

Analiza interakcije jona ArVIII, KrVIII i XeVIII sa površinom primenom Matlab-a, Origin-a i Corel draw-a

Milena D. Majkić

Dvanaesta beogradska gimnazija
Beograd, Srbija

dimitrije.majkic@open.telekom.rs

Nataša N. Nedeljković

Univerzitet u Beogradu, Fizički fakultet
Beograd, Srbija

hekata@ff.bg.ac.rs

Dimitrije P. Majkić

Visoka škola elektrotehnike i računarstva
Beograd, Srbija

dimitrije.majkic@open.telekom.rs

Sadržaj— U ovom radu je razmatrana interakcija jona ArVIII, KrVIII i XeVIII sa provodnom površinom (aluminijumom) u cilju ispitivanja njenih energetskih karakteristika. Korišćen je kvantni model dvostanja u okviru kog su dobijene populaciona i neutralizaciona verovatnoća, kao i rastojanja na kojima je proces zahvata elektrona iz površine metala u određeno kvantno stanje jona najverovatniji. Pokazano je da na populacioni proces utiče polarizacija jonskog ostatka. Rezultati su obrađeni primenom MATLAB-a, Origin-a i Corel DRAW-a. Razmatranja koja su ovde izložena mogu se iskoristiti u cilju ispitivanja energetske efikasnosti solarnih ćelija. Naime, aktuelna istraživanja na ovom polju odnose se na izradu metalnih nanoantena koje se nanose na solarne panele čineći ih efikasnijim.

Ključne reči: interakcija jona; provodna površina; kvantni model dvostanja; polarizacioni efekat; nanoantene; solarni paneli.

I. UVOD

Interakcija naelektrisanih jona sa površinom čvrstog tela je razmatrana kako teorijski tako i eksperimentalno. Pri interakciji jona sa površinom obrazuje se složen kvantni sistem u kome dominiraju procesi razmene naelektrisanja između jona i površine.

Korišćeni su razni modeli za opisivanje procesa neutralizacije. Jedan od modela je i kvantni model dvostanja [1] koji je i primenjen u ovom radu. Glavni rezultati dobijeni primenom modela dvostanja su rastojanja na kojima je proces uglavnom lokalizovan. Proučavanje ovakvih fundamentalnih fizičkih procesa je od značaja za razmatranje i analizu energetskih karakteristika materijala.

Naime, proces se dešava na rastojanjima reda atomskih jedinica (rezultati dobijeni u okviru modela dvostanja), što nam govori da je lokalizacija procesa na samoj površini metala. Neutralizacijom jona smanjuje se koncentracija jona u blizini površine a samim tim i toplotna provodljivost gasova.

Posledica neutralizacije je lokalno zagrevanje materijala, odnosno površine, što bi u kombinaciji sa talasima iz šireg spectra sunčeve svetlosti poboljšalo efikasnost solarnih ćelija. Naime, aktuelna istraživanja na polju solarne energije [2] odnose se na proučavanje poboljšanja efikasnosti solarnih ćelija nanošenjem metalnih nanoantena.

Kada govorimo o interakciji jona sa površinom, u okviru modela dvostanja, uzimamo u obzir da se aktivni elektron (koji vrši prelaz) u početnom trenutku nalazio u površini, a u finalnom trenutku u određenom kvantnom stanju jona. Rastojanje na kom dolazi do zahvata elektrona je određeno najvećom verovatnoćom populacije na osnovu koje se određuju neutralizaciona rastojanja. U radu je pokazano da verovatnoća populacije zavisi od vrste jona, naelektrisanja jona kao i brzine kojom se kreće jon.

Verovatnoća populacije energetskih nivoa je dobijena u okviru modela dvostanja, kao i neutralizaciona rastojanja. Korišćeni su MATLAB i Origin za prikaz dobijenih rezultata. Corel Draw je primenjen da bi se kvalitet grafika poboljšao. .

II. POLARIZACIONI EFEKAT

U ovom radu razmatramo neutralizaciju jona ArVIII, KrVIII i XeVIII koji padaju na provodnu površinu pod malim uglom [3], o čemu govori i mala vrednost normalne komponente brzine.

Za opisivanje neutralizacionog procesa koristimo kvantni model dvostanja. U okviru ovog modela aktivni elektron je u početnom trenutku bio u površini odakle se zahvata u određeno kvantno stanje jona (projektila). Na ponašanje jona utiču kako polarizovana površina tako i polarizovan jonski ostatak, što se

opisuje odgovarajućim potencijalima. U metalu je potencijalna energija elektrona predstavljena površinskim potencijalom koji se može predstaviti zbirom potencijala lika elektrona i lika jonskog ostatka. Uticaj jonskog ostatka na elektron je opisan efektivnom potencijalnom energijom aktivnog elektrona u polju polarizovanog jonskog ostatka.

Fizičke veličine kojima, u okviru modela dvostanja, opisujemo intermedijalne etape neutralizacionog procesa u upadnoj geometriji su neutralizaciona i populaciona verovatnoća [3]. Neutralizaciona verovatnoća govori o čistoj neutralizaciji jona, tj. da je povratak elektrona u metal zabranjen. Populaciona verovatnoća je definisana pod populacionim/rejonizacionim uslovima, tj. moguć je proces rejonizacije. Populisanost određenih kvantnih stanja jona na datom rastojanju R diktirana je kako procesom neutralizacije tako i rejonizacionim procesom.

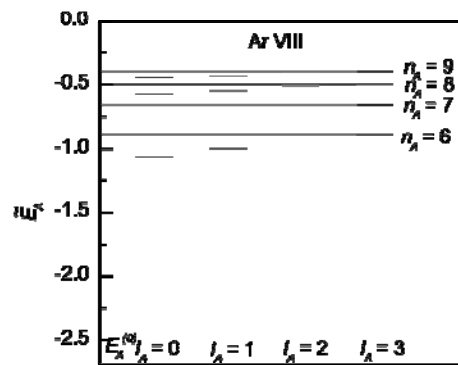
Cilj ovog rada je da se pokaže zaavisnost populacione verovatnoće I neutralizacionih rastojanja od naelektrisanja jonskog ostatka i paralelne komponente brzine projektila. Naime, joni Ar, Kr i Xe imaju isto naelektrisanje jonskog ostatka ($Z = 8$) ali različitu populacionu dinamiku. Polarizacioni efekat [4] je u model uključen preko odgovarajućeg efektivnog potencijala. Znajući eksperimentalne vrednosti energijskih parametara ovih jona (tabela I u [2]), moguće je, primenom Origin-a, grafički prikazati njihov energijski spektar. Eksperimentalne energije jona su sa energijskim parametrima povezane sledećom relacijom:

$$\tilde{E}_A = -\frac{\tilde{\gamma}_A^2}{2} \quad (1)$$

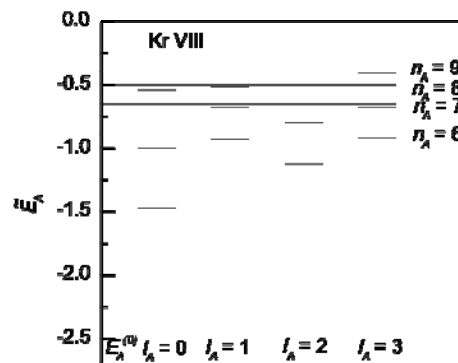
Vrednosti enrgijskih parametara iz tabele I [2] se unose u MATLAB i korišćenjem formule (1), dobijaju se vrednosti energija jona ArVIII, KrVIII i XeVIII (sa uračunatim polarizacionim efektom). Dobijene vrednosti se iz MatLAB-a eksportuju u Origin koji daje energijski spektar datih jona, za male vrednosti orbitalnog kvantnog broja $l_A=0,1,2$ i 3

Na Sl.1,2 i 3 je prikazan spektar jona ArVIII, KrVIII i XeVIII, tj. moguće energije aktivnog elektrona u polju polarizovanog jonskog ostatka sa naelektrisanjem $Z = 8$. Sa grafika se može primetiti da su energetske nivoe $\tilde{E}_A$ razmatranih jona pomereni ispod energetskih nivoe koji odgovaraju energijama jona određenih u aproksimaciji tačkastog jonskog ostatka (pune linije).

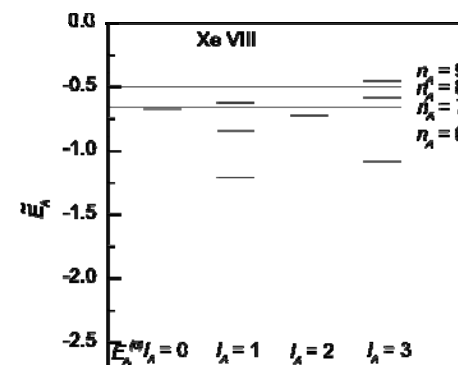
Sa Sl.1 se može videti da je polarizacioni efekat najizraženiji za jon XeVIII., a najslabiji za jon ArVIII.



Slika 1. Energetski spektar jona ArVIII



Slika 2. Energetski spektar jona KrVIII



Slika 3. Energetski spektar jona XeVIII

III. POPULACIONA VEROVATNOĆA

U prethodnim radovima, u kojima je razmatrana odlazeća geometrija jona, pokazano je [1] da na neutralizacioni proces utiče polarizacija jonskog ostatka. Ovde će biti pokazano da i u slučaju upadne geometrije polarizacioni efekat ima značajan uticaj na populacionu verovatnoću. Naime, sa povećanjem polarizacije jonskog ostatka raste vrednost maksimuma populacione verovatnoće, što dalje dovodi do pomeranja populacionog procesa ka površini.

Primenom modela dvostanja dobijaju se izrazi za populacionu i neutralizacionu verovatnoću [5].

$$\Gamma_{\nu_A}(t) = \frac{dT_{\nu_A}(t)}{dt} \quad (2)$$

Formulom (2) je određena, u okviru modela dvostanja, verovatnoća prelaza po jedinici vremena (rata). Sa ν_A je određeno kvantno stanje jona u kom će se elektron naći u finalnom trenutku. Ovako definisana rata omogućava da se dobije verovatnoća $P_{\nu_A}(t)$ da je u trenutku $t < t_{fin}$ electron vezan za jon [5]. Koristeći balans verovatnoća:

dobijamo

$$\frac{dP_{\nu_A}(t)}{dt} = \Gamma_{\nu_A}(t) [1 - P_{\nu_A}(t)] \quad (3)$$

$$P_{\nu_A}(t) = 1 - \exp[-T_{\nu_A}(t)] \quad (4)$$

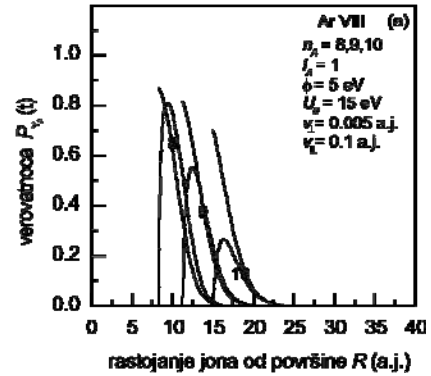
Unošenjem formule (7) za intermedijalnu verovatnoću prelaza iz [4] kao i formule (4) u MATLAB, dobijaju se vrednosti verovatnoće P_{ν_A} . Kao parametri pri crtanju grafika su unete vrednosti glavnog kvantnog broja, orbitalnog kvantnog broja, karakteristike površine – vrednost izlaznog rada (5 eV) i vrednost dna provodne zone (15 eV), kao i vrednosti paralelne i normalne komponente brzine projektila, redom 0.1 a.j. i 0.005 a.j.. Dobijene vrednosti za populacionu i neutralizacionu verovatnoću sa datim parametrima su iz Matlab unete u Origin, odakle se dobija grafički prikaz rezultata. Za kvalitetniji izgled grafika iskorišćen je Corel.

Na Sl. 4 je prikazana zavisnost verovatnoće populacije od rastojanja jona od površine za slučaj jona ArVIII sa uključenim polarizacionim efektom i u aproksimaciji tačkastog jona.

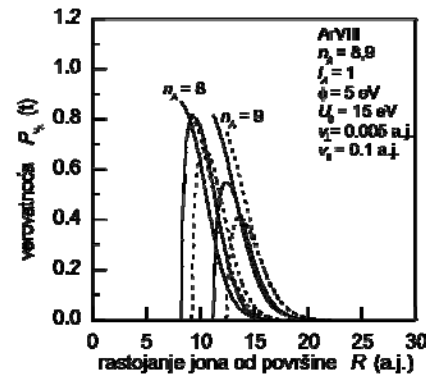
Na Sl. 5, 6 i 7, razmatramo populaciju jona ArVIII, KrVIII i XeVIII, redom. Do ove populacije dolazi tokom upada jona Ar^{8+} , Kr^{8+} i Xe^{8+} naelektrisanja jonskog ostatka $Z = 8$ pod malim uglom na površinu. Razmatrani joni zahvataju po jedan elektron na određenom rastojanju jona od površine koje se naziva neutralizaciono rastojanje. Za ovaj proces bitno je još naglasiti i karakteristike površine (izlazni rad je 5eV), kao i brzinu projektila. Normalna i paralelna komponenta brzine su, redom, 0,005 a.j. i 0,1 a.j.. Ukoliko ne bismo uzeli u obzir polarizaciju jonskog ostatka, (aproksimacija tačkastog jonskog ostatka), sve krive verovatnoće bile bi iste za sve jone.

Sa Sl. 4. se vidi da polarizacioni efekat za jon ArVIII ima mali uticaj na populacionu verovatnoću. Polarizacioni efekat pomera maksimume populacionih verovatnoća ka manjim rastojanjima jona od površine a u isto vreme povećava njene maksimalne vrednosti. Analizom grafika na Sl. 4 i Sl. 5,6,7, može se videti da polarizacioni efekat koji raste kako idemo od jona Ar ka Xe, igra važnu ulogu u populaciji kvantnih stanja.

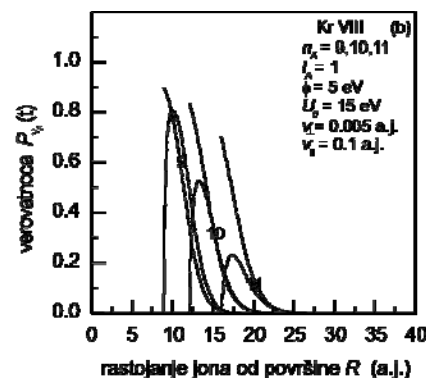
Polarizacija jonskog ostatka u odnosu na aproksimaciju tačkastog jona pomera verovatnoće ka manjim rastojanjima.



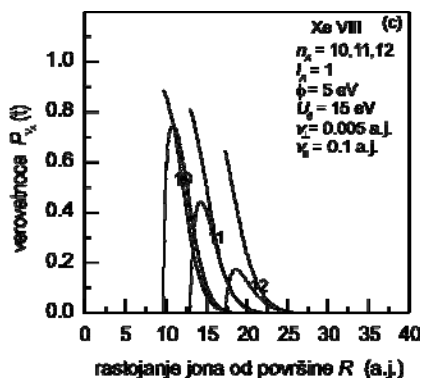
Slika 4. Verovatnoća za jon ArVIII sa uključenim polarizacionim efektom (puna linija) i u aproksimaciji tačkastog jona (isprekidana linija)



Slika 5. Verovatnoća (neutralizaciona i populaciona) za jon ArVIII



Slika 6. Verovatnoća (neutralizaciona i populaciona) za jon KrVIII



Slika 7. Verovatnoća (neutralizaciona i populaciona) za jon XeVIII

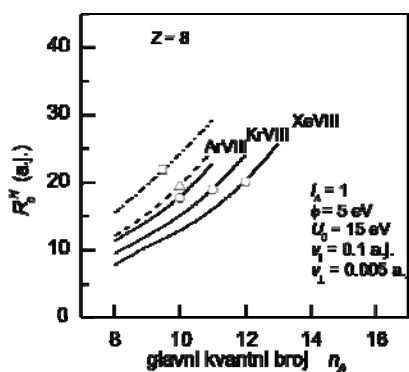
Sa Sl. 5, 6 i 7 se može videti pomeranje krivih za ista kvantna stanja n_A (energetski nivoi koji se populišu pri interakciji jona i površine) ka manjim rastojanjima jona od površine sa povećanjem polarizacionog efekta idući od ArVIII ka XeVIII. Istovremeno maksimumi populacionih verovatnoća rastu.

Neutralizaciono rastojanje, tj. rastojanje od površine na kojem verovatnoća po jedinici vremena (rata) ima maksimum, tako da je

$$\left(\frac{d\Gamma_{\nu_A}^P(t)}{dR} \right)_{R=R_c^N} = 0 \quad (5)$$

Za njihov prikaz takođe se koristi prvo Matlab, zatim Origin i na kraju CorelDraw.

Sa Sl.8 se vidi da neutralizaciona rastojanja zavise od naelektrisanja jonskog ostatka, paralelne brzine projektila [7], kvantnih brojeva koji karakterišu finalno stanje elektrona, kao i karakteristike površine, ϕ i U_0 . Neutralizaciona rastojanja zavise i od stanja polarizacije jonskog ostatka, tako da različiti joni istog naelektrisanja jonskog ostatka i istih kinematičkih karakteristika imaju različite vrednosti R_c^N .



Slika 8. Neutralizaciona rastojanja u zavisnosti od glavnog kvantnog broja za jone ArVIII, KrVIII i XeVIII.

IV. PRIMENA NA SOLARNE ČELIJE

Rezultati analize procesa neutralizacije jona pri interakciji sa provodnom površinom, koji su ovde izloženi, mogu se primeniti i u istraživanjima efikasnosti solarnih ćelija. Naime, novija istraživanja koja se vrše na Rice Univerzitetu [2] odnose se na primenu metalnih nanoantena. Metalne nanoantene se povezuju sa poluprovodnicima čime se postiže prikupljanje i infracrvene svetlosti iz sunčevog spektra, što omogućava elektronima da savladaju energetska barijeru. Rezultat je nastanak električne struje. Metalne nanoantene prikupljaju više energije iz šireg spektra sunčeve svetlosti čime se efikasnost solarnih ćelija direktno povećava. Ako bi se iskoristila i pojava zagrevanja metala usled intarkcije sa jonima (koja je izložena u radu) energetska efikasnost solarnih panela bi bila još veća.

V. ZAKLJUČAK

U radu je analizirana interakcija jona ArVIII, KrVIII i XeVIII sa provodnom površinom u cilju ispitivanja energetskih karakteristika materijala. Model koji je korišćen je model dvostanja u okviru koga su dobijene veličine kojima opisujemo neutralizacioni proces, populaciona i neutralizaciona verovatnoća, kao i neutralizaciona rastojanja, tj. rastojanja na kojima je proces uglavnom lokalizovan. Pokazano je da se process odvija na samoj površini metala što dovodi do njegovog zagrevanja i povećanja toplotnih karakteristika. Pokazano je da na proces utiče polarizacija jonskog ostatka. Prikazani su energetski spektri sva tri jona na osnovu kojih se vidi da je polarizacija najizraženija kod XeVIII. Za prikazivanje rezultata dobijenih u okviru modela dvostanja korišćeni su Matlab, Origin i CorelDraw. Pokazano je da izložena analiza interakcije jona sa metalima može da se primeni i u istraživanjima efikasnosti solarnih ćelija.

LITERATURA

- [1] N. N. Nedeljković and M. D. Majkić, "Intermediate Stages of the Rydberg-Level Population of Multiply Charged Ions Escaping Solid Surfaces", Phys. Rev. A **76**, (2007) 042902
- [2] <http://cleantechnica.com/2011/05/09/nanoantenna-surprise-discovery-could-make-solar-cells-more-efficient/>
- [3] N. N. Nedeljković, M. D. Majkić, S. M. D. Galijaš, "Grazing incidence collisions of multiply charged ions on solid surfaces. Influence of the formation of intermediate Rydberg states", J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **45** (2012) 215202
- [4] S. M. D. Galijaš, N. N. Nedeljković, M. D. Majkić, and A. B. Bunjac "The Effect of Core Polarization on The Population of the Rydberg States of ArVIII Ions Escaping Solid Surfaces", 25th Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases, August 30 -September 3, 2010, Donji Milanovac, Serbia, Contributed Papers & abstracts of invited lectures and progress reports, eds. L. Č Popović and M. M. Kuraica, Publications of the Astronomical Observatory of Belgrade **89**, (2010) 101-104.
- [5] M. D. Majkić, N. N. Nedeljković, R. Dojčilović and M. B. Obradović: "TVM v.s. kinetic energy gain for multiply charged ions interacting with solid surfaces", 26th Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases, August 27th- 31st 3, 2012, Zrenjanin, Serbia, Contributed Papers & abstracts of invited lectures and progress reports, eds M. Kuraica and Z. Mijatović, Publisher: University of Novi

Sad, Faculty of Sciences Department of Physics Novi Sad, Serbia (2012) **399** 99-102

- [6] M. D. Majkić, N. N. Nedeljković, and S. M. D. Galijaš, "Neutralization of Multiply Charged Rydberg Ions Interacting With Solid Surfaces under the Grazing Incidence Geometry", 25th Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases, August 30 - September 3, 2010, Donji Milanovac, Serbia, Contributed Papers & abstracts of invited lectures and progress reports, eds. L. Č Popović and M. M. Kuraica, Publications of the Astronomical Observatory of Belgrade **89**, (2010) 105-108.
- [7] N. N. Nedeljković, M. D. Majkić, S. M. D. Galijaš and M. A. Mirković "Population probabilities of multiply charged ions interacting with solid surface: parallel velocity effect", 26th Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases, August 27th- 31st 3, 2012, Zrenjanin, Serbia, Contributed Papers & abstracts of invited lectures and progress reports, eds M. Kuraica and Z. Mijatović, Publisher: University of Novi Sad, Faculty of Sciences Department of Physics Novi Sad, Serbia (2012) **399** 91-94,

ABSTRACT

In the present article is analyzed the interaction of ArVIII, KrVIII and XeVIII ions with solid surfaces in order to study

its energy characteristics. We used twostate quantum model in which we obtained the population and neutralization probabilities, and the distances in which the process of capture of electron from solid surface in specified quantum state is the most probable. It has been shown that the polarization effect can influence on population process. The results were analyzed with MATLAB, Origin and CorelDRAW. Considerations that are exposed here can be used in order to investigate the energy efficiency of solar cells. Namely, the current research in this area relate to the preparation of metal nanoantenna which are applied to the solar panels, making them more efficient.

ANALYSIS OF INTERACTION OF ArVIII, KrVIII AND XeVIII IONS WITH THE SURFACE USING MATLAB, ORIGIN AND CORELDRAW

Milena D. Majkić, Nataša N. Nedeljković, Dimitrije P. Majkić