koncentraciju osnovnih nosilaca naelektrisanja (Kuperovih parova). Zračenjem izazvano generisanje parova elektron-šupljina u klasičnim izolatorima menja njihovu specifičnu električnu otpornost i pri većim apsorbovanim dozama može da dovede do njihovog proboja. Raskidanje Kuperovih parova, s druge strane, ne utiče obavezno na otpornost filma InO sve dok stanje izolatora sa Kuperovim parovima nije narušeno nekim drugim mehanizmom radijacionog dejstva. Ova prividna neosetljivost filmova InO na energetske gubitke zračenja koji za rezultat imaju raskidanje elektronskih parova posledica je specifičnog mehanizma provođenja u ovim izolatorima. Za razliku od klasičnih izolatora, kretanje nosilaca naelektrisanja u izolatoru sa Kuperovim parovima ne može se opisati kao drift slobodnih naelektrisanja u električnom polju, niti kao kretanje naelektrisane čestice odgovarajuće efektivne mase u potencijalu određenom materijalnom sredinom, već u svojoj osnovi ima tunel efekat putem kog Kuperovi parovi dospevaju sa jednog superprovodnog ostrva na drugo.

8. ZAKLJUČAK

Sve veći trend ka minijaturizaciji elektronskih instrumenata, kao i povećan stepen elektromagnetne, odnosno nuklearne kontaminacije, dovodi u pitanje funkcionalnu stabilnost elektronskih sklopova najnovijih generacija. Ovo se posebno odnosi na komponente koje se nalaze u stanju razvoja i od čije primene se mnogo očekuje, pod uslovom njihove stabilnosti u elektromagnetnim/nuklearnim sredinama i/ili sredinama u kojima je uticaj primarnog i sekundarnog kosmičkog zračenja povišen. Tipičan primer su mezoskopski sistemi i materijalne strukture nanometarskih dimenzija, koje predstavljaju poseban izazov sa stanovišta analize radijacionih efekata. Zbog malih dimenzija, ove strukture su otporne na mnoge vrste zračenja i tek detaljnije istraživanje otkriva moguća radijaciona oštećenja. Fizičke i električne osobine tankih filmova savremenih materijala presudno zavise od čitavog niza parametara, od kojih su pojedini osetljivi na izlaganje samo određenim vrstama jonizujućeg zračenja odgovarajuće energije.

U radu je primenom Monte Carlo simulacije prolaska zračenja kroz filmove InO u stanju izolatora sa Kuperovim parovima analizirana promena u njima izazvana zračenjem. Ispitani su uslovi neophodni za opstajanje ovog specifičnog stanja, s obzirom na činjenicu da u interakcijama Kuperovih parova sa upadnim zračenjem i atomima uzmaklim unutar InO filmova, dolazi do narušavanja tog stanja. Osobine filmova InO u stanju izolatora sa Kuperovim parovima opisane su pomoću lokalizovanih parova u superprovodnim ostrvima i modelom dvodimenzionalnog niza Džozefsonovih spojeva. Simulacije su izvedene za više filmova InO različitih debljina, kao i za snopove zračenja različitih jona, energija i fluensa.

Prolazak zračenja kroz tanke filmove indijum oksida u stanju izolatora sa Kuperovim parovima pokazuje da se za određene energetske opsege, fluense i vrste jona u njima odigrava niz procesa sa znatnim uticajem na električne osobine. Izmeštanja u direktnim interakcijama sa upadnim zračenjem, ili u kaskadama koje slede, stvara se prostorno naelektrisanje unutar materijala. Ovo prostorno naelektrisanje se uglavnom javlja između superprovodnih ostrva u granularnoj strukturi. Ono utiče na energiju naelektrisavanja Džozefsonovih spojeva, a time i na kolektivnu kulonovsku barijeru niza, što dovodi do narušavanja stanja izolatora sa Kuperovim parovima. Ako u

ozračenom InO energija naelektrisavanja postane manja od energije sprege susednih superprovodnih ostrva, dolazi do narušavanja uslova za opstanak izolatorske faze i film InO iz stanja izolatora sa Kuperovim parovima prelazi u obično provodno stanje, bez aktivacionog mehanizma provođenja, što rezultuje promenom oblika strujno-naponske karakteristike.

Filmovi InO u stanju izolatora sa Kuperovim parovima nanometarskih debljina su generalno imuni na prolaz visokoenergetskog zračenje teških jona. Istraživanja u vezi sa radijacionom kompatibilnošću InO filmova u stanju izolatora sa Kuperovim parovima mogla bi ubuduće da budu usmerena ka razmatranju uticaja fotonskog zračenja na filmove u ovom specifičnom stanju, kao i ka razmatranju uticaja jonizujućeg zračenja na kompleksne strukture u čijem sastavu bi bili InO filmovi.

LITERATURA

- [1] S. Hoking, *Objašnjeni kosmos*, Narodna knjiga, Alfa, 2000.
- [2] R. K. Adair, *Concepts in physics*, Academic Press, New York, 1969.
- [3] D. Ivanović, *Kvantna mehanika*, Naučna knjiga, Beograd, 1974.
- [4] M. Tinkham, *Group theory and Quantum mechanics*, McGraw-Hill Book Company, USA, 1964.
- [5] R. Eisberg, R. Resnick, *Quantum Physics of Atom, Molecules, Solids, Nucleids and Particles*, John Wiley & Sons, New York, 1974.
- [6] P. Osmokrović, *Knjiga postanja ili teorija velikog praska*, Akademska misao, Beograd, 2013.
- [7] S. Glasstone, *Atomska energija*, Naučna knjiga, Beograd, 1960.
- [8] I. Supek, *Moderna fizika i struktura materije*, Tehnička knjiga, 1960.
- [9] R. Evans, *The Atomic Nucleus*, McGraw-Hill, New York, 1955.
- [10] K. Ford, *The World of Elementary Particles*, New York: Blaisdell, 1963.
- [11] R. D. Hill, *Tracking down particles*, W. A. Benjamin, 1963.
- [12] I. Bialynicki-Birula, Z. Bialynicka-Birula, *Quantum electrodynamics*, Pergamon Press Ltd and PWN- Polish Scientific Publishers, Warszawa, 1975.
- [13] R. Eisberg, R. Resnick, *Quantum Physics of Atom, Molecules, Solids, Nucleids and Particles*, John Wiley & Sons, New York, 1974.
- [14] R. H. Dicke, J.P. Witke, *Introduction to Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publ. Co., Reading, Mass., 1960.
- [15] E. Fermi, *Notes on Quantum Meechanics*, University of Chicago Press, Chicago, 1961.

- [16] W. Heisenberg, *The Physical Principles of the Quantum Theory*, Dover Publications, New York, 1930.
- [17] D. H. Frisch and A.M.Thorndike, *Elementary Particles*, D.Van Nostrand, 1964.
- [18] H. H. Heckman and P. W. Starring, *Nuclear Physics and the Fundamental Particles*, Holt, Rinehart and Winston, 1963.
- [19] D. L. Livesey, *Atomic and Nuclear Physics*, Blaisdell Publ. Co., 1966.
- [20] H. Frohlich, *Theory of dielectrics*, Clarendon Press, Oxford, 1986.
- [21] J. Gerhold, *Electrical insulation in superconducting power systems*, IEEE Trans. on Electrical Insulation, Vol. 8, 1992.
- [22] C. Kittel, *Uvod u fiziku čvrstog stanja*, Savremena administracija, Beograd, 1970.
- [23] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 7th ed., 1995.
- [24] P.Osmokrović, *Osnovi nuklearne fizike*, Akademska misao, 2008.
- [25] D. Raković, P. Osmokrović, N. Arsić, *Elektrotehnički materijali – zbirka zadataka*, Akademska Misao, Beograd, 2000.
- [26] P. Osmokrović, *Elektrotehnički materijali*, Akademska misao, Beograd, 2003.
- [27] D. Raković, *Elektrotehnički materijali*, Grosknjiga, Beograd, 1995.
- [28] D. Raković, *Fizičke osnove i karakteristike elektrotehničkih materijala*, Elektrotehnički fakultet, Beograd, 1995.
- [29] H. Korff, *Elektronska i nuklearna fizika*, Naučna knjiga, Beograd, 1948.
- [30] E.Y. Tsymbal, *PHYS927 Introduction to Solid state Physics*, <http://physics.unl.edu>.
- [31] Th. Schroeder, *Physics of Dielectrics and DRAM*, www.ihp-microelectronics.com
- [32] P. Nikolić, S. Stojiljković, *Magnetici i dielektrici*, Elektronski fakultet, Niš, 1982.

- [33] Jonscher, *Dielectric relaxation in solids*, Chelsea Dielectrics Press, London, 1983.
- [34] P. Nikolić, *Tehnologija elektrotehničkog materijala – II*, Elektrotehnički fakultet, Beograd, 1974.
- [35] P. Nikolić, D. Raković, P. Osmokrović, S. Vujatović, *Uputstva za vežbe iz elektrotehničkih materijala*, Elektrotehnički fakultet, Beograd, 1987.
- [36] S. L. Sondhi et al, *Continuous quantum phase transitions*, Rev. Mod. Phys. 69, 315–333, 1997.
- [37] E. L. Shangina and V. T. Dolgoplov, *Quantum phase transitions in two-dimensional systems*, Phys. Usp. 46, 777, 2003.
- [38] M. P. A. Fisher, *Quantum phase transitions in disordered two-dimensional superconductors*, Phys. Rev. Lett. 65, 923–926, 1990.
- [39] M. C. Chaet et al., *Universal conductivity of two-dimensional films at the superconductor-insulator transition*, Phys. Rev. B 44, 6883–6902 (1991).
- [40] A. F. Hebard and M. A. Paalanen, *Magnetic-field-tuned superconductor-insulator transition in two-dimensional films*, Phys. Rev. Lett. 65, 927–930 (1990).
- [41] A. Yazdani and A. Kapitulnik, *Superconducting-Insulating Transition in Two-Dimensional α -MoGe Thin Films*, Phys. Rev. Lett. 74, 3037–3040 (1995).
- [42] N. Markovic, C. Christiansen, and A. M. Goldman, *Thickness–Magnetic Field Phase Diagram at the Superconductor-Insulator Transition in 2D*, Phys. Rev. Lett. 81, 5217–5220 (1998).
- [43] E. Bielejec and W. Wu, *Field-Tuned Superconductor-Insulator Transition with and without Current Bias*, Phys. Rev. Lett. 88, 206802 (2002).
- [44] V. F. Gantmakher et al, *Observation of the Parallel-Magnetic-Field-Induced Superconductor–Insulator Transition in Thin Amorphous InO Films*, JETP Lett. 71, 160 (2000).
- [45] H. Kamerlingh Onnes, *Leiden Comm.*, 120b, 122b, 124c, 1911.

- [46] H. Kamerlingh-Onnes: *Reports and Comm.* 4. Int. Cryogenic Congress, London 1924.
- [47] W. Meissner and R. Oschenfeld, *Naturwissenschaften* 21, 787 (1933).
- [48] Ch. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 7th Ed., 1996.
- [49] R. A. Serway, C. J. Moses, C. A. Moyer, *Modern Physics*, Thomson Learning USA, 2005.
- [50] Paul Müller, Alexey V. Ustinov, *The Physics of Superconductors: Introduction to Fundamentals and Applications*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1997.
- [51] F. J. Blatt, *Modern Physics*, McGraw-Hill, New York, 1992.
- [52] S. Foner, et al, *Upper critical fields of high-temperature superconducting Nb_{1-y}(Al_{1-x}Gex)_y and Nb₃Al: Measurements of H_{c2} > 400 kG at 4.2°K*, *Physics Letters A*, 31, 349, 1970.
- [53] M. Tinkham, *Effect of Fluxoid Quantization on Transitions of Superconducting Films*, *Phys. Rev.* 129, 2413–2422 (1963).
- [54] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Microscopic Theory of Superconductivity*, *Phys. Rev.* 106, 162–164 (1957).
- [55] B. D. Josephson, *Possible new effects in superconductive tunneling*, *Phys. Lett*, 1, 251, 1962.
- [56] R. D. Parks, *Superconductivity*, vol. 1, New York, Dekker, 1969.
- [57] D. N. Langenberg, D. J. Scalapino, and B. N. Taylor, *The Josephson Effects*, *Sci. American*, May 1966.
- [58] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Philadelphia, Saunders College Publishing, 1975.
- [59] D. G. McDonald, *Superconducting Electronics*, *Physics Today*, 1981.
- [60] A. Gold, *Dielectric properties of a disordered Bose condensate*, *Phys. Rev.* A33, 652, 1986.

- [61] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinshtein, and D. S. Fisher, *Boson localization and the superfluid-insulator transition*, Phys. Rev. B 40, 546, 1989.
- [62] V. M. Loktev, R. M. Quick, and S. G. Sharapov, *Phase fluctuations and pseudogap phenomena*, Phys. Rep. 349, 1, 2001.
- [63] V. F. Gantmakher, *Localized superconducting pairs*, Fiz. Nizk. Temp. 37, 1, 71–83, 2011.
- [64] J.-J. Kim, J. Kim, and H. J. Lee, *Superconductivity effect on electrical conduction in insulating granular films*, Phys. Rev. B 46, 11709, 1992.
- [65] M. A. Paalanen, A. F. Hebard, and R. R. Ruel, *Low-temperature insulating phases of uniformly disordered two-dimensional superconductors*, Phys. Rev. Lett. 69, 1604, 1992.
- [66] V. F. Gantmakher, M. V. Golubkov, V. T. Dolgoplov, A. A. Shashkin, and G. E. Tsydynzhapov, *Observation of the Parallel-Magnetic-Field-Induced Superconductor–Insulator Transition in Thin Amorphous InO Films*, JETP Lett. 71, 473, 2000.
- [67] G. Sambandamurthy, L. W. Engel, A. Johansson, and D. Shahar, *Superconductivity-Related Insulating Behavior*, Phys. Rev. Lett. 92, 107005, 2004.
- [68] T. I. Baturina et al, *Localized Superconductivity in the Quantum-Critical Region of the Disorder-Driven Superconductor-Insulator Transition in TiN Thin Films*, Phys. Rev. Lett. 99, 257003 (2007).
- [69] D. Kowal and Z. Ovadyahu, *Scale dependent superconductor-insulator transition*, arXiv:0708.2751 (2007)
- [70] G. Sambandamurthy et al, *Experimental Evidence for a Collective Insulating State in Two-Dimensional Superconductors*, Phys. Rev. Lett. 94, 017003 (2005).
- [71] S. L. Sondhi et al, *Continuous quantum phase transitions*, Rev. Mod. Phys. 69, 315–333 (1997).

- [72] E. Chow and P. Delsing, *Length-Scale Dependence of the Superconductor-to-Insulator Quantum Phase Transition in One Dimension*, Phys. Rev. Lett. 81, 204–207 (1998).
- [73] Takaaki Kawaguchi, *Depinning mechanism and driven dynamics of vortices in disordered Josephson junction arrays*, Physica C: Superconductivity, 392–396, Part 1, Pages 364-368, 2003.
- [74] G.-L. Ingold and Yu. V. Nazarov in: *Single Charge Tunneling*, edited by H. Grabert and M.H. Devoret, NATO ASI Series B, Vol. 294, pp. 21–107 (Plenum Press, New York, 1992)
- [75] D. V. Averin et al, *Bloch oscillations in small Josephson junctions*, Sov. Phys. JETP 61, 407, 1985.
- [76] K. A. Matveev et al, *Parity-induced suppression of the Coulomb blockade of Josephson tunneling*, Phys. Rev. Lett. 70, 2940 (1993).
- [77] S. V. Lotkhovet al, *Cooper Pair Cotunneling in Single Charge Transistors with Dissipative Electromagnetic Environment*, Phys. Rev. Lett. 91, 197002 (2003).
- [78] I. S. Beloborodov et al. *Insulating state of granular superconductors in a strong-coupling regime*, Phys. Rev. B 74, 014502 (2006).
- [79] A. V. Lopatin and V. M. Vinokur, *Hopping transport in granular superconductors*, Phys. Rev. B 75, 092201, (2007).
- [80] P. Osmokrović, *Osnovi nuklearne fizike*, Akademska misao, 2008.
- [81] J.F. Ziegler, *The Stopping and Ranges of Ions in Matter*, Pergamon Press, New York, 1977.
- [82] F. Yang, J. H. Hamilton, *Modern Atomic and Nuclear Physics*, The McGraw-Hill Companies, Inc., New York, U.S.A., 1996.
- [83] R.D. Evans, *The Atomic Nucleus*, Krieger, New York, 1982.
- [84] G. F. Knoll, *Radiation Detection and Measurement*, 3rd Edition, John Wiley & Sons Inc., U.S.A., Third edition, 2000.

- [85] Povh et al., *Particles and Nuclei, An Introduction to the Physical Concepts*, 6th Ed., Springer, 2008
- [86] W. R. Leo, *Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments*, 2nd Revised Edition, Springer-Verlag New York, 1994.
- [87] W.E. Meyerhof, *Elements of Nuclear Physics*, McGraw-Hill, New York, 1967.
- [88] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, Wiley, New York, 1962.
- [89] W. E. Burcham, *Nuklearna fizika*, Naučna knjiga, Beograd, 1974.
- [90] S. Tavernier, *Experimental Techniques in Nuclear and Particle Physics*, Springer, 2010.
- [91] International Commission on Radiation Units and Measurements, *Fundamental quantities and units for ionizing radiation*, Report 60, Bethesda, Maryland, U.S.A. (1998)
- [92] J.R. Greening, *Fundamentals of radiation dosimetry*, Adam Hilger, Bristol, United Kingdom (1981).
- [93] C. Leroy, *Particle interaction and displacement damage in silicon devices operated in radiation environments*, Rep. Prog. Phys. 70, 2007
- [94] V. A. J. Van Lint, T. M. Flanagan, R. E. Leadon, V. C. Rogers, *Mechanisms of Radiation Effects in Electronic Materials*, New York, John Wiley & Sons, 1980.
- [95] R.J.M. Konings et al, *Comprehensive Nuclear Materials*, Elsevier, Netherlands, 2012.
- [96] K. E. Sickafus et al, *Radiation Effects in Solids*, Springer, 2007.
- [97] Ziegler J.F., Biersack J.P., and Littmark U., *The Stopping and Range of Ions in Solids*, Pergamon Press, New York, 1985.
- [98] TRIM version, J.F. Ziegler and J.P. Biersack; updated version of a computer code for calculating stopping and ranges,

- [99] Nastasi M., Mayer J.W., and Hirvonen J.K., *Ion-Solid Interactions: Fundamentals and Applications*, Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [100] G. H. Kinchin and R. S. Pease, *The Displacement of Atoms in Solids by Radiation*, Rep. Prog. Phys. 18 1, 1955.
- [101] M. J. Norgett, M. T. Robinson and I. M. Torrens, *A proposed method of calculating displacement dose rates*, Volume 33, Issue 1, August 1975, Pages 50-54.
- [102] A. Fasso et al, *Realistic Modeling of Radiation Induced Damage*, Nuclear Science and Technology, Vol. 2, pp.769-775, 2011.
- [103] I. Jun, M. A. Xapsos, and E. A. Burke, *Alpha particle nonionizing energy loss*, IEEE Trans. Nucl. Sci., pp. 3207–3210, Dec. 2004.
- [104] P. Bratley, B.L.Fox, L.E. Schrage, *A guide to Simulation*, Springer, New York, 1983.
- [105] I. M. Sobol', *Tchislenie metody Monte-Karlo*, Nauka, 1973.
- [106] L. L. Carter, E. D. Cashwell, *Particle-Transport Simulation with Monte Carlo Method*, US Energy Research and Development Administration, 1975.
- [107] J. E. Gentle, *Random number generation and Monte-Carlo methods*, Springer-Verlag, New York, 1998.
- [108] J. F. Ziegler, J. P. Biersack and M. D. Ziegler, *SRIM - The Stopping and Range of Ions in Matter*, Morrisville, NC: Lulu Press Co, 2008, pp. 1-398.
- [109] S. Milosavljevic, Dj. Lazarevic, K.a Stankovic, M. Pejovic, M. Vujisic, *Effects of Ion Beam Irradiation on Nanoscale InOx Cooper-Pair Insulators*, International Journal of Photoenergy, article ID 236823, 8 pages, Vol. 2013.

BIOGRAFIJA AUTORA

Dorđe (Rodoljub) Lazarević rođen je 16. 09. 1980. godine u Beogradu. Diplomirao je na Elektrotehničkom fakultetu u Beogradu, odseku za fizičku elektroniku, smer za medicinsku i nuklearnu tehniku, 21. 12. 2006. godine sa prosečnom ocenom 8,20, čime je stekao stručno zvanje diplomirani inženjer elektrotehnike. Upisao je doktorske studije školske 2007/08 godine na Elektrotehničkom fakultetu u Beogradu, Modul za nuklearnu, medicinsku i ekološku tehniku, mentor prof.dr Osmokrović Predrag.

Zaposlen je u INN «Vinča» od 2007.godine u Laboratoriji za zaštitu od zračenja i zaštitu životne sredine. Poslovi koje obavlja u Laboratoriji uglavnom se odnose na metrologiju i instrumentaciju u zaštiti od zračenja.

Učestvovao je na projektu osnovnih istraživanja finansiranom od Ministarstva nauke Republike Srbije: 141041 - "Zaštita od zračenja-fundamentalni teorijski i eksperimentalni aspekti", čiji je rukovodilac projekta dr Dragomir Davidović, naučni savetnik. U projektnom ciklusu 2011-2014 učestvuje sa punim opterećenjem na projektu ON171007 – Fizički i funkcionalni efekti interakcije zračenja sa elektrotehničkim i biološkim sistemima, čiji je rukovodilac dr Predrag Osmokrović, redovni profesor.

U svom dosadašnjem naučno-istraživačkom radu objavio je kao autor i koautor 18 naučnih, odnosno stručnih radova. Od toga je 6 radova u časopisima međunarodnog značaja (sa *SCI* liste), 2 rada na međunarodnim konferencijama, 1 rad u časopisima nacionalnog značaja i 9 radova na domaćim konferencijama.

Uža oblast interesovanja su ispitivanje efekata jonizujućeg zračenja sa elektronskim komponentama, merna nesigurnost kod kalibracije dozimetara za dijagnostičku radiologiju i terapiju, kao i zaštita od zračenja u medicini i industriji.

U Beogradu,

01.06.2013. godine

Prilog 1.

Izjava o autorstvu

Potpisani Đorđe Lazarević

broj indeksa 2007/5031

Izjavljujem

da je doktorska disertacija pod naslovom

Radijaciona otpornost filmova indijum oksida u stanju izolatora sa Kuperovim parovima

- rezultat sopstvenog istraživačkog rada,
- da predložena disertacija u celini ni u delovima nije bila predložena za dobijanje bilo koje diplome prema studijskim programima drugih visokoškolskih ustanova,
- da su rezultati korektno navedeni i
- da nisam kršio autorska prava i koristio intelektualnu svojinu drugih lica.

Potpis doktoranda

U Beogradu, 01.06.2013. godine

Đorđe Lazarević

Prilog 2.

Izjava o istovetnosti štampane i elektronske verzije doktorskog rada

Ime i prezime autora Đorđe Lazarević

Broj indeksa 2007/5031

Studijski program Elektrotehnika i računarstvo, Modul za nuklearnu, medicinsku i ekološku tehniku

Naslov rada Radijaciona otpornost filmova indijum oksida u stanju izolatora sa Kuperovim parovima

Mentor dr Predrag Osmokrović, redovni profesor Elektrotehničkog fakulteta Univerziteta u Beogradu

Potpisani/a Đorđe Lazarević

Izjavljujem da je štampana verzija mog doktorskog rada istovetna elektronskoj verziji koju sam predao/la za objavljivanje na portalu **Digitalnog repozitorijuma Univerziteta u Beogradu**.

Dozvoljavam da se objave moji lični podaci vezani za dobijanje akademskog zvanja doktora nauka, kao što su ime i prezime, godina i mesto rođenja i datum odbrane rada.

Ovi lični podaci mogu se objaviti na mrežnim stranicama digitalne biblioteke, u elektronskom katalogu i u publikacijama Univerziteta u Beogradu.

Potpis doktoranda

U Beogradu, 01.06.2013. godine



Prilog 3.

Izjava o korišćenju

Ovlašćujem Univerzitetsku biblioteku „Svetozar Marković“ da u Digitalni repozitorijum Univerziteta u Beogradu unese moju doktorsku disertaciju pod naslovom:

Radijaciona otpornost filmova indijum oksida u stanju izolatora sa Kuperovim parovima

koja je moje autorsko delo.

Disertaciju sa svim prilogima predao/la sam u elektronskom formatu pogodnom za trajno arhiviranje.

Moju doktorsku disertaciju pohranjenu u Digitalni repozitorijum Univerziteta u Beogradu mogu da koriste svi koji poštuju odredbe sadržane u odabranom tipu licence Kreativne zajednice (Creative Commons) za koju sam se odlučio/la.

1. Autorstvo

2. Autorstvo - nekomercijalno

3. Autorstvo – nekomercijalno – bez prerade

4. Autorstvo – nekomercijalno – deliti pod istim uslovima

5. Autorstvo – bez prerade

6. Autorstvo – deliti pod istim uslovima

Potpis doktoranda

U Beogradu, 01.06.2013. godine

