On the Possibility of Leptonic CP Violation Due to Majorana Neutrinos

Andrej Babič[1*]

Supervisor: Fedor Šimkovic[1,2†]

[1] Department of Nuclear Physics and Biophysics, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Comenius University, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava, Slovakia

[2] Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR, Joliot-Curie 6, 141980 Dubna, Moscow region, Russia

Abstract: We investigate the possibility of CP violation in the lepton sector caused by Majorana neutrino mixing. Results are confronted with current neutrinoless double-beta decay experiments. Both cases of normal and inverted neutrino mass spectrum as well as the model including 1 sterile neutrino are considered.

Keywords: neutrino, mixing, mass, spectrum, sterile, Majorana, phase, CP, violation, baryon, asymmetry

1 Introduction

1.1 What Are Neutrinos?

The neutrino is an elementary particle basic properties of which are still unknown, despite the fact that its existence was postulated back in 1930 by Pauli in an attempt to explain energy conservation in beta decay. From the experiments by Hahn and Meitner in 1911 and Chadwick in 1914 it was clear that beta particles – electron e^- and positron e^+ – emitted from nuclei possess continuous energy spectrum. Pauli assumed the rest of the decay energy to be carried away by an unknown, yet unobserved particle which was later called "neutrino" (denoted ν).[1] For beta decay of neutron and proton he would write:

$$\begin{aligned} \beta^-: &\quad n \to p + e^- + \bar{\nu}, \\ \beta^+: &\quad p \to n + e^+ + \nu. \end{aligned} \tag{1}$$

From Pauli hypothesis it immediately follows that neutrino is an electrically neutral fermion with spin $1/2$ and, compared to electron, very small (possibly zero) rest mass. Due to extremely small cross sections for neutrino interactions with electrons and nuclei, for many years the neutrino was considered an undetectable particle. Only in 1956 Cowan and Reines were first able do detect antineutrinos $\bar{\nu}$ from the Savannah River Plant nuclear reactor.

In the Standard Model – a unified theory of electroweak interactions developed in 1967 by Glashow, Salam and Weinberg – the neutrino is a neutral lepton and couples to the charged leptons – electron e, muon μ and tauon τ – in 3 flavours as electron ν_e, muon ν_μ and tauon neutrino ν_τ, respectively. It interacts with other particles exclusively via the weak interaction (the gravitational interaction being negligible in problems of particle physics, however, not in cosmology), so that in particle interactions (e.g. W boson decay) the lepton family numbers L_l, where $l = e, \mu, \tau$, are always conserved.[2]

In Standard Model the neutrino was introduced as a massless particle. However, in 1998 the Super-Kamiokande experiment revealed an azimuthal dependence of the atmospheric ν_e and ν_μ flux, implying that neutrinos travelling through space can change their flavour. From this and numerous other experiments (K2K, SNO, MINOS etc.) it is nowadays established that so-called *neutrino oscillations* actually occur, which is only possible if:

- *Neutrino mixing* takes place.
- Neutrinos have small, however nonzero masses.

Together with photons, neutrinos are the most abundant particles of ordinary matter, with overall average density of $336\,\mathrm{cm}^{-3}$. On the Earth, according to the source we distinguish:

- *Solar neutrinos* produced in the Sun's nuclear reactions.
- *Atmospheric neutrinos* produced in interactions of the cosmic rays with atoms in the Earth's atmosphere.

*andrejbabic@centrum.sk

†fedor.simkovic@fmph.uniba.sk

[1] The name "neutrino" was introduced by Fermi in 1931, meaning "small neutral one" in Italian.

[2] $L_l = +1$ for lepton l^- and neutrino ν_l, $L_l = -1$ for antilepton l^+ and antineutrino $\bar{\nu}_l$ and $L_l = 0$ for all other particles.

- *Geoneutrinos* originating from the radioactivity of the Earth's crust.

Man-made sources include:

- Nuclear reactors (*reactor antineutrinos*).
- Particle accelerators (*accelerator neutrino beams*).

In space:

- Supernova explosions produce short and intense *supernova neutrino bursts*.
- There is a *cosmic neutrino background* distributed throughout the Universe, originating in the Big Bang.

1.2 Why Is CP Violation Important?

After Wu et al. (on proposal of Lee and Yang) demonstrated in 1956 (via beta decay of ^{60}Co) that P-symmetry (*parity* symmetry; invariance of physical laws under coordinate mirror inversion) is violated in weak interactions, the CP-symmetry – a product of C-symmetry (*charge conjugation* symmetry; invariance of physical laws under particle-antiparticle interchange) and P-symmetry – was supposed to be a fundamental symmetry of the nature. However, in 1964 Cronin and Fitch showed on the decays of neutral kaons K^0, $\bar{K}^0$ that weak interactions violate CP symmetry in quark sector.

In cosmology, CP violation is essential for explanation of the *baryon asymmetry of the Universe*, i.e. the dominance of matter over antimatter in the observable Universe. For this asymmetry to occur the *Sakharov conditions* must be satisfied [Bilenky, 2010]:

1. The baryon number has to be violated at some stage of the evolution.
2. C-symmetry and CP-symmetry must be violated.
3. Departure from thermal equilibrium must take place.

Thus, from 2nd condition, if CP were conserved all baryonic matter would have annihilated right after the Big Bang.

However, the observed CP violation in quark sector (originating from quark mixing) is insufficient for explanation of the baryon asymmetry. Furthermore, CP-symmetry is known to hold in strong and electromagnetic interaction. One possibility is to search for CP violation in the lepton sector (caused by neutrino mixing). Existence of leptonic CP violation still remains an open question.

1.3 Present Status and Future Perspective

At present it is unknown whether neutrinos are *Dirac particles* (meaning that neutrino and corresponding antineutrino are distinct particles) or *Majorana particles* (meaning that the two are identical). Observation of the *neutrinoless double-beta decay* ($0\nu\beta\beta$) would only be possible in case of Majorana neutrino nature. Sensitivity of current experiments (Heidelberg-Moscow, KamLAND-Zen, Nemo 3 etc.) is not yet sufficient to bring decisive results. Nevertheless, the non-observation of the effect yields limitations on possible values of measured quantities.

The experiments LSND in 1998, MiniBooNE in 2007, the gallium anomaly (experiments GALLEX and SAGE) and the reactor antineutrino anomaly in 2011 [Mention et al., 2011] brought results explanation of which requires existence of more than 3 neutrino types. Additional hypothetical neutrino flavours are called *sterile neutrinos* since they would not enter weak interaction Lagrangian of the Standard Model.[3] Sterile neutrinos could still manifest themselves via their influence on neutrino flux disappearance and measured neutrino mass differences in oscillation experiments. Mentioned anomalies point on existence of at least 1 heavy sterile neutrino (model $3+1$), explanation of MiniBooNE results requires no less than 2 heavy sterile neutrinos (model $3+2$).

In the neutrino oscillation experiments the absolute values of individual neutrino masses (the *absolute neutrino mass scale*) cannot be measured, only the mass-squared differences being available. Thus, oscillations are also unable to reveal the nature of *neutrino mass spectrum* which could be either *normal* (with larger mass difference between the two heavier neutrinos) or *inverted* (with larger mass difference between the lighter ones).

To sum up, neutrino physics today is searching for answers on several fundamental questions, among which the most important are:

1. Are neutrinos Dirac or Majorana particles?

[3] The number of weakly interacting neutrino flavours is well-established to be 3 (e.g. by Z boson decays at LEP).

2. Is neutrino mass spectrum normal or inverted?
3. What is the absolute scale of neutrino masses?
4. Is CP-symmetry violated in the lepton sector?
5. Do sterile neutrinos exist?

In this work we show that predictions about the 4th question can be made (taking into account that answers on the others are still unknown) if more precise measurements are performed in the years to come.

2 Elementary Theory

2.1 Neutrino Mixing

Neutrinos ν_e, ν_μ, ν_τ which interact with other particles are described by mutually orthonormal *flavour eigenstates* with definite flavour $|\nu_e\rangle$, $|\nu_\mu\rangle$, $|\nu_\tau\rangle$. However, when describing the neutrino propagation in space the orthonormal basis of *mass eigenstates* $|\nu_1\rangle$, $|\nu_2\rangle$, $|\nu_3\rangle$ with definite masses m_1, m_2, m_3, respectively, is more convenient. Neutrino mixing describes the fact that the flavour eigenstates are actually linear combinations of the mass eigenstates and vice versa. The transformation between the two bases is unitary (in order to conserve measurement probabilities) and is expressed by the unitary *neutrino mixing matrix* or *Pontecorvo-Maki-Nakagawa-Sakata (PMNS) matrix* U with elements U_{li}, where $l = e, \mu, \tau$ and $i = 1, 2, 3$, so that:[4]

$$\begin{aligned} |\nu_l\rangle &= \sum_i U_{li}|\nu_i\rangle, \\ |\nu_i\rangle &= \sum_l U^*_{li}|\nu_l\rangle. \end{aligned} \tag{2}$$

Since the mixing matrix is required to be unitary:

$$U^\dagger U = \mathbb{1} \tag{3}$$

its elements are not all mutually independent. Hence, it is possible to parametrise the matrix in a certain manner. In the *standard parametrisation* the mixing matrix is parametrised by the *mixing angles* θ_{ij}, *Dirac phases* δ_{ij} and, if neutrinos are Majorana particles, by additional Majorana phases α_k. In the general case of N neutrino types (e.g. models $3+1$ and $3+2$ including sterile neutrinos), for number of mixing angles n_θ, Dirac phases n_δ and Majorana phases n_α we get [Bilenky, 2010]:

$$\begin{aligned} n_\theta &= \frac{1}{2}N(N-1), \\ n_\delta &= \frac{1}{2}(N-1)(N-2), \\ n_\alpha &= N-1. \end{aligned} \tag{4}$$

For relevant cases this yields:

N	n_θ	n_δ	n_α
2	1	0	1
3	3	1	2
4	6	3	3
5	10	6	4

Values of the mixing parameters fully determine the matrix elements U_{li} and must be further obtained from the experiments.

Mixing angles θ_{ij} are introduced into the $N \times N$ mixing matrix U via its decomposition into product of n_θ orthogonal matrices R_{ij} of N-dimensional passive spatial rotations about angle θ_{ij} in the ij-plane. Dirac phases δ_{ij} are then introduced via multiplying the corresponding matrix R_{ij} as follows:

$$\tilde{R}_{ij} = D_{ij} R_{ij} D^\dagger_{ij}, \tag{5}$$

where D_{ij} is $N \times N$ diagonal matrix:

$$D_{ij} = \mathrm{diag}\left(1, \ldots, 1, e^{i\delta_{ij}}\right). \tag{6}$$

If neutrinos are Majorana particles the mixing matrix is finally multiplied from the right by the $N \times N$ diagonal matrix P containing the additional Majorana phases.

In two-neutrino approximation the 2×2 mixing matrix $U = R_{12}$ (Dirac neutrino case) is parametrised by one mixing angle θ_{12} only:

$$U = \begin{pmatrix} \cos\theta_{12} & \sin\theta_{12} \\ -\sin\theta_{12} & \cos\theta_{12} \end{pmatrix}. \tag{7}$$

In the standard 3-neutrino case the 3×3 mixing matrix contains the mixing parameters θ_{12}, θ_{13}, θ_{23}, δ_{13} and usually takes the form:

$$U = R_{23}\tilde{R}_{13}R_{12} \tag{8}$$

[4] Note that the PMNS matrix was originally introduced in analogy with the Cabibbo-Kobayashi-Maskawa (CKM) matrix which describes the quark mixing.

which explicitly reads ($s_{ij} = \sin\theta_{ij}$, $c_{ij} = \cos\theta_{ij}$):

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & c_{23} & s_{23} \\ 0 & -s_{23} & c_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{13} & 0 & s_{13}e^{-i\delta_{13}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -s_{13}e^{i\delta_{13}} & 0 & c_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{12} & s_{12} & 0 \\ -s_{12} & c_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

In the model $3+1$ including 1 sterile neutrino we parametrise the 4×4 mixing matrix by θ_{12}, θ_{13}, θ_{23}, θ_{14}, θ_{24}, θ_{34} and δ_{13}, δ_{14}, δ_{24} as follows [Barry et al., 2011]:

$$U = R_{34}\tilde{R}_{24}\tilde{R}_{14}R_{23}\tilde{R}_{13}R_{12}. \quad (10)$$

In the general N-neutrino case, the expression for the *transition probability* $P_{l\to l'}$ that an ultrarelativistic (which is almost always the case) flavour neutrino ν_l produced with energy E will be detected as flavour neutrino $\nu_{l'}$ of (in general) different flavour after travelling the distance L in vacuum is [Bilenky, 2010]:

$$P_{l\to l'}(E,L) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} U_{l'j}U^*_{lj}U^*_{l'i}U_{li}\,e^{i\Delta m^2_{ji}c^3L/(2\hbar E)}, \quad (11)$$

where $\Delta m^2_{ji} = m^2_j - m^2_i$ is the *mass-squared difference* of the neutrino masses m_j, m_i. It is now obvious that neutrino oscillation is only possible if neutrinos mix (in order for the elements U_{li} to be nonzero) and possess different (i.e. nonzero) masses.

2.2 Determining the Neutrino Mass

From neutrino oscillation experiments only the information about the mixing angles θ_{ij} and mass-squared differences Δm^2_{ji} is available.[5] From oscillation experiments with solar neutrinos the mass-squared difference $\Delta m^2_S = \Delta m^2_{21}$ is known. From oscillations of atmospheric neutrinos the difference between the largest and smallest mass $\Delta m^2_A = |\Delta m^2_{32}| \approx |\Delta m^2_{31}|$ is known (both definitions are acceptable because of $\Delta m^2_S \ll \Delta m^2_A$) [Vergados et al., 2012].

Due to the absolute value in Δm^2_A two types of neutrino mass spectrum are possible:

1. *Normal spectrum (NS)*:

$$m_1 < m_2 \ll m_3. \quad (12)$$

[5] Dirac phases δ_{ij}, Majorana phases α_k as well as individual neutrino masses m_i do not enter into oscillation results.

For mass-squared differences we get:

$$\begin{aligned} \Delta m^2_S &= m^2_2 - m^2_1, \\ \Delta m^2_A &= m^2_3 - m^2_1. \end{aligned} \quad (13)$$

We pick the smallest mass as the *free parameter* m_0:

$$\begin{aligned} m_1 &= m_0, \\ m_2 &= \sqrt{\Delta m^2_S + m^2_0}, \\ m_3 &= \sqrt{\Delta m^2_A + m^2_0}. \end{aligned} \quad (14)$$

2. *Inverted spectrum (IS)*:

$$m_3 \ll m_1 < m_2. \quad (15)$$

Mass-squared differences read:

$$\begin{aligned} \Delta m^2_S &= m^2_2 - m^2_1, \\ \Delta m^2_A &= m^2_2 - m^2_3. \end{aligned} \quad (16)$$

The smallest mass is once again chosen as the free parameter m_0:

$$\begin{aligned} m_1 &= \sqrt{\Delta m^2_A - \Delta m^2_S + m^2_0}, \\ m_2 &= \sqrt{\Delta m^2_A + m^2_0}, \\ m_3 &= m_0. \end{aligned} \quad (17)$$

Knowledge of the mass spectrum type (NS or IS) and free parameter value m_0 would reveal the absolute neutrino mass scale.

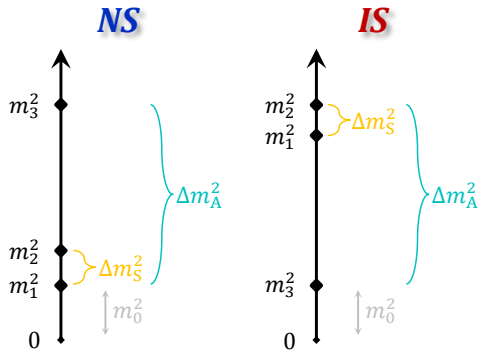


Figure 1: Normal (NS) and inverted (IS) neutrino mass spectrum.

In the $3+1$ model including 1 sterile neutrino the additional mass m_4 is introduced:

$$m_1, m_2, m_3 \ll m_4 \quad (18)$$

and expressed via Δm^2_{41} and the free parameter m_0 as follows:

1. Normal spectrum:

$$m_4 = \sqrt{\Delta m_{41}^2 + m_0^2}. \tag{19}$$

2. Inverted spectrum:

$$m_4 = \sqrt{\Delta m_{41}^2 + \Delta m_A^2 - \Delta m_S^2 + m_0^2}. \tag{20}$$

The up-to-date global fit to experimental results yields following mixing parameter values (with 1σ statistical significance) [Gonzalez-Garcia et al., 2012]:

$\sin^2\theta_{12}$	$0.302^{+0.013}_{-0.012}$
$\sin^2\theta_{23}$	$0.413^{+0.037}_{-0.025}$
$\sin^2\theta_{13}$	$0.0227^{+0.0023}_{-0.0024}$
$\Delta m_S^2\,[10^{-5}\,\mathrm{eV}^2/c^4]$	$7.50^{+0.18}_{-0.19}$
$\Delta m_A^2\,[10^{-3}\,\mathrm{eV}^2/c^4]$ (NS)	$2.473^{+0.070}_{-0.067}$
$\Delta m_A^2\,[10^{-3}\,\mathrm{eV}^2/c^4]$ (IS)	$2.427^{+0.042}_{-0.065}$

For the $3+1$ sterile neutrino model the following additional values were obtained [Kopp et al., 2013]:

$\lvert U_{e4}\rvert$	0.15
$\Delta m_{41}^2\,[\mathrm{eV}^2/c^4]$	0.93

The free parameter m_0 can be constrained e.g. via the following measurements:

- Various cosmological observations (especially the measurement of CMB anisotropy) provide an upper bound on the sum of neutrino masses [Vergados et al., 2012]:

$$m_{\mathrm{cosmo}} = \sum_i m_i. \tag{21}$$

  Current results yield the upper bound of the order $10^{-1}\,\mathrm{eV}/c^2$ [Abazajian, 2011]. For instance, the galactic redshift survey yields a limit [Thomas et al., 2010]:

$$m_{\mathrm{cosmo}} < 0.28\,\mathrm{eV}/c^2. \tag{22}$$

  This bound excludes the values of m_0 exceeding $0.09\,\mathrm{eV}/c^2$.

- On the other hand, from precise measurements of tritium ^{3}H and rhenium ^{187}Re beta spectrum endpoint the *effective neutrino mass* m_β can be examined [Vergados et al., 2012]:

$$m_\beta = \sqrt{\sum_i |U_{ei}|^2 m_i^2}. \tag{23}$$

  From the experiments in Mainz and Troitsk the following upper bound has been obtained:

$$m_\beta < 2.2\,\mathrm{eV}/c^2, \tag{24}$$

  implying that m_0 should also not be larger than approximately $2.2\,\mathrm{eV}/c^2$ for both types of mass spectrum.

In addition to this, there are possibilities to determine the m_0 value in certain models of the Grand Unified Theory.

2.3 Effective Majorana Neutrino Mass

We further assume Majorana nature of massive neutrinos. The *effective Majorana neutrino mass* $m_{\beta\beta}$ is defined as follows [Vergados et al., 2012]:

$$m_{\beta\beta} = \sum_i U_{ei}^2 m_i. \tag{25}$$

Since the elements U_{ei} in the first row of the mixing matrix can in general be complex numbers the $m_{\beta\beta}$ could also be complex. Modulus of the effective Majorana neutrino mass $|m_{\beta\beta}|$ can in principle be measured in $0\nu\beta\beta$ experiments. Since the $0\nu\beta\beta$ has not yet been observed (either due to the Dirac neutrino nature or simply because of insufficient sensitivity of running experiments) only the upper bound over $|m_{\beta\beta}|$ has been cast, of the order $10^{-1}\,\mathrm{eV}/c^2$. For example, the Heidelberg-Moscow experiment with the ^{76}Ge isotope yields a limit [Vergados et al., 2012]:

$$|m_{\beta\beta}| < 0.32\,\mathrm{eV}/c^2. \tag{26}$$

A slightly stronger bound has been obtained in the KamLAND-Zen experiment with ^{136}Xe [Vergados et al., 2012]:

$$|m_{\beta\beta}| < 0.30\,\mathrm{eV}/c^2. \tag{27}$$

Sensitivity improvement in current and future experiments up to an order of $10^{-2}\,\mathrm{eV}/c^2$ is expected in the prospect of a few years.

3 Constraining the Majorana Phases from Up-to-Date Data

3.1 Model with 3 Neutrino Types, Normal Spectrum of Masses

In case of 3 Majorana neutrino types we multiply the mixing matrix (8) from the right by 3×3 diagonal matrix P containing the Majorana phases α_1, α_2

[Vergados et al., 2012]:[6]

$$P = \mathrm{diag}\left(e^{i\alpha_1/2}, e^{i\alpha_2/2}, e^{i\delta_{13}}\right), \qquad (28)$$

so that the elements U_{ei} in the first row of the mixing matrix become:

$$\begin{aligned} U_{e1} &= c_{12}\, c_{13}\, e^{i\alpha_1/2}, \\ U_{e2} &= s_{12}\, c_{13}\, e^{i\alpha_2/2}, \\ U_{e3} &= s_{13}. \end{aligned} \qquad (29)$$

Recalling the parametrisation of masses in NS (14) via the free parameter m_0 we can express the effective Majorana neutrino mass as follows:

$$m_{\beta\beta} = c_{12}^2 c_{13}^2 m_1 e^{i\alpha_1} + s_{12}^2 c_{13}^2 m_2 e^{i\alpha_2} + s_{13}^2 m_3. \qquad (30)$$

Once the values of the mixing parameters θ_{12}, θ_{13} and mass-squared differences Δm_S^2, Δm_A^2 are known, the value of $m_{\beta\beta}$ for certain type of mass spectrum and certain value of m_0 is completely given by the Majorana phases α_1, α_2, values of which are, however, unknown [Nakamura and Petcov, 2012]. Majorana phases can in general possess any value from the interval $[0, 2\pi)$. Nevertheless, if any of the Majorana phases turned out to be different from 0 and π the CP-symmetry would be violated in the lepton sector since the elements U_{li} would no longer be all real.[7] We show that precise measurements of the $|m_{\beta\beta}|$ could exclude certain values of Majorana phases and eventually reveal CP violation caused by Majorana neutrinos.

Firstly, we analyse the case of normal spectrum of neutrino masses. Assuming all possible values of the Majorana phases α_1, α_2 the $|m_{\beta\beta}|$ can only obtain certain range of values. In the fig. 2 we plot the possible values of $|m_{\beta\beta}|$ as a function of the free parameter m_0 in case of NS in model with 3 neutrino types. The values from subsection (2.2) were used within the analysis. Possible values are indicated as the blue region. Black lines represent values that conserve the CP-symmetry (i.e. both Majorana phases are either equal to 0 or π). For the purpose of illustration the IS is also indicated in red. Considering the experimental limits of cosmological and $0\nu\beta\beta$ measurements the values of m_0 larger than $0.1\,\mathrm{eV}/c^2$ are excluded and fall outside the range of our interest. Around the

[6] The special choice of the last diagonal element eliminates the Dirac phase δ_{13} from the first row of the mixing matrix.

[7] The same statement is valid for the Dirac phases. However, $0\nu\beta\beta$ experiments are not sensitive to these parameters.

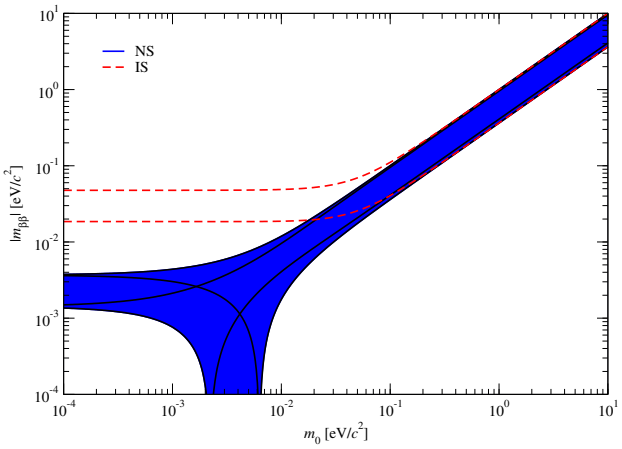


Figure 2: $|m_{\beta\beta}|$ dependence on m_0, 3 ν-s, NS.

free parameter value $0.005\,\mathrm{eV}/c^2$ very low values of $|m_{\beta\beta}|$ are also allowed which could hardly be measured in the forthcoming experiments.

Here we take a closer look at the Majorana phases. Given a fixed m_0 we examine which values of Majorana phases α_1, α_2 (separately) are allowed in order to generate certain value of $|m_{\beta\beta}|$ (leaving the other Majorana phase to take any arbitrary value). We perform the analysis for the m_0 values of $0.0005\,\mathrm{eV}/c^2$, $0.005\,\mathrm{eV}/c^2$ and $0.05\,\mathrm{eV}/c^2$ (as these correspond to qualitatively different regions of the plot in the fig. 2). Corresponding regions with respect to the range of $|m_{\beta\beta}|$ are plotted in the fig. 3 to 5. α_1 is indicated

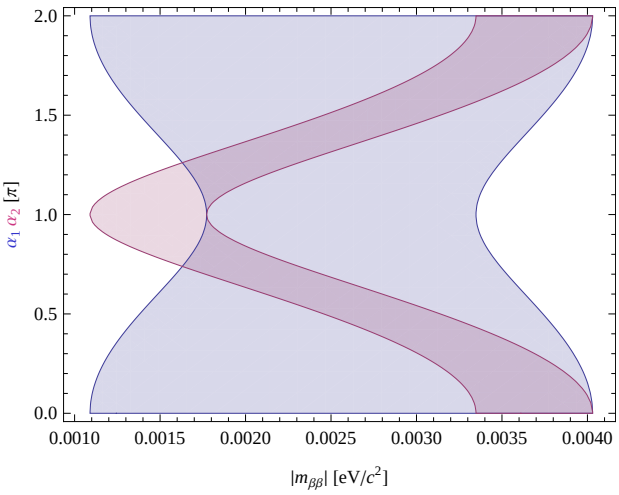


Figure 3: α_1, α_2 dependence on $|m_{\beta\beta}|$, 3 ν-s, NS, $m_0 = 0.0005\,\mathrm{eV}/c^2$.

in blue, α_2 in red. In principle, from the fig. 4, the leptonic CP violation (assuming 3-neutrino mixing, NS and value $m_0 = 0.005\,\mathrm{eV}/c^2$) would be revealed

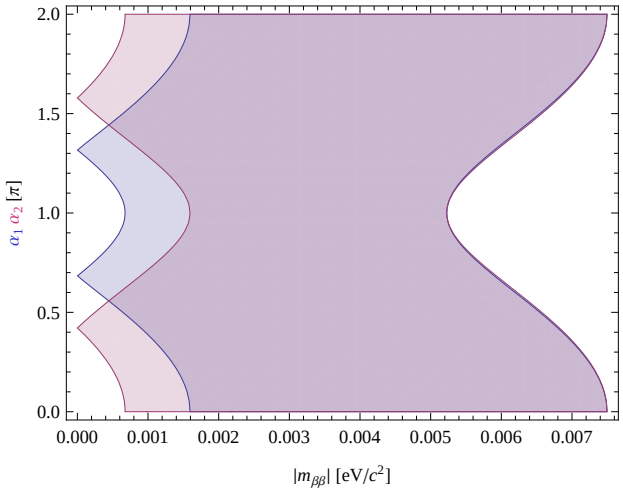


Figure 4: α_1, α_2 dependence on $|m_{\beta\beta}|$, 3 ν-s, NS, $m_0 = 0.005\,\mathrm{eV}/c^2$.

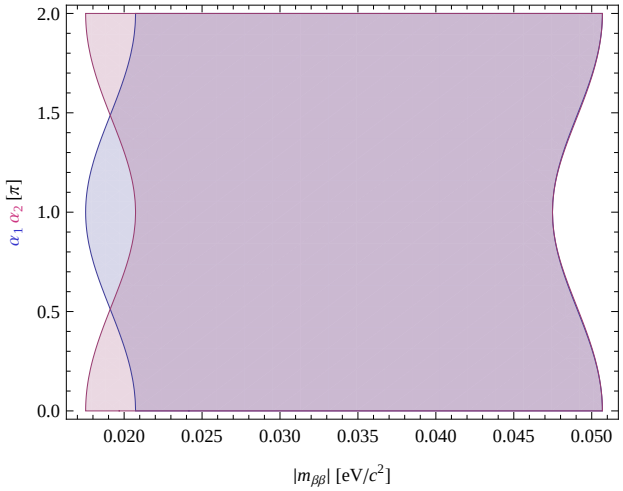


Figure 5: α_1, α_2 dependence on $|m_{\beta\beta}|$, 3 ν-s, NS, $m_0 = 0.05\,\mathrm{eV}/c^2$.

if $|m_{\beta\beta}|$ was shown to be less than cca. $0.5\,\mathrm{meV}/c^2$ (since at least one Majorana phase would have to be different from 0 and π). Reason for excluding the CP-conserving Majorana phase values can be brought into connection with the rapid decrease region of possible $|m_{\beta\beta}|$ values below the CP-conserving black lines in fig. 2. Outside this region the CP-conserving Majorana phase values are always allowed. It is expected that future $0\nu\beta\beta$ measurements will further constrain the upper bound on $|m_{\beta\beta}|$ down to the value of around $10\,\mathrm{meV}/c^2$. However, for NS the $|m_{\beta\beta}|$ in the physically significant part of the plot in the fig. 2 lies almost an order below this level. Thus, discovering the CP violation in this case is far beyond the possibilities of current and forthcoming experiments.

3.2 Model with 3 Neutrino Types, Inverted Spectrum of Masses

For the inverted spectrum of masses we also use the matrix P in the form (28) and further parametrise the masses as in (17).

Possible $|m_{\beta\beta}|$ values for all Majorana phase combinations with respect to m_0 is plotted in the fig. 6. We indicate the possible values as the red region,

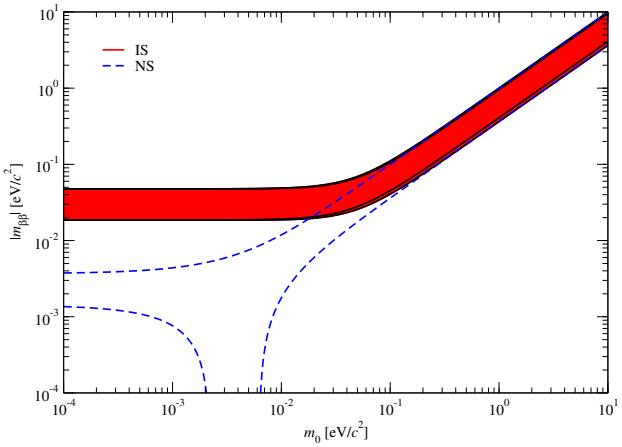


Figure 6: $|m_{\beta\beta}|$ dependence on m_0, 3 ν-s, IS.

black lines representing the CP-conserving values. NS is also shown in blue for clarity. We observe that IS casts lower limit of approximately $20\,\mathrm{meV}/c^2$ for the possible values of $|m_{\beta\beta}|$. Thus, if $|m_{\beta\beta}|$ is found to lie below this limit in the future, IS would be excluded within the 3-neutrino model.

In the fig. 7, we perform the Majorana phase analysis for m_0 value of $0.05\,\mathrm{eV}/c^2$ only, since the range of $|m_{\beta\beta}|$ is virtually constant over the m_0 values of interest. α_1 is depicted in blue, α_2 in red. In case of IS the whole range of $|m_{\beta\beta}|$ allows CP-conserving combinations of Majorana phases, thus disabling us to make any CP violation predictions.

It is, however, interesting to plot the possible values of Majorana phase difference $\alpha_{21} = \alpha_2 - \alpha_1$ [Šimkovic et al., 2013] (fig. 8). In fact, it is possible to write the modulus of effective Majorana neutrino mass $|m_{\beta\beta}|$ (as a modulus of sum of complex numbers) as follows:

$$|m_{\beta\beta}| = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} r_i^2 + 2\sum_{i=2}^{N}\sum_{j=1}^{i-1} r_i r_j \cos(\alpha_j - \alpha_i)}, \quad (31)$$

where $r_i = |U_{ei}|^2 m_i$, while $N = 3$ and $\alpha_3 = 0$ in standard 3-neutrino model. It turns out that in this

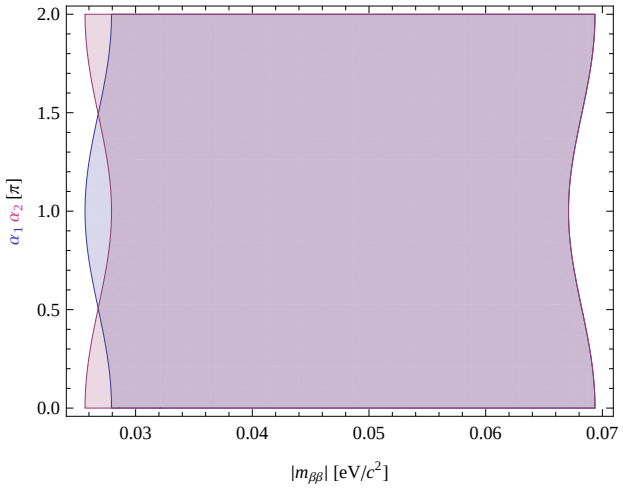


Figure 7: α_1, α_2 dependence on $|m_{\beta\beta}|$, 3 ν-s, IS, $m_0 = 0.05\,\mathrm{eV}/c^2$.

case (3-neutrino mixing, IS and $m_0 = 0.05\,\mathrm{eV}/c^2$) the dominant term among those in the second sum is that which contains $\cos(\alpha_2 - \alpha_1) = \cos\alpha_{21}$. We see that

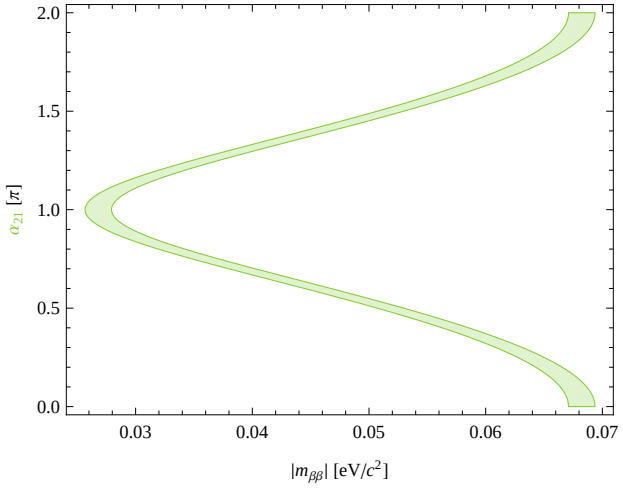


Figure 8: $\alpha_2 - \alpha_1$ dependence on $|m_{\beta\beta}|$, 3 ν-s, IS, $m_0 = 0.05\,\mathrm{eV}/c^2$.

given the value of $|m_{\beta\beta}|$ only narrow intervals of α_{21} are allowed, symmetrically distributed around π.

3.3 Model with 3 + 1 Neutrino Types, Normal Spectrum of Masses

When considering 1 additional sterile neutrino we introduce the Majorana phases α_1, α_2, α_3 by multiplying the 4×4 mixing matrix U from the right with 4×4 diagonal matrix P in the form [Vergados et al., 2012]:

$$P = \mathrm{diag}\left(e^{i\alpha_1/2}, e^{i\alpha_2/2}, e^{i(\delta_{13}+\alpha_3/2)}, e^{i\delta_{14}}\right) \qquad (32)$$

and thus the elements U_{ei} become:

$$\begin{aligned} U_{e1} &= c_{12}\,c_{13}\,c_{14}\,e^{i\alpha_1/2}, \\ U_{e2} &= s_{12}\,c_{13}\,c_{14}\,e^{i\alpha_2/2}, \\ U_{e3} &= s_{13}\,c_{14}\,e^{i\alpha_3/2}, \\ U_{e4} &= s_{14}. \end{aligned} \qquad (33)$$

The effective Majorana neutrino mass in the model 3 + 1 can be expressed as follows:

$$\begin{aligned} m_{\beta\beta} = c_{12}^2\,c_{13}^2\,c_{14}^2\,m_1\,e^{i\alpha_1} + s_{12}^2\,c_{13}^2\,c_{14}^2\,m_2\,e^{i\alpha_2} + \\ + s_{13}^2\,c_{14}^2\,m_3\,e^{i\alpha_3} + s_{14}^2\,m_4. \end{aligned} \qquad (34)$$

where the mass m_4 is expressed via (19) (NS).

In the fig. 9, we once again present the plot of possible values of $|m_{\beta\beta}|$ with respect to m_0 for normal mass spectrum, in the 3 + 1 model. Allowed values

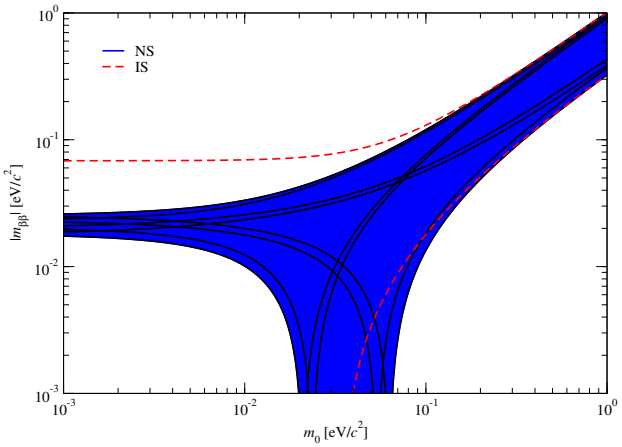


Figure 9: $|m_{\beta\beta}|$ dependence on m_0, $3+1$, NS.

for NS are displayed in blue, black lines correspond to CP-conserving cases. IS is sketched in red. We see that the region of rapid decrease is now located near the m_0 value of $0.05\,\mathrm{eV}/c^2$.

We analyse the Majorana phases α_1, α_2, α_3 in case of NS for m_0 values of $0.005\,\mathrm{eV}/c^2$ and $0.05\,\mathrm{eV}/c^2$, as these correspond to physically distinct areas of interest. Again, α_1 is indicated in blue and α_2 in red. Additional Majorana phase α_3 is presented in yellow. From the fig. 10 no CP violation can be predicted. In the fig. 11, once again, the CP-violating region is observed for very low values $|m_{\beta\beta}|$ of around $1\,\mathrm{meV}/c^2$. Current experiments are unable to tell whether $|m_{\beta\beta}|$ is truly of this order.

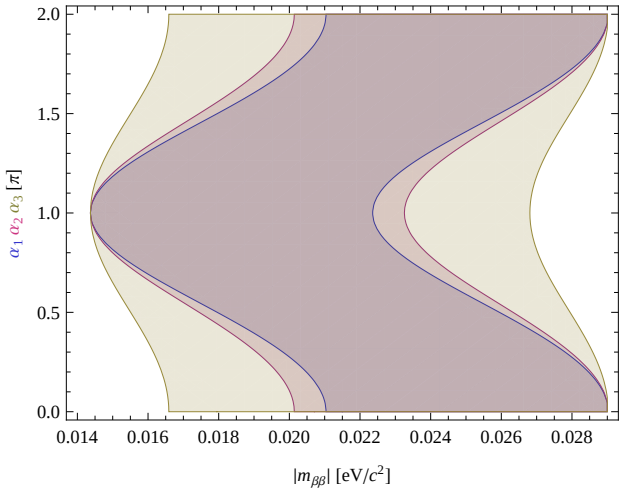


Figure 10: α_1, α_2, α_3 dependence on $|m_{\beta\beta}|$, $3+1$, NS, $m_0 = 0.005\,\mathrm{eV}/c^2$.

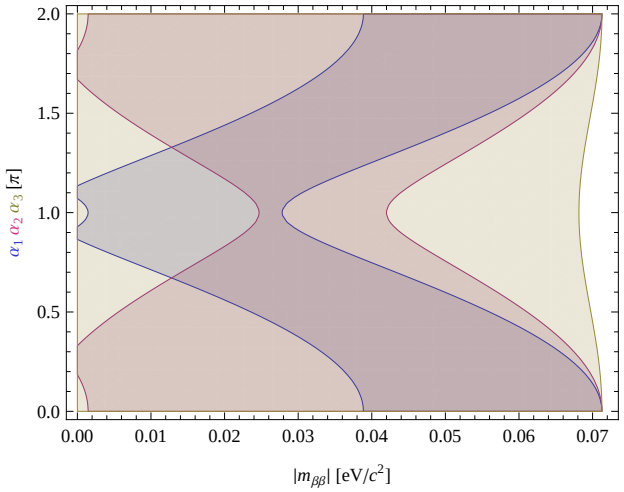


Figure 11: α_1, α_2, α_3 dependence on $|m_{\beta\beta}|$, $3+1$, NS, $m_0 = 0.05\,\mathrm{eV}/c^2$.

3.4 Model with 3 + 1 Neutrino Types, Inverted Spectrum of Masses

Finally, we analyse the case of inverted spectrum of neutrino masses. Multiplying the mixing matrix with the diagonal matrix P of the form (32) we obtain once again the elements (33) and parametrise the additional mass m_4 via the relation (20).

In the fig. 12 we present the dependence of $|m_{\beta\beta}|$ on m_0 for the inverted neutrino mass spectrum. Allowed region for the IS is shown in red. Black lines correspond to CP conservation. Blue lines represent the NS. The region including very low $|m_{\beta\beta}|$ values has been largely extended to the m_0 values lying beneath $0.04\,\mathrm{eV}/c^2$.

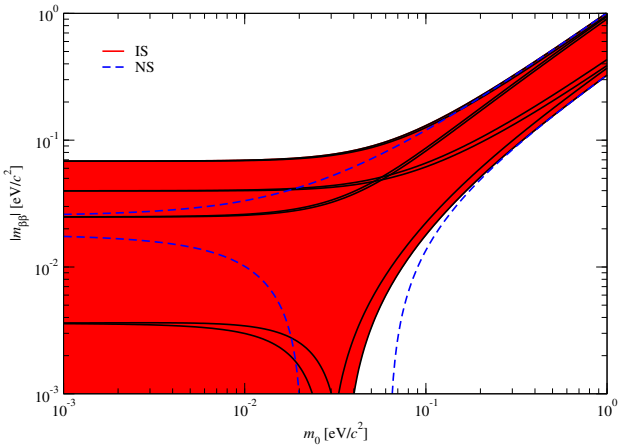


Figure 12: $|m_{\beta\beta}|$ dependence on m_0, $3+1$, IS.

In the fig. 13 and 14 we examine the Majorana phases again for the m_0 values of $0.005\,\mathrm{eV}/c^2$ and $0.05\,\mathrm{eV}/c^2$, this time in case of IS. Majorana phases

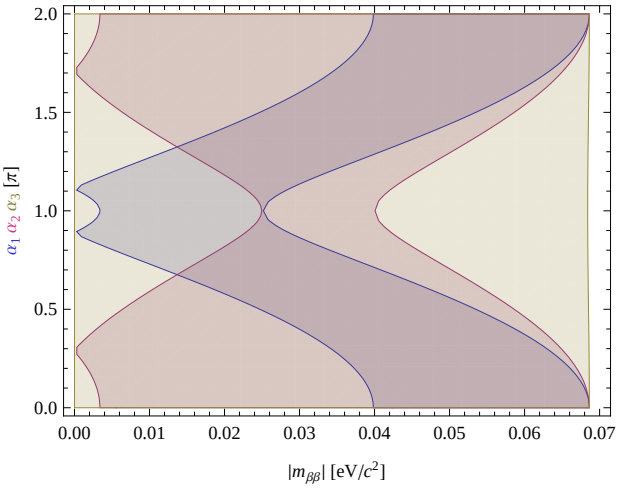


Figure 13: α_1, α_2, α_3 dependence on $|m_{\beta\beta}|$, $3+1$, IS, $m_0 = 0.005\,\mathrm{eV}/c^2$.

α_1, α_2 and α_3 are represented by blue, red and yellow, respectively. For the IS we again observe CP violation for $|m_{\beta\beta}|$ less then a few meV/c^2 in the whole region of m_0 corresponding to possibly low $|m_{\beta\beta}|$ values (i.e. for m_0 less than approximately $0.04\,\mathrm{eV}/c^2$). Contemporary experiments are again not sensitive enough to decide whether the leptonic CP violation due to Majorana neutrinos in this case (model $3+1$, IS) actually occurs.

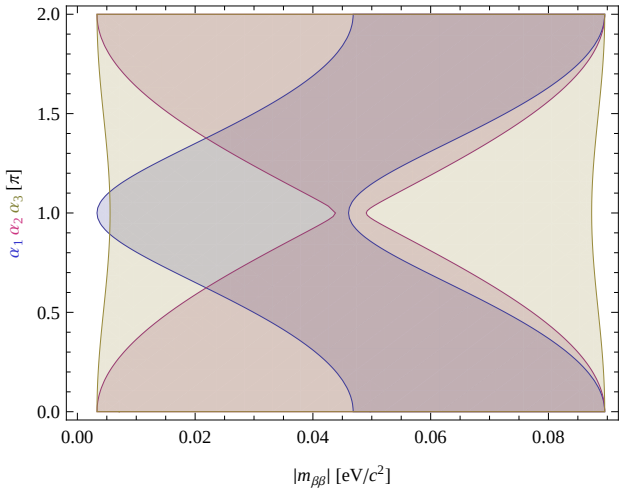


Figure 14: α_1, α_2, α_3 dependence on $|m_{\beta\beta}|$, $3+1$, IS, $m_0 = 0.05\,\mathrm{eV}/c^2$.

4 Summary and Outlook

We conclude that values of m_0 which allow very low $|m_{\beta\beta}|$ values also create a possibility to theoretically predict the leptonic CP violation (in NS model with 3 neutrino types and both NS and IS models with $3+1$ neutrino types). However, the predictions can be only made if $|m_{\beta\beta}|$ turns out to be of the order $10^{-3}\,\mathrm{eV}/c^2$, which is inaccessible through current $0\nu\beta\beta$ experiments. The neutrino physics either has to develop more sensitive ways of measurements or perhaps determine the values of the mixing parameters in a brand-new way. Until then, the CP violation in the lepton sector still remains an open question and a challenge for particle physics and cosmology.

Acknowledgements

Hereby I would like to thank Fedor Šimkovic for introducing me into the interesting topic via many fruitful discussions. My thanks also goes to Irina Bormotova for helping me to give plots their final appearance.

References

[Abazajian, 2011] Abazajian, K. N. (2011). Cosmological and astrophysical neutrino mass measurements. *Astropart. Phys. 35*.

[Barry et al., 2011] Barry, J., Rodejohann, W., and Zhang, H. (2011). Light sterile neutrinos: Models and phenomenology. *SISSA*.

[Bilenky, 2010] Bilenky, S. M. (2010). *Introduction to the Physics of Massive and Mixed Neutrinos*. Springer, Heidelberg.

[Gonzalez-Garcia et al., 2012] Gonzalez-Garcia, M. C., Maltoni, M., Salvado, J., and Schwetz, T. (2012). Global fit to three neutrino mixing: Critical look at present precision. *JHEP*.

[Kopp et al., 2013] Kopp, J., Machado, P. A. N., Maltoni, M., and Schwetz, T. (2013). Sterile neutrino oscillations: The global picture. *arXiv:1303.3011v1*.

[Mention et al., 2011] Mention, G., Fechner, M., Lasserre, T., Mueller, T. A., Lhuillier, D., Cribier, M., and Letourneau, A. (2011). The reactor antineutrino anomaly. *Physical Review D*.

[Nakamura and Petcov, 2012] Nakamura, K. and Petcov, S. T. (2012). Neutrino mass, mixing and oscillations. *RPP 2012 (Particle Data Group)*.

[Thomas et al., 2010] Thomas, S. A., Abdalla, F. B., and Lahav, O. (2010). Upper bound of 0.28 eV on the neutrino masses from the largest photometric redshift survey. *Physical Review Letters*.

[Vergados et al., 2012] Vergados, J. D., Ejiri, H., and Šimkovic, F. (2012). Theory of neutrinoless double-beta decay. *Rept. Prog. Phys. 75 (2012) 106301*.

[Šimkovic et al., 2013] Šimkovic, F., Bilenky, S. M., Faessler, A., and Gutsche, T. (2013). On the possibility of a measurement of the CP majorana phase in the $0\nu\beta\beta$ decay. *arXiv:1210.1306v2*.

Zavedenie pojmu relatívnej vlhkosti vzduchu na gymnáziu

Ágnes Bartal[1]*
Školiteľ: Michaela Velanová[1‡]

[1] Katedra teoretickej fyziky a didaktiky fyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava, Slovenská republika

Abstrakt

Rozhodujúcimi teóriami vzdelávania v súčasnosti sú teória aktívneho poznávania a pedagogický konštruktivizmus. Tieto sú aj hlavnými východiskami tejto práce. Základom je žiakovo aktívne konštruovanie nových poznatkov na základe súvislostí medzi predchádzajúcimi poznatkami a novou skúsenosťou.

Cieľom tejto práce je vytvoriť aktivity a pracovné listy, pomocou ktorých si žiaci aktívnou poznávacou činnosťou osvoja poznatky o relatívnej vlhkosti vzduchu. Považujeme ich za dôležité, nakoľko vlhkosť vzduchu vo veľkej miere ovplyvňuje naše zdravie i náš pocit pohodlia.

Poznatky o relatívnej vlhkosti vzduchu sa využívajú aj pri snahe zvýšiť komfort ľudí pracujúcich napr. v továrňach a kanceláriách, avšak sú podstatné aj z hľadiska turizmu. Na základe výskumov [Berglund, 1993] bola určená tzv. konformná zóna človeka v závislosti od teploty a relatívnej vlhkosti vzduchu. Mimo tejto zóny má človek pocit sucha, chladu, dusna alebo horúčavy.

Kľúčové slová: pracovné listy, vlhkosť vzduchu, aktivita, aktívne poznávanie, experiment

1 Vodná para v atmosfére

Voda, ktorá je vyparovaná do atmosféry, je jednou z najpodstatnejších zložiek, ktoré ovplyvňujú počasie. Vlhkosť vzduchu úzko súvisí so vznikom dažďa, oblakov, hmly a tiež so zmenami tlaku vzduchu. Ako autori J. Kopáček a J. Bednář [Kopáček, Bednář, 2005] uvádzajú v knihe *Jak vzniká počasí*, čistý a suchý vzduch prakticky neexistuje, vodná para je v ňom vždy prítomná. Táto skutočnosť je z hľadiska nášho zdravia a pre meteorologické deje podstatná. Obsah vodnej pary vo vzduchu sa pohybuje medzi 0 až 4 objemovými percentami, pričom 0% je teoretická hodnota, v realite neexistuje. Najdôležitejšími fyzikálnymi veličinami, ktoré charakterizujú vodnú paru vo vzduchu, sú tieto:

- **Absolútna vlhkosť vzduchu**: Fyzikálna veličina absolútna vlhkosť vzduchu (ρ_v) udáva hmotnosť vodnej pary v jednotke objemu vzduchu. Jednotkou je $kg.m^{-3}$ ($g.m^{-3}$), avšak niekedy sa používa aj jednotka $g.kg^{-1}$, ktorá vyjadruje hmotnosť vodnej pary v jednotke hmotnosti suchého vzduchu. Množstvo vodnej pary vo vzduchu nemôžeme zvyšovať neobmedzene, existuje maximálne množstvo vodnej pary, ktoré v sebe vzduch dokáže „udržať“. Prebytok vodnej pary potom skondenzuje. Táto medzná hodnota je charakteristická pre danú teplotu a nazýva sa **absolútna vlhkosť nasýteného vzduchu** (ρ_{vs}). V tabuľke (Tab. 1) uvádzame hodnoty absolútnej vlhkosti nasýteného vzduchu pri rôznych teplotách vzduchu.

$\frac{t}{°C}$	-5	10	15	20	25	30
$\frac{\rho_{vs}}{gm^{-3}}$	3,3	9,4	12,8	17,3	23,0	30,3

Tab. 1: Závislosť absolútnej vlhkosti nasýteného vzduchu od danej teploty

- **Tlak vodných pár** je parciálny tlak vodných pár vo vzduchu. V prípade nasýteného vzduchu sa tento tlak nazýva **tlak nasýtenia**. Absolútna vlhkosť nasýteného vzduchu a tlak nasýtenia závisia od teploty. Teplý vzduch dokáže prijímať väčšie množstvo vody.
- **Relatívna vlhkosť vzduchu**: Častejšie ako s absolútnou vlhkosťou vzduchu sa stretávame s relatívnou vlhkosťou vzduchu (r). Vyjadruje pomer medzi aktuálnou absolútnou vlhkosťou vzduchu a absolútnou vlhkosťou nasýteného vzduchu pri danej teplote. Zároveň ide o pomer medzi aktuálnym tlakom vodných pár a tlakom nasýtenia pri danej teplote. Vyjadruje sa v percentách.

$$r = \frac{\rho_v}{\rho_{vs}} \cdot 100\%$$

- **Teplota rosného bodu (T_d)**: Ide o teplotu, pri ktorej sa vodná para prítomná vo vzduchu stane nasýtenou pri nezmenenom atmosferickom tlaku. [Kopáček, Bednář, 2005] V nasledujúcej tabuľke (Tab. 2) uvádzame niekoľko príkladov teploty rosného bodu pri danom stave vzduchu (pri istej teplote a relatívnej vlhkosti):

* bartal.agnes@gmail.com
‡ michaela.velanova@gmail.com

t / °C	r / %						
	90	80	70	60	50	40	30
35	33	31	29	26	23	19	15
32	31	28	26	23	20	17	12
29	27	26	23	21	18	14	10
27	25	23	21	18	15	12	7
24	22	20	18	16	13	9	5
21	19	17	15	13	10	7	3
18	17	15	13	10	7	4	0
16	14	12	10	7	5	2	
13	11	9	7	4	2	0	
10	8	7	4	2	0		

Tab. 2: Teploty rosného bodu v závislosti od aktuálnej relatívnej vlhkosti a teploty vzduchu

2 Vplyv vlhkosti vzduchu na človeka

Vlhkosť vzduchu vo veľkej miere ovplyvňuje okrem počasia aj náš pocit pohodlia. Fungovanie nášho organizmu závisí okrem iného aj od množstva vodnej pary vo vzduchu, ktorý nás obklopuje.

2.1 Vlhkosť vzduchu a potenie

Vyparovanie vody z povrchu tela *„závisí od rozdielu parciálnych tlakov vodných pár na pokožku a v okolitom vzduchu.“* [Jokl, Malý, 2009] Môže však nastať situácia, že vo vzduchu je príliš veľa vodnej pary, teda vzduch dosahuje veľkú hodnotu relatívnej vlhkosti. Pri takýchto podmienkach sa pot z povrchu tela vyparuje pomalšie, telo sa nedostatočne ochladzuje. Je to nebezpečné pri veľkých horúčavách: nedokážeme sa potiť, čo vedie k poškodeniu organizmu - prichádza k vzniku tepelného úpalu. Kvôli teplotnej rozťažnosti sa vplyvom vysokých teplôt cievy rozširujú. Podľa rovnice kontinuity sa teda zníži rýchlosť toku krvi mozgom, srdcom, pľúcami a obličkami.

To postihuje najmä obyvateľov pralesov. Stretávame sa s tým aj my, napr. počas choroby, keď sa liečime inhaláciou. Z horúcej zmesi sa veľmi rýchlo vyparuje voda, t.j. vzduch medzi zmesou a uterákom sa za krátky čas stane nasýtený vodnou parou. Počas inhalácie na tvári cítime kvapalinu. Nie je to však pot, ale skondenzovaná čistá voda. Pri takej veľkej teplote by sa náš organizmus už mal brániť potením, avšak kvôli vysokej hodnote relatívnej vlhkosti nedokáže - tvár sa nedostatočne ochladzuje a môžu sa prejaviť mierne príznaky tepelného úpalu (bolesť hlavy, únava) ako nežiaduce účinky liečby.

2.2 Vlhkosť vzduchu a pocit pohodlia

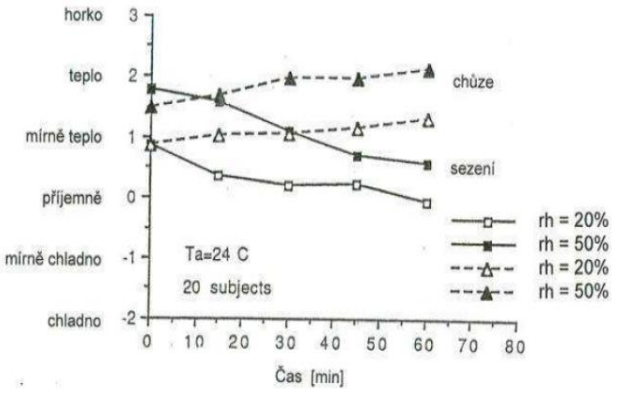
Vlhkosť vzduchu sa podieľa aj na tom, ako vnímame teplotu vzduchu okolo seba, teda aká je pocitová teplota, a ako vnímame kvalitu ovzdušia. Keď vlhkosť vzduchu príliš obmedzí vyparovanie, máme pocit dusna. Čím vyššia je teplota vzduchu, tým menšia relatívna vlhkosť stačí k pocitu dusna (Tab. 3):

t / °C	16	18	20	22	24	26	28	30	32	34
r / %	99	88	78	70	62	56	50	45	40	36

Tab. 3: Závislosť relatívnej vlhkosti od teploty vzduchu, pri ktorých má človek pocit dusna

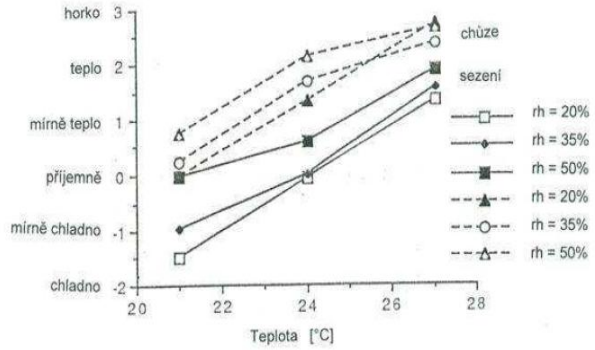
Pokles vlhkosti vzduchu pri danej teplote zvyšuje vyparovanie sa potu a tým aj ochladzovanie sa organizmu, čo prispeje k pocitu čerstvosti.

Na nasledujúcich obrázkoch (Obr. 1 a Obr. 2) sú znázornené výsledky experimentu, počas ktorého bol skúmaný vplyv vlhkosti vzduchu na pocit tepla v závislosti od teploty vzduchu od 20°C do 28°C. Skúmané boli dve skupiny osôb: ľudia z jednej skupiny nepretržite sedeli, ľudia z druhej skupiny sa nepretržite prechádzali v miestnosti počas 60 minút. [Berglund, 1993]



Obr. 1: Tepelné pocity pri nepretržitom sedení alebo chôdzi v 24°C pri relatívnych vlhkostiach 20% a 50%.

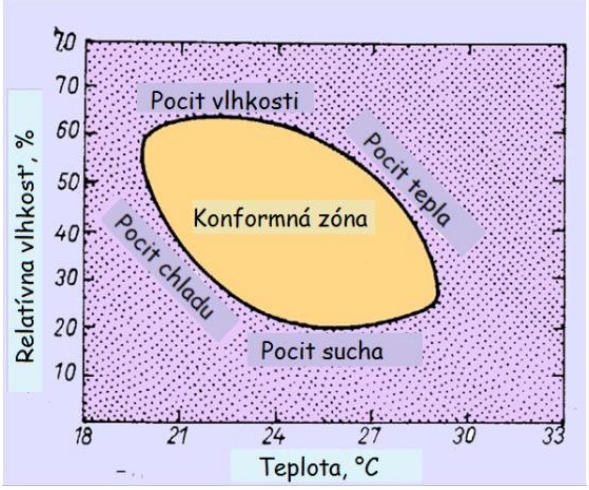
Výsledky znázornené na Obr. 1 jasne poukazujú na to, že pocitové teplo je výrazne väčšie pri vyššej relatívnej vlhkosti nezávisle od toho, či človek chodí alebo sedí v miestnosti. Z hľadiska pohodlia je dôležitý aj výsledok, že pri nepretržitom sedení pocitové teplo klesá a pri nepretržitej chôdzi sa časom zvyšuje.



Obr. 2: Tepelné pocity pri nepretržitom sedení alebo chôdzi v 24°C pri relatívnych vlhkostiach 20% a 50%.

Obr. 2 znázorňuje, že so zvyšujúcou sa teplotou sa zvyšuje aj pocitové teplo. Z grafu vidíme aj to, že relatívna vlhkosť najviac ovplyvnila pocit tepla pri teplote 21°C v prípade, keď subjekty jednu hodinu sedeli. Čím vyššia teplota bola v miestnosti, tým boli pocitové teploty jednotlivých skupín subjektov bližšie k sebe.

Výsledky experimentu potvrdzuje aj Obr. 3:



Obr. 3: Vplyv relatívnej vlhkosti a teploty vzduchu na pocit pohodlia

Graf na obrázku (Obr. 3) demonštruje konformnú zónu človeka v závislosti od teploty a relatívnej vlhkosti vzduchu. Vidíme, že pri 21°C je pre človeka najvhodnejšia relatívna vlhkosť vzduchu medzi 50-60%. Širší interval konformnej zóny máme pri teplotách od 23°C do 26°C. V tomto intervale teplôt pohodlie dosiahneme už aj pri relatívnej vlhkosti vzduchu od 25% do 55%. Pri vyšších teplotách potrebujeme menšie hodnoty relatívnej vlhkosti, aby sme mali pocit pohodlia. V prípade vysokých teplôt a vysokej relatívnej vlhkosti máme pocit horúčavy a dusna. Pri nízkych teplotách a nízkej relatívnej vlhkosti cítime vzduch suchý a chladnejší, ako v skutočnosti je.

2.3 Vlhkosť vzduchu a správna funkcia organizmu

„Sliznica ... pokrýva vnútorné priestory orgánov a ... chráni pred škodlivými vplyvmi prostredia (baktérie, vírusy, toxické látky). Častým produktom sliznice je hlien, ktorý okrem zabránenia vysychania pôsobí antimikrobionálne.“ [Wikipedia, 2013]

V prípade nízkej vlhkosti vzduchu sliznica vysychá, proti čomu sa zdravý organizmus bráni zvýšenou tvorbou hlienu. Pokusmi sa zistilo, že relatívna vlhkosť vzduchu nemá klesnúť pod hodnotu 15%. Pri menšej relatívnej vlhkosti sa koža človeka výrazne vysuší, zvyšuje sa pocit vysušenia očí a ťažko sa dýcha kvôli suchým slizniciam. Dôsledkom suchých očí je zvyšovanie frekvencie žmurkania a problémy s nosením kontaktných šošoviek. Spomenuté faktory majú veľký vplyv na výkonnosť ľudí, preto sú znalosti o vlhkosti dôležité.

Optimálny dolný limit relatívnej vlhkosti vzduchu je 35% v prípade, ak sú v miestnosti antistatické materiály a 40% v ostatných prípadoch (pri nízkej vlhkosti vzduchu výrazne stúpa tvorba statickej elektriny). [Jokl, Malý, 2009]

2.4 Význam vlhkosti vzduchu v praxi

Všetky tieto poznatky sa využívajú pri snahe zvýšiť komfort ľudí pracujúcich v továrňach, kanceláriách, atď. Avšak sú podstatné aj z hľadiska turizmu: zvýšenie pohodlia turistov v rôznych relaxačných centrách, napr. v krytých kúpaliskách. Keďže je tam stále prítomná voda, pravidelná regulácia relatívnej vlhkosti vo vnútri budovy je významná.

Na plavárňach relatívnu vlhkosť udržujú v norme (45% až 60%) tromi spôsobmi:

1. ak relatívna vlhkosť mimo budovy je oveľa menšia ako vo vnútri a teploty mimo i vo vnútri sú približne rovnaké, tak relatívnu vlhkosť vo vnútri znížia vetraním;
2. ak teplota vo vnútri budovy má byť väčšia ako teplota vonku, a relatívna vlhkosť vonku má vysokú hodnotu, tak zohrievaný vonkajší vzduch pustia do vnútra;
3. ak hodnota relatívnej vlhkosti i teploty je vonku aj vo vnútri vysoká, tak pomocou kondenzácie a odstránením skondenzovanej vody znížia množstvo vody vo vzduchu, čiže aj relatívnu vlhkosť vzduchu. V tomto prípade vetranie nie je odporúčané.

Vlhkosť vzduchu na plavárňach závisí aj od počtu návštevníkov. Čím je viac ľudí, tým je vyššia relatívna vlhkosť vzduchu, lebo voda sa vyparuje z väčšieho povrchu (povrch ľudí a podlahy). [Bartal, 2013]

3 Relatívna vlhkosť ako súčasť ŠVP

Nasledujúca aktivita Vlhký vzduch je určená pre študentov 2. ročníka gymnázia. Je zostrojená v súlade so Štátnym vzdelávacím programom fyziky ISCED3, podľa ktorého žiak po zvládnutí obsahu z témy Vyparovanie a kondenzácia. Nasýtené pary. *„pozná využitie informácie o relatívnej vlhkosti vzduchu v miestnosti a vonku.“* [MŠ SR, 2011] K aktivite sú potrebné nasledovné vedomosti a zručnosti:

- časticová stavba látok;
- vyparovanie a kondenzácia;
- zákony ideálneho plynu.

3.1 Aktivita Vlhký vzduch

Nosná myšlienka: **V atmosfére sa nachádza voda**

1. Obsahuje vzduch v atmosfére vodu? Ak áno, v akom skupenstve? Svoju odpoveď zdôvodni.
2. Každému je známy výraz vlhkosť. Vlhké je prádlo po vypraní, drevo po daždi, vlasy po umytí. Môže byť aj vzduch vlhký? Potvrď svoju odpoveď (experimentom alebo iným spôsobom).
3. Formuluj hypotézu o tom, od čoho závisí vlhkosť vzduchu.
4. Pomocou akých fyzikálnych veličín by si charakterizoval vlhkosť vzduchu?
5. Čo znamená podľa teba, že v Dubrovníku má vzduch relatívnu vlhkosť 57% (Obr. 4)? A čo sa stane, ak relatívna vlhkosť vzduchu dosiahne 100%?



Obr. 4: Aktuálne počasie v Dubrovniku dňa 04.02.2013

3.2 Analýza Aktivity Vlhký vzduch

Vyučovacia sekvencia je vedená formou diskusie medzi žiakmi v celej triede, učiteľ usmerňuje diskusiu. Otázky, ktoré sú súčasťou aktivity sme dali 17 žiakom 2. ročníka gymnázia v Dunajskej Strede formou dotazníka. Našim cieľom bolo dozvedieť sa žiacke miskoncepcie. Väčšinou pracovali v malých skupinkách alebo individuálne. V analýze uvedieme niekoľko z ich konkrétnych odpovedí.

1. **Obsahuje vzduch v atmosfére vodu? Ak áno, v akom skupenstve? Svoju odpoveď zdôvodni.**

Očakávame, že väčšina žiakov si nevie predstaviť, ako vzniká dážď alebo hmla. Napriek tomu predpokladáme, že mnoho žiakov odpovie na otázku, či vzduch obsahuje vodu, kladne, ale môžu existovať žiaci, ktorí odpovedia záporne.

Všetci žiaci, ktorí vyplnili nami zadaný dotazník, odpovedali, že vzduch obsahuje vodu, a to v plynnom skupenstve. Jeden žiak spomenul aj kvapalné skupenstvo vo forme dažďa. Zo zdôvodnení svojho presvedčenia o existencii vodnej pary vo vzduchu, ktoré sa vyskytli v ich odpovediach uvedieme tieto:

„Keď je vzduch vlhký, obsahuje vodnú paru (lebo moje vlasy sa skučeravia).“

„Keby neobsahoval vodu, neexistovali by oblaky a ani kolobeh vody.“

„Áno, lebo hmla obsahuje vodu.“

Všetky tieto odpovede sú čiastočne správne, vyvolávajú domnienku, že sa s touto problematikou už stretli (niektorí majú konkrétne skúsenosti a niektorí sa o tom pravdepodobne učili). Inými možnými odpoveďami sú tieto:

- Atmosféra neobsahuje vodu, lebo vzduch má plynné a voda má kvapalné skupenstvo.
- Kvapalné skupenstvo má dážď, plynné majú oblaky a hmla, a tuhé má sneh a krupy.

Prvá odpoveď je chybná, žiak si neuvedomuje, že voda existuje aj v plynnom skupenstve, hoci sa to už učil. Uvedomiť si skutočnosť existencie vodnej pary vo vzduchu nie je jednoduché, takže musíme žiakom pomôcť krok po kroku, aby si to osvojili. Pomocnou otázkou je: kde sa stratí voda pri vyparovaní? Druhá odpoveď je už bližšie k správnej, lenže obsahuje najčastejšiu miskoncepciu žiakov: oblaky a hmla majú plynné skupenstvo [Henriques, 2000]

Správnou odpoveďou na pôvodnú otázku je, že vzduch v atmosfére obsahuje vodu a to vo všetkých troch skupenstvách: vodnú paru nevidíme, ale dôkazom jej existencie je kondenzácia (prejavuje sa ako rosa na oknách), dážď má kvapalné skupenstvo, sneh tuhé a oblaky a hmla môžu existovať v kvapalnom aj v tuhom skupenstve.

2. **Každému je známy výraz vlhkosť. Vlhké je prádlo po vypraní, drevo po daždi, vlasy po umytí. Môže byť aj vzduch vlhký? Potvrď svoju odpoveď (experimentom alebo iným spôsobom).**

Táto otázka nadväzuje na tú predchádzajúcu. Podľa zistených odpovedí žiaci „cítia“, že po daždi je vzduch ťažší, vlhší. Všetci odpovedali, že vzduch môže byť vlhký hlavne po daždi. Jeden žiak

dokonca uviedol kondenzovanie ako dôkaz vlhkosti. Ostatní žiaci dôkaz svojich odpovedí neuviedli. Napriek tomu očakávame, že niektorí žiaci by mohli uvažovať o tom, že vzduch je vlhký iba v oblakoch (alebo v hmle) a mimo nich je suchý (lebo oblaky sú viditeľnými prejavmi vody v atmosfére). Keď sú oblaky už veľmi „vlhké“, začne pršať. Takúto odpoveď by mohli navrhovať ako dôkaz vlhkosti vzduchu v oblakoch. Súčasťou zadania je experimentálny dôkaz tvrdenia. V prípade presvedčenia, že vzduch je mimo oblakov suchý, sa to samozrejme nedá. Uvedieme niekoľko iných konkrétnych žiackych návrhov, respektíve zdôvodnení pre prípad suchého vzduchu:
„*Predmet obklopený vzduchom sa nestane vlhkým, lebo ani vzduch nie je vlhký*.“
„*Vzduch nie je vlhký, lebo necítime vlhkosť*.“

Správna odpoveď: Vzduch je aj mimo oblakov vlhký, niekedy viac, niekedy menej. Suchý vzduch prakticky neexistuje. Uvedieme jeden z možných experimentálnych dôkazov na vlhký vzduch: Ochladiť ľubovoľný predmet v chladničke pod rosný bod a po vybratí na ňom vzniknú kvapky vody. Odkiaľ sú tieto kvapky? Môžu „prísť“ iba zo vzduchu (lebo predmety sa nepotia), takže aj tam, kde nie je oblak, je vo vzduchu vodná para, čiže je vlhký. Žiaci by po takýchto úvahách mohli aj sami navrhnúť nasledujúcu otázku: Od čoho vlastne závisí vlhkosť vzduchu?

3. Sformuluj hypotézu o tom, od čoho závisí vlhkosť vzduchu.

Našim názorom je, že žiaci by navrhli závislosť vlhkosti od množstva vodnej pary vo vzduchu, od výšky (nad hladinou vody), od podnebia, ročných období, tlaku vzduchu. To všetko sú správne odpovede.

Väčšina žiakov, u ktorých sme robili prieskum, napísala, že vlhkosť závisí od:

- množstva zrážok;
- množstva vodnej pary vo vzduchu;
- teploty.

Vyskytli sa aj nasledujúce faktory:

- nadmorská výška;
- tlak vzduchu;
- počasie;
- hmla;
- vietor;
- podnebie.

Všetky odpovede mali formu zoznamu slov.

4. Pomocou akých fyzikálnych veličín by si charakterizoval vlhkosť vzduchu?

Najviac žiakov z nášho prieskumu napísalo % ako fyzikálnu veličinu, ktorá je charakteristikou vlhkosti vzduchu. Ako dôvod napísali:
„*Takto som to videl vo Formule 1*.“ alebo „*Takto ju uvádzajú v predpovediach počasia*.“

Niekoľko žiakov napísalo aj iné fyzikálne veličiny, ako napr.: tlak, teplota, objem, hustota, rýchlosť (bez dôvodu). Jeden žiak uviedol aj fyzikálne veličiny energia a práca, ako dôvod naznačil otázku: „*Čo je účinnejšie pre veterný mlyn: suchý alebo vlhký vzduch?“*

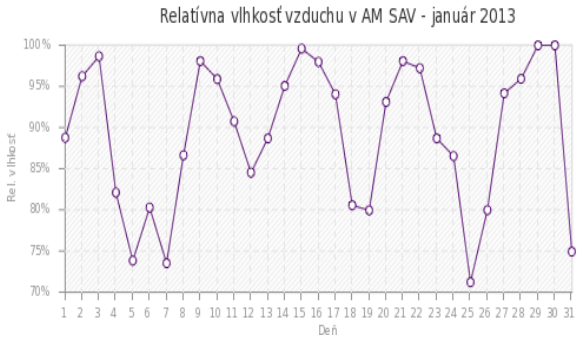
Správna odpoveď: Vlhkosť vzduchu je charakterizovaná množstvom (hmotnosťou alebo objemom) vody v jednotke hmotnosti suchého vzduchu, alebo v jednotke objemu vzduchu, t.j. vlhkosť môžeme nazývať aj „hustota vody vo vzduchu“. Tu by bolo vhodné pomôcť žiakom, aby sami zadefinovali fyzikálnu veličinu absolútna vlhkosť a navrhli jednotku, v ktorej sa meria (takýmto spôsobom navrhnúť aj vzorec na výpočet).

5. Čo znamená podľa teba, že v Dubrovníku má vzduch relatívnu vlhkosť 57% (Obr. 4)? A čo sa stane, ak relatívna vlhkosť vzduchu dosiahne 100%?

Na prvú časť otázky odpovedalo iba pár žiakov, a odpovede zneli takto:
„Ak je tam vlhkosť 57%, tak je tam veľmi dusno.“

Druhá časť otázky vyvolala rozdielne názory. Polovica žiakov si myslela, že 100%-ná relatívna vlhkosť nemôže nastať, lebo by sme sa udusili (vzduch sa premení na vodu). Druhá polovica vedela, že vtedy zvyčajne začne pršať. Tu je niekoľko konkrétnych žiackych odpovedí:
„Čím je vyššia teplota, tým viac sa zvýši aj vlhkosť. Ak dosiahne 100%, vzduch zmizne.“
„Začne pršať a tým sa zníži percentuálny podiel vlhkosti.“

Dôležité je upozorniť žiakov na to, že relatívna vlhkosť nie je tá istá vlhkosť, o ktorej sa bavili predtým. Mali by si všimnúť, že relatívna vlhkosť je udaná v percentách, čo znamená, že vyjadruje nejakú časť z celku. Ako sme očakávali, žiaci odpovedali nasledujúcim spôsobom: 57%-ná a 100%-ná relatívna vlhkosť znamená, že 57% alebo 100% objemu vzduchu je voda. Väčšina žiakov prišlo na to, že to je nezmysel, celkový objem vzduchu nemôže tvoriť voda. Z toho usúdili, že 100%-ná relatívna vlhkosť neexistuje. Ako protiargument učiteľ môže ukázať grafy podobného charakteru (Obr. 5):



Obr. 5: Relatívna vlhkosť vzduchu v Mlyňanoch v januári 2013

Takýmito logickými krokmi môžeme viesť žiakov k tomu, aby si uvedomili, že celok z ktorého 57% je voda, je niečo iné ako celkový objem vzduchu. Ale čo je potom ten celok, ktorého nejaká časť vyjadruje relatívnu vlhkosť?

Nasleduje učiteľove vysvetlenie alebo diskusia so žiakmi o maximálnej absolútnej vlhkosti, ktorú v sebe vzduch dokáže udržať a o relatívnej vlhkosti, čo úzko súvisí s predtým zadefinovanými pojmami. Učiteľ by mal zdôrazniť aj to, že po dosiahnutí 100%-nej relatívnej vlhkosti prebieha vo vzduchu kondenzácia (je to potrebné kvôli tomu, aby žiaci nepoužívali senzor vlhkosti - potrebný k experimentom spomenutých v pracovných listov - v zlom prostredí a aby ho tým nepoškodili). Súvis kondenzácie a 100%-nej relatívnej vlhkosti môže byť tiež výsledkom diskusie s triedou. Diskusiu je vhodné ďalej viesť smerom k tomu, prečo sú dôležité informácie o relatívnej vlhkosti vonku alebo v miestnosti. Učiteľ by mal poukázať na to, že množstvo vody vo vzduchu vo veľkej miere ovplyvňuje naše pohodlie. Takéto úvahy by mohli viesť k otázkam ako napr.:

- Kde sa dýcha ľahšie: v krytom termálnom kúpalisku, alebo vonku na lúke v lete?
- Kedy sa cítia lepšie: v zime, keď už dávno nesnežilo a nepršalo -keď je „sucho“- alebo keď sneží (bez vetra - dávať pozor na to, aby žiaci nedebatovali o teplote).

Žiaci by mali na to prísť, že hlavný prítomný faktor v každej spomenutej situácii je voda alebo neprítomnosť vody, t.j. vlhkosť vzduchu. Po zvládnutí aktivity by žiaci mohli prejsť k otázkam typu Ako?, napr. Ako môžeme zmeniť relatívnu vlhkosť vzduchu? Odporúčame, aby táto otázka bola zodpovedaná na seminároch pre maturantov hlavne kvôli nedostatku času. Odpoveď na otázku by mali žiaci nájsť sami aktívnou činnosťou a pomocou pracovných listov.

4 Pracovné listy

Pracovné listy k ďalším dvom aktivitám sú už nad rámec Štátneho vzdelávacieho programu. „*Definovať absolútnu a relatívnu vlhkosť vzduchu a vysvetliť pojem rosný bod*“ patrí medzi cieľové požiadavky na vedomosti a zručnosti maturantov z fyziky. [MŠ SR, 2011]

V tomto príspevku uvedieme iba znenie úloh obsiahnutých v pracovných listov, skutočné pracovné listy sa nachádzajú v prílohe. (viď Prílohy

4.1 Pracovný list 1

<u>Nosná myšlienka</u>: Relatívnu vlhkosť miestnosti dokážeme zmeniť zmenou teploty

<u>Úloha 1.1</u>:

- Skúmaj, ako spolu súvisí relatívna vlhkosť a teplota vzduchu v danom objeme (v uzavretej a suchej sústave). Navrhni experiment v počítači podporovanom prírodovednom laboratóriu. Jednou z dostupných pomôcok je senzor vlhkosti.
- Formuluj hypotézu o tom, ako spolu súvisia relatívna vlhkosť a teplota vzduchu v uzavretej sústave. Svoju hypotézu zdôvodni.
- Vykonaj experiment.
  Dávaj pozor na to, aby sa vlhkomer nedostal do styku s chemickými výparmi a používaj senzor vo vzduchu, v ktorom neprebieha kondenzácia. Senzor by si nemal používať vo vzduchu, ktorého teplota dosiahne alebo presahuje 70°C.
- Výsledky experimentu potvrdzujú alebo vyvracajú tvoju hypotézu? Vysvetli výsledky merania.

<u>Úloha 1.2:</u>

- Vykonaj experiment ešte raz s tým rozdielom, že v sústave bude niekoľko kvapiek vody.
- Sformuluj hypotézu ohľadom závislosti relatívnej vlhkosti vzduchu od teploty vzduchu v uzavretej sústave s kvapkami vody.
- Potvrdili výsledky experimentu tvoje očakávanie? Vysvetli výsledky merania.

4.2 Analýza Pracovného listu 1

<u>Úloha 1.1</u>:

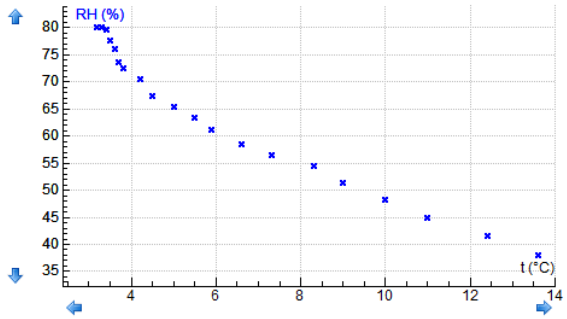
Cieľom tejto úlohy je, aby si žiaci aktívnou poznávacou činnosťou osvojili znalosti o zmene relatívnej vlhkosti vzduchu v závislosti od zmeny teploty vzduchu. Podľa vykonaného experimentu by mali zistiť, že závislosť je nepriamo úmerná a nie je lineárna.

Predpoklady správne vykonaného experimentu:

- suchý a čistý pohár alebo baňka;
- dostatočné tesnenie (aby para z baňky alebo pohára nemohla uniknúť);
- zariadenie na ochladzovanie alebo oteplenie baňky (ľad, rýchlovarná kanvica);
- senzor vlhkosti a teploty;
- MoLab a zručnosti pri práci s MoLabom.

Počas merania musia žiaci dbať na to, aby sa objem uzavretej sústavy príliš nezmenil. Podľa skúsenosti nelinearita skúmanej závislosti sa viac prejaví na teplotnom intervale blízkom teplote rosného bodu.

Hlavná myšlienka, ktorú si majú žiaci odniesť z tohto experimentu je to, ako možno zmeniť relatívnu vlhkosť v nejakej miestnosti zohrievaním alebo ochladzovaním. Výsledkom merania je závislosť relatívnej vlhkosti vzduchu od teploty vzduchu podobného charakteru:



Obr. 6: Výsledok merania relatívnej vlhkosti vzduchu v závislosti od teploty vzduchu v uzavretej sústave

Úloha 1.2:

Zámerom tejto úlohy je vyvolať u žiakov kognitívny konflikt, lebo otepľovaním uzavretej sústavy s kvapkami vody relatívna vlhkosť neklesá, ale zvýši sa. Úlohou žiakov je spojiť predchádzajúce znalosti s novou situáciu a vyvodiť záver, vysvetliť pozorovaný jav.

Predpoklady správne vykonaného experimentu: primerane veľa kvapiek vody v sústave. Experiment nám fungoval s počtom kvapiek, ktoré ostali po vypláchnutí baňky. Pri malom množstve by sme teoreticky nedosiahli zvýšenie relatívnej vlhkosti pri stúpajúcej teplote, pri veľkom množstve by senzor hneď ukazoval hodnotu 100%.

Hlavná myšlienka: vyparovaním vody sa vlhkosť vzduchu zvýši aj napriek zvyšovaniu teploty - množstvo vody v jednotke objemu vzduchu stúpa rýchlejšie ako predpokladaná absolútna vlhkosť nasýteného vzduchu pri stúpajúcej teplote.

4.3 Pracovný list 2

Nosná myšlienka: Množstvo vody vo vzduchu sa dá znížiť

Úloha 2.1:

Pomôcky: jedna kadička, teplomer, ľad, voda

- Zmeraj teplotu a relatívnu vlhkosť v triede a zaznamenaj ich.
- Daj do kadičky vodu s izbovou teplotou. Postupne pridávaj do vody kocky ľadu.
- Aký jav začne prebiehať? Napíš svoje očakávanie.
- Odhadni, pri akej teplote vody v kadičke začne jav prebiehať. Zaznamenaj svoju predpoveď.
- Vykonaj pokus a meraj teplotu vody v kadičke. Zisti teplotu, pri ktorej začne jav prebiehať. Porovnaj očakávanú a nameranú hodnotu teploty.

  Dávaj pozor na to, aby počas merania nikto v triede nevetral a ani dvere neotvoril.
- Vykonaj ešte raz celý experiment pri zmenených počiatočných podmienkach.

Úloha 2.2:

Napíš svoj návrh a zdôvodnenie, ako by si znížil relatívnu vlhkosť v miestnosti na 50% (aby bola pre človeka príjemná) v rôznych prípadoch:

Prípad 1: V miestnosti je 10°C a 90% relatívnej vlhkosti.

Prípad 2: V miestnosti je 35°C a 70% relatívnej vlhkosti.

Pri riešení Úlohy 2.2 môžeš používať Diagram 1.

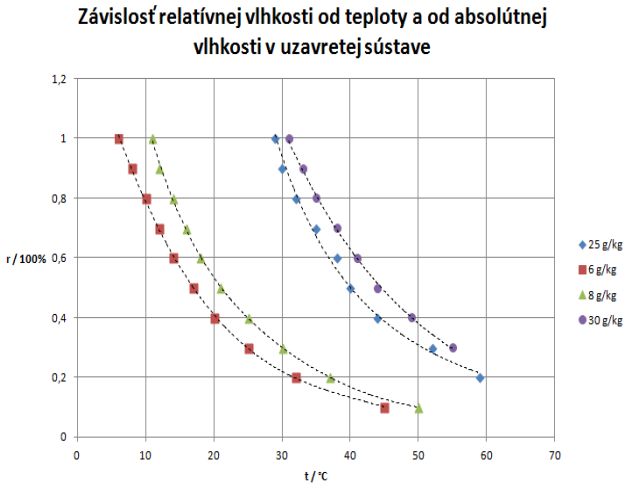


Diagram 1: Závislosť relatívnej vlhkosti od teploty a od absolútnej vlhkosti v uzavretej sústave

4.4 Analýza Pracovného listu 2

Úloha 2.1:

Cieľom úlohy je experimentom určiť rosný bod pri danej teplote a absolútnej vlhkosti, a žiakovo uvedomenie si, že rosný bod existuje a dá sa dosiahnuť. Cieľom druhého experimentu je ukázať, že rosný bod závisí od aktuálneho stavu vzduchu, čiže od aktuálnej teploty a relatívnej vlhkosti.

Predpoklady správne vykonaného experimentu: prichystaná kadička s vodou a dostatok ľadu. Žiaci majú najprv namerať teplotu vody a vzduchu a relatívnu vlhkosť vzduchu v triede. Podľa týchto údajov intuitívne skúsia predpovedať rosný bod, a skúsia to experimentom overiť. Do vody postupne dávajú kocky ľadu a medzitým merajú ustálenú teplotu vody, ktorá je súhlasná s teplotou steny kadičky. Do pracovného listu zaznamenajú očakávanú aj nameranú teplotu, pri ktorej na stene kadičky zvonka vznikli kvapky vody - táto teplota sa nazýva rosný bod.

Úloha 2.2:

Cieľ úlohy: Táto úloha sa opiera o kreativitu žiakov, a dáva spätnú väzbu o zvládnutí tematiky vlhkosti vzduchu. Pomocou tejto úlohy môžeme kontrolovať, do akej miery si žiak osvojil pojmy: absolútna vlhkosť, relatívna vlhkosť a rosný bod, a či má nadhľad nad tematikou. Podľa žiackych odpovedí dostaneme informácie aj o tom, či dokážu osvojené znalosti spojiť. S takýmto problémom,

ktorý je spomenutý v tejto úlohe, sa stretávajú aj údržbári na termálnych kúpaliskách a riešia ho podobným spôsobom (viď sekcia 2.4).

Požiadavky k riešeniu úlohy: Je potrebné, aby žiaci zvládli všetky experimenty pred touto úlohou (obsiahnuté v spomenutých pracovných listov). Predpokladá sa, že žiaci si osvojili vedomosti o zmene relatívnej vlhkosti v závislosti od teploty, o vyparovaní vodnej pary a majú predstavu o tom, že dosiahnutím rosného bodu sa voda skondenzuje, čiže sa zníži množstvo vody obsiahnuté vo vzduchu. Je potrebná aj znalosť toho, ako vplýva vlhkosť vzduchu na správnu funkciu organizmu.

Riešenie úlohy:

Prípad 1: Vyriešenie tohto problému je ľahké, stačí zohriať vzduch v miestnosti na 18-20°C, týmto spôsobom relatívna vlhkosť klesne na 50% a tieto podmienky sú už príjemné pre človeka na základe grafu na Obr. 3.

Prípad 2: Toto je už ťažší problém, lebo zohrievaním by sme znížili relatívnu vlhkosť, ale 40°C už nie je pre človeka príjemná teplota (podľa Diagram 1 sa pri takejto teplote dosiahne relatívna vlhkosť hodnotu 50%). Ochladzovaním vzduchu bude teplota príjemnejšia, avšak relatívna vlhkosť prudko narastá, čoho dôsledkom je pocit dusna. Množstvo vody vo vzduchu musíme znížiť iným spôsobom - odpoveďou je rosný bod. Vzduch máme ochladzovať po teplotu rosného bodu, nechať skondenzovať dostatok vody a odstrániť ju. Dostaneme suchší vzduch, ako sme mali na začiatku, teraz je ho potrebné už iba zohriať na príjemnú teplotu.

Poďakovanie

Chcela by som touto cestou vyjadriť poďakovanie vedúcej práce, Mgr. Michaele Velanovej, za množstvo času, ktoré mi venovala, za jej odborné vedenie, cenné rady, návrhy a trpezlivosť.

Literatúra

[Bartal, 2013] BARTAL, J. 2013. Thermal Corvinus, Promenádna 3221/20, Veľký Meder. Relatívna vlhkosť v kúpalisku. 24. marca 2013. Osobná komunikácia.

[Berglund, 1993] BERGLUND, L.G. 1993. Human responses to humidity. In *Research on Indoor Air Quality and Climate : CIB Proceedings : publication 163.* Rotterdam, 1993. Zdroj: JOKL, M. V., MALÝ, S. 2009. Relativní vlhkost a člověk - nové přípustné limity. In *Josra* [online]. 2009. č. 2. [cit. 13.3.2013]. ISSN 1803-3687.

[Henriques, 2000] HENRIQUES, L. 2000. Children's misconceptions about weather: A review of the literature [online]. [cit. 18.3.2013]. Dostupné na internete: < http://www.csulb.edu/~lhenriqu/NARST2000.htm>.

[Jokl, Malý, 2009] JOKL, M. V., MALÝ, S. 2009. Relativní vlhkost a člověk - nové přípustné limity. In *Josra* [online]. 2009. č. 2. [cit. 13.3.2013]. ISSN 1803-3687. Dostupné na internete: <http://www.bozpinfo.cz/josra/josra-02-2009/jokl_maly-vlhkost-a-clovek.html>.

[Kopáček, Bednář, 2005] KOPÁČEK, J., BEDNÁŘ, J. 2005. Jak vzniká počasí. 1. vyd. Praha : Univerzita Karlova, Nakladatelství Karolinum, 2005. 226 s. ISBN : 80-246-1002-7.

[MŠ SR, 2011] MŠ SR. 2011. Štátny vzdelávací program ISCED 3 [online]. Bratislava. 2011. [cit. 4.2.2013]. Dostupné na internete: <www.minedu.sk>.

[Wikipedia, 2013] WIKIPÉDIA. 2013. *Sliznica* [online]. [cit. 18.3.2013] Dostupné na internete: <http://sk.wikipedia.org/wiki/Sliznica>

Prílohy

Pracovný list 1

<u>Nosná myšlienka</u>: Relatívnu vlhkosť miestnosti dokážeme zmeniť zmenou teploty

<u>Úloha 1.1</u>:

- Skúmaj, ako spolu súvisí relatívna vlhkosť a teplota vzduchu v danom objeme (v uzavretej sústave). Navrhni experiment v počítači podporovanom prírodovednom laboratóriu. Jednou z dostupných pomôcok je senzor vlhkosti.
- Formuluj hypotézu o tom, ako spolu súvisia relatívna vlhkosť a teplota vzduchu v uzavretej sústave. Svoju hypotézu zdôvodni.
- Vykonaj experiment.

 **Dávaj pozor** na to, aby sa vlhkomer nedostal do styku s chemickými výparmi a používaj senzor vo vzduchu, v ktorom neprebieha kondenzácia. Senzor by si nemal používať vo vzduchu, ktorého teplota dosiahne alebo presahuje 70°C.

- Výsledky experimentu potvrdzujú alebo vyvracajú tvoju hypotézu? Vysvetli výsledky merania.

Hypotéza:
Pomôcky:
Postup:

Výsledky a vysvetlenie výsledkov:

Úloha 1.2:

- Vykonaj experiment ešte raz s tým rozdielom, že v sústave bude niekoľko kvapiek vody.
- Sformuluj hypotézu ohľadom závislosti relatívnej vlhkosti vzduchu od teploty vzduchu v uzavretej sústave s kvapkami vody.
- Potvrdili výsledky experimentu tvoje očakávanie? Vysvetli výsledky merania.

Hypotéza:
Pomôcky:
Postup:

Výsledky a vysvetlenie výsledkov:

Pracovný list 2

<u>Nosná myšlienka:</u> Množstvo vody vo vzduchu sa dá znížiť

<u>Úloha 2.1:</u>

Pomôcky: jedna kadička, teplomer, ľad, voda

- Zmeraj teplotu a relatívnu vlhkosť v triede a zaznamenaj ich.
- Daj do kadičky vodu s izbovou teplotou. Postupne pridávaj do vody kocky ľadu.
- Aký jav začne prebiehať? Napíš svoje očakávanie.
- Odhadni, pri akej teplote vody v kadičke začne jav prebiehať. Zaznamenaj svoju predpoveď.
- Vykonaj pokus a meraj teplotu vody v kadičke. Zisti teplotu, pri ktorej začne jav prebiehať. Porovnaj očakávanú a nameranú hodnotu teploty.



Dávaj pozor na to, aby počas merania nikto v triede nevetral a ani dvere neotvoril.

- Vykonaj ešte raz celý experiment pri zmenených počiatočných podmienkach.

Teplota vzduchu v triede: _____

Relatívna vlhkosť vzduchu v triede: _____

Očakávaný jav:

Odhad teploty vody v kadičke, pri ktorej jav začne prebiehať: _____

Nameraná hodnota teploty vody, pri ktorej jav začne prebiehať: _____

Druhé meranie:

Teplota vzduchu pri zmenených počiatočných podmienkach: _____

Relatívna vlhkosť vzduchu pri zmenených počiatočných podmienkach: _____

Odhad teploty vody v kadičke, pri ktorej jav začne prebiehať: _____

Nameraná hodnota teploty vody, pri ktorej jav začne prebiehať: _____

Úloha 2.2:

- Napíš svoj návrh a zdôvodnenie, ako by si znížil relatívnu vlhkosť v miestnosti na 50% (aby bola pre človeka príjemná) v rôznych prípadoch:

  Prípad 1: V miestnosti je 10°C a 90% relatívnej vlhkosti.

  Prípad 2: V miestnosti je 35°C a 70% relatívnej vlhkosti.

Pri riešení Úlohy 2.2 môžeš používať Diagram 1.

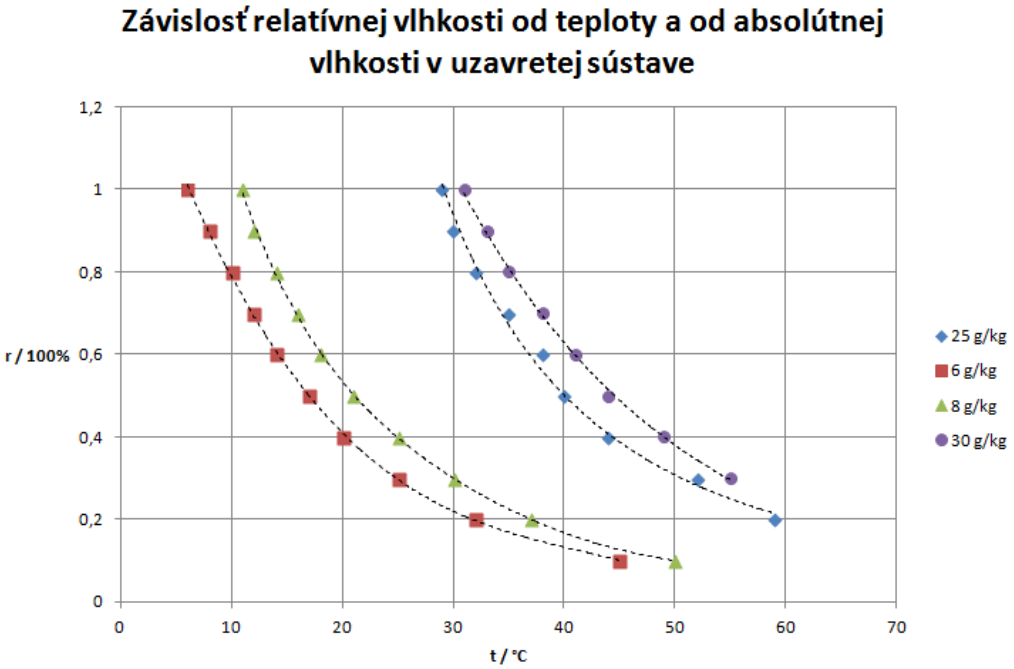


Diagram 1: Závislosť relatívnej vlhkosti od teploty a od absolútnej vlhkosti v uzavretej sústave

Návrh pre prípad 1:

Návrh pre prípad 2:

Experimenty so vzduchom a héliom plnenými balónmi

Jozef Bašista[1]
Školiteľ: Zuzana Ješková[2]

Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Ústav fyzikálnych vied, Oddelenie didaktiky fyziky, Park Angelinum 9, 041 54 Košice, Slovenská republika

Abstrakt

Balón je jednoduchý, ľahko dostupný predmet, s ktorým sa už každý z nás stretol ako dieťa, avšak jeho využitie je oveľa väčšie. Svojím charakterom, ktorý vyplýva z vlastností samotného materiálu balóna a tiež z vlastností súvisiacich s plynom obsiahnutým v balóne, umožňuje realizovať experimenty z rozličných oblastí fyziky. Vo svojej práci som skúmal využitie balóna pri rôznych experimentoch z fyziky a na ich základe som pripravil sériu siedmych m[1]eraní a to meranie deformácie latexového pásika, meranie závislosti tlaku stien od polomeru gumeného balóna, meranie molárnej hmotnosti plynu v balóne, videoanalýza pretekov balónov v horizontálnom smere, meranie zvislého pohybu teplovzdušného a héliového balóna, meranie odporovej sily vzduchu pôsobiacej na padajúcu loptu a balón, meranie vplyvu Magnusovej sily na rotujúci balón a jedného demonštračného experimentu pod názvom Héliový balón v neinerciálnej vzťažnej sústave. Pre každé meranie som pripravil pracovný list s úlohou merania, fyzikálnym princípom, postupom merania, analýzou merania, vzorovými výsledkami, návrhom na ďalšie využitie merania vo vyučovaní a aktivitou vytvorenou v systéme COACH. Navrhnutú laboratórnu úlohu Meranie molárnej hmotnosti plynu v balóne som overil vo výučbe predmetu Fyzikálne meranie podporované počítačom v 2.ročníku medziodborového štúdia s fyzikou na PF UPJŠ v Košiciach. Experimenty sú určené pre stredné a vysoké školy ako námety na laboratórne cvičenia.

Kľúčové slová: fyzikálny experiment, balón, tlak

1 Balón vo vyučovaní fyziky

Pod pojmom balón si každý z nás predstaví obľúbenú, jednoduchú, lacnú a dostupnú hračku z detských čias, s ktorou sa rád hrával, vyhadzoval do vzduchu a pritom pozoroval, ako pomaly klesá naspäť k zemi, alebo v druhom prípade po uvoľnení balóna zo šnúrky pozoroval, ako pomaly nenávratne stúpa k oblakom. Už vtedy sme si kládli otázky, prečo sa balón správa raz tak a raz inak. Dnes už vieme, že balón, ako predmet rôzneho tvaru, vyrobený z gumy alebo latexu či papiera, prípadne rôznych textílií obklopujúci alebo uzatvárajúci istý objem daného plynu, robí z neho predmet, ktorý má veľmi veľa zaujímavých vlastností a využití nielen v bežnom živote, ale aj vo vyučovaní fyziky. Svojím charakterom, ktorý vyplýva z vlastností samotného materiálu balóna a tiež z vlastností súvisiacich s plynom obsiahnutým v balóne, umožňuje realizovať experimenty z rozličných oblastí fyziky.

Samotný materiál, z ktorého je balón vyrobený predstavuje pružnú gumu, ktorá je vhodná na demonštráciu javov **deformácie**. Použitím pružného pásika vystrihnutého z balóna, umožňuje pri jeho napínaní zobraziť závislosť deformačnej sily pôsobiacej na gumu alebo latex od jeho relatívneho predĺženia, ktorá kopíruje tvar krivky deformácie a na ktorej môžeme ukázať oblasti rôznych deformácii pružného materiálu. Zo závislosti deformačnej sily od relatívneho predĺženia pre pásiky z rôznych balónov vyrobených z rozličných materiálov, tiež možno určiť, ktorý balón je možné nafúknuť na väčší objem.

Pri nafukovaní balóna sa materiál deformuje a vznikajúce pružné sily (v smere tangenciálnom k povrchu balóna), ktoré sa snažia balón stiahnuť a majú za následok vznik **dodatočného tlaku** vyplývajúceho zo zakrivenia materiálu balóna. Pri nafukovaní balóna tiež môžeme vidieť nezvyčajné správanie tlaku plynu v balóne, ktoré nerastie lineárne ako by sme predpokladali. Dôkazom tohto nezvyčajného správania sa tlaku v balóne je to, že na začiatku pri prvom fúknutí musíme ústami vytvoriť o niečo vyšší tlak ako pri ďalších fúknutiach do balóna. Aj za týmto javom sa skrýva vlastnosť materiálu z ktorého je balón vyrobený a tak tlakom svojich stien ovplyvňuje tlak plynu vo vnútri balóna. Závislosť tlaku stien balóna môžeme určiť meraním tlaku plynu v balóne a jeho polomeru, pri postupnom vypúšťaní plynu z balóna až na jeho začiatočnú veľkosť. Aj takouto závislosťou, môžeme porovnať balóny z rôznych materiálov, alebo úplne nový a niekoľkokrát nafúknutý balón z rovnakého materiálu.

Keďže pri nafúknutí balóna je v jeho vnútri obsiahnutý nejaký plyn (či už vzduch alebo napr. hélium), môžeme nafúknutý balón využiť aj pri výučbe zákonitostí správania sa ideálneho plynu. Uzavretím plynu do guľatého balóna, môžeme určiť jeho objem, merať jeho tlak a teplotu a z týchto veličín použitím stavovej rovnice taktiež veľmi presne odhadnúť napr. počet mólov plynu, ktorý

1 jozbas@gmail.com
2. zuzana.jeskova@upjs.sk

sme do balóna uzavreli. Pomocou balóna nafúknutého plynom (vzduchom, héliom, oxidom uhličitým) môžeme tiež demonštrovať efekt difúzie. Kým v prípade vzduchom plneného balóna je hustota vzduchu vnútri a mimo balóna približne rovnaká, v prípade héliom plneného balóna je hustota hélia vnútri a mimo balóna výrazne odlišná. To spôsobí difúziu hélia z balóna von, čo znamená, že héliom plnený balón pomerne rýchlo spľasne aj vďaka veľkosti svojich atómov, ktoré sú dostatočne malé, aby sa zmestili do otvorov v materiáli balóna, na rozdiel od vzduchom plneného, ktorý vydrží v pôvodnej veľkosti aj niekoľko dní.

Tak ako na všetky predmety ponorené do tekutiny, aj na balón pôsobí podľa Archimedovho zákona vztlaková sila, ktorej veľkosť určením objemu balóna a hustoty tekutiny jeho v okolí vieme tiež veľmi rýchlo určiť.

Nafúknutý balón sa vo vzduchu **pohybuje** v závislosti od hustoty plynu uzavretého v balóne nahor alebo nadol. Tento pohyb môžeme analyzovať z kinematického a dynamického hľadiska uplatnením zákonov dynamiky.

Pri rotácii balóna môžeme zase pozorovať existenciu Magnusovej sily a jej vplyv na tvar trajektórie pohybu balóna.

Pri nafúknutí balóna jeho následnom uvoľnení sústava balón- unikajúci plyn demonštruje platnosť zákona akcie a reakcie, resp. zákona zachovania hybnosti.

Pri umiestnení balóna do sústavy, ktorá sa pohybuje (auto, vlak, a pod.), môžeme v prípade neinerciálnej sústavy (sústava sa rozbieha, brzdí alebo zatáča) sledovať existenciu zotrvačných síl. V prípade héliom plneného balóna pozorujeme opačný efekt pôsobenia **zotrvačnej sily** ako v štandardných situáciách.

Spojením stavovej rovnice a aplikácie Archimedovho zákona a zákonov dynamiky, môžeme taktiež veľmi jednoducho určiť hmotnosť plynu v balóne a dokonca aj jeho molárnu hmotnosť, ktorá je porovnateľná s tabuľkovou hodnotou.

2 Experimenty s balónmi

2.1 Videoanalýza pretekov balónov v horizontálnom smere

Preteky balónov naplnených plynom v horizontálnom smere priamo demonštrujú zákon akcie a reakcie tak, že pretlak plynu v balóne sa po uvoľnení otvoru snaží vyrovnať s tlakom okolia čím prudko vytláča plyn cez otvor balóna a tak uvádza balón do pohybu opačným smerom ako je to zobrazené na obr.1.



Obr.1:Preteky balónov v horizontálnom smere

Na základe zákona akcie a reakcie je dosiahnutá rýchlosť balóna určená rýchlosťou vytlačenia objemu plynu otvorom balóna. Použitím vzduchom a héliom plneného balóna je potrebné sa zamyslieť, ktorý z balónov sa vyprázdni skôr a tým aj skôr dosiahne väčšiu rýchlosť.

Ak uvažujeme dva identické balóny (tzn. rovnako použité alebo nepoužité) naplnené rovnakým objemom vzduchu a hélia, tak pretlak vo vnútri balónov je rovnaký vzhľadom k tlaku gumených stien balóna. Po uvoľnení balóna v dôsledku tlakového rozdielu, tlaková sila vytláča plyn z balóna a keďže je hmotnosť hélia približne sedemkrát menšia ako vzduchu, tak héliom naplnený balón sa vyprázdni skôr ako balón naplnený vzduchom. Preto héliom plnený balón je rýchlejší na kratšej vzdialenosti, avšak vzduchom plnený balón doletí ďalej.

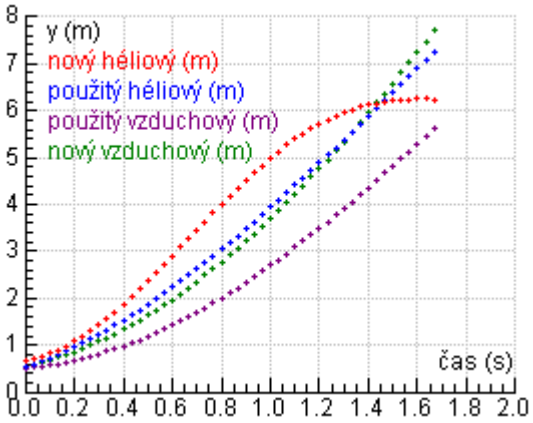
Ak uvažujeme dva identické balóny, ale jeden z nich je nový (tzn. ešte nebol použitý), tak musíme vziať do úvahy , že nový balón nenafúkame na rovnaký objem ako balón, ktorý už bol použitý a taktiež tlak gumených stien nového balóna v dôsledku pružnej deformácie, môže dopomôcť k rýchlejšiemu vyprázdneniu balóna, ako pri niekoľkokrát nafúknutom balóne, kde je tento tlak už podstatne menší.

Pri pretekoch balónov v horizontálnom smere, kedy sú balóny upevnené prostredníctvom krúžkov k silonu, je výsledná sila vo vertikálnom smere nulová (tiažová, vztlaková sila a sila reakcie závesu sú v rovnováhe). V horizontálnom smere pôsobia na balón, ktorého hmotnosť sa počas pohybu mení, reakčná sila v smere pohybu a proti smeru pohybu trecia sila medzi krúžkom a silonom, na ktorom je balón uchytený a aerodynamická odporová sila. Ak zoberieme do úvahy, že balóny sú podlhovastého približne aerodynamického tvaru, ktoré sa po uvoľnení zmenšujú, tak môžeme zanedbať aj aerodynamickú odporovú silu vzduchu pôsobiacu proti smeru pohybu balóna.

Výsledky videomerania:

V tejto videoanalýze pohybu balónov sme určili závislosť polohy balónov od času a následným vyhladením a derivovaním tejto závislosti sme určili závislosť rýchlosti balóna od času. Získané závislosti sme navzájom porovnali a určili poradie balónov v pretekoch v rôznych kategóriách.

Grafy závislostí polohy balónov od času v pretekoch sú zobrazené na obr.2.



Obr.1b): Grafy závislostí polohy balónov od času pre určenie najvyššej dosiahnutej rýchlosti v pretekoch

Poznámka:

Videoanalýza pohybu balóna je nenáročné meranie, ktoré si každý študent môže za pomoci obyčajnej kamery vyskúšať aj sám doma. Skúmaním rôznych balónov a ich vylepšení počas letu, môže so svojím balónom inšpirovať aj ostatných študentov, aby skúmali pohyb svojho balóna a tak dosiahli lepšie časy. Pretekmi balónov sa tak medzi študentmi prirodzene vytvorí súťaživá atmosféra a spoločné vylepšenia balónov môžu priniesť ešte nejaké zaujímavé výsledky.

2.2 Héliom plnený balón v neinerciálnej vzťažnej sústave

Každý z nás už isto pri cestovaní v aute, autobuse, električke či vlaku pocítil vplyv síl pôsobiacich na naše telo súvisiacich s rozbiehaním či zmenou smeru alebo náhlym a nepríjemným zabrzdením dopravného prostriedku. Jednoduchým experimentom, pri ktorom použijeme vzduchom naplnený balón (ktorý predstavuje naše telo), ktorý je umiestnený v neinerciálnej vzťažnej sústave (tzn. sústave ktorej zrýchlenie je nenulové, napr.: v rozbiehajúcom aute), môžeme vidieť a na základe vlastnej skúsenosti z cestovania aj ihneď povedať, ako sa bude balón naplnený vzduchom správať pri rozbiehaní, brzdení či zmene smeru auta.

Ak však v tomto experimente nahradíme vzduchový balón balónom naplneným héliom, bude jeho pohyb v rozbiehajúcom sa aute rovnaký, ako pohyb vzduchom plneného balóna?

Vysvetlenie pohybu héliového balóna ilustrujeme na príklade rozbiehajúceho sa auta (tzn. neinerciálnej vzťažnej sústavy), v ktorom je na zadnom sedadle na šnúrke upevnený héliový balón tak, aby sa mohol nakláňať všetkými smermi.

Pri rozbiehaní auta vzduch obsiahnutý v aute nie je v pokoji, ale zrýchľuje spolu s autom. Tento pohyb vzduchu, ktorý je rovnaký so smerom, akým sa vychýlil aj vzduchom naplnený balón v prvom prípade, spôsobuje zmenu tlaku vzduchu v aute, ktorý narastá v smere od čelného skla k zadnému. V dôsledku toho, že sila pôsobiaca na vzduch nachádzajúci sa bližšie k zadnej časti auta je väčšia ako sila pôsobiaca na vzduch v prednej časti auta a toho, že hustota vzduchu v aute je väčšia ako hustota hélia v balóne, tak sa héliový balón pohne v smere zrýchľujúceho sa auta, (obr.1a)



Obr.1a): Héliový balón umiestnený v rozbiehajúcom sa aute.

V rozbiehajúcom aute sa v horizontálnom smere vytvoria pre héliový balón podobné tlakové podmienky ako vo voľnom priestore pre balón stúpajúci vo vertikálnom smere a preto sa héliový balón v umiestnený v rozbiehajúcom aute prirodzene posunie dopredu.

Pri brzdení auta nastáva opačná situácia, kedy tlak vzduchu v aute narastá v smere od zadného skla k čelnému a v dôsledku toho sa héliový balón pohne smerom dozadu (obr.1b), opačným smerom ako vzduchom naplnený balón v prvom prípade.



Obr.1b) Héliový balón umiestnený v brzdiacom aute.

V laboratórnych podmienkach môžeme experiment s héliovým balónom realizovať tak, že ho umiestnime do veľkej nádoby, ktorou budeme pohybovať so zrýchlením v horizontálnom smere.

Poznámka:

Tento demonštračný experiment upevneného héliového balóna v neinerciálnej vzťažnej sústave je vhodné použiť aj pri pohybe neinerciálnej vzťažnej sústavy po zakrivenej trajektórii, kedy zavádzame fiktívnu silu nazývanú aj ako odstredivá sila. Táto sila je často študentmi nepochopená a podľa názvu "odstredivá sila" ich vedie k chybnému záveru, že sila musí vždy smerovať od stredu zakrivenia trajektórie smerom von. Väčšina študentov sa pred týmto experimentom zhodne, že héliový balón sa pohne smerom od stredu zakrivenia trajektórie k vonkajšej strane, tak ako sa nakloní cestujúci pod vplyvom odstredivej sily v aute, ktoré prechádza zákrutou.

S autom pohybujúcim sa po zakrivenej trajektórii sa otáča aj vzduch obsiahnutý v aute. Tento pohyb spôsobuje, že tlak vzduchu v aute rastie so vzdialenosťou od osi rotácie. V dôsledku toho, sila pôsobiaca na vzduch v aute bližšie k vonkajšej časti trajektórie je väčšia ako sila pôsobiaca na vzduch bližšie k osi rotácie a toho, že hustota vzduchu v aute je väčšia ako hustota hélia v balóne, tak fiktívna sila smeruje k osi rotácie a héliový balón sa pod jej vplyvom tiež nakloní k osi rotácie.

V laboratórnych podmienkach vieme vytvoriť podobné podmienky pre héliový a súčasne vzduchom plnený balón, aké sú v aute pohybujúcom sa po zakrivenej trajektórii tak, že do veľkého priesvitného guľatého balóna umiestnime menší héliový a vzduchom plnený balón tak, aby mali dostatok miesta k pohybu. Potom guľatý balón uviažeme na dlhšiu niť a roztočíme. Héliom plnený balón sa posunie k osi rotácie (ako je to zobrazené na obr.2) a vzduchom plnený balón sa posunie k vonkajšiemu okraju zakrivenej trajektórie guľového balóna.



Obr.2: Héliom plnený balón vložený do guľatého vzduchom plneného balóna, pohybujúcom sa po zakrivenej trajektórii.

Na tejto jednoduchej demonštrácii môžu študenti vidieť, že aj odstredivá sila paradoxne môže v niektorých prípadoch smerovať do stredu zakrivenej trajektórie.

2.3 Meranie molárnej hmotnosti plynu v balóne

Meranie molárnej hmotnosti plynu budeme realizovať využitím latexového balóna, ktorého vlastnosti sú ideálne aj pre takéto meranie. Jednoduchým spojením Archimedovho zákona, stavovej rovnice ideálneho plynu a Newtonových pohybových zákonov môžeme dosiahnuť veľmi dobrý odhad, porovnateľný s tabuľkovou hodnotou.

Pre plynom plnený balón sa za normálnych podmienok (t.j. pri normálnom tlaku a izbovej teplote) dá z teploty, tlaku a objemu balóna na základe platnosti stavovej rovnice ideálneho plynu určiť počet mólov plynu:

$$n_{plyn} = \frac{p_{balon} V_{balon}}{R T_{lab}} \quad (1)$$

kde p_{balon} je tlak plynu v balóne, V_{balon} je objem balóna, R = 8,3145 J/mol.K je univerzálna plynová konštanta a T_{lab} je teplota okolitého vzduchu v laboratóriu ale aj teplota plynu v balóne, ktorý je v rovnovážnom stave s okolím.

Za predpokladu, že hustota plynu v balóne je menšia ako okolitého vzduchu, na balón pôsobí vztlaková sila F_{vz}, ktorá je väčšia ako tiažová sila pôsobiaca na sústavu balón a uzavretý plyn. Veľkosť vztlakovej sily závisí podľa Archimedovho zákona od hustoty okolitého vzduchu a objemu vzduchu vytlačeného objemom balóna naplneného plynom, čo môžeme vyjadriť vzťahom:

$$F_{vz} = \rho_{vzduch} g V_{balon} \quad (2)$$

kde F_{vz} je vztlaková sila pôsobiaca na balón, ρ_{vzduch} je hustota okolitého vzduchu, g = 9,81 m/s^2 je gravitačné zrýchlenie a V_{balon} je objem balóna. Ak vzduch považujeme za ideálny plyn, pre jeho hustotu môžeme zo stavovej rovnice písať:

$$\rho_{vzduch} = M_{m(vzduch)} \left(\frac{p_{lab}}{R T_{lab}} \right) \quad (3)$$

kde M_{m}(vzduch) je molárna hmotnosť vzduchu a p_{lab} je tlak vzduchu v laboratóriu.

Potom pre veľkosť vztlakovej sily platí:

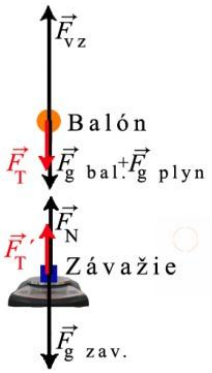
$$F_{vz} = M_{m(vzduch)} \left(\frac{p_{lab}}{R T_{lab}} \right) g V_{balon} \quad (4)$$

Aby sme zamedzili stúpaniu balóna, na balón pripevníme malé závažie, ktoré spôsobí jeho klesanie a umožní tak meranie hmotnosti balóna naplneného plynom na digitálnej váhe (obr.1a).



Obr.1a): Sústava nafúknutý balón – závažie na digitálnej váhe

Vektorové pôsobenie síl na sústavu nafúknutý balón- závažie- digitálne váhy je zobrazené na obr.1b).



Obr.1b): Zobrazenie vektorového pôsobenia síl na sústavu balón - závažie s popisom síl.Overenie vo vyučovaní

$\vec{F}_{vz}$ –vztlaková sila pôsobiaca na balón s plynom

$\vec{F}_{g\ plyn.}$ – tiažová sila pôsobiaca na plyn v balóne

$\vec{F}_t$– sila, ktorou pôsobí závažie na balón

$\vec{F}'_t$– sila, ktorou pôsobí balón na závažie

$\vec{F}_{g\ bal.}$ – tiažová sila pôsobiaca na balón

$\vec{F}_{gzav.}$ – tiažová sila pôsobiaca na závažie

$\vec{F}_N$ – sila, ktorou pôsobí sila na závažie

Ak je sústava balón – závažie umiestnená na váhach v pokoji, na základe prvého, resp. druhého Newtonovho zákona pre výslednú silu $\boldsymbol{F}_v$ pôsobiacu na sústavu balón - závažie platí:

$$\vec{F}_v = \vec{F}_{vz} + \vec{F}_{g\ bal.} + \vec{F}_{g\ plyn} + \\ +\vec{F}_T + \vec{F}_T{}' + \vec{F}_N + \vec{F}_{g\ zav.} = \vec{0} \quad (5)$$

pričom pre veľkosť výslednej sily F_v potom platí:

$$F_v = F_{vz} - m_{balon}g - m_{plyn}g - F_T + \\ +F_T{}' + F_N - m_{zav.}g = 0\ N \quad (6)$$

kde m_{balon} je hmotnosť samotného balóna pred nafúknutím, m_{plyn} je hmotnosť uzavretého plynu v balóne, $m_{zav.}$ je hmotnosť pripojeného závažia (tzn. hmotnosť ventilu, lepiacej pásky a pripojeného závažia).

Využitím tretieho Newtonovho zákona, že veľkosti vzájomne pôsobiacich síl F_T a $F_T{}'$ medzi balónom a pripojeným závažím sú rovnako veľké a opačného smeru, úpravou rovnice (6) dostávame vzťah:

$$F_{vz} - m_{balon}g - m_{plyn}g + F_N - m_{zav.}g = 0 \quad (7)$$

a následným vyjadrením hmotnosti plynu dostávame vzťah:

$$m_{plyn} = \frac{F_{vz} - m_{balon}g + F_N - m_{zav.}g}{g} \quad (8)$$

pričom dosadením za F_{vz} podľa vzťahu (4) a malou úpravou dostávame:

$$m_{plyn} = M_{m(vzduch)}\left(\frac{p_{lab}}{RT_{lab}}\right)V_{balon} - \\ -\boldsymbol{m_{balon}} + \frac{\boldsymbol{F_N}}{\boldsymbol{g}} - \boldsymbol{m_{zav.}} \quad (\mathbf{9})$$

kde F_N/g je hmotnosť celej sústavy zobrazená na displeji digitálnej váhy.

Molárnu hmotnosť plynu M_m(plyn) potom môžeme určiť ako podiel hmotnosti plynu m_{plyn} a počtu mólov plynu n_{plyn}:

$$M_{m(plyn)} = \frac{m_{plyn}}{n_{plyn}} = \\ = \frac{M_{m(vzduch)}\left(\frac{P_{lab}}{RT_{lab}}\right)V_{balon} - m_{balon} + \frac{F_N}{g} - m_{zav.}}{n_{plyn}} \quad (10)$$

čo po dosadení vzťahu (1) pre n_{plyn} roznásobením a úpravou dostávame výsledný vzťah:

$$M_{m(plyn)} = M_{m(vzduch)}\left(\frac{p_{lab}}{p_{balon}}\right) + \\ +\left(\frac{F_N}{g} - m_{balon} - m_{zav.}\right)\frac{RT_{lab}}{p_{balon}V_{balon}} \quad (11)$$

K určeniu molárnej hmotnosti vzduchu M_m(vzduch) ako plynu, ktorého molárnu hmotnosť chceme určiť, je lepšie vynásobením oboch strán rovnice vzťahu (10) počtom mólov plynu (tj. n_{plyn}) upraviť rovnicu na tvar:

$$M_{m(plyn)}n_{plyn} - M_{m(vzduch)}\left(\frac{p_{lab}}{RT_{lab}}\right)V_{balon} = \\ = \frac{F_N}{g} - m_{balon} - m_{zav.} \quad (12)$$

kde M_m(plyn) je rovný M_m(vzduch).

Dosadením vzťahu (1) za n_{plyn} a úpravou pravej strany rovnice do tvaru:

$$M_{m(vzduch)}(p_{balon} - p_{lab})\frac{V_{balon}}{RT_{lab}} = \\ = \frac{F_N}{g} - m_{balon} - m_{zav.} \quad (13)$$

odkiaľ vyjadrením M_m(vzduch) dostávame výsledný tvar pre výpočet molárnej hmotnosti vzduchu:

$$M_{m(vzduch)} = \frac{\frac{F_N}{g} - m_{balon} - m_{zav.}}{(p_{balon} - p_{lab})\frac{V_{balon}}{RT_{lab}}} \quad (14)$$

Pri konečnom výpočte molárnej hmotnosti plynu v balóne sa hodnota získaná experimentom môže od tabuľkovej hodnoty líšiť aj o niekoľko percent a nemusí to byť spôsobené zlým postupom merania,

ale tým, že v balóne nie je 100% zastúpenie skúmaného plynu, ale zmes plynu a vzduchu.

Potom pre dva zmiešané plyny (t.j. hélium a vzduch), molárnu hmotnosť plynu zo vzťahu (10) možno zapísať aj v tvare:

$$M_{m(plyn)} = \frac{m_{plyn}}{n_{plyn}} = \frac{m_{He} + m_{vzduch}}{n_{plyn}} = \frac{M_{m(He)}n_{He} + M_{m(vzduch)}n_{vzduch}}{n_{plyn}} =$$

$$= M_{m(He)}\left(\frac{n_{He}}{n_{plyn}}\right) + M_{m(vzduch)}\left(\frac{n_{vzduch}}{n_{plyn}}\right) \quad (15)$$

kde n_{plyn} je počet mólov zmiešaných plynov (tj. $n_{plyn} = n_{He} + n_{vzduch}$), n_{He} a n_{vzduch} sú množstvá mólov každého zo zmiešaných plynov, M_m(He) a M_m(vzduch) sú ich molárne hmotnosti. Využitím vzťahu $n_{vzduch} = n_{plyn} - n_{He}$ a jeho doplnením do vzťahu (15) a malou úpravou dostávame tvar:

$$M_{m(plyn)} = M_{m(vzduch)} + \\ +(M_{m(He)} - M_{m(vzduch)})\left(\frac{n_{He}}{n_{plyn}}\right) \quad (16)$$

Percentuálne zastúpenie hélia f_{He}, ktoré je dané podielom n_{He}/n_{plyn} a jeho vyjadrením zo vzťahu (16) dostávame výsledný tvar:

$$f_{He} = \left(\frac{n_{He}}{n_{plyn}}\right) = \frac{M_{m(plyn)} - M_{m(vzduch)}}{M_{m(He)} - M_{m(vzduch)}} \quad (17)$$

kde M_m(He) = 0,004003 kg/ mol a M_m(vzduch) = 0,02897 kg/mol sú tabuľkové hodnoty.

Výsledky merania:

Meraním pri ktorom sme experimentálne určili molárnu hmotnosť vzduchu a hélia, sme dosiahli výsledky veľmi blízke tabuľkovým hodnotám. Percentuálne zastúpenie hélia v balóne je v intervale, ktorý výrobca udáva na 98% a viac. Výsledky, ktoré sme získali sú zapísané v Tab.1.

Tab.1: Tabuľka výsledkov merania molárnej hmotnosti vzduchu.

$M_{m(vzduch)}$	**0,02883 ± 0,00158**	**kg/mol**
	28,83 ± 1,58	g/mol

Tabuľka výsledkov merania molárnej hmotnosti hélia a jeho percentuálne zastúpenie v balóne.

$M_{m(He)}$	**0,00442 ± 0,00045**	**kg/mol**
	4,42 ± 0,45	g/mol
f_{He}	**98,3**	**%**

Poznámka:

Experimentálne určenie molárnej hmotnosti plynu je jednoduché meranie, ktoré využitím Archimedovho zákona, stavovej rovnice ideálneho plynu a Newtonových pohybových zákonov, pomocou jednoduchých a dostupných pomôcok, dáva možnosť experimentálne určiť nielen molárnu hmotnosť hélia a vzduchu, ale aj akéhokoľvek plynu, ktorého tabuľková molárna hmotnosť je väčšia ako hmotnosť vzduchu.

3 Overenie vo vyučovaní

3.1 Meranie mólovej hmotnosti plynu vo vyučovaní

V rámci výučby predmetu Počítačom podporované fyzikálne merania na ÚFV PF UPJŠ, som realizoval so študentmi 2. ročníka bakalárskeho štúdia aktivity Meranie molárnej hmotnosti plynu v balóne (tj. hélia a vzduchu). Cvičenie sa uskutočnilo dňa 13.3.2013.

Týždeň pred meraním v rámci prípravy študenti dostali pracovný list s teóriou a postupom merania, ktoré bolo pre toto meranie pripravené.

Na začiatku cvičenia sme v spoločnej diskusii so študentmi sformulovali úlohu merania a zopakovali fyzikálne zákony, ktoré sa v meraní využívajú. Za pomoci študentov sme dospeli k výslednému vzťahu pre určenie experimentálnej molárnej hmotnosti plynu a následne sme predstavili spôsoby merania veličín, ktoré budú merať. Taktiež sme študentov upozornili na možné chyby, ktorých sa môžu pri meraní dopustiť, keďže meranie je veľmi citlivé na vonkajšie podmienky.



Obr.1: Oboznámenie študentov s teóriou a príprava na meranie

Študenti využitím príslušného postupu merania, najprv experimentálne určili molárnu hmotnosť vzduchu a potom podobným postupom aj molárnu hmotnosť hélia. Počas merania študenti prakticky vyskúšali meranie tlaku v balóne, atmosférického tlaku pomocou tlakových senzorov, meranie teploty v miestnosti pomocou teplotného senzora, meranie obvodu pomocou krajčírskeho metra, následný výpočet objemu balóna a hmotnosť prázdneho balóna a balóna naplneného plynom.



Obr.2: Práca študentov pri nafukovaní balónov

V závere merania som so študentmi porovnal výsledky ,ktoré pri meraní získali s tabuľkovými hodnotami a v prípade héliom plneného balóna sme diskutovali o odchýlkach experimentálne určených výsledkov od tabuľkovej hodnoty, ktorá je spôsobená tým, že v balóne sa nenachádza 100% zastúpenie hélia, ale zmes vzduchu a hélia. Nakoniec študenti určili aj percentuálne zastúpenie hélia v balóne.

Napriek tomu, že meranie trvalo trochu viac času ako poskytuje vyučovacia hodina, študentom sa meranie veľmi páčilo a mohli si uvedomiť, že aj molárna hmotnosť plynu sa dá určiť jednoduchým experimentálnym spôsobom aj v školských podmienkach.

Poďakovanie

Týmto by som sa chcel poďakovať vedúcej záverečnej práce Zuzane Ješkovej, za jej odborné vedenie, metodickú pomoc a cenné rady, ktoré mi dopomohli k vypracovaniu mojej vedeckej práce. Taktiež sa chcem poďakovať aj Veronike Fekovej za praktickú pomoc pri tvorbe videomeraní ako aj Ústavu fyzikálnych vied za poskytnutie priestorov a pomôcok pre realizáciu experimentov.

Literatúra

[FEKOVÁ, V. 2010] FEKOVÁ, V. (2010). Fyzika nafukovania balónov. In bakalárska práca. Košice: UPJŠ, 2010. 42 s.

[HAJKO, V. a DANIEL-SZABÓ, J. 1983.] HAJKO, V. a DANIEL-SZABÓ, J. (1983). Základy fyziky. Bratislava: VEDA, 1983

[JEŠKOVÁ, Z. and FEATONBY, D. and FEKOVÁ, V. 2012] JEŠKOVÁ, Z. and FEATONBY, D. and FEKOVÁ, V. (2012). Balloons revisited. In *Physics Education.*2012, č. 47, s 392-398

[JEŠKOVÁ, Z. and FEATONBY, D. 2012] JEŠKOVÁ, Z. and FEATONBY, D. (2012) What Happens Next?: Rocket- balloon launch: helium versusair. In *Physics Education.* 2012, č. 47, s 782-783

[JADRICH, J. and BRUXVOORT, C. 2010] JADRICH, J. and BRUXVOORT, C. (2010) Investigating diffusion and entropy with carbon dioxide – filled balloons. In *The Physics Teacher.* 2010, č. 48, s 388-390

[ZABLE, A.C. 2010] ZABLE, A.C. (2010) Experiments with helium- filled balloons. In *The Physics Teacher*. 2010, č. 48, s 582-586

[GLUCK, P. 2003] GLUCK, P. (2003) Air resistance on falling balls and balloons. In *The Physics Teacher*. 2003, č. 41, s 178-180

[CROSS, R. 2007] CROSS, R. (2007) Aerodynamics of a party balloon. In *The Physics Teacher.* 2007, č. 45, s 334-336

[AGUILELLA, V. M. – ALCARAZ, A. – RAMÍREZ, P. 2002] AGUILELLA, V. M. – ALCARAZ, A. – RAMÍREZ, P. (2002) Inward "centrifugal" force on a helium- filled balloon: An illustrative experiment. In *The Physics Teacher.* 2002, č. 40, s 214-216

Systém COACH, dostupné na: http://cma-science.nl/english/index.html

Súbor trojrozmerných pomôcok pre podporu fyzikálneho vzdelávania

Erik Bayerl*
Školiteľ: Janka Raganová‡

Katedra fyziky, FPV UMB, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, Slovenská republika

Abstrakt

Pri sprístupňovaní fyzikálneho poznania žiakom základných a stredných škôl, ako aj pri neformálnom vzdelávaní vo fyzike, má veľký význam uplatňovanie didaktickej zásady názornosti. To si vyžaduje, aby učiteľ alebo popularizátor fyziky mal k dispozícii vhodné nositele názornosti – učebné pomôcky, medzi ktorými najdôležitejšiu úlohu zohrávajú pomôcky trojrozmerné.

Práca prezentuje súbor ôsmich vytvorených trojrozmerných interaktívnych učebných pomôcok, ktoré je možné využiť pri sprístupňovaní fyzikálnych javov a zákonov vo vyučovacom procese, aj v rámci aktivít neformálneho fyzikálneho vzdelávania. Ku každej pomôcke je vypracovaný metodický návod pre učiteľa a návod pre žiaka, resp. návštevníka podujatia neformálneho vzdelávania.

Kľúčové slová: vyučovanie fyziky, učebná pomôcka, zásada názornosti, formálne a neformálne fyzikálne vzdelávanie

1 Úvod

V ostatnom období registrujeme rapídny pokles záujmu mladých ľudí o fyzikálne vzdelávanie. Z povedomia spoločnosti sa vytráca význam a zmysel fyziky ako jednej z najdôležitejších prírodovedných disciplín. Fyzika stráca na svojej príťažlivosti a prestáva byť lákadlom pre mladých ľudí. Na znižovanie záujmu mladých ľudí o fyzikálne vzdelávanie poukazuje, okrem iného, aj vysoký pokles počtu maturantov z predmetu fyzika. Štatistiky ukazujú, napríklad, pokles maturantov z fyziky v Banskobystrickom kraji od roku 2006 do roku 2009 až o takmer 60 %, podobne je na tom aj Trenčiansky kraj, kde bol zaznamenaný pokles za rovnaké obdobie až o takmer 65 % [Balážovič, 2010]. Fyzika je navonok, najmä žiakmi, prezentovaná ako ťažko zvládnuteľná, príliš abstraktná veda, ktorá u nich vyvoláva vysoký nezáujem. Žiaci o nej hovoria ako o predmete „plnom vzorcov“. Celkovo sa z nej vytráca pôvodný zmysel a krása, ktorými sa od počiatku prezentovala.

Fyzika od pradávna lákala najmä svojou tajomnosťou a záhadnosťou, ktorú v sebe skrýva. Jej predmetom boli a naďalej sú javy, zákonitosti a deje, ktoré tvoria náš každodenný život a neustále s nimi prichádzame do kontaktu. Prvotné stretnutie nastáva cestou zmyslového poznania. Človek, ako tvor zvedavý, sa neustále zamýšľal nad príčinami pozorovaných javov, s ktorými prichádza do kontaktu pomocou zmyslov. Takéto vnímanie objektívneho okolitého sveta a jeho zákonitostí, ktoré sú predmetom skúmania fyziky, je ľuďom oveľa bližšie. Preto by malo byť aj základom získavania vedomostí vo vzdelávacom procese žiakov.

Uvedený senzualistický prístup k učeniu sa opiera najmä o didaktickú zásadu názornosti. Uplatňovanie názornosti vo vyučovaní fyziky by mal mať učiteľ fyziky hlboko vryté do pamäti. Názorné vyučovanie je sprostredkúvané súborom prostriedkov, z ktorých veľký význam majú učebné pomôcky. Využívanie učebných pomôcok na vyučovaní fyziky môže pôsobiť na žiakov motivujúco, môže vyučovaciu hodinu spestriť, hodina môže pôsobiť pútavejšie a ich využívanie má ešte viacero iných pozitívnych stránok aj pre učiteľa, ale najmä pre žiaka.

Vyššie uvedené dôvody nás viedli k vypracovaniu práce, s ktorou by sme sa formou tohto článku chceli podeliť aj s ostatnými. Cieľom práce bolo vytvoriť súbor učebných pomôcok podnecujúcich žiacke poznávanie v rôznych oblastiach fyziky. Vytvorený súbor učebných pomôcok by mohol slúžiť najmä učiteľovi ako didaktický prostriedok vo vyučovacom procese, ale môže byť ako celok používaný aj na rôznych popularizačných akciách prezentujúcich fyziku formou neformálneho vzdelávania. Práca obsahuje okrem súboru učebných pomôcok aj metodické návody pre učiteľa, žiaka a rovnako návštevníka výstavy neformálneho vzdelávania.

Napriek tomu, že základnou úlohou učiteľa je využívať učebné pomôcky ako súčasť vyučovacieho

* erik.bayerl@post.sk
‡ Janka.Raganova@umb.sk

procesu, v práci predstavujeme aj jednoduchý postup, pomocou ktorého si môže učiteľ uvedené pomôcky samostatne zostrojiť a následne ich využívať. Rovnako si môžu niektoré z týchto pomôcok zostrojiť aj sami žiaci s prípadnou pomocou dospelej osoby.

2 Názornosť ako prostriedok k dosiahnutiu cieľov vyučovania

Didaktické zásady výrazne vplývajú na ostatné prostriedky a činitele súvisiace s vyučovacím procesom. Ich uplatňovanie znásobuje účinnosť výchovy a vzdelávania. Naopak, ich nedodržiavanie môže spôsobovať vážne problémy vo vyučovaní a učení sa žiakov.

Ako prvý didaktickú zásadu názornosti zdôvodnil a prepracoval J. A. Komenský, ktorý sformuloval zlaté pravidlo pre učiteľov: „… *všetko nech sa predkladá všetkým zmyslom, nakoľko je to len možné. A teda veci viditeľné zraku, počuteľné sluchu, voňajúce čuchu, ochutnateľné chuti a hmatateľné hmatu; a ak sa niečo môže vnímať naraz viacerými zmyslami, nech sa to predloží viacerým zmyslom.“* [Komenský, 1979, s. 27] Z toho vyplýva, že čím viac zmyslov je zapojených do poznávacieho procesu, tým je tento proces efektívnejší.

Didaktická zásada názornosti sa opiera o senzualistický prístup k učeniu, ktorého podstatou je získavanie vedomostí nielen sluchom, ale aj ostatnými zmyslami človeka. Vyjadruje skutočnosť, že čím viacej zmyslov sa zúčastní osvojovania a pochopenia vedomostí, javov, zákonitostí a vzťahov medzi nimi, tým bude toto osvojovanie efektívnejšie a najmä trvácnejšie.

Význam didaktickej zásady názornosti spočíva v samotnom procese poznávania. Skôr, ako sa v žiakovi utvárajú pojmy, je dôležitá práve zmyslová skúsenosť. Z nej sa vytvárajú predstavy a utváranie pojmov je až na konci celého poznávacieho procesu. Zásadu názornosti si nemožno predstavovať len ako „predkladanie prostriedkov názornosti pred žiakov“, ale jej využívanie závisí od mnohých činiteľov, ako sú napríklad vekové osobitosti žiakov, povaha učiva vyučovacieho predmetu, fáza vyučovacieho procesu [Petlák, 2004].

S objektívnym svetom, ktorého fyzikálne zákonitosti tvoria obsah vyučovania fyziky, sa zoznamujeme predovšetkým práve už spomínanou cestou zmyslového poznania. Zmyslové poznanie predstavuje východisko všetkých našich poznatkov o svete. Preto je jedným zo základných požiadaviek vyučovania fyziky na všetkých typoch škôl vytváranie predstáv a pojmov na základe vnemov a konkrétnych poznatkov získaných pomocou zmyslov. [Kašpar, 1978]

Vo vyučovaní fyziky si však nevystačíme iba so zmyslovou stránkou poznania, demonštrácia a predvádzanie fyzikálnych dejov opierajúce sa o zmyslové vnemy nepostačuje na splnenie cieľov vyučovania. Fyzikálne poznanie je zložitý proces, pretože obsah vzdelávania, vedecké poznatky sa vyjadrujú pomocou teórií a vyjadrujú prechod od konkrétneho k abstraktnému. Obyčajné opisovanie vonkajšej stránky predvádzanej pomôcky neodhaľuje podstatu pomôcky, pre ktorú bola zostrojená. Názorná zložka vyučovania predstavuje však jeden z významných didaktických prostriedkov, ktoré podnecujú myslenie žiakov.

Pozitívnou stránkou názornosti vo vyučovaní fyziky je aj jej dôležitosť z pohľadu žiaka. Cez názornosť prijíma žiak sprostredkovanie učiva s väčším záujmom, ochotnejšie preniká do podstaty demonštrovaných javov a zákonitostí.

Dôležitú úlohu pri uplatnení názornosti, ako aj v celom výchovno-vzdelávacom procese, má učiteľ. Učiteľ ako koordinátor celého výchovno-vzdelávacieho procesu usmerňuje a riadi aj myslenie žiakov počas názorného predvádzania pomôcky, upozorňuje žiakov na podstatu a súvislosti pozorovaných fyzikálnych javov a zákonitostí. Vedie žiakov k osvojeniu správnych a trvalých vedomostí. Pri uplatňovaní zásady názornosti by mal učiteľ vychádzať zo psychologických základov žiaka. Proces poznávania a vývinové osobitosti žiakov sú zásadou názornosti podmienené.

Je však dôležité poukázať na to, že s názornosťou vo vyučovaní treba narábať opatrne, pretože zanedbávanie názornosti vedie k verbálnosti, ale jej preceňovanie zase zamedzuje rozvoju abstraktného myslenia. Je preto potrebné využívať názornosť v správnej miere. Názornosť by nemala byť cieľom vyučovania, ale iba prostriedkom k dosiahnutiu cieľa vyučovania. Jednou z možností k uplatňovaniu didaktickej zásady názornosti sú práve učebné pomôcky, ktoré tvoria materiálny základ názorného vyučovania.

3 Učebné pomôcky ako prostriedok uplatňovania názornosti

S didaktickou zásadou názornosti súvisí najmä používanie učebných pomôcok. Učebné pomôcky napomáhajú k väčšej názornosti a zapájajú čo najviac receptorov žiakov pri vnímaní učebnej látky.

Pod učebnou pomôckou si vo všeobecnosti môžeme predstaviť široké spektrum predmetov využívaných počas výchovno-vzdelávacieho procesu. Jednou z viacerých definícií učebných pomôcok je definícia J. Prúchu, ktorý hovorí, že „učebné pomôcky sú predmety sprostredkujúce alebo napodobňujúce realitu, napomáhajúce k väčšej názornosti alebo uľahčovaniu vzdelávania“ [Prúcha, 2004, s. 274]. Vidíme, že učebné pomôcky zvyšujú názornosť.

Úlohou učebných pomôcok by nemalo byť nahradiť verbálne vysvetľovanie učiteľa, ale uplatňovaním zásady názornosti rozvíjať a podporovať tvorivé myslenie a konanie žiakov.

Učebné pomôcky sa od počiatku používali ako najúčinnejší prostriedok objasňovania fyzikálnych teórií. Rovnako predstavujú efektívny prostriedok na demonštrovanie javov, princípov a zákonitostí vyskytujúcich sa všade okolo nás, ktoré sú predmetom skúmania fyziky. Význam využívania učebných pomôcok nie je iba v „lepšom pochopení učiva žiakmi“, ako sa na prvý pohľad zdá, ale rovnako v sebe skrývajú aj ďalšie pozitívne stránky. Vhodne zvolené učebné pomôcky pôsobia motivujúco, vzbudzujú záujem o učivo a učenie sa žiakov, môžu spestriť vyučovací proces. Fyzická manipulácia žiakov s pomôckami, možnosť bezprostredného styku s nimi pozitívne vplýva na rozvoj senzomotorických zručností žiakov, rozvíja ich tvorivú činnosť a myslenie, práca s pomôckami formuje zmyslové poznávacie procesy žiakov. Rovnako sú zdrojom a nositeľom množstva informácií. Žiak si možno ani neuvedomuje, ako manipuláciou s učebnými pomôckami získava množstvo informácií, myšlienkovo ich spracúva a premieňa na trvalejšie vedomosti, ako by mal pozorované fyzikálne javy a zákonitosti prijímať v nenázornej forme.

3.1 Tvorba učebných pomôcok

Navrhovanie a tvorbu učebných pomôcok ovplyvňujú mnohé činitele. Je potrebné zhodnotiť ich úlohu, ktorú majú plniť vo výchovno-vzdelávacom procese (napr. demonštračnú, opisnú, ilustračnú) a do ktorej fázy vyučovacieho procesu budú zaradené (motivačná, expozičná, fixačná, aplikačná alebo diagnostická). Pri rozhodovaní o tom, ktorú časť učiva sprístupniť žiakom prostredníctvom učebnej pomôcky a ako ju zhotoviť tak, aby jej účinnosť bola čo najväčšia, je potrebné brať ohľad najmä na výchovno-vzdelávací cieľ, charakter vyučovacieho predmetu a jeho funkciu pri formovaní profilu absolventa, druh učebnej látky, ktorý má byť sprostredkovaný učebnou pomôckou. Dôležitú úlohu hrá aj vyučovacia forma, v rámci ktorej učiteľ používa učebnú pomôcku a učebné metódy, ktoré učiteľ pri používaní učebnej pomôcky využíva. Významný je taktiež vek, mentálna zrelosť žiakov a ich predchádzajúce vedomosti a zručnosti. [Driensky and Hrmo, 2004]

Ak by sme si chceli nejakú trojrozmernú učebnú pomôcku svojpomocne skonštruovať, je potrebné dosiahnuť zdôraznenie podstaty objektu alebo javu, ktorý nimi simulujeme. Konštrukcia pomôcky by nemala byť zložitá a malo by sa s ňou ľahko manipulovať. Pomôcka by mala byť funkčne spoľahlivá, mala by mať primeranú hmotnosť a rozmery, ktoré závisia od toho, či pomôcku učiteľ demonštruje, alebo s ňou žiaci sami pracujú. Mala by mať ľahkú transportovateľnosť. Zároveň by malo byť jej využívanie bezpečné z hľadiska mechanického poranenia, elektrického výboja, chemického vplyvu alebo iných, zdravie ohrozujúcich, vplyvov. Mala by byť jednoducho skladovateľná a nenáročná na údržbu. Taktiež by mala mať dostatočnú životnosť a nízke výrobné a prevádzkové náklady. [Driensky and Hrmo, 2004]

Po zhotovení pomôcok prichádza na rad ich využívanie na tie účely, na ktoré boli skonštruované. Počas práce s učebnými pomôckami by sme mali dodržiavať určité zásady.

3.2 Zásady práce s učebnými pomôckami

Aj keď by sa možno zdalo, že používanie učebných pomôcok je jednoduchá záležitosť, opak je pravdou. V dnešnej dobe má učiteľ k dispozícii širokú škálu učebných pomôcok. Vybrať tú správnu pomôcku, ktorá by pôsobila najefektívnejšie vo výchovno-vzdelávacom procese, je dosť náročné. Dodržiavanie zásad správnej práce s učebnými pomôckami môže učiteľovi túto činnosť uľahčiť. Po syntéze poznatkov viacerých autorov zaoberajúcich sa danou problematikou uvádza J. Dostál [Dostál, 2008] zásady, ktoré je pri práci s učebnými pomôckami dodržiavať. V prvom rade by mal mať učiteľ prehľad o dostupných učebných pomôckach. Ak sa rozhodne nejakú pomôcku použiť, mal by si pred jej použitím overiť jej funkčnosť. Učiteľ by mal vedieť s učebnými pomôckami pracovať a poznať ich didaktické využitie. Pri výbere učebných pomôcok by mal byť kladený dôraz na ciele, vek a úroveň psychického vývoja žiakov. Pri použití učebnej pomôcky zbytočne neopisujeme slovom to, čo je žiakom z pomôcky zrejmé. Ak má použitie učebnej pomôcky charakter pokusu, je výhodné do jeho realizácie zapojiť aj žiakov. Mal by sa snažiť aktivizovať žiakov tak, aby z nej aj samostatne získavali čo najviac informácií a sprievodným slovom usmerňovať pozornosť žiakov a ich

myšlienkové operácie. Učebné pomôcky by mali byť predkladané až vtedy, keď chceme upriamiť pozornosť žiakov na dané učivo. Pre zdôraznenie vzájomných vzťahov a súvislostí, zložitosti javov, by malo byť umožnené dotváranie pomôcky počas výkladu.

Pri práci s učebnými pomôckami je potrebné dodržiavať všetky dôležité pravidlá a zásady, ktoré súvisia s ich využívaním, pretože slúžia k efektívnosti práce s nimi. Ich nerešpektovanie môže mať negatívnejší dopad, než ich nepoužívanie.

Uvedené pravidlá, zásady a požiadavky súvisiace s výberom, tvorbou a používaním učebných pomôcok sme sa snažili zohľadniť a dodržiavať aj my pri zhotovovaní nasledujúcich učebných pomôcok. Rovnako by sa nimi mali riadiť aj všetci tí, ktorí sa rozhodnú dané pomôcky zostrojiť.

4 Súbor vytvorených fyzikálnych učebných pomôcok

Prehľad zhotovených učebných pomôcok, ktoré môžu byť využité jednotlivo na vyučovaní, alebo aj ako súbor pri realizovaní popularizačných podujatí prezentujúcich vzrušujúce fyzikálne poznávanie, uvádzame v tabuľke (Tab. 1).

Uvedený súbor pozostáva z ôsmich fyzikálnych interaktívnych učebných pomôcok, pomocou ktorých možno demonštrovať fyzikálne javy z viacerých oblastí fyziky: mechaniky, optiky, magnetizmu. Pomôcky demonštrujú jeden alebo viacej fyzikálnych javov (napr. pomôcka Maľujeme mydlovou vodou). Pomôcka s názvom „Dokážeš postaviť most?“ je zhotovená v dvoch rôznych prevedeniach.

Pri navrhovaní alebo samotnej tvorbe pomôcok sme sa inšpirovali domácimi, ale aj zahraničnými námetmi ([Bruman, 1991], [Hipschman, 1983], [Hipschman, 1993], [Reichl, 2004]). Nadviazali sme pritom na bohaté skúsenosti učiteľov Katedry fyziky FPV UMB v Banskej Bystrici v oblasti tvorby učebných pomôcok ([Bulla, 1999], [Raganová and Bulla, 2001], [Raganová and Bulla, 1999]). Uvedené zdroje nám slúžili výhradne len ako inšpirácia.

Námety pomôcok sme volili tak, aby demonštrované fyzikálne javy, a najmä ich fyzikálne vysvetlenia, neboli náročné na pochopenie, aby predvádzané fyzikálne javy boli pomôckou jednoducho prezentované a zároveň, aby mali demonštrované javy čo najväčší súvis s bežnou praxou a naším životom.

Pri tvorbe jednotlivých pomôcok sme dbali na zásady a požiadavky súvisiace s tvorbou pomôcok opísané v úvode článku.

Za základný konštrukčný materiál sme zvolili drevo, ktoré je dosť pevné a zároveň z bežných materiálov asi najdostupnejšie. Keďže drevo je materiál, ktorý môže reagovať na rôzne klimatické zmeny (najmä ak nie je ešte dobre vyschnuté), bolo potrebné vykonať jeho povrchovú úpravu. Preto sme zvolili vonkajší náter.

Pomôcky sme namaľovali farbou, ktorá nie je zdraviu škodlivá. Použitá bola latexová farba, do ktorej sme pridávali rôzne odtiene dúhových farieb. Všetky odtiene sme si samostatne namiešavali. Pomôcky mohli byť kvôli povrchovej úprave natreté aj bežným lakom, ale získanou farebnosťou sme chceli dosiahnuť aj to, aby upútali už pri prvotnom stretnutí sa s nimi.

Zvolené farby niektorých pomôcok majú aj ďalší význam, napríklad farebnosť pomôcky „Kúzelné krabičky“ súvisí s bežne používanými farbami magnetov. Taktiež farby dielov veľkého mosta sú, po správnom postavení, zoradené podľa farieb dúhy. Keďže uvedený most má len päť dielov a farieb dúhy je sedem, z použitých farieb sme zámerne vylúčili indigovú modrú a fialovú. Tieto farby vznikajú rozkladom bielej farby, preto je podstava mosta biela. V prenesenom význame by sme mohli povedať, že „most vyrastá zo svojej podstavy“, čiže farby mosta vznikajú z farby jeho podstavy. Náter pomôcok sme vykonali aj pre ich lepšiu povrchovú údržbu (poutieranie od prachu, prípadne iných nečistôt).

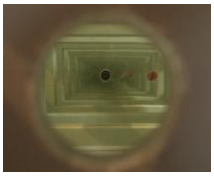
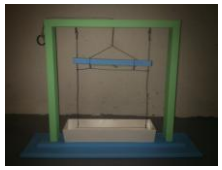
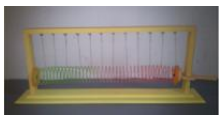
Dôležitú úlohu pri prezentovaní pomôcok hrá aj ich veľkosť. Pri navrhovaní pomôcok sme sa snažili „ísť zlatou strednou cestou“. Zostrojené pomôcky nie sú veľmi malé, ale ani príliš veľké. Pri navrhovaní ich veľkosti sme sa snažili brať ohľad aj na ich uskladniteľnosť a dobrú transportovateľnosť.

Pri výrobe pomôcok sme brali ohľad aj na skutočnosť, že zhotovené pomôcky budú prechádzať rukami veľkého množstva ľudí, budú s nimi manipulovať malé deti. Preto sme sa snažili, aby boli pomôcky dostatočne pevné, pružné a odolné voči vonkajšiemu tlaku a opotrebovaniu. Viac namáhané spoje sme spájali dvojmo, lepidlom aj skrutkami.

Uvedené pomôcky sú konštruované a návody na ich zhotovenie písané tak, aby s ich zhotovením nemal väčší problém žiadny šikovnejší učiteľ. Niektoré časti k zhotoveniu pomôcok sú bežne dostupné.

Ku každej pomôcke sme vytvorili návod na použitie pomôcky pre žiaka alebo návštevníka výstavy neformálneho fyzikálneho vzdelávania, ako aj metodický návod pre učiteľa. Našu koncepciu štruktúry a formy oboch metodických návodov bližšie rozoberieme v ďalšej časti článku.

Tab. 1: Súbor zhotovených fyzikálnych učebných pomôcok

Názov pomôcky	*Obrázok zhotovenej pomôcky*	*Demonštrované fyzikálne javy a pojmy*
Dokážeš postaviť most?	 	Sila, gravitačná sila, tlaková sila, rozklad síl
Zázračné koleso	 	Stabilita telesa, pohyb telesa po naklonenej rovine, rovnovážna poloha, ťažisko
Sú naozaj rovnaké?	 	Optické vlastnosti oka
Pohľad do nekonečna	 	Odraz svetla, rovinné zrkadlo, odraz svetla na rovinnom zrkadle
Maľujeme mydlovou vodou		Povrchové napätie, interferencia svetla, vlastnosti pružnej blany
Pružinový had		Vlnenie, pozdĺžne a priečne vlnenie
Kúzelné krabičky		Silové pôsobenie telies, fyzikálne polia, magnetická sila a pole
Guľôčkový výťah		Vzájomná premena mechanických foriem energie, potenciálna, kinetická energia

Časť uvedeného súboru pomôcok bola použitá na popularizačnom podujatí Noc výskumníkov v septembri 2012 (Obr. 1). Rovnako sa s nimi nielen zoznámili, ale aj overili ich funkčnosť, pevnosť, odolnosť voči zaťaženiu, študenti učiteľstva fyziky, ale aj iných študijných odborov (Obr. 2). Návštevníci boli z pomôcok nadšení. U viacerých prezentované pomôcky vzbudili túžbu po poznaní, prejavila sa ich zvedavosť. Pri prezentovaní sme sa stretli len s pozitívnymi odozvami zo strany návštevníkov.



Obr. 1: Noc výskumníkov 2012



Obr. 2: Testovanie pomôcok vysokoškolskými študentmi

4.1 Štruktúra návodu pre žiaka alebo návštevníka výstavy neformálneho vzdelávania

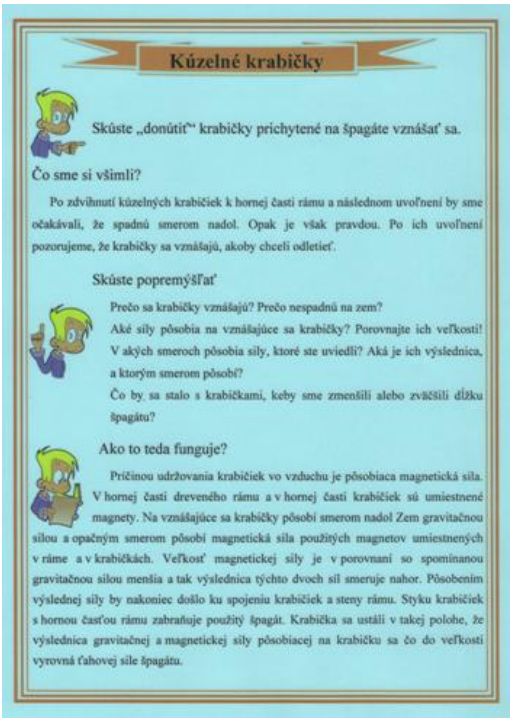
Návod pre žiaka, ako aj pre návštevníka výstavy neformálneho vzdelávania, tvoria ku každej pomôcke dve kartičky zaliate vo fólii, ktoré sú k danej pomôcke priložené (Obr. 3, Obr. 4). Ich cieľom je usmerniť manipuláciu návštevníka s pomôckou a doplniť jeho informácie o fyzikálnych dejoch a procesoch súvisiacich s javom, ktorý pomôcka demonštruje.

Prvá z kartičiek obsahuje názov pomôcky, úlohu pre žiaka alebo návštevníka výstavy. Za úlohou nasleduje časť s názvom „Čo sme si všimli?“, ktorá opisuje pozorovanú činnosť pomôcky. Ďalej sa na kartičke nachádza časť s otázkami na zamyslenie, ktoré súvisia s predvádzaným javom. Túto časť sme nazvali „Skúste popremýšľať!“. A na záver si môžu návštevníci prečítať, v časti „Ako to celé funguje?“, fyzikálne vysvetlenie pozorovaného javu. Keďže je uvedený súbor určený aj širokej verejnosti formou popularizačných podujatí, snažili sme sa fyzikálne vysvetlenie prispôsobiť tak, aby ho bol schopný pochopiť aj návštevník so základnými vedomosťami z fyziky.

Druhá časť metodického návodu sa nazýva „Poobzerajme sa naokolo“. Jej obsahom je možná aplikácia, využívanie daného fyzikálneho javu v praxi, či možné stretnutie sa s ním v bežnom živote. Tieto informácie sú miestami doplnené aj historickými perličkami súvisiacimi s daným fyzikálnym javom. Cieľom tejto časti je spojenie teórie s praxou.

Súčasťou textu sú aj motivačné obrázky a fotografie spomínaných fyzikálnych javov a dejov súvisiacich s bežným životom a praxou. Takmer všetky obrázky v tejto časti sú prevzaté od iných autorov, nie sú naším dielom. Keďže uvádzanie bibliografických odkazov priamo v obrázkoch by rušilo celkový dojem, rozhodli sme sa mená autorov obrázkov a internetové adresy, kde sú dané obrázky publikované, uviesť v jednom zozname, ktorý tvorí osobitnú prílohu k metodickým návodom. Zoznam obrázkov použitých v tomto článku uvádzame v zozname literatúry.

Našu koncepciu tvorby a štruktúry metodických návodov pre žiaka alebo návštevníka výstavy neformálneho vzdelávania ilustrujeme na ukážke pomôcky s názvom „Kúzelné krabičky“.



Kúzelné krabičky

Skúste „donútiť“ krabičky prichytené na špagáte vznášať sa.

Čo sme si všimli?

Po zdvihnutí kúzelných krabičiek k hornej časti rámu a následnom uvoľnení by sme očakávali, že spadnú smerom nadol. Opak je však pravdou. Po ich uvoľnení pozorujeme, že krabičky sa vznášajú, akoby chceli odletieť.

Skúste popremýšľať

Prečo sa krabičky vznášajú? Prečo nespadnú na zem?

Aké sily pôsobia na vznášajúce sa krabičky? Porovnajte ich veľkosti!

V akých smeroch pôsobia sily, ktoré ste uviedli? Aká je ich výslednica, a ktorým smerom pôsobí?

Čo by sa stalo s krabičkami, keby sme zmenšili alebo zväčšili dĺžku špagátu?

Ako to teda funguje?

Príčinou udržovania krabičiek vo vzduchu je pôsobiaca magnetická sila. V hornej časti dreveného rámu a v hornej časti krabičiek sú umiestnené magnety. Na vznášajúce sa krabičky pôsobí smerom nadol Zem gravitačnou silou a opačným smerom pôsobí magnetická sila použitých magnetov umiestnených v ráme a v krabičkách. Veľkosť magnetickej sily je v porovnaní so spomínanou gravitačnou silou menšia a tak výslednica týchto dvoch síl smeruje nahor. Pôsobením výslednej sily by nakoniec došlo ku spojeniu krabičiek a steny rámu. Styku krabičiek s hornou časťou rámu zabraňuje použitý špagát. Krabička sa ustáli v takej polohe, že výslednica gravitačnej a magnetickej sily pôsobiacej na krabičku sa čo do veľkosti vyrovná ťahovej sile špagátu.

Obr. 3: Ukážka návodu pre žiaka a návštevníka výstavy neformálneho vzdelávania (1. časť)



Poobzerajme sa naokolo

Magnety lákali ľudí od nepamäti. Fascinujúcou bola ich schopnosť priťahovať železné predmety neviditeľnou silou. Neskôr ich začali využívať vo svoj prospech.

História využívania magnetu siaha do dávnych dôb. Jeho názov je odvodený od geografickej oblasti v Turecku, nazývanej Magnézia, známej výskytom ložísk magnetitu, jediného prírodného minerálu schopného priťahovať železné predmety. Prvé zachované písomné záznamy však pochádzajú už z obdobia Starovekej Číny, kde ju využívali v kompasoch na orientáciu na mori.

„Tajomnosť“ správania sa magnetov zotrvala až do 19. storočia. Začali sa objavovať mnohé teórie opisujúce magnetické javy a prichádzalo sa na súvislosti medzi magnetickou a elektrickou silou. Objavy H. Ch. Oersteda a M. Faradaya prispeli k oveľa väčšiemu využívaniu magnetov v bežnej praxi.

Bez magnetov by si svoj život v dnešnej dobe vedel predstaviť asi málokto. Stretávame sa s nimi na každom kroku. Nachádzajú sa v počítačoch, televíziách, ako magnetické čipy na platobných kartách, pri uzatváraní dvier na skrinkách, či chladničkách. Ako malé magnety ich často využívame na uchytenie odkazov a iných vecí na magnetickej tabuli. Malé magnety môžeme nájsť aj v hodinkách. Veľké elektromagnety zase uľahčujú prácu na žeriavoch. Využívanie silných magnetov má veľké uplatnenie v medicíne, napr. vyžívanie magnetickej rezonancie. Jednou z nemenej dôležitých využití magnetov je výroba elektrickej energie v elektrárňach, kde sú magnety súčasťou generátorov.

Existuje nespočetné množstvo zariadení, ktoré by sa nezaobišli bez prítomnosti magnetov a mnoho situácií, v ktorých sú magnety nenahraditeľnou súčasťou.

Obr. 4: Ukážka návodu pre žiaka a návštevníka výstavy neformálneho vzdelávania (2. časť)

4.2 Štruktúra metodických návodov pre učiteľa

Každý metodický návod pre učiteľa je rovnako členený a pozostáva zo siedmich častí. Názvy jednotlivých častí sme volili tak, aby mali pútavejšiu podobu. Súčasťou metodického návodu sú aj časti z návodu pre žiaka, či návštevníka výstavy neformálneho vzdelávania.

Na úvod, v časti „Použitie“, uvádzame stručný prehľad tém, pri preberaní ktorých je možné pomôcku použiť. Zámerne tu neuvádzame vekové zaradenie žiakov. Pomôcky náročnejšie na fyzikálne vysvetlenie je možné pre mladšie vekové kategórie použiť napríklad len ako motivačný činiteľ, na spestrenie a oživenie vyučovacej hodiny. Hĺbka rozoberania a zaoberania sa použitou pomôckou závisí od vekovej a s ňou súvisiacej psychickej vyspelosti žiakov.

V druhej časti sa nachádza motivačný text uvádzaný aj v metodickom návode pre žiakov a návštevníkov neformálneho vzdelávania, takže jeho obsahom je spomínaná aplikácia, využívanie daného fyzikálneho javu v praxi, či možné stretnutie sa s ním v bežnom živote. Tento text je miestami doplnený o ďalšie informácie, ktoré sa v žiackom návode nenachádzajú. Uvedený text sme sa rozhodli uviesť aj v metodickom návode, pretože by mohol slúžiť učiteľovi ako doplňujúci materiál alebo na prípadnú inšpiráciu pri využití tej-ktorej pomôcky.

Za úvodným textom nasleduje časť „Úloha“, ktorá obsahuje úlohu pre žiakov, čo majú s danou pomôckou robiť. Súčasťou úlohy je obrázok zhotovenej pomôcky.

Potom nasleduje časť s názvom „Čo pozorujeme?“, v ktorej je opísané, čo môžeme pozorovať pri manipulácii s danou pomôckou.

Nasledujúcu časť, nazvanú „Skúste popremýšľať!“, tvoria otázky súvisiace s prezentovaným fyzikálnym javom. Žiak sa má po odskúšaní pomôcky zamyslieť nad danou problematikou.

Potom nasleduje fyzikálne vysvetlenie pozorovaného fyzikálneho javu. Túto časť sme nazvali názvom „Ako to celé funguje?“. Fyzikálne vysvetlenie sme sa opäť snažili uviesť na takej úrovni, aby ho mohol pochopiť človek so základným fyzikálnym vzdelaním.

Na záver uvádzame návod na zhotovenie pomôcky, pomocou ktorého si môžu učitelia danú pomôcku svojpomocne zhotoviť. V jeho úvodnej časti sa nachádza zoznam potrebného materiálu. Táto časť sa nazýva „Ako si pomôcku zostrojiť?“.

Našu koncepciu tvorby a štruktúry metodických návodov k pomôckam pre učiteľa budeme ilustrovať na príklade pomôcky „Pohľad do nekonečna“.

4.3 Ukážka metodického návodu pre učiteľa

Pohľad do nekonečna

Použitie

Pomôcku „Pohľad do nekonečna“ je možné použiť pri vyučovaní optiky, odrazu svetla, pri preberaní učiva o zrkadlách, obraze predmetu vzniknutého pomocou rovinného zrkadla.

Motivačný text


Odraz svetla na vodnej hladine

Ľudia sú odjakživa zvedavé bytosti. Neustále si všímajú javy okolo seba. Príroda bola a neustále je plná tajomstiev, ktoré ľudí od nepamäti lákali. Mnohé zariadenia, či pomôcky na uľahčenie si života, ľudia objavili práve v prírode. Jednou z takýchto pomôcok je aj bežne v domácnosti používané zrkadlo.

Ľudia si všimli, že obyčajná vodná hladina vytvára na svojom povrchu, pri určitom uhle pohľadu, obrazy predmetov umiestnených pred ňou.


Zrkadlo - Benátky

Vodnú hladinu môžeme preto považovať za „predchodcu“ dnešných zrkadiel. Používanie vodnej hladiny bolo dosť nepraktické, a tak začali vznikať prvé zrkadlá zostrojované z rôznych kovov, najčastejšie bronzu. Používanie kovových zrkadiel bolo známe už v starom Egypte, Číne a Mezopotámii. Ich vývoj sa neustále menil. Po čase ľudia zistili, že aj používanie kovových zrkadiel nie je až také praktické, ako sa na prvý pohľad zdalo. Výrobou prvých sklenených zrkadiel sa preslávili Benátčania, i keď prvé náznaky sklenených zrkadiel sa objavili už u Feničanov, ale tie sa v praktickom živote neujali. Prvé sklenené zrkadlá, blízke tým dnešným, sa začali v Benátkach vyrábať okolo roku 1279. Už v tej dobe to boli dokonalé a veľmi vkusné zrkadlá. Na ich výrobu používali veľmi vyspelú technológiu, ktorá bola dlhé roky tajomstvom. Po odhalení výroby zrkadiel sa prišlo na to, že zrkadlo tvorilo sklo a z jednej strany nanesená tenká kovová vrstva. Toto tajomstvo si udržali Benátčania až do 18. storočia. Po tomto období sa začala odhalená výroba zrkadiel šíriť po celej Európe. Pôvodná technológia výroby zrkadiel bola však zdraviu škodlivá, pretože nanášaný kov bol tvorený parami

cínu a olova. Preto bola táto technológia nahradená využívaním striebra a iných chemických zlúčenín.


Prvý Newtonov ďalekohľad (1668)

Spočiatku mali zrkadlá len estetickú funkciu. Neskôr vedci zistili, že využívanie zrkadiel má nezastupiteľné miesto vo vede. Začali vznikať prvé periskopy (1637, J. Herelius), zdokonaľovali sa ďalekohľady (1668, I. Newton). V dnešnej dobe má využívanie zrkadiel, ako dôležitej súčasti mnohých zariadení, nenahraditeľné miesto v medicíne, v doprave, vede a technike. Ich použitie súvisí aj s tvarom zrkadiel, zrkadliacej plochy. Podľa tvaru ich zvykneme deliť na rovinné, duté a vypuklé zrkadlá. Využívanie zrkadiel posunulo vedu výrazne dopredu a zjednodušilo nám mnohé činnosti.


Cestné zrkadlo (vypuklé)

Úloha

„Pozrite sa do nekonečna“ predstavuje jednoduchý pokus, ktorý využíva odraz svetla. Vašou úlohou je pozrieť sa do vnútra „nekonečna“ cez otvory v prednej časti zariadenia.



Obr. 5: Zhotovená pomôcka “Pohľad do nekonečna”

Čo pozorujeme?

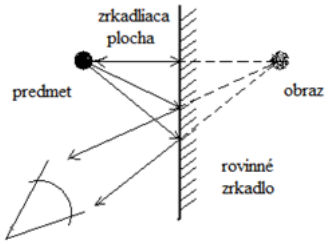
Po tom, ako si vezmeme pomôcku do rúk a pozrieme sa cez dva otvory do jej vnútra, pozorujeme veľmi dlhý sklenený tunel. Vzniknutý obraz nám pripadá, ako by sme sa pozerali do nekonečna.

Skúste popremýšľať!

Koľko obrazov predmetu vzniká pri použití dvoch rovinných zrkadiel? Od čoho závisí počet vzniknutých obrazov?
Čo by sa stalo s počtom vzniknutých obrazov, keby neboli zrkadlá umiestnené rovnobežne vedľa seba?

Ako to celé funguje?

Uvedenú pomôcku tvoria dve paralelne spojené rovinné zrkadlá otočené zrkadliacimi plochami k sebe. Uvažujme najskôr o obraze predmetu jedným rovinným zrkadlom (Obr. 6). Zrkadlo predstavuje optickú plochu, odrážajúcu väčšinu svetla dopadajúceho na jeho plochu. Obraz predmetov sa vytvára na základe zákona odrazu svetla. Obraz predmetu je neskutočný, rovnako veľký, priamy, stranovo prevrátený.



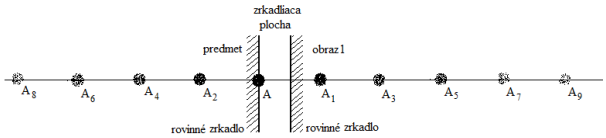
Obr. 6: Obraz predmetu vytvorený jedným rovinným zrkadlom

Zaujímavá situácia vznikne, ak použijeme k zobrazovaniu predmetov dve rovinné zrkadlá. Pri použití jedného zrkadla sme dostali práve jeden obraz. Ak použijeme dve zrkadlá, počet vzniknutých obrazov závisí od uhla, ktorý zvierajú zrkadliace plochy daných zrkadiel. Vo všeobecnosti platí pre počet obrazov vzniknutých dvomi rovinnými zrkadlami vzťah

$$n = \frac{360°}{\varphi} - 1,$$

kde φ je uhol, ktorý zvierajú dané dve rovinné zrkadlá.

Uhol dvoch rovinných zrkadiel, ktoré sú rovnobežné a ich zrkadliace plochy sú natočené k sebe, je 0 °. Použitím uvedeného vzťahu limitne dostávame, že počet obrazov takto umiestnených zrkadiel je nekonečný. O tom, že pri použití dvoch rovnobežných zrkadiel vznikne nekonečne veľa obrazov, svedčí aj zobrazovanie obrazu A (Obr. 7).



Obr. 7: Obraz predmetu vzniknutý dvomi rovnobežnými rovinnými zrkadlami

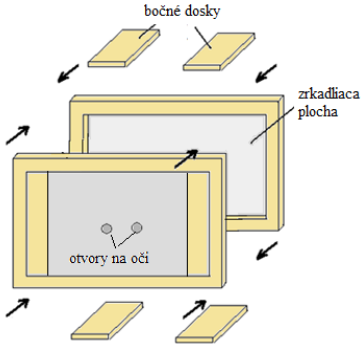
Z toho vyplýva, že pri pohľade do vzniknutých otvorov sa nám obraz, ktorý vidíme, javí ako „pohľad do nekonečna“. V skutočnosti však nedokážeme pozerať do nekonečna, pretože aj ľudské oko má určité fyziologické medze a taktiež pri jednotlivých obrazoch dochádza k znižovaniu intenzity svetla.

Ako si pomôcku zostrojiť?

Materiál: 2 rovinné zrkadlá s rovnakými rozmermi (napr. šírka 300 mm, dĺžka 500 mm), drevené rámy na zrkadlá (rozmery podľa rozmerov zrkadiel), 4 kusy drevených doštičiek (dĺžka 200 mm, šírka 70 mm), 16 kusov skrutiek (dĺžka 20 mm), 40 kusov skrutiek (dĺžka 40 mm), univerzálne lepidlo.

Vezmeme si jedno zrkadlo a v polovičnej výške a šírke doň vyvŕtame dva kruhové otvory s priemerom okolo 15 mm vo vodorovnej vzdialenosti asi 70 mm. Na obe zrkadlá vytvoríme rámy z dreva, na spoje použijeme dlhšie skrutky a lepidlo. Rámy upevníme na zrkadlá pomocou univerzálneho lepidla. Obe zrkadlá umiestnime rovnobežne vedľa seba, zrkadliacimi plochami k sebe, do vzdialenosti 120 mm. Zrkadlá po bokoch spojíme pomocou drevených doštičiek. Drevené kusy spájame skrutkami. Zariadenie môžeme farebne vyzdobiť, aby pútalo svojím zovňajškom.

Pre lepšie pochopenie postupu zhotovenia pomôcky uvádzame na záver jej schematický nákres (Obr. 8).



Obr. 8: Schematický nákres pomôcky

5 Záver

Predloženou prácou sme sa snažili prispieť k popularizácii fyziky formou využívania učebných pomôcok. Uvedomujeme si, že názornosť zohráva vo vyučovaní fyziky dôležitú úlohu a umožňuje jednoduchšie spracovanie učiva. Najlepším prostriedkom na podporu názornosti sú práve učebné pomôcky. Celkovo sa nám podarilo zhotoviť súbor ôsmich interaktívnych fyzikálnych učebných pomôcok, ktoré spĺňajú požiadavky kladené na ich tvorbu a používanie.

Uvedený súbor učebných pomôcok by sme chceli ešte doplniť ďalšími pomôckami. Spoločne budú tvoriť inventár Katedry fyziky Fakulty prírodných vied Univerzity Mateja Bela v Banskej Bystrici. Môžu byť využívané Katedrou fyziky na akciách, ktoré organizuje, napríklad seminár Fyzika je moja kamarátka, alebo každoročne sa konajúce popularizačné podujatie Noc výskumníkov.

Niektoré z uvedených pomôcok už boli použité na spomínaných popularizačných podujatiach. Návštevníkom podujatí sa pomôcky veľmi páčili, pomôcky ich zaujali. Môžeme konštatovať, že aj to malé množstvo použitých pomôcok vyvolalo u návštevníkov pozitívny ohlas.

Veríme, že uvedené pomôcky prinesú radosť z fyzikálneho poznávania, že budú lákadlom pre návštevníkov spomínaných popularizačných podujatí. Rovnako veríme, že sa nimi inšpiruje nejeden učiteľ a bude ich s pozitívnou odozvou využívať na vyučovaní fyziky. Dúfame, že aspoň malou mierou prispejú ku zlepšeniu situácie, ktorá sa týka popularity fyziky na Slovensku.

Poďakovanie

Prezentované vytvorené pomôcky spolu s námetmi na ich využitie vo formálnom aj neformálnom fyzikálnom vzdelávaní budú v priebehu času doplnené ďalšími a spoločne budú spracované formou diplomovej práce.

Touto cestou by som chcel zároveň poďakovať mojej konzultantke diplomovej práce, RNDr. Janke Raganovej, PhD., za cenné rady a nápady, ktoré mi poskytla aj pri konzultovaní tejto práce.

Literatúra

[Balážovič, 2010] Balážovič, M.: *Fyzika v ohrození.* In .týždeň [online]. [2013-04-03]. Dostupné na internete: <http://betablog.tyzden.sk/balazovicm/2010/11/19/fyzika-v-ohrozeni/>.

[Komenský, 1979] Komenský, J. Á. (1979). *Didaktika veľká*. Bratislava : SPN.

[Petlák, 2004] Petlák, E. (2004). *Všeobecná didaktika.* Bratislava : IRIS.

[Kašpar, 1978] Kašpar, E. a kol. (1978). *Didaktika fyziky – obecné otázky.* Praha : SPN.

[Prúcha, 2004] Prucha, J. a kol. (2004). *Pedagogický slovník.* 4. vyd. Praha : Portál.

[Driensky and Hrmo, 2004] Driensky, D. – Hrmo, R. (2004). *Materiálne didaktické prostriedky.* Bratislava : Nakladateľstvo STU v Bratislave.

[Dostál, 2008] Dostál, J. (2008). *Učební pomucky a zásada názornosti.* Olomouc : VOTOBIA.

[Bruman, 1991] Bruman, R. (1991). *Exploratorium Cookbook I*. San Francisco : Exploratorium staff.

[Hipschman, 1983] Hipschman, R. (1983). *Exploratorium Cookbook II*. San Francisco : Exploratorium staff.

[Hipschman, 1993] Hipschman, R. (1993). *Exploratorium Cookbook III*. San Francisco : Exploratorium staff.

[Reichl, 2004] Reichl, J. (2004). *Levitující krabička od filmu.* In Matematika - fyzika - informatika, 2004, s. 612 – 614.

[Bulla, 1999] Bulla, M. (1999). *Využitie trojrozmerných pomôcok pri formálnom i neformálnom fyzikálnom vzdelávaní* : diplomová práca. Banská Bystrica.

[Raganová and Bulla, 2001] Raganová, J. – Bulla, M. (2001). *Interaktívne fyzikálne pomôcky ako prostriedok zvyšovania názornosti vo fyzikálnom vzdelávaní.* In Matematika - fyzika - informatika, roč. 10, 2001, č. 7, s. 417.

[Raganová and Bulla, 1999] Raganová, J. - Bulla, M. (1999). *Rozvíjanie fyzikálneho vzdelávania prostredníctvom interaktívnych výstav.* In Acta Universitatis Matthiae Belii FPV III/99. Fyzika. Banská Bystrica : FPV UMB, 1999, s. 108.

Obrázky:

Ami v Benátkach. [online]. [cit. 2013-01-17]. Dostupné na internete: <http://amidala.blog.sk/detail.html?a=cacbb9f7004ebfb0f3d06566d91d7906>.

Early Chinese Compass. [online]. [cit. 2013-02-06]. Dostupné na internete: <http://www.magnet.fsu.edu/education/tutorials/museum/chinesecompass.html>.

Elektromagnety nad 5T. [online]. [cit. 2013-02-06]. Dostupné na internete: <http://www.magcentrum.sk/elektromagnety-nad-5t.html>.

Hora. [online]. [cit. 2013-01-17]. Dostupné na internete: <http://obrazky.4ever.sk/priroda/hory/hora-145342>.

Jedinák, D. 2010. *Isaac NEWTON – vypočítal som to*. [online]. [cit. 2013-01-18]. Dostupné na internete: <http://www.hvezdaren.sk/zaujimavosti/spomienky-na-vyznacnych-fyzikov/isaac-newton-vypocital-som-to.html?page_id=673>.

Sobolewski, J. *Mineralienatlas*. [online]. [cit. 2013-02-07]. Dostupné na internete: <http://www.mineralienatlas.de/lexikon/index.php/Mineralienportrait/Magnetit>.

Zrkadlo. [online]. [cit. 2013-01-18]. Dostupné na internete: <http://sk.wikipedia.org/wiki/Zrkadlo>.

K možnostiam využívania žiakmi vytvorených modelov na hodine fyziky

Mária Beniačiková* Katarína Krišková†
Školiteľ: Martin Hruška‡

katedra fyziky FPV UMB, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, Slovenská republika

Abstrakt

Vo vyučovaní fyziky a ostatných prírodných vied sa využívajú rôzne modely, ktoré majú žiakom zjednodušiť poznávanie a pomôcť vybudovať správnu predstavu o skúmanom jave. Modely síce vystihujú dôležité aspekty skúmaného javu, zároveň však treba pamätať na ich obmedzený popis reality, ktorý vyplýva priamo zo samotnej podstaty modelu ako priblíženia reálnej situácie. V príspevku sa zaoberáme dvomi modelmi – modelom slnečnej sústavy a modelom atómu. Cieľom využitia spomenutých modelov na vyučovaní je predovšetkým rozvíjať kritické myslenie žiakov a zmeniť ich nesprávne predstavy súvisiace so skúmanými javmi a objektmi. Navrhnuté a žiakmi vytvorené modely je možné použiť ako podporné materiály k už existujúcim modelom skúmaného javu.

Kľúčové slová: model, slnečná sústava, atóm

1 Úvod

V školskom prostredí sa často stretávame s modelovaním. Takmer na každom vyučovacom predmete je potrebné používať model. Rovnako je tomu aj vo fyzike. Často sa stáva, že pri modeloch s ktorými na vyučovaní pracujeme, si žiaci vytvoria nesprávne predstavy o skúmanom jave, pretože si mylne myslia, že daný model presne zodpovedá skutočnosti. Je preto vhodné používať rôzne druhy modelov, prípadne žiakov upozorniť, že daný model nespĺňa všetky aspekty reality, ale sú v ňom určité nepresnosti. V našej práci sme sa zamerali na model slnečnej sústavy a atómu, pričom sme sa venovali hlavne pomerom veľkostí a vzdialeností.

2 Modely a modelovanie vo fyzike

Nielen vo fyzike, ale aj v rámci fyzikálneho vzdelávania na školách, sa stretávame s objektmi, ktoré chceme podrobnejšie skúmať, zistiť aké majú vlastnosti a ako sa správajú v rôznych situáciách. Často sú reálne objekty príliš zložité, nevhodné na skúmanie v školskom prostredí, prípadne príliš malé, či veľké na to, aby sme s nimi mohli pracovať. Aby sme tieto objekty mohli so žiakmi skúmať, musíme ich nahradiť modelom, ktorý ich reprezentuje.

Modely nahrádzajú skúmaný objekt či jav, pričom sa jedná o zjednodušenú konštrukciu. Preto model reprodukuje reálny objekt len v niektorých vlastnostiach. Vlastnosti reálneho objektu, ktoré pri skúmaní daného javu tento jav neovplyvňujú, prípadne majú len veľmi malý vplyv, zanedbávame. Zanedbaním týchto vlastností zjednodušujeme objekt a následne aj jeho skúmanie.

Pri vytváraní modelov si preto musíme ujasniť, aké vlastnosti a správanie má model demonštrovať a na základe toho sa rozhodnúť, ktoré z vlastností reálneho javu bude model obsahovať, a ktoré aspekty zanedbáme. Model musí byť zostrojený tak, aby „poznatky, ktoré sme získali jeho skúmaním, boli rovnocenné s poznatkami, ktoré by sme získali skúmaním reálneho objektu“ [Janovič et al, 2003, str. 25].

3 Navrhované modely

V rámci predkladanej práce sme sa zamerali na dva modely, s ktorými sa žiaci základných a stredných škôl stretávajú nielen na hodinách fyziky, ale aj na iných vyučovacích predmetoch. Jedná sa o model Slnečnej sústavy a model atómu. Prostredníctvom týchto modelov chceme poukázať na často mylné predstavy, ktoré majú žiaci o daných objektoch. Pri zostrojovaní modelov sa zameriavame aj na rozvoj kritického myslenia a na aktívnu poznávaciu činnosť žiakov.

Nakoľko sa navrhované modely zameriavajú len na jednu z vlastností skúmaných objektov, ich využitie je obmedzené. Preto by sa mali dané modely používať ako podporné materiály k už existujúcim modelom.

* maria.beniacikova@gmail.com
† katarina.kri@gmail.com
‡ martin.hruska@umb.sk

3.1 Model slnečnej sústavy

So skúmaním slnečnej sústavy sa žiaci stretávajú na hodinách fyziky, ale aj na hodinách geografie. Keďže nám nie je umožnené priamo skúmať slnečnú sústavu, nahrádzame ju modelmi. Modely slnečnej sústavy sú rôzne – od grafických modelov, ktoré nájdeme na stránkach kníh a encyklopédií, rôznych 3D objektov, až po počítačové interaktívne modely.

Avšak väčšina týchto modelov sa zameriava najmä na zobrazenie jednotlivých planét slnečnej sústavy, ich trajektórií, postaveniu voči slnku či ostatným planétam.

Preto sme sa rozhodli, že so žiakmi zostrojíme model slnečnej sústavy, ktorý znázorňuje reálny pomer veľkostí planét a ich vzdialeností od Slnka. Pri výrobe daného modelu sa snažíme poukázať na to, že modely slnečnej sústavy dané veličiny nezobrazujú správne. Pri rozbore danej situácie chceme žiakov priviesť k tomu, aby kriticky posúdili existujúce modely, a zamerali sa na vlastnosti, ktoré nie sú zobrazené správne.

Na zostrojenie daného modelu potrebujeme vedieť priemer planét a ich vzdialenosť od Slnka. Za základ nami zostrojeného modelu sme zvolili Slnko, ktoré nahradíme tenisovou loptičkou. Základ modelu si učiteľ môže zvoliť s ľubovoľnou veľkosťou, avšak by mal pamätať na to, aby nebol model príliš malý, alebo príliš veľký. Na základe pomeru priemeru Slnka a priemeru tenisovej loptičky vypočítame priemery planét aj vzdialenosti. Vypočítané vzdialenosti sú len približné, nakoľko skutočné priemery planét a vzdialenosti, ako aj priemer tenisovej loptičky nie je presné číslo. Tabuľka 1 [Tab. 1] zobrazuje reálne a prepočítané vzdialenosti pre nami zostrojený model.

Tab. 1: Vzdialenosti planét od Slnka a priemer jednotlivých planét

	Prepočítaný priemer [mm]	Prepočítaná vzdialenosť od Slnka [m]
Slnko	70	0
Merkúr	0,2	2,9
Venuša	0,6	5,4
Zem	0,6	7,5
Mars	0,3	11,5
Jupiter	7,1	39,1
Saturn	5,8	71,8
Urán	2,3	144,4
Neptún	2,2	226,3

Ak žiaci nemajú potrebné znalosti na výpočet daných vzdialeností, môžeme na prepočet použiť webovú aplikáciu.

Na základe prepočítaných priemerov zvolíme vhodných reprezentantov daných planét, ktorých použijeme v modeli. Tieto zavesíme v správnom poradí na špagát v prepočítanej vzdialenosti.

Takto zostrojený model zobrazuje reálny pomer veľkostí planét a ich vzdialeností od Slnka. Zostrojený model môžu žiaci porovnať s existujúcimi modelmi, pričom sa zamerajú na spoločné a rozdielne vlastnosti modelov.

3.2 Realizácia modelu vo vyučovacom procese

Daný model sme zostrojili so žiakmi piateho ročníka základnej školy na Škole u Filipa v Banskej Bystrici, v rámci predmetu *Ako to funguje*. Cieľom predmetu je doplniť, prípadne rozšíriť obsah učiva prírodovedných predmetov, ako sú fyzika, chémia, geografia a biológia. Daný predmet sa vyučuje v dvojhodinových blokoch.

Hodina pozostávala z troch častí: úvodné opakovanie, modelovanie slnečnej sústavy žiakmi a vytvorenie novej predstavy o slnečnej sústave.

V úvodnej časti sme si formou testu zopakovali vedomosti o slnečnej sústave. V teste nazvanom Vesmírny cestovateľ mali žiaci odpovedať na otázky týkajúce sa poradia a počtu planét slnečnej sústavy, a niektorých vlastností slnečnej sústavy.



Obr. 1: Nafukovací model slnečnej sústavy

Každý žiak dostal odpoveďový hárok, na ktorom boli vyznačené planéty slnečnej sústavy a Slnko. Každý, kto uviedol správnu odpoveď, mohol cestovať na ďalšiu planétu. Žiaci medzi sebou súťažili, kto v slnečnej sústave docestuje najďalej. Niektorí žiaci docestovali až na Neptún, niektorí sa však zastavili na Zemi.

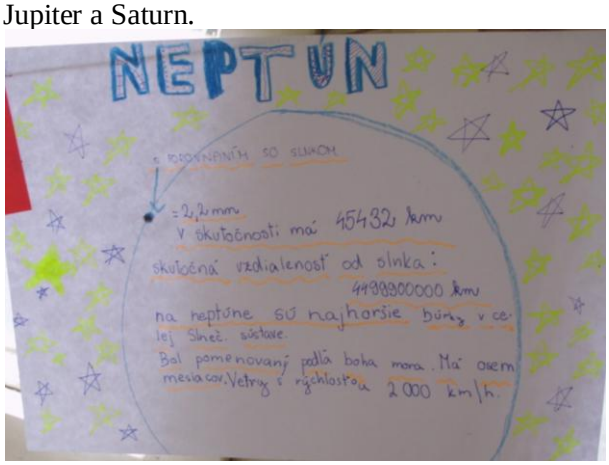
Po precestovaní slnečnej sústavy sme žiakov rozdelili do dvojíc a rozdali sme im nafukovacie modely planét. Úlohou žiakov bolo, aby sa rozostavili tak, ako si predstavujú slnečnú sústavu. Žiaci správne určili poradie planét, a postavili tesne k Slnku v správnom poradí. Následne sme začali diskutovať o slnečnej sústave. So žiakmi sme sa zamerali na pomery veľkostí planét a ich vzdialenosti. Žiaci uvideli, že Slnko je v porovnaní s planétami asi 500-krát väčšie, veľkosti planét

však porovnávať nevedeli. O vzdialenosti planét tiež nemali správne predstavy.
Po diskusií sme sa presunuli do lavíc, a pozreli sme sa na tabuľku veľkostí a vzdialeností planét. Ako model Slnka sme zvolili tenisovú loptičku a s ňou sme porovnávali veľkosti jednotlivých planét. Spoločne sme zistili, že v porovnaní s 7 centimetrovým Slnkom by mala naša Zem veľkosť 0,6 milimetra, najmenšia planéta Merkúr by mala veľkosť 0,1 mm a veľkosť najväčšieho Jupitera by bola 7,1 mm.



Obr. 2: Výroba modelu slnečnej sústavy

Na základe zistených veľkostí planét sme určili Merkúr, Venušu, Zem a Mars ako makové zrniečko, zrniečko čierneho korenia zobrazovalo Urán a Neptún a nové korenie znázorňovalo Jupiter a Saturn.



Obr. 3: Model slnečnej sústavy – planéta Neptún

Keď už žiaci poznali veľkosti planét, opäť sme ich rozdelili do dvojíc a zadali sme im samostatnú prácu. Žiaci z dostupných zdrojov – encyklopédia a internet, zistili základné informácie o planétach a následne o každej planéte napísali tieto informácie na výkres veľkosti A4, na ktorý prilepili aj zrniečko znázorňujúce danú planétu.

V závere hodiny každý žiak predstavil spolužiakom planétu o ktorej písal. Spoločne sme na špagáte namerali vzdialenosti planét od Slnka a v daných vzdialenostiach sme zavesili plagátiky o jednotlivých planétach. Vytvorenú slnečnú sústavu sme následne zavesili na chodbe školy. Z dôvodu, že veľkosť chodby nebola dostatočná na zavesenie celej slnečnej sústavy, mohli sme ako poslednú planétu slnečnej sústavy zavesiť Mars.

3.3 Model atómu

S atómom sa žiaci stretávajú na základnej škole najmä v chémii. Na strednej škole sa atómom zaoberá aj fyzika. Žiaci si na základe vedomostí ktoré nadobudnú, predstavujú atóm rôznym spôsobom, pričom sú ich predstavy ovplyvnené modelmi, s ktorými sa na hodinách stretávajú.

Väčšina modelov, ktoré zobrazujú atóm a jeho jadro, sa zameriava na fakt, že v strede atómu sa nachádza jeho jadro, ktoré je zložené z protónov a neutrónov. Pritom sú častice tvoriace atóm zobrazené rovnakou veľkosťou, prípadne sú elektróny zobrazené ako guľôčky, pričom sa jedná o bodové častice.

Jeden z modelov atómu, s ktorým sa môžu žiaci stretnúť, sa nachádza v učebnici Fyziky [Pišút et al, 2003]. V danej učebnici sa uvádza takýto model atómu: „Keby sme rozmery protónu zväčšili na hrášok s polomerom 3 mm, potom by mal pri tom istom zväčšení atóm vodíka polomer vyše 300 m . Z tohto hľadiska je atóm vodíka, rovnako ako iné atómy, prakticky „prázdny“ [[Pišút et al, 2003, str. 107].

Daný model je na zostrojenie príliš veľký, ale vyjadruje skutočný pomer veľkostí atómu a protónu.

Nami navrhovaný model atómu sa bude zameriavať na skutočný pomer veľkostí atómu a jadra atómu. Zamerali sme sa na najjednoduchší atóm – atóm vodíka. Pri prepočítavaní polomerov [Tab. 2] sme zvolili taký pomer, aby sa dal model zostrojiť.

Pri zostrojení modelu musíme nájsť vhodné objekty, ktoré budú reprezentovať časti atómu. Za atóm by sme si mohli zobrať vežový guľový vodojem, ktorý sa bežne nachádza v blízkosti poľnohospodárskeho družstva. V danom pomere by teda mal protón a neutrón veľkosť peľového zrniečka.

Tab. 2: Reálne a prepočítané polomery atómu a jeho častí

	reálne polomery [m]	prepočítané polomery [m]
atóm	$0{,}53.10^{-10}$	5,3
protón	$0{,}7.10^{-15}$	$0{,}7.10^{-4}$
neutrón	$0{,}7.10^{-15}$	$0{,}7.10^{-4}$

Žiakov môžeme nasmerovať k tomu, aby si v dostupných zdrojoch vyhľadali model atómu, ako aj polomery atómu a jeho častí a aby ich porovnali. Na základe porovnania žiaci odhalia, že modely nezobrazujú realitu.

Pri konfrontácii navrhovaného modelu a existujúceho modelu poukazujeme na nesprávne predstavy žiakov so snahou o ich odstránenie.

4 Záver

Pri vytváraní modelu slnečnej sústavy a modelu atómu sme sa pozreli na varianty modelov, ktoré sa odlišujú od zaužívaných modelov. Žiaci základných a stredných škôl sa často nezamýšľajú nad ďalšími aspektmi jednotlivých dostupných modelov. Pri praktickej aplikácii modelu slnečnej sústavy medzi žiakmi piateho ročníka základnej školy sme zistili, že žiaci majú často nesprávne predstavy o predkladaných modeloch. Žiaci pri modelovaní slnečnej sústavy vedeli ako sú planéty slnečnej sústavy usporiadané, ale nezamýšľali sa nad pomerom veľkostí planét slnečnej sústavy a tiež nad vzdialenosťami jednotlivých planét od Slnka. Tým, že sme so žiakmi vytvorili model slnečnej sústavy v približnom pomere reálnych vzdialeností a veľkostí planét si žiaci doplnili svoje predstavy o slnečnej sústave.

Poďakovanie

Rady by sme sa poďakovali nášmu školiteľovi Mgr. Martinovi Hruškovi, PhD. za cenné pripomienky a užitočné rady.

Literatúra

Build a Solar system. [online]. Dostupné na internete: <http://www.exploratorium.edu/ronh/solar_system/>.

[Janovič et al, 2003] Janovič, J., Koubek, V., Pecen. I. 1999. *Vybrané kapitoly z didaktiky fyziky*. Bratislava: Univerzita Komenského, 1999.

[Pišút et al, 2003] Pišút, J. a i., 2003. *Fyzika pre 4.ročník gymnázií*. Bratislava : Slovenské pedagogické nakladateľstvo – Mladé letá, s.r.o., 2003.

[Raganova and Pfefferová, 2002] Raganová, J., Pfefferová, M. 2002. Medzipredmetové vzťahy vo vyučovaní informatiky a fyziky na gymnáziu. In: *Didinfo 2002*. Banská Bystrica : Univerzita Mateja Bela, Fakulta prírodných vied, 2002. s. 112 – 116.

[Volf, 2012] Volf, I. 2012. Výuka fyziky: vytváření a užívaní modelů. In: *Československý časopis pro fyziku*. 62 (2012) č. 5 – 6, s. 377 - 381.

The Anomalous Spectral Function of Superconductors

Tomáš Bzdušek[1]*

Supervisor: Richard Hlubina[2]†

[1] Department of Theoretical Physics and Didactics of Physics, FMFI UK, Mlynská Dolina 842 48 Bratislava
[2] Department of Experimental Physics, FMFI UK, Mlynská Dolina 842 48 Bratislava

The spectral function of electrons is at present commonly used to study the electronic properties of condensed matter systems. It is investigated not only theoretically but also experimentally – by the angle-resolved photoemission and inverse photoemission spectroscopies. Unfortunately, it only shows the net result of all playing mechanisms. In our work we raise a question whether it is possible to obtain more specific spectroscopic information. We specialize on the easiest superconductive systems and study their *anomalous spectral function* which in the Nambu-Gorkov formalism corresponds to the off-diagonal Green's function. There is a reason to expect that this object encodes information about the pairing mechanism of the superconductive electrons – information not contained in the "ordinary" spectral function.

The anomalous spectral function $B_{\mathbf{k}}(x)$ may be defined using temperature Green's functions through

$$\begin{aligned} F(\mathbf{k},\tau) &= -\left\langle \hat{\mathbf{T}} c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)\ c_{-\mathbf{k}\downarrow} \right\rangle \\ \overline{F}(\mathbf{k},\omega_\ell) &= \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{i\omega_\ell \tau} F(\mathbf{k},\tau) \stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{B_{\mathbf{k}}(x)\mathrm{d}x}{i\omega_\ell - x} \end{aligned}$$

with $\hat{\mathbf{T}}$ the time-ordering operator and $\beta^{-1} = k_{\mathrm{B}}T$. Inspired by [White, 1991] we calculate a set of sum rules

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x x^n B_{\mathbf{k}}(x) = \left\langle \left\{ \left[c_{\mathbf{k}\uparrow}, \mathscr{H} \right]_n, c_{-\mathbf{k}\downarrow} \right\} \right\rangle \qquad (1)$$

for the electron-phonon Hamiltonian and for the Hubbard model. In equation (1) the multiple commutator $\left[c_{\mathbf{k}\uparrow}, \mathscr{H} \right]_n$ is defined iteratively starting from $\left[c_{\mathbf{k}\uparrow}, \mathscr{H} \right]_0 = c_{\mathbf{k}\uparrow}$. A virtue of the sum rules is that they give some information about the solution to the many-electron problem without actually solving it.

Our calculation gives a remarkable result that for (*i*) the electron-phonon Hamiltonian *without Coulomb repulsion* and for (*ii*) a *d-wave superconductor* in the Hubbard model, all 0^{th}, 1^{st}, and 2^{nd} moments of $B_{\mathbf{k}}(x)$ vanish. This is notable because the first moment of the BCS solution

$$B_{\mathbf{k}}^{\mathrm{BCS}}(x) = \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \left[\delta(x - E_{\mathbf{k}}) - \delta(x + E_{\mathbf{k}}) \right]$$

is *nonzero*. We thus propose a hypothesis that the exact solutions of the cases (*i*) and (*ii*) contain a small noncoherent part of an opposite sign to annihilate the first moment.

We numerically study the case (*i*) by iteratively solving the Eliashberg equations on the imaginary axis and then analytically continuing the solution to the real axis using the method of Padé approximants [Beach et al., 2000]. The anomalous spectral function $B_{\mathbf{k}}(x)$ is then obtained by taking the imaginary part of the off-diagonal Green's function on the real axis. The noncoherent negative part of $B_{\mathbf{k}}(x)$ is in fact found, and the first moment is computed to be zero indeed. We also show that turning on a weak Coulomb repulsion preserves the noncoherent feature.

We further investigate whether $B_{\mathbf{k}}(x)$ could be measured experimentally. We calculate the irreducible spin-spin and density-density correlation functions of a superconductor (without vertex correction). It turns out that taking their sum and difference separates the contributions of the ordinary and anomalous spectral functions. A noteworthy corollary is that convolutions of the anomalous spectral function are in principle observable. We conclude with some notes on the solution of the problem of inversion which seems to be feasible at least at zero temperature.

A more comprehensive documentation of this project can be found in my master thesis available at http://fks.sk/~bzduso/physics/master/

References

[Beach et al., 2000] Beach, K. S. D., Gooding, R. J., and Marsiglio, F. (2000). Reliable Padé analytical continuation method based on a high-accuracy symbolic computation algorithm. *Physical Review B*, 61(8):5147–5157.

[White, 1991] White, S. R. (1991). Spectral weight function for the two-dimensional Hubbard model. *Physical Review B*, 44(9):4670–4673.

*tomas.bzdusek@gmail.com

†Richard.Hlubina@fmph.uniba.sk

Nelineárne transformácie femtosekundových impulzov v dvojjadrových mikroštruktúrnych optických vláknach

Ľubomír Čurilla[1]*
Školiteľ: Ignác Bugár[2‡]

[1] Katedra experimentálnej fyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava
[2] Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava

Abstrakt

Dvojjadrové mikroštruktúrne optické vlákna predstavujú špeciálny typ optických vlnovodov s rôznymi unikátnymi vlastnosťami, ktoré majú vysoký aplikačný potenciál v optických komunikačných systémoch, ale aj v spektroskopii. Vďaka svojim vlastnostiam sú progresívnym prvkom aj v oblasti riadenia signálu v zariadeniach využívajúcich plne optické prepínanie signálu. Cieľom prezentovanej práce je vyšetrovanie nelineárnych vlastností dvojjadrového mikroštruktúrneho optického vlákna s cieľom prepínania medzi jadrami zmenou vstupnej energie žiarenia a pozornosť je pri tom venovanáná aj na spektrálne rozširovanie femtosekundových impulzov počas nelineárneho šírenia.

Kľúčové slová: mikroštruktúrne optické vlákno, dvojjadrové vlákno, plne optické prepínanie, femtosekundové impulzy, spektrálne rozširovanie.

1 Úvod

Optické vlákna vo svojej konvenčnej forme sú v dnešnej dobe bežnou súčasťou rôznych zariadení pracujúcich na optických princípoch. Najväčšie uplatnenie našli v oblasti telekomunikačných technológií, kde sa stali dôležitým nástrojom na prenos informácií. Zaujímavým novým typom tejto kategórie vlákien sú mikroštruktúrne optické vlákna (MOF) s princípom vedenia svetla na báze zakázaných fotonických pásov. V súčasnej dobe je pozornosť venovaná aj na vyšetrovanie dvojjadrových MOF, pri ktorých vhodný dizajn mikroštruktúry zabezpečí vzájomnú väzbu medzi jadrami. Táto väzba je kľúčová pri študovaní javov spojených s optickým prepínaním prenášaného signálu medzi dvomi jadrami na výstupe vlákna. Vedecký výskum je preto v tejto oblasti zameraný na štúdium vzájomnej väzby jadier, jej charakterizácie a vplyvu na dvojjadrové šírenie sa svetla vláknom. Dvojjadrové vlákna sú sféricky asymetrické, preto vykazujú značný dvojlom umožňujúci riadenie svetelného poľa pomocou zmien jeho polarizačného stavu a v prípade použitia vyšších energií žiarenia aj možnosť nelineárneho prepínania žiarenia medzi jednotlivými jadrami.

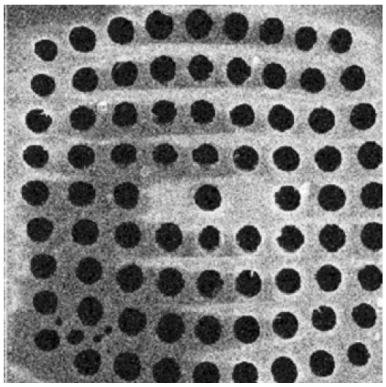
2 Mikroštruktúrne optické vlákna

Mikroštruktúrne optické vlákna predstavujú nekonvenčný typ optických vlákien, pretože vo svojom priereze obsahujú mikroštruktúru s najrôznejším geometrickým usporiadaním. Sú vyrobené zväčša z homogénneho materiálu s indexom lomu n_0 a v oblasti ich jadier je mikroštruktúra tvorená vzduchovými kapilárami s priemerom d a periódou Λ [Koyš, 2010]. Príprava mikroštruktúrnych vlákien sa realizuje pomocou metódy „stuck – and – pull“, ktorá je známa z prípravy konvenčných optických vlákien. Rozdiel je v tom, že makroskopická preforma je okrem jadra a obalu tvorená aj kapilárami v usporiadaní, ktoré po zmenšení priečneho rozmeru vytvárajú potrebnú mikroštruktúru. Podľa typu jadra rozlišujeme dva hlavné typy mikroštruktúrnych vlákien. Vlákno s pevným jadrom sa pripravuje nahradením jednej vzduchovej kapiláry v preforme homogénnou tyčou. Na druhej strane vlákno s dutým jadrom sa pripravuje zväčšením priemeru centrálnej vzduchovej kapiláry. V porovnaní s konvenčnými vláknami sa MOF s pevným jadrom vyznačujú vysokým kontrastom indexov lomu jadra a obalu, čo má za následok lepšie lokalizovanie jednotlivých módov v jadre. Modifikáciou mikroštruktúry je možné dosiahnuť zmenu rôznych optických vlastností vlákna a zvýrazniť alebo potlačiť nelineárne efekty.

2.1 Dvojjadrové MOF

Špeciálnym typom vlákien sú vlákna, ktoré vo svojom priereze obsahujú dve súbežné jadrá (Obr. 1), v prípade ktorých evanescentné polia hrajú dôležitú úlohu. V prípade, že je vzdialenosť medzi jadrami príliš veľká, môže byť svetelná vlna vedená v každom jadre zvlášť bez vzájomného ovplyvňovania.

* lubo.curilla@gmail.com
‡ bugar@ilc.sk



Obr. 1: Ukážka reálnej mikroštruktúry s dvomi jadrami.

Na druhej strane dizajn vlákna môže umožniť, že sa evanescentné polia jednotlivých jadier vzájomne prekrývajú a tým dochádza k optickej väzbe medzi jadrami. Táto väzba spôsobí periodické prelievanie elektromagnetickej energie z jedného jadra do druhého. Tento jav otvoril nové možnosti manipulácie so svetelným poľom a na realizáciu úloh spracovania prenášaného signálu.

V matematickom popise šírenia sa svetla dvojjadrovým vláknom a uvážením vzájomnej väzby jadier sa dajú použiť dva rôzne prístupy. Prvým je teória viazaných módov (CMT – Coupled Mode Theory), v ktorej sa s obidvoma jadrami pracuje ako so samostatnými entitami a prelievanie energie medzi nimi je spôsobené ich vzájomnou väzbou. Druhým prístupom je teória tzv. supermódov, v ktorej sa s vláknom pracuje ako s celkom a žiarenie sa šíri vo forme supermódov pokrývajúcich obidve jadrá vlákna.

2.2 Teória viazaných módov

Teória je založená na opise oboch jadier ako samostatných vlnovodov, ktoré sú navzájom viazané väzbovým koeficientom. Výstupom z tejto teórie je dvojica funkcií (CME – Coupled Mode Equations) popisujúcich periodické prelievanie sa energie medzi jednotlivými jadrami [Agrawal, 2001]. Základné viazané rovnice sa matematicky odvádzajú z Helmholtzovej rovnice pre optický signál s frekvenciou ω, ktorý sa šíri vláknom v smere osi z

$$\nabla^2 \tilde{\tilde{E}} + \tilde{n}^2(x,y) k_0^2 \tilde{\tilde{E}} = 0, \qquad (1)$$

kde $k_0 = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda_0}$, c je rýchlosť svetla vo vákuu, λ_0 je vlnová dĺžka vo vákuu a $\tilde{\tilde{E}}(\vec{r},\omega)$ predstavuje Fourierovu transformáciu elektrického poľa $\vec{E}(\vec{r},t)$. Teória viazaných módov je založená na predpoklade, že riešenie základnej Helmholtzovej rovnice (1) sa dá napísať v tvare

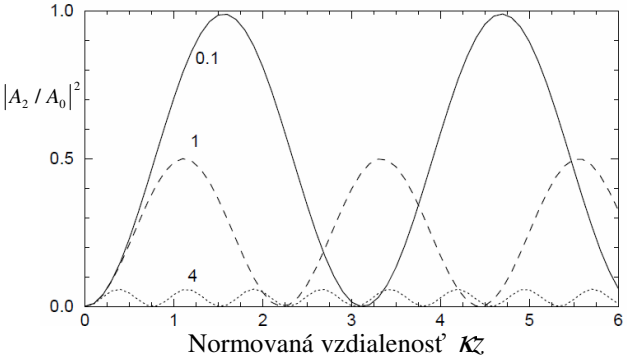
$$\tilde{\tilde{E}}(\vec{r},\omega) \approx \hat{e}\left[\tilde{A}_1(z,\omega)F_1(x,y) + \tilde{A}_2(z,\omega)F_2(x,y)\right]e^{i\beta z}, \qquad (2)$$

kde β je konštanta šírenia, $\tilde{A}_{1,2}$ predstavujú amplitúdy žiarenia v jednom a druhom jadre a $\hat{e}$ predstavuje smer polarizácie, ktorý sa počas šírenia nemení. F_m (m=1,2) predstavuje priestorové rozloženie základného módu v m-tom jadre. Riešením tohto problému a prechodom do časovej oblasti využitím inverznej Fourierovej transformácie dostávame vyjadrenia pre amplitúdy žiarenia v oboch jadrách. V prípade, že žiarenie je naviazané iba do jedného jadra, teda $A_1(0) = A_0$ a $A_2(0) = 0$, riešenie rovníc pre amplitúdy $A_{1,2}$ bude v tvare

$$A_1(z) = A_0\left[\cos(\kappa_e z) + i\left(\frac{\delta_a}{\kappa_e}\right)\sin(\kappa_e z)\right] \qquad (3a)$$

$$A_2(z) = A_0\left(\frac{i\kappa_{21}}{\kappa_e}\right)\sin(\kappa_e z), \qquad (3b)$$

kde κ_{mn} (m,n=1,2) predstavujú väzbové koeficienty medzi jadrami, $\kappa_e = \sqrt{\kappa^2 + \delta_a^2}$ je efektívny väzbový koeficient, $\kappa = \sqrt{\kappa_{12}\kappa_{21}}$ a $\delta_a = \frac{1}{2}(\beta_{01} - \beta_{02})$ predstavuje mieru asymetrie fázových rýchlostí medzi oboma jadrami. Napriek tomu, že na začiatku bolo žiarenie naviazané iba do jedného jadra, pri šírení dochádza k periodickému prelievaniu energie z jedného jadra do druhého, pričom perióda závisí od parametra κ_e, resp od κ a δ_a. Obr. 2 znázorňuje pomer amplitúd $|A_2/A_0|^2$ ako funkciu z pre rôzne hodnoty δ_a/κ.



Obr. 2 Závislosť pomeru amplitúd $|A_2/A_0|^2$ ako funkcie normovanej vzdialenosti κz pre rôzne hodnoty δ_a/κ: 0,1; 1; 4.

Z obr. 2 je zrejmé, že len v prípade symetrickej štruktúry, keď $\delta_a = 0$ môže byť prenesená celá svetelná energia z jedného jadra do druhého. Pritom

existuje presne definovaná najkratšia vzdialenosť, na ktorej dôjde k tomuto úplnému prenosu. Túto vzdialenosť charakterizuje jeden z najdôležitejších parametrov vlákna – väzbová dĺžka L_c, ktorá je definovaná vzťahom [Agrawal, 2001]

$$L_c = \frac{\pi}{2\kappa_e} \tag{4}$$

Na záver je nutné poznamenať, že pre nelineárne šírenie sa žiarenia je potrebné teóriu viazaných módov upraviť tak, že pri riešení sa nezanedbajú nelineárne členy. V tom prípade budú rovnice (3) zložitejšie a priamo závislé na hodnote intenzity vstupného žiarenia.

2.3 Nelineárne vlastnosti MOF

V súčasnosti je štúdium nelineárnych vlastností predmetom intenzívneho výskumu v oblasti vláknovej optiky. Mikroštruktúrne optické vlákna vďaka svojej štruktúre s vysokým koeficientom plnenia vzduchom a malým pevným jadrom umožňujú šírenie sa žiarenia s vysokou intenzitou na dlhých optických dráhach. Tieto vlákna vykazujú silnú nelineárnu odozvu a nazývajú sa vysoko nelineárne MOF [Stajanča, 2011]. Štúdium nelineárnych javov je z hľadiska využitia optických vlákien veľmi dôležité. Pre niektoré aplikácie sú tieto javy nežiadúce, pre iné môžu byť zdrojom špeciálnych režimov šírenia ako napr. generácia solitónov. Najdôležitejšie sú nelineárne javy tretieho rádu, keďže javy párnych rádov sú v materiáloch s centrom symetrie nulové ($\chi^{(n)} = 0$ pre n = 2, 4, 6...). Medzi najintenzívnejšie študované a aplikované javy tretieho rádu v oblasti vláknovej optiky patrí optický Kerrov jav a Ramanov rozptyl [Koyš, 2010].

Optický Kerrov jav popisuje zmenu indexu lomu v závislosti od intenzity vstupného optického žiarenia. Účinnosť tohto javu je popísaná nelineárnym koeficientom n_{NL} a výsledný index lomu materiálu je daný vzťahom

$$n(I) = n_L + n_{NL} I\,, \tag{6}$$

kde n_L je lineárna časť indexu lomu a I je intenzita žiarenia, ktoré sa šíri vláknom. Kerrov jav je základom mnohých dôležitých nelineárnych procesov vo vlákne ako sú samomodulácia fázy (SPM), krížová modulácia fázy (XPM) a generácia solitónov [Koyš, 2010]. Tieto javy sú v konečnom dôsledku zodpovedné za spektrálno – časové zmeny prenášaných impulzov, ako aj za priestorové v prípade dvojjadrových vlákien. Rozširovanie v spektrálnej oblasti je základom pre proces generácie superkontinua, ktorému sa v súčasnosti venuje značná pozornosť kvôli jeho aplikačnej atraktivite.

Ramanov rozptyl je spôsobený osciláciami atómov v mriežke. V porovnaní s Kerrovým javom je to pomalý proces kvôli väčším hmotnostiam jadier. Spontánny Ramanov rozptyl je spôsobený termálnymi fluktuáciami atómov, je zdrojom šumu v prenášanom signále a patrí k lineárnym procesom. Stimulovaný Ramanov rozptyl je vyvolaný stimulovanou emisiou neelasticky rozptýlených fotónov a patrí k nelineárnym procesom s výhodným využitím pre postupné zmenšovanie frekvencie prenášaného žiarenia [Koyš, 2010].

Nelineárne efekty by mohli okrem spektrálnych transformácií viesť aj k javu plne optického prepínania v prípade dvojjadrových vlákien, keďže konštanta šírenia a tým aj väzbová dĺžka je laditeľná zmenou intenzity vstupného poľa.

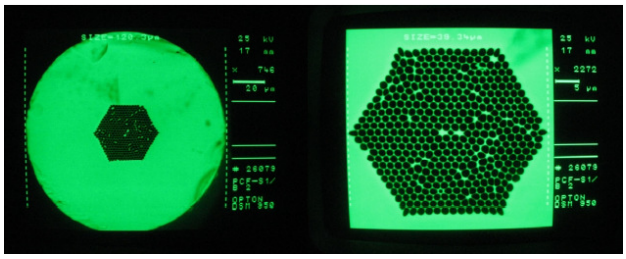
3 Štúdium nelineárneho spektrálneho rozširovania impulzov

Implementácia dvojjadrových MOF vo vláknovo-optických technológiách vyžaduje znalosť jeho charakteristík, medzi ktoré patria straty, disperzia, polarizačné vlastnosti a nelineárne vlastnosti. V prípade dvojjadrových vlákien je venovaná pozornosť aj možnosti prepínania žiarenia medzi jednotlivými jadrami zmenou polarizačnej roviny alebo intenzity (nelineárne prepínanie) vstupného žiarenia. V oblasti nelineárneho prepínania je obmedzujúcim javom rozšírenie spektra vstupného žiarenia, ktorý jav sa dá aj eliminovať, aj využiť na rozšírenie prepínania pre ďalšie vlnové dĺžky.

Obidve spomenuté metódy prepínania vyžadujú optimalizáciu parametrov vlákna, aj vstupného žiarenia, aby prepínanie prebiehalo s vysokou účinnosťou. V rámci prác, ktoré sa zaoberali touto problematikou boli demonštrované účinnosti prepínania nad 90 % [Betlej, 2006]. Zaujímavým rozmerom vyšetrovania dvojjadrových MOF je kombinácia polarizačného prepínania s nelineárnym šírením, keď otáčaním polarizačnej roviny sa dá ladiť plynule vlnová dĺžka výstupného žiarenia [Lorenc, 2008], respektíve jeho kontrast medzi dvomi jadrami vlákna [Bugar, 2008]. Motivovaná predošlými výsledkami predkladaná práca je zameraná na vyšetrovanie spektrálnych a priestorových transformácií poľa femtosekundových impulzov v blízkej infračervenej oblasti spektra pri ich nelineárnom šírení v jadrách dvojjadorvého MOF. Zamerali sme sa na vyšetrovanie spektrálneho rozširovania femtosekundových impulzov v dvojjadrovom MOF s pozornosťou zameranou aj na možnosti prepínania medzi jadrami zmenou vstupnej intenzity žiarenia. Experimentálne skúmanie vytýčených cieľov prebiehalo v priestoroch Medzinárodného laserového centra v Bratislave.

3.1 Charakteristika použitej vzorky vlákna

Počas experimentálnej činnosti bola použitá vzorka dvojjadrového mikroštruktúrneho optického vlákna s hexagonálnou geometriou mikroštruktúry, ktoré bolo vyrobené v Inštitúte technológií elektronických materiálov (ITME) so sídlom vo Varšave. Vlákno bolo vyrobené na základe špeciálnych požiadaviek Medzinárodného laserového centra (ILC) v Bratislave. Predstavuje typ dvojjadrového MOF vyrobeného z multikomponentného materiálu, so zvýšenou nelinearitou [Koyš, 2010].



Obr. 3 Mikroskopický záznam prierezu vyšetrovaného dvojjadrovného MOF.

Jednotlivé geometrické parametre vlákna sú zhrnuté v tab. 1

Priemer vlákna	120 ± 2 µm
Rozmer mikroštruktúry	40 ± 1 µm
Rozmer eliptických jadier pozdĺž ich hlavných a vedľajších poloosí	1,3; 1,8 ± 0,1 µm
Vzájomná vzdialenosť jadier	3,5 ± 0,5 µm
Rozmer vzduchových dutín	1,5 ± 0,2 µm
Vzdialenosť dvoch susedných vzduchových dutín	1,6 ± 0,2 µm

Tab. 1 Súhrn geometrických parametrov vlákna.

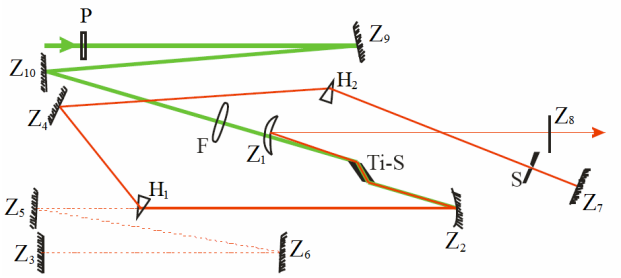
Dvojjadrové vlákna sú na základe ich sférickej asymetrie dvojlomné, ktorú vlastnosť eliptický tvar jadier predstaveného vlákna ešte viac zosilní. Použité vlákno je tým pádom vhodné aj na vyšetrovanie možnosti prepínania žiarenia zmenou polarizácie vstupného žiarenia.

3.2 Femtosekundový laserový systém

Na zabezpečenie nelineárneho šírenia v dvojjadrovom MOF boli použité femtosekundové laserové impulzy so strednou vlnovou dĺžkou v blízkej infračervenej oblasti spektra a s energiami v oblasti stoviek nanojoulov. Laserový systém, ktorý bol použitý na generáciu týchto impulzov pozostáva z femtosekundového Ti – Zafírového oscilátora, viacprechodového zosilňovača a optického parametrického zosilňovača (OPA).

1. Femtosekundový Ti – Zafírový oscilátor

Prvou časťou laserového systému je Ti – Zafírový laserový oscilátor TiF50 od spoločnosti CDP systems (Obr. 4), ktorý je čerpaný laserom Verdi od spoločnosti Coherent. Oscilátor generuje 100 fs impulzy s preladiteľnou vlnovou dĺžkou v rozsahu 760 – 830 nm. Opakovacia frekvencia impulzov je 80 MHz a priemerný výstupný výkon okolo 400 mW. Zelený lúč na obr. 4 predstavuje dráhu kontinuálneho čerpacieho žiarenia s vlnovou dĺžkou 532 nm a s výkonom 3,5 W, červený lúč predstavuje dráhu femtosekundových impulzov.



Obr. 4 Schematické znázornenie Ti – Zafírového oscilátora.

Význam optických prvkov, ktoré sú znázornené na obr. 4 je nasledovný:

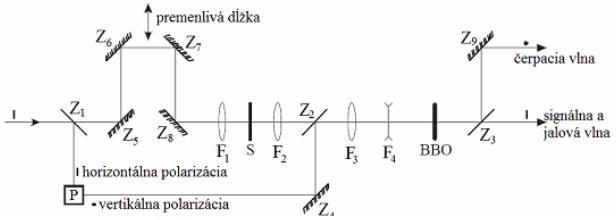
Ti – S: kryštál titánu dopovaný zafírom dlhý 5 mm; Z_1 – Z_8: dielektrické zrkadlá s vysokou odrazivosťou v oblasti 680 – 880 nm; Z_1, Z_2: vysoko odrazivé zrkadlá, priepustné pre čerpacie žiarenie s polomerom krivosti 100 mm; Z_8: výstupné zrkadlo s priepustnosťou 23 %; F: šošovka na fokusáciu čerpacieho žiarenia do Ti – S kryštálu s ohniskovou vzdialenosťou 90 mm; H_1, H_2: optické hranoly na kompenzáciu kladného lineárneho čirpu zväčšením optickej dráhy pre červené vlnové dĺžky a zmenšením pre modré vlnové dĺžky; Z_9, Z_{10}: zrkadlá pre usmernenie čerpacieho žiarenia; P: polarizačný rotátor, ktorý otáča rovinu polarizácie do horizontálneho smeru; S: štrbina, ktorá umožňuje prelaďovanie vlnovej dĺžky impulzov.

2. Femtosekundový Ti – Zafírovy viacprechodový zosilňovač

S cieľom zvýšiť intenzitu impulzu sa používa viacprechodový zosilňovač MPA50 od spoločnosti CDP system, ktorý funguje na báze zosilnenia čirpovaných impulzov (CPA - chirped pulse amplification). Keďže Ti – Zafírový kryštál by bol poškodený zosilnením femtosekundových impulzov, impulzy oscilátora sú najprv v čase roztiahnuté (nadobudnú čirp) a po procese zosilnenia skomprimované naspäť na ich pôvodnú dĺžku (100 fs). Zo zosilňovača vystupujú impulzy s vlnovou dĺžkou okolo 800 nm, a energiou 100 µJ pri opakovacej frekvencii 1 kHz. Opakovacia frekvencia je daná použitým čerpacím laserom Evolution od spoločnosti Coherent, ktorý generuje impulzy s dĺžkou 200 ns pri vlnovej dĺžke 527 nm a maximálnou energiou do 12 mJ.

3. Optický parametrický zosilňovač

Optický parametrický zosilňovač umožňuje meniť vlnovú dĺžku femtosekundových impulzov v blízkej infračervenej oblasti, v ktorej prebieha štúdium vyšetrovaného vlákna. Parametrický zosilňovač predstavuje nelineárny jav druhého rádu, ktorý spôsobí rozdelenie energie čerpacích (č) fotónov medzi dva generované fotóny. V prípade parametrickej generácie vznikajú dve nové polia, ktoré sa nazývajú signálna (s) a jalová (j) vlna. Z hľadiska zákona zachovania energie a hybnosti pre interagujúce fotóny v parametrickej generácii platí súčasne $\omega_č = \omega_s + \omega_j$, $\overrightarrow{k_č} = \overrightarrow{k_s} + \overrightarrow{k_j}$. Prvá rovnica determinuje frekvenciu a druhá vlnové vektory generovaných polí. Druhá rovnica je vlastne podmienka fázovej synchronizácie, ktorá sa dá dosiahnuť v anizotrópnych kryštáloch, keď čerpacia a signálna vlna sú vzájomne kolmo polarizované. V našom prípade sa na parametrické zosilnenie používa kryštál Beta – Barium – Borát (BBO), ktorý vykazuje vysokú hodnotu nelineárnej suscepibility druhého rádu a má anizotrópny charakter. V parametrickom generátore dochádza k zosileniu zdrojového signálu, ktorý vzniká generáciou superkontinua menšou časťou vstupnej energie. Väčšia časť vstupnej energie je použitá na zosilnenie zdrojového signálu po ich priestorovom a časovom prekrytí v nelineárnom kryštáli.



Obr. 5 Schematické znázornenie optického parametrického zosilňovača.

Schéma parametrického zosilňovača je znázornená na obr. 5 a obsahuje nasledovné optické prvky:

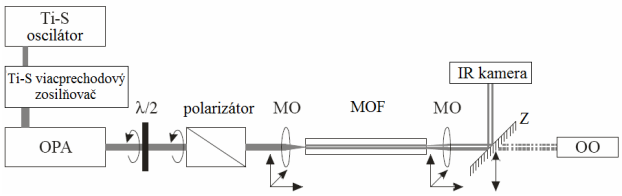
$Z_1 – Z_9$: dielektrické zrkadlá; $Z_2 – Z_3$: spektrálne selektívne dielektrické zrkadlá; P: polarizačný rotátor zostavený z dvoch zrkadiel, ktoré otáčajú polarizáciu o 90° a zároveň menia smer lúča k Z_4; $F_1 – F_4$: šošovky; S: zafírová doštička použitá na generáciu superkontinua; BBO: kryštál parametrickej generácie.

Femtosekundové impulzy sú v OPA preladiteľné v rozsahu 1110 – 1500 nm, ladenie prebieha otáčaním BBO kryštálu a zmenou časového oneskorenia medzi zdrojovým signálom a čerpacou vlnou na BBO kryštáli. V rámci tejto práce na výstupe z OPA bola nastavená vlnová dĺžka 1250 nm, pri ktorej je najúčinnejšia parametrická konverzia pre signálové impulzy s energiami na úrovni 500 nJ a dĺžkou okolo 80 fs.

3.3 Experimentálny postup a výsledky

Experimentálne usporiadanie aparatúry, ktoré bolo použité na vyšetrovanie nelineárnych transformácií femtosekundových impulzov je schematicky znázornené na obr. 6. Okrem zdroja femtosekundových impulzov obsahuje prvky na manipuláciu so vstupným žiarením a vzorkou vlákna a registračné zariadenia.

Vstupnú energiu fs impulzov, ktoré sú naviazané do jadra vlákna je možné regulovať systémom polvlnovej doštičky (λ/2) a polarizátora. Polarizátor pritom určuje aj smer ich roviny kmitov, ktorý bol nastavený tak, aby zodpovedal smeru rovnobežnému s osou jadier (Y – polarizácia) dvojjadrového MOF. Otáčaním polvlnovej doštičky pre pevnú polohu polarizátora sme menili vstupnú energiu impulzov. Prvotné nastavenie aparatúry prebehlo za účelom optimalizácie a) naviazania femtosekundového zväzku do jadier vlákna a b) registrácie žiarenia z výstupného konca vlákna.



Obr. 6 Schematické znázornenie experimentálnej aparatúry pre spektrálne rozširovanie femtosekundových impulzov.

Na naviazanie žiarenia do vlákna bol použitý mikroobjektív (MO) so štyridsaťnásobným zväčšením, ktorý bol umiestnený na posuvnom stojane Nanomax - TS značky ThorLabs umožňujúcom pohyb vo všetkých troch karteziánskych smeroch s presnosťou na 20 nm. Za vláknom sa nachádza rovnaký mikroobjektív, pomocou ktorého sme zobrazovali jednotlivé jadrá na infračervenú (IR) kameru Xeva USB FPA 320 od spoločnosti Xenics. Záznam kamery sme pozorovali na počítači pomocou dostupného programu X – Control 1.2. Samotné vlákno, ktoré sa nachádza upevnené na stojane medzi objektívmi, je upravené tak, aby jeho obe čelá boli hladké. Výstupné žiarenie z dvojjadrového MOF dopadalo na zberné optické vlákno, ktoré je pripojené k infračervenému spektrometru OceanOptics NIR – 512 s rozsahom od 854,28 nm do 1749,27 nm. Posuvné zrkadlo (Z), slúžilo na odrazenie žiarenia na čip infračervenej kamery (IR kamera), pomocou ktorej sme monitorovali výstupné čelo dvojjadrového vlákna pri naviazaní laserového zväzku. Kamera slúžila aj na registráciu priestorového rozloženia interagujúcich

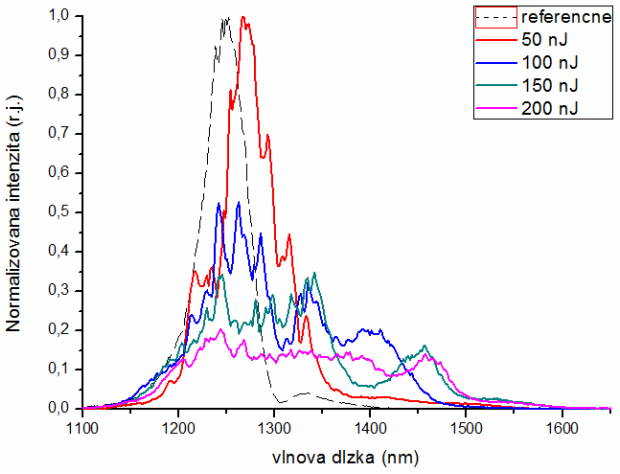
femtosekundových impulzov v tejto rovine. Kamerové záznamy boli robené paralelne so spektrálnymi pri každej zmene vstupných parametrov femtosekundových impulzov.

Experimenty boli zamerané na štúdium spektrálneho rozširovania femtosekundových impulzov a ich nelineárneho prepínania medzi jednotlivými jadrami pri narastajúcej energii vstupného žiarenia. S cieľom získania obrazu o obidvoch javoch postup merania sa skladal z dvoch krokov:

- Naviazanie žiarenia do prvého jadra – zaznamenávanie spektier z prvého jadra,
- Naviazanie žiarenia do druhého jadra – pozorovanie spektier z prvého jadra.

Pri experimente sme pracovali s vláknom dĺžky 6,5 cm. Úvodné nastavenia spočívali v postupnej optimalizácii naviazania zväzku impulzov do jedného z jadier dvojjadrového MOF. Po nastavení polarizátora sme stanovili polohu pre natočenie polvlnovej doštičky, aby vstupné impulzy boli polarizované v nepriestupnom smere vzhľadom na polarizátor. Potom sme postupne zvyšovali energiu imuplzov najprv na východziacu hodnotu 50 nJ a potom postupne vždy o hodnotu 50 nJ. Pre každú hodnotu energie sme registrovali trojicu záznamov zo spektrometra s integračným časom 10 s pri odpočítavaní pozadia za tmy . Pre každú hodnotu vstupnej energie boli vykonané aj kamerové záznamy, ktoré slúžili na registráciu vplyvu zvyšovania energie na priestorové rozloženie žiarenia v dvojjadrovej štruktúre vlákna. Jednotlivé spektrálne aj kamerové záznamy boli spracované pomocou programu OriginPro 8. Na spracovanie záznamov kamery sme využili jeho funkciu na zobrazenie 3D grafov vo forme ekvidistančných kontúr a farebného rozlíšenia rôznych úrovní osvetlenia.

Na nasledujúcom obrázku (Obr. 7) je znázornená závislosť výstupného spektra femtosekundových impulzov od ich vstupnej energie pri zaznamenávaní excitovaného (prvého) jadra dvojjadrového MOF. Z uvedených výsledkov vyplýva, že porovnaním šírky referenčného spektra a spektier žiarenia, ktoré prešli vláknom stanovenej dĺžky jednoznačne dochádza k spektrálnemu rozširovaniu. Z obr. 7 je zrejmé, že pri zvyšovaní vstupnej energie, dochádza k monotónnemu zväčšovaniu rozšírenia. Dôležité je však všimnúť si, že k rozširovaniu dochádza prevažne v oblasti smerom k väčším vlnovým dĺžkam. V oblasti smerom k menším vlnovým dĺžkam je rozšírenie takmer nepozorovateľné. Ďalším zaujímavým faktom, ktorý vyplýva z pozorovania je to, že pri zvyšovaní energie sa mení charakter spektier z hľadiska počtu výrazných maxím, dokonca dochádza k ich pohybu. Pri energii 50 nJ pozorujeme iba čisté spektrálne rozšírenie, ale v prípade 100 nJ a 150 nJ sú spektrá už značne zložitejšie s viacerými maximami.

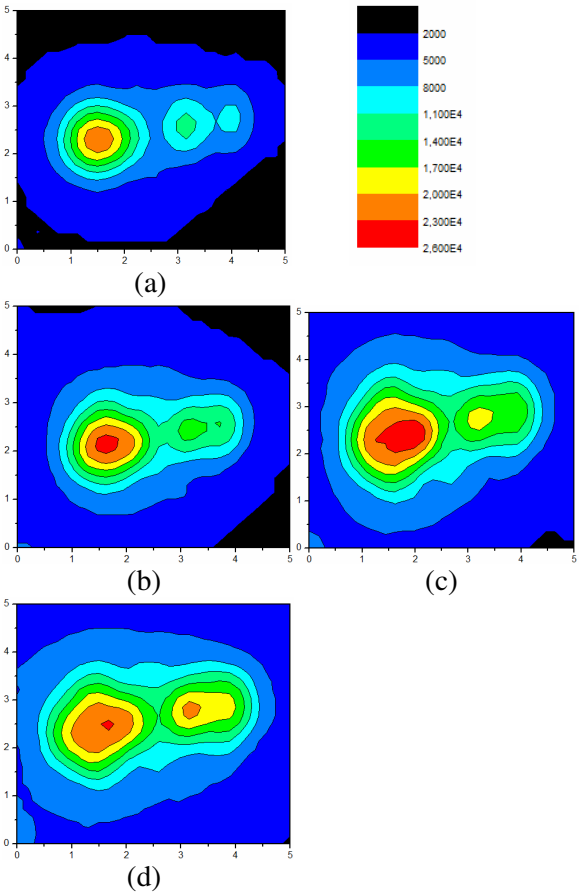


Obr. 7 Závislosť výstupného spektra femtosekundových impulzov od hodnoty ich vstupnej energie pri zaznamenávaní z excitovaného jadra dvojjadrového MOF.

Obidve spomenuté pozorovania naznačujú charakter nelineárneho šírenia v anomálnej oblasti disperzie vlákna. Pre túto oblasť je charakteristické vytváranie solitónov, ktoré si popri spektrálnom rozšírení v dôsledku javu samomodulácie fázy, zachovávajú ich časovú dĺžku. Nemenná dĺžka imulzov udržuje nelineárny charakter šírenia, ktorého dôsledkom frekvencia solitónov sa postupne posúva k nižším hodnotám na základe javu stimulovaného Ramanového rozptylu. Vznik viacerých spektrálnych extrémov sa dá vysvetliť rozpadom solitónu vyššieho rádu na viac solitónov prvého rádu, ktorý jav je typický pre nelineárne šírenie femtosekundových impulzov v anomálnej oblasti disperzie. Anomáliou spektrálnych záznamov je to, že integrálna spektrálna intenzita klesá s rastúcou energiou impulzov. Tento trend naznačuje vplyv nelineárneho prepínania na spektrálnu závislosť, ktorý jav je jednoznačnejší na základe kamerových záznamov.

Na obr. 8 sú znázornené kamerové záznamy prislúchajúce tým istým experimentálnym podmienkam a energiám impulzov, ako pri spektrálnych záznamoch na obr. 7. Záznamy zobrazujú priestorové rozloženie intenzity na výstupnom čele dvojjadrového MOF a pri energii 50 nJ sa dá pozorovať dominantný extrém v prislúchajúcom jadre, do ktorého bolo naviazanie laserového zväzku optimalizované. Zväčšením energie impulzov maximálna intenzita v excitovanom jadre rastie, ale na druhej strane postupne sa posilní druhý extrém prislúchajúci neexcitovanému jadru. Dokonca pri zmene energie zo 150 na 200 nJ maximálna intenzita v excitovanom jadre klesá, ale v neexcitovanom ďalej rastie. Táto nelineárna závislosť priestorového rozloženia femtosekundových impulzov od ich

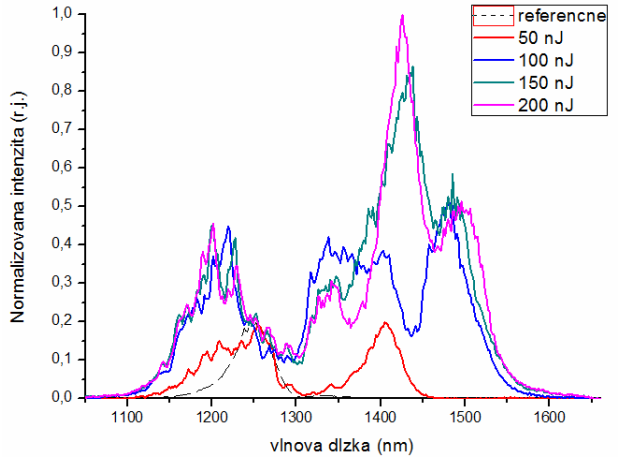
vstupnej energie potvrdzuje väzbu medzi jadrami vlákna a možnosť nelineárneho prepínania medzi nimi pomocou zmeny energie vstupných femtosekundových impulzov.



Obr. 8 Porovnanie priestorového rozloženia femtosekundových impulzov na výstupnom čele dvojjadrového MOF pre rôzne hodnoty ich vstupnej energie: a) 50 nJ, b) 100 nJ, c) 150 nJ, d) 200 nJ.

S cieľom dosiahnutia ešte väčšieho kontrastu prepínania bude treba optimalizovať experimentálne podmienky z hľadiska dĺžky vlákna. V druhom kroku experimentálneho štúdia sme sa venovali registrácii spektier z jadra, ktoré nebolo excitované. Postup merania bol totožný s predchádzajúcim meraním, rozdiel spočíval len v optimalizácii naviazania do druhého jadra pri monitorovaní výstupného čela vlákna pomocou kamery. Geometria spektrálnej registrácie ostala pritom nezmenená, to znamená že optimalizovaná na prvé jadro, ktoré sa po zmene naviazania stalo neexcitovaným.

Výsledky prezentované na obr. 9 vykazujú silnejšiu závislosť rozširovania spektra v smere k nižším frekvenciám od vstupnej energie impulzov. Oproti excitovanému jadru už pri energii 50 nJ bolo zaznamenané rozšírenie do 1450 nm s dvomi výraznými exrémami. Pri vstupnej energii 100 nJ nastane saturácia rozšírenia a po ďalšom zvyšovaní už dochádza len k zväčšeniu spektrálnej intenzity najmä okolo vlnovej dĺžky 1430 nm. Monotónny nárast integrálnej spektrálnej intenzity v neexcitovanom jadre je ďalším potvrdením nelineárneho prepínania medzi jadrami v súlade s kamerovými záznamami.



Obr. 9 Závislosť výstupného spektra femtosekundových impulzov od hodnoty ich vstupnej energie pri zaznamenávaní z neexcitovaného jadra dvojjadrového MOF.

Druhý poznamenaniuhodný efekt, ktorý vychádza z porovnania spektrálnych závislostí je vyššia dominancia spektrálnej oblasti 1400 – 1500 nm v prípade neexcitovaného jadra. V tejto oblasti spektrálna intenzita monotónne rastie v neexcitovanom jadre oproti spektrálnej oblasti 1200-1300 nm, kde od 100 nJ ostáva už nezmenená. Protikladne v excitovanom jadre spektrálna intenzita práve pri krátkych vlnových dĺžkach klesá veľmi intenzívne, kým pre dlhé vlnové dĺžky vykazuje len mierny nárast. Tieto pozorovania potvrdzujú spektrálnu závislosť väzbovej dĺžky šíriaceho sa žiarenia a dávajú podklad na využitie nelineárneho prepínania pre ľubovolné vlnové dĺžky v rámci nelineárne rozšíreného spektra. Optimalizácia tejto operácie z hľadiska vstupnej vlnovej dĺžky, vstupnej energie a polarizácie bude predmetom ďalšieho výskumu, ktorá sľubuje vysokokontrastné prepínanie pri nízkych vstupných energiách v spektrálnej oblasti optických komunikačných systémov.

4 Záver

V predkladanej práci sme sa venovali štúdiu nelineárnych vlastností mikroštruktúrnych optických vlákien so zameraním na spektrálne transformácie femtosekundových impulzov po prechode vláknom definovanej dĺžky. Pozorovanie bolo zamerané aj na možnosti nelineárneho prepínania zmenou vstupnej energie impulzov. Experiment bol realizovaný pomocou pozorovania excitovaného aj neexcitovaného jadra s cieľom kvalitatívne demonštrovať väzbu medzi jadrami. Zhodnotením nameraných výsledkov je zrejmé, že

jednoznačne dochádza k značnému rozširovaniu spektra v oboch jadrách v smere k väčším vlnovým dĺžkam. Taktiež sme pozorovali zväčšenie pomeru výstupnej intenzity v neexcitovanom jadre v porovnaní s excitovaným zmenou vstupnej energie impulzov. Poukázali sme aj na spektrálnu závislosť účinnosti nelineárneho prepínania a v budúcnosti sa plánujeme venovať jej optimalizácii pre vybrané vlnové dĺžky. Získané poznatky sú dôležité pri implementovaní dvojjadrových MOF na plne optické spracovávanie optického signálu, čomu sa v súčasnej dobe venuje veľká pozornosť.

5 Poďakovanie

Ďakujem svojmu školiteľovi Mgr. Ignácovi Bugárovi, PhD. za cenné rady, pripomienky, konzultácie a odbornú pomoc a vedenie pri vypracovaní práce. Moja vďaka patrí aj Mgr. Pavlovi Stajančovi a Mgr. Ľudovítovi Haizerovi za pomoc pri experimentálnej činnosti.

Literatúra

[Agrawal, 2001] Agrawal, G. P. (2001). *Application of nonlinear fiber optics.* San Diego: Academic Press.

[Betlej, 2006] Betlej, A. et al. (2006). *All-optical switching and multifrequency generation in a dual-core photonic crystal fiber.* In Optics Letters. 2006, vol. 31, No. 10, p. 1480-1482.

[Bugár et. al., 2008] Bugár, I. et. al. (2008). *Polarization-Controlled Dispersive Wave Redirection in Dual-Core Photonic Crystal Fiber.* In Laser Physics. 2008, vol. 18, No. 12, p.1420 – 1428.

[Koyš, 2010] Koyš, M. (2010). *Supercontinuum generation in dual core photonic crystal fiber*: Dizertačná práca. Bratislava: Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK.

[Lorenc, 2008] Lorenc, D. Et al. (2008), *Linear and nonlinear properties of multicomponent glass photonic crystal fibers*, In Laser Physics.2008, vol. 18, No. 3, p. 270-276.

[Stajanča, 2011] Stajanča, P. (2011). *Manipulácia so svetelným poľom pomocou mikroštruktúrnych optických vlákien:* Diplomová práca. Bratislava: Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK.

[Zhang, 2003] Zhang, L., Yang, Ch. (2003). *Polarization splitter based on photonic crystal fibers.* In Optics Express. 2003, vol. 11, No. 9, p. 1015 – 1020.

Vplyv striedavého magnetického poľa na komplexnú permeabilitu lisovaných vzoriek pripravených rôznym spôsobom mletia amorfnej pásky typu Vitroperm

Samuel Dobák[1]*

Školiteľ: Ján Füzer[1]†

[1] Katedra fyziky kondenzovaných látok, Ústav fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Park Angelinum 9, 041 54 Košice, Slovenská republika

Abstrakt: V práci skúmame vplyv zvyšujúcej sa amplitúdy striedavého magnetického poľa na frekvenčné spektrá reálnej (μ_r') a záporne vzatej imaginárnej zložky (μ_r'') relatívnej komplexnej permeability ($\hat{\mu}_r = \mu_r' - i\,\mu_r''$) dvoch vzoriek. Východiskovým materiálom na prípravu lisovaných práškových feromagnetík bola amorfná páska nominálneho zloženia $Fe_{73}Cu_1Nb_3Si_{16}B_7$, ktorá bola mletá pri izbovej teplote a po schladení na teplotu kvapalného dusíka. Vzniknuté dva typy prášku boli za tepla lisované a následne žíhané. Získané frekvenčné závislosti μ_r' a μ_r'' boli detailne analyzované s cieľom pochopiť mechanizmus dynamiky magnetizačných procesov v striedavých magnetických poliach s rôznou amplitúdou. Pozorované výsledky sú interpretované na základe javu relaxácie doménových stien.

Kľúčové slová: feromagnetizmus, komplexná permeabilita, lisované práškové materiály.

1 Úvod

Už niekoľko desaťročí sú intenzívne študované amorfné a nanokryštalické zliatiny na báze železa vďaka ich unikátnym magneticky mäkkým vlastnostiam, ktoré vykazujú. Medzi tieto vlastnosti patrí predovšetkým vysoká hodnota magnetickej permeability, nízka koercivita a malé energetické straty pri premagnetovaní [Herzer, 2013]. Typickým spôsobom prípravy amorfnej zliatiny je metóda rýchleho ochladenia taveniny požadovaného zloženia na rotujúcom valci za vzniku amorfnej pásky. Žíhaním amorfnej pásky nad jej kryštalizačnou teplotou sa dosahuje získanie materiálu s veľmi jemnou nanokryštalickou štruktúrou v amorfnej matrici. Nanokryštalické materiály vo forme pások sú komerčne vyrábané v obrovských množstvách a sú aplikované v priemysle. Vo svete sú dobre známe pod svojimi obchodnými menami, napr. Vitroperm® a Vitrovac®, ktoré vyrába nemecká firma Vacuumschmelze GmbH & Co. KG alebo Finemet® od japonskej firmy Hitachi Metals Ltd., ktorý bol zároveň prvým nanokryštalickým magneticky mäkkým materiálom, ktorý bol pripravený v roku 1988 [Yoshizawa et al., 1988].

Nanokryštalické pásky sú pomerne krehké a konečný tvar výrobkov zhotovených z nich, podobne ako v prípade plechov a ocelí, je limitovaný na jednoduché tvary, vzhľadom na principiálne obmedzené možnosti ich tvarovania súvisiace s ich fyzikálnymi vlastnosťami a samotným vzhľadom. Snahou je teda pripraviť magneticky mäkký materiál s podobnými alebo ešte aplikačne výhodnejšími vlastnosťami vo forme, ktorá by bola vhodná na širšie uplatnenie kvôli lepšej možnosti tvarovania finálnych produktov potrebných v praxi. Ďalším hnacím aspektom vývoja v tejto oblasti je cieľ vytvoriť materiál s lepšou recyklovateľnosťou po dobe jeho životnosti. Tieto motívy vedú k príprave práškových materiálov, ktoré môžu byť lisované do foriem trojrozmerných požadovaných tvarov. Výskum v tejto oblasti je zameraný na štúdium fyzikálnych vlastností lisovaných materiálov, ktoré sú pripravované lisovaním feromagnetického prášku [Manivel Raja et al., 2001, Torrens-Serra et al., 2009]. V prípade, že práškové častice sú pred lisovaním obalené elektroizolačnou vrstvou, potom hovoríme o tzv. magneticky mäkkých kompozitoch [Liu et al., 2013, Shokrollahi and Janghorban, 2007]. Touto izolačnou vrstvou sa dosahuje zníženie magnetických strát redukovaním medzičasticových príspevkov k vírivým prúdom.

Na popis dynamických vlastností feromagnetika v striedavých magnetických poliach je výhodné používať komplexnú magnetickú permeabilitu. Táto veličina v sebe skrýva informácie nielen o makroskopických magnetických vlastnostiach feromagnetika, ale poskytuje aj hlbší pohľad do podstaty a priebehu magnetizačných procesov prebiehajúcich v materiáli.

*samuel.dobak@gmail.com

†jan.fuzer@upjs.sk

2 Spektrum komplexnej permeability feromagnetických materiálov

2.1 Statická permeabilita

Predpokladajme, že do jednosmerného magnetického poľa umiestnime vzorku feromagnetického materiálu a budeme skúmať reakciu tohto materiálu na magnetické pole. Miera magnetickej odozvy feromagnetika na magnetické pole v ňom je opísaná magnetickou permeabilitou μ, resp. magnetickou susceptibilitou χ, ktoré pre homogénne izotropné feromagnetiká zväzujú magnetickú indukciu $\boldsymbol{B}$, resp. magnetizáciu $\boldsymbol{M}$ s intenzitou magnetického poľa $\boldsymbol{H}$ vo vnútri feromagnetika známymi vzťahmi $\boldsymbol{B} = \mu \boldsymbol{H}$ a $\boldsymbol{M} = \chi \boldsymbol{H}$, pričom predpokladáme, že vektor magnetickej indukcie $\boldsymbol{B}$, resp. magnetizácie $\boldsymbol{M}$ je kolineárny s vektorom intenzity magnetického poľa $\boldsymbol{H}$. Táto skalárna magnetická permeabilita μ súvisí so skalárnou magnetickou susceptibilitou χ vzťahom

$$\mu = \mu_0(1+\chi), \tag{1}$$

pričom μ_0 je permeabilita vákua [Coey, 2010, du Trémolet de Lacheisserie et al., 2005a].

Feromagnetiká sa vo všeobecnosti vyznačujú zložitou nelineárnou závislosťou magnetickej indukcie od veľkosti excitačného magnetického poľa. Magnetická permeabilita je tiež komplikovanou funkciou intenzity magnetického poľa. V nehomogénnych prostrediach je permeabilita navyše funkciou polohy.

Takto definovaná skalárna magnetická permeabilita je tzv. statická permeabilita, pretože je platná pre prípad, keď pole vo feromagnetiku je statické alebo sa s časom mení len veľmi pomaly.

2.2 Dynamická permeabilita

V prípade, ak magnetické pole $\boldsymbol{H}$ vo feromagnetiku je rýchlo sa meniace v čase, potom ním zapríčinená magnetická indukcia $\boldsymbol{B}$ sa nemôže meniť okamžite so zmenou budiaceho poľa. Inými slovami, feromagnetikum nemôže reagovať okamžite na zmenu magnetického poľa $\boldsymbol{H}$, ktorého účinkom je vystavené. V takomto dynamickom režime je potrebné nazerať na magnetickú permeabilitu iným spôsobom ako v predchádzajúcom statickom prípade.

Zamerajme sa na homogénne izotropné feromagnetické látkové prostredia. Predpokladajme, že malé excitačné pole $\boldsymbol{H}(t)$ vo feromagnetiku je harmonické, napr. má sínusoidálny časový priebeh s uhlovou frekvenciou ω. Potom, ak zoberieme do úvahy lineárny systém, má aj magnetická odozva materiálu, reprezentovaná magnetickou indukciou $\boldsymbol{B}(t)$, sínusoidálny priebeh s rovnakou uhlovou frekvenciou ω. Ak predpokladáme isté oneskorenie reakcie feromagnetika na budiace pole v ňom, tak magnetická indukcia $\boldsymbol{B}(t)$ bude voči poľu $\boldsymbol{H}(t)$ fázovo posunutá o uhol φ. Tieto úvahy môžeme vyjadriť rovnicami opisujúcimi časový vývoj veľkosti vektora intenzity magnetického poľa $\boldsymbol{H}(t)$ v materiáli a veľkosti vektora magnetickej indukcie $\boldsymbol{B}(t)$, teda

$$H(t) = H_\mathrm{m}\cos(\omega t), \tag{2}$$

$$B(t) = B_\mathrm{m}\cos(\omega t + \varphi), \tag{3}$$

kde H_m a B_m sú amplitúdy. Pomer amplitúd $B_\mathrm{m}/H_\mathrm{m}$ a fázový posun φ závisia pre konkrétny materiál pri daných podmienkach (pri určitej teplote) jedine na uhlovej frekvencii ω [du Trémolet de Lacheisserie et al., 2005b].

Hodnoty okamžitých veľkostí intenzity magnetického poľa $H(t)$ a magnetickej indukcie $B(t)$, definované rovnicami (2) a (3), môžeme abstraktne posudzovať ako reálne zložky komplexných funkcií $\hat{\mathcal{H}}(t) = H_\mathrm{m}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$ a $\hat{\mathcal{B}}(t) = B_\mathrm{m}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t+\varphi)}$, kde i je imaginárna jednotka.

Potom možno definovať komplexnú permeabilitu pomerom

$$\hat{\mu} = \frac{\hat{\mathcal{B}}(t)}{\hat{\mathcal{H}}(t)}, \tag{4}$$

odkiaľ po dosadení príslušných komplexných funkcií a jednoduchom odstránení spoločnej časovej závislosti čitateľa a menovateľa plynie pre komplexnú permeabilitu vzťah

$$\hat{\mu} = \frac{B_\mathrm{m}}{H_\mathrm{m}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}. \tag{5}$$

Komplexná permeabilita $\hat{\mu}$ je zloženou funkciou uhlovej frekvencie ω kvôli frekvenčnej závislosti jej modulu $B_\mathrm{m}/H_\mathrm{m}$ a jej argumentu φ. Výraz na pravej strane rovnice (5) má štruktúru komplexnej funkcie, preto sa ďalej pokúsme oddeliť jej reálnu časť od imaginárnej časti

$$\hat{\mu} = \underbrace{\frac{B_\mathrm{m}}{H_\mathrm{m}}\cos\varphi}_{\Re\mathrm{e}(\hat{\mu})} + \mathrm{i}\,\underbrace{\frac{B_\mathrm{m}}{H_\mathrm{m}}\sin\varphi}_{\Im\mathrm{m}(\hat{\mu})}. \tag{6}$$

Definične položme fázový posun $\varphi \equiv -\delta$ a dosaďme do vzťahu (6). Z párnosti funkcie kosínus a nepárnosti funkcie sínus vyplýva transformácia rovnice (6)

na vzťah

$$\hat{\mu} = \frac{B_\mathrm{m}}{H_\mathrm{m}} \cos\delta - \mathrm{i}\,\frac{B_\mathrm{m}}{H_\mathrm{m}} \sin\delta, \tag{7}$$

ktorý možno výhodne zapísať vo forme

$$\hat{\mu} = \mu' - \mathrm{i}\,\mu'', \tag{8}$$

pričom sme zaviedli označenie pre reálnu a záporne vzatú imaginárnu zložku komplexnej permeability

$$\mu' \equiv \Re\mathfrak{e}\,(\hat{\mu}) = \frac{B_\mathrm{m}}{H_\mathrm{m}} \cos\delta, \tag{9a}$$

$$\mu'' \equiv -\Im\mathfrak{m}\,(\hat{\mu}) = \frac{B_\mathrm{m}}{H_\mathrm{m}} \sin\delta, \tag{9b}$$

ktoré sú samozrejme tiež závislé od uhlovej frekvencie ω [Chikazumi, 2005, Fiorillo, 2004, Kazimierczuk, 2009]. Frekvenčné závislosti zložiek komplexnej permeability tvoria spolu tzv. spektrum komplexnej permeability feromagnetika. Často sa pracuje s relatívnymi hodnotami zložiek permeability $\mu'_\mathrm{r} = \mu'/\mu_0$ a $\mu''_\mathrm{r} = \mu''/\mu_0$, ktoré sú redukované vzhľadom na permeabilitu vákua μ_0.

Spektrum komplexnej permeability feromagnetika je vo všeobecnosti opísané superpozíciou príspevkov dvoch typov magnetizačných procesov: pohybom doménových stien a rotáciou vektora magnetizácie [Jiang et al., 2005]. Zo spektra komplexnej permeability je možné získať informácie o určitých charakteristických frekvenciách pre daný materiál, ktoré súvisia s dynamikou prebiehajúcich magnetizačných procesov a ich postupnou relaxáciou.

3 Experimentálny materiál

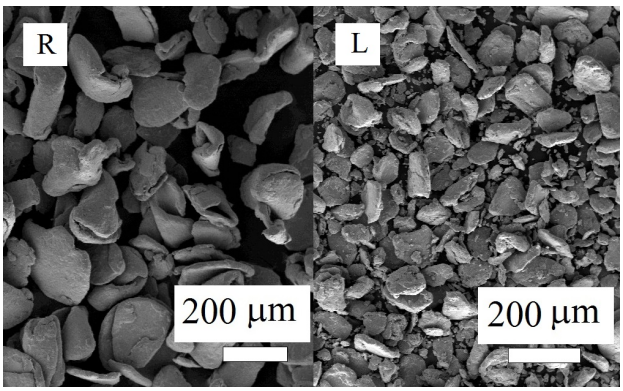
Východiskovým materiálom na prípravu študovaných vzoriek lisovaného práškového feromagnetika bola zliatina nominálneho zloženia $Fe_{73}Cu_1Nb_3Si_{16}B_7$ (Vitroperm® 800) tvaru pásky v amorfnom stave, ktorú vyrába nemecká firma Vacuumschmelze GmbH & Co. KG v Hanau metódou rýchleho ochladenia taveniny na rotujúcom valci.

Amorfná páska bola mechanicky spracovaná mletím na prášok vo vysokoenergetickom guľovom planetárnom mlyne RETSCH PM4000 (na obr. 1) pri dvoch rôznych teplotných podmienkach. Mletím pásky pri izbovej teplote vznikol prášok, ktorý bol použitý na prípravu vzorky R (označenie je z angl. *r*oom temperature). Z prášku vzniknutého mletím pásky po schladení na teplotu tekutého dusíka, použitého ako chladiace médium, bola vytvorená vzorka L (označenie je z angl. temperature of *l*iquid nitrogen). Eliminácia kontaminácie prášku sa dosiahla tým, že mletie prebiehalo v inertnej argónovej atmosfére. Rýchlosť otáčania mažiarov v mlyne bola 160 rpm, pomer hmotnosti mlecích guľôčok a prášku bol 6:1 a mletie trvalo šesť hodín. So vzniknutými dvoma typmi práškov sa zaobchádzalo v ochrannej atmosfére s kontrolovaným zložením ($O_2 < 1$ ppm, $H_2O < 1$ ppm).



Obr. 1: Guľový planetárny mlyn RETSCH PM4000. V otvorenej mlecej nádobe sú viditeľné mlecie guľôčky.

Morfológia častíc dvoch typov práškov, vzniknutých po mletí amorfnej pásky pri izbovej teplote (vzorka R) a po schladení na teplotu kvapalného dusíka (vzorka L), bola pozorovaná skenovacím elektrónovým mikroskopom TESLA BS 340. Snímky morfológie častíc práškov sú zobrazené na obr. 2.



Obr. 2: Morfológia častíc prášku vzoriek R a L.

Viac ako 95 % častíc prášku, mletého pri izbovej teplote, malo veľkosť v rozsahu od 50 µm do 300 µm, zatiaľ čo častice prášku, ktorý bol mletý po schladení na teplotu tekutého dusíka, boli menšie a ich veľkosť sa pohybovala od 20 µm do 150 µm.

Takto vzniknuté dva druhy práškov boli následne lisované pod tlakom s veľkosťou 700 MPa. Lisovanie do tvaru valčekov prebiehalo pri teplote 500 °C (pod kryštalizačnou teplotou) a trvalo päť minút. V snahe vytvoriť vzorky v tvare prstenca bol do vzniknutých valčekov vyvŕtaný axiálny otvor. Posledným technologickým krokom prípravy vzoriek R a L bolo ich žíhanie pri teplote 540 °C počas 60 minút v inertnej argónovej atmosfére s cieľom vytvoriť v materiáli nanokryštalický stav. Tepelné spracovanie vzoriek má tiež tendenciu znižovať nežiaduce mechanické napätia, ktoré boli indukované v materiáli počas procesu jeho lisovania.

Geometrické rozmery a technologické parametre vzoriek R a L v tvare prstenca sú uvedené v tab. 1.

Tab. 1: Parametre vzoriek R a L.

Vzorka	**R**	**L**
Vonkajší priemer [mm]	9,98	10,03
Vnútorný priemer [mm]	4,87	4,89
Výška [mm]	3,29	3,45
Hmotnosť [g]	1,162	1,231
Hustota [g/cm^3]	6,709	6,730
Špecifický elektrický odpor [µΩ.cm]	256	273
Tlak pri lisovaní [MPa]	700	700
Teplota pri lisovaní [°C]	500	500
Doba lisovania [min]	5	5
Teplota žíhania [°C]	540	540
Doba žíhania [min]	60	60

4 Experimentálne metódy

4.1 Meranie frekvenčných spektier relatívnej komplexnej permeability

Meranie reálnej a záporne vzatej imaginárnej zložky relatívnej komplexnej permeability vychádzalo zo sériového náhradného obvodu, ktorým je možné reprezentovať feromagnetickú vzorku v tvare prstenca s toroidálnym vinutím. Tento model spočíva v nahradení vzorky s vinutím pomocou ideálneho rezistora s odporom R_s, ktorý je sériovo spojený s ideálnou cievkou s indukčnosťou L_s.

Komplexná impedancia takéhoto obvodu je určená vzťahom

$$\hat{Z}_\mathrm{s} = R_\mathrm{s} + \mathrm{i}\,\omega L_\mathrm{s}, \tag{10}$$

kde tzv. stratový odpor R_s je súčtom troch komponentov

$$R_\mathrm{s} = R_\mathrm{vin} + R_\mathrm{s}^{(\mathrm{vin})} + R_\mathrm{s}^{(\mathrm{fer})}, \tag{11}$$

pričom R_vin je ohmický odpor použitého vinutia, $R_\mathrm{s}^{(\mathrm{vin})}$ je stratový odpor predstavujúci straty energie vo vinutí a $R_\mathrm{s}^{(\mathrm{fer})}$ je stratový odpor, ktorý je mierou magnetických strát v skúmanom feromagnetiku.

Použitím tohto modelu reprezentácie feromagnetického prstenca s vinutím je možné reálnu časť μ_r' a záporne vzatú imaginárnu časť μ_r'' relatívnej komplexnej permeability $\hat{\mu}_\mathrm{r} = \mu_\mathrm{r}' - \mathrm{i}\,\mu_\mathrm{r}''$ vyjadriť pomocou parametrov sériového náhradného obvodu vzťahmi

$$\mu_\mathrm{r}' = \frac{L_\mathrm{s}}{L_0}, \tag{12a}$$

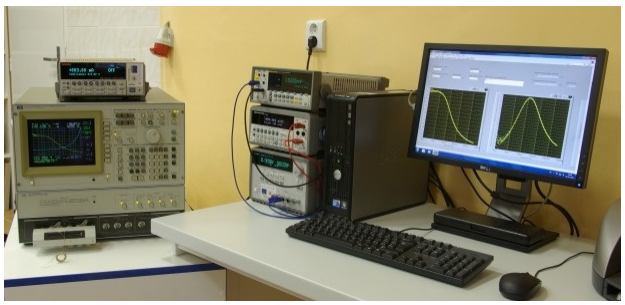
$$\mu_\mathrm{r}'' = \frac{R_\mathrm{s}^{(\mathrm{fer})}}{\omega L_0}, \tag{12b}$$

kde L_0 je indukčnosť toroidálneho vinutia bez feromagnetického prstenca s rozmermi presne rovnakými ako má vinutie s jadrom. Ak má vzorka tvar feromagnetického prstenca s obdĺžnikovým priečnym prierezom, tak indukčnosť toroidálneho vinutia bez feromagnetického prstenca je funkciou geometrických rozmerov prstenca

$$L_0 = \frac{\mu_0}{2\pi} N^2 h \ln\left(\frac{D}{d}\right), \tag{13}$$

kde N je počet závitov vinutia, h je výška, D je vonkajší priemer a d je vnútorný priemer prstenca [Khan and Akther Hossain, 2012].

Meranie zložiek relatívnej komplexnej permeability v závislosti od frekvencie sa teda transformuje na impedančné meranie sériového odporu a sériovej indukčnosti feromagnetickej vzorky s vinutím. Na vzorky R a L v tvare prstenca bolo navinutých 20 závitov vinutia z izolovaného medeného vodiča hrúbky 0,42 mm. Frekvenčné závislosti sériového odporu R_s a sériovej indukčnosti L_s skúmaných vzoriek boli merané pomocou impedančného analyzátora HP 4194A Impedance/Gain-Phase Analyzer (na obr. 3), na ktorý bolo pripojené zariadenie Agilent 16047D Test Fixture slúžiace na upevnenie kontaktov koncových častí vinutia navinutého na prstenec. Impedančný analyzátor bol riadený počítačom pomocou na to vytvoreného počítačového programu



Obr. 3: Počítačom riadený impedančný analyzátor HP 4194A Impedance/Gain-Phase Analyzer so zariadením Agilent 16047D Test Fixture.

v grafickom programovacom prostredí LabVIEW™. Spojenie medzi impedančným analyzátorom a počítačom bolo zabezpečené pomocou GPIB zbernice National Instruments™ GPIB-USB-HS s USB pripojením k počítaču.

Meranie prebiehalo v širokom rozsahu frekvencií od 100 Hz do 40 MHz. Amplitúda magnetujúceho striedavého magnetického poľa, ktorým bola vzorka excitovaná, bola vypočítavaná z efektívnej hodnoty prúdu pretekajúceho vinutím na vzorke počas merania v uvedenom frekvenčnom intervale a z geometrických rozmerov vzorky.

Získané impedančné parametre náhradného sériového obvodu, ktorý reprezentuje skúmanú vzorku feromagnetika s vinutím, boli pomocou vzťahov (12a) a (12b) prevedené na reálnu a záporne vzatú imaginárnu zložku relatívnej komplexnej permeability.

4.2 Meranie hysteréznych slučiek

Dynamické hysterézne slučky boli merané automatickým DC/AC hysterezigrafom Laboratorio Elettrofisico Walker LDJ Scientific AMH-1K-S Automatic Magnetic Hysteresisgraph (na obr. 4). Na účely merania týchto slučiek boli na vzorky R a L v tvare prstenca navinuté dve vinutia z izolovaného medeného vodiča hrúbky 0,21 mm. Primárne vinutie, slúžiace na zmagnetovanie vzorky, bolo umiestnené bližšie k vzorke. Naň bolo navinuté sekundárne vinutie, ktoré bolo použité na snímanie indukovaného napätia, ktoré reprezentuje reakciu feromagnetika na vonkajšie aplikované magnetické pole. Meranie hysteréznych slučiek prebiehalo pri zadanej maximálnej hodnote intenzity magnetického poľa H_m a pri rôznych frekvenciách premagnetovania.



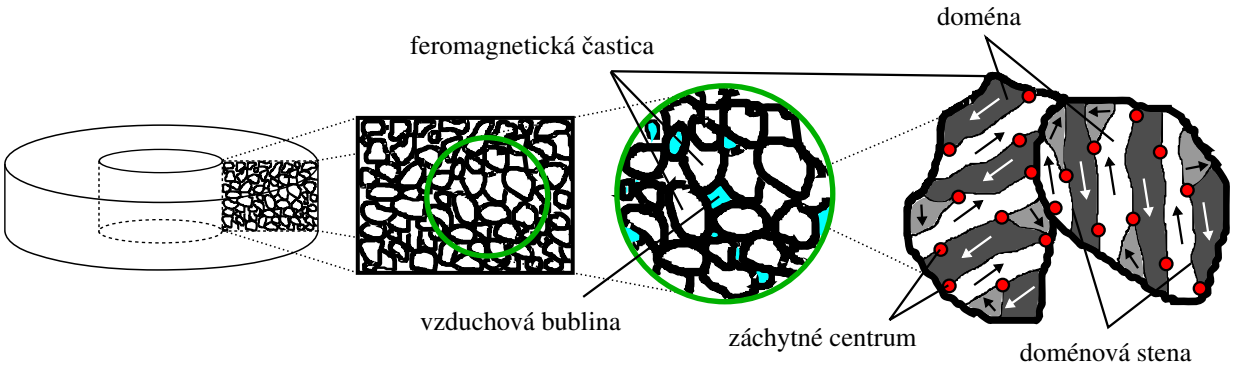
Obr. 4: Automatický DC/AC hysterezigraf Laboratorio Elettrofisico Walker LDJ Scientific AMH-1K-S Automatic Magnetic Hysteresisgraph.

5 Výsledky práce a diskusia

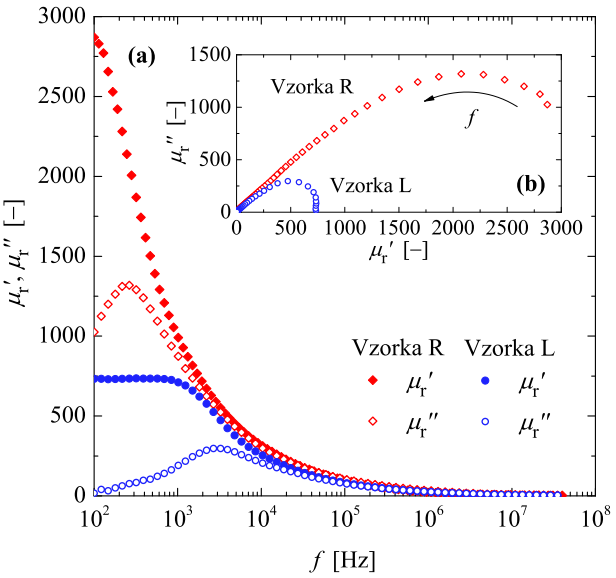
5.1 Spektrum počiatočnej komplexnej permeability

Na úvod poznamenajme, že obe študované vzorky v tvare prstenca pozostávajú z rôzne veľkých častíc (snímky morfológie častíc na obr. 2 a schematické zobrazenie na obr. 5) a aj v rámci jednej vzorky je prítomná celá distribúcia veľkosti častíc, ktorá je ohraničená zdola aj zhora. Z dôvodu tejto distribúcie častíc, všetky častice rôznej veľkosti prispievajú svojimi príspevkami k magnetickým vlastnostiam materiálu. Makroskopické magnetické vlastnosti, ktoré možno u týchto vzoriek pozorovať, sú teda strednými hodnotami magnetických vlastností celého štatistického súboru častíc, z ktorých vzorky pozostávajú. Na mikroskopickej úrovni je každá častica tvorená mnohými doménami (obr. 5), ktoré sú oddelené doménovými stenami, zachytenými na záchytných centrách (nedokonalosti, defekty a napäťové polia v častici). K zachytávaniu doménových stien na záchytných centrách dochádza v dôsledku minimalizácie energie doménových stien.

Pred meraním spektier komplexnej permeability boli obe vzorky demagnetované. Meranie reálnej (μ_r') a záporne vzatej imaginárnej zložky (μ_r'') relatívnej komplexnej permeability ($\hat{\mu}_\mathrm{r} = \mu_\mathrm{r}' - \mathrm{i}\,\mu_\mathrm{r}''$) vzoriek R a L v tvare prstenca prebiehalo najprv pri najnižšej hodnote amplitúdy magnetického poľa, ktorú bolo možné v danej experimentálnej konfigurácii (určenej počtom závitov $N = 20$ vinutia a principiálnymi obmedzeniami použitého impedančného analyzátora). Táto minimálna amplitúda excitačného poľa dosahovala hodnotu $H_\mathrm{m} = 0{,}27$ A/m pri obidvoch vzorkách.



Obr. 5: Zobrazenie (zľava doprava) prstencovej vzorky vzniknutej lisovaním prášku, priečny prierez prstencom, detail prierezu zlisovaných častíc a detail dvoch častíc prášku s doménovou štruktúrou. Pri lisovaní dochádza k vzniku vzduchových bublín medzi časticami. Záchytné centrá pre doménové steny sú zobrazené červenými krúžkami. Orientácia vektora magnetizácie v doménach je reprezentovaná šípkami.



Obr. 6: **(a)** Spektrá komplexnej permeability vzoriek R a L a **(b)** Coleov-Coleov diagram zložiek relatívnej komplexnej permeability vzoriek R a L. Merané pri minimálnej amplitúde striedavého magnetického poľa $H_\mathrm{m} = 0{,}27$ A/m.

Frekvenčné závislosti zložiek relatívnej komplexnej permeability vzoriek R a L pri najnižšej amplitúde magnetického poľa ($H_\mathrm{m} = 0{,}27$ A/m) sú zobrazené na obr. 6(a). Vzhľadom na to, že meranie zložiek komplexnej permeability bolo uskutočnené v harmonickom magnetickom poli s takouto malou amplitúdou, môžeme takto získané spektrá považovať za spektrá počiatočnej komplexnej permeability vzoriek. Počiatočná permeabilita vzrastá s narastajúcou veľkosťou feromagnetických častíc v materiáli. Vzorka R, ktorej častice sú väčšie, dosahuje hodnotu nízkofrekvenčnej (pri frekvencii $f \approx 100$ Hz) reálnej zložky relatívnej komplexnej permeability približne 2870, čo je takmer štvornásobne vyššia hodnota ako pri vzorke L, pri ktorej je táto hodnota 730.

Reálna zložka μ_r' vzorky R začína prudko klesať už od začiatku meraného frekvenčného intervalu. Pri vzorke L je toto správanie iné, hodnota μ_r' je pri nízkych frekvenciách stabilná a udržiava si konštantnú hodnotu približne do frekvencie 1 kHz, kde začína dochádzať k jej poklesu.

Záporne vzatá imaginárna zložka relatívnej komplexnej permeability μ_r'' vzorky R dosahuje svoje maximum pri frekvencii 250 Hz. Pri vzorke L hodnota μ_r'' nadobúda svoje maximum pri vyššej frekvencii, konkrétne pri 2995 Hz. Tieto frekvencie, prislúchajúce lokálnemu maximu záporne vzatej imaginárnej zložky komplexnej permeability, sa označujú ako relaxačné frekvencie f_r.

Užitočnou reprezentáciou zložiek komplexnej permeability je konštrukcia Coleovho-Coleovho diagramu, nazývaného tiež Argandov diagram, ktorý je zobrazením komplexnej permeability v komplexnej rovine, v ktorej každý bod zodpovedá usporiadanej dvojici $[\mu_\mathrm{r}'(f),\ \mu_\mathrm{r}''(\mathrm{f})]$ zmeranej pri frekvencii f. Na obr. 6(b) je Coleov-Coleov diagram vzoriek R a L pri $H_\mathrm{m} = 0{,}27$ A/m. Z tohto zobrazenia zložiek komplexnej permeability je zrejmé, že diagramy obidvoch vzoriek sa odlišujú od ideálnych polkružníc, čo nasvedčuje tomu, že pravdepodobne sú prítomné nielen reverzibilné procesy, ale aj ireverzibilné posuny doménových stien. Príspevkami k magnetizačnému procesu vo vzorkách sú teda rôzne pohyby doménových stien.

Spektrum komplexnej permeability feromagnetika

je zaujímavou informáciou o magnetizačných procesoch, ktoré sa podieľajú na príspevkoch k celkovej magnetizácii vzorky v jednotlivých frekvenčných oblastiach. V rôznych frekvenčných intervaloch sú dominantnými rôzne magnetizačné procesy a ich relaxáciu zaznamenáva práve spektrum komplexnej permeability materiálu. Každému magnetizačnému procesu prislúcha istá časová konštanta (relaxačný čas) $\tau = 1/(2\pi f_r)$, kde f_r je relaxačná frekvencia. S nárastom frekvencie magnetujúceho poľa sa magnetizačné procesy s pomalšou dynamikou (s veľkým relaxačným časom, teda s nízkou relaxačnou frekvenciou) stávajú postupne neaktívnymi, pretože nestačia sledovať rýchle zmeny harmonicky sa meniaceho magnetického poľa [Betancourt, 2011]. To má za následok prudký pokles reálnej zložky permeability a objavenie sa lokálneho maxima vo frekvenčnom priebehu záporne vzatej imaginárnej zložky permeability. Takto opísané správanie zložiek komplexnej permeability sa nazýva disperzia magnetickej permeability.

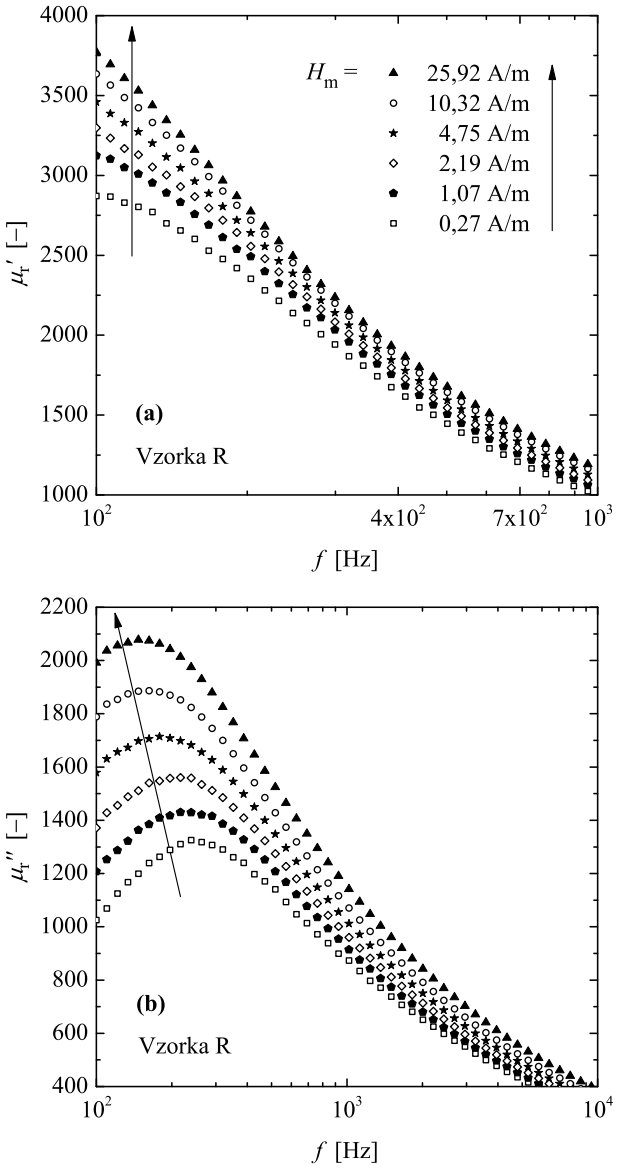
Pri frekvenciách vyšších ako je relaxačná frekvencia f_r nie sú doménové steny ďalej schopné sledovať zmeny magnetického poľa [Norailiana et al., 2012] a reálna zložka permeability klesá k nízkym hodnotám pri oboch vzorkách, kde sa aktívnym magnetizačným procesom stáva rotácia vektora magnetizácie.

5.2 Vplyv striedavého magnetického poľa na spektrá komplexnej permeability

Pri ďalších meraniach spektier komplexnej permeability vzoriek R a L sme postupne zvyšovali amplitúdu H_m striedavého magnetického poľa. Uskutočňovali sme to pomocou zvyšovania amplitúdy prúdu tečúceho toroidálnym vinutím vzorky slúžiacim na meranie spektier impedančných parametrov. Takto zmerané spektrá komplexnej permeability vzoriek pri vybraných hodnotách amplitúdy magnetického poľa sú zobrazené na obr. 7 a obr. 8.

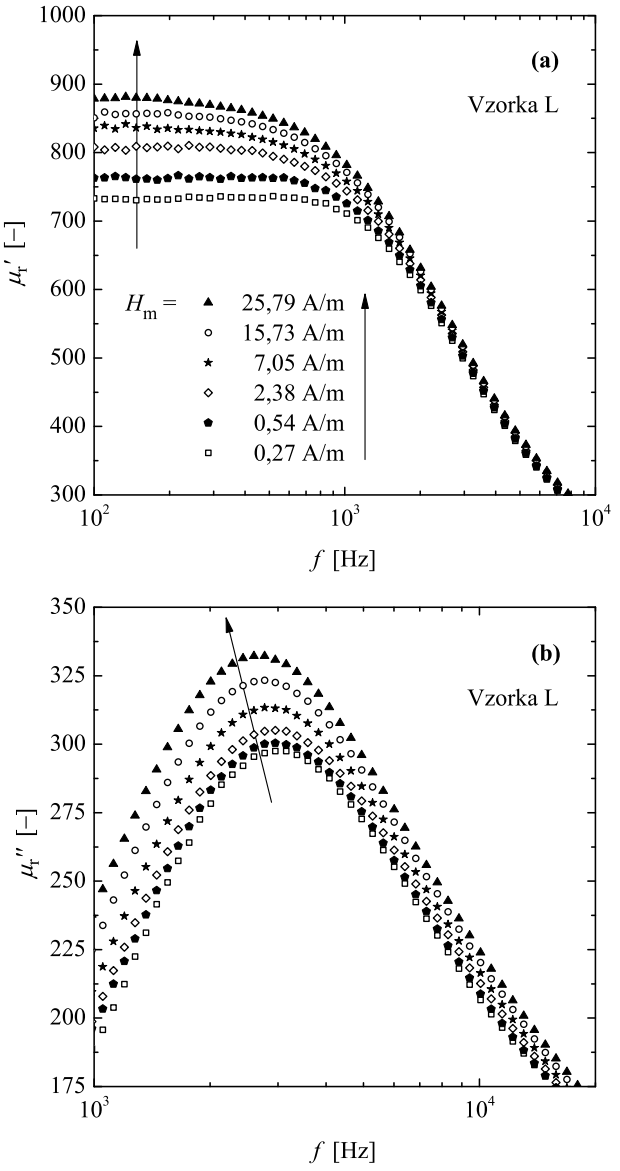
Z uvedených spektier komplexnej permeability vzoriek R a L vidieť, že so zväčšujúcou sa amplitúdou poľa narastá hodnota reálnej zložky μ_r' komplexnej permeability pri oboch vzorkách. Je to spôsobené tým, že permeabilita sleduje polohu vrcholov hysteréznych slučiek pri zväčšujúcej sa hodnote maximálnej intenzity magnetického poľa.

Podobne, s narastaním amplitúdy magnetického poľa sa zvyšuje aj hodnota maxima záporne vzatej imaginárnej zložky μ_r'' a zároveň sa relaxačná frekvencia f_r znižuje. Tento jav súvisí s pohybom doménových stien, pričom pri väčšej amplitúde pohybov stien pod vplyvom striedavého magnetického poľa musia tieto steny prekonávať väčšie vzdialenosti a na to potrebujú dlhší čas. So zvyšujúcou sa amplitúdou magnetického poľa dochádza k tlmeniu pohybu doménových stien a relaxácii pri nižšej frekvencii.



Obr. 7: Spektrá komplexnej permeability vzorky R pri vybraných amplitúdach intenzity striedavého magnetického poľa H_m. Frekvenčná závislosť **(a)** reálnej zložky μ_r' a **(b)** záporne vzatej imaginárnej zložky μ_r'' relatívnej komplexnej permeability.

Frekvenčné priebehy záporne vzatej imaginárnej zložky relatívnej komplexnej permeability μ_r'' boli

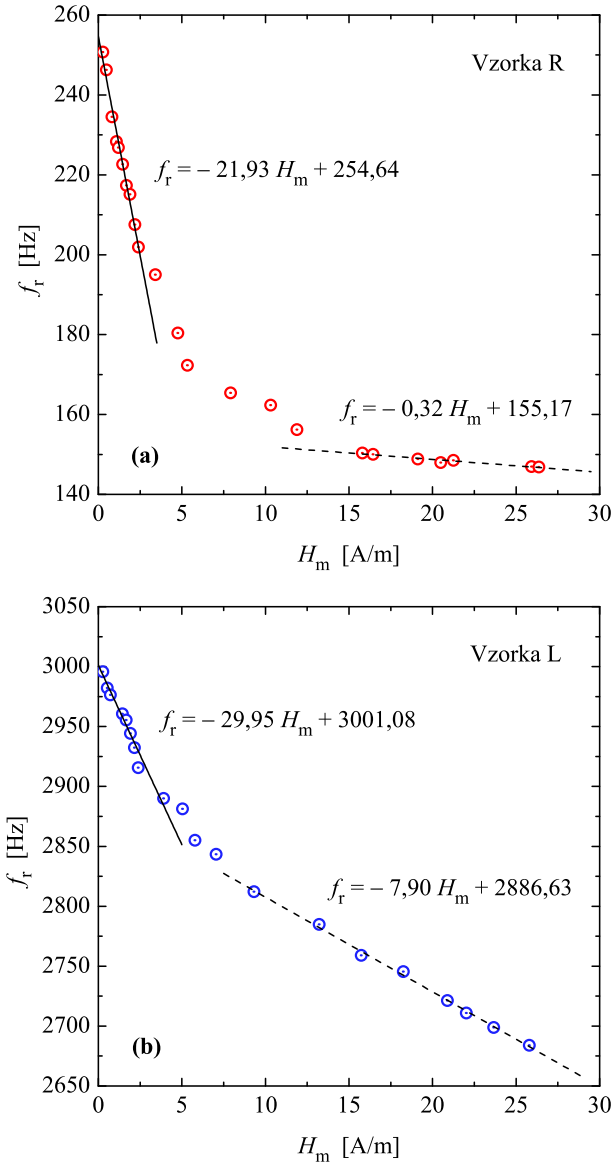


Obr. 8: Spektrá komplexnej permeability vzorky L pri vybraných amplitúdach intenzity striedavého magnetického poľa H_m. Frekvenčná závislosť **(a)** reálnej zložky μ_r' a **(b)** záporne vzatej imaginárnej zložky μ_r'' relatívnej komplexnej permeability.

v oblasti ich maxima aproximované polynómom štvrtého stupňa typu

$$\mu_r'' = \sum_{k=0}^{4} a_k f^k, \qquad (14)$$

kde a_k sú rozvojové koeficienty polynómu. Frekvencia, pri ktorej dosahuje svoje maximum aproximačný polynóm (14), bola zobratá za relaxačnú frekvenciu spektra pri danej hodnote H_m. Bikvadratická polynomická aproximácia maxím slúžila na presnejšie stanovenie polohy maxima z priebehu μ_r'', pretože táto závislosť je určená experimentálne zmeranými diskrétnymi bodmi. Takýmto spôsobom boli získané závislosti relaxačnej frekvencie od amplitúdy striedavého magnetického poľa, ktoré sú vyobrazené pre obe vzorky na obr. 9.



Obr. 9: Závislosť relaxačnej frekvencie f_r od amplitúdy striedavého magnetického poľa H_m **(a)** vzorky R a **(b)** vzorky L. Plnými a prerušovanými líniami sú znázornené aproximačné priamky vo vybraných oblastiach spolu s ich analytickými vyjadreniami.

Pri detailnejšej analýze týchto závislostí bolo zistené, že relaxačné frekvencie pri veľmi malých a pri maximálnych meraných amplitúdach H_m magnetického poľa podliehajú lineárnemu správaniu.

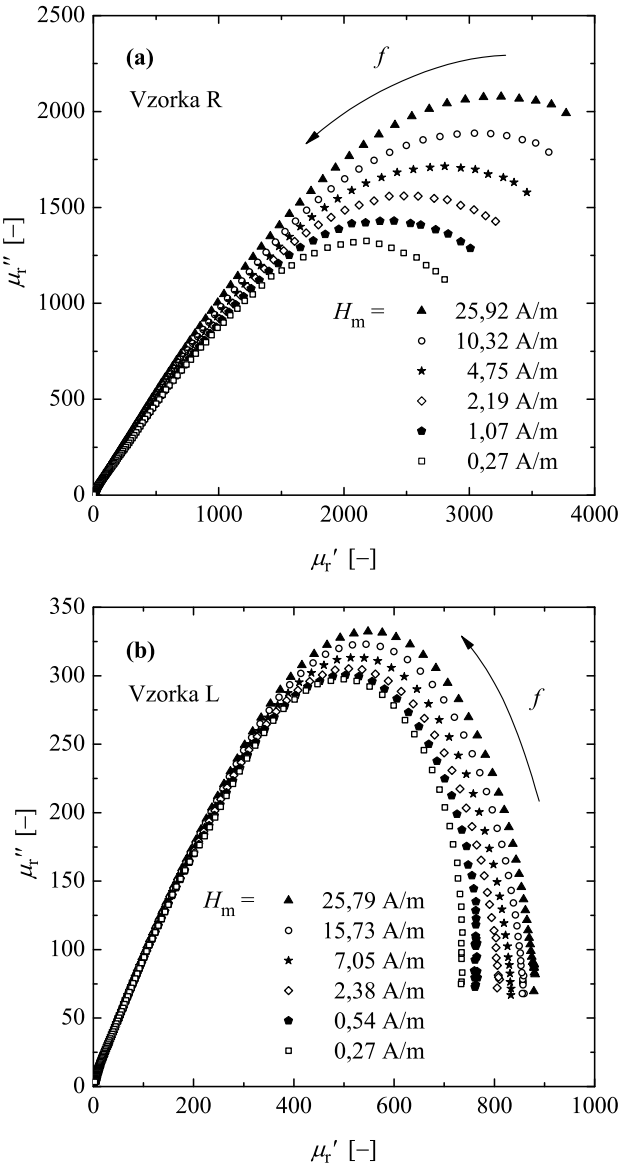
Preto v týchto oblastiach boli získané dáta aproximované priamkami, ktorých rovnice sú uvedené na obr. 9. V ďalších úvahách sa zameriame práve na tieto dve lineárne oblasti. Vychádzajúc z poznatku, že relaxačná frekvencia je spojená s deaktivovaním príspevku magnetizačného procesu pohybov doménových stien k celkovej magnetizácii, možno zo získaných závislostí relaxačnej frekvencie od amplitúdy magnetického poľa usudzovať, že miera útlmu tohto magnetizačného procesu (daná smernicou aproximačnej priamky) je pri vyšších amplitúdach magnetického poľa nižšia v porovnaní s útlmom pri malých amplitúdach.

Domnievame sa, že tento jav súvisí s prítomnosťou ďalšieho magnetizačného procesu – rotácie vektora magnetizácie, ktorý sa prejavuje pri vyšších hodnotách amplitúd striedavého magnetického poľa. Tento magnetizačný proces spôsobí, že pri väčšej amplitúde magnetického poľa dôjde nielen k posunom doménových stien, ale aj k čiastočnému pootočeniu vektora magnetizácie v doménach pod vplyvom vonkajšieho magnetického poľa. To pravdepodobne zapríčiňuje, že doménové steny sú schopné sledovať magnetické pole do vyššej frekvencie ako keby nedochádzalo k rotácii vektora magnetizácie, a teda útlm magnetizačného procesu pohybu doménových stien je pri vyšších amplitúdach intenzity magnetického poľa nižší ako pri malých amplitúdach.

Preto predpokladáme, že prvá lineárna oblasť závislosti relaxačnej frekvencie od amplitúdy magnetického poľa, pri nižších amplitúdach polí, súvisí s prítomnosťou reverzibilných a ireverzibilných posunov doménových stien a druhá lineárna oblasť, pri vyšších amplitúdach polí, je spojená s prítomnosťou ireverzibilných posunov doménových stien a s rotáciou vektora magnetizácie.

Porovnanie závislostí relaxačnej frekvencie od amplitúdy striedavého magnetického poľa pre vzorky R (obr. 9(a)) a L (obr. 9(b)) vedie k záveru, že v obidvoch lineárnych oblastiach je útlm pohybu doménových stien väčší pri vzorke L, čo pravdepodobne súvisí s oblasťou pozorovaných relaxačných frekvencií v intervale skúmaných amplitúd magnetického poľa. Vzorka L sa vyznačuje vyššími relaxačnými frekvenciami (rádovo $\approx 10^3$ Hz) oproti vzorke R (rádovo $\approx 10^2$ Hz), a teda miera útlmu pohybu doménových stien je vo vzorke L väčšia, čo súvisí s magnetizačnými procesmi vo vzorke L.

Na obr. 10 sú znázornené Coleove-Coleove diagramy, skonštruované zo zložiek relatívnej komplexnej permeability vzoriek R a L, ktoré boli merané pri vybraných amplitúdach magnetického poľa H_m. Z týchto diagramov vyplýva, že všeobecný charakter diagramov, zistený pri minimálnej amplitúde $H_\mathrm{m} = 0{,}27$ A/m, zostáva zachovaný aj pri vyšších amplitúdach magnetického poľa. Teda ani pri zvyšovaní amplitúdy poľa nedochádza k objaveniu sa ďalšieho relaxačného procesu (rezonancia spinov), ktorý by sa dal identifikovať pri vyšších frekvenciách. Magnetizačný proces rotácie vektora magnetizácie je aktívny aj pri vyšších frekvenciách nami študovaného frekvenčného intervalu.



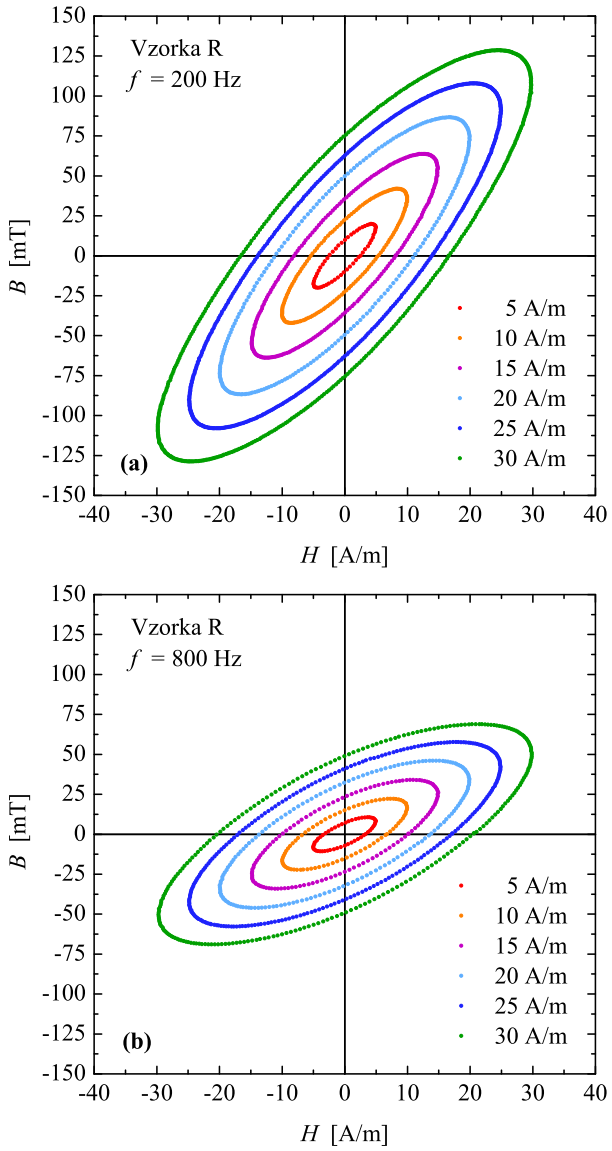
Obr. 10: Coleove-Coleove diagramy zložiek relatívnej komplexnej permeability **(a)** vzorky R a **(b)** vzorky L pri vybraných amplitúdach intenzity striedavého magnetického poľa H_m.

5.3 Dynamické hysterézne slučky

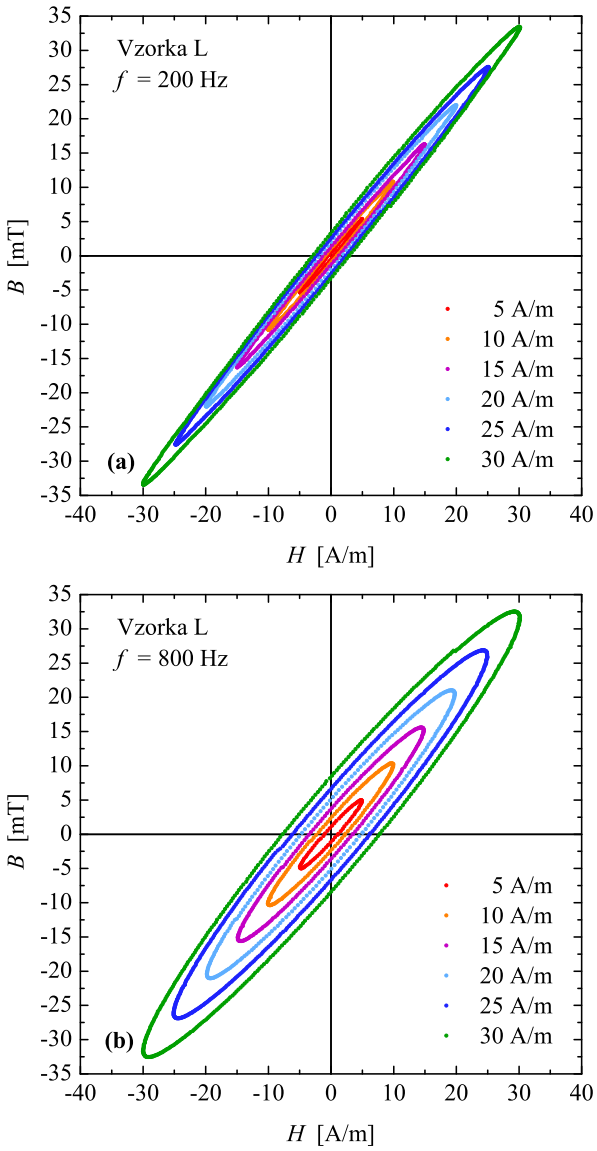
S cieľom zistenia spojitosti komplexnej permeability a hysteréznych slučiek boli merané dynamické hysterézne slučky pri striedavom premagnetovaní. Meranie hysteréznych slučiek neprebiehalo konvenčne pri zadanej hodnote maximálnej požadovanej magnetickej indukcie B_{m}, ale pri zadanej hodnote maximálnej intenzity magnetického poľa H_{m}. Tento spôsob bol zvolený cielene na dosiahnutie analogických podmienok merania ako pri meraní zložiek komplexnej permeability, kde meranie spektier impedančných parametrov vzorky s vinutím bolo uskutočňované pri konštantnej amplitúde intenzity magnetického poľa H_{m}.

Výsledky meraní hysteréznych slučiek vzoriek pri konštantnej frekvencii premagnetovania (200 Hz a 800 Hz) pri vzrastajúcej hodnote maximálnej intenzity magnetického poľa H_{m} (v rozsahu od 5 A/m do 30 A/m s krokom 5 A/m) sú vyobrazené na obr. 11 (vzorka R) a na obr. 12 (vzorka L).

Permeabilita skúmaných feromagnetík narastá so zvyšovaním hodnoty H_{m}, lebo permeabilita sleduje polohu vrcholov dynamických hysteréznych slučiek pri zvyšujúcej sa hodnote maximálnej intenzity magnetického poľa. Navyše, permeabilita pri vyššej frekvencii (800 Hz) je menšia ako pri nižšej frekvencii (200 Hz), čo sa prejavuje väčším sklonením hysteréznych slučiek pri všetkých hodnotách H_{m}.

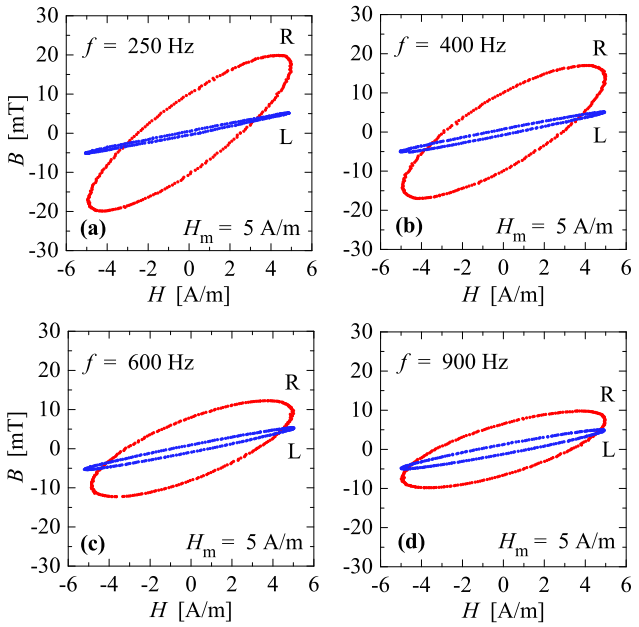


Obr. 11: Hysterézne slučky vzorky R pri frekvencii **(a)** 200 Hz a **(b)** 800 Hz pri rôznych hodnotách maximálnej intenzity magnetického poľa H_{m}.



Obr. 12: Hysterézne slučky vzorky L pri frekvencii **(a)** 200 Hz a **(b)** 800 Hz pri rôznych hodnotách maximálnej intenzity magnetického poľa H_{m}.

Frekvenčný vývoj hysteréznych slučiek vzoriek R a L pri $H_\mathrm{m} = 5$ A/m (obr. 13) korešponduje s výsledkami získanými z meraní zložiek komplexnej permeability pri rôznych amplitúdach magnetického poľa H_m. Podobný priebeh bol pozorovaný aj pri meraní dynamických hysteréznych slučiek pri vyššej maximálnej hodnote intenzity magnetického poľa $H_\mathrm{m} = 20$ A/m.



Obr. 13: Hysterézne slučky vzoriek R a L pri hodnote $H_\mathrm{m} = 5$ A/m pri vybraných frekvenciách striedavého premagnetovania.

Pri obidvoch hodnotách maximálnej intenzity magnetického poľa sú hysterézne slučky vzorky L viac sklonené k horizontálnej osi, čo svedčí o jej nižšej permeabilite. Vzorka R sa vyznačuje vyššou hodnotou permeability, ale so vzrastajúcou frekvenciou sa jej hysterézne slučky skláňajú k horizontálnej osi, a teda jej permeabilita klesá. Permeabilita vzorky L do frekvencie približne 1 kHz klesá len veľmi málo.

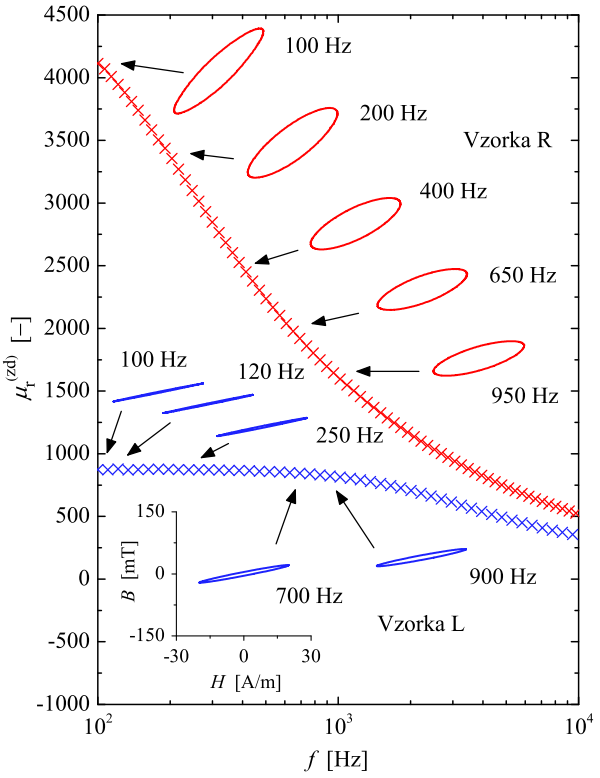
Všetky uvedené výsledky sú v súlade s výsledkami zistenými zo spektier komplexnej permeability, avšak z hysteréznych slučiek nemožno urobiť závery o dynamike magnetizačných procesov na úrovni doménovej štruktúry feromagnetika a o tlmení pohybu doménových stien vplyvom striedavého magnetického poľa so vzrastajúcou amplitúdou.

Z reálnej μ_r' a záporne vzatej imaginárnej zložky μ_r'' relatívnej komplexnej permeability možno určiť tzv. relatívnu zdanlivú permeabilitu materiálu, ktorá je definovaná vzťahom

$$\mu_\mathrm{r}^{(\mathrm{zd})} \equiv |\hat{\mu}_\mathrm{r}| = \sqrt{(\mu_\mathrm{r}')^2 + (\mu_\mathrm{r}'')^2}, \qquad (15)$$

kde $|\hat{\mu}_\mathrm{r}|$ je modul relatívnej komplexnej permeability.

Názorná ilustrácia magnetizačných procesov pri meraní zložiek komplexnej permeability vzoriek R a L je znázornená na obr. 14, na ktorom sú k frekvenčným priebehom relatívnej zdanlivej permeability pri vybraných frekvenciách priradené zodpovedajúce dynamické hysterézne slučky merané pri danej frekvencii striedavého premagnetovania.



Obr. 14: Frekvenčné závislosti relatívnej zdanlivej permeability vzoriek R (červená farba) a L (modrá farba) pri $H_\mathrm{m} = 20$ A/m. Pozdĺž kriviek sú zobrazené dynamické hysterézne slučky zodpovedajúce vybraným frekvenciám. Všetky hysterézne slučky sú škálované v rovnakej mierke.

6 Záver

V tejto práci bol skúmaný vplyv veľkosti amplitúdy striedavého magnetického poľa na spektrum komplexnej permeability dvoch typov lisovaných práškových materiálov. S týmto cieľom boli analyzované dve vzorky (R a L), ktoré boli pripravené li-

sovaním feromagnetického prášku vzniknutého mletím amorfnej pásky pri dvoch rôznych teplotných podmienkach. Nanokryštalický stav bol v lisovaných vzorkách vytvorený žíhaním nad kryštalizačnou teplotou. Teplota mletia má výrazný vplyv na morfológiu častíc vzniknutého prášku, čo do značnej miery ovplyvňuje aj magnetické vlastnosti takýchto materiálov.

Kľúčovou časťou práce bolo meranie frekvenčných spektier komplexnej permeability pri rozličných hodnotách amplitúdy magnetického poľa. Získané spektrá komplexnej permeability sme detailne analyzovali a extrahovali z nich ďalšie fyzikálne veličiny charakterizujúce študované vzorky. Výsledky sme sa pokúsili vysvetliť na základe dynamiky priebehu a relaxácie magnetizačných procesov prebiehajúcich na úrovni doménovej štruktúry feromagnetika pri striedavom premagnetovaní. Zaujímavým výsledkom je pozorovanie dvoch lineárnych oblastí poklesu relaxačnej frekvencie s narastajúcou amplitúdou magnetického poľa.

Na tieto výsledky sme nadviazali pri meraní dynamických hysteréznych slučiek, ktoré sme merali nekonvenčne pri konštantnej hodnote maximálnej intenzity magnetického poľa, čím sme sa snažili simulovať podmienky merania zložiek komplexnej permeability. Ukazuje sa, že z hysteréznych slučiek nemožno urobiť závery o dynamike magnetizačných procesov. Komplexná permeabilita sa javí ako dôležitý nástroj na skúmanie tlmenia pohybu doménových stien a ich relaxácie vo feromagnetiku vplyvom striedavého magnetického poľa s rôznou amplitúdou.

Poďakovanie

Ďakujem môjmu školiteľovi RNDr. Jánovi Füzerovi, PhD., ktorý ma odborne viedol pri realizovaní tejto práce.

Literatúra

[Betancourt, 2011] Betancourt, I. (2011). Magnetization dynamics of amorphous ribbons and wires studied by inductance spectroscopy. *Materials*, 4:37–54.

[Chikazumi, 2005] Chikazumi, S. (2005). *Physics of Ferromagnetism*. Oxford University Press, New York.

[Coey, 2010] Coey, J. M. D. (2010). *Magnetism and Magnetic Materials*. Cambridge University Press, New York.

[du Trémolet de Lacheisserie et al., 2005a] du Trémolet de Lacheisserie, É., Gignoux, D., and Schlenker, M. (2005a). *Magnetism. Volume 1: Fundamentals*. Springer, New York.

[du Trémolet de Lacheisserie et al., 2005b] du Trémolet de Lacheisserie, É., Gignoux, D., and Schlenker, M. (2005b). *Magnetism. Volume 2: Materials and Applications*. Springer, Boston.

[Fiorillo, 2004] Fiorillo, F. (2004). *Measurement and Characterization of Magnetic Materials*. Elsevier Academic Press, Amsterdam.

[Herzer, 2013] Herzer, G. (2013). Modern soft magnets: Amorphous and nanocrystalline materials. *Acta Mater.*, 61:718–734.

[Jiang et al., 2005] Jiang, H. Y., Zhong, W., Tang, N. J., Wu, X. L., Liu, W., and Du, Y. W. (2005). Complex permeability of SiO_2-coated Fe–Ni particles reduced at different temperatures. *Int. J. Mod. Phys. B*, 19:4371–4379.

[Kazimierczuk, 2009] Kazimierczuk, M. K. (2009). *High-Frequency Magnetic Components*. John Wiley & Sons, Chichester.

[Khan and Akther Hossain, 2012] Khan, M. H. R. and Akther Hossain, A. K. M. (2012). Reentrant spin glass behavior and large initial permeability of $Co_{0.5-x}Mn_xZn_{0.5}Fe_2O_4$. *J. Magn. Magn. Mater.*, 324:550–558.

[Liu et al., 2013] Liu, Y., Yi, Y., Shao, W., and Shao, Y. (2013). Microstructure and magnetic properties of soft magnetic powder cores of amorphous and nanocrystalline alloys. *J. Magn. Magn. Mater.*, 330:119–133.

[Manivel Raja et al., 2001] Manivel Raja, M., Ponpandian, N., Majumdar, B., Narayanasamy, A., and Chattopadhyay, K. (2001). Soft magnetic properties of nanostructured FINEMET alloy powder cores. *Mater. Sci. Eng. A*, 304–306:1062–1065.

[Norailiana et al., 2012] Norailiana, A. R., Hashim, M., Yussoff, W. M. D. Y., Hassan, J., and Idza, I. R. (2012). A comparative study of magnetic Cole-Cole like plot and dielectric Cole-Cole plot in polycrystalline nickel zinc ferrite. *Solid State Sci. Technol.*, 20:134–141.

[Shokrollahi and Janghorban, 2007] Shokrollahi, H. and Janghorban, K. (2007). Soft magnetic composite materials (SMCs). *J. Mater. Process. Technol.*, 189:1–12.

[Torrens-Serra et al., 2009] Torrens-Serra, J., Bruna, P., Roth, S., Rodriguez-Viejo, J., and Clavaguera-Mora, M. T. (2009). Bulk soft magnetic materials from ball-milled $Fe_{77}Nb_7B_{15}Cu_1$ amorphous ribbons. *Intermetallics*, 17:79–85.

[Yoshizawa et al., 1988] Yoshizawa, Y., Oguma, S., and Yamauchi, K. (1988). New Fe-based soft magnetic alloys composed of ultrafine grain structure. *J. Appl. Phys.*, 64:6044–6046.

ANALÝZA ZMIEN BRONCHIÁLNEHO STROMU

Marek Franko[1]

Školiteľ:. Jozef Uličný[1]

[1] *Katedra biofyziky Ústavu fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J.Šafárika, Park Angelinum 9, 041 54 Košice, Slovenská republika*

Abstrakt

Táto práca sa zaoberá návrhom aplikácie na spracovanie medicínskych dát. Prioritnou úlohou tejto práce bolo navrhnúť algoritmy a vytvoriť aplikáciu na charakterizáciu dýchacích ciest pomocou redukcie objemových dát na topologickú štruktúru technikou skeletonizácie. Aplikácia je navrhnutá a otestovaná tak, aby pracovala s reálnymi medicínskymi dátami získanými v rámci experimentálnej terapie nádorov pomocou CT modality. Obraz získaný aplikovaním segmentačného a skeletonizačného algoritmu na vnútornú štruktúru ľudských pľúc je popísaný pomocou matematických modelov, zmenami parametrov, pomocou ktorých je možno skúmať funkčné stavy dýchacieho systému, napríklad zmeny vnútornej štruktúry pľúc počas liečby pacienta resp. porovnávať štruktúru pľúc pred a po operačnom zákroku. Práca je motivovaná potrebou efektívne popísať geometrické a objemové zmeny bronchiálneho stromu pacienta s onkologickým ochorením.

Kľúčové slová: CT, skeletonizácia, medicínske zobrazovanie, bronchiálny strom

1 CT-Počítačová tomografia

Počiatky CT (výpočtovej tomografie) boli založené v roku 1895, kedy William Röntgen objavil žiarenie X (röntgenovské žiarenie). Lúče X vznikajú pri interakcii rýchlych elektrónov s hmotou. Pri prechode lúčov X rôznymi vnútornými orgánmi (v závislosti na atomárnom zložení orgánov) prichádza k tlmeniu týchto lúčov. Nevýhodou röntgenovského zobrazovania bolo, že zobrazuje projekciu celého tkaniva -orgánov (ktoré sa tým v obraze prekrývajú), čiže nie je touto metódou možné vytvoriť anatomický rez tela. Koncom 60. rokov bol tento problém vyriešený Britom GodFrey Newbold Hounsfieldom, vynájdením CT [M.F.Reiser,C.R,2012]. Princíp fungovania CT je založený na kombinácii viacerých projekcií tela pacienta lúčmi X. Pacient je vsunutý do prístroja, kde po kruhovej dráhe obieha zdroj RTG žiarenia a detektor. Brzdné žiarenie, emitované z anódy röntgenky, prechádza skúmaným objektom a po dopade na detektor, zaznamenaná intenzitu dopadajúceho žiarenia. Vzťah medzi vstupnou a výstupnou intenzitou jednotlivých projekcií je:

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\mu d} \qquad (1)$$

Kde I_0 je hodnota vstupnej intenzity žiarenia a I je hodnota výstupného žiarenia, d je hrúbka materiálu a μ je lineárny koeficient zoslabenia. Najviac žiarenia sa absorbuje v kostiach, menej v mäkkých tkanivách (pečeň) a najmenej v pľúcach a tukových vrstvách. V praxi sa úloha rekonštrukcie obrazu rieši tzv. Radonovou transformáciou a reverzibilnou Radonovou transformáciou [M.F.Reiser,C.R,2012].



Obr. 1: CT prístroj Siemens SOMATOM Perspective (zdroj:web Siemens Healthcare).



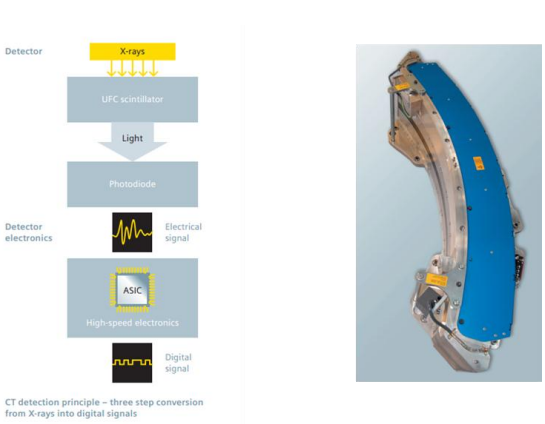
Obr. 2: CT snímok časti hlavi

1.1 Hounsfieldova jednotka

Úbytok žiarenia na CT charkterizuje denzita. Jednotkou denzity je tzv. Hounsfieldova jednotka. Hounsfieldova jednotka je bezrozmerné číslo, kvantifikujúce stupeň absorpcie žiarenia látkou. Výpočtom a spracovaním detekovaného žiarenia získame koeficient útlmu. Na CT snímkach je koeficient tlmenia vyjadrený v Hounsfieldových jednotkách v tvare :

$$HU = 1000 \times \frac{\mu_x - \mu_{voda}}{\mu_{voda}} \qquad (2)$$

Kde μ_{voda} lineárny koeficient útlmu vody . Táto škála obsahuje 2^{12} (4096) odtieňov šedej – pre zobrazenie je potrebné rozsah limitovať(zariadenia disponujú užším rozsahom). Škála má definované 2 pevné body: vzduch (-1000 HU) a voda (0 HU). Tým pádom zmena HU o 1 jednotku reprezentuje zmenu 0.1% koeficientu útlmu vody, nakoľko koeficient vzduchu je približne rovný 0. Je to definícia pre prístroje CT kalibrované vzhľadom k vode.



Obr. 3: Vľavo: Schématické znázornenie detekcie žiarenia. Vpravo: UFC (Ultra fast ceramic) detektor spoločnosti Siemens na detekciu žiarenia[Siemens HealthCare, 2010]

2 Segmentácia dát

Segmentáciu dát môžeme chápať ako dekompozíciu objemu na neprekrývajúce sa podobjemy. Segmentácia medicínskych dát najčastejšie zahŕňa rozpoznanie anatomických štruktúr a nájdenie ich presnej hranice.

2.1 Segmentácia prahovaním

V medicínskych dátach je objemový objekt reprezentovaný sadou voxelov, kde každý voxel má priradenú intenzitu experimentálneho signálu. Segmentácia prahovaním funguje na princípe, ktorý na základe intenzity určuje, či sledovaný voxel patrí k segmentovanému objemu. Prahovacie metódy predpokladajú, že objekty v obraze sa dajú odlíšiť od pozadia na základe jasovej hodnoty jednotlivých obrazových bodov (segmentované objekty vykazujú určitý stupeň homogenity). Na určenie optimálnej prahovej hodnoty sa vo väčšine prípadov využíva histogram. Väčšinou sa ako vhodný kandidát na prahovanie využíva lokálne minimum. V prípade viacnásobnej početnosti tkanív s rovnakou intenzitou lokálne minimum napomáha k ich oddeleniu.

2.2 Region growing segmentácia

Narastanie oblasti (region growing) je jedna z najjednoduchších hybridných metód segmentácie. K svojej činnosti potrebuje dva vstupy: stred šírenia (seed) a kritérium homogenity (homogenity criterion). Algoritmus začína zo stredu šírenia a do výsledku pridáva regióny okolo, kým je splnené kritérium homogenity. Nevýhodou metódy je, že potrebuje inicializovať body seed (pre každý požadovaný región zvlášť), čo znamená manuálnu interakciu s programom. Metóda je tiež citlivá na prítomnosť šumu či na diskontinuity hranice objektu. Prvým krokom algoritmu je lokalizácia stredu šírenia. Výber tohto bodu a kritérium homogenity (napr. interval hodnôt pixlov požadovane oblasti) určuje užívateľ. Oblasti potom rastú od stredov šírenia po susedné body s hodnotami určenými kritériom homogenity.

3 Skeletonizácia

Skeletonizácia - nástroj na úpravu obrazu, zdôrazňuje geometrickú a topologickú štruktúru sledovaného objektu. Skeletonizácia má niekoľko matematických vysvetlení a algoritmov ako napríklad priama skeletonizácia, morfologická skeletonizácia a SKIZ skeletonizácia („SKIZ“: skeleton by influence zones) tiež nazývaná Voronoiov diagram.

Prvý algoritmus na skeletonizáciu bol uvedený H.Blumom ako dôsledok MAT-u („MAT“: Medial Axis Transform) [J.R.Parker,2011]. Blum definoval funkciu MAF („Medial Axis Function“), ktorá počíta stredovú os ako set niekoľkých bodov, ktoré sú umiestnené v kružnici, ktorá je umiestnená do vnútra objektu.

MAF je reverzibilná transformácia, čo znamená že môže objekt vrátiť do pôvodného stavu. Algoritmus skeletonizácie sa dá názorne vysvetliť pomocou procesu horenia trávy. Ak si okraje skúmaného obrazu predstavíme ako miesto zapálenia trávy, skeleton objektu bude miesto kde sa ohne stretnú [J.R.Parker,2011].

3.1 „Thinnnig“

Táto skeletonizačná metóda pracuje na princípe odstraňovania vybraných okrajových bodov. Pre vybrané body sa predpokladá že majú hodnotu 1 a body pozadia majú hodnotu 0 (binárny obraz). Pre obrysový bod ktorý má hodnotu 1 platí, že má aspoň jeden susedný bod s hodnotou 0. „Thinnig“ dobre funguje pre objekty ktorých štruktúra sa skladá z čiar a nie pre objekty ktoré obsahujú rozsiahle spojité oblasti. V tejto práci som použil skeletonizáciu na základe „Zhang-Suen`s thinning“ algoritmu ktorý teraz bližšie popíšem.

3.2 Zhang-Suenov algoritmus

Tento skeletonizačný algoritmus je paralelná metóda čo znamená, že každá získaná hodnota závisí iba od predchádzajúcej iteračnej hodnoty. Zhang-Suen algoritmus je rýchly, jednoduchý a vhodný na skeletonizáciu objektov, ktoré pozostávaju z čiarových štruktúr ako sú napríklad pľúca. [J.R.Parker,2011]

Vo všeobecnosti sa pri „thinning“ algoritmoch pracuje s veličinou *„connectivity number“*, ktorá určuje počet susedných bodov s určitou hodnotu jasu. Táto veličina sa počíta podľa vzťahu:

$$C_n = \sum_{k \in S} N_0 - (N_k \cdot N_{k+1} \cdot N_{k+2}) \qquad (3)$$

kde N_k je farba ôsmich susedov skúmaného pixela, N_0 je skúmaný pixel, N_1 je hodnota pixelu napravo od centrálneho pixelu a ostatné sú zoradené v smere proti pohybu hodinových ručičiek. Skeletonizačný Zhang-Suenov algoritmus pozostáva z dvoch krokov. V prvom kroku pixel I[i,j] je vymazaný, ak sú splnené nasledujúce podmienky:

1.“Connectivity number“ je rovné jednej (C_n=1);

2. I[i,j] má najmenej 2 a najviac 6 čiernych susediacich bodov;

3. Najmenej jeden z I[i,j+1], I[i-1,j] a I[i,j-1] je biely;

4. Najmenej jeden z I[i-1,j], I[i+1,j] a I[i+1,j] je biely;

V druhom kroku sú podmienky nastavené podobne:

1.“Connectivity number“ je rovné jednej (C_n=1);

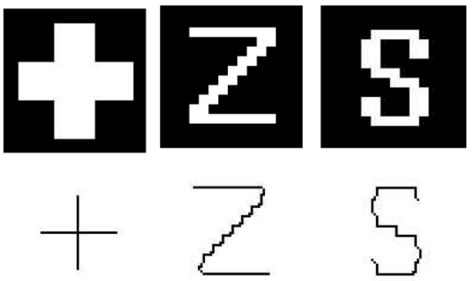
2. I[i,j] má najmenej 2 a najviac 6 čiernych susediacich bodov;

3. Najmenej jeden z I[i-1,j], I[i,j+1] a I[i+1,j] je biely;

4. Najmenej jeden z I[i,j+1], I[i+1,j] a I[i,j-1] je biely;

Na konci druhého kroku sú pixely spĺňajúce tieto podmienky vymazané. Ak na konci algoritmu neostanú na vymazanie žiadne pixely, algoritmus sa zastaví.

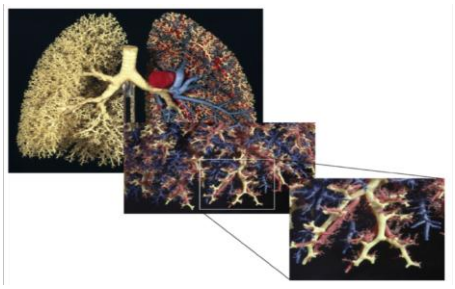
Okrem Zhang-Suen Algoritmu existuje aj mnoho iných algoritmov na skeletonizáciu ako napr: Deutschov, Guo a Hall , C.J. Hildish, Stover-Iverson algoritmus, alebo sekvenčný algoritmus s použitím štruktúrnych masiek. [J.R.Parker,2011]



Obr. 4: Výsledok skeletonizácie použitím Zhang-Suen-ovho algoritmu. [R.Parker,2011]

4 Bronchiálny strom

Hlavnou úlohou ľudských pľúc je výmena dýchacích plynov medzi vzduchom a krvou. Celková plocha ľudských pľúc meria približne 120 000 m^2 (cca 3 tenisové kurty) a je vložená do hrudníka o objeme 5-6 litrov. Bronchiálny strom sa vytvára vetvením počas pľúcnej morfogenézy. Pre ľudské dýchacie cesty platí že minimálny počet vetiev je 18 generácii a maximum 30 s priemerom 23 generácii.



Obr. 5: Ľudské pľúca[Horsfield, K., G. Dart, et al. (1971)]

4.1 Fraktálová analýza bronchiálneho stromu

Pľúcne vetvenie podlieha enormnej pravidelnosti a na prvý pohľad sa zdá byť sebe podobné. Pľúcny strom je generovaný dichotomickým vetvením a priemerný ľudský bronchiálny strom je tvorený miliónmi vetiev usporiadaných do 23 generácii. Ak by pľúca mali byť charakterizované ako fraktálová štruktúra, potom by malo existovať niekoľko jednoduchých pravidiel na popísanie vzťahov vetvenia v jednotlivých generáciách. [Kenneth Falconer,1990] Merania ukazujú že dĺžka a priemer d_z pľúcnych vetiev v z-tej generácii klesajú exponenciálne s generáciou podľa vzťahu:

$$d_z = d_0 e^{-\alpha z} = d_0 q^z \qquad ,\alpha = -\ln q \qquad (4)$$

Dĺžka a priemer v každej nasledujúcej generácií klesá s konštantným faktorom q<1 zatiaľ čo počet elementov na vyplnenie pôvodného priestoru sa zdvojnásobuje. V súlade s tým môžeme fraktálovú dimenziu pľúc určiť pomocou vzťahu:

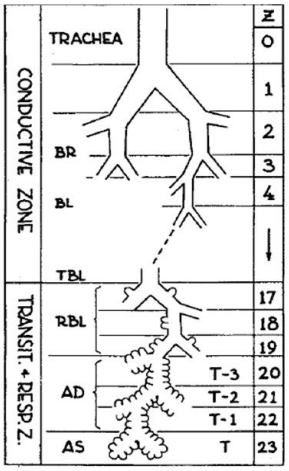
$$D_{fraktál} = \lim_{n->\infty} \frac{\ln m(r)}{\ln n} = \frac{\ln 2}{\ln \frac{1}{q}} \qquad (5)$$

Merania vykonané na rôznych bronchiálnych stromoch u viacerých ľudí určili, že $q= \exp(-\alpha) = 2^{-1/3}$ pre prvých 10-15 generácií z čoho vplýva že $D_{fraktál}$ je rovná približne 3. [Kenneth Falconer,1990]

4.2 Weibelov model bronchiálneho stromu

Detailné meranie geometrie dýchacích ciest boli medzi prvými vykonané Weibelom. V tejto práci sú dáta prezentované v dvoch modeloch : model A ktorý popisuje symetrické vetvenie a model B ktorý popisuje asymetrické vetvenie. Model A (model pravidelnej dichotómie) je typický symetrický model v ktorom sú dýchacie cesty usporiadané do generácií. Stredný priemer a dĺžka sú priradené k jednotlivým generáciám ktorých celkový počet je rovný 23. V tomto modely je vodivé pásmo bronchiálneho stromu zahrnuté do generácií 0-16, respiračné bronchy do generácie 17-19 a alveolárne kanály od generácie 19 do 23.

z	n	D (mm)	l (mm)
0	1	18.000	120.000
1	2	12.200	47.600
2	4	8.300	19.000
3	8	5.600	7.600
4	16	4.500	12.700
5	32	3.500	10.700
6	64	2.800	9.000
7	128	2.300	7.600
8	256	1.860	6.400
9	512	1.540	5.400
10	1024	1.300	4.600
11	2048	1.090	3.900
12	4096	0.950	3.300
13	8192	0.820	2.700
14	16384	0.740	2.300
15	32768	0.660	2.000
16	65536	0.600	1.650
17	131072	0.540	1.410
18	262144	0.500	1.170
19	524288	0.470	0.990
20	1048576	0.450	0.830
21	2097152	0.430	0.700
22	4194304	0.410	0.590
23	8388608	0.410	0.500



Obr. 6: Weibelov model : Každá generácia(z) je charakterizovaná počtom dýchacích ciest (n), charakteristickým priemerom(D) a charakteristickou dĺžkou(l) [Horsfield, K., G. Dart, et al. (1971)]

V modeli B sú pľúca rozdelené do n jednotiek, ktorým sú jednotlivo pridelené priemery. Na rozdiel od modelu A, model B je využitý len v málo prácach.

4.3 Horsfieldov model bronchiálneho stromu

Horsfieldov model bronchiálneho stromu je považovaný za najlepší a najpopulárnejší asymetrický model ľudských dýchacích ciest. Podľa prvej Horsfieldovej štúdie je dĺžka každej vetvy definovaná ako vzdialenosť medzi dvoma bodmi vetvenia, priemer bol určený v polovici dĺžky vetvy. Prvý predbežný model bol podobný Weibelovmu modelu no poradie jednotlivých vetiev je v tomto modeli obrátené (trachea je označená najväčším číslom). Ku každému poradovému číslu danej vetvy priliehajú nasledovné charakteristiky: počet pozorovaných dýchacích ciest a priemerné hodnoty pre dĺžky a priemery. Jednotlivé priemery sú v tomto modely vypočítateľné pomocou závislosti medzi priemermi a poradím. Medzi hlavné prednosti prvého Horsfieldovho modelu patrí schopnosť charakterizovať vlastností asymetrických stromov jednoduchým spôsobom. [M. Florens, 2011]

V roku 1971 sa Horsfield pokúsil zaviesť vyššiu úroveň detailov ako u predchádzajúceho modelu naformulovaním dvoch nových matematických modelov bronchiálneho stromu (Model 1 a Model 2).

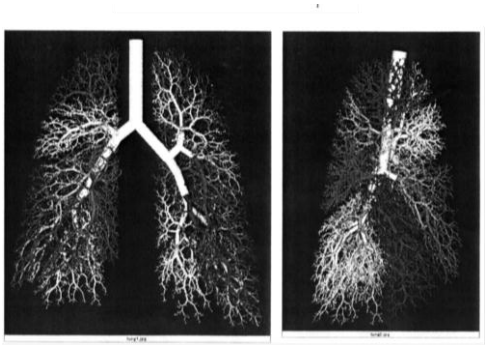
Model 1
V modeli 1 Horsfield stanovil pravidlá pre vetvenie pomocou ktorých sa definuje tzv. „rekurzívny index Δ“.V tomto modeli sa predpokladá že rodičovská vetva poradia n vytvára 2 dcérske vetvy poradia n-1 a n-1- Δ(n). Rekurzívny index Δ v tomto prípade označuje stupeň asymetrie vetvenia pričom Δ(n)=0 platí pre symetrické vetvenie. V Horsfieldovom modeli je definovaných 31 generácií pričom poradie 31 prilieha trachei a pre rekurzívny index platia nasledujúce hodnoty:

Pre n=11-27 : Δ(n)=3,
n=9 n=10: Δ(n)=3,
n=8 : Δ(n)=2,
n=2-7: Δ(n)=0 (symetrické vetvenie) .

Model 2
Hlavný rozdiel a nová myšlienka zavedená tohto modelu je, že každý bronchopulmonálny segment (BPS) je potrebné posudzovať samostatne. Takto každý BPS sa vyznačuje jedinečnou sériou dĺžiek a priemerov podľa príslušnej generácie.

4.4 Kitaokov model bronchiálneho stromu

Ak prijmeme predpoklad, že základná architektúra bronchiálneho stromu tvorí fraktálovú štruktúru, vymodelovanie bronchiálneho stromu sa dá dosiahnuť aplikáciou niekoľkých jednoduchých pravidiel. Jednoduché rekurzívne pravidlá ktoré vedú k stromovej štruktúre sa podobajú na bronchiálny strom len koncepčne. Presnejší konštrukčný návod priniesol v roku 1990 Hiroko KITAOKA pomocou 9+4 jednoduchých pravidiel na skonštruovanie 3D bronchiálneho stromu. Nato aby sa vzduch dostal rovnomerne do každej oblasti pľúc je nutné aby koncové vetvy vypĺňali priestor rovnomerne a množstvo vzduchu pretečeného vetvou by malo byť rovné jej objemu. Tieto požiadavky vedú k pravidlám pre určenie vetviacich uhlov, priemerov a dĺžok vetiev.



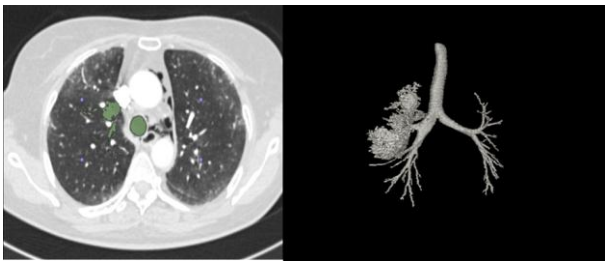
Obr. 7:Kitaokov model bronchiálneho stromu

5 Segmentácia bronchiálneho stromu

Na vyčlenenie bronchiálneho stromu zo snímok slúži segmentácia. V tejto práci som použil metódu segmentácie nazývanú „region growing“ segmentácia a realizova som ju pomocou knižnice ITK a v jazyku C++.

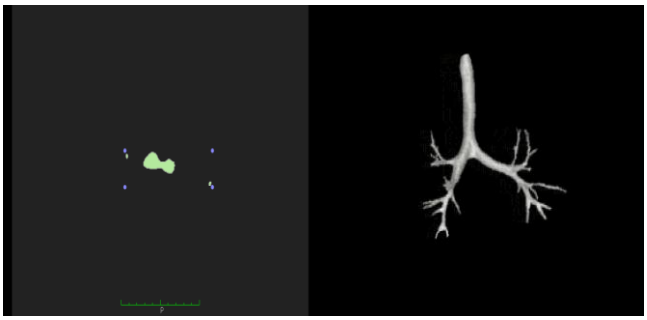
Ľudské pľúca sú charakteristické tým, že majú nízku hustotu (sú vyplnené vzduchom) čiže majú na CT snímkach nízke hodnoty HU. Vzhľadom na predpoklad, že všetky pixely na CT snímku s hodnotou pod -1100 HU sú vzduch, môžeme ich označiť tým pádom ako časť pľúc. Každý pixel s hodnotou nad -950 HU nebude patriť do dýchacích ciest, pretože to je hodnota hustoty buď bronchiálnej steny alebo iného tkaniva. Každý pixel v tomto intervale (od -1100 HU do - 950 HU) tým pádom môže patriť do dýchacích ciest.

Prvým krokom segmentácie je načítanie DICOM snímok a vytvorenie objemu. Pre CT prístroje je typické načítanie obrazu, ktorého hodnoty pixelov sú uložené ako signed short (škála vyhovuje pre interval Hounsfield jednotiek)

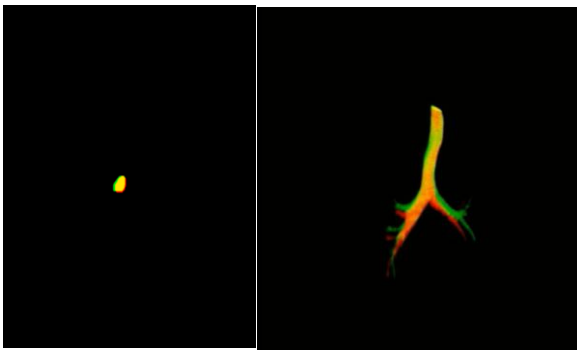


Obr.8: Označenie segmentovanej oblasti: Chybové označenie oblasti pri nesprávne zvolenom intervale prahových hodnôt, 3D model (vlastné dáta)

Výsledkom aplikácie algoritmu na sadu snímkou je segmentovaný bronchiálny strom v podobe binárneho obrazu, kde hodnota pixlu 255 prislúcha oblasti dýchacích ciest a hodnota 0 oblasti mimo dýchacích ciest. Obraz je exportovaný vo forme 2D rezov vo formáte .png.



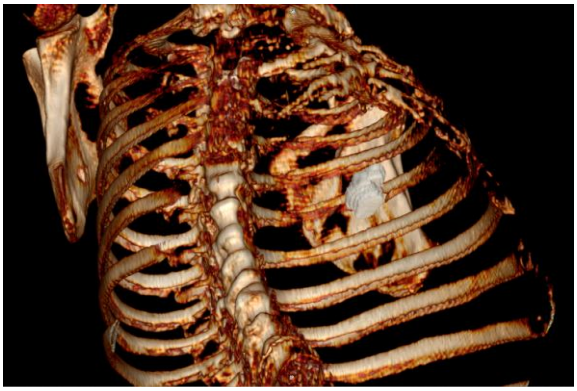
Obr.9: Segmentovaný bronch. strom



Obr. 10 prekryte snímky bronchiálnych stromov

6 Analýza zmien bronchiálneho stromu

Zdrojové dáta slúžiace pre analýzu sú CT záznamy hrudníka z 31.8. a 8.10.2012. Ide o pacienta s adenokarcinómom pľúc s prerastaním do medzihrudia (mediastína) a s metastázou do 5 rebra vpravo. Dáta boli nasnímane v Univerzitnej Nemocnici Bratislava-Ružinov a pred analyzovaním boli anonymizované (zákonu o ochrane osobných údajov).



Obr. 9:Označenie metastázi pomocou programu OsiriX a použitím techniky Region Of Interest (vlastné dáta)

Aplikovaním segmentačného algoritmu na DICOM snímky som získal 2D rezy ktoré obsahujú len bronchiálny strom . Pre lepšie znázornenie rozdielov v bronchiálnom strome som použil fúziu snímok s použitím knižnice openCV.

Prvým krokom fúzie snímok je načítanie súbežne dvoch obrazov (snímky bronchiálneho stromu pacienta z dvoch meraní) a následne prefarbenie obrazov. Na prefarbené snímky je nasledovne aplikovaná funkcia openCV - cvAddWeightet . Táto funkcia vypočítava vážený súčet elementov zdrojových obrazov a pridáva ich do výsledného obrazu.

6.1 Analýza zmien v objeme

Vplyvom metastázy je na vytvorenom 3D modeli vidno stlačenie primárnych bronchov . Na kvantitatívny popis stlačenia som použil analýzu histogramu pomocou knižnice openCV.

Bronchiálny strom zaberá na snímkach určitý počet pixlov. Keďže pľúca vytvárajú objem, dvojrozmernú informáciu nachádzajúcu sa na jednotlivý rezoch môžeme previesť na objemovú a to tak, že rozmer jedného pixlu na CT snímku sa dá určiť pomocou DICOM tagu s názvom „Reconstruction Diameter“ .

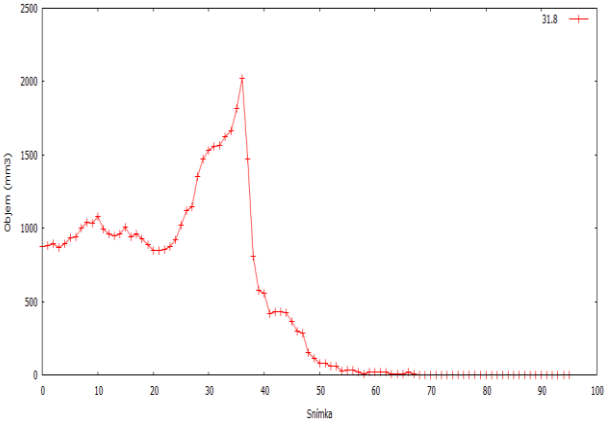
Na vytvorenie obrazu sú dáta namerané CT prístrojom prerozdelené do mriežky pričom element takejto mriežky je pixel. Veľkosť matice ktorú vytvára takáto mriežka je pri CT snímkach vo väčšine prípadov 512x512, 256x256 a 1024x1024. Každý element takejto mriežky – pixel má svoju výšku a šírku čo reprezentuje časť pacientovho tkaniva. Hodnota pixlu znamená absorpciu žiarenia meranú v Hounsfield Unit. Ďalším faktorom, ktorý vplýva na veľkosť pixelu je veľkosť priemeru poľa (DFOV-Display Field of View). Výber parametra veľkosti priemeru poľa určuje koľko z celkového počtu primárnych dát bude použitých na vytvorenie obrazu. Výberom menšej hodnoty tohto parametra klesá aj rozmer pixelu a výberom väčšej hodnoty DFOV je rozmer pixelu väčší. Veľkosť pixela môže byť v tomto smere definovaná aj ako množstvo dát pacienta obsiahnutých v jednom pixeli. Hodnota DFOV sa dá získať pomocou DICOM súboru a to konkrétne pomocou tagu (0018,1100) „Reconstruction Diameter“. Pre získanie objemovej informácie je potrebné vypočítať rozmer základnej objemovej jednotky - voxel. Zarátaním hrúbky rezu (Dicom tag „Slice thicknes“ (0018,0050)) dostávame z pixlu voxel s rozmermi veľkoti:

Objem voxlu=veľkosť pixelu x veľkosť pixelu x hrúbka rezu

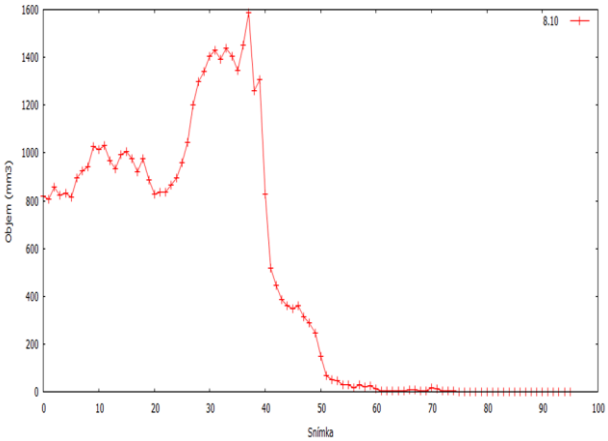
Na získanie počtu pixelov na jednotlivom CT reze som použil histogram vytvorený pomocou knižnice openCV. Prvým krokom aplikácie je vytvorenie histogramu a to pomocou funkcie:

CvHistogram* **cvCreateHist**(int **dims**,
int* **sizes**,
int **type**,float** **ranges**,
int **uniform**)

Argument dims označuje dimenziu histogramu, sizes pole rozmerov histogramu, type označuje formát histogramu (CV_HIST_ARRAY : histogram je reprezentovaný ako multidimenzionálne husté pole, CV_HIST_ SPARSE: histogram je reprezentovaný ako multidimenzionálne riedke pole), ranges znamená interval zarátaných hodnôt a uniform označuje druh takéhoto intervalu. Aplikovaním funkcie na sekvenciu snímok som získal počet bielych pixelov na snímkach. Po prepočítaní veľkosti pixelu som získal plochu a následne zarátaním hrúbky snímky aj objem. Nasledujúci graf zobrazuje závislosť objemu od poradového čísla snímky.

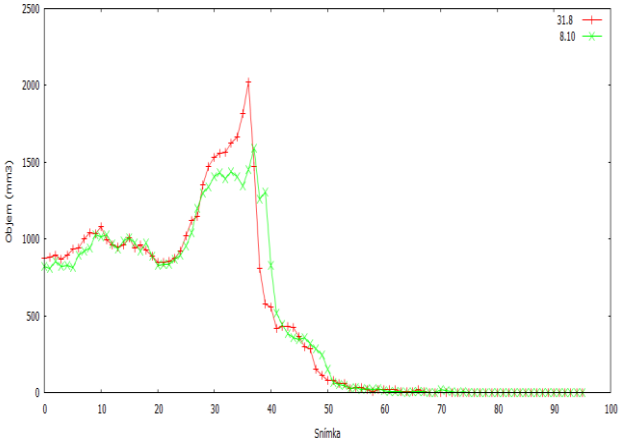


Obr. 11 Graf znázorňujúci prepočítaný objem vzťahujúci sa na jednotlivé snímky- nasnímané 31.8



Obr. 12 Graf znázorňujúci prepočítaný objem vzťahujúci sa na jednotlivé snímky- nasnímané 8.10

Na grafe Obr.13 je viditeľná zmena objemu v bronchiálnom strome. Snímky od poradového čísla 0-31 sú snímky znázorňujúce tracheu, snímky 32-41 znázorňujú priedušky a ostatné snímky znázorňujú menšie štruktúry. Pri pretransformovaní plošnej informácie na objemovú som získal objemy jednotlivý častí bronchiálneho stromu pričom v oblasti priedušiek vidno na grafe redukciu objemu.

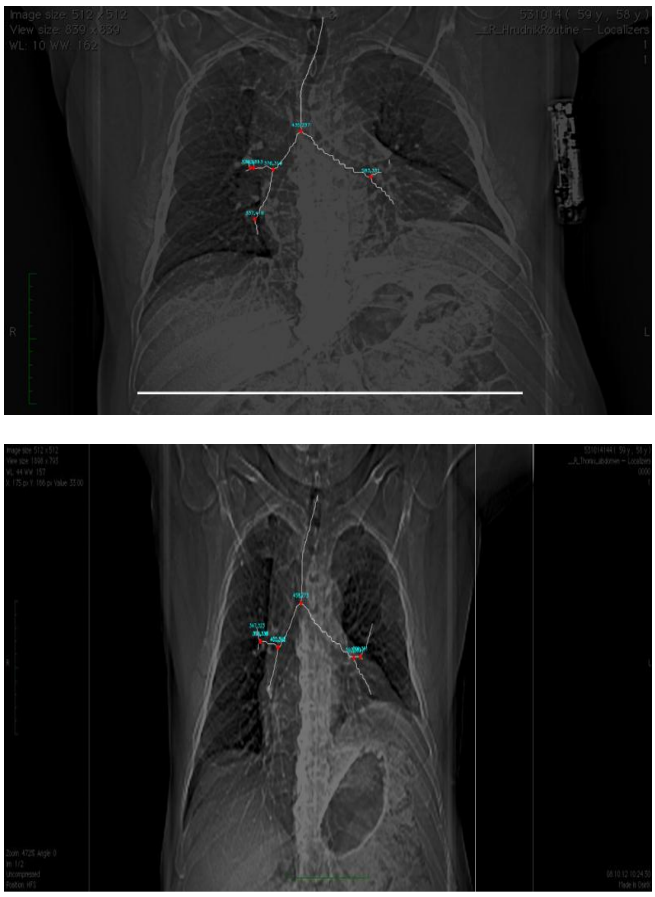


Obr. 13 Graf zázorňujúci prepočítanýobjem vzťahujúci sa na jednotlivé snímky nasnímané 8.10 (zelená) a 31.8 (červená)

Objem ktorý zaberajú priedušky (snímok 31-40) pacienta, ktorého dáta boli snímané 31.8 je po prepočítaní 12530.3 mm^3 a na snímkach z 8.10 je objem priedušiek 11318.6 mm^3 . Z výsledku je zrejmý pokles objemu priedušiek .

6.2 Analýza zmien v geometrii

Vplyvom metastázy je viditeľné aj posunutie priedušiek. Tento posun som analyzoval využitím skeletonizácie a algoritmu na hľadanie vetviacich bodov. Prvým krokom je extrakcia koronárneho rezu CT snímky na lepšiu lokalizáciu a analýzu posunutia. Po extrakcii koronárnych snímok bronchiálneho stromu a celého hrudníka som na bronchiálny strom aplikoval algoritmus skeletonizácie- Zhang Suenov algoritmus .Po aplikovaní skeletonizácie som následne podrobil skeleton analýze pomocou algoritmu na hľadanie vetviacich bodov pomocou knižnice openCV. Algoritmus prechádza skeletonom a označí vetviaci pixel ako červený bod . Výsledkom algoritmu je skeleton s označenými bodmi .



Obr. 14 Výsledok aplikácie na analýzu zmien v geometrii bronchiálneho stromu. Na hornej snímke je znázornený koronárny rez pacienta spolu so skeletonizovaným bronchiálnym stromom z dát meraných 31.8 (hore) a na spodnej snímke z dátumu 8.10.(dole)

Z polôh jednotlivých vetviacich bodov vyplýva posunutie primárnych bronchov. Na obrázku Obr.35 je pre dáta merané 31.8 uhol priedušiek 94,47° a pre dáta z 8.10 85,7°.

7 Záver

Úlohou tejto práce bolo získať systém na popis vnútornej štruktúry pľúc, čo otvára nové možnosti na preskúmanie tejto štruktúry. Dôležitou časťou práce je segmentácia bronchiálneho stromu, na ktorú som použil region growing segmentačný algoritmus. Vzhľadom na relatívne nízku kvalitu použitých dát, ktorá je vynútená požiadavkou minimalizovať radiačnú záťaž pacienta sa segmentačným algoritmom podarilo segmentovať hornú časť dýchacích ciest, ktorá ale je - vzhľadom na lokalizáciu metastázy - ovplyvnená najviac. Segmentovaný bronchiálny strom je následne podrobený analýze zmien objemu a geometrie. Na získanie objemovej informácie som použil transformáciu plošných elementov, získaných zo segmentácie, na objemové elementy. Z objemových zmien dýchacích ciest konkrétneho pacienta je viditeľné stlačenie priedušiek . Grafické znázornenie objemov, ktoré zaberajú jednotlivé časti bronchiálneho stromu, nám dovoľuje detailnejšie sa pozrieť na zmeny v objeme anatomických častí. Aplikovaním skeletonizačného algoritmu na segmentovaný strom som získal topologickú štruktúru stromu, z ktorej sa dá určiť geometrický posun primárnych bronchov . Takýto spôsob analýzy bronchiálneho stromu je ovplyvnený viacerými faktormi, ktoré vplývajú na presnosť výsledkov a to segmentácia bronchiálneho stromu (závislá od kvality experimentálnych dát) a miera nádychu pacienta .

Vytvorené 3-D modely sa dajú zobraziť pomocou stereoskopických zariadení a následne detailnejšie preštudovať s použitím haptického interfacu.

Vytvorený systém sa dá neskôr použiť ako plugin pre jestvujúce aplikácie, či už vizualizačné nástroje a DICOM vievery (napr. OsiriX), alebo aplikácie na ovládanie CT prístrojov ako napríklad software spoločnosti Siemens – Syngo, alebo nástroj na podporu bronchoskopie a tak následne po naskenovaní pacienta a archivácií dát pozorovať zmeny dýchacích ciest .

Poďakovanie

Chcel by som sa poďakovať školiteľovi doc. RNDr. Jozefovi Uličnému CSc za všetky cenné rady, pripomienky a odborné vedenie pri písaní a vytváraní tejto práce, MUDr Ivanovi Čavargovi PhD za odborné rady a experimentálne dáta a spoločnosti Siemens s.r.o za odborné poradenstvo .

Literatúra

[M.F.Reiser,C.R,2012] M.F.Reiser,C.R. Becker,L.Nikolau,G.Glazer ,2012, Multislice CT, 3rd Edition,New York,Springer, ISBN 0942-5373

[J.R.Parker,2011] J.R.Parker,2011,Algorithms for Image Processing and Computer Vision, 2nd Edition, Wiley publishing,Indianapolis,Indiana,USA, ISBN 978-0-470-64385-3

[Kenneth Falconer,1990] Kenneth Falconer,1990,Fractal geometry-Mathematical foundation and Applications,Wiley Publishing,New York, ISBN 0-471-92287-0

[M. Florens, 2011] M. Florens, B. Sapoval and M. Filoche,2011 An anatomical and functional model of the human tracheobronchial tree, *J Appl Physiol*

[Horsfield, K., G. Dart, et al. (1971)] Horsfield, K., G. Dart, et al. (1971), Models of the human bronchial tree., *J Appl Physiol 31(2): 207-17.*

[Ryuji TAKAKI and Hiroko KITAOKA, 1986] Ryuji TAKAKI and Hiroko KITAOKA, Virtual Construction of Human Lung, Science on Form 1986

[Siemens HealthCare, 2010] Siemens HealthCare, Computed Tomography. Its History and Technology,2010, Siemens AG, Medical Solutions,Nemecko

Vedenie žiakov gymnázia ku skupinovej práci prostredníctvom metodických materiálov

Bc. Bianka Gergeľová*
Školiteľ: PaedDr. Klára Velmovská, PhD.‡

Katedra teoretickej fyziky a didaktiky fyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Štátny vzdelávací program (ŠVP) z roku 2009 svojimi požiadavkami vyzýva učiteľov fyziky, aby v rámci vyučovania rozvíjali žiakov nielen vedomostne, ale aj osobnostne. K osobnostnému vývinu žiaka môže výrazne prispievať, ak žiak pracuje v skupine. Prieskumom sme zisťovali, do akej miery sa v súčasnosti uplatňuje skupinová práca žiakov vo vyučovaní fyziky, aké materiály pritom učitelia využívajú, resp. materiály akého charakteru by uvítali ako pomôcky pri uplatňovaní vyššie uvedenej formy práce. Na základe učiteľových požiadaviek (zistených prieskumom) sme navrhli metodický materiál ku skupinovej práci žiakov.

Kľúčové slová: štátny vzdelávací program (ŠVP), skupinová práca žiakov (SPŽ), aktívne poznávanie, metodické materiály ku skupinovej práci žiakov (MMkSPŽ).

Úvod

Fyzika je predmet, ktorý ponúka nesmierne veľa príležitostí na experimentovanie s vyučovacími metódami, resp. formami. Uplatňovanie nových metód vo vyučovaní je podporované vo veľkej miere aj štátnym vzdelávacím programom, presnejšie jeho stanovenými kompetenciami, ktoré sa majú rozvíjať v rámci vyučovania fyziky.

O skupinovej práci vo fyzike nemôžeme hovoriť ako o novej forme práce, pretože sa používala aj doteraz na laboratórnych cvičeniach. Avšak, v súčasnosti sa do popredia dostalo rozvíjanie osobnosti žiaka, čo je odzrkadľované aj stanovenými kompetenciami ŠVP, a preto sa na skupinovú prácu vo vyučovaní musíme pozrieť z inej perspektívy. Kým pred školskou reformou sa najväčší dôraz kládol na vedomostnú úroveň žiaka, po školskej reforme (popri jeho vedomostiach) sa upriamila pozornosť aj na jeho osobnostný rozvoj. A práve osobnosť žiaka možno výrazne rozvíjať formou skupinovej práce.

Uplatnenie skupinovej práce vo vyučovaní nie je jednoduchá záležitosť, ani zo strany žiakov, ani zo strany učiteľa. Jej efektívne využívanie vyžaduje časovo náročnú prípravu učiteľa a schopnosť žiaka pracovať v skupine. Schopnosť žiaka pracovať v skupine možno najjednoduchšie zabezpečiť častým uplatňovaním takejto formy práce vo vyučovaní („*žiak si postupne zvykne na skupinovú prácu*“ (Gergeľová, 2011, s. 32)). Časovo náročnú prípravu učiteľa možno zredukovať vopred pripravenými metodickými materiálmi určenými ku skupinovej práci žiakov. Príklad takéhoto metodického materiálu uvádzame v 3. kapitole.

1 Skupinová práca žiakov gymnázia na hodinách fyziky podľa ŠVP

Ako sme už vyššie uviedli, ŠVP výrazne podporuje uplatňovanie skupinovej práce žiakov na hodinách fyziky. Pre jednoduchosť a porovnanie sme znázornili prostredníctvom tabuľky (tab. 1T) základné znaky skupinovej práce žiakov a kompetencie ŠVP, ktoré sa majú rozvíjať v rámci vyučovania fyziky.

Tab. 1T: Základné znaky skupinovej práce žiakov a kompetencie ŠVP

Znaky skupinovej práce žiakov	Kompetencie podľa ŠVP
rozvíja sociálne kontakty medzi žiakmi	***Poznávacia (kognitívna)*** Nájsť si vlastný štýl učenia a vedieť sa učiť v skupine.
donúti k prejavu aj tých žiakov, ktorí zvyčajne na hodinách ostávajú pasívnymi	***Komunikačná*** Tvoriť, prijať a pracovať informácie.
zvyšuje sebadôveru žiaka	***Komunikačná*** Formulovať svoj názor a argumentovať.
pôsobí na intelektuálny rozvoj žiaka	***Interpersonálna*** Akceptovať skupinové rozhodnutia.
odstraňuje izolovanosť žiakov	***Interpersonálna*** Kooperovať v skupine.

* bianka.gergelova@gmail.com
‡ Klara.Velmovska@fmph.uniba.sk

žiak si postupne vytvorí pozitívny vzťah ku skupinovej práci	***Interpersonálna*** Tolerovať odlišnosti jednotlivcov a iných.
podporuje demokratické rozhodovanie, samostatnosť, iniciatívnosť a kreativitu	***Interpersonálna*** Diskutovať a viesť diskusiu o odbornom probléme.
vedomosti získané touto formou sú oveľa trvácnejšie.	***Intrapersonálna*** Regulovať svoje správanie.

Pri porovnávaní stĺpcov môžeme povedať, že vhodné uplatňovanie skupinovej práce vo vyučovaní môže výrazne prispievať k rozvoju tých kompetencií, ktoré stanovuje aj ŠVP.

2 Prieskum k metodickým materiálom

Predmetom nášho prieskumu je analýza názorov respondentov (učiteľov) v súvislosti s metodickými materiálmi ku skupinovej práci žiakov. Okrem toho, prostredníctvom prieskumu sa snažíme zachytiť aj ich postoj k využívaniu skupinovej práce žiakov vo vyučovaní fyziky vôbec.

Pri našom prieskume na získavanie dát v teréne sme použili dotazník s názvom „*Dotazník o metodických materiáloch ku skupinovej práci žiakov (MMkSPŽ)*“. Vyššie uvedený dotazník bol anonymný a obsahoval spolu 9 položiek v nasledujúcom rozložení: 3 zatvorené položky s viacnásobným výberom, 1 otvorenú a 5 polouzavretých položiek.

Z priestorových dôvodov v tejto práci uvádzame vyhodnotenie len niektorých položiek, ktoré zreteľne odzrkadľujú a) postoj učiteľov k využívaniu skupinovej práce žiakov vo vyučovaní a b) názor učiteľov na obsah metodických materiálov.

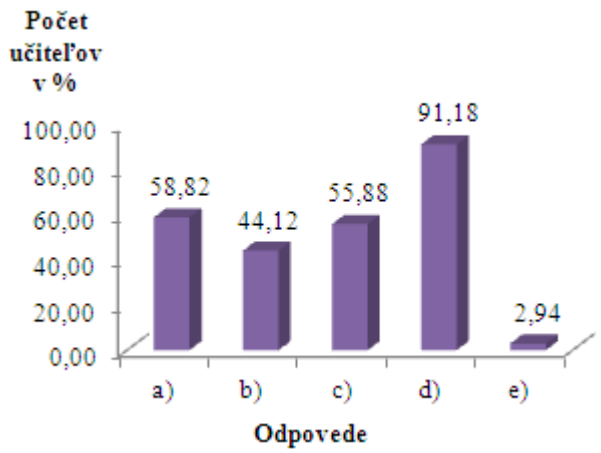
Náš prieskum sme zrealizovali na súbore veľkosti 34 respondentov, t.j. učiteľov. Oslovených respondentov však bolo 43, a teda návratnosť dotazníka je 79,07%. Respondenti nášho prieskumu sú učitelia základných a stredných škôl z Bratislavy a okolia.

Spracovanie a interpretácia vybraných položiek prieskumu

Položka č. 1 (Graf 1P):

Čo by podľa Vás mali obsahovať metodické materiály ku skupinovej práci žiakov? (Možnosť výberu viacerých odpovedí.)

a) rozširujúce informácie k danej téme,
b) riešené úlohy,
c) presný návod, ako má učiteľ postupovať na hodine,
d) návody na experimenty, možné výsledky,
e) iné.....



Graf 1P: Obsah metodických materiálov ku skupinovej práci žiakov

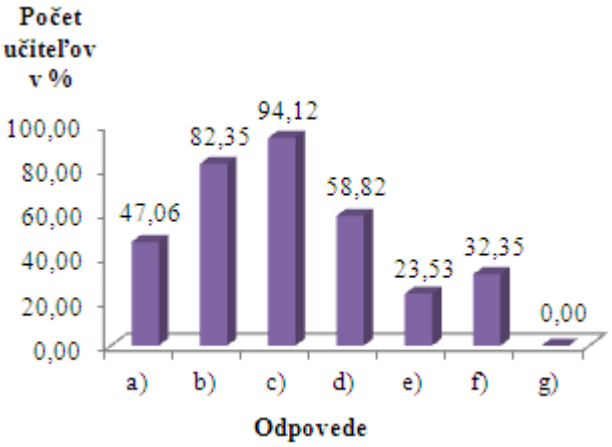
Diskusia k položke č. 1:

Podľa 91,18% opýtaných učiteľov ťažiskom MMkSPŽ by mali byť návody na experimenty s možnými výsledkami. 58,82% učiteľov by uvítalo v metodických materiáloch rozširujúce informácie k danej téme. Podľa 55,88% opýtaných učiteľov MMkSPŽ majú obsahovať aj presný návod, ako má učiteľ postupovať na hodine. Všetky tieto získané informácie sú veľmi dôležité a je potrebné ich zohľadňovať pri tvorbe MMkSPŽ.

Položka č. 2 (Graf 2P):

Podľa Vás, v ktorých častiach vyučovacieho procesu by ste vedeli najefektívnejšie využiť skupinovú prácu žiakov (SPŽ) za predpokladu, že máte k dispozícii metodické materiály (MM) s Vami navrhnutým obsahom?
(Možnosť výberu viacerých odpovedí.)

a) pri zavádzaní nových pojmov,
b) pri pokusoch,
c) pri laboratórnych cvičeniach,
d) pri riešení úloh,
e) pri preverovaní žiackych vedomostí,
f) pri opakovaní prebraného učiva,
g) pri žiadnej z uvedených možností.



Graf 2P: Časti vyučovacieho procesu, v ktorých by učitelia vedeli najefektívnejšie využiť SPŽ

Diskusia k položke č. 2:

Z grafu 2P vyplýva, že učitelia by vedeli za pomoci MM efektívne využiť SPŽ vo všetkých častiach vyučovacieho procesu, samozrejme s dôrazom na časti spojené s experimentmi, ktorých realizácia bez využitia skupinovej práce žiakov je takmer nepredstaviteľná. Na základe prvej časti predchádzajúcej vety môžeme povedať, že MM môžu výrazne prispieť k rozšíreniu využívania SPŽ aj do tých častí vyučovania, ktoré nie sú spojené s experimentmi.

Zhrnutie prieskumu

Kľúčovým cieľom nášho prieskumu bolo zistiť názory súčasných učiteľov na skutočnosť, čo by mali obsahovať novovytvorené metodické materiály, aby čo najlepšie pomohli učiteľovi pri vyučovaní, v ktorom sa využíva skupinová práca žiakov. Tento cieľ sme splnili, nakoľko učitelia sa pomocou dotazníka jasne vyjadrili, čo potrebujú k využívaniu skupinovej práce žiakov. Popri obsahu MM sme zisťovali napr. frekvenciu využívania skupinovej práce žiakov v jednotlivých častiach vyučovacieho procesu, časovú náročnosť prípravy učiteľa na hodinu s využitím SPŽ, atď.

Na základe splnenia vytýčeného kľúčového cieľa môžeme vysloviť nasledujúce **odporúčania pre prax:**

1) Podporovať využívanie skupinovej práce žiakov vo vyučovaní tvorbou metodických materiálov pre učiteľov.
2) Pri tvorbe metodických materiálov zohľadňovať požiadavky učiteľov.

3 Skúmame periódu pružinového oscilátora

V tejto kapitole si ukážeme príklad metodického materiálu k úlohe „*Zistite závislosť periódy pružinového oscilátora od hmotnosti závažia*“. Úloha je inšpirovaná novou učebnicou „*fyziky pre 2. ročník gymnázia a 6. ročník gymnázia s osemročným štúdiom*“ (Demkanin, 2010), a zároveň je určená študentom 2. ročníka 4-ročného gymnázia. Táto úloha je súčasťou pracovného listu s témou „*Vlastnosti pružinového oscilátora*“, ktorý okrem vyššie uvedenej úlohy obsahuje aj ďalšiu úlohu „*Z grafickej závislosti určte tuhosť danej pružiny*“.

Metodický materiál (MM) napísaný k úlohe v podkapitole 3.1 je obsahovo vytvorený na základe výsledkov prieskumu, ktorý je uvedený v kapitole 2.

Vypracovaný metodický materiál pozostáva z nasledujúcich častí:

1) Rozširujúce informácie k danej téme: Perióda pružinového oscilátora.
2) Organizácia práce v skupinách.
3) Vlastné skúsenosti s realizáciou aktivity.

Vyššie uvedenými tromi časťami sme sa snažili vyhovieť všetkým požiadavkám učiteľov na obsah metodických materiálov ku skupinovej práci žiakov, ktoré uviedli v dotazníku o metodických materiáloch ku skupinovej práci žiakov (MMkSPŽ).

3.1 Pracovný list určený pre skupinu žiakov na gymnáziu s témou: „Vlastnosti pružinového oscilátora“

Úloha: *Zistite závislosť periódy pružinového oscilátora od hmotnosti závažia.*

Doplňte hypotézu:

Perióda pružinového oscilátora .... od hmotnosti závažia.

Pomôcky:

Stojan na zavesenie pružiny, aspoň 4 závažia s rôznymi hmotnosťami (z_1, z_2, z_3, z_4), stopky, pružina, digitálne váhy.

Postup:

1) Upevnite pružinu na záves.
2) Overte, či pri najväčšom zaťažení (teda $m = z_1 + z_2 + z_3 + z_4$, m – celková hmotnosť zavesených závaží) možno považovať predĺženie pružiny za pružnú deformáciu.
3) Pomocou digitálnych váh určte a zapíšte:

hmotnosť z_1 = ...
hmotnosť z_2 = ...
hmotnosť z_3 = ...
hmotnosť z_4 = ...

4) Niektoré závažie zaveste na pružinu a odmerajte periódu T oscilátora.

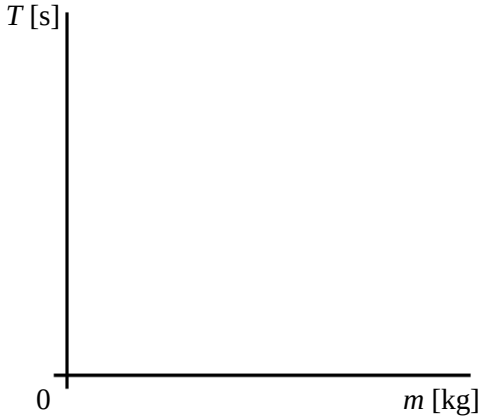
Návod na presnejšie určenie periódy T: odmerajte dobu 10-tich kmitov a nameranú hodnotu vydeľte číslom, ktorý sa rovná počtu odmeraných kmitov, t.j. číslom 10.

5) Získanú hodnotu periódy T zaznamenajte do tabuľky (Tab. 1).
6) Urobte aspoň 10 meraní tak, že pri každom novom meraní meňte celkovú hmotnosť zavesených závaží.

Tab. 1: Meranie periódy pružinového oscilátora pri rôznych hmotnostiach

Číslo merania	*m (zavesených závaží)* [kg]	T [s]
1.		
2.		
3.		
4.		
5.		
6.		
7.		
8.		
9.		
10.		

7) Do grafu (Graf 1) znázornite závislosť periódy pružinového oscilátora od celkovej hmotnosti zavesených závaží.



Graf 1: Závislosť periódy pružinového oscilátora od celkovej hmotnosti zavesených závaží

8) Získaný graf porovnajte s grafmi ostatných skupín.

Diskusia:

1) Akým spôsobom vytvoríte pružinový oscilátor?.....
.....

2) Ktoré parametre ste menili pri vašom meraní?
.....

3) Ktoré parametre ste nemenili pri vašom meraní? .....
.....

4) Na základe grafu vyslovte záver, ako závisí perióda pružinového oscilátora od hmotnosti závažia, resp. od celkovej hmotnosti zavesených závaží. Skúste odhadnúť túto matematickú závislosť. .....
.....

5) Ktorá premenná predstavuje závislú, a ktorá nezávislú pri vašej matematickej závislosti? .....
.....
.....

6) Potvrdila sa vaša hypotéza, ktorú ste vyslovili na začiatku merania? .....
.....

7) Je priebeh grafu 1 vo všetkých skupinách rovnaký? .....
.....

8) Od čoho závisí sklon (stúpanie) grafu 1? .....
.....
.....

9) Uveďte príklady pružinového oscilátora z reálneho života.....
.....

3.2 Metodické materiály k pracovnému listu s témou: „Vlastnosti pružinového oscilátora“

Metodický materiál, ktorý je pripravený k vyššie uvedenej úlohe pozostáva z troch častí, ktoré sú uvedené v kapitole 3 „*Skúmame periódu pružinového oscilátora*“.

3.2.1 Rozširujúce informácie k téme: Perióda pružinového oscilátora

Harmonický (pružinový) oscilátor, ktorému sa venujeme vo vyššie uvedenej úlohe, má blízke analógie v mnohých iných odvetviach. Nezáleží na tom, či uvažujeme príklad závažia na strome, kyvadla s malou výchylkou, alebo iných mechanických zariadení, v skutočnosti vždy ide o štúdium určitej diferenciálnej rovnice.

Richard P. Feynman a kol. (1980, s. 374-377) uvádzajú, že najjednoduchším mechanickým systémom, ktorý svojím pohybom sleduje lineárnu diferenciálnu rovnicu s konštantnými koeficientmi, je pružinový oscilátor.

Kúdelčík a Hockicko (2011, s. 152-155) sa vyjadrujú o pružinovom oscilátore nasledovne: harmonický pohyb pružinového oscilátora „*je spôsobený silou F, ktorá stále smeruje do rovnovážnej polohy a je priamo úmerná okamžitej výchylke.*“ Ak predpokladáme, že „*pohyb oscilátora nie je ovplyvňovaný vonkajšími silami, môžeme jeho harmonický pohyb považovať za* ***vlastné kmitanie****. Vlastné kmitanie pružinového oscilátora prebieha iba s istou uhlovou frekvenciou* ω_0*, ktorá súvisí s vlastnosťami oscilátora.*“ Skutočnosť, že pružinový oscilátor sa niekedy nazýva aj **lineárnym harmonickým oscilátorom** znamená, že „*sila je úmerná prvej mocnine výchylky* x.“

Ak chceme riešiť pohybovú rovnicu vlastného kmitania oscilátora, potom známy vzťah $F = -kx$ je potrebné dosadiť do 2. Newtonovho pohybového zákona $F = ma$ a získame

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx \qquad (1.1)$$

Po úprave dostaneme

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{k}{m}x = 0 \qquad (1.2)$$

Po zavedení substitúcie $\omega_0^2 = \frac{k}{m}$, dostaneme nasledujúcu rovnicu

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega_0^2 x = 0 \qquad (1.3)$$

Rovnica (1.3) predstavuje lineárnu diferenciálnu rovnicu 2. rádu.

Zovšeobecnené riešenie pohybovej rovnice pre vlastné (netlmené) kmitanie harmonického oscilátora môže mať tvar

$$x(t) = x_m \cos(\omega_0 t + \varphi), \qquad (1.4)$$

kde:

- x predstavuje okamžitú výchylku v čase t,
- x_m predstavuje maximálnu výchylku,
- $(\omega_0 t + \varphi)$ je fáza kmitu,
- φ je začiatočná fáza kmitavého pohybu v čase $t = 0\ s$.

Konštanty x_m a φ vyplývajú z počiatočných podmienok a určujú hodnotu výchylky na začiatku pohybu, v čase $t = 0\ s$. Nakoľko funkcia kosínus v rovnici (1.4) sa mení medzi krajnými hodnotami ± 1, výchylka $x(t)$ sa bude meniť medzi krajnými hodnotami $\pm x_m$.

Keďže poznáme definíciu periódy kmitov (T_0), pre ľubovoľný čas t musí platiť $x(t) = x(t + T_0)$. Ak predpokladáme, že $\varphi = 0\ rad$ a túto úvahu aj zakomponujme do rovnice (1.4) následne dostaneme

$$x_m \cos(\omega_0 t) = x_m \cos(\omega_0 (t + T_0)).$$

Nakoľko kosínusová funkcia je periodická s periódou $2\pi\ rad$, z vyššie uvedenej rovnice vyplýva

$$\omega_0 t + 2\pi = \omega_0 (t + T_0),$$

odtiaľ

$$2\pi = \omega_0 T_0.$$

Po zapracovaní známeho vzťahu medzi periódou a frekvenciou a použitej substitúcie z rovnice (1.3) do predchádzajúceho vzťahu, dostaneme pre uhlovú frekvenciu pohybu vzťah

$$\omega_0 = \frac{2\pi}{T_0} = 2\pi f_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} \qquad (1.5)$$

Jednoduchý kmitavý pohyb je periodický, priamočiary a nerovnomerný. Prostredníctvom vzťahu pre uhlovú frekvenciu pohybu môžeme vyjadriť aj frekvenciu, a aj periódu vlastných kmitov netlmeného harmonického oscilátora

$$T_0 = \frac{2\pi}{\omega_0} = 2\pi \sqrt{\frac{m}{k}} \qquad (1.6)$$

$$f_0 = \frac{1}{T_0} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}. \qquad (1.7)$$

Vzťah (1.7) nám poukazuje na skutočnosť, že perióda a frekvencia kmitania závisia len od hmotnosti kmitajúceho závažia, a od tuhosti danej pružiny. Od veľkosti amplitúdy výchylky nezávisia.

Ďalšie riešenie pohybovej rovnice (1.3) môže mať tvar $x = x_m \sin(\omega_0 t + \varphi)$, čo v skutočnosti predstavuje rovnicu (1.4), ibaže hodnota fázovej konštanty φ je posunutá o $\frac{\pi}{2}$. Toto posunutie vyplýva z vlastností funkcie sínus a kosínus.

3.2.2 Organizácia práce v skupinách

Erich Petlák (2004, s.254-255) vo svojej „*Všeobecnej didaktike*“ charakterizuje tri druhy skupinovej práce žiakov, a to jednotnú skupinovú prácu, diferencovanú a brigádnickú. Druhy skupinovej práce sa určujú na základe rôznorodosti úloh, ktoré sú riešené skupinami. Pracovný list určený pre skupinu žiakov na gymnáziu s témou „*Vlastnosti pružinového oscilátora*“ druhovo patrí k jednotnej skupinovej práci, nakoľko všetky skupiny riešia tú istú úlohu, všetci pracujú na rovnakých problémoch (teoretických aj praktických). Skupiny pri riešení nami vytvorenej úlohy sa odlišujú len v tom, že každá skupina pracuje s pružinou inej tuhosti. Táto skutočnosť sa potom prejaví pri záverečnej prezentácii výsledkov všetkými skupinami. Keďže všetky naše skupiny riešia tú istú úlohu, aj organizácia ich práce bude rovnaká.

Pod pojmom „*organizácia práce v skupinách*“ rozumieme spôsob rozdelenia jednotlivých úloh medzi členmi jednej skupiny.

Pri riešení úlohy, t.j. pri zisťovaní závislosti periódy pružinového oscilátora od hmotnosti závažia, sú potrební aspoň štyria žiaci (A, B, C, a D), pričom dvaja z nich sa venujú materiálnemu vybaveniu a činnostiam, ktoré sú s nim spojené (žiaci A a B), a dvaja (zapisovatelia skupiny) sa zaoberajú vyplňovaním príslušnej tabuľky, čiže tab. 1 (žiaci C a D).

Podrobnejšie rozdelenie práce medzi dvojicami môže byť nasledovné:

- dvojica (žiaci A a B), ktorá sa venuje materiálnemu vybaveniu:
  a) jeden z dvojice (žiak A) sa zaoberá závažiami, t.j.
     i. určuje ich hmotnosti a príslušné hodnoty hlási druhej dvojici, t.j. zapisovateľskej (žiakom C a D), aby si ich mohli zaznamenať do 3-ho bodu postupu,
     ii. pri každom meraní zavesí zvolené závažie na pružinu (prvá časť 4. bodu postupu),
     iii. počas každého nového merania (6. bod postupu úlohy) mení závažie, pričom dbá na to, aby pri každom novom meraní bolo použité závažie s inou hmotnosťou. Hodnotu hmotnosti závažia pri každom novom meraní hlási zapisovateľskej dvojici, ktorá nahlásenú hodnotu si zapíše do tabuľky (tab. 1).
  b) druhý z dvojice (žiak B) sa venuje ostatným pomôckam, t.j.
     i. na záves upevní pružinu (1. bod postupu našej úlohy), resp. zostaví vhodnú aparatúru k meraniu,
     ii. overí, či pri najväčšom zaťažení možno považovať predĺženie pružiny za pružnú deformáciu (2. bod postupu),

iii. pri každom meraní meria periódu T pružinového oscilátora (druhá časť 4. bodu postupu). Odmeranú hodnotu periódy hlási zapisovateľom, t.j. žiakom C a D.

V skutočnosti žiaci A a B pracujú naraz. Kým žiak A sa venuje bodu a)i., dovtedy žiak B sa môže venovať činnosti za b)i. Pri bodoch a)ii, a)iii, b)ii a b)iii sa už musia zosúladiť v činnosti.

- dvojica (zapisovateľská, žiaci C a D), ktorá sa zaoberá vyplňovaním príslušnej tabuľky:
  c) jeden zo zapisovateľskej dvojice (žiak C) má za úlohu:
     i. zaznamenať hodnoty hmotností z_1, z_2, z_3 a z_4 do 3. bodu postupu, ktoré dostáva od žiaka A (bod a)i),
     ii. zaznamenať počas každého nového merania hodnotu pre m do tabuľky 1 (dostáva ju od žiaka A – bod a)iii).
  d) druhý zo zapisovateľskej dvojice (žiak D) má za úlohu:
     i. zaznamenať počas každého nového merania periódu T oscilátora do tabuľky 1 (dostáva ju od žiaka B – bod b)ii).

Ideálne je, ak zapisovateľská dvojica pracuje priebežne s dvojicou, ktorá experimentálne získava hodnoty.

Cieľom vyššie uvedeného podrobného rozdelenia práce medzi členmi skupiny je, aby sa každý člen aktívne zapájal do spoločnej práce a nikto nezostával iba pasívnym pozorovateľom. Ak žiaci prvýkrát pracujú v skupinách, nami navrhnuté podrobné rozdelenie práce im možno predstaviť a vysvetliť. Ak žiaci už majú dostatok skúseností so skupinovou prácou, organizáciu práce skupiny im možno pokojne prenechať, resp. možno tým poveriť vedúceho skupiny. (K vedúcemu skupiny sa vyjadríme nižšie.)

Po nameraní hodnôt a vyplnení tabuľky 1 skupina už pracuje ako celok. Členovia skupiny spoločne skonštruujú príslušný graf („*Graf 1 Závislosť periódy pružinového oscilátora od celkovej hmotnosti zavesených závaží*“) a odpovedajú na otázky v diskusii. Ak väčšina skupín je hotová, nasleduje ich prezentácia výsledkov. Môže byť veľmi užitočné, ak dosiahnuté výsledky prezentuje z každej skupiny slabší žiak, samozrejme jeho prezentácia môže byť kolegami doplnená, aj opravená. Zverejňovanie výsledkov práce skupín má významný didaktický účinok. „*Skupiny sa navzájom porovnávajú a presviedčajú sa o správnosti, či nesprávnosti svojich postupov, čo slúži na opakovanie, utvrdzovanie učiva a pochopenie vzájomných súvislostí*“ (Gergeľová, 2011, s. 34).

V našom prípade pri riešení úlohy, resp. pri prezentovaní výsledkov skupiny sa porovnávajú a zisťujú, že napriek rovnakému zadaniu úlohy, skupiny získali rôzne výsledky. V rámci diskusie vhodne kladenými otázkami by mali prísť k nasledujúcim záverom:

- Pre periódu pružinového oscilátora nie je rozhodujúca len hmotnosť zavesených závaží, ale i tuhosť pružiny,
- Čím tuhšia je pružina, ktorú používa daná skupina žiakov, tým menší sklon má čiara grafu 1.

Keďže nami navrhnuté rozdelenie práce si vyžaduje štyroch členov skupiny, je potrebné, aby jeden z členov sa stal vedúcim skupiny. Úlohou vedúceho je okrem plnenia svojich vlastných čiastkových úloh aj dohliadanie na práce ostatných členov skupiny. Vedúci skupiny zodpovedá za odvedenú prácu celej skupiny. Funkciou vedúceho je aj komunikácia s učiteľom. Aby v triede sa zachoval poriadok, je preto užitočné, ak si každá skupina zvolí svojho vedúceho (príp. ho môže určiť aj učiteľ). Ak vedúceho určuje učiteľ, potom pri našej úlohe sa ním môže stať napr. žiak D, nakoľko z rozdelenia práce medzi členmi skupiny vyplýva, že má najmenej povinností. Ak sa stane vedúcim skupiny, môžeme predpokladať, že bude mať porovnateľné množstvo povinností ako ostatní členovia skupiny, t.j. rozdelenie všetkých čiastkových úloh aj s funkciou vedúceho bude v skupine približne rovnomerné. Učiteľ môže komunikovať so skupinami nielen prostredníctvom vedúcich, ale aj tým, že obchádza jednotlivé skupiny a pozoruje ich činnosti. Podľa Pettyho (1996, s. 187) učiteľ pri obchádzaní skupín musí dávať pozor, aby nezostával u žiadnej skupiny príliš dlho, aj keď ich práca je nadmieru zaujímavá.

Organizácia práce určuje počet členov danej skupiny. Skupiny na základe počtu členov môžu byť malé (prevažne 3-4 členovia) a veľké (aspoň 5 členov). Podľa Pettyho (1996, s. 184) obidva typy skupín majú svoje výhody aj nevýhody. Výhodami väčších skupín môže byť, napr.:

- čím väčšia skupina, tým väčšia istota v správnosti získaných výsledkov, a tým pravdepodobnejšia odvaha oponovať učiteľovým názorom,
- čím väčšia skupina, tým väčšia pravdepodobnosť správneho riešenia zadanej úlohy.

Nevýhodami môžu byť napr.:

- čím väčšia skupina, tým pomalšie sa rozhodujú jej členovia,
- čím väčšia skupina, tým väčšia pravdepodobnosť pasívnych členov.

Výhodou menších skupín (do 4 členov), t.j. čo je aj náš prípad, je malá pravdepodobnosť pasívnych členov, a skupina sa dokáže rýchlejšie rozhodovať.

V rámci organizácie práce skupín je ešte potrebné zabezpečiť, aby členovia skupiny na seba navzájom videli. Možno to zabezpečiť rôznymi spôsobmi alternatívneho rozsadenia žiakov, napr. do štvorca, do kruhu, resp. ako to daná miestnosť

dovoľuje. Skutočnosť, že členovia skupiny vidia na seba spôsobuje, že

- navzájom sa môžu kontrolovať, resp. vedúci skupiny môže ľahšie kontrolovať prácu ostatných,
- odstraňuje sa možnosť pasívneho pozorovateľa,
- povzbudzuje členov skupiny do práce.

Pri skupinovej práci žiakov treba venovať pozornosť aj tvorbe skupín. Podľa Pettyho (1996, s. 185) skupiny sa môžu tvoriť viacerými spôsobmi, napr. náhodne, podľa kamarátstva (v tomto prípade ide o tvorbu skupín žiakmi), na základe študijných výsledkov žiakov, podľa zasadacieho poriadku, atď. V našom prípade pri úlohe „*Zistite závislosť periódy pružinového oscilátora od hmotnosti závažia*“ navrhujeme použiť náhodnú tvorbu skupín, ktorú môžeme zabezpečiť napr. náhodným priradením čísla skupiny každému žiakovi: prvá, druhá, tretia, atď. Skupiny zostavené na základe náhody môžu byť na začiatku práce rozpačité. Ich rozpačitosť však nemusí plynúť len z náhodnej tvorby skupín. Môže to byť ovplyvňované aj nedostatkom skúseností žiakov so skupinovou prácou. Ibaže, akonáhle sú žiaci rozdelení do skupín, skupiny začínajú prechádzať „*fázami vývinu vzájomnej spolupráce*“ (Gergeľová, 2011, s. 29-32). Jednotlivé fázy vývinu vzájomnej spolupráce sú: tápajúca fáza, fáza sťažností, fáza zblíženia sa, fáza zoskupovania sa žiakov a nakoniec činná fáza. Ak skupina, resp. jej členovia sa dopracovali k 5., t.j. k činnej fáze, to znamená, že skupina je schopná vlastnej organizácie práce.

3.2.3 Poznámky k realizácii aktivity

V tejto časti uvádzame návrhy, ako zrealizovať, resp. čo všetko zohľadňovať pri realizácii danej aktivity so žiakmi. Táto časť metodických materiálov obsahuje:

1) možné riešenia problémov s aparatúrou,
2) možné výsledky merania piatich skupín,
3) grafické spracovanie získaných dát všetkých skupín,
4) korektné odpovede na otázky v diskusii.

Úloha: *Zistite závislosť periódy pružinového oscilátora od hmotnosti závažia.*

(1.1) Nakoľko žiaci 2. roč. gymnázia (6. roč. gymnázia s 8-ročným štúdiom) sa prvýkrát stretávajú s pojmom „perióda oscilátora“ na strednej škole, je potrebné, aby im učiteľ tento pojem zaviedol ešte pred vypracovaním úlohy.

Pri zavedení pojmu „perióda pružinového oscilátora“ je potrebné žiakom vysvetliť dva základné pojmy, a to oscilátor a perióda.

(1) oscilátor – „zariadenie, ktorého časť vykonáva kmitavý pohyb“, pričom o kmitavom pohybe hovoríme, „ak sa bod pohybuje okolo rovnovážnej polohy sem a tam po jednej trajektórii“ (Demkanin, 2010, s. 41). Rovnovážna poloha je poloha, v okolí ktorej sa pohybuje bod telesa. (Demkanin, 2010, s. 40)

Pružinový oscilátor – oscilátor pozostávajúci z pružiny a vhodne zvoleného závažia. (Demkanin, 2010, s. 41)

(2) perióda – „časový úsek, ktorý zodpovedá jednému kmitu oscilátora“ (Demkanin, 2010, s. 42), pričom kmit predstavuje „periodicky sa opakujúcu časť kmitavého pohybu“(Koubek, 2003).

Perióda pružinového oscilátora – doba jedného kmitu pružinového oscilátora. Perióda sa označuje písmenom T a jej základnou jednotkou je sekunda – s.

Doplňte hypotézu:

Perióda pružinového oscilátora ....*závisí*..... od hmotnosti závažia.

(1.2) Vo väčšine prípadov pri doplňovaní vyššie uvedenej hypotézy žiaci nemajú jasnú predstavu o tom, čo sa od nich vyžaduje, resp. čo by mali doplniť. Pri doplňovaní hypotézy je preto potrebné žiakom vysvetliť, že v skutočnosti sledujeme ***závislosť*** *medzi dvoma parametrami, t.j. medzi periódou pružinového oscilátora T a hmotnosťou závažia m. Väčšina skupín žiakov pri tejto hypotéze uvedie jednu z dvoch odpovedí: a) závisí, b) nezávisí. Ak chceme, aby skupiny žiakov, ktoré pri hypotéze uviedli odpoveď a), svoju odpoveď aj skonkretizovali, t.j. či závisí priamo úmerne, nepriamo úmerne, lineárne, kvadraticky, exponenciálne, logaritmicky, atď., potom tieto skupiny treba na konkretizáciu upozorniť.*

Pomôcky:

Stojan na zavesenie pružiny, aspoň 4 závažia s rôznymi hmotnosťami (z_1, z_2, z_3, z_4), stopky, pružina, digitálne váhy.

(1.3) Všetky vyššie uvedené pomôcky môže zabezpečiť škola. Ak pomôcky zabezpečuje škola, potom jednotlivé skupiny žiakov stačí vytvoriť na začiatku vyučovacej jednotky, počas ktorej tieto skupiny budú riešiť túto úlohu. Niektoré pomôcky si môžu zabezpečiť aj žiaci, napr. závažia s rôznymi hmotnosťami a stopky. Tento prípad však vyžaduje, aby:

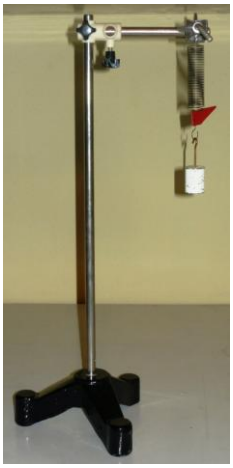
1) učiteľ včas rozdelil žiakov do skupín (aspoň tri dni pred riešením tejto úlohy),

2) učiteľ vopred oznámil vytvoreným skupinám (aspoň tri dni pred riešením úlohy), ktoré pomôcky si majú zabezpečiť sami. Ak žiaci prvýkrát pracujú formou skupinovej práce, je potrebné im zdôrazniť, že na zabezpečovaní pomôcok by sa mal podieľať každý člen skupiny. (p. Organizácia práce v skupinách)

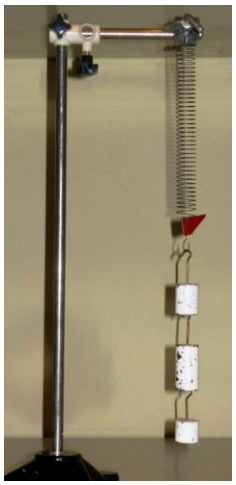
(1.4) Podrobnejšie k jednotlivým pomôckam:

Stojan na zavesenie pružiny

Pri výbere, resp. pri konštrukcii stojana treba zohľadňovať v prvom rade jeho tvar, pričom najvhodnejším tvarom je tvar písmena L, ktoré je preklopené nahor – Γ. Vhodný stojan k meraniu je znázornený na obrázku (Obr. 1MM). Zvislá časť stojana by mala byť dlhá aspoň 45 cm. Táto dĺžka zvislej časti je dôležitá preto, aby sa zaťažená pružina po natiahnutí a následnom uvoľnení mohla kmitať bez toho, aby sa dotkla povrchu lavice. Vodorovná časť statívu by mala byť dlhá asi 10 cm.



Obr. 1MM Zostava aparatúry



Obr. 2MM „Stĺp“ závaží

Problém:

Pri niektorých meraniach zvislá časť stojana by mala byť dlhá aspoň 70 cm. (O probléme hovoríme iba v prípade, ak škola nemá k dispozícii takýto dlhý, resp. vysoký stojan. Ak škola ho však k dispozícii má, potom už nehovoríme o probléme. Pri používaní takéhoto stojana je potrebné ešte skupiny upozorniť, aby jeden člen skupiny rukami pridržiaval stojan k lavici, najmä v prípade, ak pružina sa zaťažuje závažím ťažším ako 300 g. Toto opatrenie je dôležité z hľadiska nebezpečenstva prevrátenia aparatúry.)

Vysvetlenie problému, resp. prečo k nemu vôbec dochádza:

K vyššie uvedenému problému dochádza zvyčajne pri práci s pružinou, ktorá má tuhosť okolo 25 $N.m^{-1}$ a viac. V postupe úlohy je povedané, že skupina má urobiť aspoň 10 meraní tak, že pri každom novom meraní mení celkovú hmotnosť zavesených závaží (6. bod postupu). Nižšie, v komentári (1.6) uvádzame návrh pre vhodný výber závaží, podľa ktorého zistíme, že najťažším závažím z_4 pri pružine s tuhosťou okolo 25 $N.m^{-1}$ môže byť závažie s hmotnosťou 300 g. V školských laboratóriách sa takéto závažie zväčša získava poskladaním 50-gramových alebo 100-gramových závaží.

Na pružinu možno zavesiť 3x100 g len tak, ako to znázorňuje obrázok 2MM, t.j. zo závaží vytvoríme akýsi „stĺp“, ktorý potom zavesíme na pružinu. Zavesenie všetkých troch 100 gramových závaží priamo na pružinu je nevhodným riešením. V tomto prípade, buď sa to nedá ani zrealizovať, pretože závažia sú veľké v porovnaní s háčikom pružiny a nezmestia sa na háčik, alebo, ak sa to podarí, potom pružinový osciláto je nestabilný vzhľadom na kmitavý pohyb. Pri kmitaní sa takýto oscilátor môže rozpadnúť, resp. závažia môžu spadnúť z pružiny.

Skutočným zdrojom problému je práve ten vytvorený „stĺp“ závaží. Niekedy dĺžka „stĺpa“ závaží je väčšia ako dĺžka „stĺpom“ zaťaženej pružiny. Ako znázorňuje aj obrázok 2MM, na uvedenie pružiny do kmitavého pohybu nie vždy ostane dostatok miesta. Pri uvádzaní pružinového oscilátora do činnosti je potrebné, aby oscilátor bol vzdialený od povrchu lavice približne 13-15 cm.

Riešenie problému:

Problém s nedostatočnou dĺžkou zvislej časti statívu možno vyriešiť dvoma spôsobmi:

(1) k zvislej časti statívu primontujeme tyčku takej dĺžky, aby súčet dĺžok (statív + tyčka) bol aspoň 70 cm. V tomto prípade stačí vodorovná časť statívu s dĺžkou asi 10 cm.

(2) celý stojan (s výškou 45 cm) postavíme na okraj lavice tak, aby zvislá časť statívu ležala na lavici, ale vodorovná časť vyčnievala z lavice do takej miery, aby zaťažená pružina pri kmitaní sa nemohla dotýkať lavice. V tomto prípade vodorovná časť statívu by mala mať dĺžku aspoň 15-20 cm.

V obidvoch prípadoch je vhodné, ak takto vytvorený stojan jeden člen zo skupiny rukami pridržiava k lavici. Tým sa predchádza nebezpečenstvu prevrátenia aparatúry.

Závažia s rôznymi hmotnosťami

Najvhodnejšími závažiami sú závažia zo súboru školských pomôcok, resp. tie, na ktorých sú výrobcom napísané ich hmotnosti. Ak skupiny používajú takéto závažia, t.j. so známymi hmotnosťami, pri treťom kroku postupu si môžu ušetriť čas, nakoľko nemusia ich hmotnosti určovať pomocou digitálnych váh.

Stopky, pružina a digitálne váhy

Ako stopky možno používať tie, ktoré sú v mobilných telefónoch.

Pri tejto úlohe nezáleží na tom, či pružina má, alebo nemá ukazovateľ. Ukazovateľ v tomto prípade nie je potrebný.

Digitálne váhy potrebujeme len vtedy, ak pracujeme so závažiami, ktorých hmotnosti nepoznáme, resp. nie sú na nich výrobcom napísané.

Postup:

1) Upevnite pružinu na záves.

(1.5) Nakoľko pri tejto úlohe meriame periódu pružinového oscilátora, t.j. oscilátor bude vykonávať kmitavý pohyb, je výhodnejšie pružinu nielen zavesiť na vodorovnú časť stojana, ale ju aj určitým spôsobom uchytiť, aby sme tým zabránili jej

možnému pádu. Nezachytená pružina môže pri kmitaní zo statívu ľahko zoskočiť. Alternatívny spôsob uchytenia pružiny je znázornený na obrázku 3MM.



Obr. 3MM Alternatívny spôsob uchytenia pružiny

2) Overte, či pri najväčšom zaťažení (teda $m = z_1 + z_2 + z_3 + z_4$, m – celková hmotnosť zavesených závaží) možno považovať predĺženie pružiny za pružnú deformáciu.

(1.6) Pri výbere závaží je potrebné skupiny upozorniť na jednu podstatnú skutočnosť. V záujme pružnej deformácie pružiny pri najväčšom zaťažení, je výhodnejšie používať závažia s menšími hmotnosťami. Zadefinovať závažie s menšou hmotnosťou nie je celkom triviálne. Napr. závažie s hmotnosťou 100 g pri pružine s tuhosťou do 5 N.m^{-1} možno považovať za ťažké závažie, pretože pri zavesení na pružinu spôsobuje predĺženie okolo 20 cm. Z ďalšieho pohľadu to isté závažie, t.j. závažie s hmotnosťou 100 g pri pružine s tuhosťou do 30 N.m^{-1} môžeme pokladať za ľahké závažie, pretože pri vyššie uvedenej pružine, t.j. pri pružine s k ~ 30 N.m^{-1} spôsobuje predĺženie okolo 2,6 cm.

Návod pre vhodný výber závaží, resp. ako predísť poškodeniu pružiny, a zároveň zabezpečiť dobrú merateľnosť 10-tich kmitov:

Ak pri danej pružine sa použije závažie, ktoré ju predĺži iba o 1-2 cm, pri uvedení oscilátora do činnosti môžeme pozorovať akýsi „skackajúci" kmitavý pohyb, ktorý je nevýhodný z hľadiska zaznamenávania nami určených 10-tich kmitov. Potrebný počet kmitov pre presnejšie určovanie periódy uvádzame vo 4. bode postupu.

1) nech závažím z_1 pri danej pružine je závažie, ktoré pri zavesení predĺži pružinu aspoň o 5 cm,

2) nech závažím z_2 je závažie, ktoré je aspoň o 30-35% ťažšie ako závažie z_1,

3) nech závažím z_3 je závažie, ktoré je aspoň o 60-65% ťažšie ako závažie z_1,

4) nech závažím z_4 je závažie, ktoré je aspoň o 90-95% ťažšie ako závažie z_1.

3) Pomocou digitálnych váh určte a zapíšte:
hmotnosť z_1 = ...
hmotnosť z_2 = ...
hmotnosť z_3 = ...
hmotnosť z_4 = ...

(1.7) Hmotnosti závaží z_1, z_2, z_3 a z_4 určujú skupiny pomocou digitálnych váh iba v tom prípade, ak na závažiach nie sú výrobcom uvedené ich hmotnosti. Používanie závaží s uvedenými hmotnosťami je výhodné z dvoch hľadísk:

1) z hľadiska šetrenia času,

2) z hľadiska možného nedostatku materiálneho zabezpečenia, t.j. digitálnych váh.

Hmotnosti závaží z_1, z_2, z_3 a z_4 našich piatich skupín:

1. skupina
hmotnosť z_1 = ... 0,04 kg .....
hmotnosť z_2 = ... 0,06 kg .....
hmotnosť z_3 = ... 0,07 kg .....
hmotnosť z_4 = ... 0,08 kg .....

2. skupina
hmotnosť z_1 = ... 0,08 kg .....
hmotnosť z_2 = ... 0,09 kg .....
hmotnosť z_3 = ... 0,1 kg .....
hmotnosť z_4 = ... 0,15 kg .....

3. skupina
hmotnosť z_1 = ... 0,1 kg .....
hmotnosť z_2 = ... 0,15 kg .....
hmotnosť z_3 = ... 0,17 kg .....
hmotnosť z_4 = ... 0,2 kg .....

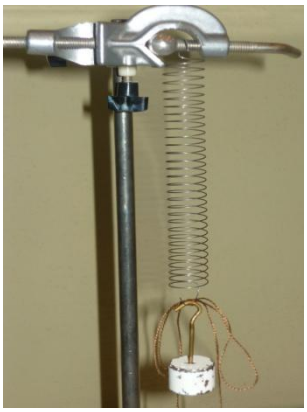
4. skupina
hmotnosť z_1 = ... 0,15 kg .....
hmotnosť z_2 = ... 0,2 kg .....
hmotnosť z_3 = ... 0,25 kg .....
hmotnosť z_4 = ... 0,3 kg .....

5. skupina
hmotnosť z_1 = ... 0,75 kg .....
hmotnosť z_2 = ... 1 kg .....
hmotnosť z_3 = ... 1,25 kg .....
hmotnosť z_4 = ... 2 kg .....

4) Niektoré závažie zaveste na pružinu a odmerajte periódu T oscilátora.
Návod na presnejšie určenie periódy T: odmerajte dobu 10-tich kmitov a nameranú hodnotu vydeľte číslom, ktorý sa rovná počtu odmeraných kmitov, t.j. číslom 10.

(1.8) Tento bod postupu vo všeobecnosti by nemal byť problematický. Menší problém môže nastať pri pružine s tuhosťou do 5 N.m^{-1}. Pri takejto pružine na základe nášho návrhu v komentári (1.6) závažím z_1 môže byť závažie s hmotnosťou 30 g. Ak toto závažie zavesíme na pružinu s malou tuhosťou (do 5 N.m^{-1}), môže dôjsť k tomu, že pri uvedení pružinového oscilátora do činnosti, dané závažie z pružiny „odletí". Tento problém možno vyriešiť celkom jednoducho. Riešenie problému znázorňuje

obrázok 4MM. Závažie k háčiku pružiny možno jednoducho priviazať nitkou.



Obr. 4MM Závažie priviazané nitkou

Meranie periódy oscilátora by malo byť bezproblémový.

5) Získanú hodnotu periódy T zaznamenajte do tabuľky (Tab. 1).

(1.9) Všetky namerané hodnoty T našich piatich skupín sú uvedené v príslušných tabuľkách (Tab. 1) v komentári (1.10).

6) Urobte aspoň 10 meraní tak, že pri každom novom meraní meňte celkovú hmotnosť zavesených závaží.

(1.10) V nasledujúcich tabuľkách sú uvedené výsledky piatich skupín.

1. skupina

Tab. 1: Meranie periódy pružinového oscilátora pri rôznych hmotnostiach.

Číslo merania	*m (zavesených závaží)* [kg]	T [s]
1.	0,04	0,58
2.	0,06	0,71
3.	0,07	0,77
4.	0,08	0,82
5.	0,1	0,92
6.	0,11	0,97
7.	0,12	1
8.	0,13	1,04
9.	0,14	1,08
10.	0,15	1,11
11.	0,21	1,32

2. skupina

Tab. 1: Meranie periódy pružinového oscilátora pri rôznych hmotnostiach.

Číslo merania	*m (zavesených závaží)* [kg]	T [s]
1.	0,08	0,52
2.	0,09	0,56
3.	0,1	0,58
4.	0,15	0,7
5.	0,17	0,75
6.	0,18	0,76
7.	0,19	0,78
8.	0,23	0,86
9.	0,25	0,9
10.	0,33	1,03

3. skupina

Tab. 1: Meranie periódy pružinového oscilátora pri rôznych hmotnostiach.

Číslo merania	*m (zavesených závaží)* [kg]	T [s]
1.	0,1	0,43
2.	0,15	0,52
3.	0,17	0,56
4.	0,2	0,6
5.	0,25	0,67
6.	0,27	0,69
7.	0,3	0,73
8.	0,35	0,79
9.	0,37	0,81
10.	0,47	0,91

4. skupina

Tab. 1: Meranie periódy pružinového oscilátora pri rôznych hmotnostiach.

Číslo merania	*m (zavesených závaží)* [kg]	T [s]
1.	0,15	0,46
2.	0,2	0,53
3.	0,25	0,59
4.	0,3	0,65
5.	0,35	0,7
6.	0,4	0,75
7.	0,45	0,79
8.	0,5	0,83
9.	0,55	0,88
10.	0,65	0,95

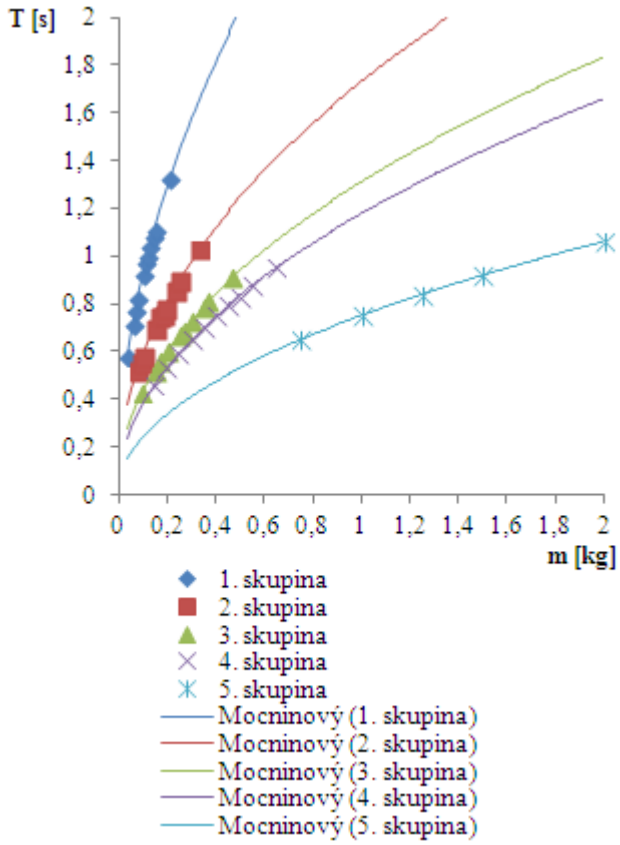
5. skupina

Tab. 1: Meranie periódy pružinového oscilátora pri rôznych hmotnostiach.

Číslo merania	*m (zavesených závaží)* [kg]	T [s]
1.	0,75	0,65
2.	1	0,75
3.	1,25	0,84
4.	1,5	0,92
5.	2	1,06

7) Do grafu (Graf 1) znázornite závislosť periódy pružinového oscilátora od celkovej hmotnosti zavesených závaží.

(1.11) Nasledujúci graf znázorňuje päť závislostí periódy pružinového oscilátora od celkovej hmotnosti zavesených závaží. Päť závislostí v nižšie uvedenom grafe po poradí prislúchajú vyššie uvedeným tabuľkám. Kvôli porovnaniu výsledkov jednotlivých meraní sme závislosti znázornili do jedného grafu.



Graf 1: Závislosť periódy pružinového oscilátora od celkovej hmotnosti zavesených závaží

8) Získaný graf porovnajte s grafmi ostatných skupín.

(1.12) Je výhodné a časovo úsporné, ak takéto „hromadné" znázornenie všetkých závislostí, ktoré je uvedené aj v komentári (1.11) urobí učiteľ. Kým skupiny vypracúvajú tie otázky, pri ktorých nemusia komunikovať s ostatnými skupinami, učiteľ môže od skupín pozbierať namerané hodnoty a spracovať ich pomocou Excelu do jedného grafu. Toto „hromadné" znázornenie závislostí je užitočné použiť v rámci záverečnej prezentácii dosiahnutých výsledkov všetkými skupinami.

Diskusia:

(1.13) Nasledujúce odpovede v diskusii sú odpovede, ktoré zodpovedajú meraniu každej skupiny.

1) Akým spôsobom vytvoríte pružinový oscilátor?

   Pružinový oscilátor možno veľmi jednoducho vyrobiť zavesením vhodného závažia na pružinu. Vhodným závažím je závažie, ktoré po zavesení na pružinu nespôsobí jej trvalú (tvárnu, plastickú) deformáciu.

2) Ktoré parametre ste menili pri vašom meraní?

   Pri našom meraní sme menili iba jeden parameter, a to hmotnosť zaveseného závažia, resp. celkovú hmotnosť zavesených závaží.

3) Ktoré parametre ste nemenili pri vašom meraní?

   Pri našom meraní sme nemenili tuhosť pružiny, celý čas sme pracovali len s jednou pružinou.

4) Na základe grafu vyslovte záver, ako závisí perióda pružinového oscilátora od hmotnosti závažia, resp. od celkovej hmotnosti zavesených závaží. Skúste odhadnúť túto matematickú závislosť.

   Závislosť veľkosti periódy T od hmotnosti zaveseného závažia m popisuje mocninová funkcia s exponentom $\frac{1}{2}$ a grafom závislosti je odmocnina. Rovnicou odmocninovej funkcie vo všeobecnosti je $y = c\sqrt{x}$, pričom c predstavuje nejakú konštantu. Pre náš prípad platí, že $x \equiv m$ a $y \equiv T$, t.j. všeobecný zápis rovnice odmocniny, ktorá vyjadruje závislosť T od m, je nasledovný: $T = c\sqrt{m}$.

5) Ktorá premenná predstavuje závislú, a ktorá nezávislú pri vašej matematickej závislosti?

   Našou nezávislou premennou je hmotnosť zaveseného závažia – m, pretože pri každom novom meraní sme ju menili. Perióda T predstavuje našu závislú premennú, pretože sa menila v závislosti od hmotnosti zaveseného závažia – m.

6) Potvrdila sa vaša hypotéza, ktorú ste vyslovili na začiatku merania?

   Áno, naša hypotéza sa potvrdila. Meraním sme ukázali závislosť medzi veľkosťou periódy kmitavého pohybu T a hmotnosťou zaveseného závažia – m.

7) Je priebeh grafu 1 vo všetkých skupinách rovnaký?

   Áno, každá skupina vykreslila graf odmocninovej funkcie.

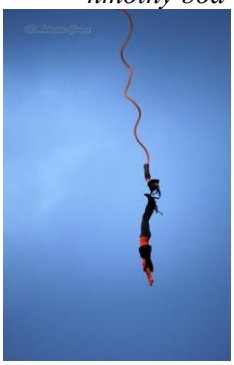
8) Od čoho závisí sklon (stúpanie) grafu 1?

   Pri tejto otázke si musíme uvedomiť charakteristiky použitých pomôcok pri priamom meraní. Meranie sme zrealizovali pomocou pružiny a závažia. Charakteristikou závažia je hmotnosť a charakteristikou pružiny je tuhosť. Na základe vzťahu $T = c\sqrt{m}$ môžeme povedať, že na sklon (stúpanie) grafu vplýva veličina, ktorá je zahrnutá v našej konštante c. Z vyššie uvedených charakteristík vyplýva, že tou veličinou môže byť len tuhosť pružiny k.

9) Uveďte príklady pružinového oscilátora z reálneho života.

   Príkladmi pružinového oscilátora môžu byť:
   - ✓ *bungee jumping (Obr. 1),*

- ✓ *prístroj k meraniu telesnej hmotnosti v beztiažovom stave (Obr. 2).*
  Prístroj je vyvinutý pre použitie na vesmírnych staniciach, udržiavaných na obežnej dráhe okolo Zeme. Je tvorený pohyblivou sedačkou spojenou pružinami z ramien: astronaut si sadne na sedačku a meria periódu vyvolaných kmitov. Jeho hmotnosť sa potom určuje zo vzťahu pre periódu kmitajúcej sústavy pružina + hmotný bod (Halliday, 2000, s. 430).



Obr.1 Bungee jumping



Obr. 2 Prístroj k meraniu telesnej hmotnosti v beztiažovom stave

Záver

Predkladaná práca pozostáva z troch kapitol. V prvej kapitole poukazujeme na kompetencie, ktoré stanovuje štátny vzdelávací program, resp. ktoré sa majú rozvíjať prostredníctvom vyučovania fyziky a približujeme základné znaky skupinovej práce žiakov. Porovnaním kompetencií a znakov skupinovej práce sme chceli poukázať na skutočnosť, že práve forma skupinovej práce žiakov ja cesta, ktorá môže viesť k rozvíjaniu kompetencií, ktoré sú stanovené ŠVP, a tým pádom aj k príprave žiaka do života, pretože spolupráca, resp. práca v nejakom tíme je neoddeliteľnou súčasťou každého z nás, t.j. aj každého žiaka.

V druhej kapitole prinášame zjednodušené zhrnutie prieskumu, ktorý bol zameraný na zisťovanie vhodného obsahu novovytvorených metodických materiálov ku skupinovej práci žiakov. Pri našej otázke ohľadom obsahu MMkSPŽ nám mohli najviac pomôcť práve súčasní učitelia fyziky, ktorí denne spolupracujú zo žiakmi a vedia, že vedenie žiakov k spolupráci nemusí byť triviálnou záležitosťou.

Keďže SPŽ nie je vždy jednoduchá, rozhodli sme sa napísať také metodické materiály, ktoré by mohli slúžiť ako pomôcky pre učiteľa pri jej uplatňovaní vo vyučovaní fyziky. Príklad takýchto metodických materiálov uvádzame v kapitole 3. Sú to metodické materiály k vybranej časti z fyziky.

Podľa nás, zaoberať sa skupinovou prácou na gymnáziu, je dôležité. Preto našou snahou v budúcnosti bude príprava ďalších aktivít s využitím skupinovej práce žiakov a príslušných metodických materiálov. Cieľom aktivít bude poskytnúť žiakom situácie, resp. vhodné podmienky na to, aby sa „naučili“ pracovať v tíme, a aby sa svojou vlastnou prácou podieľali na osvojovaní fyzikálnych poznatkov. Cieľom metodických materiálov bude uľahčiť prácu učiteľa pri uplatňovaní skupinovej práce žiakov vo vyučovaní.

Zoznam bibliografických odkazov

DEMKANIN, P. a kol. 2010. Fyzika pre 2. ročník gymnázia a 6. ročník gymnázia s osemročným štúdiom. 1. vyd. Prievidza : Združenie EDUCO, 2010. 127 s. ISBN 978-80-89431-10-6.

FEYNMAN, R. a kol. 1980. Feynmanove prednášky z fyziky 1. 1. vyd. Bratislava : ALFA, vydavateľstvo technickej a ekonomickej literatúry n. p., 1980. 456 s. ISBN 63-221-80.

GERGEĽOVÁ, B. 2011. Skupinová práca vo vyučovaní fyziky. Bakalárska práca. Bratislava : FMFI UK, 2011. 76 s.

HALLIDAY, D. a kol. 2000. FYZIKA. Vysokoškolská učebnice obecné fyziky. 1. vyd. Brno : Vysoké učení technické v Brně – nakladatelství VUTIUM, 2000. 1198 s. ISBN 80-214-1869-9.

KOUBEK V., LEPIL O. 2003. Fyzika pre 3. ročník gymnázií. [online]. 6. vyd. [cit. 2013-03-16]. Dostupné na www:<http://www.ddp.fmph.uniba.sk/~koubek/UT_html/G3/kap5/5-1.htm#I>. ISBN 80-10-00189-9.

KÚDELČÍK J., HOCKICKO P. 2011. Základy fyziky. [online]. 1. vyd. Žilina : Žilinská Univerzita v Žiline, 2011. 272 s. ISBN 978-80-554-0341-0. [cit. 2013-03-29]. Dostupné na www:<http://hockicko.uniza.sk/Books/ZakladyFyziky_KudelcikHockicko.pdf>.

PETLÁK, E. 2004. *Všeobecná didaktika.* 2. vyd. Bratislava : Iris, 2004. 311 s. ISBN 80-89018-64-5.

PETTY, G. 1996. Moderní vyučování : praktická příručka. 1. vyd. Praha : Portál, 1996. 384 s. ISBN 80-7178-070-7.

Štátny vzdelávací program, FYZIKA. 2009. Príloha ISCED 3. 1. upravená verzia. [online]. Bratislava : Ministerstvo školstva, vedy, výskumu a športu. [cit. 2012-04-11]. Dostupné na www: <https://www.iedu.sk/vyucovanie_a_studium/vyucovacie_predmety/xKatalog_Dokumenty/Fyzika%20ISCED%203.pdf>.

Ramanova mikrospektroskopie vakuol kvasinek druhu *Candida albicans*

Šárka Gregorová[1]*
Školitel: Peter Mojzeš[1‡]

[1] Fyzikální ústav Univerzity Karlovy, MFF UK, Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2, Česká republika

Abstrakt

Ramanova mikrospektroskopie umožňuje měřit spektra Ramanova rozptylu s prostorovým rozlišením v řádu μm^3 a studovat tak neinvazivním způsobem přirozené složení biologických objektů. V předkládané práci bylo pomocí Ramanovy mikrospektroskopie studováno chemické složení vakuol patogenních kvasinek druhu *Candida albicans*. Byly naměřeny série spekter živých buněk při různých způsobech kultivace. K vyhodnocení těchto souborů spekter byla využita vícerozměrná statistická metoda rozkladu do singulárních hodnot (*singular value decomposition*). Bylo zjištěno, že vakuoly buněk kultivovaných různým způsobem či v různých kultivačních médiích se mezi sebou liší zejména obsahem polyfosfátu, reprezentovaného ve spektru dobře identifikovatelným pásem s maximem na ~1155 cm^{-1}. Až o několik cm^{-1} se může překvapivě lišit též vlnočet tohoto pásu. Na základě experimentů provedených *in vitro* s hexametafosfátem sodným coby modelem vakuolárního polyfosfátu bylo prokázáno, že poloha maxima tohoto pásu je citlivá na přítomnost a koncentraci dvojmocných kationtů.

Klíčová slova: Ramanova mikrospektroskopie, polyfosfát, *Candida albicans*, kvasinková vakuola, chemické složení

1 Úvod

Ramanova mikrospektroskopie je metoda vibrační spektroskopie, umožňující díky kombinaci Ramanovy spektroskopie a konfokální mikroskopie měřit spektra Ramanova rozptylu ze zvoleného místa vzorku s prostorovým rozlišením v řádu μm^3. V posledních letech nachází uplatnění při studiu biologických objektů – tkání, jednotlivých buněk a buněčných organel. Buňky lze studovat *in vivo* ve vodném prostředí, naměřená spektra poskytují informaci o přirozeném chemickém složení buňky a o distribuci látek v rámci buňky i mezi jednotlivými příslušníky buněčné kultury.

V této práci byly metodou Ramanovy mikrospektroskopie studovány vakuoly patogenní kvasinky druhu *Candida albicans*. Kvasinka *C. albicans* je nejčastějším původcem kvasinkových onemocnění člověka [Pfaller et al., 2012], [Kalvodová a Manych, 1996]. Jakožto oportunistický patogen se přirozeně vyskytuje u velkého procenta zdravých jedinců na sliznicích a v gastrointestinálním traktu [Kim a Sudbery, 2011], aniž by způsobovala onemocnění. V případě oslabení hostitele však může dojít k rozvoji nemoci v rozsahu od relativně četných a málo nebezpečných povrchových mykóz až po život ohrožující systémovou kandidózu [Kalvodová a Manych, 1996].

Jednou z důležitých organel C. albicans je její vakuola, podílející se na zpracování potravy, uchování zásob, detoxifikaci buňky a adaptaci na některé stresové podmínky [Li a Kane, 2009]. Ve vakuole je kromě jiných látek akumulován polyfosfát, lineární polymer složený z jednotek až stovek fosfátových jednotek, zbytků kyseliny trihydrogenfosforečné. Vakuolární polyfosfát může představovat až 20% celkové suché váhy kvasinkové buňky [Kornberg, 1995], ve vakuole může být obsaženo až 99% polyfosfátu v kvasinkové buňce [Kornberg et al., 1999]. Vakuolární polyfosfát má zásobní funkci, slouží coby chelatační činidlo pro dvojmocné kationty a hraje roli v udržování pH homeostáze vakuoly [Li a Kane, 2009]. Jako chelatační činidlo se podílí též na detoxifikaci cytosolu při přebytku kationtů kovů jako je zinek, železo, měď, kadmium nebo rtuť [Kornberg et al., 1999].

2 Experimentální část

2.1 Kultivace kvasinek *C. albicans*

Kvasinky *C. albicans* klinicky izolovaného kmene HE 169 z mykologické sbírky Lékařské fakulty Univerzity Palackého v Olomouci byly kultivovány na Ústavu organické chemie a biochemie Akademie věd České republiky.

Kvasinky rostly za teploty 37°C a za aerobních podmínek a byly kultivovány třemi různými způsoby. V prvním případě rostly 18 hodin v plném

* sarka.gregorova@gmail.com
‡ mojzes@karlov.mff.cuni.cz

YPD médiu (2% glukóza, 1% *yeast extract*) do pozdní exponenciální fáze. Ve druhém případě rostly buňky v médiu YPD 14 hodin do střední exponenciální fáze, poté byly dvakrát promyty vodou a převedeny do čerstvého YPD média, kde rostly další 4 hodiny. Na konci kultivace byly v *lag*-fázi. Ve třetím případě rostly buňky opět 14 hodin v YPD médiu a po promytí byly převedeny do YNB média (*Yeast nitrogen base* bez síranu amonného a aminokyselin, 2% glukózy, jedním zdrojem dusíku byl prolin o výsledné koncentraci 100 μM). V YNB rostly buňky další čtyři hodiny do *lag*-fáze. Prolin je pro kvasinky špatným zdrojem dusíku [Oliver et al., 2008], kvasinky jsou tedy v médiu YNB vystaveny metabolickému stresu.

Malé množství buněčné suspenze bylo centrifugováno (1000×g, 2 minuty), peleta byla resuspendována v destilované vodě, znovu centrifugována a rozpuštěna v pětinovém objemu destilované vody. Vzorek byl nanesen na podložní sklíčko se sníženou vlastní fluorescencí (Borofloat, Schott Nexterion nebo křemen,UQG Optics). Krycí sklíčko (klasické nebo křemenné) bylo fixováno bezbarvým lakem. Obě dvě sklíčka byla kvůli posílení elektrostatické fixace buněk pokryta poly-L-lysinem (Sigma-Aldrich, M_r = 30 000–70 000).

Preparát s fixovanými buňkami byl používán pro měření ne déle než 1,5 hodiny od přípravy. Celkově měření buněk jedné kultivace s ohledem na jejich stárnutí netrvalo déle než 5 hodin.

2.2 Parametry měření spekter

Spektra vakuol byla měřena na konfokálním Ramanově mikrospektrometru LabRAM HR800 (Horiba Jobin-Yvon), vybaveným konfokálním mikroskopem Olympus BX40. Excitačním zdrojem byl He-Ne laser o vlnové délce 632,8 nm a o výkonu na vzorku 3 až 8 mW. Použitý objektiv měl stonásobné zvětšení (100× *oil immersion*, NA = 1,3, index lomu imerzního oleje 1,58, Olympus). Při měření byla volena velikost konfokální clony 200 μm a šířka vstupní štěrbiny spektrografu 100 μm. Spektra byla měřena s mřížkou o 600 vrypech/mm a s mřížkou o 300 vrypech/mm v rozsahu 600 až 3900 cm^{-1} v režimu *Extended range* (řídící program LabSpec, Horiba Jobin-Yvon). Celkově měření spektra jedné buňky trvalo přibližně 3 minuty 45 sekund (mřížka o 600 vrypech/mm) resp. 1 minutu 50 sekund (mřížka o 300 vrypech/mm). Mikroskop je vybaven barevnou kamerou pro vizuální pozorování vzorku osvětleného bílým světlem zespoda či shora. Odhadované laterální resp. axiální rozlišení bylo za daných podmínek ~ 300 nm resp. ~ 2 μm [Horiba Jobin-Yvon HR800 User Manual], [Huang et al., 2005].

Měření *in vitro* probíhala na modulárním Ramanově spektrografu Jobin-Yvon-Spex 270M. Excitačním zdrojem byl diodami čerpaný pevnolátkový Nd:VO_4 laser s emisí na vlnové délce 532 nm o výkonu 200 mW na výstupu. Vstupní štěrbina spektrografu byla 60 μm široká. Rozptýlené záření bylo sbíráno pod úhlem 90° a bylo rozkládáno mřížkou o 1200 vrypech/mm. Spektrum bylo měřeno v rozsahu 312 až 2517 cm^{-1}, doba měření byla 6×6×5 s.

Kalibrace vlnočtové škály byla provedena pomocí spekter neonové výbojky (akvizice 100×1 s) programem NeokalSpex2 (doc. RNDr. Jiří Bok, CSc., Fyzikální ústav Univerzity Karlovy v Praze).

2.3 Úprava naměřených spekter

Pro zpracování rozsáhlých souborů spekter kvasinkových vakuol byla využita jedna z metod faktorové analýzy, metoda rozkladu do singulárních hodnot (*singular value decomposition*, dále SVD). Spektra Y_j naměřená v bodech ν_i jsou lineárně rozložena do souboru ortonormálních subspekter $S_k(\nu_i)$, seřazených sestupně podle velikosti jim odpovídajících singulárních hodnot w_{kk}. Naměřená spektra tedy můžeme vyjádřit jako

$$Y_j(\nu_i) = \sum_{k=1}^{N} V_{kj} w_{kk} S_k(\nu_i) \qquad (1)$$

kde V_{kj} je unitární matice koeficientů lineárního rozvoje mezi spektry a subspektry. V rovnici (1) je v ideálním případě měření nezatíženého experimentální chybou N rovno počtu faktorů f, které ovlivňují spektra (f může být například počet chemických látek ve směsi). Pro obvyklý případ, kdy počet měřených spekter n je menší než počet bodů ve spektrech m a pro reálné měření zatížené experimentální chybou je N rovno n.

Residuální chyba, která ukazuje, nakolik dobře jsou spektra modelována pouze prvními r subspektry, je definována jako

$$RE(r) = \sqrt{\frac{\sum_{k=r+1}^{N} w_{kk}^2}{m(n-r)}} \qquad (2)$$

Reziduální chyba s rostoucím r klesá. Pro nezašuměná data bude nulová pro $r = f$. V případě zašuměných dat je dobrým odhadem hodnoty f takové r, od něhož singulární hodnota a reziduální chyba klesá lineárně.

Vlnočtové škály souborů spekter naměřených na Ramanově mikrospektrometru v různé dny byly sesazeny na základě prvního subspektra faktorové analýzy souborů v oblasti 994 až 1014 cm^{-1}, která obsahuje úzký pás příslušející dýchací vibraci fenylalaninu [Huang et al., 2005]. Toto sesazení bylo třeba provést vzhledem k tomu, že mezi jednotlivými měřícími dny může dojít k drobnému posuvu nulové polohy mřížky spektrografu, a tedy

i ke spektrálnímu posuvu celého spektra. Sesazení vlnočtové škály bylo provedeno pomocí programu *xshift* (Mgr. Jan Palacký, PhD., Fyzikální ústav Univerzity Karlovy v Praze).

Další úpravy a vyhodnocení spekter byly provedeny v programu *Background* (Mgr. Jan Palacký, PhD.). Bylo odečteno fluorescenční pozadí prvních 10–20 subspekter, spektra byla intenzitně normalizována na pás vody v oblasti 3100–3900 cm^{-1} a bylo od nich odečteno spektrum okolí buněk – destilované vody. Spektrum okolí buněk bylo měřeno s delšími akvizičními časy a vícekrát kvůli zvýšení poměru signál/šum a bylo vyhlazeno Gaussovským filtrem.

V případě, že byla analyzována pouze část spektrální oblasti, byla zpravidla provedena ještě jedna přesnější korekce fluorescenčního pozadí.

Rozdíly mezi jednotlivými skupinami buněk byly porovnávány na základě koeficientů V_{ij} příslušného subspektra, získané SVD analýzou souboru zahrnujícího spektra všech porovnávaných skupin. Ke zhodnocení statistické významnosti rozdílů pozorovaných mezi jednotlivými skupinami buněk byl použit Studentův t-test s hladinou významnosti q = 99%. Výsledky t-testu byly získány pomocí funkce *ttest* v programu *Microsoft Excell*.

Pro účely přesnějšího určení polohy pásu $(PO_3)^{2-}$ vibrací polyfosfátu na ~1155 cm^{-1} byl tento pás modelován v jednotlivých spektrech prvními dvěma subspektry faktorové analýzy oblasti 1130 až 1180 cm^{-1} po korekci pozadí – spektrum bylo vypočteno podle vzorce (1) pro N = 2. V takto upravených spektrech bylo nalezeno maximum pásu a jedenáct bodů okolo tohoto maxima bylo v programu Gnuplot proloženo Gaussovou funkcí. Takto byla získána přesnější poloha maxima pásu polyfosfátu.

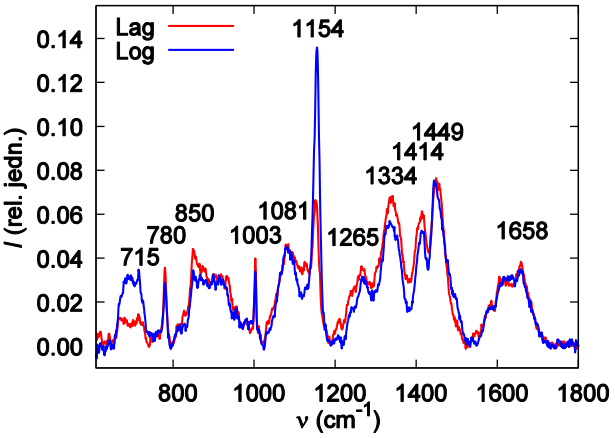
2.4 Použité chemikálie

K měření *in vitro* byl použit hexametafosfát sodný (Fluka, purum, 65–70% P_2O_5), trimetafosfát trisodný (Sigma-Aldrich, ≥ 95%) a chloridy jedno- a dvojmocných kationtů (Cu^{2+}, Fe^{2+}, Mg^{2+}, Na^+, K^+, Zn^{2+}, Fluka nebo Sigma-Aldrich, ≥ 98%).

3 Výsledky

3.1 Obsah vakuol

Byla provedena faktorová analýza 80 spekter vakuol buněk pěstovaných na médiu YPD do *lag*-fáze (dále *lag* buňky) a 65 spekter vakuol buněk pěstovaných do pozdní exponenciální fáze (dále *log* buňky). První subspektra S_1 získána samostatnou SVD analýzou souborů *lag* a *log* buněk představují průměrná spektra charakteristická pro uvedené populace buněk. Pro oblast charakteristických vibrací 600 až 1800 cm^{-1} jsou zobrazena na Obr. 1.



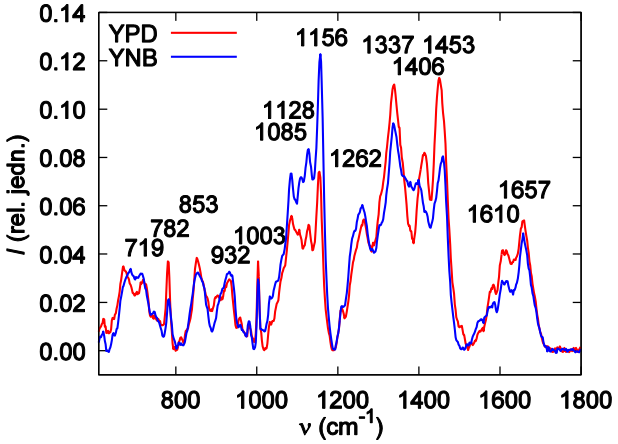
Obr. 1: První subspektra faktorové analýzy *lag* a *log* buněk v oblasti 600 až 1800 cm^{-1}

Pásy v subspektrech lze obecně přiřadit vibracím biomolekul a dalších látek, jejichž přítomnost bylo možno ve vakuolách očekávat: široký pás okolo 690 cm^{-1} a úzký pás na 1154 cm^{-1} odpovídají P-O-P resp. $(PO_3)^{2-}$ vibracím polyfosfátu [Majed et al., 2009]. Maximum na 715 cm^{-1} pravděpodobně odpovídá vibracím fosfolipidové hlavičky vakuolární membrány [Huang et al., 2005]. Pás na 780 cm^{-1} odpovídá vibracím bází nukleových kyselin uracilu, thyminu a cytosinu [Huang et al., 2007], [Singh et al., 2006]. Za široký pás v oblasti 800 až 975 cm^{-1} je zodpovědno velké množství různých vibrací, ostré maximum na 850 cm^{-1} pravděpodobně odpovídá tyrosinu [Huang et al., 2005]. Pás na 1003 cm^{-1} přísluší dýchací vibraci fenylalaninu [Huang et al., 2005]. Pás na 1081 cm^{-1} přísluší pravděpodobně C-C, C-O, CO-O-C valenčním a C-O-H deformačním vibracím [Socrates, 2001]. Za pásy v oblasti 1200 až 1520 cm^{-1} jsou zodpovědné různé vibrace CH, CH_2 a CH_3 skupin, vibrace amidu III a další vibrace [Socrates, 2001]. Pás v oblasti 1520 až 1740 cm^{-1} přísluší zejména vibracím C=C skupiny, vibracím amidu I a vibracím aminokyselin tryptofanu, fenylalaninu a tyrosinu [Socrates, 2001], [De Gelder et al., 2007].

V dalším experimentu bylo porovnáno 109 spekter vakuol buněk pěstovaných do *lag*-fáze na médiu YPD (dále *YPD* buňky) a 109 spekter vakuol buněk rostlých na médiu YNB (dále *YNB* buňky). První subspektra faktorové analýzy jednotlivých souborů v oblasti 600 až 1800 cm^{-1} jsou zobrazena na Obr. 2.

Pásy identifikované v subspektrech na Obr. 2 (až na drobné výjimky) odpovídají pásům na Obr. 1. Rozdíly mezi subspektry S_1 souborů různě kultivovaných buněk spočívají zejména v relativních intenzitách pásů a odrážejí různé zastoupení chemických složek ve vakuolách. V oblasti 800 až 975 cm^{-1} se původně široký pás

rozdělil na dva užší s maximy na 853 a 932 cm^{-1}, jejichž původ se nepodařilo jednoznačně identifikovat. Za vzrůst pásu na 1610 cm^{-1} jsou zodpovědné zejména aminokyseliny fenylalanin, tyrosin a tryptofan [De Gelder et al., 2007].



Obr. 2: První subspektra faktorové analýzy *YPD* a *YNB* buněk v oblasti 600 až 1800 cm^{-1}

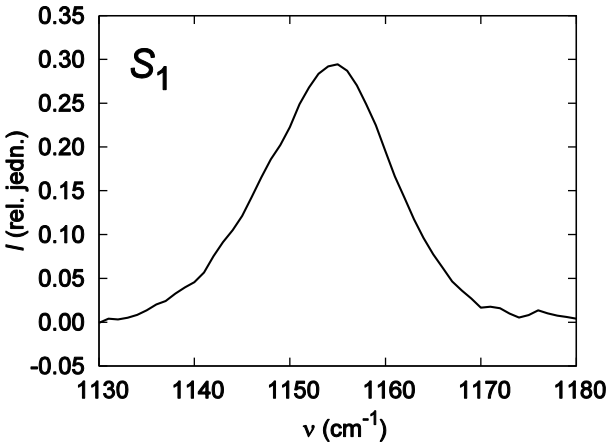
3.2 Oblast pásu polyfosfátu

Vzhledem k tomu, že pás $(PO_3)^{2-}$ vibrací polyfosfátu je jednou z nejvýraznějších spektrálních črt v Obr. 1 a Obr. 2 a odpovídá též nejvýraznějším rozdílům mezi jednotlivými soubory buněk, byla dále podrobně analyzována oblast 1130–1180 cm^{-1}, v níž se tento pás nachází. První a druhé subspektrum *společné* faktorové analýzy *lag* a *log* buněk v této oblasti je zobrazeno na Obr. 3 a Obr. 5, příslušné koeficienty V_{ij} jsou na Obr. 4 a Obr. 6. První a druhé subspektrum *společné* faktorové analýzy *YPD* a *YNB* buněk a příslušné koeficienty V_{ij} jsou zobrazeny na Obr. 7 až Obr. 10.

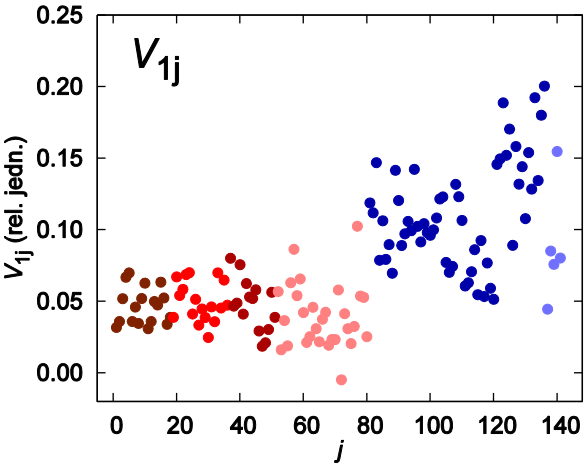
Z vyšších hodnot koeficientů V_{1j} je patrné, že *log* resp. *YNB* buňky akumulují polyfosfát v průměru více než *log YPD* buňky. Různé odstíny červené a modré v závislostech V_{ij} označují různé série měření buněk kultivovaných stejným způsobem. Z charakteristického diferenčního tvaru druhých subspekter je pak patrné, že je pás pro *log* a *YNB* buňky posunut k vyšším vlnočtům.

Vyšší subspektra ($k > 2$ v rovnici (1)) v případě tohoto pásu odpovídají podle grafu závislosti residuální chyby (2) na počtu subspekter r již jen experimentální chybě (graf není zobrazen).

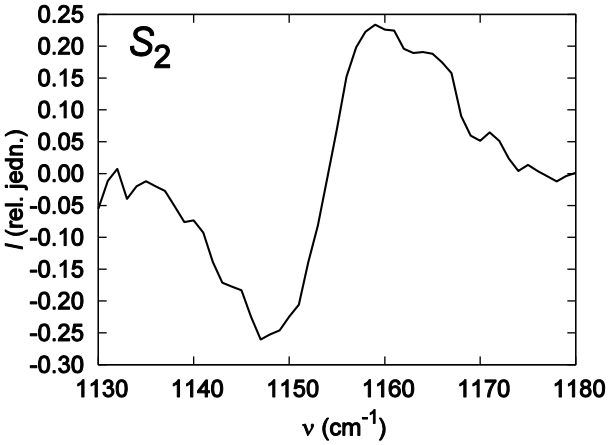
Histogramy vyjadřující zastoupení intenzity studovaného pásu v populacích buněk jsou zobrazeny na Obr. 11 (*log* a *lag* buňky) a na Obr. 12 (*YPD* a *YNB* buňky). Histogramy poloh maxima tohoto pásu jsou pak zobrazeny na Obr. 13 (*log* a *lag* buňky) a na Obr. 14 (*YPD* a *YNB* buňky).



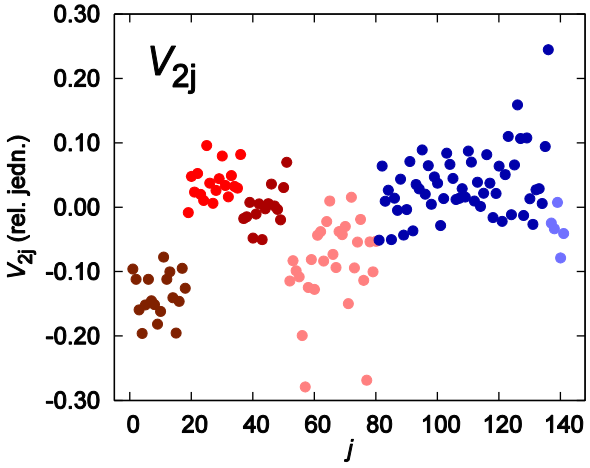
Obr. 3: První subspektrum faktorové analýzy *lag* a *log* buněk v oblasti 1130 až 1180 cm^{-1}



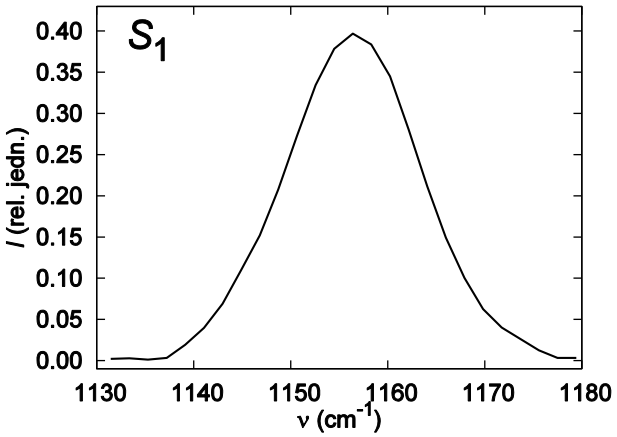
Obr. 4: Koeficienty V_{1j} faktorové analýzy *lag* (červená) a *log* (modrá) buněk v oblasti 1130 až 1180 cm^{-1}



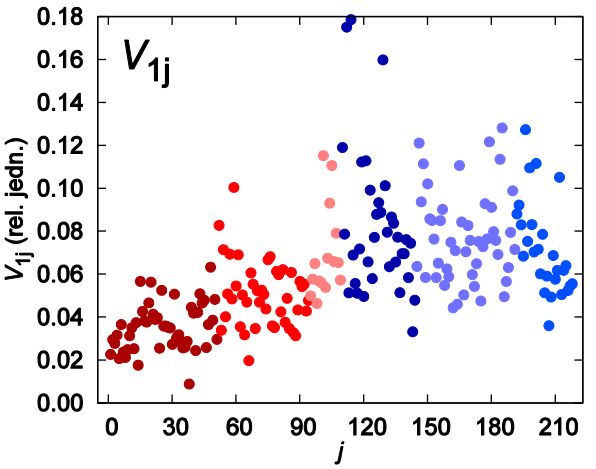
Obr. 5: Druhé subspektrum faktorové analýzy *lag* a *log* buněk v oblasti 1130 až 1180 cm^{-1}



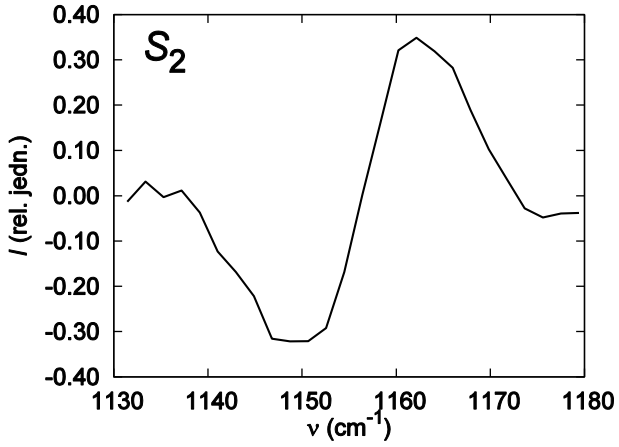
Obr. 6: Koeficienty V_{2j} faktorové analýzy *lag* (červená) a *log* (modrá) buněk v oblasti 1130 až 1180 cm^{-1}



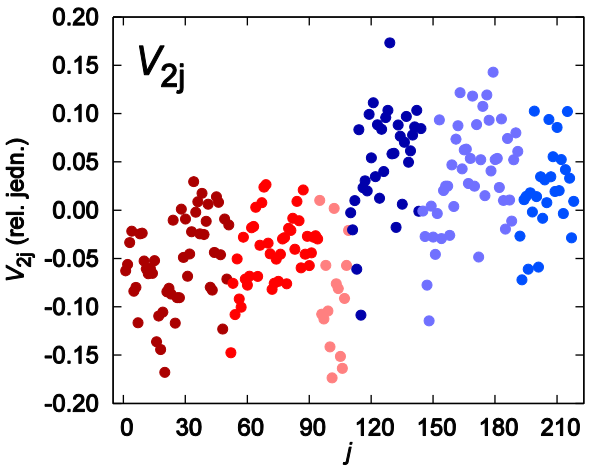
Obr. 7: První subspektrum faktorové analýzy *YPD* a *YNB* buněk v oblasti 1130 až 1180 cm^{-1}



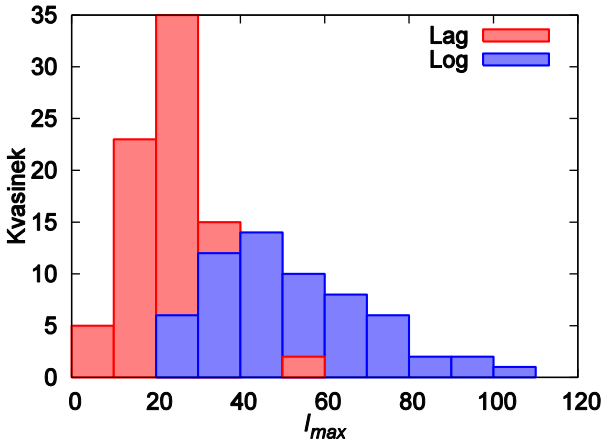
Obr. 8: Koeficienty V_{1j} faktorové analýzy *YPD* (červená) a *YNB* (modrá) buněk v oblasti 1130 až 1180 cm^{-1}



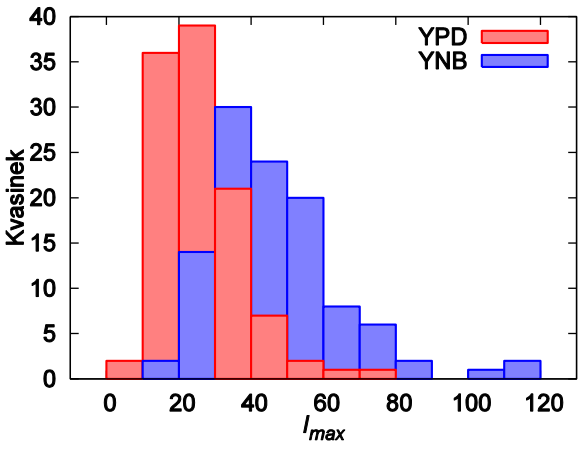
Obr. 9: Druhé subspektrum faktorové analýzy *YPD* a *YNB* buněk v oblasti 1130 až 1180 cm^{-1}



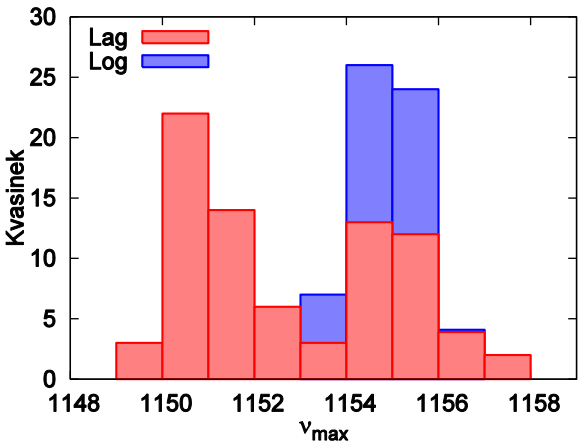
Obr. 10: Koeficienty V_{2j} faktorové analýzy *YPD* (červená) a *YNB* (modrá) buněk v oblasti 1130 až 1180 cm^{-1}



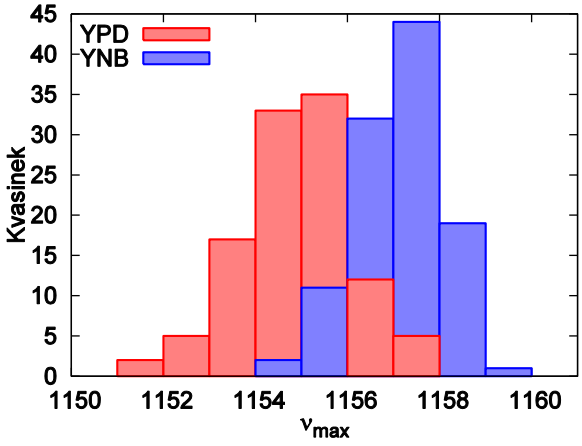
Obr. 11: Histogram maximálních intenzit pásu $(PO_3)^{2-}$ vibrací polyfosfátu pro *lag* a *log* buňky. Menší sloupec je zobrazen před větším



Obr. 12: Histogram maximálních intenzit pásu $(PO_3)^{2-}$ vibrací polyfosfátu pro *YPD* a *YNB* buňky. Menší sloupec je zobrazen před větším



Obr. 13: Histogram poloh maxima pásu $(PO_3)^{2-}$ vibrací polyfosfátu pro *lag* a *log* buňky. Menší sloupec je zobrazen před větším



Obr. 14: Histogram poloh maxima pásu $(PO_3)^{2-}$ vibrací polyfosfátu pro *YPD* a *YNB* buňky. Menší sloupec je zobrazen před větším

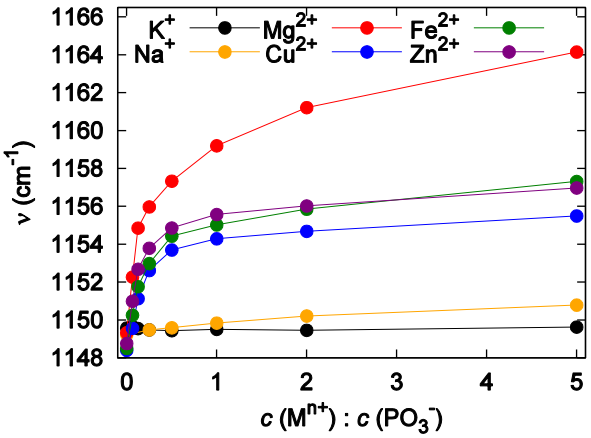
3.3 Výsledky experimentů *in vitro*

Dále byly provedeny experimenty *in vitro* s anorganickými fosfátovými sloučeninami, jejichž účelem bylo odhalit příčinu posuvu vlnočtu pásu $(PO_3)^{2-}$ vibrací polyfosfátu. Většina experimentů byla provedena s hexametafosfátem sodným (dále HMP) coby nejdelším komerčně dostupným oligofosfátem.

Byla naměřena závislost polohy studovaného pásu HMP na pH v rozsahu 3,0 až 11,6. Spektra byla měřena po jednom dni od přípravy vzorků a po čtrnácti dnech od přípravy vzorků. Bylo zjištěno, že pH nemá na polohu maxima studovaného pásu prakticky žádný vliv (graf není zobrazen). Po 14 dnech od přípravy se pH vzorku lišilo maximálně o 0,1, kromě nejvíce bazického vzorku, jehož pH kleslo na 8,8. To zřejmě odpovídá hydrolýze části fosfoanhydridových vazeb, při níž se do roztoku uvolňují protony.

Dále byla studována závislost polohy pásu HMP na celkové koncentraci HMP ve vzorku v rozsahu od 1/32 M do 2 M. Na tomto rozsahu roste poloha maxima s koncentrací přibližně lineárně a rozdíl mezi maximem a minimem činí přibližně 1,3 cm^{-1}.

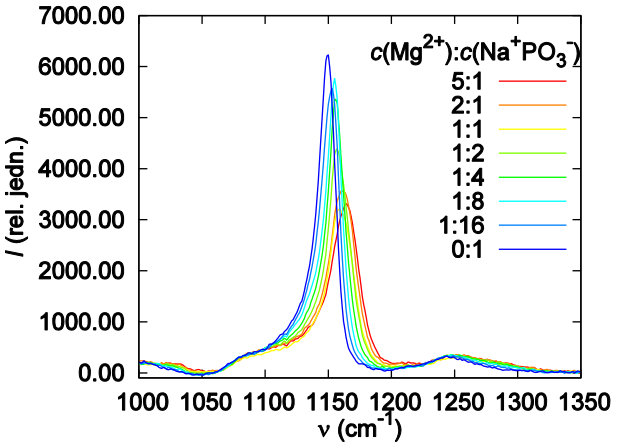
Nakonec byla měřena závislost polohy maxima studovaného pásu na koncentraci jedno- a dvojmocných kationtů pro poměr koncentrací kationtu a fosfátových jednotek polyfosfátu od 0:1 až po 5:1. Výsledky měření jsou zobrazeny na Obr. 15. Je patrné, že s rostoucí koncentrací dvojmocných kationtů se poloha studovaného pásu posouvá k vyšším vlnočtům, a to o 14,8 cm^{-1} pro Mg^{2+} a o 7,1 cm^{-1} až 8,8 cm^{-1} pro ostatní dvojmocné kationty na studovaném rozsahu koncentrací. Intenzita pásu se také snižuje, jak je patrné z Obr. 16 pro příklad interakce HMP s Mg^{2+}.



Obr. 15: Graf závislosti polohy maxima pásu $(PO_3)^{2-}$ vibrací hexametafosfátu sodného na poměru koncentrací kationtů a fosfátových jednotek

Vliv Mg^{2+} na polohu pásu $(PO_3)^{2-}$ vibrací byl studován též na modelu trimetafosfátu trisodného. Bylo zjištěno, že Mg^{2+} polohu maxima sudovaného

pásu též posouvá k vyšším vlnočtům, i když méně než v případě HMP (o 8,8 cm^{-1} na studovaném rozsahu koncentrací). Závislost má též jiný tvar, je přibližně lineární (graf není zobrazen).



Obr. 16: Spektra hexametafosfátu sodného v závislosti na poměru koncentrací kationtů a fosfátových jednotek

4 Diskuse

Obsah vakuol buněk pěstovaných na médiu YPD do různých fází růstové křivky (*lag* a *log* buňky) se liší zejména koncentrací polyfosfátu, projevujícího se ve spektrech úzkým pásem okolo 1155 cm^{-1} a širokým pásem okolo 690 cm^{-1}. Rozdíly pozorované v oblasti 1200 až 1520 cm^{-1} (viz Obr. 1) se týkají spíše celkové intenzity širokého pásu tvořeného superpozicí pásů jednotlivých složek a mohou být způsobeny pouze odlišným odečtem fluorescenčního pozadí v této oblasti.

Obsah vakuol buněk pěstovaných na různých médiích (*YPD* a *YNB* buňky) se liší více. Kromě rozdílů odpovídajících rozdílné koncentraci polyfosfátu pozorujeme odlišné poměry intenzit pásů v oblasti 1200 až 1520 cm^{-1}. Očekáváme, že minimálně část těchto odlišností je způsobena vakuolární membránou, která obsahuje velké množství CH, CH_2 a CH_3 skupin, jejichž spektra mají pásy v této oblasti. To je v souladu s odlišným tvarem pásu okolo 2900 cm^{-1}, který též odpovídá vibracím uhlovodíkových skupin (není zobrazeno).

Podrobnější analýza rozdílů pozorovaných ve spektrech buněk kultivovaných za různých podmínek jde nad rámec této práce. Zde jsme se soustředili na chování pásu polyfosfátu.

Ukázalo se, že buňky vystavené nepříznivým metabolickým podmínkám – ať už jde o docházející živiny v pozdní exponenciální fázi nebo špatný zdroj dusíku v médiu YNB – akumulují polyfosfát více než buňky pěstované na plném médiu bohatém na nutriční zdroje. V obou případech je pás polyfosfátu navíc posunutý k vyšším hodnotám vlnočtů – průměrně o 1,4 cm^{-1} pro *lag* a *log* buňky, a o 2,3 cm^{-1} pro *YPD* a *YNB* buňky. Přitom *lag* buňky se rozdělily na dvě skupiny podle koeficientů V_{2j} příslušejících druhému subspektru – jedna skupina se, co se týče polohy studovaného pásu, více podobá *log* buňkám, viz Obr. 6 a Obr. 13. Vzhledem k tomu, že všechny čtyři měřené skupiny byly připravovány za stejných podmínek a s použitím stejné šarže média, je pozorovaný rozdíl zvláštní. Projevuje se zde pravděpodobně velmi subtilní rozdíl v zacházení s buňkami, jehož povahu se nám však bohužel zatím nepodařilo odhalit. Podařilo se nám tímto ale ukázat, že při kultivaci buněk je potřeba precizně dodržovat předepsaný protokol, protože i drobné odchylky mohou mít vliv na složení obsahu vakuol, které faktorová analýza naměřených spekter odhalí.

Vyšší akumulace polyfosfátu při zhoršených životních podmínkách je v souhlasu s prací Raa a Kornberga, podle nichž je polyfosfát důležitý pro přežití kolonií bakterií *E. coli* ve stacionární fázi růstu [Rao a Kornberg, 1996] a s prací [Biryukova et al., 2011], podle níž u kvasinek druhu *Yarrowia lipolytica* při přechodu do stacionární fáze vznikají polyfosfátové granule.

Na základě experimentů provedených *in vitro* s hexametafosfátem sodným coby modelem vakuolárního polyfosfátu usuzujeme, že nejvýznamnějším faktorem, který způsobuje posuv vlnočtu fosfátového pásu, je přítomnost a koncentrace dvojmocných kationtů. Studované jednomocné kationty naproti tomu nemají vliv téměř žádný. Tento výsledek je v souladu s prací [Koda et al., 1994], která popisuje vliv odlišných jedno- a dvojmocných kationtů na anorganický polyfosfát. Pokud je nám známo, nebyl tento efekt *in vivo* dosud pozorován.

Zdá se, že drobný vliv na polohu maxima pásu polyfosfátu má i koncentrace fosfátových jednotek ve vzorku, nicméně tento efekt je malý ve srovnání s pozorovanými rozdíly v poloze pásu vakuolárního polyfosfátu (přibližně 1,3 cm^{-1} oproti až > 8 cm^{-1}).

Naše experimenty tedy ukazují, že rozdíly v poloze maxima pásu polyfosfátu ve vakuolách kvasinek jsou způsobeny zejména rozdíly v koncentraci dvojmocných kationtů. Aby bylo však možné vliv dvojmocných kationtů s jistotou potvrdit i ve vakuole, bylo by třeba experimenty provést na realističtějším modelu vakuolárního polyfosfátu – nejlépe na směsi polyfosfátů o různé délce řetězce od jednotek až po stovky monomerních jednotek. Vhodné by též bylo potvrdit rozdíly v koncentraci kationtů ve vakuolách jejich přímou extrakcí z vakuol.

5 Závěr

V této práci jsme ukázali, že Ramanova mikrospektroskopie umožňuje *in vivo* měření chemického složení vakuol kvasinkových buněk,

a že v kombinaci s multivariantními statistickými metodami zpracování souborů spekter je schopná detekovat rozdílné chemické složení vakuol *C. albicans* v závislosti na podmínkách kultivace buněčné kultury.

K nejvýraznějším pozorovaným rozdílům ve spektrech odlišně kultivovaných buněk patří intenzita a poloha pásu $(PO_3)^{2-}$ vibrací polyfosfátu okolo 1155 cm^{-1}. Ukázalo se, že buňky v pozdní exponenciální fázi růstu buněčné kultury na již vyčerpaném médiu a buňky pěstované na médiu chudém na zdroj dusíku mají ve svých vakuolách v průměru výrazně více polyfosfátu než buňky v *lag*-fázi růstu pěstované na plném médiu. Vakuolární polyfosfát tak zřejmě hraje roli v přizpůsobení buňky na zhoršené nutriční podmínky.

Průměrná poloha maxima pásu polyfosfátu je pro buňky v pozdní exponenciální fázi a buňky pěstované v médiu chudém na zdroj dusíku posunuta o několik cm^{-1} k vyšším vlnočtům. Tento posuv je s největší pravděpodobností zapříčiněn odlišnou koncentrací dvojmocných kationtů ve vakuolách.

Poděkování

Děkuji vedoucímu práce doc. RNDr. Peteru Mojzešovi, CSc., za trpělivost, ochotu a všestrannou pomoc při měření i zpracování této práce. Dále bych chtěla poděkovat Mgr. Václavě Bauerové z Ústavu organické chemie a biochemie Akademie věd České republiky, v.v.i., za kultivaci kvasinek.

Literatura

[Biryukova et al., 2011] Biryukova, E. N., A. Yu. Arinbasarova, N. E. Suzina, V. V. Sorokin a A. G. Medentsev (2011). Ultrastructural changes in Yarrowia lipolytica cells under stress conditions. *Microbiology*. **80**(3),350–354.

[De Gelder et al., 2007] De Gelder, Joke, Kris De Gussem, Peter Vandenabeele a Luc Moens (2007). Reference database of Raman spectra of biological molecules. *Journal of Raman Spectroscopy*. **38**(9), 1133–1147.

[Horiba Jobin-Yvon HR800 User Manual] Horiba Jobin-Yvon (2005). *HR800 User Manual*. Lille.

[Huang et al., 2005] Huang, Yu-San, Takeshi Karashima, Masayuki Yamamoto a Hiro-o Hamaguchi (2005). Molecular-Level Investigation of the Structure, Transformation, and Bioactivity of Single Living Fission Yeast Cells by Time- and Space-Resolved Raman Spectroscopy. *Biochemistry*. **44**(30), 10009–10019.

[Huang et al., 2007] Huang, Wei E., Mark J. Bailey, Ian P. Thompson, Andrew S. Whiteley a Andrew J. Spiers (2007). Single-Cell Raman Spectral Profiles of Pseudomonas fluorescens SBW25 Reflects in vitro and in planta Metabolic History. *Microbial Ecology*. **53**(3), 414–425.

[Kalvodová a Manych, 1996] Kalvodová, Dagmar a Jiří Manych (1996). Fungi. In *Lékařská mikrobiologie: bakteriologie, virologie, parazitologie*. BEDNÁŘ, Marek et al. Praha: Marvil. Kapitola 26, s. 344–360. ISBN 80-238-0297-6.

[Kim a Sudbery, 2011] Kim, Joon a Peter Sudbery (2011). Candida albicans, a major human fungal pathogen. *The Journal of Microbiology*. **49**(2), 171–177.

[Koda et al., 1994] Koda, Shinobu, Teruyuki Kawakami a Hiroyasu Nomura (1994). Polymer Journal. *Raman Spcetroscopic Studies on the Interaction between Counterions and Polyphosphate Ion*. **26**(4), 473–47.

[Kornberg, 1995] Kornberg, A. (1995). Inorganic Polyphosphate: Toward Making a Forgotten Polymer Unforgettable. *Journal of Bacteriology*. **177**(3), 491–496.

[Kornberg et al., 1999] Kornberg, A. et al. (1999). Inorganic polyphosphate: a molecule of many functions. *Annu. Rev. Biochem.* **68**, 89–125.

[Li a Kane, 2009] Li, Sheena Claire a Patricia M. Kane (2009). The yeast lysosome-like vacuole: Endpoint and crossroads. *Biochimica et Biophysica Acta - Molecular Cell Research*. **1793**(4), 650–663.

[Majed et al., 2009] Majed, Nehreen, Christian Matthäus, Max Diem a April Z. Gu (2009). Evaluation of Intracellular Polyphosphate Dynamics in Enhanced Biological Phosphorus Removal Process using Raman Microscopy. *Environmental Science*. **43**(14), 5436–5442.

[Oliver et al., 2008] Oliver, B. G., P. M. Silver a T. C. White (2008). Polyene susceptibility is dependent on nitrogen source in the opportunistic pathogen Candida albicans. Journal of Antimicrobial Chemotherapy. **61(**6),1302–1308.

[Pfaller et al., 2012] Pfaller, Michael et al. (2012). Epidemiology and outcomes of candidemia in 3648 patients: data from the Prospective Antifungal Therapy (PATH Alliance®) registry, 2004-2008. *Diagnostic Microbiology and Infectious Disease*. **74**(4), 323–331.

[Rao a Kornberg, 1996] Rao, N. N. a A. Kornberg (1996). Inorganic polyphosphate supports resistance and survival of stationary-phase Escherichia coli. *J Bacteriol.* **178**(5), 1394–1400.

[Singh et al., 2006] Singh, Gajendra Pratap, Giovanni Volpe, Caitriona M. Creely, Helga Grötsch, Isabel M. Geli a Dmitri Petrov (2006). The lag phase and G1 phase of a single yeast cell monitored by Raman microspectroscopy.

Journal of Raman Spectroscopy. **37** (8), 858–864.

[Socrates, 2001] Socrates, George (2001). *Infrared and raman characteristic group frequencies: tables and charts*. 3rd ed. West Sussex: John Wiley, 2001. ISBN 04-700-9307-2.

Dynamické vlastnosti Isingovho modelu v náhodných poliach

Stanislav Hrivňak[1]*
Školiteľ: Milan Žukovič[1‡]

[1] PF UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovenská republika

Abstrakt

Isingov model v náhodnom poli (ďalej RFIM – random field Ising model) je prototypovým modelom magnetických systémov s tzv. zmrazeným neusporiadaním, v ktorom prebiehajú mechanizmy súperenia medzi usporiadaným a neusporiadaným stavom. Kým lokálne interakcie medzi spinmi vedú k vzniku feromagnetického usporiadania, náhodné pole má tendenciu ho narušiť. Toto súperenie do veľkej miery ovplyvňuje termodynamické vlastnosti. Jedným z dôsledkov je fakt, že dvojrozmerný (2D) RFIM nevykazuje pri žiadnej teplote ďalekodosahové usporiadanie, preto kľúčovou otázkou ostáva štúdium štatistickej mechaniky doménových stien. Na rozdiel od Isingovho modelu bez vonkajšieho poľa, v RFIM modeli nie je vždy možné zmenšovať doménovú stenu za účelom zníženia povrchovej energie. Hovoríme, že doménové steny sú zachytávané lokálnym poľom. Systém sa tak po ukončení vývoja doménových stien nachádza v neusporiadanom stave, hoci finálne feromagnetické domény môžu byť veľmi rozsiahle. To sa prejaví v multimodalite povrchu voľnej energie a následne v dlhých relaxačných časoch.

V práci boli implementované Monte Carlo simulácie zameriavajúce sa na štúdium vývoja magnetizácie, energií pochádzajúcich z výmennej interakcie a interakcie s náhodným poľom, spinovej párovej korelačnej funkcie a veľkosti najväčšej domény. Posledná veličina z menovaných sa zvykne určovať nepriamou metódou založenou na fluktuáciách magnetizácie. V tejto práci sme ju však určovali priamo použitím Hoshenovho – Kopelmanovho algoritmu. Vyšetrovali sme dva typy náhodného poľa – s uniformným a Gaussovým rozdelením s rôznymi parametrami. V oboch prípadoch sa vývoj magnetizácie a veľkosti najväčšej domény správali podľa mocninového zákona s exponentmi, ktoré v závislosti od amplitúdy vonkajšieho poľa exponenciálne klesali. V prípade slabých polí boli navyše potvrdené rôzne režimy nárastu veľkosti najväčšej domény v skorých a neskorých časoch.

Kľúčové slová: Isingov model, náhodné pole, dynamické vlastnosti, Monte Carlo simulácie

1 Úvod

Isingov model v náhodnom poli (RFIM) sa od svojho zavedenia [1] stal predmetom výskumu mnohých prác z oblasti magnetizmu. Hlavnou motiváciou na skúmanie tohto modelu je jeho experimentálna realizácia v podobe zriedeného antiferomagnetu nachádzajúceho sa v homogénnom poli reprezentovaného tzv. DAFF modelom, kvôli tvrdeniu, že oba tieto modely spadajú do rovnakej triedy univerzality. [2,3]. Hamiltonián pre náš systém má podobu

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle} s_i s_j + \sum_i s_i \,, \qquad (1.1)$$

kde

J - konštanta výmennej interakcie, ktorá bola v tejto práci konvenčne zvolená ako $J = 1$,

s_i – hodnota i-teho spinu, ktorá môže nadobúdať hodnoty ±1, a

η_i – náhodné číslo pochádzajúce z nejakého rozdelenia F.

Prvý člen predstavuje klasickú Isingovskú interakciu medzi najbližšími susedmi a druhý člen reprezentuje interakciu vonkajšieho náhodného poľa s daným spinom.

V RFIM sa hamiltonián líši od štandardného Isingovho modelu o dodatkový člen reprezentujúci lokálne náhodné pole, čo vedie k veľkým zmenám v správaní sa makroskopických ako aj mikroskopických veličín v rovnovážnom aj nerovnovážnom stave. V prípade jednorozmernej ($D = 1$) lineárnej retiazky sa usporiadaný stav nedosahuje [4]. V prípade $D = 2$ je situácia podobná, avšak boli už vykonané štúdie, ktoré naznačili existenciu fázového prechodu pri istej kritickej hodnote rozptylu náhodného vonkajšieho poľa. [5] Prípad $D = 3$ vykazuje fázový prechod do feromagnetického stavu pri poklese pod kritickú teplotu. [6] Lokálne statické náhodné polia

* stano.hrivnak@gmail.com
‡ milan.zukovic@upjs.sk

spôsobujú vznik mnohých lokálnych miním voľnej energie, a tak zvyšujú šance na uviaznutie v lokálnom optime, čo má za následok dlhé relaxačné časy potrebné na dosiahnutie rovnovážneho stavu.

Isingov model v nulovom poli pod kritickou teplotou T_C vytvára v skorých časoch domény stredných veľkostí, v ktorých sú spiny súhlasne orientované. S narastajúcim časom najmenšie domény postupne miznú, až sa docieli stav, kedy väčšina spinov na mriežke má rovnaký smer. Dôvod tohto správania spočíva v existencii povrchovej energie domén – čím má doména väčší povrch, tým väčšou energiou prispieva k celkovej energii systému, pretože pri feromagnetickej interakcii (výmenná interakcia $J > 0$) prispievajú opačne orientované spiny na hraniciach domén kladnými príspevkami, a tak sťažujú minimalizáciu energie. Systém však môže znížiť svoju energiu preklopením spinov v okolí hranice domény, čo spôsobí zmenšovanie malých a súčasné zväčšovanie veľkých domén až kým nevznikne doména tiahnuca sa celou mriežkou.

Situácia je však podstatne odlišná pri RFIM. Stále platí, že domény sa tvoria vo forme súhlasne orientovaných susedných spinov a disponujú povrchovou energiou, avšak nie vždy je pre systém energeticky výhodné zmenšovať túto doménovú stenu. Dôvodom je práve prítomnosť lokálneho náhodného poľa. Niektoré uzly mriežky totižto budú vykazovať vysoké lokálne vonkajšie pole, ktoré, ak smeruje napríklad nahor, bude vysoko podporovať orientáciu spinu taktiež nahor. A tak ak na jednej strane má systém záujem preklopiť spin smerom nadol kvôli existujúcemu povrchu doménovej steny a na strane druhej je pole v danom uzle orientované nahor, sme svedkami súťaže medzi týmito dvoma interakciami. Pravdepodobnosť preklopenia spinu je priamo úmerná faktoru $e^{-2\beta\eta_i}$, kde β je prevrátená hodnota teploty a η_i je veľkosť poľa v danom uzle. Ak je η_i veľké, potom tento faktor je veľmi malý a tak hovoríme, že doménové steny sú zachytávané lokálnym poľom. Zmenšovanie doménovej steny je teda zamedzené energetickou bariérou vyprodukovanou lokálnym poľom. Ak teda v dôsledku toho domény prestanú rásť, systém sa bude nachádzať v neusporiadanom stave, a to aj pri nízkych teplotách.

Tieto neusporiadané spinové systémy sú predmetom skúmania už dlhší čas. Cieľom tejto práce je pomocou Monte Carlo simulácií študovať časový vývoj takýchto systémov s dôrazom na dynamiku vývoja magnetizácie, energií pochádzajúcich z výmennej interakcie a interakcie s náhodným poľom, spinovej korelačnej funkcie a veľkosti domén v nerovnovážnom stave. Vo väčšine prác týkajúcich sa RFIM sa na určenie veľkostí jednotlivých domén používa nepriama metóda založená na fluktuáciách magnetizácie. [7 – 9]. V tejto práci sme však určovali aktuálnu veľkosť domény priamo použitím Hoshenovho – Kopelmanovho algoritmu [10], ktorý nám umožňuje presnejšie skúmanie časového vývoja.

Samotné náhodné pole môže mať rôzne podoby líšiace sa konkrétnou distribučnou funkciou. Vo väčšine prác je vonkajšie náhodné pole generované z Gaussovského, uniformného, poprípade binomického rozdelenia. [11,12]. Predpokladá sa však, že v dôsledku javu univerzality by správanie sa systému malo byť nezávislé od konkrétneho typu náhodného poľa. [13] Ďalším cieľom tejto práce je overiť tento predpoklad nezávislosti v podobe porovnania dosiahnutých výsledkov pre dva rôzne typy náhodného poľa.

2 Metóda

Na preskúmanie dynamiky vývoja vyššie spomenutých fyzikálnych veličín sme vykonali Monte Carlo simulácie modelu (1.1) na štvorcovej mriežke pri konštantnej redukovanej teplote $k_BT/J = 0,5$, využívajúce Metropolisov algoritmus spinovej dynamiky [14], pričom sme skúmali vývoj veličín počas prvých 25000 Monte Carlo krokov. Bola použitá mriežka veľkosti 256 × 256, čo predstavuje dostatočnú veľkosť pre potreby tejto práce. Na vysporiadanie sa s okrajovými efektmi boli použité periodické okrajové podmienky.

Veľkosti klastrov (domén) boli určované pomocou Hoshenovho-Kopelmanovho algoritmu [10]. Jeho podstata spočíva v tom, že postupne prechádzame mriežkou a každému spinu priradíme nálepku, ktorá hovorí o tom, do ktorého klastra daný spin patrí. Ak má daný uzol spin napr. +1 a v jeho susedstve sa už nenachádza žiaden spin patriaci do klastra spinov typu +1, tak sme svedkami zrodu nového klastra a teda danému spinu priradíme ešte nepoužitú nálepku označujúcu daný klaster. Ak sa však v jeho susedstve už nachádza spin patriaci do klastra spinov typu +1, potom danému vyšetrovanému spinu priradíme rovnakú nálepku akú má tento jeho sused. Môže však nastať aj situácia, kedy sa v susedstve práve vyšetrovaného spinu nachádza viac spinov rovnakého typu, ktoré už patria do istého klastra a ich nálepky sú rôzne. V tom prípade pre práve vyšetrovaný spin použijeme číselne najnižšiu nálepku a poznačíme si, že dané dva klastre predstavujú v skutočnosti jeden a ten istý. Tento algoritmus sa pre 2D systémy ukazuje ako veľmi efektívny.

Náhodné číslo η_i vystupujúce v hamiltoniáne pochádza z náhodného rozdelenia $F(\eta_i)$. V tejto práci sme sa zaoberali dvoma rozdeleniami, a to uniformným s hustotou rozdelenia danou vzťahom

$$F_1(\eta_0,\eta_i)=\frac{1}{2\eta_0},\ \eta_i\in\langle-\eta_0,\eta_0\rangle \qquad (2.1)$$

kde η_0 je v absolútnej hodnote maximálna hodnota veľkosti poľa a druhé rozdelenie je Gaussove rozdelenie dané hustotou

$$F_2(\eta_0,\eta_i)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{\eta_i^2}{2\sigma^2}},\ \eta_i\in(-\infty,\infty) \qquad (2.2)$$

kde σ je smerodajná odchýlka. Jedným z cieľov tejto práce je porovnanie výsledkov dosiahnutých týmito rozdeleniami. Vyvstáva však otázka, aké podoby týchto rozdelení je možné navzájom porovnávať, keďže zo vzťahov (2.1) a (2.2) je zjavné, že obe rozdelenia majú po jednom voľnom parametri. V tejto práci budeme považovať za objektívne porovnanie výsledkov dosiahnutých z rozdelení F_1 a F_2 práve vtedy, ak sa rozdelenia zhodujú v 1. aj 2. centrálnom momente, t.j. zhodujú sa v strednej hodnote a smerodajnej odchýlke. Stredná hodnota týchto rozdelení je nulová a teda zhodná. Smerodajná odchýlka rozdelenia F_1 je $\eta_0/\sqrt{3}$, a tak pre splnenie podmienky rovnosti 2. momentu musíme v rozdelení F_2 položiť $\sigma=\eta_0/\sqrt{3}$. Dostávame tak vzťah

$$F_2(\eta_0,\eta_i)=\frac{\sqrt{3}}{\eta_0\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{3\eta_i^2}{2\eta_0^2}},\ \eta_i\in(-\infty,\infty) \qquad (2.3)$$

Vzťahy (2.1) a (2.3) tak určujú dve rôzne hustoty rozdelení, ktoré pre dané η_0 majú zhodnú strednú hodnotu a smerodajnú odchýlku. Veličinu η_0 budeme nazývať *amplitúdou (intenzitou) poľa*. V tejto práci sme previedli Monte Carlo simulácie pre hodnoty amplitúdy poľa η_0 = 0,2; 0,3; 0,4; 0,6; 1,0; 1,4; 1,8; 2,2; 2,6.

Za účelom výpočtu konfiguračných stredných hodnôt a odhadu chýb bolo pre každú sadu parametrov vykonaných 50 nezávislých simulácií. Časovo závislá hodnota magnetizácie je definovaná ako:

$$M(\eta_0,t)=\frac{1}{L^2}\left\langle\left|\sum_i s_i\right|\right\rangle_t, \qquad (2.4)$$

kde L = 256 je veľkosť mriežky a symbol $\langle\ \rangle_t$ predstavuje konfiguračné vystredovanie cez hodnoty z 50 simulácií. Časovo závislá hodnota spinovej (párovej) korelačnej funkcie je definovaná ako

$$\Psi_{ss}(\eta_0,l,t)=\left\langle\langle s_i s_{i+l}\rangle_l\right\rangle_t, \qquad (2.5)$$

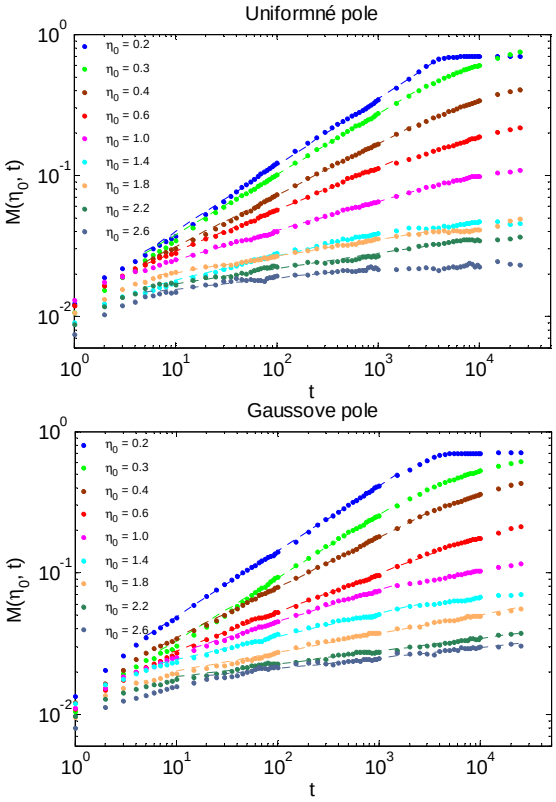
kde l je vzdialenosť medzi spinmi a vnútorná zátvorka $\langle\ \rangle_l$ predstavuje stredovanie cez všetky dvojice spinov so vzájomnou vzdialenosťou l.

3 Výsledky

Časový vývoj strednej hodnoty magnetizácie definovanej vzťahom (2.4) pre rôzne amplitúdy poľa je znázornený na obrázku 1. Pre obidva typy náhodného poľa dostávame kvalitatívne rovnaké výsledky. V prípade slabých polí ($\eta_0 \leq 0{,}3$) systém dosiahne po istom čase stacionárny stav s iba malými fluktuáciami hodnôt magnetizácie. Naopak, pri silných poliach je relaxačný čas omnoho dlhší. Povaha vývoja magnetizácie je teda silne závislá od amplitúdy vonkajšieho poľa. Jej správanie v skorých časoch je možné popísať mocninovým zákonom

$$M(\eta_0,t)\propto t^{\beta}(\eta_0), \qquad (3.1)$$

kde $\beta(\eta_0)$ je exponent mocninovej závislosti, ktorý je funkciou amplitúdy poľa η_0 a t je Monte Carlo čas.



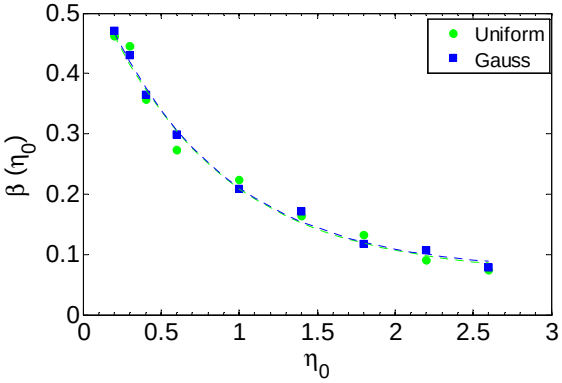
Obr. 1. Časový vývoj magnetizácie. Čiarkované čiary reprezentujú najlepší mocninový fit pre dané hodnoty magnetizácie.

Závislosť tohto exponentu od amplitúdy poľa je znázornená na obrázku 2. Pre oba typy náhodného poľa bol pozorovaný exponenciálny pokles. Ako fitovacia funkcia bola zvolená

$$\beta(\eta_0)=a+b\,e^{-c\eta_0}, \qquad (3.2)$$

kde a,b,c predstavovali voľné parametre fitu. Exponent poklesu c nadobúdal hodnotu 1,310 v prípade uniformného rozdelenia a 1,285 pre Gaussove rozdelenie. Ostrý pokles hodnoty exponentu rastu magnetizácie je prirodzeným

dôsledkom existencie dvoch interakcií v hamiltoniáne. V prípade malých polí v „súboji“ interakcií jasne dominuje výmenná interakcia, ktorá vedie systém do usporiadaného stavu. Ako však amplitúda poľa rastie, začína čoraz väčšmi prevládať spomínané zachytávanie doménových stien, ktoré sťažuje prechod k usporiadanému stavu. Oba typy náhodného poľa dosahujú v tomto porovnaní veľmi blízke hodnoty, čo potvrdzuje spomínaný jav univerzality.



Obr. 2. Závislosť exponentu β(η₀) od amplitúdy poľa η₀. Čiarkovanými čiarami je znázornený najlepší exponenciálny fit zobrazených bodov pre Gaussove aj uniformné rozdelenie.

Súperenie medzi dvoma typmi interakcií hrá v našom prípade kľúčovú úlohu pri vývoji systému. Preto je zaujímavé oddelene skúmať časový vývoj jednotlivých zložiek. Časovo závislú hodnotu výmennej interakcie definujeme ako

$$\chi(\eta_0,t)=\frac{1}{L^2}\left\langle\sum_{\langle i,j\rangle}s_i s_j\right\rangle_t, \qquad (3.3)$$

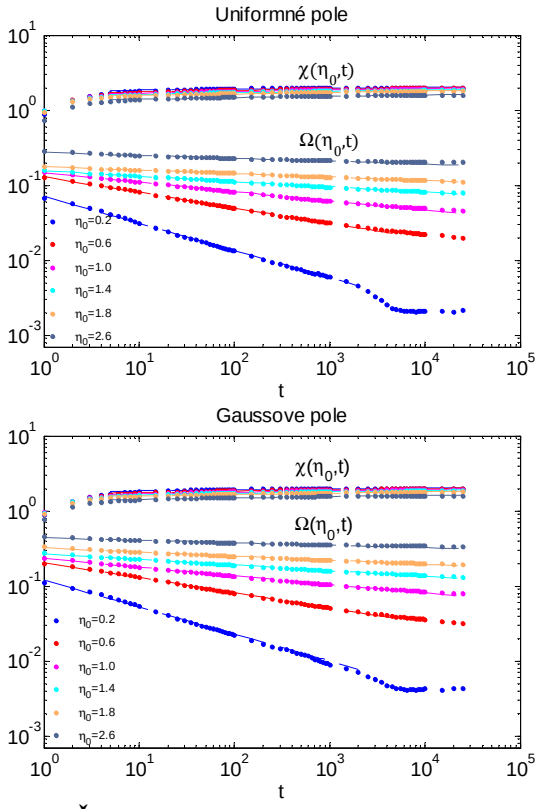
kde L = 256 je lineárna veľkosť mriežky a podobne časovo závislú hodnotu normalizovanej interakcie spinu s lokálnym poľom definujeme vzťahom

$$\Omega(\eta_0,t)=\left\langle\frac{1}{\eta_0}\langle s_i\eta_i\rangle\right\rangle_t \qquad (3.4)$$

kde $\langle\ \rangle_t$ značí stredovanie cez hodnoty 50 simulácií v čase t. Obrázok 3 zachytáva dynamický vývoj $\chi(\eta_0,t)$ a $\Omega(\eta_0,t)$. Tak uniformné aj ako aj Gaussove rozdelenie dáva kvalitatívne rovnaké výsledky. U výmennej interakcie je možné pozorovať takmer konštantné chovanie s mierne rastúcim trendom s výnimkou veľmi malých časov. Závislosť od amplitúdy poľa je iba veľmi slabá. Na druhej strane, interakcia s lokálnym poľom prudko klesá s výnimkou veľkých polí, kde sa s časom mení len pomaly. Systém sa teda správa tak, aby minimalizoval interakciu s lokálnym poľom. Pre slabé polia systém dosahuje stacionárny stav, ktorý sa prejaví v saturácii hodnoty interakcie s lokálnym poľom. Z priebehu jednotlivých interakcií je zrejmá závislosť od amplitúdy poľa, a tak prirodzenou otázkou, ktorá povstáva, je aký bude kvantitatívny popis týchto závislostí. Z obr. 3. je možné dedukovať lineárne závislosti na log-log škále, čo nám dáva dobrý predpoklad na návrh mocninových závislostí v podobe

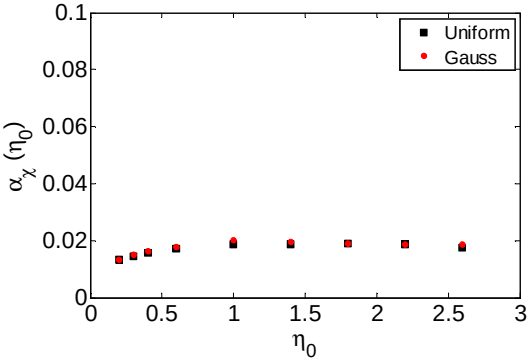
$$\chi(\eta_0,t)\propto t^{\alpha_\chi(\eta_0)} \qquad (3.5)$$

$$\Omega(\eta_0,t)\propto t^{-\alpha_\Omega(\eta_0)}, \qquad (3.6)$$

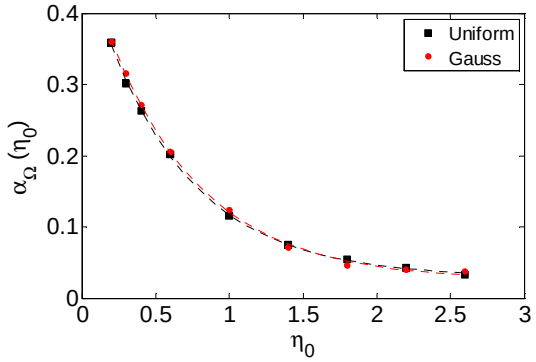


Obr. 3. Časový vývoj výmennej interakcie χ(η₀,t) a interakcie spinu s lokálnym poľom Ω(η₀,t) definovaných vzťahmi (3.3) a (3.4).

kde $\alpha_\chi(\eta_0)$ a $\alpha_\Omega(\eta_0)$ sú exponenty nárastu výmennej interakcie, resp. poklesu interakcie s lokálnym poľom. Obrázok 3 podáva najlepšie mocninové fity prislúchajúce týmto interakciám znázornené čiarkovanou čiarou. Na obrázku 4 je vykreslená závislosť exponentu $\alpha_\chi(\eta_0)$. od η_0 pre oba študované typy náhodného poľa a analogicky obrázok 5 podáva obraz o exponente $\alpha_\Omega(\eta_0)$. Opäť nezaznamenávame výrazný rozdiel medzi výsledkami dosiahnutými v uniformnom



Obr. 4. Závislosť exponentu a_χ (η₀) od amplitúdy poľa



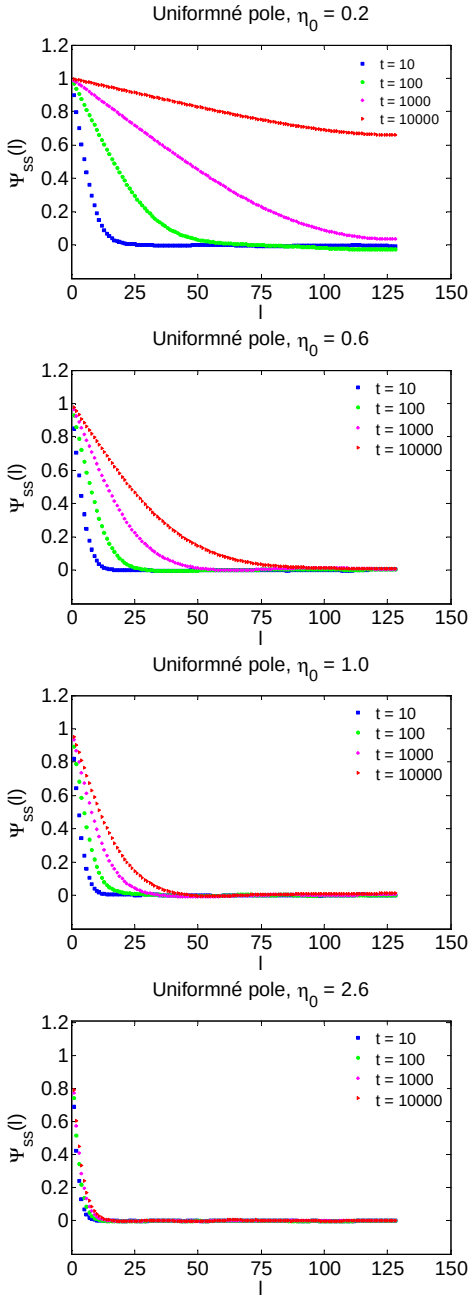
Obr. 5. Závislosť exponentu $\alpha_\Omega(\eta_0)$ od amplitúdy poľa. Čiarkovanými čiarami je znázornený najlepší exponenciálny fit zobrazených bodov pre Gaussove aj uniformné rozdelenie.

a Gaussovom poli. Hodnoty exponentu $\alpha_\chi(\eta_0)$ sú veľmi malé a jeho závislosť na amplitúde poľa je zanedbateľná, čo znamená, že je takmer úplne nezávislý od η_0. Exponent $\alpha_\Omega(\eta_0)$ však na druhej strane vykazuje známky prudkého poklesu s nárastom poľa a na základe obrázku 5 môžeme opäť predpokladať exponenciálnu závislosť v tvare

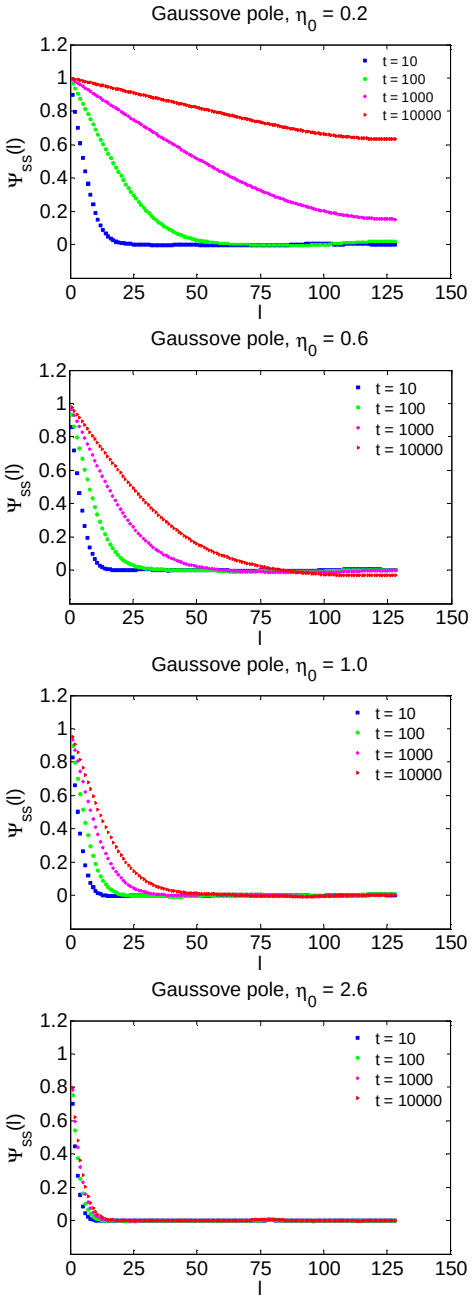
$$\alpha_\Omega(\eta_0) = a + b\, e^{-c\eta_0}, \qquad (3.7)$$

kde a,b,c predstavujú voľné parametre fitu. Exponent c tejto závislosti má pre prípad uniformného poľa hodnotu 1,576 a pre Gaussove pole hodnotu 1,639.

V ďalšom zameriame našu pozornosť na štúdium párovej korelačnej funkcie definovanej vzťahom (2.5). Obr. 6 a 7 znázorňujú túto veličinu



Obr. 6. Korelačná spinová funkcia v rôznych časoch pre 4 hodnoty amplitúdy poľa a Uniformné pole



Obr. 7. Korelačná spinová funkcia v rôznych časoch pre 4 hodnoty amplitúdy poľa a Gaussove pole

v rôznych časoch, pre rôzne hodnoty amplitúdy poľa a oba typy náhodného poľa. Z obrázkov je zrejmé, že systém je korelovaný. V prípade slabých polí sme svedkami vzniku ďalekodosahového usporiadania, keďže korelácia je významná aj na veľkých vzdialenostiach. Dôvodom takéhoto správania je už spomenutá snaha systému postupne minimalizovať interakciu s lokálnym poľom, kdežto výmenná interakcia ostáva takmer nemenná, a tak s narastajúcim časom bude čoraz väčšmi dominovať. Preto v skorých časoch systém vykazuje krátkodosahové usporiadanie a v neskorých časoch ďalekodosahové. To je zároveň dôvodom vysokých hodnôt exponentov $\beta(\eta_0)$ a $\alpha_\Omega(\eta_0)$ u slabých polí. Pre stredne veľké amplitúdy poľa nepozorujeme vznik žiadnych ďalekodosahových usporiadaní, iba s časom sa prehlbujúce krátkodosahové usporiadanie. Výmenná interakcia tam teda nikdy „nezdolá“ interakciu s lokálnym poľom v zmysle ustanovenia ďalekodosahovej štruktúry. Vznikajú iba malé domény, ktoré sa s narastajúcim časom zväčšujú, avšak vďaka prítomnosti náhodného poľa sa nikdy nezjednotia do podoby jednej veľkej domény rozprestierajúcej sa na väčšine plochy mriežky ani pri nízkych teplotách. V prípade veľkých amplitúd poľa sa nevyskytujú už ani len krátkodosahové usporiadania.

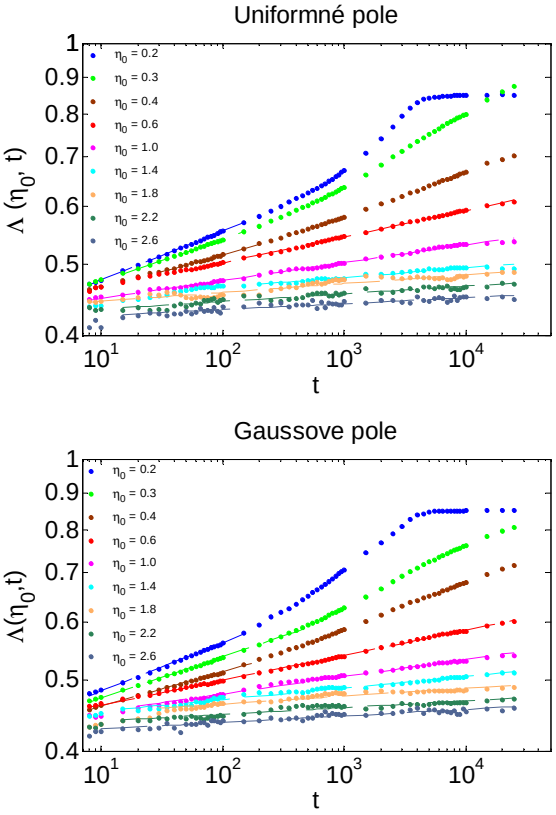
Ďalšou zaujímavou informáciou vypovedajúcou o dynamike systému je časový vývoj doménových stien. Táto problematika sa stala predmetom štúdií mnohých prác. [15] Použitím Monte Carlo simulácií [16-17] sa dosiahli numerické výsledky, ktoré boli porovnávané s teoretickými výsledkami. [18-19] V tejto práci sme sa sústredili na vývoj rastu najväčšej domény, ktorý znázorňuje obr. 8. Na zvislej osi sa nachádza podiel najväčšej domény vzhľadom k celej mriežke. Z obr.8 je zrejmé, že časový vývoj najväčšej domény sa správa podľa mocninového zákona

$$\Lambda(\eta_0, t) \propto t^{\mu(\eta_0)} \qquad (3.8)$$

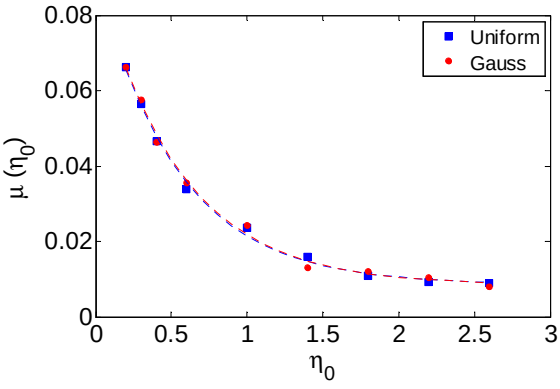
kde $\mu(\eta_0)$ je exponent mocninovej závislosti rastu najväčšej domény v skorých časoch, ktorý je závislý od amplitúdy vonkajšieho poľa. Pre malé amplitúdy polí ($\eta_0 \leq 0{,}3$) nastáva situácia, kedy pre skoré časy je rast magnetizácie iný ako pre časy neskoré. Zaoberať sa však budeme iba mocninovým zákonom v skorých Monte Carlo časoch. Závislosť $\mu(\eta_0)$ od η_0 je zobrazená na obr. 9. Pre oba typy náhodného poľa bol zaznamenaný exponenciálny pokles. Ako fitovacia funkcia bola zvolená

$$\mu(\eta_0) = a + b\, e^{-c\eta_0} \qquad (3.9)$$

kde a,b,c predstavovali voľné parametre fitu. Exponent poklesu c nadobúdal hodnotu v prípade uniformného poľa 1,816 a pre prípad Gaussovho poľa 1,852.



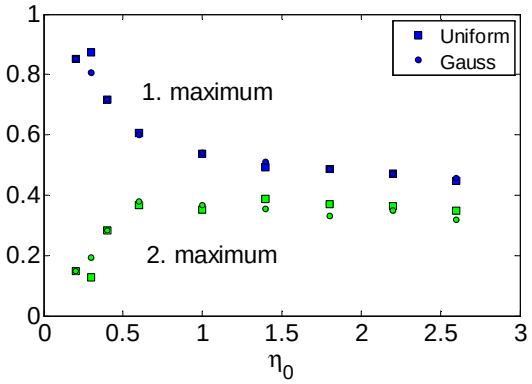
Obr. 8. Časový vývoj percentuálnej veľkosti najväčšej domény v systéme. Čiarkované čiary zodpovedajú najlepším mocninovým fitom tejto veličiny.



Obr. 9. Závislosť exponentu $\mu(\eta_0)$ od amplitúdy poľa. Čiarkovanými čiarami je znázornený najlepší exponenciálny fit zobrazených bodov pre Gaussove aj Uniformné rozdelenie.

Z obr. 8 je vidieť, že najmä pre malé amplitúdy poľa zaberá najväčšia doména od istého času väčšinu mriežky. Povstáva tak otázka, aké domény tvoria zvyšné nezaradené spiny. Čiastočne nám odpoveď na túto otázku ponúka obr. 10, kde je vykreslená závislosť prvej a druhej najväčšej domény v systéme od amplitúdy poľa v čase t = 25000. V prípade malých polí najväčšia doména jasne dominuje, no pri zväčšovaní poľa dochádza k skresávaniu rozdielov a druhá najväčšia doména

má porovnateľnú veľkosť s najväčšou. Pri všetkých veľkostiach polí je však vidieť, že prvé dve najväčšie domény tvoria viac ako 90% mriežky., čo je spôsobené pohltením malých domén veľkými v neskorých časoch vývoja systému.



Obr. 10. Závislosť veľkosti 1. a 2. najväčšej domény od amplitúdy poľa v čase t = 25000.

4 Záver

Cieľom tejto práce bolo preskúmať vybrané vlastnosti 2D Isingovho modelu v náhodnom poli v nerovnovážnom stave použitím Monte Carlo simulácií pri nízkych teplotách. Výsledky naznačili, že skúmané vlastnosti sú značne závislé od intenzity, avšak nie od typu náhodného poľa. Výsledky dosiahnuté v prípade uniformného poľa sa totižto s dobrou presnosťou zhodovali s analogickými výsledkami pre prípad Gaussovho poľa. Konkrétne, časový vývoj magnetizácie vykazoval v skorých časoch správanie sa podľa mocninového zákona s exponentom $\beta(\eta_0)$, ktorý zaznamenal exponenciálny pokles s intenzitou poľa. Ukázalo sa, že vývoj systému v čase je sprevádzaný postupnou minimalizáciou interakčnej energie s lokálnym poľom, ktorej pokles je popísaný mocninovou závislosťou s exponentom $\alpha_\Omega(\eta_0)$, ktorý taktiež exponenciálne klesal v závislosti na intenzite poľa. Na druhej strane, energia výmennej interakcie sa s časom takmer nemení. Štúdium spinovej korelačnej funkcie preukázalo existenciu ďalekodosahového usporiadania v prípade malých polí, krátkodosahového usporiadania pre stredné hodnoty poľa ako aj neusporiadaný stav u silných polí. A tak, s výnimkou malej intenzity poľa, výmenná interakcia nikdy „nezvíťazí“ v súboji s interakciou s lokálnym poľom o ustanovenie ďalekodosahového usporiadania. Na lokálne pole sa totiž dá nazerať ako na dodatkový susedný spin, ktorý disponuje stabilným príspevkom podporujúcim orientáciu spinu v smere poľa. Časový vývoj veľkosti najväčšej domény preukázal taktiež mocninový charakter závislosti s exponentom $\mu(\eta_0)$, ktorý exponenciálne klesal v závislosti na intenzite poľa. V prípade malých polí sme odhalili vývoj najväčšej domény prebiehajúci v dvoch časových režimoch s rôznymi exponentmi rastu. Celkovo sme zaznamenali tri exponenty mocninových závislostí - $\beta(\eta_0)$, $\alpha_\Omega(\eta_0)$ a $\mu(\eta_0)$, ktoré vykazovali exponenciálny pokles s rastúcou intenzitou, avšak ich hodnoty sa významne líšia. Najrýchlejšie klesá exponent rastu veľkosti najväčšej domény a najpomalšie exponent rastu magnetizácie. Zaujímavú informáciu o veľkostiach ostatných domén v systéme v neskorých časoch nám dalo porovnanie veľkostí prvej a druhej najväčšej domény. Pre malé polia zaberá najrozsiahlejšia doména takmer celú mriežku, no so zvyšujúcou sa hodnotou intenzity poľa sa veľkosti prvých dvoch najväčších domén k sebe približujú.

V súčasnej štúdii boli použité priestorovo nekorelované náhodné polia. Dá sa však očakávať že vnesenie krátkodosahových priestorových korelácií do náhodných polí ovplyvní správanie sa systému. Charakter pôsobenia takýchto náhodných polí s rôznymi typmi korelačných funkcií bude predmetom ďalšieho nášho skúmania.

Literatúra

[1] Y. Imry and S. K. Ma, Phys. Rev. Lett 35 , 1399 (1975).
[2] S. Fishman and A. Aharony, J. Phys. C 12, L729 (1979).
[3] J. L. Cardy, Phys. Rev. B 29, 505 (1984).
[4] G. Grinstein and D. Mukamel, Phys. Rev. B 27 , 4503 (1983).
[5] C. Frontera and E. Vives, Phys. Rev. E 59, R1295 (1999).
[6] J. Bricmont and A. Kupiainen, Phys. Rev. Lett 59 , 1829 (1987).
[7] S. R. Anderson, Phys. Rev. B 36 , 8435 (1987).
[8] E. T. Gawlinski, K. Kaski, M. Grant, and J. D. Gunton, Phys. Rev. Lett. 53 , 2266 (1984).
[9] D. Chowdhury and D. Stau□er, Z. Phys. B 60 , 249 (1985).
[10] H. Hoshen and R. Kopelman, Phys. Rev. B 14 , 3438 (1976).
[11] S. Sinha and P.K. Mandal, Phys. Rev. E 87, 022121 (2013).
[12] J. Esser, U. Nowak and K.D. Usadel, Phys. Rev. B 55, (1997) , vol. 9, p. 5866-5872.
[13] M. E. J. Newman and G. T. Barkema (eds.), Monte Carlo Methods in Statistical Physics (Clarendon, Oxford, 1999).
[14] N. Metropolis et. al., J. Chem. Phys. 21 , 1087 (1953).
[15] A. J. Bray, Adv. Phys. 43 , 357 (1994).

[16] D. Stauffer, C. Hartztein, K. Binder and A. Aharony, Phys. Condens. Matter 55 , 325 (1984).
[17] M. Grant and J. D. Gunton, Phys. Rev. B 29 , 1521 (1984).
[18] J. Villain, Phys. Rev. Lett 52 , 1543 (1984).
[19] G. Grinstein and J. R. Fernandez, Phys. Rev. B 29 , 6389 (1984).

Tvorba efektívnych otázok na e-hlasovanie

Katarína Karľová[1]*Jozef Hanč[1]†

Školiteľ: Jozef Hanč[1]

Oddelenie didaktiky fyziky, Ústav fyzikálnych vied, PF UPJŠ, Park Angelinum 9, 040 01 Košice

Abstrakt: Elektronické hlasovanie (e-hlasovanie) patrí dnes vo výučbe fyziky medzi silné a efektívne nástroje. Hlavnými súčasnými problémami slovenského učiteľa je zabezpečenie vhodnej digitálnej technológie pre e-hlasovanie, nedostatok kvalitných otázok pre e-hlasovanie a nedostatočná pedagogická pomoc v ich využívaní, modifikácii alebo tvorbe. V tomto príspevku sa zaoberáme aktuálnymi možnosťami využitia smartfónov spolu s internetom ako dostupnej alternatívy súčasných systémov e-hlasovania na našich školách. Na konkrétnych príkladoch a vyučovacej metóde nazývanej otázkami riadená výučba analyzujeme niekoľko techník modifikácie a tvorby efektívnych otázok na e-hlasovanie. Súčasne demonštrujeme štyri základné mechanizmy — zameranie pozornosti študentov, stimuláciu poznávacích procesov, spätnú väzbu a vyjadrovanie a konfrontáciu myšlienok počas diskusie — pomocou ktorých možno dosiahnuť ciele sledované danou otázkou.

Kľúčové slová: e-hlasovanie, digitálne technológie, mobilné telefóny, Polleverywhere, tvorba otázok

1 Úvod

Elektronické hlasovanie (e-hlasovanie), veľmi podobné tomu, ktoré sa využíva v parlamente pri hlasovaní o zákonoch, sa v zahraničí ako efektívna vzdelávacia technológia [Redish, 2003, Banks, 2006, Bruff, 2009] s adekvátnymi modernými vyučovacími metódami [Mazur, 1997, Crouch and Mazur, 2001, Beatty et al., 2006, Deslauriers et al., 2011] využíva už viac ako 20 rokov.

Na Slovensku sa táto digitálna technológia dostala do širšieho povedomia učiteľov až po roku 2006. Prvotným zdrojom informácií a pilotného zoznámenia, predovšetkým vo Východoslovenskom regióne, sa stal projekt grantovej agentúry KEGA *Interaktívne prednáškové demonštrácie a Peer Instruction - nové interaktívne metódy zvyšujúce efektívnosť prednáškovej formy vzdelávania*, ktorý prebiehal na Slovensku v rokoch 2006-2008 na PF UPJŠ v Košiciach.

V oveľa širšej miere s pôsobnosťou na celom Slovensku sa okrem iného e-hlasovaniu ako jednej z moderných digitálnych technológií venovali a venujú národné projekty *Modernizácia vzdelávacieho procesu na základných školách a stredných školách* prebiehajúce v rokoch 2009-2013. Zástupcovia z radov učiteľov z takmer každej ZŠ a SŠ na Slovensku boli v týchto projektoch zaškolení v ovládaní technologickej stránky e-hlasovania, pričom z didaktického hľadiska sa dozvedeli, že e-hlasovanie je efektívnym nástrojom formatívneho hodnotenia, interaktivity a okamžitej spätnej väzby.

Z pohľadu slovenského učiteľa fyziky, ale aj iných prírodovedných alebo humanitných predmetov, sa s používaním e-hlasovania vo výučbe vynárajú tri hlavné problémy.

Technológia e-hlasovania. Prvým, základným problémom je dostupnosť samotnej technológie e-hlasovania, ktorej zabezpečenie nie je finančne jednoduché a aj keď sa nájdu školy, ktoré majú hlasovacie systémy, tak tie sú len v jednotlivých kusoch. Preto prvou oblasťou, ktorou sme sa rozhodli zaoberať je preskúmanie najnovších a najdostupnejších možností, ako si zadovážiť e-hlasovací systém do triedy.

Zbierky otázok. Druhý, špecifický problém slovenského učiteľa spočíva v tom, že nemá k dispozícii dostatok kvalitných otázok, ktoré by boli dostupné v slovenskom jazyku. Výsledky doterajšej praxe v oblasti použitia e-hlasovania pritom jasne ukazujú, že jedným z kľúčových faktorov efektívnosti a úspešnosti je dostatok kvalitných otázok. V tejto oblasti sme sa rozhodli rozšíriť existujúce preložené sady otázok na e-hlasovanie.

Metodický postup. Tretím, najzávažnejším problémom, nielen slovenského učiteľa, je to, že existujúce učebnice a zbierky otázok a problémov [Mazur, 1997, Moore, 2003, Christian and Belloni, 2003, O'Kuma et al., 2003] sú len čiastočnou pomocou pre začiatočného používateľa e-hlasovania, pretože zvyčajne neobsahujú aj adektvátny metodický postup, ako ich efektívne používať, alebo v prípade potreby modifikovať, resp. vytvárať.

*katarina426@post.sk

†jozef.hanc@upjs.sk

Našimi výsledkami v oblasti prvého problému – Technológia e-hlasovania – sa zaoberá nasledujúca druhá sekcia tohto článku, kde popisujeme dostupné digitálne technológie pre e-hlasovanie, využívajúce smartfóny ako nástroje hlasovania a službu Polleverywhere ako softvér na spracovanie dát. Tretia sekcia predstavuje zhrnutie nášho štúdia v oblasti metodických postupov, resp. didaktickej teórie pre identifikáciu, modifikáciu a tvorbu efektívnej otázky s jej vysvetlením na konkrétnych príkladoch. V štvrtej sekcii sú predstavené existujúce preložené zbierky efektívnych otázok na e-hlasovanie v slovenskom a českom jazyku, ktoré sme rozšírili o sadu ďalších. Posledná piata sekcii je stručnýn zhrnutím spolu s prínosmi našej práce.

2 Digitálne technológie pre e-hlasovanie

S tvorbou efektívnych otázok bezprostredne súvisí technická stránka vytvárania otázok. Pod technickou stránkou máme na mysli, že používateľ e-hlasovania by mal byť oboznámený s tým, aké možnosti pri tvorbe otázky dáva samotná technológia pre e-hlasovanie. Naučiť sa ovládať technológiu je pritom najľahšia časť na ceste v úspešnom a efektívnom používaní e-hlasovania.

Z pohľadu histórie[Končelová, 2010] môžeme vývoj a aplikáciu e-hlasovania vo vzdelávaní do roku 2009 rozdeliť podobne ako vývoj našej civilizácie do viacerých etáp a to na obdobie

(1) „praveku“ alebo prvých pokusov s elektronickým hlasovaním,

(2) „starovekých“ hlasovacích systémov a ich „stredovekého“ použitia,

(3) „renesancie“ elektronického hlasovania v podobe systému ClassTalk,

(4) „priemyselnej revolúcie“ bezdrôtových hlasovacích systémov súčasnosti.

2.1 Využitie mobilných telefónov vo vzdelávaní

Štandardne sa dnes na našich školách používa bezdrôtové hlasovacie vybavenie (obdobie „priemyselnej revolúcie“), ktoré pozostáva z tzv. klikerov–hlasovacích zariadení, USB prijímača dát a softvéru, ktorý dáta spracuje a zobrazí. Študenti prostredníctvom klikerov zvolia – hlasujú správnu odpoveď a softvér spracuje výsledky v podobe histogramu. Toto štandardné vybavenie je však finančne náročné, málo ktorá škola si ho môže vôbec dovoliť, nie to ešte zakúpiť na každú učebňu. Navyše, na jeho údržbu je nutné vynaložiť ďalšie finančné prostriedky a vyhradiť si potrebný čas (napr. výmena bateriek do klikerov každých pol roka). Tieto prekážky často odradia učiteľov zapojiť e-hlasovanie do ich výučby.

Vzhľadom na „exponenciálny“ pokrok a rozvoj digitálnych technologií, ktoré zasahujú do každej oblasti ľudskej činnosti, aj v oblasti e-hlasovania došlo hlavne v posledných troch rokoch k významnej zmene, ktorú môžeme označiť ako éru „novoveku“ alebo aplikácie bežnej spotrebnej elektroniky.

Preto ako jedno z riešení sa ukazuje využitie bežného „inteligentného“ mobilného telefónu (smartfónu), ktorý dnes vlastní takmer každý žiak. Vďaka smartfónu sa tak dostávame k alternatíve hlasovacieho systému, kde sa mobily stávajú klikermi (omnoho lepšími ako samotné klikery), rozhranie Wi–fi nahrádza USB prijímač a softvérom sa stáva vhodná webová služba, ktorá dáta spracuje.

Pre mnoho učiteľov je použitie mobilov nepredstaviteľné, pretože s mobilmi majú na vyučovaní len negatívne skúsenosti. Tieto skúsenosti sa však dajú odstrániť dodržiavaním jasne stanovených pravidiel a používania mobilov a dôsledkov ich porušenia (napr. podpísaním dohody medzi učiteľom a študentmi a rodičmi).

Povolenie mobilných telefónov na vzdelávacie účely prináša učiteľovi ďalšie benefity, pretože v súčasnosti sú to tak výkonné zariadenia, že okrem e-hlasovania z pedagogického hľadiska poskytujú viacero možností využitia. Všetky základné možnosti použitia mobilov možno zhrnúť do týchto oblastí:

1. Nástroje pre okamžitú spätnú väzbu - hlasovacie zariadenia (tzv. „superklikery“)
2. Nástroje na priame generovanie, zbieranie a analyzovanie dát (vedecké dáta, fotografie, videá, zvukové nahrávky, zdroje zvuku) v triede i mimo nej
3. Brány do sveta mimo triedy (Google Jokej, vzdialený experiment, databázy)
4. Mobilné platformy pre poskytovanie obsahu (poznámky, videá, texty, hry...)

5. Nástroje na komunikáciu a spoluprácu (Gmail, Google+, SMS, Hlasová schránka, Google docs, sociálne záložky, ...)

V nasledujúcom texte rozoberieme v krátkosti prvé dve z týchto možností (viac v práci [Karľová, 2013]).

Mobil ako superkliker

Mobilný telefón môžeme použiť ako superkliker– hlasovacie zariadenie, ktoré je bezdrôtové a ľahko prenosné. Školu nestojí nič, pretože študenti si ho na vyučovanie nosia sami. Je to zariadenie, s ktorým sú študenti oboznámení, dokážu ho ovládať bez našich ďalších pokynov.

Ak s klasickým klikerom môžu študenti hlasovať len na jeden, či dva typy otázok (otázku s výberom odpovedí alebo pravda-nepravda), na inteligentných mobiloch vďaka dotykovému displeju môžu okrem toho nakresliť smer vektora, bod znázorňujúci polohu nejakého objektu, načrtnúť prstom výsledný graf, vložiť výraz, text, či určiť poradie. Vďaka tomu môžu byť otázky tvorené rôznymi spôsobmi, ktoré poskytujú širšie možnosti okamžitej spätnej väzby (obr.1).



Obr. 1: Formy otázok pre smartfón. (Obrázok prevzatý z www.learningcatalytics.com)

Mobil ako vedecký prístroj

Mobil môže slúžiť ako meracie zariadenie. Dokážeme ním napr. merať čas (jeho jednoduchými stopkami alebo prostredníctvom nahratia videa, alebo audio nahrávky, či využitím jeho fotosenzora ako fotobrány). Pomocou jeho senzorov dokážeme mobilom merať aj iné fyzikálne veličiny ako zrýchlenie, tlak, teplotu. Okrem toho aj magnetické pole, osvetlenie, či zvukovú hlasitosť v triede. Dokážeme ním zozbierať rôzne dáta, spracovať ich a následne analyzovať.

Z pohľadu technológií je v súčasnosti pre aktívne bádanie vo fyzike dôležité počítačom podporované laboratórium (PPL). Aj v tomto prípade je pre školy získanie pomôcok PPL finančne náročné a často disponujú len jedným kusom senzora na meranie danej fyzikálnej veličiny. V takom prípade sa mnohokrát stáva, že študenti nemôžu aktívne pracovať s týmito pomôckami a učiteľ ich predvedie sám alebo s pomocou jednotlivcov len demonštračne.

Ak je študent pasívny, stratí záujem o celý pokus. Jedným z riešení tejto situácie je aspoň myšlienkovo zapojiť študentov do demonštrácie pomocou vyučovacej metódy *Interaktívnych demonštrácií* (viď napr. [Sokoloff and Thornton, 2006, Dutko, 2009]). Druhé riešenie ponúkajú mobilné telefóny, ktoré možno prepojiť s PPL pomocou softvéru LoggerPro od firmy Vernier a dostať tzv. systém prepojeného vedeckého laboratória, ako je to na obrázku (obr. 2). S mobilným telefónom má študent možnosť pozrieť si výsledky „z prvého radu“ na svojom displeji bez toho, aby mu niekto stál vo výhľade. Môže aktívne pracovať s danými dátami, analyzovať a interpretovať.



Obr. 2: Ukážka prepojeného vedeckého laboratória. (Obrázok prevzatý z www.vernier.com)

2.2 Webová služba Poll Everywhere

Na spracovanie výsledkov e-hlasovania potrebujeme softvér, ktorý to umožní. Vhodným prostredím je služba PollEverywhere. V súčasnosti ponúka www.polleverywhere.com svoje služby zadarmo do tried pre 40 študentov. Na tejto stránke môže jednoducho len niekoľkými kliknutiami, vytvoriť otázku pred alebo počas hodiny. Výsledky hlasovania sa ihneď zobrazia v prehliadači vo forme stĺpcového grafu.

V práci [Vasziová, 2011] je uvedené, ako sa s touto službou narábalo a aké možnosti ponúkala v roku 2010. Služba PollEverywhere však prešla niektorými inováciami. Preto v práci [Karľová, 2013] sú podrobne zmapované súčasné možnosti tejto služby, pričom je detailne popísaný postup registrácie, vytvárania a administrácie otázok.

Medzi hlavné inovácie patrí možnosť zobraziť otázku na hlasovanie aj s možnosťami odpovede priamo na mobiloch študentov pomocou systému vlastnej živej stránky (ľahko vytvoriteľnej jedným kliknutím v danej službe) ako je to obr. 3. Vďaka



Obr. 3: Hlasovanie cez mobilný telefón

tomu nie je nutné používať projektor, čo znižuje technickú aj finančnú náročnosť e-hlasovania.

Ďalšou je napr. jednoduchá tvorba slovných mračien, export otázok do prezentačných softvérov ako Powerpoint, Prezzi, resp. uloženie linky na vlastný blog, či stránku.

E-hlasovanie pomocou smartfónov a Polleverywhere sme úspešne otestovali v tomto letnom semestri v kurze fyziky pre biológov na PF UPJŠ v Košiciach na prednáškach konaných v rozsahu 2 hodiny týždenne.

3 Didaktický pohľad na ciele a tvorbu otázok

Oveľa náročnejšou a dôležitejšou je didaktická stránka práce s otázkami, ktorá zahŕňa zručnosti ako správne identifikovať, modifikovať, alebo vytvoriť otázku, aby to zodpovedalo situácii v triede. Otázku na e-hlasovanie totiž nemožno použiť vo výučbe efektívne, pokiaľ nie je jasné, aké ciele má plniť a čo ňou chceme dosiahnuť. Bez tejto znalosti sa nepodarí využiť výhody otázok a často sa nevedomky sabotuje ich účinok.

3.1 Pedagogický účel otázok a mechanizmy jeho dosiahnutia

Výsledky doterajšej praxe [Banks, 2006, Bruff, 2009, Beatty et al., 2006] v oblasti použitia e-hlasovania jasne ukazujú, že jedným z kľúčových faktorov efektívnosti a úspešnosti je kvalitná otázka. Efektívne otázky na e-hlasovanie sa pritom líšia od otázok vhodných na domáce úlohy alebo na úlohy na cvičenia, či písomku.

Ďalej sa ukazuje, že vytváranie vlastných kvalitných otázok je ďaleko zložitejšie, ako by sa na prvý pohľad zdalo. Podľa článku [Beatty et al., 2006] na to, aby učiteľ dokázal tvoriť otázky na e-hlasovanie je nutné zvládnuť niekoľko zručností, ktoré podľa náročnosti možno zoradiť následovne:

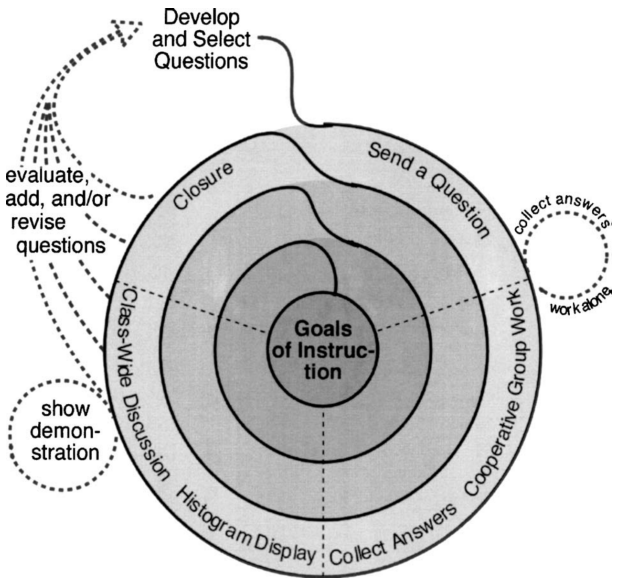
1. porozumenie, čo je to efektívna otázka a ako ju použiť
2. identifikácia vhodnej otázky pre svoje potreby
3. modifikácia jestvujúcich otázok
4. samostatná tvorba otázok

V tejto časti podrobnejšie uvedieme didaktickú teóriu pre prácu s otázkami podľa práce [Beatty et al., 2006], pretože skôr ako sa učiteľ dostane k vytvoreniu svojej prvej otázky vhodnej na e-hlasovanie, mal by zvážiť, na čo mu bude slúžiť daná otázka, aké ciele sleduje, akú má úlohu, a prostredníctvom ktorých mechanizmov to môže dosiahnuť.

Úloha otázok

Vo vyučovacom modeli zvanom otázkami riadená výučba, má kladenie otázky cez e-hlasovanie väčšiu úlohu než v tradičnej výučbe. Ide o formu tzv. obrátenej výučby, kde otázky predstavujú samotné jadro výučby, pričom určujú, ako bude prebiehať vyučovanie, riadia jeho tempo.

Pri obrátenej výučbe je naším primárnym cieľom v triede nie prednáška, či prezentácia informácií. Usilujeme sa skôr pomôcť študentom preskúmať, organizovať, integrovať a rozšíriť ich znalosti, zručnosti,



Obr. 4: Cyklus otázok v otázkami riadenej výučbe. (Obrázok prevzatý z [Beatty et al., 2006])

poznanie. Otázkami sa snažíme pomôcť študentovi v tom, čomu nerozumie.

Výklad a prezentácia informácií je pri obrátenej výučbe mimo triedy a študenti pred vyučovacou hodinou čítajú učebný text, ktorý sa týka preberanej témy, alebo pozerajú krátke video, v ktorom sa oboznámia so základnými pojmami, vďaka čomu ušetríme na hodine drahocenný čas a môžeme sa venovať vyššie uvedeným činnostiam.

Aktivita v triede pri otázkami riadenej výučbe je organizovaná pomocou cyklu otázok obr. 4. Cyklus začneme premietnutím otázky alebo problému triede, bez toho, aby sme otázku komentovali, a ponecháme študentom niekoľko minút na diskutovanie v malých skupinách.

V rámci skupiny študenti diskutujú a argumentujú rôzne názory, predstavy, intuíciu, vypracujú riešenia. Potom elektronicky zahlasujú. Nasleduje zobrazenie stĺpcového grafu odpovedí. Bez toho, aby sme odhalili, ktorá odpoveď je správna, moderujeme diskusiu v rámci celej triedy. Požiadame dobrovoľníkov, aby vysvetlili odôvodnenie, ktoré sa skrýva za ich rozhodnutím, pre ktorú voľbu hlasovať. S dobrým riadením tohto procesu, to môže viesť k horlivej výmene názorov a argumentov medzi študentmi.

Počas diskusie na základe myslenia študentov zistíme, či môže nasledovať všeobecný záver, experiment, stručná mini prednáška, súvisiaca otázka na e-hlasovanie, alebo čokoľvek iné, čo je nutné k uzavretiu danej témy. Vhodne vybrané komentáre majú výrazný vplyv v učení sa študentov. Typicky opakujeme celý cyklus tri alebo štyrikrát za jednu vyučovaciu hodinu (45 minút).

Ciele otázok

Správne použitie otázky v triede je spojené s tým, že učiteľ si vedome uvedomuje, čo ňou sleduje. Inými slovami otázka musí sledovať pedagogické ciele. Podľa [Beatty et al., 2006] sa pedagogický účel alebo cieľ otázky premieta do troch rovín. Otázka by mala plniť obsahový cieľ, procesný (poznávací) cieľ a metakognitívny cieľ.

Obsahový cieľ
Obsahový cieľ otázky je určený odpoveďou na otázku: *Akú časť témy chceme objasniť?* Tento cieľ je najviditeľnejší a pre začiatočníka je najjednoduchšie pochopiť práve tento cieľ otázky.

Je potrebné, aby bola otázka zameraná na dôležité pojmy. Pretože otázkami riadená výučba nemôže vysvetliť všetko v predmete v čase vymedzenom pre vyučovaciu hodinu. Z toho dôvodu sústredíme opakovaný cyklus otázok na fundamentálne pojmy, základné myšlienky, základné princípy, zásadné rozdiely, súvislosti, aby si ich žiaci ujasnili, utriedili a pochopili ich. S hlbokým pochopením týchto vecí sú študenti už schopní a pripravení učiť sa sami pokročilejšie témy, resp. vypracovať súvisiace domáce úlohy.

Procesný cieľ
Procesný alebo poznávací cieľ otázky je určený odpoveďou na otázku: *Aké poznávacie procesy chceme, aby si študenti precvičili?* Medzi základné poznávacie procesy patrí: zapamätanie, porozumenie, aplikácia, analýza, schopnosť hodnotiť a tvoriť. Prednáška rozvíja zvyčajne len ten najnižší kognitívny proces zapamätanie, zatiaľ čo otázkami riadenou výučbou môžeme rozvíjať všetky efektívnejšie.

V prípade fyziky možno základné poznávacie procesy, alebo myšlienkové pochody rozviesť detailnejšie. Ukazuje sa, že úspešní vedci, fyzici používajú rôzne myšlienkové pochody (podoby fyzikálneho myslenia), z ktorých najdôležitejšie podľa článku [Beatty et al., 2006] prehľadne zhŕňa nasledujúca tabuľka (tab. 1).

Otázky zamerané na procesný cieľ by mohli byť charakterizované prostredníctvom precvičovania týchto podôb fyzikálneho myslenia.

Rozhodujúca aktivita pre študentov, ktorá zahr-

Najdôležitejšie podoby fyzikálneho myslenia

Základné:
Hľadať alternatívne interpretácie
Porovnávať a dať do protikladu
Vysvetliť, popísať a znázorniť
Predpovedať a pozorovať
Aplikovať na ďalšiu situáciu
Monitorovať a zdokonaľovať komunikáciu

Pokročilé:
Tvoriť viacero riešení
Kategorizovať a klasifikovať
Diskutovať, sumarizovať a modelovať
Urobiť stratégiu, overiť a naplánovať
Pouvažovať a ohodnotiť
Premýšľať o myslení a učení sa

Tabuľka 1: Klasifikácia podôb fyzikálneho myslenia

ňuje a integruje podoby fyzikálneho myslenia je analýza: Porozumenie situácie identifikovaním kľúčových pojmov a vzťahov a ich zdôvodňovanie. Praktická analýza rozvíja konceptuálne porozumenie a spája ho so schopnosťou úspešne riešiť problém.

Metakognitívny cieľ
Metakognitívny cieľ otázky je určený odpoveďou na otázku: *Aké presvedčenia, názory o učení sa a práci vo fyzike chceme posilniť?*

Niektoré otázky, ktoré tieto ciele zahŕňajú, sú nasledovné: Majú študenti správnu predstavu o tom, čo znamená pochopiť veci vo fyzike? Je fyzika o zapamätaní a uplatňovaní pravidiel a rovníc alebo o zdôvodňovaní a pochopení zmyslu javov vo svete okolo nás? Mali by študenti študovať a pracovať samostatne, alebo je učenie sa spoluprácou a sociálnym procesom? Mali by študenti sústrediť pozornosť na detaily alebo ju zamerať na hlavnú myšlienku? Má si študent na prvýkrát všetko perfektne uvedomovať a rozumieť, alebo je nutné viacnásobné (špirálové) učenie?

Odpovede na tieto otázky sú zrejmé pre mnohých učiteľov, ale nie pre študentov. Tieto otázky je potrebné zapojiť do vyučovacieho procesu, pretože čím viac si študenti uvedomujú metakognitívny cieľ, tým viac sú schopní sa naučiť a pochopiť nové poznatky. Najtypickejšia otázka je, či študent vie, čo znamená rozumieť fyzike. Či má dobrú predstavu, o tom, čo znamená, že má dobre zorganizované vedomosti z fyziky. Pokiaľ tieto otázky nie sú súčasťou vyučovania, tak je menej efektívna otázka na e-hlasovanie, ale aj samotná výučba.

Mechanizmy pre dosiahnutie cieľov

Autori článku [Beatty et al., 2006] identifikovali aj to prostredníctvom akých mechanizmov dosiahneme naplnenie vyššie uvedených cieľov otázky. Ide o štyri hlavné navzájom doplňajúce mechanizmy:

- upriamenie pozornosti študentov na predloženú otázku
- stimulácia poznávacích procesov
- okamžitá spätná väzba
- vyjadrovanie a konfrontácia myšlienok počas diskusie

Prvé dva mechanizmy môžu byť adresované týmito dvomi otázkami: „Čo si študenti myslia o položenej otázke? Ako o tej otázke premýšľajú?“ Otázka môže nasmerovať pozornosť študentov na konkrétne fakty, rysy, myšlienky, konflikty či vzťahy. Práve otázkou upozorníme na to, aby si študenti uvedomili dôležité veci. Otázka môže stimulovať študentov k precvičeniu kognitívnych procesov: osvojenie podôb fyzikálneho myslenia a hlavne precvičovanie analýzy.

Tretí a najočividnejší mechanizmus, ktorým môže otázka na e-hlasovanie slúžiť z didaktického hľadiska, je okamžitá spätná väzba o odpovediach študentov. Pozretím histogramu odpovedí sa študenti učia vlastnému porozumeniu. Pokiaľ táto informácia nie je iba zaznamenaná, ale aktuálne použitá učiteľom alebo študentmi k vytvoreniu ďalšej diskusie, potom použitie systému odpovedí predstavuje formatívne (priebežné) hodnotenie k tomu, aby sa učenie sa študentov zlepšilo, nie len posúdilo.

Štvrtým a najdôležitejším mechanizmom je diskusia. Diskusia, ktorú sprevádza použitie otázky v rámci malej skupiny pred hlasovaním a v rámci celej triedy po zobrazení histogramu je kľúčová k tomu, aby bola otázkami riadená výučba efektívna. Jeden dôvod je ten, že vysloviť nahlas postrehy, predpoklady, očakávania a pochopenie je pre študentov veľmi cenné. Myslenie študentov je často nepresné, hmlisté a nejednotné. Ak študent musí konvertovať myslenie do jazyka, resp. jazyka fyziky, tak nedostatky jeho myslenia sa stanú evidentnými a môžu tak byť odstránené. Ďalším dôvodom toho, že diskusiou dosiahneme efektívnejšiu výučbu, je ten, že diskusia zahŕňa

konfrontáciu rôznych postrehov, rôzneho analyzovania a rôznych záverov. Povedať študentom ako myslieť je notoricky neefektívne, ale vyvolávanie ich premýšľania a konfrontácie s alternatívnymi riešeniami má ďaleko lepší efekt.

Diskusia v celej triede učiteľovi odhalí oveľa viac o porozumení a nedorozumeniach študentov ako samotný histogram. Dôvodom toho je, že z jedného histogramu učiteľ nezistí detailne, ako študenti premýšľali. Často sa totiž môže stať, že študenti síce zahlasujú správne, ale správnu odpoveď si odvodili na základe nesprávnych argumentov. Použitím diskusie sa učiteľ aktívne informuje o tom, aká je povaha príčiny chýb pri premýšľaní študentov.

3.2 Aplikácia teórie prostredníctvom rôznych techník a konkrétne príklady

V tejto sekcii uvedieme základné špeciálne techniky (tab. 2), ktorými v praxi dosiahneme aktivovanie spomenutých mechanizmov. Najprv si tieto techniky všeobecne popíšeme a v ďalšej sekcii ilustrujeme na konkrétnych príkladoch. Techniky boli rozdelené do skupín, podľa toho, ktorý zo štyroch mechanizmov stimulujú.

V stručnosti popíšeme niektoré z techník uvedených v tabuľke. Viac možno nájsť v [Beatty et al., 2006, Banks, 2006], resp. v práci [Karľová, 2013].

Techniky tvorby otázok na e-hlasovanie

Upriamenie pozornosti študenta:
Odstrániť nepodstatné
Porovnávať a dať do protikladu
Rozšíriť kontext
Použiť známe otázky v iných situáciách
Nachytať a vrátiť sa späť
Podpora diskusie:
Kvalitatívne otázky
Analyzovať a zdôvodňovať
Otázky s viacero obhájiteľnými odpoveďami
Vyžadovať nevypovedané predpoklady
Zámerné nejednoznačnosti
Navodenie miskoncepcie
Stimulácia kognitívnych procesov:
Interpretovať reprezentácie
Porovnávať a dať do protikladu
Rozšíriť kontext
Zistiť množinu alebo podmnožinu
Zoradiť rôzne varianty
Odhaliť lepší spôsob riešenia
Vytvoriť vhodnú stratégiu
Zahrnúť vonkajšie informácie
Vynechať potrebné informácie
Formatívne hodnotenie:
Odpovede odhaľujúce neporozumenia
Odpoveď: žiadne z vyššie uvedených

Tabuľka 2: Zoznam základných techník

Techniky pre upriamenie pozornosti študenta

Odstrániť nepodstatné

Touto technikou máme na mysli odstránenie niečoho nedôležitého (podľa toho, na aký pedagogický účel chce učiteľ zamerať). Napríklad otázka je oslabená tým, že ak obsahuje kvantitatívne výpočty, tak zvyčajne to odvráti pozornosť študentov na podstatný fyzikálny princíp a rozptýli ich v tom, ktoré poznatky majú využiť.

Porovnávať a dať do protikladu

Tým, že študenti porovnávajú dve veci, ich pozornosť bude prirodzene zameraná na rozdiely medzi nimi. Túto techniku môžeme realizovať rôznymi spôsobmi. Prvým spôsobom je položiť otázku tak, aby študenti porovnávali niekoľko situácií. Ďalším spôsobom je to, že opíšeme situáciu a opýtame sa, aký vplyv bude mať zmena niektorého z aspektov. Môžeme tiež položiť rovnaké otázky pre rôzne situácie.

Rozšíriť kontext

Zadaním známej otázky v neznámej situácii sa pozornosť študentov upriami na to, v čom sa nová situácia odlišuje od známej a na význam týchto rozdielov. Študenti rozšíria svoje porozumenie pojmu a tiež rozšíria svoj pohľad na vec.

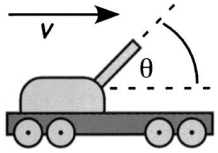
Nachytať a vrátiť sa späť

Pri tejto technike ide o položenie dvoch súvisiacich otázok. Prvá je pasca: otázka vytvorená na to, aby sa drvivá väčšina študentov dopustila chyby a hlasovala za najatraktívnešiu nesprávnu odpoveď. Učiteľ umožní študentom odpovedať a potom sa bez akejkoľvek diskusie prejde na druhú otázku.

Druhá otázka spôsobí, že si študenti uvedomia, že sa dopustili chyby v prvej otázke. Ak sa študenti „popália“ na vlastnej chybe a objavia to, sú ďaleko viac schopní poučiť sa z toho, než akoby mali byť vopred upozornení alebo informovaní, čoho sa dopustili.

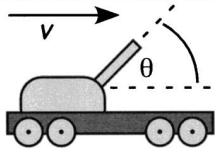
Ak sa opýtame otázku, ktorá je na obr. 5 a), veľa

a) Delo pripojené k vlečke vystrelí v smere pohybu vlečky. Pod akým uhlom nad horizontom by malo vystreliť, aby projektil pristál čo najďalej od miesta, odkiaľ bol vystrelený?



1) oveľa väčším ako 45° 4) mierne pod 45°
2) mierne nad 45° 5) oveľa menším ako 45°
3) presne 45° 6) nemožno určiť

b) Delo pripojené k vlečke vystrelí v smere pohybu vlečky. Pod akým uhlom nad horizontom by malo vystreliť, aby projektil pristál čo najďalej od dela?



1) oveľa väčším ako 45° 4) mierne pod 45°
2) mierne nad 45° 5) oveľa menším ako 45°
3) presne 45° 6) nemožno určiť

Obr. 5: Použitie techniky nachytať a vrátiť sa späť

študentov bude omylom odpovedať 45 stupňov. Ak následovne predložíme otázku na obr. 5 b) veľa študentov si uvedomí, že odpoveď práve na túto otázku je 45 stupňov. Vďaka tejto otázke prehodnotia, ako sa táto otázka líši od tej prvej, a uvedomia si, že neuvažovali rýchlosť kanóna vzhľadom na zem. V skutočnosti pri odpovedi na prvú otázku, nevedomky odpovedali na tú druhú. A pomocou druhej si uvedomia, že sa treba vrátiť späť a opraviť odpoveď na prvú otázku.

Techniky pre stimuláciu kognitívnych procesov

Špecifické techniky tvorby otázok pre povzbudenie kognitívnych procesov sú rôznorodé, ako spektrum podôb fyzikálneho myslenia, na ktoré sú zamerané. Mnoho študentov sa tak sústreďuje na algebraickú reprezentáciu fyzikálnych pojmov, vzťahov a situácií, že nevedia oceniť užitočnosť alternatívnych reprezentácii ako sú grafy a vektorové diagramy alebo verbálne opisy vo fyzike a mimo nej.

Otázky, ktoré vyžadujú od študentov alternatívne reprezentácie sú užitočné na zníženie venovania pozornosti vzorcom a sú užitočné aj na to, aby rozvinuli podobu fyzikálneho myslenia „hľadať alternatívne výklady“. Technika je v otázke zakódovaná tým, že potrebná informácia na zodpovedanie je ukrytá v alternatívnej reprezentácii alebo si žiada použitie alternatívnej reprezentácie. Napríklad popis pohybu objektu grafom v otázke môže vyžadovať zistiť informáciu z grafu, ako je sklon alebo obsah pod krivkou. Podobne je vhodné žiadať o verbálny opis zmyslu matematických rovníc.

Odhaliť lepší spôsob je nepriama taktika na posilnenie podoby fyzikálneho myslenia „tvoriť viacero riešení“. Najprv prezentujeme otázku, ktorú študenti pravdepodobne vyriešia, no náročnou alebo zdĺhavou cestou, počas ktorej sa môžu pomýliť. Potom, počas diskusie, navedieme žiakov na oveľa elegantnejšie alebo jednoduchšie riešenie.

Vytvoriť stratégiu je technika pre posilnenie podoby fyzikálneho myslenia „urobiť stratégiu, overiť a naplánovať“. Je realizovaná tak, že prezentujeme problém a požiadame študentov, aby identifikovali prístup najvhodnejší pre dosiahnutie jeho riešenia. Táto taktika núti premýšľať študentov vyslovene o riešení problému a súbore stratégií, ktorý majú k dispozícii a nie o vzorcoch, či výpočtoch.

Zahrnúť vonkajšie informácie a *vynechať potrebné informácie* sú ďalšie techniky užitočné na rozvíjanie podoby fyzikálneho myslenia „tvoriť viacero riešení“. Nútia študentov uvažovať nad tým, ktorá informácia je nutná k zostaveniu stratégie a zároveň ponúkajú iný pohľad. Premýšľajú o otázke kritickejšie, pretože nie každá informácia poskytuje presne to, čo je potrebné na vyriešenie.

Techniky pre použitie spätnej väzby ako formatívneho hodnotenia

Tretím a hlavným mechanizmom, prostredníctvom ktorého otázky môžu plniť ich stanovené ciele, je poskytnutie okamžitej spätnej väzby učiteľovi a študentom cez histogram odpovedí. Na to, aby histogram poskytol učiteľovi čo najužitočnejšiu informáciu, by mali byť otázky tvorené tak, aby odhalili bežné chyby, či nedorozumenia (miskoncepcie), na čo je výhodná napr. technika „odpovede odhaľujúce možné neporozumenia“.

Týmto spôsobom môžeme pozrieť na histogram a rýchlo zistiť, či niektorá z nesprávnych odpovedí neprevláda. Histogram odpovedí je vo všeobecnosti najužitočnejší študentom a učiteľovi vtedy, keď je spektrum výberu študentských odpovedí široké, ako keď prevláda jedna odpoveď. Výnimkou je technika nachytať a vrátiť sa späť, keď jedna nesprávna odpoveď je dominantná.

Často je vhodné použitie odpovede: *žiadne z vyššie uvedených* alebo *nedostatok informácií* ako voľbu odpovede. Pritom ako správnu alebo najlepšiu odpoveď na otázku ju volí učiteľ dosť často, aby ju študenti brali vážne.

Techniky pre podporu vyjadrovania, konfliktov a produktívnej diskusie

Štvrtým mechanizmom naplnenia cieľov otázky je efektívna diskusia, ktorá má študentov naučiť vyjadrovať svoje myslenie, vypočuť si myslenie ostatných a riešiť odlišnosti. Poskytuje to tiež učiteľovi cennú informáciu o porozumení, zmätkoch a pokrokoch. Nie všetky otázky vedú rovno k produktívnej diskusii. Otázky, ktoré sú pre toto najužitočnejšie sa trochu líšia od tých, čo sú vhodné na písomku.

Kvalitatívne otázky sú zvyčajne lepšie na podporu vyjadrovania argumentov než kvantitatívne, pretože kvantitatívne otázky lákajú študentov do premýšľania o číslach, premenných a rovniciach, ktoré sú náročné na komunikáciu a diskusiu. Kvalitatívne otázky podporujú diskusiu z hľadiska pojmov, myšlienok a všeobecných vzťahov.

Otázky na *analyzovanie a zdôvodňovanie*, ktoré vyžadujú, aby študenti uvažovali a starostlivo sa zamysleli, podobne povedú k lepšej diskusii a hodnotnejšiemu vyjadrovaniu, ako tie, ktoré vyžadujú počítanie alebo učenie sa naspamäť.

Podobne môžeme vytvoriť otázky, ktoré *vyžadujú nevypovedané predpoklady*, alebo ktoré obsahujú *zámerné nejednoznačnosti*. Navyše podporovanie nesúhlasu a teda aj produktívnej diskusie má také výhody, že si študenti uvedomia, že v rôznych situáciách sú rôzne interpretácie, ďalej si uvedomia dôležitosť predpokladov vo fyzikálnom uvažovaní a napokon kritérií, ktoré zohľadňujú fyzici, keď vyhodnocujú predpoklady.

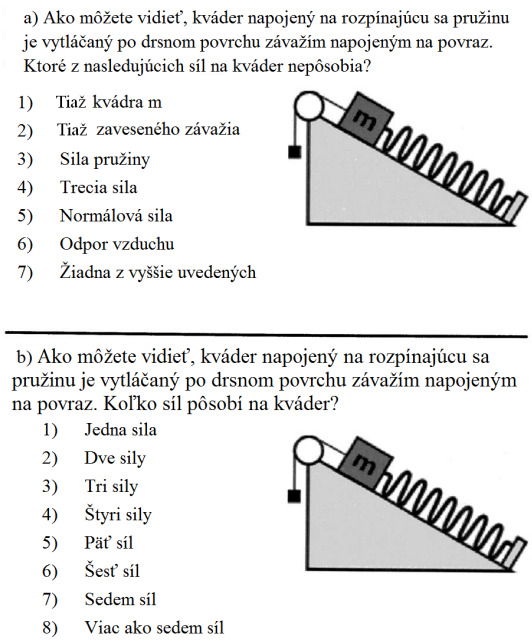
Pokúsiť sa *navodiť miskoncepciu* je ďalšou užitočnou technikou: ide o položenie otázky, ktorá zámerne zavedie študentov do takých situácií, v ktorých prejavia svoje nesprávne predstavy a porozumenie. Takéto otázky pomáhajú študentom uvedomiť si typické zlé predstavy a nepochopenia, a tým opraviť a zlepšiť svoje.

Konkrétne príklady

Na to, aby sme vedeli lepšie predstaviť a správne pochopiť, čo sa skrýva za teóriou, je žiaduce, aby sme videli jej aplikáciu v konkrétnych príkladoch (viď napr. [Beatty et al., 2006, Karľová, 2013]).

V tomto článku uvedieme jeden ilustratívny príklad týkajúci sa rozboru, resp. identifikácie síl, kde si ukážeme ako pomocou rôznych techník možno prerobiť klasickú otázku na takú, ktorá je vhodná pre otázkami riadenú výučbu.

Variant a) obr. 6 ukazuje otázku, ktorá sa zameriava na schopnosť študentov identifikovať sily na telese. Klasická úloha žiada od žiakov identifikáciu síl. Otázka naproti tomu využíva techniku navodenia miskoncepcie a jej cieľom je, aby si študenti uvedomili, že na rozdiel od gravitácie a elektromagnetických síl pôsobiacich na diaľku, sú všetky sily pôsobiace na kváder zapríčinené interakciou s iným telesom v priamom kontakte s ním.



Obr. 6: Dva varianty otázky na identifikáciu síl

Táto otázka môže byť vylepšená. Variant b) na obr. 6 je stále kvalitatívna otázka a navodzuje rovnakú miskoncepciu. Študenti však musia vymenovať sily, čím odhalia iné, možno neočakávané miskoncepcie a chyby. Otázka predstavuje použitie techniky viacero *obhájiteľných odpovedí*: Odpovede štyri až osem sú fyzikálne obhájiteľné, pretože záleží na tom, aké nevyslovené predpoklady v úlohe máme. Napr. či sa zanedbáva vztlak a odpor vzduchu, či zahŕňajú zanedbateľné, ale reálne sily ako gravitácia Mesiaca, či magnetické pole Zeme atď.

Odpoveď, ktorú si študenti vyberú, sprostredkuje informáciu o ich stupni porozumenia alebo o špecifických zlých predstavách, ktoré by mohli mať. Okrem toho, otázka slúži na to, aby stimulovala študentov premýšľať o tom, ktoré sily sú prítomné. Potom, počas celotriednej diskusie, učiteľ môže ignorovať zvolené odpovede a zaradom diskutovať o rôznych možných silách, ktorá z nich si zaslúži byť zarátaná a ktorá nie. Ďalej môže ukázať vo všeobecnosti prístup

pre identifikáciu síl na telese a osvetliť rôzne voľby a formálne dohody podieľajúce sa na identifikovaní síl.

Najsilnejším aspektom tohto variantu otázky je, že sleduje metakognitívny cieľ, že najdôležitejšie pri riešení problému je argumentovanie, zdôvodňovanie, presvedčivosť a opodstatnenie odpovede.

4 Zbierky otázok

Jedným zo základných problémov učiteľa začiatočníka v používaní e-hlasovania je nedostatok kvalitných a efektívnych otázok, ktorými sa zlepší učenie sa študentov. Vzhľadom na to, že v slovenskom jazyku, prípadne českom jazyku je síce preložených niekoľko stoviek otázok ([Vasziová, 2009, Vasziová, 2011, Končelová, 2010]) z rôznych oblastí, predsa len niektoré oblasti otázok chýbajú.

Preto sme sa rozhodli preložiť do slovenského jazyka praxou overené otázky týkajúce sa vedeckej argumentácie a rozmýšlania [Coletta and Phillips, 2005] a sadu otázok na e-hlasovanie týkajúcu sa použitia vyššej matematiky v prírodných vedách[1]. Dokopy ide o sadu 46 otázok (v prípade matematiky aj s riešeniami) a sú uvedené v práci [Karľová, 2013]. Pre získanie konkrétnej predstavy uvedieme štyri príklady (dva týkajúce sa matematiky a dva vedeckej argumentácie).

Otázka č. 1. V nádobe pestujeme populáciu baktérií. O 11:00 je v nádobe jedna baktéria. Baktéria sa rozdelí raz za jednu minútu, takže populácia sa každú minútu zdvojnásobí. O 12:00 je nádoba plná. Kedy bola nádoba do polovice naplnená?

(a) 11:01
(b) 11:15
(c) 11:30
(d) 14:45
(e) 11:59

Správna odpoveď: (e)

Vysvetlenie: Vieme, že o 12:00 je populácia v nádobe plná a že každú minútu sa populácia zdvojnásobuje. Keď pôjdeme v čase spätne, správa sa populácia „opačne“, t.j. každú minútu späť klesne populácia na polovicu. Minútu pred dvanástou (11:59) teda populácia bola polovičná ako v 12:00, t.j. do polovice nádoby, na čo sme hľadali odpoveď.

Otázka č. 2. Z vane vyteká voda, pričom objem vody V a jej hĺbka vo vani h sa menia s časom t. Čo musí platiť o $\frac{dV}{dh}$ a $\frac{dV}{dt}$?

(a) musia sa rovnať
(b) musia mať opačné znamienka
(c) musia byť záporné
(d) musia byť kladné
(e) nič z vyššie uvedených

Správna odpoveď: (b)

Vysvetlenie: S klesajúcou hĺbkou klesá objem, resp. s rastúcou hĺbkou vody rastie objem vody vo vani. Objem je teda rastúcou funkciou hĺbky. dV/dh je teda kladná. S plynúcim (rastúcim) časom klesá objem vody vo vani. Objem je klesajúcou funkciou času. dV/dt je teda záporná.

Otázka č.3. Máte dve hlinené guľôčky rovnakej veľkosti a tvaru. Obe guľôčky majú rovnakú hmotnosť. Jednu guľôčku sploštíme do tvaru koláčika. Ktoré z nasledujúcich tvrdení je správne?

1. Sploštený kúsok hliny váži viac ako guľový
2. Oba kúsky vážia rovnako
3. Guľôčka váži viac ako sploštený kúsok

pretože:

1. Sploštený kúsok pokrýva väčšiu plochu
2. Keď sa niečo sploští, tak to stratí na váhe
3. Hlina nebola pridaná ani odobraná
4. Keď sa niečo sploští, získa to na váhe

Otázka č.4. Farmár Brown pozoroval myši, ktoré žijú na jeho poli. Zistil, že každá je buď tučná, alebo chudá. Tiež mala každá z nich buď čierny alebo biely chvost. Napadlo mu usúdiť, či veľkosť myší nejako súvisí s farbou jej chvostu. Preto pochytal všetky myši v určitej časti poľa a pozoroval ich. Obrázok nižšie ukazuje všetky myši, ktoré pochytal. Myslíte, že existuje nejaká súvislosť medzi veľkosťou myši a ich farbou chvosta?

1. Zdá sa, že súvislosť existuje
2. Zdá sa, že žiadna súvislosť neexistuje

pretože:

[1] Autorom otázok je J. Epstein z Katedry matematiky Polytechnickej univerzity v New Yorku a poskytol nám ich na základe osobnej komunikácie. Viac o tomto type otázok možno nájsť na `http://www.flaguide.org/tools/diagnostic/calculus_concept_inventory.php`.



1. pre každú možnosť je tu niekoľko myší
2. súvislosť medzi veľkosťou myší a farbou ich chvosta môže byť daná geneticky
3. farmár nepochytal dosť myší
4. väčšina tučných myší má čierny chvost, zatiaľ čo väčšina chudých myší má biely chvost
5. keď myši priberajú, tmavne im chvost

5 Zhrnutie

V úvode sme predostreli problémy s e-hlasovaním, na ktoré učitelia natrafia v začiatkoch jeho používania. Ide o finančne náročnú digitálnu technológiu, nedostatok efektívnych otázok na e-hlasovanie v slovenskom jazyku a absencia metodiky práce s otázkami.

Prvý problém sme riešili navrhnutím a otestovaním dostupnej alternatívy hlasovacieho systému pomocou smartfónov a webovej služby Polleverywhere, pričom sme ukázali ďalšie možnosti použitia smartfónu (vedecký prístroj, brána do sveta mimo triedy, poskytovanie obsahu, nástroj pre komunikáciu a spoluprácu).

Druhý problém sme čiastočne riešili predstavením dostupných zbierok otázok v slovenskom a českom jazyku a doplnením sady otázok (46) týkajúcich sa použitia matematiky v prírodných vedách a vedeckého rozmýšľania a argumentácie. Neskôr ich chceme aj elektronicky sprístupniť.

Tretí, najzávažnejší problém sme riešili štúdiom a spracovaním pedagogickej teórie, potrebnej na rozoznanie dobrej otázky na e-hlasovanie, modifikovanie klasickej úlohy na otázku vhodnú na e-hlasovanie, čo sme podporili aplikáciou na ilustratívnych príkladoch a napokon aj na vytvorenie otázky na e-hlasovanie.

Literatúra

[Banks, 2006] Banks, D. A., editor (2006). *Audience Response Systems in Higher Education: Applications and Cases*. Information Science Publishing, London.

[Bao et al., 2009] Bao, L., Cai, T., Koenig, K., Fang, K., Han, J., Wang, J., Liu, Q., Ding, L., Cui, L., Luo, Y., Wang, Y., Li, L., and Wu, N. (2009). Learning and scientific reasoning. *Science*, 323(5914):586–587.

[Beatty et al., 2006] Beatty, I. D., Gerace, W. J., Leonard, W. J., and Dufresne, R. J. (2006). Designing effective questions for classroom response system teaching. *American Journal of Physics*, 74(1):31–39.

[Bruff, 2009] Bruff, D. (2009). *Teaching with Classroom Response Systems: Creating Active Learning Environments*. John Wiley and Sons, San Francisco.

[Christian and Belloni, 2003] Christian, W. and Belloni, M. (2003). *Physlet Physics: Interactive Illustrations, Explorations and Problems for Introductory Physics*. Addison-Wesley, 1st edition.

[Coletta and Phillips, 2005] Coletta, V. P. and Phillips, J. A. (2005). Interpreting FCI scores: Normalized gain, preinstruction scores, and scientific reasoning ability. *American Journal of Physics*, 73(12):1172–1182.

[Crouch and Mazur, 2001] Crouch, C. H. and Mazur, E. (2001). Peer instruction: Ten years of experience and results. *American Journal of Physics*, 69(9):970–977.

[Deslauriers et al., 2011] Deslauriers, L., Schelew, E., and Wieman, C. (2011). Improved learning in a large-enrollment physics class. *Science*, 332(6031):862–864.

[Dutko, 2009] Dutko, M. (2009). Interaktívne prednáškové demonštrácie. Master's thesis, Univerzita P. J. Šafárika, Košice.

[Karľová, 2013] Karľová, K. (2013). E-hlasovanie vo fyzikálnom vzdelávaní. Bachelor's thesis, Univerzita P. J. Šafárika, Košice.

[Končelová, 2010] Končelová, J. (2010). Hlasování jako okamžitá zpětná vazba ve výuce fyziky. Master's thesis, Univerzita J. E. Purkyně, Ústí nad Labem.

[Mazur, 1997] Mazur, E. (1997). *Peer Instruction: A User's Manual*. Upper Saddle River.

[Moore, 2003] Moore, T. (2003). *Six Ideas that Shaped Physics: Units C, N, E, T, R, Q*. McGraw-Hill, Boston, 2nd edition.

[O'Kuma et al., 2003] O'Kuma, T. L., Maloney, D. P., and Hieggelke, C. J. (2003). *Ranking Task Exercises in Physics*. Addison-Wesley.

[Redish, 2003] Redish, E. F. (2003). *Teaching Physics with the Physics Suite CD*. Wiley.

[Sokoloff and Thornton, 2006] Sokoloff, D. R. and Thornton, R. K. (2006). *Interactive Lecture Demonstrations, Active Learning in Introductory Physics*. Wiley, 1st edition.

[Vasziová, 2009] Vasziová, G. (2009). Metóda peer instruction vo výučbe fyziky. Master's thesis, Univerzita P. J. Šafárika, Košice.

[Vasziová, 2011] Vasziová, G. (2011). Zbierka konceptuálnych úloh pre vyučovaciu metódu peer instruction. Rigorosa thesis, Univerzita P. J. Šafárika, Košice.

Radiation hardness of electronic devices

Filip Kasnár[1]*
Supervisor: Mário Pavlovič[1‡]

[1] Institute of nuclear and physical engineering, FEI STU, Ilkovičova 3, 842 48 Bratislava, Slovakia

Abstract

The project is focused on developing software that is able to analyze data from CCD cameras to determine the radiation hardness of the CCD. In this work, principles of the CCD and radiation effects on the CCD are described. Parameters of the software are presented. The results obtained with the help of the CCD and the software are discussed.

1 Introduction

Charge-coupled device (CCD) is an electronic device based on a Metal-Oxide-Semiconductor (MOS) structure. It can be used as a suitable reference structure to study effects of radiation on semiconductor structures. Because the CCD consists of millions of the MOS capacitors on one chip, one can obtain good statistical results of radiation effects on this semiconductor structure. This work is based on a project proposing to use CCD as a beam-loss monitor because of good linear response of the CCD matrix to the radiation.

2 Radiation effects on semiconductors

2.1 Charge build-up effects

The damage caused by ionizing radiation is primarily due to the trapping of the charge in silicon dioxide and secondarily due to anomalies in the silicon-silicon dioxide interface. An incident ionizing particle produces electron-hole pairs in the insulator. Electrons can leave silica instantaneously due to the applied electric field. Holes remaining in the insulator result in the charge build-up in the silicon dioxide. This charge build-up results in changing a few important electric parameters of MOS transistors. One of the most important is the threshold voltage V_t. The charge generated by ionizing radiation causes a threshold-voltage shift. A fraction of holes generated in the oxide layer causes the same effect as an application of negative voltage to the gate electrode. Due to the absorbed dose, the threshold voltage shifts towards the negative gate voltage, as it can be seen in Fig. 1.

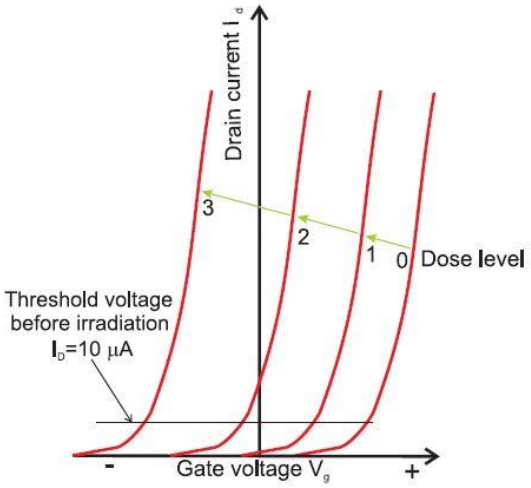


Fig. 1: Threshold voltage shift in a PMOS-structure due to the absorbed dose of radiation (modified from [Makowski, 2006]).

2.2 Single-event effects

Apart from the charge build-up effects, radiation can affect electronic components by triggering so-called single-event effects (SEEs) that can be destructive or non-destructive. These effects can be a result of interaction of an energetic particle with the MOS structure. This particle can create a "shower" of secondary charged particles that then leave an ionization trail (Fig. 2).
Among the single-event effects, single-event upsets (SEUs) are especially dangerous to the digital devices. A single event upset is a change of the device status induced by an energetic particle that has enough energy to induce the error.

* xkasnarf@stuba.sk
‡ marius.pavlovic@stuba.sk

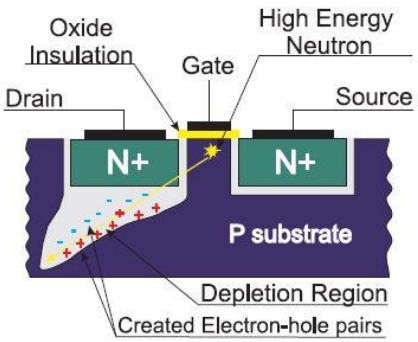


Fig. 2: An ionization trail produced by a neutron [1].

3 Principles of CCD

The basic principle of a CCD camera is shown in Fig. 3.

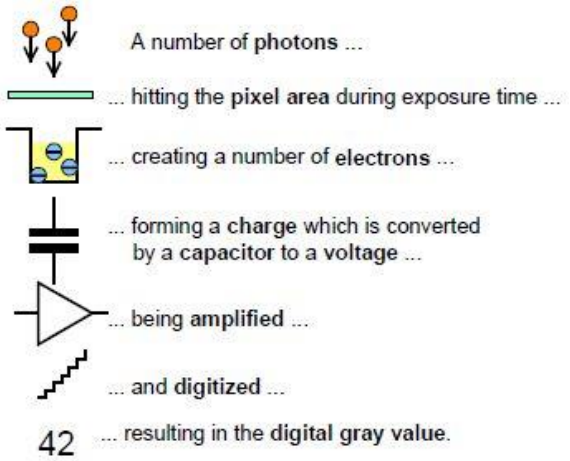


Fig. 3: Physical principle of CCD [Belousov, 2012].

The electrons creating charge in a potential well are produced via photoelectric effect. The charge is collected in the depletion region of the MOS capacitors before it is transferred to the output node, amplified and digitized. The final value of charge is expressed in a digital number (DN). This number is proportional to the number of the electrons created by photons. Sum of the digital numbers of all MOS capacitors corresponds to the total digital number. This number is linearly proportional to the intensity of the photon beam. The distribution of the collected charge in the CCD corresponds to an electronic image that is reconstructed after the readout of the device.
The images created by the CCD devices are affected by different types of noise. One of them is the dark current. The dark current is caused by electrons generated thermally. They build up in the MOS capacitors of the CCD. The rate of the dark current accumulation depends on the temperature CCD. After each exposure, the MOS capacitors are discharged, hence the dark current can be lowered using shorter exposure times, i.e. higher number of frames per second (FPS).

4 Radiation effects on CCD

Short-term effects on the CCD are ionization and single-event upsets.
The effect of ionization leads to an increase of the total digital number. The visual representations of ionization are bright splashes in the image. This effect can be useful, because the total digital number and intensity of ionizing radiation are in linear relation. This means that it is possible to use CCD as a monitor of the ionizing radiation.
The effect of SEU is influencing the performance of the control circuits of the CCD. This causes errors in processing of the images. That is why the visual representation of SEU can be dark rows, columns or whole areas of the image. The total digital number is therefore not in linear relationship with the intensity of radiation.
Long-term effect is a raise of the dark current due to a permanent damage of the insulator in the MOS structure. This damage visually adds bright pixels to the "dark" frames already affected by the thermally generated electrons.

5 Experiment and a program for image analysis

5.1 Experiment

The experiment was done in order to study the short-term as well as the long-term effects on the CCD in the radiation environment of the accelerators [Belousov, Mustafin, Ensinger, 2012]. A CCD camera was irradiated by secondary fragments and gamma-rays created by losses of 0.95 Gev/u pulsed uranium ion beam in a thick aluminum target. The images recorded during the experiment were analyzed by the program.

5.2 Program

The program was developed in the LabVIEW environment using the NI Vision Development Module and the NI Vision Acquisition Software. The Graphic User Interface of the program is shown in Fig. 4. It consists of plot, feature buttons, indicator of the number of files, input boxes for folders and image display.

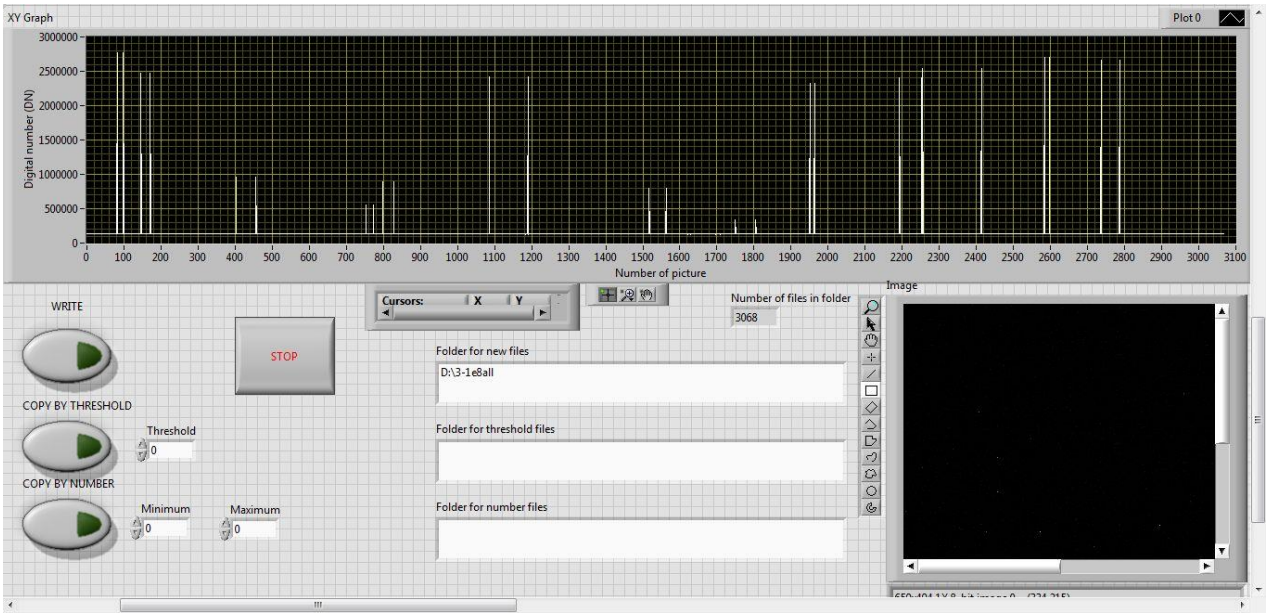


Fig. 4 Control panel of the program in the LabVIEW environment

The plot shows the total DN of each image after it has been processed. The image processing can be done during the experiment or after the experiment. This is because the program processes images in a user specified folder as soon as they appear there. The virtual instrument (VI) is used in the script sorts the images alphabetically.

After the image processing is done, three feature buttons become available to the user. The WRITE button creates a spreadsheet. The spreadsheet is in the form of a table. There is a file number, the total DN, the average DN, the standard deviation of the DN and a filename for each image. The COPY BY THRESHOLD button is useful, when the user wants to analyze the images with the total DN above certain threshold (e.g. to exclude "dark" frames). All images with the total DN above a user specified threshold are then copied to a user specified folder. The spreadsheet is created in the same way as when using the WRITE button, but with the added time-stamp.

When the user wants to separate a sequence of images, the COPY BY NUMBER button is available. In this case, all images with the file number within a user-specified range are copied in a user specified folder and a spreadsheet is created. This can be useful when one wants to have a closer look at certain specific sequence that indicates that some event occurred over some sequence of frames.

6 Results

The program was tested by analyzing the images created by the CCD camera in the environment without high level of radiation. The processing speed in the online mode (new images in folder every second) was about 25 images per second. Higher values of FPS led to errors in the image processing. These errors were caused by the VI in LabVIEW, because of large amount of images copied in a short time. After the errors occurred, the program was not able to make the spreadsheet with correct values. This error occurred only during the real-time processing.

After initial tests, the program was used to analyze the images created by the CCD camera during the experiment. In the offline mode, the program analyzed 3068 images in about 17 seconds. Based on the image analysis, a plot was created (Fig. 5), which enables to sort all images into three categories:

- Category A: images with the lowest total DN;
- Category B: images with the highest total DN;
- Category C: images with the total DN between the highest and the lowest total DN.

Because it was obvious, that the majority of images were from category A, we used the COPY BY THRESHOLD button to separate the images with the higher total DN. To select a correct value of the threshold, we used the spreadsheet created by the WRITE button. The lowest DN values were around

130 000, so the threshold value was set to 150 000. After the sorting by the threshold had been done, we had got 26 files. Using the spreadsheets, we could differentiate between images with the total DN more than 2 000 000 (Category B) and the images with the total DN less than 1 000 000 (Category C).

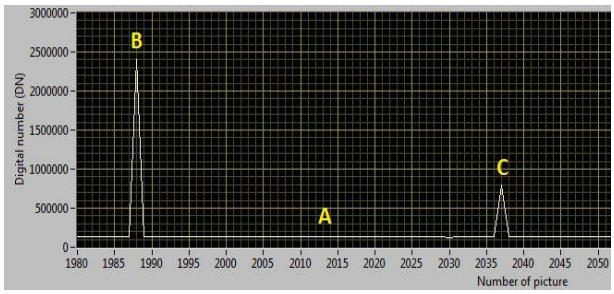


Fig. 5: Three categories of images observed on the plot in detail.

The images in the category A were affected by long-term effects only, because these images were recorded without beam-losses. Therefore, the total DN corresponds to the dark current.
The images from category B correspond to short-term effects caused mainly by ionization (see Fig. 6, the right image). On some of these images, minor errors caused by SEU can be seen, as well. These are manifested as dark rows or columns that are not processed. However, the difference in the total DN between these images is not bigger than 10 %. Averaging the total DN of all images in this category can be used to evaluate the total ionization caused by radiation with a sufficient precision.

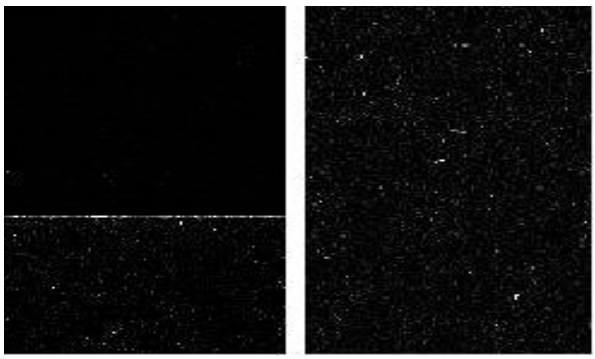


Fig. 6: Short-term effects caused by ionization.

Cat.	N	$\bar{DN}$	σ_{DN}	%
A	3042	130 207	1726	99,15
B	16	2 536 855	155 598	0,52
C	10	709 814	242 414	0,33

Tab. 1: Statistical results of the processed images.

The effects of radiation seen in images from Category C correspond to SEU and ionization. The SEUs affected the control electronics in the CCD in such a way, that some areas of the images are black, i.e. not processed properly (Fig. 6, the left image). The total DN from these images is not in relation with the level of ionization.
The most important statistical values of the processed images are collected in Tab.1. The standard deviation of the total DN in the Category A is low. This means that the dark current did not changed significantly. The average values for the total DN in the Category B images are 3,5 times higher than the average values of the total DN in the Category C images. Therefore, one must sort these images for the accurate evaluation of the radiation caused by beam-loss.

7 Conclusions

The program described in this work is a useful tool for studying the effects of radiation on the CCD devices. Further use of this program is proposed for the application of the CCD as a beam-loss monitor.

References

[Makowski, 2006] Makowski, D. (2006). The Impact of Radiation on Electronic Devices with the Special Consideration of Neutron and Gamma Radiation Monitoring. *Ph.D Dissertation.*

[Belousov, 2012] Belousov, A. (2012). CCD Overall System Gain Measurement. *PowerPoint presentation.*

[Belousov, Mustafin, Ensinger, 2012] Belousov, A., Mustafin, E., and Ensinger, A. (2012). Short and Long Term Ionizing Radiation Effects on Charge-Coupled Devices (CCD) in Radiation Environment of High-Intensity Heavy Ion Accelerators. *Poster*. GSI Darmstadt, TU Darmstadt.

Implementation of Ehrenfest molecular dynamics with the four-component Dirac-Coulomb treatment of electrons

Lukáš Konečný[1*] Márius Kádek[1†]

Supervisor: Olga L. Malkina[2‡]

[1] Katedra teoretickej fyziky a didaktiky fyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava
[2] Ústav anorganickej chémie, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava

Abstract: This works presents a mean-field (Ehrenfest) molecular dynamics with electrons described by the time-dependent four-component Dirac-Coulomb equation. Its features are demonstrated on the calculation of the absorption spectrum of lithium hydride.

Keywords: Ehrenfest molecular dynamics, Dirac-Coulomb method, electron spectra

1 Introduction and motivation

ReSpect (*Re*lativistic *Spect*roscopy) is a quantum-chemical computer program designed for calculation of the electronic structure of molecules and their spectroscopic properties [Repisky et al., 2013]. It solves the time-independent Dirac-Coulomb equation by Hartree-Fock or density functional theory. This work extends the functionality of the code by solving the time-dependent Dirac-Coulomb equation and real-time treatment of classical nuclear motion.

Potential applications of the presented work range from calculations of nuclear motion effects on chemical properties and spectra, probabilities of formally spin-forbidden electronic transitions or spin dynamics. Our primary systems of interest are molecules, where relativistic effects become important (such as those containing heavy elements).

2 Ehrenfest molecular dynamics

Ehrenfest (or mean-field) molecular dynamics (MD) describes molecular systems consisting of nuclei and electrons [Marx and Hutter, 2009]. Nuclei are treated as classical objects and their states are described by positions and velocities (momenta). Electrons are quantum particles described by the wave function (or the density matrix). Equation of motion for electrons is the time-dependent Schrodinger (or, in our case, Dirac-Coulomb) equation[1]

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi(r,t) = H_{\mathrm{e}}(r,R)\varphi(r,t). \tag{1}$$

Wave function $\varphi(r,t)$ is a many-electron wave function expressed, in principle, in an infinite basis set. Each nucleus obeys the Newton's equation

$$M_I \frac{\mathrm{d}^2 R_I}{\mathrm{d}t^2} = F_I(R,t). \tag{2}$$

In these equations r (R) is the set of all electronic (nuclear) coordinates and R_I means the position of only the I-th nucleus.

Nuclear and electronic motions are coupled. Nuclear positions enter the electronic Hamiltonian $H_{\mathrm{e}}(r,R)$, and electronic wave function is used to calculate forces acting on nuclei.

2.1 Nuclear dynamics

In our implementation of Ehrenfest molecular dynamics, the Newton's equations for nuclei are solved in discrete time steps by the velocity Verlet algorithm [Swope et al., 1982]:

1. calculate nuclear positions at time $t+\Delta t$

$$R_I(t+\Delta t_{\mathrm{N}}) = R_I(t) + V_I(t)\Delta t_{\mathrm{N}} + \frac{1}{2}A_I(t)\Delta t_{\mathrm{N}}^2,$$

2. calculate velocities at time $t+\Delta t/2$

$$V_I\left(t+\frac{\Delta t_{\mathrm{N}}}{2}\right) = V_I(t) + A_I(t)\frac{\Delta t_{\mathrm{N}}}{2},$$

3. calculate accelerations from forces

$$A_I(t+\Delta t_{\mathrm{N}}) = -\frac{F_I(R,t+\Delta t_{\mathrm{N}})}{M_I}$$

*lukas.konecny1@gmail.com
†kadmax314r@gmail.com
‡olga.malkin@savba.sk

[1] We use Hartree atomic units in this work.

4. calculate velocities at time $t+\Delta t$

$$V_I(t+\Delta t_{\mathrm{N}}) = V_I\left(t+\frac{\Delta t_{\mathrm{N}}}{2}\right) + A_I(t+\Delta t_{\mathrm{N}})\frac{\Delta t_{\mathrm{N}}}{2}.$$

The velocity Verlet algorithm is known to have good stability and accuracy, it is time-reversible and preserves area in the phase space [Frenkel and Smit, 2001].

The calculation of forces acting on nuclei is the part of the third step of the algorithm. The force acting on nucleus I is calculated as a gradient of the potential:

$$F_I(R,t) = \nabla_I \int \varphi^{\star}(r,t) H_{\mathrm{e}}(r,R) \varphi(r,t) \mathrm{d}r. \qquad (3)$$

More precisely, forces computed in the third step (forces at time $t+\Delta t$) are obtained from wave function $\varphi(r,t+\Delta t)$. Nuclear coordinates in the electronic Hamiltonian are the coordinates calculated in the first step of the velocity Verlet algorithm – coordinates at time $t+\Delta t$. The nuclear-nuclear repulsion term is included into the electronic Hamiltonian H_{e}, therefore this contribution to the force is taken into account in equation 3.

2.2 Electronic dynamics

As the nuclei move, the electronic wave function is calculated on the fly from the time-dependent four-component Dirac-Coulomb equation

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi(r,t) = H_{\mathrm{e}}(r,R)\varphi(r,t).$$

Wave function $\varphi(r,t)$ is a four-component vector and the electronic Hamiltonian is based on one-electron Dirac Hamiltonian and non-relativistic Coulombic interaction between electrons. Nuclear-nuclear and nuclear-electronic interactions are non-relativistic as well. One-electron part of the Hamiltonian is

$$h_{\mathrm{D}} = \begin{pmatrix} V_{\mathrm{Ne}}+V_{\mathrm{NN}} & c\boldsymbol{\sigma}\cdot p \\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot p & V_{\mathrm{Ne}}+V_{\mathrm{NN}}-2c^2 \end{pmatrix}. \qquad (4)$$

This Hamiltonian takes into account both scalar relativistic effects and the spin-orbit interaction. Because of the non-covariant Coulombic interaction, some properties of the one-electron Dirac equation and some relativistic effects (such as retardation effects) are lost. However, the error caused by using approximate methods (Hartree-Fock or density functional theory) to solve this equation is usually larger than these effects.

We solve the electronic equation within the Hartree-Fock approximation. Many-electron wave function $\varphi(r,t)$ is expressed in the form of the Slater determinant built from one-electron functions $\varphi_a(r_i,t)$ – molecular spin-orbitals. Each electron is treated in the mean field of other electrons.

Most of the quantum chemical programs including ReSpect express molecular orbitals as a linear combination of some basis functions

$$\varphi_a(r_i,t) = \sum_{\mu} c_{\mu a}(t)\chi_{\mu}(r_i). \qquad (5)$$

Basis functions $\chi_{\mu}(r)$ may be atomic orbitals, plane waves or other convenient functions. ReSpect program uses Gaussian type atomic orbitals centered on nuclei

$$\chi^{\mathrm{GTO}}_{J\alpha\mathbf{l}}(r) = f(\mathbf{l}, r-R_J)e^{-\alpha(r-R_J)^2}, \qquad (6)$$

where R_J is position of the nucleus and function f contains term

$$\frac{1}{(r-R_J)^{l_x+l_y+l_z}}(x-X_J)^{l_x}(y-Y_J)^{l_y}(z-Z_J)^{l_z},$$

in which $\mathbf{l}=(l_x,l_y,l_z)$ is a vector of three integers determining the shape of the orbital (s, p, d ...). Gaussian type orbitals have good properties for calculation of integrals. Coefficients $c_{\mu a}$ are called molecular orbital coefficients and these are the unknowns during the calculation.

In our implementation of Ehrenfest molecular dynamics, the electronic equation is solved in the density matrix formalism. Elements of the density matrix expressed by molecular orbital coefficients are as follows

$$D_{\mu\nu}(t) = \sum_{i=1}^{\mathrm{occ.}} c_{\mu i}(t)c^{\star}_{\nu i}(t). \qquad (7)$$

The time-dependent Dirac-Coulomb equation for the density matrix within the Hartree-Fock approximation has the following form

$$i\frac{\partial}{\partial t}D(t) = [F(r,R,t), D(t)]. \qquad (8)$$

The Fock operator

$$F = h_{\mathrm{D}} + G, \qquad (9)$$

consists of the one-electron Dirac Hamiltonian h_{D} and the non-relativistic part G, which contains the Coulombic term J and the exchange term K:

$$G = \begin{pmatrix} J+K & K \\ K & J+K \end{pmatrix}. \qquad (10)$$

Exact solution of this equation is

$$D(t') = U(t',t)D(t)U^{\dagger}(t',t), \tag{11}$$

where

$$U(t',t) = \mathrm{T}\exp\left[\int_t^{t'} F(\tau)\,\mathrm{d}\tau\right] \tag{12}$$

is the evolution operator. This operator is difficult to evaluate, namely due to the time ordered product, so further approximations are called for. The evolution operator is expressed as a sum of infinite series – the Magnus expansion. If time t' and time t are sufficiently close, this series can be truncated after a few terms. Current version of our program uses the Magnus expansion of the first-order, which approximates the evolution operator to be

$$U(t+\Delta t, t+\Delta t) = \exp\left[-2iF(t)\Delta t\right]. \tag{13}$$

We plan to extend this approach by adding the Magnus expansion of the second order. It will allow us to use longer time steps. Similar method is mentioned by Belpassi [Belpassi et al., 2011].

2.3 Algorithm

As it was previously mentioned, there is a coupling between electronic and nuclear motions. This is why the electronic and nuclear equations have to be solved concurrently. Both the velocity Verlet algorithm and the Magnus expansion use discrete time steps. However, the time step for electrons and the time step for nuclei do not need to be of the same length. This is because nuclei are heavier than electrons and move on larger time scales. Therefore it is not necessary to update the nuclear positions after each update of the electronic state. The only condition for the nuclear time step is to be an integer multiple of the electronic time step, $\Delta t_{\mathrm{N}} = k\,\Delta t_{\mathrm{e}}$.

The algorithm of Ehrenfest molecular dynamics as implemented in the ReSpect program is as follows

1. propagate the electronic density matrix from time t to time $t+\Delta t_{\mathrm{N}}$ by performing a series of time steps of length Δt_{e} according to equations 11 and 13,
2. calculate the nuclear positions and velocities according to the first and second step of the velocity Verlet algorithm,
3. calculate the forces acting on nuclei from the updated density matrix,
4. calculate the accelerations from the forces and velocities using these accelerations.

After each cycle, we obtain the density matrix for electrons and the positions and velocities (momenta) for nuclei. Arbitrary first-order molecular property can be calculated from these – as a trace of the product of density matrix and the operator of that physical quantity and/or as a function of nuclear coordinates and momenta. This allows us to investigate, how molecular properties change during the simulation.

The calculation starts with arbitrary (defined by a user of the program) nuclear positions and velocities. The initial electronic state is a result of the converged time-independent Hartree-Fock calculation with static nuclei (in the initial positions). The option to perturb the electrons by an external electric impulse field is implemented.

3 Benchmark calculations

3.1 Obtaining the spectrum

Absorption spectrum, the subject of our interest, is the dipole strength function. This spectrum can be obtained from a simulation if the evolution of the dipole moment after a perturbation by an external field is known.

Total dipole moment is the sum of the electronic and nuclear moments

$$P_{\mathrm{total}} = P_{\mathrm{N}} + P_{\mathrm{e}}. \tag{14}$$

The nuclear dipole moment is the sum

$$P_{\mathrm{N}} = \sum_{I=1}^{N} Q_I(R_I - R_{\mathrm{gauge}}), \tag{15}$$

where Q_I is the electric charge of nucleus I and R_{gauge} is the gauge origin. Gauge origin may be chosen arbitrarily for neutral systems. The electronic dipole moment is calculated as the mean value of the dipole moment operator[2]

$$P_{\mathrm{e}} = \mathrm{Tr}\left[PD(t)\right] = -\mathrm{Tr}\left[rD(t)\right]. \tag{16}$$

We are interested in the change of dipole moment during simulation. Therefore it is convenient to define the induced dipole moment as the difference between dipole moment at time t and 0:

$$P_{\mathrm{induced}}(t) = P(t) - P(0). \tag{17}$$

[2] $P = q_{\mathrm{e}} r$, where $q_{\mathrm{e}} = -e$ and e is 1 in atomic units.

Induced dipole moment $P_{\text{induced}}(t)$ is subjected to Fourier transform to obtain $P_{\text{induced}}(\omega)$. The property of the molecule which defines, how the induced dipole moment is related to the external field, is a polarizability tensor $\alpha(\omega)$ defined in the frequency domain by

$$P_{\text{induced}}(\omega) = \alpha(\omega)E(\omega), \tag{18}$$

where $E(\omega)$ is the Fourier transform of the external electric field. Imaginary part of the polarizability tensor is used to define the photo-absorption cross section tensor

$$\sigma(\omega) = \frac{4\pi\omega}{c}\Im\alpha(\omega). \tag{19}$$

Finally, the trace of $\sigma(\omega)$ is the dipole strength function

$$S(\omega) = \frac{1}{3}\text{Tr}\sigma(\omega) = \frac{4\pi\omega}{3c}\text{Tr}\left[\Im\alpha(\omega)\right]. \tag{20}$$

This function is referred to as the electron excitation absorption spectrum of a molecule.

Tensors $\alpha(\omega)$ and $\sigma(\omega)$ are 3×3 matrices. Components of the polarizability tensor define the response of x, y, and z coordinates of the induced dipole moment to the external field in the x, y, and z directions. To obtain all components necessary for calculating the dipole strength function, we performed two calculations. In the first one, the external field was parallel, and in the second one perpendicular to the molecule.[3]

$E(\omega)$ in the definition of the polarizability tensor (equation 18) is the Fourier transform of the external electric field. In all calculations presented in this work we use a δ-function impulse

$$E(t) = \kappa\delta(t). \tag{21}$$

Its Fourier transform is the constant κ.

The external impulse excites the electrons to a state, which is a superposition of stationary states. As these states evolve in time, dipole moment changes. We record the dipole moment as a function of time and then use it to calculate the dipole strength function as described above. The external impulse is small and short enough, that it does not move the nuclei directly. Nuclear motion occurs only due to the effect of electrons on nuclei.

[3]Two directions of the field are enough only for linear molecules, such as LiH. For other molecules, three calculations are necessary.

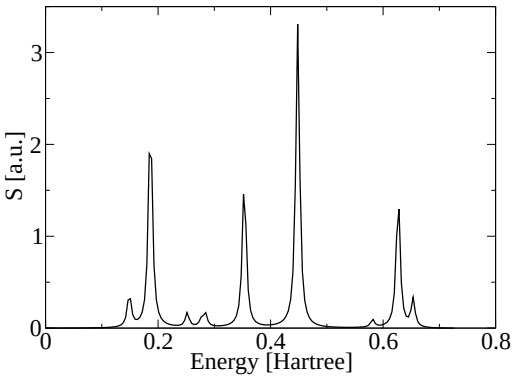


Figure 1: Spectrum of LiH with static nuclei fixed at the equilibrium distance.

Spectrum of a molecule gives us information about its excited states. Positions of peaks correspond to energy differences[4] between electronic states of the molecule. Value of the dipole strength function – intensity of the peak corresponds to the probability of the transition between states, the higher the peak, the greater the probability of the transition to occur.

3.2 Effect of nuclear motion

Figure 1 shows the absorption spectrum with static nuclei. This spectrum was calculated with nuclei at the equilibrium distance. To investigate the effect of nuclear motion, first we performed the same calculation only allowing the nuclei to move. Resulting spectrum is shown in Figure 2. Peaks are slightly shifted to lower energies and their relative intensities remain approximately the same. A new peak at low energy appeared, it corresponds to oscillations of bond length, not to the energy difference between electronic states.

To increase the effect of nuclear motion, the second simulation was started with nuclei in non-equilibrium distance. The resulting spectrum is shown in Figure 3. Here, the shift of peaks toward smaller energies is the same as in Figure 2. However, relative intensities of peaks changed. For example, a high peak at approximately 0.25 Hartree was very low without nuclear motion. Another occurred effect was the phase shift of some peaks. The peak corresponding to nuclear oscillations is shifted by the factor of $\exp[i\pi]$

[4]Energy and frequency have the same dimension in atomic units, because Planck constant is 1 in this system of units.

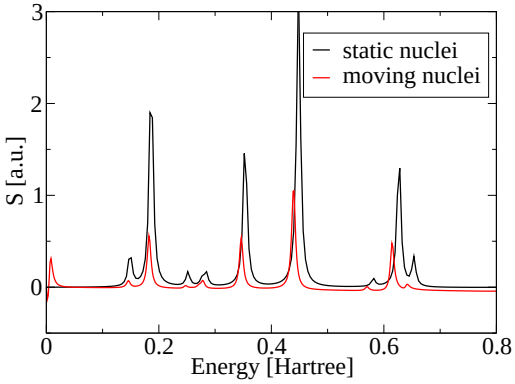


Figure 2: Spectrum of LiH with moving nuclei compared with the spectrum with nuclei fixed at the equilibrium distance. Nuclear motion started with the equilibrium internuclear distance 1.606 Å.

with respect to other peaks. Some electronic peaks have different phases as well.

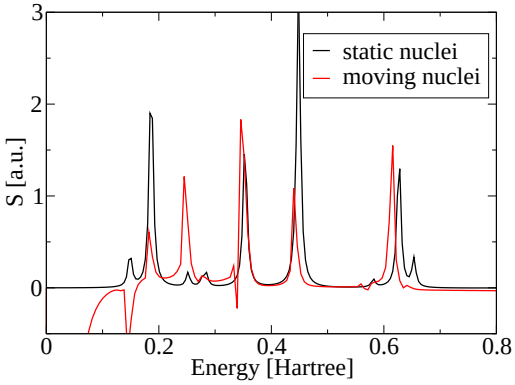


Figure 3: Spectrum of LiH with moving nuclei compared with the spectrum with nuclei fixed at the equilibrium distance. Nuclear motion started with internuclear distance 1.55 Å.

3.3 Analysis of the spectra

There are two major observations in the spectra of LiH, which need to be explained: the shift of peaks toward smaller energies, and the change of the intensity of peaks.

Each peak in the spectrum corresponds to a transition from the ground state to some excited electronic state. The position of the peak is determined by the energy difference between the ground state and the excited state. The energy of the electronic ground state as a function of nuclear coordinates has a minimum for the nuclear positions corresponding to the equilibrium bond length. The energy curves for excited states are usually flatter than one for the ground state and have minima at different bond lengths (usually longer than the equilibrium bond length of the ground state). For these reasons the energy difference between the ground and an exited state will be maximal at the equilibrium bond length of the ground state (that was the case for the spectrum calculated with static nuclei). As a result, in spectra with moving nuclei, the excitation energies should be (in average) smaller – that explains our observation.

From that it also follows, that different excitation energies should be affected by nuclear movement to a different extent. We believe, that the corresponding differences are also visible in our spectra.

The intensity of different peaks in the spectra is affected by the following factors: the values of the electronic transition dipole moments (integrals from the product of wave functions of the two corresponding states and the dipole moment operator), spin symmetry of those two states and the probability of finding nuclei at the corresponding distances. Classical nuclei spend most of the time in the positions where their velocities are small – the longest and the shortest internuclear distance during oscillations. Thus in our calculation, the analysis of dipole moments gives us information mostly about electronic states at the nuclear turning points rather than at the equilibrium distance. Moreover, the wave functions (and therefore also the transition dipole moments) also depend on nuclear coordinates (i.e. on bond length). The combination of these two factors explains the observed change of the intensities of peaks in the spectra obtained with moving nuclei.

Since the spin of the electrons is not a good quantum number when relativistic spin-orbit effects are included, the spin-forbidden transitions (for example singlet-triplet transitions) become allowed. It means that, in principle, they can be observed in our simulation. However, the LiH molecule is certainly too light to allow such observation. Only when we artificially increase relativistic effects in the system (by decreasing the speed of light) a new weak peak that can probably be attributed to a singlet-triplet transition was observed. It still requires more work and some additional analysis to be implemented to iden-

tify such transitions unambiguously.

4 Conclusions

To the best of our knowledge, this is the first implementation of the Ehrenfest molecular dynamics with the time-dependent four-component Dirac-Coulomb treatment of electrons. Although it is only the initial implementation, the developed program works and the first calculations look promising. Parallelization of the code, which is currently under way will make the code faster and thus applicable to larger systems. Next stages of the development are toward better methods for solution of the electronic equation (namely higher order Magnus expansion or DFT, which is faster than Hartree-Fock and also includes electron correlation) and analysis of spin.

The presented calculation of the absorption spectrum of lithium hydride serves only as a benchmark. In the nearest future we plan to extend our calculations toward systems, where relativistic effects are important or where symmetry forbidden transitions can occur, to fully utilize the advantages of this method.

References

[Belpassi et al., 2011] Belpassi, L., Storchi, L., Quiney, H. M., and Tarantelli, F. (2011). Recent advances and perspectives in four-component dirac–kohn–sham calculations. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 13(27):12368–12394.

[Frenkel and Smit, 2001] Frenkel, D. and Smit, B. (2001). *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications*. Academic press.

[Marx and Hutter, 2009] Marx, D. and Hutter, J. (2009). *Ab initio molecular dynamics: basic theory and advanced methods*. Cambridge University Press.

[Repisky et al., 2013] Repisky, M., Komorovsky, S., Malkin, V. G., Malkina, O. L., et al. (2013). ReSpect, version 3.2. Relativistic Spectroscopy DFT program.

[Swope et al., 1982] Swope, W. C., Andersen, H. C., Berens, P. H., and Wilson, K. R. (1982). A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters. *The Journal of Chemical Physics*, 76:637.

Grafitizácia vzoriek pri príprave terčov pre urýchľovačovú hmotnostnú spektrometriu

Ivan Kontuľ*

Školiteľ: Miroslav Ješkovský[1]†
[1]Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina 842 48 Bratislava, Slovenská republika

Abstrakt: Práca sa zaoberá tvorbou grafitových terčov pre použitie v urýchľovačovej hmotnostnej spektrometrii (AMS). Hlavnú časť tohto procesu tvorí premena vzorkového uhlíka viazaného v CO_2 na grafit, ktorý sa umiestňuje už priamo do AMS terčov. Na priebeh grafitizácie má vplyv viacero faktorov, ktorých správne nastavenie môže pomôcť znížiť čas potrebný na úplnú grafitizáciu. Preto sme sa v tejto práci snažili optimalizovať teplotu, pri ktorej táto premena prebieha a taktiež sme si overili vplyv predprípravy železného katalyzátora na priebeh reakcie.

Kľúčové slová: grafitizácia, AMS, rádiouhlík, datovanie

1 Úvod

Rádiouhlík ^{14}C je β^- aktívny izotop uhlíka

$$^{14}_{6}C \rightarrow ^{14}_{7}N + e^- + \bar{\nu}_e \qquad (1)$$

s maximálnou energiou β častíc 156 keV. Doba polpremeny tohto izotopu je 5700 $\pm$ 30 rokov, čo je hodnota určená váženým priemerom viacerých meraní z rokov 1961 až 1968 [Roberts and Southon, 2007]. Zdroje rádiouhlíka sú:

- kozmogénne - ^{14}C vzniká interakciou sekundárnych neutrónov kozmického žiarenia pri reakcii

$$^{1}_{0}n + ^{14}_{7}N \rightarrow ^{14}_{6}C + ^{1}_{1}p \qquad (2)$$

- antropogénne - rádiouhlík vzniká v reaktoroch jadrových elektrární a veľké množstvo ho vzniklo v 50-tych rokoch minulého storočia počas testov nukleárnych zbraní rovnakou reakciou ako pre kozmické žiarenie

Keď v atmosfére reakciou (2) vznikne atóm rádiouhlíka, veľmi rýchlo sa viaže s kyslíkom do oxidu uhličitého a v tejto forme sa dostáva vďaka fotosyntéze do celej biosféry. Živé organizmy si počas celého života vymieňajú oxid uhličitý s okolím, teda aj oxid uhličitý obsahujúci rádiouhlík. ^{14}C sa taktiež v organizmoch rozpadá a preto majú živé organizmy istú rovnovážnu hladinu obsahu rádiouhlíka vo svojich telách. Po smrti ale výmena $^{14}CO_2$ skončí a množstvo rádiouhlíka sa v dôsledku rádioaktívneho rozpadu postupne znižuje. Na základe tohto princípu v roku 1949 americký fyzik a chemik Willard Libby vyvinul proces rádiouhlíkového datovania archeologických vzoriek, za čo mu bola v roku 1960 udelená Nobelova cena za chémiu.

Datovanie spočíva v určení množstva uhlíka ^{14}C vo vzorke. Jedna z možností ako určiť toto množstvo je na základe rádioaktívneho rozpadu vzťahom, ktorý je odvodený zo zákona rádioaktívnej premeny

$$t = \frac{T_{1/2}}{ln\,2} ln \frac{A_0}{A_t} \qquad (3)$$

(A_0 je aktivita súčasného organického uhlíka v zvolenom etalóne, A_t je aktivita zistená pri meraní a $T_{1/2}$ je doba polpremeny rádiouhlíka) [Chrapan, 1974]. Keďže sa jedná o rádionuklid s nízkou energiou β častíc a vo vzorkách je nízka aktivita od rádiouhlíka, používajú sa kvapalné scintilačné počítače a plynové proporcionálne detektory. Vzorka sa chemicky upraví do vhodnej formy pre použitie v detektore, napríklad spálenie a príprava metánu z vzkniknutého oxidu uhličitého pre proporcionálne počítače.

Druhou možnosťou je použitie urýchľovačovej hmotnostnej spektrometrie, ktorá má tú výhodu, že je potrebné podstatne menšie množstvo vzorky na analýzu ako pri predchádzajúcom spôsobe. Tento spôsob už nie je založený na sledovaní rádioaktívneho rozpadu rádiouhlíka, ale umožňuje počítať množstvo atómov ^{14}C vo vzorke, respektíve pomer počtu týchto atómov k dvom stabilným izotopom uhlíka - ^{12}C a ^{13}C. Pri tejto metóde sa vzorka spáli a CO_2, ktoré vznikne pri spaľovaní, sa mení na grafit použiteľný v AMS.

*ikontul@gmail.com
†Miroslav.Jeskovsky@fmph.uniba.sk

2 Urýchľovačová hmotnostná spektrometria

Urýchľovačová hmotnostná spektrometria alebo AMS (z anglického Accelerator Mass Spectrometry) je nadstavba nad klasickou hmotnostnou spektrometriou. Využíva teda tie isté princípy, len má vďaka urýchľovaniu častíc isté výhody.
Základným princípom hmotnostnej spektrometrie je to, že keď sa nabitá častica s nábojom q dostane do magnetického poľa B, ktorého smer je kolmý na rovinu pohybu nabitej častice, tak v dôsledku pôsobenia Lorentzovej sily sa častica odkloní z pôvodného smeru pohybu a bude sa v magnetickom poli pohybovať po kruhovej dráhe s polomerom R (stále v tej istej rovine, na ktorú je kolmé magnetické pole). Veľkosť polomeru R potom závisí od hmotnosti častice m, energie častice E, náboja častice q a veľkosti magnetickej indukcie poľa B nasledovne:

$$R^2 = \frac{2}{B^2} \cdot \frac{E}{q} \cdot \frac{m}{q} \tag{4}$$

Atómy s rôznymi hmotnosťami a energiami teda budú mať v magnetickom poli rôzne dráhy. To znamená, že vieme rozlíšiť jednotlivé izotopy jedného prvku, lebo ich hmotnosť sa líši kvôli rozdielnemu počtu neutrónov v jadre. Týmto spôsobom sa pri správne nastavenom magnetickom poli dajú z množstva atómov vybrať tie, ktoré majú požadovanú hodnotu zlomku Em/q^2. Teoreticky by sa takto dal určiť pomer počtu atómov ^{14}C k počtu atómov ^{12}C. Problémom je ale to, že detekované môžu byť aj:

- izobary skúmaného rádionuklidu (nuklidy s rovnakým počtom nukleónov ale rozdielnym počtom protónov) - pre ^{14}C by to boli atómy ^{14}N
- molekuly s rovnakou hmotnosťou - pre rádiouhlík by to boli molekuly $^{12}CH_2$ a ^{13}CH
- ióny s rovnakou hodnotou Em/q^2

[Tuniz et al., 1998]. Metóda AMS tieto problémy rieši zaradením urýchľovača do meracej aparatúry. Narozdiel od klasickej hmotnostnej spektrometrie používa AMS zväčša prúd záporných iónov, čo pri meraniach ^{14}C eliminuje vplyv izobaru ^{14}N, lebo dusík netvorí stabilné záporné ióny [Tuniz et al., 1998]. AMS najčastejšie využíva tandemové urýchľovače so stripovacou fóliou, ktorá okrem svojej primárnej úlohy zabezpečí aj discociáciu molekúl $^{12}CH_2$ a ^{13}CH a tým zabráni ich detekcii.

Zväzok iónov je tvorený v časti nazývanej iónový zdroj. Typicky používanými iónovými zdrojmi sú odprašovacie zdroje (z anglického *sputter ion sources*). Tieto zdroje využívajú na ionizáciu prúd Cs^+ iónov. Zahrievaním cézia vzniknú céziové pary, ktorých prúd je nasmerovaný na ionizér (zahriata kovová plocha) a v dôsledku tepelnej ionizácie vznikajú kladné céziové ióny, ktoré sú sústredené do zväzku. Cs^+ ióny vo zväzku narážajú do grafitového terča (ak analyzujeme obsah ^{14}C vo vzorke) a z jeho povrchu sú odprašované atómy grafitu (*sputtering*). Procesom výmeny náboja medzi céziom a odprášeným grafitom vznikajú záporne nabité ióny uhlíka C^-. Terč tvorí grafit uložený v hliníkovej elektróde, ktorá spolu s extrakčnou elektródou tvorí elektrické pole slúžiace na usmernenie C^- iónov do zväzku.
Zväzok iónov smeruje do injekčného systému (ten je potrebný vtedy ak má AMS viac ako jeden iónový zdroj, aby bolo možné prepínať medzi jednotlivými zdrojmi). Zväzok putuje do magnetického analyzátora využívajúceho princíp hmotnostnej spektrometrie na analýzu hodnoty Em/q^2 jednotlivých iónov v zväzku. Tento analyzátor zároveň vytriedi tie ióny, ktoré majú žiadanú hmotnosť a iba tieto prejdú do urýchľovača.
Medzi najrozšírenejšie urýchľovače v AMS patria tandemy, v ktorých je celkové urýchľovacie napätie rozdelené napäťovým deličom, aby sa ióny urýchľovali postupne. Keď zväzok dosiahne terminál so stripovacím plynom alebo stripovacou fóliou, záporný náboj iónov sa zmení na niekoľkonásobný kladný náboj a tieto kladné ióny sú urýchľované opačným rozdielom potenciálov ďalej cez urýchľovač až do ďalšieho magnetického analyzátoru, ktorý vybrané ióny odkloní do detektora. V detektore sa určí výsledný počet iónov so zvolenou hodnotou Em/q^2. Bežne sa používajú ionizačné komory a polovodičové detektory.

3 Grafitizácia

3.1 Popis redukcie CO_2 na grafit

Grafitizácia sa uskutočňuje pomocou redukcie oxidu uhličitého na železe za prítomnosti vodíka - Boschovej reakcie

$$CO_2 + 2H_2 \xrightarrow[Fe]{500-900\ ^\circ C} C + 2H_2O \tag{5}$$

Táto reakcia prebieha v dvoch stupňoch - redukcia CO_2 na CO

$$CO_2 + H_2 \xrightarrow[Fe]{500-900\ ^\circ C} CO + H_2O \qquad (6)$$

a redukcia vziknutého CO na grafit

$$CO + H_2 \xrightarrow[Fe]{500-900\ ^\circ C} C + H_2O \qquad (7)$$

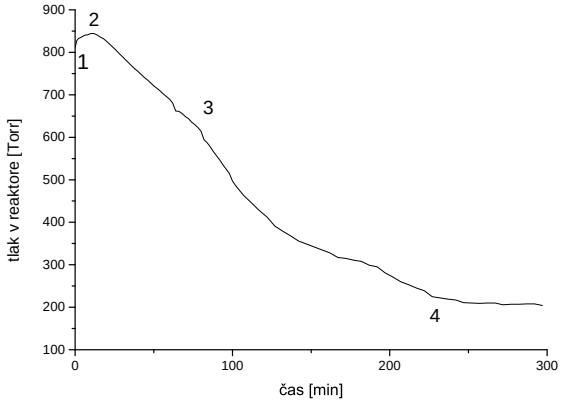
Grafitizácia uhlíka viazaného v oxide uhličitom teda vyžaduje prítomnosť vodíka. Zo stechiometrických koeficientov rovnice (5) je vidieť, že aby reakcia prebehla pre celý objem CO_2, je potrebný aspoň dvojnásobný tlak vodíka. Preto sa používa pomer tlaku H_2 k tlaku CO_2 od 2:1 po 6:1 [Liebl et al., 2010] [Molnár et al., 2010] [Lowe et al., 1987].

Na ľavej strane rovnice (5) sú oba reaktanty v plynnom skupenstve a na pravej strane je grafit v pevnom skupenstve a voda v kvapalnej fáze, preto keď prebieha táto reakcia v uzavretom objeme - reaktore (Obr. 2), tlak v ňom bude postupne klesať. Priebeh Boschovej reakcie môžme teda sledovať pomocou tlakomeru pripojeného na reaktor.

Po zahriatí zmesi oxidu uhličitého a vodíka na potrebnú teplotu za prítomnosti železného prášku najskôr začnú disociovať molekuly oxidu uhličitého na molekuly oxidu uhoľnatého za vzniku vody. Na Obr. 1 je to úsek medzi bodmi 1 a 2. V tejto časti sa tlak mierne zvyšuje v dôsledku nárastu teploty plynov v reaktore. Keď už v reaktore vznikne CO, začne prebiehať aj reakcia (7) a tlak ďalej klesá. Reakcia (6) je oproti (7) pomalšia, preto je pokles tlaku za bodom 3 väčší ako v úseku 2-3. V bode 3 je pravdepodobne už všetko CO_2 zredukované na CO a pokles tlaku je spôsobený len druhou, rýchlejšou reakciou [Hut et al., 1986].

Pred bodom 4 už je klesanie tlaku pomalšie ako v skorších časových úsekoch a to preto, lebo nezreagovaného CO je v objeme oveľa menej ako v bode 3. Za bodom 4 je tlak v podstate konštantný, lebo všetko CO_2 a CO sú zredukované. Konečný tlak p_{fin} je už iba tlak zostatkového vodíka.

Produktom Boschovej reakcie je okrem grafitu aj voda. Jej prítomnosť ale spomaľuje grafitizáciu, preto je potrebné mať vodnú pascu - časť reaktora, ktorá je ochladená na -5°C až -78°C [Molnár et al., 2010][Liebl et al., 2010]. Vodná pasca môže byť realizovaná zmesou suchého ľadu a acetónu, zmesou metanolu a tekutého dusíka alebo elektronicky pomocou Peltierových článkov.



Obr. 1: Príklad priebehu tlaku v reaktore pri grafitizácii

Ak je teplota železa menšia ako 500°C, v reaktore prebieha reakcia

$$CO + 3H_2 \xrightarrow[Fe]{< 500^\circ C} CH_4 + H_2O \qquad (8)$$

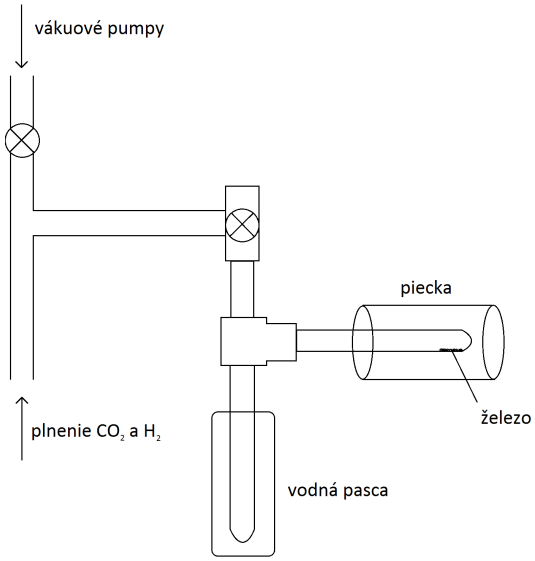
ktorá produkuje metán [Rinyu et al., 2007]. Produkcia metánu nespomaľuje reakciu ako takú, ale vzniknutý metán v sebe viaže vzorkový uhlík. Pri tomto procese dochádza k izotopovej frakcionácii uhlíka (pri niektorých chemických reakciách je uprednostnený jeden izotop pred ostatnými), čo môže zmeniť výsledný pomer $^{14}C/^{12}C$.

Boschova reakcia prebieha pri pomerne veľkom intervale teplôt. Avšak nie pri každej teplote prebieha rovnakou rýchlosťou. Ukazuje sa napríklad, že redukcia CO_2 na CO prebieha rýchlejšie pri vyšších teplotách narozdiel od redukcie CO na grafit [Liebl et al., 2010]. Vplyv teploty je pomerne veľký, preto bolo našou snahou optimalizovať reakciu z hľadiska teploty.

3.2 Popis aparatúry

Použitá grafitizačná linka pozostáva zo štyroch reaktorov (zjednodušený nákres reaktora je na Obr. 2) napojených na difúznu vákuovú pumpu podporovanú rotačnou vákuovou pumpou. Rotačná pumpa odčerpáva difúznu pumpu, respektíve odčerpáva linku ak sa v nej nachádza atmosférický vzduch, aby sa rýchlo nedegradovala olejová náplň difúznej pumpy. Tri reaktory majú objem približne 9,11 ml a štvrtý približne 18,21 ml.

Skúmavky tvoriace dve ramená reaktoru sú buď z bo-



Obr. 2: Zjednodušený nákres reaktora

rosilikátu (pre teploty menšie ako 700°C) alebo z kremenného skla (teploty vyššie ako 700°C). Jednotlivé spoje sú realizované pomocou Swagelok Cajon Ultra-Torr vákuových konektorov.
Na každý reaktor je pripojený manometrický senzor s neistotou merania 3,12% z hodnoty.
Vodnú pascu sme realizovali zmesou metanolu a tekutého dusíka, ktorej teplotu sme regulovali v rozmedzí -25°C až -45°C.
Teplotný rozsah piecok je 50°C až 900°C.

3.3 Postup pri grafitizácii

Na prípravu grafitu sme použili oxid uhličitý so stupňom čistoty 99,9%, ktorý bol prečistený vymrazovaním a prechodom cez dve piecky - jedna obsahuje striebornú vlnu a druhá medené granule. Oxid uhličitý sa plnil do utesnených sklenených nádobiek s objemom 5 ml na tlak 740 $\pm$ 10 Torr pre väčší reaktor a na tlak 370 $\pm$ 10 Torr pre menší reaktor. Plniaci tlak bol zvolený tak, aby bol tlak oxidu uhličitého v reaktore približne 200 $\pm$ 10 Torr.
Na základe objemu a tlaku sme potom mohli určiť počet molekúl CO_2 a teda aj celkovú hmotnosť atómov uhlíka vo vzorke. Na tento výpočet sme použili stavovú rovnicu pre ideálny plyn

$$m_C = \frac{p.V}{k_B.T} 12u \qquad (9)$$

kde hmotnosť $12u$ zodpovedá hmotnosti jedného atómu uhlíka (u je atómová hmotnostná jednotka 1,6606.10^{-27} kg). Uhlík v prírode má izotopické zloženie 98,93% uhlíka ^{12}C, 1,07% uhlíka ^{13}C a menej ako 10^{-9}% uhlíka ^{14}C, preto je hodnota $12u$ dostatočne presná. Zarátanie jedného percenta atómov s hmotnosťou $13u$ by zmenilo výslednú hmotnosť m_C (v mg) až na desatinnom mieste, ktoré je mimo citlivosti laboratórnych váh, ktoré používame na váženie prírastku hmotnosti po grafitizácii.
Keďže sa jedná o reálny, a nie ideálny plyn, tak sme overili, či pri týchto podmienkach stavová rovnica ideálneho plynu dáva rovnaké výsledky ako van der Waalsova stavová rovnica

$$\left(p + \frac{N^2 a}{N_A^2 V^2}\right).\left(V - b\frac{N}{N_A}\right) = N.k_B.T \qquad (10)$$

ktorá už zohľadňuje, že sa nejedná o ideálny plyn (koeficienty pre CO_2 sú a = 0,364 Jm^{3}mol^{-2}, b = 4,267.10^{-5} m^{3}mol^{-1}).

	N	m_C [mg]
stavová rovnica pre ideálny plyn	1,2105.10^{20}	2,4122
van der Waalsova rovnica	1,2157.10^{20}	2,4226

Tab. 1: Počet molekúl uhlíka a celková hmotnosť uhlíka vo vzorke pre dve stavové rovnice (pri teplote 22°C)

Rozdiel medzi stavovými rovnicami je za týchto podmienok dostatočne malý na to, aby sme mohli používať jednoduchší vzťah (9).

Do časti reaktora s pieckou sa uložil železný prášok (-325 mesh, 97%, ALDRICH) s hmotnosťou m_{Fe} (1 až 10 mg), táto odnímateľná časť reaktora má spolu so železom hmotnosť m_{sk+Fe}.
Uzavretá nádobka s oxidom uhličitým sa pripojila k reaktoru (Obr. 1), ktorý sa následne vyvákuoval aspoň na úroveň 3.10^{-5} Torr.
Potom sa mohla otvoriť nádobka s CO_2 a pomocou tekutého dusíka sa oxid uhličitý vymrazil do reaktora. Reaktor sa uzavrel a vymrazené CO_2 sa zahrialo na izbovú teplotu, aby sme mohli určiť tlak p_{CO_2}.
Prázdnu nádobku sme odpojili a na jej miesto napojili fľašu s vodíkom. Priestor medzi fľašou a reaktorom bolo potrebné znova vyvákuovať a CO_2 v reaktore znova vymraziť tekutým dusíkom, aby sme na tlakomeri pripojenom na reaktor mohli sledovať, koľko vodíka doň púšťame.

Do reaktora sme napustili približne 400 Torrov vodíka, čo je dvojnásobok tlaku CO_2. Minimálne takéto množstvo vodíka je potrebné na to, aby sa všetko CO_2 na železe zredukovalo na grafit. Reálne je tlak vodíka v reaktore vyšší ako je hodnota, ktorú sme odčítali pri tomto plnení, lebo časť reaktora je ponorená v tekutom dusíku kvôli vymrazeniu oxidu uhličitého a pri nižšej teplote je v rovnakom objeme podľa stavovej rovnice nižší tlak. Až po zahriatí na izbovú teplotu sme mohli zistiť reálny pomer medzi tlakom oxidu uhličitého a vodíka. Tekutý dusík sme potom odobrali a nechali reaktor zohriať na izbovú teplotu. Počiatočný tlak plynov v reaktore pri izbovej teplote označujeme p_{ini}.
Na reaktor sme umiestnili vodnú pascu a piecku vopred zohriatu na požadovanú teplotu (zohriata vopred musí byť preto, lebo ak by sa zohrievalo železo postupne, časť CO_2 by mohla zreagovať na metán). Keď sa časť reaktora so železom zahreje, začne prebiehať Boschova reakcia a tlak zmesi oxidu uhličitého a vodíka začne klesať. Počas priebehu reakcie sme sledovali tlak v reaktore p.
Po ukončení grafitizácie sme odvážili skúmavku so železom a grafitom (hmotnosť m') a určili hmotnostný prírastok grafitu na železe

$$m = m' - m_{sk+Fe} \tag{11}$$

4 Výsledky meraní a optimalizácia

Účinnosť procesu grafitizácie je charakterizovaná výťažkom reakcie. Sú dve možnosti ako určiť výťažok:

- hmotnostný výťažok

$$\frac{m}{m_C}.100\% \tag{12}$$

  Je to pomer v percentách medzi hmotnosťou prírastku na železe m a hmotnosťou m_C vyrátanou podľa (9). Táto hodnota nemôže byť väčšia ako 100%.

- tlakový výťažok

$$\frac{p_{ini} - p_{fin}}{3.p_{CO_2}}.100\% \tag{13}$$

  Keď je reaktor naplnený oxidom uhličitým na tlak p_{CO_2}, tak podľa stechiometrických koeficientov v (5) sa na každú jednotku tlaku CO_2 pri grafitizácii spotrebujú dve jednotky tlaku H_2. Počiatočný tlak p_{ini} by mal teda klesnúť o trojnásobok tlaku p_{CO_2}. Tlakový výťažok je potom pomer medzi rozdielom tlakov na začiatku a konci grafitizácie a tejto teoretickej hodnoty $3p_{CO_2}$. Tento spôsob určenia výťažku má ale tú nevýhodu, že môže byť väčší ako 100%. Keď sme pre priebeh tlaku určili hodnotu na ktorú by mal tlak klesnúť

$$p_{kompl} = p_{ini} - 3.p_{CO_2} \tag{14}$$

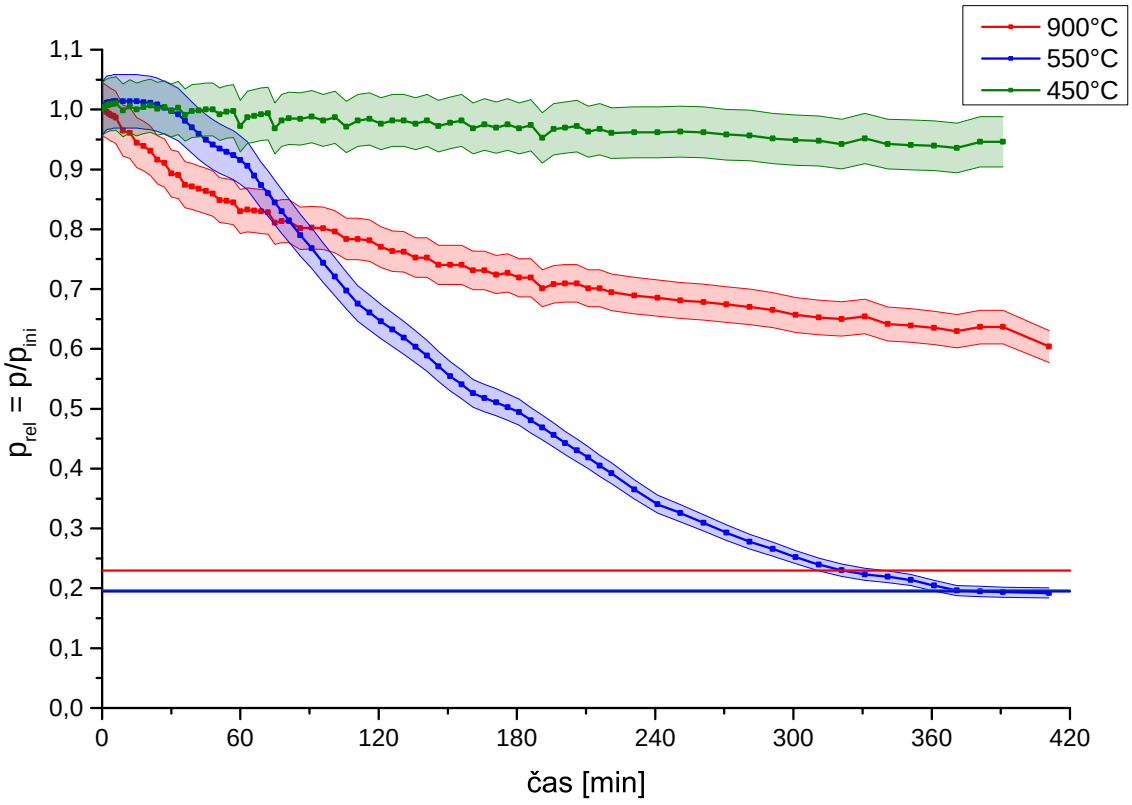
  tak sa pri niektorých meraniach stalo, že tlak klesol nižšie ako je táto hodnota. To sa dá vysvetliť tým, že v tejto finálnej časti grafitizácie už sa všetok oxid uhličitý aj oxid uhoľnatý zredukovali na grafit, ale vodík sa v reaktore stále nachádza a ten môže redukovať oxidy železa, ktoré vznikli na železnom prášku [Hut et al., 1986].

Jednotlivé priebehy sú preškálované na

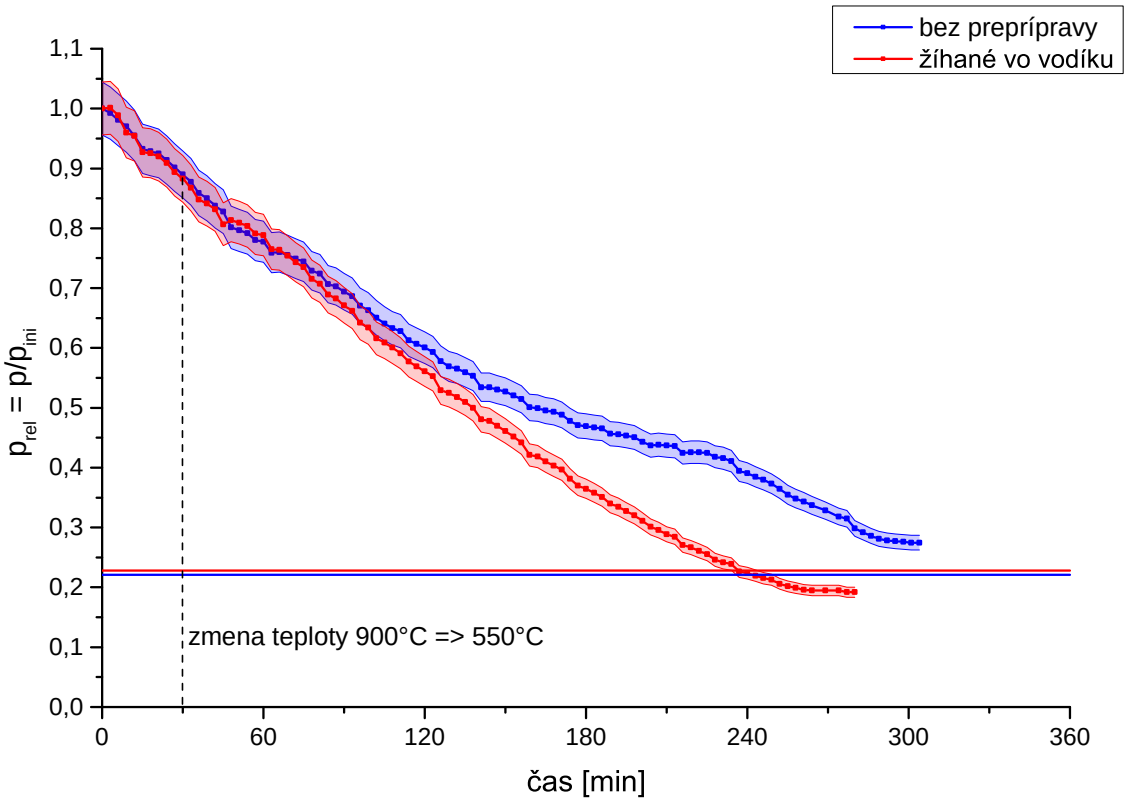
$$p_{rel} = \frac{p}{p_{ini}} \tag{15}$$

a formou vodorovnej čiary je v nich zakreslená aj preškálovaná úroveň tlaku p_{kompl}.

Na Obr. 3 je graf priebehov tlaku v reaktore pre 3 rôzne teploty: 450°C, 550°C a 900°C. Tlak pri teplote 450°C prakticky neklesol, čo sme aj očakávali, keďže teplota je menšia ako 500°C a mal by sa tam tvoriť metán. Metán je v plynnom skupenstve a preto tlak neklesá. Potvrdzuje sa teda, že pri takýchto teplotách grafitizácia neprebieha.
Pri 900°C je klesanie tlaku v prvej hodine veľmi dobré, ale následne tlak klesá veľmi pomaly. Pri tejto teplote teda rýchlo prebehne prvá časť Boschovej reakcie (6), ale druhá časť pri takto vysokej teplote prebieha pomaly. Tlak v reaktore neklesol do blízkosti hranice znázornenenej na grafe, grafitizácia teda neprebehla úplne.
Keď bola teplota železa 550°C, bol pokles tlaku na začiatku grafitizácie o niečo pomalší ako pri 900°C, ale na rozdiel od vyššej teploty sa pokles nezastavil, pokračoval ďalej až po tlak p_{kompl}. Túto úroveň dosiahol tlak za čas 371 minút.
Pri porovnávaní sme sa snažili ostatné parametre (pomer H_2:CO_2, hmotnosť železa) pre jednotlivé merania v rámci možností našej aparatúry zachovať.
O rozdielnej efektivite týchto priebehov svedčia aj výťažky uvedené v nasledujúcej tabuľke.



Obr. 3: Priebeh tlaku v reaktore pre 3 rôzne teploty s pridaným intervalom neistôt



Obr. 4: Priebeh tlaku pri zmene teploty bez prepŕípravy železa a so železom žíhaným vo vodíku s pridaným intervalom neistôt

teplota [°C]	pomer H_2:CO_2	m_{Fe} [mg]	hmotnostný výťažok [%]	tlakový výťažok [%]
450	2,74	1,75	4,96 ± 1,74	6,70 ± 2,97
550	2,73	1,99	92,56 ± 2,17	100,17 ± 3,44
900	2,89	1,34	50,41 ± 1,87	51,40 ± 3,62

Tab. 2: Hmotnostný a tlakový výťažok pre 450°C, 550°C a 900°C

Od začiatku reakcie po istý čas t je priebeh 900°C lepší ako priebeh 550°C, po tomto čase sa to obráti. Využitím tohto poznatku by sa mohol dať skrátiť celkový čas potrebný na grafitizáciu. Ak bude na začiatku grafitizácia prebiehať pri teplote 900°C a po čase t sa teplota zmení na 550°C, mala by celá reakcia prebehnúť za kratší čas ako keď je po celý čas grafitizácie železo zohrievané na teplotu 550°C [Liebl et al., 2010]. Aby sme mohli tento koncept vyskúšať, museli sme určiť čas t.

Na určenie času sme použili porovnanie rýchlosti reakcie v, ktorú sme zadefinovali ako

$$v = -\frac{dp_{rel}}{dt} \tag{16}$$

Mínus je tam z toho dôvodu, aby bola rýchlosť kladná, keď tlak klesá. Deriváciu z (16) sme určovali numericky z nameraných hodnôt tlaku pomocou centrálnej metódy:

$$\frac{dp_{rel}}{dt}(t) \approx \frac{p_{rel}(t+h) - p_{rel}(t-h)}{2h} \tag{17}$$

kde h je vzdialenosť medzi jednotlivými dátovými bodmi.

Chyba takejto aproximácie je

$$R = \left| \frac{p^{(3)}_{rel}(t)}{6} h^2 \right| \tag{18}$$

kde $p^{(3)}_{rel}$ je tretia derivácia a je rovná

$$\frac{-p_{rel}(t-2h) + 2p_{rel}(t-h) - 2p_{rel}(t+h) + p_{rel}(t+2h)}{2h^3} \tag{19}$$

tiež pomocou centrálnej metódy [Wikipedia, 2013].

Pred aplikáciou numerického derivovania sme ale museli ešte vyhladiť experimentálne priebehy tlaku v reaktore pre tieto dve teploty. V týchto priebehoch je totiž pomerne často prudký pokles tlaku, ktorý vzniká vtedy, keď sa do vodnej pasce dolieva tekutý dusík, aby sa udržala potrebná teplota na vychytávania vody zo zvyšku reaktora. Tieto náhle poklesy by mohli spôsobiť veľké výkyvy v hodnotách počítanej derivácie.

Priebehy sme vyhladili metódou plávajúceho priemeru pomocou piatich bodov

$$p_{rel,i} = \frac{1}{5} \sum_{n=-2}^{+2} p_{rel,i+n} \tag{20}$$

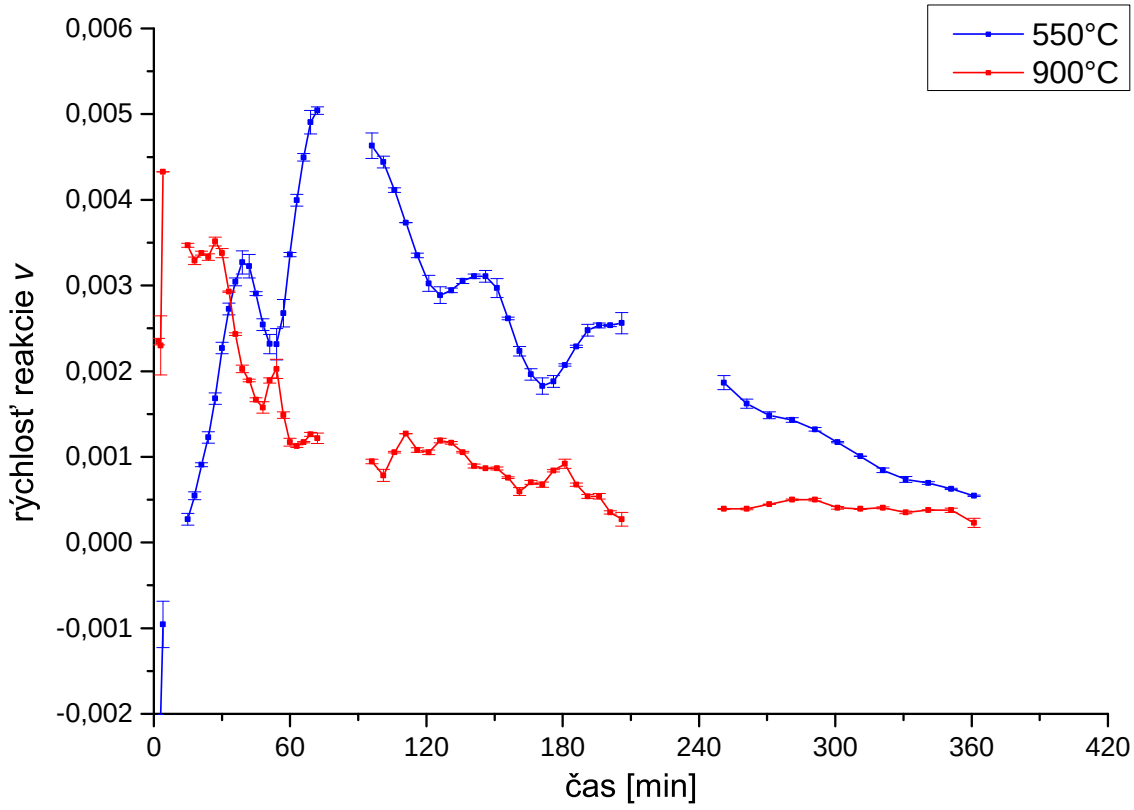
a deriváciu podľa (17) sme určovali práve z týchto "vyhladených" bodov. Rýchlosti pre dve skúmané teploty sú znázornené v grafe na Obr. 5. Niektoré časti priebehu rýchlostí sú vynechnané z toho dôvodu, že v týchto oblastiach sme menili časový interval sledovania tlaku v reaktore. Vzťahy (17) až (19) vyžadujú ale rovnaké vzdialenosti medzi jednotlivými dátovými bodmi a preto tieto oblasti nie sú vhodné na určovanie derivácie.

Priebeh rýchlostí má pomerne veľké výkyvy. Je to spôsobené jednak tým, že aj po vyhladení priebehu tlaku pokles kolíše, ale aj tým, že interval zapisovania hodnoty tlaku v okolí času t je pomerne dlhý - sú to až tri minúty. Krok h pri počítaní derivácie je práve dĺžka tohto intervalu a je preto nutné poznamenať, že tieto rýchlosti slúžia iba na kvalitatívne porovnanie priebehu reakcie pri dvoch rôznych teplotách.

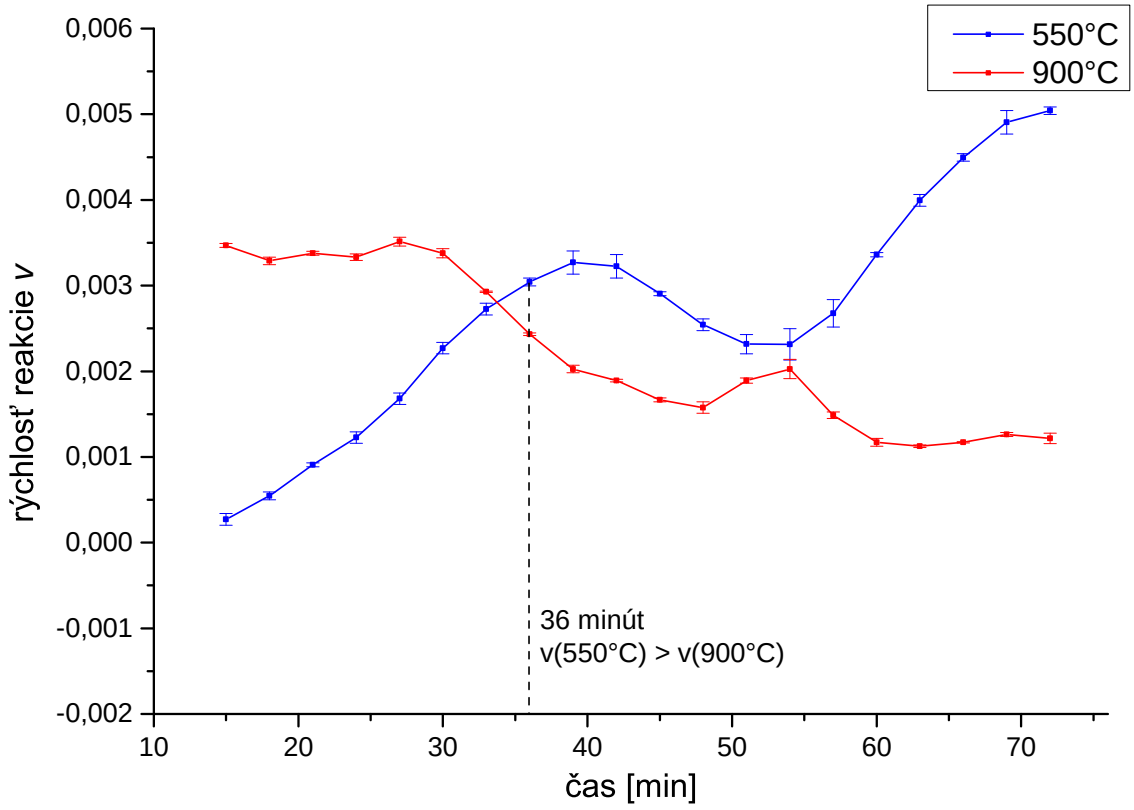
Na Obr. 6 je priblížená tá časť grafu rýchlostí, kde sa rýchlosť reakcie pri 550°C stáva väčšou ako je rýchlosť pri 900°C. Čas, v ktorom to nastáva, je 36 minút. Pre postup so zmenou teploty sme sa rozhodli teplotu zmeniť už v čase 30 minút od začiatku grafitizácie, lebo trvá niekoľko minút, kým piecka zmení svoju teplotu.

Vyskúšali sme teda postup, pri ktorom sme grafitizáciu začali pri teplote 900°C a po polhodine sme zmenili teplotu piecky na 550°C. Zmena teploty nebola síce okamžitá, ale nemohli sme piecku zohriatu na 990°C vymeniť za piecku s teplotou 550°C, lebo pri výmene by sa mohlo železo v reaktore ochladiť natoľko, že by mohli prebiehať nežiadané reakcie, napríklad tvorba metánu. Priebeh tlaku v reaktore pri takomto postupe je na Obr. 4 (údaje značené modrou farbou) a percentuálne výťažky v Tab. 3. Tlak v reaktore by dosiahol hranicu úplnej grafitizácie p_{kompl} približne v čase 330 minút od začiatku procesu, čo je o 41 minút skôr ako pri postupe, keď bola počas celého procesu piecka zohriata na 550°C. Tento údaj je iba odhad založený na priebehu v čase pred ukončením sledovania tlaku. Nebolo totiž časovo možné sledovať grafitizáciu až do úplného konca.

Ďalším faktorom ovplyvňujúcim proces grafitizácie, ktorý sme skúmali, je predpríprava použitého železného prášku. Ešte pred naplnením reaktora je možné železný katalyzátor aktivovať.



Obr. 5: Rýchlosť reakcie *v* pre 990°C a 550°C



Obr. 6: Priblíženie oblasti, v ktorej je pokles tlaku v reaktore pre 550°C rýchlejší ako pre 900°C

Existuje viacero spôsobov, ale jeden z najrozšírenejších je žíhanie vo vodíkovej atmosfére pri teplote 400-600°C po dobu jednej hodiny [Hua et al., 2004][Czernik and Goslar, 2001]. Postup so zmenou teploty spomenutý vyššie sme teda vyskúšali aj so železom, ktoré sme žiadnym spôsobom nepripravovali a aj so železom, ktoré sme pred grafitizáciou hodinu žíhali pri teplote 600°C vo vodíkovej atmosfére (priebeh značený červenou farbou na Obr. 4). Účelom tejto predprípravy je zredukovať oxidy vzniknuté na povrchu železa na čisté železo a zväčšiť tak plochu, na ktorej môže grafitizácia prebiehať [Němec et al., 2010]. Je vidieť, že pri katalyzátore s predprípravou sa reakcia dostala na hranicu p_{kompl} v čase 237 minút. To je o 93 minút menej ako so železom bez predprípravy a o 134 minút menej ako pri postupe bez zmeny teploty. Aj percentuálne výťažky boli pre tento spôsob lepšie (Tab. 3).

pred-príprava	pomer H_2:CO_2	m_{Fe} [mg]	hmotnostný výťažok [%]	tlakový výťažok [%]
nežíhané	2,85	1,71	92,56 ± 2,17	93,11 ± 3,91
žíhané	2,66	1,20	93,39 ± 2,18	105,98 ± 3,12

Tab. 3: Hmotnostný a tlakový výťažok pre postup so zmenou teploty

5 Záver

Podarilo sa nám optimalizovať priebeh grafitizácie oxidu uhličitého, kedy sme najlepšie výťažky a najkratší čas grafitizácie dosiahli pomocou zmeny teploty železného katalyzátora z 900°C na 550°C po 30 minútach od začiatku procesu a predprípravou železného prášku formou žíhania vo vodíkovej atmosfére pri teplote 600 °C po dobu jednej hodiny. Oproti referenčnému priebehu pred optimalizáciou (priebeh pri 550°C) tlak pri tomto optimalizovanom postupe klesol na hladinu úplnej grafitizácie o 134 minút skôr. Okrem skrátenia doby potrebnej na grafitizáciu sa zlepšenie prejavilo aj na vyšších percentuálnych výťažkoch grafitu.

Optimalizáciou tohto procesu na pomerne veľkých vzorkách (niekoľko mg uhlíka) sa nám podarilo dosiahnuť signifikantné urýchlenie celej reakcie, ktoré zohráva dôležitú úlohu pri grafitizácii rádovo mikrogramových vzoriek, kedy samotná reakcia môže trvať aj viac ako 12 hodín.

Poďakovanie

Rád by som sa touto formou poďakoval svojmu školiteľovi RNDr. Miroslavovi Ješkovskému, PhD. a taktiež RNDr. Alexandrovi Šivovi, PhD. za ich ochotu a trpezlivosť.

Literatúra

[Chrapan, 1974] Chrapan, J. (1974). *Radiačná chronológia*. Alfa.

[Czernik and Goslar, 2001] Czernik, J. and Goslar, T. (2001). Preparation of graphite targets in the Gliwice Radiocarbon laboratory for AMS 14C dating. *Radiocarbon*, 43.

[Hua et al., 2004] Hua, Q., Zoppi, U., Williams, A. A., and Smith, A. M. (2004). Small-mass AMS radiocarbon analysis at ANTARES. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 223-224.

[Hut et al., 1986] Hut, G., Östlund, H. G., and van der Borg, K. (1986). Fast and complete CO2-to-graphite conversion for 14C accelerator mass spectrometry. *Radiocarbon*, 28.

[Liebl et al., 2010] Liebl, J., Ortiz, R. A., Gloser, R., Handle, F., Kutschera, W., Steier, P., and Wild, E. M. (2010). Studies on the preparation of small 14C samples with an RGA and 14C-enriched material. *Radiocarbon*, 52.

[Lowe et al., 1987] Lowe, D. C., Wallace, G., and Sparks, R. J. (1987). Applications of AMS ine the atmospheric and oceanographic sciences. *Nuclear Instruments and Methods in Physics B*, 29.

[Molnár et al., 2010] Molnár, M., Rinyu, L., Nagy, T., Svingor, E., Futó, I., Veres, M., Jull, A. J. T., Burr, G. S., Cruz, R., and Biddulph, D. (2010). Developments and results from the new Hungarian graphite target line. *Nuclear Instruments and Methods in Physics B*, 268.

[Němec et al., 2010] Němec, M., Wacker, L., and Gäggeler, H. (2010). Optimization of the graphitization process at AGE-1. *Radiocarbon*, 52.

[Rinyu et al., 2007] Rinyu, L., Futó, I., Kiss, . Z., Molnár, M., Svingor, E., Quarta, G., and Calcagnile, L. (2007). Performance test of a new graphite target production facility in ATOMKI. *Radiocarbon*, 49.

[Roberts and Southon, 2007] Roberts, M. L. and Southon, J. R. (2007). A preliminary determination of the absolute 14C/12C ratio of OX-I. *Radiocarbon*, 49.

[Tuniz et al., 1998] Tuniz, C., Bird, J. R., Fink, D., and Herzog, G. F. (1998). *Accelerator Mass Spectrometry: Ultrasensitive Analysis for Global Science*. CRC Press LLC.

[Vogel et al., 1984] Vogel, J. S., Southon, J. R., Nelson, D. E., and Brown, T. A. (1984). Performance of catalytically condensed carbon for use in accelerator mass spectrometry. *Nuclear Instruments and Methods in Physics B*, 5.

[Wikipedia, 2013] Wikipedia (2013). Finite difference coefficient. `http://en.wikipedia.org/wiki/Finite_difference_coefficients`. 30/03/2013.

Materiály na vyučovanie fyziky v 6. a 7. ročníku základnej školy

Katarína Krišková *
Školiteľ: Jana Raganová ‡

Katedra fyziky, FPV UMB, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, Slovenská republika

Abstrakt

Cieľom práce je predstaviť vytvorené materiály, vhodné na vyučovanie fyziky v 6. a 7. ročníku základnej školy. Vytvorili sme dva typy materiálov. Prvý typ využíva interaktívnu tabuľu, druhý typ materiálov sú klasické materiály, ktoré môžu byť rozmnožené pre každého žiaka. Vytvorené materiály rozvíjajú nielen kognitívne ale aj komunikačné kompetencie žiakov.
Kľúčové slová: fyzika, základná škola, 6. ročník, 7. ročník, učebné materiály, interaktívna tabuľa.,

1 Úvod

Poslaním vyučovacieho predmetu fyzika v rámci nižšieho sekundárneho vzdelávania je nielen rozvíjať poznatky a vedomosti z fyziky, ale aj rôzne schopnosti, zručnosti a kompetencie žiakov.

Pri rozvíjaní kompetencií môže učiteľ použiť rozličné materiály, ktoré sa nezameriavajú len na vedomosti z daného predmetu.

Nakoľko sa fyzika považuje za jeden z málo obľúbených predmetov, aktivity a materiály, ktoré počas vyučovacieho procesu využívame, by mali žiakov aj zaujať a motivovať.

Rozvoj digitálnych technológií v súčasnosti priniesol do škôl novú didaktickú techniku, v ostatných rokoch sa čoraz viac v triedach objavujú napríklad interaktívne tabule. Interaktívna tabuľa môže vzbudiť pozornosť žiakov, motivovať ich k ďalšej činnosti.

Nielen materiály pripravené na interaktívnu tabuľu, ale aj klasické pracovné listy môžu vzbudiť pozornosť žiakov a rozvíjať ich mnohé schopnosti.

V predkladanej práci sme sa zamerali na vytvorenie súboru materiálov na vyučovanie fyziky. Materiály sa zameriavajú na učivo 6. a 7. ročníka základnej školy. Materiály, ktoré sme vytvorili, môžu byť použité ako materiály na interaktívnu tabuľu, ale aj ako klasické pracovné listy, ktoré sa rozmnožia pre každého žiaka.

2 Materiály na interaktívnu tabuľu

Nami vytvorené materiály sú vytvorené prostredníctvom softvéru, ktorý je priložený k interaktívnej tabuli. Existujú rôzne softvéry na interaktívne tabule, avšak tieto nie sú medzi sebou kompatibilné. Preto je dôležité vedieť, v akom softvéri sú materiály vytvorené.

V rámci danej práce sme vytvárali materiály prostredníctvom softvéru ActivInspire.

Vytvorené materiály sa dajú využiť v rámci fixácie vedomostí z daného učiva, či tematického celku.

2.1 Materiály na opakovanie

Materiál na opakovanie je zameraný na učivo 7. ročníka. Daný materiál sa zameriava na tematický celok Premena skupenstiev látok. Dá sa použiť pri opakovaní daného tematického celku, prípadne sa môžu jeho časti využiť samostatne, podľa potrieb učiteľa.

Prvá strana daného materiálu je zameraná na porovnanie dvoch skupenských premien - varu a vyparovania kvapaliny. Úlohou žiakov je správne priradiť výroky napísané v spodnej časti k slovu Var alebo k slovu Vyparovanie.

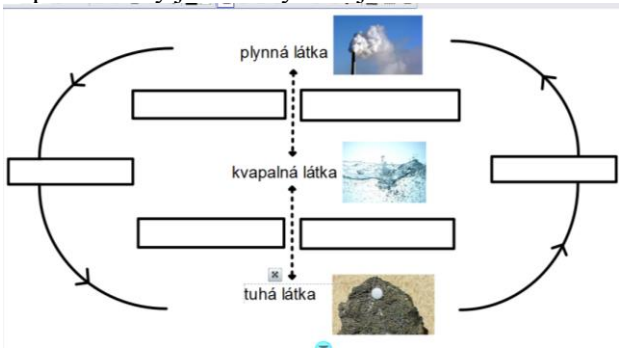
Na druhej strane sa nachádza zobrazená mriežka a tabuľka nameraných hodnôt teploty v čase. Žiaci majú na základe týchto hodnôt zostrojiť graf závislosti teploty od času. Na začiatku musia žiaci narysovať osi a zvoliť vhodnú mierku tak, aby za do grafu dali zaznačiť všetky hodnoty z tabuľky. Na základe grafu, ktorý vytvorili, môžu opísať prebiehajúci dej.

Tretia strana sa zaoberá premenou kvapalného skupenstva na plynné. Žiaci majú do prázdnych okienok napísať názov deja, ktorý charakterizuje premenu kvapalného skupenstva na plynné a názov deja, ktorý charakterizuje premenu plynného skupenstva na kvapalné.

* katarina.kri@gmail.com
‡ janka.raganova@umb.sk

Na nasledujúcej strane sa opäť vraciame ku grafom, ktoré nie sú žiakmi veľmi obľúbené. V danom cvičení majú narysovaný graf závislosti teploty od času pre neznámu kvapalinu, pričom žiaci majú opísať dej, ktorý je na grafe zobrazený. Danú úlohu môžeme využiť aj na rozbor a analýzu grafu, pýtať sa žiakov rôzne doplňujúce otázky, ktoré im pri opisovaní grafu napomôžu.

Piata strana je zameraná na opakovanie premien skupenstiev látok (Obr. 1). Na ploche je zobrazená jednoduchá pojmová mapa. V danej mape sú napísané len skupenstvá látok a k nim prislúchajúce obrázky. Úlohou žiakov je do prázdnych políčok dopísať názvy jednotlivých dejov.



Obr. 1: Pojmová mapa z modulu na opakovanie

Posledná strana je venovaná zostrojeniu grafov, ale aj čítaniu s porozumením. Na pracovnej ploche je zobrazená mriežka a narysované osi grafu. Na samostatnom papieri žiaci dostanú opis fyzikálneho deja, pričom ho majú znázorniť v grafe závislosti teploty od času.

K uvedenému materiálu sme vytvorili aj metodiku pre učiteľov, v ktorej sa nachádzajú zadania vytvorených cvičení a ich stručný opis. Metodika obsahuje aj zadanie úloh, ktoré nie sú v materiáloch pre žiakov napísané.

2.2 Fyzikálne prevodníky

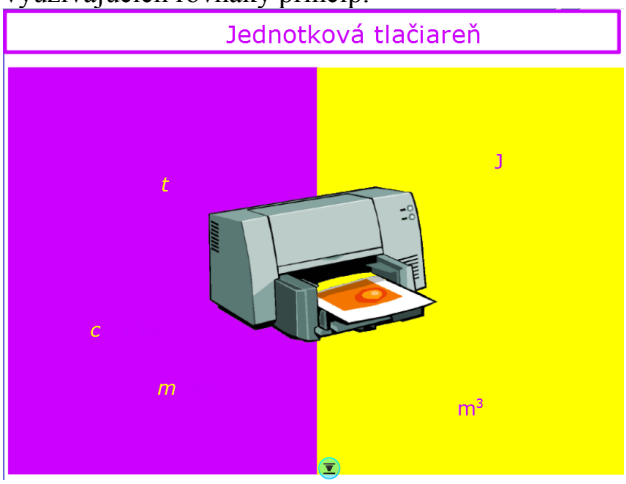
Ďalšie dva vytvorené učebné materiály sú nazvané prevodníky, pretože premieňajú objekt na iný objekt. Vytvorili sme dva typy prevodníkov – prvý typ premieňa názov fyzikálnej veličiny na jej značku. Druhý typ prevodníka premieňa značku fyzikálnej veličiny na jej jednotku.

Prevodník funguje na jednoduchom princípe. Pracovná plocha je rozdelená na dva obdĺžniky, ktoré sú vyfarbené rozdielnymi farbami. Na rozhraní dvoch obdĺžnikov sa nachádza obrázok tlačiarne, ktorý symbolizuje prechod od jedného objektu k druhému.

Na to, aby sme „zmenili“ názov fyzikálnej veličiny na jej značku, stačí pretiahnuť dané slovo, pričom prechádzame cez tlačiareň, ktorá „vytlačí“ danú značku (Obr. 2). Jedným nedostatkom daného prevodníka je, že slová, ktoré majú prechádzať cez tlačiareň, sa dajú presúvať aj mimo tohto obrázka, čím sa stráca efektnosť daného materiálu. Preto treba žiakov usmerniť, aby so slovami prechádzali len cez obrázok tlačiarne.

Vytvorené prevodníky sú zamerané na fyzikálne veličiny, s ktorými sa žiaci stretávajú v 7. ročníku pri zavedení tepla a jeho výpočtu.

Prevodníky sa dajú ľahko transformovať, pričom stačí prepísať príslušné dvojice slov a značiek. Učiteľ si tak môže s využitím nášho materiálu vytvoriť súbor ďalších učebných materiálov využívajúcich rovnaký princíp.



Obr. 2: Jednotková tlačiareň

2.3 Vlastnosti kvapalín

Materiál, ako už názov napovedá, je obsahovo zameraný na tematický celok Vlastnosti kvapalín. Materiál je určený na opakovanie daného tematického celku.

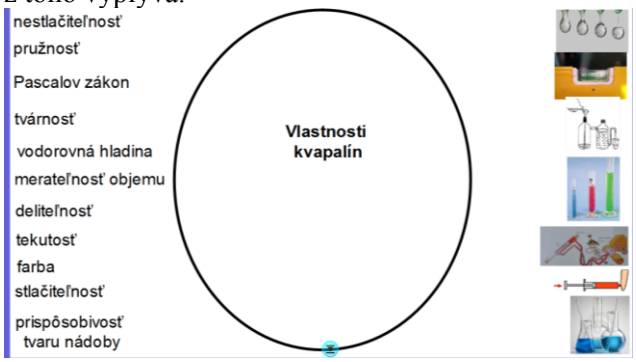
Na pracovnej ploche sa nachádzajú tri hlavné časti (Obr. 3). V ľavej časti plochy sú vypísané rôzne slová. V strede je ovál s textom Vlastnosti kvapalín. Napravo sú rôzne obrázky.

Úlohou žiakov je zo slov v ľavej časti vybrať vlastnosti, ktoré majú kvapaliny, a tieto presunúť do oválu v strede. Medzi slovami sa nachádzajú aj vlastnosti, ktoré kvapaliny nemajú. Žiaci musia teda rozlíšiť, či sa jedná o vlastnosti kvapalín, alebo nie. Slová sme vyberali zámerne tak, aby sa medzi nimi nachádzali aj také, ktoré vo fyzike nepovažujeme za fyzikálne vlastnosti.

Ďalšou úlohou žiakov je ku vlastnostiam kvapalín priradiť obrázok, ktorý zobrazuje danú vlastnosť a jej využitie v praxi. Obrázky zobrazujú hydraulické zariadenie, odmerné valce, kadičky naplnené kvapalinou, striekačku s vodou, časť vodováhy, kvapky vody, spojené nádoby. Podobné obrázky môžu žiaci nájsť aj v učebnici.

Pri priraďovaní obrázkov ku jednotlivým vlastnostiam sa môžeme so žiakmi rozprávať

o využití daných vlastností v bežnom živote. Následne sa môžeme zamerať na vlastnosti, ktoré nazývame fyzikálne veličiny. Pri fyzikálnych veličinách môžeme zdôrazniť, že sú merateľné a čo z toho vyplýva.



Obr. 3: Materiál na opakovanie vlastností kvapalín

3 „Papierové“ materiály

Pri tvorbe učebných materiálov sme sa nezamerali len na materiály, ktoré sa dajú využívať iba s interaktívnou tabuľou. Nakoľko nie vždy sa dá interaktívna tabuľa použiť, vytvorili sme aj také materiály, ktoré sa dajú pre žiakov rozmnožiť. Pri vypracovávaní daných materiálov žiakmi postačí ceruzka alebo pero. Avšak tieto materiály sa dajú využiť aj ako materiály na interaktívnu tabuľu.

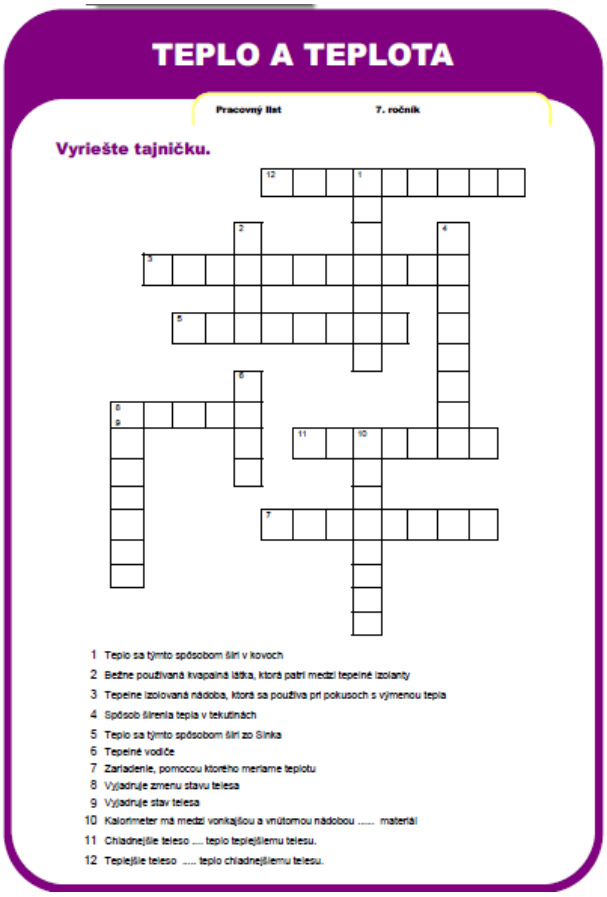
Uvedené učebné materiály sa dajú využiť najmä vo fixačnej fáze vyučovacej hodiny. Avšak materiály nemajú podobu klasických pracovných listov, kde majú žiaci dopisovať slová. Snažili sme sa vytvoriť materiály, ktoré žiakov zaujmú, ale aj poukážu na miskoncepcie, ktoré sa u žiakov vytvorili.

3.1 Tajnička

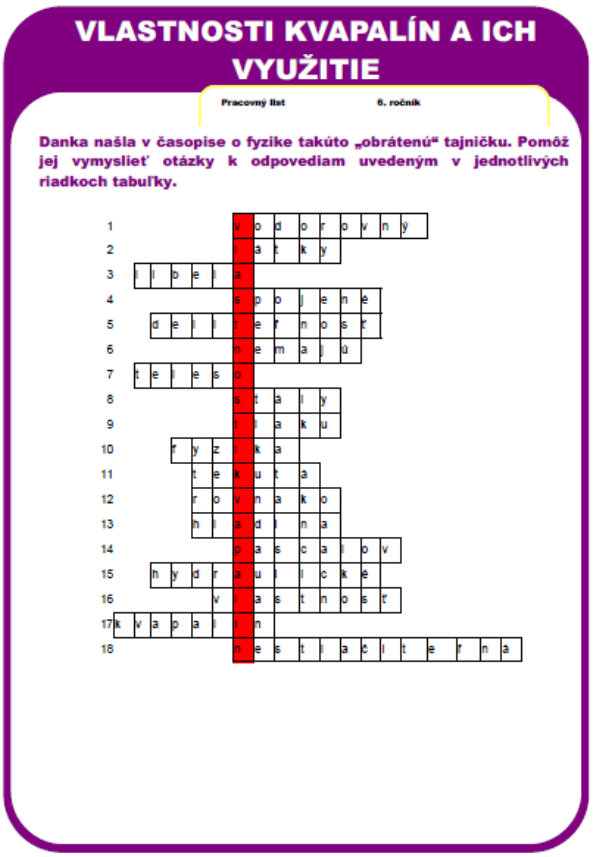
Daný pracovný list sa zameriava na opakovanie pojmov teplo a teplota, ktoré sa vyučujú v 7. ročníku. Pracovný list obsahuje tajničku, ktorú majú žiaci vylúštiť (Obr. 4). Tajnička sa zameriava na základné pojmy, ktoré si žiaci často mýlia. Jedná sa najmä o samotné pojmy teplo a teplota a o pojmy, súvisiace so šírením tepla. Tajnička bola použitá pri diagnostike vedomostí žiakov z danej oblasti, ale môže sa využiť aj vo fixačnej fáze.

3.2 Obrátená tajnička

Pod obrátenou tajničkou (Obr. 5) rozumieme tajničku, ktorá je vylúštená, ale nemá otázky. Úlohou žiakov je vymyslieť otázky, odpoveď na ktoré je napísaná v tajničke. Takto si žiaci zopakujú dané pojmy a ich charakteristiky. Pri tejto úlohe môžeme odhaliť nepresnosti, ktoré majú žiaci vo vedomostiach.



Obr. 4: Pracovný list s tajničkou



Obr. 5: Obrátená tajnička

Vytvorili sme dve obrátené tajničky. Prvá sa zameriava na opakovanie tematického celku Vlastnosti kvapalín. V tejto tajničke sa nachádzajú slová, ktoré vyjadrujú vlastnosti kvapalín a ich využitie. Tajnička obsahuje 18 pojmov, teda žiaci musia vymyslieť 18 otázok, pričom tieto sa musia zameriavať na preberanú látku. Pri tejto úlohe si žiaci precvičia nielen učivo, zistia, či mu porozumeli, ale zároveň si zdokonaľujú svoje kognitívne a komunikačné kompetencie a využívajú divergentné myslenie.

Otázky, ktoré žiaci vymýšľajú, musia mať zmysel a musia byť jednoznačne zadané a pochopiteľné aj pre ostatných spolužiakov. Druhá obrátená tajnička sa zameriava na opakovanie vlastností kvapalín, plynov a tuhých látok. Tajnička obsahuje 22 pojmov, ku ktorým musia žiaci vymyslieť otázky. Daná tajnička bola použitá v 7. ročníku pri opakovaní učiva z fyziky 6. ročníka.

3.3 Neúplná osemsmerovka

Pracovný list (Obr. 6), ktorý sa zameriava na tému Spoločné a rozdielne vlastnosti kvapalín, plynov a tuhých látok, obsahuje osemsmerovku. Táto nie je obyčajná, chýba jej legenda. Žiaci v nej teda musia nájsť slová – vlastnosti kvapalín, plynov a tuhých látok, ktoré sa naučili na predchádzajúcich hodinách, pričom medzi týmito vlastnosťami sú aj fyzikálne veličiny, s ktorými sa oboznámili. Keď v osemsmerovke nájdu vlastnosť, zapíšu ju do príslušného stĺpca, podľa toho, či sa jedná o vlastnosť kvapalín, plynov alebo tuhých látok. Po nájdení všetkých vlastností, ktoré sa v osemsmerovke nachádzajú, žiaci odpovedajú na dve otázky. Prvá otázka sa zameriava na spoločné vlastnosti látok všetkých skupenstiev. Pri odpovedi na túto otázku si môžu pomôcť nájdenými vlastnosťami, ktoré majú zoradené v jednotlivých stĺpcoch. V druhej otázke sa pýtame na vlastnosti, ktoré sú fyzikálne veličiny.

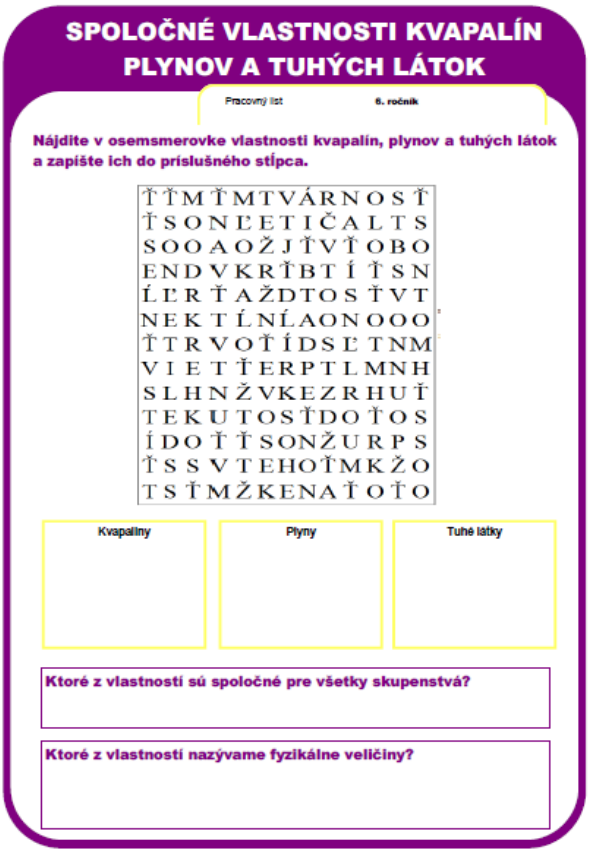
4 Záver

Materiály, ktoré sme vytvorili, sa dajú použiť v rámci vyučovania fyziky 6. a 7. ročníka základnej školy. Materiály sú zamerané najmä na opakovanie učiva, pričom rozvíjajú kognitívne a komunikačné kompetencie

Vytvorené materiály sme využili na hodinách fyziky v 6. a 7. ročníku Školy u Filipa v Banskej Bystrici. Materiály boli pre žiakov zaujímavé a podporovali ich aktivitu na hodinách.

Pri práci s interaktívnou tabuľou sa žiaci sami hlásili a chceli isť ku tabuli. Z toho sme usúdili, že pri primeranom využití interaktívnej tabule je podporená motivácia a činnosť žiakov.

Vytvorené materiály budú voľne prístupné pre všetkých učiteľov fyziky na stránke Virtuálne laboratórium fyziky Katedry fyziky Fakulty prírodných vied Univerzity Mateja Bela v Banskej Bystrici (<http://www.fpv.umb.sk/kat/kf/FyzLab/>).



Obr. 6: Pracovný list s neúplnou osemsmerovkou

Poďakovanie

Ďakujem svojej konzultantke za odbornú pomoc a cenné rady pri vytváraní materiálov a písaní práce.

Literatúra

[Lapitková et al., 2011] Lapitková, V, et al. (2011). *Fyzika pre 6. ročník základných škôl*. Bratislava : Expol Pedagogika, s r. o.

[Lapitková et al., 2011] Lapitková, V, et al. (2011). *Fyzika pre 7. ročník základnej školy a 2. ročník gymnázia s osemročným štúdiom.*. Bratislava : Didaktis, s r. o.

[Maťašovská, 2010] Maťašovská, M. (2010). *Pracovný zošit z fyziky pre 6. ročník základných škôl a 1. ročník gymnázií s osemročným štúdiom.* Bratislava : Mapa Slovakia Plus, s r. o.

[Kelecséni, Moťovská, 2010] Kelecséni, P., Moťovská, M. (2010). *Pracovný zošit z fyziky pre 7. ročník základných škôl a 2. ročník*

gymnáziií s osemročným štúdiom. Bratislava : Mapa Slovakia Plus, s r. o.

[Schreiberová et al., 2012], Schreiberová, J. a i. (2012). *Hravá fyzika 7: Pracovný zošit pre 7. ročník ZŠ a sekundu GOŠ.* Košice : Taktik vydavateľstvo, s r. o.

[Štestáková et al., 2011] Štestáková, G. a i. 2012. *Hravá fyzika 6: Pracovný zošit pre 6. ročník ZŠ a prímu GOŠ.* Košice : Taktik vydavateľstvo, s r. o.

Štátny vzdelávací program – Fyzika: Príloha ISCED 2. [online]. Dostupné na internete: <http://www.statpedu.sk/files/documents/svp/2stzs/isced2/vzdelavacie_oblasti/fyzika_isced2.pdf >

Virtuálne laboratórium fyziky [online]. Dostupné na internete: <http://www.fpv.umb.sk/kat/kf/FyzLab/>.

Woods-Saxon mean field and BCS occupancies of individual orbits (Extended Abstract)

Miroslav Macko*

Supervisor: Fedor Šimkovic[1†]

Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava, Slovensko

The possibility of observing neutrinoless double decay offers the opportunity of determining the effective neutrino mass if the nuclear matrix element were known. Theoretical calculations are uncertain, and the occupation of valence orbits by nucleons active in the decay is likely to be important. Recently, they has been determined by precisely measuring cross sections for both neutron-adding and removing transfer reactions [1]. These results indicate that the Fermi surface is much more diffuse than in theoretical calculations.

In this presentation the BCS occupancies of individual orbits are calculated by considering Woods-Saxon mean field. Recall that within a mean field approximation to many-body nuclear problem it is assumed that a single nucleon is moved independently in the averaged field $\hat{U}(i)$ of all other nucleons:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{A} \frac{\hat{p_i}^2}{2m_i} + \sum_{i<j}^{A} \hat{V}(i,j) \approx \sum_{i=1}^{A} \left[\frac{\hat{p_i}^2}{2m_i} + \hat{U}(i) \right]. \quad (1)$$

The Woods-Saxon potential takes the form

$$\hat{U}(r) = -\frac{V_0}{1+exp(\frac{r-R}{a})}. \quad (2)$$

Here, V_0, R and a are parameters representing the potential depth, nuclear radius and diffuseness of the surface, respectively.

The main aim of this work is to discuss different parametrizations and modifications of Woods-Saxon potential [2] and to study their impact on the occupation of valence proton and neutron orbits in the ground state of nuclei involved in the double beta decay of ^{76}Ge and ^{130}Te. For that purpose a code for calculation of single particle energies and wave functions is developed by taking advantage of basis of harmonic oscillator wave functions.

The pairing correlations are due to short-range part of nucleon-nucleon interaction and play a very important role in nuclei with open shells. In analogy with the Bardeen, Cooper and Schrieffer (BCS) ground state of a superconductor the wave function of ground state of even-even nuclei is represented as follows:

$$|\mathrm{BCS}\rangle = \prod_j \prod_{m>0} \left(u_j + v_j c^\dagger_{jm} c^\dagger_{j-m} \right) |-\rangle. \quad (3)$$

Here $c^\dagger_{jm}$ is creation operator of single particle state $|jm\rangle$ and u_k and v_k are variational parameters, which are determined in such way that a corresponding ground state energy has a minimum. We get a set of BCS equations

$$\left(\frac{\partial}{\partial v_j} + \frac{\partial u_j}{\partial v_j} \frac{\partial}{\partial u_j} \right) \langle \mathrm{BCS} | \hat{H}' | \mathrm{BCS} \rangle = 0. \quad (4)$$

with $\hat{H}' = \hat{H} - \lambda_n \hat{N}_n - \lambda_p \hat{N}_p$. $\hat{N}_n$ and $\hat{N}_p$ are neutron and proton particle number operators, respectively. $\lambda_{p,n}$ is the Lagrange multiplier which has a meaning of Fermi energy. The u_k^2 and v_k^2 represent the probability that a certain nucleon orbit is not or is occupied. The occupancy of orbital with total single particle angular momentum j is given by

$$occupancy(j) = (2j+1)v_j^2. \quad (5)$$

In our work several different occupancy alternatives are calculated due to considered variations of the Woods-Saxon mean field for $1p - 0f_{5/2} - 0g_{9/2}$ model space for A=76 nucleus and for $2s - 1d - 0g_{7/2} - 0h_{11/2}$ model space for A=130 nucleus and compared with measured occupancies.

References

[1] B.P. Kay et al., Phys. Rev. C 79, 021301(R) (2009); Phys. Rev. C 87, 011302(R) (2013).

[2] N. Schwierz, I. Wiedenhöver and A. Volya, ArXiv:0709.3525v1 [nucl-th].

*macko.mire@gmail.com

†simkovic@teller.dnp.fmph.uniba.sk

Štúdium rekonštrukcie $b\bar{b}$-kvarkových párov v experimente CDF

Oliver Majerský*

Školiteľ: Pavol Bartoš†

Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina 842 48 Bratislava

Abstrakt: V tejto práci sa zaoberáme rekonštrukciou dijetových eventov obsahujúcich $b\bar{b}$-kvarkové páry. Využívame Monte Carlo vzorku $p\bar{p}$ zrážok pri energii 1,96 TeV nasimulovanej pomocou generátora *Pythia*. Skúmame energetické straty b kvarkov pred hadronizáciou na partónovej úrovni a porovnávame rekonštruovanú energiu b-jetov so skutočnou energiou b kvarkov, ktoré dané b-jety vytvárajú. Cieľom je prispieť k pochopeniu rekonštrukcie $b\bar{b}$ kvarkových párov experimentom CDF, čo využijeme pri skúmaní predo-zadnej asymetrie v $b\bar{b}$ produkcii.

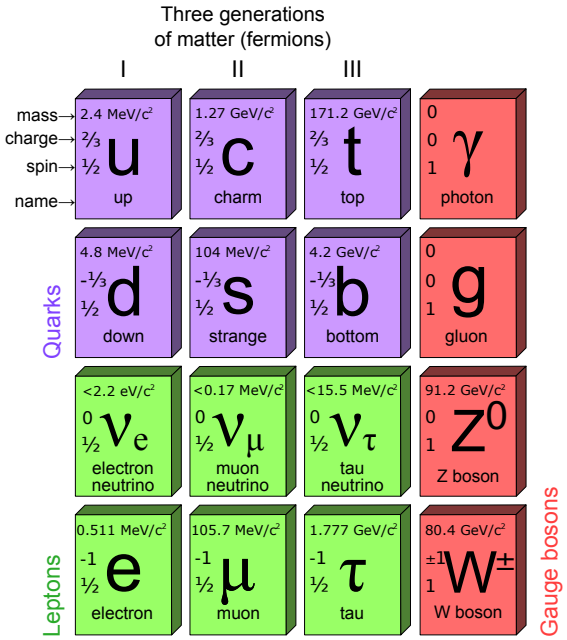
Kľúčové slová: b kvark, b-jet, predo-zadná asymetria, CDF

1 Úvod

V súčasnosti veľké množstvo experimentálnych výsledkov v oblasti časticovej fyziky je vo veľmi dobrej zhode so Štandardným modelom elementárnych častíc. Analýza experimentálnych dát získaných v experimente CDF na urýchľovači Tevatron vo Fermilabe však poukazuje na predo-zadnú asymetriu v produkcii *top*-kvarkových párov, ktorá sa od predpovedí Štandardného modelu výraznejšie odlišuje [1]. Je preto zaujímavé skúmať, či niečo podobné budeme pozorovať aj v prípade produkcie *bottom*-kvarkových párov. Aby sme však boli schopní výsledky porovnať s teoretickými predpoveďami, musíme získané výsledky pretransformovať z rekonštrukčnej úrovne na úroveň partónovú. Preto sa zaoberáme rekonštrukciou priečnej energie na Monte Carlo vzorke nasimulovanej pomocou generátora *Pythia*, ktorým simulujeme protón-antiprotónové zrážky v experimente CDF.

2 Štandardný model

Štandardný model je súborom teórií popisujúcich častice hmoty a ich interakcie na subjadrovej úrovni. Popisuje tri zo štyroch základných interakcií – elektromagnetickú, silnú jadrovú a slabú jadrovú interakciu, pričom elektromagnetická a slabá jadrová interakcia je dnes popísaná jednotnou teóriou elektroslabej interakcie. Okrem toho popisuje aj Higgsov mechanizmus, ktorý hovorí, ako častice nadobúdajú hmotnosť interakciou s Higgsovým poľom.



Obr. 1: Častice hmoty a intermediálne bozóny podľa Štandardného modelu [2].

2.1 Fundamentálne fermióny

Na základe Štandardného modelu predpokladáme, že hmota vo vesmíre je tvorená *fermiónmi*, t.j. časticami s poločíselným spinom, ktoré podliehajú Pauliho vylučovaciemu princípu. Navyše, Štandardný model hovorí, že tieto častice nemajú vnútornú štruktúru. Fundamentálne fermióny delíme do dvoch skupín: na *leptóny* a *kvarky*. Každá skupina obsahuje šesť častíc rozdelených do troch pokolení, ktoré sa navzájom líšia hmotnosťou častíc. Zatiaľ čo častice prvého pokolenia tvoria stabilnú hmotu vo vesmíre, častice druhého a tretieho pokolenia sú nestabilné a pozorujeme ich iba v kozmickom žiarení, alebo ako produkty zrážok v urýchľovačoch častíc. Ku každej z týchto častíc existuje antičastica, ktorá ma rovnakú

*oliver.majersky@gmail.com
†bartos@fmph.uniba.sk

hmotnosť, avšak opačný elektrický náboj.

Medzi leptóny patrí elektrón (e), mión (μ) a tau (τ), ktoré majú jednotkový náboj[1]. Ku každému elektricky nabitému leptónu prislúcha elektricky neutrálne neutríno: elektrónové (ν_e), miónové (ν_μ) a tau neutríno (ν_τ) (viď obr. 1). Leptóny interagujú slabo (všetky) alebo elektromagneticky (e, μ, τ). Nakoľko neutrína interagujú iba slabou interakciou, ich detekcia je mimoriadne náročná.

Ďalšou skupinou sú elementárne častice s neceločíselným elektrickým nábojom[1] – kvarky. Z obr. 1 vidíme, že rozlišujeme šesť kvarkov: *up* (u), *down* (d), *charm* (c), *strange* (s), *top* (t) a *bottom* (b). Kvarky nie sú schopné existovať samostatne, ale vytvárajú *hadróny*, častice s celočíselným elektrickým nábojom[1], ktoré delíme na dve skupiny. Ide o *mezóny* tvorené dvojicou kvark-antikvark a *baryóny*, ktoré sú tvorené trojicou kvarkov. Okrem elektrického náboja sú kvarky nositeľmi aj tzv. *farebného náboja*. Pomocou farebného náboja rozlišujeme tri kvantové stavy, v ktorých sa kvark môže nachádzať: červený, zelený a modrý (farby boli zvolené na základe analógie s optikou). Viazané stavy kvarkov (hadróny) sú tvorené iba bezfarebnou kombináciou farieb, nakoľko hadróny „nemajú farbu“.

2.2 Interakcie a intermediálne bozóny

Častice, ktoré sprostredkujú už spomenuté interakcie medzi fermiónmi, nazývame *intermediálne bozóny*. Tieto bozóny sú kvantami daného silového poľa. Predstaviť si to môžeme tak, že dve častice navzájom interagujú vymieňaním si intermediálneho bozónu. Každej interakcii prislúcha jeden alebo viacero rôznych intermediálnych bozónov.

Elektromagnetickú interakciu sprostredkúva fotón (γ). Ide o bozón s nulovým elektrickým nábojom a s nulovou pokojovou hmotnosťou.

Nosičmi slabej interakcie sú W^+, W^- a Z^0 bozón. Sú to častice s veľkou pokojovou hmotnosťou (viď obr. 1), ktorá zapríčiňuje krátky dosah tejto interakcie. Slabá interakcia je zodpovedná za rádioaktívnu premenu.

Silná interakcia je sprostredkovaná ôsmimi rôznymi gluónmi. Gluóny sú neutrálne častice s nulovou pokojovou hmotnosťou. Nesú však farebný náboj, ktorý si kvarky navzájom vymieňajú. Silná interakcia je zodpovedná za udržanie kvarkov v hadrónoch a zároveň udržiava jadrá atómov pokope pôsobením proti odpudivej elektrostatickej sile medzi protónmi. Zvláštnosťou silnej interakcie je, že sila interakcie rastie so vzdialenosťou, čo má za následok *„uväznenie kvarkov“* v hadrónoch [3].

Higgsov mechanizmus popisuje interakciu s Higgsovým poľom a vysvetľuje, prečo fotón na rozdiel od $W^\pm$ a Z^0 bozónov nemá pokojovú hmotnosť (tzv. *spontánne narušenie symetrie*) a zároveň vysvetľuje, ako hmotnosť nadobúdajú aj ostatné častice hmoty. Higgsov bozón doposiaľ nebol nájdený, avšak 4. júla 2012 ohlásili vedci z Európskej organizácie pre jadrový výskum (CERN) objav nového bozónu, ktorý má hmotnosť v oblasti 125–126 GeV/c^2 a má rovnaké vlastnosti ako Higgsov bozón [4].

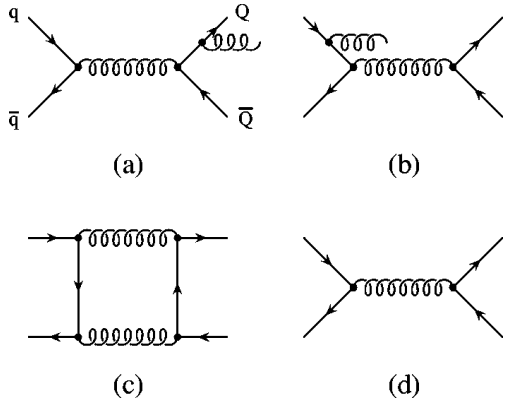
Napriek tomu, že veľké množstvo experimentálnych výsledkov je v zhode so Štandardným modelom, nejedná sa o teóriu všetkého. Nepopisuje gravitáciu a nehovorí nič o tmavej hmote a tmavej energii, ktorých podstatu nepoznáme. Štandardný model neponúka uspokojivú odpoveď na niektoré fundamentálne otázky, ako napríklad príčinu asymetrie v množstve hmoty a antihmoty vo vesmíre. V niektorých prípadoch sa predpovede Štandardného modelu dokonca značne líšia od experimentálnych výsledkov. Príkladom môže byť pozorovaná predo-zadná asymetria v produkcii top kvarkových párov [1]. Práve toto meranie je motiváciou tejto práce, v ktorej sa zaoberáme možnosťami skúmania predo-zadnej asymetrie v produkcii b kvarkových párov.

3 Predo-zadná asymetria v $b\bar{b}$ produkcii

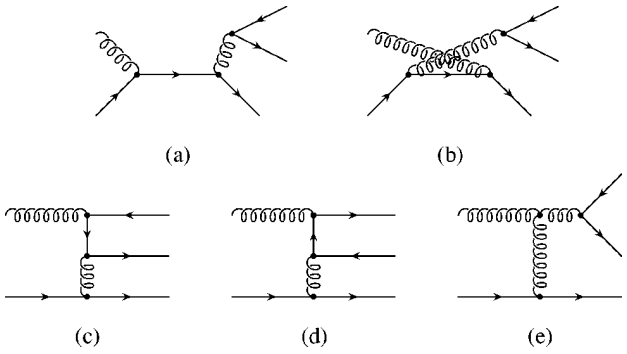
Predo-zadná asymetria hovorí o rozdielnom počte častíc (b kvarkov) vyprodukovaných v smere letiaceho protónu (dopredu) a častíc vyprodukovaných v opačnom smere (dozadu).

Bottom-kvarkové páry môžu vznikať pomocou silnej interakcie dvoma procesmi: anihiláciou kvarku s antikvarkom ($q+\bar{q} \to b+\bar{b}$), alebo gluónovou fúziou ($g+g \to b+\bar{b}$). V oboch prípadoch Štandardný model nepredpovedá predo-zadnú asymetriu v základnom ráde poruchovej teórie. Korekcie vyšších rádov však pokuazujú na niekoľko zdrojov asymetrie. V prvom rade ide o interferenciu amplitúd procesov kvark-antikvarkovej anihilácie, pri ktorých dochádza k vyžiareniu glúonu v počiatočnom a konečnom stave

[1] Elektrický náboj vyjadrený v násobkoch náboja elektrónu.



Obr. 2: Pôvod asymetrie ťažkých kvarkov pri anihilácii kvarku s antikvarkom: interferencia amplitúd procesov, pri ktorých dochádza k vyžiareniu gluónu v počiatočnom (b) a konečnom (a) stave; interferencia box diagramu (c) a Born diagramu (d) [6].



Obr. 3: Pôvod asymetrie ťažkých kvarkov vďaka interferencii amplitúd procesov kvark-gluónovych rozptylov (a)-(e) [6].

(obr. 2). Ďalším zdrojom asymetrie je interferencia amplitúd procesov kvark-gluónovej interakcie (obr. 3). Okrem toho k asymetrii prispievajú aj procesy elektroslabej interakcie $q+\bar{q} \to Z/\gamma^{\star} \to b+\bar{b}$. Procesy gluón-gluónovej fúzie ku asymetrii neprispievajú ani pri korekciach vyšších rádov. [5, 6]

3.1 Definícia predo-zadnej asymetrie

Predo-zadná asymetria sa často definuje ako funkcia produkčného uhla kvarku vzniknutého pri interakcii. Tento uhol je definovaný v sústave hmotného stredu kvarkov vstupujúcich do interakcie. Pri rekonštrukcii eventov však nevieme, aké partóny vstupovali do interakcie a nevieme, aké mali energie a hybnosti. Preto pri skúmaní asymetrie nevieme vypočítať predo-zadnú asymetriu pomocou tohto produkčného uhla. Namiesto toho ju definujeme pomocou rozdielu rapidít vyprodukovaných b a $\bar{b}$ kvarkov ($\Delta y_b = y_b - y_{\bar{b}}$), pričom rapidita je definovaná ako:

$$y = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{E+p_z c}{E-p_z c}\right), \tag{1}$$

kde E je energia skúmanej častice a p_z jej hybnosť v smere letiaceho protónu. Predo-zadnú asymetriu teda vyjadrujeme vzťahom:

$$A_{FB} = \frac{N(\Delta y_b > 0) - N(\Delta y_b < 0)}{N(\Delta y_b > 0) + N(\Delta y_b < 0)}, \tag{2}$$

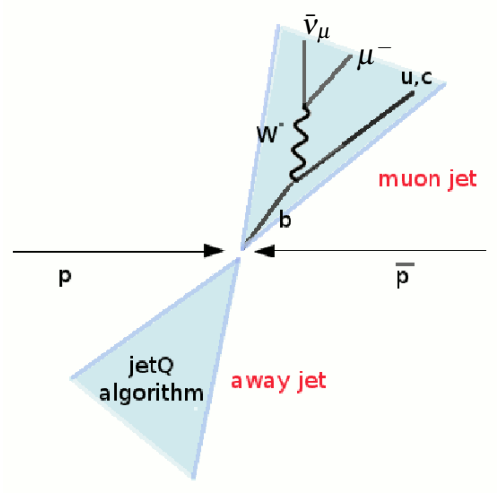
kde $N(\Delta y_b > 0)$ ($N(\Delta y_b < 0)$) vyjadruje počet prípadov, kedy rozdiel rapidít b a $\bar{b}$ kvarkov bol kladný (záporný).

4 Rekonštrukcia b-jetov

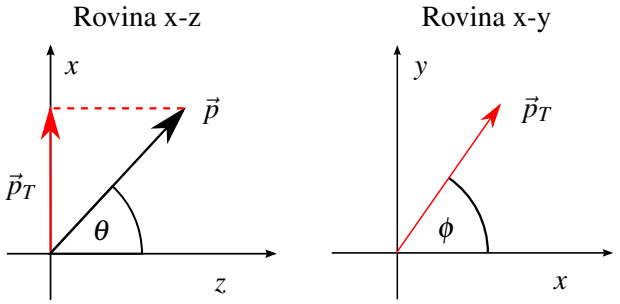
Keďže kvarky nemôžu existovať v neviazanom stave, dochádza k *hadronizácii*, t.j. vytváraniu hadrónov. Kvark alebo gluón potom pozorujeme v detektore ako spŕšku hadrónov letiacich približne rovnakým smerom, ktorej hovoríme jet. Na identifikáciu jetov pochádzajúcich z b ($\bar{b}$) kvarkov používame metódu, ktorá hľadá sekundárny priesečník trekov (stôp nabitých hadrónov v driftových komorách). Princíp tejto metódy spočíva v tom, že b-hadróny vznikajúce po zrážke sú relatívne dlho žijúce častice, takže preletia určitú vzdialenosť od bodu zrážky a až potom sa rozpadnú a vytvárajú sekundárny priesečník trekov. Ten sa prejaví ako bod ležiaci mimo bodu interakcie protónu a antiprotónu. [5]

Ďalším krokom rekonštrukcie je rozlišovanie, či b-jet pochádza z b alebo $\bar{b}$ kvarku. Za týmto účelom používame kritérium *soft lepton tag*, ktoré určuje znamienko náboja kvarku na základe prítomnosti miónu alebo anti-miónu v b-jete ako na obr. 4. Využívame pri tom fakt, že b kvark sa môže prostredníctvom slabej interakcie rozpadnúť na W^- bozón a ľahký kvark (u alebo c), pričom W^- sa rozpadá na mión a miónové anti-neutríno. Ak by išlo o $\bar{b}$ kvark, slabá interakcia by prebiehala procesom $\bar{b} \to W^+ + \bar{u}/\bar{c}$ a W^+ by sa rozpadol na anti-mión a miónové neutríno. Na základe znamienka miónu je teda možne rozlíšiť b kvark od $\bar{b}$ kvarku. [5]

Prítomnosť miónu požadujeme v jednom z b-jetov, ktorému hovoríme *miónový* jet. Zo zákonu zachovania hybnosti vyplýva, že v opačnom smere bude taktiež jet, ktorý vznikol z druhého kvarku z $b\bar{b}$ páru, ktorý nazývame *away* jet.



Obr. 4: Schéma jetov vzniknutých z b a $\bar{b}$ kvarkov pochádzajúcich z $p\bar{p}$ zrážky [5].



Obr. 5: Znázornenie uhlov θ a ϕ, hybnosti $\vec{p}$ a priečnej hybnosti $\vec{p}_T$. Smer osi z je určený smerom letiacich protónov v urýchľovači. Rovina x-y je priečna rovina kolmá na os z.

5 Skúmanie rekonštrukcie na Monte Carlo vzorke

Na skúmanie sme využili Monte Carlo (MC) vzorku vyprodukovanú generátorom Pythia, ktorá obsahuje produkty zrážok $p\bar{p}$ pri ťažiskovej energii 1,96 TeV. Vzorka obsahuje nielen informáciu o vzniknutých kvarkoch a gluónoch (partónová úroveň), ale aj simuláciu jetov a ich odozvu v detektore CDF (rekonštrukčná úroveň).

Na partónovej úrovni Pythia zaznamenáva jednotlivé častice do tzv. *HEPG banky*. Častice sú rozlišované pomocou identifikačného čísla (ID), ktoré určuje typ častice a zároveň je každej častici priradený index. My sa v našej práci budeme zaoberať iba časticami, ktoré sú produktami interakcie, takže nás nebudú zaujímať častice, ktoré vstupovali do interakcie a sú zaznamenané v HEPG banke. Pri hľadaní častíc v HEPG banke pomocou indexov a ID je treba dávať pozor na prípady, kedy je jednej častici priradených viacero indexov. Tento prípad nastane, ak kvark vyžiari gluón – kvarku je priradený jeden index pred vyžiarením gluónu a druhý index po vyžiarení gluónu.

Ako u kvarkov na partónovej úrovni, tak aj u jetov sa zaoberáme niekoľkými potrebnými veličinami. Primárne ide o absolútnu hodnotu priečnej hybnosti $|\vec{p}_T|$ a priečnu energiu E_T častice/jetu, ktoré súvisia s absolútnou hodnotu celkovej hybnosti $|\vec{p}|$ a celkovou energiou E častice/jetu nasledovne:

$$|\vec{p}_T| = |\vec{p}| \cdot \sin\theta \quad (3)$$

$$E_T = E \cdot \sin\theta, \quad (4)$$

kde θ je uhol medzi smerom vyprodukovanej častice (osou jetu) a smerom protónu vstupujúceho do interakcie. Pomocou tohto uhla definujeme aj pseudorapiditu:

$$\eta = -\ln\left(\tan\frac{\theta}{2}\right). \quad (5)$$

Pre $\theta = 90°$ je $\eta = 0$, pričom postupne narastá až do nekonečna pre $\theta \to 0°$. Naopak, pre $\theta \to 180°$ η klesá do mínus nekonečna.

Na úplný popis smeru vyprodukovanej častice (jetu) používame aj azimutálny uhol ϕ v rovine kolmej na smer letiaceho protónu. Celková konfigurácia súradníc je znázornená na obr. 5.

Pre skúmanie rekonštrukcie je taktiež dôležité vedieť kvantitatívne porovnať smer pohybu častice a smer osi jetu. Za týmto účelom využívame rozdiel vzdialenosti ΔR v dvojrozmernom priestore $\eta - \phi$ definovaný nasledovne:

$$\Delta R = \sqrt{(\eta_1 - \eta_2)^2 + (\phi_1 - \phi_2)^2}, \quad (6)$$

kde η_1 a ϕ_1, resp. η_2 a ϕ_2 sú pseudorapidita a azimutálny uhol prvej častice, resp. druhej častice. Ak sa teda dve častice pohybujú rovnakým smerom, tak ich $\Delta R = 0$. Podobne môžeme charakterizovať, či je častica v kónuse istého jetu, a to tak, že porovnáme smer častice a osi jetu. V našom prípade používame jety definované kónusom $\Delta R = 0,4$.

5.1 Skúmané veličiny

V práci sa zaoberáme energetickými stratami b kvarkov. Veličinu, ktorú sme za týmto účelom skúmali je rozdiel celkovej energie prvého a posledného b kvarku v HEPG banke ΔE_b:

$$\Delta E_b = E_{\text{last}} - E_{\text{first}}, \tag{7}$$

kde *first*, resp. *last* označuje b-kvark pre daný event, ktorý ma v HEPG banke najnižší, resp. najvyšší index. Keďže pri jetoch sa budeme zaoberať priečnou energiou (nie celkovou), zaujímal nás aj rozdiel priečnej energie $\Delta E_{T,b}$, ktorý definujeme analogicky ako v prípade rozdielu celkovej energie:

$$\Delta E_{T,b} = E_{T,\text{last}} - E_{T,\text{first}} \tag{8}$$

Pre účely skúmania rekonštrukcie $b\bar{b}$ eventov sme potrebovali určiť, či sa vytvorený b kvark nachádza v rekonštruovanom b-jete a nakoľko sa líši ich priečna energia. Pri vyžiarení alebo absorpcii gluónu b kvark zmení svoj smer. Skúmali sme preto vzdialenosť b kvarku od osi zrekonštruovaného b-jetu ΔR v priestore $\eta - \phi$ a rozdiel medzi zrekonštruovanou priečnou energiou b-jetu a priečnou energiou prislúchajúceho b kvarku vzniknutého pri interakcii:

$$\Delta E_T = E_{T,\text{b-jet}} - E_{T,b} \tag{9}$$

Rozlišovali sme štyri prípady:

- b kvark, ktorý vytvoril miónový jet
- b kvark, ktorý vytvoril away jet
- $\bar{b}$ kvark, ktorý vytvoril miónový jet
- $\bar{b}$ kvark, ktorý vytvoril away jet

5.2 Selekcia eventov

Tak, ako pri zrážkach častíc v urýchľovačoch prebieha množstvo nezaujímavých pozaďových procesov, aj naša MC vzorka obsahuje eventy, ktoré pre nás nie sú zaujímavé. V prvom rade samozrejme požadujeme, aby event obsahoval b, resp. $\bar{b}$ kvark. V prípade určovania rozdielu energii ΔE_b požadujeme, aby pre každý event HEPG banka obsahovala aspoň dva b, resp. $\bar{b}$ kvarky s rôznymi indexami.

Pri skúmaní rozdielu priečnej energie b-jetu a b kvarku požadujeme, aby v evente bol práve jeden b resp. $\bar{b}$ kvark, pričom tieto môžu vyžarovať gluóny (b, resp. $\bar{b}$ kvark pred a po vyžiarení gluónu považujeme za ten istý). Okrem toho požadujeme nasledovné kritériá:

- Miónový jet aj away jet musia byť označené ako b-jety algoritmom hľadajúcim sekundárny priesečník trekov.
- Priečna energia oboch jetov $E_T > 20\,\text{GeV}$.
- Veľkosť priečnej hybnosti miónu $|\vec{p}_T| > 10\,\text{GeV}/c$.
- Pseudorapidita miónu $|\eta| < 0,6$.
- Pseudorapidita away jetu $|\eta| < 1,0$.
- Rozdiel medzi azimutálnym uhlom miónového jetu a away jetu $\Delta\phi > 2,8\,\text{rad}$.

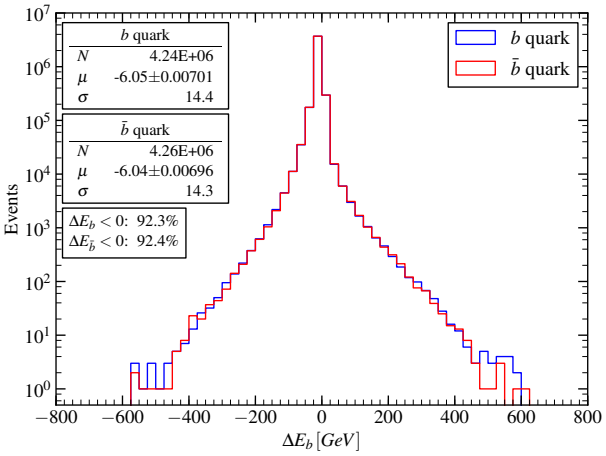
6 Výsledky a diskusia

Rekonštrukciu $b\bar{b}$ párov sme skúmali na vzorke, ktorá mala $1,3 \cdot 10^7$ eventov.

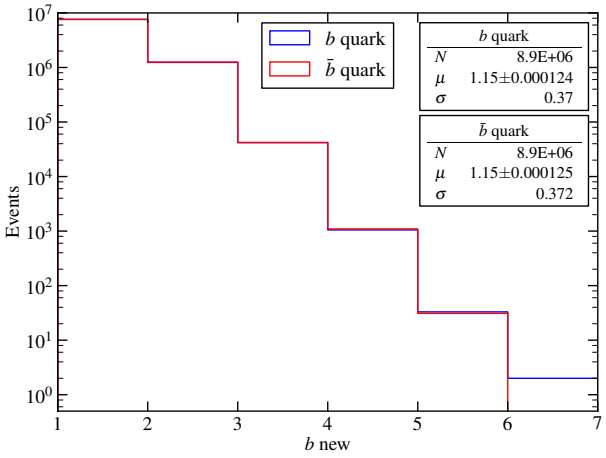
6.1 Energetické straty b kvarkov

Najskôr sme sa zaujímali o spektrum energie b kvarkov na partónovej úrovni v eventoch obsahujúcich aspoň dva b, resp. $\bar{b}$ kvarky. Zaujímalo nás, koľko b ($\bar{b}$) kvarkov stratilo v eventoch viac energie ako získalo. Sledovali sme teda rozdiel energií ΔE_b medzi kvarkom s najvyšším a najnižším indexom v HEPG banke, ako je definované v rovnici (7). Výsledky sme zobrazili v histogramoch na obr. 6.

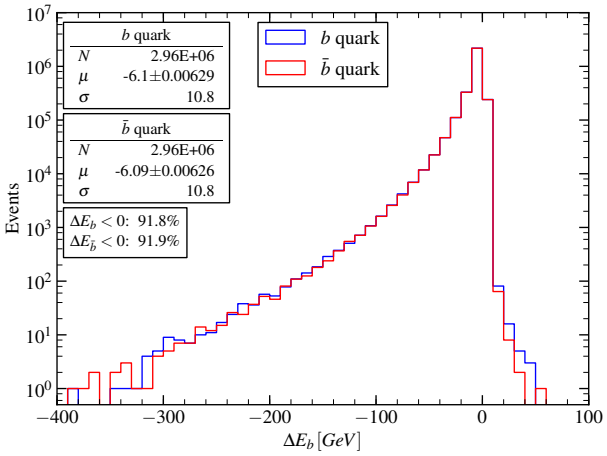
Napriek tomu, že približne 92% zo selektovaných eventov malo záporný rozdiel energie b, resp. $\bar{b}$ kvarkov, čo by sme očakávali, v histograme evidentne vidíme eventy so značne kladným rozdielom energie,



Obr. 6: Spektrum rozdielu energie ΔE_b medzi b ($\bar{b}$) kvarkom s najvyšším a najnižším indexom.



Obr. 7: Spektrum počtu rôznych b, resp. $\bar{b}$ kvarkov v evente.



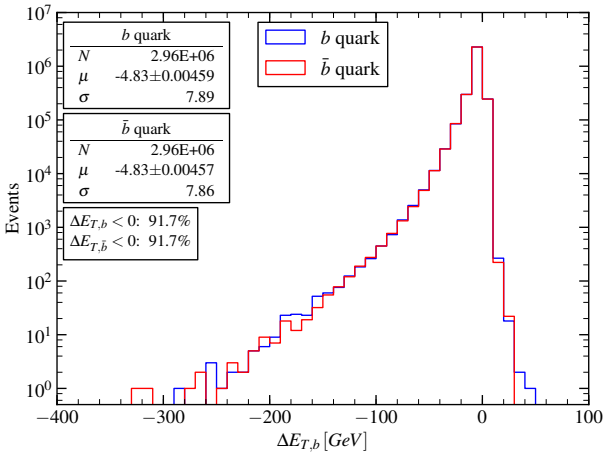
Obr. 8: Spektrum rozdielu energie ΔE_b medzi b ($\bar{b}$) kvarkom s najvyšším a najnižším indexom v HEPG banke v eventoch s jedným b ($\bar{b}$) kvarkom.

a to rádovo až niekoľko 100 GeV. Takto veľké rozdiely energií môžu byť spôsobené tým, že sa nepozeráme na jeden kvark, ktorý vyžiaril alebo pohltil gluón, ale porovnávame viacero b, resp. $\bar{b}$ kvarkov. Preskúmali sme preto, koľko je rôznych b, resp. $\bar{b}$ kvarkov v evente. Z obr. 7 vidíme, že naša vzorka obsahuje nezanedbateľné množstvo eventov, kde máme dva alebo viac rôznych b ($\bar{b}$) kvarkov.

Pre elimináciu porovnávania energií rôznych b, resp. $\bar{b}$ kvarkov sme zobrali iba eventy, kde je práve jeden b resp. $\bar{b}$ kvark. Mohlo tak nanajvýš dôjsť k vyžiareniu alebo pohlteniu gluónov týmto kvarkom. Z obr. 8 vidíme, že po tejto selekcii sú potlačené vysoké hodnoty rozdielu energií kvarku (hodnoty niekoľko 100 GeV). V spektre samozrejme zostali aj eventy s kladným rozdielom energií (8%), čo zodpovedá málo pravdepodobnému procesu pohltenia gluónu b kvarkom.

Príliš veľké rozdiely energií, ktoré môžme vidieť na obr. 6, sú spôsobené porovnávaním energie rôznych kvarkov. Spektrá však stále obsahujú eventy, v ktorých došlo k strate energie viac ako 100 GeV. Ide o eventy, v ktorých vznikol $b\bar{b}$ pár z vysoko energetického gluónu pochádzajúceho priamo z protónu, či antiprotónu a tieto kvarky potom vyžiarili energetické gluóny.

Keďže pri rekonštruovaných jetoch sa zaujímame o ich priečnu energiu, pozreli sme sa tiež na rozdiel priečnej energie b, resp. $\bar{b}$ kvarkov s najvyšším a najnižším indexom v HEPG banke v eventoch, ktoré obsahujú práve jeden b, resp. $\bar{b}$ kvark. Na obr. 9 vidíme, že toto rozdelenie má podobný charakter ako rozdelenie rozdielu celkových energií kvarku na obr. 8. Pre

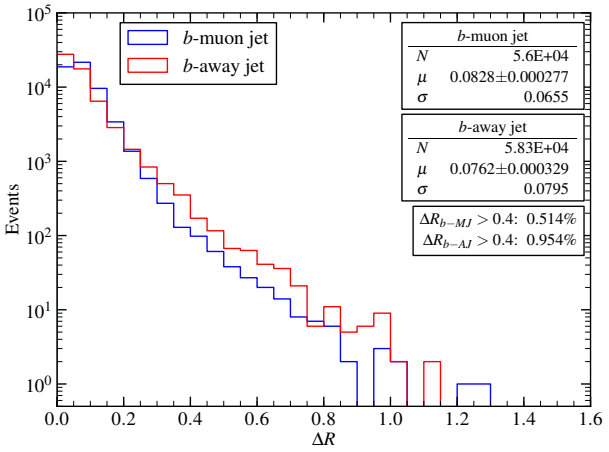


Obr. 9: Spektrum rozdielu priečnej energie $\Delta E_{T,b}$ medzi b ($\bar{b}$) kvarkom s najvyšším a najnižším indexom v HEPG banke v eventoch s jedným b ($\bar{b}$) kvarkom.

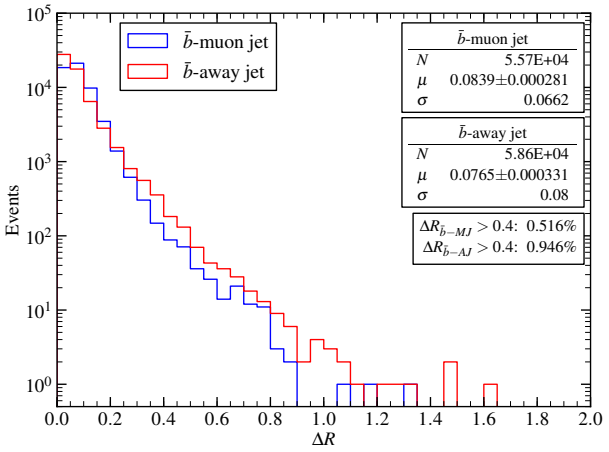
úplnosť treba dodať, že jednotlivé rozdelenia pre b kvark a pre $\bar{b}$ kvark sa výrazne neodlišujú.

6.2 Rekonštrukcia priečnej energie b jetov

Pri skúmaní rekonštrukcie priečnej energie b-jetov sme požadovali, aby eventy splnili výberové kritériá popísané v kapitole 5.2 a zároveň, aby obsahovali práve jeden b resp. $\bar{b}$ kvark. Vďaka vyžarovaniu, resp. absorpcii gluónov bude rekonštruovaná priečna energia odlišná od priečnej energie pôvodného vzniknutého $b/\bar{b}$ kvarku (s najnižším indexom v HEPG banke) a tiež sa zmení smer jeho pohybu. Rozdiel medzi smerom pohybu pôvodného b kvarku



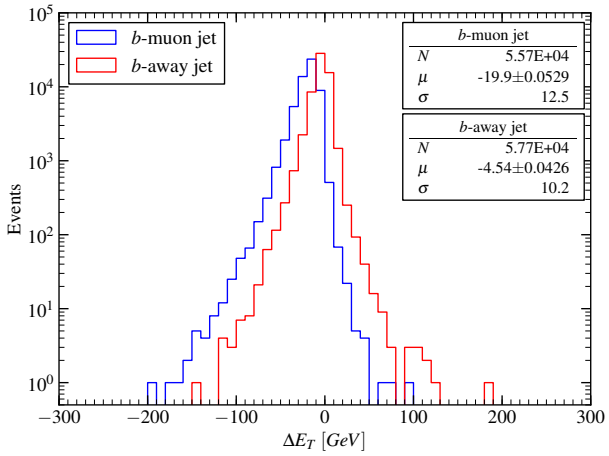
Obr. 10: Rozdiel medzi smerom pohybu b-jetu a b kvarkom, ktorý tento jet inicioval.



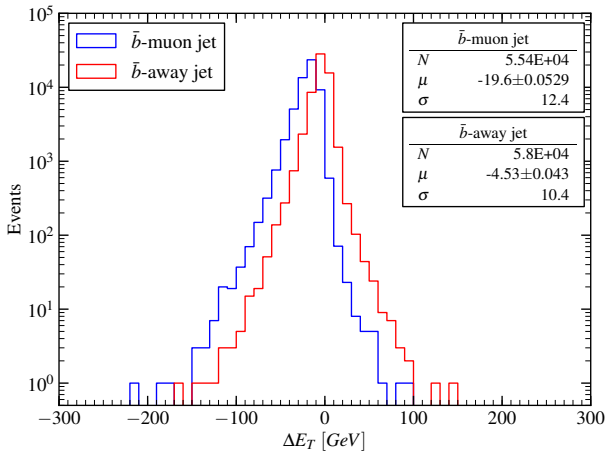
Obr. 11: Rozdiel medzi smerom pohybu b-jetu a $\bar{b}$ kvarkom, ktorý tento jet inicioval.

a osou miónového, resp. away jetu v priestore $\eta - \phi$ (ΔR_b) je znázornený na obr. 10. Prípad s $\bar{b}$ kvarkami ($\Delta R_{\bar{b}}$) je zobrazený na obr. 11. Z informácií v týchto histogramoch vidíme, že iba v zanedbateľne malom množstve eventov dochádza k tomu, že smer vzniknutého b-jetu sa vďaka vyžarovaniu gluónov vychýli od smeru pôvodného b kvarku.

Rozdiel priečnej energie rekonštruovaného miónového, resp. away jetu a b ($\bar{b}$) kvarku, ktorý tento jet inicioval, je znázornený na obr. 12 (obr.13). Pre tieto rozdelenia sme požadovali, aby rozdiel smeru pôvodného b kvarku a osi rekonštruovaného jetu bol menší ako 0,4 (teda b kvark ostal v b-jete). Ako vidno, rozdelenia zodpovedajú energetickej strate b kvarkov spôsobenej vyžiarením gluónov zobrazenej na obr. 9. Vidíme však, že rekonštruovaný b-jet môže mať aj



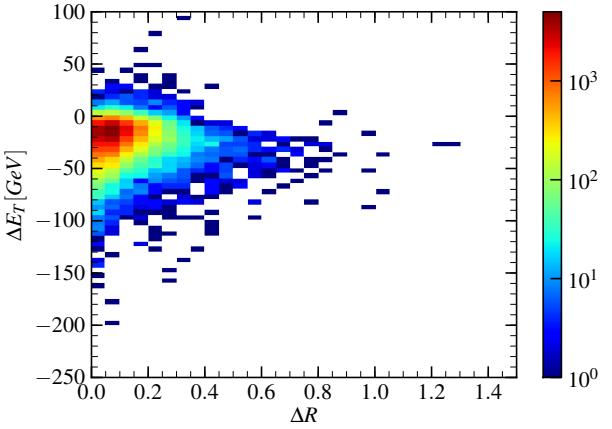
Obr. 12: Spektrum rozdielu priečnej energie ΔE_T b-jetu a b kvarku, ktorý tento jet inicioval, pre eventy s $\Delta R_b < 0,4$.



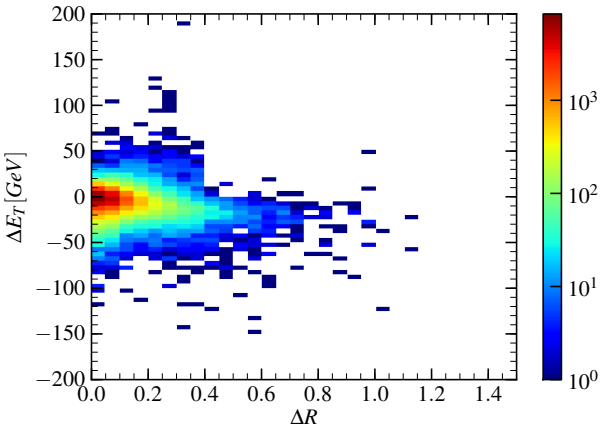
Obr. 13: Spektrum rozdielu priečnej energie ΔE_T b-jetu a $\bar{b}$ kvarku, ktorý tento jet inicioval, pre eventy s $\Delta R_{\bar{b}} < 0,4$.

väčšiu energiu ako b kvark, ktorý ho inicioval. To môže byť spôsobené pohltením gluónu b kvarkom, ale aj započítaním častíc pozadia do uvažovaného b-jetu.

Charakter závislosti rozdielu priečnych energií ΔE_T pôvodného b, resp. $\bar{b}$ kvarku a rekonštruovaného b-jetu je možné vyjadriť aj ako závislosť od rozdielu smerov pohybu pôvodného b, resp. $\bar{b}$ kvarku a rekonštruovaného b-jetu. Tieto rozdelenia môžeme vidieť na obr. 14 – 17. Pre narastajúce ΔR sledujeme posun ΔE_T do záporných hodnôt, čo poukazuje na fakt, že ak sa pôvodný b, resp. $\bar{b}$ kvark pohyboval smerom, ktorý nie je v kónuse rekonštruovaného jetu, došlo k výraznejšej strate energie pôvodného b, resp.



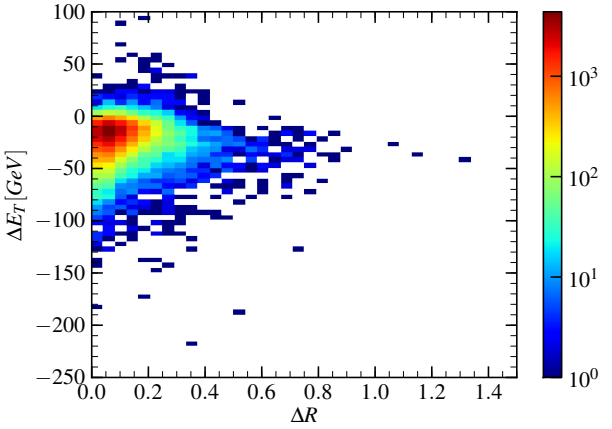
Obr. 14: Závislosť rozdielu priečnej energie ΔE_T miónového b-jetu a b kvarku, ktorý inicioval tento jet, od rozdielu smerov ich pohybu.



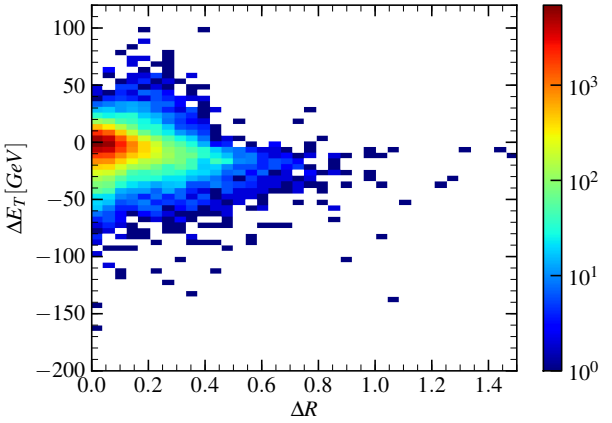
Obr. 15: Závislosť rozdielu priečnej energie ΔE_T away b-jetu a b kvarku, ktorý inicioval tento jet, od rozdielu smerov ich pohybu.

$\bar{b}$ kvarku vyžiarením gluónu. Pri rekonštrukcii tak pozorujeme menšiu energiu, než b ($\bar{b}$) kvark v skutočnosti mal.

Ďalej si môžeme všimnúť, že stredné hodnoty spektier rozdielu priečnej energie b-jetu a pôvodného b, resp. $\bar{b}$ kvarku (obr. 12, resp. 13) získané z miónového jetu a away jetu sa odlišujú približne o 15 GeV. Tento rozdiel je spôsobený tým, že energia miónového jetu neobsahuje príspevok energie miónu, ktorý sa v jete nachádza. Spektrum rozdielu priečnej energie b-jetu a pôvodného b, resp. $\bar{b}$ kvarku korigované na prítomnosť miónu v miónovom jete je zobrazené na obr. 18. Po tejto korekcii sú spomínané rozdiely medzi spektrom pre miónové a away jety približne 2 GeV.



Obr. 16: Závislosť rozdielu priečnej energie ΔE_T miónového b-jetu a $\bar{b}$ kvarku, ktorý inicioval tento jet, od rozdielu smerov ich pohybu.



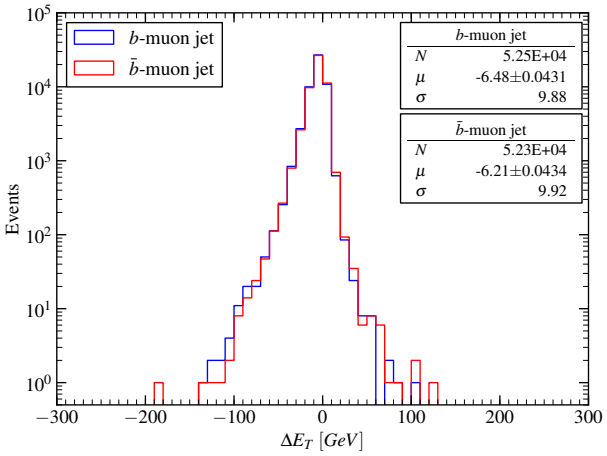
Obr. 17: Závislosť rozdielu priečnej energie ΔE_T away b-jetu a $\bar{b}$ kvarku, ktorý inicioval tento jet, od rozdielu smerov ich pohybu.

7 Záver

V tejto práci sme sa zaoberali možnosťou skúmania predo-zadnej asymetrie v $b\bar{b}$ produkcii prostredníctvom štúdia rekonštrukcie priečnej energie b-jetov na MC vzorke simulujúcej $p\bar{p}$ zrážky v experimente CDF.

Určili sme spektrum strát celkovej a priečnej energie b, resp. $\bar{b}$ kvarku v eventoch obsahujúcich iba jeden $b\bar{b}$ pár. Stredná hodnota strát priečnej energie dosahuje úroveň približne 5 GeV, a to rovnako pre b, ako aj $\bar{b}$ kvarky.

Následne sme skúmali rozdiel v priečnej energii zrekonštruovaného b-jetu v porovnaní s energiou b kvarku, ktorý tento jet inicioval, na partónovej úrovni. Zistili sme, že stredná hodnota tohto roz-



Obr. 18: Spektrum rozdielu priečnej energie ΔE_T miónového b-jetu a b, resp. $\bar{b}$ kvarku, ktorý tento jet inicioval, pre eventy s $\Delta R_b < 0,4$ s korekciou na prítomnosť miónu v miónovom jete.

dielu je pre prípad miónového jetu nižšia o približne 15 GeV v porovnaní s prípadom away jetu. Je to však spôsobené tým, že energia miónového jetu nezahŕňa energiu miónu, ktorý sa v tomto jete nachádza. Po korekcii na prítomnosť miónu v miónovom jete sa stredné hodnoty rozdielu priečnych energií pre prípady miónového jetu a away jetu odlišovali približne o 2 GeV .

V práci sme sa zaoberali prípadmi, kedy bol v evente vytvorený iba jeden $b\bar{b}$ pár. Ako sme však ukázali, výberové kritéria spĺňajú aj eventy obsahujúce viacero $b\bar{b}$ párov. Túto prácu je teda možné ďalej rozšíriť o štúdium, ako sa budú rekonštruovať eventy s viacerými $b\bar{b}$ pármi.

Poďakovanie

Týmto by som sa rád poďakoval môjmu školiteľovi Mgr. Pavlovi Bartošovi, PhD. a konzultantovi doc. RNDr. Stanislavovi Tokárovi, CSc. za ich pomoc pri nejasnostiach, pri zorientovaní sa v oblasti časticovej fyziky a za usmernenie pri práci.

Literatúra

[1] T. Aaltonen a spol. (CDF Kolaborácia). Measurement of the top quark forward-backward production asymmetry and its dependence on event kinematic properties. arXiv:1211.1003, 2012.

[2] Standard Model of Elementary Particles. <http://en.wikipedia.org/wiki/File:Standard_Model_of_Elementary_Particles.svg>. Citované 20. 2. 2013.

[3] Particle Data Group. Color charge and confinement. <http://pdg.web.cern.ch/pdg/cpep/color.html>, n.d. Citované 22. 2. 2013.

[4] CERN. CERN experiments observe particle consistent with long-sought Higgs boson. <http://press.web.cern.ch/press-releases/2012/07/cern-experiments-observe-particle\-consistent-long-sought-higgs-boson>, 2012. Citované 21. 2. 2013.

[5] P. Bartoš. First measurement of forward-backward Asymmetry in $b\bar{b}$ Production at CDF. <http://indico.cern.ch/getFile.py/access?contribId=40&sessionId=1&resId=0&materialId=slides&confId=175916>, 2012.

[6] J. H. Kühn a G. Rodrigo. Charge asymetry of heavy quarks at hadron colliders. *Physical Review*, Phys. Rev. D 59, 054017, 1999.

Použitie iónovej pohyblivostnej spektrometrie na priamu povrchovú detekciu TNT, detekčné limity a aplikácie

Michaela Malásková[†]
Školiteľ: Martin Sabo[1‡]

[1] Katedra experimentálnej fyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

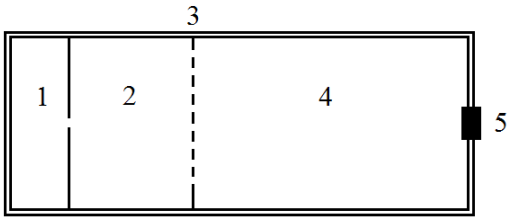
V tejto práci bude predstavená iónová pohyblivostná spektrometria (IMS) pre priamu povrchovú detekciu 2,4,6-trinitrotoluénu (TNT). Práca sa zaoberá vývojom a optimalizáciou zariadenia, pomocou ktorého sme desorbovali vzorku priamo z povrchu vzorky do reakčnej komory IMS. Dosiahnutý detekčný limit pre povrchovú detekciu TNT bol 350 pg. Pohyblivostné spektrá boli overené pomocou hmotnostnej spektrometrie. Nízke detekčné limity nám dovoľovali použiť IMS pre rôzne aplikácie, ktoré budú v tejto práci taktiež predstavené.

Kľúčové slová: Iónová pohyblivostná spektrometria, reakčné ióny, TNT, povrchová detekcia.

1 Úvod

V súčasnej dobe pri neustálej hrozbe teroristických útokov vzniká potreba rýchlej a spoľahlivej detekcie výbušnín predovšetkým na verejných miestach ako sú školy a letiská. V tejto práci sa budem venovať detekcii stopových množstiev výbušnín pomocou iónovej pohyblivostnej spektrometrie (IMS - Ion Mobility Spektrometry). K jej výhodám patrí hlavne schopnosť pracovať pri atmosférickom tlaku, vysoká citlivosť, rýchla odozva a relatívne nízka cena [1]. K nevýhodám môžeme priradiť komplikácie spojené s prácou pri atmosférickom tlaku ako napríklad prítomnosť vodných pár, ktoré vstupujú do reakcií a vytvárajú klastre. Vodné pary a vznik vodných klastrov sa dá čiastočne odstrániť pomocou lapačov vodných pár alebo vyhrievaním IMS spektrometra [1]. Ďalšou nevýhodou je problém pri identifikovaní iónov, kvôli obmedzenej databáze pohyblivosti iónov.

2 Teoretický úvod



Obrázok 1 – Schéma IMS spektrometra: 1 – Iónový zdroj, 2 – Reakčná komora, 3 – Ovládacia mriežka, 4 – Driftová trubica, 5 – Detektor

IMS spektrometer pozostáva z 3 hlavných častí a to iónového zdroja, reakčnej komory a driftovej trubice (obr. 1). V zdroji iónov sú vytvorené ióny, ktoré sú ďalej vedené homogénnym elektrickým poľom do reakčnej komory, kde prichádza k ich reakcii so vzorkou plynu a vznikajú nové ióny. Ako zdroj iónov sú najčastejšie používané rádioaktívne zdroje a korónový výboj, ktorý bol použitý aj v našej IMS. Najviac využívaným rádioaktívnym zdrojom je ^{63}Ni, najmä kvôli stabilite a tomu, že nepotrebuje externý napäťový zdroj. Ďalšie často využívané rádioaktívne zdroje sú amerícium a trícium. Ich hlavnou nevýhodou je rádioaktivita, ktorá si vyžaduje zvýšené bezpečnostné opatrenia a taktiež zabraňuje ich vývozu na niektoré zahraničné trhy. Korónový výboj ako zdroj iónov si síce na rozdiel od rádioaktívnych zdrojov vyžaduje vonkajšie napájanie elektrickou energiou, no jeho výhoda je, že je nerádioaktívny a dosahujeme s ním vyššiu citlivosť detekcie. V prípade použitia korónového výboja ako iónového zdroja je veľmi dôležité zabrániť vstupu neutrálnych produktov vznikajúcich v koróne, do reakčnej komory. To sa najčastejšie realizuje použitím opačného prúdenia ionizačného plynu ako je smer prúdenia iónov [1]. Nové ióny vzniknuté v reakčnej komore sú vedené na jej koniec, kde sa nachádza ovládacia mriežka (angl. Shutter Grid, ďalej len SG). SG má schopnosť otvoriť sa na krátku dobu a prepustiť balík iónov do driftovej trubice. Mriežka pozostáva z rovnobežných vodivých vlákien, pričom párne vlákna sú vzájomne vodivé a izolované od

[†]Michaela.malaskova@gmail.com
[‡]Martin.sabo@gmail.com

nepárnych, ktoré sú taktiež vzájomne vodivé [1]. Ak na párne aj nepárne vlákna privádzame rovnaké napätie, mriežka sa otvorí a prepustí ióny, ak je napätie rôzne, mriežka ostáva pre ióny zatvorená. V driftovej trubici sa ióny separujú na základe pohyblivosti k a sú vedené elektrickým poľom až na detektor na konci trubice. Pohyblivosť iónov je daná vzťahom, ktorý vo svojej práci odvodili Ravercomb a Mason [2]:

$$k = (3q/16n\Omega)*(2\pi/K_bTm_r)^{1/2} \quad (1)$$

kde n je koncentrácia neutrálneho plynu, K_b je Boltzmannova konštanta, T je absolútna teplota plynu, Ω je zrážkový prierez pre zrážku daného iónu s molekulou driftového plynu a m_r je redukovaná hmotnosť':

$$m_r = m*M/(m+M). \quad (2)$$

Experimentálne určujeme pohyblivosť':

$$k = L_d^2/(U*t_d) \quad (3)$$

kde L_d je dĺžka driftovej trubice, U napäťový spád na driftovej trubici a t_d je čas driftu. Pre naše potreby častejšie využívame redukovanú pohyblivosť najmä kvôli zmenám teploty a tlaku v laboratóriu, ktorá je daná vzťahom:

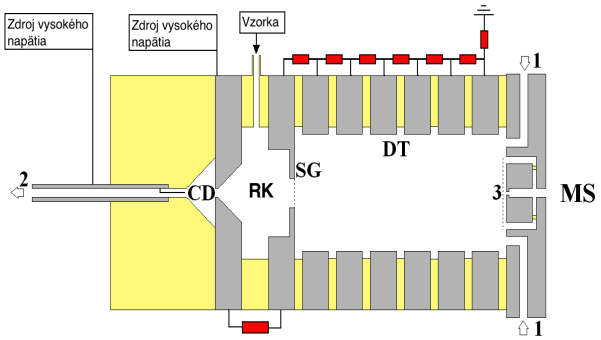
$$k_0=k*(T_0/T)*(p/p_0) \quad (4)$$

kde T_0 je rovná 273 K, T je teplota driftového plynu, $p_0$je 101 kPa a p tlak driftového plynu.

3 Experiment

V tomto experimente používame IMS, ktorý je postavený z ôsmych kruhových nerezových elektród, elektricky izolovaných teflónovými krúžkami. Prvá elektróda bola napájaná vysoko napäťovým zdrojom, táto elektróda bola spojená s ostatnými elektródami pomocou odporov v sériovom zapojení, pričom posledná elektróda bola pripojená cez odpor na zem (obrázok 2). Prvý odpor mal hodnotu 6,5 MΩ. Ostatné odpory mali hodnotu 1,6 MΩ, čím zabezpečili homogénne elektrické pole v driftovej trubici IMS. Ako zdroj iónov sme v našom spektrometri použili korónový výboj v geometrii hrot – rovina. Napätie na hrote bolo 9,5 kV a na rovine 6,5 kV. Týmto napäťovým rozdielom sme vytvorili korónový výboj. Pri takomto zapojení bola hodnota intenzity elektrického poľa 495,2 V.cm^{-1} podľa čoho sme rátali redukovanú pohyblivosť zo vzťahu (4).

Výpust plynu bol umiestnený za korónovým výbojom, čím sme dosiahli opačné prúdenie plynu ako je pohyb iónov v korónovom výboji. Vo všetkých experimentoch sme pracovali pri hodnote korónového prúdu 14 µA. Ako prúdiaci plyn sme používali syntetický vzduch, pri teplote 90,5 °C. Dĺžka driftovej trubice bola 8,25 cm. Otváracia mriežka bola vyrobená z volfrámových drôtov s priemerom 50 µm vzdialených od seba 0,5 mm. Otváracia doba mriežky bola 110 µs. Pre presnú identifikáciu bol IMS prepojený k hmotnostnému spektrometru, kvôli hmotnostnej analýze iónov.



Obrázok 2 - Schéma nami používaného IMS spektrometra: CD-korónový výboj, RK-reakčná komora, SG- ovládacia mriežka, DT- driftová trubica, 1-vstup driftového plynu, 2- výpust plynu z IMS, 3- kolektor iónov, MS- hmotnostný spektrometer zdroj [1].

IMS pracoval mierne pod atmosférickým tlakom čím sme dosiahli nasávanie atmosférického vzduchu do reakčnej komory IMS. Dosiahnutie nižšieho tlaku bolo zabezpečené membránovou pumpou, ktorá čerpala IMS spektrometer za korónovým výbojom. Pre rôzne hodnoty tlaku sme dosiahli rôzne hodnoty nasávania atmosférického vzduchu do reakčnej komory IMS (tabuľka 1).

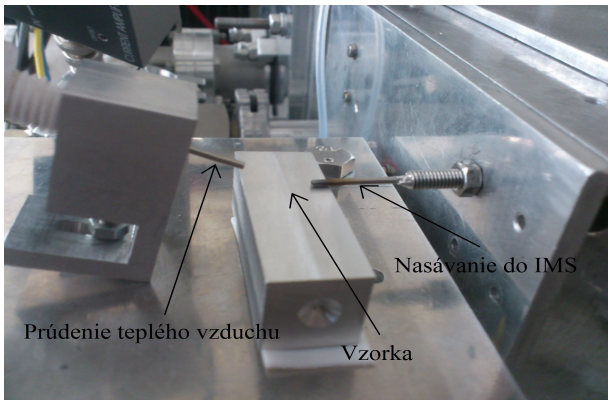
Nasávanie (ml/min)	Tlak (mbar)
200	982,5
400	973,5
600	962,5
800	950

Tabuľka 1

Hodnoty tlaku nasýtených pár 2,4,6-trinitrotoluénu sú veľmi nízke, čo komplikuje jeho detekciu, z toho dôvodu sme na povrch vzorky fúkali vyhriaty vzduch, vďaka čomu došlo k lepšiemu odparovaniu 2,4,6-trinitrotoluénu. Priemer kapiláry, cez ktorú prúdil teplý vzduch na vzorku bol 0,5 mm, priemer nasávacej kapiláry do IMS spektrometra bol taktiež 0,5 mm tak ako je to zobrazené na obrázku 3. Hodnoty teploty ohrievania sa menili s prúdením, ako je to zobrazené v tabuľke 2.

Prúdenie (ml/min)	Teplota (°C)
400	75
600	94
800	140
1000	150

Tabuľka 2



Obrázok 3 - Experimentálne nadstavenie používané na vkladanie vzorky v tomto experimente.

Vzorku sme pripravovali riedením malých množstiev odváženého 2,4,6-trinitrotoluénu v metanole. Pre lepšie premiešanie sme roztok na niekoľko minút vkladali do ultrazvukovej vaničky. Riedenie sme viackrát opakovali, aby sme mali v roztoku čo najmenšie množstvá 2,4,6-trinitrotoluénu. Začínali sme pri 1,1 mg 2,4,6-trinitrotoluénu v 1 ml roztoku a niekoľko násobným riedením sme sa dostali na hodnotu 140 ng 2,4,6-trinitrotoluénu v 0,4 ml roztoku. Zriedený roztok sme následne nabrali do 1 µl striekačky. Po vytlačení striekačky sme získali na špičke ihly kvapku 2,4,6-trinitrotoluénu a metanolu. Kvapku sme následne nechali vyschnúť a špičku ihly sme vložili namiesto vzorky tak, ako je to znázornené na obrázku 3. Z množstva 2,4,6-trinitrotoluénu zriedeného v metanole sme následne vyrátali množstvo tejto výbušniny na špičke ihly. V našom experimente sme merali 2,4,6-trinitrotoluénu v rozsahu od 110 ng po 350 pg.

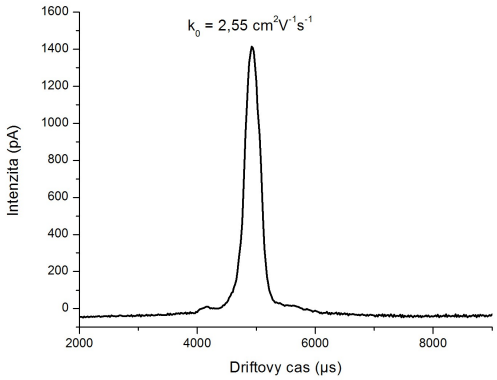
4 Výsledky a diskusia

4.1 Reakčné ióny

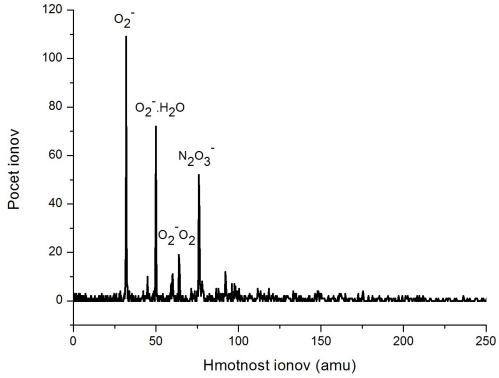
Keďže vzduch prúdi cez korónový výboj opačne ako je smer pohybu iónov, tvoria sa hlavne reakčné ióny O_2^- [3]. Na obrázku 4 je zobrazené základné IMS spektrum reakčných iónov s redukovanou pohyblivosť k_0 = 2,55 $cm^2V^{-1}s^{-1}$ rátanou podľa vzťahov 3-4. Na obrázku 5 je k nemu prislúchajúce hmotnostné spektrum. I keď na pohyblivostnom spektre vidíme iba jeden pík, z hmotnostného spektra vidíme, že tento pík je zložený z viacerých iónov. Najvýraznejší z týchto iónov je O_2^- s hmotnosťou m/z = 32 amu. Okrem neho identifikujeme aj ióny $O_2^-.H_2O$ s hmotnosťou m/z = 50 amu, $O_2^-.O_2$ s hmotnosťou m/z = 64 amu a ión $N_2O_3^-$ s hmotnosťou m/z = 76 amu. Vznik iónov O_2^- popisuje reakcia z rovnice (5) a vznik $O_2^-(H_2O)_{n+1}$ rovnica (6) [4]:

$$O_2 + e^- \rightarrow O_2^- \quad (5)$$

$$O_2^-(H_2O)_n + H_2O \rightarrow O_2^-(H_2O)_{n+1} \quad (6)$$

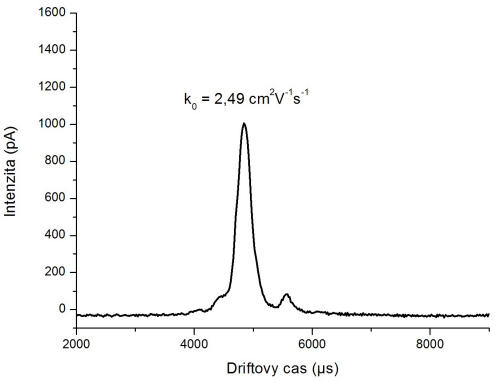


Obrázok 4 – Základné IMS spektrum

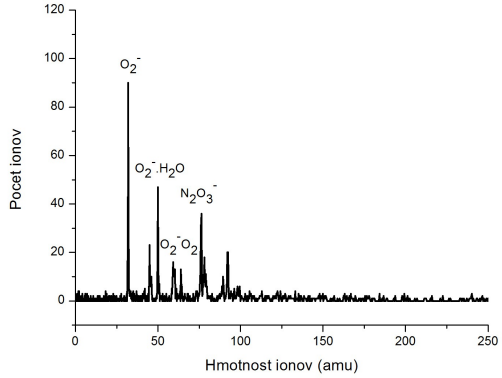


Obrázok 5 – Základné MS spektrum

Po pridaní atmosférického vzduchu pozorujeme zmenu ako IMS tak aj MS spektra. Zmena tlaku v IMS spôsobila posunutie pôvodného píku, pričom nečistoty v atmosférickom vzduchu zapríčinili malú zmenu redukovanej pohyblivosti z 2,55 $cm^2V^{-1}s^{-1}$ na 2,49 $cm^2V^{-1}s^{-1}$. Nečistoty prítomné v atmosférickom vzduchu taktiež zapríčinili vznik nového píku ako môžeme vidieť na obrázku 6. V hmotnostnom spektre na obrázku 7 vidíme tak isto veľa nových iónov spôsobených nečistotami z ovzdušia.

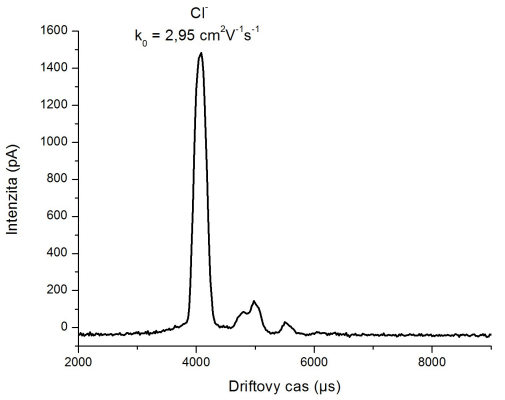


Obrázok 6 – IMS spektrum po pridaní atmosférického vzduchu

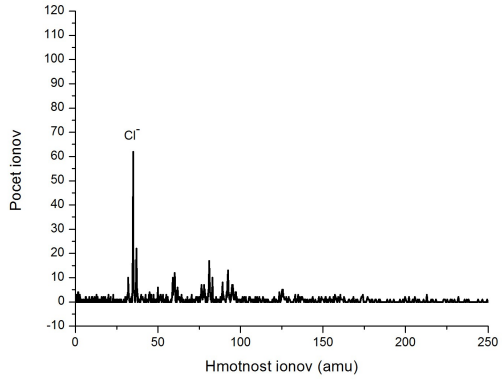


Obrázok 7 – MS spektrum po pridaní atmosférického vzduchu

Pre stabilizáciu spektra sme používali dopovanie chloridom uhličitým CCl_4. V IMS spektre na obrázku 8 identifikujeme nový pík Cl^- s redukovanou pohyblivosťou k_0 = 2,95 $cm^2V^{-1}s^{-1}$ a jeho izotopy. K nemu prislúchajúce MS spektrum je zobrazené na obrázku 9.



Obrázok 8 – IMS spektrum pri dopovaní CCl_4

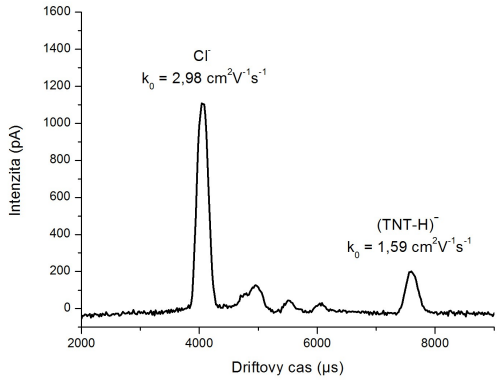


Obrázok 9 – MS spektrum pri dopovaní CCl_4

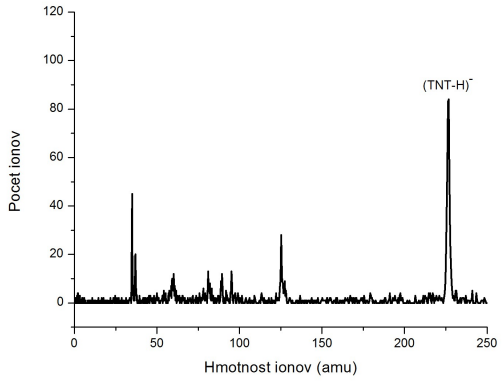
Ión Cl^- sa využíva ako reakčný ión pre detekciu výbušnín, dobre reaguje s TNT, pričom vzniká $(TNT-H)^-$ ako vidno z rovnice (7) [5]:

$$Cl^- + TNT \rightarrow TNT.Cl^- \rightarrow (TNT-H)^- + HCl \quad (7)$$

Po pridaní TNT do reakčnej komory sme identifikovali pík $(THT-H)^-$ s redukovanou pohyblivosťou k_0 = 1,59 $cm^2V^{-1}s^{-1}$. Táto hodnota sa dobre zhoduje s redukovanou pohyblivosťou uvedenou v literatúre [5]. IMS spektrum je zobrazené na obrázku 10 a MS spektrum na obrázku 11, kde je hmotnosť $(TNT-H)^-$ s m/z = 226 amu.



Obrázok 10 – IMS spektrum po vložení vzorky TNT

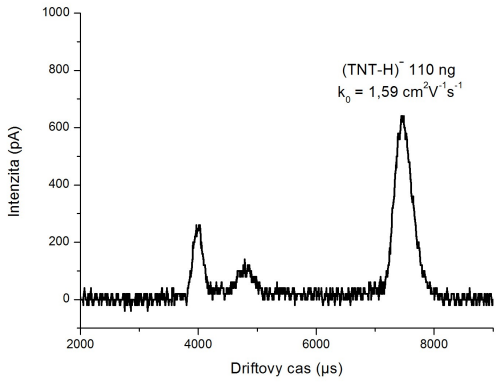


Obrázok 11 – MS spektrum po vložení vzorky TNT

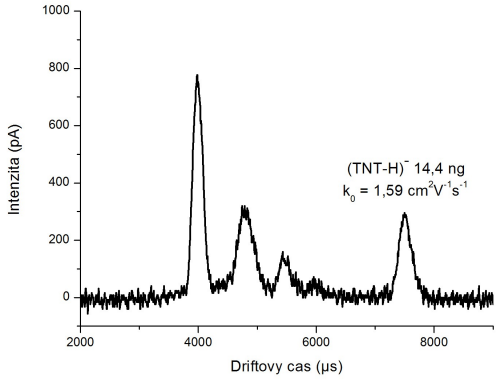
4.2 Detekčný limit

V tomto experimente sme určovali detekčný limit 2,4,6-trinitrotoluénu pomocou nanášania TNT zriedeného s metanolom tak ako to bolo popísané v experimente. Pohybovali sme sa v intervale od 110 ng až po 350 pg TNT. Na obrázku 12 vidíme veľmi výrazný pík TNT pri množstve 110 ng s redukovanou pohyblivosťou k_0 = 1,59 $cm^2V^{-1}s^{-1}$. Pre množstvo 14,4 ng je tento pík menej intenzívny, ako možno vidieť na obrázku 13, no stále je veľmi ľahko pozorovateľný, redukovaná pohyblivosť k_0 = 1,59 $cm^2V^{-1}s^{-1}$. Na obrázku 14 je zobrazené IMS spektrum pre množstvo 350 pg TNT

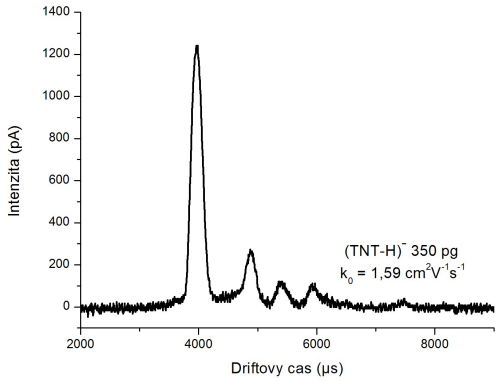
s k_0 = 1,59 $cm^2V^{-1}s^{-1}$. Stále dokážeme rozoznať pík, čím sme sa dostali na hodnotu porovnateľnú s experimentom, kedy sa vzorka vkladá priamo do IMS, kde bola vyhrievaná. V našom prípade bola vzorka vyhrievaná mimo IMS a detekčný limit bol dosiahnutý bez potreby ďalšej úpravy IMS.



Obrázok 12 – IMS spektrum so vzorkou 110 ng TNT



Obrázok 13 – IMS spektrum so vzorkou 14,4 ng TNT



Obrázok 14 – IMS spektrum so vzorkou 350 pg TNT

Dosiahnutie nízkeho detekčného limitu je veľmi dôležité, pretože nám umožňuje vystopovať výbušninu aj vo veľmi malých množstvách. Nízke detekčné limity nám dovoľujú použiť našu IMS na povrchovú detekciu TNT v rôznych aplikáciách. Pre demonštráciu sme zvolili detekciu TNT z podrážky topánok a pera.

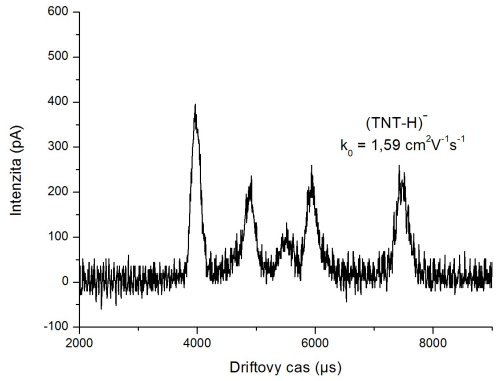
4.3 Detekcia TNT z podrážky

Na podrážky topánok sme nanášali rôzne množstvá roztoku TNT zriedeného v metanole v rozsahu od 50-3 µl, čo predstavovalo 5,5 až 90 µg TNT. Roztok bol nanesený na plochu približne 2 cm^2 tak ako je to vyznačené na obrázku 15, vzorky sme nechali zaschnúť a topánky boli následne nosené 8 hodín a týždeň odložené v laboratóriu. Meranie sme uskutočnili priložením podrážok na vyznačených miestach s tým, že bola analyzovaná plocha iba 1 mm^2, čo predstavuje plochu, ktorá bola vyhrievaná. Podrážka bola umiestnená namiesto vzorky tak ako je to znázornené na obrázku 3 na dobu niekoľko sekúnd. Bez problémov sme zadetekovali TNT na všetkých miestach podrážok.

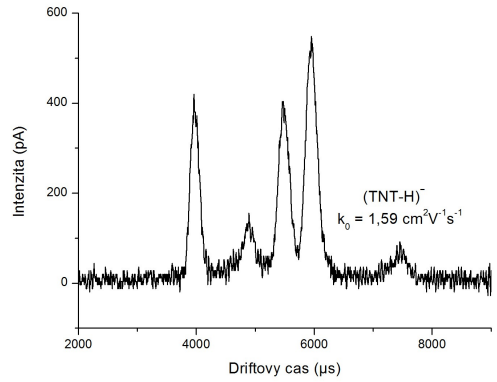


Obrázok 15 – Podrážky s aplikovaným roztokom TNT a metanolu

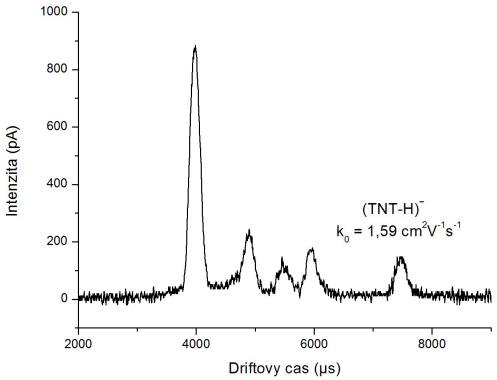
Na obrázku 16 je zobrazené IMS spektrum pre analyzovanú plochu kde bolo rozliatych 50 µl roztoku (90 µg TNT / 2cm^2) ión $(TNT-H)^-$ má redukovanú pohyblivosť k_0 = 1,59 $cm^2V^{-1}s^{-1}$. IMS spektrum analyzovanej plochy na ktorú bolo vyliatych 10 µl roztoku (18 µg TNT / 2cm^2) je zobrazené na obrázku 17 a IMS spektrum plochy, kde bolo rozliatych 3 µl roztoku (5,5 µg TNT / 2cm^2) je zobrazené na obrázku 18.



Obrázok 16 – IMS spektrum 50 µl roztoku TNT



Obrázok 17 – IMS spektrum 10 µl roztoku TNT

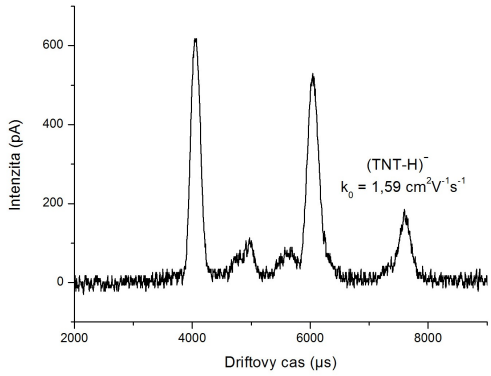


Obrázok 18 – IMS spektrum 3 µl roztoku TNT

Ako je vidno z obrázkov 16, 17, 18 intenzity píkov sa výrazne líšia. To bude pravdepodobne z viacerých dôvodov, a síce najmä kvôli rôznym množstvám nanášaného roztoku TNT. Predpokladali by sme, že zo znižujúcim sa množstvom aplikovaného roztoku bude klesať aj intenzita píku, čomu však odporujú obrázky 17 a 18. Tu bol zadetekovaný vyšší pík pri 3 µl ako pri 10 µl roztoku. To bude pravdepodobne spôsobené miestom aplikácie, pretože na niektorých miestach sa mohla chôdzou vzorka ošúchať viac ako na iných, prípadne rozdielnou dobou prikladania vzorky k IMS.

4.4 Detekcia TNT z pera

Pri ďalšej aplikácii sme rozdrvili v prstoch 1mg TNT, ktorý sme potom spätne vysypali do nádobky. Bez umytia rúk boli po 15tich minútach následne jednu hodinu písané poznámky z predmetu atómová a jadrová fyzika s perom, ktoré sme potom uschovali vo vrecúšku v laboratóriu a po troch dňoch analyzovali krátkym priložením pera k IMS. Na obrázku 19 vidno, že sme boli schopný detegovať výrazný pík TNT s redukovanou pohyblivosťou $k_0 = 1{,}59\ cm^2V^{-1}s^{-1}$.



Obrázok 19 – IMS spektrum priloženého pera

5 Záver

V tejto práci sme modifikovali IMS na priamu povrchovú analýzu. Možnosti IMS boli predstavené pre detekciu nebezpečnej výbušniny 2,4,6 – trinitrotoluén. Bol dosiahnutý detekčný limit 350 pg, čo predstavuje veľmi vysokú citlivosť. Vysoká citlivosť bola demonštrovaná na dvoch aplikáciách, pri ktorých bolo detekované TNT z podrážky a pera.

Poďakovanie

Táto práca bola podporená Slovenskou agentúrou pre výskum a vývoj, projektom APVV-0733-11 a agentúrou VEGA, projektom VEGA-1/0379/11. Poďakovanie taktiež patrí ministerstvu vnútra a ministerstvu obrany SR za dodanie TNT, ktoré boli analyzované v tomto projekte.

Literatúra

[1] – M. Sabo. Iónová pohyblivostná a hmotnostná spektrometria Dizertačná Práca. Bratislava : FMFI UK, 2010

[2] – Revercomb H. E.; Mason E. A. Anal. Chem. 1975, 47, 970-83

[3] – M. Sabo, J. Matúška, Š. Matejčík. Specific O_2^- generation in corona discharge for ion mobility spectrometry. *Talanta*, 2011

[4] – K. Sekimoto, M. Takayama. Influence of needle voltage on the formation of negative core ions using atmospheric pressure corona discharge in air. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2006

[5] – R.G. Ewing, D.A. Atkinson, G.A. Eiceman, G.J. Ewing. A critical review of ion mobility spectrometry for the detection of explosives and explosive related compounds. *Talanta*, 2001

Štúdium fyzikálnych vlasností optickej pinzety

Michaela Maliňáková[1]*
Školiteľ: Mgr. Gregor Bánó, PhD.[1‡]

[1] UPJŠ ÚFV Katedra Biofyziky, Jesenná 5, 040 01 Košice, Slovenská republika

Abstrakt

Optická pinzeta je zariadenie, ktoré využíva účinok fokusovaného laserového lúča k zachytávaniu a manipulácii mikro alebo nano objektov. V rámci bakalárskej práce bola postavená optická pinzeta s laserom o vlnovej dĺžke 785 nm pomocou ktorej sme dokázali vo vodnom prostredí zachytiť a premiestňovať sklenené guľôčky o priemeru 2 mikrometrov. Kvalita optickej pasce sa dá charakterizovať parametrom tuhosti, ktorý vystihuje mieru úmernosti medzi silou pôsobiacou na guľôčku a jej vzdialenosťou od rovnovážnej polohy v strede lúča. Pomocou detektora polohy sme sledovali Brownov pohyb zachytenej častice. Analýzou výkonového spektra oscilácií sme určili tuhosť optickej pinzety. Zistili sme, že v nami sledovanej oblasti výkonu lasera je tuhosť optickej pasce lineárnou funkciou intenzity laserového žiarenia.

Úvod

Od začiatku 70 rokov je známy princíp optickej pasce, v ktorej sú mikroskopické objekty zachytené a manipulované pomocou laserových lúčov. Optické pinzety našli vo vede široké uplatnenie. V rámci biofyziky sa používajú na meranie slabých silových pôsobení (napr. pri naťahovaní DNA molekúl), na detekciu malých posuvov (napr. pri sledovaní pohybu molekulárneho motora kinezínu), na triedenie buniek v mikrofluidických zariadeniach, atd. K novším aplikáciám optickej pinzety patrí aj použitie SERS senzorov (*Surface Enhanced Raman Scattering*), ktoré sa dajú zachytiť do optických pascí a umožňujú detekciu stopových množstiev liečiv. Na vývoji týchto senzorov sa podiela aj skupina vedcov na Katedre biofyziky ÚFV, PF, UPJŠ v Košiciach.

Úlohou predloženej práce je otestovať tuhosť (silu) novopostavenej optickej pinzety v závislosti od výkonu použitého lasera. V prvej časti práce popíšeme princíp optickej pasce. Postupne si priblížime základné princípy fungovania a taktiež elementárne komponenty, z ktorých pozostáva aparatúra optickej pinzety, ako laser a mikroskop. Jednou z hlavných parametrov charakterizujúcich kvalitu optickej pasce je tuhosť – miera úmernosti medzi silou pôsobiacou na zachytenú časticu a jej vzdialenosťou od rovnovážnej polohy v strede pasce. Na meranie tuhosti existuje viacero spôsobov, ktoré sú popísané v teoretickej časti.

Druhá časť práce je zameraná na popis aparatúry optickej pinzety postavenej na Katedre biofyziky. Tuhosť pasce sme experimentálne určili na základe výkonového spektra Brownovho pohybu zachytených častíc. Práca obsahuje popis riadiaceho programu, ktorý bol napísaný vo vývojovom prostredí LabVIEW pre zber dát. Získané výsledky sú uvedené v záverečnej časti.

1 Fyzikálne princípy optickej pinzety

Experimentálne bolo pozorované, že pokiaľ priesvitná guľôčka, nachádzajúca sa v tekutom prostredí, bola vystavená silnému laserovému žiareniu s nehomogénnym rozdelením intenzity, tak potom svetelný tlak ju stiahol do miest s najväčšiou intenzitou svetla.

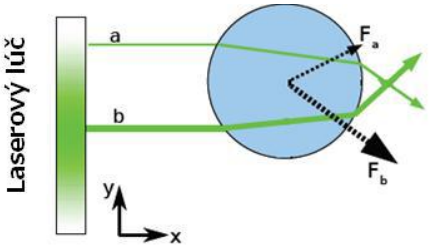
Dôvod vysvetlil Arthur Ashkin, ktorý vo svojej práci [1] popísal silové pôsobenie fotónov na guľôčku v situácii ilustrovanej obrázkom 1. V prostredí s indexom lomu n_2 sa nachádza priesvitná guľôčka s indexom lomu n_1, pričom $n_1 > n_2$. Prostredím sa šíri lúč laserového žiarenia (z ľava do prava). Bez ujmy na všeobecnosti predpokladajme, že intenzita lúča v mieste ***b*** je väčšia ako v mieste ***a***. Pri zmene smeru šírenia svetla dochádza k zmene hybnosti fotónov.

* miselitina@yahoo.com
‡ gregor.bano@upjs.sk

Po dopade na guľôčku je časť lúča ***a*** i ***b*** odrazená (odrazený lúč nie je zobrazený na obrázku) a časť sa láme, pričom v oboch prípadoch fotóny menia svoj smer. Zo zákona zachovania hybnosti plynie, že hybnosť guľôčky sa zmení tak, aby sa celková hybnosť systému (guľôčka + fotóny) zachovala. Matematicky to môžeme zapísať nasledovne:

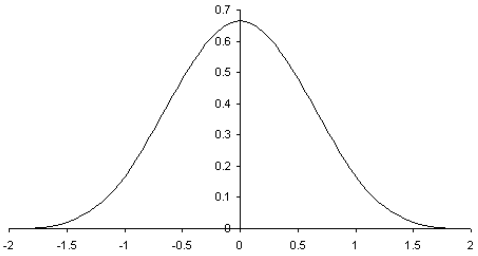
$$\vec{F} = \frac{d\overrightarrow{p_g}}{dt} = -\sum \frac{d\overrightarrow{p_f}}{dt} \quad , \qquad (1)$$

kde $\overrightarrow{p_g}$ je hybnosť guľôčky a $\overrightarrow{p_f}$ je hybnosť fotónov.



Obrázok 1. Sily pôsobiace na guľôčku umiestnenú v laserovom lúči s nehomogénnym rozdelením intenzity žiarenia.

Je vidieť, že v prípade keď pravá strana rovnice je nenulová, vzniká sila *F*, ktorá pôsobí na guľôčku. Výsledná sila sa skladá z rozptylovej a gradientovej zložky. Rozptylová sila (podľa anglického pomenovania *scattering force*) súvisí so zmenou hybnosti fotónov odrazených na rozhraní guľôčky s prostredím. Táto sila je priamo úmerná intenzite svetla a pôsobí vždy v smere šírenia laserového lúča. Gradientová sila (podľa anglického pomenovania *gradient force*) vzniká v dôsledku rozdielu intenzít svetelného žiarenia, ako je to znázornené na obrázku 1. Je vidieť, že väčší tok fotónov v mieste ***b*** ako v mieste ***a*** spôsobí výslednú silu $\overrightarrow{F_a} + \overrightarrow{F_b}$, ktorá ťahá guľôčku smerom k väčšej intenzite svetla (v smere gradientu intenzity).

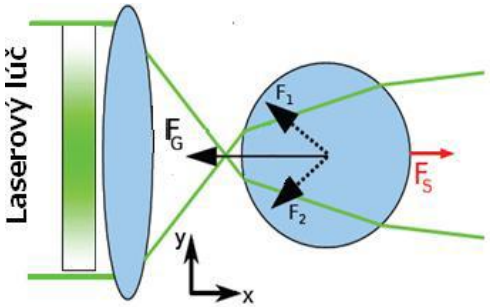


Obrázok 2. Rozdelenie intenzity žiarenia Gaussovského lúča v závislosti na vzdialenosti od stredu lúča.

V praxi sa na zachytenie guľôčiek používa tzv. gaussovský lúč, ktorého rozdelenie intenzity odpovedá gaussovskej krivke (viď. obrázok 2). Je vidieť, že intenzita žiarenia je najväčšia v strede lúča. Gradientová sila bude guľôčku ťahať vždy do rovnovážnej polohy (s nulovým gradientom) v strede lúča.

Doteraz popísané silové pôsobenie dokáže zachytiť guľôčku len v radiálnom smere. Pre vytvorenie stabilnej optickej pinzety je nutné kompenzovať pôsobenie rozptylovej sily aj v axiálnom smere. Jednou z možností je umiestnenie guľôčky do silne fokusovaného lúča. Fokusovanie dosiahneme vhodnou šošovkou.

Na obrázku 3 sú znázornené sily, ktoré pôsobia pri lome svetla na guľôčku umiestnenú tesne za ohniskom laserového lúča. Je vidieť, že vzniká sila, ktorá ťahá guľôčku smerom k ohnisku. Vieme, že rozptylová sila tlačí časticu v smere šírenia lúča. V konečnom dôsledku sa častica ustáli v rovnovážnej polohe za ohniskom, kde celková výslednica axiálnych síl bude rovná nule.



Obrázok 3. Sily pôsobiace na guľôčku umiestnenú za ohniskom silne fokusovaného laserového lúča.

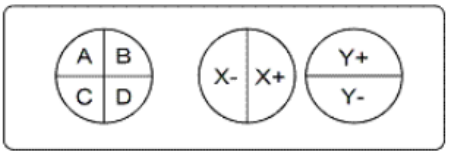
2 Optická zostava laserovej pinzety

Základná schéma pre vytvorenie optickej pasce (ktorej hlavné prvky sú laser a mikroskop) je ukázaná na obrázku 5. Mikroskop môžeme použiť buď komerčný fluorescenčný, v ktorom sa xenónová / ortuťová lampa nahradí vstupom pre laser, alebo sa využitím optických a optomechanických prvkov postaví vlastný mikroskop. Sústava šošoviek (na obrázku 5), cez ktorú prechádza laserové svetlo nám slúži na vytvorenie roztiahnutého rovnobežného zväzku lúča, ktorý ďalej vstupuje cez objektív na vzorku.

Pracovná vzdialenosť a numerická apertúra objektívu určia polohu ohniska laserového lúča vo vzorke a intenzitu (resp. gradient intenzity) v ňom. Vzorka je osvetlená lampou, ktorej svetlo prechádza

cez kondenzor. Zväčšený obraz vzorky je vytvorený sústavou objektívu a šošovky na CCD kamere (prípadne pred okulárom mikroskopu). Dichroické zrkadlá umiestnené medzi objektívom a CCD kamerou (resp. medzi kondenzorom a lampou) majú špecifickú vlastnosť a to, že odrazia len istú vlnovú dĺžku, (svetlo z lasera) a inú prepustia (svetlo z lampy).

Na určenie polohy častice zachytenej v pinzete nám slúži kvadrantový fotodetektor (skratka QPD od anglického *quadrant photodetektor*). Je to fotodióda rozdelená na 4 časti. V prípade, že zväzok laserového lúča je smerovaný presne do stredu kvadrantového fotodetektora tak zo všetkých oblastí je generovaný rovnaký foto prúd. V opačnom prípade sme schopný určiť relatívnu polohu lúča dopadajúceho na detektor.



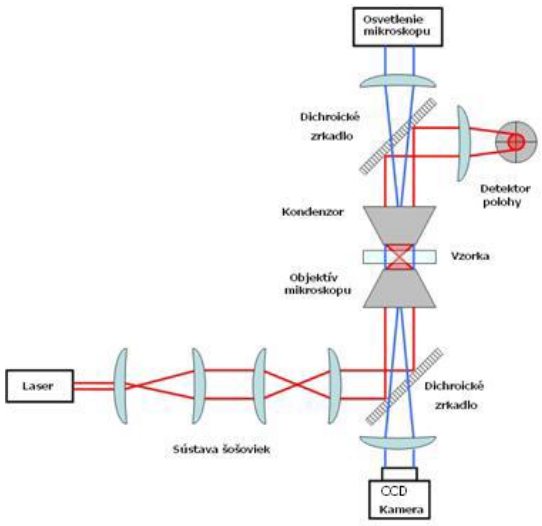
Obrázok 4. Principiálna schéma fungovania kvadrantového fotodetektora.

Označme signály z jednotlivých častí detektora A,B,C, a D ako to je vidieť na obrázku 4. Potom pozícia Y-ovej súradnice bude úmerná signálu:

$$V_y = (A + B) - (C + D)$$

a podobne X-ová súradnica sa bude dať určiť podľa

$$V_x = (A + C) - (B + D).$$



Obrázok 5. Schematické znázornenie základných prvkov optickej pinzety [2].

V prípade optickej pinzety bude zachytená častica vychýlená z rovnovážnej polohy odkláňať laserový lúč od axiálneho smeru. Túto zmenu smeru šírenia laserového zväzku môžeme zachytiť sledovaním polohy dopadu lúča na kvadrantový fotodetektor a tak môžeme určiť (relatívnu) radiálnu odchýlku častice od rovnovážnej polohy.

3 Meranie tuhosti optickej pinzety

Guľôčka zachytená v optickej pinzete vytvorenej silno fokusovaným Gaussovským lúčom sa chová (v prvom priblížení) ako harmonický oscilátor. Sila *F*, ktorá pôsobí na guľôčku v radiálnom smere je úmerná vzdialenosti stredu guľôčky od osi lúča.

$$\vec{F} = -\alpha\vec{r}. \qquad (2)$$

Fyzikálna veličina, tuhosť optickej pinzety α nám charakterizuje akú dobrú (ako silnú) optickú pascu máme. Existujú rôzne experimentálne metódy na určenie tuhosti, z ktorých tri popíšeme podrobnejšie.

A) Ekvipartičná teoréma

Pre objekt v harmonickom potenciáli s tuhosťou α platí, podľa ekvipartičnej teorémy:

$$\frac{1}{2}k_B T = \frac{1}{2}\alpha < x^2 >, \qquad (3)$$

kde k_B je Boltzmanova konštanta, T je teplota a $< x^2 >$ je stredná hodnota kvadrátu vzdialenosti častice od rovnovážnej polohy v smere *x*.

Pri použití ekvipartičnej teorémy nám stačí pomocou polohového detektora nameraťstrednú hodnotu kvadrátu radiálnej polohy častice (vo vybranom smere x alebo y) a potom z rovnice (3) vieme vypočítať tuhosť optickej pinzety α.

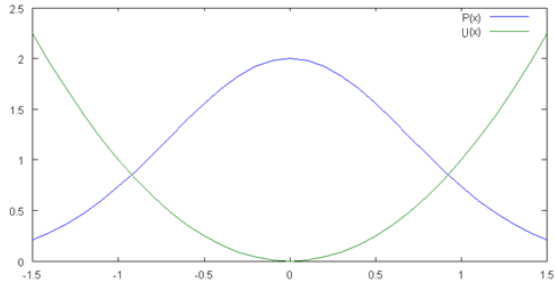
B) Analýza optického potenciálu

Pre harmonický oscilátor bude pravdepodobnosť výskytu častice vo vzdialenosti *x* od rovnovážnej polohy daná Boltzmanovým rozdelením [3]:

$$P(x) = e^{\frac{-U(x)}{k_B T}} = e^{\frac{-\alpha x^2}{2k_B T}} \qquad (4)$$

kde *P(x)* nám určuje pravdepodobnosť výskytu častice vo vzdialenosti *x* od rovnovážnej polohy a *U(x)* je potenciálna energia rovná $\frac{1}{2}\alpha x^2$.

Funkcie *P(x)* a *U(x)* sú znázornené na obrázku 6. Funkciu *P(x)* môžeme experimentálne určiť priebežným zaznamenaním polohy v čase. Fitovaním nameraného rozdelenia gaussovskou krivkou sa dá určiť tuhosť α.



Obrázok 6. Pravdepodobnosť výskytu častice *P(x)* a potenciálna energia *U(x)* ako funkcia vzdialenosti od rovnovážnej polohy.

C) Výkonové spektrum

Je vidieť, že metódy A aj B na určenie tuhosti α si vyžadujú merania absolútnej hodnoty polohy častice *x*. V praxi to znamená, že detektor na určenie polohy musí byť nakalibrovaný. Kalibračná konštanta ρ určí úmernosť medzi signálom V_x (elektrické napätie) detektora a aktuálnou polohou *x*.

$$V_x = \rho x. \tag{5}$$

Na určenie tuhosti optickej pinzety sme v tejto práci použili ďalšiu metódu, ktorá je nezávislá od kalibrácie detektora polohy. Pohybovú rovnicu častice zachytenej v harmonickom optickom potenciály, ktorá je ponorená v kvapalnom prostredí môžeme napísať ako [4]:

$$m\ddot{x} + \beta\dot{x} + \alpha x = F(t) \tag{6}$$

kde $\beta\dot{x}$ je viskózny odpor prostredia pre prípad malého Reynoldsovho čísla, β je frikčný koeficient, αx je sila optickej pasce a $F(t)$ sú stochastické termálne sily.

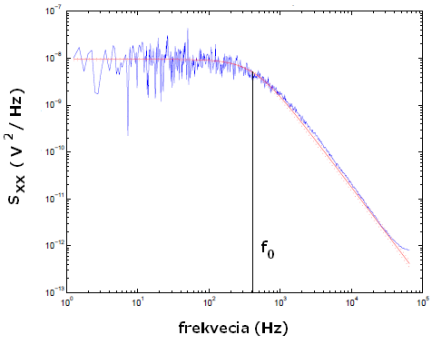
Výsledkom týchto síl koná častica Brownov pohyb v parabolickej potencionálnej jame charakterizovaný Lorentzovským výkonovým spektrom [3]:

$$S_{xx}(f) = \frac{k_B T}{\pi^2 \beta (f_0^2 + f^2)} \tag{7}$$

kde $S_{xx}(f)$ je v jednotkách vzdialenosť ^{2}/Hz, f_0 je medzná frekvencia, pre ktorú platí:

$$f_0 = \alpha (2\pi\beta)^{-1} \tag{8}$$

Funkcia (7) je znázornená na obrázku 7.



Obrázok 7. Graficky znázornené výkonové spektrum s medznou frekvenciou f_0 [5].

Frikčný koeficient sférickej častice je $\beta = 6\pi\eta a$, kde η je viskozita prostredia, a je polomer guľôčky. Keďže nemáme kalibrovaný detektor polohy, to znamená, že zo signálu nevieme priamo určiť S_{xx}. Pre výkonové spektrum nameraného napätia z kvadrantového fotodetektora bude podľa (5) a (7) platiť:

$$S_{vv} = \rho^2 S_{xx}, \tag{9}$$

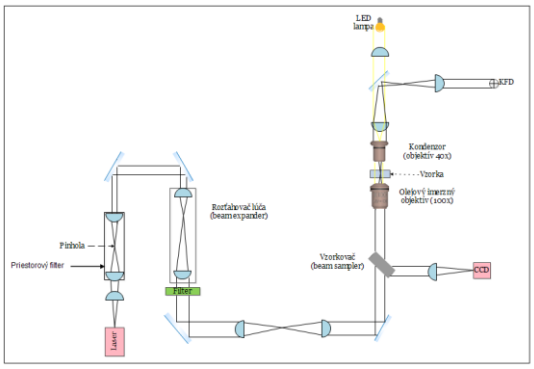
$$\text{resp. } S_{vv} = \frac{\rho^2 k_B T}{\pi^2 \beta (f_0^2 + f^2)}. \tag{10}$$

Experimentálne spektrum S_{vv} sme v tejto práci fitovali dvojparametrovou funkciou $S_{vv} = \frac{A}{f_0^2 + f^2}$. Na základe rovnice 8 sme zo získanej medznej frekvencie vypočítali tuhosť optickej pinzety. Je vidieť, že pri tejto metóde nie je potrebná kalibrácia detektora polohy.

4 Experimentálna časť

4.1 Aparatúra

V rámci tejto práce som sa zúčastnila na stavbe aparatúry optickej pinzety, s využitím diódového lasera (785 nm) a mikroskopu zostaveného v Laboratóriu laserovej spektroskopie na Katedre biofyziky ÚFV PF UPJŠ.



Obrázok 8. Nákres našej aparatúry.

Obrázok 8 predstavuje schému našej aparatúry. Laserový lúč prechádza cez kolimačnú šošovku do priestorového filtra, kde sa fokusuje do $30\ \mu m$ pinholy. Úlohou priestorového filtra je vylepšiť tvar lúča, aby sa čo najviac podobal Gaussovskému zväzku (obrázok 2). K tomu sa využije difrakcia lúča pri prechode kruhovou apretúrou. Stred vznikajúceho difrakčného obrazca v prvom priblížení odpovedá Gaussovskému lúču. Ďalej pomocou dvoch zrkadiel sa lúč dostane k rozťahovaču lúča (*beam expander*), kde sa zväzok rozšíri. Chceme širší zväzok lúča aby sme využili celú numerickú apertúru objektívu.

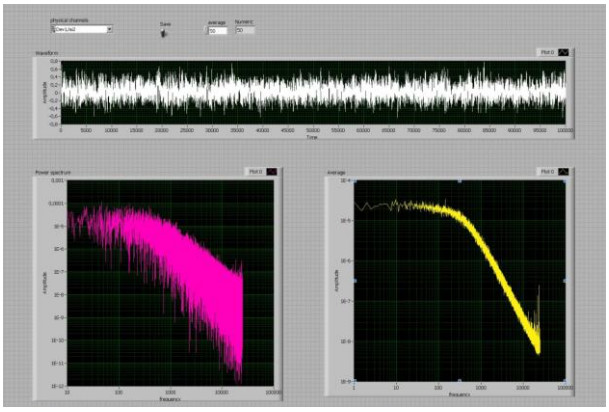
Následne lúč prechádza opäť sústavou šošoviek až do objektívu, kde sa fokusuje na vzorku. Lúč zo vzorky prechádza kondenzorom a dopadá na dichroické zrkadlo, ktoré prepustí vlnovú dĺžku svetla z LED lampy na osvetlenie vzorky ale vlnovú dĺžku lasera odrazí do kvadrantového fotodetektora. Pod objektívom je umiestnený vzorkovač (beam sampler), ktorý odráža časť svetla z lampy na CCD kameru.

4.2 Program LabVIEW

Programovacie prostredie LabVIEW (z anglického *Laboratory Virtual Instruments Engineering Workbench*) je vhodné nie len k programovaniu systému pre meranie a analýzu dát, ale aj k vizualizácii riadiaceho procesu a výsledkov. Prehľadné grafické programovacie prostredie umožňuje ľahko a rýchlo navrhovať nové aplikácie a prevádzať zmeny v konfigurácii. Z týchto dôvodov sme zvolili program LabVIEW ako najvhodnejší pre meranie a vyhodnotenie nášho experimentu [6]. Signál z kvadrantového fotodetektora bol snímaný laboratórnou kartou, ktorá bola umiestnená v počítači.

Na meranie tuhosti optickej pinzety sme napísali LabVIEW kód. V prvej časti sme zadali počiatočné podmienky ako kanál, na ktorom máme výstup z kvadrantného fotodetektora, rozsah napätia, vzorkovaciu frekvenciu a počet nameraných hodnôt. V časti dva sme spracovali vstupný analógový signál do 3 grafických panelov (viď. obrázok 9). Panel "waveform" zachytával signál amplitúdy V_x v čase. Panel "power spectrum", teda výkonové spektrum, nám ukazoval výkonové spektrum pre ten daný priebeh amplitúdy. Cyklus merania sme nechali opakovať 50-krát, aby sme dosiahli lepší pomer signál/šum. Panel "average" nám udával priemer všetkých nameraných spektier.

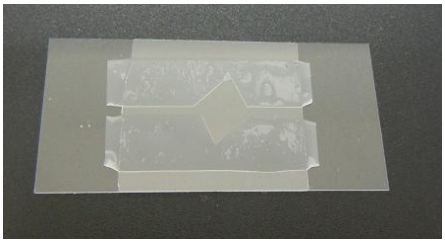
Tretia časť v programe slúži na uloženie nameraných dát a ich zapísanie do tabuľky. V prípade, že program len testujeme sa dá časť 3 vypnúť. Namerané dáta sme spracovali a fitovali teoretickou funkciou v programe Origin.



Obrázok 9. Výstupný panel z LabVIEW.

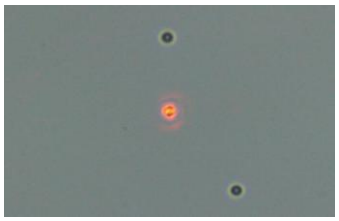
4.3 Výsledky

Pri meraní tuhosti sme pracovali s $2\mu m$ sklenenými guľôčkami, ktoré boli rozpustené vo vode. Suspenziu guľôčiek sme umiestnili medzi dvojicu mikroskopických sklíčok (hrúbka 0,17 mm), ktorých vzdialenosť približne 0,3 mm bola nastavená vrstvou parafilmu (viď. obrázok 10). Takto pripravenú vzorku sme vložili do mikroskopu.



Obrázok 10. Pripravená vzorka sklenených guľôčiek.

Následne sme zapli laserový lúč a potom pomocou skrutiek na mechanickom stolčeku sme jemne posúvali guľôčky, tak aby sa jedna zachytila do optickej pasce (viď. obrázok 11). Náš laserový lúč mal na vzorke výkon 17,4 mW, ktorý sme vedeli znížiť používaním sady filtrov vložených do dráhy lúča. Spustili sme program na meranie tuhosti a uložili výsledky. V ďalšom kroku sme pridali slabý filter a tak sa výkon lasera na vzorke znížil na 10,5 mW. Po nameraní výkonového spektra sme opäť uložili výsledky. Procedúru sme zopakovali ešte dvakrát stále so silnejšími filtrami (nižším výkonom lasera).



Obrázok 11. Ukážka obrazu zo CCD kamery zachytenej guľôčky v laserovom lúči a dvoch nezachytených guľôčiek.

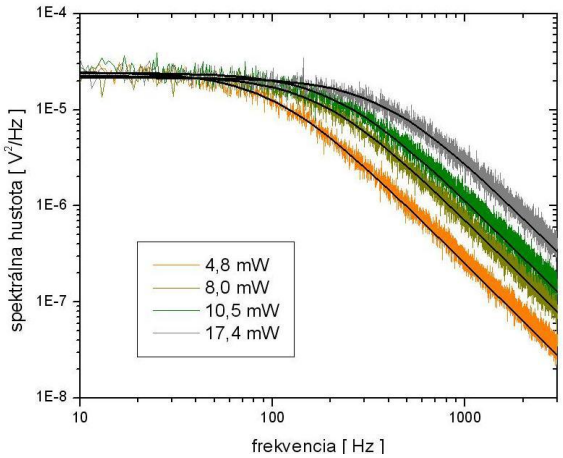
Všetky namerané dáta sme následne spracovali programom Origin, kde sme použili princíp, ktorý je opísaný v kapitole 3 c. Výkonové spektrá pre rôzne hodnoty výkonu laserového lúča, sú znázornené na obrázku 12. Experimentálne krivky sme fitovali funkciou:

$$S_{vv} = \frac{A}{f_0^2 + f^2}. \qquad (11)$$

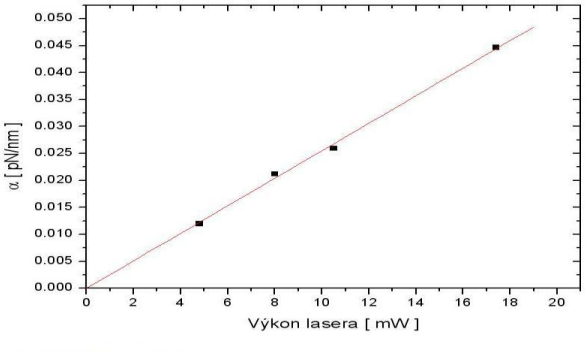
Následne sme vyrátali tuhosť optickej pasce podľa vzťahu (8). Získané hodnoty α sú vznesené v grafe na obrázku 13 v závislosti od intenzity lasera. Je vidieť, že tuhosť optickej pinzety je lineárnou funkciou intenzity lasera. Sklon lineárnej závislosti (v našom prípade 2.5 pN/nm/W) charakterizuje kvalitu optickej pinzety.

Taktiež sme vyhotovili graf pre koeficient *A* v závislosti od výkonu lasera. A je konštanta rovná (viď. rovnice 10 a 11):

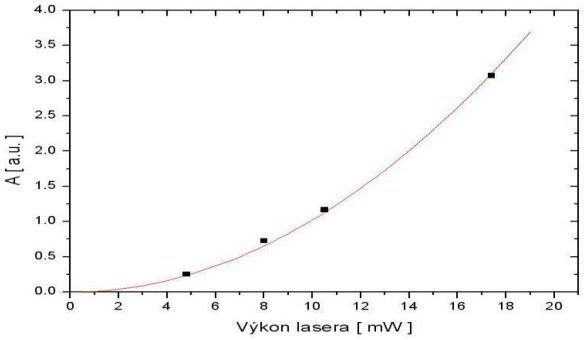
$$A = \frac{\varrho^2 k_B T}{\pi^2 \beta} \qquad (12)$$



Obrázok 12. Výkonové spektrá pre rôzne hodnoty výkonu lasera. Čierne krivky odpovedajú fitovaným závislostiam.



Obrázok 13. Tuhosť optickej pinzety v závislosti od výkonu lasera.



Obrázok 14. Koeficient *A* v závislosti od výkonu lasera.

Je vidieť, že pre dané experimentálne podmienky je *A* úmerné kvadrátu kalibračnej konštanty ϱ (rovnica 5), ktorá je mierou úmernosti medzi polohou častice a napäťovým signálom kvadrantového detektora. Kedže ϱ je lineárnou funkciou intenzity lasera, *A* sa bude meniť s kvadrátom výkonu. Na obrázku 14 je vidieť, že získané hodnoty parametra *A* sa dajú dobre preložiť parabolickou funkciou.

Záver

Cieľom tejto práce bolo určiť závislosť tuhosti optickej pinzety od výkonu lasera. Na to však boli potrebné predchádzajúce kroky ktoré zhrnieme v nasledujúcich riadkoch.

Postavili sme funkčnú aparatúru optickej pinzety založenú na diódovom laseri s vlnovou dĺžkou 785 nm, do ktorej sme zachytili sklenené guľôčky o priemere 2 µm. Pomocou programu LabVIEW sme zautomatizovali proces merania tuhosti pasce. Napísaný program vypočítal zo signálu kvadrantového fotodetektora (odpovedá polohe zachytenej častice) výkonové spektrum oscilácií okolo rovnovážnej polohy.

Analýzou výkonového spektra oscilácií sme určili tuhosť optickej pinzety pre rôzne hodnoty intenzity lasera. Dostali sme lineárnu závislosť tuhosti pasce od výkonu lasera (so sklonom 2.5 pN nm^{-1} W^{-1}), čo odpovedá naším očakávaniam. Stanovené ciele našej práce boli splnené.

Poďakovanie

Na tomto mieste by som sa rada poďakovala vedúcemu tejto práce Mgr. Gregorovi Bánóvi, PhD. za jeho cenné rady, trpezlivosť a priateľský prístup. Práca bola uskutočnená s finančnou podporou projektu VEGA 1/1154/11.

Literatúra

[1] A. Ashkin: The pressure of laser light, *Scientific American* **226**, 63-71 (1972).

[2] http://en.wikipedia.org/wiki/Optical_tweezers

[3] K. C. Neuman and S. M. Block: Optical trapping, *Rev. Sci. Instrum.* **75**, 2787 (2004)

[4] K. Svoboda, S. M. Block: Biological applications of optical forces, *Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct.* **23**, 247-85 (1994)

[5] R. Ch. Castberg: Characterisation and calibration of Optical tweezers, MASTER THESIS, Universitetet i Oslo 2008 http://folk.uio.no/renec/thesis/COT.pdf

[6] J. Vlach, J. Havlíček, Martin Vlach: Začíname s LabVIEW, Technická literatura Praha 2008

Top quark charge measurement using opposite b-jet charge information

Matej Melo*

Supervisor: Stanislav Tokár†

Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina 842 48 Bratislava

Abstract: In this paper we present the top quark charge study in $t\bar{t}$ production, which was carried out with the ATLAS experiment using 2.05fb^{-1} sample obtained at $\sqrt{s} = 7$ TeV and the corresponding Monte Carlo sample. We used the most common approach based on direct charge analyses of the top quark decay products, for b-jet charge determination a weighting technique was used. We tested a new approach based on rejecting events where both b-jets have the same sign of electric charge. Results from this method were compared with the results from the usual method, where this event cut was not required. We found out that despite big statistics loss ($\sim 47\%$) this new approach gives better results.

Keywords: top quark, b-jet, jet charge, combined charge, lepton and b-jet pairing algorithm

Introduction

In 1995 a new particle was discovered in Fermilab on CDF and D0 experiments [1, 2]. It is widely accepted that this particle is the Standard Model (SM) top quark with charge $+2/3$ [1]. At the end of nineties a theoretical model appeared [3] which predicted an exotic heavy quark $\tilde{t}$ (XM quark) with mass around 170 GeV (similar to the mass of the observed quark) but with charge $-4/3$. In this model the top quark with charge $+2/3$ also exists, but with mass around 270 GeV. Though the mentioned model was experimentally excluded due to non/existence of quark with mass around 270 GeV, it is still important to distinguish experimentally whether we observe SM or XM quark. A strong preference to the SM - at 95% confidence level (CL) - was given by CDF and D0 experiments [4, 5, 6]. First results from the ATLAS [7, 8] experiment at 0.7 fb^{-1} data sample [9] were again without a full (5σ CL) exclusion of the XM scenario. This is the reason why it is still interesting to come with more precise measurement of the top quark charge, using higher statistics of the ATLAS experiment.

The top quark [2] lifetime is roughly $3 \cdot 10^{-25}$ s [10], less than hadronization time. Therefore we observe a "bare quark" decay, instead of top hadrons. There are several techniques used for experimental top quark charge studies, discussion on this topic can be found in [11]. In our study we focused on the most common method, based on direct charge analyses of the top quark decay products.

With 99.8% probability [3] the top quark decays into W boson and b quark:

$$t^{+2/3} \rightarrow W^{+1} + b^{-1/3} \tag{1}$$

Assuming XM scenario:

$$\tilde{t}^{-4/3} \rightarrow W^{-1} + b^{-1/3} \tag{2}$$

Therefore we need to identify both W boson and b quark charges. W decays almost immediately, with probability 1/3 leptonically (to electron e, muon μ or tau-lepton τ [4] and the corresponding neutrino ν). The lepton charge directly determines the W charge. However, b quark hadronizes and is observed only as a shower of hadrons called jet. There are two techniques used for b-jet charge determination: Soft lepton tag (studied in [9]) and charge weighting procedure. We used the second approach, it is described in section 1.2.

In reality we have $t\bar{t}$ pairs which implies 2 W bosons and 2 b-jets. Lepton-b-jet pairing algorithm

*matej.melo@gmail.com

†stanislav.tokar@fmph.uniba.sk

[1] Electric charges in this paper are in units of elementary electric charge, $e = 1.602 \cdot 10^{-23}$ C.

[2] In this paper we will defaultly use the name top quark, but we must not forget it might be the XM $\tilde{t}$-quark.

[3] According to CKM matrix [12] (Cabibbo-Kobayashi-Maskawa matrix, or just quark mixing matrix), which describes the strength of quark flavour-changing weak decays.

[4] Tau-lepton is also unstable and decays almost immediately into e, μ (both $\sim$17%) or hadronically [13]. This makes tau-lepton identification quite difficult. In our analyses we therefore distinguished only between 2 branches - events with one high p_T (transverse momentum) electron and events with one high p_T muon. However, we have to remember that they might be decay products of tau-lepton.

(lb-pairing, described in section 1.3) is used to match the isolated lepton to the corresponding b-jet which comes from the same top quark, (there is another b-jet in approximately opposite direction - opposite b-jet). After lb-pairing we can calculate the combined charge Q_{comb}, which is given by b-jet charge multiplied by charge of lepton associated with this b-jet by lb-pairing. SM predicts negative Q_{comb} values, while XM positive.

In previous studies after lb-pairing mostly only b-jets associated with lepton were used. In our study we examined whether we can effectively use also the opposite b-jet charge information. We rejected events where both b-jets have the same sign of charge, i.e. events, where is high probability that in one case the weighting procedure failed.

1 Top quark charge analysis

1.1 Signal process

Depending on the W bosons decay modes in $t\bar{t}$ events, there are three possible decay modes:

- Hadronic mode - both W bosons decay hadronically. It occurs with probability 4/9, but because of huge QCD background it is not suitable for top charge analyses.
- Semileptonic mode - one W decays hadronically, the second W decays leptonically. It occurs with probability 4/9, it has moderate background and statistically it is more significant than dilepton mode. Therefore in our analyses we focused on this process.
- Dileptonic mode - both W bosons decay leptonically. Very clear process, but it has lower statistics - its probability is only 1/9.

In summary, we studied the process

$$pp \to t\bar{t} \to W^+bW^-\bar{b} \to b\bar{b}jjl\nu, \qquad (3)$$

where neutrino was observed as missing transverse energy E_T.

1.2 B-jet charge weighting procedure

As we already mentioned, b quark hadronizes and instead of one particle we observe a whole shower of hadrons (jet). A jet charge weighting technique [14] was developed to determine effective charge of the observed jet. As a result of optimisation, it requires:

- Only tracks belonging to b-jet within a cone [5] $\Delta R < 0.25$ are accepted
- Only tracks with $p_T > 10$ GeV are considered
- Maximum of 10 tracks with the highest p_T is used

Tracks which pass these criteria are used to calculate the effective b-jet charge via formula

$$Q_{b\text{-}jet} = \frac{\sum_i q_i |\vec{j}\cdot\vec{p}_i|^\kappa}{\sum_i |\vec{j}\cdot\vec{p}_i|^\kappa}, \qquad (4)$$

where q_i ($\vec{p}_i$) is charge (momentum) of i-th particle, $\vec{j}$ is a unit vector in direction of jet axis and κ is a constant, defined by an optimisation procedure to 0.5.

1.3 Lepton-b-jet pairing algorithm

When we know W (lepton) charge and charges of both b-jets [6], we need to associate the lepton to corresponding b-jet, i.e. to pair the products of the same top quark. In our study we used lepton-b-jet pairing algorithm, based on studying the invariant mass of lepton-b-jet pairs. If assignment is correct, $m(l,b\text{-}jet)$ cannot exceed the mass of the top quark. The following condition must be fulfilled:

$$m(l,b\text{-}jet^{(1)}) < m_{cr} \wedge m(l,b\text{-}jet^{(2)}) > m_{cr}, \qquad (5)$$

where $m_{cr} = 155$ GeV is critical mass, obtained from optimisation studies (Fig. 1).

Efficiency ε of this algorithm (probability of fulfilling the condition (5)) is quite low, only 28.3%. On the contrary, it gives high purity $P = 86.6\%$ (probability that the lepton is correctly matched to the corresponding b-jet, when the condition (5) is fulfilled). For the top quark charge study only events which passed this criterion are used.

1.4 Combined charge

For top quark studies in $t\bar{t}$ events a special variable combined charge (Q_{comb}) was introduced. It is defined by formula:

$$Q_{comb} = Q^l_{b\text{-}jet} \cdot Q_l, \qquad (6)$$

[5] Cone ΔR is defined as $\Delta R = \sqrt{\Delta\eta^2 + \Delta\phi^2}$, where $\Delta\eta$ is pseudorapidity [15] and $\Delta\phi$ is azimuthal angle in the detector cylindrical coordinates.

[6] In some events we have for various reasons more than 2 b-jets. In that case we study the 2 with the highest p_T.

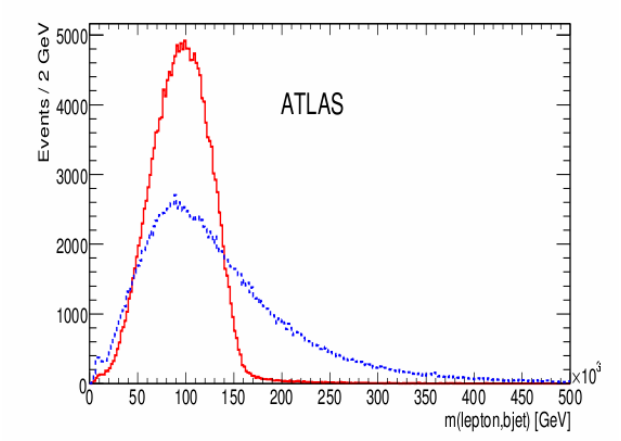


Figure 1: MC simulation of lb-pair invariant mass from the same top quark (red) and from different top quarks (blue). Source: [16]

where $Q^l_{b\text{-}jet}$ is the effective b-jet charge given by (4) and Q_l is the charge of lepton which is matched to this quark by condition (5). It can be easily shown that in SM the mean value of Q_{comb} is negative while in XM positive.

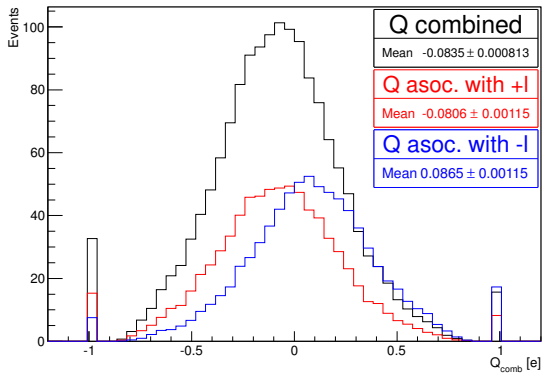


Figure 2: Typical shape of combined charge spectrum, in this case for SM Monte Carlo (MC) signal $t\bar{t}$ events, electron branch. We derived it from charge spectrum of b-jets associated with positive charged lepton (red), to which we added charge spectrum of b-jets associated with negative charged lepton (blue) multiplied by -1. The small peaks at values -1 and 1 are given by jets where all tracks had the same sign of electric charge.

Purity P of the combined charge determination is given by formula

$$P = \frac{N(Q_{comb} < 0)}{N(Q_{comb} < 0) + N(Q_{comb} > 0)}, \qquad (7)$$

where $N(Q_{comb} < 0)$ is number of events with negative b-jet combined charge and $N(Q_{comb} > 0)$ is number of events with positive combined charge (here we assume SM scenario, i.e. low purity - less than 50% - would mean XM).

2 Top quark charge measurement using opposite b-jet charge

2.1 Basic idea

In our previous studies the combined charge was calculated from the b-jet associated with isolated lepton, information from the opposite b-jet was in this last part of analyses unused. However, according to the section 1.1 the two b-quarks should be of opposite charge. As a consequence the two b-jets, corresponding to the parton level quarks, should have in most cases [7] opposite charge sign. In our study we therefore rejected events where both b-jets have the same sign of charge and we analysed impact of this cut on final results. In Fig. 3 we compared both the usual and this new approach.

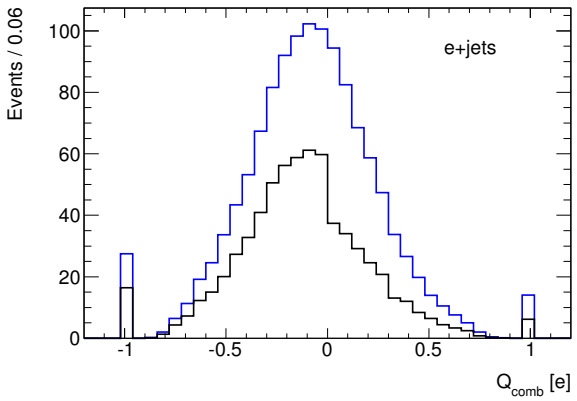


Figure 3: Comparison of Q_{comb} spectra when using the usual method (blue) and the new method (black), MC electron branch signal sample. It is obvious that in the new approach the peak is more skewed, but at the expense of significant statistics loss.

[7] Not necessarily. Approximately 15% of b-jets have wrong sign because of $B^0 - \overline{B^0}$ oscillations [17]. This fact significantly decreases the purity of the combined charge determination.

2.2 Analysed data and MC samples

For our analyses we used official ATLAS experiment data and MC samples. The data were collected in proton-proton collisions during the year 2011 at the energy $\sqrt{7}$ TeV. The total integrated luminosity is 2.05 ± 0.04 fb^{-1}.

The MC samples were simulated using official ATLAS simulation and reconstruction code. The MC@NLO Monte Carlo generator [18] in combination with HERWIG [19] was used to simulate the MC signal sample. Full list of generators for background processes and detailed description of the MC samples can be found in [20]. Total MC integrated luminosity 167.4 fb^{-1} was reweighted to the data sample size, to simulate the real process.

On these samples selection criteria were applied to select th $t\bar{t}$ semileptonic events. For example, one isolated high-p_T lepton, at least 4 high-p_T jets (two of them b-tagged [8]) and high missing E_T were required. The detailed list of event cuts can be also found in [20]. In addition to these cuts, in our method we required opposite b-jet charges, i.e. the following condition had to be fulfilled:

$$Q^{(1)}_{b\text{-}jet} \cdot Q^{(2)}_{b\text{-}jet} < 0 \tag{8}$$

2.3 Background processes

The event selection criteria are developed to minimize the unfavorable background effects. However, they are not ideal and still sometimes different processes pass these selection criteria. In our analyses we considered the background processes:

- W boson + jets
- Z boson + jets
- Diboson events - WW, WZ and ZZ
- QCD multijet processes
- Single top quark production

It should be noted that single top quark production is not a genuine background because it gives the same sign of combined charge as the signal process. However, it is considered as background in terms of studying the $t\bar{t}$ signal process.

[8] For b-tagging JetFitterCombNN weight > 0.35 [21] was required.

We expect that MC correctly describes these processes, except of QCD. In case of QCD we have cross section several orders higher than in other processes and only a tiny fraction passes these criteria, therefore MC is not sufficiently accurate. Instead of MC simulations we use data driven technique - the Matrix method, which is based on selecting two categories of events, using tight and loose lepton selection criteria; described in [22].

If we want to compare the MC signal sample with the data, we need to add the expected background to the MC simulated signal sample.

2.4 Results

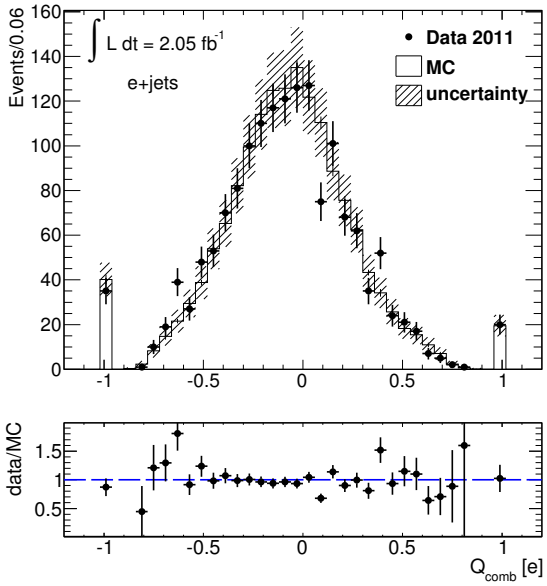
In this section we present our results - combined charge spectra obtained using the usual method (Fig. 4, 6, 8) and our new method (Fig. 5, 7, 9). In each spectrum we compare the MC simulation (including background) with the ATLAS data. The dashed area describes the MC uncertainty - including statistical uncertainty, cross-section uncertainty (10%) and luminosity uncertainty (1.8%). The plot under each histogram displays the data/MC ratio for each bin.

The complete results including partial results for different background processes are displayed in Tables 1 and 2. The uncertainties are given again by the statistical uncertainty, luminosity uncertainty (1.8%) and cross-section uncertainty, which varies from 10% (single-top) to 50% (QCD processes).

To assess suitability of the new method it is important to study both its purity P and efficiency ε. From Fig. 3 it is obvious that the new method gives higher purity, but it is not clear whether it is worthy the low efficiency. Low efficiency means bigger statistical uncertainties and might cause that the final result is even worse. To clarify this we studied two indicators. First one is the

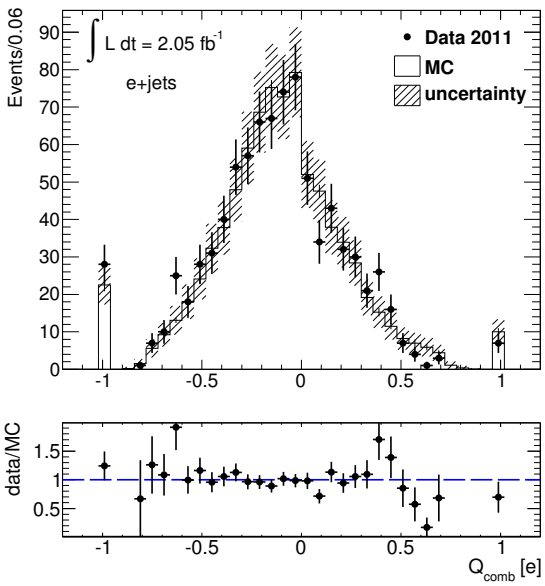
$$\xi = \frac{|<Q_{comb}>|}{\sigma_{<Q_{comb}>}} \tag{9}$$

ratio - it measures on how many standard deviations (CL) is the Q_{comb} charge sign determined. The second one is quality factor $\varepsilon(2P-1)^2$ used for purity vs. efficiency optimization. The resulting values of these indicators for both methods are displayed in Tables 3, 4 and 5.



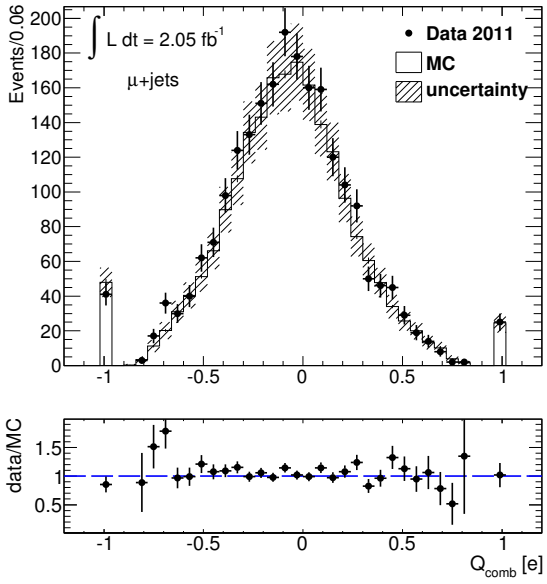
$$\begin{array}{lcl} < Q_{comb}^{MC} > & = & \text{-0.075}\pm\text{0.008} \\ < Q_{comb}^{data} > & = & \text{-0.084}\pm\text{0.009} \end{array}$$

Figure 4: Combined charge spectrum for electron branch, usual method.



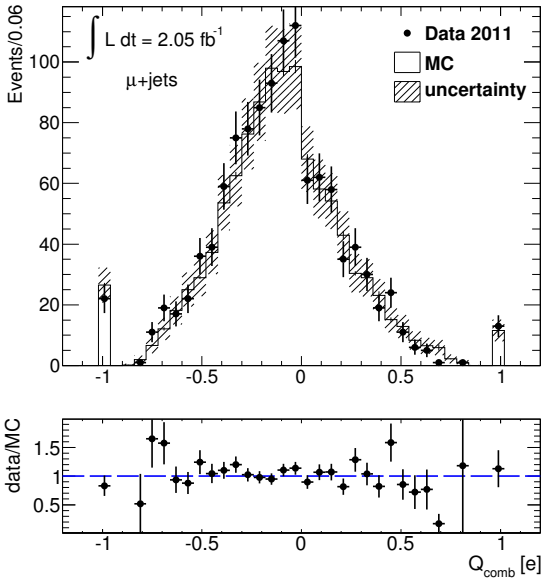
$$\begin{array}{lcl} < Q_{comb}^{MC} > & = & \text{-0.107}\pm\text{0.012} \\ < Q_{comb}^{data} > & = & \text{-0.130}\pm\text{0.012} \end{array}$$

Figure 5: Combined charge spectrum for electron branch, new method.



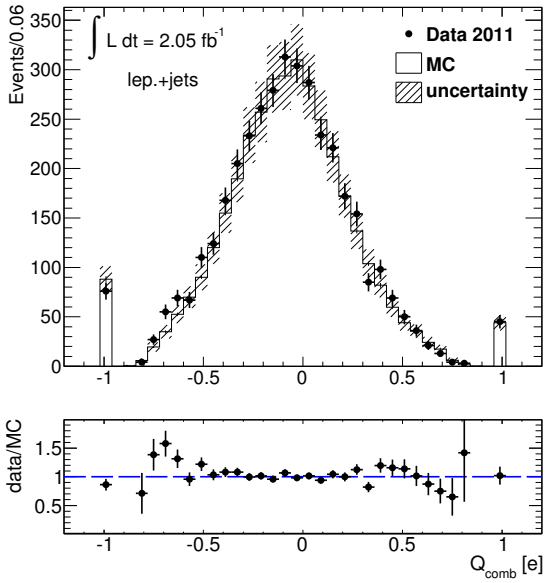
$$\begin{array}{lcl} < Q_{comb}^{MC} > & = & \text{-0.074}\pm\text{0.007} \\ < Q_{comb}^{data} > & = & \text{-0.078}\pm\text{0.007} \end{array}$$

Figure 6: Combined charge spectrum for muon branch, usual method.



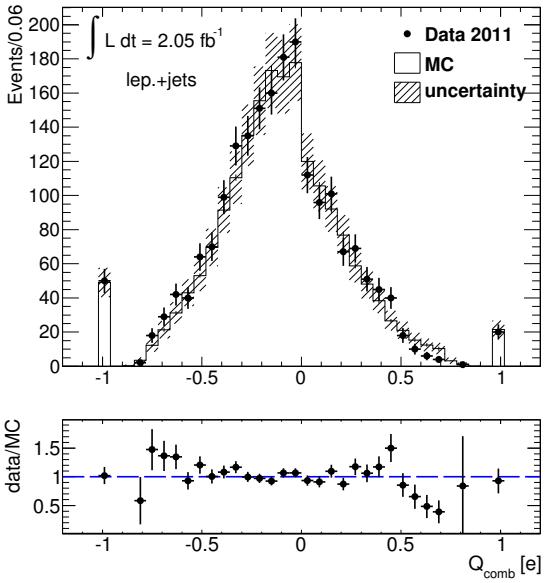
$$\begin{array}{lcl} < Q_{comb}^{MC} > & = & \text{-0.104}\pm\text{0.010} \\ < Q_{comb}^{data} > & = & \text{-0.112}\pm\text{0.010} \end{array}$$

Figure 7: Combined charge spectrum for muon branch, new method.



$< Q^{MC}_{comb} >$ = -0.075±0.005
$< Q^{data}_{comb} >$ = -0.081±0.005

Figure 8: Combined charge spectrum for muon+electron branch, usual method.



$< Q^{MC}_{comb} >$ = -0.105±0.008
$< Q^{data}_{comb} >$ = -0.120±0.007

Figure 9: Combined charge spectrum for muon+electron branch, new method.

Electron branch				
Process:	usual method		new method	
	N	$< Q_{comb} >$	N	$< Q_{comb} >$
W+jets	77±15	-0.077±0.050	40±9	-0.044±0.071
Z+jets	9±3	0.078±0.153	6±3	0.129±0.190
Diboson	1±1	0.223±0.573	0±1	-0.241±0.735
QCD	18±10	-0.005±0.111	13±7	-0.003±0.010
non-top-bkgd	105±18	-0.014±0.041	59±10	0.041±0.054
Single top	67±11	-0.067±0.042	35±7	-0.083±0.058
Signal	1421±156	-0.080±0.009	755±85	-0.120±0.012
Signal + bkgd	1592±158	-0.075±0.008	850±86	-0.107±0.012
Data	1574±40	-0.084±0.009	859±29	-0.130±0.012

Table 1: Number of events and mean combined charge for different simulated processes and data in electron branch, results for both usual and our new method.

Muon branch				
Process:	usual method		new method	
	N	$< Q_{comb} >$	N	$< Q_{comb} >$
W+jets	132±24	-0.047±0.032	68±13	0.018±0.044
Z+jets	14±4	-0.184±0.091	7±3	-0.165±0.146
Diboson	2±2	-0.069±0.029	1±1	0.103±0.341
QCD	36±19	-0.014±0.064	18±10	0.005±0.072
non-top-bkgd	184±31	-0.052±0.028	94±17	0.004±0.037
Single top	80±12	-0.051±0.038	42±8	-0.075±0.053
Signal	1826±200	-0.078±0.008	962±108	-0.116±0.011
Signal + bkgd	2090±203	-0.074±0.007	1099±110	-0.104±0.010
Data	2213±47	-0.078±0.007	1141±34	-0.112±0.010

Table 2: Number of events and mean combined charge for different simulated processes and data in muon branch, results for both usual and our new method.

Electron branch								
Method:	MC+bkgd				Data			
	ε [%]	P [%]	$\varepsilon(2P-1)^2$	ξ	ε[%]	P [%]	$\varepsilon(2P-1)^2$	ξ
usual method	100.0	60.0	0.040	8.9	100.0	60.8	0.047	9.6
new method	53.4	66.7	0.060	9.2	54.6	68.0	0.071	11.2

Table 3: Comparison between relative efficiency ε, purity P, quality factor $\varepsilon(2P-1)^2$ and ratio ξ (9) in both methods, electron branch.

Muon branch								
Method:	MC+bkgd				Data			
	ε [%]	P [%]	$\varepsilon(2P-1)^2$	ξ	ε[%]	P [%]	$\varepsilon(2P-1)^2$	ξ
usual method	100.0	60.0	0.040	10.6	100.0	60.5	0.044	11.2
new method	52.6	66.4	0.057	10.3	51.6	68.0	0.067	11.6

Table 4: Comparison between relative efficiency ε, purity P, quality factor $\varepsilon(2P-1)^2$ and ratio ξ (9) in both methods, muon branch.

Combined electron + muon branch								
Method:	MC+bkgd				Data			
	ε [%]	P [%]	$\varepsilon(2P-1)^2$	ξ	ε[%]	P [%]	$\varepsilon(2P-1)^2$	ξ
usual method	100.0	60.0	0.040	13.8	100.0	60.6	0.045	14.8
new method	52.9	66.5	0.058	13.8	52.9	68.0	0.068	16.2

Table 5: Comparison between relative efficiency ε, purity P, quality factor $\varepsilon(2P-1)^2$ and ratio ξ (9) in both methods, electron + muon branch.

Conclusion

In Figures 4-9 we observe a good agreement between the data and the MC predictions. Only in Fig. 5 there is a slight disagreement at 1.5 σ CL. In general the data give slightly higher $| < Q_{comb} > |$ values than MC predicts.

In Tables 1 and 2 we see combined charge values for different background processes, they should be consistent with 0. This is in the new method perfectly fulfilled.

In Tables 3, 4 and 5 the purity and relative efficiency values are compared. The electron + muon combination in the new approach gives values $\varepsilon = 52.9\%$ and $P = 66.5\%$, compared to the previous method: $\varepsilon = 100\%$ and $P = 60.0\%$. According to Table 5 the ξ value remains unchanged in both methods in case of MC, but in the case of real data it is higher in our method. Finally, the quality factor $\varepsilon(2P-1)^2$ is in our method significantly higher in both branches.

In summary, the new approach gives purity which is worth the loss of almost half of the statistics. According to the comparison of the quality factor $\varepsilon(2P-1)^2$ and the ξ value (9) in both methods we can state that the new approach gives better results than the previous method. This approach is usable also in other processes with two b-jets with opposite sign of charge, for example in forward-backward asymmetry studies, which might be the window to the new physics behind the SM.

Acknowledgements

I would like to thank my supervisor doc. RNDr. Stanislav Tokár CSc. for patience and great willingness to introduce me to the fascinating world of particle physics analysis. My gratitude also belongs to Mgr. Pavol Federič PhD. who helped me a lot with the software part of my analysis. I would also like to thank my family for their love and support. My special thanks belongs to the Almighty God for his blessing.

References

[1] Abe et al. (CDF collaboration). *Phys. Rev. Lett.*, 74:2626–2631, 1995.

[2] S. Abachi et al. (D0 collaboration). *Phys. Rev. Lett.*, 74:2632, 1995.

[3] E. Ma D. Chang, W. F. Chang. *Phys. Rev. D*, 59:091503, 1999.

[4] V. M. Abazov et al. *Phys. Rev. Lett.*, 98:041801, 2007.

[5] A. Abulencia et al. *CDF Note*, 8753, 2007.

[6] T. Altonen et al. *Phys. Rev. Lett.*, 105:101801, 2010.

[7] ATLAS Collaboration. Atlas detector nad physics performance: Technical design report. *CERN-LHCC-99-014, ATLAS-TDR-014*, 1999.

[8] ATLAS Collaboration. *JINST 3*, S08003, 2008.

[9] ATLAS Collaboration. *Nuovo Cim.*, C03N3:217–220, 2012.

[10] D0 Collaboration. Determination of the width of the top quark. (D0 Note 6034-CONF), 2010.

[11] L. H. Orr U. Baur, M. Buice. Direct measurement of the top quark charge at hadron colliders. *Phys. Rev. D*, 64:094019, 2001.

[12] Cabibbo–Kobayashi–Maskawa matrix, 2013. http://en.wikipedia.org/wiki/Cabibbo%E2%80%93Kobayashi%E2%80%93Maskawa_matrix, accessed: 2013-04-03.

[13] Tau (particle), 2013. http://en.wikipedia.org/wiki/Tau_(particle), accessed: 2013-04-03.

[14] R. Barrate et al. *Phys. Lett.*, B426:217–230, 1998.

[15] Pseudorapidity, 2013. http://en.wikipedia.org/wiki/Pseudorapidity, accessed: 2013-04-03.

[16] ATLAS Collaboration. Expected performance of the atlas experiment. (CERN-OPEN-2008-020):1001–1011, 2008.

[17] Peter Bednář. *Determination of Top Quark charge in CDF experiment*. PhD thesis, Comenius University Bratislava, 2007. Section 4.4.3.

[18] S. Frixione et al. *JHEP*, 0206:029, 2002.

[19] G. Corcella et al. *JHEP*, 0101:010, 2001.

[20] S. Tokar et al. Top quark charge measurement with the atlas experiment: Weighting technique approach. Technical Report ATL-COM-PHYS-2012-028, CERN, Geneva, 2012". ATLAS internal note, available at: https://cds.cern.ch/record/1416045/?ln=sk (ATLAS protected)".

[21] JetFitterCOMBNN for 15 GeV, 2012. https://twiki.cern.ch/twiki/bin/viewauth/AtlasProtected/BTaggingBenchmarks#JetFitterCOMBNN_for_15_GeV, accessed: 2013-04-03. ATLAS protected.

[22] ATLAS Collaboration. Mis-identified lepton backgrounds in top quark pair production studies for EPS. (ATL-COM-PHYS-2011-768), 2011.

JOJO – detská hračka plná fyziky

Lucia Mišianiková[1]
Školiteľ: Marián Kireš[2]

Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Ústav fyzikálnych vied, Oddelenie didaktiky fyziky, Park Angelinum 9, 041 54 Košice, Slovenská republika

Abstrakt

V súčasnosti sa vo fyzikálnom vzdelávaní dostávajú do popredia metódy založené na aktívnom žiackom bádaní, ktoré podporujú konceptuálne porozumenie u žiakov. V práci sme vytvorili metodický materiál zameraný na štúdium pohybu detskej hračky JOJO. Vytvorená metodika je rozdelená do niekoľkých vzdelávacích aktivít, kde žiaci sami tvoria hypotézy, navrhujú riešenie problémov, zisťujú a overujú ich pomocou počítačom podporovaných meraní, videomeraní a zaznamenávajú výsledky do grafov. Po obsahovej stránke je metodika zameraná na základné fyzikálne princípy pri rotačných pohyboch, moment sily, princíp fungovania rovnoramenných váh, vplyv rozloženia hmotnosti telesa na rotačný pohyb, množstvo energie ukrytej v otáčajúcom sa telese. Na základe výsledkov poznávacích aktivít žiaci formulujú vlastné závery.
Kľúčové slová: IBSE, rotačný pohyb, JOJO

1 Objaviteľské prístupy v prírodovednom vzdelávaní (IBSE)

1.1 Povaha vedeckého skúmania

Žijeme v dobe, kedy počítače, technika, internet a iné moderné technológie sú neodmysliteľnou súčasťou nášho života. Každú našu činnosť máme tendenciu vylepšovať, inovovať a riešiť novými spôsobmi. Tak je to aj vo vzdelávaní. Jednou z populárnych metód vo vyučovaní žiakov je prírodovedné vzdelávanie „Inquiry Based Science Education“ (IBSE) alebo Objaviteľské prístupy v prírodovednom vzdelávaní.

Všetky inovácie uplatňované v prírodovednom vzdelávaní nesú v sebe snahu o naplnenie kľúčového cieľa, ktorým je pochopenie. Pochopenie, chápanie vyžaduje od učiaceho sa aktívnu účasť zapojenia svojich už existujúcich poznatkov.

"Skúmanie posilňované technológiami" môže pomáhať žiakom pri získavaní, organizovaní, vizualizácii a interpretácii dát skúmaného problému. Žiaci môžu používať sondy a tým rýchlo zaznamenať veľa dátových bodov. Môžu tiež využiť nové technologické nástroje na zhromažďovanie dát mnohých pokusov, aj tých, ktorých priebeh je časovo náročný.

Použitím softvéru je možné skúmať grafy, tabuľky a vzťahy generované v reálnom čase, navzájom ich posudzovať a rôznym spôsobom prezentovať. Správnym používaním pomocných technológií môžu učitelia a žiaci zhromažďovať a analyzovať dáta, čím majú žiaci čas pozorovať, premýšľať a budovať konceptuálne vedomosti, ktoré sú základom skúseností pri práci v laboratóriách. Okrem toho, súvisiace grafické znázornenia ponúkajú zrakovú vizualizáciu, ktorá môže zvýšiť porozumenie študentov.

Skúmanie na báze vedeckého vzdelávania je prístupom k výučbe a učeniu vedy, ktorá pochádza z toho, ako sa študenti učia, vedecky skúmajú, a zameriavajú sa na základný učebný obsah. Je dôležité zabezpečiť, aby študenti skutočne pochopili, čo sa učia, a nie sa len povrchovo naučili. Vedecký výskum by sme mohli chápať ako proces identifikácie otázok a kontinuálneho hľadania odpovedí a vysvetlení. Ten vychádza z aktuálnych predstáv, ktoré sú postavené na predchádzajúcich skúsenostiach žiaka v úlohe vedca.

Dôležitým faktorom vo vzdelávaní je motivácia - proces, v ktorom žiak dosiahne spokojnosť a je príslušne odmenený. Motivácia pochádza zo spokojnosti, čo sa naučil a pochopil. IBSE nie je o množstve Informácií v pamäti, je to skôr o myšlienkach alebo konceptoch vedúcich k pochopeniu, ktorá rastie hlbšie a hlbšie.

IBSE čerpá zo skúseností a výskumu, ktorý poskytuje jasnejšie a jasnejšie pochopenie o tom, ako sa študenti učia. Výskum ukazuje, že prirodzenou zvedavosťou študentov je, aspoň čiastočne, pokus, hľadanie vzťahov a vzájomná interpretácia skúseností s ostatnými. Nie všetky argumentácie sú však u žiakov vedecky presné.

Prírodovedné vzdelávanie poskytuje a vyberá skúsenosti štruktúrované tak, aby žiaci aj naďalej rozvíjať svoje nápady na tie, ktoré sú vedecky viac presné.

1.2 Princíp skúmania

IBSE bude vyzerať celkom odlišne v rôznych triedach. Je potrebný dostatočný priestor pre jednotlivých učiteľov prispôsobovať, inovovať, pracovať na svojich vlastných vedomostiach, zručnostiach, záujmov, ako aj pre žiakov. Existujú však niektoré dôležité zásady, ktoré sú dodržiavané vo všetkých bádateľských programoch.

Ďalším základom IBSE je pochopenie procesu vedeckého bádania. Ide o sadu etáp, ktorá je veľmi podobná spôsobu, akým vedci postupujú pri svojej práci.

Nejde o súbor krokov, ktoré majú byť dodržané. Je to skôr séria etáp, ktoré vedú proces. Pre študentov to začína prieskumnou etapu, kde majú možnosť zoznámiť sa s fenoménom budúcej štúdie. Potom sa presunú do etapy vyšetrovania pozostávajúcej z mnohých častí. Ide o zložitý proces, kde jednotlivé časti je nutné viackrát preskúmať, či dokonca občas preskočiť. Napríklad, ak výsledkami skúmania sa neoveria predpovede žiakov, je potrebné vypočuť si predpoklady, vrátiť sa na začiatok skúmania a vytvoriť nový experiment. Ak navrhnutý plán skúmania nefunguje, je potrebné ho prepracovať. Ak prídu na predbežný záver, ktorý sa však líši so záverom druhého tímu, oba tímy musia skúmanie zopakovať. Ďalšou etapou je na základe viacerých skúmaní syntetizovať, čo sa žiaci naučili a sformulovať závery. Poslednou, štvrtou etapou je zhrnutie, kde žiaci medzi sebou komunikujú o danej problematike.

Prístup k výučbe a učeniu vedy pochádza z troch častí:

1. Porozumenie procesu učenia

Žiaci sa pokúsia nájsť zmysel sveta okolo nich tým, že hľadajú vzory a vzťahy vo svojich skúsenostiach a prostredníctvom interakcie s ostatnými.

Budujú svoje porozumenie prostredníctvom úvah o ich skúsenostiach.

2. Povaha vedeckého skúmania

Proces vedy je možné zastúpiť do 4 etáp:

Preskúmať: žiaci sa zoznámia s fenoménom, ktorý budú skúmať

Zistiť: žiaci plánujú a vykonávať skúmanie

Vyvodiť závery: žiaci syntetizujú to, čo sa naučili, a prichádzajú na niektoré konečné závery

Komunikovať: komunikácia študentov, ich nové pochopenie

3. Zameranie na obsah

Prehľad dôležitých pojmov sa často objavuje vo vzdelávacích štandardoch. Avšak špecifiká silne závisia na miestnom kontexte a záujme študentov a učiteľov.[12]

Kritéria pre každú bádateľský orientovanú prírodovednú lekciu v projekte ESTABLISH sú v súlade s ESTABLISH definíciou Bádateľský orientovaného prírodovedného vzdelávania (IBSE) a podporujú a uľahčujú aktívny prístup študentov k učeniu. Tieto lekcie musia predstavovať bádateľsky orientované prírodovedné vzdelávanie a inšpirovať učiteľa k tvorbe vlastných IBSE materiálov.

Typy bádateľsky orientovaných činností

Rozlišujeme typy bádateľských aktivít, ktorých zoznam je uvedený nižšie. Odráža zvýšené zapojenie študentov a tiež zodpovedá zníženej miere učiteľského konania. Je dôležité nezačať extrémne tým, že žiakom poskytneme úplnú samostatnú kontrolu, ale umožniť im postupný rozvoj smerujúci k vedeckému mysleniu a prevzatie väčšej iniciatívy v bádateľskom procese. Vždy tu budú ciele, ktoré je potrebné splniť (stanovené učiteľom), ale formulovanie týchto cieľov a obmedzujúce podmienky pre ich dosiahnutie sa môžu líšiť od riadených, cez obmedzujúce až po voľné. Tento zoznam môže slúžiť ako prostriedok pre to, aby sme boli schopní rozlíšiť rôzne druhy bádania a aby sme si uvedomili ich miesto v danej hierarchii .

1. Interaktívna demonštrácia: úlohou učiteľa je predviesť ukážku a manipulovať s vedeckými prístrojmi a pritom interaktívne klásť overovacie otázky týkajúce sa toho, čo bude prebiehať (predpovedanie) alebo ako niečo mohlo prebehnúť (vysvetlenie), a pomôcť tak študentom s tým, aby dospeli k záverom spôsobom, ktorý bude vedecky správny. Bádateľská časť tu spočíva v odpovediach a vysvetleniach formulovaných študentmi.

V našej práci využívame túto metódu v 2. kapitole pri roztáčaní telesa a momente sily a tiež pri demonštrácii experimentu v kapitole 6.2 (podrobnejší rozpis v tab. 2).

2. Riadené objavovanie: to isté čo vyššie, ale v tomto prípade vykonávajú študenti experiment, ktorý im zadal učiteľ. Toto je tradičná laboratórna práca so študentmi, väčšinou formou laboratórnej kuchárky alebo práce, ktorá sa riadi krok za krokom pokynmi. Obvykle sa to týka skupiny činností, ktoré vykonáva súbežne celá trieda s výrazným zameraním na overenie informácie, ktorá bola predtým v triede vysvetlená.

Navrhli sme aktivity 2.1, 2.2 a 4.1 zamerané práve na tento typ bádateľskej metódy.

3. Riadené bádanie: v tomto prípade pracujú študenti v tímoch na svojich vlastných experimentoch. Učiteľ definoval problém a zadal jasne formulovaný cieľ: "Zistite .." "Určite ...". Neexistuje tu vopred daná odpoveď a závery sú založené výhradne na prácu študentov. Študenti dostanú pokyny alebo rozšírené (predlaboratórne) inštrukcie a riadi sa početnými učiteľom stanovenými otázkami.

Kapitoly 2.2, 2.3 a kapitola 4.3 opisujú metodiku riadeného objavovania.

4. Viazané bádanie: aj v tomto prípade formuluje problém učiteľ, ale od žiakov sa očakáva, že

navrhnú a budú vykonávať experiment sami s obmedzeným alebo žiadnym zásahom učiteľa a iba s čiastočnou predlaboratórnou prípravou. Činnosti v rámci viazaného bádania vyžadujú určitú mieru skúseností zo strany žiakov, inak by mohli mať problém.
K danému typu bádania sme vytvorili aktivity 4.1 a 4.2.
5. Otvorené bádanie: v rámci daného kontextu sa od žiaka očakáva, že navrhne a formuluje svoj vlastný výskumný problém ako aj postup jeho riešenia. Príklad: „Formulujte výskumný problém súvisiaci s analýzou alebo rozpoznaním reči“. Žiaci môžu buď porovnať vysoké alebo nízke tóny, muža alebo ženy, tóny produkované hudobným nástrojom alebo hlasom, hlasné alebo tiché, atď.

2 Návrh metodiky JOJO

Podľa hore uvedeného zoznamu bádateľských aktivít navrhujeme metodiku pre učiteľov, ktorá zachytáva skúmanie translačného a rotačného pohybu JOJA. Plán učiva je navrhnutý na niekoľko vyučovacích hodín. Po obsahovej stránke je metodika zameraná na základné fyzikálne princípy pri rotačných pohyboch, moment sily, princíp fungovania rovnoramenných váh, vplyv rozloženia hmotnosti telesa na rotačný pohyb, množstvo energie ukrytej v otáčajúcom sa telese. Získané vedomosti žiaci následne využijú pri popise samotného pohybu JOJA. Do výučby sme zaviedli niekoľko názorných demonštračných experimentov, ktoré umožňujú žiakom lepšie pochopiť danú problematiku. Na overovanie vzťahov a pochopenie fyzikálnych dejov pomocou meraní a videomeraní v programe COACH 6 sme vytvorili pracovné listy.

Aktivita	***Typ bádateľskej aktivity***
1.3 Ako rýchlo sa teleso otáča	Interaktívna diskusia
1.4 Aká je rýchlosť jednotlivých bodov kolesa pri jazde na bicykli	Riadené objavovanie
2. Ako roztočíme teleso	
4.1 Ako sa JOJO pohybuje	interaktívna diskusia
4.2 Prečo JOJO stúpa	interaktívna diskusia
4.3 Akým pohybom sa JOJO hýbe	riadené objavovanie/ viazané bádanie
4.4 Cuknutie v najnižšom bode pohybu JOJA	interaktívna diskusia
4.6 Ktoré JOJO je rýchlejšie	viazané bádanie
6.1 Guľôčky na naklonenej rovine	interaktívna diskusia
6.2 Preteky plechoviek	Interaktívna demonštrácia

Tab. 1 Zoznam metodických tém a príslušný typ bádateľskej aktivity

Aktivita	***Typ bádateľskej aktivity***
2.1 Ako rýchlo sa teleso otáča	Riadené objavovanie
2.2 Aká je rýchlosť jednotlivých bodov kolesa pri jazde na bicykli	Riadené objavovanie
4.1 Akým pohybom sa JOJO hýbe	Riadené objavovanie/ Viazané bádanie
4.2Ktoré JOJO je rýchlejšie	Viazané bádanie

Tab. 2 Zoznam aktivít a príslušný typ bádateľskej aktivity

3 Metodika pre učiteľov

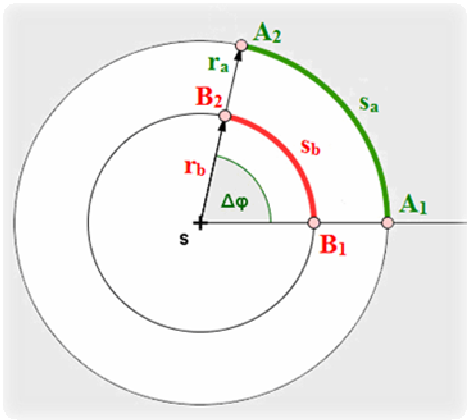
Následne uvádzame ukážky metodík vybraných aktivít s číslovaním v pôvodnom dokumente.

1.3 Ako rýchlo sa teleso otáča

Rýchlosť rovnomerného pohybu sa všeobecne vypočíta podľa vzťahu $v = \frac{\Delta s}{\Delta t}$. Predstavuje dráhu, ktorú prejde teleso (hmotný bod) za určitý čas.
Rýchlosť vzťahujúca sa k pohybu po kružnici sa nazýva obvodová rýchlosť. Hovorí nám ako veľký oblúk na kružnici prejde bod za určitý čas.
Celú situáciu si môžeme predstaviť ako kolotoč otáčajúci sa okolo stredu S (Obr. 1), kde na jednom jeho ramene môžu sedieť dvaja ľudia. Označme si ich A_1 a B_1. Z počiatočnej polohy sa za určitú dobu oba posunuli do novej polohy A_2 a B_2.
Ako rýchlo sa tieto dva body pohybovali? Sú ich obvodové rýchlosti rovnaké, alebo rôzne?

Všimnime si dĺžky jednotlivých trajektórií počas pohybu bodov A a B z polohy 1 do novej polohy 2. Bod A_1 prešiel väčšiu dráhu na ceste do bodu A_2

ako bod B_1 do B_2 za rovnaký čas. Bod A_1 sa teda musel pohybovať väčšou rýchlosťou. Obvodová rýchlosť týchto bodov je teda rôzna. Čím je bod vzdialenejší od osi otáčania, tým je jeho rýchlosť väčšia, keďže musí prejsť väčšiu dráhu za ten istý čas. Obvodová rýchlosť teda závisí na vzdialenosti bodu od osi otáčania (polomeru kružnice), a to priamo úmerne (čím väčší polomer, tým väčšia dráha a tým väčšia rýchlosť pohybujúceho sa bodu).
Akou veľkou rýchlosťou sa teda teleso otáča, ak rôzne body telesa v závislosti na vzdialenosti od osi majú obvodové rýchlosti rôzne?
Aby sme mohli vyjadriť rýchlosť otáčajúceho sa telesa, potrebujeme zaviesť novú fyzikálnu veličinu ω, ktorú nazývame uhlová rýchlosť.
Rameno kolotoča, teda aj body A_1 a B_1 počas svojho pohybu do novej polohy opísali rovnako veľký uhol φ.
Uhlová rýchlosť nám hovorí, ako veľký oblúk na kružnici opíše bod za určitý čas.
Ak sa tuhé teleso otáča okolo osi, každá častica telesa sa otáča o rovnaký uhol v danom časovom intervale a má rovnakú uhlovú rýchlosť.



Obr. 1 Pohyb bodu po kružnici pri rôznych vzdialenostiach od osi otáčania

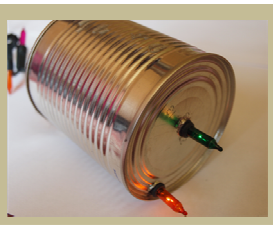
1.4 Aká je rýchlosť jednotlivých bodov kolesa pri jazde na bicykli

Všimnite si pohyb jednotlivých častí kolies počas jazdy na bicykli.
Aký pohyb vykonávajú stredy kolies a body na ich obvode?
Stredy oboch kolies sa pohybujú dopredu posuvným pohybom. Pohyb bodov na obvode kolesa je však zložitejší.
Na fotografii zachytenej počas dlhej expozičnej doby (Obr. 2) môžeme vidieť pohyb svetelných bodov v strede a na obvode valiaceho sa kotúča. Svetelný bod na obvode kotúča opisuje krivku nazývanú cykloida.

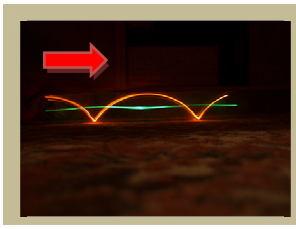


Obr. 2 Jeden svetelný zdroj v strede valiaceho sa valca a ďalší bod na okraji znázorňujú rôzne cesty, po ktorých sa tieto dva body pohybujú. Stred sa pohybuje v priamom smere (zelená priamka), zatiaľ čo bod na okraji sa pohybuje po ceste nazývanej cykloida (oranžová krivka)

Ako možno zostaviť zariadenie a zaznamenať takýto pohyb?

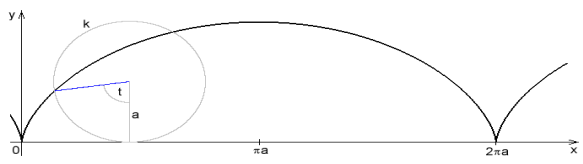


Na zaznamenanie pohybu bodov valiaceho sa valca použijeme plechovku valcového tvaru, do ktorej dna navŕtame dva otvory (jeden v strede a druhý na obvode dna plechovky).
Umiestnime do nich žiarovky rôznych farieb – je možné použiť žiarovky na vianočné osvetlenie. Žiarovky rozsvietime a vytvoríme tmavé okolité podmienky.
Pred objektív fotoaparátu si umiestnime plechovku so svietiacimi žiarovkami.

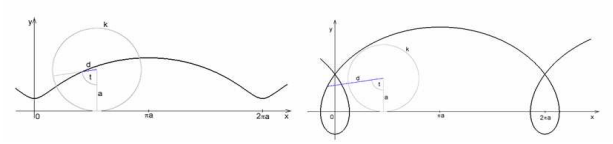


Aby sme zaznamenali takýto pohyb, potrebujeme si vhodne nastaviť expozičnú dobu fotenia. Táto snímka je vytvorená pri expozičnej dobe 5.00 s a pri ohniskovej vzdialenosti F = 3.8.
Od začiatku spúšte máme 5 sekúnd na to, aby sme plechovku kotúľali priamočiaro po podložke tak, aby sa nám nešmýkala a nevracala spať (nie je potrebný rovnomerný pohyb). Na vzniknutej fotografii vidíme pohyb osvetlených žiaroviek počas valivého pohybu plechovky.

Cykloida
Cykloida je krivka, ktorú vytvorí bod pevne spojený s kružnicou valiacou sa po priamke (Obr. 3). Tento bod nemusí nutne ležať na obvode kružnice. Môže sa nachádzať vo vnútornej (vonkajšej) časti valiacej sa kružnice. Vtedy hovoríme o skrátenej (predĺženej) cykloide (Obr. 4).



Obr. 3 Cykloida



Obr. 4 Skrátená (A) a predĺžená (B) cykloida

Prvé zmienky o cykloidách pochádzajú už zo stredoveku od Cusa (1401 – 1464), avšak pomenovanie cykloida pochádza od slávneho Galilea z r. 1599, ktorý vytvoril aj jej kovové a drevené modely. Medzi ďalších najznámejších matematikov, ktorí sa zaoberali cykloidou môžeme vymenovať: Torricelli, Taliani Ricci a Viviani, Francúzi Mersenne, Pascal, Fermat, Roberval a Descartes, Wallis a Wren v Anglicku, Holanďan Huygens a Belgičan Sluze a mnohí ďalší. Na prelome 18. storočia to boli Johann a Jacob Bernoulli, Leibnitz, Newton a l´Hospital.

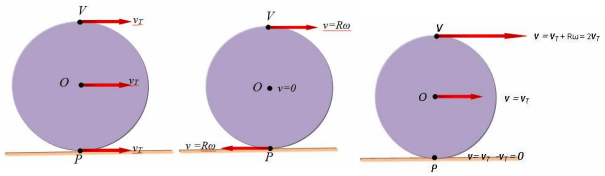
Úloha: Vyhľadajte informácie o cykloide: parametrické vyjadrenie, dĺžka oblúku, obsah plochy ohraničenej krivkou, polomer krivosti.

Táto úloha je vhodná pre žiakov so zvýšeným záujmom, prípadne ako bonusová úloha na obohatenie vedomostí.

Aké druhy pohybov vykonáva valiace sa koleso?

Ukážeme si, že takýto pohyb je možné chápať ako pohyb zložený z posuvného a rotačného pohybu.

Pre čisto posuvný pohyb znázornený na obrázku 5a) si predstavme, že koleso sa neotáča, takže každý bod sa pohybuje vpravo rýchlosťou v_T. Obr. 5b) znázorňuje čisto rotačný pohyb, to je pohyb z pohľadu cyklistu, ktorý vidí os otáčania ako nepohyblivú. každý bod kolesa rotuje okolo tejto osi uhlovou rýchlosťou ω. Ľubovoľný bod na jeho vonkajšom obvode má obvodovú rýchlosť v_T .



translačný pohyb	b) rotačný pohyb	c) kombinácia translačného a rotačného pohybu

Obr. 5 Pohyb valiaceho sa kolesa (c) môžeme demonštrovať ako zloženie čisto translačného (a) a čisto rotačného pohybu (b)

Zložením pohybov 5a) a 5b) dostávame výsledný valivý pohyb (Obr. 5c).

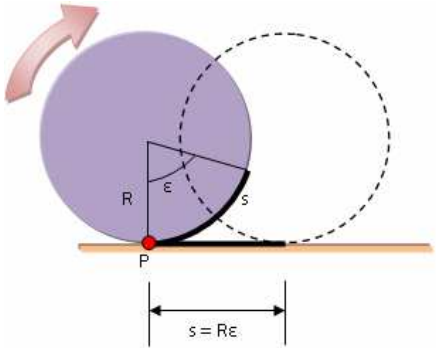
Všimnime si veľkosti rýchlostí bodu P, stredu O a vrcholu V kolesa.

Aké sú rýchlosti jednotlivých bodov P, O a V? Porovnaj

Zložením rýchlostí pre oba pohyby dostávame:

Body v blízkosti bodu P sú takmer v pokoji, zatiaľ čo body na vrchole V sa pohybujú rýchlejšie ako akákoľvek časť kolesa, a to rýchlosťou $2v_T$. Keďže rýchlosť rotačného pohybu stredu O je nulová, jeho rýchlosť počas valivého pohybu je rovná rýchlosti translačného pohybu v_T.

Prečo sa veľkosť obvodovej rýchlosti bodov P a V kolesa počas jeho rotačného pohybu rovná rýchlosti translačného pohybu jeho ťažiska? ($v = R\omega = v_T$)?



Obr. 6 Pre čistý valivý pohyb, kde sa valec otočí o uhol ε, jeho stred prejde lineárnu vzdialenosť $s = R\varepsilon$

Valec (bod P) počas valivého pohybu vykoná jednu otáčku (prejde dráhu $s = 2\pi.R$) obvodovou rýchlosťou $v = R\omega$. Za rovnaký čas prejde ťažisko valca rýchlosťou v_T rovnakú lineárnu vzdialenosť $s = 2\pi.R$, čo predstavuje odvalenie celého valca. Vidíme, že bod P prejde rovnakú dráhu počas svojho rotačného pohybu za ten istý čas ako ťažisko pri jeho posuvnom pohybe. Obvodová rýchlosť $v = R\omega$ rotačného pohybu valca je teda rovná rýchlosti ťažiska v_T pri jeho translačnom pohybe.

Valivý pohyb telesa môžeme teda modelovať ako kombináciu translačného a rotačného pohybu.

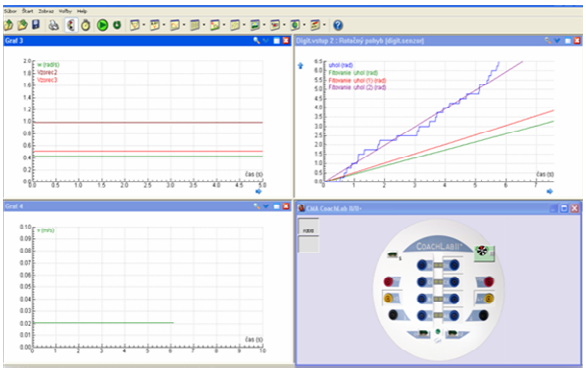
Je možné tento rozdiel rýchlostí jednotlivých častí kolesa bicykla pozorovať voľným okom, alebo vhodným spôsobom zaznamenať?

Fotografia, ktorá zachytáva pohyb valiaceho sa kolesa bicykla presvedčivo dokumentuje tento fakt. Obraz drôtov v blízkosti vrcholu kolesa je rozmazaný, zatiaľ čo drôty v spodnej časti sú zachytené takmer ostro.



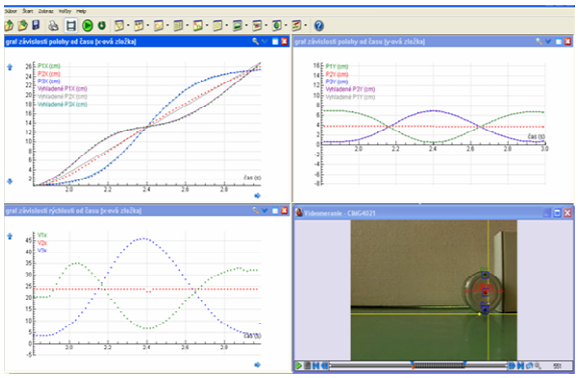
Obr. 7 Fotografia zaznamenávajúca pohyb valiaceho sa kolesa bicykla. Obraz dolnej časti drôtov je podstatne ostrejší, čo značí, že vrchná časť kolesa sa pohybuje väčšou rýchlosťou.

Čo to znamená?
Keďže je obraz drôtov v hornej časti kolesa menej ostrý, ich rýchlosť je väčšia. Naopak, rýchlosť drôtov v spodnej časti kolesa je menšia.
Aktivita 1.1 Ako sú závislé uhlová a obvodová rýchlosť? (pracovný list)
Aktivita zameraná na zistenie závislosti uhlovej rýchlosti ω telesa od jeho obvodovej rýchlosti *v* a vzdialenosti *r* od osi otáčania pomocou počítačom podporovaného merania s využitím senzora rotačného pohybu a programu COACH 6.
Žiaci v tejto aktivite získajú zručnosti pri používaní senzora rotačného pohybu, kde s pomocou programu budú vykresľovať graf závislosti uhlovej rýchlosti pre rôzne polomery koliesok, z čoho následne odvodia vzťah medzi uhlovou, obvodovou rýchlosťou a polomerom r.



Obr. 8 Aktivita zameraná na zistenie závislosti uhlovej rýchlosti ω telesa od jeho obvodovej rýchlosti *v* a vzdialenosti *r* od osi otáčania pomocou programu COACH 6

Aktivita 1.2 Rýchlosť valiaceho sa kolesa



Obr. 9 Aktivita zameraná na porovnanie veľkosti rýchlostí troch rôznych bodov valiaceho sa kolesa (na obvode, osi a v mieste dotyku s podložkou) počas jeho valivého pohybu pomocou programu COACH 6

Aktivita zameraná na porovnanie veľkosti rýchlostí troch rôznych bodov kolesa (na obvode, osi a v mieste dotyku s podložkou) počas jeho valivého pohybu pomocou počítačom podporovaného videomerania s využitím programu COACH 6.

Táto aktivita umožňuje žiakom pomocou nasnímaného videa znázorňujúceho valivý pohyb telesa a vyznačených troch rôznych bodov určiť ich rýchlosť, navzájom ju porovnať a overiť si svoje predpoklady.

4.1 Ako sa JOJO pohybuje

Ako funguje jojo? Prečo a okolo čoho sa otáča?

Jojo funguje na základe zákona zachovania energie a na jej premenách. Na strede joja, v ktorom leží os otáčania je namotaná nitka. Tým, že ho držíme nad zemou, má určitú potenciálnu (polohovú) energiu. Jeho kinetická energia je v tomto momente nulová. Akonáhle jojo upustíme, v dôsledku gravitačnej sily začne padať, nitka sa bude odvíjať a tým sa jojo počas svojho pádu bude otáčať. Pri pohybe joja sa potenciálna energia mení na kinetickú (pohybovú). Zákon zachovania energie nám hovorí, že sa celková energia zachováva a teda by sa mala celá polohová energia premeniť na potenciálnu. V najnižšom bode, kedy sa nitka odvinie celá, jojo dosiahne maximálnu kinetickú energiu.

4.2 Prečo JOJO stúpa

Prečo pozorujeme pohyb joja nahor, aj keď sa nitka na ňom navinutá celá odtočila? Odkiaľ berie energiu na svoj výstup a prečo „nevyskočí“ do rovnakej výšky?

Keď sa nitka úplne odvinie, jojo má maximálnu kinetickú energiu, ktorú využije na opätovné navíjanie sa a zotrvačnosťou začne stúpať. Jeho kinetická energia sa začne premieňať na polohovú. Zákon zachovania energie stále platí, avšak jojo nevystúpi do rovnakej výšky. Časť energie sa stratí v iných formách, ako je napr. odpor vzduchu, či trenie nitky, čím sa po niekoľkých výstupoch definitívne zastaví.

4.3 Akým pohybom sa JOJO hýbe

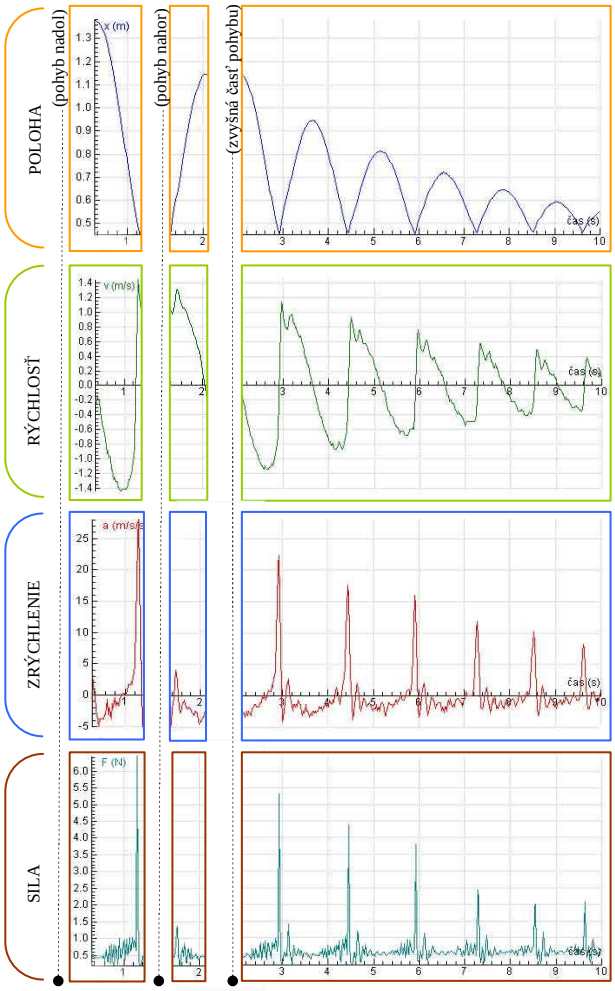
Aktivita 4.1 ***Ako sa JOJO hýbe***
Aktivita zameraná na popis pohybu joja pomocou počítačom podporovaného merania s využitím senzora pohybu, senzora sily a programu COACH 6.

V tejto bádateľskej aktivite žiaci sami navrhnú a zrealizujú experiment, pri ktorom vyšetria pohyb, ktorý vykonáva jojo. Ide o viazané bádanie, kde učiteľ zadá žiakom stanovený problém, ktorý riešia samostatne, alebo iba s malou pomocou učiteľa. Tento typ bádateľskej aktivity je vhodný pre žiakov, ktorí už nadobudli dostatočné zručnosti pri práci s programom COACH 6. K dispozícii majú senzor polohy a senzor sily, pomocou ktorých zaznamenávajú celkový priebeh pohybu joja až po jeho zastavenie. Pri tejto aktivite nie je dôležité iba

správne zaznamenanie výsledkov, ale aj samotné čítanie a pochopenie grafických závislostí.
Žiaci sú rozdelení do skupiniek, kde každá pracuje s jojom rôznej dĺžky špagátu. Na záver, keď si výsledky porovnajú, je možné vidieť závislosť meraných veličín od dĺžky špagátu.
Úloha: Preskúmaj, ako sa hýbe jojo. Opíš jeho správanie sa v jednotlivých častiach pohybu.
Pomôcky: JOJO, senzor polohy, senzor sily, COACH 6

Žiaci vytvoria grafy závislosti polohy, rýchlosti a zrýchlenia od času. Vďaka senzoru sily je možné zistiť veľkosť silového pôsobenia na špagát v istých okamihoch pohybu joja.
Najdôležitejšou časťou je samotná analýza grafov.
Pomocné otázky slúžiace na usmernenie pri riešení problémovej úlohy:

Popíš, aký pohyb koná jojo smerom nadol/nahor. Na akom dlhom špagáte bolo navinuté? Akú maximálnu rýchlosť dosiahlo? Odčítaj z grafu jeho zrýchlenie a porovnaj ho s gravitačným. Koľkokrát poskočilo na jedno natočenie? V akej fáze pohybu joja pôsobila výrazná sila na špagát? Urč jej veľkosť. Koľko sekúnd trvala? Aký čas trvala prvá otáčka (pohyb dole a hore)? Ako sa menila rýchlosť, zrýchlenie a pôsobiaca sila každým ďalším poskokom joja?
Výsledky nášho merania (Obr. 26): Pri uvoľnení špagátu spustíme meranie. Jojo sa pohybuje smerom k senzoru, pričom vykonáva zrýchlený pohyb. Z grafu časovej závislosti polohy sme určili dĺžku navinutého špagátu, a to 0,93 m. V najnižšej polohe dosahuje maximálnu rýchlosť 1,44 $m.s^{-1}$ a zrýchlenie 4,2 $m.s^{-2}$, čo je o čosi menšie ako gravitačné (graf rýchlosti sme vyhladili a následne zderivovali „vyhladené v“, čím sme dostali novú závislosť zrýchlenia od času, alebo je možné grafy postupne fitovať vhodnou funkciou). Trvá 0, 28 sekúnd, kým sa smer rýchlosti zmení na opačný a jojo začne stúpať smerom nahor spomaleným pohybom. V najnižšej polohe, v čase zmeny smeru rýchlosti nám graf ukázal prudký nárast pôsobiacej sily na špagát joja o veľkosti 0, 64 N, ktorý trval rovnakú dobu. Jojo vystúpi do takmer pôvodnej výšky. Pohyb sa opakuje, avšak s každým nasledujúcim „poskokom“ sú jeho rýchlosť, zrýchlenie a pôsobiaca sila čoraz menšie až do samotného zastavenia.



Obr. 10 Grafy polohy, rýchlosti, zrýchlenia a sily pôsobiacej na JOJO počas jeho pohybu zaznamenané v programe COACH 6

Na konci si vytvorené skupinky žiakov porovnajú výsledky. Keďže používali jojo so špagátom rôznej dĺžky, ich výsledky sa budú líšiť.
Ako ovplyvní pohyb joja dĺžka špagátu, ktorý je na ňom namotaný?
Žiaci najprv diskutujú o možných vzniknutých rozdieloch a až tak výsledky navzájom prezentujú a zdôvodňujú. Jojo, ktoré malo kratší špagát sa odvinulo skôr a tým dosiahlo menšiu maximálnu rýchlosť a zrýchlenie v porovnaní s dlhším špagátom. Taktiež sila, ktorá vznikla pri zmene smeru pohybu joja a pôsobila na špagát bola menšia. Celkový pohyb sa zastavil skôr.
Pre žiakov, ktorí ešte nemajú dostatočné zručnosti na zrealizovanie viazaného bádania je vhodné použiť aktivitu, ktorá obsahuje video znázorňujúce pohyb JOJA (pracovný list „Ako sa správa JOJO (Maxwellov zotrvačník) počas svojho pohybu“). Žiaci dostanú pracovné listy, kde majú podrobný popis postupných krokov k určovaniu a analýze pohybu JOJA.

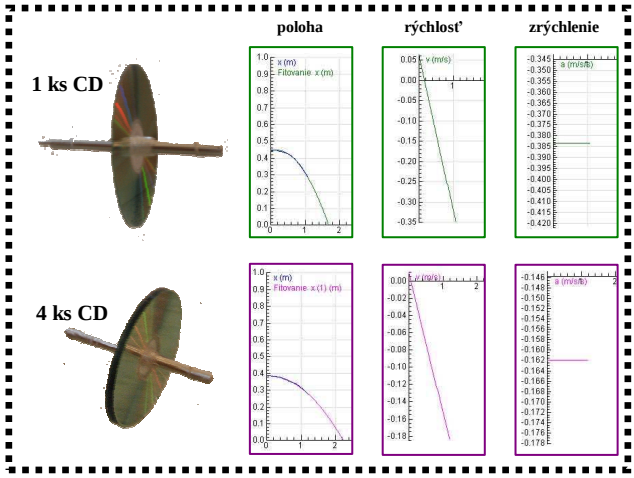
4.4 Cuknutie v najnižšom bode pohybu JOJA

Počas pohybu joja pociťujeme v istom okamihu výraznú pôsobiacu silu na nitku, či samotné jojo. *Odkiaľ sa toto cuknutie berie?*
Keď sa nitka úplne odvinie a jojo dosiahne najnižšiu polohu, jeho rýchlosť je maximálna. V tomto momente je smer rýchlosti a tým aj smer hybnosti *mv* orientovaný smerom nadol. Tento zostupný pohyb je zastavený a obrátený napínacou niťou, ktorá napodobňuje zrážku proti "neviditeľnému múru." Zrážka na konci nite prebieha vo veľmi krátkom čase. Vtedy na nitku pôsobí obrovská sila, ktorú pocítime cuknutím joja.
Môžeme to vidieť aj zo známeho vzťahu pre impulz sily: $I = F.\Delta t = \Delta p$. V dôsledku zmeny smeru hybnosti sa celková hybnosť joja zvýši dvojnásobne. Keďže zmena prebehne v krátkom okamihu, pociťujeme veľkú nárazovú silu.

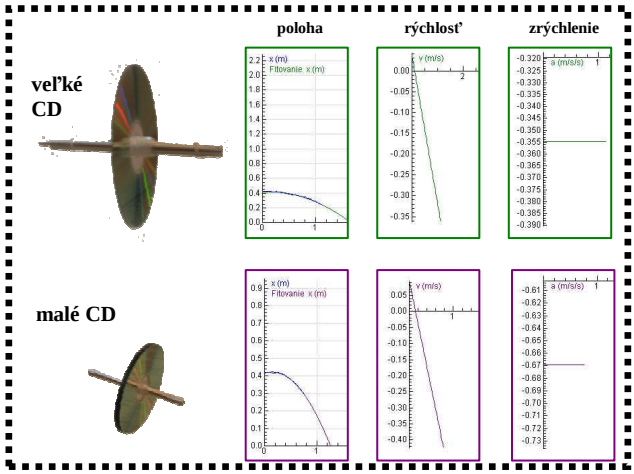
4.6 Ktoré JOJO je rýchlejšie

Over platnosť vzťahov (5) a (8) pre zrýchlenie Maxwelovho zotrvačníka na konkrétnych zotrvačníkoch pomocou merania v programe COACH 6 v závislosti na ich hmotnosti a rôznych vonkajších polomeroch. Na základe vzťahov a dosiahnutých výsledkov diskutuj o tom, aké parametre vplývajú na rýchlosť joja.
Aké jojo je najvýhodnejšie použiť, aby bolo čo najrýchlejšie?

Žiaci navrhnú riešenie a zostrojenie pomôcok, ktorými by sa dali vzťahy vhodným spôsobom overiť. Predkladáme nasledovné riešenie. Na overenie oboch vzťahov je vhodné použiť CD, ktoré je dobrou náhradou zotrvačníka. Pri overovaní prvého vzťahu zrýchlenia zotrvačníka použijeme rôzny počet rovnakých CD (1 ks a 4 ks), čím dosiahneme rozdielnu hmotnosť zotrvačníkov s rovnakým polomerom. Pri overovaní druhého vzťahu potrebujeme dosiahnuť rôzny vonkajší polomer, nakoľko je potrebné zachovať hmotnosť a vnútorný polomer zotrvačníka. Tu je vhodným riešením použitie CD rôznych polomerov. Je potrebné nakombinovať ich tak, aby hmotnosť veľkých bola rovnaká ako hmotnosť malých CD (1 veľké a 2 malé).
Aktivita 4.2 Overenie vzťahov pre zrýchlenie padajúceho zotrvačníka (pracovný list)
Aktivita zameraná na overovanie vzťahov pre zrýchlenie zotrvačníka.
V tejto aktivite žiaci overia vzťahy (5) a (8) vyjadrené pre zrýchlenie zotrvačníka v závislosti na rôznej hmotnosti a vonkajšom polomere pomocou počítačom podporovaného merania s programom COACH 6.



Obr. 11 Výsledky meraní pri rôznej hmotnosti zotrvačníkov, avšak rovnakých rozmerov pomocou programu COACH 6



Obr. 12 Výsledky meraní pri rovnakej hmotnosti zotrvačníkov, avšak rôznych vonkajších polomerov pomocou programu COACH 6

6.1 Guľôčky na naklonenej rovine

Na objasnenie valivého pohybu telesa dole naklonenou rovinou môžeme použiť zdôvodnenie z energetického hľadiska. Uvažujme prípad, kedy sa guľa valí dole po mierne naklonenej rovine. Aké druhy pohybov pri tom vykonáva? Keďže ide o valivý pohyb, guľôčka okrem svojho posuvného pohybu vykonáva aj rotačný. Pri skotúľaní guľôčky z naklonenej roviny sa jej polohová energia zmení na kinetickú, ktorá má dve zložky. Prvou zložkou je kinetická energia posuvného (translačného) pohybu a druhou je kinetická energia rotačného pohybu. Zmenu polohovej energie môžeme vyjadriť rovnicou

$$E_P = E_{KT} + E_{KR},$$

kde E_P je polohová energia guľôčky na začiatku pohybu, E_{KT} je kinetická energia posuvného pohybu po skotúľaní sa z naklonenej roviny a E_{KR} je

kinetická energia rotačného pohybu po skotúľaní sa z naklonenej roviny. Po úprave dostávame:

$$mgh = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}I\omega^2 .$$

6.2 Preteky plechoviek

Zoberte si dve rovnaké plechovky koly, umiestnite ich vedľa seba a naraz pustite po mierne naklonenej rovine. *Pozorujte ich pohyb. V čom sa líši? Ktorá dobehne do cieľa ako prvá?*
Plechovky sa po naklonenej rovine valili rovnakou rýchlosťou a do cieľa dorazili v jednom okamihu (Obr. 32 hore). *Teraz jednu plechovku pretrepte a pokus zopakujte. Čo pozorujeme v tomto prípade?* Plechovka s pretrepaným nápojom sa omeškala a do cieľa prišla ako druhá (Obr. 32 dole). Pokus niekoľkokrát opakujeme, no výsledok je rovnaký. *Prečo je to tak? Zdôvodni.*

Keďže pozorujeme omeškanie plechovky toho istého druhu, ihneď nám napadne, že príčina bude v rozložení hmotnosti.
Plechovka sa po pustení začne kotúľať a začne zrýchľovať posuvnú aj rotačnú zložku svojho pohybu. Čo sa však deje s tekutým vnútrom plechovky? Posuvná zložka jeho rýchlosti musí byť rovnaká ako posuvná zložka rýchlosti obalu plechovky. Toto ale neplatí o rotačnej zložke rýchlosti. Čím viac energie musí plechovka vynaložiť na rotáciu svojho pohybu, tým menej energie jej ostáva na pohyb posuvný, a teda sa bude pohybovať pomalšie. Ide teda o to, v ktorej plechovke je nápoj pevnejšie prepojený s plechovkou.
Čo sa deje pri pretrepaní plechovky?
V plechovke prebieha chemická reakcia, pri ktorej vzniká CO_2 v plynnom skupenstve. V dôsledku toho sa v plechovke zvýši tlak, ktorý má za následok zvýšenie trenia koly o steny plechovky a tiež koly o samú seba. Vnútro pretrasenej plechovky je akoby "pevnejšie prepojené s obalom" ako vnútro nepretrasenej. Preto sa väčšia časť energie premení práve na rotačnú zložku pohybu a plechovka prehrá. Je možné, že kola pri pretrepaní vytvorí penu, no tá plechovku iba viac spomalí.





Obr. 13 Pohyb valiacich sa plechoviek koly po naklonenej rovine. Obe plechovky sa kotúľajú rovnakou rýchlosťou (hore). Ak je jedna plechovka pretrepaná, zaostáva za druhou (dole)

4 Pracovné listy

Pracovný list: Ako sú závislé uhlová a obvodová rýchlosť?



Na kolotoči sa deti rozmiestnili po všetkých sedadlách jeho obvodu. Všetky sa však nepomestili a tak si posadali na miesta bližšie stredu (osi otáčania). Kolotoč sa začal roztáčať. Pohybovali sa všetky deti sediace na obvode a vo vnútornej časti kolotoča rovnako rýchlo?
Porovnaj
Od čoho závisí veľkosť rýchlostí otáčajúcich sa telies okolo osi otáčania?
Existuje nejaký vzťah medzi obvodovou a uhlovou rýchlosťou telies otáčajúcich sa okolo osi?
SKÚMAJME POMOCOU POČÍTAČA
V tejto aktivite budete používať senzor rotačného pohybu v spojení s počítačom k meraniu rýchlosti rotačného pohybu. Tento senzor nám bude zaznamenávať veľkosť uhla počas rotačného pohybu kolieska pohybujúceho sa po podložke.



Senzor má kolieska troch rôznych polomerov. Každým prejdeme po podložke rovnakou obvodovou rýchlosťou a odvodíme vzájomné vzťahy.
Úloha:
Zistite ako závisí uhlová rýchlosť telesa od jeho obvodovej rýchlosti a vzdialenosti od osi otáčania (r).
Pomôcky:

počítač so systémom COACH 6, sonda rotačného pohybu (kolieska s polomerom r_1 = 10 mm, r_2 = 29 mm, r_3 = 48 mm), merací panel Coach Lab II

Postup:
Pripojte senzor rotačného pohybu k meraciemu panelu.
Otvorte aktivitu '*Rychlost rotacneho pohybu*'.
Na kraj stola umiestnite senzor tak, aby sa najväčšie koliesko s polomerom r_1 dotýkalo podložky a mohli ním voľne pohybovať (obr.).

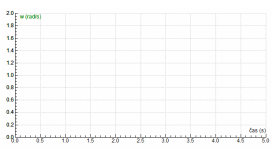


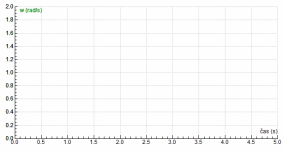
Nacvičte si rovnomerný pohyb so senzorom po okraji stola v trvaní 5 s.
Analýza získaných výsledkov:
Zakreslite svoju predpoveď pre graf závislosti veľkosti uhla otočenia kolieska s polomerom r_1 od času.

Na meracom paneli si skontrolujte, poprípade nastavte počiatočnú hodnotu uhla ako 0 rad a urobte meranie.
Na obrazovke sa zobrazí graf závislosti veľkosti uhla otočenia kolieska od času. Zobrazený graf závislosti porovnajte so svojou predpoveďou.
Akú závislosť vám pripomína graf f(l)?
.....
.....
Nameranú závislosť fitujte vhodnou funkciou. Zapíšte typ funkcie a hodnoty parametrov a, b. Čo tieto veličiny predstavujú v našom meraní?

y = f(x)= *a =* *b =*

Čo predstavuje sklon funkcie y = f(x)? Aká je hodnota sklonu funkcie pre koliesko s polomerom r_1?
.....
.....
.....
.....Diskutujte v skupinách o pojme „sklon" funkcie. Čo nám hovorí a čo predstavuje zmena sklonu v našom prípade?
.....
.....
.....
.....
Predpovedajte graf závislosti uhlovej rýchlosti kolieska od času a následne tento graf zobrazte.





Predpoveď 2 Výsledok 2

Ako sa mení rýchlosť otáčania s polomerom kolieska?
Rovnaké meranie pomocou senzora urobte postupne pre kolieska polomerov r_2 a r_3, pričom sa snažte zachovať rovnakú rýchosť pohybu ako v prvom prípade. Predpovede a výsledky merania zaznačte do predchádzajúcich grafov.

Namerané závislosti zakaťdým fitujte vhodnou funkciou.

Aká je hodnota sklonu funkcie pre koliesko s polomerom r_2?
.....
.....
Aká je hodnota sklonu funkcie pre koliesko s polomerom r_3?
.....
.....
Ako sa menil sklon funkcie závislosti uhla otočenia od času so zmenou veľkosti polomeru kolieska?
.....
.....
.....
.....
Ako sa menila veľkosť uhlovej rýchlosti so zmenšujúcim sa polomerom pri dodržanej konštantnej obvodovej rýchlosti?
.....
.....
.....
.....
Zistite ako závisí uhlová rýchlosť kolieska od jeho obvodovej rýchlosti a vzdialenosti od osi otáčania (r). Svoje zistenie potvrďte výpočtom, alebo graficky z nameraných hodnôt a známych polomerov r_1, r_2 a r_3.

Záver

V tejto práci sme sa zaoberali bádateľsky ladenou koncepciou vyučovania „IBSE", ktorá je jednou z metód založenou na aktívnom žiackom bádaní. Žiaci rozvíjajú svoje vedomosti a zručnosti a sú vedení samostatne skúmať neznáme problémy, tvoriť hypotézy, pojednať o možných riešeniach, experimentovať, porozumieť dosiahnutým výsledkom a správne ich interpretovať.
Navrhli a vytvorili sme metodický materiál popisujúci pohyb JOJA. Metodika je rozdelená do viacerých častí podľa typológie IBSE. Takto vytvorené materiály umožňujú učiteľom efektívne sprístupňovanie učiva pre žiakov. Cieľom tejto práce bolo nielen poskytnúť metodické materiály k danej problematike, ale aj vytvoriť ukážku a inšpirovať učiteľov, ako si môžu sami pripraviť

učebné materiály aj z iných častí vzdelávacieho programu.
Navrhli sme sériu aktivít pre žiakov gymnázií, ktoré môžu prevádzať na hodine nielen v rámci objasňovania učiva, ale aj ako samostatnú činnosť pomocou bádania v počítačom podporovanom laboratóriu. Aktivity sme sformulovali do pracovných listov, vďaka ktorým majú žiaci sformulovaný postup pri riešení fyzkálnych problémov aj bez pomoci učiteľa. Aktivity sú zamerané na skúmanie pohybu JOJA pomocou meraní, videomeraní a následnej analýzy grafických závislostí.

Poďakovanie

Touto cestou vyslovujem poďakovanie vedúcemu práce doc. RNDr. Mariánovi Kirešovi, PhD. za pomoc, odborné vedenie a pripomienky a Ústavu fyzikálnych vied za poskytnutie priestorov a pomôcok pre realizáciu experimentov. Taktiež ďakujem všetkým, ktorí ma cennými radami a podnetnými nápadmi podporili pri tvorbe tejto práce.

Zoznam použitej literatúry

[Poláček, P., 2011] Poláček, P. (2011) Cyklické křivky vyšších řádů. diplomová práca. ZÁPADOČESKÁ UNIVERZITA V PLZNI. Fakulta aplikovaných věd. Plzeň.

[Held, Ľ. et. al., 2011]Held, Ľ. et al. (2011) Výskumne ladená koncepcia prírodovedného vzdelávania. SAV Bratislava. 90 vyd., ISBN 978-80-8082-436-0, pp. 9 – 100.

[Chmelár, J., 2011] Chmelár. J. (2011) Vybraná témata diferenciálního počtu v počítačem podporované výuce. bakalárska práca, UNIVERZITA PALACKÉHO V OLOMOUCI, pedagogická fakulta. katedra matematiky. Olomouc.

[Holliday, D., Resnick, R., Walker, J., 2006] Holliday, D., Resnick, R., Walker, J., (2006) Fyzika. Mechanika. Vysoké učení technické v Brně, VUTIUM. 5 vyd., ISBN 80-214-1868-0, pp 263 – 283.

[Kireš, M., Ješková, Z., 2006] Kireš, M., Ješková, Z. (2006) Conceptual understanding of the Maxwell wheel motion, Program and Abstracts. Modelling in Physics and Physics Education. GIREP Conference 2006. Amsterdam, Netherlands, August 20-26., pp. 49 – 50.

[Projekt ESTABLISH] Projekt ESTABLISH. [online]. Dostupné na internete: <http://establish-fp7.eu>.

[Hofatein, N. v. Lunetta, 2003] Hofatein, N. v. Lunetta (2003) The laboratory in Science Education. Foundations for the Twenty-First Century. Willey Periodicals. Inc.

Vplyv nepárneho počtu nukleónov na spontánne štiepenie

Pavol Mošať[1]*
Školiteľ: Stanislav Antalic[1‡]

[1] Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Tento článok sa zameriava na problematiku spontánneho štiepenia jadier, pričom vychádza zo štatistického súboru hodnôt dôb polpremeny a vetviacich pomerov pre 88 nuklidov z oblasti $Z \geq 96$, získaných experimentálnymi metódami. Práca sa zaoberá analýzou faktorov, ktoré majú vplyv na samotné štiepenie jadier, a to konkrétne uzavreté vrstvy protónov a neutrónov a párnosť, resp. nepárnosť ich počtu v jadre.

Kľúčové slová: Spontánne štiepenie, Doba polpremeny, Vetviaci pomer, Magické čísla, Faktor potlačenia

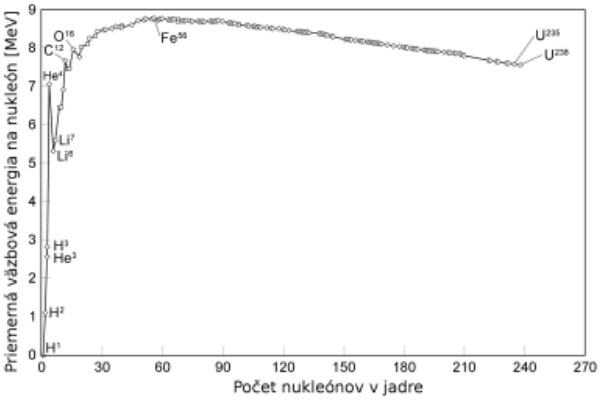
1 Úvod

Už je to viac ako 70 rokov, čo bolo objavené spontánne štiepenie. Počas tejto doby bolo nazhromaždené veľké množstvo experimentálnych dát popisujúcich tento proces. O poslednú publikovanú sumarizáciu týchto dát sa pokúsila D.C.Hoffman k príležitosti 50. výročia objavenia štiepenia jadier [Hoffman, 1989].

Odvtedy sa však vyvinuli modernejšie a výkonnejšie meracie zariadenia, ktoré výrazne posunuli hranicu poznania najťažších jadier. Z nášho pohľadu je hlavne dôležité, že nám poskytli nové informácie o spontánnom štiepení. Bolo pre nás obrovskou výzvou pokúsiť sa tieto údaje spracovať do rôznych systematík s cieľom potvrdiť, poprípade spochybniť doterajšie známe fakty o tomto komplikovanom procese a zároveň tak rozšíriť poznanie čitateľa v tejto problematike.

2 Spontánne štiepenie jadier

V roku 1940 Petržak a Flerov [Flerov and Peterjak, 1940] objavili, že ^{238}U sa môže rozpadať aj prostredníctvom spontánneho štiepenia na dva veľké fragmenty. Pravdepodobnosť procesu štiepenia však bola až o sedem rádov menšia v porovnaní s alfa premenou. Od tej doby bolo objavených množstvo (viac ako 100) jadier, ktoré sa rozpadávajú práve spontánnym štiepením.



Obr. 1: Závislosť väzbovej energie na nukleón atómového jadra od počtu nukleónov v jadre.

Ide o proces, ktorý je veľmi zriedkavý v oblasti ľahkých aktinidov, no s rastúcim hmotnostným a protónovým číslom postupne naberá na dôležitosti, a to až tak, že pre ťažké jadrá sa stáva dominujúcim procesom, ktorý má veľký vplyv na stabilitu jadier. Samotná „ochota“ jadier štiepiť sa vyplýva z energetickej výhodnosti štiepenia ťažkého jadra na dve ľahšie. Ide najmä o fakt, že väzbová energia pripadajúca na jeden nukleón nadobúda maximum pre jadrá v oblasti $A = 50 – 60$ a postupne s rastúcim hmotnostným číslom klesá až k hodnote asi 7,5 MeV, čo je zobrazené na Obr. 1. Ak teda urobíme energetickú bilanciu rozpadu jadra s hmotnostným číslom asi 240, ktorému odpovedá väzbová energia približne 7,6 MeV/nukleón, na dva fragmenty s hmotnostými číslami 120, ktorých väzbová energia na nukleón je až približne 8,5 MeV, badáme rozdiel 0,9 MeV/nukleón a teda viac ako 200 MeV pre 240 prítomných nukleónov. Táto energia sa uvoľňuje pri štiepení jadra, pričom asi 80% z nej sa mení na kinetickú energiu fragmentov pri ich vzájomnom odpudzovaní a zvyšok odnášajú emitované neutróny, žiarenie beta, gama z fragmetov a neutrína [Beiser, 1969].

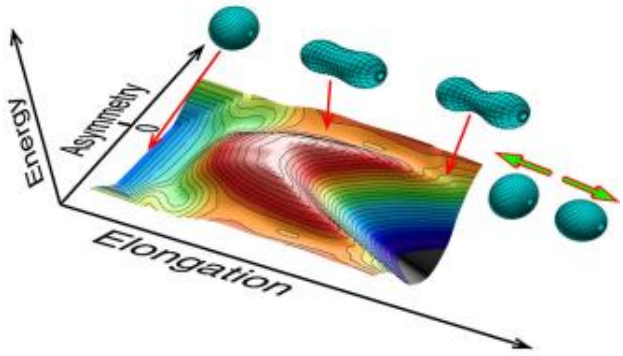
Aj napriek tejto zjavnej energetickej výhodnosti pozorujeme častokrát spomenuté veľmi malé pravdepodobnosti pre štiepenie jadier. Dôvodom je veľká Coulombovská bariéra pre separáciu fragmentov. A tak ťažké jadro môže existovať ako

* palo.mosat@gmail.com
‡ Stanislav.Antalic@fmph.uniba.sk

dve menšie jadrá uviaznuté v potenciálovej jame, ktorých separácia by síce znamenala energeticky výhodnejší stav, ale privysoká bariéra im bráni sa oddeliť.

Kým by sme mohli očakávať, že jadrá sa budú s najväčšou pravdepodobnosťou štepiť na dva rovnako veľké fragmenty, t.j. symetricky, v skutočnosti môžu pri štiepení jadra existovať aj energeticky výhodnejšie konfigurácie. V tomto prípade môžeme pozorovať dominanciu asymetrického štiepenia. Pri ňom sa jadrá nedelia ľubovoľne, ale každej možnej veľkosti fragmetov štiepenia prislúcha istá pravdepodobnosť, ktorá závisí od výšky štiepnej bariéry, ktorú musia deliace sa fragmety prekonať. Tá sa ale mení s asymetrickosťou prerozdelenia hmoty do fragmetov. Pre symetrické štiepenie môže byť taká vysoká, že sposobí aj jeho úplné potlačenie [Krane, 1988].

V praxi môžeme tento fakt experimentálne potvrdiť, keďže pri pokusoch sa ukázalo, že s rastúcou energiou jadra, ktoré sa inak štiepi asymetricky, rastie aj pravdepodobnosť pre jeho symetrické štiepenie.



Obr. 2: Závislosť výšky štiepnej bariéry pre jadro ^{180}Hg od nerovnomernosti prerozdelenia hmoty v jadre – asymmetry a predĺženia jadra – elongation [Andreyev, 2010].

Isté veľkosti fragmetov sú pri štiepení rôzne veľkých jadier preferované pred ostatnými. Zvyčajne jeden fragment je z oblasti magických jadier, t.j. jadier z okolia izotopov s uzatvorenými protónovými a/alebo neutrónovými vrstvami. Príkladom môže byť štiepenie ^{236}U a ^{256}Fm. Kým urán sa najpravdepodobnejšie rozpadá na fragmenty v okolí hmotnostných čísel 95 a 140, u o 20 nukleónov ťažšieho fermia je to 114 a 141. Teda veľkosť jedného z fragmentov štiepenia ostáva rovnaká aj pre o dosť ťažšie jadro ^{256}Fm a takmer celý hmotnostný rozdiel medzi ^{236}U a ^{256}Fm sa sústredí do druhého fragmentu. Tento fenomén spôsobuje výhodná, dvojito magická konfigurácia ^{132}Sn ($Z = 50$, $N = 82$ - obidve magické), ktorú vysvetľuje vrstvový model ako uzavreté vrstvy protónov a neutrónov. To vedie k energetickej výhodnosti takéhoto usporiadania a zvýšenej stability jadier. Práve preto pri štiepení pozorujeme, že jeden z fragmentov ostáva prednostne v tejto oblasti [Krane, 1988].

Celý proces sa však zdá byť komplikovanejší a na hmotnostné rozdelenie pri štiepení majú vplyv aj iné faktory, ktoré môžu dominovať nad výhodnosťou uzavretých vrstiev, čoho dôkazom je veľmi zaujímavý výsledok štiepenia ^{180}Hg [Andreyev, 2010].

Pred experimentom nebolo pochýb o symetrickom štiepení na dve rovnaké jadrá ^{90}Zr v dôsledku ich dvojito magickej konfigurácii $Z = 40$, $N = 50$. Experiment však ukázal asymetrické štiepenie na dva fragmenty s najpravdepodobnejším rozdelením hmotnosti v pomere 72/108. Vysvetlenie tejto neočakávanej udalosti prinieslo modelovanie potenciálnej energie v závislosti od deformácie jadra (na Obr. 2 je deformácia znázornená ako predĺženie jadra – elongation a asymetria prerozdelenia hmotnosti pri deformácii), ktoré síce ukázalo energetické minimum pre symetrické rozštiepenie (na Obr. 2 ako „sivá jama“ na pravej strane), no predchádza mu veľká bariéra. Dve možné cesty k rozštiepeniu vedú okolo tejto bariéry, no ako je vidno z Obr. 2, hmota jadra sa pri nich prerozdeľuje asymetricky.

2.1 Polčas rozpadu pre spontánne štiepenie

Spontánne štiepenie je, podobne ako alfa premena, jav preniknutia fragmentov cez potenciálovú bariéru. Jadro pretuneluje zo svojho základného stavu cez štiepnu bariéru až do stavu rozštiepenia sa na fragmenty. Doba polpremeny $T_{1/2}$ je veličinou charakterizujúcou rozpadanie sa jadier a určuje čas, za ktorý sa rozpadne práve polovica z celkového počtu jadier.

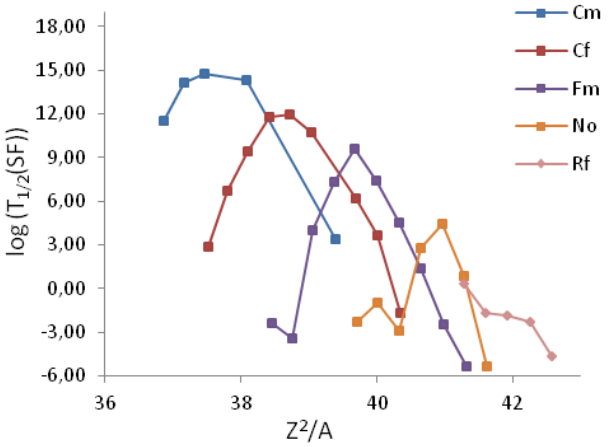
Tie sa však môžu rozpadať rôznymi procesmi, a v našej práci sa zaujímame len o ich spontánne štiepenie, takže budeme pracovať s dobou polpremeny pre spontánne štiepenie $T_{1/2}(SF)$ a vetviacim pomerom b_{SF}, čo nie je nič iné, než pravdepodobnosť pre jadro rozpadnúť sa spomedzi všetkých procesov práve prostredníctvom spontánneho štiepenia [Krane, 1988]. [Krane, 1988] Tieto tri veličiny spolu úzko súvisia a síce:

$$T_{1/2}^{SF} = \frac{T_{1/2}}{b_{SF}}$$

Na tomto mieste by bolo vhodné poznamenať, že všetky hodnoty dôb polpremeny a vetviacich pomerov pre spontánne štiepenie asi 90-tich nuklidov, spracovaných v tejto práci, boli získané výlučne experimentálnymi metódami.

3 Vplyv nepárneho A na spontánne štiepenie

Ako sme si už vyššie spomenuli, s rastúcim protónovým a hmotnostným číslom klesá stabilita jadier, čomu odpovedá skracovanie dôb polpremeny



Obr. 3: Pokles dôb polpremeny spontánneho štiepenia s rastúcim parametrom Z^2/A pre jednotlivé izotopy [NNDC].

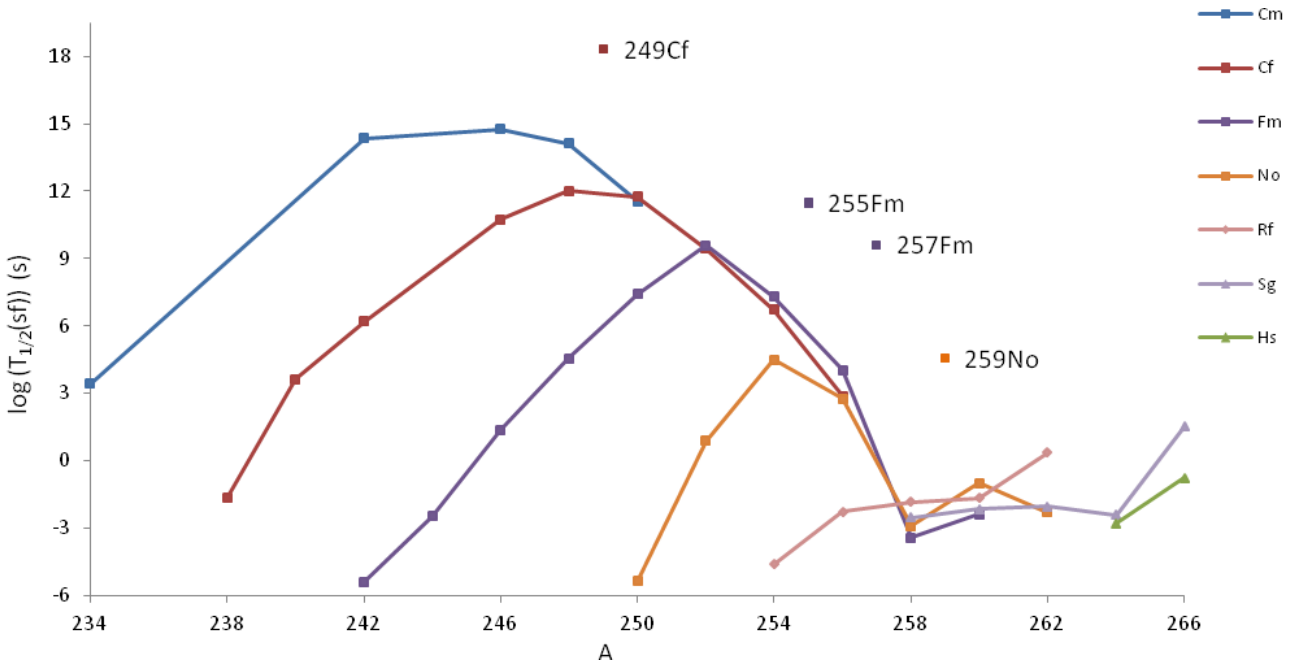
pre spontánne štiepenie. Je to spôsobené najmä čoraz väčšou odpudivou silou medzi protónmi, rastúcou s druhou mocninou ich počtu, ktorú nedokážu kompenzovať príťažlivé sily medzi nukleónmi, rastúcimi len ako A, čo je asi $2{,}5 \times Z$. Ako približný indikátor štiepenia bol zavedený parameter Z^2/A [Beiser, 1969]. Na Obr. 3 môžeme vidieť, ako klesá $T_{1/2}(SF)$ s rastom tohto parametra pre párno-párne izotopy.

Tie isté hodnoty $T_{1/2}(SF)$ sú vykreslené aj na Obr. 4, no tentokrát v závislosti len od A, doplnené o 4 párno-nepárne jadrá. Premennú na horizontálnej osi sme zmenili najmä pre lepšiu orientáciu čitateľa v hmotnostných číslach, čím ho ušetríme od neustáleho prepočítavania A z hodnoty Z^2/A.

Zaujímavým faktom, ktorý nám ukazuje Obr. 4 sú očividne vysoké hodnoty $T_{1/2}(SF)$ pre jadrá s nepárnym počtom neutrónov (zobrazené ako osobitné body zafarbené podľa Z) v porovnaní s ich susediacimi párno-párnymi jadrami. Ako príklad uvedieme ^{249}Cf s dobou polpremeny asi $2{,}2 \times 10^{18}$s, ktorý je stabilnejší voči štiepeniu zhruba o šesť rádov viac, ako dva najstabilnejšie párno-párne izotopy ^{248}Cf a ^{250}Cf s $T_{1/2}(SF)$ $9{,}9 \times 10^{11}$s, resp $5{,}6 \times 10^{11}$s. Podobnú stabilizáciu o približne 3-5 rádov vykazujú aj iné párno-nepárne jadrá, na Obr. 4 sú ako príklad uvedené okrem ^{249}Cf ešte ^{255}Fm, ^{257}Fm a ^{259}No. Tejto problematike je venovaná podkapitola 3.2.

3.1 Párno-párne jadrá

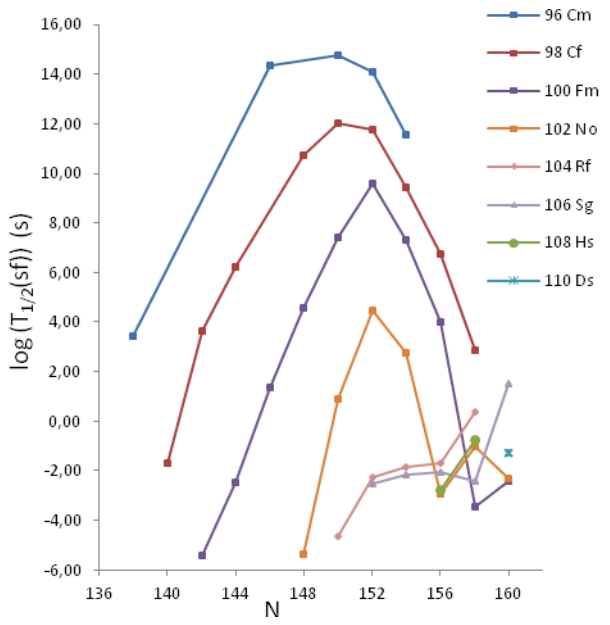
V tejto časti je spracovaných celkovo 44 párno-párnych jadier, počnúc najľahším ^{234}Cm (Z = 96) až po ^{270}Ds (Z = 110), pričom u všetkých bolo pozorované spontánne štiepenie. Doby polpremeny pre spontánne štiepenie týchto jadier sa pohybujú od niekoľkých mikrosekúnd (10^{-5}s) až po 10^{15}s, čo predstavuje rozsah 20 rádov. Stabilita jadier voči štiepeniu klesá s narastajúcim protónovým číslom Z a pre dané Z sa výrazne mení s počtom neutrónov. Závislosť $T_{1/2}(SF)$ od neutrónového čísla pre párno-párne jadrá je načrtnutá na Obr. 5, kde



Obr. 4: Závislosť $T_{1/2}$(sf) od počtu nukleónov A jadra. Párno-párne izotopy daného prvku sú pospájané čiarami a odlíšené farbami podľa Z. Osobitne sú zobrazené 4 párno-nepárne jadrá, ktoré sú v porovnaní so susediacimi párno-párnymi jadrami výrazne stabilnejšie voči spontánnemu štiepeniu [NNDC].

môžeme badať, že pre izotopy prvkov $Z = 96 – 102$ sa ako veľmi stabilná javí konfigurácia so 152 neutrónmi. Fm a No tu dosahujú maximálne hodnoty $T_{1/2}(SF)$ a výrazne ovplyvnené sú aj izotopy Cm a Cf, ktoré si aj napriek dosť veľkému nadbytku neutrónov v tejto oblasti udržujú vysokú stabilizáciu voči štiepeniu. Pre izotopy so $Z > 104$ sa však tento efekt takmer úplne vytráca, aj keď u Rf je ešte vidieť pomerne prudký nárast $T_{1/2}(SF)$ od $N = 150$ ku $N = 152$ asi o tri rády.

Na Obr. 5 sa však javí akýsi nový trend rastu $T_{1/2}(SF)$ s veľmi podobným sklonom pre izotopy Rf, Sg a Hs počnúc $N = 156$ resp. 158, čo by mohlo indikovať prítomnosť ďalšej uzavretej deformovane vrstvy. Čiastočne sa k tomuto trendu



Obr. 5: Závislosť $T_{1/2}(SF)$ od neutrónového čísla pre dané prvky. Vplyv uzavretej deformovanej vrstvy $N = 152$ na $T_{1/2}(SF)$ je očividný [NNDC].

pripája aj ^{260}No ($T_{1/2}(SF) = 108$ms), no nasleduje pokles u ^{262}No na hodnotu len asi 5 ms. Bohužial, pri tejto hodnote je nutné poznamenať, že meranie [Hulet, 1989] prebehlo za nejasných podmienok, a odvtedy ho nikto nezopakoval, preto hodnotu 5 ms treba brať iba veľmi opatrne. Zaujímavé však je, že v tejto oblasti pozorujeme aj nárast $T_{1/2}(SF)$ u ^{260}Fm na asi 4 ms, čo je síce len približná hodnota, no aj napriek tomu pomerne dobre sedí do systematiky. Presnejšie merania dôb polpremeny a vetviacich pomerov ^{260}No, ^{262}No a ^{260}Fm a ťažších párno-párnych izotopov Sg, Hs, či aspoň jedného ďalšieho párno-párneho izotopu Ds (zatiaľ známy len jediný, ^{270}Ds s $T_{1/2}(SF) > 50$ms), by nám mohli pomôcť odhaliť alebo vyvrátiť dohady o náraste stability jadier voči štiepeniu niekde v oblasti $N > 160$.

Vráťme sa ešte k Obr. 4. Pozorný čitateľ si mohol všimnúť okrem už uvedených efektoch klesania $T_{1/2}(SF)$ s rastúcim A a Z a vysokej stability jadier s nepárnym A aj ďalšiu zaujímavú vec, ktorou je neočakávaná číselná zhoda v hodnotách dôb polpremeny, u niektorých zdanlivo nesúvisiacich nuklidoch. Takáto veľká zhoda sa na grafe z Obr. 4 objavuje na 7 miestach. Ako príklady uvedieme dve dvojice, ktoré majú navzájom najpodobnejšie hodnoty a na Obr. 4 sa takmer prekrývajú. Pre $A = 250$ tento jav pozorujeme u Cm ($Z = 96$, $N = 154$) a Cf ($Z = 98$, $N = 152$), s logaritmom doby polpremeny 11,55, resp. 11,75, pre $A = 252$ pozorujeme veľmi podobné hodnoty 9,42 a 9,59 u Cf ($Z = 98$, $Z = 154$), resp. Fm ($Z = 100$, $N = 152$) rovnako je to aj u viacerých iných dvojiciach. Ešte dodáme, že pri $A = 258$ a 260 majú veľmi blízke hodnoty $T_{1/2}(SF)$ dokonca až 4 nuklidy, ich hodnoty sa pohybujú v desiatkach milisekúnd.

Na prvý pohľad sa zdá, akoby stabilita niektorých jadier s nie veľmi odlišnými Z a N (napr. 96 a 98, resp. 154 a152) záležala len na A, a teda nie na konkrétnych počtoch protónov a neutrónov. Bližšie si však tento fenomén nevieme vysvetliť.

3.2 Jadrá s nepárnym *Z* alebo *N*

Ako som už spomenul v predchádzajúcej časti, v praxi sa stretávame s pomerne vysokými dobami polpremeny párno-nepárnych jadier vzhľadom k ich párno-párnym okolitým susedom. O dvojito nepárne jadrá sa zatiaľ nebudeme zaujímať, vplyv nepárneho počtu protónov a zároveň aj neutrónov na stabilitu jadra voči spontánnemu štiepeniu rozoberieme neskôr.

Z/N	152	153	154	155	156	157	158	159	160
106	-2,5	0,9	-2,2	1,5	-2,1	0,8	-2,4		1,6
105	1,1			1,2	0,7		1,7		
104	-2,3	2,7	-1,9	1,6	-1,7	2,8	0,4		
103		5,0*			1,4		3,4	5,1*	
102	4,5		2,7	3,2	-2,9	4,5*	-1,0	-2,3	
101			6,0*	5,2*	6,3*		3,8	6,8	
100	9,6		7,3	11,5	4,0	9,6	-3,4	0,2	-2,4

Tab. 1: Tabuľka dekadických logaritmov $T_{1/2}(SF)$, farba sa mení od modrej pre najmenej stabilné, prechádza cez žltú pre priemerne stabilné až k sýto červenej pre najstabilnejšie jadrá [NNDC].
*** znamená minimálnu hodnotu**

Ako motivácia k danej problematike nám poslúži výsek z tabuľky nuklidov (Tab. 1), kde jednotlivé nuklidy majú polohu podľa ich počtu protónov a neutrónov a čísla v poliach zobrazujú dekadický logaritmus $T_{1/2}(SF)$. K týmto hodnotám je ešte pre lepšiu prehľadnosť priradená farebná

škála tak, že od najstabilnejších jadier s najvyšším $T_{1/2}(SF)$, zobrazených červenou farbou, sa postupne s klesajúcou stabilitou mení farba až na žltú a modrú pre najmenej stabilné. Ihneď pri pohľade na prvý, či tretí riadok Tab. 1 ($Z = 106$ resp. 104) zaregistrujeme pravidelné striedanie žltej a modrej farby, čo znamená, že $T_{1/2}(SF)$ sa mení pri konštantnom Z podľa párnosti N, a to o viac ako tri rády! Aj keď to na prvý pohľad nemusí byť z tabuľky vidno, najviac sa tento efekt prejavuje u ^{257}Fm ($Z = 100$), ktoré má voči svojmu ľavému párno-párnemu susedovi dlhší $T_{1/2}(SF)$ o takmer šesť rádov a voči pravému susedovi dokonca až o trinásť rádov! Celkom obdobne sa však doby polpremeny pre štiepenie menia aj v stĺpcoch s párnym N a striedajúcim sa, párnym alebo nepárnym Z.

3.2.1 Faktor potlačenia *HF* spontánneho štiepenia pre nuklidy s nepárnym *Z* alebo *N*

Farebná tabuľka síce slúži dobre na aké – také kvalitatívne popísanie tohto deja, no bolo by dobré vedieť vyjadriť potlačenie spontánneho štiepenia aj prostredníctvom čísel, aby sme mohli porovnávať, kde sa tento efekt prejavuje najviac, kde sa poprípade neprejavuje vôbec a či má v tabuľke nuklidov nejaký rastúci alebo klesajúci trend. Na túto službu si zavedieme tzv. faktor potlačenia spontánneho štiepenia - *HF* (z ang. Hindrance factor). Ide vlastne o porovnanie $T_{1/2}(SF)$ nuklidu s nepárnym Z alebo N voči jeho dvom párno-párnym susedom, a to nasledovne:

- pre jadrá s nepárnym Z a párnym N, ako

(1) $$HF = \frac{T_{1/2}^{SF}(^{A}_{N}Z)}{\left[T_{1/2}^{SF}(^{A-1}_{N}Z-1)\times T_{1/2}^{SF}(^{A+1}_{N}Z+1)\right]^{1/2}}$$

- pre jadrá s párnym Z a nepárnym N, ako

(2) $$HF = \frac{T_{1/2}^{SF}(^{A}_{N}Z)}{\left[T_{1/2}^{SF}(^{A-1}_{N-1}Z)\times T_{1/2}^{SF}(^{A+1}_{N+1}Z)\right]^{1/2}}$$

Teda vlastne vidíme, že sa jedná o pomerné číslo medzi dobou polpremeny jadra s nepárnym Z alebo N a geometrickým priemerom dôb polpremeny jeho najbližších párno-párnych susedov. Do menovateľa by sme rovnako mohli zaviesť miesto geometrického priemeru aritmetický, no jeho veľkou nevýhodou je, že nie je až tak citlivý na rádový rozdiel čísel, z ktorých je počítaný. My však často do menovateľa dosadzujeme práve čísla, ktoré sa líšia aj o päť rádov, preto nám smerodajnejší výsledok poskytne geometrický priemer.

Z/N	151	152	153	154	155	156	157	158	159
108							1,1*		
107									
106			3,3		3,6		3		
105		3,8				2,9		2,7	
104	3,9		4,7		3,4				
103						3,7		3,7	
102					3,3		6,5*		
101				1*		5,8*		6	
100					5,8		9,3		3,1
99				4,9		5,6			
98	6,5								
97			3,8						

Tab. 2: Tabuľka dekadických logaritmov faktorov potlačenia pre nuklidy s nepárnym *Z* alebo *N*, rozlíšených farebne podľa veľkosti HF od červenej, cez žltú, až po zelenú farbu.
*** znamená minimálnu hodnotu**

V Tab. 2 sú podľa vyššie uvedených vzorcov (1) a (2) vypočítané dekadické logaritmy faktorov potlačenia pre 24 jadier z oblasti $Z > 97$ s nepárnym počtom nukleónov. Ako sme už vyššie spomenuli, najväčšie potlačenie zaznamenávame u ^{257}Fm, a práve v tejto oblasti sa nachádzajú vo všeobecnosti najväčsie hodnoty. Dve hodnoty v tabuľke sú v porovnaní s ostatnými veľmi malé, potlačenie štiepenia voči párno-párnym susedom tu síce registrujeme, ale je len veľkosti jedného rádu. U ^{255}Md ide o skokovú zmenu oproti jeho ťažším izotopom ^{257}Md a ^{259}Md, ktoré vykazujú vysoké faktory potlčenia štiepenia až šesť rádov. Zdanlivo sa môže zdať, že je ^{255}Md v porovnaní s nimi nestabilnejšie, no nie je to tak. HF totiž zobrazuje potlačenie štiepenia – teda stabilitu voči štiepeniu v porovnaní so susediacimi párno-párnymi jadrami, a teda ^{255}Md je relatívne málo stabilnejšie práve voči nim.

	Z	*N*	*A*	$T_{1/2}(SF)$
Fm	100	154	254	$2{,}00\times10^{7}$s
Md	101	154	255	$1{,}07\times10^{6}$s
No	102	154	256	$5{,}49\times10^{2}$s
Md	101	156	257	$2{,}00\times10^{6}$s
Md	101	158	259	$6{,}00\times10^{3}$s

Tab. 3: V tabuľke vidíme, že vysvetlenie veľmi malého HF pre ^{255}Md spočíva vo vyššom $T_{1/2}$(SF) jedného z jeho párno-párnych susedov [NNDC].

Kým voči ^{256}No je vidieť (Tab. 3) stabilizáciu ^{255}Md o 4 rády, oproti ^{254}Fm sa už žiadna stabilizácia neprejavuje, ba naopak, v tomto prípade je stabilnejší párno-párny sused. Ak si uvedomíme, že smerom k magickému počtu neutrónov 152 sa zvyšuje stabilita jadier a pozrieme sa do Tab. 3, vidíme, že $T_{1/2}(SF)$ pre izotopy Md rastie smerom k $N = 152$. Pre ^{259}Md sú to tisícky sekúnd, pre ^{257}Md sú to už milióny sekúnd, no pre ^{255}Md sú to opäť len milióny sekúnd. Izotopy No a Fm sa však pravidelne stabilizujú smerom k $N = 152$, ako je vidno na Obr. 5. Teda malý HF u ^{255}Md je spôsobený práve tým, že tento izotop z nejakého dôvodu nesleduje rast smerom k $N = 152$, ako ostatné nuklidy. Ďalším dôležitým faktom je, že uvedená hodnota HF je len minimálna (limitná) a teda môže byť vyššia. Otázne však je, či môže byť vyššia až o približne 3 rády, ako si to vyžaduje systematika. To by znamenalo, že reálna hodnota $T_{1/2}(SF)$ pre ^{255}Md by musela byť až miliardy sekúnd (pozn.: zatiaľ určená spodná limitná hodnota len na úrovni miliónov sekúnd).

Pri ^{265}Hs je zatiaľ priskoro robiť nejaké závery, keďže je to v danej oblasti jediný izotop, pre ktorý je možné vypočítať *HF* voči obom párno-párnym susedom a nevieme, nakoľko, a či vôbec sa potlačenie prejavuje u iných, okolitých jadrách. Známe sú zatiaľ doby polpremeny spontánneho štiepenia pre 5 izotopov Hs s hmotnostými číslami od 263 po 267 a sú zhrnuté v Tab. 4. A aj keď zatiaľ poznáme doby polpremeny len jedného párno-párneho suseda pre párno-nepárne ^{263}Hs a ^{267}Hs, už teraz môžeme povedať, že ich štiepenie sa nezdá byť voči týmto susedom výraznejšie potlačené.

	Z	*N*	*A*	$T_{1/2}(SF)$
Hs	108	155	263	$8{,}8\times10^{-3}$s
Hs	108	156	264	$1{,}6\times10^{-3}$s
Hs	108	157	265	$1{,}9\times10^{-1}$s
Hs	108	158	266	$1{,}6\times10^{-1}$s
Hs	108	159	267	$2{,}6\times10^{-1}$s

Tab. 4: Všetky izotopy Hs, pre ktoré sú známe hodnoty $T_{1/2}(SF)$ [NNDC].

S istotou však môžeme konštatovať, že momentálne najťažším prvkom, u ktorého sa dá jednoznačne pozorovať potlačenie štiepenia pre izotopy s nepárnym *A* voči ich párno-párnym susedom, je Sg, kde sa potlačenie prejavuje asi 3 rádmi.

3.3 Jadrá s nepárnym počtom *Z* aj *N*

Na základe výsledkov z predchádzajúcej kapitoly, kde sa ukázal veľký vplyv nepárneho *Z* alebo *N* na spontánne štiepenie sa prirodzene otvára otázka, ako sa budú správať jadrá, ktoré majú nepárny počet ako protónov, tak aj neutrónov.

Pre tento druh jadier sme určili faktor potlačenia trochu odlišným spôsobom, a to vzhľadom až na jeho štyri okolité párno-párne jadrá, konkrétne podľa vzťahu:

(3) $$HF = \frac{T^{SF}_{1/2}(^{A}_{N}Z)}{\left[T^{SF}_{1/2}(^{A-2}_{N-1}Z-1)\times T^{SF}_{1/2}(^{A}_{N+1}Z-1)\times T^{SF}_{1/2}(^{A}_{N-1}Z+1)\times T^{SF}_{1/2}(^{A+2}_{N+1}Z+1)\right]^{1/4}}$$

Pre lepšiu orientáciu v množstve indexov sú vzorovo v Tab. 5 umiestné 4 párno-párne nuklidy susediace s ^{254}Es. Vidíme, že doba polpremeny spontánnym štiepením tohto nepárno-nepárneho nuklidu suverénne prevyšuje hodnoty jeho štyroch susedov a *HF* predstavuje až osem rádov.

	Z	*N*	*A*	$T_{1/2}(SF)$	$log_{10}HF$
Cf	98	154	252	$2{,}66\times10^{9}$s	
Cf	98	156	254	$5{,}24\times10^{6}$s	
Es	99	155	254	$7{,}94\times10^{14}$s	8,04
Fm	100	154	254	$1{,}97\times10^{7}$s	
Fm	100	156	256	$1{,}03\times10^{4}$s	

Tab. 5: ^{254}Es a jeho susediace párno-párne nuklidy. Z 5 nuklidov je suverénne najstabilnejší – má najdlhšiu dobu polpremeny pre spontánne štiepenie [NNDC].

Takto vypočítané faktory potlačenia štiepenia sa z dostupných dát dajú určiť pre 5 nepárno-nepárnych jadier. Ak sa uspokojíme s výpočtom *HF* len voči trom párno-párnym susediacim nuklidom, do štatistiky nám pribudnú ešte ďalšie dva *HF*. Týchto sedem nových hodnôt je doplnených k hodnotám *HF* pre jadrá s nepárnym *Z* alebo *N*, a výsledkom je Tab. 6. Výraznú stabilizáciu voči párno-párnym susediacim nuklidom vykazuje všetkých 7 nepárno-nepárnych doplnených nuklidov, ktorých dekadické logaritmy *HF* sa pohybujú od 2,4 (^{256}Md) až po 9,1 (^{260}Md). Okrem toho si u 3 nuklidov ^{254}Es, ^{260}Md a ^{262}Lr môžeme všimnúť výrazne vyššie *HF* aj oproti blízkym nuklidom s len jedným nepárnym číslom *Z* alebo *N*. Znamená to, že v týchto prípadoch ďalší nepárny nukleón výrazne prispieva k ešte väčšej stabilite jadra voči spontánnemu štiepeniu. S týmto tvrdením však vôbec nie sú v súlade hodnoty ďalších troch nepárno-nepárnych nuklidov, a síce ^{256}Lr, ^{256}Db a ^{260}Db, ktorých hodnoty *HF* v príslušných oblastiach nijak výraznejšie neprevyšujú tie od nuklidov s len jedným nepárnym číslom *Z* alebo *N*.

Z/N	151	152	153	154	155	156	157	158	159
108							1,1*		
106			3,3		3,6		3,0		
105	**3,6**	3,8			**3,1**	2,9		2,7	
104	3,9		4,7		3,4				
103			**4,2***			3,7		3,7	**6,1***
102					3,3		6,5		
101				1,0*	**2,4***	5,8*		6,0	**9,1**
100					5,8		9,3		3,1
99				4,9	**8,0***	5,6			
98	6,5								
97			3,8						

Tab. 6: Tabuľka HF zhodná s Tab. 2, no doplnená o 7 nepárno-nepárnych nuklidov (zvýraznené)
*** znamená minimálnu hodnotu**

Osobitným prípadom je ^{256}Md, ktoré sa zdá byť málo stabilné v porovnaní so šiestimi ďalšími vyššie uvedenými nepárno-nepárnymi nuklidmi. Vyskytuje sa tu rovnaký efekt ako pri ^{255}Md (pozri kap. 3.2.1). Md je zároveň jediným prvkom, u ktorého možno pozorovať nárast *HF* s rastúcim neutrónovým číslom.

Z celkového počtu 7 dvojito nepárnych jadier máme teda veľmi protikladné výsledky. Momentálne nevieme vysvetliť, prečo u polovice študovaných nepárno-nepárnych jadier pozorujeme efekt zvýšenej stabilizácie oproti jadrám s len jedným párnym *Z* alebo *N*, kým u druhej polovice nie. Ak by sme teda celkom prirodzene predpokladali, že výsledný HF nepárno-nepárnych nuklidov, bude daný šúčinom HF od nepárneho počtu protónov a HF od nepárneho počtu neutrónov, výsledky tejto práce to nepreukazujú.

4 Záver

Získali sme celkom zaujímavé množstvo informácií o spontánnom štiepení najťažších jadier a rôznych faktoroch, ktoré ho dokážu výrazne ovplyvňovať.

Výrazný vplyv uzavretej deformovanej vrstvy N = 152 na stabilitu jadier voči štiepeniu je očividne preukázateľný pre izotopy z oblasti Z = 96 – 102. U nuklidoch s vyšším protónovým číslom sa tento efekt vytráca a bol tu pozorovaný nový trend rastu $T_{1/2}(SF)$ s rastúcim N, čo by mohlo idikovať ďalšiu uzavretú vrstvu neutrónov.

Jadrá s nepárnym Z alebo N sa ukázali byť výrazne stabilnejšie voči spontánnemu štiepeniu v porovnaní s ich párno-párnymi susediacimi jadrami. Svedčia o tom veľké hodnoty faktorov potlačenia až o 3 – 9 rádov. Ako sa tento efekt prejavuje u nuklidov s Z ≥ 108 zatiaľ nie je jasné, no hodnoty $T_{1/2}(SF)$ pre Hs naznačujú, že tu už nepárne Z alebo N nemajú až taký vplyv na spontánne štiepenie.

Pre jadrá s oboma nepárnymi Z aj N sa zosilnený stabilizačný efekt oproti jadrám s len jedným nepárnym Z alebo N preukázal len u niektorých nuklidoch. Ak sa aj pre ne ukázali zvýšené hodnoty HF, zatiaľ nevieme povedať, či ide o súčin HF od nepárneho počtu protónov a HF od nepárneho počtu neutrónov, keďže veľa hodnôt HF je limitných a v skutočnosti môžu byť o niečo vyššie.

Objavenie ďalších nových ťažkých jadier a presné zmeranie ich dôb polpremeny a vetviacich pomerov by mohlo prispieť k objasneniu otázok, ktorých zodpovedanie je momentálne limitované práve množstvom dostupných experimentálnych údajov.

Poďakovanie

V tejto časti by som sa chcel poďakovať doc. Stanislavovi Antalicovi, ktorý ma uviedol do zaujímavej problematiky spontánneho štiepenia jadier a ochotne sa mi venoval aj napriek jeho zaneprázdnenosti.

Literatúra

[Andreyev, 2010] Andreyev, A.N., Elseviers, J., Huyse, M., Van Duppen, P., Antalic, S., Barzakh, A., Bree, N., Cocolios, T.E., Comas, V.F., Diriken, J., et al. (2010). New Type of Asymmetric Fission in Proton-Rich Nuclei, *Physical Review Letters* 105, 252502

[Beiser, 1969] Beisier, A., (1969). Perspectives of Modern Physics, McGraw-Hill, New York

[Flerov and Peterjak, 1940] Flerov, G.N., Peterjak, K.A. (1940). Spontaneous Fission of Uranium, *Physical Review* 58, 89.

[Hoffman, 1989] Hoffman, D.C. (1989). Spontaneous fission properties and life-time systematics, *Nuclear Physics* A502 21c-40c.

[Hulet, 1989] Hulet, E.K. (1989). Results from Heavy-Ion Bombardments of ^{254}Es, *UCRL*-100763

[Krane, 1988] Krane, K. S. (1988). Introductory Nuclear Physics, John Wiley and Sons, Hoboken.

[NNDC] National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory

Srovnání vybraných karbocyaninových fluorescenčních sond z hlediska jejich použitelnosti při měření membránového potenciálu kvasinek

Mudroňová Kateřina*, Plášek Jaromír*

*Fyzikální ústav, MFF UK

Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2

katerina.mudronova@gmail.com

1. Úvod

Tato práce se věnuje srovnání vybraných karbocyaninových fluorescenčních sond se sondou $diSC_3(3)$, která je v oddělení biofyziky FÚUK již používána k měření změn membránového potenciálu kvasinek. Z dostupných fluoroforů jsme vybrali sondy $diSC_3(5)$, $diIC_2(5)$, $diIC_1(3)$, $diOC_3(3)$ a JC-1. Experimenty jsme prováděli metodou synchronně skenované fluorescence, naměřená spektra jsme následně rozkládali do jednotlivých složek. Zabývali jsme se otázkou, zda jsou vybrané sondy lepšími či horšími substráty MDR pump a zda je metoda rozkladu spekter použitelná i pro další fluorescenční sondy.

Klíčová slova: membránový potenciál, kvasinky, S. cerevisiae, fluorescenční sondy

2. Redistribuční lipofilní sondy

Redistribuční lipofilní sondy použité v této práci jsou výjimečné tím, že po interakci s proteiny uvnitř buňky se jejich excitační i emisní maximum posune do červené oblasti spektra, navíc se mnohonásobně zvýší intensita fluorescence takto vázané sondy. Pokud posun maxim dostatečný (v případě již známé $diSC_3(3)$ činí 13 nm), jsou naměřená spektra lineární kombinací spektra sondy volné a sondy vázané podle vztahu:

$$F(\lambda) = A \cdot F_F(\lambda) + B \cdot F_B(\lambda) \ , \qquad (1)$$

kde F_F a F_B jsou modelová experimentálně získaná spektra volné a vázané sondy. A a B jsou koeficienty přímo úměrné koncentraci sondy vně a uvnitř buňky. Protože celý experiment je navržen tak, aby koncentrace sondy byla nízká, je možné chování sondy popsat Nernstovou rovnicí:

$$\frac{[c_{in}]}{[c_{out}]} = e^{-\frac{zF\Psi}{RT}} \ , \qquad (2)$$

kde na levé straně vystupuje poměr koncentrací sondy uvnitř a vně buňky, Ψ je membránový potenciál buňky v mV. Dodržíme-li podmínku nízké koncentrace sondy ve vzorku, velikost membránového potenciálu lze potom určit podle vztahu [1]:

$$\Psi = 59 \cdot \ln(B/A)\,. \qquad (3)$$

3. Metoda synchronně skenované fluorescence (SSF)

Metoda SSF spočívá v udržování konstantního rozdílu mezi vlnovou délkou excitace a emise. Pokud je tento rozdíl roven Stokesovu posunu, výstupem měření je mnohem užší a až desetkrát intenzivnější pás. Díky tomu, že synchronní spektrum je násobkem excitačního a emisního spektra, je též výrazně potlačena autofluorescence pozadí. [2]

4. Popis experimentu

Zdrojem excitačního záření byla xenonová výbojka, z něj byla pomocí excitačního monochromátoru vybrána vhodná vlnová délka. Emise byla snímána v pravoúhlém uspořádání.

Nejprve byla změřena emisní a excitační spektra jednotlivých sond – 4 µM roztoku sondy ve vodě a v 2% hovězím albuminu. Měřením v albuminu jsme získali spektra sondy vázané a měření vzorku ve vodě nám poskytlo spektra sondy volné. Pomocí těchto spekter jsme určili modelová spektra, do kterých bylo možné rozkládat naměřená data dle vztahu (1).

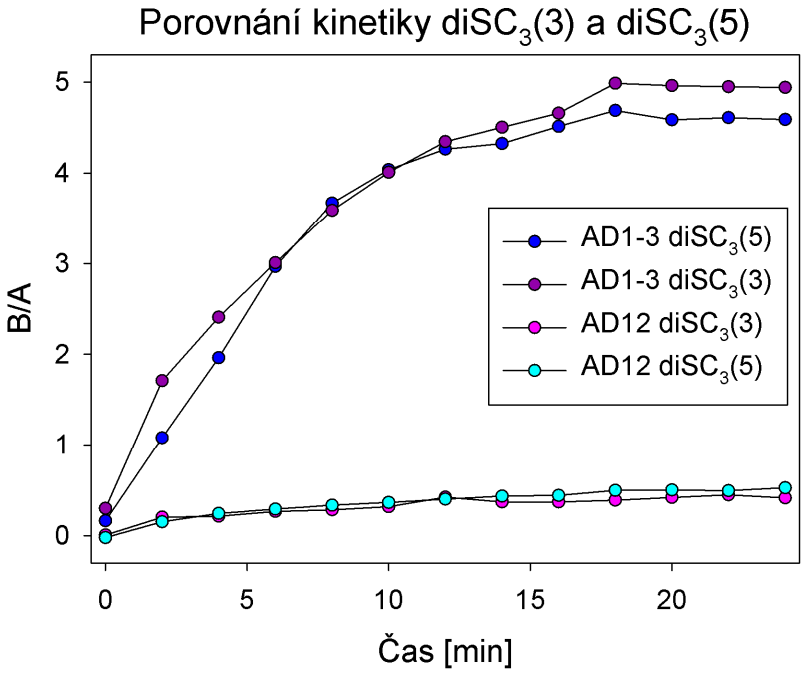
K řídké suspenzi kvasinkových buněk *S. cerevisiae* o optické hustotě (OD) 0,1 v 3 ml plastových kyvetách byly přidávány zkoumané sondy. Zkoumán byl časový profil rychlosti akumulace jednotlivých sond, v druhé části práce jsme se zabývali otázkou, zda je možné metodiku rozkladu spekter vyvinutou pro sondu $diSC_3(3)$ použít také pro sondu $diSC_3(5)$. Abychom mohli dokázat naši domněnku, že to možné je, zkoumali jsme pomocí těchto dvou sond vliv acidifikace na velikost membránového potenciálu.

5. Použité kmeny kvasinek

K experimentům této práce byly použity dva mutantní kmeny kvasinek *S. cerevisiae*, a to kmen AD12, který se vyznačuje nadprodukcí MDR pumpy Pdr5 a AD1-3, jemuž byly deletovány geny pro syntézu pump Pdr5, Snq2 a Yor1, což jsou nejdůležitější MDR pumpy kvasinek. Pokud to experiment vyžadoval, pumpy kmene AD12 byly inhibovány pomocí FK506.

6. Výsledky

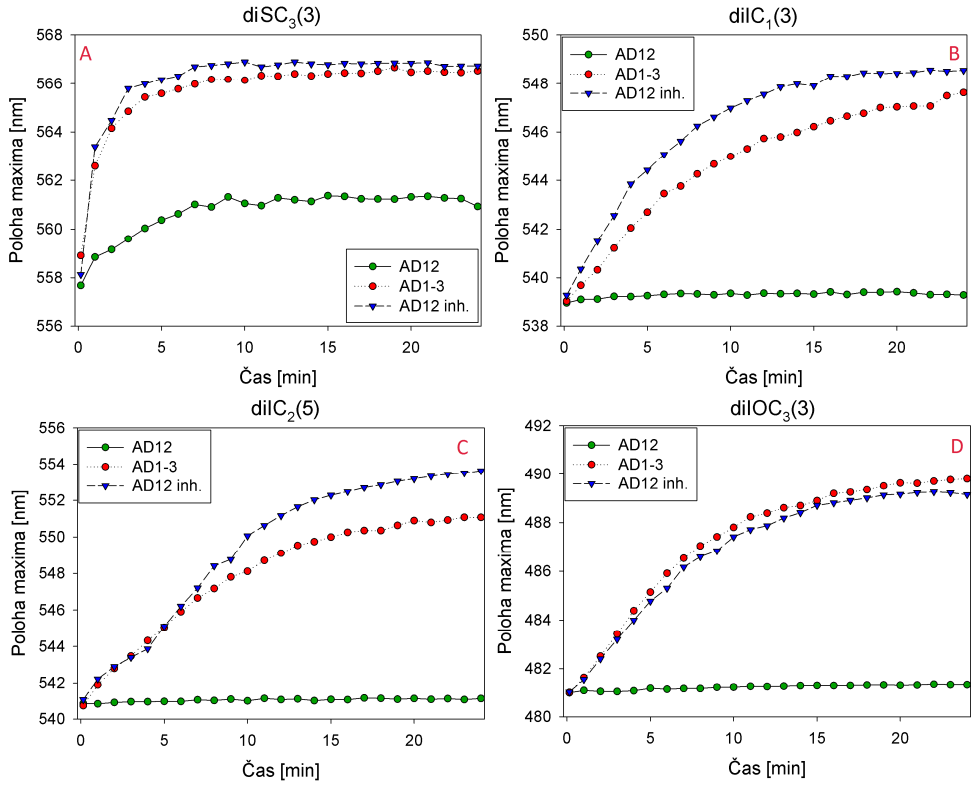
Porovnávali jsme časový profil rychlosti akumulace $diSC_3(3)$ a $diSC_3(5)$ v buňkách *S. cerevisiae* AD1-3 a AD12. Ukázalo se, že obě sondy jsou stejně dobrým substrátem pumpy Pdr5 a hodnota membránového potenciálu obdržená pomocí obou sond je shodná.



Graf 1: Časový profil rychlosti akumulace sond $diSC_3(3)$ a $diSC_3(5)$.

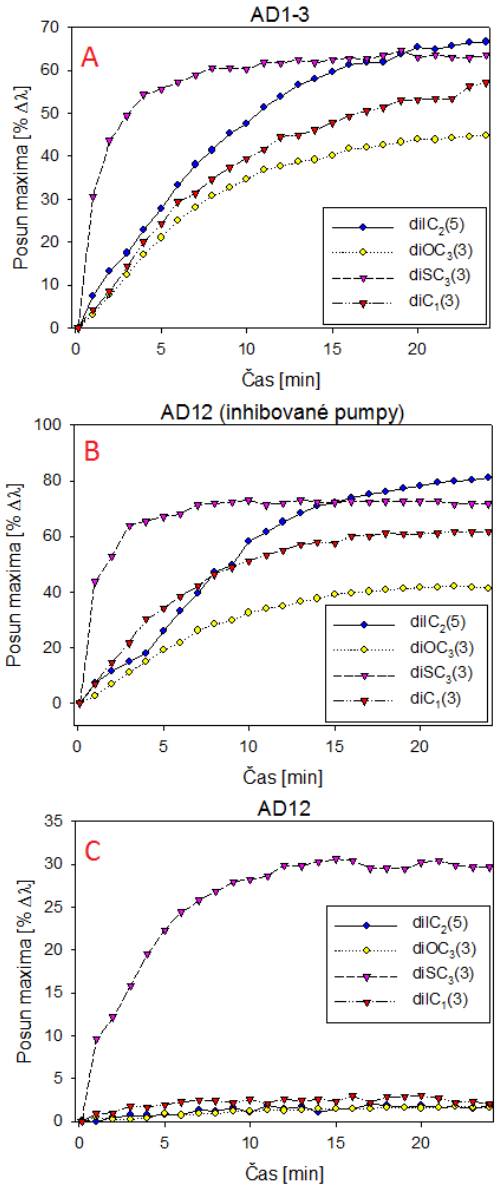
K vzorkům buněčné suspenze s 2,85 ml MES-TEA pufru o pH 6,2 a 150 µl 40% roztoku glukózy o celkové OD 0,1 bylo 4,5 min po přidání buněk vpraveno 6 µl 2.10^{-5} M sondy.

Dále jsme porovnávali časový profil akumulace ostatních sond. Tato část experimentů probíhala na buňkách *S. cerevisiae* AD1-3 a AD12. Kmenu AD12 byly v jedné sérii inhibovány MDR pumpy, abychom mohli sledovat jejich vliv na sondy.



Graf 2: Časový profil rychlosti akumulace jednotlivých fluoroforů v buňkách *S. cerevisiae* AD1-3, AD12 a AD12 s inhibovanými pumpami (inhibitor FK506). K vzorkům buněčné suspenze s 2,85 ml MES-TEA pufru o pH 6,2 a 150 µl 40% roztoku glukózy o celkové OD 0,1 bylo 4,5 min po přidání buněk vpraveno 6 µl 2.10^{-5} M

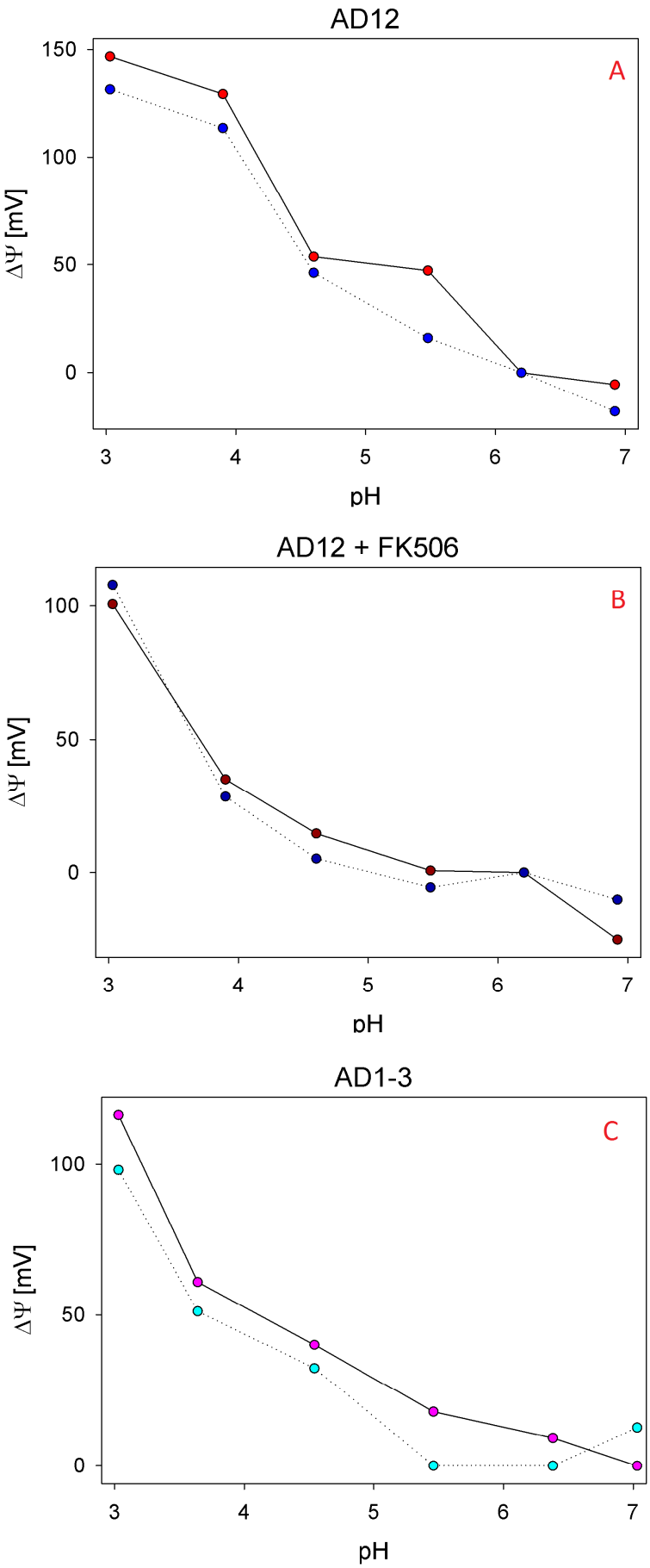
sondy. Poloha maxima je udávaná v absolutních hodnotách. Sonda A) $diSC_3(3)$, B) $diIC_1(3)$, C) $diIC_2(5)$ a D) $diOC_3(3)$.



Graf 3: Časový profil rychlosti akumulace jednotlivých fluoroforů v buňkách *S. cerevisiae* AD1-3, AD12 a AD12 s inhibovanými pumpami (inhibitor FK506). Data z grafu 2 byla vztažena k rozdílu emisních maxim jednotlivých sond ve vodě a v roztoku albuminu. A) *S. cerevisiae* AD1-3, B) AD12 s inhibovanými MDR pumpami, C) AD12.

Z grafu 2 vidíme, že zkoumané sondy se akumulují v buňkách *S. cerevisiae* AD1-3 a AD12 s inhibovanými pumpami obdobně. Aby byl průběh jejich redistribuce zřejmější, byly naměřené údaje vztaženy k rozdílu emisních maxim jednotlivých sond ve vodě a v roztoku 2% albuminu. Z grafu 3A vidíme, že časový profil akumulace ostatních sond se liší od $diSC_3(3)$ nicméně rovnovážné hodnoty, kterých poloha maxima dosáhne po dvaceti minutách, si dobře odpovídají. Graf 3B popisuje obdobnou situaci, neboť buňkám *S. cerevisiae* AD12 byly pomocí FK506 inhibovány MDR pumpy. Graf 3C ukazuje, že zkoumané sondy jsou mnohem lepšími substráty pumpy Pdr5 než sonda $diSC_3(3)$, na rozdíl od sondy $diS_3(5)$, která, jak je možné si povšimnout z grafu 1, je stejně dobrým substrátem pumpy Pdr5. Vzhledem k tomu, že MDR pumpy nemají velkou substrátovou specificitu a jeden substrát může být odstraňován více pumpami, je pravděpodobné, že podobný průběh bude mít i akumulace sond v buňkách s jinými MDR pumpami.

Poznatky o sondě $diSC_3(5)$ a její modelová spektra byly použity pro zkoumání vlivu acidifikace na membránový potenciál kvasinek. Provedli jsme řadu experimentů na buňkách *S. cerevisiae*, abychom ukázali, že výsledky obdržené za použití obou sond si odpovídají. Byla připravena sada pufrů o hodnotě pH v rozsahu 3 – 7. Nejprve byly měřeny vzorky, v nichž byla přítomna pokaždé jen jedna sonda, poté byl proveden experiment, kdy do vzorku byly přidány obě sondy najednou, abychom zjistili, zda přítomnost jedné sondy ovlivňuje spektrální charakteristiky druhého fluoroforu.



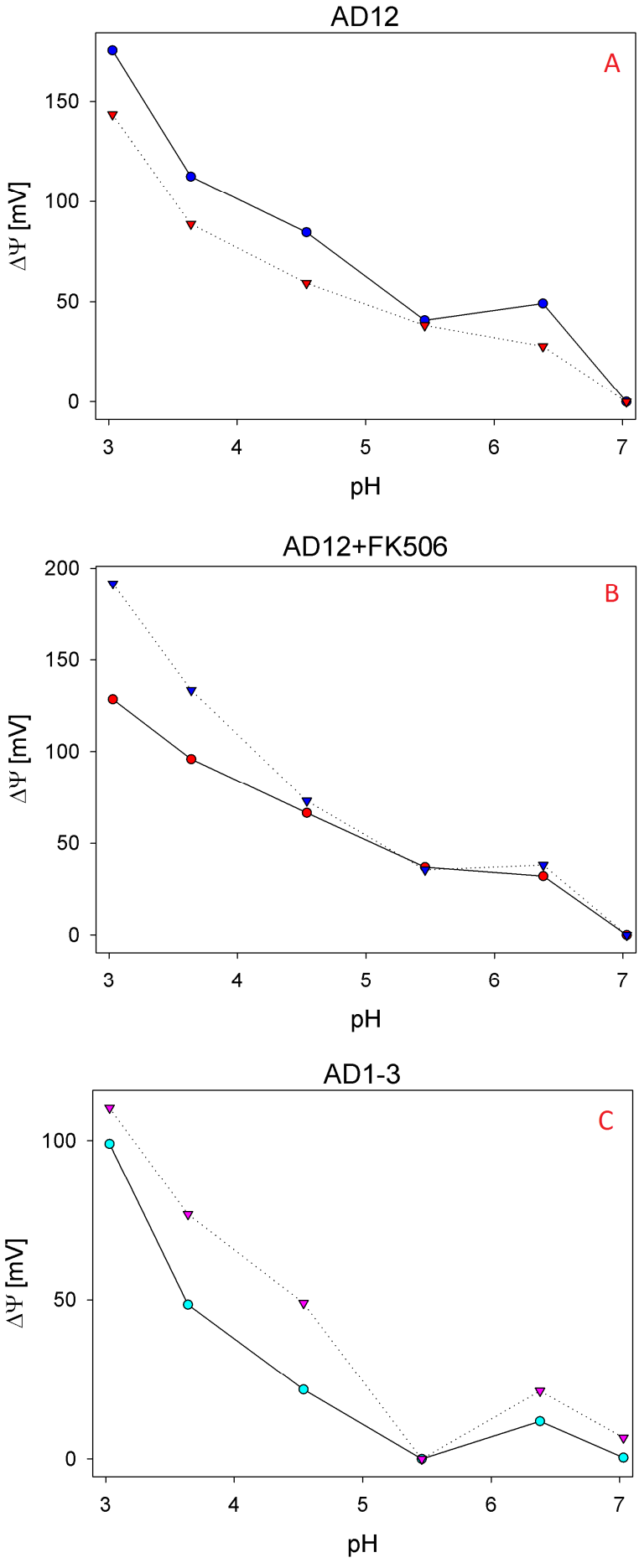
Graf 4: Porovnání velikosti změn membránového potenciálu změřených pomocí sond $diSC_3(3)$ a $diSC_3(5)$. Ke vzorkům buněčné suspenze s 2,85 ml MES-TEA pufru o pH 6,2, 150 µl 40% roztoku glukózy a v případě 3.10B 3 µl FK506 o celkové OD 0,1 bylo 4,5 min po přidání buněk vpraveno 6 µl 2.10^{-5} M sondy, pokaždé byla pouze jedna sonda v jednom vzorku.

A) *S. cerevisiae* AD12, $diSC_3(5)$ —●—, $diSC_3(3)$ ···●···,

B) *S. cerevisiae* AD12 s inhibovanými pumpami,$diSC_3(5)$ ···●···, $diSC_3(3)$ —●—,

C) *S. cerevisiae* AD1-3, $diSC_3(5)$ —○—, $diSC_3(3)$ – –▽– –.

Graf 4 ukazuje, že změny membránového potenciálu zjištěné pomocí sondy $diSC_3(5)$ velice dobře odpovídá změnám naměřeným pomocí sondy $diSC_3(3)$. Jak jsme předpokládali, pokud byly buňkám *S. cerevisiae* AD12 inhibovány MDR pumpy, změny jejich membránového potenciálu odpovídaly změnám membránového potenciálu AD1-3.



Graf 5: Porovnání velikosti změn membránového potenciálu změřených pomocí sond diSC$_3$(3) a diSC$_3$(5). Ke vzorkům buněčné suspenze s 2,85 ml MES-TEA pufru o pH 6,2, 150 µl 40% roztoku glukózy a v případě 3.10B 3 µl FK506 o celkové OD 0,1 bylo 4,5 min po přidání buněk vpraveno 6 µl 2.10^{-5} M sondy, pokaždé byly přidány obě sondy do každého vzorku.

A) *S. cerevisiae* AD12, diSC$_3$(5) —●—, diSC$_3$(3) ···▼···,

B) *S. cerevisiae* AD12 s inhibovanými pumpami, diSC$_3$(5) – –▼– –, diSC$_3$(3) ···●···,

C) *S. cerevisiae* AD1-3, diSC$_3$(5) —○—, diSC$_3$(3) —●—.

Graf 5 spolu ukazuje, že přidáme-li do vzorku obě sondy zároveň, nezmění se spektrální charakteristiky ani jedné ze sond. Porovnáme-li graf 4 a graf 5, vidíme, že změny membránového potenciálu jsou vzhledem k biologické povaze experimentu stejné.

7. Závěr

Bylo ukázáno, že některé sondy karbocyaninové řady jsou zřejmě lepšími substráty MDR pump než sondy $diSC_3(3)$ a $diSC_3(5)$. Podobný časový profil akumulace všech zkoumaných sond nás opravňuje se domnívat, že dalšími experimenty bude možné dokázat jejich použitelnost při měření membránového potenciálu kvasinek a jeho změn. Domníváme se, že po získání modelových spekter bude možné použít stejnou metodiku jako pro sondu $diSC_3(3)$.

Dále jsme měřili vliv acidifikace na membránový potenciál kvasinek. Tato studie je také tématem článku připravovaném na oddělení biofyziku FÚUK. Ukázali jsme, že měření změn membránového potenciálu pomocí dvou různých sond $diSC_3(3)$ a $diSC_3(5)$ dává velice podobné výsledky. To naznačuje, že metoda, která byla vyvinuta v biofyzikálním oddělení, je dostatečně objektivní a nezávislá na použití konkrétní sondy $diSC_3(3)$. Navíc jsme zjistili, že obdržíme velice podobné výsledky, i když jsou ve vzorku přítomny obě sondy zároveň, což nabízí široké možnosti dalšího využití. Ověření metodiky pro další sondu kromě $diSC_3(3)$ nám dává naději, že podobnými experimenty s dalšími sondami karbocyaninové řady docílíme podobných výsledků.

Literatura

[1] J. Plášek, D. Gášková, H. Lichtenberg-Fraté, J. Ludwig, M. Höfer. *Monitoring of real changes of plasma membrane potential by diS-C(3)(3) fluorescence in yeast cell suspensions.* J Bioenerg Biomembr. 2012 Oct;44(5):559-69. doi: 10.1007/s10863-012-9458-8. Epub 2012 Jul 19.

[2] J. Plášek, D. Gášková, J. Večeř, K. Sigler. *Use of Synchronously Excited Fluoserscence to Assess the Acumulation of Membrane Potential Probes in Yeast Cells*. Folia Microbiol. 45 (3), 225 – 229 (2000)

Štúdium vrstiev kazeínu a ich štiepenia plazmínom metódou QCM

Peter Nádaždy
Školiteľ: prof.RNDr.Tibor Hianik, DrSc.

Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská dolina F1, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Protelytická aktivita plazmínu v mlieku, pri ktorej dochádza k štiepeniu kazeínu má vplyv na kvalitu mliečnych výrobkov[1]. Preto je v súčasnosti vyvíjaná snaha o nájdenie lacného a rýchleho spôsobu detekcie plazmínu v mlieku. V našej práci sme sa zamerali na skúmanie tvorby vrstvy kazeínu na zlatom povrchu, ktorá slúži ako senzor na plazmín. Kazeín sme na zlato naväzovali prostredníctvom 11-merkaptoundekánovej kyseliny (11-MUA). Tvorbu tejto vrstvy a jej interakciu s plazmínom sme sledovali pomocou kremenných kryštalických mikrováh (QCM).

Kľúčové slová: plazmín, kazeín, 11-merkaptoundekánová kyselina, kremenné kryštalické mikrováhy

1 Úvod

Kazeíny sú skupina fosfoproteínov. Hodne sa vyskytujú v mlieku. Existuje viacero druhov kazeínov (αS1, αS2, κ, β). Kazeín je nerozpustný vo vode, preto sa v mlieku vyskytuje vo forme miciel, ktoré sú stabilizované vápnikovými iónmi.

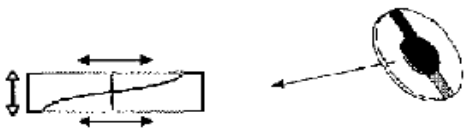
Plazmín je serínová proteáza, ktorá je v krvi zodpovedná za degradáciu fibrínu a fibrinogénu [2]. Vyskytuje sa aj v mlieku, kde je zodpovedná za hydrolýzu kazeínu [1]. Štiepenie kazeínu sa prejaví zhorknutím mlieka. Plazmín má maximálnu aktivitu pri 37°C. Vyvinutie účinnej metódy detekcie aktivity plazmínu je preto veľmi aktuálne najmä pre spracovanie mlieka na syry.

V našej práci sme sa venovali vývoju biosenzora, ktorý by umožnil určiť aktivitu plazmínu v procese štiepenia β kazeínu. Rozhodli sme sa pre imobilizáciu kazeínových miciel pomocou kovalentného naviazania na samousporiadanú vrstvu z 11 - merkaptoundekánovej kyseliny (11-MUA), ktorá sa vytvorila na zlate chemisorbciou vďaka –SH skupine. Takýto spôsob imobilizácie je možný aj pri neutrálnom pH [3].

Na sledovanie tvorby kazeínovej vrstvy a následnej interakcie s plazmínom sme použili kremenné kryštalické mikrováhy (QCM). Metóda QCM umožňuje sledovať zmeny mechanických vlastností vrstvy na povrchu kmitajúceho kremenného rezonátora na základe zmien rezonančnej frekvencie a dynamického odporu tohto rezonátora.

2 Kremenné kryštalické mikrováhy (QCM)

Metóda QCM je založená na meraní rezonančnej frekvencie kremenného piezokryštálu. Po aplikácii určitého napätia na piezoelektrické médium dôjde k mechanickej deformácii tohto média. Na povrchu kryštálu sú naparené zlaté elektródy (slúžiace aj ako povrch senzora), na ktoré je privádzané striedavé napätie. To má za následok vznik akustických vĺn v kryštáli. V akustických senzoroch sa využívajú rôzne druhy vĺn (povrchové, objemové, priečne, pozdĺžne). To, aký druh vĺn vznikne, závisí od uhlu rezu kryštálom. V QCM sa využívajú objemové priečne vlny, čo umožňuje meranie v kvapalnom médiu, preto sa používa takzvaný AT-rez (sklon 35°10´ od optickej osi).



Obrázok 1: Schematický náčrt QCM senzora, plné šípky znázorňujú výchylky a prázdne smer šírenia vlny [4] .

Pri rezonančnej frekvencii vznikne v rezonátore stojatá vlna, ktorej vlnová dĺžka je celočíselným násobkom dvojnásobku hrúbky rezonátora t_q (predpokladáme, že je hrúbka rezonátora zanedbateľná v porovnaní s jeho šírkou, a tak stači vlnu riešiť len v jednom rozmere). Pre rezonančnú frekvenciu potom platí vzťah:

$$f_0 = n\frac{v}{2t_q} \qquad (1)$$

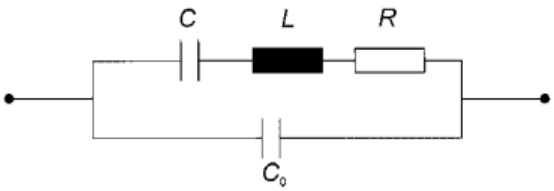
Kde v je rýchlosť šírenia vlny a n je kladné celé číslo. Rýchlosť šírenia vlny závisí od hustoty kryštálu ρ_q a od modulu pružnosti AT-rezu μ_q:

$$v = \sqrt{\frac{\mu_q}{\rho_q}} \qquad (2)$$

Ak ďalej predpokladáme naviazanie tenkej vrstvy materiálu s rovnakými mechanickými vlastnosťami ako materiál rezonátora, dôjde k zmene rezonančnej frekvencie, pre ktorú platí Sauerbreyho rovnica:

$$\Delta f = -\frac{2f_0^2}{A\sqrt{\mu_q \rho_q}}\Delta m \qquad (3)$$

kde f_0 je fundamentálna frekvencia, A je plocha pracovnej časti kryštálu. Keďže zvyčajne sa nestretávame iba s materiálmi s rovnakou hustotou a modulom pružnosti, ako má náš rezonátor, tak sa tento vzťah pri práci v tekutinách používa prevažne na kvalitatívne sledovanie adsorbcie molekúl na povrch kryštálu. Uvedený vzťah platí len pre tenké vrstvy vo vákuu. Preto je pre prípadné výpočty potrebné analyzovať ekvivalentný elektrický obvod (Butterworth-van-Dykeov rezonančný obvod).



Obrázok 2: Butterworth-van-Dykeov rezonančný obvod [4] .

Odpor R je spájaný so stratami energie akustickej vlny, ktorá preniká z rezonátora do kvapalného média. Veľkosť týchto strát závisí od vlastností povrchu rezonátora a okolitého média. Preto sledujeme okrem zmien rezonančnej frekvencie aj zmeny odporu.

3 Materiály a metódy

3.1 Imobilizácia kazeínu na povrch kryštálu

Pred každým meraním sme kryštál cez noc (12 až 18 hodín) inkubovali v 2 mM roztoku merkaptoundekánovej kyseliny (11-MUA) v etanole. Molekuly 11-MUA sa cez tiolovú –SH skupinu naväzovali na zlaté elektródy a vytvorili samousporiadanú monovrstvu.

Pred meraním sme kryštál opláchli najskôr etanolom a následne destilovanou vodou.

Meranie prebiehalo v prietokovej cele, kde je kryštál z jednej strany v kontakte so vzduchom a z druhej strany v kontakte s prúdiacou kvapalinou, do ktorej sú postupne pridávané vzorky. Rýchlosť prúdenia kvapaliny bola 50 µl/min. Rozkmitanie kryštálu a samotné meranie údajov sme vykonali pomocou vektorového analyzátora Agilent 8712ES (Agilent Technologies, USA).

Najskôr sme kryštál premývali destilovanou vodou, kým sa hodnoty rezonančnej frekvencie a odporu neustálili.

Pre imobilizáciu kazeínu je najskôr potrebné aktivovať 11-MUA pomocou N-hydroxy-sukcinimidu (NHS) a N-etyl-N-(dimetyl-aminopropyl) karbodiimidu (EDC). Preto sme po ustálení vpustili do prietokovej cely roztok EDC (20 mM) a NHS (50 mM) vo vode. Tento roztok sme tam nechali 30 minút a potom sme celu premývali destilovanou vodou.

Po ustálení hodnôt meraných veličín sme vymenili vodu za PBS (0,01 M fosfátový pufor, 2,7 mM KCl, 0,137 M NaCl, pH 7.4) a znovu sme čakali na ustálenie. Potom sme do cely vpustili kazeín rozpustený v PBS v koncentrácií 0,25 mg/ml. Po približne 30 minútach sme celu premyli s PBS.

Keďže sa kazeín nemusel naviazať na všetky 11-MUA, tak sme ešte celu premyli 0,2 M etanolamínom rozpusteným vo vode. Následne sme ešte celu premývali s PBS.

3.2 Sledovanie aktivity plazmínu

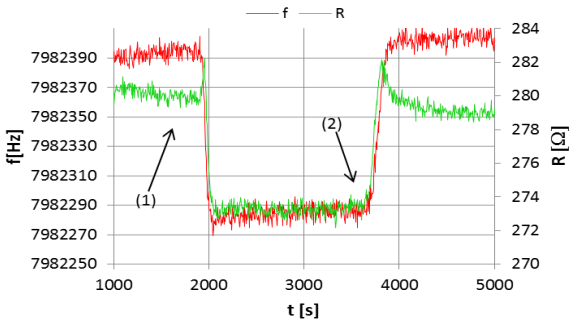
V poslednej fáze experimentu sme do cely vpustili plazmín v koncentrácii menšej ako 10 µg/ml (rozpustený v PBS). Po prebehnutí interakcie plazmínu s kazeínom sme celu premyli s PBS.

Merania boli vykonávané pri teplote približne 23°C. Neskôr sme vykonali aj merania pri teplote 37°C. Pri tejto teplote sme doposiaľ urobili iba dve merania, a to jedno kompletne pri teplote 37°C a v druhom sme zvýšili teplotu z 23°C na 37°C až pred pridaním plazmínu. V oboch prípadoch sme zároveň zvýšili koncentráciu kazeínu na 1 mg/ml. Urobili sme aj jedno meranie s vyššou koncentráciou kazeínu pri teplote 23°C.

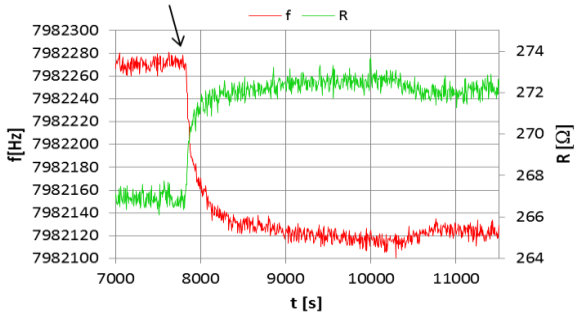
4 Výsledky a diskusia

Karbodiimidovú aktiváciu molekúl 11-MUA sme robili podľa postupu uvedenom v časti 3.1. Typický priebeh tohto procesu je znázornený na obrázku 3. Prítomnosť EDC/NHS spôsobovala pokles rezonančnej frekvencie aj dynamického odporu. Pri následnom premýtí vodou hodnoty oboch skokovo narástli.

Výmena vody za PBS je sprevádzaná prudkým poklesom frekvencie aj odporu.



Obrázok 3: Kinetika zmien rezonančnej frekvencie, f, a dynamického odporu, R, počas aktivácie vrstvy 11-MUA roztokom EDC/NHS (20mM EDC, 50mM NHS vo vode). (1) dodanie EDC/NHS, (2) premytie povrchu deionizovnou vodou.



Obrázok 4: Kinetika zmien rezonančnej frekvencie f, a dynamického odporu R, počas naväzovania kazeínu (25mg/ml v PBS). Šípka znázorňuje moment dodania kazeínu prietokovým spôsobom.

Typický priebeh zmien veličín f a R počas naväzovania kazeínu na aktivovanú vrstvu 11-MUA je uvedený na obrázku 4. Sledovali sme pokles frekvencie f, a nárast odporu R. Je to spôsobené nárastom hmotnosti vrstvy na povrchu kryštálu. Zároveň vzrástla hrúbka vrstvy, čo taktiež spôsobilo výraznejšiu interakciu s okolitým vodným roztokom, a teda dochádzalo k väčším stratám energie akustických vĺn, čo sa prejavilo v raste odporu. Tento priebeh sa dal očakávať na základe jednoduchej úvahy. Ak predpokladáme, že sa kazeín K naväzuje na voľné väzobné miesta N za vzniku komplexu KN (čo je vlastne imobilizovaný proteín). Rýchlosť tejto reakcie je úmerná súčinu koncentrácií kazeínu [K] a voľných väzobných miest [N].

$$v = k_1[K][N] \qquad (4)$$

kde k_1 je rýchlostná konštanta vzniku komplexov KN. Zároveň však dochádza aj k rozpadu komplexov KN. Preto je celková rýchlosť reakcie (derivácia koncentrácie) rovná:

$$\frac{d[KN]}{dt} = k_1[K][N] - k_2[KN] \qquad (5)$$

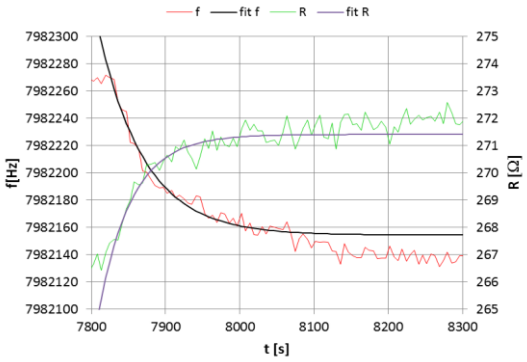
Koncentrácia kazeínu je konštantná a koncentrácia voľných väzobných miest sa dá vyjadriť cez koncentráciu KN komplexov. Tak dostaneme diferenciálnu rovnicu:

$$\frac{d[KN]}{dt} = k_1[K](N_0 - [KN]) - k_2[KN] \qquad (6)$$

Kde N_0 je pôvodný počet väzobných miest. Riešením tejto rovnice dostaneme časovú závislosť koncentrácie komplexov KN:

$$[KN] = \frac{k_1[K]N_0}{k_1[K] + k_2}\left(1 - e^{-(k_1[K]+k_2)t}\right) \qquad (7)$$

Táto koncentrácia je spojená so zmenou rezonančnej frekvencie a dynamického odporu. Získané kinetické krivky zmien f a R môžeme preto fitovať pomocou vzťahu (7). Výsledky fitu sú uvedené na Obrázku 5.

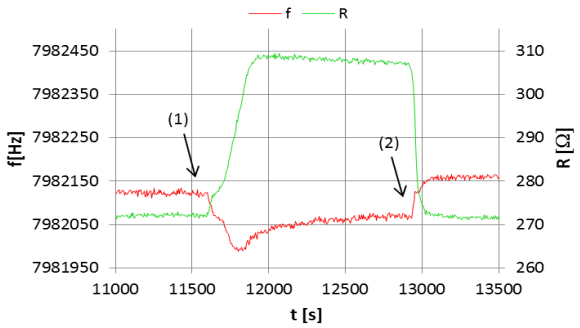


Obrázok 5: Kinetika zmien rezonančnej frekvencie f, a dynamického odporu R počas naväzovania kazeínu na vrstvu 11-MUA a exponenciálny fit pomocou vzťahu (7)

Fitovacia funkcia dobre popisuje strmý pokles frekvencie (resp. nárast odporu), ale nie ustáľovanie meraných hodnôt. Na priebeh meraných veličín má totiž vplyv aj nenaviazaný kazeín, čo sa pri rýchlych zmenách na povrchu kryštálu neprejavilo. Exponent fitovacej funkcie nám hovorí o rýchlosti dosiahnutia rovnovážneho stavu, a preto závisí od rýchlostných konštánt reakcií v oboch smeroch. V koeficiente, ktorý násobí exponenciálu je tiež pomer rýchlostných konštánt. Celkový pokles frekvencie je mierou rovnovážnej konštanty reakcie prebiehajúcej na povrchu kryštálu.

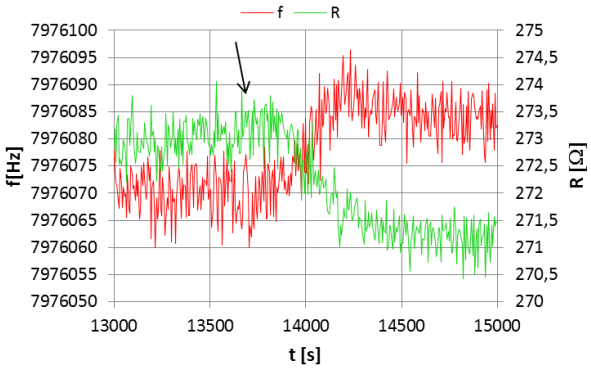
Pri zhášaní aktivovaných 11-MUA 0,2 M etanolamínom dochádzalo k výraznému nárastu odporu, ale len k miernemu poklesu frekvencie. Pozorovania sú v tomto prípade pravdepodobne skreslené prítomnosťou vody, v ktorej bol etanolamín rozpustený. Voda pravdepodobne posilnila nárast odporu a zmiernila pokles

frekvencie. Získané výsledky však svedčia o interakcii etanolamínu s neobsadenou aktivovanou vrstvou 11-MUA.



Obrázok 5: Kinetika zmien f a R počas zhášania aktivovaných molekúl 11-MUA etanolamínom (0,2 M vo vode). (1) dodanie etanolamínu, (2) premytie povrchu s PBS.

Interakcia plazmínu s pripravenou vrstvou kazeínu sa prejavila podľa očakávania nárastom frekvencie a poklesom odporu. Priebeh mal podobný charakter ako pri naväzovaní kazeínu, avšak znamienko pred exponciálou bolo opačné, pretože v tomto prípade dochádzalo k odštiepeniu častí molekúl kazeínu z vrstvy. Na obrázku 6 je uvedené jedno z úspešných meraní.



Obrázok 6: Kinetika zmien rezonančnej frekvencie f, a dynamického odporu R počas štiepenia kazeínovej vrstvy plazmínom pri 23°C. Šípka označuje dodanie plazmínu**.**

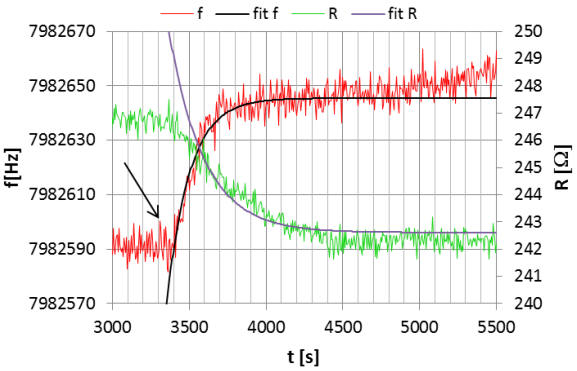
Tabuľka 1: Zmeny rezonančnej frekvencie a odporu pri naväzovaní kazeínu a pri štiepení kazeínu plazmínom.

Kazeín		Plazmín	
Δf[Hz]	ΔR[Ω]	Δf[Hz]	ΔR[Ω]
-146±2	5,11±0,15	21±2	-2,82±0,01
-141±2	5,60±0,12	10±3	-1,28±0,14
-108±2	3,2±0,13	15±2	-1,99±0,17
-67±3	3,40±0,17	14±3	-1,85±0,15
-122±2	4,38±0,14	31±2	-1,84±0,14

V tabuľke 1 sú zhrnuté zmeny rezonančnej frekvencie a odporu pri tvorbe kazeínovej vrstvy a pri jej hydrolýze plazmínom. Z týchto výsledkov prekvapivo nevidno koreláciu medzi odozvou na naviazanie molekúl kazeínu a aktivitou proteázy.

V snahe dosiahnúť vyššiu citlivosť sme v ďalších meraniach použili koncentráciu kazeínu až 1 mg/ml. Avšak nezaznamenali sme výrazne odlišnú odozvu pri tvorbe kazeínovej vrstvy. Preto zvyšovanie koncentrácie kazeínu asi nebude mať vplyv na zvýšenie citlivosti senzora na plazmín. Na potvrdenie tohto tvrdenia však treba vykonať ešte viac meraní pri teplote 23°C. Meranie aktivity plazmínu pri teplote 23°C ukázalo zmenu frekvencie 14±3 Hz a odporu -0,91±0,12 Ω.

Na aktivitu plazmínu vplýva aj teplota. Táto aktivita je maximálna pri 37 ^{0}C. Preto sme vykonali merania pri tejto teplote. Prvým meraním pri teplote 37°C sme dosiahli zmenu frekvencie za prítomnosti plazmínu až 64±2 Hz a zmenu odporu -4,42±0,12 Ω (Obrázok 7). Celé meranie prebiehalo pri teplote 37°C. Bolo však bohužiaľ často prerušované prítomnosťou bubliniek tvoriacich sa v prietokovej cele, čo neumožnilo odčítanie niektorých hodnôt meraných veličín a celé meranie sa neúmerne predĺžilo. Preto sme v druhom meraní zvýšili teplotu až pred pridaním plazmínu. V tomto prípade sa nám však časť vrstvy zrejme tesne pred pridaním plazmínu odtrhla. Aj napriek tomu sme namerali zmenu frekvencie 29±3 Hz a zmenu odporu -2,20 ±0,16 Ω. Zdá sa preto, že pri teplote, zodpovedajúcej optimálnej aktivite plazmínu (37 ^{0}C) dochádza k väčšej odozve senzora. Pre potvrdenie toho predpokladu je však potrebné vykonať ďalšie experimenty. Na obrázku 7 sú namerané hodnoty preložené fitmi vychádzajúcimi zo vzťahu (7). Znamienka pred exponenciálnymi funkciami sú opačné ako pri naväzovaní kazeínu. V tomto prípade by sme dostali pre koncentráciu odštiepených kazeínových zvyškov závislosť analogickú vzťahu (7). Koncentrácia týchto zvyškov je však spojená s kladnou zmenou rezonančnej frekvencie (a zápornou zmenou dynamického odporu).



Obrázok 7: Kinetika zmien rezonančnej frekvencie f, a dynamického odporu R počas štiepenia

kazeínovej vrstvy plazmínom pri teplote 37°C aj s fitmi urobenými pomocou vzťahu (7). Moment dodania plazmínu je uvedený šípkou.

Záver

V našej práci sme sa venovali štúdiu tvorby kazeínovej vrstvy na zlatom povrchu a možnosťou jej využita ako citlivej vrstvy biosenzora na detekciu aktivity plazmínu.
Podarilo sa nám imobilizovať molekuly kazeínu na tenkú zlatú vrstvu naparenú na povrchu kremenného kryštálu, a to kovalentnou väzbou cez samousporiadanu vrstvu 11-MUA.
Ďalej sme ukázali, že pomocou metódy QCM je možné detegovať štiepenie kazeínu plazmínom v koncentráci 10 μg/ml. Načrtli sme tiež spôsob ako by sa dala zahriatím na 37°C zvýšiť citlivosť detekcie plazmínu pomocou vyvinutého senzora, čo si však vyžaduje ďalšie experimentálne overenie.

Poďakovanie

Táto práca bola finančne podporená programom cezhraničnej spolupráce EÚ Maďarská republika - Slovenská republika, projekt MILKSENS, číslo projektu HUSK/1101/1.2.1.

Literatúra

[1] Crudden, A., Patrick, Fox, F., Kelly, L. A. (2005). Factors affecting the hydrolytic action of plasmin in milk. *International Dairy Journal*, 15, 305-313
[2] Murray, R. K., Granner, D. K., Mayes, P. A., Rodwell, V. W. (1993). *Harper's Biochemistry*, page 720
[3] Martin, A. H., Goff, H.D., Smith, A., Dalgeish, D.G. (2005). Imobilization of casein micelles for probing their structure and interactions with polysacharides using scanning electron microscopy (SEM). *Food Hydrocolloids*, 20, 817-824
[4] Janshoff, A., Galla, H. J., Steinem, C. (2000). The quartz- crastal microbalance in life science. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 39, 4004-4032.

Využitie magnetozómov v terapii mozgových nádorov

Adam Olas[1*]
Školiteľ: Melánia Babincová[1+]

[1]Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Testovali sme fyzikálno-chemické vlastnosti novosyntetizovanej magnetickej kvapaliny (MAG/12D a MAGHS-5FU), v ktorých magnetozómy obsahujú železo v oxidačnom stupni Fe^{3+}. Bolo zistené, že vplyvom VF magnetického poľa s pracovnou frekvenciou 3,5 MHz, sa magnetická kvapalina zohrieva v dôsledku Brown-Néelovho relaxačného efektu, pričom dosiahnutá teplota vzrastá so zvyšujúcou sa koncentráciou magnetických nanočastíc. Zistilo sa, že magnetická kvapalina s rôznou koncentráciou magnetozómov, dodaných do živného média rakovinových buniek BP6 sarkómu nemá žiadny toxický vplyv na tieto bunky. V meraniach in vitro na týchto bunkách bolo zistené, že vplyvom VF poľa nastáva úhyn buniek, pričom percento úhynu narastá so zvyšujúcou sa koncentráciou magnetozómov v ich živnom médiu. V dôsledku pôsobiaceho VF poľa dochádza k ohrevu magnetozómov, a tak k následnej perforácii membrány buniek a ich smrti. Testovaná magnetická kvapalina je vhodná pre aplikáciu v elektromagnetickej hypertermii. Bol pozorovaný úhyn rakovinových buniek C6 gliómu vplyvom chemoterapeutického účinku 5fluoruracylu. Naviazaním cytostatika na magnetické nanočastice (MAGHS-5FU) môžeme znížiť množstvo podanej chemoterapeutickej látky a tiež zefektívniť jej pôsobenie vplyvom VF poľa. Bol sledovaný efekt kombinovanej chemoterapie a hypertermie in vitro na rakovinových bunkách C6 gliómu.

Kľúčové slová: magnetozómy, feromagnetické kvapaliny, vysokofrekvenčná elektromagnetická hypertermia, chemoterapia, 5-fluorouracil.

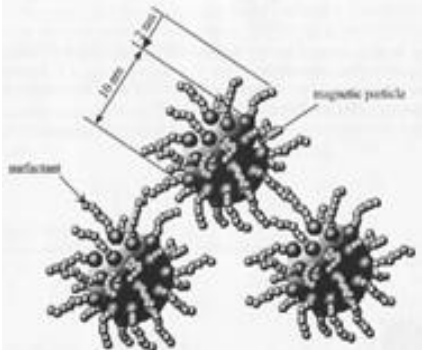
1 ÚVOD

Magnetické nanočastice a magnetické kvapaliny predstavujú širokú oblasť využitia v technickom priemysle ako aj biomedicínskych aplikáciách. Testovali sme novosyntetizované magnetické kvapaliny pre možnosť ich aplikácie v protinádorovej terapii a to v elektromagnetickej hypertermii mozgových nádorov.

Nanočastice s feromagnetickými vlastnosťami môžu byť aplikované do organizmu vo forme magnetickej kvapaliny, v ktorej sú rozptýlené v kvapalnom nosiči alebo zabudované do lipozómov ako magnetolipozómy. Citlivosť týchto štruktúr na nehomogénne magnetické pole umožňuje ich akumuláciu na požadovanom mieste v tele, kde slúžia ako cielené transportné nosiče liečiv. Niektoré z magnetických nanočastíc inkorporovaných spolu s cytostatikom do lipozómov sú schopné prechádzať hematoencefalickou bariérou, a tak môžu byť v tejto podobe použité pre liečbu mozgových nádorov. Týmto spôsobom môže byť k nádoru dopravené cytostatikum 5-fluorouracil, ktoré predstavuje perspektívnu komplementárnu chemoterapeutickú liečbu k elektromagnetickej hypertermii pomocou magnetických nanočastíc. Na základe spolupôsobenia terapeutických metód chemoterapie a elektromagnetickej hypertermie predpokladáme zníženie koncentrácia použitého cytostatika oproti samotnej liečbe chemoterapiou. Takto by sa pri terapii mozgových nádorov znížilo riziko poškodenia buniek CNS a tiež celková záťaž pre organizmus pacienta.

1.1 Magnetické nanočastice a magnetické kvapaliny

Magnetické nanočastice alebo magnetozómy (MNPs) sú častice, ktoré obsahujú magnetické jadro tvorené železom v stabilnej nerozpustnej forme Fe^{3+}, obalené nemagnetickým materiálom a stabilizačnou vrstvou surfaktantu a ich rozmery sú 4 – 100 nm [BABINEC, P. et al., 2005].



Obr. 1.: Magnetické nanočastice: magnetické jadro s polárnymi hlavičkami stabilizačného materiálu.

* adamolas@gmail.com
+ melania.babincova@fmph.uniba.sk

Vrstva surfaktantu slúži na odstránenie efektu možnej koagulácie, ktorá je spôsobená vzájomnou molekulovou príťažlivosťou nanočastíc a dipól-dipólovými interakciami, a tak zabraňuje možnému vzniku agregátov. Slúži tiež na kompenzáciu príťažlivých Van der Waalsových síl elektrostatickými odpudivými silami.

Magnetické kvapaliny alebo ferokvapaliny (FF) sú umelo vytvorené koloidné suspenzie, obsahujúce malé monodoménové feromagnetické nanočastice, rozptýlené v nosnej kvapaline [ROSENSWEIG et al., 1985]. Magnetická kvapalina si zachováva svoje kvapalné vlastnosti a rovnorodé zloženie aj v prítomnosti magnetického poľa vďaka malým rozmerom suspendovaných častíc.

1.2 Magnetické nanočastice v elektromagnetickej hypertermii nádorov

Začiatkom 90-tych rokov minulého storočia sa začalo experimentálne skúmanie využitia ferokvapalín pre liečbu hypertermiou. Potvrdená bola citlivosť nádorových buniek na zvýšenú teplotu, a tak možnosť ich likvidácie za pomoci magnetických kvapalín [JORDAN et al., 1993].

Elektromagnetická hypertermia sprostredkovaná jednodoménovými magnetickými nanočasticami resp. ferokvapalinami a magnetolipozómami predstavuje perspektívnu terapeutickú metódu aplikovateľnú v medicíne. Vplyvom nehomogénneho magnetického poľa sú MNPs vychytávané z cirkulácie a zotrvávajú v cieľovom nádorovom tkanive. Aplikáciou VF elektromagnetického poľa sa rozkmitajú s frekvenciou $f = 3{,}5$ MHz a následne sa ohrievajú v dôsledku Brownovho a Néelovho relaxačného efektu [ROSENSWEIG et al., 2002]. Pri tejto frekvencii sa prednostne zahrievajú magnetické nanočastice a rakovinové tkanivo sprostredkovane cez ne, čím sa eliminujú nežiaduce účinky prehriatia zdravého tkaniva, ktoré magnetozómy neobsahuje. Cieľové nádorové tkanivo sa trením častíc a vedením tepla sekundárne zahrieva a je priamo ničené. Pri spomínanej frekvencii $f = 3{,}5$ MHz VF poľa je skinová hĺbka 42,6 cm, a to umožňuje aplikáciu aj pre nádory hlbšie uložené v tele, a teda široké uplatnenie pri terapii lokálnou hypertermiou. Tento spôsob liečby pomocou lokálneho ohrevu tumoru nad 42 °C spĺňa požiadavky na maximálnu tvorbu tepla v požadovanej oblasti a ochranu okolitého zdravého tkaniva súčasne [BABINCOVÁ et al., 1999], [RIADH et al., 2008].

Hayashi a kol. [HAYASHI et al., 2010] ukázali, že teplo nie je vhodné len na liečbu hypertermiou, ale tiež môže byť využité ako hnacia sila pre uvoľňovanie liečiva naviazaného na častice pôsobením VF poľa. Tento nový spôsob využitia nanočastíc môže byť tak aplikovaný v hypertermii nádorov, ako aj v chemoterapii liečivami-cytostatikami.

Magnetolipozómy sú ideálnym nosičom pre transport liečiva k nádoru počas hypertermickej terapie. Inkorporované magnetické nanočastice sa pôsobením VF magnetického poľa zahrievajú v dôsledku Brownovho a Néelovho relexačného efektu, lipidová dvojvrstva sa mechanickým pôsobením alebo zahriatím perforuje a dôjde k uvoľneniu obsahu magnetolipozómu [BABINCOVÁ et al.,1999].

1.3 Chemoterapia a 5-fluorouracil (5FU)

5-FU je pyrimidínový analóg, ktorý sa už vyše 40 rokov používa ako cytostatikum pri liečbe nádorových ochorení.

Patrí do skupiny liečiv nazývaných antimetabolity. Predstavuje viacero mechanizmov účinku, ale hlavne pôsobí ako inhibítor tymidylát syntázy, kedy blokuje syntézu tymidín pyrimidínu potrebného pre replikáciu DNA. Rýchlo sa deliace nádorové bunky tak bezprostredne hynú kvôli nedostatku tymínu. Ako pyrimidínový analóg je v bunkách premieňaný na rôzne cytotoxické metabolity, ktoré sa môžu začleniť do DNA a RNA. To vedie k zastaveniu bunkového cyklu a následne k zániku bunky apoptózou, pretože je inhibovaná jej schopnosť syntetizovať DNA. Má tiež schopnosť tlmiť aktivitu exozómového a exoribonukleázového komplexu, ktoré sú pre prežitie buniek nevyhnutné.

5-FU má proti-zjazvujúce vlastnosti, čo môže byť výhodou pri liečbe mozgových nádorov, avšak problémom zostáva, že pri neprimeraných dávkach pôsobí neurodegeneratívne z dôvodu poškodzovania oligodendrocytov [LONGLEY et al., 2003].

V predloženej práci je rozpracovaná metóda, v ktorej sa snažíme odstrániť nežiaduce efekty maximálnym možným znížením dávky liečiva naviazaného na magnetozómy za súčasnej aplikácie elektromagnetickej hypertermie.

2 MATERIÁL A METÓDY

2.1 Použitý materiál

Ultračistá deionizovaná voda: H_2O, $M = 18{,}02\ \mathrm{g.mol^{-1}}$ (ANALYTIKA, Praha); fyziologický roztok 0,9 %: H_2O = 1000 ml, NaCl = 9g (IMUNA, SR); magnetická kvapalina MAG/12D: polomer častíc = 50 nm, koncentrácia

$c = 50\ mg.ml^{-1}$, nosič – voda, jadro – magnetit (Fe^{3+} : Fe^{2+} = 1 : 1), stabilizátor – škrob; magnetická kvapalina MAGHS s naviazaným 5FU: polomer častíc = 100 nm, koncentrácia $c = 60\ mg.ml^{-1}$, nosič – voda, jadro – magnetit, stabilizátor – hydroxyetylový škrob; kyselina L-askorbová ($C_6H_8O_6$): $M = 176{,}1\ g.mol^{-1}$, (SLAVUS BRATISLAVA); rakovinové bunkové kultúry BP6 sarkómu: koncentrácia buniek na Petriho miske v 6 ml živného média, $c = 2{,}5.10^5$ (dodané z Ústavu experimentálnej onkológie SAV); rakovinové bunkové kultúry Rat Glioblastoma C6 (C6 glióm): koncentrácia buniek na Petriho miske v 6 ml živného média, $c = 2{,}5.10^5$ (dodané z American Type Culture Collection v spolupráci s Onkologickou klinikou v Mníchove); sójový lecitín, M = 150 g/mol (SIGMA); chloroform CH_3Cl, M = 119,38 g/mol, 99 % (MERCK); 5-fluorouracil (5FU), 5-fluoro-1H,3H-pyrimidine 2,4-dione $C_4H_3FN_2O_2$: $M = 130{,}077\ g/mol$, (SIGMA).

2.2 Príprava magnetickej kvapaliny

Magnetické kvapaliny MAG/12D a MAGHS s naviazaným 5FU (MAGHS-5FU) boli vyrobené koloidnou disperziou monodoménových magnetických nanočastíc vo vodnom nosiči. Magnetozómy boli zhotovené reakciou železitých a železnatých solí za vzniku kryštalického magnetitu Fe_3O_4:

$$2FeCl_3 + FeCl_2 + 8NH_3 + 4H_2O \rightarrow Fe_3O_4 + 8NH_3Cl$$

Ich jadro je tvorené železom viazaným v zlúčeninách (Fe_3O_4 , $MeO.Fe_2O_3$) v pomere Fe_2:Fe_3 = 1 : 1. Častice sú v kvapaline stabilizované vrstvou škrobu, ktorý má v kvapalnom médiu úlohu surfaktantu. Novosyntetizované kvapaliny vykazujú superparamagnetické vlastnosti a sú autoklávované (sterilizované), a tak je potrebné pracovať s nimi pomocou čistých nástrojov a tiež musia byť skladované pri teplote ~ 4 °C, aby si zachovali svoje pôvodné vlastnosti.

2.3 Príprava bunkových kultúr BP 6 sarkómu a C6 gliómu

Bunkové kultúry potkanieho BP 6 sarkómu a C6 gliómu boli vysievané do 6 ml živného média Petriho misiek v koncentrácii $c = 2{,}5.10^5$ a kultivované za čas 5 dní. Bolo nevyhnutné pripraviť viacero porovnávacích vzoriek, aby sme vylúčili iné nežiaduce faktory vplývajúce na úhyn buniek. Experiment musel byť vykonaný v priebehu dvoch hodín kvôli presnosti výsledkov merania, aby sme odstránili ostané potenciálne faktory vplývajúce na úhyn pozorovaných buniek.

2.4 Priebeh merania

Metódu absorpčnej UV-VIS spektroskopie sme využívali na meranie absorpčných spektier vzoriek v blízkej UV oblasti (190 – 400 nm) použitím jednolúčového Spektrofotometra UV/VIS s diferenciačným režimom UV mini-1240 od Shimadzu.

Pri experimentálnom vysokofrekvenčnom ohreve sme používali aparatúru prispôsobenú na meranie vzoriek biologických materiálov. Základom zariadenia je vysokofrekvenčný generátor GV6 (ZEZ Rychnov). Teplotu vzoriek sme určovali na mikrovoltmetri – pikoampérmetri BM 545. Zariadenie funguje na princípe merania rozdielnych potenciálov na vodivých opačných koncoch termočlánku (Cu – Ko) s priemerom $\Phi = 0{,}06\ mm$ (citlivosť $\pm 0{,}1 - 0{,}2\ °C$). Metódu VF ohrevu sme využívali pri ohreve vzoriek magnetickej kvapaliny s rôznymi koncentráciami magnetozómov. V prípade rakovinových buniek bola teplota meraná IČ termometrom s presnosťou 0,1°C.

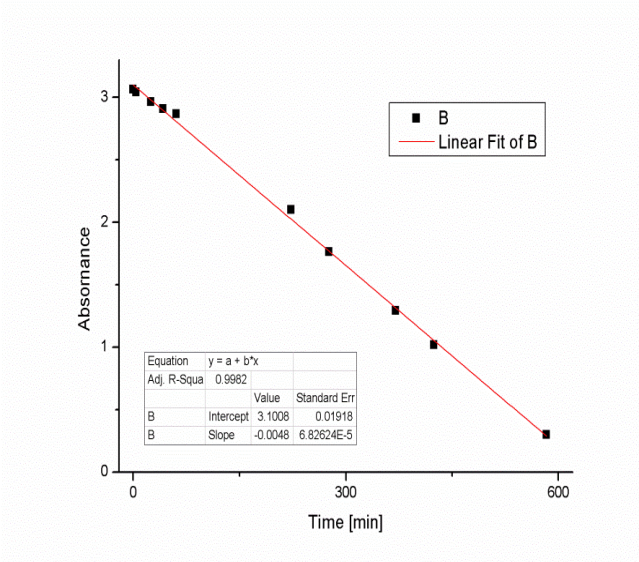
3 VÝSLEDKY A DISKUSIA

3.1 Charakteristika a vlastnosti magnetickej kvapaliny, interakcia s kyselinou askorbovou, stabilita a toxicita v organizme.

V prvej časti experimentov, v snahe preveriť kvalitu novosyntetizovanej magnetickej kvapaliny, konkrétne kontrolu prítomnosti Fe^{3+} iónov vo vzorke, sme sledovali jej reakciu s kyselinou askorbovou. V našom experimente sme spomínanú reakciu sledovali vo fyziologickom roztoku, aby sme sa väčšmi priblížili k fyziologickým podmienkam. Pretože kyselina askorbová je trvale prítomná v ľudskom organizme, môže táto reakcia reálne prebehnúť po aplikácii magnetozómov do nádoru počas hypertermie. Z toho dôvodu dobu reakcie sledujeme pri maximálnej hypertermickej teplote 45°C. Antioxidačná aktivita kyseliny askorbovej H_2A závisí od prítomnosti iónov prvkov (prechodných kovov). Vplyvom kyseliny askorbovej dochádza súčasne k redukcii iónov železa Fe^{3+} prítomných v jadrách nanočastíc na dvojmocné železo Fe^{2+}. Pri reakcii redukovaného železa Fe^{2+} s peroxidom vodíka H_2O_2 môžu vznikať hydroxylové radikály $OH^{\bullet}$, ktoré pôsobia na bunky cytotoxicky, čo by znamenalo, že okrem

hypertermických účinkov magnetickej kvapaliny vplyvom VF poľa, môže v nádorových bunkách prebehnúť aj peroxidačná reakcia.

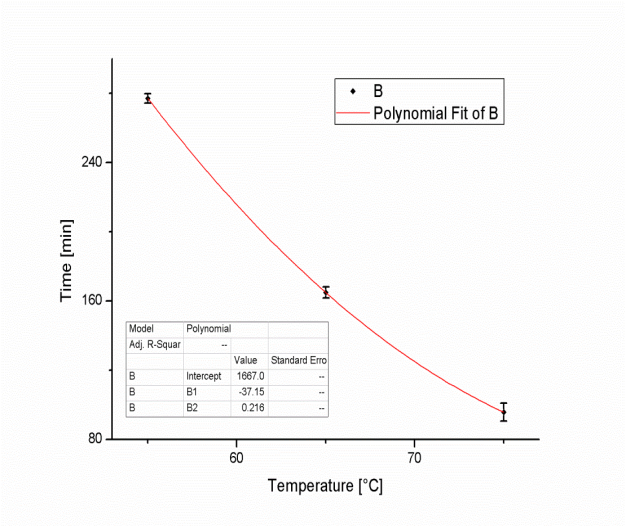
Absorpčnou spektroskopiou pomocou UV/VIS Spektrofotometra sme pozorovali pokles absorpčných maxím v blízkej UV oblasti (210 – 400 nm) pri hornej hranici hypertermickej teploty 45°C reakčnej zmesi magnetickej kvapaliny MAG/12D ($c = 0{,}5\ \mathrm{mmol.l^{-1}}$) a kyseliny askorbovej ($c = 0{,}05\ \mathrm{mg.ml^{-1}}$) zmiešaných v pomere 1 : 1.



Obr. 2: Časová závislosť poklesu píku roztoku kyseliny askorbovej a ferokvapaliny (1 : 1) pri hypertermickej teplote T = 45 °C v UV oblasti.

Zo získaných hodnôt sme zobrazili závislosť poklesu absorpčného píku od času a zistili sme lineárny priebeh závislosti (Obr. 2.). Doba reakcie bola pri spomínanej teplote skoro 590 minút (~ 9,8 hod). Doba reakcie magnetickej kvapaliny s kyselinou askorbovou sa znižuje s pH prostredia, čo by znamenalo, že v nádoroch, kde je pH nižšie prebehne reakcia rýchlejšie, čo môže viesť k vzniku voľných radikálov a peroxidácii membrán rakovinových buniek. Preto je dôležitá otázka sledovania doby reakcie i v závislosti od teploty.

Absorpčnou spektroskopiou sme sledovali interakciu magnetickej kvapaliny s kyselinou askorbovou, teda pokles absorpčných maxím s časom v blízkej UV oblasti (190 – 400 nm) pri rôznych teplotách reakčných zmesí ($T_i = 45,\ 50,\ 65$ a 75 °C. Graf na Obr. 3. zobrazuje reakčné časy pri rôznych teplotách T_i, ktorý sme preložili spojnicou trendu. Rôzne teploty zmesí sme dosiahli permanentným ohrevom vo vodnom kúpeli s termostatom od Memmert s presnosťou merania $\pm 1\ °C$.

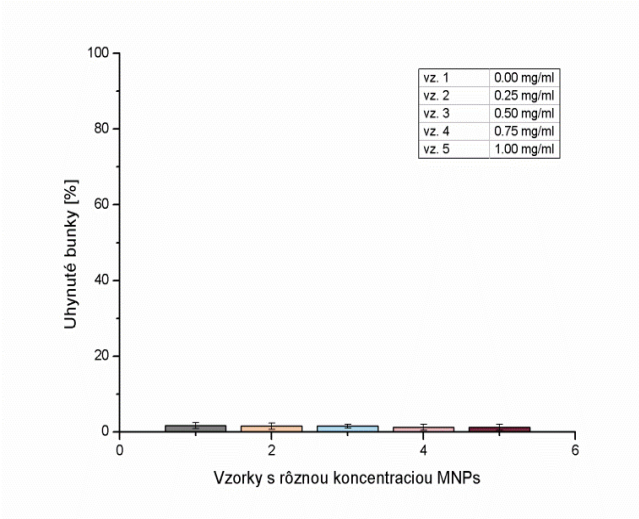


Obr. 3: Rýchlosť reakcie roztoku kyseliny askorbovej a ferokvapaliny (1 : 1) pri rôznej teplote Ti v UV oblasti.

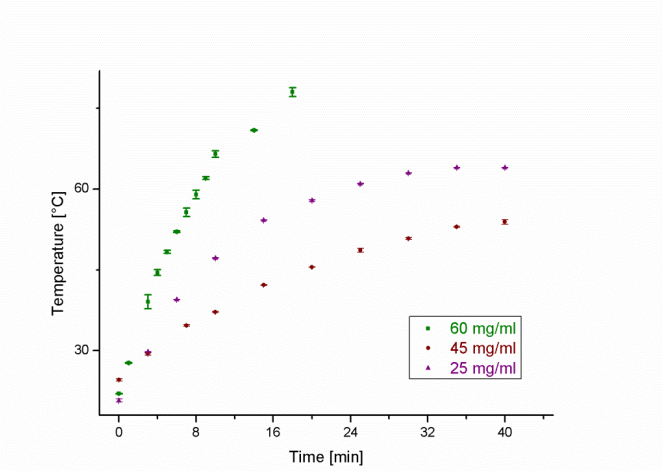
V našich experimentoch sme museli otestovať aj prípadný toxický účinok magnetickej kvapaliny na ľudský organizmus, čo sme simulovali na bunkových kultúrach BP6 sarkómu in vitro.

V piatich Petriho miskách boli kultivované rakovinové bunky s koncentráciou $c = 2{,}5.10^5$ na 6 ml živného média. Pridávali sme k nim rôzne množstvá magnetickej kvapaliny MAG/12D (koncentrácia $c = 50\ \mathrm{mg.ml^{-1}}$): $c = 0\ \mu\mathrm{l.ml^{-1}}$, $c = 5\ \mu\mathrm{l.ml^{-1}}$, $c = 10\ \mu\mathrm{l.ml^{-1}}$, $c = 15\ \mu\mathrm{l.ml^{-1}}$, $c = 20\ \mu\mathrm{l.ml^{-1}}$.

Toxický účinok magnetickej kvapaliny sme sledovali v dvoch nezávislých meraniach vždy po 4 hodinovej inkubácii kvapaliny s rakovinovými bunkami. Na Obr. 4. je uvedená závislosť percenta úhynu rakovinových buniek BP6 sarkómu od koncentrácie magnetozómov v ich živnom médiu. Percento uhynutých buniek je vyjadrené ako stredná hodnota z počtu desiatich meraní a je v rozmedzí 1,2 – 1,7 %. Z dosiahnutých výsledkov vidieť, že koncentrácia aplikovaných magnetozómov nemá výrazný účinok na úhyn pozorovaných rakovinových buniek. Dokonca aj množstvo uhynutých buniek vo vzorke, do ktorej magnetická kvapalina pridaná nebola je porovnateľné s ostatnými vzorkami obsahujúcimi magnetickú kvapalinu, a tak toxické pôsobenie magnetickej kvapaliny môžeme vylúčiť.



Obr. 4: Závislosť úhynu rakovinových buniek BP6 sarkómu od rôznej koncentrácie magnetozómov.



Obr. 5: Teplotná závislosť magnetickej kvapaliny s rôznou koncentráciou magnetozómov od času pôsobenia VF magnetického poľa.

3.2 Vplyv VF magnetického poľa na ohrev magnetickej kvapaliny

Naším cieľom bolo overiť schopnosť dispergovaných nanočastíc novosyntetizovanej ferokvapaliny ohrievať sa vo VF poli s pracovnou frekvenciou 3,5 MHz, a tak dosiahnuť efektívne zvýšenie teploty v tkanive, kde sú aplikované.

Pre testovanie sme používali magnetickú kvapalinu MAGHS so supendovanými nanočasticami Fe_3O_4 s veľkosťou 60 nm. Používali sme tri rôzne koncentrácie suspendovaných magnetozómov v nosiči z deionizovanej vody: $c = 60\ mg.ml^{-1}$, $c = 45\ mg.ml^{-1}$, $c = 25\ mg.ml^{-1}$.

Na grafe na Obr. 5. je znázornená teplotná závislosť magnetickej kvapaliny s tromi rôznymi koncentráciami magnetozómov počas pôsobenia VF magnetického poľa. Pri koncentrácii $60\ mg.ml^{-1}$ sme dosiahli hypertermickú teplotu (42-45 °C) za približne 4 minúty, pri nižšej koncentrácii $45\ mg.ml^{-1}$ za 8 minút a pri najnižšej koncentrácii magnetozómov $c = 25\ mg.ml^{-1}$ sme potrebovali ešte dlhší čas na dosiahnutie tejto teploty a to okolo 18 minút. Z tohto zistenia je zrejmé, že so zvyšujúcou sa koncentráciou magnetozómov v magnetickej kvapaline sa zrýchľuje nárast teploty kvapaliny počas pôsobenia VF poľa. Vzrast teploty s dobou ohrevu je spočiatku strmší, po dosiahnutí určitej hodnoty sa už teplota ďalej nemení až sa nakoniec dostane do ustáleného stavu, kedy sa už ohrev magnetickej kvapaliny nezvyšuje.

Ohrev magnetických kvapalín vplyvom VF poľa si vysvetľujeme pôsobením Néelovho a Brownovho relaxačného efektu. Jednodoménové magnetické nanočastice vo VF poli prechádzajú opakovanou zmenou vnútorného vektora magnetizácie, čo spôsobuje súčasný translačný a rotačný pohyb magnetozómov vo viskóznej kvapaline, a tak sa častica následne zahrieva v dôsledku trenia. Fakt, ktorý potvrdzuje správnosť tejto teórie je rýchlejší ohrev magnetickej kvapaliny so zvyšujúcou sa koncentráciou magnetozómov.

Z nameraných výsledkov možno skonštatovať, že nami testovaná magnetická kvapalina MAGHS je v rôznych koncentráciách aplikovateľná v elektromagnetickej hypertermii.

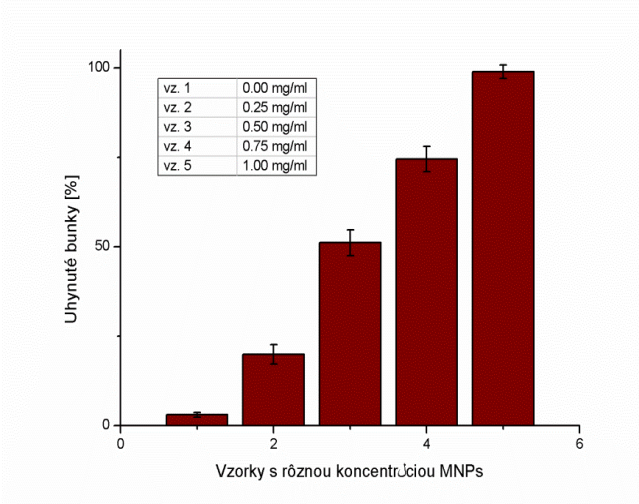
3.3 Hypertermický účinok VF poľa na rakovinové bunky BP6 sarkómu in vitro

V tomto experimente sme pozorovali hypertermický účinok VF poľa na rakovinové bunky BP6 sarkómu s rôznymi koncentráciami magnetozómov v ich živnom médiu. Do štyroch vzoriek sme pridali rôzne množstvá magnetickej kvapaliny MAG/12D (koncentrácia $c = 50\ mg.ml^{-1}$) a získali sme rôzne koncentrácie magnetických nanočastíc vo vzorkách: $c = 5\ mg.ml^{-1}$ $c = 10\ mg.ml^{-1}$, $c = 15\ mg.ml^{-1}$ $c = 20\ mg.ml^{-1}$. Vzorka č.1. slúžila ako kontrola, do nej magnetická kvapalina pridaná nebola, s ňou bol pozorovaný úhyn buniek výlučne pôsobením VF poľa.

Vzorky sme vkladali do VF poľa a sledovali ich ohrev na približne 42 °C meraním teploty IČ termometrom, avšak teplota vzoriek nesmela presiahnuť hornú hypertermickú hranicu 45 °C, vtedy sme ich vybrali z VF poľa. Percento úhynu buniek bolo merané kolorimetrickou metódou

pomocou trypánovej modrej. Vykonali sme 3 nezávislé merania, pri ktorých bolo počas niekoľkých hodín odčítavaných 5 hodnôt počtu natívnych buniek. Viabilitu rakovinových buniek sme učili z percentuálneho podielu živých buniek voči bunkám odumretým. Získali sme 15 rôznych hodnôt pre každú koncentráciu, ktorých stredné hodnoty sme vyniesli do grafu na Obr. 6.

Na Obr. 6. môžeme pozorovať závislosť percenta uhynutia rakovinových buniek od zvyšujúcej sa koncentrácie magnetozómov v živnom médiu v dôsledku hypertermickej teploty počas pôsobenia VF poľa. Percento uhynutých buniek od koncentrácie magnetických nanočastíc obsiahnutých v aplikovanej magnetickej kvapaline vzrastá. Zo spomínaného grafu možno vidieť, že najvyššia použitá koncentrácia magnetozómov spôsobila skoro 100 percentný úhyn buniek, pričom bez použitia magnetickej kvapaliny je úhyn buniek len 3 %. Z vyhodnotenia našich výsledkov vyplýva, že úhyn buniek bol skutočne dosiahnutý hypertermiou, a že iný vplyv na ich úhyn je zanedbateľný.

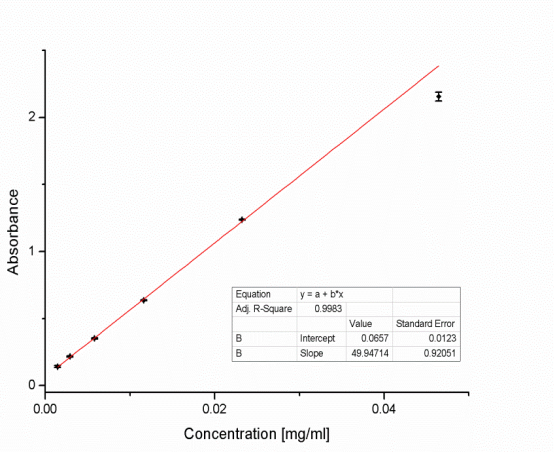


Obr. 6: Závislosť úhynu rakovinových buniek BP6 sarkómu od rôznej koncentrácie magnetozómov pri hypertermickej teplote 42°C počas pôsobenia VF poľa.

Narastanie percenta úhynu buniek s koncentráciou magnetických nanočastíc si vysvetľujeme tak, že rozžeravené magnetické nanočastice následkom relaxačných efektov interagujú s membránami rakovinových buniek, kde môžu spôsobiť ich perforáciu alebo zmenu permeability a fluidity, čo vedie následne k narušeniu ich metabolizmu a k smrti. Tieto merania nám potvrdili vhodnosť aplikácie sledovanej magnetickej kvapaliny v elektromagnetickej hypertermii nádorov.

3.4 Charakteristika 5FU, zabudovanie 5FU do lipozómov

UV-VIS spektroskopiou sme sledovali spektrálne charakteristiky 5FU. Zistili sme rozpustnosť tejto látky vo vode a zostrojili sme kalibračnú krivku 5FU, ktorá je vyjadrením lineárnej závislosti absorbancie pri vlnovej dĺžke 263 nm od koncentrácie 5FU v roztoku deinizovanej vody (Obr. 7.).



Obr. 7: Závislosť absorbancie od koncentrácie 5FU v UV oblasti.

Pozorovali sme možnosť zabudovania 5FU do lipozómov vo vzorkách, ktoré sme pripravili rozpustením 5FU vo vode a následnou hydratáciou lipidického filmu (sójový lecitín) vodným roztokom študovanej látky, pričom sa táto látka sa zabudovala do vodnej fázy lipozómu. Vyhodnotením výsledkov z 20 vzoriek sme zistili percento zabudovania 5FU do lipozómov približne 8,75 ± 0,44 %. Týmto meraním sme sa snažili dokázať využitie lipozómov ako cielených prenášačov cytostatika 5FU, ktoré tak môže byť spoločne s magnetickými nanočasticami dopravené do nádoru. Takto upravené lipozómy môžu po kontrolovanom uvoľňovaním navodiť chemoterapiu a hypertermiu súčasne.

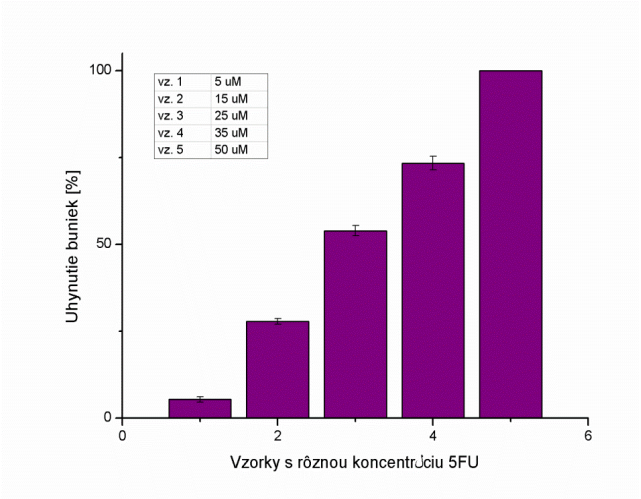
3.5 Terapia pomocou hypertermie a chemoterapie na rakovinové bunky C6 gliómu in vitro.

V experimentoch sme sledovali na bunkových kultúrach C6 gliómu chemoterapeutický účinok 5FU s rôznou koncentráciou a elektromagnetickú hypertermiu vplyvom VF poľa v prítomnosti magnetickej kvapaliny s rôznymi koncentráciami.

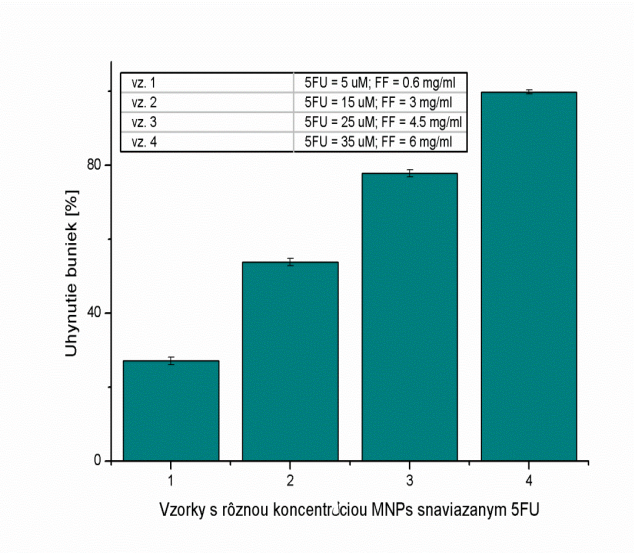
Chemoterapeutický účinok 5FU sme testovali v troch nezávislých meraniach a výsledný úhyn buniek sme vyrátali z 11-tich hodnôt. Z grafu na Obr. 8. vidieť, že úhyn nádorových buniek rastie

priamoúmerne so zvyšujúcou sa koncentráciou aplikovaného cytostatika 5FU. Maximálne percento uhynutých buniek sme pozorovali pri najvyššej koncentrácii pridaného 5FU ($c = 50\ \mu M$), ktorý bol 100 %.

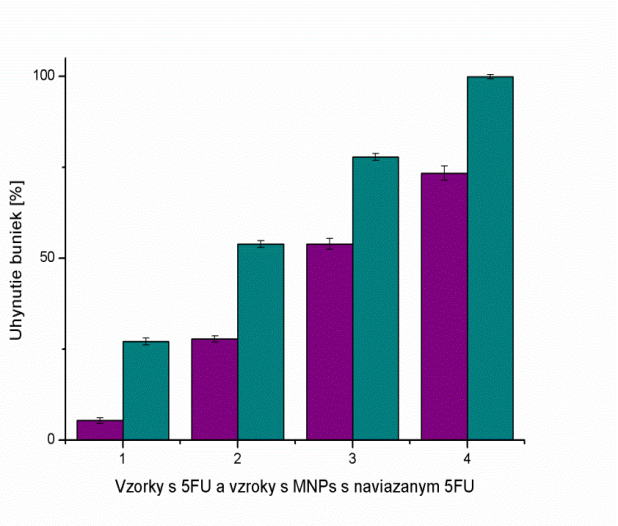
Sledovali sme terapiu rakovinových buniek v prítomnosti magnetickej kvapaliny MAGHS-5FU za prítomnosti VF magnetického poľa, ako potenciálnu kombinovanú liečbu nádorových ochorení (Obr. 9.). Do Petriho misiek s bunkovými kultúrami sme pridali také množstvá magnetickej kvapaliny, aby koncentrácie naviazaného 5FU na magnetozómoch boli zhodné s koncentráciami 5FU v predchádzajúcom meraní, kvôli názornejšiemu následnému porovnaniu výsledkov. Vykonali sme tri nezávislé merania a výsledné percento uhynutých buniek sme určovali z 11-tich hodnôt. Dosiahli sme maximálny úhyn rakovinových buniek 99,8 ± 0,57% pri najvyššej sledovanej koncentrácii ($c_{FF} = 6\ mg.ml^{-1}; c_{5FU} = 35\ \mu M$) magnetozómov s naviazaným 5FU. Z grafu na Obr. 9. vidieť, že sme opäť dosiahli lineárny nárast percenta uhynutých buniek so zvyšujúcou sa koncentráciou magnetickej kvapaliny s naviazaným terapeutikom rastie.



Obr. 8: Graf závislosti úhynu rakovinových buniek C6 gliómu od chemoterapie pôsobením 5FU.



Obr. 9: Graf závislosti úhynu rakovinových buniek C6 gliómu od množstva magnetozómov s naviazaným 5FU počas pôsobenia VF poľa.



Obr. 10: Graf závislosti úhynu rakovinových buniek C6 gliómu od chemoterapie pôsobením 5FU a od množstva magnetozómov s naviazaným 5FU počas pôsobenia VF poľa (kombinovaná hypertermia a chemoterapia).

Potvrdili sme, že dosiahneme približne o 25 % vyšší efekt úhynu rakovinových buniek terapiou pomocou magnetozómov s naviazaným cytostatikom 5FU vplyvom VF poľa, ako pri samotnej chemoterapii cytostatikom 5FU s rovnakou koncentráciou (Obr. 10).

4 Záver

V práci sme zistili, že testované novosyntetizované magnetické kvapaliny MAG/12D a MAGHS (MAGHS-5FU) sú vhodné pre aplikáciu v elektromagnetickej lokálnej hypertermii, čo sme dokázali úhynom buniek BP6 sarkómu a C6 gliómu

in vitro. Pri pracovnej frekvencii f = 3,5 MHz VF elektromagnetického poľa sú obe magnetické kvapaliny použiteľné aj v rôznych koncentráciách. Dokázali sme úhyn rakovinových buniek pôsobením elektromagnetickej hypertermie pomocou magnetickej kvapaliny MAGHS-5FU obsahujúcej magnetozómy s naviazaným cytostatikom 5-fluorouracilom a k nej komplementárnej liečby chemoterapiou pôsobením 5FU. Pomocou súčasne pôsobiacich spomínaných metód sme dosiahli vynikajúci výsledok, skoro 100-percentný úhyn buniek C6 gliómu. Spomínané magnetozómy s naviazaným cytostatikom sú schopné prechádzať hematoencefalickou bariérou, a takto sú použiteľné pre liečbu mozgových nádorov. Na základe súčinnosti dvoch spomínaných terapeutických metód sa nám podarilo znížiť koncentráciu aplikovaného cytostatika oproti samotnej liečbe chemoterapiou, a tak sme eliminovali možný toxický efekt 5FU na zdravé nervové tkanivo mozgu v okolí nádoru.

Poďakovanie

Za vedenie, pomoc pri experimentoch a užitočné rady poskytnuté pri tvorbe práce vyjadrujem poďakovanie Prof. RNDr. Melánii Babincovej, Csc. Tiež patrí moja vďaka všetkým, ktorí prispeli k úspešnému dokončeniu tejto práce.

Téma práce bola zadaná ako jeden z cieľov úlohy v rámci výskumných projektov a financovaná z grantu VEGA 1/0642/11.

Literatúra

[BABINEC, P. et al., 2005] BABINEC, P., BABINCOVÁ, M., SOURIVONG, P., LESZCZINSKA, D. (2005). Efficient treatment of pigmented B16 melanoma using photosensitized long-circulating magnetofullerenosomes. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 293(1): 394-397.

[ROSENSWEIG et al., 1985] ROSENSWEIG, R. E. (1985). *Ferrohydrodynamics*. London: Cambridge University Press.

[LONGLEY et al., 2003] LONGLEY, D.B., HARKIN, D.P., JOHNSON, P.G. (2003). 5-fluorouracil: mechanisms of action and clinical strategies. *Nat. Rev. Cancer*. 3 (5): 330–8.

[JORDAN et al., 1993] JORDAN, A., WUST, P., FAHLING, H., JOHN, W., HINZ, A., FELIX, R. (1993). Inductive heating of ferrimagnetic particles and magnetic fluids: Physical evaluation of their potential for hyperthermia. *International Journal of Hyperthermia*. 9(1): 51–68.

[ROSENSWEIG et al., 2002] ROSENSWEIG, R.E. (2002). Heating magnetic fluid with altrenating magnetic field. *Jurnal of Magnetism and Magnetic Material.* 252: 307-374.

[RIADH et al., 2008] RIADH, W. Y. Habash (2008). Bioeffects and therapeutic applications of electromagnetic energy. U.S.A: CRC Press. s. 400. ISBN-13: 978-1-4200-6284-7.

[BABINCOVÁ et al., 2004] BABINCOVÁ, M., ALTANEROVÁ, V., ALTANER, Č., ČIČMANEC, P., BABINEC, P. (2004). In vivo heating of magnetic nanoparticles in alternating magnetic field. *Medical Physics.* 31(8): 2219-2221.

[BABINCOVÁ et al., 1999] BABINCOVÁ, M. (1999). Cielený prenos a kontrolovateľné uvoľňovanie liečiv pomocou magnetolipozómov. *Česká a Slovenská Farmacie.* 48(1): 27-29.

[HAYASHI et al., 2010] HAYASHI, K., et al. (2010). *ACS Appl Mater Interfaces*. 2(7): 1903–1911.

[JONSSON et al., 2002] JONSSON, P. (2002). Anisotropy, disorder and frustration in magnetic nanoparticle system and spin glasses. *Comprehensive Summaries of Uppsala Disertations from the Faculty of Science and Technology*. 727.

[ALEXIOU et al., 2006] ALEXIOU, C., JURGONS, R., SELIGER, C., IRO, H. (2006). Medical applications of magnetic nanoparticles. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology.* 6(9-10): 2762-2768.

[LAURENT et al., 2011] LAURENT, S., et. al (2011). Magnetic fluid hyperthermia: Focus on superparamagnetic iron oxide nanoparticles. *Advances in Colloid and Interface Science.* 166: 8-23.

[BABINCOVÁ et al., 2002] BABINCOVÁ, M., ČIČMANEC, P., ALTANEROVÁ, V., ALTANER, Č., BABINEC, P. (2002). AC – magnetic field controlled drug release from magnetoliposomes: design of a method for site – specific chemotherapy. *Bioelektrochemistry.* 55: 17 – 19.

[KALJAROVÁ et al., 2010] KALJAROVÁ, D., BABINCOVÁ, M. (2010). Ascorbic acid mediated iron mobilization from magnetic nanoparticles at higher temperatures. *Optoelectronics And Advanced Materials. Rapid communications.* 4(4). 520-522.

Vplyv tlaku na supravodivosť tenkého filmu nióbu

Matúš Orendáč[1]
Školiteľ: Slavomír Gabáni[2]

[1] Centrum fyziky nízkych teplôt, Prírodovedecká fakulta,UPJŠ, Park Angelínum 9 , 041 54 Košice, Slovenská republika
2 Centrum fyziky nízkych teplôt, Ústav experimentálnej fyziky, SAV, Watsonová 47, 040 01 Košice, Slovenská republika

Abstrakt

Predkladaná práca je zameraná na štúdium vplyvu vysokého tlaku na supravodivosť tenkého filmu nióbu. Niób je veľmi dôležitým a široko využívaným prvkom v supravodivých aplikáciách. Medzi elementárnymi prvkami má najvyššiu hodnotu kritickej teploty prechodu do supravodivého stavu, $T_C \approx 9{,}24$ K, pri normálnom tlaku. Predošlý výskum vplyvu vysokého tlaku p na T_c masívnej vzorky Nb poukázal na zložitú a nelineárnu závislosť, T_c vs p. Nióbové tenké filmy v porovnaní s masívnymi vzorkami vykazujú vyššie hodnoty horného kritického poľa prechodu do normálneho stavu (H_{c2}), ale naopak nižšie hodnoty T_c v závislosti od hrúbky filmu, veľkosti zŕn, atď. Pri štúdiu nami pripravených nióbových tenkých filmov, hrúbky 100 nm a T_c = 8,95 K pri normálnom tlaku, sme po prvýkrát previedli merania elektrického odporu pri rôznych hodnotách hydrostatického tlaku do 3 GPa. Tieto merania poukazujú na nárast T_cs rastúcim tlakom: dT_c/dp = 71 mK/GPa, naproti žiadnej zmene H_{c2} v rámci chyby merania, $H_{c2} \approx$ konšt.. V prípade masívnej vzorky Nb sa pozoroval pokles T_c s rastúcim tlakom: dT_c/dp = -32 mK/GPa. Rozdiely v správaní supravodivých vlastností medzi tenkým filmom a masívnou vzorkou Nb so zmenou tlaku možno najlepšie vysvetliť zmenou zrnitej štruktúry, ktorá bola pozorovaná AFM mikroskopom a následne vyhodnotená obrazovou analýzou.

Kľúčové slová: veľmi vysoké tlaky, veľmi nízke teploty, supravodivosť, tenké vrstvy

1 Úvod

V posledných rokoch sú supravodivé materiály pod tlakom predmetom intenzívneho výskumu s cieľom nájsť izbový supravodič a hlbšie pochopiť jav supravodivosti. Snaha vytvoriť materiál, ktorý by bol supravodivý pri izbovej teplote, by malo obrovský význam v praktických aplikáciách. Napríklad: pri prenose elektrickej energie od elektrárne až ku koncovému spotrebiteľovi sa stratí približne 20% elektrickej energie vo forme Joulovho tepla (spôsobené elektrickým odporom vedenia). Zavedením supravodivého elektrického vedenia by vďaka nulovému elektrickému odporu tieto straty zmizli. Vďaka tieniacim prúdom v supravodičoch pri naložení vonkajšieho magnetického poľa by bolo možné ich použitie, ako tienenie nízkofrekvenčného elektromagnetického šumu (50 Hz), ktorý môže spôsobovať problémy v zosilňovačoch a meracích aparatúrach. Ďalšie využitie je v doprave, kde sa využíva skutočnosť, že supravodič je ideálny diamagnet, čo je možné použiť na levitujúce rýchlovlaky. Tiež zaujímavé by bolo využitie supravodičov v elektronike. Napríklad na stavbu vysokokvalitných rezonančných obvodov, keďže kvalita rezonančného obvodu rastie s klesaním jeho elektrického odporu. V roku 1986 bola objavená zlúčenina La-Ba-Cu-0 (LBCO) s teplotou prechodu do supravodivého stavu 35 K prekonávajúc dovtedy najvyššiu známu teplotu prechodu 23,5 K u zlúčeniny Nb_3Ge o viac ako 50%. Čoskoro po tomto objave bol zistený nezvyčajne veľký vplyv tlaku na teplotu prechodu pre túto zlúčeninu. Simulovanie efektov vonkajšieho tlaku (variácia mriežkových konštánt) bolo realizované nahradením La menším isovalentným iónom Y. Takto vyvolaný chemický tlak umožnil ďalší veľký skok v teplote prechodu až nad teplotu kvapalného dusíka v zlúčenie Y-Ba-Cu-O (YBCO). Toto viedlo k záveru, že jemné ladenie materiálových parametrov fyzikálnymi a chemickými prostriedkami by mohlo viesť k ďalšiemu zvýšeniu teploty prechodu do supravodivého stavu. Experimentálne štúdium supravodivosti v extrémnych podmienkach sa tak stáva dôležitou oblasťou fyziky tuhých látok. Znížením rozmeru systému z 3D na kvázi 2D a aplikáciou vysokého hydrostatického tlaku sa dá očakávať nezvyčajné správanie supravodivých parametrov, ako je napríklad kritická teplota a kritické magnetické pole. Správanie sa tenkých vrstiev je veľmi odlišné od masívnych vzoriek vyrobených z toho istého materiálu. Na pochopenie správania týchto kvázi 2D systémov musí byť aplikovaná kvantová fyzika.

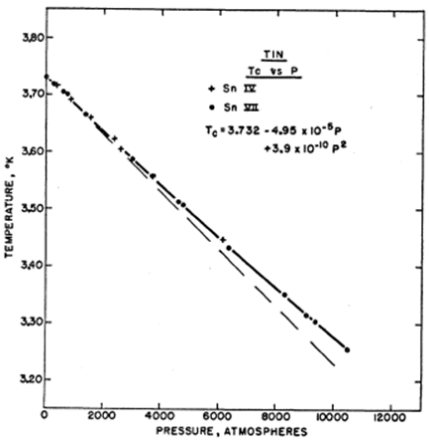
V posledných desaťročiach bolo vyvinutých niekoľko metód na výrobu tenkých vrstiev. V tenkých filmoch nióbu bolo zistené že mikroštruktúra hrá veľmi dôležitú úlohu. Nióbové tenké filmy pripravené metódou DC magnetrónového naprašovania pozostávajú z nióbových zŕn, ktorých veľkosť závisí od podmienok prípravy tenkého filmu, ako sú: teplota substrátu, doba ukladania zŕn, výkon magnetrónového dela a tlak plynu. Zrná sú oddelené amorfným nióbom a hlavne Nb_2O_5. V prípade masívnej vzorky (bulk), závislosť kritickej teploty prechodu do supravodivého stavu od tlaku súvisí hlavne s hustotou stavov na Fermiho hladine. V prípade tenkého filmu sa objavia dva hlavné dôvody redukcie teploty prechodu: a) efekt kvantovej rozmernosti (quantum size effect QSE), b) zmena povrchových fonónových módov.

V súčasnosti existuje len málo vedeckých prác o vplyve tlaku na supravodivosť tenkých vrstiev. Cieľom tejto práce je skúmať vplyv tlaku na teplotu prechodu do supravodivého stavu tenkého filmu nióbu a zvládnutie novej metódy merania elektrického odporu pod tlakom do 3 GPa.

2 Vplyv tlaku na supravodivosť

2.1 Tlaková závislosť teploty prechodu v Bardeen-Cooper-Schriefferovej teórii supravodivosti

Štúdium vplyvu vysokého tlaku na supravodivosť začalo v roku 1925 prácou G. J. Sizoo a H. K. Onnesa [G.J. Sizoo and H.K. Onnes 1925], keď zmerali teplotné závislosti odporu cínu – Sn – v nulovom magnetickom poli pri rôznych tlakoch až do 0,03 GPa (300 bar). Zistili, že kritická teplota supravodivého fázového prechodu, T_c, klesne o približne 5 mK pri tlaku 300 bar (Obr. 1)



Obr. 1 Závislosť T_c od tlaku pre Sn [G.J. Sizoo and H.K. Onnes 1925]

Neskoršie merania do vyšších tlakov ukázali závislosť T_c pre Sn [L.D. Jennings - C.A. Swenson 1958][M. Eremets 1996]:

$$T_c = 3.733 - 4.95 \times 10^{-5} \times p + 5.9 \times 10^{-10} \times p^2 \qquad (1)$$

Podobné hladké závislosti $T_c(p)$ boli postupne určené pre Al (T_c = 1,14 K), In (T_c = 3,407 K) a Pb (T_c =7,193 K), čím sa tieto elementárne supravodivé chemické prvky často využívajú ako sekundárne indikátory tlaku v tlakových komôrkach (Obr. 2).

			dln(Tc/dP)
Al	Tc=1.14 K	dTc/dP=-0.285K/Gpa	(-0.25K/Gpa)
In	Tc=3.4 K	dTc/dP=-0.436K/Gpa	(-0.128K/Gpa)
Sn	Tc=3.73 K	dTc/dP=-0.482K/Gpa	(-0.13K/Gpa)
Pb	Tc=7.19 K	dTc/dP=-0.360K/Gpa	(-0.05K/Gpa)

Obr. 2 Prehľad prvkov používaných ako tlakové senzory v tlakových komôrkach.

Najčastejšie sa však používa olovo kvôli pomerne vysokej teplote T_c a pomerne veľkej zmene T_c s tlakom (vyššia citlivosť). Pokles T_c s tlakom ako pre Sn, In či Pb možno vo všeobecnosti pozorovať pre všetky jednoduché (*s*, *p* – elektrónové) kovové supravodiče a môže byť vysvetlený v rámci teórie supravodivosti Bardeena – Coopera - Schrieffera (BCS teórie). Tá je založená na elektrón-fonónovej interakcii medzi pármi elektrónov (vytváranie tzv. cooperovských párov), pričom pre kritickú teplotu supravodivého fázového prechodu platí [J.S. Schilling and J.J. Hamlin 2008]:

$$T_c \approx 1.13\theta_D \exp\left(\frac{-1}{\lambda}\right), \qquad (2)$$

kde θ_D je Debeyova teplota a λ je parameter elektrón-fonónovej interakcie. Ďalej platí:

$$\theta_D \approx <\omega> \approx \sqrt{\frac{k}{m}} \qquad (3)$$

$$\lambda = \frac{N(E_F) < I^2 >}{m < \omega^2 >}, \qquad (4)$$

kde ω je fonónová frekvencia, k je konštanta pružnosti mriežky, $N(E_F)$ je elektrónová hustota stavov v okolí Fermiho hladiny - E_f a $<I^2>$ je stredná hodnota štvorca maticového elementu elektrón-fonónovej interakcie. Po dosadení (3) a (4) do rovnice (2) dostávame:

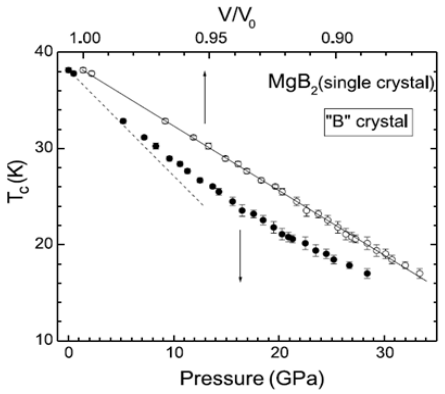
$$T_c \approx \sqrt{\frac{k}{m}} e^{-k/\eta}, \qquad (5)$$

kde m je hmotnosť katiónu supravodivého prvku a η je McMillan-Hopfieldov parameter, pre ktorý platí:

$$\eta = N(E_f)\langle I^2 \rangle , \qquad (6)$$

Treba poznamenať, že rovnica (2) je platná iba v prípade supravodičov so slabou väzbou medzi

elektrónmi v cooperovských pároch, keď konštanta elektrón-fonónovej interakcie λ je malá. V jednoduchom kove vplyvom tlaku rastie k oveľa rýchlejšie ako η, takže exponenciálny člen vo vzťahu (5) rýchlo klesá a teda klesá aj T_c. Týmto spôsobom možno tiež vysvetliť pokles T_c s rastúcim tlakom v známom BCS dvojmedzerovom supravodiči MgB_2 (Obr. 3) s najvyššou hodnotou $T_c \approx 40$ K [S. Deemyad et al 2003].



Obr. 3 Graf závislosti T_c od tlaku pre zlúčeninu MgB_2 [S. Deemyad et al 2003]

Je potrebné poznamenať, že ak m je hmotnosť izotopu supravodivého prvku, ktorá sa mení vo vzťahu (5) namiesto tlaku, tak dostávame klasický izotopický jav, t.j. $T_c \sim m^{-1/2}$. Pokles T_c s rastúcim tlakom p, t.j. $dT_c/dp < 0$, však neplatí pre všetky materiály. Veľká hodnota dT_c/dp, či už kladná alebo záporná, naznačuje možnosť existencie vyššej hodnoty T_c pri normálnom tlaku vhodnou zmenou chemického zloženia supravodivého materiálu. Vplyvom takéhoto vhodného dopovania možno dosiahnuť tzv. pozitívny chemický tlak. Táto stratégia bola s veľkým úspechom použitá skupinou profesora C. W. Chu v roku 1987. Po ich zistení, že T_c kuprátu La-Ba-Cu-O narastie z 32 K na 40 K pri aplikovaní len pomerne malého tlaku 1.4 GPa [C.W. Chu et al 1987], nahradili veľký ión La menším iónom Y, čím vytvorili chemický tlak vo vnútri zlúčeniny, a vytvorili tak prvý supravodič s teplotou $T_c \approx 92$ K, ktorá je vyššia ako teplota varu kvapalného dusíka [M.K. Wu et al. 1987]. O niekoľko rokov neskôr tá istá skupina v spolupráci s kolegami z Carnegie Institute of Washington vyrobila zlúčeninu na báze ortuti, Hg-1223, s rekordnou teplotou $T_c \approx 164$ K [L. Gao et al. 1994].

2.2 Vplyv tlaku na prvky periodickej sústavy prvkov

V periodickej sústave prvkov existuje v súčasnosti 30 prvkov, ktoré vykazujú supravodivosť pri normálnom tlaku (na Obr. 4 sú vyznačené žltou farbou) a 23 prvkov, ktoré začnú byť supravodivé až pri aplikovaní vysokého tlaku (na Obr. 4 sú vyznačené modrou farbou) s najvyššou kritickou teplotu 25 K pre Ca pri tlaku 161 GPa. Z toho je prirodzené očakávať, že všetky prvky sa môžu stať supravodičmi, ale niektoré z nich iba pri extrémnych podmienkach ako sú veľmi nízka teplota (rádovo niekoľko mK až K) a extrémne vysoký tlak (až stovky GPa). V periodickej sústave prvkov existujú štyri skupiny prvkov, ktoré nevykazujú supravodivé vlastnosti pri normálnom tlaku v celom rozsahu teplôt.

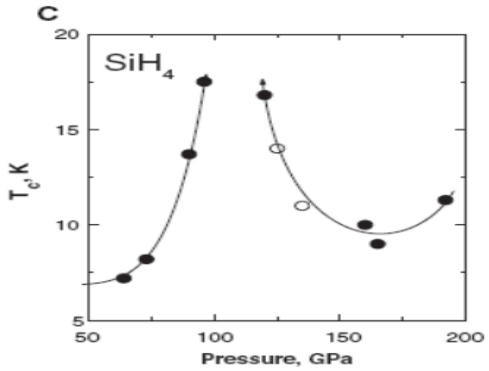


Obr. 4 Periodická sústava prvkov. Prvky ktoré vykazujú supravodivosť pri normálnom tlaku sú vyznačené žltou. Prvky ktoré sú supravodivé pri vysokom tlaku sú vyznačené modrou. [J.S. Schilling and J.J. Hamlin 2008]

2.2.1 Nekovové prvky

V tejto skupine prvkov nepozorujeme supravodivosť pri normálnom tlaku kvôli tomu, že majú málo, prípadne žiadne vodivostné elektróny. Aplikovaním externého tlaku musí daný prvok najprv prejsť do kovového stavu, aby získal vodivostné elektróny a až potom môže prejsť do supravodivého stavu. Vodík prechádza do kovového stavu až pri tlaku vyše 100 GPa (1 Mbar). N.W. Ashcroft [N.W. Ashcroft 2004] predpovedal, že takýto kovový vodík sa pri tlaku vyššom ako 400 GPa stane izbovým supravodičom. Vodík v supravodivom stave zatiaľ nebol experimentálne objavený. N.W. Ashcroft tiež poukázal na fakt, že vodík v niektorých zlúčeninách je namáhaný vnútorným tlakom atómov mriežky v ktorej sa nachádza [N.W. Ashcroft 2004]. Tento vnútorný tlak výrazne znižuje externý tlak potrebný na prechod danej zlúčeniny do kovového stavu. Tieto

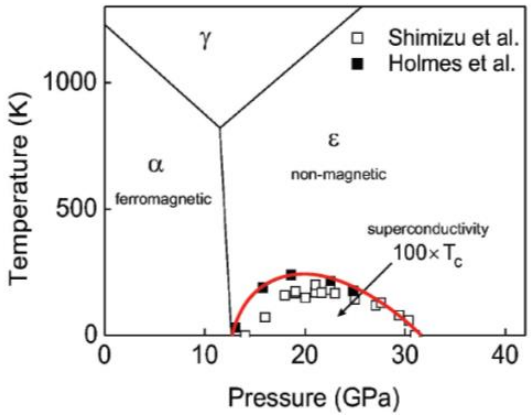
zlúčeniny musia byť bohaté na vodík. Sú to napríklad: $LiBH_4$, $LiAlH_4$ alebo SiH_4. Príkladom prechodu s izolátorového molekulárneho stavu do kovového je silan – SiH_4 [M.I. Eremets et al. 2008]. K prechodu do kovového stavu dochádza pri externom tlaku 50 GPa. Závislosť kritickej teploty prechodu do supravodivého stavu od vonkajšieho tlaku je zobrazená na Obr. 5. Z grafu je zrejmé, že prechod do supravodivého stavu nastáva pri maximálnej teplote $T_c^{max} \approx 17$ K medzi 96 a 120 GPa.



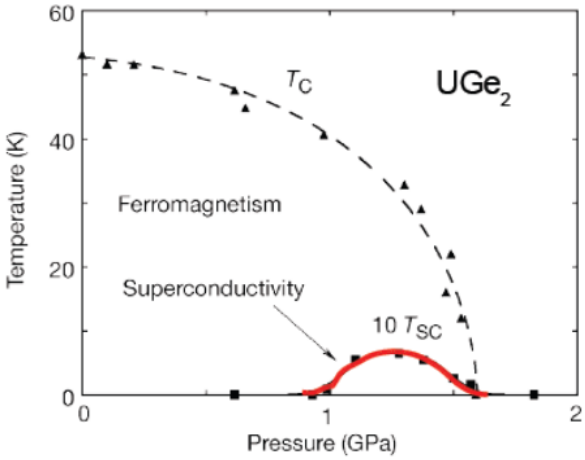
Obr. 5 Závislosť kritickej teploty prechodu do supravodivého stavu od vonkajšieho tlaku pre zlúčeninu SiH_4 [N.W. Ashcroft 2004]

2.2.2 Magnetické kovy a väčšina vzácnych zemín a aktinoidov

V druhej skupine nepozorujeme supravodivosť v celom rozsahu teplôt pri normálnom tlaku, lebo táto skupina obsahuje magnetické: *3d*-kovy, *4f*-vzácne zeminy a *5f*-aktinoidy. Železo Fe, ktoré patrí do tejto skupiny je za normálnych podmienok (izbová teplota, normálny tlak) feromagnetické. Aplikovaním externého tlaku dochádza v železe k fázovému prechodu z fázy bcc (α-Fe) do fázy hcp (ε-Fe) [K. Shimizu et al 2005]. Deje sa tak v rozsahu tlakov 10 až 14 GPa v dôsledku čoho v železe zaniká feromagnetizmus. Mössbauerovou spektroskopiou bolo zistené, že v ε-Fe fáze vzniká Pauliho paramagnetizmus vodivostných elektrónov. Maximálna kritická teplota, T_c, je približne 2,1 K pri tlaku 21 GPa [K. Shimizu et al 2005]. Závislosť T_c od tlaku je na Obr. 6. Hranica supravodivosti má oblúkový tvar podobný tomu aký majú ťažkofermiónové systémy napr. UGe_2 [S.S. Saxena, et al. 2000] (Obr. 7). Z toho možno usudzovať, že v ε-Fe fáze železa po potlačení magnetizmu a magnetických fluktuácií na minimum alebo úplne, nastáva supravodivosť pravdepodobne vďaka nekonvenčnému mechanizmu vzniku cooperovských párov podobne ako u spomínaných ťažkofermiónových zlúčeninách [K. Shimizu et al 2005].



Obr. 6 Závislosť T_c od tlaku pre železo Fe. [K. Shimizu et al 2005]

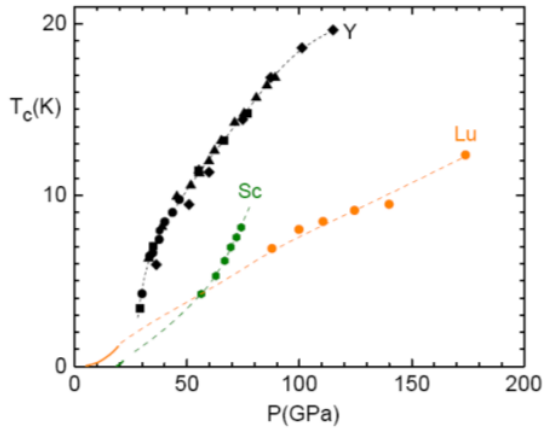


Obr. 7 Závislosť T_c od tlaku pre ťažkofermiónový systém UGe_2 [S.S. Saxena, et al. 2000]

2.2.3 d^1 - prechodové kovy

V tretej skupine prvkov nevykazujúcich supravodivosť pri normálnom tlaku sú trojmocné *d*-elektrónové prvky Sc, Y a Lu. Supravodivosť v nich nie je prítomná lebo nemajú dostatok *3d* vodivostných elektrónov. Bolo zistené, že v prvkoch Sc, Y a Lu sa supravodivosť objaví až pri extrémne vysokých tlakoch a kritická teplota neustále rastie s tlakom až do hodnôt T_c(Sc) ≈ 19,6 K (106 GPa), T_c(Y) ≈ 19,5 K (115 GPa) a T_c(Lu) ≈ 12,4 K (174 GPa) [13, 14, 15]. Závislosť T_c od tlaku je zobrazená na Obr. 8. Priložením externého tlaku na tieto prvky rastie počet *d*-elektrónov vo vodivostnom páse vplyvom očakávaného *s-d*

transferu, pretože kinetická energia *s*-elektrónov rastie oveľa rýchlejšie ako *d*-elektrónov.



Obr. 8 Závislosť T_c od tlaku pre prvky: Sc, Y a Lu.[[J.S. Schilling and J.J. Hamlin 2008]]

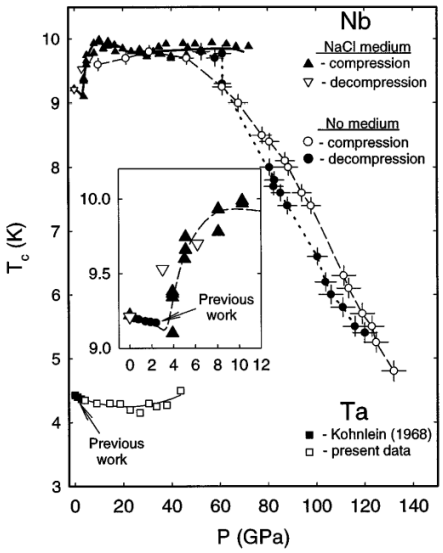
2.2.4 Jednovalenčné alkalické a vzácne kovy okrem Li

Štvrtá skupina nesupravodivých prvkov pri normálnom tlaku obsahuje alkalické a vzácne kovy. V tejto skupine prvkov sa podarilo vysokým tlakom indukovať supravodivosť len v prvku cézia – Cs, s T_c^{max} približne 1,3 K pri tlaku 12 GPa [J. Witting 1970]. Aplikovaním vysokého tlaku na prvok lítia sa zvýšila kritická teplota z 0.4 mK pri normálnom tlaku na 14 K pri tlaku 30 GPa. Alkalické kovy môžeme popísať modelom voľných elektrónov s Fermiho plochou približne guľového tvaru. Neexistencia supravodivosti pri normálnom tlaku u prvkov v tejto skupine s výnimkou lítia je spôsobená nízkou hustotou elektrónových stavov na Fermiho ploche.

Najvyššiu T_c spomedzi prvkov má v súčasnosti Ca (T_c = 25 K pri 165 GPa) [Yamabuchi 2006] a zo zlúčenín Hg-Ba-Ca-Cu-O (Hg-1223) (T_c = 164 K pri 30 GPa) [L. Gao, et al. 1994].

2.3 Vplyv tlaku na supravodivosť nióbu

Niób patrí medzi prechodové kovy s elektrónovou konfiguráciou $4d^4 5s^1$. Oxiduje na vzduchu pri teplote nad 200 °C. Kryštalizuje v objemovo centrovanej kubickej štruktúre. Pri normálnom tlaku má najvyššiu kritickú teplotu, T_c = 9,24 K, zo všetkých prvkov. Predchádzajúce pokusy na objemovej vzorke nióbu pod hydrostatickým tlakom do 2,4 GPa preukázali monotónny pokles T_c s rastúcou hodnotou tlaku [TF Smith 1970]. V spomínanej práci bolo použitých päť vzoriek s hodnotami T_c od 9,145 K až 9,214 K pri normálnom tlaku. Na druhej strane, nehydrostatické merania do 6 GPa ukázali monotónny nárast T_c a nevratnú tlakovú závislosť T_c [W. Gey 1969]. V experimente realizovanom Struzhkinom a jeho spolupracovníkmi boli vykonané merania T_c masívnej vzorky nióbu až do megabarových tlakov (viac ako 100 GPa (Obr. 9)) [V. V. Sruzhkin, et al. 1997].



Obr. 9 Graf závislosti T_c od tlaku masívnej vzorky nióbu.[V. V. Sruzhkin, et al. 1997]

V závislosti T_c od tlaku boli pozorované anomálie v intervaloch 5-6 GPa a 60-70 GPa, ktoré vyplývajú z tlakovo citlivých elektrónových topologických prechodov. Pri veľmi vysokom tlaku medzi 70 a 132 GPa sa pozoruje lineárny pokles T_c až do 4,7 K . Toto zníženie T_c masívnej vzorky je spôsobené hlavne poklesom hustoty stavov na Fermiho hladine [McMillan 1968]. V prípade tenkého filmu existujú dva hlavné dôvody redukcie teploty prechodu: i) efekt kvantovej rozmernosti (quantum size effect QSE) a potom ii) zmena povrchových fonónových módov [BosePRL]. Bose a spolupracovníci [BosePRL, BosePRB, BanerjeeAPL] ukázali, že v tenkých filmoch nióbu, je mikroštruktúra vrstiev veľmi dôležitá. Nióbové filmy pripravené metódou DC-magnetrónového naprašovania pozostávajú z nióbových zŕn. Veľkosť týchto zŕn závisí od podmienok prípravy tenkého filmu ako sú: teplota substrátu, doba ukladania zŕn, výkon magnetrónového dela a tlak plynu. Zrná sú oddelené amorfným nióbom a hlavne Nb_2O_5. Priame meranie supravodivej energetickej medzery v nanoštruktúrovaných tenkých filmoch Nb ukazuje, že energetická medzera sa zmenšuje so zmenšením priemernej veľkosti zŕn. Kritická teplota T_c, získaná

z transportných a magnetických meraní, tiež klesá s veľkosťou zrna ako v prípade energetickej medzery. Závislosť supravodivých vlastností na veľkosti zŕn v tomto supravodiči je preto daná zmenami v elektrónovej hustote stavov skôr ako zmenou povrchových fonónových módov. V súlade s Andersonovým kritériom, supravodivosť nebola pozorovaná u veľkostí zŕn menších ako 8 nm [S. Bose et al. 2005]. So znížením priemernej veľkosti zrna v nanoštruktúrovaných tenkých filmoch nióbu bol pozorovaný systematický prechod z fázy kovu až do fázy slabého izolátora. Analýza teplotnej závislosti odporu v izolatórovej fáze jasne ukazuje na existenciu dvoch odlišných aktivačných energií zodpovedajúcich medzi-zrnovým a vnútro-zrnovým mechanizmom transportu elektrónov. Bolo ukázané, že energetická bariéra na hraniciach zŕn je úmerná šírke neusporiadanej medzi-zrnovej oblasti, ktorá sa zväčšuje s poklesom veľkosti zŕn. Pre prechod kov-izolátor, ktorý sa vyskytuje v tenkom filme nióbu kvôli rozšíreniu energetickej medzery na hraniciach zŕn, kritická veľkosť zŕn je spomínaných 8 nm a zodpovedajúca šírka hraníc zŕn je 1,1 nm [S. Bose et al. 2006]. Bolo ukázané, že horné kritické magnetické pole H_{c2} v zrnách nióbu o veľkosti rádovo 10 nm, sa riadi zmenami v efektívnej Ginzburg-Landauovej koherenčnej dĺžke, ku ktorej dochádza v dôsledku dvoch konkurenčných faktorov: a) pokles veľkosti zrna a následné zvýšenie neusporiadanosti, b) efektívne zníženie hustoty stavov na Fermiho hladine kvôli vytvoreniu tzv. Kubo medzery. V dôsledku toho, je horné kritické pole H_{c2} v nanoštruktúrovanom Nb nemonotónnou závislosťou veľkosti zrna. V intervale veľkosti zŕn 60 až 20 nm H_{c2} rastie s klesajúcou veľkosťou zŕn. Pre veľkosť zŕn približne 20 nm H_{c2} sa zvýši 2,5 krát oproti hodnote H_{c2} masívnej vzorky, zatiaľ čo nie je prítomný výrazný pokles T_c od hodnoty pre masívnu vzorku 9,24 K. To možno pripísať k poklesu koherenčnej dĺžky kvôli zníženiu strednej voľnej dráhy elektrónov s klesajúcou veľkosťou zŕn. Avšak pri veľkosti zrna pod 20 nm H_{c2} klesá s klesajúcou veľkosťou zŕn. V tomto rozmedzí veľkostí zŕn tiež dochádza k zníženiu T_c, rovnako ako ku zníženiu supravodivej energetickej medzery. Pokles H_{c2} v tomto regióne je možné pripísať poklesu hustoty stavov na Fermiho hladine kvôli kvantovaniu v elektrónových energetických hladinách [S. Bose et al 2006[2]].

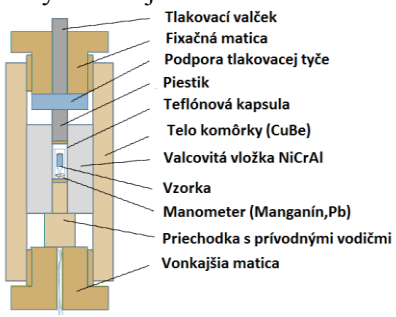
Vplyv tlaku na supravodivé tenké filmy Nb nebol, podľa našich znalostí, doteraz skúmaný. Preto je práca venovaná vplyvu vysokého tlaku na T_c tenkých filmov Nb. Vzorky tenkých nióbových filmov boli vyrobené v Nanotechnologickom laboratóriu na prípravu nanosúčiastok pre elektroniku, senzory a enviromentálne aplikácie ÚFV PF UPJŠ v Košiciach pod vedením RNDr. V. Komanického, PhD. Tenké filmy hrúbky 100 nm boli pripravené metódou DC-magnetrónového naprašovania.

3 Experimentálne metódy

.

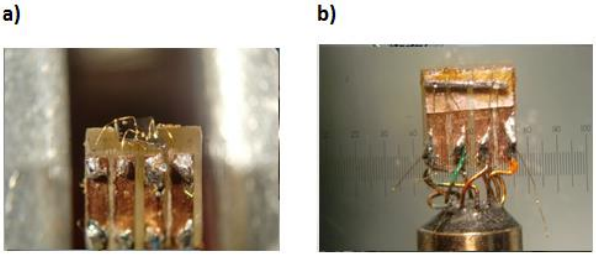
3.1 Princíp a príprava piestikovej tlakovej komôrky

Na generovanie vysokých tlakov bola použitá HPC-33 tlaková komôrka piestikového typu. V tejto komôrke je možné generovať tlak až do 3 GPa. Ako tlakové médium sa použil olej DAPHNE. Schematický nákres je na Obr. 10.



Obr. 10 Schematický nákres piestikovej tlakovej komôrky.

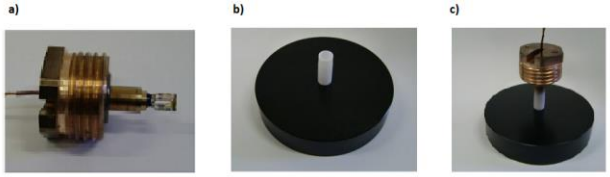
V ďalších odsekoch je opísaná príprava komôrky na meranie. Najprv sa nakontaktuje vzorka a umiestni na držiak (Obr. 15 a), ktorý je prispájkovaný na priechodku. Spolu so vzorkou, je k držiaku prilepený aj manometer na indikovanie tlaku (Obr. 11 b).



Obr. 11 Detailné zväčšené zobrazenie držiaka so vzorkou (a) a oloveného manometra (b).

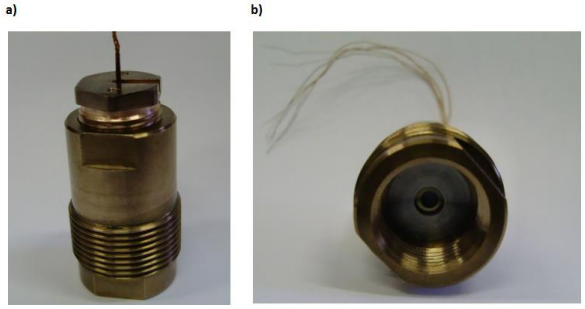
Pri izbových teplotách, kde prebieha aplikovanie tlaku, sa používa ako manometer manganín (zliatina medi 86%, mangánu 12% a niklu 2%). Pri nízkych teplotách sa využíva ako manometer supravodivý cín (Sn) alebo olovo (Pb). Touto metódou je možné určiť zo známej závislosti T_c od tlaku, tlak v okolí vzorky. Následne je priechodka s držiakom so vzorkou a manometrom vložená do

vonkajšej matice (Obr. 12 a). Do plastového podstavca je vložená teflónová kapsula a naplnená doplna dielektrickým olejom DAPHNE s malou viskozitou (Obr. 12 b). Do teflónovej kapsuly je vložený držiak so vzorkou a manometrom (Obr. 12 c).



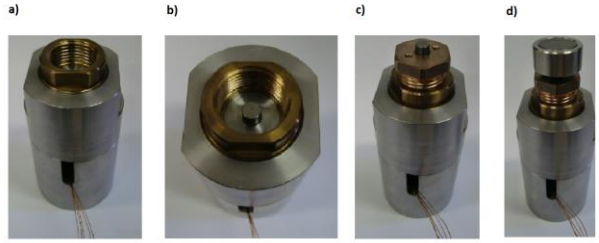
Obr. 12 Plnenie teflónovej kapsuly tlakovým médiom.

Medzi teflónovú kapsulu a priechodku sa ešte vkladá kovové (CuBe) tesnenie. Potom vonkajšia matica aj s teflónovou kapsulou je vložená do tela komôrky (Obr. 13 a). Telo komôrky je vyrobené tiež zo zlúčeniny CuBe. Na Obr. 13 b) je pohľad do vnútra tela piestikovej komôrky a na valcovitú vsuvku vyrobenú z NiCrAl.



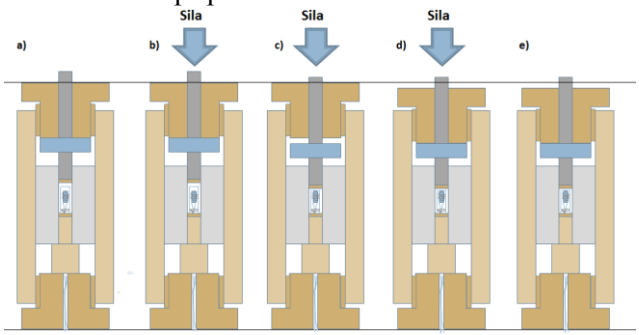
Obr. 13 Skladanie piestikovej komôrky (pohľad zboka a do vnútra).

Poskladaná komôrka je vložená do nerezového podstavca (Obr. 14 a). Zhora je zasunutý piestik, ktorým sa prenáša tlak z lisu na vzorku (Obr. 14 b). Potom je voľne zaskrutkovaná fixačná matica, ktorou je po zatlačení komôrky zafixovaný tlak aj po odstránení pôsobenia lisu (Obr. 14 c). Nakoniec na vrch komôrky je položený valček z tvrdého materiálu (Obr. 14 d), aby pri aplikovaní tlaku piestik komôrky nepoškodil piest lisu.



Obr. 14 Vkladanie uzavretej komôrky do ochranného nerezového podstavca.

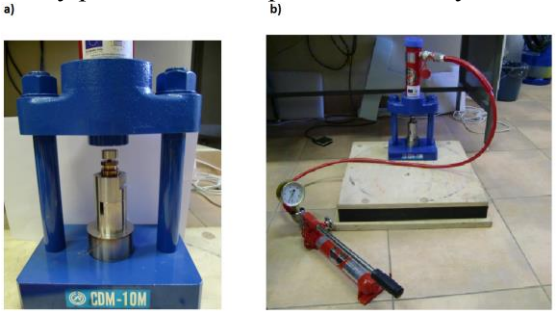
Po zložení komôrky je v nej atmosférický tlak a je pripravená na aplikovanie vysokého tlaku (Obr. 15 a). Na komôrku je aplikovaný externý tlak lisom (Obr. 15 b). Avšak na vzorku v kapsule bude pôsobiť omnoho väčší tlak, ako je tlak lisu. Pre túto komôrku platí, že tlak v jej vnútri (v okolí vzorky) je približne 64-krát väčší ako tlak lisu kvôli tomu, že plocha, na ktorú tlačí lis, je omnoho väčšia ako plocha teflónovej kapsuly, v ktorej je vzorka. Teflónová kapsula so vzorkou sa vplyvom tlaku deformuje (Obr. 15 c). Tlak v kapsulke je potrebné fixovať dotiahnutím fixačnej matice, aby po odstránení externého tlaku lisu ostala vzorka natlakovaná (Obr. 15 d). Na Obr. 15 e) je komôrka natlakovaná a pripravená na meranie.



Obr. 15 Postup pri aplikovaní tlaku v piestikovej tlakovej komôrke.

a) všetky časti komôrky sú zložené a pripravené na aplikovanie tlaku
b) na tlakovací valček aplikujeme silu pomocou lisu
c) vplyvom tlaku sa deformuje teflonová kapsula
d) aplikovaný tlak je potrebné zafixovať fixačnou maticou
e) po zafixovaní tlaku môžeme uvoľniť silu generovanú lisom

Na Obr. 16 a) je detail komôrky vloženej do lisu. Podstavec plní dve funkcie: drží komôrku v správnej polohe pri tlakovaní a chráni okolité osoby pred možnou explóziou komôrky.



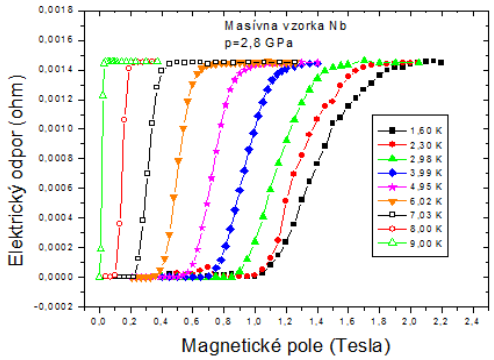
Obr. 16 Lis pre natlakovanie komôrky.

Natlakovaná komôrka je namontovaná na sondu a vložená do kryomagnetického systému s variabilnou teplotou od 300 K až po 1,5 K a maximálnym magnetickým poľom 10 T, pričom

magnetické pole je orientované kolmo na tenký film aj smer prúdu pretekajúci vzorkou.

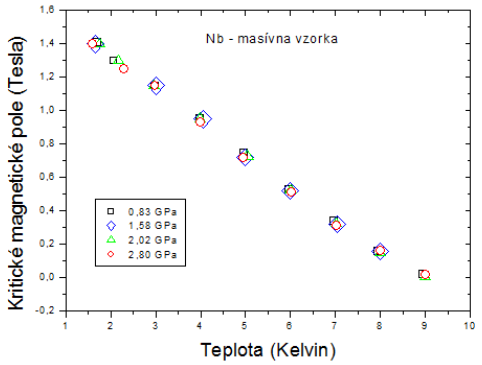
4 Experimentálne výsledky a diskusia

Najprv bola meraná masívna vzorka Nb. V komôrke bol vygenerovaný určitý tlak a potom sa vykonalo meranie. Meranie sa uskutočnilo pre niekoľko hodnôt tlaku a prebiehalo tak že, teplota bola zafixovaná a menilo sa magnetické pole a štvorbodovým meraním elektrického odporu vzorky sa zachytil prechod do supravodivého stavu, čím sa zistilo $H_{c2.}$ Týmto spôsobom sa meralo pri rôznych teplotách. Na Obr. 17 znázornená poľová závislosť elektrického odporu masívnej vzorky Nb pri rôznych teplotách a pri maximálnom aplikovanom tlaku. Metódou merania elektrického odporu nie je možné určiť $H_{c1,}$ ale je možné určiť H_{c2} resp. H_{c3}. Ako kritérium pre hodnotu veľkosti horného kritického magnetického poľa H_{c2} pri určitej teplote bola zvolená hodnota poľa, pri ktorej elektrický odpor vzorky dosahuje polovicu hodnoty pri prechode do supravodivého stavu.



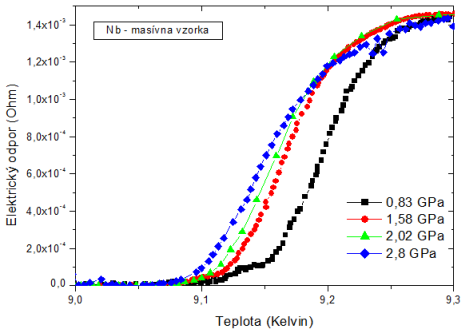
Obr. 17 Závislosť elektrického odporu masívnej vzorky Nb od magnetického poľa pre rôzne teploty pri tlaku 2,8 GPa

Každej hodnote teploty na grafe na Obr. 17 prislúcha jedna hodnota kritického poľa H_{c2}. Táto závislosť H_{c2} od T pre rôzne tlaky je vynesená na Obr. 18.



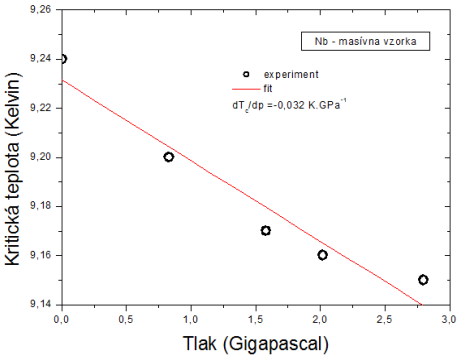
Obr. 18 Fázový diagram masívnej vzorky Nb pre rôzne tlaky.

Ďalší experiment prebiehal tak, že v nulovom magnetickom poli pri zafixovanej hodnote tlaku a meniacej sa teplote bol meraný elektrický odpor (Obr. 19). Následne bola zistená kritická teplota. Ako kritérium pre hodnotu kritickej teploty T_c bola zvolená hodnota teploty pri ktorej elektrický odpor vzorky dosahuje polovicu hodnoty pri prechode do supravodivého stavu.



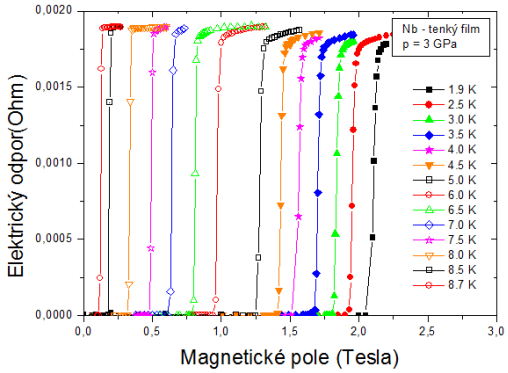
Obr. 19 Závislosť elektrického odporu masívnej vzorky Nb od teploty pri rôznom tlaku.

Na Obr. 20 je vynesená závislosť kritickej teploty masívnej vzorky Nióbu od externého tlaku pričom hodnota kritickej teploty pri nulovom tlaku bola získaná z tabuliek. Z grafu je zrejmé, že kritická teplota masívnej vzorky Nb s tlakom klesá.



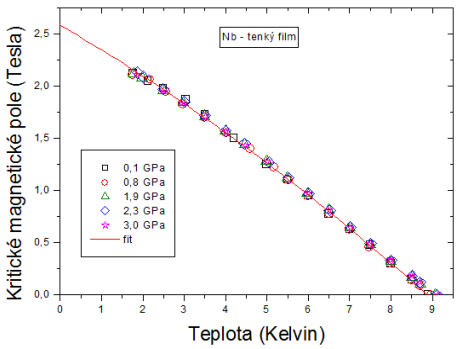
Obr. 20 Závislosť kritickej teploty masívnej vzorky Nb od tlaku.

Meranie elektrického odporu tenkého filmu Nb prebiehalo rovnako, ako u masívnej vzorky. Na Obr. 21 je graf závislosti elektrického odporu tenkého filmu Nb od aplikovaného magnetického poľa pri rôznych teplotách.



Obr. 21 Závislosť elektrického odporu vzorky od naloženého magnetického poľa pri rôznych teplotách pre tenký film Nb pod tlakom p = 3 GPa.

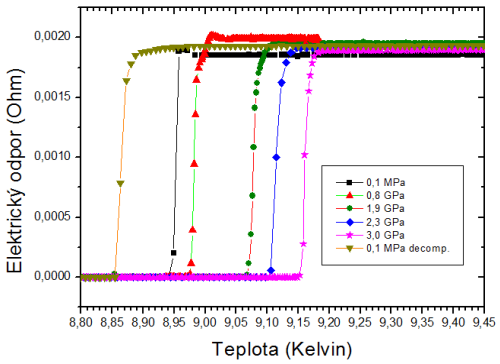
Každej hodnote teploty na grafe na Obr. 21 prislúcha jedna hodnota kritického poľa H_{c2}. Táto závislosť H_{c2} od T je vynesená na Obr. 22.



Obr. 22 Fázový diagram tenkého filmu Nb pri rôznom tlaku.

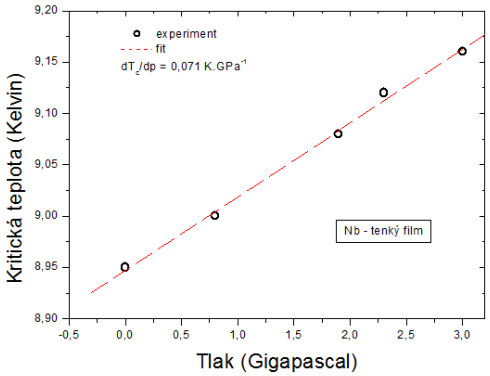
.

Na Obr. 22 je znázornený fázový diagram tenkého filmu Nb pri rôznych tlakoch. V rámci chyby merania sa tvar fázového diagramu a následne hodnota horného kritického poľa $H_{c2}(0)$ tenkého filmu nióbu s tlakom nemení. Na Obr. 23 je graf teplotnej závislosti elektrického odporu tenkého filmu Nb pri rôznych tlakoch. Bol pozorovaný nárast T_c s tlakom, avšak kritická teplota vzorky po uvoľnení externého tlaku späť na normálny bola menšia ako kritická teplota pred aplikovaním tlaku. Takéto správanie je spôsobené zmenou zrnitej štruktúry vplyvom tlaku (viď nižšie). Závislosť elektrického odporu od teploty po aplikovaní tlaku je na Obr. 23 označená 0,1 MPa decomp. a závislosť elektrického odporu pred aplikovaním tlaku je označená 0,1 MPa .



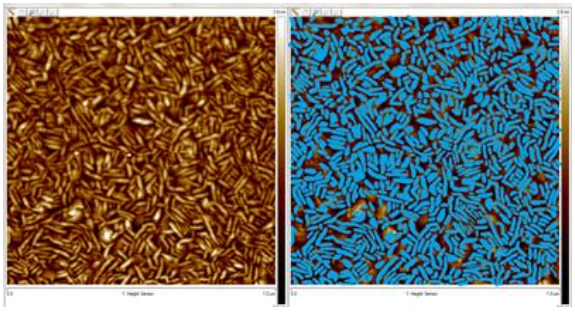
Obr. 23 Teplotné závislosti elektrického odporu tenkého filmu Nb pri rôznych tlakoch.

Na Obr. 24 je vynesená závislosť kritickej teploty tenkého filmu Nb od externého tlaku. Výsledná závislosť je preložená priamkou pomocou metódy najmenších štvorcov a má rastúci character.



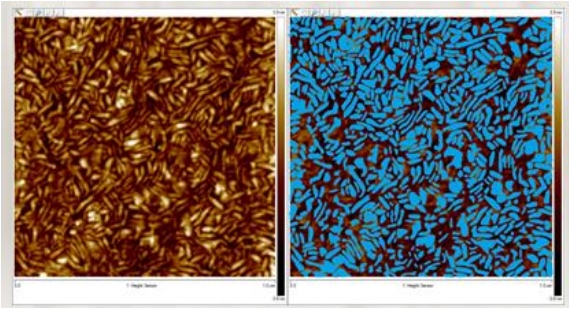
Obr. 24 Závislosť kritickej teploty tenkého filmu Nb od tlaku.

Štruktúra tenkého filmu Nb pred aplikovaním tlaku (Obr. 25) a po odtlakovaní experimentálnej komôrky (Obr. 26) bola pozorovaná AFM mikroskopom.



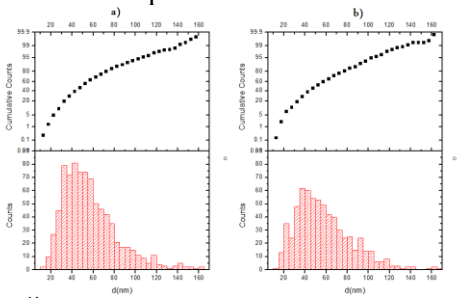
Obr. 25 Obraz tenkého filmu Nb urobený AFM mikroskopom pred aplikovaním tlaku. Na

pravom obrázku vidieť farebne zvýraznené zrná pre obrazovú analýzu.



Obr. 26 Obraz tenkého filmu Nb urobený AFM mikroskopom po odtlakovaní experimentálnej komôrky. Na pravom obrázku vidieť farebne zvýraznené zrná pre obrazovú analýzu.

Výsledné obrázky (Obr. 25 a Obr. 26 - vpravo) boli graficky spracované programom, ktorý vyhodnotil dĺžku a plochu zŕn.



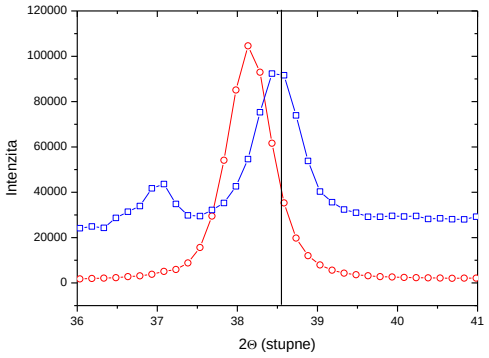
Obr. 27 Štatistické rozdelenie zŕn v tenkom filme nióbu: a) pred aplikovaním tlaku, b) po odtlakovaní experimentálnej komôrky.

Na Obr. 28 sú zhrnuté charakteristické parametre jednotlivých filmov.

Parametre	Naprášený film Nb	Film Nb po uvoľnení tlaku
Počet zŕn (1000 x 1000 nm^2)	835	667
Priemerná veľkosť zrna	56,96 nm	58,96 nm
Minimálna veľkosť zrna	14,7 nm	13,9 nm
Maximálna veľkosť zrna	163,6 nm	207,7 nm
Priemerná plocha zrna	863,9 nm^2	1000 nm^2
Minimálna plocha zrna	111,1 nm^2	97,6 nm^2
Maximálna plocha zrna	4252 nm^2	6696 nm^2
Plocha zŕn	721424,1 nm^2 (72,2%)	667384,9 nm^2 (66,7%)
Plocha medzi-zrnovej fázy	278575,9 nm^2 (27,8%)	332615,1 nm2 (33,3%)

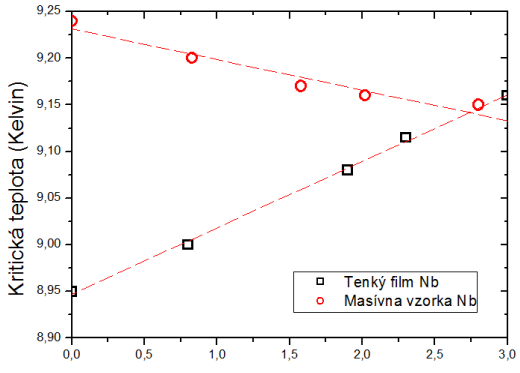
Obr. 28 zhrnutie charakteristických parametrov jednotlivých filmov.

Vidíme, že po uvoľnení tlaku sa zväčšila plocha jednotlivých zŕn ale došlo k zmenšeniu počtu zŕn a tým sa zmenšila aj celková plocha zŕn. Pozorovania povrchu tenkých filmov Nb pomocou AFM poukazujú na zmenu štruktúry filmu. Vzorky tenkého filmu Nb (jedna na ktorú nebol aplikovaný tlak a druhá na ktorú bol tlak aplikovaný) boli podrobené Röntgenovej difrakcii (Obr. 29).



Obr. 29 Spektrum Röntgenovej difrakcie pre tenký film Nb pred aplikovaním tlaku (červené krúžky) a po aplikovaní a uvoľnení tlaku (modré štvorce). Pre porovnanie je naznačená tabuľková hodnota pre masívnu vzorku čiernou čiarou.

Merania Röntgenovej difrakcie ukázali že, mriežková konštanta naprášeného filmu Nb je väčšia ako pre masívnu vzorku Nb. Po aplikovaní tlaku a následnom uvoľnení tlaku bola nameraná na filme mriežková konštanta, ktorá ma hodnotu blízku tabuľkovej hodnote masívnej vzorky Nb (označená čiernou čiarou na Obr. 29.) Hodnota smernice dT_c/dp = -32 mK/GPa, ktorú sme namerali pre masívnu vzorku sa pomerne dobre zhoduje s predchádzajúcimi meraniami, kde sa jej hodnota pohybovala medzi -16 a -25 mK/GPa [TF Smith 1970]. Opačné znamienko smernice dT_c/dp = 71 mK/GPa pre tenký film je pravdepodobne dôsledok zmeny mriežkovej konštanty filmu (ako ukázali merania Röntgenovej difrakcie).



Obr. 30 Porovnanie správania sa tenkého filmu a masívnej vzorky Nb.

Na jednej strane, zmenšenie mriežkovej konštanty filmu aplikovaním hydrostatického tlaku,

poukazuje na priblíženie sa k parametrom masívnej vzorky. Avšak po uvoľnení tlaku dostaneme nižšiu hodnotu T_c ako v prípade masívnej vzorky Nb a dokonca nižšiu ako pred aplikovaním tlaku na film Nb. Pozorovania povrchu tenkých filmov Nb pomocou AFM mikroskopu poukazujú na zmenu štruktúry filmu. Pravdepodobne nejde o zmenu elektrónovej štruktúry Nb resp. hustoty stavov na Fermiho hladine ako v prípade masívnej vzorky, ale o štrukturálnu zmenu, podobnú žíhaniu. Z toho vyplýva, že aplikovaním hydrostatického tlaku na tenký film Nb vieme zvýšiť T_c a priblížiť tak jeho hodnotu k hodnote masívnej vzorky. Pri tlakoch nad 3 GPa je hodnota T_c pre tenký film Nb dokonca vyššia ako v prípade masívnej vzorky. Tento rozdiel je však na úrovni našej presnosti merania teploty a preto by bolo vhodné overiť túto tendenciu aplikovaním vyššieho tlaku. Na to však bude potrebné použiť iný typ tlakovej komôrky. Po uvoľnení tlaku sa T_c zníži pod pôvodnú hodnotu aká bola pred aplikovaním tlaku a taktiež sa zmení štruktúra filmu ako aj mriežková konštanta, čo poukazuje na to že aplikovanie hydrostatického tlaku uvoľňuje napätia indukované v tenkom filme pri naprašovaní. Môžeme teda hovoriť o istom druhu žíhania aplikovaním tlaku.

5 Záver

Metódou DC magnetrónového naprašovania sme pripravili nióbové tenké filmy s hrúbkou 100 nm. Filmy sme následne merali viacerými experimentálnymi metódami ako napr. meranie elektrického odporu, Röntgenová difrakcia, analýza štruktúry pomocou AFM mikroskopu. Hlavným cieľom tejto práce bolo aplikovanie hydrostatického tlaku (do hodnoty 3 GPa) na tenký film a porovnať vplyv tlaku na supravodivé vlastnosti s masívnou vzorkou nióbu. Merania kritickej teploty T_c pod tlakom, ukázali úplne opačné správanie sa tenkého filmu a masívnej vzorky, kde sme dostali smernice dT_c/dp = 71 mK/GPa pre tenký film a dT_c/dp = -32 mK/GPa pre masívnu vzorku. Pri najvyššej hodnote tlaku okolo 3 GPa je dokonca hodnota T_c pre tenký film vyššia ako pre masívnu vzorku. Je preto dôležité aplikovať vyššiu hodnotu tlaku a sledovať či si tenký film zachová rastúcu tendenciu hodnoty T_c. Na to bude potrebné použiť iný druh tlakovej komôrky.

V prípade masívnej vzorky je pokles T_c spôsobený zmenou hustoty stavov na Fermiho hladine, resp. topologickou zmenou Fermiho hladiny [V. V. Sruzhkin, et al. 1997]. V prípade tenkého filmu sa jedná o zmenu štruktúry filmu. Z Röntgenovej difrakcie vieme, že mriežková konštanta naprášeného filmu je väčšia, ako v prípade masívnej vzorky, čo je spôsobené inou mriežkovou konštantou podložky nióbu. Takto pripravené filmy majú naindukované vnútorné pnutia. Aplikovaním tlaku a následným uvoľnením tlaku sa tieto pnutia uvoľnia, čo bolo potvrdené zmenšením hodnoty mriežkovej konštanty takéhoto filmu na hodnotu mriežkovej konštanty masívnej vzorky. Nie je jasné čo sa deje pri zvyšovaní hodnoty aplikovaného tlaku, avšak vieme ako sa zmení štruktúra filmu po odtlakovaní komôrky. Porovnaním AFM obrázkov filmu pred a po aplikovaní tlaku môžeme povedať, že film má väčší podiel medzi-zrnovej oblasti a taktiež sa zväčší priemerná veľkosť zrna. Efekt aplikovania tlaku je teda nereverzibilný a pôsobí podobne ako žíhanie, teda máme istý druh žíhania aplikovaním tlaku

Poďakovanie

Moje poďakovanie patrí vedúcemu práce RNDr. Slavomírovi Gabánimu, PhD. za odbornú pomoc a cenné pripomienky, ktoré mi pomohli pri vypracovaní tejto práce. Moje poďakovanie patrí aj RNDr. Gabrielovi Pristášovi, PhD za cenné konzultácie ohľadom supravodivosti. Taktiež poďakovanie patrí aj Dominikovi Jenikovi za pomoc pri grafickom spracovaní obrázkov z AFM mikroskopu. Zároveň ďakujem všetkým, ktorí mi akýmkoľvek spôsobom pomohli pri vypracovaní tejto práce.

Literatúra

[G.J. Sizoo and H.K. Onnes 1925] G.J. Sizoo and H.K. Onnes, (1925), Commun. *Phys. Lab*. Univ. Leiden, 180b, 13

[L.D. Jennings - C.A. Swenson 1958] L.D. Jennings - C.A. Swenson, (1958), Phys. Rev. 112, 31

[M. Eremets 1996] M. Eremets, (1996), High pressure experimental methods, *Oxford University Press*,

[J.S. Schilling and J.J. Hamlin 2008] J.S. Schilling and J.J. Hamlin, (2008), J. Phys. 121, 052006

[S. Deemyad et al 2003] S. Deemyad, T. Tomita, J.J. Hamlin, B.R. Beckett, J.S. Schilling, D.G. Hinks, J.D. Jorgensen, S. Lee, S. Tajima, (2003), *Physica* C 385, 105

[C.W. Chu et al 1987] C.W. Chu, P.H. Hor, R.L. Meng, L. Gao, Z.J. Huang, Y.Q. Wang, (1987), *Phys. Rev. Lett*. 58, 105

[M.K. Wu et al. 1987] M.K. Wu, J.R. Ashburn, C.J. Torng, P.H. Hor, R.L. Meng, L. Gao, Z.J. Huang, Y.Q. Wang, C.W. Chu, (1987) Phys. *Rev. Lett*. 58, 908

[L. Gao et al. 1994] L. Gao, Y. Xue, F. Chen, Q. Ziong, R.L. Meng, D. Ramirez, C.W. Chu, J.H. Egert, H.K. Mao, (1994), *Phys. Rev*. B 50 4260

[N.W. Ashcroft 2004] N.W. Ashcroft, (2004), *Phys. Rev. Lett*. 92 187001

[M.I. Eremets et al. 2008] M.I. Eremets, I.A. Trojan, S.A. Medvedev, J.S. Tse, Y. Yao, (2008), *Science* 319 1506

[K. Shimizu et al 2005] K. Shimizu, K. Amaya, N. Suzuki, (2005), *Phys. Soc. Japan* 74 1345

[S.S. Saxena, et al. 2000], S.S. Saxena, P. Agarwal, K. Ahilan, F. M. Grosche, R.K.W. Haselwimmer, M.J. Steiner, E. Pugh, I.R. Walker, S.R. Julian, P. Monthoux, G.G. Lonzarich, A. Huxley, I. Sheikin, D. Braithwaite, J. Flouquet, (2000) Nature 406 587

[J. Witting 1970], J. Witting, (1970), *Phys. Rev. Lett.* 24 (1970) 812

[Yamabuchi 2006] Yamabuchi, (2006), *J.Phys.Soc.Japan*

[L. Gao, et al. 1994] L. Gao, Y. Xue, F. Chen, Q. Ziong, R.L. Meng, D. Ramirez, C.W. Chu, J.H. Egert, H.K. Mao, (1994), *Phys. Rev*. B 50 4260

[TF Smith 1970] TF Smith, (1970), *Phys. Lett*. 33A, 465

[W. Gey 1969] W. Gey 1969 *Z. Phys*. 229, 85

[V. V. Sruzhkin, et al. 1997] V. V. Sruzhkin,Yuiri A. Timofeev,Russel J. Hemley, Ho-kwang Mao, (1997), *Phys. Rev. Lett* 79, 4262

[S. Bose et al. 2005] Sangita Bose, Pratap Raychaudhuri , Rajarshi Banerjee, Parinda Vasa, Pushan Ayyub, 2005, *Phys. Rev. Lett*. 95, 147003

[S. Bose et al. 2006] Sangita Bose ,Rajarshi Banerjee ,ArdaGenc ,Pratap Raychaudhuri , Hamish L Fraser, Pushan Ayyub (2006), *J.Phys,:Condens. Matter* 18, 4553

[S. Bose et al 20062] Sangita Bose, Pratap Raychaudhuri, Rajarshi Banerjee, Pushan Ayyub, (2006), *Phys. Rev. Lett*. B 74 224502

Vývoj metód merania exhalácie ^{222}Rn z pôdy

Ján Pánik*
Školiteľ: Karol Holý† , Monika Műllerová‡

Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

V tejto práci sa venujeme štúdiu rýchlosti exhalácie ^{222}Rn z pôdy. Merania sa uskutočňovali pred FMFI UK najmä akumulačnou metódou, ktorej základom je hromadenie sa radónu v akumulačnej nádobe.

Na základe bodových odberov, kontinuálnych záznamov a adsorpcii radónu na aktívnom uhlí sme určovali plošnú exhalačnú rýchlosť z objemových aktivít radónu (OAR) nameraných v akumulačnej nádobe. Takto určené exhalačné rýchlosti radónu sme porovnávali s teoreticky vypočítanými exhalačnými rýchlosťami.

Kľúčové slová: radón, objemová aktivita radónu (OAR), exhalačná rýchlosť, scintilačná komora, aktívne uhlie, kontinuálny monitor (AlphaGUARD).

1 Úvod

Fyzikálne a chemické charakteristiky robia z radónu dobrého stopovača rôznych environmentálnych procesov. Dôvodmi merania OAR a počítania exhalačných rýchlostí je niekoľko. Hlavnými sú najmä testovanie atmosférických transportných modelov na regionálnej alebo globálnej škále [Grossi et al., 2010], zostavenie máp exhalačných rýchlostí radónu [Grossi et al., 2010], určovanie zmiešavacej výšky v prízemných vrstvách atmosféry na základe variácií radónu v atmosfére [Holý et. al., 1999], určovanie exhalácie fosílneho CO_2 do atmosféry [Schmidt et al., 2003].

Radón je za atmosférických podmienok bezfarebný rádioaktívny inertný plyn bez chuti, zápachu a je rozpustný vo vode. Doba polpremeny ^{222}Rn je $T_{1/2}$ = 3,8 dňa. Je členom ^{238}U premenového radu a vzniká alfa premenou ^{226}Ra.

Keďže radón je inertný plyn, najčastejšie sa vyskytuje v atomárnej forme a nepredstavuje veľké riziko pre ľudský organizmus. Avšak jeho krátkožijúce produkty premeny (najmä ^{218}Po a ^{214}Po) sú kovy, ktoré sa na rozdiel od radónu viažu na aerosóly v ovzduší a následne sú vdychované do pľúc. Rádioaktívnou premenou izotopov polónia sú emitované α častice (^{218}Po s energiou 6 MeV a ^{214}Po s energiou 7,7 MeV), ktoré spôsobujú poškodenie pľúcnych buniek.

V prírode sa nachádzajú tri izotopy radónu: ^{219}Rn nazývaný aktinón, ^{220}Rn nazývaný torón a ^{222}Rn nazývaný radón. Aktinón ($T_{1/2}$ = 3,96 s) a torón ($T_{1/2}$ = 55,6 s) nie sú zvyčajne predmetom dozimetrických meraní, pretože majú veľmi krátku dobu polpremeny.

Merania exhalačných rýchlostí radónu sa uskutočňovalo pred FMFI UK. Využívali sme najmä akumulačnú metódu, ktorej základ tvorí akumulačná nádoba v tvare hrnca otočená dnom nahor a otvorenou časťou je pritlačená k pôdnemu povrchu.

Z bodových odberov, kontinuálneho monitoringu, adsorpcii radónu na aktívnom uhlí a z nárastových kriviek OAR v akumulačnej nádobe sme určovali plošné exhalačné rýchlosti. Jednotlivé metódy určenia exhalačných rýchlostí sú testované a navzájom porovnávané v nasledujúcich kapitolách.

2 Emanácia, emanačný koeficient a exhalačná rýchlosť

Radón sa dostáva do pôdneho vzduchu uvoľňovaním z pôdy a hornín, ktoré sú zdrojom ^{226}Ra. Hmotnostné aktivity ^{226}Ra sa v pôde pohybujú v rozmedzí 10 – 50 Bq/kg a v horninách asi 50 Bq/kg [Böhm, 2003]. Radón je z pôdy transportovaný konvekciou alebo difúziou do atmosféry, v ktorej je redistribuovaný rôznymi meteorologickými procesmi.

Pri premene ^{226}Ra na ^{222}Rn je emitovaná alfa častica s energiou 4,78 MeV. Atóm radónu v dôsledku spätného odrazu získava kinetickú energiu (~ 0,1 MeV), ktorá je 10 – 10^5 krát väčšia ako typická energia chemickej väzby [Böhm, 2003]. Vďaka získanej kinetickej energii môže radón uvoľnený z pôvodnej chemickej štruktúry migrovať k povrchu alebo defektom pôdneho zrna.

Radón uvoľnený z pôdneho zrna preniká do pôdnych pórov, defektov a trhlín. Tento fyzikálno –

* japan@zoznam.sk
† karol.holy@fmph.uniba.sk
‡ monika.mullerova@fmph.uniba.sk

chemický proces uvoľňovania radónu z pôvodnej štruktúry sa nazýva *emanácia.*

Koncentrácia radónu v pôdnom vzduchu je tvorená tými atómami radónu, ktoré prenikli až do pôdnych pórov. *Emanačný koeficient* (K_e) udáva pomer počtu atómov, ktoré sa dostanú do pórov k celkovému počtu atómov radónu, ktoré vzniknú rádioaktívnou premenou ^{226}Ra za jednotku času na jednotku objemu.

Ak je rozmer zrna podstatne väčší ako je dolet α častice, radón sa do pôdnych pórov nedostane. Ak je rozmer pórov oveľa menší ako je atóm radónu schopný prejsť, tak skončí v niektorom inom pôdnom zrne. Radón môže pôdne zrno radiačne poškodiť, čo môže značne uľahčiť jeho ďalší transport do pórov. Ak sú póry zaplnené vodou, atóm sa v nej zabrzdí a odtiaľ sa už ľahšie dostáva do vzduchu.

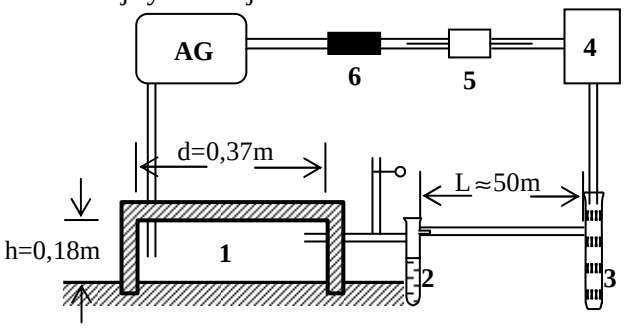
Miera transportu radónu cez povrch medzi pevnou látkou a atmosférou je vyjadrená *exhaláciou* radónu. Pevnou látkou môže byť pôda, stavebné materiály a pod., kým za atmosféru môžeme považovať uzavretú nádobu, budovu alebo otvorený vzduch. Exhalácia je kvantitatívne charakterizovaná *exhalačnou rýchlosťou* [Műllerová, 2005].

3 Metódy merania radónu

Exhalačná rýchlosť radónu z pôdy môže byť počítaná alebo priamo určená experimentálnym meraním.

Priame určovanie exhalačnej rýchlosti najčastejšie využíva akumulačnú metódu. Založená je na určovaní exhalačnej rýchlosti z hromadeného radónu v nádobe tvare hrnca, ktorá je otvorenou časťou pritlačená k povrchu pôdy [Holý et al., 2000]. V našom prípade boli rozmery akumulačnej nádoby nasledovné:
priemer d = 0,37 m a výška h = 0,18 m.

Schéma zapojenia aparatúry pre meranie exhalačnej rýchlosti je zobrazená na obr. 1:



Obr. 1: Schéma meracej aparatúry; 1 – akumulačná nádoba, 2 – vymrazovačka, 3 – silikagél, 4 – vzduchové čerpadlo, 5 – prietokomer, 6 – aerosólový filter, AG – AlphaGUARD.

OAR v akumulačnej nádobe bola určovaná na základe bodových odberov, kontinuálnych a integrálnych meraní.

Bodové odbery boli založené na odobratí cca 100 ml vzduchu do janetky z uzavretej akumulačnej nádoby v určitých časových intervaloch. Vzorka sa po odbere presunula do Lucasovej scintilačnej komory s objemom 125 ml a po dosiahnutí rádioaktívnej rovnováhy sa meraním zistila objemová aktivita ^{222}Rn v akumulačnej nádobe podľa vzťahu [Holý et. al., 1999]:

$$A = \frac{n_{vz} - n_p}{\varepsilon_d V_{vz}} e^{\lambda_{Rn} t_{0m}} \frac{\lambda_{Rn} t_m}{1 - e^{-\lambda_{Rn} t_m}} \qquad (1)$$

kde: n_{vz} – početnosť od vzorky, n_p – početnosť od pozadia, ε_d – účinnosť scintilačnej komory, V_{vz} – objem meranej vzorky, λ_{Rn} – premenová konštanta ^{222}Rn, t_{0m} – doba od odberu vzorky do začiatku merania vzorky, t_m – doba merania vzorky.

Kontinuálne merania boli uskutočňované pomocou profesionálneho monitoru radónu – AlphaGUARD-u, ktorý zaznamenával OAR v akumulačnej nádobe v 10 minútových cykloch.

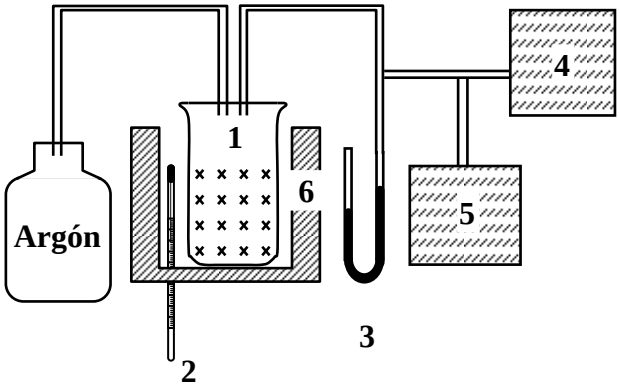
Integrálne merania OAR v akumulačnej nádobe sa uskutočňovali metódou adsorpcie radónu na aktívnom uhlí. Vzorkovnica s aktívnym uhlím mala nasledovné rozmery: výška h = 6,6 cm a priemer d = 5,2 cm. V hornej časti vzorkovnice sa nachádzal filter o priemere 3 cm, cez ktorý difundoval radón dovnútra vzorkovnice. Vzorkovnica obsahovala približne 60 g aktívneho uhlia v tvare valčekov a počas merania sa umiestňovala na dno akumulačnej nádoby [Műllerová et al., 2006]. Aby sa mohla určiť OAR zachytená na aktívnom uhlí, musel sa vykonať prevod radónu z aktívneho uhlia do litrovej scintilačnej komory Lucasovho typu. Z exponovaného uhlia sa odobrala časť, ktorá bola v nádobe vložená do elektrickej piecky. Táto vzorka sa zahrievala na 400 – 500 °C po dobu asi 10 minút. Adsorbovaný radón sa uvoľňoval a hromadil nad uhlím a postupne sa nasával do evakuovanej scintilačnej komory. Nakoniec sa nádoba s aktívnym uhlím a aj celá meracia aparatúra (obr. 2) prefúkla argónom [Holý et al., 1995; Műllerová et al., 2006].

Celková aktivita radónu, zachytená na aktívnom uhlí sa určovala podľa vzťahu [Műllerová et al., 2006]:

$$A_{v,c} = \frac{n_{vz} - n_p}{\varepsilon_p \varepsilon_d} \frac{m_c}{m_{vz}} e^{\lambda_{Rn} t_{e,m}} \frac{\lambda_{Rn} t_m}{1 - e^{-\lambda_{Rn} t_m}} \qquad (2)$$

kde: n_{vz} – početnosť od vzorky, n_p – početnosť od pozadia, m_c – celková hmotnosť aktívneho uhlia v

nádobe exponovanej radónom, ε_p – účinnosť prevodu ^{222}Rn z aktívneho uhlia do scintilačnej komory, ε_d – účinnosť detektora, m_{vz} – hmotnosť aktívneho uhlia umiestneného do nádoby na analýzu, λ_{Rn} – konštanta premeny ^{222}Rn, $t_{e,m}$ – doba od skončenia expozície aktívneho uhlia po začiatok merania vzorky, t_m – doba merania vzorky.



Obr. 2: Schéma aparatúry na prevod ^{222}Rn z aktívneho uhlia do scintilačnej komory; 1 – nádoba s analyzovaným aktívnym uhlím, 2 – teplomer, 3 – manometer, 4 – scintilačná komora, 5 – vákuová výveva, 6 – elektrická piecka.

Z celkovej aktivity radónu zachytenej na aktívnom uhlí bola počas doby expozície aktívneho uhlia určená priemerná objemová aktivita radónu v akumulačnej nádobe podľa vzťahu [Műllerová et al., 2006]:

$$A_V = \frac{\lambda^* A_{V,C}}{K'\left(1 - e^{-\lambda^* t}\right)} \qquad (3)$$

kde:
$K' = \left(1{,}52 \cdot 10^{-7} \pm 5 \cdot 10^{-9}\right) m^3 \cdot s^{-1}$,
$\lambda^* = \left(1{,}9 \cdot 10^{-6} \pm 1 \cdot 10^{-7}\right) s^{-1}$ a t – doba expozície aktívneho uhlia v akumulačnej nádobe.

V ďalšej časti práce sú porovnávané výsledky určenia exhalačných rýchlostí na základe teoretických výpočtov a tiež rôznych spôsobov merania OAR v akumulačnej nádobe.

4 Teoretické výpočty exhalačnej rýchlosti

Radón je v podpovrchovej vrstve pôdneho vzduchu transportovaný hlavne molekulárnou difúziou. Pri difúznom transporte má plyn tendenciu presúvať sa v smere poklesu gradientu jeho koncentrácie. Tento jav je kvantitatívne opísaný Fickovým zákonom [UNSCEAR, 1982]:

$$j = \left(F_p - w\right) D_{ef} \nabla_C \qquad (4)$$

kde: j – hustota toku radónu, F_p – totálna porozita pôdy, w – objemová vlhkosť pôdy, D_{ef} – efektívny difúzny koeficient radónu, ∇_C – gradient koncentrácie radónu.

V prípade radónu v pôdnom vzduchu treba brať do úvahy tvorbu a pokles koncentrácie v dôsledku rádioaktívnej premeny. Za predpokladu, že sú koncentrácia radónu v smere x a y, a efektívny difúzny koeficient nezávislé, potom je zmena koncentrácie C_{Rn} v pôdnom vzduchu v hĺbke z a v čase t opísaná rovnicou [Holý et al., 2000; Nazaroff, 1988; UNSCEAR, 1982]:

$$\frac{dC_{Rn}}{dt} = D_{ef} \cdot \frac{d^2 C_{Rn}}{dz^2} + \frac{K_e \cdot \lambda_{Ra} \cdot C_{Ra}}{F_p - w} - \lambda_{Rn} \cdot C_{Rn} \qquad (5)$$

kde: C_{Ra}, C_{Rn} – koncentrácie ^{226}Ra a ^{222}Rn, D_{ef} – efektívny difúzny koeficient radónu, z – hĺbka merania, K_e – emanačný koeficient radónu, λ_{Ra}, λ_{Rn} – premenové konštanty ^{226}Ra a ^{222}Rn, F_p – totálna porozita pôdy, w – objemová vlhkosť pôdy.

Zahrnutím okrajových podmienok: koncentrácia radónu na povrchu je blízka nule, resp. nulová a koncentrácia radónu vo veľkej hĺbke je konštantná; dostaneme vzťah (6), ktorý je riešením vzťahu (5) [Holý et al., 1999; Holý et. al., 2000]:

$$A_{V,Rn}(z) = \frac{K_e \cdot A_{V,Ra}}{F_p - w}\left(1 - e^{-\frac{z}{L}}\right) \qquad (6)$$

kde: $A_{V,Rn}$ – objemová aktivita ^{222}Rn v hĺbke z, $A_{V,Ra}$ – objemová aktivita ^{226}Ra, $L = \sqrt{D_{ef} / \lambda_{Rn}}$ – difúzna dĺžka radónu v pôde.

Exhalačnú rýchlosť radónu z povrchu pôdy môžeme získať, ak vynásobíme Fickov zákon (4) premenovou konštantou λ_{Rn}. Dosadením rovnice (6) do takto upravenej rovnice (4) s podmienkou z = 0 je možné získať exhalačnú rýchlosť radónu na povrchu v jednotkách $Bq \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ v nasledovných tvaroch [Holý et. al., 1999; UNSCEAR, 1982]:

$$E_{S,Rn} = \lambda_{Rn} \cdot K_e \cdot A_{m,Ra} \cdot \rho_d \cdot L \qquad (7)$$

$$E_{S,Rn} = \lambda_{Rn} \cdot \left(F_p - w\right) \cdot A_{S,Rn} \cdot L \qquad (8)$$

$$E_{S,Rn} = \frac{A_{V,Rn}(z)}{z} \cdot \left(F_p - w\right) \cdot D_{ef} \qquad (9)$$

kde: $L = \sqrt{D_{ef} / \lambda_{Rn}}$ – difúzna dĺžka radónu v pôde, ρ_d – hustota pôdy, $A_{V,Rn}(z)$ – objemová aktivita ^{222}Rn v hĺbke z, $A_{m,Ra}$ – hmotnostná aktivita ^{226}Ra v pôde, λ_{Rn} – premenová konštanta ^{222}Rn, $A_{S,Rn}$ – saturovaná hodnota objemovej aktivity ^{222}Rn v pôde, F_P – totálna porozita pôdy, D_{ef} – efektívny difúzny koeficient, w – objemová vlhkosť pôdy, K_e – emanačný koeficient radónu.

Pri výpočtoch exhalačných rýchlostí podľa vzťahov (7) – (9) môžeme použiť buď namerané hodnoty difúznej dĺžky L, alebo vypočítaného efektívneho difúzneho koeficientu D_{ef}, na základe ktorého môžeme tiež vypočítať teoretickú hodnotu difúznej dĺžky zo vzťahu $L = \sqrt{D_{ef} / \lambda_{Rn}}$.

Efektívny difúzny koeficient D_{ef} v jednotkách [m^2/s] môžeme vypočítať podľa nasledovného vzťahu [NRC, 1984]:

$$D_{ef} = 7 \cdot 10^{-6} \cdot e^{-4\left(m - F_P^2 \cdot m + m^5\right)} \qquad (10)$$

kde: $m = w/F_P$

Pri výpočte exhalačnej rýchlosti radónu podľa vzťahu (9) stačí poznať nárast OAR v hĺbke niekoľkých desatín metra, netreba poznať údaje o hmotnostnej aktivite ^{226}Ra, saturovanej hodnote aktivity ^{222}Rn, emanačnom koeficiente K_e a hustote pôdy ρ_d.

Exhalačná rýchlosť ^{222}Rn z pôdy môže byť vypočítaná aj na základe empirického vzťahu (11), ktorý navrhol Szegvary a kol. [Szegvary, 2009]:

$$E_{S,Rn} = \frac{0{,}89\,\dot{D}\left[\mathrm{nSv\,h^{-1}}\right] - 11{,}01}{3600} \qquad (11)$$

kde: $\dot{D}$ – terestriálny dávkový príkon nameraný vo výške 1 m nad zemským povrchom.

Vzťahy (7) až (9) a (11) umožňujú teoretické počítanie exhalačných rýchlostí. Pre priemerné hodnoty charakterizujúce pôdu pred FMFI UK [Holý et al., 1996; Holý et al., 2001; Ridziková, 2001]:

$A_{m,^{226}Ra} \approx (37{,}6 \pm 2{,}5)\,\mathrm{Bq/kg}$, $F_p \approx 0{,}5 \pm 0{,}02$, $\dot{D} \approx (65 \pm 2{,}6)\,\mathrm{nGy/h}$, $\rho_d \approx (1225 \pm 25{,}6)\,\mathrm{kg/m^3}$, $K_e \approx 0{,}145 \pm 0{,}05$, $D_{ef} \approx (2{,}32 \pm 0{,}36) \cdot 10^{-6}\,\mathrm{m^2/s}$, $\lambda_{Rn} = 2{,}1 \cdot 10^{-6}\,\mathrm{s^{-1}}$, $A_{S,Rn} \approx (24 \pm 3)\,\mathrm{kBq/m^3}$, $A_{V,Rn}(15\mathrm{cm}) \approx 3\,\mathrm{kBq/m^3}$, $L \approx (1{,}1 + 0{,}1)\,\mathrm{m}$, $w = 0{,}18 \pm 0{,}02$ možno dostať nasledujúce exhalačné rýchlosti radónu z pôdy:

- Podľa (7): $E_{S,Rn} = (15{,}4 \pm 5{,}6)\,\mathrm{mBq \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}}$
- Podľa (8): $E_{S,Rn} = (17{,}7 \pm 3{,}2)\,\mathrm{mBq \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}}$
- Podľa (9): $E_{S,Rn} = (14{,}9 \pm 3{,}0)\,\mathrm{mBq \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}}$
- Podľa (11): $E_{S,Rn} = (13{,}0 \pm 0{,}6)\,\mathrm{mBq \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}}$

Všetky vypočítané hodnoty exhalačnej rýchlosti radónu sú v rámci neistôt ich určenia v dobrej zhode.

5 Priame určenie exhalačnej rýchlosti z nárastových kriviek OAR

Exhalačnú rýchlosť radónu možno určiť z nárastových kriviek objemových aktivít radónu v akumulačnej nádobe. Po uzavretí akumulačnej nádoby sa sleduje vzrastajúca objemová aktivita na základe bodových odberov vykonávaných v určité časové intervaly alebo kontinuálneho merania až po saturovanú hodnotu. V akumulačnej nádobe je časová zmena koncentrácie radónu vyjadrená vzťahom [Dörr, 1990; Holý et al., 2000]:

$$\frac{dc}{dt} = \frac{E_{S,Rn} \cdot S}{V} - \lambda_{Rn} \cdot c - \lambda_b \cdot c \qquad (12)$$

kde: S – plocha základne akumulačnej nádoby, V – objem akumulačnej nádoby, λ_{Rn} – premenová konštanta ^{222}Rn, λ_b – konštanta charakterizujúca spätnú difúziu radónu do pôdy a únik atómov radónu z meracieho systému, pričom platí: $\lambda^* = \lambda_{Rn} + \lambda_b$.

Riešením vzťahu (12) s počiatočnými podmienkami c (t = 0) = 0 získame vzťah (13), ktorý sa používa na experimentálne určovanie exhalačnej rýchlosti prostredníctvom fitovania nárastových kriviek objemových aktivít radónu v akumulačnej nádobe [Holý et al., 2000]:

$$A_{V,Rn} = \frac{E_{S,Rn} \cdot S}{V \cdot \lambda^*} \cdot \left(1 - e^{-\lambda^* \cdot t}\right) \qquad (13)$$

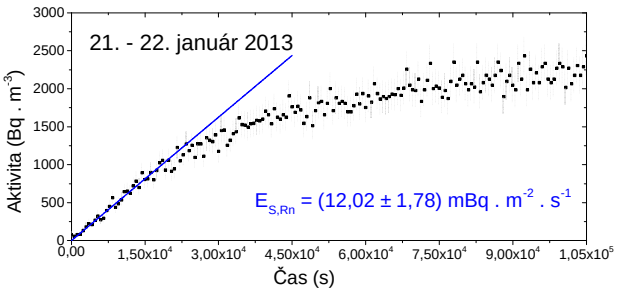
Z uvedeného vzťahu jednoznačne vyplýva nutnosť použitia exponenciálneho nárastu OAR v akumulačnej nádobe, tzn. merať OAR až po jej saturovanú hodnotu pre určenie exhalačnej rýchlosti.

Pre prípad, že súčin $\lambda^* \cdot t \leq 0{,}2$ ($t \approx 2 - 5$ hod), dostaneme limitný prípad vzťahu (13), ktorý je vyjadrený v nasledovnom tvare:

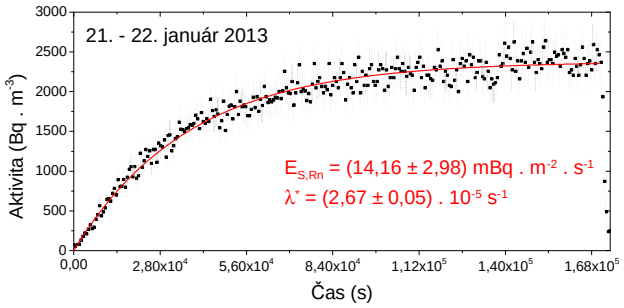
$$A_{V,Rn} = \frac{E_{S,Rn} \cdot S}{V} \cdot t \qquad (14)$$

Z tohto vzťahu vyplýva možnosť použitia lineárneho nárastu OAR na určenie exhalačnej rýchlosti radónu z pôdy.

Pre ilustráciu je na nasledujúcich obrázkoch (obr. 3 a obr. 4) určená exhalačná rýchlosť z experimentálnych meraní vykonaných pred FMFI UK v januári 2013 na základe lineárneho a exponenciálneho nárastu objemovej aktivity radónu v akumulačnej nádobe.



Obr. 3: Nárast OAR v akumulačnej nádobe a lineárny fit podľa vzťahu (14) .



Obr. 4: Nárast OAR v akumulačnej nádobe a exponenciálny fit podľa vzťahu (13).

Hodnoty exhalačných rýchlostí určených na základe lineárneho a exponenciálneho nárastu OAR v akumulačnej nádobe sú nasledovné:

- $E_{S,Rn} = (12{,}0 \pm 1{,}8)\ \mathrm{mBq \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}}$ (podľa lineárneho nárastu)
- $E_{S,Rn} = (14{,}2 \pm 3{,}0\ \mathrm{mBq}) \cdot \mathrm{m^{-2} \cdot s^{-1}}$ (podľa exponenciálneho nárastu)

Z uvedených hodnôt vidieť celkom dobrú zhodu s teoreticky vypočítanými hodnotami exhalačných rýchlostí v 4. kapitole.

6 Priame určenie exhalačnej rýchlosti z integrálnych meraní

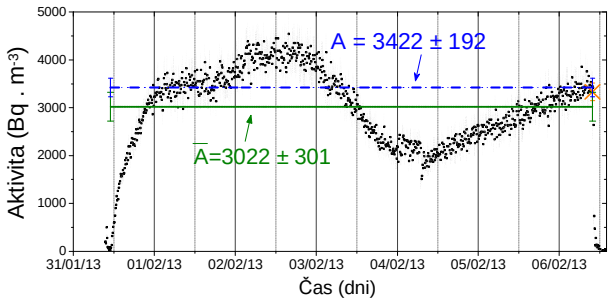
Integrálne merania OAR v akumulačnej nádobe boli založené na adsorpcii radónu na aktívnom uhlí. Priemerné hodnoty OAR v akumulačnej nádobe sme potom počítali podľa vzťahov (2) a (3), ktoré sú uvedené v kapitole 3.

Grossi a kol. [Grossi et al., 2010] uvádza vzťah, na základe ktorého je možné určiť exhalačnú rýchlosť z integrálnych meraní, ktoré poskytujú priemerné hodnoty OAR v akumulačnej nádobe. Integráciou vzťahu (13) možno dostať vzťah, ktorý dáva do súvisu priemernú hodnotu OAR a exhalačnú rýchlosť:

$$\overline{A_{Rn}} = \frac{E_{S,Rn} \cdot S}{V \cdot \lambda^*} \left[1 - \frac{1 - e^{-\lambda^* \cdot T}}{\lambda^* \cdot T} \right] \qquad (15)$$

kde: $\overline{A_{Rn}}$ – priemerná hodnota OAR v akumulačnej nádobe, T – doba expozície aktívneho uhlia, $E_{S,Rn}$ – plošná exhalačná rýchlosť, S – plocha základne akumulačnej nádoby, V – objem akumulačnej nádoby a meracej trasy.

Na obr. 5 je zobrazený záznam z hromadenia OAR v akumulačnej nádobe v období 31.1.2013 až 6.2.2013. Kontinuálny záznam OAR bol vykonaný pomocou AlphaGUARD-u. Popri kontinuálnom meraní sa tiež uskutočňovali kontrolné bodové odbery pre meranie OAR. V akumulačnej nádobe bolo počas uvedenej doby exponované aj aktívne uhlie.



Obr. 5: Kontinuálny záznam OAR v akumulačnej nádobe. Údaj znázornený krížikom (X) zodpovedá OAR zistenej na základe bodového odberu. Čiary zodpovedajú priemerným hodnotám OAR získanými na základe merania pomocou aktívneho uhlia (- - - -) a AlphaGUARD-u (——).

Z grafu vidieť, že OAR určené na základe bodových odberov v rámci svojej neistoty merania dobre korešpondujú s kontinuálnym záznamom. Priemerná hodnota objemovej aktivity radónu určená pomocou aktívneho uhlia po celú dobu expozície má nasledovnú hodnotu:

$A = (3422 \pm 192)\ \mathrm{Bq/m^3}$. Aritmetický priemer OAR vypočítaný z kontinuálneho merania pomocou AlphaGUARD-u je nasledovný: $\overline{A} = (3022 \pm 301)\ \mathrm{Bq/m^3}$.

Zo získaných priemerných údajov OAR sme pomocou vzťahu (15) určili exhalačné rýchlosti, ktoré boli porovnané s hodnotami $E_{S,Rn}$ určenými z lineárneho a exponenciálneho nárastu OAR v akumulačnej nádobe:

- $E_{S,Rn} = (36{,}6 \pm 2{,}4)\ \mathrm{mBq \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}}$ (aktívne uhlie)
- $E_{S,Rn} = (32{,}3 \pm 3{,}4)\ \mathrm{mBq \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}}$ (aritmetický priemer)
- $E_{S,Rn} = (36{,}6 \pm 3{,}8)\ \mathrm{mBq \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}}$ (podľa exponenciálneho nárastu)
- $E_{S,Rn} = (34{,}3 \pm 3{,}9)\ \mathrm{mBq \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}}$ (podľa lineárneho nárastu)

Z výsledkov je zrejmé, že všetky použité metódy dávajú hodnoty exhalačnej rýchlosti radónu v rámci neistôt merania v dobrom súlade. Avšak tieto hodnoty exhalačných rýchlostí sú viac ako dvakrát vyššie ako tie, ktoré boli zistené v druhej polovici januára 2013.

Môže to súvisieť s meniacimi sa meteorologickými podmienkami (zrážky, zmeny teploty, snehová pokrývka, atď.). Zvýšené hodnoty exhalačnej rýchlosti boli zistené aj pri ďalších meraniach v zimných a jarných mesiacoch v roku 2013.

Týmto výsledkom bude treba venovať ďalšiu pozornosť už aj preto, že exhalačná rýchlosť radónu z pôdy sa považuje za málo meniacu sa počas roka.

7 Záver

V práci sú porovnané rôzne metódy určovania exhalačnej rýchlosti – teoretické počítanie exhalačnej rýchlosti, určovanie exhalačnej rýchlosti na základe získaných priemerných hodnôt OAR z aktívneho uhlia a určenie exhalačnej rýchlosti z lineárneho a exponenciálneho nárastu OAR v akumulačnej nádobe.

Exhalačné rýchlosti radónu z pôdy vypočítané zo vzťahov (7) – (9) a (11) sú navzájom v dobrej zhode. Rovnako sú tieto vypočítané hodnoty exhalačných rýchlostí v zhode s výsledkami priameho určenia exhalačných rýchlostí z nárastových kriviek OAR v akumulačnej nádobe. Testovanie metódy určovania exhalačnej rýchlosti na základe integrálneho merania OAR v akumulačnej nádobe ukázalo, že táto metóda je rovnako dobre použiteľná pre určovanie exhalačných rýchlostí ako metódy založené na fitoch hromadenia OAR v akumulačnej nádobe.

Výhoda tejto metódy je hlavne v tom, že je aplikovateľná pre rozsiahlejšie poľné merania, ktoré je spravidla nemožné realizovať pomocou kontinuálneho monitoru radónu z finančných dôvodov.

Ukázali sme tiež, že pre určenie priemernej hodnoty OAR nahromadenej v akumulačnej nádobe je vhodná metóda založená na adsorpcii radónu na aktívnom uhlí.

Výsledky práce tiež ukázali, že údaje o exhalačnej rýchlosti radónu z pôdy pre rozsiahlejšie územia, ktoré sú potrebné napr. pre testovanie atmosférických modelov, je možné získať tiež z údajov o distribúcii ^{226}Ra v pôde alebo z meračov dávkových príkonov používaných v monitorovacej sieti včasného varovania, ktoré spravidla pokrývajú väčšie územné celky.

Poďakovanie

Chcel by som sa poďakovať svojim školiteľom doc. RNDr. Karolovi Holému, CSc. a RNDr. Monike Műllerovej, PhD. za odborné vedenie pri vypracovávaní tejto práce, za poskytnutie cenných rád, za pomoc pri meraniach v laboratóriu a najmä za prejavenú trpezlivosť.

Literatúra

[Böhm, 2003] Radoslav Böhm, *Dizertačná práca, Modelovanie radiačného rizika indukovaného radónom a zdrojmi Augerových elektrónov,* Bratislava, 2003.

[Dörr, 1990] Dörr, H. – MÜNNICH, K.O. 1990. *^{222}Rn flux and soil air concentration profiles in West-Germany. Soil ^{222}Rn as tracker for gas transport in the unsaturated soil zone*. In Tellus B. Volume 42, Issue 1. 20-28 s.

[Grossi et al., 2010] Grossi, C., et al., *Inter-comparison of different direct and indirect methods to determine radon flux from soil, Radiation Measurements (2010),* doi: 10.1016/j.radmeas.2010.07.021.

[Holý et al., 1995] K. Holý, I. Sýkora, M. Chudý, A. Polášková, J. Fejda, O. Holá: *Radionuclide Content in Some Bulding Materials and Their Radon Exhalation*, J. Radioanal. Nucl. Chem., Letters 199 (4), (1995) pp. 251-263.

[Holý et al., 1996] K. Holý, R. Böhm, A. Polášková, J. Štelina, O. Holá, I. Sýkora: *Average Daily and Annual Courses of ^{222}Rn Concentration in Some Natural Medium*, Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, Articles, 209, No. 2 (1996) 315-323.

[Holý et. al., 1999] K. Holý, M. Chudý, A. Šivo, M. Richtáriková, A. Polášková, R. Böhm, I. Bosá, O. Holá, T. Stanys, P. Petruf, P. Vojtyla: *Investigations of ^{14}C and ^{222}Rn variations in*

atmosphere and soil in Slovakia, Final Report for the IAEA, Research Contract No. 9093/RB, UK-JF-129/99, Bratislava (1999) 109 p.

[Holý et al., 2000] K. Holý, M. Matoš, T. Stanys, O. Holá, A. Polášková, I. Bosá: *Testing of the ^{222}Rn as a Tool for Determination of CO_2 Exhalation Rates from the Soil*, Zborník 2. Banskoštiavnické dni, Banská Štiavnica 6. – 7. 10. 2000.

[Holý et al., 2001] K. Holý, A. Ridziková, A. Polášková, T. Stanys, I. Bosá, O. Holá: *Temporal variability of some radon characteristics of the soil*, Conference Proceedings of the XXIV. Days of Radiation Protection, Jasná pod Chopkom, 2001.

[Műllerová, 2005] Monika Műllerová, *Diplomová práca, Komplexná radónová diagnostika uzatvorených priestorov*, Bratislava, 2005.

[Műllerová et al., 2006] M. Műllerová, K. Holý, A. Polášková: *Vysokocitlivá integrálna metóda určovania objemovej aktivity ^{222}Rn na báze aktívneho uhlia*, 7. Banskoštiavnické dni 2005: Zborník, Senec: ISK (2006) pp. 44-50.

[Nazaroff, 1988] W. W. Nazaroff, B. A. Moed and R. G. Sextro: *Soil as a Source of Indoor Radon: Generation, Migration and Entry, In Radon and its Decay Products in Indoor Air*, Eds. W. W. Nazaroff and A. W. Nero, New York: John Wiley and Sons (1988).

[NRC, 1984] Nuclear Regulatory commission, *Characterization of Uranium Tailings Cover Materials for Radon Flux Reduction*, Rep. NUREG/CR – 1081, USNRC, Washington, DC, 1984.

[Ridziková, 2001] Anežka Ridziková, *Diplomová práca, Štúdium exhalácia ^{222}Rn z pôdy*, Bratislava, 2001.

[Schmidt et al., 2003] Schmidt, M., R. Graul, H. Sartorius, and I. Levin, *The Schauinsland CO_2 record: 30 years of continental observations and their implications for the variability of the European CO_2 budget*, J. Geophys. Res., 108(D19), 4619, doi:10.1029/2002JD003085, 2003.

[Szegvary, 2009] T. Szegvary, F. Conen, P. Ciais, *Atmospheric environment, European ^{222}Rn inventory for applied atmospheric studies*, 2009.

[UNSCEAR, 1982] United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation, *Ionizing Radiation: Sources and biological effects*. United Nations, New York, 1982.

Meranie vodivostí roztokov chloridu sodného a kyseliny akrylovej a volt-ampérovej charakteristiky vodného výboja v roztoku NaCl

Tomáš Polakovič[1*]

Školiteľ: Andrej Buček[1†]

Katedra experimentálnej fyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina 842 48 Bratislava

Abstrakt: Roztoky kyseliny akrylovej (kyseliny prop-2-énovej) a chloridu sodného sa hojne využívajú v priemysle alebo, v prípade roztokov *NaCl*, predstavujú pracovné prostredie v oblasti ťažby a geologického vŕtania. S nástupom plazmových technológií sa začali hľadať postupy využívajúce výboje práve v týchto roztokoch za rôznymi účelmi, ako napríklad depozícia polymérnych vrstiev (akrylátov) na povrchy materiálov ekologicky menej zaťažujúcimi cestami. Efektivita týchto procesov závisí okrem iných parametrov aj od vodivosti daných roztokov.
Práca sa zaoberá meraním a čiastočnou kvantifikáciou závislostí vodivosti roztokov od ich koncentrácií a teploty.

Kľúčové slová: impedančná spektroskopia, vodivosť roztokov, plazma, vodný výboj

1 Úvod

S rozšírením sa vysoko výkonných impulzných zdrojov sme schopní generovať plazmu nie len v plynoch pri atmosférickom tlaku, ale aj v kvapalinách [Lisitsyn et al., 1999], kde majú potenciálne veľa využití, napríklad v ťažobnom priemysle na rozrušovanie pôdy a hornín pri hĺbkových vrtoch alebo (pri tepelne nerovnovážnej plazme) ako zdroj chemicky aktívnych častíc, zdroj ozónu alebo ako zdroj silných elektrických polí a UV žiarenia, ktoré sa používajú na sterilizáciu vody alebo mlieka [Akiyama, 2000]. Dopyt po týchto technikách a snaha o ich efektivizáciu narastajú s narastajúcimi nárokmi na ekonomickosť a znižovanie ekologickej záťaže pri výrobe, čo sú veľké výhody opracovávania materiálov plazmou.

2 Teoretická časť

2.1 Výboje vo vodnom prostredí

Pri formovaní vodných výbojov sú dôležité dva mechanizmy:

1. Termálny mechanizmus, pri ktorom sa začne roztok zahrievať v dôsledku tečúceho elektrického prúdu. Pri dosiahnutí dostatočnej energie začne roztok vrieť a v jeho objeme sa začnú formovať bubliny pary, v ktorých dôjde k zapáleniu difúzneho výboja (kvôli malým rozmerom bublín samotných), ktorý po čase prejde do streameru, ako sa objem bublín začne zväčšovať [Touya et al., 2006].

2. Elektrický mechanizmus, kde dôjde k vzniku elektrónovej lavíny priamo v objeme vody, podobne ako v plynných prostrediach [Beroual et al., 1998].

Aj keď zahrnieme oba mechanizmy, formovanie streamerov v kvapalných prostrediach je oblasť, v ktorej sa stále robí intenzívny výskum a celkový mechanizmus ešte nie je úplne vysvetlený [Katsuki et al., 2002] [Beroual et al., 1998] [Lisitsyn et al., 1999]. Predošlé experimenty ale naznačujú, že stabilita a uniformita veľko-objemových streamerov je ovplyvňovaná vodivosťou prostredia [Akiyama, 2000].

2.2 Vodivosť roztokov

Vodivosť roztokov, ako veličina, definuje schopnosť viesť prúd, kde nosičmi náboja sú disociované katióny a anióny. S narastajúcou koncentráciou sa zvyšuje aj vodivosť roztoku, jav, ktorý sa aproximuje na základe Debye-Hückelovej teórie, špecificky podľa Debye-Hückelovej rovnice [Atkins, 2000]:

$$\Delta_m = \Delta_m^0 - K\sqrt{c_m} \tag{1}$$

kde K je empirická konštanta, c_m molárna koncentrácia a Δ_m^0 limitujúca molárna vodivosť. Molárne vodivosti sa vyjadria ako

$$\Delta_m = \frac{\kappa}{c_m} \tag{2}$$

kde κ je vodivosť roztoku. Prípadne sa môže použiť rozšírenie na Debye-Hückel-Onsagerov vzťah v

*tom.polakovic@gmail.com

†bucek@gimmel.ip.fmph.uniba.sk

tvare:

$$\Delta_m = \Delta_m^0 - (A + B\Delta_m^0)\sqrt{c_m} \quad (3)$$

kde A a B sú konštanty závislé od stavových veličín roztoku, jeho viskozity, dielektrickej pevnosti a veľkostí nábojov iónov. Dôležité je podotknúť, že vzťah (1) a (3) platí iba pre silné elektrolyty ako soli alebo silné kyseliny a zásady a výsledná závislosť molárnej vodivosti od molárnej koncentrácie je veľmi slabá [Atkins, 2000].

V prípade, že koncentrácia iónov je menšia ako koncentrácia roztoku samotného, tak sa mechanizmus prenosu prúdu mení. Pri slabých monokarboxylových kyselinách alebo slabých zásadách uplatňuje Ostwaldtov zákon v tvare [Atkins, 2000]:

$$\frac{1}{\Delta_m} = \frac{1}{\Delta_m^0} + \frac{\Delta_m c_m}{K_a(\Delta_m^0)^2} \quad (4)$$

kde K_a je disociačná konštanta. Táto rovnica popisuje stav, keď relatívne ľahšie katióny H_3O^+, primárne zodpovedné za vedenie prúdu v kvapaline, interagujú s málo pohyblivými, ťažkými aniónmi a dosahujú rovnovážny stav charakterizovaný disociačnými konštantami špecifickými pre každú látku.

Zákon (1) a (3) kolabuje pre relatívne vysoké koncentrácie, pretože pri klesajúcej vzdialenosti medzi iónmi narastá intenzita interakcie medzi nimi, až do momentu, kedy vodivosť nie je určovaná pohyblivosťou iónov, ale veľkých, vzájomne interagujúcich clusterov, ktoré z dôvodu svojej väčšej hmotnosti znižujú efektivitu prenosu náboja. [Wright, 2007]

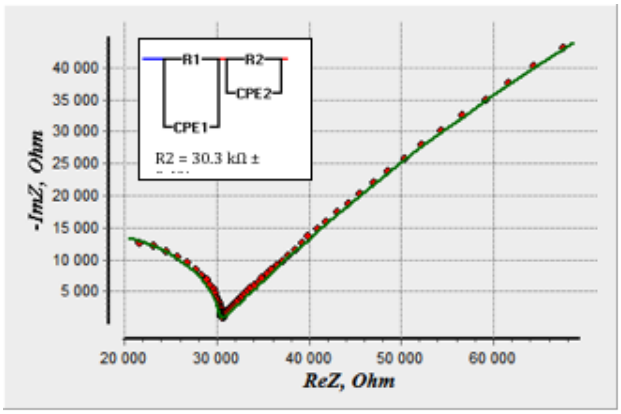
2.3 Impedančná spektroskopia

Merané vzorky (v našom prípade roztoky) sa nesprávajú ako jednoduché elektrické odpory, ale majú komplexnú impedanciu, ktorá je závislá od frekvencie privádzaného napätia.

$$Z^* = Z' + jZ'' = R\frac{1}{1+(\omega RC)^2} + jR\frac{-\omega RC}{1+(\omega RC)^2} \quad (5)$$

kde graf $Z''(Z')$ predstavuje polkružnicu pod $Z'' = 0$ a odpor vzorky sa dá určiť z priesečníku spektra s osou Z'.

Na rozhraní kovovej elektródy a vzorky dochádza k vzniku blokujúcej vrstvy, ktorá je nevodivá pri napojení na jednosmerné napätie, ale ma kapacitný charakter. Procesy spojené s polarizovaním tejto vrstvy sprostredkujú prenos striedavých alebo impulzných signálov [Barsoukov and Macdonald, 2005].



Obr. 1: Impedančné spektrum destilovanej vody. červené body reprezentujú namerané hodnoty, zelená čiara fit. Inset: Ekvivalentný elektrický obvod a získaná hodnota elektrického odporu

Na obr. (1) vidíme výhodu určovania vodivostí pomocou metódy impedančnej spektroskopie: blokujúce vrstvy spôsobujú, že pri rôznych frekvenciách meriame rôzne hodnoty impedancie (lineárna časť grafu na pravej strane). Tento jav by bolo možné potlačiť privedením vyššieho napätia ako je napätie na blokujúcej vrstve (rádovo vyšším ako pri meraní touto metódou), pri veľkých vodivostiach roztokov by však vznikali problémy s veľkosťami prúdu tečúceho vzorkami.

Na grafe tiež vidíme, kde sa začne prejavovať 'objemová' časť impedancie od vzorky (vidíme časť polkruhu), ktorá reálne zodpovedá vodivostiam, ktoré chceme získať.

3 Experiment

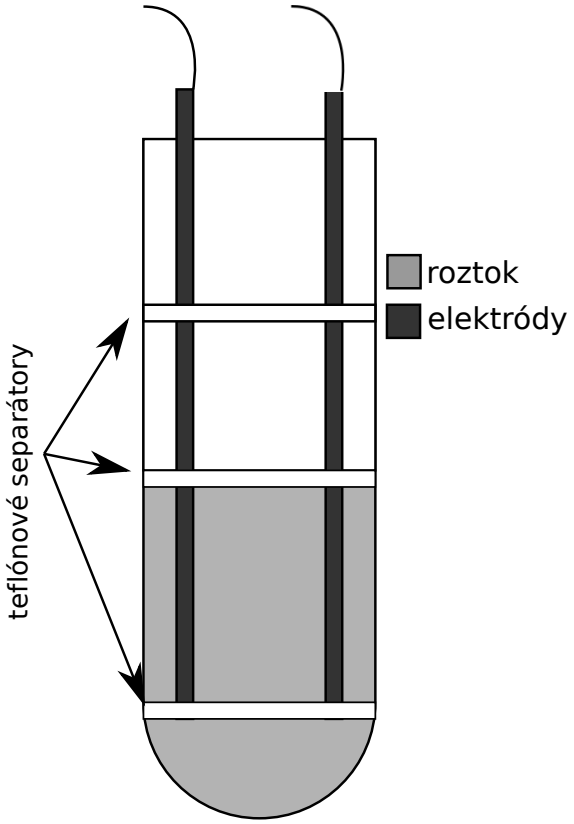
Vykonané boli dva druhy merania:

1. meranie vodivostí roztokov *NaCl* a kyseliny akrylovej pri rôznych koncentráciách

2. meranie volt-ampérovej charakteristiky diafragmového výboja horiaceho v roztokoch *NaCl*

3.1 Určovanie vodivosti roztoku *NaCl* a kyseliny akrylovej

Merania boli robené impedančnou spektroskopiou v rozsahu 1 Hz - 100 kHz s budiacim napätím 100 mV. Samotné meracie zariadenie (obr. (2)) pozostáva zo sklenenej nádoby na kvapalinu, do ktorej sa ponára



Obr. 2: Schéma meracej bunky na meranie pomocou impedančnej spektroskopie

elektródový systém a lock-in nanovoltmetra Stanford Instruments SR850A. Dvojica nerezových valcových elektród je udržiavaná v konštantnej vzdialenosti pomocou troch teflónových separátorov, ktoré zároveň slúžia na stabilizáciu a centrovanie elektródového systému v nádobe.
Na meranie sa využíva časť elektród s dĺžkou 25 mm. Vzdialenosť ich osí je 7.1 mm, priemer elektródy 1.5 mm a vnútroný priemer nádoby je 12 mm.
Keďže odpor, je funkciou aj geometrických parametrov sústavy, na určenie rezistivity (merného odporu) potrebujeme meracie zariadenie okalibrovať (určiť geometrickú konštantu meracej bunky).

V našom prípade sme na určenie geometrickej konštanty zariadenia modelovali potenciálové, resp. prúdové pole pomocou programu FEMM.
Výsledkom modelu je, že pri napätí 1 V na 1 mm a vodivosti 1 S/m tečie prúd 0.00108 A. Pri dĺžke elektród 25 mm je elektrický odpor systému.

$$R = \frac{1}{\kappa} k \tag{6}$$

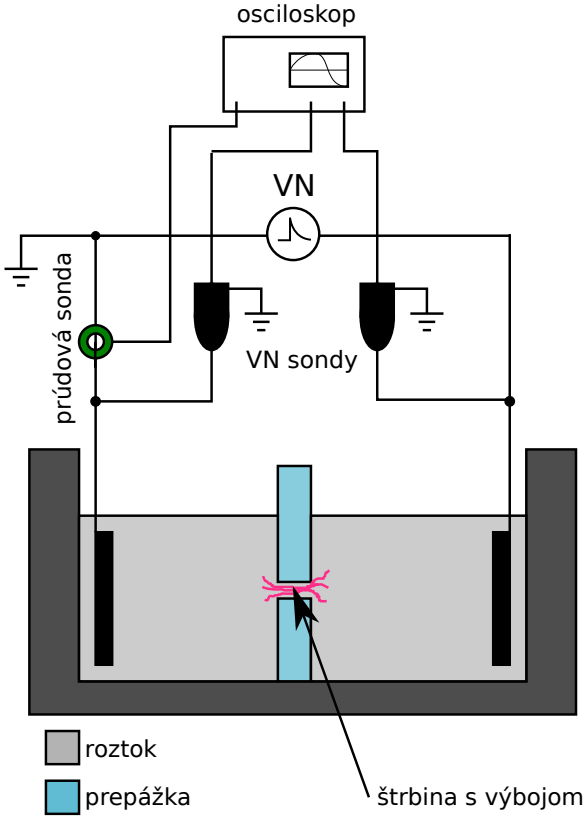
odkiaľ dostávame hodnotu k = 0.370 cm^{-1}. Elektrickú vodivosť roztoku sme schopný určiť z odporu nameraného našim zariadením ako

$$\kappa = \frac{0.370}{R} [S/cm] \tag{7}$$

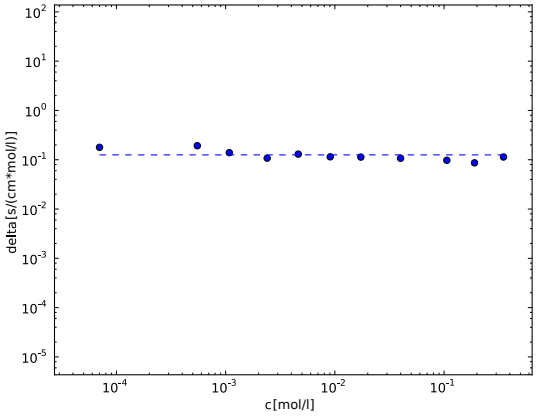
Na prípravu roztokov sa používala kyselina akrylová od firmy Sigma-Aldrich (99%, 180-220 ppm MEHQ ako inhibítor).

3.2 Volt-ampérová charakteristika výboja v roztoku NaCl

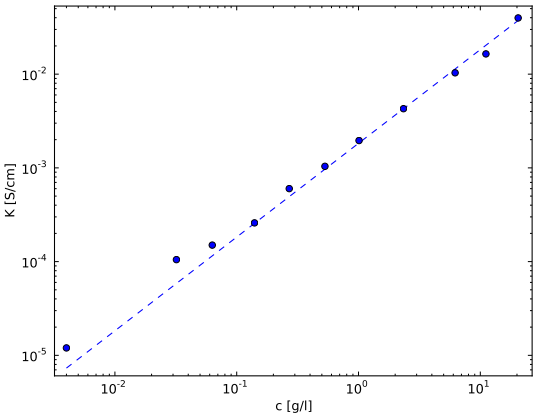
Výboj horel v reaktore (obr. (3)) s PMMA prepážkou hrúbky 3 mm so štrbinou o rozmeroch 51 mm x 0.3 mm, ktorá ho rozdeľovala na dva rovnaké objemy, v ktorých v každom bol 1 l roztoku. Napájaný bol vysokonapäťovým generátorom, ktorý dodával impulzné záporné napätie s amplitúdou U do -25 kV, frekvenciou 100 Hz a polšírkou impulzu v ráde 450 ns.
Merania napätí aj prúdov boli uskutočnené osciloskopom Tektronix 2024b, vysokonapäťovými sondami Tektronix P6015a a prúdovej sondy Pearson 4100. Merania sa opakovali pre rôzne koncentrácie roztoku *NaCl* v poradí od nižších k vyšším.



Obr. 3: schéma reaktora a zapojenia sónd pre meranie volt-ampérovej charakteristiky.



Obr. 4: $\Delta_m(c_m)$ roztoku $NaCl$



Obr. 5: $\kappa(c)$ pre roztok $NaCl$

4 Výsledky a diskusia

4.1 Vodivosť roztokov

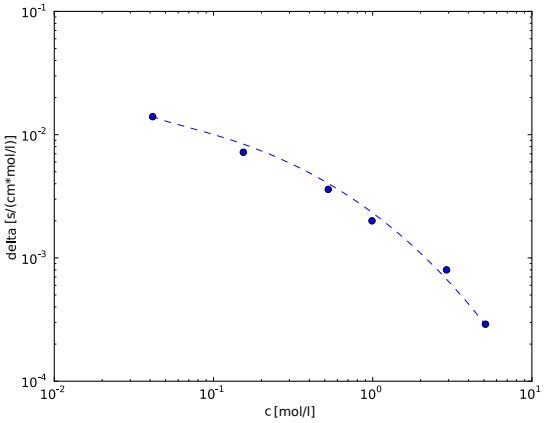
Pri meraní vodivosti roztoku $NaCl$ v závislosti od koncentrácie (príklad impedančného spektra na obr. (9)) sa potvrdil teoretický predpoklad slabej závislosti molárnej vodivosti Δ_m od molárnej koncentrácie c_m, ktorá v rozsahu troch rádov vyšla konštantná (obr. (4)), teda empirická konštanta K bude blízka nule. Na základe tohto výsledku očakávame, v priblížený, lineárnu závislosť elektrolytickej vodivosti κ od koncentrácie c a vieme určiť empirickú konštantu úmernosti medzi nimi (obr. (5)).
Pre účely extrapolácie môžeme používať vzťah:

$$\kappa[S/cm] = 0.0018277 * c[g/l] \qquad (8)$$

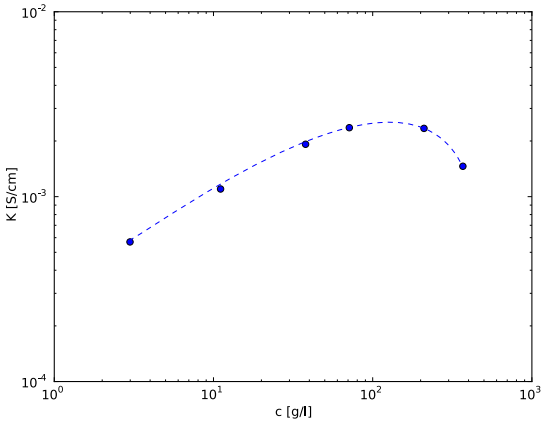
Uskutočnili sme aj meranie vodivosti pitnej vody, kde nám vodivosť κ vyšla $5.81{*}10^{-4}$ S/cm, čo je hodnota zodpovedajúca roztoku $NaCl$ s koncentráciou c = 0.25 g/l.
Rovnako podľa očakávaní vyšla nekonštantná a nelineárna závislosť molárnej vodivosti od molárnej koncentrácie $\Delta_m(c_m)$ pri kyseline akrylovej, ktorá nadobúda hodnoty blízke nule už okolo c_m rovné 10 mol/l (obr. (6)). Tiež z meraní vidíme, že existuje optimálna hodnota koncentrácie, pokiaľ chceme dosiahnuť maximálnu vodivosť roztoku a to v okolí hodnoty c = 150 g/l (obr. (7)).
Za účelmi dôkladnejšej kvantitatívnej charakterizácie vodivosti bola odmeraná aj závislosť vodivosti roztoku $NaCl$ od teploty t, ktorá sa javí byť v našom rozsahu teplôt lineárna (obr. (8)), pričom empirický vzťah má tvar pre koncentráciu c = 0.3 g/l:

$$\kappa[S/cm] = 3.0172 * 10^{-5} t[^\circ C] + 0.2 * 10^{-3} \qquad (9)$$

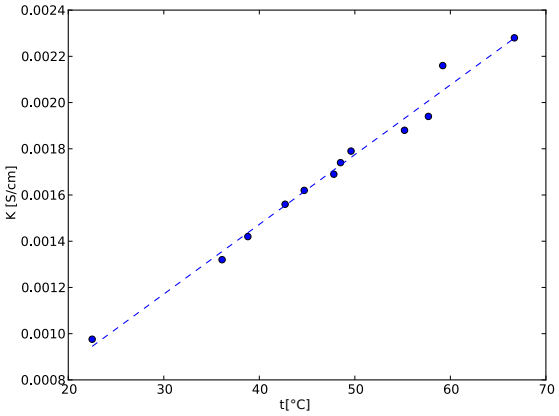
Vzťah (9), ukazujúci rastúci trend vodivosti s teplotou je v zhode s predošlými meraniami v tejto oblasti [Light et al., 2005].



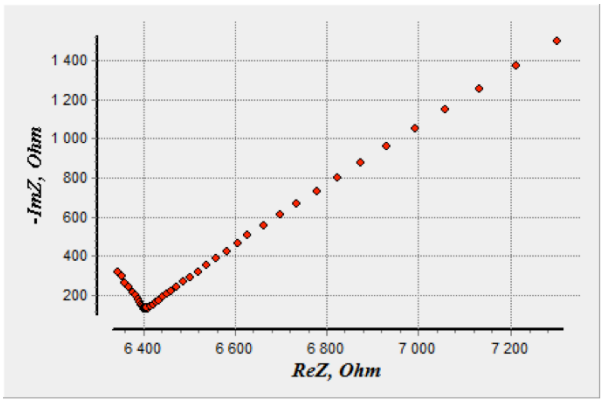
Obr. 6: $\Delta_m(c_m)$ pre roztok kyseliny akrylovej



Obr. 7: $\kappa(c)$ pre roztok kyseliny akrylovej



Obr. 8: tepelná závislosť $\kappa(t)$ pre roztok *NaCl* s koncentráciou 0.3 g/l



Obr. 9: detail impedančného spektra pre našu vzorku destilovanej vody

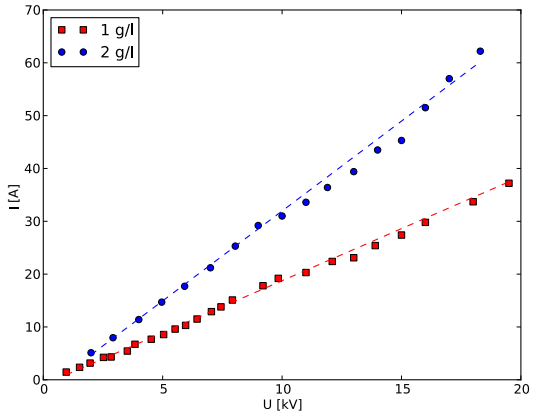
4.2 Volt-ampérová charakteristika výboja

Z priebehu U-I charakteristiky (vykreslená pre dve rôzne koncentrácie na obr. (10)) pred zapálením výboja (v oblasti okolo $8kV$) je vidieť prinajmenšom rádovú zhodu s vodivosťami určenými z meraní v časti 4.1. Potenciálnymi zdrojmi odchýliek sú dva faktory:

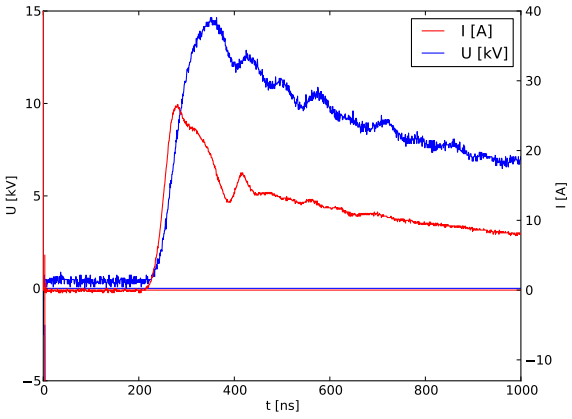
1. Fakt, že pracujeme s neideálnym obvodom. Samotný reaktor, pozostávajúci z dvoch vodivých objemov s dielektrikom medzi nimi má nenulovú kapacitu, čo môžeme pozorovať na základe oneskorovania sa amplitúdy napätia (viď obr.(11)). Presnejšia kvantifikácia tohto faktoru by vyžadovala ďalšie modelovanie komplikovaných elektrických polí v reaktore, čo je mimo rozsah tohto článku.

2. Pri dostatočne veľkej amplitúde napätia, resp. prúdu, začíname pozorovať vznikanie bublín v dôsledku vrenia roztoku. Tieto bubliny spôsobujú zníženie vodivosti (na obr. (11) v oblasti 10 kV), ktorá začne s narastajúcim napätím narastať v dôsledku vzniku vodivejších kanálov v mieste horenia výboja [Šimor, 2002].

Bližšia kvantifikácia tejto nelinearity bola znemožnená technickými obmedzeniami experimentálnej aparatúry, kde sme narážali na hranicu maximálneho napätia dodávaného zdrojom pri nízkych koncentráciách alebo na maximum rozsahu prúdovej sondy (pri koncentráciách nad $3g/l$ boli amplitúdy prúdov pri kritickej hodnote napätia nad $150A$)



Obr. 10: Volt-ampérové charakteristiky v roztokoch $1g/l$ a $2g/l$



Obr. 11: Detail jedného napäťového (modrá) a prúdového (červená) impulzu z osciloskopu.

5 Záver

Cieľom práce bolo určiť vodivosti roztokov v závislosti od niektorých parametrov, konkrétne koncentrácie a teploty. Pre závislosti od koncentrácií sme boli schopní nájsť priebeh vodivostí na širokom intervale (od destilovanej vody až po stav nasýtenia) a poskytli tak jednoduchý nástroj na ďalšie teoretické predikcie, či už pre efektivitu výbojových procesov, alebo na určovanie disociačných konštánt pre kyselinu akrylovú a potvrdili naše výsledky výstupom z meraní volt-ampérových charakteristík. V prípade závislosti vodivosti od teploty sme sme poskytli nezávislé potvrdenie predošlých experimentov.

Poďakovanie

Na záver by som sa chcel poďakovať školiteľovi Mgr. Andrejovi Bučekovi, PhD. za odborné vedenie a RNDr. Františkovi Kundracikovi, CSc. za cenné rady, podporu a pomoc pri meraní impedančných spektier.

Literatúra

[Akiyama, 2000] Akiyama, H. (2000). Streamer discharges in liquids and their applications. *Dielectrics and Electrical Insulation, IEEE Transactions on*, 7(5):646–653.

[Atkins, 2000] Atkins, P. W. (2000). *The elements of physical chemistry*. Oxford University Press, Oxford.

[Barsoukov and Macdonald, 2005] Barsoukov, E. and Macdonald, J. R. (2005). *Impedance spectroscopy: theory, experiment, and applications*. Wiley-Interscience.

[Beroual et al., 1998] Beroual, A., Zahn, M., Badent, A., Kist, K., Schwabe, A., Yamashita, H., Yamazawa, K., Danikas, M., Chadband, W., and Torshin, Y. (1998). Propagation and structure of streamers in liquid dielectrics. *Electrical Insulation Magazine, IEEE*, 14(2):6–17.

[Katsuki et al., 2002] Katsuki, S., Akiyama, H., Abou-Ghazala, A., and Schoenbach, K. H. (2002). Parallel streamer discharges between wire and plane electrodes in water. *Dielectrics and Electrical Insulation, IEEE Transactions on*, 9(4):498–506.

[Light et al., 2005] Light, T. S., Licht, S., Bevilacqua, A. C., and Morash, K. R. (2005). The fundamental conductivity and resistivity of water. *Electrochemical and Solid-State Letters*, 8(1):E16–E19.

[Lisitsyn et al., 1999] Lisitsyn, I., Nomlyama, H., Katsuki, S., and Akiyama, H. (1999). Thermal processes in a streamer discharge in water. *Dielectrics and Electrical Insulation, IEEE Transactions on*, 6(3):351–356.

[Šimor, 2002] Šimor, M. (2002). *Plazmochemická hydrofilná úprava netkaných textílií ako batériových separátorov a filtračných médií*. PhD thesis, FMFI, UK Bratislava.

[Touya et al., 2006] Touya, G., Reess, T., Pecastaing, L., Gibert, A., and Domens, P. (2006). Development of subsonic electrical discharges in water and measurements of the associated pressure waves. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 39(24):5236.

[Wright, 2007] Wright, M. (2007). *An Introduction to Aqueous Electrolyte Solutions*. Wiley.

Magnetoelastickou interakciou vyvolané reentrantné fázové prechody v presne riešiteľnom Isingovom modeli

Matúš Rebič[1]*

Školiteľ: Jozef Strečka[1]†

Katedra teoretickej fyziky a astrofyziky, Ústav fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Park Angelinum 9, 040 01 Košice

Abstrakt: Táto práca je inšpirovaná nedávnym exaktným riešením Isingovho modelu so spinom 1/2 započítavajúcim spinovú-fonónovú interakciu pre dekorované rovinné mriežky [1]. Tento postup sme zovšeobecnili pre Isingov model so zmiešanými spinmi 1/2 a S, pričom veľkosť spinu S dekorujúcich atómov môže nadobúdať ľubovoľné hodnoty. Z rigoróznej mapovacej korešpondencie s ekvivalentným Isingovým modelom so spinom 1/2 boli odvodené presné analytické výsledky pre partičnú funkciu a jednotlivé termodynamické veličiny. Pre konkrétny spinový systém s dekorujúcimi spinmi veľkosti S = 1 sme zostrojili fázové diagramy a preskúmali teplotné závislosti magnetizácie, smerodajnej odchýlky a tepelnej kapacity. Ukázali sme, že uvažovaný spinový model sa môže nachádzať v troch fázach, ktoré sú navzájom oddelené v základnom stave fázovým prechodom prvého druhu a pri konečných (nenulových) teplotách krivkou fázového prechodu druhého druhu. Najzaujímavejšou objavenou fázou je frustrovaná antiferomagnetická fáza, ktorá vzniká následkom dostatočne silnej magnetoelastickej interakcie a je charakterizovaná nezvyčajnou koexistenciou antiferomagnetického spinového usporiadania s úplným neusporiadaním dekorujúcich spinov.

Kľúčové slová: Isingov model, fonón, spinová frustrácia, exaktné riešenie

1 Úvod

V oblasti fyziky kondenzovaných látok sa často stretávame s pojmom geometrickej spinovej frustrácie, ktorý označuje jav, kedy spiny umiestnené do uzlov kryštalickej mriežky nedokážu minimalizovať všetky párové spinovo-spinové interakcie. V dôsledku tohto efektu dochádza k netriviálnemu spinovému usporiadaniu, ktoré sa prejaví v zmene správania sa termodynamických veličín pri dostatočne nízkych teplotách a narušením platnosti 3. termodynamickej vety pri teplote absolútnej nuly. Jedným z prvých navrhnutých a riešených príkladov takéhoto frustrovaného magnetického systému je Isingov model [2, 3] na trojuholníkovej mriežke s antiferomagnetickou interakciou medzi najbližšími susedmi, ktorý bol navrhnutý G. H. Wannierom a R. M. F. Houtappelom [4, 5, 6] v roku 1950. Započítaním magnetoelastickej interakcie pre spinový model opisujúci správanie sa magnetických materiálov možno vyvolať takúto spinovú frustráciu aj na pôvodne nefrustrovanom systéme.

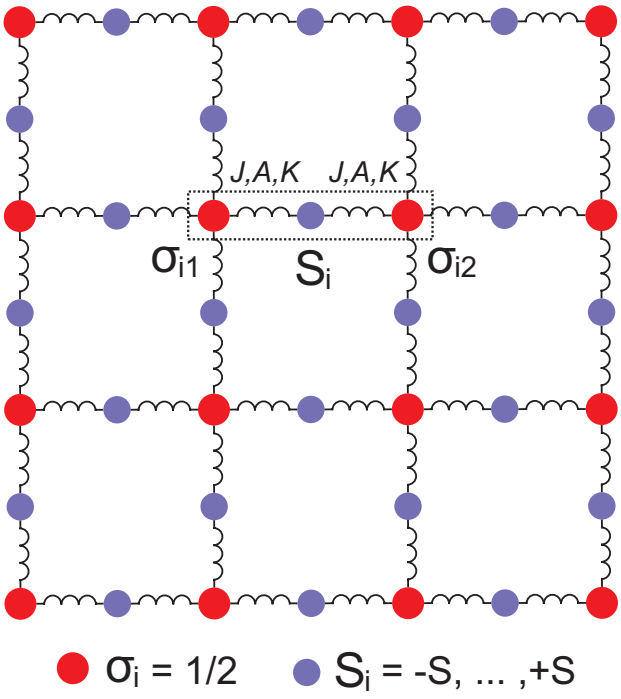
Táto práca je inšpirovaná exaktným riešením Isingovho modelu so spinom $1/2$ a spinovou-fonónovou interakciou na dekorovanej štvorcovej mriežke s prípustnými mriežkovými vibráciami len dekorujúcich atómov, ktorý bol študovaný v práci Strečku, Rojasa a de Souzu [1] pomocou dekoračno-iteračnej transformácie [7, 8, 9, 10, 11, 12] a harmonickej aproximácie. Vo vyššie spomenutej práci boli preštudované magnetické a termodynamické vlastnosti Isingovho modelu s magnetoelastickou interakciou v závislosti od veľkosti charakteristickej frekvencie mriežkových vibrácií dekorujúcich atómov. Jedním z naším cieľov bude zovšeobecniť tento postup na prípad so zmiešanými spinmi $1/2$ a S, pričom veľkosť spinu S dekorujúcich atómov bude nadobúdať ľubovoľné hodnoty. Taktiež budú preštudované magnetické a termodynamické vlastnosti na konkrétnom prípade takéhoto typu mriežky so zmiešanými spinmi $1/2$ a 1, ktorý v dôsledku magnetoeslastickej interakcie vykazuje spinovú frustráciu dekorovaných uzlov pôvodnej kryštálovej mriežky.

2 Isingov model so zmiešanými spinmi a spinovou-fonónovou interakciou

Uvažujme dvojrozmernú kryštalickú mriežku obsadenú atómami so spinom $1/2$, pričom medzi každou dvojicou týchto atómov je umiestnený ďalší dekorujúci atóm so spinom S, ktorý môže oscilovať okolo svojej rovnovážnej polohy. Taktiež nech platí,

*rebicmatus@gmail.com

†jozef.strecka@upjs.sk



Obr. 1: Schematické znázornenie dekorovanej štvorcovej mriežky. Uzly pôvodnej štvorcovej mriežky sú obsadené nehybnými atómami so spinom $\sigma_i = 1/2$, zatiaľ čo dekorujúce uzly sú obsadené dekorujúcimi atómami so spinom S vykonávajúcimi vibračný pohyb.

že mriežkové oscilácie dekorujúcich atómov podliehajú kvantovo-mechanickým zákonom. Pre lepšiu ilustráciu je na obrázku 1 schematicky znázornená uvažovaná magnetická štruktúra pre špeciálny prípad dekorovanej štvorcovej mriežky.

2.1 Hamiltonián a partičná funkcia

Celkový hamiltonián pre Isingov model vieme zapísať ako

$$\mathscr{H} = \sum_{i=1}^{Nq/2} \mathscr{H}_i = \sum_{i=1}^{Nq/2} (\mathscr{H}_i^m + \mathscr{H}_i^e), \qquad (1)$$

kde N predstavuje celkový počet nehybných uzlov mriežky a parameter q je počet najbližších susedov jedného takéhoto nehybného uzla. Väzbový hamiltonián $\mathscr{H}_i$ obsahuje dve časti, pričom prvý príspevok $\mathscr{H}_i^m$ reprezentuje magnetoelastickú časť energie a druhý príspevok $\mathscr{H}_i^e$ elastickú časť energie kvantových oscilácií dekorujúcich atómov

$$\begin{aligned} \mathscr{H}_i^m = & - (J - A\hat{\rho}_i) S_i \sigma_{i1} \\ & - (J + A\hat{\rho}_i) S_i \sigma_{i2} - D S_i^2, \end{aligned} \qquad (2)$$

$$\mathscr{H}_i^e = \frac{\hat{p}_i^2}{2M} + K\hat{\rho}_i^2. \qquad (3)$$

Spinové premenné $\sigma_i = \pm 1/2$ a $S_i = -S, -S+1, \ldots, +S$ predstavujú z-tové priemety Isingových spinov veľkosti $1/2$ a S. Parameter J predstavuje Isingovu výmennú interakciu medzi vzájomne susediacimi atómami so spinom σ a S za predpokladu rovnovážnej vzdialenosti medzi nimi, pričom rovnovážna poloha dekorujúcich atómov je umiestnená do stredu príslušnej väzby. Ďalej, parameter D označuje veľkosť jednoiónovej anizotropie pôsobiacej na dekorujúce atómy so spinom S, parameter A magnetoelastickú interakciu určujúcu zmenu veľkosti výmennej interakcie so zmenou polohy dekorujúceho atómu, K je elastická konštanta charakterizujúca deformovateľnosť väzieb dekorujúcich atómov a M predstavuje hmotnosť dekorujúceho atómu. Pri kvantovej reprezentácii mriežkových kmitov predstavuje $\hat{\rho}_i$ operátor výchylky i-teho dekorujúceho atómu zo svojej rovnovážnej polohy umiestnenej do stredu i-tej väzby štvorcovej mriežky ($\hat{\rho}_i = 0$) a $\hat{p}_i$ operátor hybnosti i-teho dekorujúceho atómu. Z kvantovej mechaniky je známe, že tieto dva operátory spĺňajú komutačný vzťah $[\hat{\rho}_k, \hat{p}_k] = i\hbar$. Poznamenajme, že interakcia susediacich atómov je funkciou operátora relatívnej výchylky dekorujúcich atómov z ich rovnovážnej polohy $J = J(\hat{\rho})$, pričom budeme ďalej uvažovať len členy rozvoja do prvého rádu vzhľadom na relatívnu malosť uvažovaných výchyliek (harmonická aproximácia). Posledný člen hamiltoniánu (3) započítava elastickú energiu súvisiacu s kvantovými vibráciami dekorujúcich atómov opäť za predpokladu platnosti harmonickej aproximácie. Vynechanie faktora $1/2$ z tohto člena je spôsobené dvoma ekvivalentnými väzbami dekorujúcich atómov so susednými atómami uzlov pôvodnej štvorcovej mriežky.

Zavedením kanonickej transformácie [13] pre operátor výchylky $\hat{\rho}_i$ vo vhodnom tvare tak, aby sa tvar operátora hybnosti i-teho dekorujúceho atómu zachoval (t.j. časová derivácia operátora výchylky sa po tejto transformácií nezmenila $\hat{p}_i = d\hat{\rho}_i/dt = d\hat{\rho}_i'/dt = \hat{p}_i'$), môžeme docieliť toho, aby magnetoelastická časť väzbového hamiltoniánu (2) nezávisela od operátora výchylky $\hat{\rho}_i$. Takáto transformácia má tvar

$$\hat{\rho}_i = \hat{\rho}_i' - \frac{A}{2K} S_i (\sigma_{i1} - \sigma_{i2}). \qquad (4)$$

Pre túto transformáciu sa dá jednoducho ukázať, že operátor hybnosti sa transformá- ciou nezmení. Do-

sadením vzťahu (4) do magnetoelastickej (2) a elastickej (3) časti väzbového hamiltoniánu a následnej krátkej úprave dostávame nový tvar väzbového hamiltoniánu $\mathscr{H}_i'$, so zložkami

$$\begin{aligned}\mathscr{H}_i^{m\prime} = & - JS_i(\sigma_{i1}+\sigma_{i2}) \\ & + J'S_i^2\sigma_{i1}\sigma_{i2} - D'S_i^2, \end{aligned} \tag{5}$$

$$\mathscr{H}_i^{e\prime} = \frac{\hat{p}_i'^2}{2M} + K\hat{\rho}_i'^2, \tag{6}$$

kde sme zaviedli nové efektívne interakčné parametre $J' = A^2/2K$ a $D' = D + A^2/8K$. Z rovnice (5) je zrejmé, že spinovo-fonónová interakcia vedie k vzniku trojspinovej interakcie štvrtého stupňa a zmení tiež veľkosť efektívnej jednoiónovej anizotropie.

Kanonická transformácia (4) nám následne umožňuje započítať spinové a mriežkové stupne voľnosti nezávisle od seba. V dôsledku toho, celková partičná funkcia uvažovaného modelu sa dá čiastočne faktorizovať do tvaru

$$\begin{aligned}\mathscr{Z} = \sum_{\{\sigma_i\}}\prod_{i=1}^{Nq/2}\mathscr{Z}_i^e\mathscr{Z}_i^m = \sum_{\{\sigma_i\}}\prod_{i=1}^{Nq/2}\left[\mathbf{Tr}_i\exp\left(-\beta\mathscr{H}_i^{e\prime}\right)\right] \\ \left[\sum_{S_i=-S}^{+S}\exp\left(-\beta\mathscr{H}_i^{m\prime}\right)\right], \end{aligned} \tag{7}$$

kde $\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$, k_{B} je Boltzmanova konštanta a T je absolútna teplota. Symbol $\mathbf{Tr}_i$ označuje stopu cez mriežkové stupne voľnosti i-tej väzby mriežky, sumácia $\sum_{\{\sigma_i\}}$ prebieha cez všetky konfigurácie spinov $1/2$ z uzlov štvorcovej mriežky a suma $\sum_{S_i}$ započítava všetky možné konfigurácie i-teho dekorujúceho spinu S.

Vypočítajme najskôr elastickú časť partičnej funkcie $\mathscr{Z}_i^e$. Elastická časť väzbového hamiltoniánu $\mathscr{H}_i^{e\prime}$ je ekvivalentná s hamiltoniánom kvantového harmonického oscilátora, ktorý možno jednoducho diagonalizovať vo Fockovej reprezentácií kreačných a anihilačných operátorov

$$\begin{aligned}\hat{b}_i^+ &= \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}\left(\hat{\rho}_i' - \frac{i}{M\omega}\hat{p}_i'\right), \\ \hat{b}_i^- &= \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}\left(\hat{\rho}_i' + \frac{i}{M\omega}\hat{p}_i'\right), \end{aligned} \tag{8}$$

spĺňajúcich štandardné bozónovské komutačné pravidlá $\left[\hat{b}_i^-, \hat{b}_i^+\right] = 1$. Následne väzbový hamiltonián nadobúda tvar

$$\mathscr{H}_i^{e\prime} = \frac{\hat{p}_i'^2}{2M} + K\hat{\rho}_i'^2 = \hbar\omega\left(\hat{b}_i^+\hat{b}_i^- + \frac{1}{2}\right), \tag{9}$$

kde $\omega^2 = 2K/M$ predstavuje typickú kruhovú frekvenciu kvantových oscilácií dekorujúcich atómov. Elastickú časť partičnej funkcie môžeme následne vypočítať pomocou diagonalizovanej podoby (9) väzbového hamiltoniánu $\mathscr{H}_i^{e\prime}$ ako

$$\mathscr{Z}_i^e = \mathbf{Tr}_i\exp\left(-\beta\mathscr{H}_i^{e\prime}\right) = \left[2\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\right]^{-1} \tag{10}$$

kde sme pri riešení využili vzťah pre nekonečnú geometrickú postupnosť.

Explicitný výraz pre magnetickú časť partičnej funkcie $\mathscr{Z}_i^m$ môžeme ďalej upraviť do tvaru, ktorý naznačuje možnosť zavedenia zovšeobecnenej dekoračno-iteračnej transformácie [8, 9, 10, 11, 12] a to

$$\begin{aligned}\mathscr{Z}_i^m &= \sum_{S_i=-S}^{+S}\exp\left(-\beta\mathscr{H}_i^{m\prime}\right) \\ &= \sum_{n=-S}^{+S}\exp\left(\beta D'n^2 - \beta J'n^2\sigma_{i1}\sigma_{i2}\right) \\ &\quad \cosh\left[\beta Jn(\sigma_{i1}+\sigma_{i2})\right] \\ &= R_0\exp\left(\beta R_1\sigma_{i1}\sigma_{i2}\right). \end{aligned} \tag{11}$$

Tá nám umožňuje nahradiť magnetickú časť väzbovej partičnej funkcie $\mathscr{Z}_i^m$ jednoduchším ekvivalentným výrazom. Mapovacie parametre R_0 a R_1 predstavujú neznáme transformačné parametre, ktoré sú jednoznačne určené podmienkou '*self-konzistentnosti*' mapovacej transformácie (11). Volíme ich tak, aby transformačná rovnica (11) platila pre akúkoľvek kombináciu spinov σ_{i1} a σ_{i2}. Dosadením všetkých štyroch možných kombinácií spinových stavov $\sigma_{i1} = \pm 1/2$ a $\sigma_{i2} = \pm 1/2$ do rovnice (11) dostávame dve nezávislé algebraické rovnice, ktoré jednoznačne určujú analytické vyjadrenie neznámych transformačných parametrov R_0 a R_1

$$R_0 = (V_1V_2)^{\frac{1}{2}}, \qquad \beta R_1 = 2\ln\left(\frac{V_1}{V_2}\right), \tag{12}$$

pričom pre jednoduchosť zápisu sme zaviedli funkcie V_1 a V_2 ako

$$V_1 = \sum_{n=-S}^{+S}\exp\left(\beta Dn^2\right)\cosh\left(\beta Jn\right), \tag{13}$$

$$V_2 = \sum_{n=-S}^{+S}\exp\left[\beta n^2\left(D + \frac{A^2}{4K}\right)\right]. \tag{14}$$

Po dosadení dekoračno-iteračnej transformácie (11) a riešenia pre elastickú časť partičnej funkcie (10) do vzťahu (7) pre celkovú partičnú funkciu získavame mapovací vzťah

$$\begin{aligned}\mathscr{Z} &= (R_0\mathscr{Z}_i^e)^{Nq/2}\,\mathscr{Z}_{\mathrm{IM}}(\beta R_1)\\ &= \left[\frac{V_1V_2}{4\sinh^2\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}\right]^{Nq/4}\mathscr{Z}_{\mathrm{IM}}(\beta R_1), \quad (15)\end{aligned}$$

ktorý dáva do súvisu partičnú funkciu študovaného modelu $\mathscr{Z}(\beta,J,A,K,D)$ s partičnou funkciou $\mathscr{Z}_{\mathrm{IM}}(\beta R_1)$ Isingovho modelu so spinom $1/2$ na štvorcovej mriežke s efektívnou teplotne závisiacou interakciou R_1 medzi najbližšími susedmi. Zo známeho exaktného výsledku pre partičnú funkciu korešpondujúceho Isingovho modelu so spinom $1/2$ na štvorcovej mriežke [14, 15] možno následne získať pomocou rovnice (15) aj presné riešenie pre partičnú funkciu Isingovho modelu so zmiešanými spinmi na dekorovanej štvorcovej mriežke s dekorujúcimi atómami vibrujúcimi podľa zákonov kvantovej mechaniky. Všimnime si, že elastická časť partičnej funkcie mapovacieho vzťahu spôsobuje neutlmenie (tzv. nulové kmity) mriežkových oscilácií pri nulovej teplote v kvantovom ponímaní harmonických kmitov mriežky.

2.2 Spontánna magnetizácia

Magnetizáciu pre prvú podmriežku atómov so spinom $\sigma_i = \pm 1/2$ označme ako m_A. Vypočítame ju na základe *Barryho mapovacej teorémy* [16], ktorá nám dovoľuje vypočítať podmriežkovú magnetizáciu m_A na základe dokázanej ekvivalencie medzi strednou hodnotou spinov štvorcovej mriežky a strednou hodnotou týchto spinov na korešpondujúcej dekorovanej mriežke $m_A \equiv \langle\sigma_i\rangle = \langle\sigma_i\rangle_{\mathrm{IM}} \equiv m_{\mathrm{IM}}(\beta R_1)$, kde symboly $\langle\ldots\rangle$ a $\langle\ldots\rangle_{\mathrm{IM}}$ označujú štatistické stredovanie pre pôvodný dekorovaný Isingov model so zmiešanými spinmi a korešpondujúci Isingov model so spinom $1/2$. S využitím analytického riešenia pre štvorcovú mriežku [17] a následnom zjednodušení dostávame exaktný vzťah pre spontánnu magnetizáciu podmriežky A v tvare

$$\begin{aligned}m_A &= \frac{1}{2}\left[1-\frac{1}{\sinh^4\left(\frac{\beta R_1}{2}\right)}\right]^{1/8}\\ &= \frac{1}{2}\left[1-\frac{16V_1^4V_2^4}{\left(V_1^2-V_2^2\right)^4}\right]^{1/8}. \quad (16)\end{aligned}$$

Magnetizáciu pre druhú podmriežku atómov so spinom $S_i = -S,-S+1,\ldots,+S$ označme m_B a vypočítame ju pomocou presnej *Callenovej-Suzukiho identity* [18, 19], podľa ktorej strednú hodnotu dekorovaných spinov štvorcovej mriežky vypočítame ako

$$m_B = \langle S_i\rangle = \left\langle \frac{1}{\mathscr{Z}_i^m}\sum_{S_i=-S}^{+S} S_i \exp\left(-\beta\mathscr{H}_i^{m\prime}\right)\right\rangle. \quad (17)$$

Po dosadení vzťahov (5) a (11) do predchádzajúceho výrazu (17) a krátkej úprave dostávame vzťah pre spontánnu magnetizáciu podmriežky B v tvare, kde využijeme fakt že výraz určujúci spontánnu magnetizáciu podmriežky B je funkciou Isingových spinov $m_B = \langle f(\sigma_{i1},\sigma_{i2})\rangle$. Potom je možné zapísať takýto výraz ako lineárnu kombináciu týchto spinov a koeficienty tohto rozvoja získať po dosadení všetkých štyroch možných kombinácií spinových stavov. Riešením vzniknutej sústavy štyroch lineárnych rovníc o štyroch neznámych dostávame hodnoty príslušné koeficientov rozvoja. Exaktný vzťah pre spontánnu magnetizáciu podmriežky B tak prejde do konečného tvaru

$$m_B = 2m_A\frac{\sum_{n=-S}^{+S} n\exp\left(\beta Dn^2\right)\sinh\left(\beta Jn\right)}{\sum_{n=-S}^{+S}\exp\left(\beta Dn^2\right)\cosh\left(\beta Jn\right)}. \quad (18)$$

Pri študovaní antiferomagnetickej fázy takéhoto systému nám ako parameter usporiadania poslúži 'staggered' magnetizácia $m_A^S = \frac{1}{2}\langle\sigma_{i1}-\sigma_{i2}\rangle$, ktorú vypočítame identickým spôsobom ako magnetizáciu pre prvú podmriežku na základe *Barryho mapovacej teorémy*. Magnetizácia pre podmriežku B odpovedajúca dekorujúcim atómom so spinom S_i je v prípade takéhoto antiferomagnetického usporiadania mriežky nulová.

2.3 Vnútorná energia

Vnútornú energiu Isingovho modelu so zmiešanými spinmi na dekorovanej štvorcovej mriežke získame zo známeho vzťahu štatistickej fyziky ako záporne vzatú hodnotu parciálnej derivácie logaritmu partičnej funkcie podľa inverznej teploty $\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$.

Explicitné vyjadrenie vnútornej energie pozostáva z dvoch častí, prvý príspevok pochádza od magnetického podsystému a druhý od mriežkových oscilácií

$$\mathscr{U} = -\frac{\partial(\ln \mathscr{Z})}{\partial \beta} = \mathscr{U}_M + \mathscr{U}_L, \qquad (19)$$

pričom jednotlivé zložky vnútornej energie nadobúdajú tvary

$$\mathscr{U}_M = -\frac{Nq}{4}\left[\frac{V_1'}{V_1} + \frac{V_2'}{V_2} + 4\rho_{\mathrm{IM}}\left(\frac{V_1'}{V_1} - \frac{V_2'}{V_2}\right)\right] \qquad (20)$$

$$\mathscr{U}_L = \frac{Nq}{4}\hbar\omega \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right). \qquad (21)$$

Parametre V_1' a V_2' označujú parciálne derivácie výrazov V_1 aV_2 podľa β, teda

$$V_1' = \sum_{n=-S}^{+S} Dn^2 \exp\left(\beta Dn^2\right)\cosh\left(\beta Jn\right) + \sum_{n=-S}^{+S} \exp\left(\beta Dn^2\right) Jn \sinh\left(\beta Jn\right), \qquad (22)$$

$$V_2' = \sum_{n=-S}^{+S} n^2\left(D + \frac{A^2}{4K}\right) \exp\left[\beta n^2\left(D + \frac{A^2}{4K}\right)\right]. \qquad (23)$$

Vo vzťahu (20) vystupuje aj tzv. *párová korelačná funkcia* $\rho_{\mathrm{IM}} = \langle \sigma_{i1}\sigma_{i2}\rangle$ medzi dvojicou susedných Isingových spinov, ktorej predpis poznáme zo vzťahu pre vnútornú energiu $\mathscr{U}_{\mathrm{IM}}$ Isingovho modelu so spinom $1/2$ na štvorcovej mriežke [14, 15]. Pre zložitosť výsledného výrazu tepelnej kapacity sme na jej výpočet použili numerické derivovanie analytického výrazu (19) pre vnútornú energiu s využitím známeho termodynamického vzťahu $C = \partial\mathscr{U}/\partial T$.

2.4 Smerodajná odchýlka

V poslednom rade sa pozrime taktiež na to, ako sa zmení stredná hodnota operátora výchylky $\langle\hat{\rho}_i\rangle$ po zavedení transformácie (4). Z danej transformácie je zrejmé, že

$$\langle\hat{\rho}_i\rangle = \langle\hat{\rho}_i'\rangle - \frac{A}{2K}\left(\langle S_i\sigma_{i1}\rangle - \langle S_i\sigma_{i2}\rangle\right). \qquad (24)$$

Strednú hodnotu súčinu spinov $S_i\sigma_{i1}$ a $S_i\sigma_{i2}$ vypočítame podobne ako pri spontánnej magnetizácii podmriežky B pomocou *Callenovej-Suzukiho identity* [18, 19]. Po krátkej úprave dostávame identické výrazy pre obe korelačné funkcie, a teda ich rozdiel je nulový. Vidíme, že po takto zvolenej transformácii (4) sa stredná hodnota operátora výchylky nezmení $\langle\hat{\rho}_i\rangle = \langle\hat{\rho}_i'\rangle$ a naviac, kedže operátor výchylky spĺňa reláciu

$$\hat{\rho}_i' = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}\left(\hat{b}_i^+ + \hat{b}_i^-\right), \qquad (25)$$

je zrejmé, že stredná hodnota operátora výchylky dekorujúcich atómov z ich rovnovážnej polohy bude nulová, t.j. $\langle\hat{\rho}_i'\rangle = 0$, kedže súčasne platí $\langle\hat{b}_i^+\rangle = \langle\hat{b}_i^-\rangle = 0$. Tento výpočet naznačuje, že dekorujúce atómy oscilujú symetricky okolo svojej rovnovážnej polohy a mieru týchto oscilácií možno kvantifikovať pomocou smerodajnej odchýlky.

Na výpočet smerodajnej odchýlky potrebujeme vypočítať strednú hodnotu druhej mocniny operátora výchylky dekorujúcich atómov $\langle\hat{\rho}_i^2\rangle$ kedže platí $d = \sqrt{\langle\hat{\rho}_i^2\rangle - \langle\hat{\rho}_i\rangle^2}$. Stredovaním použitej kanonickej transformácie (4) dostávame

$$\langle\hat{\rho}_i^2\rangle = \langle\hat{\rho}_i'^2\rangle + \frac{A^2}{8K^2}\langle S_i^2\rangle - \frac{A^2}{2K^2}\langle S_i^2\sigma_{i1}\sigma_{i2}\rangle, \qquad (26)$$

kde prvý člen pre strednú hodnotu transformovaného operátora výchylky dekorujúcich atómov s využitím vzťahu (25) a krátkej úprave prejde na tvar

$$\langle\rho_i'^2\rangle = \frac{\hbar\omega}{4K}\coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right). \qquad (27)$$

Druhý a tretí člen, ktoré fyzikálne predstavujú kvadrupólový moment dekorujúcich atómov $\langle S_i^2\rangle$ a trojspinovú interakciu štvrtého stupňa medzi centrálnym dekorujúcim spinom a jeho dvoma susediacimi Isingovými spinmi $\langle S_i^2\sigma_{i1}\sigma_{i2}\rangle$ dostávame využitím *Callenovej-Suzukiho identity* [18, 19] a analogického postupu ako pri počítaní strednej hodnoty súčinu centrálneho dekorujúceho spinu s jeho susediacim Isingovým spinom. Pri výpočte oboch stredných hodnôt sme opäť riešili systém štyroch lineárnych rovníc o štyroch neznámych koeficientov rozvoja výrazov pod strednými hodnotami podľa spinov σ_{i1} a σ_{i2}. Po jednoduchej úprave dostávame exaktný výsledok pre strednú hodnotu druhej mocniny operátora výchylky dekorujúcich atómov

$$\langle\hat{\rho}_i^2\rangle = \frac{\hbar\omega}{4K}\coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) + \frac{A^2}{8K^2}\left(1 - 4\rho_{\mathrm{IM}}\right)F_2, \qquad (28)$$

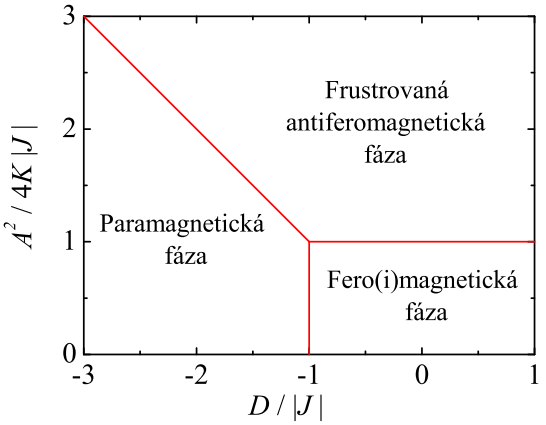
kde $\rho_{\mathrm{IM}} = \langle \sigma_{i1}\sigma_{i2} \rangle$ je párová korelačná funkcia súvisiaca s vnútornou energiou podľa vzťahu $\rho_{\mathrm{IM}} = -\frac{\mathscr{U}_{\mathrm{IM}}}{\frac{Nq}{2}R}$ a funkcia F_2 je daná výrazom

$$F_2 = \frac{\sum_{n=-S}^{+S} n^2 \exp\left[\beta n^2 (D + A^2/4K)\right]}{\sum_{n=-S}^{+S} \exp\left[\beta n^2 (D + A^2/4K)\right]}. \qquad (29)$$

Poznamenajme, že táto hodnota je zjavne nenulová, a teda aj smerodajná odchýlka pre náš prípad daná ako $d = \sqrt{\langle \hat{\rho}_i^2 \rangle}$ bude rôzna od nuly. Táto informácia bude dôležitá z hľadiska akceptácie zvolenej sady parametrov pre skúmaný systém z hľadiska posúdenia ich oprávnenosti, kedže smerodajná odchýlka nemôže byť veľká v rámci medzí platnosti harmonickej aproximácie.

3 Najzaujímavejšie výsledky

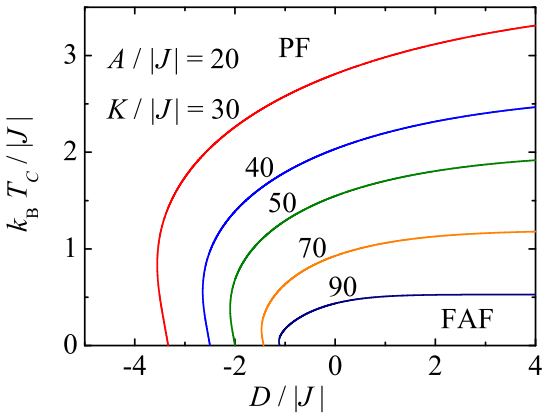
Táto kapitola bude venovaná rozboru základných termodynamických veličín a vzťahov, ktoré sme získali v predchádzajúcich kapitolách. Kedže študovaný model bol vo svojej podstate riešený ako Isingov model na ľubovoľnej planárnej dekorovanej mriežke s ľubovoľnou veľkosťou dekorujúcich spinov S, vybrali sme si pre bližšie preskúmanie modelový systém na dekorovanej štvorcovej mriežke s koordinačným číslom $q = 4$ a dekorujúcimi atómami o veľkosti spinu $S = 1$. Poznamenajme, že výsledky odvodené v predchádzajúcej časti platia tak pre prípad feromagnetických ($J > 0$), ako aj antiferomagnetických ($J < 0$) interakcií. Veľkosť Isingovej výmennej interakcie si ďalej zvolíme ako energetickú jednotku a všetky voľné parametre systému ako veľkosť jednoiónovej anizotropie D, magnetoelastickej interakcie A, elastickej konštanty K (konštanty pružnosti), teploty k_BT a charakteristickej frekvencie vibrácie ω budeme normovať pre prípad antiferomagnetickej interakcie vzhľadom na veľkosť absolútnej hodnoty výmennej interakcie $|J|$, respektíve pre prípad feromagnetickej interakcie priamo vzhľadom na hodnotu tejto interakcie J. Na overenie správnosti získaných exaktných výsledkov sme konfrontovali naše výsledky s výsledkami [20, 21] pre rigidnú limitu nášho modelu, ktoré boli v zhode s našimi výpočtami.



Obr. 2: Fázový diagram základného stavu študovaného systému vo forme závislosti parametra $A^2/4K|J|$ od veľkosti jednoiónovej anizotropie $D/|J|$.

3.1 Fázový diagram základného stavu

Fázový diagram základného stavu pre Isingov model na dekorovanej štvorcovej mriežke s koordinačným číslom $q = 4$ a dekorujúcimi atómami o veľkosti spinu $S = 1$ je znázornený na obrázku 2. Tento diagram odpovedá spinovému usporiadaniu jednotlivých podmriežok s minimálnou hodnotou energie. Skonštruovaný bol na základe nízkoteplotnej limity $T \to 0$ vzťahu (12) pre efektívnu teplotne závisiacu interakciu R_1 medzi najbližšími susedmi korešpondujúceho Isingovho modelu so spinom $1/2$ na jednoduchej štvorcovej mriežke [14, 15]. Pre jednoduchosť je vykreslený vo forme závislosti podielu kvadrátu magnetoelastickej interakcie a štvornásobku súčinu konštanty pružnosti s absolútnou hodnotou výmennej interakcie $A^2/4K|J|$ od veľkosti jednoiónovej anizotropie $D/|J|$, kedže sa dá ukázať že takýto podiel vo svojej podstate určuje charakter spinového usporiadania v základnom stave nášho modelu. Všimnime si, že pre hodnotu takéhoto parametra menšiu ako je jedna ($A^2/4K|J| < 1$) prejde systém s klesajúcou hodnotou jednoiónovej anizotropie vždy pri $D/|J| = -1$ z usporiadanej feromagnetickej alebo ferimagnetickej fázy do neusporiadanej paramagnetickej fázy. Fero(i)magnetická fáza je v tomto prípade charakteristická paralelným usporiadaním Isingových spinov uzlov pôvodnej štvorcovej mriežky, pričom dekorované spiny nadobúdajú buď kladnú hodnotu $S_i = 1$ (feromagnetický prípad), alebo zápornú hodnotu $S_i = -1$ (ferimagnetický prípad). Pre hodnotu parametra $A^2/4K|J| > 1$ prechádza systém z čiastočne usporiadanej (frustrovanej) antiferomagnetickej fázy do ne-



Obr. 3: Fázový diagram medzi frustrovanou antiferomagnetickou fázou (FAF) a paramagnetickou fázou (PF) vo forme závislosti kritickej teploty $k_BT_C/|J|$ od veľkosti jednoiónovej anizotropie $D/|J|$ pre konštantnú hodnotu magnetoelastickej interakcie $A/|J| = 20$ a niekoľko rôznych hodnôt konštanty pružnosti $K/|J|$.

usporiadanej paramagnetickej fázy pri rôznych hodnotách jednoiónovej anizotropie, určenej vzťahom $D/|J| = -A^2/4K|J|$. Študovaný systém vo frustrovanej antiferomagnetickej fáze prejde do stavu, v ktorom sú všetky vzájomne susediace Isingové spiny pôvodnej štvorcovej mriežky orientované antiparalelne voči sebe navzájom a dekorované spiny nadobudnú ľubovoľnú hodnotu. Neusporiadanú paramagnetickú fázu charakterizuje náhodné usporiadanie všetkých spinov dekorovanej štvorcovej mriežky. Keďže fázový prechod z usporiadanej feromagnetickej alebo ferimagnetickej fázy do neusporiadanej paramagnetickej fázy vykazuje štandartné termodynamické správanie, ďalej sa ním nebudeme zaoberať.

3.2 Frustrovaná antiferomagnetická fáza

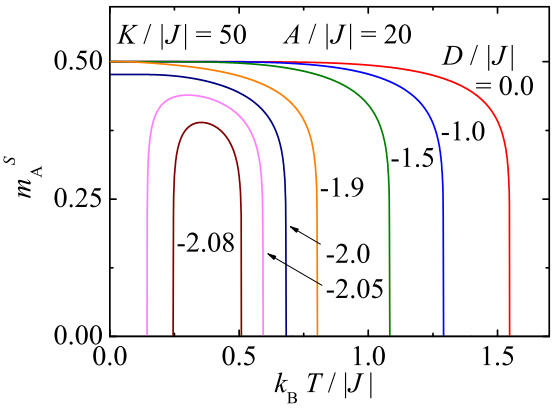
Pozrime sa teraz na fázový prechod z čiastočne usporiadanej a čiastočne neusporiadanej antiferomagnetickej fázy do neusporiadanej paramagnetickej fázy pri konečných teplotách. Jednotlivé sady parametrov sú zvolené tak, aby vždy platila podmienka pre frustrovanú antiferomagnetickú fázu $A^2/4K|J| > 1$. Veľkosť magnetoelastickej interakcie je pre jednoduchosť zvolená na konštantnú hodnotu $A/|J| = 20$, pričom ďalej budeme meniť len konštantu pružnosti $K/|J|$, a to v rozmedzí hodnôt 30 až 90, stále v rámci platnosti harmonickej aproximácie.

3.2.1 Fázový diagram

Efektívna teplotne závisiaca interakcia R_1 medzi najbližšími susedmi korešpondujúceho Isingovho modelu so spinom $1/2$ na jednoduchej štvorcovej mriežke [14, 15], vyjadrená vzťahom (12) nám dovoľuje jednoducho získať závislosť kritickej teploty $k_BT_C/|J|$ od veľkosti jednoiónovej anizotropie $D/|J|$, magnetoelastickej konštanty $A/|J|$ a konštanty pružnosti $K/|J|$ porovnaním efektívnej interakcie s jej kritickou hodnotou $\beta R_1 = -2\ln(1+\sqrt{2})$ (viď. diagram znázornený na obrázku 3). Túto formu závislosti môžeme ďalej považovať za fázový diagram skúmaného systému pri konečných teplotách, pričom poznamenajme, že táto kritická teplota nezávisí od znamienka Isingovej výmennej interakcie J. Na obrázku 3 vidíme, že pri fixnej hodnote magnetoelastickej interakcie $A/|J| = 20$ má zmena parametra určujúceho konštantu pružnosti $K/|J|$ na priebeh kritickej teploty fázového prechodu pri frustrovanej antiferomagnetickej fáze značný vplyv, a s jej narastajúcou hodnotou dochádza k poklesu kritickej teploty $k_BT_C/|J|$ fázového prechodu medzi frustrovanou antiferomagnetickou a paramagnetickou fázou. Je dôležité poznamenať, že takýto fázový prechod vykazuje v blízkom okolí ich fázového rozhrania reentrantné správanie, čo môžno opäť vidieť z obrázka 3. Pri hodnote jednoiónovej anizotropie $D/|J| << -A^2/4K|J|$ dochádza k tomu, že systém sa nachádza v základnom stave v neusporiadanej paramagnetickej fáze bez ohľadu na veľkosť zvolenej teploty.

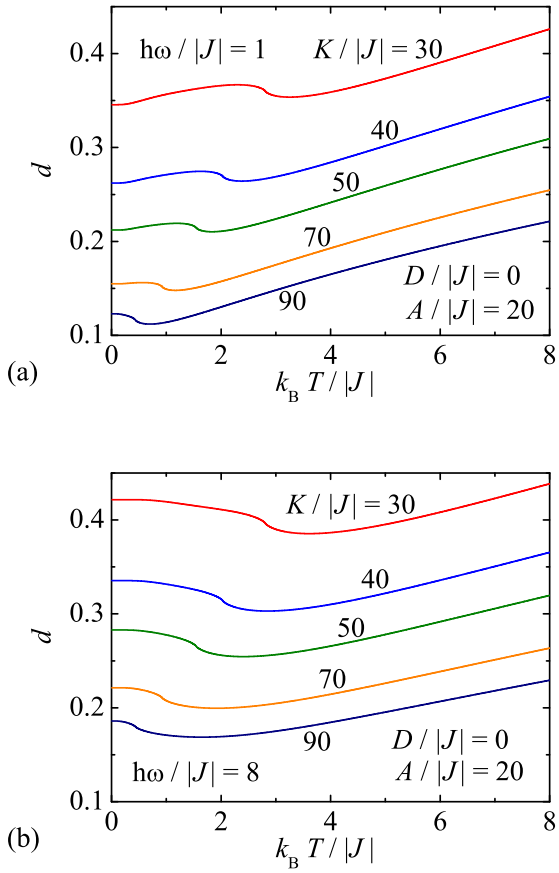
3.2.2 Spontánna 'staggered' magnetizácia

Pri študovaní spontánnej magnetizácie pre frustrovanú antiferomagnetickú fázu sa zaoberáme len teplotnou závislosťou spontánnej 'staggered' magnetizácie na podmriežke A, ktorá odpovedá Isingovským atómom so spinom $1/2$, kedže výsledná spontánna magnetizácia pre podmriežku B odpovedajúca dekorujúcim atómom so spinom 1, je v tomto prípade nulová. Zvolená je vhodná reprezentatívna dvojica parametrov magnetoelastickej interakcie $A/|J| = 20$ a konštanty pružnosti $K/|J| = 50$. Na obrázku 4 vidíme, že s klesajúcou hodnotou jednoiónovej anizotropie $D/|J|$ až k hraničnej hodnote fázového prechodu, ktorá má pre zvolenú sadu parametrov hodnotu $D/|J| = -2$, dochádza k zakriveniu charakteristickej krivky spontánnej 'staggered' magnetizácie len v blízkom okolí kritickej teploty. Avšak pri hodnote jednoiónovej anizotropie $D/|J| = -2$, ktorá od-



Obr. 4: Spontánna 'staggered' magnetizácia podmriežky A ako funkcia teploty $k_BT/|J|$ pre konštantnú hodnotu magnetoelastickej interakcie $A/|J| = 20$, konštantu pružnosti $K/|J| = 50$ a niekoľko rôznych hodnôt jednoiónovej anizotropie $D/|J|$.

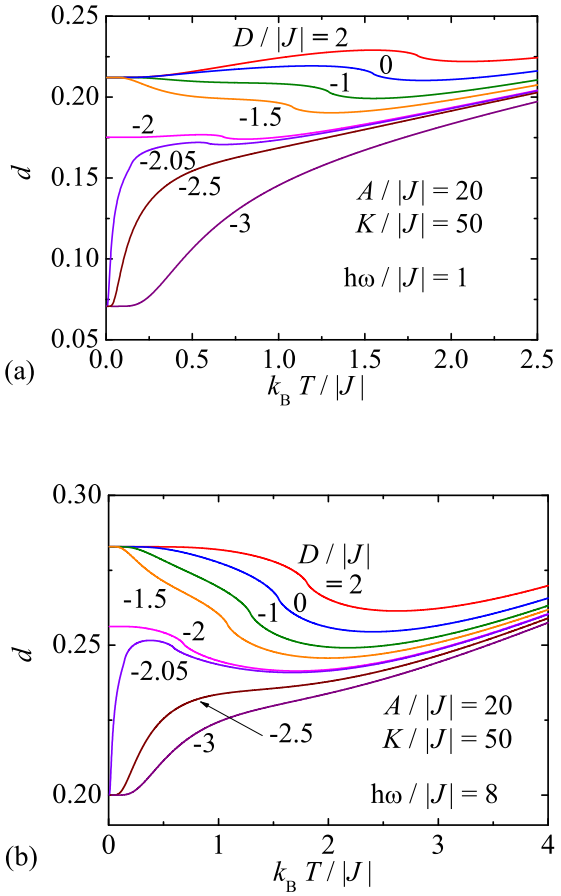
povedá fázovému rozhraniu čiastočne usporiadanej antiferomagnetickej a neusporiadanej paramagnetickej fázy, dochádza v priebehu spontánnej 'staggered' magnetizácie k zaujímavému úkazu, kedy jej charakteristická krivka nenadobúda v blízkosti nulových teplôt hodnotu $1/2$, odpovedajúcu dokonalému antiferomagnetickému usporiadaniu spinov podmriežky A, ale netriviálnu hodnotu 0.476781905. Spočítaním nízkoteplotnej limity pre efektívnu interakciu βR_1 zo vzťahu (12) a následným dosadením do vzťahu (16) pre magnetizáciu podmriežky A, ktorý odpovedá spontánnej 'staggered' magnetizácie, získavame asymptotickú hodnotu $m_A^S = \frac{1}{4}\sqrt[8]{175} = 0.476781905$. Pre danú sadu parametrov reentrantné správanie krivky fázového prechodu ďalej spôsobí, že na intervale hodnôt jednoiónovej anizotropie $D/|J|$ v rozmedzí -2.095 až -2.0 dochádza k netriviálnemu správaniu sa krivky spontánnej 'staggered' magnetizácie podmriežky A. Tá je v oblasti veľmi nízskych teplôt v dôsledku neusporiadaného charakteru základného stavu nulová, pri dolnej kritickej teplote prechádza do frustrovanej antiferomagnetickej fázy s nenulovou hodnotou spontánnej 'staggered' magnetizácie a následne s ďalším nárastom teploty zaniká opätovným dosiahnutím neusporiadanej paramagnetickej fázy pri hornej kritickej teplote. Tento priebeh spontánnej magnetizácie potvrdzuje korektnosť fázového diagramu na obrázku 3 z predchádzajúcej podkapitoly.



Obr. 5: Smerodajná odchýlka d ako funkcia teploty $k_BT/|J|$ pre konštantnú hodnotu magnetoelastickej interakcie $A/|J| = 20$, jednoiónovú anizotropiu $D/|J| = 0$, niekoľko rôznych hodnôt konštanty pružnosti $K/|J|$ a dve typické frekvencie mriežkových kmitov: (a) $\hbar\omega/|J| = 1$; (b) $\hbar\omega/|J| = 8$.

3.2.3 Smerodajná odchýlka

Táto časť je zameraná na preskúmanie teplotnej závislosti smerodajnej odchýlky d pre zvolené sady parametrov z nami získaného exaktného vzťahu (28). Hodnota smerodajnej odchýlky nesmie byť veľká, aby nebola narušená platnosť harmonickej aproximácie. Táto podmienka naďalej zohráva dôležitú úlohu z hľadiska akceptácie zvolených sád parametrov. Zvolená je vhodná reprezentatívna dvojica parametrov magnetoelastickej interakcie $A/|J| = 20$ a niekoľko rôznych hodnôt konštanty pružnosti $K/|J|$ tak, aby odpovedali fázovému diagramu na obrázku 3 pre čiastočne usporiadanú antiferomagnetickú fázu. Na priloženej dvojici obrázkov 5 (a)(b) vidíme, ako pri konštantnej hodnote jednoiónovej anizotropie $D/|J| = 0$ so zväčšujúcou sa hodnotou konštanty pružnosti $K/|J|$ dochádza k utlmeniu výchy-

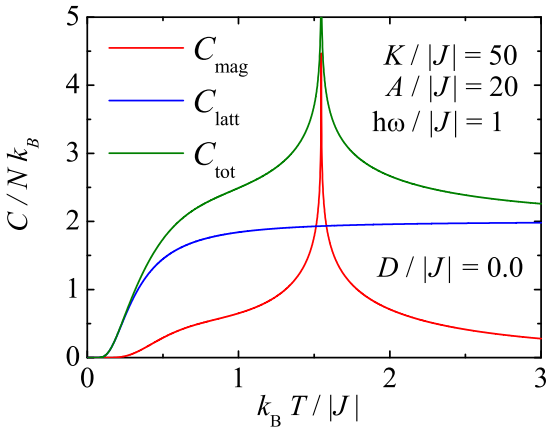


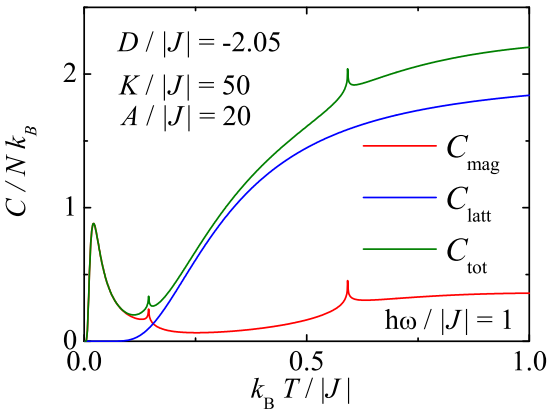
Obr. 6: Smerodajná odchýlka d ako funkcia teploty $k_BT/|J|$ pre konštantnú hodnotu magnetoelastickej interakcie $A/|J| = 20$, konštantu pružnosti $K/|J| = 50$, niekoľko rôznych hodnôt jednoiónovej anizotropie $D/|J|$ a dve typické frekvencie mriežkových kmitov: (a) $\hbar\omega/|J| = 1$; (b) $\hbar\omega/|J| = 8$.

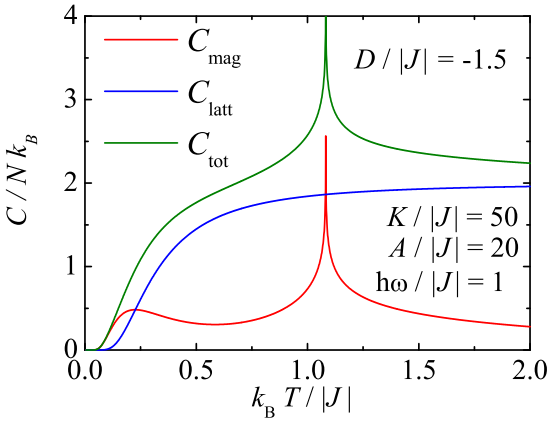
liek dekorujúcich atómov z ich rovnovážnej polohy. Zmenšenie charakteristickej frekvencie mriežkových kmitov $\hbar\omega/|J|$, pre ktorú boli zvolené dve typické hodnoty $\hbar\omega/|J| = 1$ a $\hbar\omega/|J| = 8$, mení priebeh výchyliek dekorujúcich atómov z ich rovnovážnej polohy, pričom tiež spôsobuje ich utlmenie. Teplotný efekt tu má za následok očakávaný nárast smerodajnej odchýlky no všimnime si, že pri nízkych teplotách je jej priebeh netriviálny. Druhá dvojica obrázkov 6 (a)(b) reprezentuje fakt, že pri nemeniacej sa hodnote konštanty pružnosti $K/|J| = 50$ je priebeh smerodajnej odchýlky pre rôzne hodnoty jednoiónovej anizotropie $D/|J|$ pri frustrovanej antiferomagnetickej fáze diametrálne odlišný, čo možno priamo ukázať zo získaného exaktného vzťahu (28). Na prvom obrázku 6 (a) pre hodnotu charakteristickej frekvencie mriežkových kmitov $\hbar\omega/|J| = 1$ vidíme, že nad hodnotou jednoiónovej anizotropie $D/|J| = -2$, ktorá v danom prípade odpovedá fázovému prechodu, je hodnota smerodajnej odchýlky s rastúcou teplotou $k_BT/|J|$ spočiatku rovnaká, v okolí nízkych teplôt ďalej vykazuje odlišnosti pre rôzne hodnoty jednoiónovej anizotropie a pri vyšších teplotách opäť splýva do spoločnej hodnoty. Pre $D/|J| = -2$ z fázového rozhrania je počiatočná hodnota smerodajnej odchýlky odlišná oproti zvyšným hodnotám a s rastúcou teplotou jej priebeh analogicky narastá do spoločnej hodnoty. Reentrantné správanie ďalej spôsobí, že na intervale hodnôt jednoiónovej anizotropie $D/|J|$ v rozmedzí -2.095 až -2.0 dochádza k odlišnému teplotnému správaniu sa smerodajnej odchýlky. Je možné ukázať, že teplotná derivácia priebehu smerodajnej odchýlky z tejto oblasti vykazuje dve singularity. Zostávajúce hodnoty pre $D/|J| < -2.095$ pri vyšších teplotách analogicky splývajú do spoločnej hodnoty. Na druhom obrázku 6 (b) pozorujeme, ako sa pre hodnotu charakteristickej frekvencie mriežkových kmitov $\hbar\omega/|J| = 8$ zmení priebeh smerodajnej odchýlky.

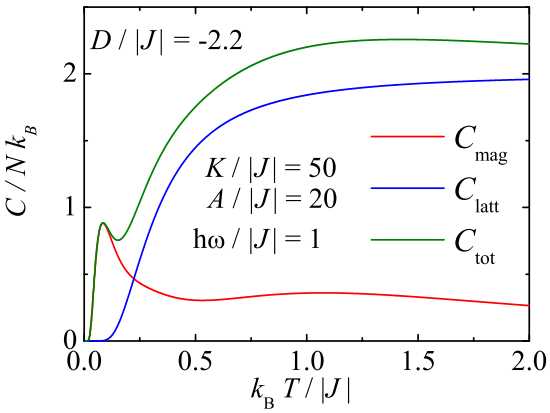
3.2.4 Tepelná kapacita

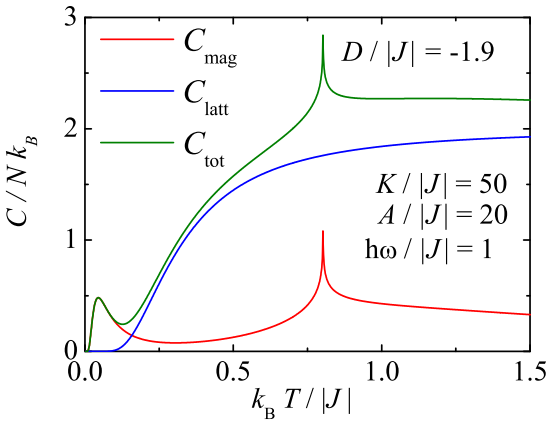
Poslednou študovanou veličinou pre frustrovanú antiferomagnetickú fázu je tepelná kapacita, ktorú sme opäť normovali na celkový počet uzlov pôvodnej štvorcovej mriežky N a Boltzmanovu konštantu k_B. Na jej výpočet bolo použité numerické derivovanie analytického výrazu (19) pre vnútornú energiu. Použitá bola reprezentatívna dvojica parametrov magnetoelastickej interakcie $A/|J| = 20$ a konštanty pružnosti $K/|J| = 50$, na základe priebehov smerodajnej odchylky na obrázku 5 z predchádzajúcej podkapitoly tak, aby nebola narušená platnosť harmonickej aproximácie a zároveň bola splnená podmienka pre frustrovanú antiferomagnetickú fázu. Na priebehu tepelnej kapacity ako funkcie teploty zobrazenom na sade obrázkov 7, kedy bola použitá charakteristická frekvencia mriežkových kmitov $\hbar\omega/|J| = 1$, vidíme výskyt logaritmickej singularity pre hodnoty jednoiónovej anizotropie $D/|J| > -2$, ktorá odzrkadľuje kritickú teplotu fázového prechodu z antiferomagnetickej fázy do paramagnetickej. V dôsledku reentrantného správania možno pozorovať výskyt dvoch logaritmických singularít pri hodnotách jednoiónovej anizotropie z intervalu hodnôt $-2.095 < D/|J| < -2.0$ v súlade s fázovým diagramom zobrazeným na obrázku 3. Ak je hodnota jednoiónovej anizotropie $D/|J|$ vy-

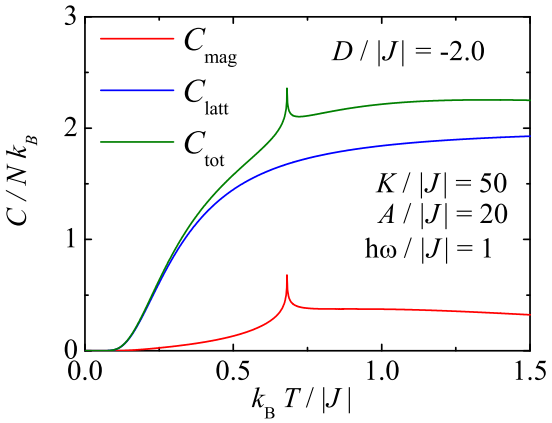






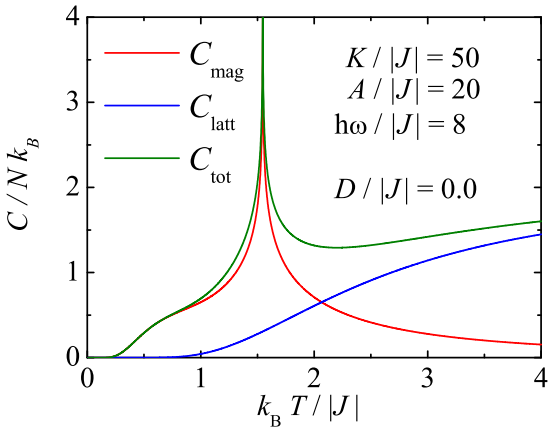


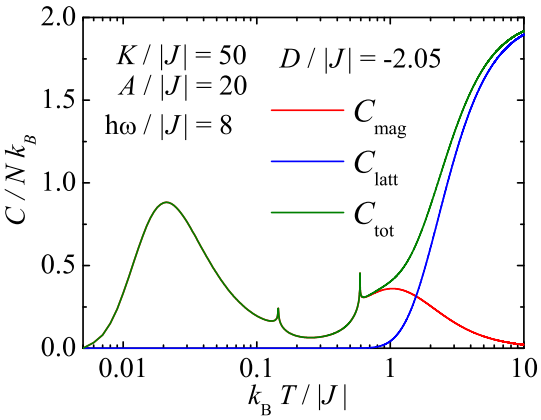


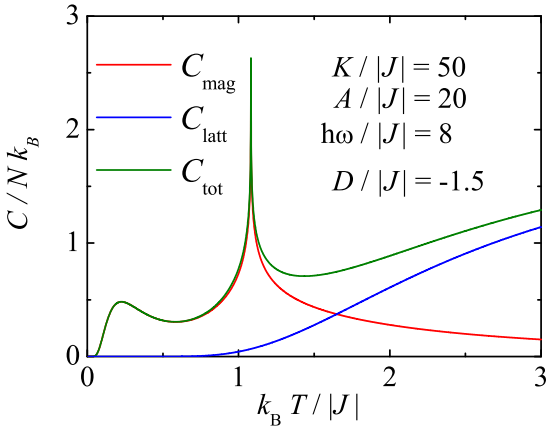


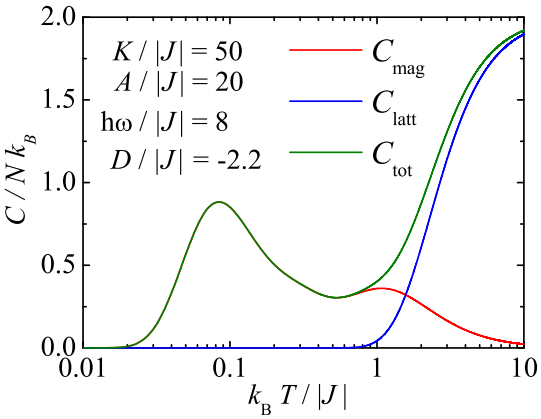
Obr. 7: Tepelná kapacita C/Nk_B ako funkcia teploty $k_BT/|J|$ pre konštantnú hodnotu magnetoelastickej interakcie $A/|J| = 20$, charakteristickú frekvenciu mriežkových kmitov $\hbar\omega/|J| = 1$, konštantu pružnosti $K/|J| = 50$ a niekoľko rôznych hodnôt jednoiónovej anizotropie $D/|J|$.

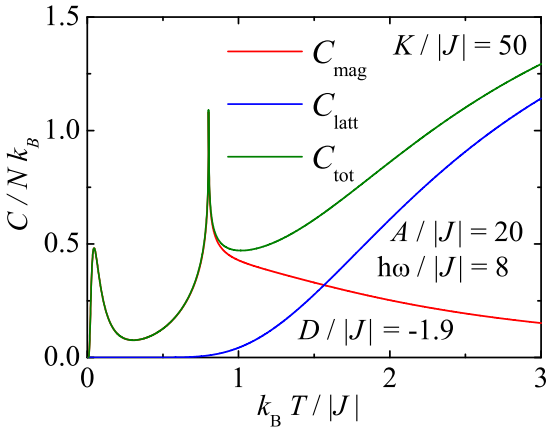
braná z blízkeho okolia fázového prechodu, potom pozorujeme výskyt oblého Schottkyho maxima, ktoré sa objavuje pri teplote menšej ako je hodnota kritickej teploty $k_BT_C/|J|$ a jeho pôvod môžno vysvetliť teplotnými excitáciami dekorujúcich spinov S_i. Pre poslednú sadu obrázkov 8 bola zvolená charakteristická frekvencia mriežkových kmitov na hodnotu $\hbar\omega/|J| = 8$, aby bol príspevok k tepelnej kapacite pochádzajúci od mriežkových oscilácií posunutý k vyšším teplotám. Vidíme, že pre takto zvolenú sadu parametrov vzniká ďalšie dodatočné oblé maximum z mriežkového príspevku tepelnej kapacity nad hodnotou kritickej teploty $k_BT_C/|J|$ a naviac, pozorujeme výskyt oboch logaritmických singularít medzi dvojicou vzniknutých maxím. V limite vysokých teplôt konverguje tepelná kapacita k limitnej hodnote $C/Nk_B = 2$ pre všetky hodnoty parametrov vzhľadom na nulový príspevok magnetického podsystému k celkovej tepelnej kapacite.

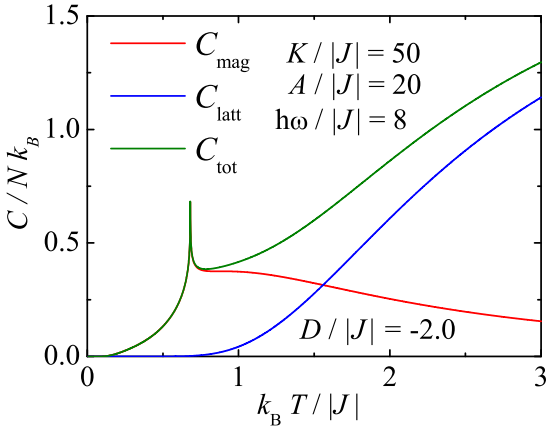












Obr. 8: Tepelná kapacita C/Nk_B ako funkcia teploty $k_BT/|J|$ pre konštantnú hodnotu magnetoelastickej interakcie $A/|J| = 20$, charakteristickú frekvenciu mriežkových kmitov $\hbar\omega/|J| = 1$, konštantu pružnosti $K/|J| = 50$ a niekoľko rôznych hodnôt jednoiónovej anizotropie $D/|J|$.

4 Záver

Táto študentská vedecká práca je venovaná exaktnému riešeniu Isingovho modelu so zmiešanými spinmi a spinovou-fonónovou interakciou na dekorovanej štvorcovej mriežke s prípustnými mriežkovými vibráciami len dekorujúcich atómov, pričom veľkosť spinu dekorujúcich atómov môže nadobúdať ľubovoľné hodnoty. Z mapovacej korešpondencie s jednoduchým Isingovým modelom so spinom $1/2$ na štvorcovej mriežke a využitím harmonickej aproximácie boli odvodené presné analytické výsledky pre kritické teploty, magnetizácie jednotlivých podmriežok, 'staggered' magnetizáciu, vnútornú energiu a smerodajnú odchýlku.

Uvažovaním spinového systému s dekorujúcimi spinmi veľkosti $S = 1$ sme preskúmali fázový diagram základného stavu, teplotnú závislosť 'staggered' magnetizácie, smerodajnej odchýlky a tepelnej

kapacity. Ukázali sme, že uvažovaný spinový model sa môže nachádzať v základnom stave v troch fázach, ktoré sú navzájom oddelené fázovým prechodom prvého druhu a pri konečných (nenulových) teplotách krivkou fázového prechodu druhého druhu. Pre fázový prechod z frustrovanej antiferomagnetickej fázy do neusporiadanej paramagnetickej boli preštudované teplotné závislosti smerodajnej odchýlky a tepelnej kapacity pri rôznych hodnotách interakčných parametrov. Naviac bolo v tejto fáze zistené reentrantné správanie, ktoré prináša do systému netriviálne teplotné závislosti spontánnej 'staggered' magnetizácie a tepelnej kapacity.

Pod'akovanie

Moje pod'akovanie patrí najmä vedúcemu práce, doc. Strečkovi, za vedenie, odbornú pomoc a cenné pripomienky pri celkovom spracovaní.

Literatúra

[1] STREČKA, J. - ROJAS, O. - DE SOUZA, S. M. Spin-phonon coupling induced frustration in the exactly solved spin-1/2 Ising model on a decorated planar lattice. In *Physical Letters A*, 2012, vol. 376, p. 197.

[2] LENZ, W. Beiträge zum Verständnis der magnetischen Eigenschaften in festen Körpern. In *Physikalische Zeitschrift*, 1920, vol. 21, p. 613-615.

[3] ISING, E. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. In *Zeitschrift für Physik*, 1925, vol. 31, p. 253-258.

[4] WANNIER, G. H. Antiferromagnetism. The Triangular Ising Net. In *Physical Review*, 1950, vol. 79, p. 357-364.

[5] WANNIER, G. H. Antiferromagnetism. The Triangular Ising Net. In *Physical Review B*, 1973, vol. 7, p. 5017-5017.

[6] HOUTAPPEL, R. M. F. Order-disorder in Hexagonal Lattices. In *Physica*, 1950, vol. 16, p. 425-455.

[7] SYOZI, I. Statistics of Kagomé Lattice. In *Progress of Theoretical Physics*, 1951, vol. 6, p. 306-308.

[8] FISHER, M. E. Transformations of Ising Models. In *Physical Review*, 1959, vol. 113, p. 969-981.

[9] ROJAS, O. - VALVERDE, J. S. - DE SOUZA, S. M. Generalized transformation for decorated spin models. In *Physica A*, 2009, vol. 388, p. 1419-1430.

[10] STREČKA, J. Generalized algebraic transformations and exactly solvable classical-quantum models. In *Physical Letters A*, 2010, vol. 374, p. 3718-3722.

[11] STREČKA, J. *On the Theory of Generalized Algebraic Transformations*. Germany : LAP, 2010. 72 p. ISBN 978-3-8383-6200-7.

[12] ROJAS, O. - DE SOUZA, S. M. Direct algebraic mapping transformation for decorated spin models. In *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2011, vol. 44, p. 245001.

[13] ENTING, I. G. The second-neighbour Ising chain as a model for spin-phonon interactions: susceptibility. In *Journal of Physics A: Mathematical, Nuclear and General*, 1973, vol. 6, p. 170.

[14] ONSAGER, L. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. In *Physical Review*, 1944, vol. 65, p. 117-149.

[15] DOMB, C. On the Theory of Cooperative Phenomena in Crystals. In *Advances in Physics*, 1960, vol. 9, p. 149-244.

[16] BARRY, J. H. - KHATUN, M. - TANAKA, T. Exact solutions for Ising-model even-number correlations on planar lattices. In *Physical Review B*, 1988, vol. 37, p. 5193-5204.

[17] YANG, C. N. The Spontaneous Magnetization of a Two-Dimensional Ising Model. In *Physical Review*, 1952, vol. 85, p. 808-816.

[18] CALLEN, H. B. A note on Green functions and the Ising model. In *Physical Letters*, 1963, vol. 4, p. 161.

[19] SUZUKI, M. Generalized Exact Formula for the Correlations of the Ising Model and Other Classical Systems. In *Physical Letters*, 1965, vol. 19, p. 267-268.

[20] JAŠČUR, M. Exact results for a decorated Ising model. In *Physica A*, 1988, vol. 252, p. 217-224.

[21] DAKHAMA, A. Exact solution of a decorated ferrimagnetic Ising model. In *Physica A*, 1988, vol. 252, p. 225-237.

Electron Induced Fluorescence of Hydrogen

Anita Ribar *
Supervisor: Juraj Országh ‡

Dept. of Experimental Physics, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

Abstract

Study of hydrogen excitation by impact of monochromatic electrons was performed using a crossed electron/molecular beams apparatus. Fluorescence spectra were recorded by optical spectrometer in the range of 200-700 nm. In this region a large number of singlet and triplet molecular transition were identified besides Balmer's lines, Fulcher (α-δ) series, continuum H_2 ($a^3\Sigma^+_g \rightarrow b^3\Sigma^+_u$). From the measured excitation curves the threshold energies for the excitation of H_2 molecule into the state $a^3\Sigma^+_g$ were determined. Cross sections of the continuum H_2 ($a^3\Sigma^+_g \rightarrow b^3\Sigma^+_u$) at wavelengths greater than 500nm were measured for the first time as known.

Keywords: hydrogen, emission spectrum, cross-section, threshold, continuum

1 Introduction

Many different theoretical and experimental methods were used to study the spectrum of hydrogen molecule, resulting in a great amount of data concerning the hydrogen atom and molecule.

The spectra of molecular hydrogen were studied by Richardson [Richardson et al., 1934] who examined the rotational structure of the secondary system of hydrogen molecule with Hilger quartz spectrograph. Afterwards, Gale and [Gale et al., 1928] published rich spectrum containing more than 3000 rotational lines using the interferometry of discharge spectra. They sorted lines by their relative intensities. Later Finkelburg [Finkelburg et al., 1929] named the observed molecular bands based on already known atomic systems of hydrogen or on data of other authors who observed or predicted their existence. In order to make a better systematic review of his own work and work of previous authors, Herzberg [Herzberg et al., 1963] has made a table with symbolic representation of examined states. As the hydrogen molecule is important not just for its simplicity and better understanding of more complex systems but also because of its energetic potential as a fuel for the future its isotopes were examined [Dieke et al., 1958] Dieke gathered and tabulated known levels of all of the combinations of hydrogen atoms combined into the diatomic hydrogen molecules. In the first half of the previous century, the knowledge about the spectra of molecules, which are commonly used in chemistry, chemical technology, or are interesting in astrophysics, medicine etc., were reviewed and listed by Pearse [Pearse and Gaydon, 1965] . Sharp [Sharp, 1971]presented systematic spectroscopic labeling of the hydrogen lines and compared it compared with Dieke and emphasized that "although much is known about molecular hydrogen and its ions, a considerable amount of research remains to be done." Significant work has been done by Mohlmann and De [Mohlman et al., 1976] who studied emission cross sections of Fulcher-α bands using the electron impact. The maximum value of the cross section was at energy of 15.6eV, but it has been noted that secondary processes are of great importance in determining cross sections for this band considering pressures in range of nearly $3 \cdot 10^{-4}$ mbar. Fulcher-α band was further examined by Kuzmenko [Kuzmenko et al., 1979] , who has published the band strength tables. On the other hand, there were more experiments concerning VUV and EUV region, where Werner and Lyman bands can be observed, [Shemansky et al., 1985] , which is of great importance for astrophysics. Besides the molecular bands, there are reports about hydrogen continuum emission H2 ($a^3\Sigma_g^+ \rightarrow b^3\Sigma_u^+$) mainly in the VUV spectral range [Lavrov et al., 1999] and UV/VIS range. [James et al., 1998]

The motivation for hydrogen emission spectra study is the importance of this molecule for electric discharges of technological relevance, or also for the next generation of nuclear power reactors. Knowledge of the emission spectra of this molecule is useful for modelling and diagnostic of plasmas, and it is also relevant for understanding atmospheric processes on planets where hydrogen/hydrocarbons are present. In this work we present first results concerning electron impact excitation and dissociative excitation of hydrogen molecule. We present emission spectra induced by 14, 25, 50 and 100eV monochromatic electrons in the spectral range 200-700 nm. Continuum has been recorded in almost whole spectral range with the region above 500nm measured probably for the first time. For

* anita.ribar@gmail.com
‡ juraj@orszagh.info

several emission lines we present excitation cross sections and dissociative excitation cross sections as measured in this experiment.

2 Experimental apparatus

Experiment was performed on apparatus schematically presented in Figure 1. Nearly monoenergetic electrons are formed in trochoidal electron monochromator (TEM). The magnetic field of 5×10^{-3}T necessary for operation of TEM is aligned in the direction of the electron beam (blue arrow in the Figure 1). Electron energy resolution was set to 300 meV full width at half maximum (FWHM) as determined by retarding potential method. The electron current was in this case ~750nA as measured by picoampermeter Keithley 6485. The perpendicular beam of molecules was formed by an effusive capillary. Its dimensions are 0.3mm diameter and 10mm length. The reaction occurs under single collision conditions. The purity of hydrogen was 99.98% guaranteed by the supplier. Capacitive pressure gauge, Pfeifer Vacuum CMR 362, was used to measure the pressure inside the capillary and was kept constant during the measurement. The working pressure in the vacuum chamber during measurements was 1×10^{-4}mbar and the background pressure was 8×10^{-9}mbar as measured by Pfeiffer Vacuum gauge PBR 260.

The emitted photons are passing through the bi-convex optical lens made of UV fused silica forming collimated beam of light. Between Czerny-Turner optical monochromator and vacuum chamber MgF_2 window is placed, after which the photons pass through additional plano-convex lens of the same material as the first one focusing the beam onto the entrance slit of the optical monochromator. Resolution of optical monochromator is regulated by slit width (resolution of 0.8 nm FWHM as measured at 588 nm Ar line is achieved with 200 μm, or 70μm slit width for resolution 0.3 nm FWHM at the same line). Photomultiplier on the exit of the optical monochromator was Hammatsu H4220P, which was cooled down to -25°C and was sensitive between 185-710nm.

Surface of the electrodes of TEM and inner wall of the vacuum system were covered with colloidal graphite. This layer and the shape of electrodes in which the filament was located, reduced the background radiation from the hot filament.

The electron energy scale was calibrated using the emission cross section of the (0,0) band of the 2nd positive system of N_2 ($C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$) at 337 nm and He I ($1s2p\ ^3P^o_{1,2}$ - $1s4d\ ^3D_{1,2,3}$) 447.14 nm emission line using the 14.1eV peak of N_2 ($C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$) (0,0) cross section and 23.736eV of He I ($1s2p\ ^3P^o_{1,2}$ - $1s4d\ ^3D_{1,2,3}$) cross section step.

The apparatus was operated in two regimes (i) fluorescence spectra recording at selected electron energy and (ii) the dependence of specific transition intensity on the electron energy. The dissociative excitation threshold energies were determined by least square fitting method.

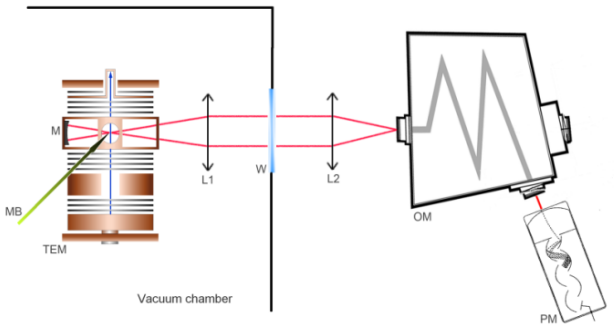


Figure 1: Schematic view of the experimental setup. TEM- Trochoidal electron monochromator, MB – molecular beam, M – spherical mirror, L1, L2 – fused silica lenses, W- MgF_2 window, OM- optical monochromator, PM-photomultiplier.

3 Results and discussion

We have measured the spectrum of hydrogen molecule induced by nearly monoenergetic electrons of 50eV kinetic energy (Figure 2). As it can be seen in the Figure 2, apart from Balmer lines we were able to identify Fulcher α, β, γ, and δ systems, and H_2 ($a^3\Sigma^+_g \rightarrow b^3\Sigma^+_u$) continuum , which actually starts in the VUV region at 121.5nm. Fulcher systems overlap one another and there are several groups of each system that rise from the continuum radiation and can be observed in form of peaks.

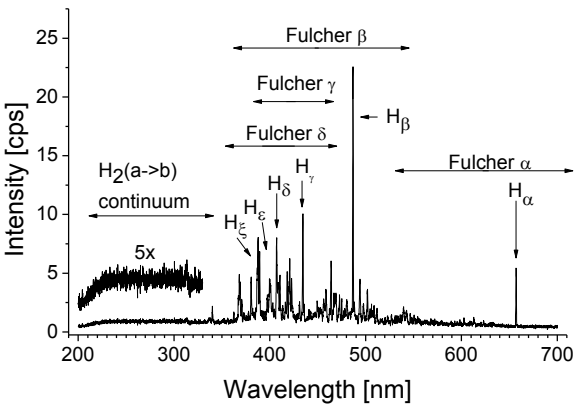


Figure 2: Spectrum of H_2 at 50eV with transitions corresponding to: Balmer series H(α-ζ), Fulcher (α-δ) bands overlapping one another (approximately the range below arrows), continuum $a^3\Sigma^+_g$-> $b^3\Sigma^+_u$.

Noticeable difference in spectra obtained by previous authors [James et al., 1998] at energies 14, 19, and 100eV, at 20 and 100eV [Aguilar et al., 2008] led us to the measurements of hydrogen

molecule spectrum at various energies. (Figure 3 and Figure 4). It has been confirmed that at low energies, more specifically 14eV in our case (Figure 4) only continuum is observable. Having the ability to observe only continuum radiation we could obtain sensitivity curve for the apparatus as this continuum has already been recorded by previous authors, even though not as high as our apparatus could record. Using this [Ajello and Shemansky, 1993] for the wavelengths to 500nm, and previously obtained tungsten filament spectrum from 500nm to 710nm, we were able to build the apparatus function for the whole region of observation. Now we use this function to get the real spectrum shape (Figure 3 and Figure 4) by multiplying the signal recorded by our system (for ex.Figure 2) with this apparatus function.

As it has been already mentioned, we were guided by experience of previous authors who were devoted to measuring emission cross sections and spectra of hydrogen molecule at various energies to examine the difference in forming triplet, singlet states and Balmer lines probabilities. [Aguilar et al., 2008] [James et al., 1998]

It has been proven that at lower energies (14eV Figure 4) only continuum is visible, with raising the energy of impact electrons (25eV Figure 4) both singlet and triplet states begin to form just as Balmer lines. This is the energy when the spectrum is the richest. At higher energies triplet and singlet transitions drastically decrease, and on the other hand Balmer lines are, as it will be seen on their cross sections, still strong. (Figure 3 and Figure 4)

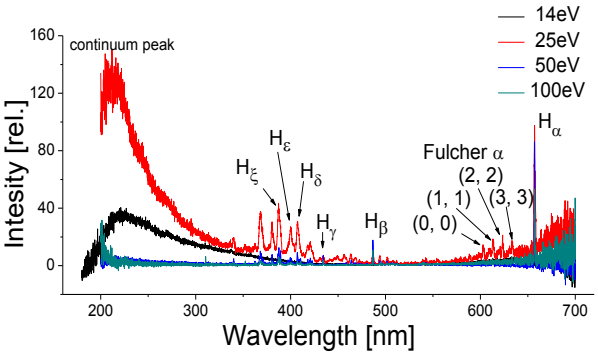


Figure 3: Hydrogen spectra gained at various energies multiplied with sensitivity curve to observe the develepement of singlet, triplet transitions as well as the continuum and Balmer series. Some of the transition wich are or are planet to be examined in more detail are marked

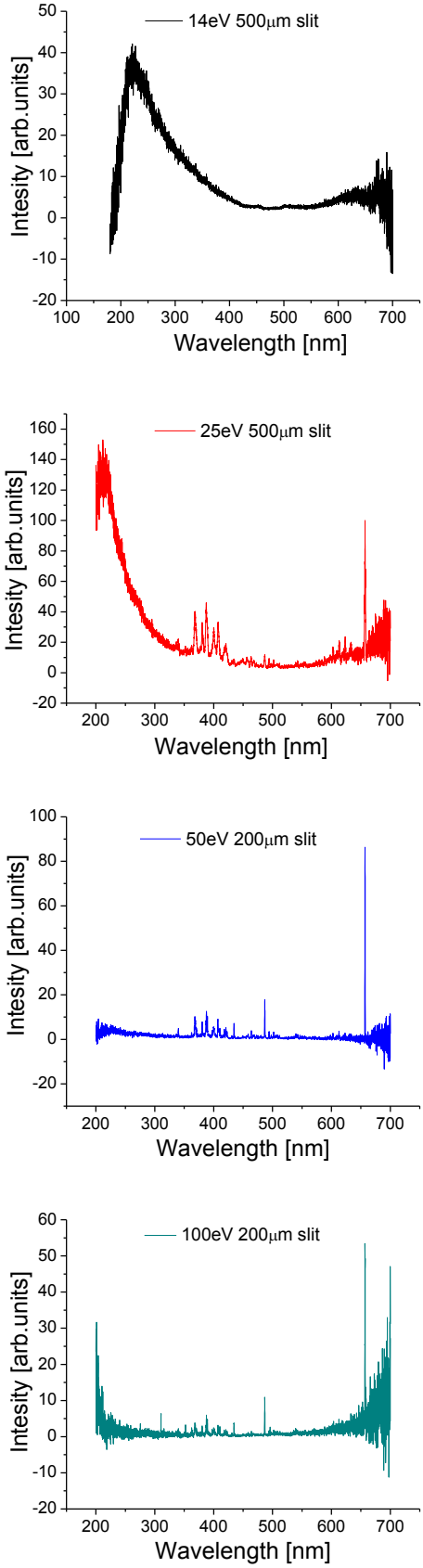


Figure 4: Hydrogen spectra obtained by 14, 25, 50 and 100eV from the top to the bottom graph respectively with difference in resolution depending on the slit widths (200mm slits have greater resolution) are presented.

For the Balmer's lines we have carried out measurements of dissociative excitation functions. These excitation curves were measured at the wavelengths corresponding to Balmer series lines (example is shown in the Figure 5 for H_α and H_γ) and several other wavelengths (230, 638, 650 and 670nm; Figure 6) in order to obtain excitation function for the H_2 (a→b) continuum.

Wavelength (nm)	1st Threshold energy (eV)	2nd treshold energy (eV)
670	12.2±0.5	
657 (H_α)	12.4±0.5	16.4±0.5
650	12.2±0.5	
638	12.5±0.5	
486.8 (H_β)	12.2±0.5	17.1±0.5
434.4 (H_γ)	12.1±0.5	17.8±0.5
410.4 (H_δ)	12.3±0.5	17.5±0.5
397.5 (H_ε)	12.4±0.5	
389.5 (H_ζ)	12.5±0.5	
230	12.1±0.5	

Table 1: Threshold energies of observed transitions within hydrogen continuum $a^3\Sigma^+_g$-> $b^3\Sigma^+_u$ and Balmer series

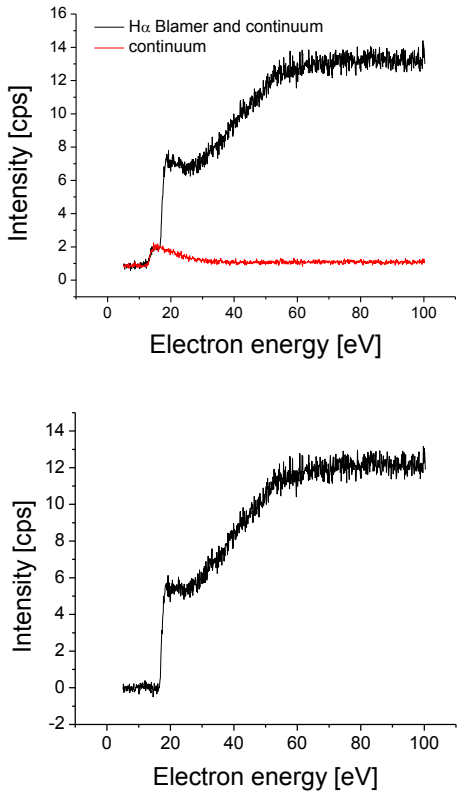


Figure 5: Emission cross-section of transition at 657nm. First graph shows the original signal (black) and conntinuum (red). Continuum is than substracted from the original signal, and cross-section for Balmer H_α is presented on the second graph.

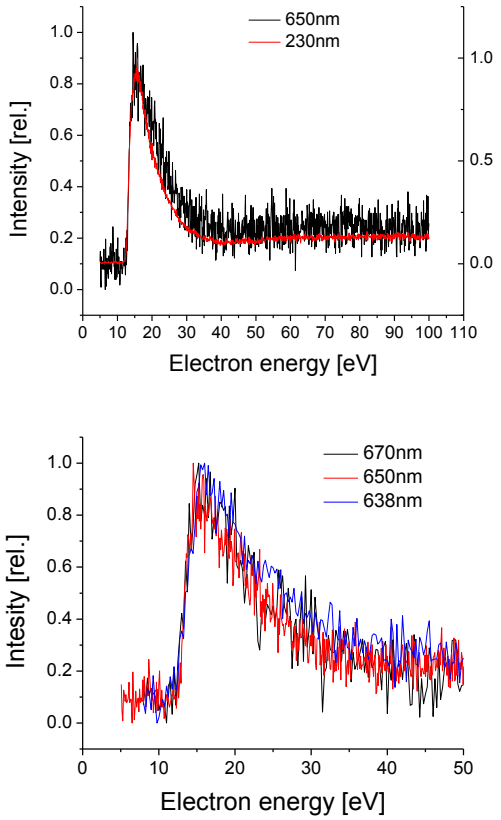


Figure 6: Emission cross-sections of transitions within hydrogen continuum normalized on unit intensity.Measured cross-sections on 650nm and 230nm (upper) have the same shape and threshold, as well as 638, 650 and 670nm (lower)

There are several visible thresholds in the measured excitation curve for H_α. The first of the thresholds for each of the cross-section measurements was determined by fitting procedure and the data are shown in the Table 1. The first threshold corresponds to the threshold for the H_2(a→b) continuum radiation (as enthalpies of formation corresponding to Balmer series lines are higher than obtained energy values). The calculated theoretical minimum of energy needed to excite to the $a^3\Sigma^+_g$ state is 10.2eV. Subtracting the continuum from the obtained signal, we were able to calculate thresholds for first four transitions of Balmer series (H_α $H_\beta H_\gamma$ and H_δ). Because of other processes occurring on the same wavelength as H_ε and H_ζ, we were not able to determine thresholds for these transitions.

The determination of the threshold energies for the Balmer series transitions had to be done after subtracting the continuum contribution to the intensity of the line. On H_α line which raises at 657nm the continuum contribution has been confirmed. This led us to the conclusion that the sensitivity of our apparatus could be used for measurement of continuum cross-sections on wavelengths higher than 500nm, which hasn't been

found in literature. The measurements were performed at 638nm and 670nm (Figure.6.) and compared to the 650nm and 230nm cross sections. All of the cross-sections have almost the same shape and approximately the same threshold energies at 12eV. Continuum presence at wavelengths higher than 500nm has been confirmed.

4 Conclusion

Studies of hydrogen are important for many fields of physics, chemistry, energetic or technology. In this experimental study we focused on electron impact excitation of hydrogen molecule in crossed beams experiment. The spectra of hydrogen at impact energies of 14, 25, 50 and 100eV were recorded and evaluated. Fulcher (α-δ) systems, H_2 ($a^3\Sigma^+_g \rightarrow b^3\Sigma^+_u$) continuum and hydrogen atomic Balmer lines were identified. Excitation curves were measured at the wavelengths corresponding to Balmer lines H(α-ζ), and the first thresholds were determined. In order to determine thresholds for transitions within continuum, four wavelengths, where no other line or band appears, have been chosen. Threshold for the observed continuum transitions are in range of 12.1-12.5±0.5eV, and 16,4-17,8±0.5eV for the second threshold corresponding to Balmer H_α, H_β, H_γ and H_δ.

Acknowledgements

This work was partially supported by the Slovak Research and Development Agency, project Nr. APVV-0733-11, SK-SRB-0026-11, DO7RP-0025-11 and the grant agency VEGA project Nr. VEGA-1/0379/11 and grant UK/596/2013.

References

[Aguilar et al., 2008] Aguilar A., Ajello J. M., Mangina R. S., James G. K. (2008) The electron-excited mid-ultraviolet to near-infrared spectrum of H_2: cross sections and transition probabilities. *The Atrophysical Journal*, 177:388-407

[Ajello and Shemansky, 1993] Ajello J. M., Shemansky D. E. (1993) Electron excitation of the H_2 ($a^3\Sigma^+_g \rightarrow b^3\Sigma^+_u$) continuum in the vacuum ultraviolet. *The Astrophysical Journal*, 407:820-825

[Dieke et al., 1958] Dieke G. H. (1958) The molecular spectrum of hydrogen and its isotopes. *Journal of Molecula Spectroscopy*, 1:494-517

[Finkelburg et al., 1929] Finkelburg W., Mecke R. (1929) Die Bandsysteme im Molekülspetrum des Wasserstoffs. Mitteilung aus dem Physikalischen Institut der Universität Bonn 198.

[Gale et al., 1928] Gale H. G., Monk G. S. and Lee K. O. (1928) Wave-lengths in the secondary spectrum of hydrogen. *The Astrophysical Journal*, Vol. 67, 2:89-113,

[Herzberg et al., 1963] Herzberg G., Spinks J.W. T. (1963) Molecular spectra and molecular structure, Second edition, Princeton, New Jersey

[James et al., 1998] James G. K., Ajello J. M., Pryor W. R. (1998) The middle ultraviolet-visble spectrum of H_2 excited by electron impact. *Journal od geophysical research*, Vol. 103, E9, 20 113-20 123

[Kuzmenko et al., 1979] Kuzmenko N. E., Kuznetsova L. A., Monyakin A. P., Kuyzakov Y. Y., Plastinin Y. A. (1979) Electronic transition probabilities and lifetimes of electronically excited states of diatomic molecules. *Sov.Phys.Usp*. 22:160

[Lavrov et al., 1999] Lavrov B. P., Melnikov A. S. (1999) UV continuum emission and diagnostics of hydrogen-containing nonequilibrium plasmas. *Physical review E*, 59:3526-3543

[Mohlman et al., 1976] Mohlmann G. R., De Heer F. J. (1976) Emission cross sections of the $H_2(3p^3\Pi_u,\upsilon' \rightarrow 2s^3\Sigma_g^+)$ transition for electron impact on H_2. *Chemical physics letters*, Vol. 43, 2:240-244

[Pearse and Gaydon, 1965] Pearse R. W. B., Gaydon A. G. (1965), THE IDENTIFICATION OF MOLECULAR SPECTRA, 3rd edition, London, p.170

[Richardson et al., 1934] Richardson O. W., Rymer T. B. (1934) The spectrum of H_2. *Proc. R. Soc. Lond. A* 147:24-47l

[Sharp, 1971] Sharp T. E. (1971) Potential-energy curves for molecular hydrogen and its ions. Atomic data 2:119-169

[Shemansky et al., 1985] Shemansky D. E., Ajello J. M., Hall D. T. (1985) Electron impact of H_2: Rydberg band systems and the Benchmatk dissociative cross section for H Lyman-alpha. *The Astrophysical Journal*, 296:765-773

Hľadanie exotického hadrónového stavu Θ^+ v centrálnych zrážkach PbPb na experimente ALICE

Michal Šefčík[1*]
Školiteľ: Marek Bombara[1‡]

[1] Katedra jadrovej a subjadrovej fyziky, Ústav fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Jesenná 5, 04154 Košice

Abstrakt

Vo viacerých experimentoch bola pozorovaná častica Θ^+ s hmotnosťou okolo 1540 MeV/c^2, ktorej minimálna konfigurácia vyžaduje štyri kvarky a jeden antikvark, teda patrí medzi hypotetické hadróny zložené z piatich kvarkov/antikvarkov nazývané pentakvarky [Close, 2005]. Kvarkové stavy zložené z viac ako troch kvarkov sú v kvantovej chromodynamike povolené a ich existencia alebo neexistencia je dôležitá pre výskum povahy silnej interakcie. Experimentálne dôkazy o existencii pentakvarkov sú v súčasnosti kontroverzné, niektoré experimenty s vysokou štatistikou nenašli dôkazy pre Θ^+ [Shirotori et al., 2012].

V našej práci sme analyzovali dáta z eperimentu ALICE na LHC v CERNe. Experiment ALICE je vhodný pre hľadanie exotických hadrónových stavov vďaka tomu, že pri zrážkach ťažkých jadier môže vznikať kvarkovo-gluónová plazma, hadronizáciou z ktorej môžu kvarky ľahšie vytvárať hadróny zložené z komplikovanejších skupín kvarkov ako v hadrónových zrážkach. Pre rozpadovú hypotézu $\Theta^+ \rightarrow p^+ + K^0$ sme počítali invariantnú hmotnosť páru detektorom zrekonštruovaných častíc. V histograme invariantných hmotností by sa Θ^+ prejavila ako zvýšenie početnosti pri hmotnosti Θ^+.

Predpokladali sme 2 možné scenáre rozpadu: v silnom kanáli produkty rozpadu vychádzajú priamo z interakčného bodu. Pozadie v tomto prípade vzniká náhodnými kombináciami častíc, ktoré nepochádzajú z jedného rozpadu. Jeho tvar sme odhadli metódou zmiešavania, teda kombinovaním častíc z rôznych zrážok. Pre rozpad v slabom kanáli sme využili existujúci framework na rekonštrukciu multipodivných hyperónov (Ξ^- a Ω^-), topológia rozpadu ktorých by mala byť taká istá ako v $\Theta^+ \rightarrow p^+ + K^0$.

Kľúčové slová: pentakvark, exotické hadrónové stavy, dvojčasticový rozpad, experiment ALICE

Úvod

V súčasnosti sa za fundamentálne (bezštruktúrne) častice považujú leptóny (elektrón, mión, tauón a im prislúchajúce neutrína), kvarky (v šiestich vôňach) a výmenné častice interakcií (fotón, gluón, W a Z bozóny). Leptóny a kvarky sú rozdelené do troch generácií, pričom častice vyšších generácií sa rozpadajú na ľahšie častice predchádzajúcich generácií, v konečnom stave sú častice prvej generácie. Atómy sú zložené len z častíc prvej generácie (z elektrónov, up a down kvarkov).

Častice charakterizujeme okrem iného pokojovou hmotnosťou, spinom, elektrickým nábojom a dobou života. Častice s pokojovou hmotnosťou rovnou nule sa pohybujú rýchlosťou svetla vo vákuu, častice s pokojovou hmotnosťou väčšou ako nula sa pohybujú pomalšie ako svetlo vo vákuu. Spin (vlastný moment hybnosti) častíc môže byť celočíselný a poločíselný. Častice s celočíselným spinom nazývame bozóny, medzi ne zaraďujeme fotóny a mezóny. Častice s poločíselným spinom nazývame fermióny, platí pre ne Pauliho vylučovací princíp a patria medzi ne leptóny a baryóny. Všetky voľne pozorované častice majú elektrický náboj rovný celočíselnému násobku elementárneho náboja $e=1{,}602.10^{-19}$C. Doba života častíc závisí od toho, akou interakciou prebieha ich rozpad. Častice, ktoré sa rozpadajú silnou interakciou nazývame rezonanciami. Ich doby života sú 10^{-23}-10^{-24}s. Častice, ktoré sa rozpadajú elektromagnetickou alebo slabou interakciou žijú dlhšie, $\tau > 10^{-20}$s a nazývame ich kvázistabilné.

Kvarky nikdy nie sú pozorované voľne, pretože silná interakcia ich zväzuje do skupín, ktoré nazývame hadróny. Medzi hadróny patria baryóny zložené z trojíc kvarkov a mezóny zložené z dvojíc kvark-antikvark. Hadróny charakterizujeme kvantovými číslami izospin, priemet izospinu, podivnosť, pôvab, krása, pravda, ktoré sa zložia z kvantových čísel kvarkov, ktoré ich tvoria, a teda určujú ich kvarkové zloženie. Kvarkový model

*sefcikm@centrum.sk
‡marek.bombara@cern.ch

obmedzuje možné kombinácie hodnôt kvantových čísel hadrónov, napr. baryón s podivnosťou -3 musí mať elektrický náboj -1. Najznámejšími baryónmi sú nukleóny protón a neutrón, ktoré sú zložené len z up a down kvarkov.

kvark	up	down	strange	charm	bottom	top
hmotnosť [GeV/c^2]	0,002	0,005	0,1	1,3	4,2	170
elektrický náboj	+2/3	-1/3	-1/3	+2/3	-1/3	+2/3
spin	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2
baryónové číslo	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3
izospin	1/2	1/2	0	0	0	0
projekcia izospinu	1/2	-1/2	0	0	0	0
podivnosť	0	0	-1	0	0	0
pôvab	0	0	0	1	0	0
krása	0	0	0	0	1	0
pravda	0	0	0	0	0	1

Tabuľka 1: Vlastnosti a kvantové čísla kvarkov.

Keď sa koncom 40-tych a začiatkom 50-tych rokov objavili prvé podivné častice (K mezóny; Λ, Σ a Ξ baryóny – nazývané hyperóny), zaviedlo sa na vysvetlenie ich vlastností kvantové číslo podivnosť. V 60-tych rokoch sa rozvinul kvarkový model, ktorý sa potvrdil objavom Ω hyperónu a pôvabných častíc a neskôr aj častíc obsahujúcich bottom kvark, v 70-tych rokoch. Top kvark sa prvýkrát experimentálne potvrdil v roku 1995, rozpadá sa však prirýchlo a tak nevytvára hadróny.

Existujú skupiny častíc (napr. (p^+, n), (π^+, π^0, π^-), (Σ^+, Σ^0, Σ^-)), ktoré silno interagujú rovnako, zásadne sa líšia iba elektrickým nábojom. Tieto skupiny častíc nazývame izospinové (alebo nábojové) multiplety a môžeme ich chápať ako rozličné stavy jednej častice. Každý multiplet charakterizujeme izotopickým spinom (izospinom) I, pričom 2I+1 je počet častíc (stavov) v multiplete. Každej častici v multiplete sa potom priradí rôzna projekcia izospinu I_3. Napríklad protón má I=1/2, I_3=1/2 a neutrón I=1/2, I_3=-1/2.

Keďže kvarky majú spin ½, musia spĺňať Pauliho vylučovací princíp. Existencia baryónov zložených z troch rovnakých kvarkov tomu odporuje. Preto sa zaviedlo ďalšie kvantové číslo farba. Každý kvark môže existovať v troch farbách: červenej, zelenej a modrej. Antikvarky majú zasa antifarby (antičervená, antizelená a antimodrá). Farebný náboj rozhoduje o tom, ako spolu kvarky silne interagujú. Podobne ako v elektrostatike, približne platí, že rovnaké náboje sa odpudzujú a rôzne sa priťahujú. Hadróny sú bezfarebné – baryóny sú zložené z trojice červená, zelená a modrá; mezóny sú zložené z dvojice farba-antifarba.

Kvantová chromodynamika (teória popisujúca silné interakcie medzi kvarkami) povoľuje aj zložitejšie stavy zložené z väčšieho počtu kvarkov. V niekoľkých experimentoch boli ohlásené pozorovania úzkeho signálu [Close, 2005] v rozdelení invariantných hmotností okolo 1540 MeV/c^2 pri skúmaní rozpadov hypotetickej častice $\Theta^+ \rightarrow K^+n$ a $\Theta^+ \rightarrow pK_S^0$. Θ^+ je častica s kladným elektrickým nábojom, kladným baryónovým číslom a kladnou podivnosťou. Na vyskladanie takejto častice je potrebných minimálne 5 kvarkov. Pozitívna podivnosť znamená, že je prítomný podivný antikvark a aby baryónové číslo bolo 1, je treba pridať ďalšie 4 kvarky (konkrétne Θ^+ má zloženie $uds\bar{u}d$). Častice zložené z piatich kvarkov nazývame pentakvarky.

V súčasnosti sú experimentálne dôkazy o existencii pentakvarkov kontroverzné, preto táto téma priťahuje pozornosť experimentátorov, ktorí sa snažia potvrdiť alebo vyvrátiť túto hypotézu, ako aj teoretikov, ktorí skúmajú, čo by znamenala existencia alebo neexistencia pentakvarkov pre teóriu popisujúcu interakcie medzi kvarkami, kvantovú chromodynamiku (QCD).

1 Rozpady a zákony zachovania

Častice medzi sebou interagujú rôznymi spôsobmi. Sú známe 4 typy interakcií, podľa klesajúcej intenzity: silná, elektromagnetická, slabá a gravitačná. Silné interakcie pôsobia len medzi hadrónmi. Držia pokope kvarky v hadrónoch a nukleóny v jadrách. Sú krátkeho dosahu, asi do 10^{-15}m. Elektromagnetické interakcie pôsobia medzi nabitými časticami. Priťahujú elektróny k jadrám a atómy navzájom. Takmer všetky sily (okrem gravitácie), ktoré poznáme z bežného života sú elektromagnetického pôvodu. Dosah elektromagnetických síl nie je obmedzený vzdialenosťou, sú dlhého dosahu. Slabá interakcia je prítomná pri rozpadoch mnohých častíc (vrátane β rozpadu). Má krátky dosah. Gravitačná interakcia pôsobí medzi všetkými hmotnými časticami. V makrosvete je dominantná, v mikrosvete je zanedbateľná.

Všetky častice sa rozpadávajú na ľahšie častice, ak je ich rozpad povolený zákonmi zachovania. Okrem bežných veličín, ktoré sa zachovávajú a ktoré sú známe aj z fyziky makrosveta, ako energia, hybnosť, elektrický náboj a moment hybnosti (spin), časticiam sú priradené ďalšie kvantové čísla, ktoré sa zachovávajú. Skutočnosť, že elektrón v β rozpade je stále sprevádzaný antineutrínom, možno vysvetliť zákonom zachovania elektrónového

leptónového čísla, ktoré je rovné +1 pre elektrón a elektrónové neutríno, -1 pre ich antičastice a 0 pre všetky ostatné častice:

$n^0 \rightarrow p^+ + e^- + \bar{\nu}$; 0=0+1-1.

Podobný zákon platí aj pre mión a miónové neutríno, ako aj pre tauón a tauónové neutríno. Protón je stabilný vďaka zákonu zachovania baryónového čísla, ktoré je rovné +1 pre baryóny, -1 pre antibaryóny a 0 pre ostatné častice. Keďže protón je najľahší baryón, nemôže sa rozpadnúť bez narušenia baryónového čísla. Hoci existuje zákon zachovania leptónového čísla a zákon zachovania baryónového čísla, neexistuje zákon zachovania mezónového čísla.

Podivné častice vznikajú veľmi rýchlo a rozpadávajú sa pomaly. To naznačuje, že vznikajú iným spôsobom, ako zanikajú. Skutočne to tak je, vznikajú prostredníctvom silnej interakcie a zanikajú slabou. Keďže podivnosť sa zachováva v silných a elektromagnetických interakciách, musia podivné častice vznikať v pároch. Podivnosť sa ale narúša v slabých interakciách, teda napr. pri rozpade Λ baryónu podivnosť nie je zachovaná:

$\Lambda^0 \rightarrow p^+ + \pi^-$; -1≠0+0.

Rozpad častice na ťažšie častice je zakázaný zákonom zachovania energie. Hmotnosť rozpadávajúcej sa častice je vždy väčšia ako súčet hmotností produktov. Ťažšie častice sa môžu tvoriť len v zrážkach 2 a viacerých častíc, ak je invariantná hmotnosť sústavy zrážajúcich sa častíc väčšia ako pokojová hmotnosť vznikajúcej častice.

2 Dvojčasticový rozpad

Pri dvojčasticovom rozpade zo zákona zachovania hybnosti vyplýva, že v pokojovej sústave rozpadajúcej sa častice musia mať dcérske častice rovnako veľké hybnosti opačného smeru. Zákon zachovania energie je (pracujeme v sústave, kde c=1):

$$M = E_1 + E_2 \quad ,$$

kde M je hmotnosť rodičovskej častice a E_1 a E_2 sú energie dcérskych častíc. Vyjadrime energie pomocou hybnosti a hmotnosti:

$$M = \sqrt{|\vec{p}|^2 + m_1^2} + \sqrt{|\vec{p}|^2 + m_2^2} \quad ,$$

kde m_1 a m_2 sú hmotnosti dcérskych častíc.

Úpravou sa dá veľkosť hybnosti dcérskych častíc vyjadriť ako:

$$|\vec{p}| = \frac{\sqrt{(M^2 - (m_1+m_2)^2)(M^2 - (m_1-m_2)^2)}}{2M} \quad ,$$

teda závisí len od hmotností častíc a je pri danom rozpade stále rovnaká.

Predpokladajme neutrálnu časticu, ktorá sa rozpadá na kladne a záporne nabitú časticu. Označme q_L veľkosť hybnosti rodičovskej častice v laboratórnej sústave. Hybnosti dcérskych častíc q_+, q_- rozložme na dve zložky: q_{+L}, q_{-L} v smere rovnobežnom s hybnosťou rodičovskej častice (pozdĺžny smer) a q_{+T}, q_{-T} v smere kolmom na hybnosť rodičovskej častice (priečny smer). Medzi laboratórnou sústavou a pokojovou sústavou rodičovskej častice platí Lorentzova transformácia:

$$\begin{pmatrix} q_L \\ q_T \\ E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & \beta\gamma \\ 0 & 1 & 0 \\ \beta\gamma & 0 & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_L' \\ q_T' \\ E' \end{pmatrix} \quad ,$$

kde nečiarkované veličiny sú v laboratórnej sústave a čiarkované veličiny sú v pokojovej sústave rodičovskej častice, pričom

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad ,$$

β je rýchlosť rodičovskej častice v laboratórnej sústave v jednotkách rýchlosti svetla. Teda platí:

$$\begin{aligned} q_{+L} &= \gamma q_{+L}' + \beta\gamma E_+' \\ q_{+T} &= q_{+T}' \\ q_{-L} &= \gamma q_{-L}' + \beta\gamma E_-' \\ q_{-T} &= q_{-T}' \\ q_L &= \beta\gamma M \end{aligned} \quad .$$

Ďalej platí:

$$\begin{aligned} q_{+L}' &= q_+' \cos\theta \\ q_{+T}' &= q_+' \sin\theta \\ q_{-L}' &= -q_{+L}' \\ q_{-T}' &= -q_{+T}' \equiv -q_T \end{aligned}$$

kde Θ je uhol medzi hybnosťou kladnej častice a pozdĺžnym smerom.

Definujme α ako:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{q_{+L} - q_{-L}}{q_{+L} + q_{-L}} = \\ &= \frac{\gamma(q_{+L}' - q_{-L}') + \beta\gamma(E_+' - E_-')}{\beta\gamma M} = \\ &= \frac{2q_+' \cos\theta}{\beta M} + \frac{E_+' - E_-'}{M} \end{aligned} \quad ,$$

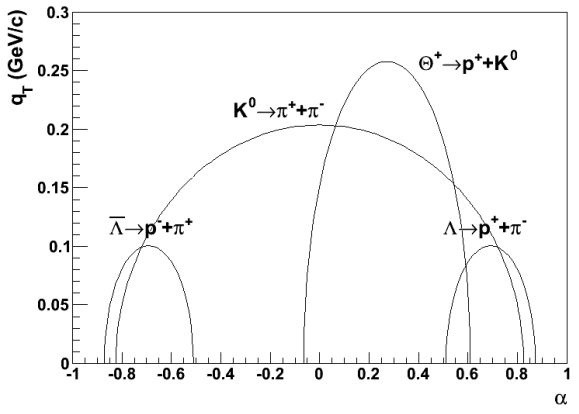
ak zvolíme

$$\xi = \frac{2q_+'}{M}, \quad \varphi = \frac{E_+' - E_-'}{M} \quad ,$$

potom za predpokladu β≈1 (pre relativistické častice) platí

$$\begin{aligned} \alpha &= \xi\cos\theta + \varphi \\ \frac{(\alpha-\varphi)^2}{\xi^2} &= \cos^2\theta = 1 - \sin^2\theta = 1 - \frac{q_T^2}{q_+'^2} \\ \frac{(\alpha-\varphi)^2}{\xi^2} &+ \frac{q_T^2}{q_+'^2} = 1 \end{aligned} \quad .$$

Posledná rovnica je rovnica elipsy, pričom φ, ξ a q_+' závisia len od M, m_+ a m.. V experimente vieme zmerať hybnosti produktov, ak potom vynesieme na jednu os q_T a na druhú os α, experimentálne body budú tvoriť elipsu, ktorej poloha, tvar a veľkosť bude závisieť od druhu rozpadu (obrázok 1). Diagram na obrázku 1 sa nazýva Armenterosov-Podolanského diagram a umožňuje identifikáciu častíc len na základe kinematiky rozpadu.



Obrázok 1: Na obrázku sú znázornené elipsy pre rôzne rozpady vrátane hypotetického pentakvarku, ktorý by sa mal rozpadnúť na protón a kaón (predpokladaná hmotnosť pentakvarku je 1540 MeV/c^2).

3 Analýza dvojčasticových rozpadov v experimtente ALICE

ALICE (A Large Ion Collider Experiment) je jedným zo štyroch veľkých experimentov na LHC v CERNe (medzi ďalšie patria ATLAS, CMS a LHCb). Skúma zrážky ťažkých iónov, pri ktorých je hustota energie dostatočná na to, aby vznikla kvarkovo-gluónová plazma.

3.1 Popis detektorov

ALICE využíva veľké množstvo rôznych detektorov, z ktorých každý poskytuje kúsok informácie, ktorá je potrebná na zrekonštruovanie zrážky (obrázok 3).

Dráhové detektory valcového tvaru ITS (Inner Tracking System) a TPC (Time Projection Chamber) merajú prechod častice v mnohých bodoch, z čoho sa dá určiť dráha častice. V detektore je aplikované pozdĺž osi z (os z je rovnobežná so zväzkom) magnetické pole, čo umožňuje zistiť priečnu hybnosť zo zakrivenia dráhy.

ITS je umiestnený najbližšie ku zväzku a dokáže určiť miesto zrážky (primárny vertex) s presnosťou desatiny milimetra. Častice, ktoré vznikli pri rozpade častíc s veľmi krátkou dobou života sa dajú identifikovať tým, že nevýchádzajú presne z miesta zrážky, čo je možné vďaka vysokému priestorovému rozlíšeniu ITS.

TPC je detektor valcovitého tvaru, vyplnený plynom, v strede rozdelený na dve driftové časti. Pozdĺž osi z je aplikované homogénne elektrické pole. Nabité častice prechádzajúce cez TPC ionizujú plyn pozdĺž ich dráhy. Uvoľnené elektróny sú unášané elektrickým poľom k okrajom valca, kde sú zaznamenané pomocou MWPC (Multi Wire Proportional Chambers), čím sa dajú určiť súradnice r a φ. Súradnica z sa určí pomocou merania driftového času. Častice s pseudorapiditou $|\eta|<0.9$ prejdú celou šírkou TPC a častice s pseudorapiditou $|\eta|<1.5$ prejdú aspoň časťou TPC (pseudorapidita častice je definovaná ako

$$\eta = -\ln\left[\tan\left(\frac{\theta}{2}\right)\right] \quad ,$$

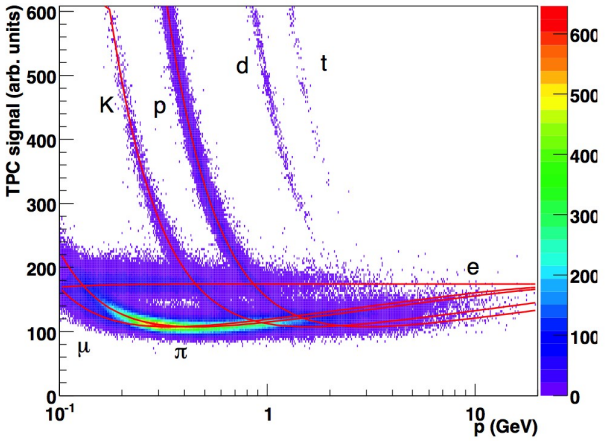
kde Θ je uhol medzi hybnosťou častice a osou z). TPC má schopnosť rozlíšiť dráhy častíc aj pri veľkých hustotách častíc, aké sú produkované pri zrážkach jadier olova (má rozlíšenie 8000 nabitých častíc na jednotku rapidity, rapidita je definovaná ako

$$y = \frac{1}{2}\ln\frac{E+p_z}{E-p_z} \quad ,$$

pre relativistické častice je rapidita približne rovná pseudorapidite). Meraním veľkosti vzniknutého náboja je možné merať energetické straty častíc prechádzajúcich TPC plynom. Energetické straty na jednotku dĺžky sa dajú vypočítať pomocou Betheho-Blochovho vzorca:

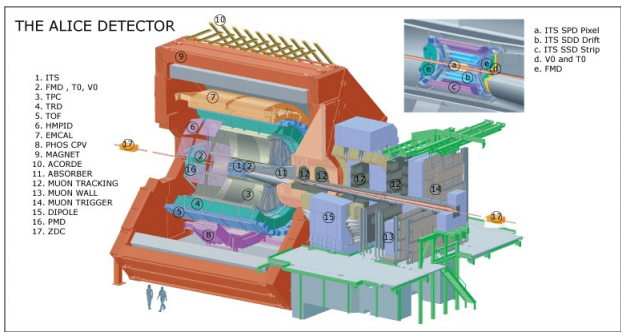
$$-\frac{dE}{dx} = \frac{e^2(Ze)^2 n_e}{4\pi\epsilon_0^2 m_e c^2 \beta^2} \cdot \left[\ln\left(\frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2}{I}\right) - \ln(1-\beta^2) - \beta^2\right] \quad ,$$

kde I je stredný ionizačný potenciál, n_e je hustota elektrónov, Ze je náboj častice. Tieto straty sú pre danú hybnosť závislé od hmotnosti častice (lebo $\beta\gamma = p/m$), teda zmeraním hybnosti a energetických strát možno časticu identifikovať (obrázok 2).



Obrázok 2: Energetické straty pre rôzne častice. Ako vidno, krivky splývajú pri vysokých hybnostiach, teda identifikácia relativistických častíc touto metódou nie je vždy jednoznačná.

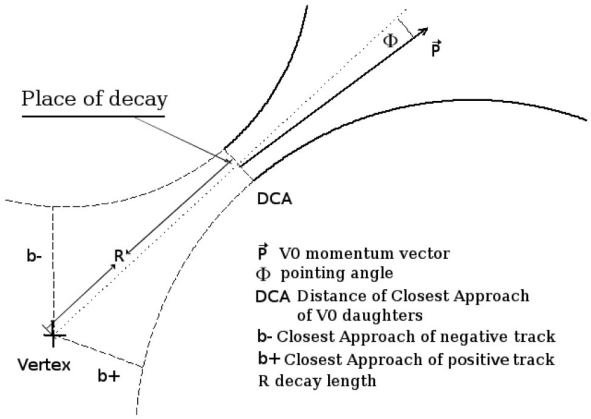
Ďalšiu informáciu o type častice poskytuje TOF (Time Of Flight), ktorý meria čas letu častice, čo spolu s hybnosťou umožňuje určiť hmotnosť. Častice možno identifikovať aj pomocou žiarenia, ktoré vysielajú pri prechode materiálom. HMPID (High Momentum Particle Identification) zaznamenáva Čerenkovovo žiarenie emitované časticami a TRD (Transition Radiation Detector) meria prechodové žiarenie. Pri detekcii miónov sa využíva fakt, že dokážu prejsť materiálom bez väčších strát energie. Miónové detekory sú preto umiestnené vo vonkajšej vrstve za absorbátorom, ktorý pohltí ostatné častice. Detekcia párov miónov môže poskytnúť informáciu o prítomnosti mezónov zložených z kvarkov tej istej vône (kvarkónium). Kalorimeter EMCal (ElectroMagnetic Calorimeter) detekuje spŕšky častíc a PHOS (Photon Spectrometer) detekuje fotóny.



Obrázok 3: Detektorové usporiadanie experimentu ALICE. [CERN web, 2013]

3.2 Selekčné kritériá

Pri analýze (hypotetického) dvojčasticového rozpadu zo zaznamenaných dráh produktov rozpadu (obrázok 4) sa určí miesto rozpadu zistením polôh dcérskych častíc v mieste ich najväčšieho priblíženia. Pri selekčných kritériách sa využíva okrem iného minimálna vzdialenosť dcérskych dráh DCA, minimálna vzdialenosť pozitívnej (negatívnej) dráhy od miesta zrážky b_+ (b_-) a vzdialenosť miesta rozpadu od miesta zrážky R. Uhol Φ medzi vektorom smerujúcim od miesta zrážky k miestu rozpadu a vektorom hybnosti neutrálnej častice V^0 je malý ak V^0 vychádza priamo z miesta zrážky, ale môže byť veľký, ak V^0 pochádza z rozpadu inej častice.

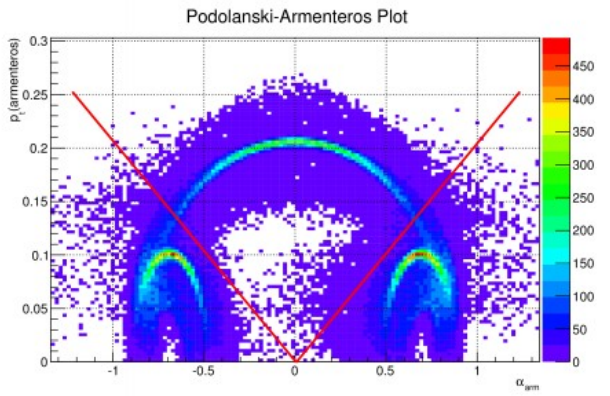


Obrázok 4: Znázornenie rozpadu neutrálnej častice. [Kaliňák, 2012]

Selekčnými kritériami pre dráhy nabitých častíc (tracky) sa snažíme vyberať častice, ktoré sú konzistentne videné v oboch dráhových detektoroch (ITS aj TPC). Častica by mala preletieť dostatočnou šírkou detektora, aby sa jej dráha dala zrekonštruovať s potrebnou presnosťou. Nepružnou zrážkou vo vnútri detektora sa môže hybnosť častice prudko zmenšiť a dráha takejto častice môže byť vyhodnotená ako dráha dvoch častíc. Preto požadujeme, aby dráha častice bola zložená aspoň zo 70-tich bodov (signál alebo skupina signálov blízko seba v TPC - cluster) zo 160 možných.

Minimálna vzájomná vzdialenosť dcérskych trackov V^0 rozpadu musí byť malá, lebo pochádzajú z toho istého rozpadu. Ich minimálna vzdialenosť od miesta zrážky by naopak nemala byť malá, pretože nevychádzajú z miesta zrážky, ale z miesta rozpadu častice, ktorá prešla istú vzdialenosť. Ak majú častice príliš malú hybnosť, magnetické pole môže zakriviť ich dráhu natoľko, že sa vrátia do stredu detektora, čo vedie k nežiaducim efektom (napr. dráha takejto častice môže byť zaznamenaná ako dráha dvoch častíc).

Pri hľadaní neutrálnych častíc, ktoré sa rozpadnú na dve nabité častice (rozpady V^0, v našom prípade K^0), vieme zistiť invariantnú hmotnosť dcér pre danú časticovú hypotézu. Vyberáme iba také páry, ktorých invariantná hmotnosť je konzistentná s našou hypotézou. Takisto sa dá využiť kinematika rozpadu (α a q_T premenné popísané v kapitole 3).



Obrázok 5: Znázornenie selekčného kritéria pre Armenterosove-Podolanského premenné.

Ak vyberieme len tie páry častíc, ktoré padnú na grafe na obrázku 5 nad červené čiary (červená krivka je daná rovnicou $q_T = 0{,}2|\alpha|$), vylúčime tým častice pochádzajúce z rozpadov lambda a antilambda hyperónov. Ďalej overíme, či sú náboje dcérskych častíc opačné (lebo pochádzajú z rozpadu neutrálnej častice a platí zákon zachovania elektrického náboja).

Is on TPC refit	true
nCrossedRowsTPC	≥ 70
findable	> 0
nCrossedRowsTPC/findable	≥ 0,8

Tabuľka 2: Selekčné kritériá pre track.

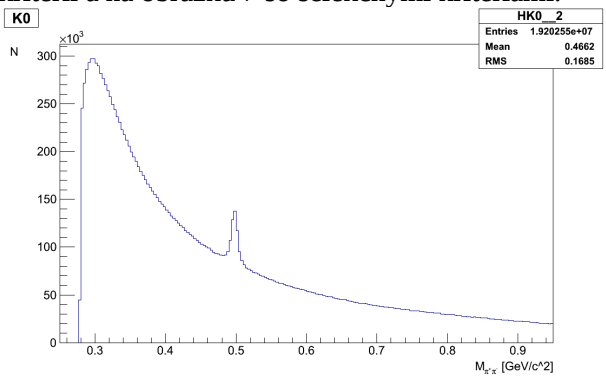
Minimálna vzdialenosť od primárneho vertexu	≥ 0,1 cm
Minimálna vzájomná vzdialenosť	≤ 1 σ
Priečna hybnosť	≥ 0,16 GeV/c

Tabuľka 3: Na dcérske tracky V^0 sú aplikované tieto kritériá.

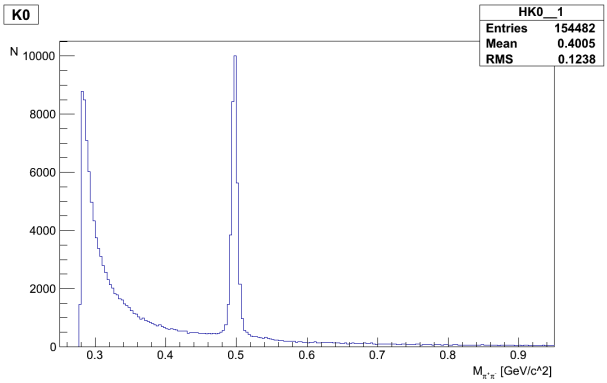
Invariantná hmotnosť dcérskych trackov	0,485 GeV/c^2 ≤ M ≤ 0,51 GeV/c^2
AP premenné	$q_T > 0{,}2|\alpha|$
Rapidita	$|y| < 0{,}75$
Vzdialenosť miesta rozpadu od miesta zrážky	0,9 cm ≤ R ≤ 100 cm
GetOnFlyStatus	false
Rovnaké náboje dcér	false

Tabuľka 4: Selekčné kritériá pre V^0.

Berieme pár trackov a za predpokladu, že predstavujú pióny vypočítame ich invariantnú hmotnosť. Tá bude rovná hmotnosti kaónu pre pár trackov, ktoré naozaj pochádzajú z rozpadu kaónov. Tieto páry tvoria signál. Ostatné páry (tracky, ktoré nie sú pióny alebo nepochádzajú z jedného rozpadu) vytvoria náhodné pozadie. Na obrázku 6 je rozdelenie invariantných hmotností bez selekčných kritérií a na obrázku 7 so selekčnými kritériami.



Obrázok 6: Histogram rozdelenia invariantných hmotností pre rozpadovú hypotézu $K^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^-$ bez selekčných kritérií.

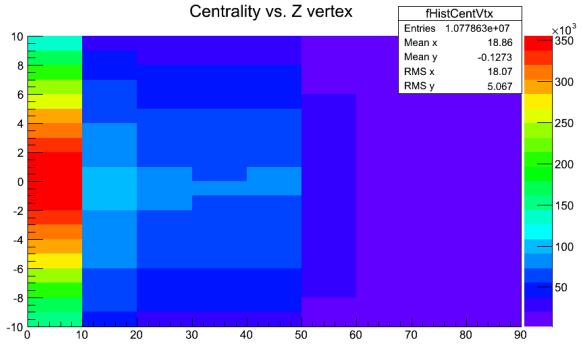


Obrázok 7: Rovnaký histogram, ako predchádzajúci, ale len pre páry častíc, ktoré vyhovujú selekčným kritériám. Vidíme jasný signál z rozpadu $K^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^-$ v okolí 0.5 GeV/c2 a výrazne potlačené pozadie.

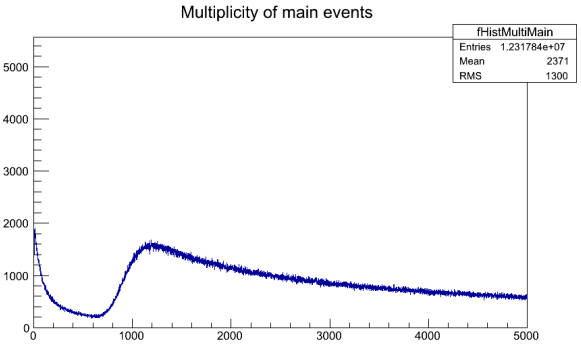
3.3 Hľadanie pentakvarku Θ^+

Analyzované dáta sú zo zrážok jadier olova v experimente ALICE z jesene 2011 pri energii 2,76TeV na jeden nukleónovo-nukleónový pár. Bolo analyzovaných okolo 12 miliónov zrážok, čo predstavuje približne jednu štvrtinu celkovej štatistiky. Analýza bola realizovaná oficiálnym softvérom kolaborácie ALICE - AliRoot. Zrážky boli vyberané tak, aby boli čo najcentrálnejšie. Centralita je miera prekryvu jadier pri zrážke, teda pri málo centrálnych zrážkach sa jadrá zrazia len okrajovo. Pri vysoko centrálnych zrážkach je veľká šanca, že vznikne kvarkovo-gluónová plazma. Pri rekombinácii z plazmy môžu kvarky ľahko tvoriť hadróny za predpokladu, že sa dané kvarky nachádzajú pri sebe, preto rekombinácia kvarkov z plazmy zvýhodňuje tvorbu exotických hadrónových stavov. Zrážky ťažkých jadier sú preto výhodné pre hľadanie pentakvarku. Na obrázku 8 je histogram

centrality analyzovaných zrážok a na obrázku 9 je histogram multiplicity analyzovaných zrážok.

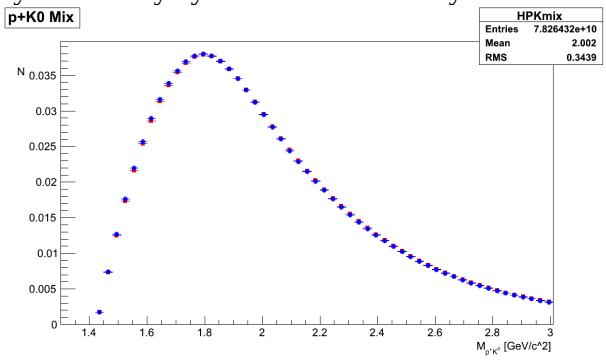


Obrázok 8: Centralita zrážok je vynesená na x-ovej osi (najcentrálnejšie zrážky sú vľavo), na y-ovej osi je poloha zrážky (primárneho vertexu) pozdĺž osi detektora (os z) v centimetroch.

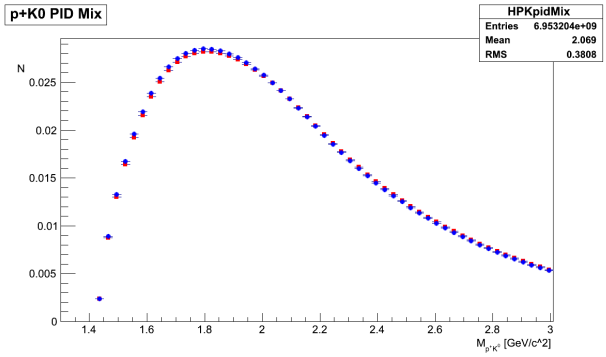


Obrázok 9: Multiplicita zrážok, teda počet zrekonštruovaných nabitých častíc pri každej zrážke. Nárast počtu zrážok pri vyšších multiplicitách je dôsledok toho, že sme vyberali zrážky s vysokou centralitou.

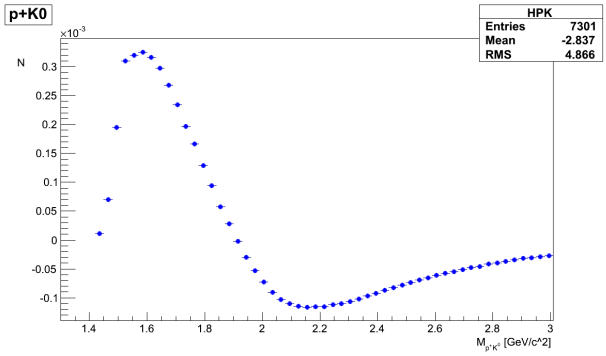
Pri hľadaní pentakvarku Θ^+ počítame invariantnú hmotnosť pre pár track a rekonštruovaná neutrálna častica V^0. Používame selekčné kritériá popísané v kapitole 4.2, pri ktorých nerobíme predpoklad o povahe rozpadu Θ^+ (slabý alebo silný). Predpokladáme, že väčšina pozadia vzniká tým, že berieme tracky a V^0, ktoré nepochádzajú z rovnakého rozpadu. Náhodné kombinácie tracku a V^0 tvoria kombinatorické pozadie. Takéto pozadie môžeme zreprodukovať metódou zmiešavania (mixed event method), teda tak, že zoberieme track z jednej zrážky a V^0 z inej zrážky, čím je zaručené, že nepochádzajú z jedného rozpadu. Zmiešavané zrážky by mali mať podobnú centralitu (multiplicitu) a polohu primárneho vertexu, čím sa zaručí rovnaká účinnosť rekonštrukcie tracku (V^0). Vyplnením histogramu invariantnými hmotnosťami takýchto párov nedostaneme žiadny signál, iba čisté pozadie. Na obrázkoch 10 a 11 je rozdelenie invariantných hmotností pre rozpadovú hypotézu $\Theta^+ \rightarrow p^+ + K^0$ a pozadie získané zmiešavaním bez a s využitím identifikácie častíc. V oboch prípadoch majú obe rozdelenia skoro rovnaký tvar, čo znamená, že drvivá väčšina párov $p^+ + K^0$ sú náhodné kombinácie. Odhad pozadia môžeme odpočítať od histogramov, ktoré predstavujú signál + pozadie. Po odčítaní nevidíme pík, vidíme istú štruktúru, ktorej vysvetlenie by vyžadovalo ďalšiu analýzu.



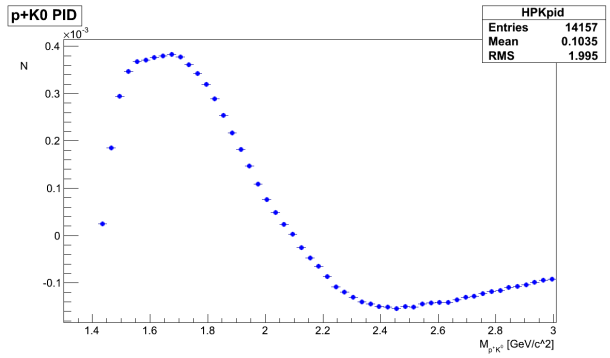
Obrázok 10: Rozdelenie invariantných hmotností pre rozpadovú hypotézu $\Theta^+ \rightarrow p^+ + K^0$ (modré kruhy). Červenými štvorcami je vyznačené pozadie získané zmiešavaním.



Obrázok 11: Rovnaký histogram, ak zoberieme iba také páry track + V^0, ktoré boli identifikované v detektore ako protón a kaón.



Obrázok 12: Výsledok po odčítaní pozadia.



Obrázok 13: Výsledok po odčítaní pozadia, s identifikáciou častíc.

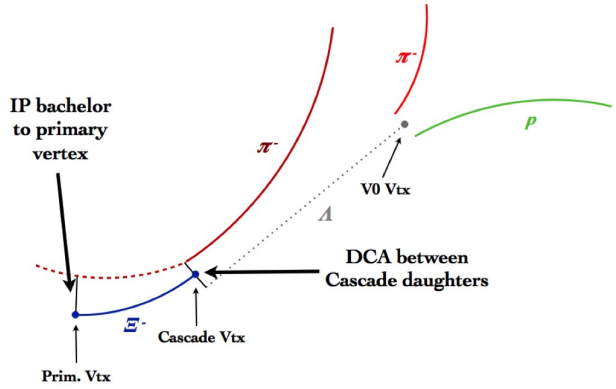
3.4 Hľadanie pentakvarku pomocou topológie kaskády

Topológia rozpadu pentakvarku by mala zodpovedať rozpadom multipodivných hyperónov Ξ^-, Ω^- - tzv. kaskádam. Tieto rozpady sú rozpady na nabitú časticu (táto bude ďalej nazývaná bachelor) a neutrálnu časticu (V^0), pričom neutrálna častica sa následne rozpadne na dve nabité častice. Za predpokladu, že pentakvark Θ^+ sa rozpadá slabo, môžeme využiť pri analýze existujúci softvérový framework na rekonštrukciu kaskád.

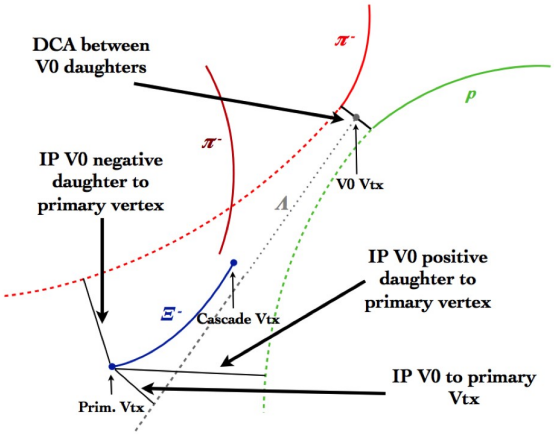
Is on TPC refit	true
nCrossedRowsTPC	≥ 70
Rapidita	$\|y\| \leq 0{,}8$
Priečna hybnosť	≥ 0,15 GeV/c
Minimálna vzdialenosť dcér primárneho rozpadu	≤ 0.3 cm
Minimálna vzdialenosť V^0 od primárneho vertexu	≥ 0.05 cm
Minimálna vzdialenosť bachelora od primárneho vertexu	≥ 0.03 cm
Minimálna vzájomná vzdialenosť dcér V^0 rozpadu	≤ 1 cm
Minimálna vzdialenosť dcéry V^0 rozpadu od primárneho vertexu	≥ 0.1 cm
Bachelor je identický s dcérou V^0 rozpadu	false

Tabuľka 5: Selekčné kritériá pre všetky tri nabité častice kaskády. (Obrázok 14 a 15)

Okrem týchto kritérií sme ešte overili identitu častíc tak, aby zodpovedala rozpadovej hypotéze.

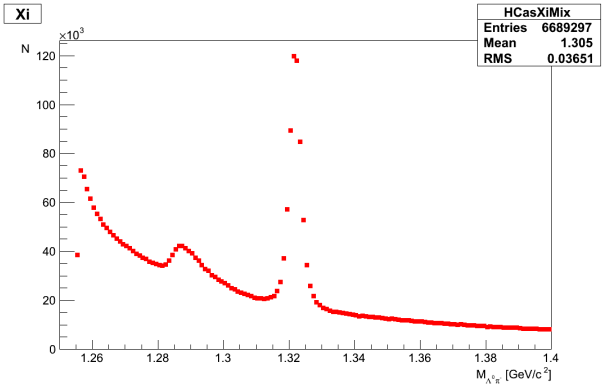


Obrázok 14: Znázornenie minimálnej vzdialenosti bachelora od primárneho vertexu (IP bachelor to primary vertex) a minimálnej vzdialenosti dcér primárneho rozpadu (DCA between Cascade daughters). [ALICE internal note, 2013]

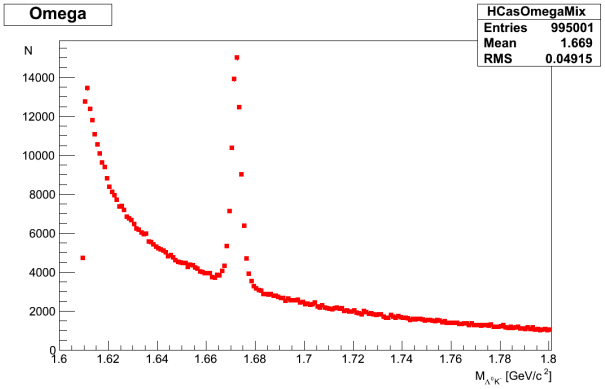


Obrázok 15: Znázornenie minimálnej vzdialenosti dcéry V0 rozpadu od primárneho vertexu (IP V0 positive/negative daughter to primary vertex), minimálnej vzdialenosti V0 od primárneho vertexu (IP V0 to primary Vtx) a minimálnej vzájomnej vzdialenosti dcér V0 rozpadu (DCA between V0 daughters). [ALICE internal note, 2013]

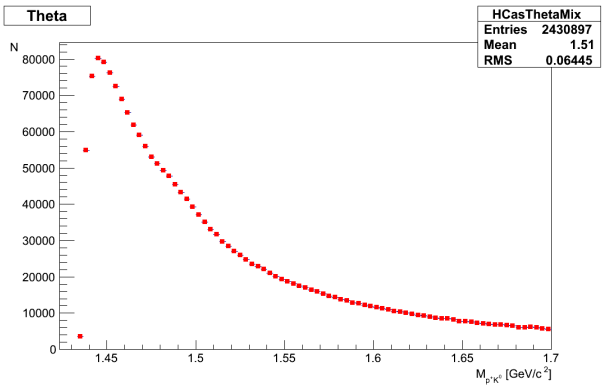
Efektívnosť selekčných kritérií sme vyskúšali na známych rozpadoch Ξ^- a Ω^- (obrázok 16 a 17), kde vidíme pekné signály v oblasti tabuľkových hodnôt. Výsledné rozdelenie invariantných hmotností pre $\Theta^+ \rightarrow p^+ + K^0$ je na obrázku 18. V oblasti predpovedanej hmotnosti nevidno žiadnu signifikantnú zmenu (možno slabé zvlnenie). Na vylúčenie alebo potvrdenie stavu Θ^+ budeme potrebovať plnú štatistiku a tiež zefektívniť selekčné kritériá.



Obrázok 16: Rozdelenie invariantných hmotností pre rozpadovú hypotézu $\Xi^- \rightarrow \Lambda^0 + \pi^-$.



Obrázok 17: Rozdelenie invariantných hmotností pre rozpadovú hypotézu $\Omega^- \rightarrow \Lambda^0 + K^-$.



Obrázok 18: Rozdelenie invariantných hmotností pre rozpadovú hypotézu $\Theta^+ \rightarrow p^+ + K^0$.

Záver

V tejto práci sme sa oboznámili s kinematikou rozpadu častice na dve dcérske častice, zistili sme, že kinematika je ohraničená. Analyzovali sme rozpady známych častíc (K^0, Ξ^-, Ω^-) a taktiež sme hľadali pentakvark Θ^+. Na vylúčenie alebo potvrdenie existencie stavu Θ^+ za daných experimentálnych podmienok je potrebné vykonať analýzu s väčšou štatistikou zrážok, respektíve s alternatívnymi selekčnými kritériami. Experimenty, kde bol stav videný naznačujú, že šírka píku môže zodpovedať dobe života asi 10^{-20}s, čo je približne doba života častice J/ψ. V selekčných kritériách sme vynechali kritériá súvisiace s dobou života (napr. miesto rozpadu Θ^+), keďže táto informácia nie je známa. V budúcnosti je potrebné urobiť série testov s týmito kritériami. Ideálne by bolo vložiť túto časticu do Monte Carlo generátora, nechať ju rozpadnúť v detektore a získať tak najoptimálnejšie selekčné kritériá. Taktiež by bola potrebná analýza celej dátovej vzorky (asi 50 miliónov zrážok).

Poďakovanie

Chcel by som poďakovať RNDr. Marekovi Bombarovi, PhD. za usmernenie a cenné rady.

Literatúra

[Close, 2005] F. E. Close. 2005. In *Contemporary Physics*. Quarks, diquarks, tetraquarks, and pentaquarks. ISSN 1366-5812, 2006, vol. 47, no. 2, p. 67-78

[Shirotori et al., 2012] K. Shirotori et al. 2012. Search for the Θ^{+} pentaquark via the $\pi^-p\to K^-X$ reaction at 1.92 GeV/c. *Phys.Rev.Lett.* 109 (2012) 132002

[CERN web, 2013] Oficiálna stránka experimentu ALICE. [online]. [cit. 2013-04-16]. Dostupné z: <http://aliceinfo.cern.ch/Public/en/Chapter2/Chap2Experiment-en.html>

[Kaliňák, 2012] P. Kaliňák. Production of neutral kaons in p-p and Pb-Pb collisions with ALICE at the CERN LHC: PhD thesis. 2012.

[ALICE internal note, 2013] Multi-Strange Baryon analysis in Pb-Pb collisions at 2.76 TeV, ALICE Internal Note 2013

Boseho-Einsteinove korelácie v mnohočasticovej produkcií pri *pp* zrážkach o energií 7 TeV

Juraj Smieško*

Školiteľ: Tibor Ženiš†

Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt: Práca sa zaoberá čiastkovou úlohou spojenou s výskumom BEC (Boseho-Einsteinových korelácií) pri energiách 7 TeV. Konkrétne závislosťou hadronizačného polomeru R a nekoherenčného faktora (*incoherence factor*) λ (chaotickosti p) od pseudorapidity trekov η.

Kľúčové slová: Boseho-Einsteinove korelácie, $\pi^{\pm}$ mezóny, experiment ATLAS, pseudorapidita.

1 Teoretický základ

Korelačná funkcia C_2 dvoch identických bozónov je definovaná ako [Weiner, 2000]:

$$C_2(\mathbf{p_1}, \mathbf{p_2}) = \frac{P(\mathbf{p_1}, \mathbf{p_2})}{P(\mathbf{p_1})P(\mathbf{p_2})}, \qquad (1)$$

kde $\mathbf{p_1}$ a $\mathbf{p_2}$ sú hybnosti častíc. $P(\mathbf{p_1}, \mathbf{p_2})$ je dvojčasticová hustota pravdepodobnosti nájsť časticu s hybnosťou $\mathbf{p_1}$ a súčasne s ňou časticu s hybnosťou $\mathbf{p_2}$. $P(\mathbf{p_1})$ a $P(\mathbf{p_2})$ sú jednočasticové hustoty pravdepodobnosti nájsť časticu s hybnosťou $\mathbf{p_1}$ resp. $\mathbf{p_2}$.

Prístup založený na aproximácii vlnových funkcii častíc rovinnými vlnami vedie k nasledujúcemu tvaru korelačnej C_2 funkcie pre gaussovské rozdelenie hustoty pravdepodobnosti zdroja

$$C_2(Q) = 1 + \lambda e^{-Q^2R^2}, \qquad \text{(PWG)}$$

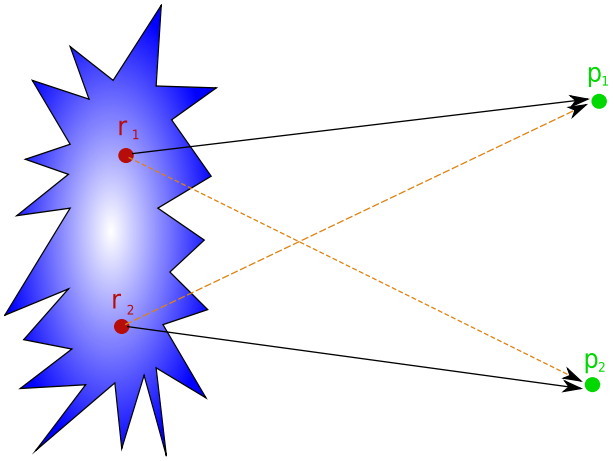
kde λ je takzvaný nekoherenčný faktor (*incoherence factor*) a bol zavedený empiricky (môže nadobúdať hodnoty od 0 pre úplne koherentný zdroj, až po 1 pre úplne chaotický). $Q^2 = -q^2$ je relativistický invariant $Q^2 = M^2 - 4m^2$, kde M je invariantná hmotnosť dvojčasticového systému, m je hmotnosť častice a $\mathbf{q} = \mathbf{p_1} - \mathbf{p_2}$ je rozdiel hybností častíc.

Treba v tejto časti zdôrazniť, že symetria vlnovej funkcie systému identických bozónov spôsobuje, že korelačná C_2 funkcia nie je konštantou a závisí hlavne od Q^2. Tiež treba zdôrazniť, že v *pp* zrážkach vznikajú hlavne pióny ($> 80\%$).

V experimente sa tiež používa C_2 funkcia s exponenciálnym rozdelením hustoty pravdepodobnosti zdroja (PWE):

$$C_2(Q) = 1 + \lambda e^{-QR}, \qquad \text{(PWE)}$$

Toto je však iba empirická parametrizácia bez fyzikálneho zdôvodnenia.



Obr. 1: Dva identické bozóny vyžiarené z toho istého zdroja.

Kvantovo-optický prístup k BEC

Korelačnú C_2 funkciu môžeme tiež odvodiť pomocou kvantovo-optického prístupu, čo nás privedie k nasledujúcemu tvaru korelačnej funkcie [Weiner, 2000]:

$$C_2(Q) = 1 + 2p(1-p)e^{-R^2Q^2} + p^2e^{-2R^2Q^2}, \qquad \text{(OAG)}$$

kde p je parameter zvaný chaotickosť (*chaoticity*), ktorá môže nadobúdať hodnoty od 0 (pre úplne koherentný zdroj) až 1 (pre úplne chaotický zdroj). Je ľahké nahliadnuť, že rovnica (PWG) je čiastočným prípadom rovnice (OAG) s $p = 1 = \lambda$.

*smiesko@nic-nac-project.org

†zenis@fmph.uniba.sk

V experimente sa občas používa exponenciálna modifikácia C_2 funkcie (OAG)

$$C_2(Q) = 1 + 2p(1-p)e^{-RQ} + p^2 e^{-2RQ}, \text{ (OAE)}$$

čo je tiež iba experimentálna parametrizácia.

1.1 Konštrukcia korelačnej C_2 funkcie

Pre experimentálne meranie korelačnej $C_2(Q)$ funkcie je potrebné získať signálne rozdelenie $N(Q)$ obsahujúce BEC a vydeliť ho referenčným $N^{\text{ref}}(Q)$ ktoré BEC neobsahuje.

$$C_2(Q) = N(Q)/N^{\text{ref}}(Q), \tag{2}$$

kde signálne rozdenie $N(Q)$ je rozdelenie párov rovnako nabitých trekov $N^{\pm\pm}(Q)$ a $N^{\text{ref}}(Q)$ je rozdelenie párov trekov bez Bose-Eisteinových korelácií. $N^{\text{ref}}(Q)$ rozdelení je viacero typov, my sme však pracovali iba s jedným, a to s rozdelením párov opačne nabitých trekov z toho istého eventu.

Toto rozdelenie má niekoľko neduhov, obsahuje rezonancie ako ρ, ω, K, K^*, ..., je preto nutné vylúčiť niektoré oblasti Q z fitu (v našom prípade v oblasti Q od 350 do 750 MeV), tiež, tak ako pre ostatné typy signálnych rozdelení, je potrebné preň urobiť korekciu na Coulombovskú interakciu.

1.2 Coulombovská korekcia

Merané rozdelenie párov rovnako alebo opačne nabitých piónov $N^{\text{meas}}(Q)$ za prítomnosti Coulombovskej interakcie je dané [Pratt, 1986] [Gyulassy, 1997] [Juricic, 1989]

$$N^{\text{meas}}(Q) = G(Q)N(Q), \tag{3}$$

kde $N(Q)$ je rozdelenie bez vplyvu Coulombovských síl a $G(Q)$ je *Gamowov difúzny faktor*

$$G(Q) = \frac{2\pi\eta}{e^{2\pi\eta} - 1}, \tag{4}$$

kde Sommerfeldov parameter η je definovaný ako

$$\eta = \pm\frac{\alpha m}{|Q|}, \tag{5}$$

kde α je konštanta jemnej štruktury (1/137) a m je hmotnosť častice. Znamienko plus je pre pár rovnako nabitých a mínus pre pár opačne nabitých piónov.

2 Dataset a výber eventov

Na analýzu sme použili tzv. „minimum bias“ eventy, teda eventy ktoré sú vyberané trigrami ktoré uprednostňujú iné ako single difraktívne a elastické procesy.

Počet vybraných eventov je okolo 20 miliónov.

Tiež sme použili Monte Carlo (MC) vzorku s približne 14 miliónmi eventov. MC vzorka bola vytvorená pomocou MC generátora Pythia 6.421 [Sjöstrand, 2006] (the ATLAS MC09 Pythia6 tune [ATLAS, 2010]), s nedifraktívnimi, single-difraktívnimi a double-difraktívnimi procesmi započítaními vzhľadom na ich účinné prierezy. Tieto eventy boli potom simulované a zrekonštruované pomocou programu na simuláciu detektoru ATLAS [ATLAS, 2010].

2.1 Výber eventov

Eventy vybrané na analýzu museli spĺňať nasledujúce podmienky:

- Event nesmel byť označený ako kozmický.
- Event musel mať dva alebo viac zrekonštruovaných trekov.
- Event musel mať iba jeden primárny vertex: 1 primárny a 0 sekundárnych vertexov.

3 Výber trekov

Na treky boli aplikované ďalšie kritéria, tak aby sa odstránili hlavné zdroje pozadia a chyby pri rekonštrukcií. Použité kritéria sú zhrnuté v Tabuľka 1

4 Trek – trek korekcie

Na treky bola tiež aplikovaná štandardná ATLAS procedúra na korekciu trekou, ktorá zahŕňa korekciu na:

- efektivitu rekonštrukcie treku $\epsilon(p_{\text{T}}, \eta)$, ktorá je funkciou pseudorapidity η a priečnej hybnosti p_{T}.
- Podiel sekundárnych častíc $f_{\text{sec}}(p_{\text{T}}, \eta)$,
- Podiel vybraných trekov, ktorých primárne častice sa nachádzajú mimo vybranej kinematickej oblasti $f_{\text{okr}}(p_{\text{T}}, \eta)$.

popis	kritérium
pseudorapidita treku	$\mid \eta \mid < 2{,}5$
priečna hybnosť treku	$p_{\mathrm{T}} > 100$ MeV
počet zásahov na trek v pixel detektore	trk_nPixHits > 0
počet zásahov v SCT ak p_{T} treku je v intervale (100, 200) MeV	trk_nSCTHits ≥ 2
počet zásahov v SCT ak p_{T} treku je v intervale (200, 300) MeV	trk_nSCTHits ≥ 4
počet zásahov v SCT ak p_{T} treku je viac ako 300 MeV	trk_nSCTHits ≥ 6
minimálna priečna vzdialenosť treku od vertexu	$\mid d_0 \mid < 1{,}5$ mm
minimálna pozdĺžna vzdialenosť treku od vertexu	$\mid z_0 * \sin(\theta) \mid < 1{,}5$ mm
χ^2 kritérium pre p_{T} treku väčšiu než 10 000 MeV	$\mathrm{Prob}(\chi^2, \mathrm{ndf}) \geq 0{,}01$

Tabuľka 1: Výberové kritéria na treky, θ je azimutálny uhol treku, ndf $\equiv$ *počet stupňov voľnosti.*

- Falošné treky $f_{\mathrm{fake}}(p_{\mathrm{T}}, \eta)$.

Použitý vzťah na váhovanie trekov:

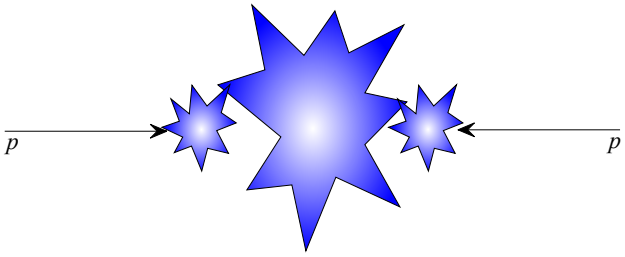
$$w(p_{\mathrm{T}}, \eta) = \frac{1}{\epsilon(p_{\mathrm{T}}, \eta)} \left[1 - f_{\mathrm{sec}}(p_{\mathrm{T}}, \eta)\right] \cdot \left[1 - f_{\mathrm{okr}}(p_{\mathrm{T}}, \eta)\right] \cdot \left[1 - f_{\mathrm{fake}}(p_{\mathrm{T}}, \eta)\right] \quad (6)$$

Váhovacie faktory použité v (6) sú oficiálne efektivity ATLAS Standard Model Minimum Bias skupiny.

Aby sa vylúčila možnosť falošnej rekonštrukcie dvoch trekov bol zvolený limit na Q medzi dvoma trekmi $Q_{\mathrm{min}} = 20$ MeV.

5 Výsledky

Hlavným dôvodom skúmania závislosti R a $\lambda\ (p)$ od pseudorapidity η bola hypotéza, že pre veľký systém sa okrem jednej centrálnej hadronizačnej oblasti vytvoria ďalšie dve menšie v smere osi detektora, tak ako je to znázornené na Obr. 2.



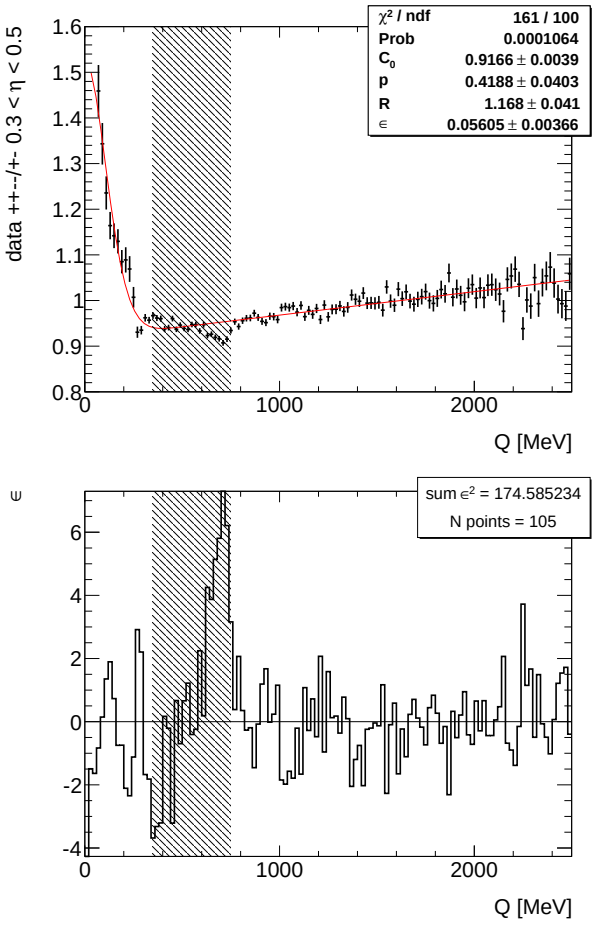
Obr. 2: Overovaná hypotéza.

V takomto prípade by mal hadronizačný polomer R pri istej hodnote η prudko narásť (skočiť), zatiaľ čo nekoherenčný faktor $\lambda\ (p)$ poklesnúť pri rastúcej pseudorapite trekov η.

Túto závislosť sme skúmali pomocou korelačnej $C_2(Q)$ funkcie, vyjadrenej pomocou rozdielu štvorhybností Q, fitovanej jednou zo štyroch teoretických C_2 funkcií PWG PWE OAG OAE. A to pri dvoch hodnotách multiplicity trekov: pre ľubovoľnú multiplicitu a pre multiplicitu väčšiu ako 50.

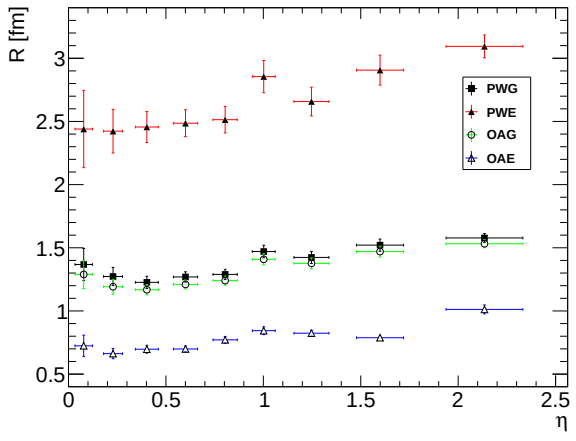
Keďže sme ako referenčné rozdelenie $N^{\mathrm{ref}}(Q)$ použili rozdelenie $N^{+-}(Q)$ v oblasti od 350 do 750 MeV (šrafovaná oblasť na Obr. 3) sa z dôvodu rezonancií a iných rozdielov medzi rovnako a opačne nabitými rozdeleniami párov trekov fit odchyľuje od dát, preto bola táto oblasť z fitu vylúčená. S rastúcou multiplicitou a klesajúcou priečnou hybnosťou p_{T} sa táto odchýlka stáva menej výrazná.

Na Obr. 3 hore sa nachádza príklad korelačnej $C_2(Q)$ funkcie pri pseudorapidite η medzi 0,3 a 0,5 a ľubovoľnej multiplicite fitovanej teoretickou C_2 funkciou OAG. A na Obr. 3 dole sú potom zobrazené rezíduá ϵ, definované ako pomer rozdielu korelačnej $C_2(Q)$ a teoretickej C_2 funkcie k neistote $C_2(Q)$ funkcie.

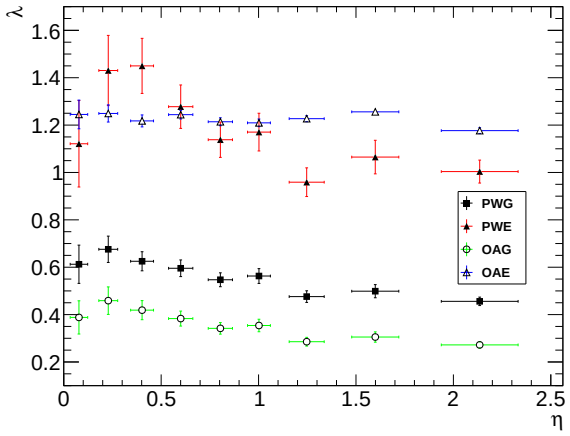


Obr. 3: Príklad korelačnej $C_2(Q)$ funkcie fitovanej teoretickou C_2 funkciou OAG.

5.0.1 Multiplicita $N > 0$

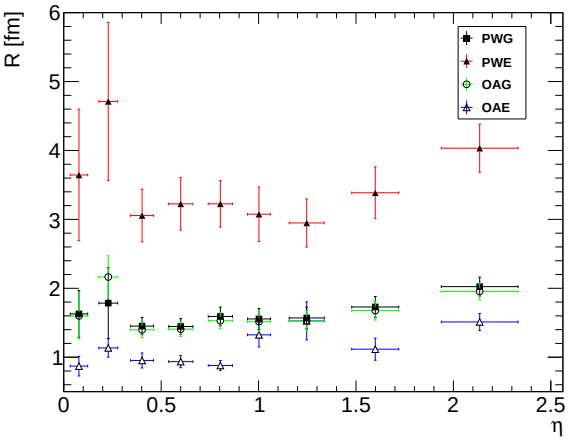


Obr. 4: Závislosť R od η pre $N^{\pm\pm}(Q)/N^{+-}(Q)$ a ľubovolnú multiplicitu.



Obr. 5: Závislosť λ (p) od η pre $N^{\pm\pm}(Q)/N^{+-}(Q)$ a ľubovolnú multiplicitu.

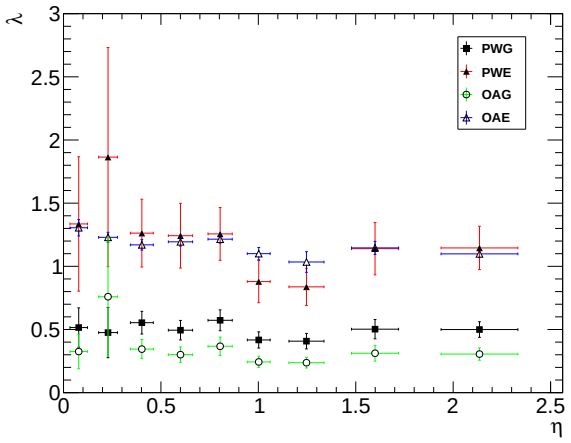
5.0.2 Multiplicita $N > 50$



Obr. 6: Závislosť R od η pre $N^{\pm\pm}(Q)/N^{+-}(Q)$ a multiplicitu $N > 50$.

Na Obr. 4 a Obr. 6 je zobrazená závislosť hadronizačného polmeru R od pseudorapidity η, ktorá vykazuje pre funkcie PWG a OAG veľmi podobný priebeh a mierny rast s rastúcou η. Tak isto aj nekoherenčný faktor λ (p), zobrazený na Obr. 5 a Obr. 7, vykazuje pre tieto dve funkcie podobný klesajúci priebeh (o konštantu). Pre funkciu OAE vykazuje R najväčší rast a λ (p) pokles, ale zároveň aj najväčšie neistoty.

Na Obr. 4 je zrejmí malý skok približne pri $\eta \approx 1$ pre všetky štyri C_2 funkcie. Skok sa nachádza aj v grafe Obr. 5 pri tej istej hodnote η. Pri multiplicite $N > 50$ je skok pri $\eta \approx 1$ na Obr. 6 vyditeľný len pre funkciu OAG, ale na grafe pre λ na Obr. 7 je viditeľný pre všetky C_2 funkcie.



Obr. 7: Závislosť λ (p) od η pre $N^{\pm\pm}(Q)/N^{+-}(Q)$ a multiplicitu $N > 50$.

5.1 Funkcia R_2

Rezonancie kvôli ktorým sme vylúčili z fitu korelačných $C_2(Q)$ funkcií určitú oblasť Q nepôsobia len v tejto oblasti. Pôsobia aj na oblasť pod $Q < 350$ MeV, v tejto oblasti však očakávame BEC. Pomocou Mote Carla je možné urobiť korekciu na rezonancie v referenčnom rozdelení párov opačne nabitých trekov $N^{+-}(Q)$ tak, že skonštruujeme takzvanú R_2 funkciu:

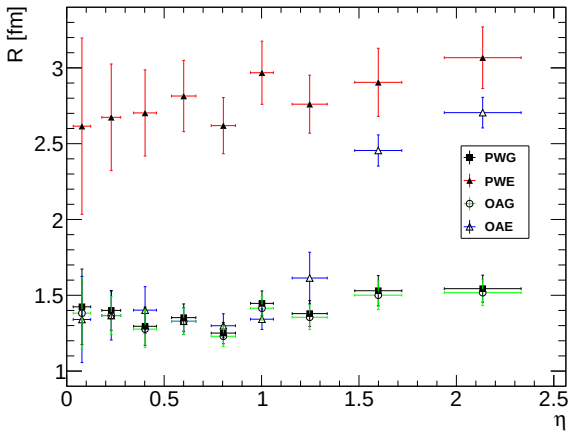
$$R_2 = \frac{C_2(Q)}{C_2^{\mathrm{MC}}(Q)} \tag{7}$$

kde $C_2(Q)$ je korelačná funkcia získaná predelením rozdelenia $N^{\pm\pm}(Q)$ rozdelením $N^{+-}(Q)$ a $C_2^{\mathrm{MC}}(Q)$ je korelačná funkcia získaná podobne ale pomocou Monte Carla, ktoré neobsahuje BEC. $C_2^{\mathrm{MC}}(Q)$ funkcia by v ideálnom prípade mala byť jednotková, ale keďže tiež obsahuje rezonancie vykazuje zvlnenie okolo jednotky.

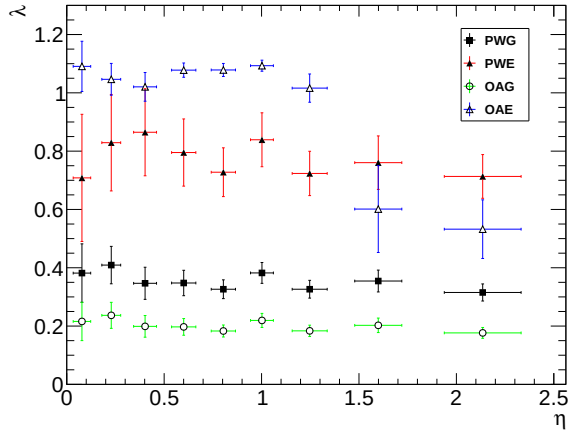
Monte Carlo simulácia obsahuje 50,1 % produktov rezonancií z ktorých: ρ (35,9 %), ω (27,7 %), K, K^* (25,9 %), η (5,5 %), η' (2,3 %), ϕ (1,7 %). Okrem toho ešte asi 1 % trekov patrí elektrónom.

Funkciu R_2 sme tiež fitovali štyrmi teoretickými C_2 funkciami: PWG, PWE, OAG, OAE pre dve rôzne multilplicity: $N > 0$ a $N > 50$. Aj teraz sme museli z fitu vylúčiť istú oblasť Q (od 500 do 700 MeV), kvôli odchýlkam ktoré vznikli ako dôsledok ďalších rozdielov medzi $N^{\pm\pm}(Q)$ a $N^{+-}(Q)$.

5.1.1 Multiplicita $N > 0$

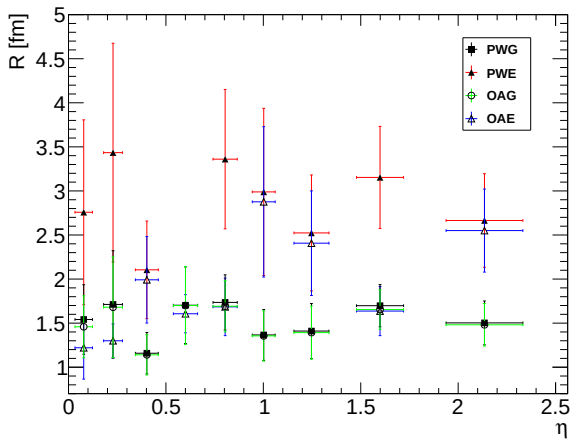


Obr. 8: Závislosť R od η pre R_2 a ľubovolnú multiplicitu.

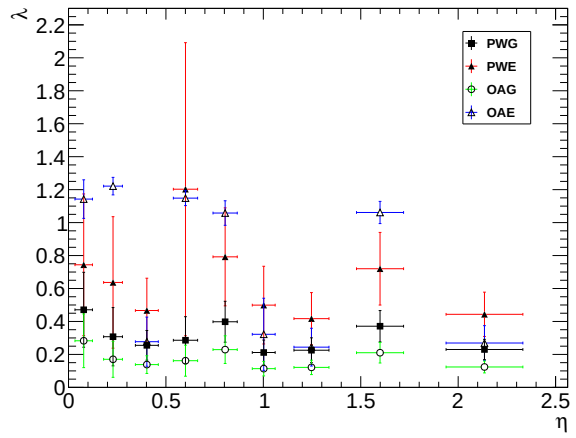


Obr. 9: Závislosť λ (p) od η pre R_2 a ľubovolnú multiplicitu.

5.1.2 Multiplicita $N > 50$



Obr. 10: Závislosť R od η pre R_2 a multiplicitu $N > 50$.



Obr. 11: Závislosť λ (p) od η pre R_2 a multiplicitu $N > 50$.

Závislosť hadronizačného polomeru R od η pre funkciu R_2 je zobrazená na Obr. 8 pre multiplicitu $N > 0$ na Obr. 10 pre multiplicitu $N > 50$. Pre C_2 funkcie PWG a OAG vykazujú hodnoty R pre obe multiplicity podobný priebeh, avšak malý skok v okolí $\eta \approx 1$ je badateľný len pre Obr. 8 ktorý zodpovedá ľubovoľnej multiplicite. Skok resp. nárast je viditeľný aj v priebehu C_2 funkcie OAE. Hodnoty R na grafe na Obr. 10 sú príliš nepresné, aby sa z nich dalo niečo usudzovať.

Pre zavislosť nekoherenčného faktora λ (p) zobrazenom na Obr. 9 a Obr. 11 je situácia analogická.

Veľké neistoty grafov na Obr. 10 a Obr. 11 sú spôsobené malou štatistikou.

6 Záver

Hadronizačný polomer R resp. nekoherenčný faktor λ (p) vykazujú pre $C_2(Q)$ korelačnú funkciu malý skok v okolí $\eta \approx 1$ pre obe multiplicity, čo podporuje našu hypotézu. Tento skok je badateľný aj pre funkciu R_2 ale len pri multiplicite $N > 0$. Pre funkciu R_2 a multiplicitu $N > 50$ je kvôli veľkým neistotám správanie R a λ (p) s rastúcou pseudorapiditou η nejednoznačné.

Aby sme mohli jednoznačne potvrdiť našu hypotézu je potrebné znížiť neistoty, najmä pre multiplicitu $N > 50$, čo môžme dosiahnuť zvýšením štatistiky alebo použitím iného referenčného rozdelenia $N^{\mathrm{ref}}(Q)$. Skok môže byť tiež spôsobený samotným detektorom ATLAS, keďže je poskladaný z viacerých typov detektorov.

Poďakovanie

Na tomto mieste by som sa chcel poďakovať môjmu školiteľovi RNDr. Tiborovi Ženišovi, Phd. a doc. RNDr. Stanislavovi Tokárovi, CSc. za mnoho cenných rád a pripomienok.

Literatúra

[Weiner, 2000] R.M. WEINER *BOSON INTERFEROMETRY IN HIGH-ENERGY PHYSICS*, Phys. Rep. 327 (2000) 249-346

[Pratt, 1986] Scott Pratt *Coherence and Coulomb effects on pion interferometry*, Phys. Rev. D33 (1986) 72-79

[Gyulassy, 1997] M. Gyulassy, S.K. Kauffmann, L.W. Wilson *Pion interferometry of nuclear collisions. I. Theory*, Phys. Rev. C20 (1997) 2267-2292

[Juricic, 1989] I. Juricic at.all *Bose-Einstein correlations in e^+e^- collisions*, Phys. Rev. D39 (1989)

[Sjöstrand, 2006] T. Sjöstrand, S. Mrenna, P.Z. Scands, JHEP 05 (2006) 026.

[ATLAS, 2010] ATLAS Collaboration, ATL-PHYS-PUB-2010-002 (2010), http://cdsweb.cern.ch/record/1247375.

Využitie spektroskopického elipsometra pri konštrukcii biosenzora na báze DNA aptamérov

Marianna Sohová [1]*
Školiteľ: Tibor Hianik [1], Juraj Chlpík [2]

[1] Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
[2] Ústav jadrového a fyzikálneho inžinierstva, FEI STU, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava

Abstrakt

Elipsometria je citlivá optická nedeštruktívna metóda, zväčša využívaná na meranie optických vlastností tenkých vrstiev adsorbovaných na povrchoch. TIRE (*Total Internal Enhanced Elipsometry*) je metóda spájajúca SPR a elipsometriu. Pomocou nej je možné dosiahnuť vyššiu citlivosť a sledovať naväzovanie malých molekúl na kovové povrchy. Takáto metóda sa dá využiť na detekciu afinitných interakcií na povrchoch v prípade optických biosenzorov. Cieľom práce je otestovať možnosť využitia elipsometra Horiba Jobin - Yvon MM-16 rozšíreného o TIRE na zostrojenie biosenzora, vyšetriť jeho citlivosť a schopnosť zaznamenať naviazanie monovrstvy cystamínu ako modelu väzby aptaméru na zlatý povrch. Cieľom práce je aj analýza interakcie trombínu s DNA aptamérmi. Ukázali sme, že uvedené zariadenie umožňuje zaznamenať zmenu plazmónovej rezonancie pri zmene uhla dopadu už o 0,01°, čo je postačujúce na zaznamenanie depozície monovrstvy zloženej z cystamínu. Zaznamenali sme exponenciálny nárast signálu pri interakcii trombínu s aptamérmi, čo svedčí o možnosti detekcie takejto interakcie pri nízkej koncentrácii trombínu.

Kľúčové slová: TIRE, SPR, biosenzory, DNA aptaméry, trombín.

1 Úvod

Biosenzory sú zariadenia, ktoré dokážu registrovať požadované biologické molekuly (analyty) prostredníctvom rôznych chemických alebo fyzikálnych metód. Základnú stavbu biosenzora tvorí receptor, prevodník a zobrazovacie zariadenie. Analytom môže byť akákoľvek látka, ktorú je receptor schopný rozpoznať. Ako receptory sa v afinitných biosenzoroch využívajú protilátky alebo aptaméry. Aptaméry sú syntetické jednovláknové nukleové kyseliny, ktoré sa vytvárajú pomocou metódy SELEX-u (Systematic Evolution of Ligands by EXponencial enrichment). K hlavným výhodám aptamérov patrí ich výroba bez použitia laboratórnych zvierat, vysoká stabilita a odolnosť voči nukleázam. Ich jednoduché pripájanie prostredníctvom avidín-biotín interakcie alebo na základe vysokej afinity SH skupín na koncoch aptamérov ku zlatu umožňuje rýchlu výrobu biosenzorov. V závislosti od typu senzora sú tieto zariadenia schopné zaznamenať vznik určitých chemických zlúčenín počas chemickej reakcie, zmenu teploty, hmotnosti alebo zmenu optických vlastností materiálov. Podľa spôsobu, akým zaznamenávajú proces zmeny meranej látky, rozdeľujeme biosenzory na elektrochemické, piezoelektrické, optické a termosenzory.

Vývoj optických senzorov na detekciu malých molekúl je veľmi aktuálny a zaujímavý problém aj vzhľadom na potrebu rýchlej a citlivej detekcie toxických látok v potravinách a životnom prostredí. Použitie takýchto senzorov je ekologické, lebo zväčša nevyžaduje aplikáciu žiadnych prídavných fluoreskujúcich látok alebo rôznych značiek a zároveň je ekonomické.

Medzi využiteľné optické metódy patria povrchová plazmónová rezonancia (*SPR - Surface Plasmon Resonance*) a elipsometria úplného vnútorného odrazu (TIRE).

Obe tieto techniky sú vhodné na analýzu veľmi tenkých vrstiev [Westphal a Bornmann, 2002]. Princíp ich merania je založený na pozorovaní zmien optických vlastností. Pre biochemické aplikácie je dôležitý rozdiel indexov lomu vody ($n = 1{,}33$) a biologických materiálov ($n \approx 1{,}47$) [Westphal a Bornmann, 2002]. Obe metódy využívajú podobný princíp vytvárania plazmónov na rozhraniach dvoch odlišných optických prostredí. Nás bude z týchto dvoch metód zaujímať elipsometria. Pri meraní touto metódou sa využíva šikmý dopad svetla a nie je potrebné vákuum, preto je možné jej široké využitie napríklad v biológii, medicíne alebo chémii.

* marianna@snet.sk

2 Princípy elipsometrie a TIRE

2.1 Elipsometria

Elipsometrické meranie je založené na pozorovaní zmien polarizácie elektromagnetického vlnenia. Výsledok elipsometrického merania zahŕňa analýzu zmeny polarizácie odrazeného zväzku od meranej vzorky. Z takto nameraných zmien je potom možné odvodiť vlastnosti skúmaného materiálu. Odrazom polarizovaného svetla od povrchu vzorky dôjde k zmene stavu polarizácie svetla. Z nameraných dát potom vyhodnocujeme dva parametre Δ a ψ. Optické vlastnosti skúmaného materiálu je možné získať z nameraných dát regresnou analýzou. Význam elipsometrických parametrov Δ a ψ je zrejmý z elipsometrickej rovnice [Skoršepová a Chlpík, 2012]:

$$\rho = \tan\psi \exp(i\Delta) \equiv \frac{r_p}{r_s} \qquad (1)$$

kde r_p a r_s sú amplitúdové reflektivity elektrického poľa. Parameter $\tan\psi$ vyjadruje pomer amplitúd, zatiaľ čo parameter Δ predstavuje fázový rozdiel medzi *p* a *s* polarizáciou [Nabok et. al, 2005].

Vzhľadom na to, že SPR sa realizuje pri úplnom vnútornom odraze, hodnota $|r_s|$ sa príliš nelíši od 1, preto môžeme písať:

$$r_p \approx \tan\psi \exp(i\Delta) \quad \text{a} \quad R_p = |r_p|^2 \approx \tan^2\psi \qquad (2)$$

Na meranie SPR pomocou elipsometrie je možné využiť dva typy konfigurácií hranol – kovová vrstva – látka: Kretschmanovu a Ottovu.

2.2 TIRE

Nedávno bola vyvinutá vylepšená elipsometria, tzv. *SPR enhanced elipsometry* alebo inak nazvaná - metóda úplnej vnútornej odrazovej elipsometrie (*Total Internal Reflection Elipsometry* – TIRE) [Arwin et al., 2004]. Touto metódou je možné dosiahnuť vyššiu citlivosť [Nabok et al., 2005]. Ak má dopadové médium index lomu n_0 a výstupné médium n_1, pričom platí, že $n_0 > n_1$, môže nastať úplný odraz svetla. Potom pre medzný uhol platí:

$$\sin\phi_m = \frac{n_1}{n_0} \qquad (3)$$

Ak je uhol dopadu väčší ako medzný uhol, nedochádza k prechodu lúča do druhého prostredia. V tejto situácii vzniká evanescentná vlna, ktorá zasahuje do druhého prostredia na vzdialenosť rádovo rovnú vlnovej dĺžke dopadajúceho svetla. Odrazené svetlo vchádza späť do hranola a pri špecifickom uhle sa môže energia dopadajúceho svetla na rozhraní kovu a dielektrika absorbovať povrchovými plazmónmi s ktorými je v rezonancii. Pri meraní je nutné zachovať podmienku prechodu z hustejšieho prostredia do opticky redšieho [Arwin et al., 2004].

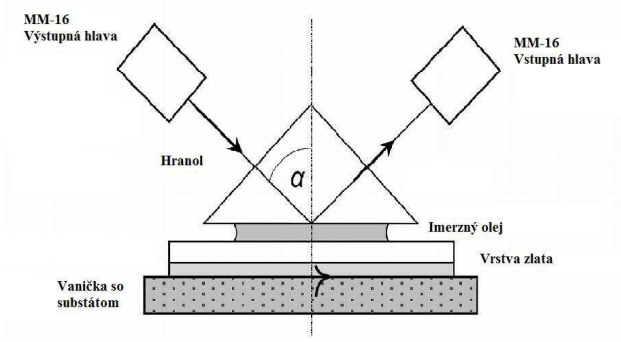
Na SPR meranie sa najčastejšie využíva Kretschmanova konfigurácia. Ide o kombináciu skleneného sklíčka s naparenou tenkou kovovou vrstvou, ktorá je v kontakte s meranou látkou. Sklíčko sa zároveň druhou stranou dotýka hranola. Na jeho povrch dopadá merací optický zväzok [Arwin et al., 2004]. Ak dôjde k adsorpcii ďalšej vrstvy na povrch kovu, pozorujeme zmenu podmienok vzniku plazmónovej rezonancie.

Táto technika už bola využitá na detekciu naväzovania protilátok a hybridizácie komplementárnych molekúl DNA po naviazaní na zlatý povrch [Westphal a Bornmann, 2002]. Bolo pozorované naväzovanie feritínu na zlato [Poksinski a Arwin, 2004]. Rovnako aj naväzovanie malých molekúl ako sú simazín, atrazín a T2 mykotoxín [Nabok et al., 2005].

Schopnosť TIRE reagovať na malé zmeny hrúbok vrstiev využívame v tejto práci. Plánujeme vytvorenie senzora na báze DNA aptamérov, v ktorom budeme sledovať zmeny podmienok plazmónovej rezonancie po väzbe proteínov na aptaméry. Na otestovanie citlivosti zariadenia TIRE sme pozorovali naväzovanie cystamínu na zlatý povrch a urobili sme prvý test interakcie trombínu s DNA aptamérmi imobilizovanými na zlatej vrstve.

3 Experiment a výsledky

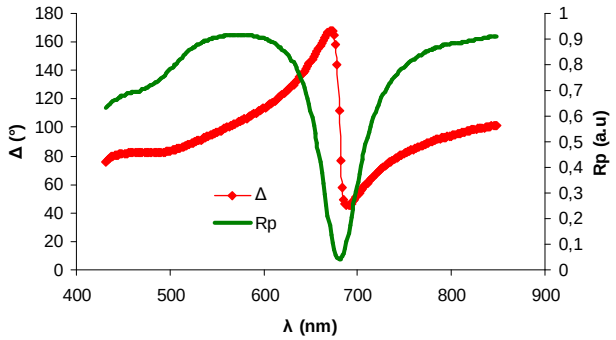
Merania sme realizovali na elipsometri Horiba Jobin-YvonMM-16 s motorizovaným goniometrom. Využili sme Kretschmanovu konfiguráciu, ktorú tvoril pravouhlý optický hranol BK-7, teflónová vanička s objemom 400 µl, imerzný olej, vrstva zlata bola nanesená na skle BK-7. Rozsah uhlov použitého goniometra je od 45 do 90 stupňov. Rozsah vlnových dĺžok je od 430 nm do 850 nm. Spektrálne rozlíšenie je 2 nm. Schéma meracieho zariadenia je znázornená na Obr.1.



Obr. 1 Schéma meracieho zariadenia [Skoršepová a Chlpík, 2012] – upravené.

Základný výstup elipsometrického merania sú hodnoty parametrov Δ a ψ v závislosti od vlnovej

dĺžky. Na účely vyhodnotenia merania s využitím SPR je vhodnejšia závislosť Δ a R_p od vlnovej dĺžky (Obr. 2).

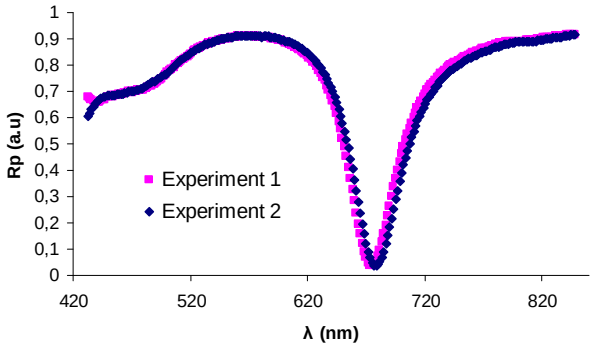


Obr. 2 Ukážka výsledkov elipsometrického merania.

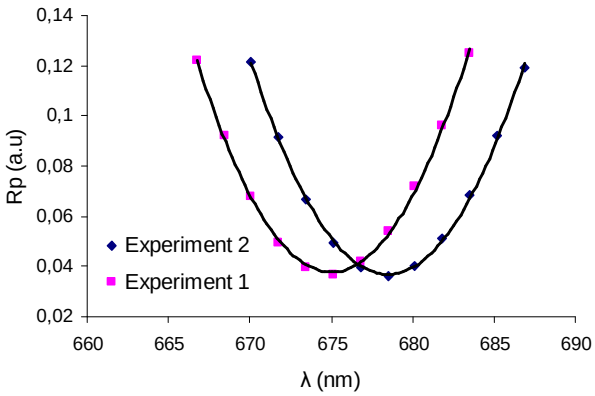
Na obr. 2, ako už bolo uvedené vyššie, je Δ pomer fáz a R_p je intenzita odrazeného *p* polarizovaného svetla.

Obr. 3 zobrazuje posun miním pri vytváraní vrstvy cystamínu na povrchu zlata. Ako je možné vidieť na Obr. 3A, posun minima veličiny R_p nie je výrazný. Zmenou rozsahu na Obr. 3B možno zistiť, že nastal posun o približne 4 nm. Na druhej strane, meranie zmeny veličiny Δ je oveľa citlivejšie (Obr. 4). V lineárnej oblasti, ako je zrejmé z Obr. 4., sa hodnota (označená krúžkom) zmenila o 86 °.

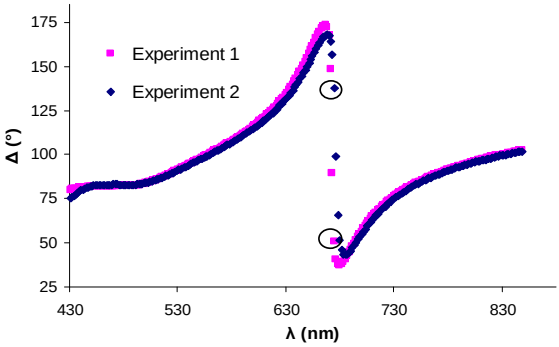
A



B

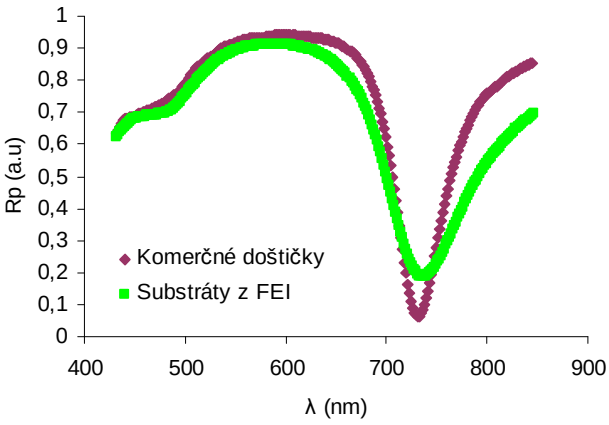


Obr. 3 Posun miním Rp pri meraní naväzovania cystamínu na zlatú vrstvu, A – celý rozsah; B – detail miním Rp; minimami sú preložené paraboly.



Obr. 4 Zmena parametra Δ pri naväzovaní cystamínu na vrstvu zlata , λp = 675,13 nm.

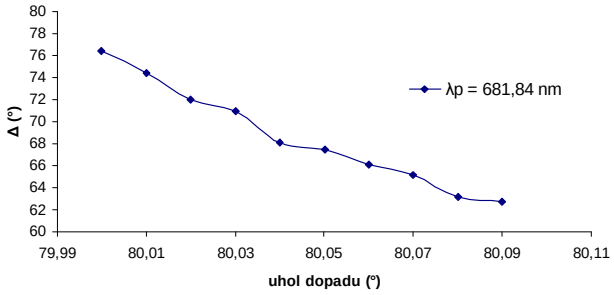
Ako prvé sme testovali zlaté vrstvy vyrobené na Ústave mikroelektroniky a fotoniky FEI STU v Bratislave. Porovnávali sme komerčné substráty s predpokladanou hrúbkou vrstvy 44 nm a substráty z FEI s hrúbkou 30 nm. Zistili sme, že pri komerčných doštičkách sme schopní dosiahnuť nulovú hodnotu R_p v plazmónovej rezonancii, zatiaľ čo pri vrstvách s hrúbkou 30 nm to nebolo možné. Zlato s hrúbkou 30 nm vytváralo dokonca širšie minimum, ktoré sme pozorovali pri uhle dopadu 80° (Obr. 5).



Obr. 5 Porovnanie plazmónových rezonancií komerčných substrátov a substrátov vyrobených na FEI STU, uhol dopadu 80°.

Takáto zmena bola jednoznačne daná malou hrúbkou zlata. Hrubšie sklo spôsobuje praktické problémy pri manipulácii so vzorkou. Plánujeme preto vyhotovenie substrátov z tenšieho skla, ako aj vyskúšať rozličné hrúbky zlata, aby sme boli schopní dosiahnuť podobné výsledky ako na komerčných substrátoch.

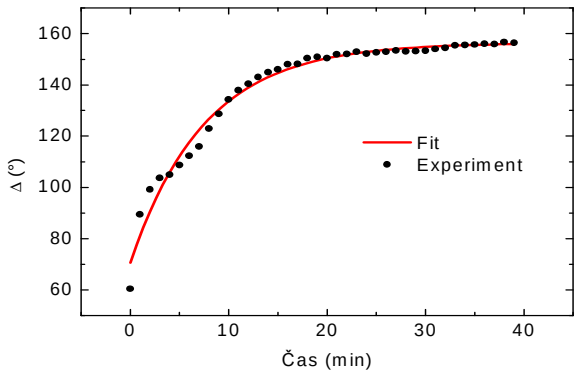
Vzhľadom na to, že parameter Δ je citlivejší než posun minima R_p, zisťovali sme jeho citlivosť pri zmenách uhlov dopadu o 0,01°. Zmenu parametra Δ v lineárnej oblasti sme schopní zaznamenať aj pri takýchto malých zmenách uhla dopadu, o čom svedčí závislosť veličiny Δ od uhla dopadu uvedená na Obr. 6.



Obr. 6 Závislosť veličiny Δ od uhla dopadu.

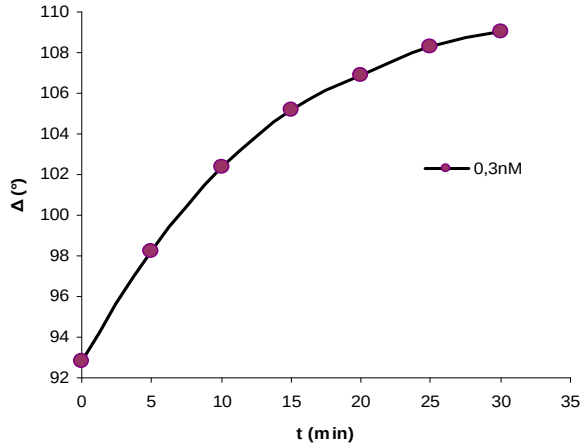
Možnosti spektroskopického elipsometra rozšíreného o SPR s následným využitím vo funkcii biosenzora ukazuje experiment naväzovania cystamínu s koncentráciou 10 mM na zlatý povrch. Merania sme počas prvých desiatich minút uskutočňovali po každej minúte a potom po každých dvoch minútach. Jednotlivé hodnoty posunu Δ sme odčítavali pri vlnovej dĺžke 673 nm. Táto vlnová dĺžka sa nachádza v lineárnej oblasti parametra Δ.

Teflónovú vaničku sme naplnili destilovanou vodou a pri uhle 83° sme pozorovali pokles odrazivosti *p* polarizovaného svetla spôsobený plazmónovou rezonanciou. V druhom kroku sme z vaničky odobrali určitý presný objem destilovanej vody a doplnili ho koncentrovaným roztokom cystamínu, aby sme dosiahli výslednú koncentráciu 10 mM. Cystamín je disulfid obsahujúci vo svojej štruktúre disulfidový mostík, ktorý sa po interakcii so zlatom rozpája a cystamín sa tak na povrch viaže iba jednou skupinou, nakoľko takáto skupina má vyššiu afinitu ku zlatu. Odoberanie vody z vaničky a pridávanie cystamínu je treba robiť precízne, aby nedošlo k posunutiu vaničky, ani substrátu s hranolom. Akýkoľvek posun niektorého z týchto prvkov by znamenal zmenu podmienok generácie plazmónu. Kinetika zmien Δ po dodaní cystamínu je uvedená na Obr. 7. Zmerané hodnoty boli preložené exponenciálnou krivkou $\Delta(t) = A_1 - A_2 e^{-t/\tau}$.



Obr. 7 Časová závislosť parametra Δ pri adsorbcii cystamínu (c = 10 mM), fit: $\Delta = A_1 - A_2 e^{-t/\tau}$, A1 = (156,435 ± 0,97), A2 = (85,852 ± 2,14), τ = (7,55 ± 0,41) min; R2 = 0,98.

Na Obr. 7 je možné vidieť systematický posun hodnoty Δ s nárastom času. Z tohto zistenia by sme mohli usudzovať, že sme zaznamenali posun Δ v závislosti od množstva naviazaného cystamínu na zlatý povrch v koncentrácii mM. Je to v súlade s predchádzajúcimi prácami, v ktorých bol pozorovaný exponenciálny nárast veličín s následným nasýtením pri adsorbcii rôznych molekúl [Poksinski a Arwin, 2004, Nabok et al., 2005]. Následne sme sa rozhodli otestovať, či sme schopní zaznamenať posun parametra delta pri interakcii trombínu s DNA aptamérmi naviazanými na povrch zlata prostredníctvom tiolových skupín. Trombín je enzým, ktorý zohráva veľmi dôležitú úlohu v zrážaní krvi. Počas tohto procesu dosahuje koncentrácia trombínu v krvi niekoľko nM. Preto sme sa sústredili na otestovanie citlivosti senzora na trombín v rozsahu koncentrácií : 0,1 nM, 0,3 nM, 1,0 nM, 3,0 nM a 10 nM. Sekvencia trombínového aptaméra bola SH-GGTTGGTGTGGTTGG. Jedná sa o aptamér citlivý na fibrinogénové miesto väzby na trombíne. Tento aptamér bol vyvinutý v roku 1992 [Bock et al. 1992]. Aptamér, rozpustený v TE tlmivom roztoku (10 mM Tris-HCl + 1 mM EDTA, pH 7.6) sme v koncentrácii 5 µM nechali inkubovať na zlatom povrchu doštičiek 12 hodín pri teplote 4 °C. Počas tohto času sa aptamér obsahujúci SH skupinu, imobilizoval na zlatý povrch na základe vysokej afinity SH skupiny ku zlatu. Po inkubácii sme povrch opláchli najprv destilovanou vodou a potom tlmivým roztokom. Následne sme na povrch pridali 10 mM roztok mercaptoetanolu, ktorý slúži na blokovanie neobsadených miest na zlate. Povrch sme opäť opláchli destilovanou vodou a následne pracovným tlmivým roztokom BB (20 mM Tris-HCl +140 mM NaCl + 5 mM KCl + 1 mM $MgCl_2$ + 1 mM $CaCl_2$, pH 7.4) a doštičku sme upevnili do experimentálnej aparatúry. Prvé meranie sme uskutočnili v čistom BB tlmivom roztoku, potom sme odobrali približne 100 µl a pridali sme pripravený roztok trombínu rozpusteného v BB s určitou presnou koncentráciou. Keďže nebolo možné odobrať celý objem vaničky (cca. 400 µl), výsledné koncentrácie v roztokoch boli pravdepodobne až štvornásobne nižšie ako vyššie uvedené. Na Obr. 8 je uvedená kinetická krivka zmien Δ v dôsledku dodania trombínu s koncentráciou 0,3 nM.



Obr. 8 Kinetika zmien veličiny Δ pre senzor pozostávajúci z vrstvy DNA aptaméra a merkaptoetanolu po dodaní trombínu v koncentrácii 0.3 nM.

Počas tohto merania sme boli schopní zaznamenávať exponenciálne nasycovanie parametra Δ iba do koncentrácie 1 nM. Pri vyšších hodnotách koncentrácií nárast nebol viditeľný. Príčinou je pravdepodobne obsadenie všetkých väzobných miest na povrchu senzora molekulami trombínu.

Presnejšie výsledky a odstránenie vplyvu difúzie či nedostatočného rozmiešania vzoriek vo vaničke môžeme dosiahnuť využitím prietokovej cely. Na konštrukcii takejto cely sa momentálne pracuje. Po jej vyhotovení bude možné urobiť presnejšie experimenty a zistiť aj reprodukovateľnosť výsledkov.

4 Záver

V práci sme ukázali, že pomocou metódy TIRE dokážeme registrovať zmenu plazmónovej rezonancie pri zmene uhla dopadu o 0,01 stupňa a pozorovať naväzovanie vrstvy cystamínu v koncentrácii 10 mM na povrch zlatej vrstvy. Sledovanie posunu miním R_p počas vytvárania vrstvy nie je vzhľadom na slabé spektrálne rozlíšenie elipsometra možné, preto využívame parameter Δ, ktorý je najmä v okolí rezonančnej vlnovej dĺžky omnoho citlivejší. Substráty vyhotovené na FEI sa ukazujú ako vhodná náhrada drahých komerčných podložiek, je však potrebné zväčšiť vrstvu zlata na hrúbku 40 nm až 45 nm, ktorá je pre túto techniku optimálna.

Nadobudnuté poznatky chceme využiť v ďalšej práci pri vývoji biosenzora. Uskutočnili sme prvé meranie interakcie aptaméra s trombínom. Sledovali sme nárast parametra delta v závislosti od času. Získané výsledky naznačujú, že dokážeme takúto väzbu zaznamenať. Nakoľko ide o prvé merania je potrebné ich opakovať a kvantifikovať. Keďže ide o citlivú metódu, bude zaujímavé zistiť, či je možné zaznamenať aj nižšie koncentrácie trombínu, napríklad v oblasti pM, pretože takéto koncentrácie sú klasickou metódou SPR ťažko merateľné. Zariadenie plánujeme rozšíriť o prietokovú celu, pri ktorej meraná látka, napríklad proteín, preteká kontinuálne pod substrátom, čo zjednodušuje aplikáciu analytu a umožňuje regeneráciu senzora. Taktiež budeme schopní kvantitatívne vyhodnotiť kinetické závislosti prebiehajúcich chemických adsorpčných reakcií. Selektivitu senzora chceme overiť prostredníctvom interakcie trombínového aptaméra s BSA (bovine serum albumin), ktorý by sa na aptamér citlivý na trombín v tomto prípade nemal viazať. Teda nemali by sme pozorovať významnú zmenu parametra Δ. Takto citlivý senzor, by v budúcnosti umožnil zaznamenať zmeny malých koncentrácii proteínov - rakovinových markerov napr. v ľudskej krvi, čo by mohlo urýchliť a zefektívniť diagnostiku niektorých ochorení napríklad aj rakoviny.

Poďakovanie

Táto práca bola finančne podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja (APVV-0410-10) a Vedeckou grantovou agentúrou (VEGA 1/0785/12).

Literatúra

[Arwin et al., 2004] Arwin, A., Poksinski, M., Johansen, K. (2004). Total internal reflection elipsometry: principles and applicationsm. *Applied optics*, Vol. 43, No. 15. p. 3028-3036.

[Bock et al., 1992] Bock L.C., Griffin L.C., Latham J.A., Vermaas E.H., Toole J.J. (1992). Selection of single-stranded DNA molecules that bind and inhibit human thrombin. *Nature*, Vol. 355, p. 564–566.

[Nabok et al., 2005] Nabok, A.V., Tsargorodskaya, A . , Hassan, A. K. Starodub, N.F. (2005). Total internal reflection ellipsometry and SPR detection of low molecular weight environmental toxins. *Applied Surface Science* 246. p. 381–386.

[Poksinski a Arwin, 2004], Poksinski, M. Arwin, H. (2004). Protein monolayers monitored by internal reflection ellipsometry. *Thin Solid Films* 455 –456. p. 716–721.

[Skoršepová a Chlpík 2012] Skoršepová, T., Chlpík, J. (2012). Spectroscopic ellipsometer as a sensor based on surface plasmon polaritons. *Proceedings, APPCOM 2012*, ISBN 978-80-227-3720-3, p. 369.

[Westphal a Bornmann, 2002] Westphal, P. a Bornmann, A. (2002). Biomolecular detection by surface plasmon enhanced ellipsometry. *Sensors and Actuators B* 84 . p. 278–282.

Magnetizmus organickej látky

(N-Me-2,6-di-Me-Py)$(TCNQ)_2$ – vlastnosti a prejavy

Daniela Šoltésová[1]*
Školiteľ: Marcela Kajňaková[1‡]

[1]Katedra fyziky kondenzovaných látok, Ústav fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Park Angelinum 9, 041 54 Košice, Slovenská republika

Abstrakt

Predkladaná práca sa zaoberá problematikou v oblasti rýdzo organických magnetík, konkrétne rieši magneto-štruktúrne korelácie rýdzo organickej organickej anión – radikálovej soli (N-Me-2,6-di-Me-Py)$(TCNQ)_2$. V rámci práce boli študované magnetické vlastnosti meraním magnetickej dc-susceptibility. Nosnou témou predkladanej práce je experimentálne štúdium tepelnej kapacity v nulovom aj nenulovom magnetickom poli. Následne boli experimentálne dáta analyzované pomocou teoretických modelov. Vzhľadom aj na závery zo štúdia magnetickej susceptibility, sme experimentálne výsledky analyzovali pomocou modelu, ktorý popisuje magnetický systém tvorený lineárnymi spinovými retiazkami slabo interagujúcimi svojimi koncami. Z analýzy vyplýva záver, že magnetický systém uvedenej látky predstavuje realizáciu heisenbergovského modelu konečnej uniformnej retiazky spinov $S = 1/2$ s malou koncentráciou voľných koncov. Pričom interakcie v retiazke sú $J_1 \approx 120$ K a interakcie medzi koncami retiazky sú $J_2 \approx 5{,}2$ K.

Kľúčové slová: Organické magnetiká 1, Nízkorozmerný magnetizmus 2, Termodynamické vlastnosti 3

1 Úvod

Podnetom pre skúmanie organických anión – radikálových solí (ARS) založených na báze 7, 7, 8, 8 – tetrakyanochinodimetánových molekúl (TCNQ) bol v roku 1960 problém vysokoteplotnej supravodivosti [W.A. Little, 1964], [I.F. Schegolev, 1972] a neskôr aj objavenie organických kovov a supravodičov založených na katión – radikálových soliach a jeho derivátoch [D. Jerome et al., 1980]. Do pozornosti sa TCNQ založené na ASR znovu dostali po objavení ich vlastnosti tavenia bez rozkladu [M. Tanaka et al., 1987], [V.A. Starodub et al., 1987], čím sa takéto zlúčeniny môžu použiť v nových typoch elektrolytických metaloxidových pamätiach [Sanyo Electric Co., 1986], [V.A. Starodub et al., 1991], ktoré ovládajú vysoko operačné charakteristiky. Z hľadiska uplatnenia sú organické molekulové látky veľmi perspektívnym materiálom kvôli svojim rozmanitým vlastnostiam. Vzťahy medzi kryštálovou štruktúrou a štruktúrou magnetických subsystémov majú bohatý diagram, keďže aj minimálne zmeny v kryštálovej štruktúre majú za následok veľkú zmenu magnetických vlastností [A. Radváková et al., 2010], [A. Radváková et al., 2009], [S. V. Vitushkina et al., 2009].

V práci predkladáme výsledky nášho skúmania rýdzo organickej ARS na báze TCNQ: (N-Me-2,6-di-Me-Py)$(TCNQ)_2$, kde $(N\text{-Me-2,6-di-Me-Py})^+$ je N-metyl-2,6-dimethyl-pyridinový katión. Kryštálová štruktúra látky bola stanovená pomocou štúdia infračerveného a röntgenového spektra. Nosnou témou predkladanej práce je experimentálne štúdium tepelnej kapacity v nulovom aj nenulovom magnetickom poli. Tepelnú kapacitu sme merali v teplotnom rozsahu od 0,4 K do 45 K v magnetických poliach 0 T a 9 T. V práci predkladáme tiež výsledky experimentálneho štúdia magnetických vlastností, ktoré boli študované meraním magnetickej susceptibility v teplotnom rozmedzí 2 – 300 K, v rôznych magnetických poliach.

Experimentálne výsledky tepelnej kapacity aj magnetickej susceptibility sme analyzovali rovnakým modelom, s rovnakými parametrami výmenných interakcií. Z analýz vyplýva záver, že magnetický systém uvedenej látky predstavuje realizáciu heisenbergovského modelu konečnej uniformnej retiazky spinov $S = 1/2$ s malou koncentráciou voľných koncov. Pričom interakcie v retiazke sú $J_1 \approx 120$ K, interakcie medzi koncami retiazky sú $J_2 \approx 5{,}2$ K a koncentrácia koncov retiazok je $a \sim 0.033$.

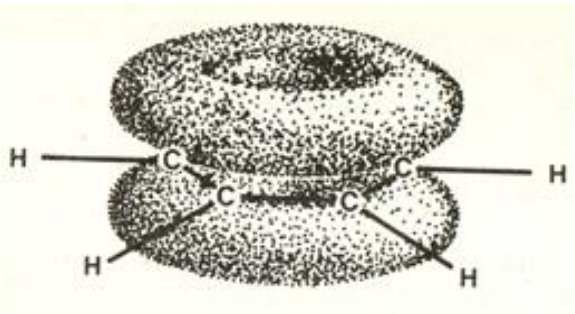
* dankasoltes@gmail.com
‡ marcela.kajnakova@upjs.sk

2 Magnetizmus v rýdzo organických látkach a magnetické interakcie

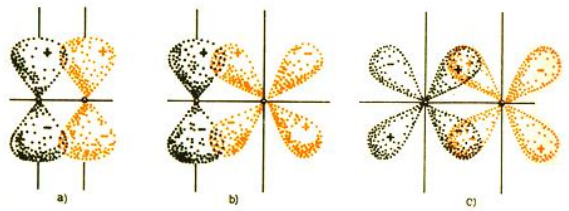
Látka (N-Me-2,6-di-Me-Py)$(TCNQ)_2$, ktorú sme študovali, je rýdzo organická. To znamená, že na rozdiel od iných magnetických látok neobsahuje žiadne ióny kovu. Skladá sa zo štyroch veľmi ľahkých prvkov: uhlík, vodík, kyslík a dusík. U takýchto látok sa nevyskytujú žiadne atómy kovu, ktoré by mohli byť nosičmi nespárených elektrónov. Napriek tomu má naša skúmaná látka magnetické vlastnosti, preto ju zaraďujeme medzi organické magnetiká.

Nosičmi magnetických momentov v organických magnetikách sú molekuly, v našom prípade anión – radikály $TCNQ^{\bullet -}$. V okolí molekuly TCNQ vznikajú nad a pod molekulou tzv. elektrónové mraky (Obr.1.). Tie sú dôsledkom π – prekryvu orbitálov *p* alebo *d* (Obr. 2.), po ktorých sa pohybujú elektróny.

Radikál je neutrálna častica (atóm, molekula), ktorá obsahuje nespárený valenčný elektrón (vo svojich valenčných orbitáloch má nepárny počet elektrónov). Radikál je vo všeobecnosti veľmi reaktívna častica, ktorá rýchlo reaguje s okolím. K stabilizácii anión – radikálu $TCNQ^{\bullet -}$ dochádza delokalizáciou elektrónovej hustoty medzi dvoma molekulami TCNQ.

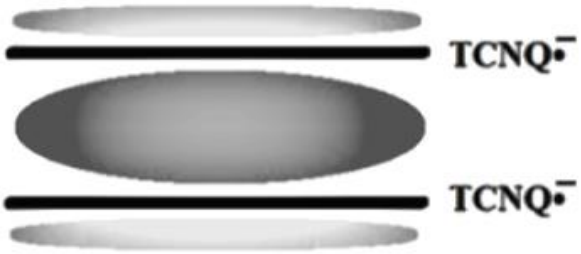


Obr. 1: Cyklická molekula so znázornením prekryvu π-väzbových orbitálov nad a pod rovinou molekuly[J. Gažo et al., 1981]



Obr. 2: Vznik π – väzby prekrývaním orbitálov a) p – p, b) p – d, c) d – d[J. Gažo et al., 1981]

Ak sa k sebe priblížia dve molekuly TCNQ, tak dochádza v rámci stabilizácie anión – radikálu a zníženia energie k delokalizácii elektrónovej hustoty π – väzieb. Elektrónové mraky sa preusporiadajú a sústredia sa medzi tieto dve molekuly (Obr. 3.). Takto vzniknutá dvojica molekúl TCNQ má elektrónovú hustotu – t.j. náboj jedného elektrónu so spinom ½. Magnetický moment organických magnetík teda vzniká v dôsledku nerovnomerného rozdelenia elektrónovej hustoty na molekulách, z ktorých je tvorená daná zlúčenina[G. R. Desiraju, 1989], [J. Fraxedas, 2006].



Obr. 3: Schematické znázornenie dvojice molekúl TCNQ, s delokalizovanou elektrónovou hustotou náboja jedného elektrónu

Vďaka tomu, že dve molekuly TCNQ „nesú“ spin, môžu medzi sebou magneticky interagovať. Keďže sú však molekuly TCNQ (tiež aj katióny) pomerne rozmerné, podmienky ich priestorového uloženia v kryštálovej štruktúre vedú k tomu, že TCNQ molekuly sú uložené planparalelne za sebou v radoch, oddelených katiónmi. V dôsledku toho sú molekulové organické magnetiká najčastejšie nízkorozmernými systémami.

Za magnetické vlastnosti v organických látkach sú zodpovedné elektróny v *s* alebo *p* orbitáloch, pretože látka obsahuje iba prvky, ktoré majú valenčné elektróny nachádzajúce sa len v týchto orbitáloch.

Vo všeobecnosti rozlišujeme magnetické interakcie *feromagnetické* a *antiferomagnetiké,* v závislosti od celkového usporiadania spinov a ciest medzi nimi. Feromagnetická interakcia je charakteristická tým, že spiny magnetických iónov sú usporiadané paralelne a u antiferomagnetickej sú usporiadané antiparalelne.

Magnetické interakcie môžu byť sprostredkované výmennými cestami – tzv. *výmenné interakcie* alebo môžu byť dôsledkom vzájomného pôsobenia spinov ako dipólov – tzv. *dipól-dipólové interakcie.*

Výmennú interakciu môžeme všeobecne – teda aj u organických magnetík, popísať Heisenbergovým hamiltoniánom

$$\hat{H} = -2\sum_{i<j} J_{ij}\hat{S}_i\hat{S}_j \qquad (1)$$

pričom J_{ij} vyjadruje ako sa ovplyvňujú magnetické ióny *i* a *j* a je nazývaná konštanta výmennej inerakcie, a $\hat{S}_i$ a $\hat{S}_j$ sú operatátory spinu na *i* – tom alebo *j* – tom mieste mriežky.

Ak je v uvedenom Hamiltoniáne výmenná interakcia záporná, hovoríme o antiferomagnetických interakciách. Naopak, ak je

výmenná interakcia kladné číslo, tak ide feromagnetické intearakcie.

Výmenná interakcia sa vyjadruje najčastejšie v jednotkách energie – Kelvin alebo mili Elektrónvolt (1,44 K = 1,24.10^{-4} eV).

Interakcie medzi spinmi môžeme vo všeobecnosti definovať pomocou Hamiltoniánu (1), ktorý platí všeobecne pre izotropne výmenné interakcie v rôznych magnetických systémoch. V reálnych systémoch sa vyskytujú častejšie anizotropne výmenné interakcie. Tie sú spôsobené druhom magnetického iónu a tiež tým, že na daný materiál pôsobí hlavne kryštálové pole a tiež dipólové interakcie. Anizotropne výmenné interakcie vieme popísať Hamiltoniánom

$$\hat{H} = -2J \sum_i \left\{ a\left(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y\right) + b\left(\hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z\right) \right\} \quad (2)$$

kde a a b sú parametre, pomocou ktorých rozlišujeme tri limitné prípady interakcií. Ak je $a = 0$, $b = 1$, tak daný Hamiltonián popisuje silne anizotropný systém charakteristický tým, že je preferovaná orientácia spinov do jedného určitého smeru – do smeru osi z. Tento smer nazývame ľahká os. Tento limitný prípad s uvedeným Hamiltoniánom nazývame Isingov model. Ďalší prípad nastáva, ak je $a = 1$, $b = 0$, a nazývame ho XY model. V takýchto systémoch sa spiny orientujú v ľahkej rovine, teda v rovine XY. Posledný limitný prípad je pre $a = 1$, $b = 1$, ktorý je identický s heisenbergovským modelom.

Uvedené tri dané limitné prípady nie je v reálnych systémoch vždy možné samostatne nájsť. Častejšie sú preto na popis vhodnejšie tzv. prechodové modely ako Heisenberg – XY model alebo Heisenbergov – Isingov model. Celé usporiadanie spinov súvisí s tým, že celý systém má snahu dostať sa do stavu s minimálnou energiou. Preto môže daný systém preferovať orientáciu v jednom smere, v jednej rovine, respektíve nemusí preferovať žiaden smer, alebo systém je realizáciou kombinácie viacerých modelov.

Rozmernosť spinového priestoru nezávisí od dimenzie mriežky magnetických iónov.

Priestorová anizotropia magnetických korelácií je daná usporiadaním výmenných ciest medzi magnetickými iónmi/spinmi v kryštálovej mriežke a orientáciou spinov (teda, u klasických magnetických iónov priestorovou orientáciou ich magnetických orbitálov). Dimenzia magnetického systému môže byť nulová (0d) a to práve vedy, keď výmenné interakcie existujú medzi konečným počtom magnetických iónov, v tzv. klastroch, pričom samotné klastre medzi sebou neinteragujú. Ak výmenné cesty existujú len v jednom smere, hovoríme o jednorozmernom (1d) mriežkovom priestore. V dvojrozmernom (2d) mriežkovom priestore interagujú medzi sebou výmenné cesty v rovine, t.j. v dvoch smeroch. O trojrozmernom (3d) mriežkovom priestore hovoríme, ak existujú interakcie medzi magnetickými iónmi v každom smere. Systémy 0d, 1d a 2d a ich kombinácie/"variácie" spoločne označujeme pojmom nízkorozmerné systémy.

Usporiadanie magnetického systému ovplyvňuje rozmernosť spinového aj mriežkového priestoru. Rozlišujeme usporadúvanie na krátku vzdialenosť (SRO – short range order) a na dlhú vzdialenosť (LRO – long range order). Proces, pri ktorom látka prechádza do usporiadaného stavu nazývame fázový prechod, a ten sa vyznačuje teplotou fázového prechodu alebo kritickou teplotou T_C.

To či sa magnetický systém usporiada alebo nie môžeme sledovať z teplotnej závislosti tepelnej kapacity magnetického systému. Usporiadanie na krátku vzdialenosť – SRO sa v tejto závislosti prejavuje oblým maximom a vidieť ho môžeme až po odčítaní tepelnej kapacity mriežky (ale je možné ho pozorovať aj v celkovej tepelnej kapacite – mení sa to od systému k systému). Pokiaľ je vplyv magnetických interakcií silnejší než vplyv tepelných kmitov mriežky, dôjde v systéme pri určitej teplote T_C k magnetickému usporiadaniu. Takéto usporiadanie vo všetkých smeroch a na dlhú vzdialenosť – LRO, pozorujeme v teplotnej závislosti tepelnej kapacity ako ostré maximum, ktoré kvôli jeho tvaru nazývame tiež λ – anomália. Tento prechod je zväčša výrazný a viditeľný aj bez odčítania mriežkového príspevku kapacity. λ - anomália má pre práškové látky väčšinou širší tvar a toto maximum je nízke. Oproti tomu v látkach, ktoré sú tvorené kryštálikmi, je maximum úzke a vysoké. Vzhľadom k výraznému prejavu fázového prechodu v C(T) je určenie T_C z C(T) oveľa presnejšie než napr. z magnetickej kapacity.

Vo výnimočných prípadoch niektoré prechody, či už SRO alebo LRO, nie sú v teplotnej závislosti tepelnej kapacity výrazné a nedajú sa jednoznačne spozorovať. Preto často používame na zobrazenie tepelnej kapacity redukované súradnice ako *C/T*, *dC/dT* alebo *log C* v závislosti od teploty, kde môžeme tieto prechody identifikovať.

Dipólová interakcia nám popisuje ako sa ovplyvňujú spiny bez toho, aby boli spojené väzbou. Vieme ju popísať klasickým Hamiltoniánom

$$H = \sum_{j \neq i} \left\{ \frac{\vec{m}_i \vec{m}_j}{\vec{r}_{ij}^{\,3}} - \frac{3\left(\vec{m}_i \vec{r}_{ij}\right)\left(\vec{m}_j \vec{r}_{ij}\right)}{\vec{r}_{ij}^{\,5}} \right\}$$

kde $\boldsymbol{m_i}$, $\boldsymbol{m_j}$ je magnetický moment i – tého a j - tého iónu a $\boldsymbol{r_{ij}}$ je polohový vektor j – tého iónu vzhľadom na i – tý ión. Dipólová interakcia má dlhodosahový charakter, avšak jej veľkosť je zvyčajne oveľa menšia ako veľkosť výmennej interakcie.

Organické magnetiká vieme popísať heisenbergovským modelom, pričom vo väčšine je

preferovaná antiferomagnetiká interakcia v dôsledku prekryvu elektrónových hustôt. Sú charakteristické veľmi presnou kryštálovou štruktúrou a tvoria ich pomerne veľké molekuly, preto u nich nie je predpoklad na vytváranie klastrov. Zaraďujeme ich medzi nízkorozmerné magnetiká, najčastejšie sú to jednorozmerné alebo kvazi–dvojrozmerné systémy. U organických magnetík je dipólová interakcia veľmi slabá, keďže u nich ide o spin ½. Prevláda u nich výmenná interakcia spôsobená hlavne priamym prekryvom elektrónových hustôt anión – radikálov $TCNQ^{\bullet -}$, prípadne spôsobená výmennými interakciami, sprostredkovanými slabými väzbami, akými sú vodíkové väzby (HBs) alebo Van der Walsove väzby.

Pri výbere modelu, ktorý by opísal - charakterizoval magnetickú štruktúru látky, vychádzame najčastejšie z kryštálovej štruktúry látky. U organických magnetík na báze TCNQ je jeden magnetický moment daný jedným štruktúrnym dimérom, čo sú dva anión – radikály $TCNQ^{\bullet -}$. Dvojica molekúl TCNQ má jeden spin S = ½ a tieto dvojice idú v rade za sebou. Vedľajší rad molekúl TCNQ – teda spinov, je oddelený katiónmi, za ktorými nasleduje znova ďalší rad spinov. Vzdialenosti medzi katiónmi a spinmi sú väčšie, teda rady TCNQ sú priestorovo oddelené. Z toho usudzujeme, že látka by mohla predstavovať jednorozmerný spinový model.

Riešenie kryštálovej štruktúry nami študovanej látky odhalilo aj prítomnosť slabých vodíkových väzieb (HBs) medzi katiónmi a anión – radikálmi $TCNQ^{\bullet -}$. Z doterajších výskumov magnetoštruktúrnych korelácií vieme, že HBs môžu sprostredkovať magnetické výmenné interakcie. Tento fakt robí dané organické magnetikum výnimočné v tom zmysle, že drvivá väčšina doterajších organických magnetických látok je jednorozmerná, ale u tejto látky je možnosť, že vďaka HBs môžu magnetické interakcie existovať v dvoch smeroch.

3 Metodika

3.1 Meranie tepelnej kapacity

Meranie tepelnej kapacity sme realizovali na komerčnej PPMS (Physical Property Measurement System) aparatúre firmy Quantum Design (Obr. II.1.1). Tepelnú kapacitu sme merali v teplotnom intervale od 0,4 K – 45 K pri magnetickom poli 0 T a 9 T.

Keďže reálne látky pozostávajú z rôznych podsystémov, aj celková tepelná kapacita vzorky pozostáva z viacerých príspevkov, ktoré pochádzajú od jednotlivých podsystémov. Ak predpokladáme, že jednotlivé podsystémy medzi sebou neinteragujú (teda prenos energie medzi nimi považujeme za zanedbateľný), môžeme vo všeobecnosti celkovú tepelnú kapacitu vyjadriť ako súčet jednotlivých príspevkov:

$$C = C_{LATT} + C_{MAG} + C_{EL} + C_{SCH}$$

kde C je celková tepelná kapacita celej vzorky, C_{LATT} je tepelná kapacita mriežkového podsystému (tzv. mriežková kapacita), ktorá pochádza od kmitov mriežky, teda od fonónov. C_{MAG} je tepelná kapacita magnetického podsystému, ktorá pochádza od vzájomného pôsobenia spinov, resp. interakcií spinov a ich najbližšieho okolia. C_{EL} je príspevok od voľných / vodivostných elektrónov a C_{SCH} je tzv. jadrový Schottkyho príspevok. V nami študovanej látke môžeme zanedbať príspevok od elektrónového podsystému, keďže sa v nej nevyskytujú voľné elektróny a celý systém nie je elektricky vodivý a niektoré podobné systémy sa javia ako úzkopásmové polovodiče, a to len pri vyšších teplotách. Tiež môžeme zanedbať jadrový Schottkyho príspevok, pretože atómy, tvoriace študovaný rýdzo-organický systém nevykazujú jadrový príspevok k tepelnej kapacite. Teplotná závislosť tepelnej kapacity sa teda redukuje na separáciu mriežkového a magnetického príspevku.

3.2 Magnetizačné merania

Na meranie magnetických vlastností sme používali komerčnú MPMS (Magnetic Properties Measurement System) aparatúru firmy Quantum Design, v ktorej prebieha meranie magnetického momentu na báze SQUID (The superconducting quantum interference device). Merania na aparatúre MPMS prebiehali v našom prípade v dvoch režimoch: sú to režimy Zero field cooling (ZFC) a Field cooling (FC). V režime ZFC sa vzorka ochladí bez prítomnosti magnetického poľa na počiatočnú teplotu a až následne je na ňu naložené magnetické pole a zmeria sa teplotná závislosť magnetizácie. Pri režime FC sa vzorka ochladzuje už v prítomnosti magnetického poľa a následne sa meria teplotná závislosť magnetizácie. Meranie prebiehalo v teplotnom rozsahu od 2 K do 300 K.

Presnosť meraní MPMS je daná pre každý bod merania ako odchýlka signálu vzorky a fitu signálu.

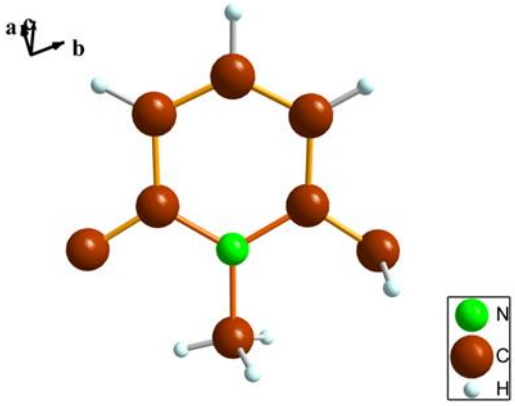
Po zmeraní magnetického momentu slamky a kapsulky, v ktorej sa už nachádzala látka, sa následne odčíta diamagnetický signál kapsulky a slamky ako funkcia magnetického momentu v závislosti od teploty. Takto získame už len hodnoty magnetického momentu samotnej látky. Hodnotu diamagnetického príspevku našej látky $\chi_{dia} = - 13{,}578 \cdot 10^{-5}$ emu/mol sme zistili pomocou Pascalových konštánt [R. L. Carlin, 1996], [S. Krupička, 1969].

3.3 Charakteristika a popis vzorky

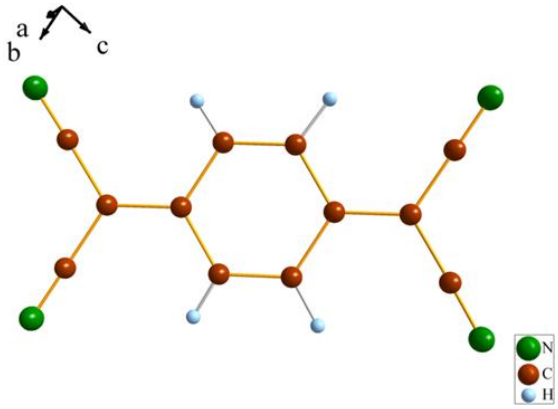
Študovaná látka bola syntetizovaná na spolupracujúcom pracovisku Univerzity V. Karazina v Charkove na Ukrajine. Kryštálová štruktúra látky bola riešená pomocou RTG difraktometrie a infračervenej spektroskopie na pracovisku kolegov v Charkove.

Röntgenová štúdia kryštálovej štruktúry ARS bola vykonávaná pri izbovej teplote použitím zariadenia KM-4 KUMA DIFFRACTION. Kryštálová štruktúra bola riešená priamymi metódami a Fouriérovými syntézami použitím softvéru SHELXS-97 [G. M. Sheldrick , 1997]. Súradnice vodíkových atómov boli vypočítané z geometrických podmienok. Syntetizovaná zlúčenina bola tiež skúmaná meraním jej absorpcie v infračervenom spektrálnom rozsahu.

Kryštálová štruktúra študovanej vzory (N-Me-2,6-di-Me-Py)$(TCNQ)_2$ je tvorená anión – radikálom $TCNQ^{\bullet}$ v hlavnej pozícii a kryštalograficky nezávislým N-metyl-2,6-dimethyl-pyridinovým katiónom umiestneným v čiastočne centrálne symetrickej pozícii (Obr. 4.)

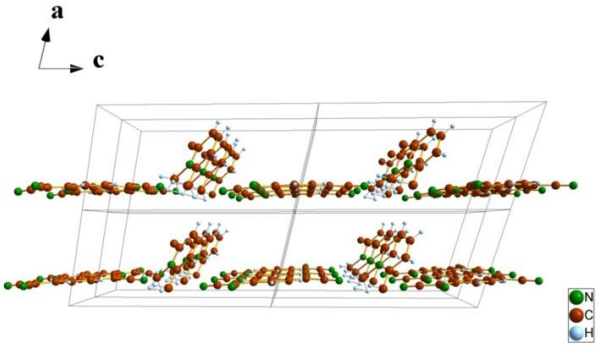


Obr. 4: Schematická kryštálová štruktúra katiónu $(N\text{-}Me\text{-}2,6\text{-}di\text{-}Me\text{-}Py)^+$ v látke (N-Me-2,6-di-Me-Py)$(TCNQ)_2$.



Obr.5: Schematické znázornenie kryštálovej štruktúry anión – radikály $TCNQ^{\bullet}$ (7, 7, 8, 8 – tetrakyanochinodimetán).

Vykonané štúdie ukazujú, že ARS má vrstevnatú štruktúru. V nej sa vrstvy tvorené (N-Me-2,6-di-Me-Py)$^+$ katiónmi striedajú pozdĺž osi *c* s vrstvami pozostávajúcimi z anión – radikálov $TCNQ^{\bullet}$ (Obr. 5.). Tvar molekúl TCNQ, ktoré tvoria π - molekulový systém, je takmer rovinný: anión – radikál $TCNQ^{\bullet}$ je charakterizovaný len minimálnymi odchýlkami dusíkových atómov z uhlíkovej roviny s hodnotami 0,16 Å a 0,15 Å. Kryštálová štruktúra preto pozostáva zo stĺpcov, tvorených molekulami TCNQ, ktoré sú uložené paralelne za sebou (Obr. 6.). Uhly, ktoré zvierajú tieto roviny TCNQ, sú 0°. Molekuly TCNQ vytvárajú slabo dimerizované stĺpce pozdĺž osi *a*. Vzdialenosť medzi rovinami, ktoré sú tvorené uhlíkovými atómami v TCNQ molekulách, sú v dimeroch 3,20 Å a medzi dimérmi 3,23 Å . Katióny sú prakticky rovinné, keďže maximálna odchýlka od roviny v molekule katiónu je len 0,03 Å. Anión – radikál $TCNQ^{\bullet}$ je charakterizovaný malými odchýlkami dusíkových atómov z uhlíkovej roviny s hodnotami 0,16 Å a 0,15 Å.



Obr. 6: Perspektívny pohľad na kryštálovú štruktúru v rovine ac.

V nasledujúcej tabuľke sú uvedené hlavné kryštalografické údaje látky (N-Me-2,6-di-Me-Py)$(TCNQ)_2$.

Empirický vzorec	**$C_{32}H_{20}N_9$**
Molekulová hmotnosť	530,57 g/mol
Kryštalografická sústava	Trojklinická
Priestorové usporiadanie	P $\bar{1}$
Hustota /g/cm^3	1,24
Parametre elementárnej bunky:	
a/Å	7.243(1)
b/Å	7.908(2)
c/Å	13.836(3)
α/°	87.02(3)
β/°	76.27(3)
γ/°	67.70(3)
Objem /Å^3	711.6(2)
Z	1

Ak chceme interpretovať výsledky magnetických meraní je potrebné poznať náboj – magnetický moment ARS. Ten môže byť stanovený analýzou dĺžky väzieb v molekulách TCNQ, a energie stabilizácie vypočítanej v rámci modelu harmonického oscilátora HOSE [T.M. Krycowski, 1983]. Pomocou kvantovo chemických výpočtov bol vypočítaný náboj pre jednu molekulu TCNQ v ARS – 0,53 *e*.

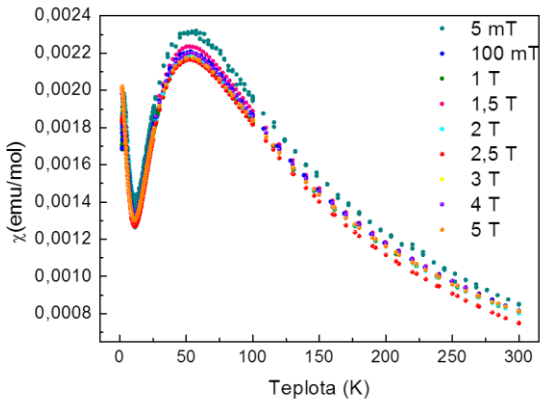
Keď zoberieme do úvahy presnosť tejto interpretácie, získame priemerný náboj umiestnený na molekule TCNQ rovný – 0,50 *e* na molekulu. Kvôli tomu štruktúrny dimér, čiže dvojica molekúl TCNQ, nesie náboj – 1 *e* a efektívny spin je S = ½.

4 Experimentálne výsledky a diskusia

Študovaná látka bola syntetizovaná na spolupracujúcom pracovisku Univerzity V. Karazina v Charkove na Ukrajine. Teoretické modely boli vypočítané kolegom profesorom Cheranovskym z Charkovskej univerzity. Našou prácou bolo experimentálne štúdium magnetickej susceptibility tepelnej kapacity, analýza výsledkov a definovanie magnetického systému prostredníctvom teoretických modelov.

4.1 Magnetická susceptibilita a porovnanie s teoretickým modelom

Magnetickú susceptibilitu polykryštalickej vzorky s hmotnosťou 80,57 mg sme merali v teplotnom intervale od 2 K do 300 K v magnetických poliach 5 mT, 100 mT a 1 T, 1,5 T, 2 T, 2,5 T, 3 T, 4 T a 5 T (Obr. 7.)



Obr. 7: Teplotná závislosť magnetickej dc – susceptibility v magnetických poliach meraná v režimoch ZFC a FC.

V okolí teploty T = 50 K sa nachádza oblé maximum (vysokoteplotné), ktoré je prejavom prítomnosti krátkodosahových interakcií magnetických momentov.

Vysokoteplotná časť susceptibility sa dá opísať v teplotnom intervale od 150 do 300K, podľa Currie – Weissovho zákona, ktorý má tvar

$$\chi = \frac{C}{T - \theta},$$

kde T je teplota, θ je Weissova teplota a C je Currieho konštanta. Z fitovania experimentálnych dát sme vypočítali Weissovu teplotu $\theta \cong -85\ K$, ktorej záporná hodnota ukazuje, že interakcie v našej látke sú antiferomagnetické. Ďalej, vychádzajúc z teplotnej závislosti $\chi.T$, sme vypočítali efektívny magnetický moment látky pri izbovej teplote ako:

$$\mu_{ef} = \sqrt{8\chi T} = 1{,}58\ \mu_B$$

Táto hodnota je blízka teoretickej hodnote 1,73 μB pre magnetický systém so spinom ½, keďže podľa teoretického predpokladu pre *S=1/2* platí [S. Krupička, 1969], [R. L. Carlin, 1996]

$$\mu_{ef} = \sqrt{N(N+2)} = 1{,}73\ \mu_B\ ,$$

kde N je počet nespárených elektrónov magnetického iónu. V prípade nami skúmanej organickej látky je N určené kvantovo-chemickými výpočtami elektrónovej hustoty pre dvojicu TCNQ molekúl.

Experimentálnu hodnotu μ_{ef} môžeme považovať za potvrdenie teoretických výpočtov, ktoré predpokladajú, že na jednej molekule TCNQ by mala byť elektrónová hustota rovná 0,53 e^-. Elektrónová hustota dvojice molekúl TCNQ odpovedá potom približne náboju 1 elektrónu, čo je spin ½.

Tiež sme vypočítali hodnotu g – faktora g = 2,08, ktorú sme určili pomocou vzťahu

$$g = \sqrt{\frac{1}{B.0{,}09375}}.$$

Pri najnižších teplotách susceptibilita znovu narastá a objavuje sa druhé - nízkoteplotné maximum. Prudký nárast susceptibility pri najnižších teplotách môže byť prejavom prítomnosti prímesí, nečistôt, inej fázy látky alebo koncov fragmentov látky. Z analýzy kryštálovej štruktúry však vieme, že nami skúmaná látka je čistá, t.j. nie je tam iná fáza ani nečistoty ako napríklad magnetický ión alebo iné molekuly ako sú uvedené vo vzorci. Usudzujeme, že nárast a následné nízkoteplotné maximum by mohol byť prejavom interakcií voľných koncov fragmentov látky.

Pre analýzu magnetickej susceptibility a zistenie parametrov magnetického systému sme použili sme **kombináciu modelu heisenbergovskej spinovej retiazky s periodickými hranicami a malého počtu voľných spinov.** Model Hamiltoniánu má tvar

$$H = \sum_{i=1}^{N} (J\boldsymbol{S}_i\boldsymbol{S}_{i+1} - 2\mu H\boldsymbol{S}_i^z) - 2\mu nH\boldsymbol{S}_0^z, \boldsymbol{S}_{N+1} = \boldsymbol{S}_1, n \ll N$$

kde J je väzbová konštanta, $\boldsymbol{S}_i$ je jeden elektrónový spinový operátor umiestnený na i – tej retiazke. Retiazka spinov a voľné spiny majú rovnaký g – faktor ($g = 2$) a rovnaký moment spinu S = ½ . Výsledný získaný Hamiltonián pre dvojicu heisenbergovských spinov má potom tvar:

$$H_{eff} = J_{eff} S_1 S_2,$$

s interakciou $J_{eff} = J_2(\rho)^2$,

kde ρ je redukovaná spinová hustota koncov retiazok s nepárnym počtom spinov N.



Obr. 8: Schematický náčrt modelu magnetického systému, tvoreného lineárnymi S=1/2 spinovými retiazkami s interakciou J_1 , slabo interagujúcimi svojimi koncami interakciou J_2

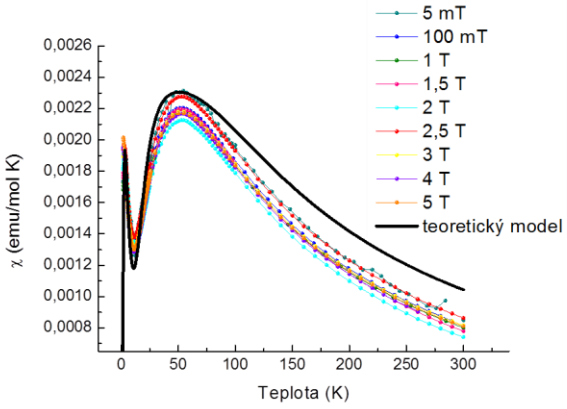
Celková molárna susceptibilita má formu súčtu dvoch príspevkov, ktorý zahŕňa retiazky vytvorené N spinmi (χ_N) a n voľných spinov – spinov na koncoch retiazok (χ_t)

$$\chi = \alpha\, \chi_t(T) + (1 - \alpha)\, \chi_N(T)$$

kde

$$\chi_t \sim \frac{4\mu^2 \alpha x}{(\exp(x) + 3)J_2}, \qquad x = \frac{J_2}{k_B T},$$

Množstvo α zodpovedá koncentrácii voľných spinov $\alpha = n/(n + m)$. Pre malé hodnoty a pre $J_2 \ll J_1$ môžeme zanedbať vplyv voľných spinov na výšku vysokoteplotného oblého maxima. To nám umožňuje použiť experimentálnu hodnotu maxím $\chi_1 \sim$ 0,00232 pri $T \sim$ 54,4 K a $\chi_2 \sim$ 0,00194 pri $T \sim$ 3,2 K, pre odhad väzbovej konštanty. Výsledkom analýzy sú hodnoty parametrov magnetického podsystému: veľkosť výmennej interakcie v rámci retiazok J_1 = 120 K, veľkosť výmennej interakcie medzi koncami retiazok J_2 = 5,1 K a koncentrácia voľných spinov α ~ 0,033.



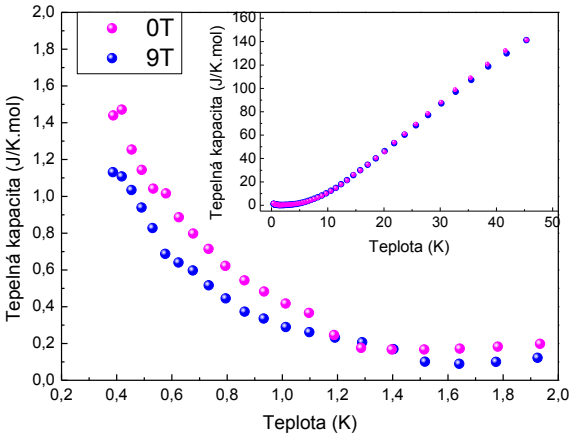
Obr. 9: Teplotná závislosť magnetickej dc – susceptibility v magnetických poliach, v porovnaní s teoretickým modelom pre konečnú uniformnú retiazku s voľnými koncami (čierna čiara).

Z analýzy magnetickej susceptibility sme zistili, že magnetický systém môže byť veľmi dobre popísaný heisenbergovským modelom pre konečnú uniformnú ½ – spinovú retiazku (s interakciou J_1) s malou koncentráciou slabo interagujúcich voľných koncov (s interakciou medzi koncami retiazky J_2).

Tým istým modelom budú analyzované aj experimentálne dáta tepelnej kapacity.

4.2 Tepelná kapacita a porovnanie s teoretickým modelom

Tepelnú kapacitu nami študovanej látky vo forme zlisovanej tablety s hmotnosťou 1,42 mg sme merali pomocou komerčnej PPMS aparatúre firmy Quantum Design v teplotnom rozsahu od 0,4 K do 45 K v magnetickom poli 0 T a 9 T (Obr.10.). Tepelná kapacita s klesajúcou teplotou klesá, ale pri najnižších teplotách tepelná kapacita narastá, a teda neklesá s teplotou podľa funkcie T^3. Stúpanie pri najnižších teplotách môže byť zapríčinené možnou Schottkyho anomáliou, ako prejavom SRO, alebo môže byť časťou λ – anomálie, ako prejavu fázového prechodu do usporiadaného stavu. Celkový prechod do SRO a LRO sme nepozorovali v teplotnej závislosti tepelnej kapacity, ani v zobrazení pomocou redukovaných súradníc.

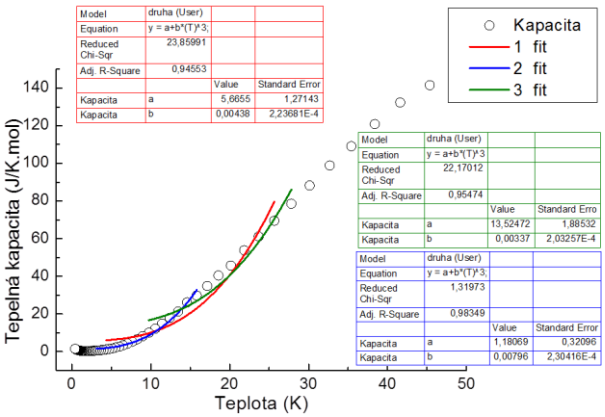


Obr. 10: Teplotná závislosť celkovej tepelnej kapacity v magnetickom poli 0 T a 9 T v teplotnom rozsahu 0,4 K – 2 K.
Vsuvka: Teplotná závislosť celkovej tepelnej kapacity v magnetickom poli 0 T a 9 T v teplotnom rozsahu 0,4 K – 50 K.

Nami skúmaný systém pozostáva magnetického a mriežkového podsystému.

V prvom kroku bolo potrebné odseparovať mriežkový príspevok, ktorý je podľa teórie ~ T^3. Ako sa však následne ukázalo, v prípade nami skúmaných systémov, tento postup neviedol presne k očakávaným parametrom. Príčinou môže byť vplyv štruktúrnej (silnej) nízkorozmernosti na fonónové módy.

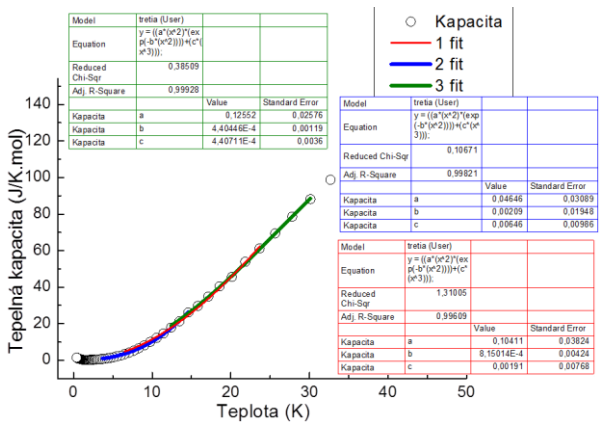
Preto sme odhad mriežkového príspevku urobili klasických spôsobom – nájdením parametrov pomocou fitovania $C(T)$ funkciou $y = a + bT^3$. Výsledky tejto analýzy (niektoré z fitovaní) sú na nasledujúcich obrázkoch (Obr.11.).



Obr. 11: Analýza nameraných dát pomocou vzťahu $y = a + bT^3$

Vychádzajúc zo skúseností s inými, nami skúmanými ASR [A. Radváková, et al., 2009] sme použili v druhom kroku pre analýzu magnetického príspevku Maxwellovú funkciu: $aT^2exp(-bT^2)$. Vzťah, pomocou ktorého sme potom analyzovali celkovú tepelnú kapacitu (Obr. 12.), mal potom tvar:

$$C = C_{LATT} + C_{MAG} = aT^2exp(-bT^2) + c\,T^3.$$



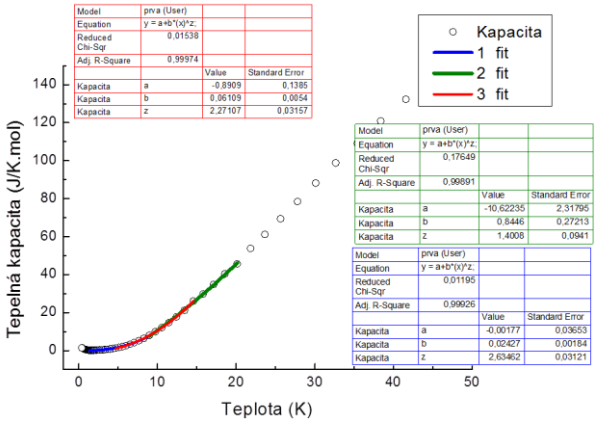
Obr. 12: Niektoré z fitovaní C(T) pomocou vzťahu $C = aT^2exp(-bT^2) + c\,T^3$

V treťom kroku našej analýzy sme využili poznatky zo štúdií [V.V. Tarasov], v ktorých boli analyzované organické nízkorozmerné magnetické systémy. Bolo ukázané, že ich tepelná kapacita mriežkového systému sa pri nízkych teplotách neriadi podľa Debyeovej teórie závislosťou T^3, ale objavujú sa členy s inou mocninou. Celkovú tepelnú kapacitu sme teda analyzovali pomocou vzťahov:

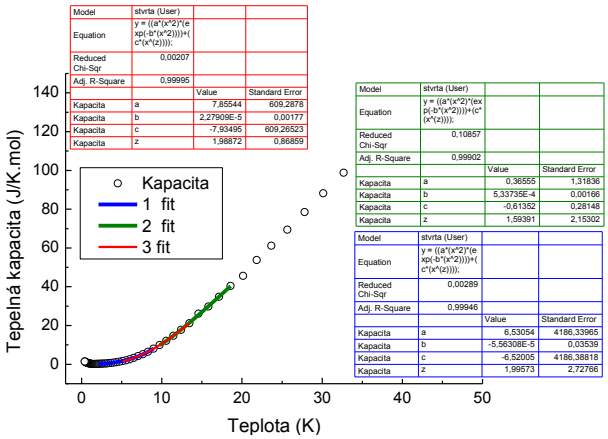
$$C = C_{LATT} + C_{MAG} = a + bT^x$$

$$C = C_{LATT} + C_{MAG} = aT^2exp(-bT^2) + c\,T^x$$

kde sme hľadali koeficient x. Tento koeficient nadobúdal hodnoty od 1,9 do 2,7, no najčastejšie to boli hodnoty 2,4 až 2,7 (Obr. 13. a Obr.14).



Obr. 13: Vybraná analýza nameraných dát pomocou vzťahu $C = a + bT^x$

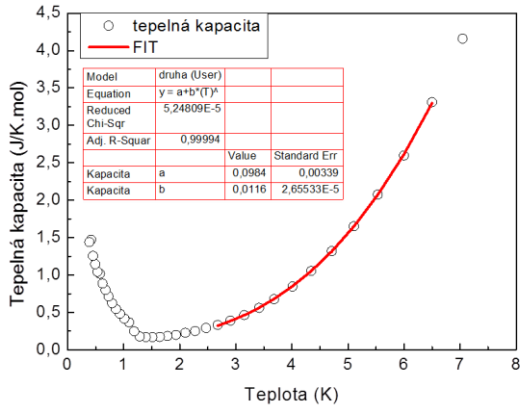


Obr. 14: Vybraná analýza nameraných dát pomocou vzťahu $C = aT^2exp(-bT^2) + c\,T^x$

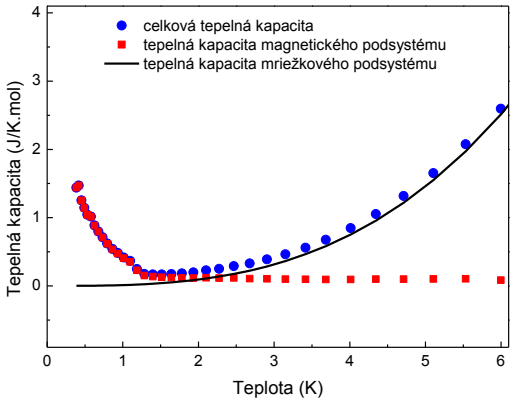
Problematika tepelnej kapacity retiazkových a vrstevnatých systémov bola diskutovaná v literatúre už začiatkom 50-tych rokov [Program MaTra2.exe]. Bolo ukázané, že tepelná kapacita nízkorozmerných systémov sa pri nízkych teplotách neriadi závislosťou T^3 podľa Debyeovej teórie a objavujú sa členy s inou mocninou, najčastejšie so závislosťou blízkou $T^{5/2}$. Analýza mriežkovej tepelnej kapacity so započítaním efektov nízkorozmernosti a stanovenie teplotných intervalov, v ktorých prevláda príspevok od jednorozmerných resp. dvojrozmerných fonónov bola veľmi komplikovaná a neviedla k jednoznačným výsledkom, preto bol pri separácii mriežkovej tepelnej kapacity nakoniec použitý Debyeov model s mriežkovým členom T^3, ako bolo použité aj v odbornej literatúre.

Príspevok mriežkového podsystému sme analyzovali v nízkoteplotnej oblasti, lebo z analýzy magnetickej susceptibility sme zistili, že interakcie medzi spinmi sú pri vyšších teplotách silné, a teda

sa tam značne prejavuje magnetický podsystém. Preto bolo pre dobrú analýzu dôležité nájsť vhodný teplotný interval, ktorý by bol dostatočne veľký (Obr. 15. a Obr. 16.).



Obr. 15: Výsledný vybraný fit, pomocou ktorého sme vykonávali ďalšiu analýzu separácie príspevku mriežkového podsystému k tepelnej kapacite.



Obr. 16: Teplotná závislosť celkovej tepelnej kapacity (modré krúžky), tepelnej kapacity mriežkového podsystému (čierna čiara) a tepelnej kapacity magnetického systému(červené štvorce).

Vzhľadom na závery z magnetickej susceptibility, sme experimentálne výsledky tepelnej kapacity analyzovali pomocou toho istého modelu, ako magnetickú susceptibilitu - teda modelu, ktorý popisuje stavy s najnižšou hodnotou energie v spinových systémoch, tvorených lineárnymi spinovými retiazkami s interakciou J_1, slabo interagujúcimi svojimi koncami – interakciou J_2 (Obr. 8.) [Ovchinnikov A.A. et al, 1980].

V uvedenom modeli je uniformná heisenbergovská retiazka tvorená 6 spinmi s interakciou medzi nimi J_1/k_B = 120,43 K, s medziretiazkovou interakciou J_2.

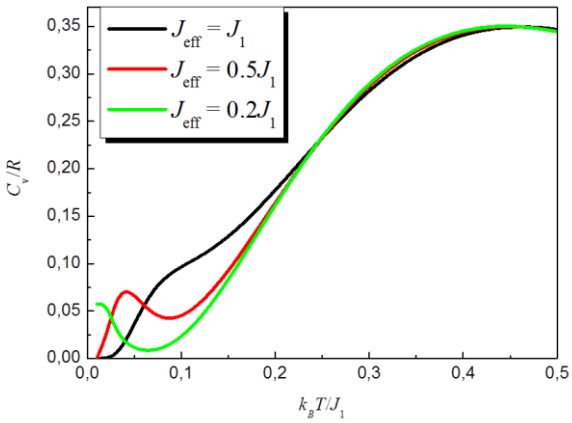
Pre odhad teplotnej závislosti tepelnej kapacity je možné napísať:

$$C_v(T) = \alpha\, C_{v,t}(T) + (1-\alpha)\, C_{v,N}(T)$$

kde α zodpovedá koncentrácii voľných spinov (koncentrácii koncov retiazok), $C_{v,t}(T)$ a $C_{v,N}(T)$ sú tepelné kapacity voľných spinov, respektíve retiazky:

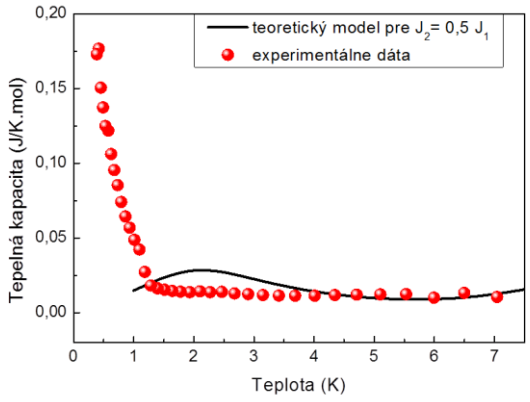
$$C_{v,t}(T) \sim \frac{3x^2 \exp(x)}{(\exp(x)+3)^2} R, \qquad x = \frac{J_2}{k_B T},$$

kde R je univerzálna plynová konštanta. Výsledky predpovede pre tepelnú kapacitu takéhoto systému pre vybrané hodnoty pomeru J_{eff} a J_1 sú na Obr. 17.



Obr. 17: Tepelná kapacita modelu jednorozmerného systému spinových (S = ½) retiazok v nulovom magnetickom poli. J_1 a J_2 predstavujú konštanty výmennej interakcie v rámci, resp. medzi koncami retiazky.

Podľa týchto výpočtov vedie medziretiazková interakcia J_2 k vzniku ďalšieho maxima v teplotnej závislosti $C_v(T)$, pri nižších teplotách. Pokles hodnoty J_2 má za následok posun nizkoteplotného maxima k nižším teplotám. S ohľadom na výsledky z analýzy magnetickej susceptibility, ktoré poskytli hodnotu medziretiazkovej interakcie J_2 = 5,13 K, sme na porovnanie nami nameraných experimentálnych dát použili model sa parametrami $J_2 = 0{,}5\, J_1$ (Obr. 18.).



Obr. 18: Teplotná závislosť tepelnej kapacity v magnetickom poli 0 T (červené body) v porovnaní s teoretickým modelom (čierna čiara) pre konečnú uniformnú retiazku (J_1) s voľnými – slabo interagujúcimi, koncami (J_{eff}).

Vzhľadom na problém s presným odhadom odpovedajúceho (a v širokej teplotnej závislosti

platného) mriežkového príspevku, nevieme zatiaľ experimentálne dáta absolútne uspokojivo analyzovať podľa navrhovaného modelu.

Jednoznačne však môžeme konštatovať dva fakty:

1. v našich experimentálnych dátach sa od 1,5 K do 0,4 K objavuje nárast tepelnej kapacity. Porovnaním s teoretickými modelmi môžeme skonštatovať, že interakcia medzi koncami retiazok $J_{eff} < 0{,}5\ J_1$, pretože **existencia maxima v experimentálnych dátach tepelnej kapacity je naznačená pre nižšie teploty, než je teoretická predpoveď**.
2. v oblasti teplôt približne 4 – 7 K (teda oblasť, kde bol relatívne presne odhadnutý a presne odčítaný príspevok mriežkového podsystému), **experimentálne dáta kvantitatívne uspokojivo korešpondujú s navrhovaným modelom**.

Spresnenie detailov modelu, ako aj parametrov z neho vyplývajúcich, bude ďalšou náplňou práce na nami študovanej vzorke.

5 Záver

V predkladanej práci sme sa zaoberali skúmaním novej organickej ARS na báze TCNQ: (N-Me-2,6-di-Me-Py)$(TCNQ)_2$. Jej kryštálová štruktúra bola stanovená pomocou štúdia infračerveného a röntgenového spektra. Experimentálne štúdium teplotnej závislosti tepelnej kapacity a magnetickej susceptibility v rôznych magnetických poliach, bolo analyzovane pomocou teoretických modelov.

Meranie magnetickej susceptibility potvrdilo v ARS prítomnosť antiferomagnetických interakcií. V experimentálnej závislosti magnetickej susceptibility sme pozorovali oblé maximum susceptibility pri teplote ~ 50 K, ktoré je prejavom prítomnosti krátkodosahových magnetických interakcií. Analýza magnetickej susceptibility ukázala, že magnetický systém môže byť veľmi dobre popísaný modelom pre heisenbergovskú konečnú uniformnú retiazku spinov $S = 1/2$, s malou koncentráciou voľných koncov, s veľkosťou výmennej interakcie v rámci retiazky $J_1 = 120$ K, s veľkosťou výmennej interakcie medzi koncami retiazok $J_2 = 5{,}1$ K a koncentráciou voľných spinov $\alpha \sim 0{,}033$.

Experimentálne výsledky tepelnej kapacity sme analyzovali pomocou toho istého modelu, ako magnetickú susceptibilitu – teda modelu, ktorý popisuje systém, tvorený lineárnymi spinovými retiazkami s interakciou J_1, slabo interagujúcimi svojimi koncami - interakciou J_2. Teoretické modely ukazujú, že interakcia J_2 medzi koncami retiazok sa prejavuje v tepelnej kapacite aj magnetickej susceptibilite ďalším nízkoteplotným oblým maximom.

Porovnaním modelov tepelnej kapacity pre rôzne veľkosti interakcií J_2 pozorujeme, že čím je menšia veľkosť interakcie J_2 medzi koncami retiazok oproti interakcii v retiazke J_1, tým sa nízkoteplotné maximum v tepelnej kapacite posúva k nižším teplotám. V našich experimentálnych dátach tepelnej kapacity sa do 0,4 K objavuje len jej nárast. Porovnaním s teoretickým modelom však môžeme skonštatovať kvantitatívny súhlas experimentu s teóriou – pre oblasť platnosti odčítania mriežkového podsystému. A je možné predpokladať, že interakcia medzi koncami retiazok $J_{eff} < 0{,}5\ J_1$, pretože existencia nízkoteplotného maxima v experimentálnych dátach tepelnej kapacity je naznačená pre nižšie teploty, než je teoretická predpoveď.

Poďakovanie

Táto práca bola podporená grantom č.ITMS26220120005 z finančných prostriedkov Európskeho fondu regionálneho rozvoja Európskej Únie.

Práca bola realizovaná na pracovisku fyziky nízkych teplôt v Košiciach.

Literatúra

[W.A. Little, 1964] W.A. Little, Phys. Rev. A 134 (1964) 1416.

[I.F. Schegolev , 1972] I.F. Schegolev, Phys. Stat. Sol. Ser. A 12 (1972) 9.

[D. Jerome et al., 1980] D. Jerome, A. Masaud, M. Ribault et *al*., J. Phys. Lett. 41 (1980) L95.

[M. Tanaka et al., 1987] M. Tanaka, F. Urano, M. Nakabata, Japan Patent 60-139832 (1987).

[V.A. Starodub et al., 1987] V.A. Starodub, V.V. Barabashova, Ye.M. Gluzman et *al*., USSR Patent No. 1389226 (1987).

[Sanyo Electric Co., 1986] Sanyo Electric Co., USA Patent No. 458055 (1986).

[V.A. Starodub et al., 1991] V.A. Starodub, Ye.M. Gluzman, K.V. Krikunov et *al*., USSR Patent 1696428 (1991).

[A. Radváková et al., 2010] A. Radváková et al., Journal of Physics and Chemistry of Solids, (2010).

[A. Radváková et al., 2009] A. Radváková et al., Journal od Physics: Condensed Matter, (2009).

[S. V. Vitushkina et al., 2009] S. V. Vitushkina et al., Research Letters in Inorganic Chemistry, (2009).

[J. Gažo et al., 1981] J. Gažo et al., Všeobecná a anorganická chémia, Bratislava, ALFA (1981).

[G. R. Desiraju, 1989] G. R. Desiraju, Crystal Engineering: The Design of Organic Solids, Elsevier (1989).
[J. Fraxedas, 2006] J. Fraxedas, Molecular Organic Materials: From Molekules to Crystalline Solids, Cambrigde University Press (2006).
[G. M. Sheldrick , 1997] G. M. Sheldrick, SHELXS 97, University of Gottingen, Germany (1997).
[T.M. Krycowski, 1983] T.M. Krycowski, R. Anuliewicz, Acta Crystallogr. B39, 732 (1983).
[A. Radváková, et al., 2009] A. Radváková, et al., J. Physics and Chemistry of Solids, 70 (2009) 1471.
[V.V. Tarasov] V.V. Tarasov, Žurnal FIZ.; I.M. Lifshitz Žurnal Exp.
[Program MaTra2.exe] Program MaTra2.exe, vytvorený kolektívom prof. Z. Trávníčka z Univerzity Palackého v Olomouci a doc. J Mareka z Masarikovej Univerzity v Brne.
[Ovchinnikov A.A. et al, 1980] Ovchinnikov A.A., Cheranovskii V.O. Theoretical and Experimental Chemistry, 1980, 16 (2), pp. 119-124.
[R. L. Carlin, 1996] R. L. Carlin, Transition metal chemistry III., New York, Marcel Dekker (1966).
[S. Krupička, 1969] S. Krupička, Fyzika feritů a příbuzných magnetických kysličníků, Praha, NČAV (1969).

Hľadanie signálu produkcie eta- jadier v experimente na Nuklotróne v SÚJV

Mária Špavorová[1†]
Školiteľ: Stanislav Vokál[1‡]

[1] inštitút, PF UPJŠ, Šrobárova 2, 041 54 Košice, Slovenská republika

Abstrakt

Cieľom tejto práce je prezentovať výsledky skúmania produkcie η- mezónových jadier v experimente SCAN na vnútornom terčíku Nuklotrónu SÚJV v Dubne. Signál produkcie η- mezónových jadier bol hľadaný v zrážkach deuterónov s jadrami ^{12}C pri energii 2,035 GeV. Ideou bolo využiť poznatok, že rozpad η- mezónových jadier prebieha cez $S_{11}(1535)$ rezonanciu. Z možných rozpadových kanálov $S_{11}(1535)$ rezonancie bol v experimente SCAN vybraný rozpad na pár protón a záporne nabitý pión, ktoré boli detegované pomocou scintilačných detektorov. Kľúčovú úlohu pritom zohráva rozdelenie efektívnej hmotnosti tohto páru, ak detegovaný pár skutočne pochádza z rozpadu $S_{11}(1535)$, prejaví sa to v spektre efektívnej hmotnosti tohto páru ako maximum, našou úlohou bolo nájsť ho.

Kľúčové slová: η- mezón, η- mezónové jadro, $S_{11}(1535)$ rezonancia, jadrové zrážky

1 Úvod

η- mezónové jadrá sú hadrónovým systémom nového druhu, jedná sa o viazané stavy silnej interakcie, ktoré vytvára η- mezón a jadro. Skúmanie takýchto exotických stavov jadier je pomerne novou a zaujímavou oblasťou v časticovej fyzike, pretože môže priniesť informácie o správaní sa mezónov v prítomnosti jadrovej hmoty, vlastnostiach nukleónových rezonancií, interakciách mezónov s jadrom, ale môže tiež prispieť aj k lepšiemu pochopeniu samotných silných interakcií.

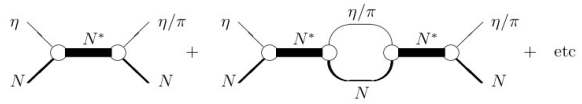
Interakcia η- mezónu s nukleónom (ďalej interakcia ηN) je pri nízkych energiách silno ovplyvnená prítomnosťou s- vlnovej $S_{11}(1535)$ rezonancie, ktorej rozpadová šírka je veľmi veľká ($\Gamma \approx 150$ MeV) a pokrýva celú nízkoenergetickú oblasť ηN interakcie. Hmotnosť tejto rezonancie leží veľmi blízko prahu produkcie ηN ($m_{\eta N_{treshold}} = m_\eta + m_N \approx 1486$ MeV), preto môže byť $S_{11}(1535)$ rezonancia sformovaná pri zrážke ηN už pri pomerne nízkej energii:

$$E_{\eta N} = 1535\,MeV - m_N - m_\eta \approx 49\,MeV$$

$S_{11}(1535)$ je však nestabilná a po svojom vzniku sa môže rozpadať tromi možnými rozpadovými kanálmi [W.- M. Yao et al.]:

- $S_{11}(1535) \rightarrow \pi + N$ (35 – 55)%
- $S_{11}(1535) \rightarrow \eta + N$ (45 – 60)%
- $S_{11}(1535) \rightarrow \pi + \pi + N$ (1 - 10)%

Kvôli veľkému vetviacemu pomeru $BR(S_{11}(1535) \rightarrow \eta N)$ prítomnosť $S_{11}(1535)$ silno ovplyvňuje všetky interakcie v tomto kanáli. Ďalším dôsledkom dominancie $S_{11}(1535)$ je, že interakciu η- mezónu s nukleónom si možno predstaviť ako sériu formovania a rozpadov tejto rezonancie, obr. 1.



Obr. 1: Schéma rozptylu ηN → $S_{11}(1535)$ → ηN a ηN → $S_{11}(1535)$ → πN. Na obrázku sa pre $S_{11}(1535)$ používa značenie N^*. Označenie η/π znamená η alebo π.

Bolo zistené, že interakcia ηN je blízko prahu ηN príťažlivá [R. S. Bhalerao, L. C. Liu.], čo je podstatná črta ηN interakcie, a tak sa prirodzene objavili otázky, či je táto interakcia dostatočne silná na to, aby mohol byť η- mezón viazaný v jadre. Táto problematika sa preto stala zaujímavou aj pre experimentálne skúmanie. Nie je to však jednoduché, pretože doba života η- mezónu $\tau_\eta = 5{,}5.10^{-19}$s je príliš krátka na to, aby mohol byť vytvorený zväzok η- mezónov, ktorým by bolo možné ostreľovať jadro, je teda nemožné skúmať interakcie η- mezónov s jadrami priamou cestou. Ich výskum je možný za predpokladu, že η- mezóny vznikajú ako koncový stav v iných elementárnych

†spavorova@gmail.com
‡stanislav.vokal@upjs.sk

procesoch, napríklad v reakciách indukovaných hadrónmi, piónmi či fotónmi na jadrách. Ak v reakcii vznikne η- mezón, možno následne skúmať jeho interakciu s tým istým jadrom, z ktorého bol produkovaný. Dôležité je, aby bola v experimente správne zvolená energia nalietavajúcich častíc. Tá sa zvykne vyberať tak, aby bola hybnosť vzniknutého η- mezónu $p_\eta \approx 0$ (tzn. aby bola splnená podmienka bezodrazovej kinematiky), vtedy je totiž pravdepodobnosť zachytenia pomalého η- mezónu jadrom, a tým aj vzniku viazaného stavu η – jadro, najvyššia. Hodnota hybnosti nalietavajúcej častice, pri ktorej sa sformuje η- mezón, ktorý je v laboratórnej sústave v pokoji, sa nazýva magickou hybnosťou.

Vo vnútri jadra podstupuje vzniknutý η- mezón sériu postupných absorbcií cez vznik a rozpad intermediárnej $S_{11}(1535)$ rezonancie [M. Kh. Anikina et al.]:

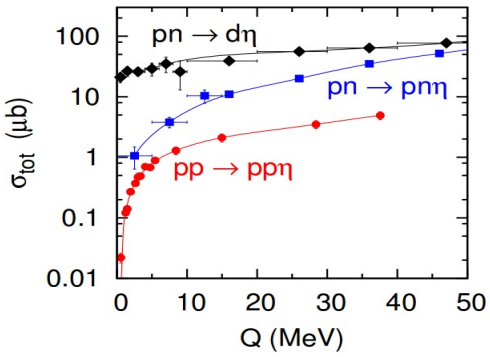
$$\eta + N \rightarrow S_{11}(1535) \rightarrow \eta + N \rightarrow S_{11}(1535) \rightarrow \ldots$$

$$\rightarrow S_{11}(1535) \rightarrow \ldots$$

Táto kreácia a anihilácia η- mezónu cez $S_{11}(1535)$ v jadrovej hmote môže viesť k vytvoreniu viazaného stavu η- mezónu s jadrom. Avšak takýto viazaný systém nemôže byť stabilný kvôli existencii konkurenčného rozpadového kanálu $S_{11}(1535)$ s pomerne vysokou pravdepodobnosťou, tzn. rozpad na Nπ. Za predpokladu, že sa vzniknutý systém η – jadro, resp. vzniknutá $S_{11}(1535)$ rezonancia rozpadne v pokoji v laboratórnej sústave na pár Nπ, získa tento pár dostatočne vysokú kinetickú energiu (T » 400 MeV) na to, aby mohol uniknúť z jadra a pravdepodobnosť procesu $\eta + N \rightarrow S_{11}(1535) \rightarrow \pi + N \rightarrow S_{11}(1535) \rightarrow \eta + N$ je zanedbateľná. Teda ak je η- mezón viazaný v jadre, môže sa vyskytovať iba v akomsi kváziviazanom, resp. metastabilnom stave s nenulovou šírkou. To je dôvod, prečo sú η- mezónové jadrá označované aj ako kvázistacionárne viazané stavy. Za uvedených predpokladov vylieta pár Nπ z jadra v navzájom opačnom smere, tzn. pod uhlom $\theta \approx 180°$ („back-to-back“ v pokojovej sústave η- mezónového jadra). Na detekcii týchto párov je založená väčšina experimentov zaoberajúca sa štúdiom η- mezónových jadier. Viazaný stav η- jadro sa v spektre týchto párov prejaví ako maximum („pík“) pod prahom produkcie ηN, tzn. $E_\pi + E_N < 1486$ MeV [Yu. S. Anisimov et al.]. Pozícia a šírka tohto píku môže poskytnúť informácie o pozícii a šírke energetických hladín η- mezónu viazaného v jadre.

2 Vznik η- mezónových jadier v pA zrážkach

η- mezónové jadrá môžu byť v pA zrážkach produkované v rôznych elementárnych procesoch. Na obr. 2 sú znázornené účinné prierezy formovania η- mezónu v prípade, kedy nalietavajúci protón s energiou blízko prahu produkcie η- mezónov interaguje s protónom alebo neutrónom v terčíkovom jadre [V. Baru et al.].



Obr. 2: Závislosť celkových účinných prierezov vzniku η- mezónov blízko prahu v reakciách pp → ηd, pn → ηpn, pp → ηpp v závislosti od prenesenej energie.

Ako ukazuje obr. 2, účinný prierez formovania η- mezónu je najvyšší pre reakciu pn → ηd, zatiaľ čo účinný prierez vzniku η- mezónu v reakcii pn → ηpn je v priemere 2- 3 krát menší a účinný prierez reakcie pp → ηpp je dokonca menší 3- 5 krát. Z uvedeného vyplýva, že produkciu η- mezónových jadier by bolo najjednoduchšie sledovať práve v kanáli pp → ηd, kedy deuterón so sebou odnesie podstatnú časť prinesenej hybnosti a vyprodukovaný pomalý η- mezón môže byť následne zachytený jadrom.

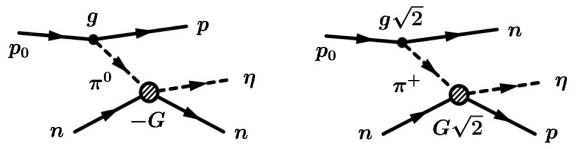
Z uvedených procesov pn → ηd, pn → ηpn a pp → ηpp bola na vysvetlenie vzniku η- mezónových jadier v pA zrážkach vybraná reakcia nalietavajúceho protónu s jadrom terčíka s nukleónovým číslom A:

$$p_0 + A \rightarrow n + p + {}_\eta(A\text{-}1)$$

pričom elementárny proces možno zapísať nasledovne [M. Kh. Anikina et al.]:

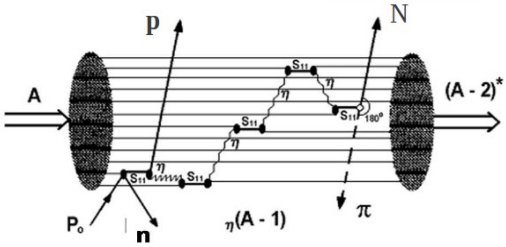
$$p_0 + n \rightarrow n + S_{11} \rightarrow n + p + \eta$$

Tento elementárny proces možno znázorniť pomocou nasledujúcich diagramov, pričom interakcia medzi nalietavajúcim protónom p_0 a neutrónom n prebieha prostredníctvom výmeny virtuálneho π^0 alebo π^+, na obr. 3.



Obr. 3: Interakcia protónu a neutrónu prebiehajúca prostredníctvom výmeny virtuálneho π^0 alebo π^+, produktami tejto reakcie sú pnη [M. Kh. Anikina].

Neutrón a protón vzniknuté v tejto reakcii odnášajú podstatnú časť hybnosti, v literatúre bývajú tieto častice často označované ako dopredu letiace nukleóny, angl. „flying forward nucleons" [S. V. Afanasyev et al.]. Tým, že so sebou odnášajú veľkú časť hybnosti nalietavajúcej častice, zabezpečujú to, že vzniknutý η- mezón má relatívne nízku hybnosť, čím značne rastie pravdepodobnosť jeho záchytu jadrom. Celý proces vzniku η- mezónu, výletu „dopredu letiacich" častíc z jadra, ako aj postupnosť emisií a absorpcií, ktoré podstupuje η- mezón v jadre, je zobrazený na nižšie uvedenom obr. 4. Konečnú fázu predstavuje rozpad $S_{11}(1535)$ rezonancie na pár pión a nukleón, ktoré z jadra vyletia pod vzájomným uhlom $\vartheta_{\pi N} \approx 180°$.

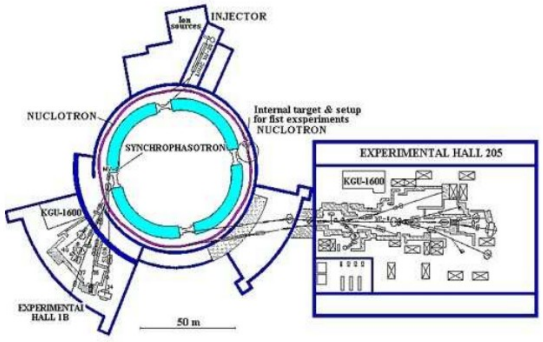


Obr. 4: Schéma vzniku η- mezónového jadra $_{\eta}$(A-1) pri interakcii zväzkového protónu p_0 s nukleónom jadra A, vznik $S_{11}(1535)$ rezonancie a „dopredu letiaceho" neutrónu, proces absorpcií a emisií η- mezónu cez vznik a rozpad $S_{11}(1535)$ rezonancie na η- mezón a nukleón, zánik η- jadra po emitovaní páru πN, ktoré vylietavajú zo zbytkového jadra (A-2) oproti sebe [M. Kh. Anikina et al.].

Hlavným problémom úspešného pozorovania a skúmania η- mezónových jadier je nízky účinný prierez formovania η- mezónového jadra v zrážkach pA alebo dA a príliš vysoké pozadie. Účinný prierez vzniku η- mezónového jadra pre uhlíkový terčík v zrážke pA je približne $\sigma(_{\eta}A) \approx 3$ μb, kým celkový účinný prierez nepružných procesov v pA kolízii je ≈ 250 mb, čo je rádove až 10^5- krát viac [V. A. Baskov et al.]. To sú dôvody, prečo je žiadúce okrem častíc pochádzajúcich z rozpadu $S_{11}(1535)$ rezonancie detekovať aj „dopredu letiace" častice, čo by prispelo k presnejším výsledkom.

3 Experiment na vnútornom terčíku v SÚJV

V LVE SÚJV sú η- mezónové jadrá produkované a skúmané na Nuklotróne, v experimente SCAN na vnútornom terčíku. Vnútorný terčík je priamo vsunutý do urýchľovacej trubice Nuklotrónu (to znamená, že nie je potrebné vyviesť urýchlený zväzok von z trubice a následne ho aplikovať na terčík), okolo neho je rozmiestnené detekčné zariadenie. Na obr. 5 vidno aj experimentálnu halu, v ktorej sa realizujú experimenty so zväzkami urýchlených častíc, ktoré sú vyvedené z Nuklotrónu.



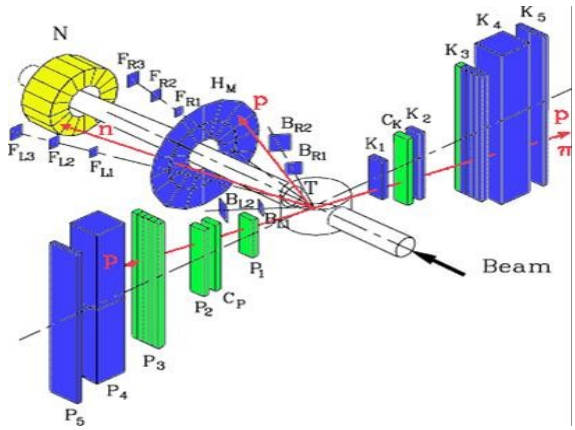
Obr. 5: Schéma Nuklotrónu v LFVE SÚJV v Dubne s vnútorným terčíkom. Miesto zrážky je obklopené detektormi ovládanými diaľkovo.

Na vnútornom terčíku Nuklotrónu sa η- mezónové jadrá študujú v nasledovných procesoch:

- $d + A \rightarrow {}_{\eta}B + ... \rightarrow \pi + p + ...$
- $p + A \rightarrow {}_{\eta}B + ... \rightarrow \pi + p + ...$

kde $_{\eta}B$ označuje sformované η- mezónové jadro, A terčíkové jadro, d deuterón a p protón. Ako terčík sa používa ^{12}C, ^{27}Al, ^{64}Cu, ^{183}W, ^{108}Ag a CH_2. V experimentoch s uhlíkovým terčíkom, ktorý sa používa najviac, sa využívala energia primárneho zväzku deuterónov v rozmedzí od (1,5 - 2,7) GeV/nukl., kedy vznikajú pomalé η- mezóny s hybnosťou menšou ako je 70 MeV/c [S. V. Afanasyev et al.].

Ako už bolo spomenuté, doba života η- jadier je veľmi krátka $\tau \approx 10^{-22}$s, preto o existencii η- jadra vieme len na základe jeho produktov rozpadu. V tomto experimente bol registrovaným párom častíc, ktorý mal pochádzať z rozpadu η- mezónového jadra rozpadúceho sa cez $S_{11}(1535)$ rezonanciu, pár pión – protón. Tieto častice by mali byť podľa známych dôvodov emitované z terčíkového jadra približne oproti sebe, čomu je prispôsobené aj experimentálne usporiadanie slúžiace na ich detekciu, obr. 6.



Obr. 6: Experimentálne usporiadanie. T označuje terčík, P, K- ramená, ktorých vzájomný uhol možno meniť v istom rozpätí, H_M- detektor na registráciu protónov vznikajúcich pri formovaní η- jadra, F_L, F_R, B_L, B_R - detektory slúžiace na monitorovanie zväzku, C_p a C_k označujú Čerenkovove detektory.

Páry častíc πp pochádzajúce z rozpadu $S_{11}(1535)$ boli registrované scintilačným spektrometrom SCAN. Na detekciu dvojice častíc v koincidencii pochádzajúcich z rozpadu $S_{11}(1535)$ rezonancie, sa využíval dvojramenný spektrometer pozostávajúci z ramien K a P, uhol medzi nimi bolo možné meniť v rozmedzí 180° ± 10°. Každé z ramien pozostávalo z piatich detektorov (K_1 - K_5, P_1 - P_5). Medzi detektormi K_1 - K_3 (P_1 - P_3) sa merala doba preletu danej častice, ozn. TOF (angl. time of flight). Pre lepšie odlíšenie piónov od protónov sa využívali Čerenkovove detektory C_k a C_p fungujúce na princípe vzniku Čerenkovovho žiarenia pri rozdielnom prahu hybnosti pre pióny a protóny, pre pióny je to hodnota 40 MeV/c, pre protóny 230 MeV/c [S. V. Afanasyev et al.]. Čerenkovove detektory sú tvorené polymetylmetakrylátom s indexom lomu n = 1,491. K_4 a P_4 sú veľkoobjemové scintilačné počítače, v ktorých býva pohltená prevažná väčšina častíc v dôsledku ionizačných strát energie, do detektorov K_5 a P_5 sa tak dostanú len najprenikavejšie častice. V scintilačných detektoroch sa ako scintilačný materiál používa prevažne polystyrén. Scintilátor H_M pozostával z dvoch koncentrických prstencov (každý z nich mal 16 segmentov) a mal slúžiť na detekciu „dopredu letiacich“ protónov, ktoré vznikajú pri formovaní η-jadier. Okolo trubice zväzku mal byť umiestnený neutrónový detektor, ide o scintilačný detektor, ktorý mal byť určený na detekciu tzv. „dopredu letiacich“ neutrónov, ten však nebol technicky realizovaný. V horizontálnej rovine po oboch stranách trubice zväzku boli uložené štyri detektory F_L, F_R, B_L, B_R slúžiace na monitorovanie zväzku a určovanie luminozity reakcie. Ich polohu bolo možné meniť v závislosti od energie urýchľovaných častíc.

3.1 Identifikácia častíc

Základnou charakteristikou častice je jej hmotnosť, ktorú možno určiť na základe jej relatívnej rýchlosti β = v/c (v- rýchlosť častice, c- rýchlosť svetla) a kinetickej energie T podľa vzťahu [S. V. Afanasyev et al.]:

$$M_{rec} = T.\frac{\sqrt{1-\beta^2}}{1-\sqrt{1-\beta^2}}$$

Jedná sa o tzv. rekonštruovanú hmotnosť, ktorú je možno určiť na základe merania rýchlosti β a kinetickej energie. Rýchlosť nabitej častice β závisí od doby, za ktorú preletí istú vzdialenosť L. V literatúre sa táto doba preletu často označuje ako TOF. V experimente SCAN sa doba preletu danej častice meria medzi detektormi K_1 - K_3, resp. P_1 - P_3. Rýchlosť β častice potom možno určiť na základe vzťahu [S. V. Afanasyev et al.]:

$$\beta = \frac{L_{start-stop}}{c.t_{tof}}$$

kde c je rýchlosť svetla, $L_{start-\ stop}$ je dráha, ktorú preletí častica medzi počítačmi K_1 - K_3, resp. P_1 - P_3, t_{tof} udáva dobu, za ktorú túto vzdialenosť častica preletí. Vo všeobecnosti častica letí pod ľubovoľným uhlom vzhľadom na os prechádzajúcu stredom detektorov, preto pre dráhu $L_{start-\ stop}$, ktorú preletí medzi detektormi $P_1(K_1)$ – $P_3(K_3)$, platí vzťah:

$$L_{start-stop} = \frac{(z_3 - z_1)}{z_3}.(z_3^2 + x^2 + y^2)$$

kde x, y, z_3 predstavujú súradnice zasiahnutého miesta detektora $P_3(K_3)$, z_1 označuje vzdialenosť detektora $P_1(K_1)$ od terčíka, resp. jeho z- ovú súradnicu. Kinetická energia častice je meraná na základe jej energetických strát v materiáli detektora [S. V. Afanasyev et al.]:

$$T = e_1 + e_2 + e_3 + e_4 + \Delta T(p)$$

pričom členy e_1, e_2, e_3, e_4 predstavujú energiu, ktorú stratí častica v elementoch K_1, K_2, K_3, K_4, resp. P_1, P_2, P_3, P_4. ΔT(p) predstavuje energetické straty častice, ktoré nie je možné merať detekčným zariadením, jedná sa napr. o straty energie častíc vo vzduchových vrstvách medzi jednotlivými detektormi [V. A. Baskov et al.]. V prípade, ak budeme poznať hodnoty rýchlosti β a kinetickej energie častice, ktorú chceme identifikovať, môžeme určiť jej hmotnosť M_{rec}.

3.2 Identifikácia prípadov

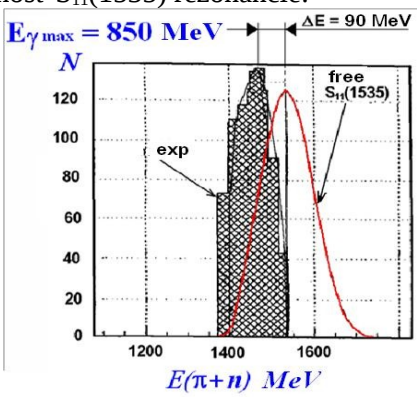
Ak uvažujeme, že nejaká častica sa rozpadáva v pokoji v laboratórnej sústave na dve častice letiace

oproti sebe, potom zo zákonu zachovania energie pred rozpadom a po ňom plynie vzťah [S. V. Afanasyev et al.]:

$$M_{eff} = \frac{m_1}{\sqrt{1-\beta_1^2}} + \frac{m_2}{\sqrt{1-\beta_2^2}}$$

kde M_{eff} označuje tzv. efektívnu hmotnosť pôvodnej častice, ktorá sa rozpadáva na dve častice charakterizované hmotnosťami m_1, m_2 a rýchlosťami β_1, β_2 [S. V. Afanasyev et al.]. Keďže detektory nám umožňujú merať β_1, β_2 a identifikovať m_1, m_2, je možné zrátať efektívnu hmotnosť pôvodnej častice, z ktorej rozpadu pochádzajú detekované častice.

Ak skutočne vzniká nejaká častica, prejaví sa ako pík, teda maximum, v spektre efektívnej hmotnosti. V prípade rozpadu voľnej $S_{11}(1535)$ rezonancie je zrejmé, že toto maximum by sa prejavilo okolo hodnoty 1535 MeV/c^2, ak uvažujeme rozpad $S_{11}(1535)$ v pokoji v laboratórnej sústave. V prípade rozpadu η- mezónových jadier však $S_{11}(1535)$ rezonancia podlieha vplyvu jadrového prostredia. Po prvý krát bol posun maxima v spektre celkovej energie páru $n\pi^+$ smerom k nižším hodnotám v porovnaní s hmotnosťou voľnej $S_{11}(1535)$ rezonancie, pozorovaný v experimente FIAN, na obr. 7. Tento posun interpretoval Sokol vo svojej práci [G. A. Sokol et al.] ako možný vplyv jadrového prostredia na hmotnosť $S_{11}(1535)$ rezonancie.



Obr. 7: Posun maxima v spektre celkovej energie páru πn. Pík je voči hmotnosti voľnej $S_{11}(1535)$ rezonancie posunutý k nižším hodnotám, čo Sokol vo svojej práci interpretoval ako vplyv jadrového prostredia.

3.3 Alternatívne procesy formovania páru protón-pión

Okrem procesu rozpadu η- mezónového jadra môže byť pár pπ produkovaný aj v rozpade nukleónovej rezonancie $D_{13}(1520)$ [Yu. S. Anisimov et al.], ktorá môže byť sformovaná pri interakcii nalietavajúcej častice s jadrom rovnako ako aj $S_{11}(1535)$. Medzi pre nás zaujímavé rozpadové kanály $D_{13}(1520)$ patria nasledujúce [W.- M. Yao et al.]:

- $D_{13}(1535) \rightarrow N\pi$ (55 – 65)%
- $D_{13}(1535) \rightarrow N\eta$ $(2{,}3 \pm 0{,}4).10^{-3}$ %

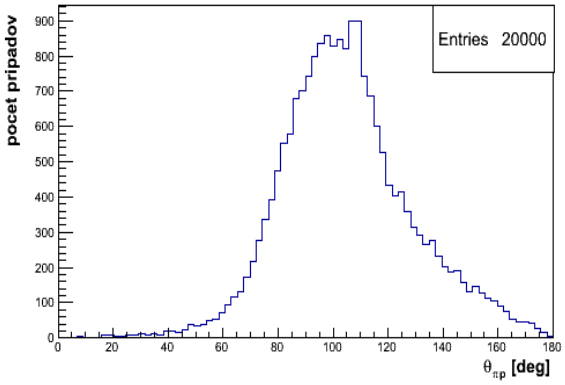
Z predchádzajúceho vidíme, že pravdepodobnosť vzniku η- mezónového jadra cez $D_{13}(1520)$ rezonanciu v procese $b + N \rightarrow N + D_{13}(1520) \rightarrow \eta + N \rightarrow D_{13}(1520) \rightarrow ...$, kde b označuje nalietavajúcu časticu (z angl. beam) a N nukleón, je takmer zanedbateľná. Ak v interakcii nalietavajúcej častice a jadra vznikne $D_{13}(1520)$ rezonancia, s omnoho väčšou pravdepodobnosťou sa ihneď rozpadne na pár Nπ ako na pár Nη, čím vlastne k formovaniu η- mezónového jadra ani nedôjde. V tomto prípade síce vznikne pár Nπ, avšak tieto častice nebudú vylietať z jadra pod uhlom 180° v dôsledku pomerne vysokej hybnosti vzniknutej $D_{13}(1520)$.

Ďalším procesom, v ktorom môže dôjsť k produkcii páru pπ, je rozpad dvoch odlišných rezonancií, pričom protón vzniknutý v rozpade jednej rezonancie je zaregistrovaný jedným ramenom a pión z rozpadu druhej rezonancie je zaregistrovaný druhým ramenom, čo sa môže javiť ako signál produkcie $S_{11}(1535)$.

Ako bolo spomenuté v úvode, pravdepodobnosť rozpadu $S_{11}(1535)$ rezonancie na pár Nπ a Nη je približne rovnaká, teda nie je vylúčené ani to, že ak v zrážke nalietavajúcej častice s jadrom dôjde k vzniku $S_{11}(1535)$ rezonancie, nerozpadne sa na Nη, ale ihneď na pár Nπ podľa vzťahu:

$$b + N \rightarrow N_1 + S_{11}(1535) \rightarrow N_1 + N_2 + \pi$$

kde b označuje nalietavajúcu časticu a N terčový nukleón, pričom nedochádza k formovaniu η- mezónového jadra. Pár pochádzajúci z takéhoto rozpadu má však odlišné charakteristiky ako pár Nπ produkovaný v rozpade η- mezónového jadra. Nasledujúci obr. 8 ukazuje rozdelenie vzájomného uhlu medzi protónom a piónom vzniknutých z rozpadu $S_{11}(1535)$ rezonancie, ide o výsledok vlastných simulácií.



Obr. 8: Rozdelenie vzájomného uhlu medzi protónom a piónom v laboratórnej sústave, ktoré sú produkované v rozpade $S_{11}(1535)$ rezonancie. Na vodorovnej osi je vynesený uhol v stupňoch, na zvislej osi je počet prípadov. Maximum vzniklo okolo hodnoty 100°.

Obrázok ukazuje, že vzájomný uhol medzi protónom a piónom pochádzajúcich z rozpadu $S_{11}(1535)$ rezonancie bez vzniku η- mezónového jadra sa pohybuje okolo hodnoty 100°. Vzájomný uhol medzi protónom a piónom, ktoré sú produkované v procese rozpadu η- mezónového jadra je okolo 180°, takto možno odlíšiť tieto dva procesy. Keďže experiment SCAN bol špeciálne skonštruovaný tak, aby ramená P a K zvierali uhol $\theta_{\pi p} \approx 180°$, eventy pochádzajúce z rozpadu $S_{11}(1535)$ bez produkcie η- mezónového jadra sú odfiltrované.

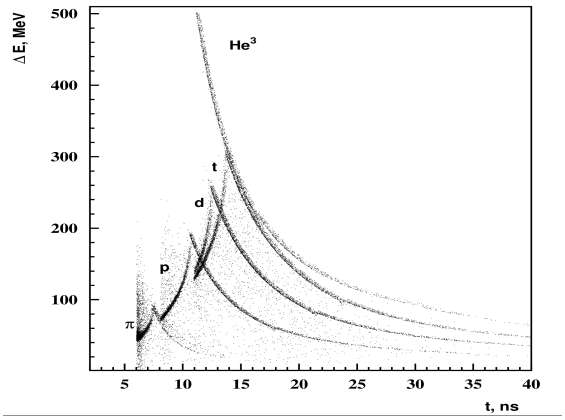
Je dôležité podotknúť, že hoci registrujeme pár častíc Nπ s opačnými hybnosťami a s energiami odpovedajúcimi hodnotám, ktoré by mali tieto častice mať, ak pochádzajú z rozpadu η- mezónového jadra $E_\pi + E_N \approx m_\eta + m_N \approx 1486$ MeV, ešte to neznamená, že nevyhnutne pochádzajú z rozpadu η- mezónového jadra. Takýto pár častíc môže vzniknúť aj v anihilácii pomalého neviazaného η- mezónu s niektorým nukleónom v jadre $\eta + N \rightarrow \pi + N$. Takéto anihilácie sa uskutočňujú bez ohľadu na to, či je vzájomná interakcia medzi η- mezónom a jadrom príťažlivá alebo odpudivá. Vzťah $\vec{p}_\pi + \vec{p}_N \approx 0$ znamená len to, že objekt, ktorý sa rozpadol na pár Nπ, mal nízku hybnosť. To, či vznikol skutočne viazaný η- mezón, nie iba pomalý, by malo signalizovať maximum v spektre celkovej energie páru Nπ, pričom pre celkovú energiu páru Nπ musí platiť podmienka $E_\pi + E_N < 1486$ MeV [Yu. S. Anisimov et al.]. Skúmaniu tohto spektra v experimente SCAN je venovaná nasledujúca časť.

4 Spracovanie dát a výsledky analýzy

Údaje zmerané v experimente z roku 2010, ako napr. rýchlosť častice, jej energetické straty v detektorovom prostredí (na základe ich merania je možné určiť kinetickú energiu častice), doba preletu a ďalšie, boli zapísané do datových súborov, ktoré boli neskôr podrobené analýze. Merania boli uskutočnené pre uhol 180° medzi ramenami P a K. Ako terčík bol použitý ^{12}C, ktorý bol bombardovaný zväzkom deuterónov s energiou 2,035 GeV/nukl.

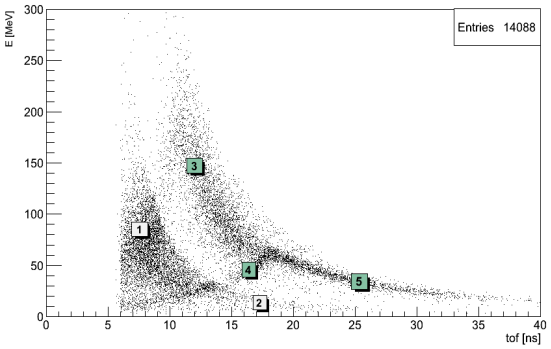
4.1 Výsledky identifikácie častíc

Druh častice, ktorá preletí systémom detektorov, možno určiť na základe jej hmotnosti, vzťah pre výpočet tzv. rekonštruovanej hmotnosti bol uvedený v časti 3.1, pričom potrebné veličiny, ako je rýchlosť detekovanej častice β a jej kinetickú energiu, možno určiť experimentálne. Rýchlosť β sa určuje na základe merania doby preletu medzi detektormi $P_1(K_1)$- $P_3(K_3)$ a kinetická energia na základe energetických strát častice v detektoroch $P_1(K_1)$- $P_4(K_4)$. Na obr. 9 je znázornený simulovaný príklad, ako vyzerajú závislosti energetických strát konkrétnych častíc od doby ich preletu detektormi spektrometra SCAN.



Obr. 9: 2D histogram- energetické straty piónov, protónov, deuterónov, trícia a iónov ^{3}He prechádzajúcich detektormi v jednotkách MeV na zvislej osi verzus doba ich preletu v jednotkách ns na vodorovnej osi. Výsledky MC simulácií.

Na nasledujúcom obrázku 10 je znázornený 2D histogram, na ktorom sú znázornené experimentálne zmerané energetické straty danej častice verzus doba jej preletu, pre efektívnejšiu identifikáciu piónov bola použitá informácia z Čerenkovových detektorov.



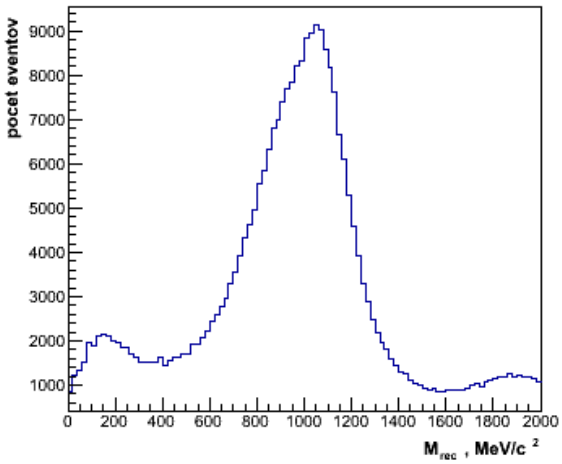
Obr. 10: 2D histogram energetických strát častíc verzus ich doba preletu medzi $P_1(K_1)$- $P_3(K_3)$ pre jeden z datových súborov.

Porovnaním s obr. 9 vidíme jasnú podobnosť, takže častice prechádzajúce detektormi možno naozaj interpretovať ako protóny a pióny.

Čísla na obrázku označujú jednotlivé oblasti, ktoré môžno vysvetliť ako:

1. pióny, ktoré preletia $P_3(K_3)$ a zastavia sa v $P_4(K_4)$
2. pomalé pióny, ktoré sa zastavia v $P_3(K_3)$ a nedostanú sa do $P_4(K_4)$
3. protóny, ktoré preletia $P_3(K_3)$ a zastavia sa v $P_4(K_4)$
4. rýchle protóny s krátkou tof, ktoré z istých dôvodov (hlavne kvôli nízkej účinnosti detektora $P_4(K_4)$) nezanechajú v $P_4(K_4)$ žiaden signál, tzn. nepoznáme informáciu o ich presnej hodnote ich energie, pretože detektory nám ju neposkytujú
5. pomalé protóny, ktoré zastavia v $P_3(K_3)$ a nedostanú sa do $P_4(K_4)$

Na základe vzťahu pre rekonštruovanú hmotnosť možno skonštruovať spektrá rekonštruovaných hmotností. Príklad takéhoto spektra pre rameno K je na obr. 11.



Obr. 11: Rozdelenie rekonštruovanej hmotnosti v ramene K pre vybraný datový súbor.

Možno si všimnúť, že spoločnou črtou týchto histogramov je to, že pri istých hodnotách rekonštruovanej hmotnosti M_{rec} vznikli dve výrazné maximá. Prvé z nich možno interpretovať ako signál od piónov a druhé ako signál od protónov. Pre potreby ďalšej analýzy sme častice, ktorých rekonštruovaná hmotnosť spadala do intervalu 0 MeV/c^2 < M_{rec} < 300 MeV/c^2, identifikovali ako pióny (m_π) a častice s hmotnosťou M_{rec}, pre ktorú platilo 300 MeV/c^2 < M_{rec} < 1500 MeV/c^2, interpretovali ako protóny. Podľa toho sme do vzťahu pre výpočet efektívnej hmotnosti, spomenutého v časti 3. 2, páru pπ, ktorý sme identifikovali ako kandidáta na rozpad η-mezónového jadra cez $S_{11}(1535)$ rezonanciu, dosadili za hmotnosti m_1 a m_2 tabuľkové hodnoty pre hmotnosť piónu a protónu (m_π = 139,57018 ± 0,00035 MeV, m_p = 938,272013 ± 0,000023 MeV [W.- M. Yao et al.]). Z uvedených úvah možno vyvodiť závery, ako sa jednotlivé častice z obr. 10 prejavujú v spektre rekonštruovanej hmotnosti. Oblasti 3 a 5 môžu prispievať k „deformácii“ píku protónov, v oblasti 4 sa zas nachádzajú protóny, ktoré tvoria prímes v oblasti piónov, a teda môžu byť identifikované ako pióny, pióny v oblasti 2 sa v spektre rekonštruovanej hmotnosti nachádzajú v oblasti protónov a môžu byť nesprávne identifikované ako protóny.

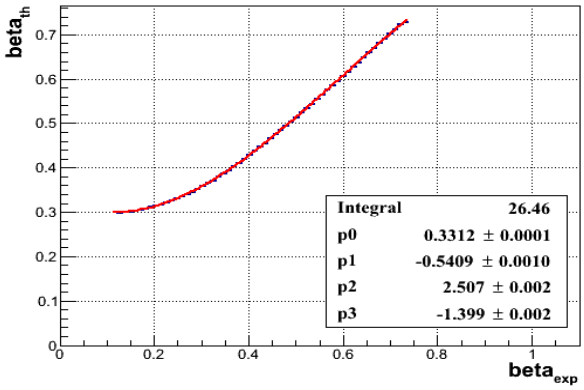
4.2 Výsledky analýzy prípadov

Pri analýze sme sa zamerali na prípady, kedy boli v koincidencii emitované dve častice letiace oproti sebe, jedna bola detekovaná ramenom P, druhá ramenom K. Efektívnu hmotnosť častice, ktorá sa rozpadne na tieto dve častice možno určiť na základe vzťahu pre výpočet efektívnej hmotnosti M_{eff}.

Avšak je dôležité poznamenať, že detekovaná častica na ceste z miesta svojho vzniku podstupuje energetické straty (a teda aj zmeny rýchlosti) v dôsledku interakcií s molekulami vzduchu či molekulami detektora, preto je nevyhnutné použiť korekciu pre rýchlosť β. Musíme teda prejsť od experimentálne zmeranej hodnoty β_{exp} k rýchlosti β_{th}, ktorú mala častica v čase svojho vzniku, teda:

$$\beta_{th} = \frac{p_0}{\sqrt{(p_0^2 + m^2)}}$$

pričom p_0 je hybnosť, ktorú získala častica v okamihu výletu z terčíka. Platí, že $\beta_{th} = f(\beta_{exp})$, na určenie tejto závislosti je potrebné vykonať simulácie pomocou programu GEANT (metódou Monte Carlo). GEANT obsahuje geometrické usporiadanie spektrometra SCAN (tzn. vzdialenosti, rozmery detektorov, typ použitého materiálu). Na obr. 12 je znázornený príklad závislosti $\beta_{th} = f(\beta_{exp})$ pre protóny v ramene P.



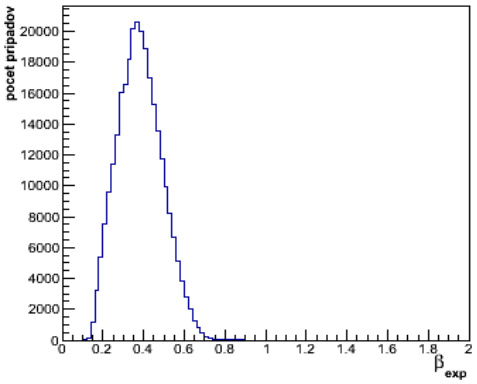
Obr. 12: Príklad závislosti $\beta_{th} = f(\beta_{exp})$ pre protóny prechádzajúce ramenom P. Červenou krivkou je znázornený fit polynomickou funkciou. V okienkach sú uvedené parametre fitu.

Hodnoty boli fitované polynomickou funkciou, β_{th} potom možno pomocou takto získaných parametrov fitu zapísať ako:

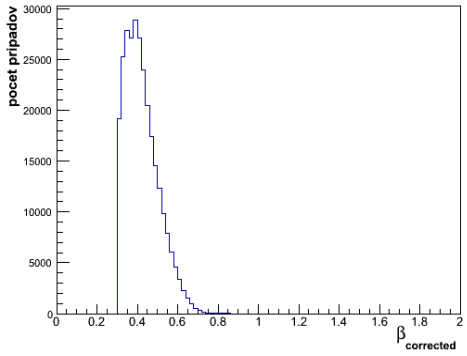
$$\beta_{th}(p) = 0{,}3312 - 0{,}5409 . \beta_{exp} + 2{,}507 . \beta_{exp}^2 - 1{,}399 . \beta_{exp}^3$$

Podobná závislosť platí aj pióny prechádzajúce ramenom P a pre protóny a pióny prechádzajúce ramenom K. Až takto určenú hodnotu rýchlosti β_{th} možno dosadiť do výsledného vzťahu pre výpočet efektívnej hmotnosti páru pπ za premennú β.

Na obr. 13 a 14 je ilustrovaný jeden príklad toho, ako dokáže použitá korekcia upraviť spektrum rýchlosti β. Príklad je uvedený pre protóny prechádzajúce ramenom P, na obr. 13 je experimentálne zmerané spektrum a na obr. 14 je znázornený tvar spektra po úprave pomocou simulácií.



Obr. 13: Experimentálne zmerané spektrum rýchlosti β pre protóny registrované ramenom P spektrometra.



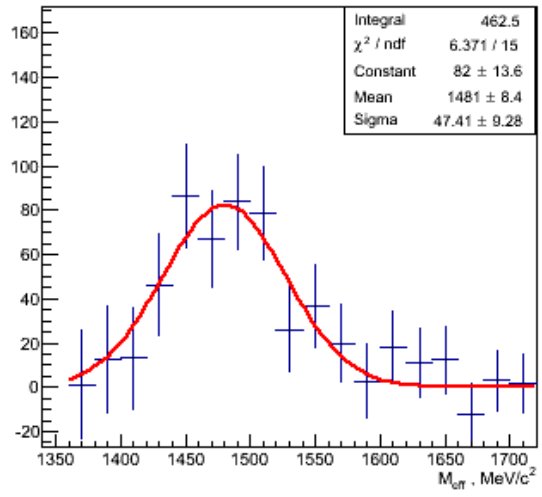
Obr. 14: Spektrum rýchlosti β pre protóny registrované ramenom P po úprave pomocou simulácií.

Z porovnania vidno, ako sa tvar spektra pomocou simulácií pozmenil, najvýraznejšiu zmenu možno pozorovať najmä pre protóny s nižšími hodnotami β_{exp}. Podľa Bethe- Blochovej formuly, ktorá popisuje ionizačné straty protónov pri ich prechode prostredím, platí, že čím je rýchlosť protónu nižšia, tým väčšie sú jeho energetické straty.

Pre lepší výber signálu bolo potrebné použiť isté doplňujúce selekčné kritériá:

- požadujeme protón v jednom ramene a pión v druhom ramene
- požadujeme, aby rozdiel y- ovej súradnice Δy protónu prechádzajúceho jedným ramenom a piónu prechádzajúceho druhým ramenom bol z intervalu $\Delta y \in$ (-100 mm, 100 mm), čím sa približne zaistí podmienka, aby častice leteli navzájom „back-to-back“ a zároveň tak berieme do úvahy aj istý rozptyl
- upresnenie podmienky koincidencie medzi signálom v ramene P a K (t. j. koincidencia registrácie protónu v jednom ramene a piónu v druhom ramene)

Po použití uvedenej korekcie pre rýchlosť β a spomenutých selekčných kritérií sme zostrojili spektrum efektívnej hmotnosti páru častíc pπ. Po odrátaní exponenciálneho pozadia je výsledné rozdelenie efektívnej hmotnosti znázornené na obr. 15.



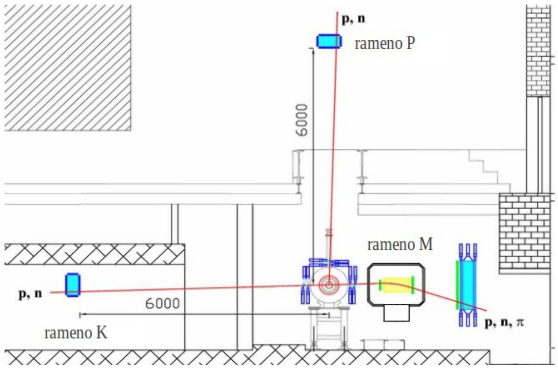
Obr. 15: Rozdelenie efektívnej hmotnosti pre pár $p\pi^-$ po použití príslušných selekčných kritérií. Na vodorovnej osi je vynesená efektívna hmotnosť v jednotkách MeV/c^2, na zvislej osi je počet prípadov. Červená krivka predstavuje fit Gaussovou funkciou. V hornom rámčeku sú uvedené parametre fitu. Pozícia maxima odpovedá hodnote „Mean“ = (1481,0 ± 8,4) MeV/c^2.

Pre našu prácu je najdôležitejší parameter fitu „Mean“, ktorý udáva najpravdepodobnejšiu hodnotu hmotnosti $S_{11}(1535)$ rezonancie v jadre v jednotkách MeV/c^2. V tomto prípade je to (1481,0 ± 8,4) MeV/c^2. Ako vidno z obrázku, hodnota efektívnej hmotnosti $S_{11}(1535)$ rezonancie v jadre je asi o 54 MeV/c^2 menšia ako hodnota hmotnosti voľnej $S_{11}(1535)$ rezonancie, navyše v rámci chyby leží v podprahovej oblasti $M_{eff} < m_p + m_\eta = 1486$ MeV, čo možno interpetovať ako signál produkcie $S_{11}(1535)$ rezonancie a vplyv jadrových efektov na jej hmotnosť. Podobný efekt posunu maxima bol pozorovaný aj v experimente FIAN a bol podobne interpretovaný ako vplyv jadrového prostredia na rozpadajúcu sa $S_{11}(1535)$ [G. A. Sokol et al.]. Posun ΔM_{eff} závisí od typu terčového jadra a typu a energie nalietavajúcej častice.

Vzhľadom na nemožnosť určenia väzbovej energie η- mezónu v jadre je prirodzené, že môžu vzniknúť pochybnosti o tom, či sa v experimente z roku 2010 skutočne jedná o signál od $S_{11}(1535)$ rezonancie vzniknutej v η- mezónovom jadre. Avšak možno predpokladať, že s použitím väčšej datovej vzorky, presnejších selekčných kritérií a predovšetkým vhodnou zmenou experimentálneho usporiadania by bolo možné pozorovať jasnejší signál.

4.3 Návrh nového experimentu

Veľkou nevýhodou pôvodného experimentálneho usporiadania bolo to, že uhol medzi ramenami P a K sa mohol kvôli technickým obmedzeniam pohybovať len v intervale 180° ± 10°, pričom signál z produkcie η- jadier bol meraný pod uhlom ≈ 180° a pozadie pod uhlom 170°, čo je pomerne malý rozsah. Navyše v analýze dát z roku 2010 zmeraných pri $\vartheta_{PK} \approx 170°$ bolo zistené, že aj v tomto prípade pravdepodobne registrujeme signál produkcie η- mezónových jadier. Ďalšou nevýhodou pôvodného usporiadania bola nemožnosť určenia náboja piónov, preto bol v rokoch 2011- 2012 navrhnutý nový experiment, obr. 16, ktorý by mal pomôcť vyriešiť tieto problémy a obmedzenia, a tak zaviesť do merania väčšiu presnosť.



Obr. 16: Návrh nového experimentálneho usporiadania. Priečny pohľad, zväzok smeruje kolmo na papier.

Nové experimentálne usporiadanie, sa od pôvodného líši pridaním ramena M, ktoré zviera s ramenom K uhol 180°, úlohou ramien K a M je identifikovať produkty rozpadu $S_{11}(1535)$ rezonancie vylietavajúcich z jadra pod uhlom približne 180°. Do ramena M bol zavedený magnetický spektrometer slúžiaci na určenie náboja nabitých častíc, čo povedie k spresneniu výsledného spektra korelovaných párov. Rameno P bolo umiestnené vzhľadom na rameno K pod uhlom 90° a jeho úlohou je zmerať pozadie študovaných procesov. Do aparatúry bola takisto zavedená aj driftová komora slúžiaca na detekovanie nabitých častíc.

Zariadenie navyše umožní merať viaceré rozpadové kanály- π^+n, π^-p, pn a pp. Cieľom nového experimentu je:

1. Hľadanie η- mezónových jadier v spektre celkovej energie korelovaných párov v dA- zrážkach
2. Určenie účinného prierezu vzniku η- mezónových jadier $\sigma(_\eta A)$, určenie závislosti účinného prierezu od energie a nukleónového čísla terčového jadra A
3. Určenie väzbovej energie η- mezónu v jadre
4. Meranie výťažku (π^-p) a (pN)- eventov spojených s rozpadmi S_{11} (1535) → πN a $S_{11}(1535)N \rightarrow NN$
5. Určenie pomeru rezonančných šírok $\Gamma(S_{11}(1535) \rightarrow \pi N)$ a $\Gamma(S_{11}N \rightarrow NN)$

Určenie väzbovej energie η- mezónu v jadre je kľúčovým parametrom, ktorý charakterizuje príťažlivý potenciál medzi η- mezónom a jadrom pri nízkych energiách. V predchádzajúcom experimente nebolo možné väzbovú energiu zmerať v dôsledku chýbajúcich monitorov, ktoré by boli schopné merať energiu a hybnosť častíc

vylietavajúcich z jadra pri formovaní η-mezónového jadra. V pôvodnom experimente však boli uskutočnené pokusy, v ktorých mali byť „dopredu letiace" rýchle protóny registrované v koincidencii spoločne s πp párom, avšak testy boli vyhodnotené ako neúspešné. Ďalším riešením by mohlo byť pozorovanie reakcií:

$$p+A \rightarrow d+{}_{\eta}(A-1) \rightarrow d+p+\pi+...$$
$$d+A \rightarrow t({}^{3}He)+{}_{\eta}(A-1) \rightarrow t({}^{3}He)+p+\pi+...$$

v ktorých je deuterón (v pA zrážkach), príp. trícium alebo hélium (v dA zrážkach) tou časticou, ktorá so sebou odnáša takmer všetku hybnosť nalietavajúcej častice. Pozorovanie tohto kanálu by bolo výhodnejšie aj z dôvodu vyššieho účinného prierezu reakcie pn →dη ako pn → pnη, obr. 2. Problém v experimente SCAN však predstavuje technická realizácia. Deuteróny nie je možné zachytiť kvôli tomu, že vylietajú pod malým uhlom vzhľadom na zväzok, zmiznú v zväzkovej trubici Nuklotrónu a detektory ich nie sú schopné zaregistrovať.

5 Záver

Vykonali sme analýzu rozpadov $S_{11}(1535)$ rezonancie s možnou produkciou η- mezónových jadier, ktoré boli registrované detektorom SCAN v SÚJV v Dubne. Analyzovali sme datové súbory, pri ktorých bola použitá energia primárneho zväzku deuterónov 2,035 GeV, ako terčík bol použitý ^{12}C. V prvom kroku sme porovnali závislosť experimentálne zmeraného spektra energetických strát verzus doba preletu s MC simuláciami. Na základe porovnania možno urobiť záver, že detektormi boli skutočne registrované pióny a protóny, v ďalšom kroku sme zostrojili spektrum rekonštruovanej hmotnosti pre obe ramená spektrometra, pozorované pióny a protóny sa v tomto spektre prejavili ako dve maximá. Po použití selekčných kritérií (požiadavka „back-to-back" a požiadavka koincidencie medzi protónom registrovaným jedným ramenom a piónom zachyteným druhým ramenom) bolo nájdené spektrum efektívnej hmotnosti páru protón – pión pre vzájomnú polohu ramien spektrometra ϑ_{PK} = 180°. Maximum bolo pozorované pri hodnote (1481,0 ± 8,4) MeV/c^2. Jeho hodnota je o 54 MeV/c^2 menšia ako hmotnosť voľnej $S_{11}(1535)$ rezonancie a zároveň sa v rámci chyby nachádza aj pod prahom $m_\eta + m_N$. Tento efekt posunu maxima v spektre efektívnej hmotnosti bol vysvetlený v práci Sokola, ktorý ho interpretoval ako vplyv jadrového prostredia na rozpadajúcu sa $S_{11}(1535)$ rezonanciu.

Nový experiment by mal so sebou priniesť aj nové možnosti, hlavne presnejšiu identifikáciu častíc, sledovanie viacerých rozpadových kanálov a predovšetkým možnosť určenia väzbovej energie η-mezónu v jadre. Samozrejme, významnú úlohu tu zohráva aj štatistika, je potrebné nabrať viac údajov, zlepšiť selekčné kritériá, a tak sa pravdepodobne zvýši aj šanca, že budeme pozorovať jasnejší signál pochádzajúci od η- jadier.

Literatúra

[W.- M. Yao et al.] W.- M. Yao et al. Particle Physics Booklet, 2006.

[R. S. Bhalerao, L. C. Liu.] R. S. Bhalerao, L. C. Liu. Off-shell model for treshold pionic eta production on a nucleon and for eta-N scattering. Phys. Rev. Lett. 54, 1985.

[M. Kh. Anikina et al.] M. Kh. Anikina et al. Search for and study of η- mesic nuclei in pA-collisions at the JINR LHE nuclotron, arXiv:nucl-ex/0412036v2 23, 2004.

[Yu. S. Anisimov et al.] Yu. S. Anisimov et al. Search for and study of η- mesic nuclei in the dA – interaction at the JINR VBLHEP Nuclotron, 2011.

[V. Baru et al.] V. Baru et al. Phys. Rev. C 67, 0240002, 2003.

[S. V. Afanasyev et al.] S. V. Afanasyev et al. Search results of η- mesic nuclei in the d + C reaction in JINR, Nuclear Physics B-Proceedings Supplements, Volumes 219- 220, 2011.

[G. A. Sokol et al.] G. A. Sokol, A. I. Ľvov, L. N. Pavlyuchenko. Observation of eta- mesic nuclei in photoreactions: results and perspectives, arXiv:nucl-ex/0106005v1, 2001.

[V. A. Baskov et al.] V. A. Baskov et al. P. N. Lebedev Physical Institute, Leninsky prospect 53, Moscow 119991, Studies of eta- mesic nuclei at the LPI electron synchrotron, arXiv:1212.6313v1 [nucl-ex], 2012.

Archimedov zákon interaktívne

Petra Špiláková[1]
Školiteľ: Miroslava Ožvoldová[1]

[1] inštitút, PdF TU, Priemyselná 4, 91843 Trnava, Slovenská republika

Abstrakt

Príspevok pojednáva o existujúcich troch typoch laboratórií a postoje k nim. Hlavným cieľom práce je prezentovať príklad interaktívnej výučby pre tematický celok hydromechanika v zmysle stratégie integrovaného e-learningu, t.j. na báze experimentovania. Príspevok prezentuje dve vytvorené interaktívne simulácie v programe Easy Java Simulations *Archimedov zákon – kváder a ihlan*, spolu s pracovnými listami, nový reálny vzdialený experiment Archimedov zákon, vytvorený transformáciou z počítačom podporovaného experimentu na báze programu Easy Remote ISES (ER-ISES), ktorý bude voľne prístupný na adrese vzdialeného laboratória katedry fyziky PdF TU.

Kľúčové slová: interaktívna simulácia, Java applet, vzdialený experiment, Archimedov zákon, Easy Java Simulations, Easy Remote ISES,

1 Úvod

V dnešnej dobe, kedy sa pozornosť upriamuje na stále vznikajúce nové technológie, či už v oblasti výpočtovej techniky alebo vedy, je úlohou školy pripraviť žiaka na život v tejto modernej spoločnosti a sprístupniť mu osvojenie zručností potrebných na jeho začlenenie do pracovného trhu, vyžadujúceho určité IKT kompetencie. Z tohto pohľadu je vyučovanie na školách zastarané a nesplňuje podmienky vytvárania informačne gramotného človeka. Vhodnými vyučovacími predmetmi pre implementáciu nových výučbových stratégií sú prírodovedné predmety, medzi ktoré patrí aj fyzika, ktorá má veľký potenciál práve v praktickej časti výučby formou práce v laboratóriách. A tu je na učiteľovi akú formu vzdelávania zvolí, či klasickú, alebo založenú na vedomostiach nadobudnutými vlastnými aktivitami žiaka.

Učiteľ môže zaradiť do vyučovania zaujímavý interaktívny materiál v podobe appletu alebo vzdialeného experimentu. Na internete sa nachádza nespočetné množstvo simulácií s fyzikálnym zameraním popisujúcim všetky jej oblasti, ktoré sú vo väčšine prípadov voľne dostupné. No ak by si učiteľ chcel vytvoriť simulácie podľa vlastných predstáv, bolo práve na tento účel vyvinuté vývojové prostredie Easy Java Simulations, [1] ktoré poskytuje širokú paletu možností tvorby appletov . Je upravené do podoby, s ktorou môžu bezproblémovo pracovať aj ľudia bez programátorských zručností. S reálnymi vzdialenými experimentmi je situácia trochu horšia. Síce sa ich na internete vyskytuje nie malé množstvo, prístup ku väčšine z nich je podmienený znalosťou prístupového hesla. Ich tvorba je tiež technicky a programátorsky náročnejšia a nákladnejšia ako u simulácií. Tento problém sa snažili vyriešiť autori F. Schauer, F. Lustig a M. Krbeček vytvorením nového vývojového prostredia Easy Remote ISES v na báze „copy and paste a následne „plug and play „ [2] ER-ISES je teda určený na ľahšiu tvorbu vzdialených experimentov, ktorú by mali zvládnuť aj ľudia bez znalosti nejakého programovacieho jazyka. Používaním nových koncepcií výučby vo forme simulácii a vzdialených experimentov podporujeme tvorivé a kritické myslenie študentov, rozvíjame ich IKT kompetencie a rozširujeme ich obzory v rámci modernej spoločnosti.

Fyzika nepatrí medzi obľúbené predmety študentov na školách. Preto ďalším opodstatneným dôvodom zaradenia interaktívnych simulácií a vzdialených experimentov do výučby fyziky je jej zatraktívnenie a zvýšenie záujmu študentov. Vhodné začlenenie do hodiny môže mať motivačný charakter, pomáhať pri udržiavaní pozornosti študentov, aktivizovať študentov a vedie ich k zamysleniu sa nad daným javom. Žiaci môžu pracovať samostatne (projektové a problémové vyučovanie), alebo v skupinách (skupinové vyučovanie), alebo s využívaním „inquiry based learning“. Takýmto spôsobom rozvíjame u žiakov a študentov komunikačné zručnosti, vedieme k zodpovednosti za svoju vykonanú prácu, učíme ich plánovať, vytrvať a správne si rozvrhnúť postupnosť činností, upevňujeme ich samostatnosť, zvyšujeme aktivitu a zanietenosť, vedieme k trpezlivosti odvahe vyskúšať niečo nové a podporujeme ich vlastné tempo. Výhodou týchto foriem experimentov je to, že nie sú obmedzované ani priestorovo ani časovo. Môžeme ich využívať kdekoľvek a kedykoľvek, ak máme k dispozícii počítač pripojený do siete internet.

Je známe, že zatiaľ väčšina učiteľov zastáva tradičný typ vyučovacej hodiny a nevyužíva edukačný potenciál vzdialených experimentov (RE) a interaktívnych simulácií ako virtuálneho

experimentu. Tu môžeme argumentovať časovou, finančnou a priestorovou úsporou. Vzdialené experimenty poskytujú reálne dáta a, ktoré sa získavajú meraním na reálnej aparatúre. Rozdiel od laboratórneho experimentu je len vo vzdialenosti experimentu a experimentátora. Niektoré RE umožňujú vykonávať merania, ktoré by priamo v triede neboli možné, či už napr. z bezpečnostných, či finančných , alebo iných dôvodov. Napríklad práca s nebezpečnými, vzácnymi alebo ekonomicky náročnými objektmi, či pozorovania dlhodobého charakteru. Simulácie umožňujú zobraziť aj také deje, ktoré by sme v reálnom prostredí len ťažko alebo vôbec nemohli vykonať. Ako príklad môžeme uviesť experimenty z prostredia mikrosveta, skúmanie fyzikálnych zákonov vo vesmíre, alebo deje, ktoré prebiehajú príliš rýchlo alebo naopak veľmi pomaly.

2 Vzdialené laboratórium

Vo vyučovaní fyziky hrá dôležitú úlohu práca s laboratórnymi experimentmi, ktorá podporuje a vedie žiakov k vedeckému poznávaniu fyzikálnych javov sveta. Žiak získava zručnosť so zaobchádzaním s meracími prístrojmi, rôznymi aparatúrami a inou technikou. Upevňuje si nadobudnuté teoretické vedomosti a aplikuje ich v úlohách vyplývajúcich z experimentu. Na realizáciu školských laboratórnych experimentov je potrebné určité vybavenie školy, či už špecializovanou učebňou alebo technickým zariadením. Rovnako treba brať do úvahy časovú dotáciu predmetu, ktorá je často nepostačujúca, Táto skutočnosť sa odráža v spôsobe výučby, kde na úkor praktických cvičení a laboratórnych experimentov učitelia využívajú hodiny len na teoretické sprostredkovanie učiva.

Vzdialené laboratória sú pomerne novou koncepciou rozvoja, ale v dôsledku technologického pokroku a dostupnosti nástrojov pre ich budovanie ich počet exponenciálne narastá. V prípade nutnosti nahradenia školského laboratórneho experimentu predstavujú najvhodnejšiu alternatívu, pretože ak sú správne navrhnuté môžu študentom poskytnúť tele-prítomnosť, vykonávanie experimentov na reálnom zariadení, získavanie dát, učenie sa metódou pokus omyl, ponúkajú časovú a priestorovú flexibilitu [3].

2.1 Porovnanie experimentov

Ako sme vyššie už uviedli, v súčasnosti fyzikálne experimenty môžeme rozčleniť do troch typov a to: laboratórne experimenty, reálne vzdialené experimenty a simulácie ako virtuálny experiment. Každá z týchto možností má svoje kladné, ale aj záporné stránky.

Pri *laboratórnych experimentoch* v laboratóriu ide o fyzicky skutočný proces skúmania fyzikálneho deju. Rozdiel medzi týmto experiment a ostatnými dvoma je, že zariadenie s ktorým pracuje experimentátor je fyzicky prítomne a pripravené a študent sa tiež nachádza priamo v laboratóriu laboratóriu v blízkosti meracieho zariadenia. Za klady môžeme považovať to, že študenti pracujú s reálnymi dátami, majú možnosť hmatom, zrakom sa oboznámiť so zariadením, na ktorom sa realizuje meranie. Taktiež môžu sa objaviť aj nečakané rozdiely medzi teóriou a experimentálnymi výsledkami, ktoré prispievajú sa pochopenie role reálneho prostredia pri realizácii experimentov. Tieto skúseností by nemohli získať ak by pracovali len so simuláciami. Na druhej strane laboratórna technika, prevádzkovanie, nároky na priestor a čas sú nákladné. Nahradenie niektorých experimentov ich alternatívami v podobe vzdialených reálnych experimentov alebo simulácií je nákladovo efektívnym prístupom, s výnimkou organizácie, ktorá predstavuje experiment, ktorá má nepretržitý dohľad nad chodom experimentu. Tiež, vzhľadom k obmedzeniu priestoru a finančných zdrojov, nie sme vždy schopní splniť niektoré špeciálne potreby študentov so zdravotným postihnutím.

Simulované (virtuálne) experimenty sú imitáciami reálnych experimentov, celá laboratórna technika nie je skutočná, je iba napodobeninou vytvorenou v počítači. Zástancovia simulácií tvrdia, že sú nielen nevyhnutné, ale aj cenné. Hlavnými plusmi je: ekonomická nenáročnosť, úspora času pri práci s nimi a pochopení fyzikálneho deju žiakmi, možnosť vykonávať úkony, ktoré by v reálnych podmienkach neboli možné. Študenti môžu pozorovaný dej zastaviť, krokovať, znovu spustiť, zrýchliť, či spomaliť čím je pre nich pozorovaný jav zrozumiteľnejší. Tiež tieto simulácie vytvárajú vhodné podmienky pre aktívne učenie sa, samostatnú prácu, čo vypovedá o vyššej vzdelávacej hodnote. Nevýhodami nadmerného používania simulácií môže byť odtrhnutie medzi skutočným a virtuálnym svetom. Dáta ktoré poskytuje simulácia nie sú skutočné, a preto žiakom chýba skúsenosť s metódou pokus – omyl.

Vzdialené experimenty môžeme charakterizovať ako sprostredkovanú realitu prostredníctvom počítača. Na ich vytvorenie je potrebná laboratórna technika a vhodný priestor. Rozdielom medzi nimi a reálnymi experimentmi je vo vzdialenosti experimentu a experimentátora. Potenciálom vzdialených experimentov je dostupnosť skutočných dát bez nutnosti priamo vlastniť potrebné aparatúry kedykoľvek odkiaľkoľvek, s podmienkou pripojenia počítača na internet. Umožňujú prístup ku drahým alebo nebezpečným prvkom. Kritici vzdialených experimentov argumentujú tým, že študent pri práci s počítačom môže byť rušený a nevníma plnohodnotne

prebiehajúci dej. Niektorí študenti nepovažujú vzdialené laboratória ako realistické, a preto majú pre nich rovnakú vzdelávaciu hodnotu ako simulácie aj napriek tomu, že poskytujú reálne dáta [4].

Maa a Nickerson [2006] sa vo svojom príspevku zaoberali práve týmito dvoma postojmi na fyzikálne laboratória. Analyzovali viacero publikácií, vedeckých článkov a informačných prameňov, snažili sa nájsť odpoveď na otázku: Ako by sme mohli rozsúdiť stále nevyriešenú diskusiu o efektívnosti rôznych laboratórnych technológií používaných vo výučbe? Výsledkom ich výskumu prekvapivo bolo to, že neexistuje žiadna konvencia na hodnotenie laboratórií a efektívnosti práce v nich.

Nejednotnosť sa prejavuje už pri definíciách reálnych, reálnych vzdialených laboratórií a simuláciách. V niektorých prameňoch sa všetky tri typy spájajú a považujú sa za rovnocenné v iných sú striktne rozdeľované a porovnávané.

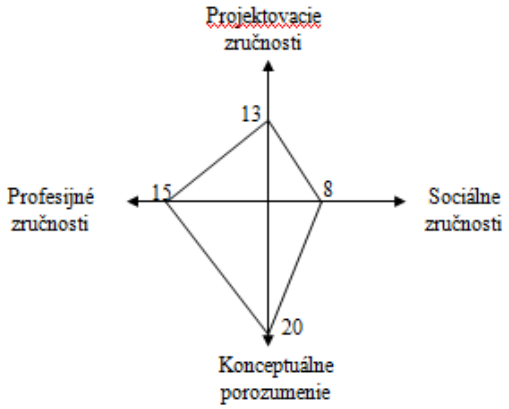
Ďalším rozporom je absencia kurikula vytyčujúceho mieru a ohodnotenie učenie žiaka prostredníctvom laboratórnych experimentov a nedostatočný počet príkladov na uskutočnenie kvalitatívnej výpovednej štúdie. Nejasnosti vznikajú aj na základe definovania nejasných cieľov na vyhodnotenie laboratórnych výstupov. Ako odraz tejto situácie pri hodnotení efektívnosti vzdelávania v laboratóriách sú argumenty pre rôzne laboratória tiež nejednoznačné a odporujúce si.

Vyvinuli štvordimenzionálny škálovací model hodnotiaci výučbu v laboratóriách (tabuľka 1). Vychádzali pritom z formulácie vzdelávacích cieľov navrhnutých Akreditačnou komisiou pre inžinierstvo a technológie – ABET.

Tabuľka 1 Edukačné ciele pre laboratórnu výučbu

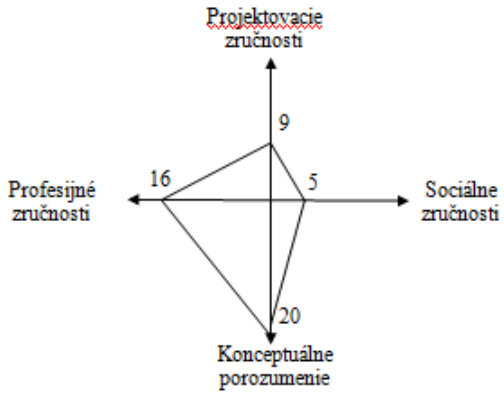
Laboratórne ciele	Popis	Ciele z ABET
Konceptuálne porozumenie	Úroveň, do akej majú laboratórne aktivity pomáhať študentom pochopiť a vyriešiť problémy spojené s vyučovanými kľúčovými pojmami.	Ilustrujú pojmy a princípy.
Projektovacie zručnosti	Úroveň, do akej laboratórne aktivity majú zvyšovať študentovu schopnosť riešiť úlohy s otvoreným koncom a tiež navrhovať a konštruovať nové deje alebo procesy.	Schopnosť navrhovať a vyšetrovať. Pochopenie podstaty vedy (Vedecká myseľ).
Sociálne zručnosti	Rozsah, v ktorom sa študenti učia ako produktívne vykonávať skupinovú vedeckú činnosť.	Sociálne zručnosti a spolupráca v skupinách (komunikácia, tímová spolupráca a riešenie problémov).
Profesijné zručnosti	Rozsah, v akom sú študenti oboznámení s technickými zručnosťami, ktoré očakávame, že majú získať.	Technické / procedurálne zručnosti. Uviesť študentov do sveta vedcov a technikov. Aplikácia poznatkov do praxe.

Ako vidíme na obrázku 1, všetky laboratórne ciele pri reálnom experimente boli zastúpené v dostatočnej miere. Najväčší dôraz bol kladený na konceptuálne porozumenie.



Obr. 1: Vzdelávacie ciele reálneho experimentu [Zdroj: 4]

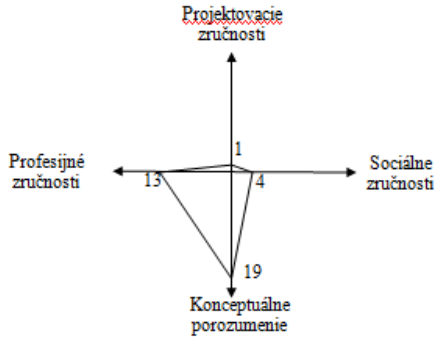
Dôraz pri simuláciách (Obr. 2) je opäť najviac kladený sa konceptuálne porozumenie a profesijné zručnosti.



Obr. 2: Vzdelávacie ciele simulácie [Zdroj: 4]

Články o vzdialených experimentoch sa výrazne líšia svojimi edukačnými cieľmi (Obr. 3). Najväčší dôraz je kladený na konceptuálne porozumenie a len jeden zdroj sa zaoberá formuláciou cieľov zameraných na projektovacie zručnosti.

Najmenej zastúpenou dimenziou v článkoch sú



Obr.3: Vzdelávacie ciele vzdialeného experimentu [Zdroj: 4]

sociálne zručnosti, hoci podľa ABET sa jedná o jednu z najdôležitejších koncepcií cieľov pre technické vzdelávanie [4].

V dnešnej dobe nie je žiadnou zvláštnosťou, že pri práci v laboratóriách používame IKT techniku. Meriame dáta pomocou rôznych experimentálnych zariadení pripojených na počítač. Kvalita laboratórnej práce by sa nemala líšiť, tým či je študent v priamom kontakte s meracou technikou alebo mu je sprostredkovaná pomocou vzdialeného experimentu cez internet. Simulácie sú kritizované pre ich neschopnosť poskytnúť autentické nastavenia a interakcie s reálnymi prístrojmi. Najvhodnejším východiskom je používanie kombinácie všetkých troch spôsobov experimentov [4].

2.2 Vzdialené fyzikálne laboratória

V súčasnosti sa na Internete nachádza už množstvo vzdialených laboratórií. Ako sme uviedli na začiatku tejto kapitoly, vidíme, že myšlienka zdieľania laboratórií cez Internet so vzdelávacím zameraním, sa ujala a postupne sa rozširujú stránky s laboratóriami. Ale väčšina z nich má obmedzený prístup na študentov univerzít, na ktorých je vzdialené laboratórium vybudované [5].

Voľne prístupná je napríklad webová stránka projektu Remotely Controlled Laboratories – RCLs, ktorá vznikla pod vedením Prof. Dr. H. J. Jodla, dostupná je na internetovej adrese http://rcl-munich.informatik.unibw-muenchen.de/. Nachádza sa tu súbor vzdialených experimentov obsahujúci niečo vyše sedemnásť fyzikálnych experimentov, ktoré sú dostupné bez nutnosti registrácie alebo prístupových hesiel.

Ďalším z významných pracovísk zaoberajúcich sa aj budovaním vzdialených experimentov je *Remote Farm*, vytvorená pod vedením prof. Thomsona a pracovníkov Katedry fyziky tuhých látok na Technickej univerzity v Berlíne**.** Tieto experimenty sú dostupné na webovej stránke https://www.isis.tu-berlin.de, ale až po kladnom vybavení požiadavky o udelenie vstupu. Celkovo je tu umiestnených pätnásť vzdialených experimentov.

Jedným z priekopníkov v oblasti tvorby fyzikálnych vzdialených laboratórií je Lustig F. z MFF KU v Prahe, ktorý prvý vzdialený experiment spustil už v roku 2004. Na tejto fakulte sa v dnešnej dobe nachádza jedna z voľné dostupných a najčastejšie používaných vzdialených laboratórií (Obr. 4), ktorá vznikla ako výsledok spolupráce konzorcia troch univerzít MFF UK, Univerzity

Tomáše Bati a Trnavskej univerzity v Trnave (SK). Navštíviť ho môžeme na internetovej stránke http://www.ises.info, kde je momentálne k dispozícii až dvanásť vzdialených experimentov

so sprievodnými materiálmi v ako, českej, slovenskej, tak anglickej verzii. Experimenty sú zostavené a sprístupnené pomocou hardvéru a softvéru ISES.



Obr. 4: Vzdialené laboratórium Praha

V rámci webových stránok každého experimentu je priestor venovaný Motivácii, Úvodu, Fyzikálnemu základu, Návodu k experimentu, Zadaniu úlohy, Experimentálnemu usporiadaniu a Spusteniu experimentu.

Ďalšie vzdialené laboratórium v Českej republike nájdeme umiestnené na Univerzite Palackého v Olomouci. Je dostupné a opäť voľne prístupné na webovej stránke http://www.ictphysics.upol.cz/remotelab/rlab.html, na výber máme z piatich fyzikálnych experimentov. Stránky jednotlivých experimentov zahŕňajú Fyzikálny princíp, Návod k meraniam, Video-návod, Usporiadanie experimentu, Pracovný list, Štatistiku prístupu, Fotogalériu a Spustenie experimentu.

Prvé slovenské vzdialené laboratórium, ako uvádzajú M. Žovínová a M. Ožvoldová [6] vo svojom príspevku, bolo slávnostne otvorené dňa 30. septembra 2010 na Katedre fyziky Trnavskej univerzity v Trnave. Laboratórium disponuje siedmimi fyzikálnymi a jedným chemickým experimentom, ktoré sú k dispozícii prostredníctvom internetu na webovej stránke http://remotelab.truni.sk, pre všetkých záujemcov bez nutnosti registrácie.

Na jednotlivé experimenty sa môžeme pripojiť priamo zadaním adresy do internetového prehliadača v podobe: http://remotelab*i*.truni.sk/, kde *i* = 1, 2, ..., 8. Jedinou systémovou požiadavkou na užívateľa je mať v počítači nainštalovaný zásuvný modul JRE, pretože experiment je sprístupnený na webovej stránke pomocou Java appletov. A samozrejme musíme mať funkčné pripojenie do siete internetu. Laboratórium je v súčasnosti prístupné v dvoch jazykových verziách, slovenskej a anglickej. Hardvérové a softvérové riešenia experimentov zabezpečuje Internetový školský experimentálny systém (ISES).

3 Vytvorené experimenty

Cieľom práce je vytvoriť vzdialený experiment a interaktívne simulácie demonštrujúce Archimedov zákon, ktoré žiakom a študentom uľahčia jeho pochopenie a fyzikálne zákonitosti. Simulácie budeme vytvárať v prostredí Easy Java Simulations a na vzdialený experiment využijeme novo vytvorené prostredie Easy Remote ISES.

3.1 Interaktívne simulácie

Aby sme mohli vytvárať fyzikálne Java applety je potrebné mať nainštalované nejaké vývojové prostredie určené na ich tvorbu. V dnešnej dobe je k dispozícii veľké množstvo takýchto prostredí pracujúcich s kódom Javy, ale väčšina vyžaduje určité programátorské zručnosti. Prostredie **Easy Java Simulations**, so zaužívaným skráteným označením EJS, je zjednodušením, ktoré znalosť týchto programátorských zručností minimalizuje. Preto s ním môžu pracovať aj ľudia, ktorí nemajú žiadne skúsenosti s programovaním.
Toto vývojové prostredie je voľne šíriteľné a dostupné na oficiálnej internetovej adrese http://fem.um.es/Ejs/, ktorá je celá venovaná EJS. Nájdeme tu inštalačné súbory, návody, fórum a ďalšie stránky. Po kliknutí na úvodnú stránku máme na výber dve jazykové verzie angličtinu a španielčinu.

EJS vytvorené Franciscom Esquembre, ako súčasť projektu Open Source Physics. Je určené pre neprogramátorov, učiteľov prírodovedných predmetov a ľudí, ktorí sa viac zaujímajú o obsah a fyzikálny základ simulácii ako o technické a programátorské záležitosti. Slúži na vývoj interaktívnych simulácii zameraných na výučbu fyziky [1].

EJS vytvára programy v kóde Javy, čo je veľká výhoda, pretože Java je multiplatformový programovací jazyk, čo znamená, že je možné tieto programy spúšťať pod rôznymi operačnými systémami prostredníctvom webového prehliadača. Jedinou systémovou požiadavkou pre úspešné spustenie EJS je mať nainštalované Java Runtime Environment (JRE) verzia 1.5 alebo novšia.

Na stránke je momentálne k dispozícii aktuálna verzia tohto programu Easy Javy EJS 4.3.7, s ktorou sme pracovali aj my pri vytváraní appletov.
Uvedomujeme si, že experimenty overujúce Archimedov zákon nie je náročné vykonávať priamo v triede. Prečo sme napriek tomu siahli k realizácii appletov? Žiak pri experimentovaní vidí vyzdvihnutie vodnej hladiny napríklad pri ponáraní telesa. Ale má k dispozícii dáta? Má možnosť ich spracovať a vyhodnotiť? Ako kedy. Účelom práce, ako sme už uviedli, bolo vytvoriť ucelenú jednotku v zmysle stratégie integrovaného e-learningu, obsahujúcu tri základné komponenty:

reálny vzdialený experiment, virtuálny experiment a e-študijné materiály pre tematický celok Archimedov zákon. Tento celok môže slúžiť na motiváciu, upútanie pozornosti a záujmu študentov, samozrejme na meranie, spracovanie a vyhodnotenie dát. Výhodou simulácie, okrem toho, že ponúka zmenu viacerých parametrov, je aj tá skutočnosť, že v prípade ak by bol vzdialený experiment dočasne mimo prevádzky z technických alebo iných príčin, ako napríklad aktuálne používaný iným experimentátorom, budú tieto applety zastávať jeho edukačné funkcie. Experimentátor takto nebude ukrátený vyrieši efektívne využitie času a nemusí vymýšľať náhradné alternatívy.

V prvej fáze tvorby akéhokoľvek projektu, by sme si mali odpovedať na základne otázky týkajúce jeho obsahu, cieľovej skupiny, formy tvorby a prezentácie, a samozrejme za akým účelom vytvárame daný projekt. Poďme si teda zodpovedať tieto dotazy pre našu prvú simuláciu *Archimedov zákon - kváder*. Čo sa týka formy simulácie budeme experiment „Archimedov zákon“ vytvárať v podobe interaktívneho appletu v programovacom prostredí Easy Java Simulations, ktorý bude sprístupnený pomocou intranetového prehliadača. Cieľová skupina užívateľov je prioritne zameraná na žiakov základných škôl, čo však nevylučuje ostatných záujemcov, ktorí majú záujem s appletom pracovať. Účel tvorby všetkých fyzikálnych appletov, teda aj toho nášho, je všeobecne pomoc pri plnení edukačných cieľov novými interaktívnymi stratégiami výučby, kde sa aktivita sústreďuje na žiaka. Po obsahovej stránke je applet zameraný na Archimedov zákon, ktorý v rámci fyziky zaraďujeme do oblasti hydromechaniky.

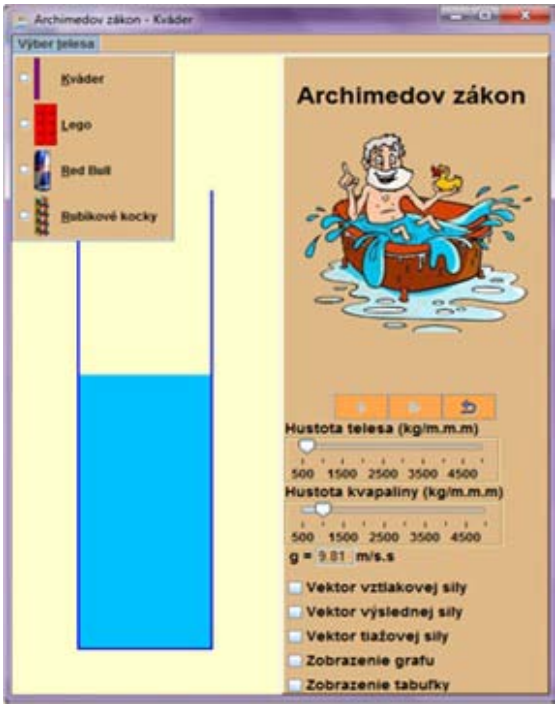
Simulácia *Archimedov zákon – kváder* demonštruje ponáranie štyroch typov telies do nádoby s kvapalinou. Po zapnutí appletu sa zobrazí hlavné okno a okno s popisom simulácie, ktoré obsahuje informácie o ovládaní a autorovi delené hornou preklikávacou lištou.

Hlavné okno je tvorené vľavo animačnou časťou, horným menu a v pravo je panel, ktorom sa nachádzajú ovládacie prvky appletu.

Prácu s appletom začneme voľbou telesa, ktoré budeme ponárať. Na výber máme kváder, lego, plechovka Redbull a Rubikove kocky, ktoré spolu s hlavným oknom vidíme na Obr. 5.

O týchto telesách uvažujeme, že sú homogénne, zložené z materiálu, ktorého hustotu zadáme a majú tvar kvádra okrem plechovky, ktorá je kolmým valcom.

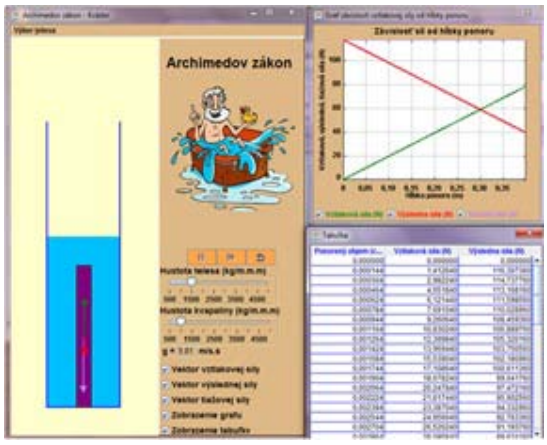
Po zakliknutí ľubovoľného telesa sa zobrazí nad nádobou s kvapalinou a sprístupnia sa tlačidlá, ktoré boli doteraz neaktívne. Applet ponúka zmenu hustoty telesa a kvapaliny pomocou posuvníkov v intervale $\langle 500, 5000\rangle$ kgm^{-3}, počiatočné hodnoty sú nastavené na hustotu telesa $\rho_{\mathrm{t}} = 1500$ kgm^{-3} a hustotu kvapaliny $\rho_{\mathrm{k}} = 1000$ kgm^{-3}. Tiažové zrýchlenie zadávame pomocou editovacieho políčka, kde ho priamo vpíšeme a potvrdíme stlačením *enter*. Rozsah nie je obmedzený a defaultna hodnota je nastavená na tiažové zrýchlenie Zeme $g = 9{,}81$ ms^{-2}.



Obr. 5: Hlavné okno: Archimedov zákon - kváder

Ak chceme zobraziť na telese aj vektory síl, môžeme tak vykovať zaškrtnutím políčka príslušnej sily. Po odkliknutí políčok pre graf alebo tabuľku sa vo vlastných oknách tieto položky zobrazia. V okne s grafom závislosti síl ako funkcia hĺbky ponoru sa v spodnej časti nachádzajú ďalšie zaškrtávacie políčka slúžiace na voľbu síl, ktoré sa majú zobraziť. K dispozícii je vztlaková, tiažová a výsledná sila, ktoré môžeme zobrazovať samostatne alebo v ľubovoľnej kombinácií. Tabuľka je zostavená z troch stĺpcov, v ktorých sa zaznamenávajú hodnoty ponorený objem (m^3), vztlaková sila (N) a výsledná sila (N). Údaje umiestnené v tabuľke sa dajú označiť a kopírovať, čo experimentátora ušetrí od odpisovania hodnôt. Okno s grafom a tabuľkou je možné zatvoriť kedykoľvek v behu simulácie a následne zaškrtnutím príslušného políčka znovu otvoriť.

Na Obr. 6 vidíme výsledný obraz spustenej simulácie, v ktorej sme zvolili ako teleso kváder, jeho hustotu $\rho_{\mathrm{t}} = 1500$ kgm^{-3}, hustotu kvapaliny $\rho_{\mathrm{k}} = 1000$ kgm^{-3}, tiažové zrýchlenie Zeme $g = 9{,}81$ ms^{-2} a zapli sme vektory síl (vztlakovej, výslednej, tiažovej). Tiež sme nechali zobraziť graf so všetkými silami a tabuľkou.



Obr. 6: Výsledný obraz spustenej simulácie: Archimedov zákon - kváder

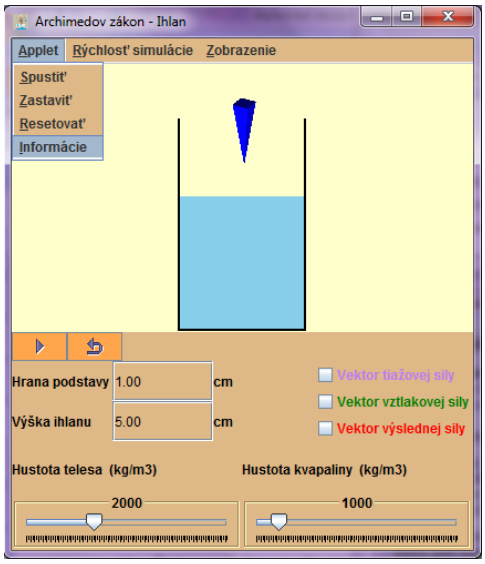
V Prílohe 1 sa nachádza pracovný list určený na prácu s touto simuláciou.

V našej animácií využijeme možnosť appletov, simulovať deje, ktoré by sme v reálnom živote nemohli zrealizovať na Zemi. Pre zaujímavosť appletu teda ako jeden z premenných parametrov ponecháme aj tiažové zrýchlenie, aby si mohli žiaci demonštrovať ponáranie telesa aj na iných planétach. Na základe experimentu si majú možnosť uvedomiť, že tiažové zrýchlenie nemá vplyv na veľkosť ponoreného objemu a smer pôsobenia výslednej sily. Teda keby ponárali rovnaké teleso do rovnakej kvapaliny na inej planéte, výsledná hĺbka ponoru by bola rovnaká ako na Zemi.

Druhá vytvorená simulácia *Archimedov zákon - ihlan* je určená pre cieľovú skupinu študentov stredných škôl, pre ktorých sme prichystali aj pracovný list zobrazený v Prílohe 2.

Simulácia demonštruje ponáranie pravidelného ihlanu so štvorcovou podstavou v smere osi *y* do nádoby s kvapalinou. Po zapnutí sa zobrazí okno s popisom simulácie a hlavné okno. V okne s popisom sú položky delené horizontálnou lištou v poradí *Popis*, ktorý obsahuje opis simulácie, *Ovládanie*, zahŕňa pokyny k práci s appletom, *Autor*, v tejto položke sú informácie o autorovi a posledná položka je *Tabuľka hustôt*, kde sa nachádzajú niektoré kvapaliny a tuhé látky s príslušnými hustotami. Ikony na spodnej lište slúžia na zväčšenie alebo zmenšenie písma. Okno je možné zavrieť bez prerušenia behu simulácie a znovu zapnúť voľbou položky *Informácie* v hlavnom menu pod *Appletom*.

Hlavné okno (Obr. 7) má v hornej časti menu, pod ním je interaktívna animácia s nádobou a ihlanom, v dolnej časti sa nachádzajú tlačidlá a ovládacie prvky.



Obr. 7 : Hlavné okno: Archimedov zákon - ihlan

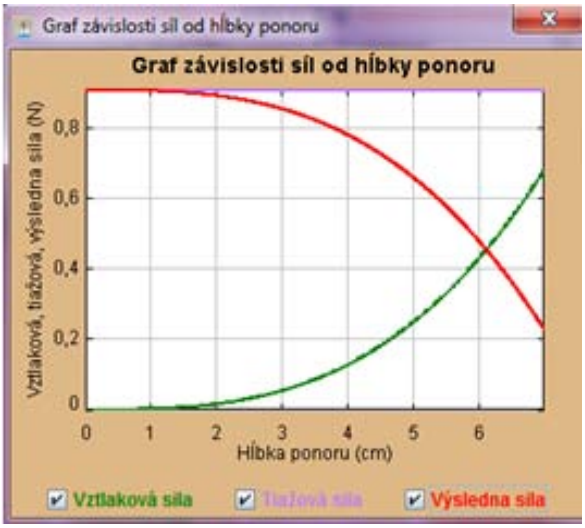
Menu je realizované rozbaľovacími lištami. V položke *Applet* je ponuka pre spustenie, zastavenie, resetovanie simulácie a tlačidlo pre zobrazenie okna s popisom, ktoré je opísané vyššie. Ďalšou položkou je *Rýchlosť simulácie*, po rozbalení lišty máme na výber z troch ponúkaných rýchlosti pohybu ihlana, je možné zvoliť iba jednu položku. V menu *Zobrazenie* sú zaškrtávacie políčka. Po odkliknutí prvých troch sa v animačnej časti na ihlane zobrazia farebne odlíšene vektory tiažovej, vztlakovej a výslednej sily, môžeme ich zobrazovať všetky súčasne alebo jednotlivo.

Ďalšie tri políčka oddelené separátorom slúžia na zobrazovanie dialógových okien s grafmi a tabuľkou. Prvým grafom je závislosť ponoreného objemu od hĺbky ponoru (Obr. 8). Druhým je graf závislosti síl od hĺbky ponoru (Obr. 9), pričom zobrazenie síl je možné navoliť zaškrtnutím položiek v spodnej časti okna grafu, v dispozícii je vztlaková sila, tiažová sila a výsledná sila.



Obr. 8 Okno grafu závislosti ponoreného objemu od hĺbky

Je ich možné zobrazovať v ľubovoľnej kombinácii a tak ako vektory síl sú farebne rozlíšené, tiažová sila je fialová, vztlaková zelená a výsledná červená. Závislosti sa vykresľujú súčasne s behom simulácie podľa aktuálnej polohy telesa.



Obr. 9: Okno grafu závislosti síl od hĺbky ponoru

Posledným samostatným oknom je tabuľka so štyrmi stĺpcami (Obr. 10), do ktorých sa vypisujú namerané hodnoty v poradí: hĺbka ponoru (cm), vztlaková sila (N), výsledná sila (N) a tiažová sila (N). Okno grafu a tabuľky je možné zatvoriť v priebehu simulácie a znovu otvoriť zaškrtnutím príslušných položiek v menu. Ovládanie menu je možné aj pomocou klávesových skratiek, a to súčasným stlačením klávesy *Alt* a klávesy s písmenom, ktoré je v menu podtrhnuté.



Hĺbka ponoru (c...	Vztlaková sila (N)	Výsledna sila (N)	Tiažová sila (N)
0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
0,0800	0,0000	0,9087	0,9087
0,1800	0,0000	0,9087	0,9087
0,2800	0,0000	0,9086	0,9087
0,3800	0,0001	0,9086	0,9087
0,4800	0,0002	0,9085	0,9087

Obr. 10: Okno s tabuľkou (ihlan)

Činnosť appletu riadime pomocou ovládacieho panelu, kde sa nachádzajú dve tlačidlá. Dvojstavové tlačidlo slúžiace na spúšťanie a zastavovanie simulácie a tlačidlo reset, ktoré nastaví všetky prvky a premenné na počiatočné hodnoty. Pod nimi sú vstupné textové polia na zadávanie veľkosti hrany podstavy v rozsahu $(0{,}5 - 5)$ cm a výšky ihlanu v intervale $(0{,}5 - 9{,}5)$ cm. Napravo sa nachádzajú farebne rozlíšené zaškrtávacie políčka plniace rovnakú funkciu ako políčka v menu pod položkou *Zobrazenie*. Na spodnej časti sú umiestnené dva posuvníky, ktorými môžeme meniť hustotu ponáraného telesa (ihlanu) a kvapaliny v nádobe. Rozsah oboch je $(500 - 5000)\ \mathrm{kgm}^{-3}$ a zvolená hodnota sa zobrazuje v paneli priamo nad nimi.

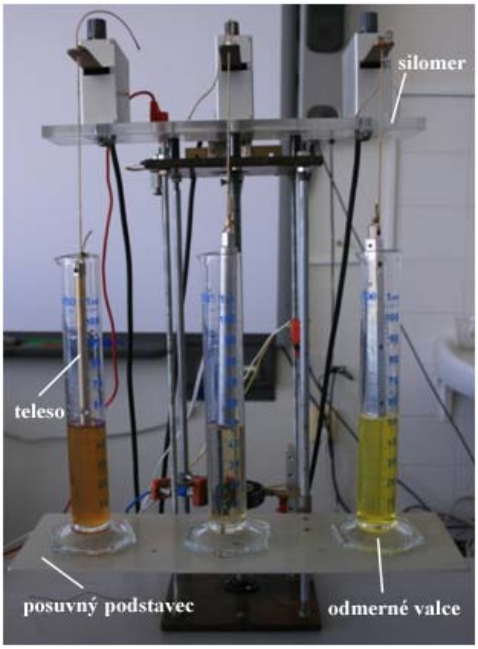
V Prílohe 3 je výsledný obraz simulácie *Archimedov zákon – ihlan*, v ktorej sme nastavili nasledujúce počiatočné hodnoty: veľkosť hrany $a = 5$ cm, výška ihlana $v = 7$ cm, hustota telesa $\rho_\mathrm{t} = 1588\ \mathrm{kgm}^{-3}$, hustota kvapaliny $\rho_\mathrm{k} = 1192\ \mathrm{kgm}^{-3}$. Zapli sme zobrazenie: vektorov všetkých síl (vztlakovej, výslednej, tiažovej), grafu závislosti ponoreného objemu od hĺbky ponoru, grafu závislosti vztlakovej, tiažovej a výslednej sily od hĺbky ponoru, tabuľku hodnôt a zobrazenie popisu simulácie. Jednotlivé okná appletu sa môžu ľubovoľne pohybovať a presúvať, výsledne usporiadanie na obrázku je z dôvodu rozmernosti appletu.

3.2 Vzdialený experiment

Pre zjednodušenie tvorby ovládacieho softvéru vzdialených laboratórií, s využitím ISES bolo vytvorené nové prostredie Easy Remote ISES (ER ISES). Ide o grafické vývojové prostredie, ktoré automaticky generuje radiaci psc súbor pre konečné stavy stroja [2]. Vývojové prostredie ponúka tri úrovne náročnosti, od najľahšej začiatočník, cez základnú až po pokročilú úroveň.

Grafické vývojové prostredie Easy Remote ISES je v súčasnej dobe plne funkčné v podobe beta-verzie. Je vhodné na tvorbu vzdialených experimentov bez nutnosti programovacích zručností. Cieľom autorov je prevádzkovať tento nástroj programového dizajnu on-line vo forme e-shopov pre hardvér aj softvér. Knižnica experimentov, ktoré sú v súčasnosti uložené na lokálnom disku, bude v budúcnosti dostupná na webovom servery v dátovom centre. Knižnica bude užívateľom dovoľovať stiahnutie vytvorených experimentov, ale aj nahrávanie nimi vytvorených experimentov späť do pamäte serveru. Takýmto spôsobom sa vytvorí on-line knižnica experimentov ponúkajúca stále sa rozširujúci výber nových experimentov vytvorených užívateľmi.

Experiment Archimedov zákon je vytvorený ako počítačom podporovaný laboratórny experiment, ktorý vidíme na obrázku 11.



Obr. 11: Laboratórny experiment Archimedov zákon

Experimentálne zariadenie sa skladá z posuvného podstavca, na ktorom sú umiestnené tri nádoby s kvapalinou. Pohyb podstavca s nádobami je zabezpečený motorčekom, ktorý otáča hriadeľom na ktorom je upevnený. Pohyb je možné vykonávať zvisle (v smere osi *y*) hore a dole. Na zastavenie podstavca sú umiestnené vypínače v krajných pozíciách. K silomerom sú pripevnené telesá, ktoré sú ponárané do kvapaliny pohybom nádob smerom nahor a vynárajú sa pri návrate do počiatočnej polohy. Pozícia podstavca je určovaná pomocou pevne natiahnutého drôtu pripojeného na zdroj jednosmerného napätia a detektoru, ktorý sa pohybuje súčasne s podstavcom a meria napätie pomocou voltmetra zo súpravy ISES.

Dáta z experimentu sú sprístupnené pomocou experimentálneho meracieho systému ISES, z ktorého sú na jeho realizáciu použité tri moduly silomera a voltmeter. Tieto moduly sú zapojené do ovládacieho panelu ISES, ktorý tvorí medzičlánok medzi nimi a počítačom, ku ktorému je pripojený.

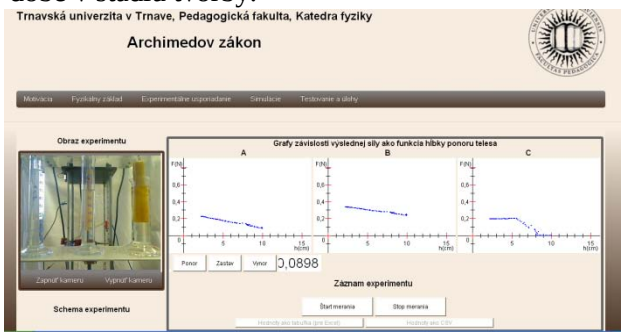
Cieľom bolo previesť tento laboratórny počítačom podporovaný experiment na vzdialený experiment prostredníctvom ER ISES.

Pri tvorbe sme sa pridržiavali navrhnutého vývojového diagramu, ktorý sa nachádza v Prílohe 4. Zo zobrazeného vývojového diagramu môžeme vyčítať, že po zapnutí vzdialeného experimentu musíme začať prácu výberom závislosti grafu z dvoch ponúkaných možností a následne výberom trubice. Potom bude možné stlačiť tlačidlo na ponorenie a počas neho bude k dispozícii zobrazovanie času a vetva programu na nahrávanie dát. Táto sa začne ak je kladne vyhodnotená podmienka v rozhodovacom symbole, pre náš prípad je to stlačenie tlačidla. Potom začne proces nahrávania až kým nie je stlačené tlačidlo *Stop* a údaje sa následne vypíšu. Kým bude odpoveď na podmienky záporná (nie je stlačené tlačidlo) dáta zostávajú vypísane a nič sa s nimi nedeje ale ak by bola kladná (stlačili sme tlačidlo) exportujú sa do zvoleného súboru a môžeme si ich uložiť do počítača. Pokiaľ sa užívateľ nevyberie touto vetvou programu, musí čakať na ukončenie ponárania. Po ňom sa sprístupní tlačidlo na vynáranie a ak je stlačené alebo ak program zistí, že nie sú vykonávané žiadne aktivity začne proces vynárania, ktorým algoritmus končí. V prípade, že je opäť vybraná grafická závislosť, postupnosť jeho krokov sa opakuje.

Treba ešte dodať, že vetva s nahrávaním dát môže byť vykonávaná aj pri procese vynárania, kde sme ju kvôli nedostatku miesta neuvádzali.

Experiment v momentálnej podobe pracuje na jednoduchšom princípe ale stále je v procese tvorby a dopĺňania.

Vytvorená webová stránka vzdialeného experimentu (Obr. 12) momentálne obsahuje v hornej časti titulok a logo Pedagogickej fakulty Trnavskej univerzity. Pod ním sa nachádza lišta s odkazmi na stránky *Motivácia, Fyzikálny základ, Experimentálne usporiadanie, Simulácie, Testovanie a úlohy*. Tieto stránky sú v súčasnej dobe v štádiu tvorby.



Obr.12: Webová stránka vzdialeného experimntu

V ľavej časti stránky sa nachádza okno, v ktorom vidíme obraz z web kamery snímajúcej experiment. Najväčšiu časť tvorí okno s appletmi slúžiacimi na ovládanie činnosti experimentu a výstup v podobe grafov, výpisu hodnoty a exportu dát. Stránka obsahuje pre každú trubicu graf závislosti výslednej sily ako funkcia hĺbky ponoru telesa. Pod nimi sa nachádzajú tlačidlá: *Ponor*, *Zastav* a *Vynor*, ktorými riadime pohyb posuvného podstavca. Po stlačení tlačidla *Ponor* sa podstavec začne pohybovať smerom hore a telesá, ktoré sú zavesené na silomeroch nad kadičkami, sa tým ponárajú do kvapaliny. Tlačidlo *Vynor* naopak slúži na pohyb podstavca smerom dole. Vedľa tlačidiel sa nachádza okno s výpisom aktuálnej polohy podstavca, vďaka ktorému môžeme odčítať hĺbku ponoru telesa. V spodnej časti sa nachádzajú tlačidlá na záznam hodnôt. Po stlačení *Štart merania* sa začnú zaznamenávať merané hodnoty a stlačením tlačidla *Stop merania* sa ukončíme

záznam dát. Teraz sa sprístupnia tlačidlá exportu pomocou, ktorých je možné namerané dáta stiahnuť do užívateľovho počítača. Export je realizovaný pomocou vyskakovacieho okna so zobrazenými dátami v stĺpcoch, ktoré si môžeme skopírovať a ľubovoľne s nimi pracovať v tabuľkových editoroch. Na výber máme formát pre Excel alebo štandardný tabuľkový formát CSV. Experiment poskytuje hodnoty aktuálnej pozície podstavca s kadičkami (cm) a výsledné sily (N) v poradí A,B,C, tak ako sú aj usporiadané grafy a telesá na kamere.

Väčší obrázok webovej stránky experimentu je v Prílohe 5.

4 Záver

V čase rozmachu informačno-komunikačných technológií je samozrejmosťou ich využitie i v edukačnom procese. Jedným z nových didaktických prostriedkov sú práve e-experimenty, či už reálne alebo virtuálne dostupné prostredníctvom internetu, ktoré práve umožňujú interaktívny spôsob výučby.

Cieľom práce bolo navrhnúť a naprogramovať didaktickú pomôcku obsahujúcu a) dve interaktívne simulácie s tematikou ponárania rôznych telies (kváder, valec ihlan) do kvapaliny na výučbu tematického celku Archimedov zákon , b) pripraviť pracovné listy k animáciám, c) reálny vzdialený počítačom podporovaný experiment Archimedov zákon v programe Easy Remote ISES (ER-ISES), ktorý bude voľne dostupný na webových adresách katedry fyziky PdF TU.

Záverom by som ešte v skratke vyzdvihla výhody používania interaktívnych simulácií a vzdialených experimentov v rámci výučby vyplývajúcich z práce:

- zvyšovanie informačnej gramotnosti študentov a pestovanie IKT kompetencií,
- zatraktívnenie obsahu fyziky a pripútanie pozornosti študentov,
- možnosť prezentovať, demonštrovať a popisovať deje, ktoré v reálnych podmienkach nemôžeme
- zníženie finančných, priestorových a časových nákladov na výučbu fyziky,
- rozvoj tvorivého a kritického myslenia, podpora samostatnej práce a budovanie osobnosti študenta (zodpovednosť, komunikácia, plánovanie, samostatnosť, aktivita, vlastné tempo),
- dostupnosť experimentov na akomkoľvek mieste a v akomkoľvek čase.

Nakoľko experiment tvorí základ pre prírodovedné vzdelávanie a súčasné trendy v edukácií smerujú k aktívnej činnosti žiaka/študenta, veríme, že pripravené didaktické pomôcky spolu s pracovnými listami prispejú k interaktívnej výučbe a lepšiemu porozumeniu javov reálneho sveta okolo nás.

Záverom možno konštatovať, že vytýčený ciel sme splnili

Poďakovanie

Ďakujem vedúcej práce doc. RNDr. Miroslave Ožvoldovej, CSc. za jej ochotu, trpezlivosť, usmerňovanie a odborné vedenie pri vypracovávaní práce.

Touto formou by som chcela poďakovať Ing. Michalovi Krbečkovi z FAI UTB Zlín a doc. RNDr. Františkovi Lustigovi, CSc. z MFF UK v Prahe za poskytnutie softvéru RE- ISES a zároveň Mgr. Lukášovi Tkáčovi, PhD. za jeho pomoc pri transformácii laboratórneho experimentu Archimedov zákon na vzdialený experiment. Za technickú pomoc pri realizácii experimentu vyslovujem poďakovanie Jaroslavovi Šérymu.

Literatúra

[1][Esquembre, 2011] Esquembre, F. (2011). Easy Java Simulations.

[2][Krbeček, Schauer, Lustig, 2013] Krbeček, M., Schauer, F., Lustig, F. (2013). EASY REMOTE ISES – Environment for Remote Experiments Programming, Innovations 2013: World Innovations in Engineering Education and Research, W. Aung, et al. (eds.), iNEER, Arlington, VA, 2013, in press.

[3][Nedič et al., 2003] Nedic, Z., Machotka, J., Nafalski, A. (2003). Remote laboratories versus virtual and real laboratories. In *Frontiers in Education*, T3E1 – T3E6.

[4][Maa, Nickerson, 2006] Maa, J., Nickerson, J. V. (2006). Hands – On, simulated, and remote laboratories: A comparative literature review. In *ACM Computer surveys*.

[5][Ožvoldová, 2012] Ožvoldová, M. (2012). E-laboratória na internete a ich implementácia do edukačného procesu. In *Tvorivý učiteľ fyziky*. 193 – 206 s.

[6][Žovínová, Ožvoldová, 2010] Žovínová, M., Ožvoldová, M. (2010). E-laboratórium vzdialených experimentov vo výučbe s podporou stratégie integrovaného e-learningu. In *Interdisciplinárny dialóg odborových didaktík 2010.* 9 s.

Príloha 1

PRACOVNÝ LIST 1

„Archimedov zákon - kváder“

1. Otvor applet Archimedov zákon – kváder, prečítaj si popis a návod použitia, potom ho pozorne sleduj a zamysli sa nad jeho významom a fyzikálnou podstatou.

2. Napíš, ktoré fyzikálne veličiny môžeme v applete Archimedov zákon - kváder meniť, a ktoré počíta a vypisuje applet sám. Nezabudni uviesť aj ich fyzikálne jednotky.

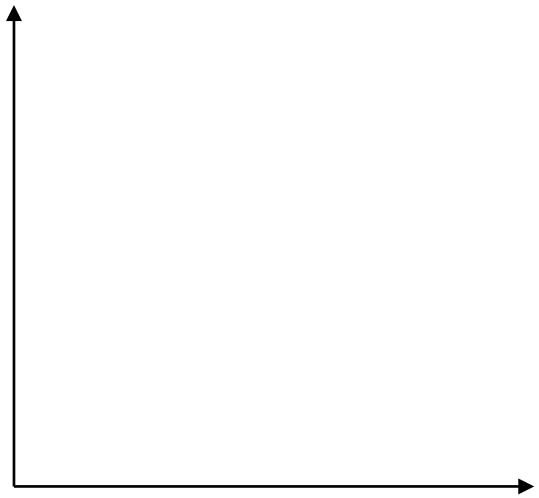
.....
.....
.....
.....

3. V závislosti od veľkosti hustoty telesa ρ_t a hustoty kvapaliny ρ_k môžu nastať tri prípady: teleso klesá, vznáša sa alebo stúpa. Doplň správne nasledujúce výroky:
   - a. Ak $\rho_\mathrm{t} < \rho_k$ teleso v kvapaline ..... .
   - b. Ak $\rho_\mathrm{t} = \rho_k$ teleso v kvapaline ..... .
   - c. Ak $\rho_\mathrm{t} > \rho_k$ teleso v kvapaline ..... .
   - Svoje tvrdenia over appletom Archimedov zákon – kváder.

4. Otvor applet Archimedov zákon – kváder, na základe experimentovania zapíš do tabuľky aká je vztlaková sila pri ponáraní ponúknutých telies, ktorým necháme nastavené počiatočné hodnoty hustôt (hustota telesa $\rho_\mathrm{t} = 1500\ \mathrm{kgm^{-3}}$, hustota kvapaliny $\rho_\mathrm{k} = 1000\ \mathrm{kgm^{-3}}$) a tiažové zrýchlenie Zeme $g = 9{,}81\ \mathrm{ms^{-2}}$. Stláčaj tlačidlo „Krok vpred“ a pre príslušný ponorený objem zapíš hodnotu do tabuľky.

Kváder		Lego		Redbull		Rubikove kocky	
Objem ponorenej časti (dm^3)	**Vztlaková sila (N)**	**Objem ponorenej časti (dm^3)**	**Vztlaková sila (N)**	**Objem ponorenej časti (dm^3)**	**Vztlaková sila (N)**	**Objem ponorenej časti (dm^3)**	**Vztlaková sila (N)**
1		**0,05**		**0,5**		**0,1**	
2		**0,1**		**1**		**0,5**	
5		**0,2**		**2**		**1**	
7		**0,3**		**4**		**1,5**	
10		**0,5**		**6**		**2**	

5. Zváž, či vztlaková sila s ponoreným objemom rastie alebo klesá. Vyjadri graficky závislosť vztlakovej sily od ponoreného objemu farebne pre jednotlivé telesá.



6. Na základe experimentovania s appletom zapíš do tabuľky aká je výsledná vztlaková sila pri ponorení kvádra, s hustotou $\rho_t = 2500\ \mathrm{kgm^{-3}}$ do kvapaliny s hustotou $\rho_k = 1500\ \mathrm{kgm^{-3}}$, pre tiažové zrýchlenia rôznych planét uvedených v tabuľke.

Tiažové zrýchlenie (ms^{-2})	**3,7 (Mars)**	**8,6 (Venuša)**	**9,1 (Saturn)**	**9,81 (Zem)**	**11 (Neptún)**
Vztlaková sila (N)					

7. Zváž, či vztlaková sila v závislosti tiažového zrýchlenia rastie alebo klesá. Vyjadrite graficky závislosť vztlakovej sily od tiažového zrýchlenia.



8. Na základe experimentovania s appletom Archimedov zákon - kváder zapíš do tabuľky veľkosť ponorenej časti lega s hustotou $\rho_t = 500\ \mathrm{kgm^{-3}}$ a hustotou kvapaliny $\rho_k = 1000\ \mathrm{kgm^{-3}}$. Tiažové zrýchlenie zadávaj do appletu podľa tabuľky.

Tiažové zrýchlenie (ms^{-2})	**3,7 (Mars)**	**8,6 (Venuša)**	**9,81 (Zem)**	**11 (Neptún)**	**22,9 (Jupiter)**
Ponorený objem lega (dm^3)					

9. Vysvetli prečo nemá zmena tiažového zrýchlenia vplyv na veľkosť ponoreného objemu telesa.

.....

.....

.....

.....

.....

10. Rozhodni, či vztlaková sila vzniká aj v **beztiažovom stave**. Svoje tvrdenie fyzikálne zdôvodni a over si ho experimentálne na applete Archimedov zákon – kváder.

.....

.....

.....

.....

11. V applete si zvoľ teleso Rubikove kocky, hustotu kvapaliny $\rho_{\mathrm{k}} = 500\ \mathrm{kgm^{-3}}$ a nastav počiatočnú hodnotu tiažového zrýchlenia $g = 10\ \mathrm{ms^{-2}}$. Postupne meň hustotu telesa podľa tabuľky a odčítaj z appletu veľkosť tiažovej sily. Následne vypočítaj objem telesa a zapíš do tabuľky.

Hustota telesa ($\mathbf{kgm^{-3}}$)	**Tiažová sila (N)**	**Objem telesa ($\mathbf{m^3}$)**
500		
1000		
1500		
2000		
2500		
3000		

12. Zhodnoť či sú vypočítané hodnoty objemu rovnaké. Ak nie vypočítaj priemernú hodnotu objemu telesa a napíš čím môže byť spôsobený tento rozdiel.

.....

.....

.....

.....

.....

13. Na základe experimentovania s appletom navrhni a zrealizuj iný spôsob zisťovania objemu jednotlivých telies a výslednú hodnotu zapíš do tabuľky.

Výpočet:

....

....

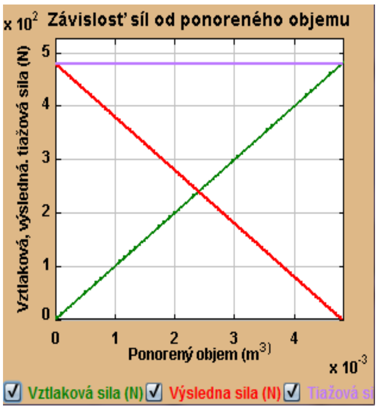
....

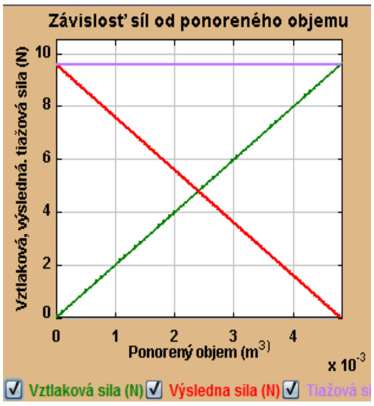
....

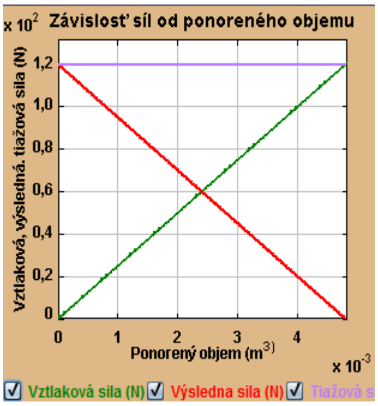
....

Teleso	**Objem telesa ($\mathbf{m^3}$)**
kváder	
lego	
plechovka RedBull	
Rubikove kocky	

14. Na obrázkoch sú zobrazené grafy závislosti síl od ponoreného objemu pre rovnaké teleso a rovnakú kvapalinu. Označ číselne tieto grafy podľa veľkosti tiažového zrýchlenia, od najmenšieho po najväčšie.







....

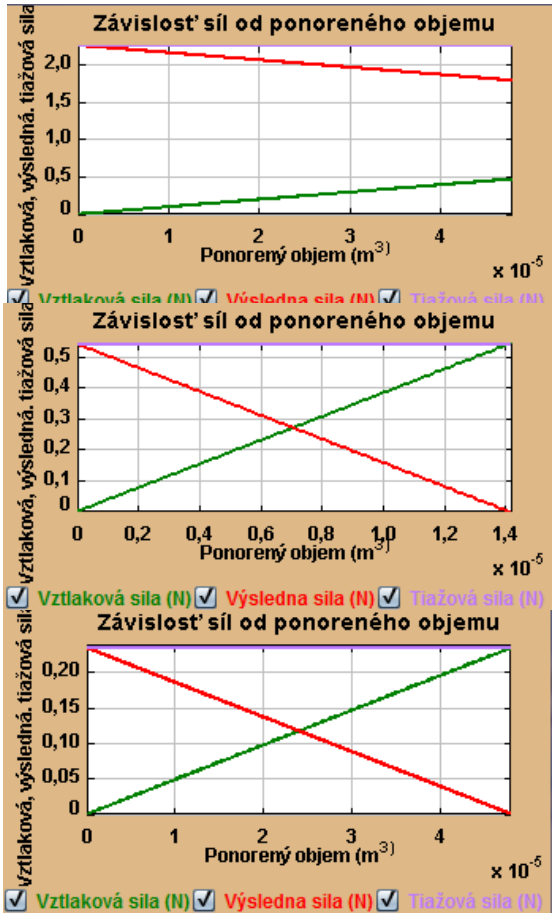
Odôvodni svoje označenie usporiadania grafov:

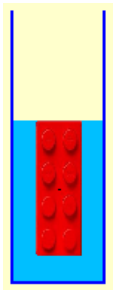
....

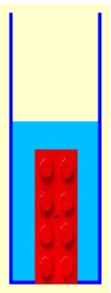
....

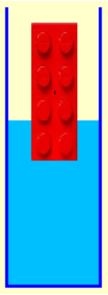
....

15. K obrázkom výsledného grafu appletu priraď spojnicami obrázok konečného stavu príslušnej animácie ponoru telesa do kvapaliny. Pomôž si appletom.

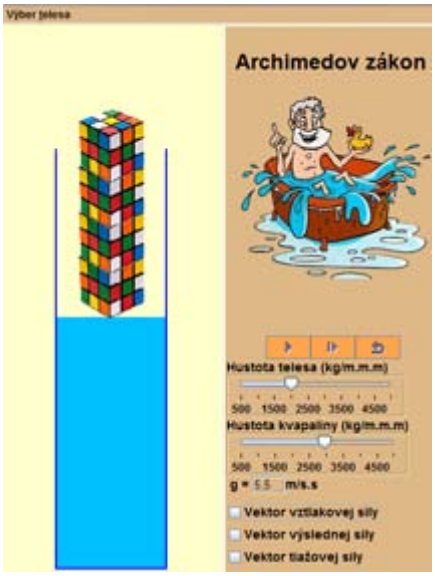








16. Na obrázku je počiatočný stav appletu Archimedov zákon – kváder zakrúžkuj konečný stav telesa po ukončení simulácie. Svoje tvrdenie over appletom.



- a) teleso sa bude vznášať
- b) teleso bude klesať ku dnu
- c) teleso bude plávať
-

Príloha 2

PRACOVNÝ LIST 2

„Archimedov zákon - ihlan“

1. Otvor applet Archimedov zákon – ihlan, prečítaj si popis a návod použitia, potom ho pozorne sleduj a zamysli sa nad jeho významom a fyzikálnou podstatou.

2. Uveď závislé a nezávislé premenné, ktoré sa vyskytujú v applete Archimedov zákon – ihlan.

.....
.....
.....
.....

3. Vypočítajte uhly, ktoré zvierajú výška strany a podstava v pravidelnom ihlane so štvorcovou podstavou ak meníme jeho rozmery. Výsledne uhly zapíšte do tabuľky.

Hrana ihlana (cm)	**Výška ihlana (cm)**	**Uhol (°)**
1	4	
1	9	
3	4	
3	9	
5	4	

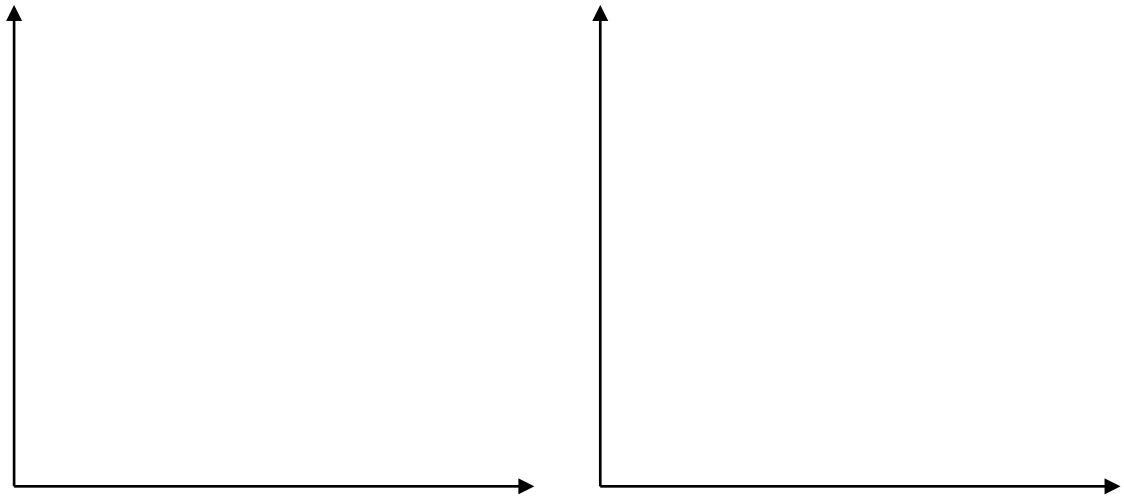
4. Ihlan so štvorcovou podstavou s veľkosťou hrany $a = 3\,\text{cm}$, výškou $v = 8\,\text{cm}$ budeme na zemskom povrchu ($g = 9{,}81\,\text{ms}^{-2}$) ponárať do kvapaliny s hustotou $\rho_k = 3000\,\text{kgm}^{-3}$. Vypočítaj jeho ponorený objem pre hustoty ihlanu uvedené v tabuľke. Výsledky zapíš do tabuľky a porovnaj ich s appletom.

Hustota ihlanu $(\mathbf{kgm^{-3}})$	**Ponorený objem – výpočet** $(\mathbf{m^3})$	**Ponorený objem – simulácia** $(\mathbf{m^3})$
500		
1000		
1500		
3000		

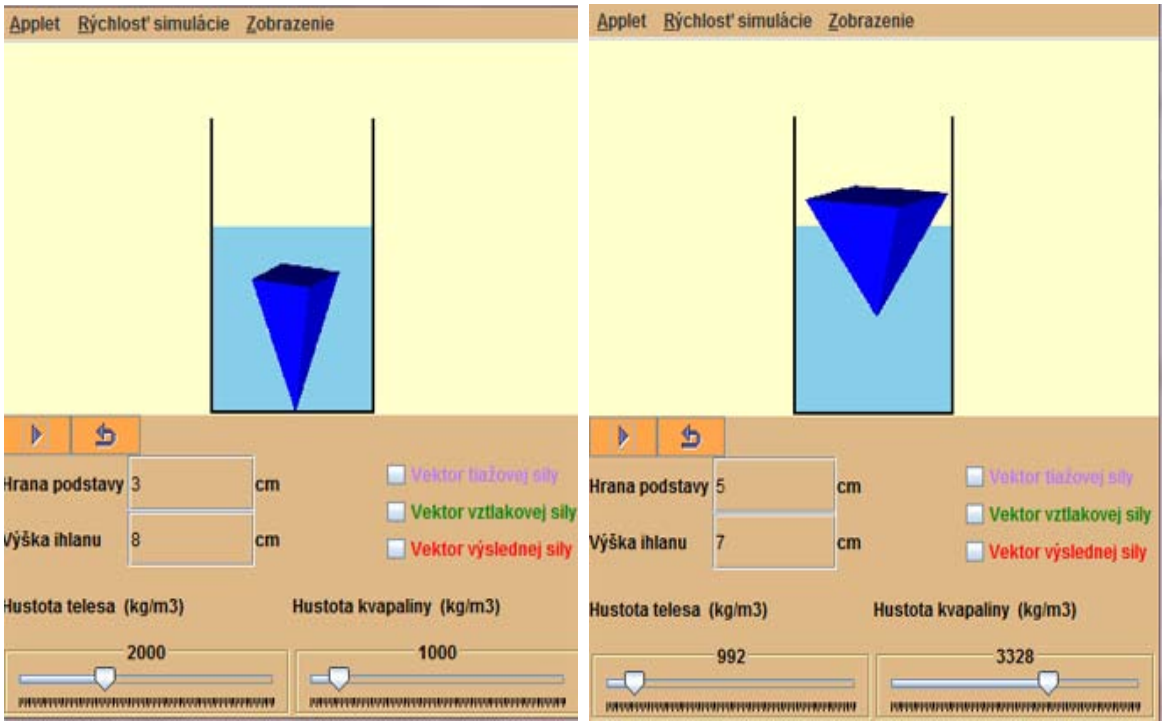
5. Nastav počiatočné hodnoty appletu Archimedov zákon – ihlan na veľkosť hrany $a = 4$ cm, výška $v = 6$ cm, hustota kvapaliny $\rho_{\mathrm{k}} = 1000\ \mathrm{kgm^{-3}}$ a hustota telesa $\rho_{\mathrm{t}} = 2000\ \mathrm{kgm^{-3}}$. Na základe experimentovania zapíš do tabuľky veľkosť vztlakovej a výslednej sily.

Ponorený objem telesa (cm^3)	Vztlaková sila (N)	Výsledná sila (N)
5		
7		
9		
11		
13		
15		
17		
19		
21		
23		
25		
27		
29		
32		

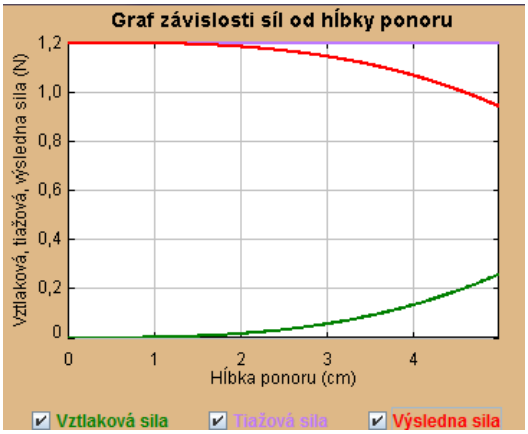
6. Zváž, ako sa menia vztlaková a výsledná sila s ponoreným objemom. Vyjadri graficky závislosť vztlakovej a výslednej sily od ponoreného objemu.

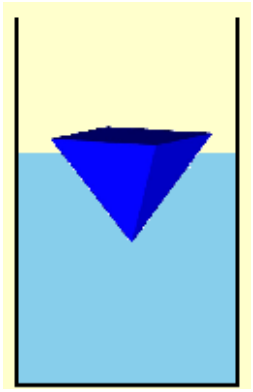


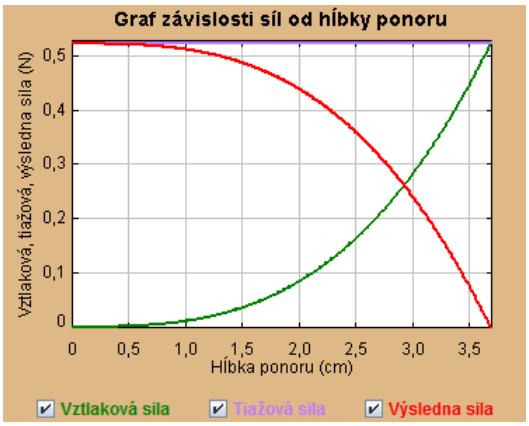
7. Dokresli do obrázkov vektory pôsobiacich síl na teleso ak vieš, že simulácia je koncovom stave.

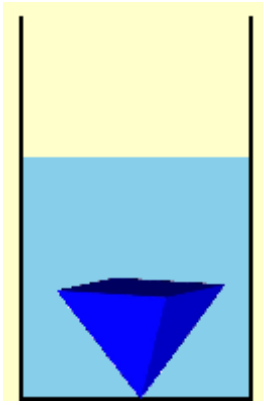


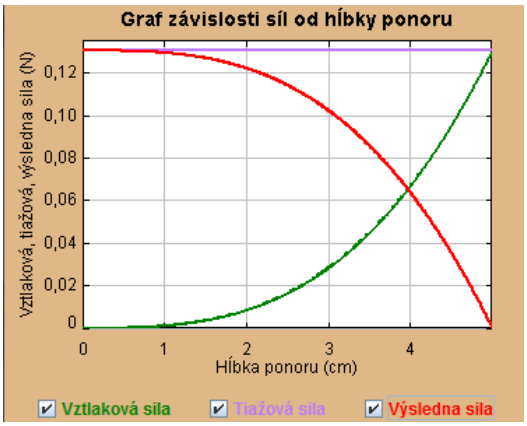
8. K obrázkom výsledného grafu appletu priraď spojnicami obrázok konečného stavu príslušnej animácie ponoru ihlanu do kvapaliny (rozmery ihlana sa nemenia). Pomôž si appletom Archimedov zákon – ihlan.

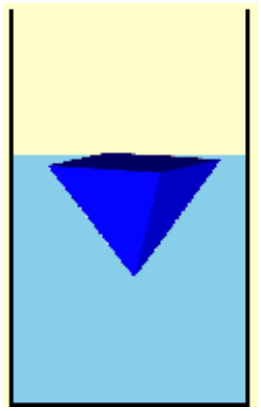








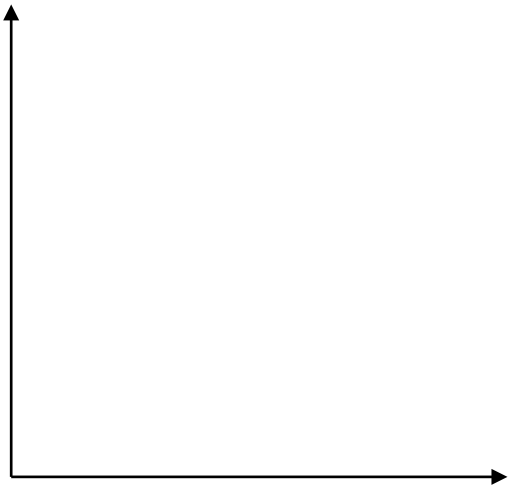




9. Nastav počiatočne hodnoty appletu na hustotu ihlanu $\rho_{\mathrm{t}} = 3000\ \mathrm{kgm^{-3}}$, hustotu kvapaliny $\rho_{\mathrm{k}} = 1000\ \mathrm{kgm^{-3}}$ a výšku ihlanu na $v = 8\ \mathrm{cm}$. Na základe experimentovania zapíš do tabuľky hodnoty hĺbky ponoru a ponoreného objemu, pre rôzne veľkosti podstavy.

Veľkosť hrany $(a = 1\ \mathrm{cm})$		**Veľkosť hrany** $(a = 3\ \mathrm{cm})$		**Veľkosť hrany** $(a = 5\ \mathrm{cm})$	
Hĺbka ponoru (cm)	Ponorený objem (m^3)	Hĺbka ponoru (cm)	Ponorený objem (m^3)	Hĺbka ponoru (cm)	Ponorený objem (m^3)

10. Vynes namerané hodnoty do grafu závislosti ponoreného objemu od hĺbky ponoru.



11. Pozoruj výsledný graf a pokús sa ho popísať a vysvetliť.

.....

.....

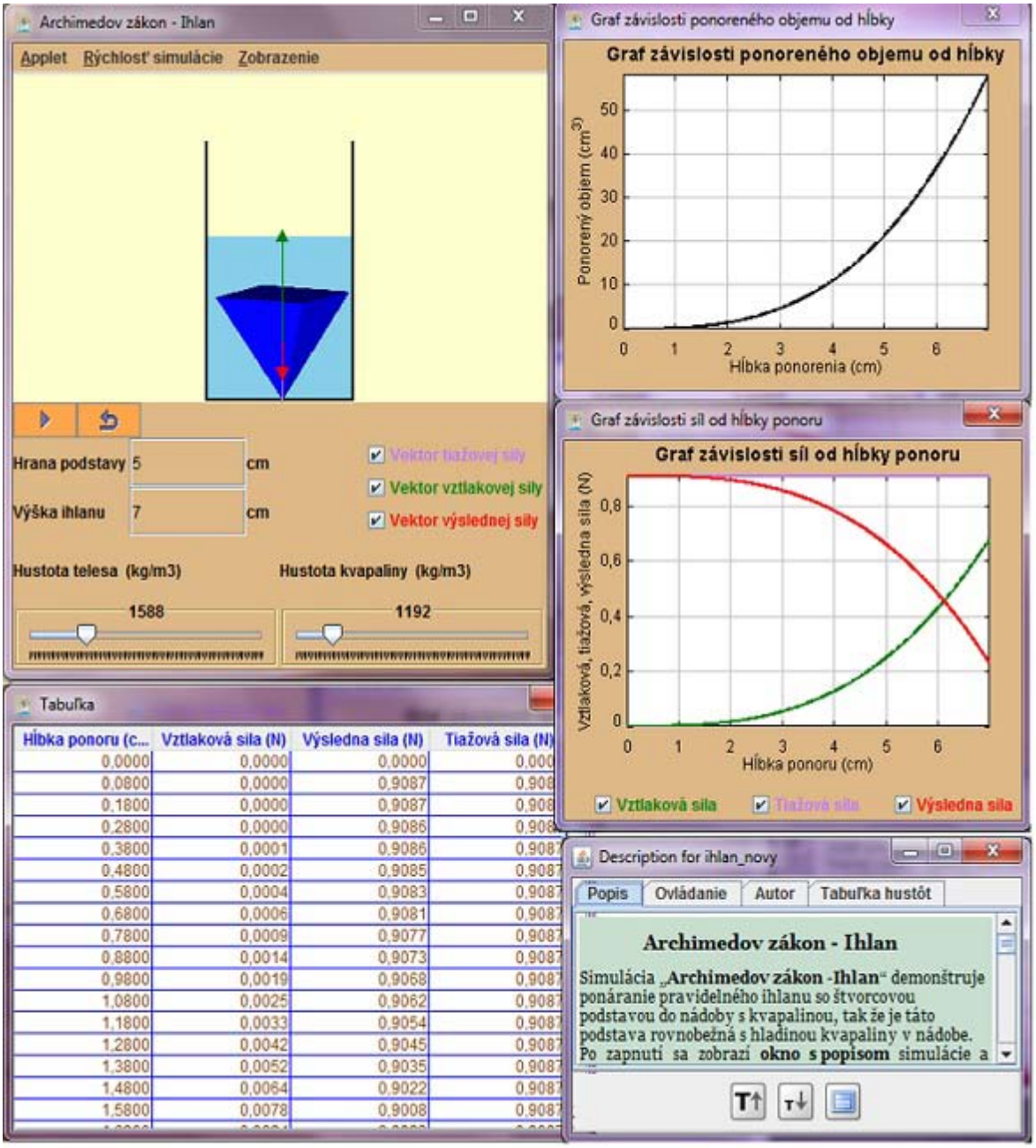
.....

.....

.....

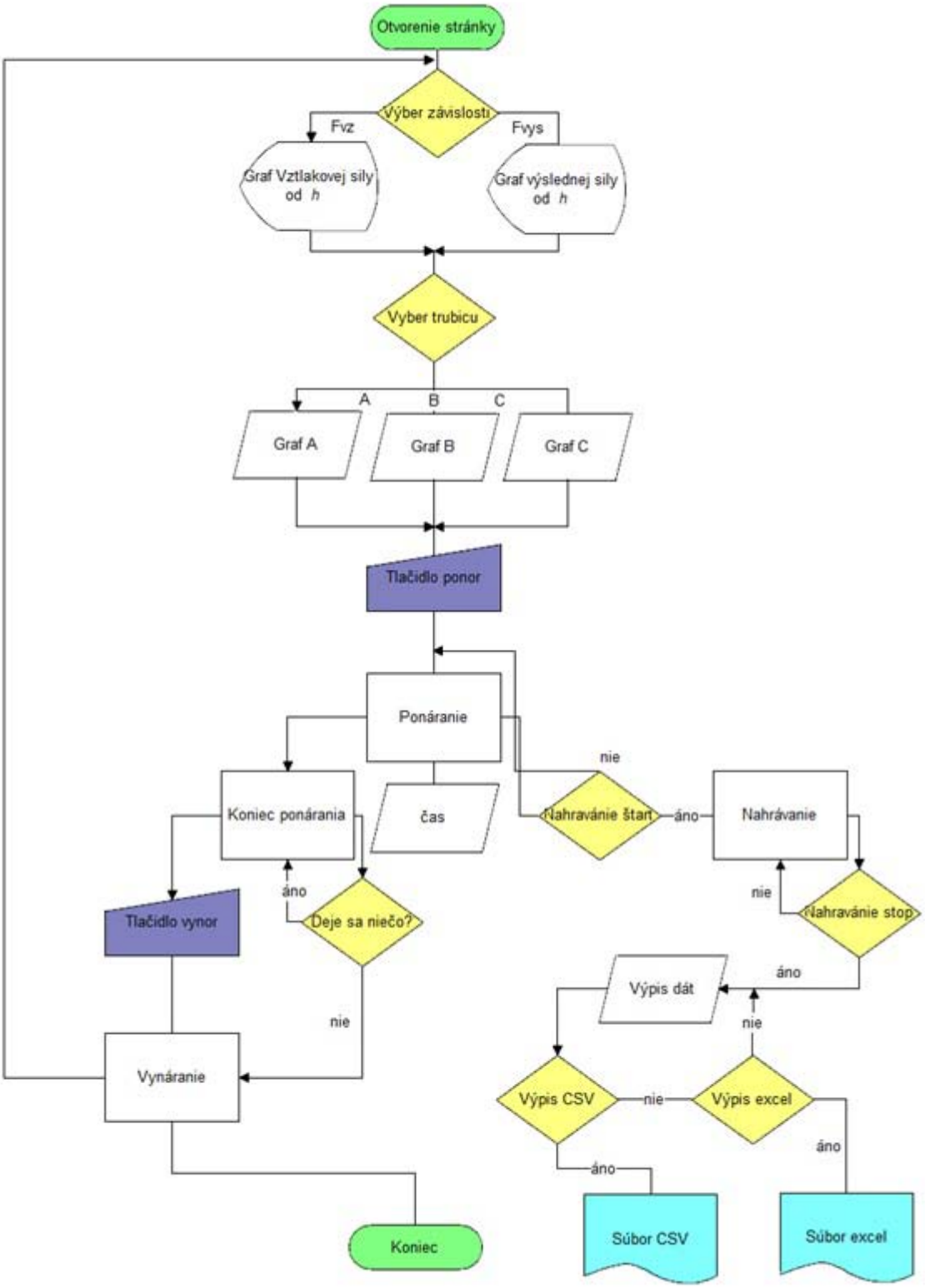
.....

Príloha 3



Výsledný obraz simulácie Archimedov zákon - ihlan.

Príloha 4



Vývojový diagram vzdialeného experimentu

Príloha 5

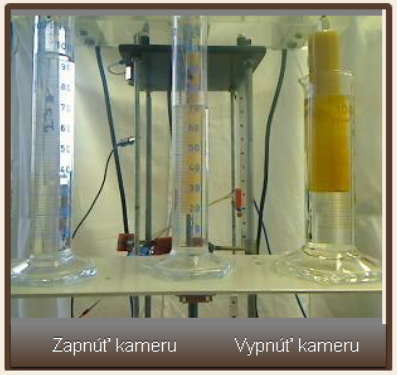
Webová stránka vzdialeného experiment Archimedov zákon

Trnavská univerzita v Trnave, Pedagogická fakulta, Katedra fyziky

Archimedov zákon

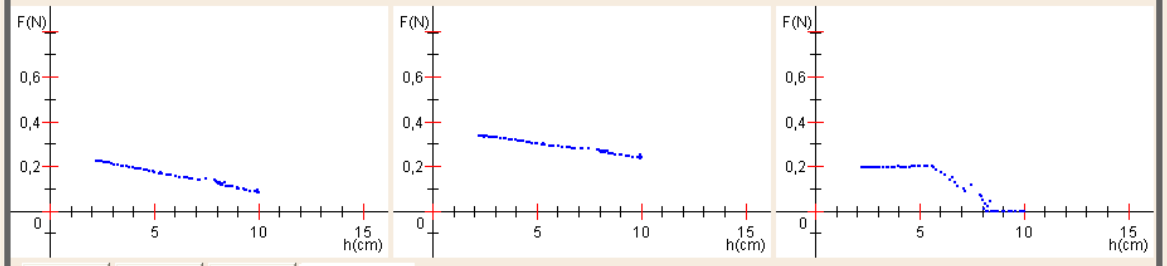
Motivácia | Fyzikálny základ | Experimentálne usporiadanie | Simulácie | Testovanie a úlohy

Obraz experimentu



Schema experimentu

Grafy závislosti výslednej sily ako funkcia hĺbky ponoru telesa



Ponor | Zastav | Vynor | 9,88

Záznam experimentu

Štart merania | Stop merania

Hodnoty ako tabuľka (pre Excel) | Hodnoty ako CSV

Powered by Easy Remote ISES

Studium interakce nanokompozitních vstev s plazmatem

Tereza Steinhartová[1]*

Školitel: Mgr. Jan Hanuš, Ph.D.[1]

1) Charles University in Prague, Faculty of Mathematics and Physics, Department of Macromolecular Physics

Abstrakt: Teoretická část se zabývá základní charakteristikou nízkoteplotního, nízkotlakého plazmatu, popisuje principy přípravy polymerních a nanokompozitních vrstev v tomto typu plazmatu a proces leptání v chemicky aktivním plazmatu. Osvětluje základní principy metod použitých k charakterizaci vzorků. Experimentální část popisuje proces hledání optimálních parametrů chemicky aktivního plazmatu (O_2/Ar) pro leptání vrstev plazmového polymeru. Po nalezení vhodných parametrů leptání, byly připraveny jednak vrstvy plazmového polymeru, jednak nanokompozitní vrstvy (kov/plazmový polymer) a vzorky byly za definovaných podmínek opracovány kyslíkovým plazmatem. Cílem bylo zkoumat fyzikálně chemické vlastnosti těchto vrstev, zejména pak jejich chemnické složení pomocí rentgenové fotoelektronová spektroskopie a smáčivost. Pozornost byla věnována změně kontaktního úhlu vody jednak v závislosti na době leptání, jednak změně v důsledku morfologie vzorku. Zvětšením drsnosti se podařilo připravit superhydrofobní (SHF) vrstvy.

Klíčová slova: plazmový polymer, chemické leptání, nanokompozitní vrstvy

Úvod

Nanokompozitní vrstvy kov/plazmový polymer nacházejí široké uplatnění jakožto antibakteriální povlaky, elektrické či optické senzory, samočistící povrchy apod. Cílem práce bylo studium interakce těchto vrstev s chemicky aktivním plazmatem a následná charakterizace těchto vrstev.

Samotné kovové klastry vykazují zajímavé chvování vůči elektromagnetickému záření - tzv. anomální absorpce, zapříčiněná plazmonovou rezonancí, nachází uplatnění při povrchově zesílené ramanovské spektroskopi (surface enhanced raman spectroscopy – SERS). Koloidní roztoky kovů se pro tento účel již používají. Problkematickou částí aplikace nanočástic na pevné podložce je nízká stabilita vrstev. Po překrytí kovu plazmovým polymerem se stabilita vrstev výrazně zlepší. Aby bylo možné dosáhnout plazmonové resonance, musí být povrch kovových nanočástic přístupný. Dobře kontrolované odleptání svrchní vrstvy plazmového polymeru se tak zdá být slibnou cestou k vyvinutí pevných, čistitelných čipů pro měření SERS.

1 Teorie

1.1 Základní charakterizace plazmatu

Jako plazma označujeme ionizovný, kvazineutrální plyn, který vykazuje kolektivní chování [4] . Vágněji řečeno jde o směs neutrálních a nabitých částic, kde interakce mezi nabitými částicemi jsou mnohem četnější než interakce neutrálů, nabité částice jsou blízko u sebe, neinteragují jen s nejbližšími sousedy, ale i dalekodosahověji (kolektivní chování) ale plyn se navenek jeví jako neutrální (kvazineutralita). Neutrálním částicím, iontům a elektronům přiřazujeme na základě jejich kinetické energie teploty T_n, T_i a T_e. Pokud bychom chtěli dosáhnout stupně ionizace alespoň $\sim 10\%$ [1] za podmínky, že plazma bude v tepelné rovnováze $T_n = T_i = T_e$ (tzv. *rovnovážné plazma*), musela by být teplota stovky tisíc stupňů celsia. V případě *nerovnovážného plazmatu* je $T_e >> T_i = T_{plynu}$ - lze uvažovat rychle se pobybující elektrony a téměř nehybné inonty a neutály.

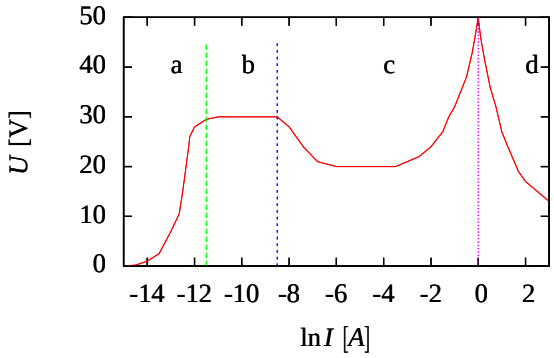
1.1.1 Nízkoteplotní výboj

Pro aplikace se užívá nerovnovážné plazma. To můžeme vytvářet různými způsoby, které lze v zásadě rozdělit do dvou skupin. Popis výboje buzeného stejnosměrným napětím (DC) zařazujeme jednak proto, že dobře ilustruje obecné chování výboje v plynech, jednak proto, že se touto metodou naprašují kovy, tedy i připravují kovové klastry. Vysokofrekvenční (RF) výboj uvadíme jakožto variantu užívanou pro přípravu plasmově polymerních vrstev.

Stejnosměrný výboj: Mějme skleněnou trubici naplněnou plynem (např. Ar) pod tlakem ~ 100 Pa uvnitř které jsou kruhové elektrody o průměru ~ 3 cm

*steint@seznam.cz

[1] poměr koncentrací nabitých/neutálních částic $\frac{n_e n_i}{n_n}$



Obr. 1: VA charakteristika výboje za sníženého tlaku

vzdálené řádově desítky centimetrů. Nyní tuto soustavu zapojíme do DC obvodu a budeme měřit voltampérovou, resp. ampérvoltovou charakteristiku [2]. Závislost, kterou pozorujeme (obr. 1) můžeme rozdělit na oblasti:

a) Nesamostatný výboj, kde proud nejprve se zvyšujícím se napětím prudce roste až k oblasti nasycení a s dalším zvýšením napětí dojde k průrazu.

b) Průrazem se zažehnul samostatný výboj. V této oblasti, jak je z obrázku patrno, nezávisí proud na napětí. Proto je třeba pro další posun v charakteristice měnit jiný parametr a to odpor.

c) Přes oblast subnormálního výboje se dostáváme do podmínek normálního a abnormálního doutnavého výboje, které jsou pro nás zajímavé a budeme se jimi zabývat podroběji dále.

d) Obloukový výboj.

Podmínky, za kterých dojde k průrazu závisí na součinu tlaku a vzdálenosti elektrod. Závislost zápalného napětí na součinu $p \cdot d$ se nazývá Paschenův zákon. V principu jde o to, že procesy vyvolané nabitými částicemi musí být v rovnováze se ztrátami na stěnách a objemovou rekombinací. U stejnosměrného výboje je průrazné napětí dáno do značné míry materiálem elektrod, konkrétně výstupní prací materiálu katody.

V doutnavém výboji ve výše popsaných podmínkách můžeme pozorovat světlé a tmavé úseky. Oblast nazývaná *kladný sloupec* s konstantním gradientem potenciálu poblíž anody dobře splňuje definici plazmatu uvedenou v 1.1 [3].

Vysokofrekvenční: Používáme-li k iniciaci výboje střídavého napětí, volíme frekvenci vyšší než 1 kHz. Pro nižší frekvence se výboj chová jako stejnosměrný, kde si jen elektrody periodicky mění úlohy. Pro vyšší frekvence již ionty "nestihnou"na změnu reagovat, stávají se nepohyblivými. Nové nosiče náboje vznikají ionizací neutrálů elektrony v objemu, ke ztrátám dochází rekombinací a difůzními procesy. Tento stav označujeme jako vysokofrekvenční (RF) doutnavý výboj. Jeho charakter se nemění s dalším zvyšováním frekvence řádově až do MHz a je nezávislý na materiálu elektrod, které tím pádem mohou být z libovolného, i dielektrického materiálu [5].

Vysokofrekvenční výboje lze rozdělit na kapacitně vázané (CCP *capacitively coupled plazma*) a induktivně vázané (ICP). Z popsaného RF doutnavho výboje uděláme kapacitně vázaný (námi užívaný) tak, že k jedné z elektrod zapojíme sériově kondenzátor[4].

1.2 Plazmová polymerace, leptání a tvorba kompozitních vrstev

1.2.1 Výboj v organickém plynu

Plazmové polymery jsou tenké organické zesíťované vrstvy připravené pomocí plazmatu. Hoří-li plazmový výboj v parách organického monomeru, který nazýváme prekurzorem, deponuje se nám vrstva plazmového polymeru.

Chemické procesy v plazmatu: Pro popis plazmové polymerace nejprve uvedeme základní chemické procesy probíhající ve výboji. Pro elektrony s vysokou energií je pravděpodobnost ioznizace i exitace přibližně stejná. U molekul je v důsledku přítomnosti vibračních a rotačních stupňů volnosti o něco pravděpodobnější excitace, při které může navíc dojít k disociaci. Schématicky můžeme tyto procesy, které jsou hlavním zdrojem excitací (CX_4^*), záporných iontů (X^-) a volných radikálů ($CX_4^\bullet$), ilustrovat (1)

$$\begin{aligned} e^- + CX_4 \rightarrow CX_4^* + e^- &\rightarrow CX_3^\bullet + X^\bullet + e^- \\ e^- + CX_4 &\rightarrow CX_3^\bullet + X^- \end{aligned} \quad (1)$$

Větší energie je třeba k přímé ionizaci[5] (2). Záporné ionty mohou dále vznikat připojením pomalého elektronu k elektronegativním molekulám, jako je třeba

[2] důvody užití zdroje proudu a měření napětí jako závislého parametru zmiňuje 1.2.3

[3] ač je často jako plazma označován celý doutnavý výboj

[4] RF pole nebude kondenzátorem ovlivněno, ale zabrání se tak odvádění záporného náboje, který se na elektrodu dostává v důsledku větší pohyblivosti elektronů oproti iontům. Vznikne záporné předpětí a proud, který měl předtím neúměrně větší kladnou složku díky velké mobilitě elektronů nyní kmitá více symetricky kolem této nové rovnovážné polohy.

[5] Ve schématu je použit kyslík, protože v našich experimentech hraje významnou roli.

právě molekula O_2, a následným rozštěpením (3).

$$e^- + O_2 \rightarrow O_2^+ + 2e^- \quad (2)$$

$$e^- + O_2 \rightarrow O_2^- \rightarrow O^- + O \quad (3)$$

Při nízkých tlacích se stávají některé procesy méně pravděpodobnými. Například vytvoření molekuly ze dvou atomů nějaké látky je za těchto podmínek neproveditelné za současného splnění zákona zachování energie (ZZE) i hybnosti (ZZH). Aby byl proces uskutečnitelný, musí být přítomna/y další částice. V případě molekul mohou být ZZE i ZZH splněny díky přítomnosti vibračních a rotačních stupňů volnosti a ke slučování disociovaných molekul, radikálů, tak dochází mnohem snadněji.

Povrch vystavený působení plazmatu: Na povrch, který vložíme do plazmatu hořícího v plynu organického monomeru, dopadají elektrony, ionty, fragmenty monomeru v základním i excitovaném stavu, neutrály, fotony. Podle rozdělení energií jednotlivých typů částic, které je dáno nastavením aparatury[6], budou na povrchu probíhat různé typy reakcí. Povrch (uzeměný nebo na plovoucím potenciálu několika voltů) bude bombardován zejména kladnými ionty. Při nízkých tlacích bude jejich energie odpovídat rozdílu potenciálů vzorku a plazmatu, při zvýšení tlaku se začnou projevovat srážky iontů s neutrály a energie, s kterou budou dopadat bude nižší než by odpovídalo potenciálovému spádu.

Mají-li dopadající ionty dostatečnou energii, může docházet k odprašování porchových atomů. Prahová energie odprašování bývá 30 - 120 eV a dochází k němu, je-li rozdíl potenciálu podložky a plazmatu větší než 100 V [5].

Základní prosesy uplatňující se při růstu vrstvy jsou tedy kombinace *dopadu* částic, jak *elektronů* tak *iontů (odprašování)*, *adsorpce*[7], *desorpce* a *plazmově chemické reakce* popsané výše (excitace, disociace, ionizace, fragmentace apod.). Dopadem elektronů či iontů na adsorbované molekuly se mohou různými procesy tvořit radikály přístupné k reakcím a tvorbě větších molekul. Dále může docházet k fragmentaci adsorbovaných molekul a tvorbě povrchových defektů.

Interakce povrchu, byť dobře definovaného, s plazmatem je ale stále velmi těžko uchopitelná. Existují modely, které dobře popisují specifické systémy. Univerzální model však není.

[6] tlak, průtoky plynů, výkon plazmového výboje

[7] rozlišujeme fyzisorpci způsobenou především Van der Walsovými silami a chemisorpci způsobenou chemickou vazbou mezi podloužkou a adsorbovanými molekulami

Do této oblasti spadají i modely plazmové polymerace [8] (například [9]), kterou lze pomocí výše uvedených základních reakcí popsat [5] jako

1. Nedisociativní adsorpce částic na povrch
2. Disociativní chemisorpce
3. Reakce mezi adsorbovanými radikály a pevným povrchem $\rightarrow$ adsorbované molekulární produkty

Po nadeponování základní vrstvy plazmovéo polymeru dochází dalším bombardováním k exitaci, případně ionizaci molekul vrstvy, která by i bez dalšího ostřelování byla po nějakou dobu chemicky aktivní. Na aktivní místa se navážou molekuly monomeru. Dochází také k aktivaci molekul monomeru v objemu. Ty pak reagují buď po dopadu s povrchem, nebo dokonce hned v objemu s jinou molekulou monomeru. Molekuly monomeru jsou tedy iniciovány srážkami s elektrony a další fáze jsou shodné s klasickou polymerací - propagace (lavinovitý růst) a terminace (ukončení růstu řetězce). Všechny tři procesy mohou probíhat jak v objemu, tak na podložce, typicky ale dochází k iniciaci v objemu plazmatu a k propagaci a terminaci na podložce.

1.2.2 Chemicky aktivní plazma

Působení chemicky aktivního plazmatu na povrchy má dva hlavní paralelní efekty, které jsou dnes využívány v praxi. Jednak leptání[9], odstraňování materiálu z opracovávaných povrchů, jednak modifikaci povrchových vlastností[10], například smáčivosti.

V porovnání s leptáním křemíkových vrstev zmiňovaných v poznámce[7], které mají relativně jednoduchou strukturu, je mechanizmus leptání polymerních vrstev složitější. Jedná se o víceprvkovou strukturu obsahující mnoho různých funkčních skupin v opakujících se řetězcíc o různých molekulových váhách. Na tuto různorodou strukturu působí částice popsané v předchozí sekci. Samozřejmě ne všechny procesy probíhají stejně intenzivně a efekt některých si můžeme dovolit zanedbat.

V leptání kyslíkovým plazmatem, kterým jsme se zabývali, hraje hlavní roli působení atomárního kys-

[8] Oproti klasickému polymeru má plazmový polymer mnohem složitější a také méně pravidelnou strukturu.

[9] odleptáváním křemíkových desek v místech, kde byla v mikronovém rozlišení pozměněna chemická struktura se vyrábějí litografické masky pro vypalování mikročipů

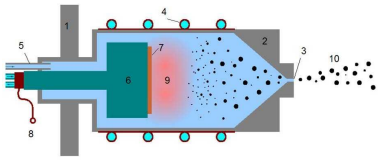
[10] SHF povrchy, zlepření vazebných vlastností apod.

líku. Je prokázána přímá úměra koncentrace atomárního kyslíku a leptací rychlosti [13]. Dopadem částic na povrch plazmového polymeru dochází k otevření vazeb a tvorbě radikálů. Velmi reaktivní atomární kyslík se váže na tyto neuzavřené molekuly a dochází tak k tvorbě uzavřených fragmentů s menší molekulovou hmotností, které již snadno opouští povrch. Pravděpodobnost, že se otevřené vazby uzavřou zpět do vrstvy je v porovnání s pravděpodobností reakce s *O* malá [12]. Ne všechny řetězce s otevřenými vazbami se podaří kyslíku vyizolovat na malé fragmenty a tím z povrchu odstranit. Na otevřené konce pevně zabudované v povrchu se kyslík naváže a stává se součástí vrstvy. Zde je původ změny chemického složení potažmo vlastností povrchu vlivem chemicky aktivního plazmatu.

1.2.3 Magnetronové naprašování a tvorba kovových nanočástic

Tenké vrstvy kovu lze deponovat tzv. *naprašováním*. Systém využívá planparalelního uspořádání elektrod připojených na DC. Pro lepší kontrolovatelnost systému se používá zdroj konstantního proudu[11]. Katoda, na které je připevněn terč z materiálu, který chceme deponovat, je ostřelována kladnými ionty (typicky Ar^+) pracovního plynu. Mají-li ionty dostatečnou energii, dochází při srážkách s povrchem k odprašování materiálu katody. Pro zvýšení depoziční rychlosti se k elektrodám přidává magnetický obvod, který vytváří elektronové pasti. Zachytáváním elektronů se prodlužuje jejich dráha, tedy i pravděpodobnost ionizačních srážek, čímž se dosáhne zvýšení stupně ionizace v okolí terče. Tomuto procesu říkáme magnetronové naprašování.

Aby se odprášené atomy kovu spojily v klastry, musejí se vytvořit vhodné podmínky. To bylo v naší aparatuře zajištěno pomocí plynového agregačního zdroje Haberlandova typu, jehož schéma je na obr. 2. Skládá se z magnetronu (6) a terče (7), pod číslem (9) je znázorněn výboj a zdroj napětí (8). Celý systém je třeba chladit (4). Pracovní plyn argon, jehož přívod je označen (5), slouží nejen k odprašování materiálu terče, ale hraje důležitou roli při agregaci klastrů[12] Dvouatomové shluky slouží jako kondenzační jádra pro růst větších částic - klastrů. V klastrozdroji je pro tento



Obr. 2: nanoklastrový zdroj Haberlandova typu [2]

proces udržován tlak jednotek až desítek pascalů. Agregované částice vyletují otvorem (3) do depoziční komory, kde je tlak typicky 1 Pa.

1.3 Metody používané k charakterizaci vzorků

1.3.1 Spektroskopická elipsometrie

Pro určení leptací rychlosti jsme měřilili tloušťku plazmového polymeru před a po leptání metodou spektroskopické elipsometrie (SE)[13].

Elipsometrie je nedestruktivní metoda pro určování optických vlastností povrchů a tenkých vrstev. Světelný svazek definované polarizace necháme dopadat na vzorek pod určitým úhlem. Po odrazu od vzorku získá následkem interakce obecně eliptickou polarizaci. Chování světla dvou význačných polarizací na rozhraní popisují Fresnelovy rovnice . Uvažuje se lineární polarizace kolmá k rovině dopadu (s-polarizace) a druhá ležící v rovině dopadu (p-polarizace). Reflexní koeficienty pro obě tyto polarizace popisující relativní intenzitu elektrické složky E odražené vlny

$$r_s \equiv \frac{E_{rs}}{E_{is}} = \frac{N_i \cos\theta_i - N_t \cos\theta_t}{N_i \cos\theta_i + N_t \cos\theta_t}$$
$$r_p \equiv \frac{E_{rp}}{E_{ip}} = \frac{N_t \cos\theta_i - N_i \cos\theta_t}{N_t \cos\theta_i + N_i \cos\theta_t}, \qquad (4)$$

kde N je komplexní index lomu ($N = n + ik$: n je reálný index lomu, k extinční koeficient), θ úhel dopadu a r resp. i resp. t jsou indexy pro parametr odražené resp. dopadající resp. prošlé vlny.

Superpozicí popíšeme libovolný stav polarizace. Fresnelovy rovnice tak dávají do souvislosti změnu poměru amplitud Ψ a změnu fázového rozdílu Δ s parametry vzorku (5) [14], které v rovnicích vystupují. Ve

[11] v magnetronovém režimu vyvolá malá změna napětí velkou změnu proudu

[12] Při srážce dvou atomů kovu dojde k odražení, aby zůstaly u sebe, je třeba ještě jednoho účastníka srážky (viz 1.2).

[13] Měření byla prováděna na spektroskopickém elipsometru Woolam v rozsahu vlnových délek 190 nm – 1600 nm a k analýze naměřených dat byl použit program WVASE32 taktéž of firmy Woolam.

[14] úhel dopadu, index lomu, extinkční ($\sim$ absorpční) koeficient (neboli komplexní index lomu) a s nimi skrze disperzi vlnová délka světla λ; stejně tak se lze z naměřených parametrů Ψ a Δ

vrstvě/vách dochází ke zpětnému odrazu a s ním spojené interferenci [11]. Započtením tohoto jevu do modelu získáváme informaci o tloušťce (multi)vrstevy.

$$\tan\Psi \exp i\Delta \equiv \frac{r_p}{r_s} = \frac{|E_{rs}| \exp i\delta_p}{|E_{rp}| \exp i\delta_s} \tag{5}$$

Nejčastěji je elipsometrie používaná při měření tloušťky tenkých vrstev materiálů. Významné je, že lze velmi přesně určit tloušťky vrstev, které jsou výrazně menší, než je vlnová délka použitého světla.

1.3.2 Rentgenová fotoelektronová spektroskopie

Ke zkoumání chemnického složení vrstvy byla použita metoda Rentgenové fotoelektronové spektroskopie (X-ray photoelektron spektroscopy - XPS). Tato metoda je založená na vnějším fotoelektrickém jevu. Budící záření (monochromatické rentgenové) o frekvenci ν dopadá na vzorek, kde dochází k vyrážení elektronů z atomů. Původní energie absorpovaného fotonu $E = h\nu$ je předána elektronu na jeho uvolnění z atomu a přechodu na Fermiho hladinu (tato vazebné energie E_B je charakteristická) a dále pak na opuštění materiálu $\varphi_{sample} = E_V - E_F$, tj. na přechod z Fermiho hladiny na energii volného elektronu (vakuová hladina). Pro kinetickou energii volného elektronu platí

$$E_K = h\nu - E_B - \varphi_{sample}. \tag{6}$$

Fermiho hladina je kolektivním parametrem celého vzorku a můžeme tak zařídit, aby E_F vzorku i detektoru byly stejné. Kinetická energie elektronu, kterou detektor zaznamená je pak

$$E_K = h\nu - E_B - \varphi_{det}, \tag{7}$$

kde φ_{det} už není parametr vzorku nýbrž přístroje, který se uváží v kalibraci. Detekcí kinetické energie elektronů tak můžeme zjišťovat vazebné energie elektronů a tedy i typy atomů obsažených v prvku.

V případě elektronů vyražených z vnitřních slupek atomů je tato energie charakteristická pro jednotlivé prvky a měření nám dává informaci o chemickém složení vzorku. Navíc můžeme pozorovat drobné rozdíly ve vazebné energii, které jsou způsobeny rozdílnou chemickou vazbou daného prvku. Výše uvedené předpokládá že excitovaný elektron doletí na detektor aniž by během cesty došlo ke srážce, což je limitující faktor jednak pro hloubku, z které můžeme elektrony pozorovat, pro většinu materiálů maximálně 10 nm, jednak pro tlak v aparatuře které musí být pod 10^{-6} Pa. [15]

1.3.3 Mikroskopie atomárních sil

Pro zkoumání povrchové morfologie vzorků byla užita metoda mikroskopie atomárních sil (atomic force microscopy - AFM), která spočívá ve zkoumání silové interakce mezi ostrým hrotem, typický poloměr křivosti hrotu je zhruba 10 nm, umístěným na pružném raménku (cantileveru), a povrchem. Pohyb raménka je detekován pomocí odrazu laseru od tohoto raménka na pozičně citlivý detektor. Skenování je realizováno pomocí piezokrystalu.

V našem případě[16] [6] byl použit polokontaktní režim s konstantní amplitudou kmitu cantilevru.

Kromě kvalitativního výstupu v podobě obrazu povrchu dostáváme kvantitativní výsledek - drsnost povrchu. Nejčastěji se udává střední kvadratická odchylka (RMS) (8).

$$R_{RMS} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i^2} \tag{8}$$

Udáním RMS však není jasné, zda se jedná o výrazné ostré nerovnosti (úzké píky) nebo o mohutnější ne tak vysoké útvary. Proto se hodnota RMS udává zpravidla v kontextu s obrázkem.

1.3.4 UV/VIS spektroskopie

Míra absorpce ve viditelné a blízké UV oblasti byla zjišťována pomocí UV-Vis spektometru Hitachi U3300. v rozmezí vlnových délek $190-900$ nm s krokem $0,5$ nm. Pro naše vzorky byla relevatní oblast zhruba nad 350 nm, tj. nad absorpční hranou skla, na kterém byly vzorky pro tento typ měření deponovány.

1.3.5 Měření kontaktního úhlu - smáčivost

Smáčivost ("míra ochoty kapaliny ulpívat nebo být v kontaktu s daným povrchem") je důležitým parametrem povchu materiálů. V objemu materiálu je každá částice obklopena dostatečným množstvím dalších a vzájemné působení se středuje. Povrchová vrstva je

získat komplexní permitivitu, která je s indexem lomu ve vztahu $\varepsilon = \sqrt{N}$

[15] Naše laboratoř je vybavena XPS aparaturou s rentgenkou Specs (pseudomonochromatická čára K_α Al na 1486,61 eV) a hemisferickým elektronovým analyzátorem Phoibos Naměřená data byla zpracována pomocí programu CasaXPS.

[16] K měření byl použit AFM Ntegra od firmy NT-MDT

obklopena částečně materiálem objemu, částečně navazující látkou. Objemové a povrchové vlastnosti mohou tedy zřejmě vykazovat rozdílné chování. O objemových vlastnostech můžeme mnoho usuzovat z různých měření, v kontaktu jsme však zpravidla s povrchem látky, proto je podstatné zabývat se jeho vlastnostmi.

Povrch lze chápat jako fázové rozhraní

Rozhraní tří fází je charakterizováno smáčecím (kontaktním) úhlem - úhel mezi vektorem ležícím v rovině povrchu a voktorem tečným k povrchu kapky v bodě tyku všech tří fází. Je-li kontaktní úhel na hladkém povrchu $\theta < 90°$ označujeme materiál jako smáčivý, je-li $\theta > 90°$ pak jako nesmáčivý.

Právě kontaktní úhel kapky vody (WCA) na připravených površích byla veličina, kterou jsme zjišťovali. V prvním přiblížení, které předpokládá dokonale hladký povrch, je hodnota kontaktního úhlu θ s povrchovými napětími mezi třemi přítomnými fázemi (s - vzorek, l - voda a g - vzduch) dána Youngovou rovnicí

$$\gamma_{sg} = \gamma_{sl} + \gamma_{lg} \cdot \cos\theta. \tag{9}$$

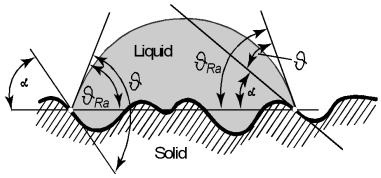
Reálné povrchy ideálně hladké nejsou, navíc mohou vykazovat chemickou nehomogenitu. Youngovu rovnici lze doplnit o korekční členy. Vliv morfologické a chemické nehomogenity se ale obtížně rozlišuje.

Dalším komplikací modelu tohoto rozhraní je, že systém nemusí být ve statické rovnováze. Kapka se po povrchu pohybuje a snaží se hledat energetické minimimum. Svou přítomností může měnit vlastnosti povrchu a tím i polohu minima, které hledá. Pro zlepšení popisu zavádíme: statický úhel θ_s po ustálení (dojde-li k němu) na vodorovném povrchu; Mějme kapku na povrchu nakloněné tak, že kapka je těsně před začátkem pohybu doleva. Pak úhel vpravo nazýváme postupující θ_a, vlevo ustupující θ_r. Na ideálních površích by se měly hodnoty všech tří úhlů shodovat. S nehomogenitou povrchu roste rozdím mezi $\theta_a - \theta_r > 0$, který označujeme jako hysterezi.

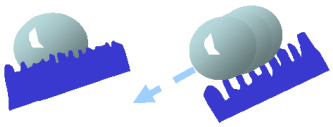
Uvažujme, že dchylky od Youngovy rovnice jsou způsobeny pouze drsností. V takovém případě můžeme rozlišit dva základní modely (obr. 4):

Wenzelova rovnice: Rovina tečná k drsnému povrchu je obecně různá od vodorovné, kterou pozorujeme makroskopicky. Kontaktní úhel θ_{Ra}, který měříme, je s úhlem θ, který skutečně svírají rozhraní na drsném povrchu (obr. 3) (a který je dán povrchovými energiemi přítomných látek) ve ztahu

$$\cos\theta_{Ra} = r\cos\theta, \tag{10}$$



Obr. 3: Wenzelův model [10]



Obr. 4: povrch popsatelný Wenzelovou rovnicí (vlevo) a Cassie –Baxterovou rovnicí (vpravo) [10]

Kde r je zmíněný korekční parametr. Tato představa chování kapek na drsném povrchu dobře odpovídá pozorování, že u smáčivých materiálů se se zvyšováním drsnosti kontaktní úhel dále klesá, kdežto u nesmáčivých látek vede zvyšování drsnosti k větší hydrofobicitě. Zároveň povrchy s tímto chováním vykazují velikou hysterezi, protože kapka i při poměrně velkém úhlu naklonění ulpívá, než dojde k utržení (kapka je v kontaktu s celým povrchem, který překrývá). Jeli však drsnost příliš velká nebo je materiál porézní, přestává být tento model funkční.

Cassie –Baxterova rovnice: Na površích porézních nebo s velikou drsností specifického charakteru ulpívají kapky na "hrotech"povrchu. Kapka je v kontaktu jednak s materiálem, jednak se vzduchem, který je zachycován v dutinách překrytých kapkou. Pozorovaný kontaktní úhel θ_{Ra} je s s úhlem θ, který skutečně svírají rozhraní na drsném povrchu (a který je dán povrchovými energiemi přítomných látek) ve vztahu

$$\cos\theta_{Ra} = f_1\cos\theta - f_2. \tag{11}$$

Kapka na površích, které se chovají takto prakticky neulpívá, hystereze je malá. Zároveň s sebou kapka při klouzání (obr. 4) odnáší nečistoty z povrchu. Materiály které při vhodném typu zdrsnění vykazují toto chování lze užívat k přípravě SHF vrstev, které mají aplikace například jako samočistící nebo protinámrazové povrchy.

1.3.6 Skenovací elektronový mikroskop

Další snímky mapující morfologii povrchu byly pořízeny na skenovacím elektronovém mikroskopu (SEM).

Problémem tohoto měření je nabíjení vzorku. Není-li z povrchu zkoumaného materiálu náboj odváděn dostatečně dobře, zhoršuje se rozlišení obrazu. Nevodivé

vrstvy se proto poprašují tenkou vrstvou vodivého materiálu (např. grafitu).

Druhou možností, která byla použita v našich měřeních je měření v lomu: máme-li multivrstvu složenou z vodivého materiálu překrytého tenkou vrstvu dielektrika, můžeme pořídit obraz z profilu. Je-li vrstva dielektrika dostatečně tenká, kvalitu obrazu téměř neovlivní a výsledný záznam dává informaci jak o složení, tak o struktuře multivrstvy.

1.3.7 Krystalové měření depoziční rychlosti

K měření depozoční rychlosti klastrů byla užita metoda vibrujícího krystalu fungující na následujícím principu [1]: krystal o tloušťce t seříznutý ve vhodném směru je připojen k oscilačnímu obvodu. Jeho rezonanční frekvence je

$$f = \frac{v_p}{2t}, \tag{12}$$

kde v_p je rychlost šíření příčné elasticé vlny ve směru loušťky t. Deponováním materiálu o hustotě ρ_k a hmotnosti dm na plochu S vzoste tloušťka o

$$\mathrm{d}t = \frac{1}{\rho_k S}\mathrm{d}m. \tag{13}$$

Taylorovým rozvojem rovnice (12) do 1. řádu dostane změnu resonanční frekvence krystalu

$$\mathrm{d}f = -\frac{f^2}{N\rho_k S}\mathrm{d}m. \tag{14}$$

Zaznamenaná rychlost poklesu resonanční frekvence, je tedy přímo úměrný depoziční rychlosti.

Vztah pro změnu frekvence (14) platí, pokud je nadeponovaná vrstva dostatečně tenká (rozvoj do 1. řádu je postačující). Dostatečnou tenkostí jsou myšleny tloušťky, při kterých ještě nehrají roli elastické vlastnosti deponovaného materiálu.

1.3.8 Optická emisní spektroskopie

Jednou z diagnostik plazmového výbeje je optická emisní spektroskopie (OES). V plazmatu dochází k excitacím, při relaxaci exitovaných stavů k emisi fotonů s charakteristicku energií. Proto také pozorujeme, že plazma "svítí".

OES zaznamenává intenzity na vlnových délek ve zvoleném rozsahu a kroku. Snímání intenzit probíhá přes křemené sklo, které nemá absorpční hranu v oblasti vlnových délek, které jsou detekovány a měření tak není tímto zkreslováno. V naměřeném spektru nalezneme pomocí databáze charakteristické čáry přítomných prvků. V našem případě jsme pozorovali atomární čáry argonu a kyslíku. Detekovaná intenzita příslušné čáry je přímo úměrná hustotě elektronů n, kterými je exitace zapříčiněna, účinnému průřezu příslušné exitace σ a koncentraci atomů c, které mohou být exitovány. Mějme dva prvku A a B a nějaké dvě čáry jejich spekter, jejichž exitace má stejný účinný průřez σ. Pak je poměr intenzit čar roven poměru koncentrací (15), neboť k procesům dochází ve stejném prostředí, tedy za stejné hustoty elektronů n. Známe-li koncentraci jednoho z prvků A této dvojice, můžeme touto metodou nazývanou *aktinometrie* určit koncentraci druhého B (15)[17]

$$\frac{I_A}{I_B} = \frac{c_A \cdot \sigma \cdot n}{c_B \cdot \sigma \cdot n} \rightarrow c_B = \frac{I_B}{I_A} c_A. \tag{15}$$

2 Experimentální část

Cílem experimentů byla příprava kompozitních vrstev kov/plazmový polymer, jejich modifikace chemicky aktivním plazmatem, resp. chemické odleptávání svrchní vrstvy plazmového polymeru a hledání optimálních podmínek pro leptání.

Samotné kovové klastry 1.2.3 vykazují aplikačně zajímavé vlastnosti, např. - antibakteriálnost, optickou anomální absorpci, atd. Jejich vrstvy jsou ale nestabilní - snadno se stírají, oxidují apod. Jednou z možností, jak stabilitu zlepšit je zkombinovat strukturu kovových klastrů s vrstvou plazmového polymeru.

Jedna možnost je deponovat klastry na polymerní vrstvu, což nezvýší stabilitu mnoho, ale hodí se pro studium samotných klastrů.

Dále je možné překrýt kové nanočástice plazmovým polymerem. Tak dostáváme vrstvy, které dědí zajímavé vlastnosti související jednak s morfologií struktury klastrů, jednak s chemickými vlastnostmi plazmového polymeru, který navíc přináší větší odolnost. Roli hraje samozřejmě i to, zda je překryvová vrstva dostatečně tenká, aby se vlastnosti související s morfologií klastrů ještě mohly projevit.

Pro některé aplikace, např. SERS se dále hodí, aby kovové klastry nebyly překryty zcela, ale byly v plazmově polymerní matrici pouze upevněny. Toho lze dosáhnout právě částečným odleptáním překryvové vrstvy plazmového polymeru. Odleptávání musí být

[17] Tento výpočet funguje samozřejmě jen v rámci jisté aproximace, která je ovšedm pro naše podmínky platná.

pro tyto účely dobře definovaným procesem. Charakterizaci chemického leptání je proto věnován první oddíl 2.1.2 experimentální části, další oddíl 2.1.4 je pak věnován chemickým změnám povrchu zapříčiněným tímto procesem.

2.1 Vrstvy plazmového polymeru

2.1.1 Depozice plazmového polymeru

Plazmově polymerní vrstvy byly připraveny pomocí kapacitně vázaného nízkoteplotního nízkotlakého doutnavého výboje. Jako prekurzor byl použit n-hexan, do výboje s výkonem 60 W byl vpouštěn ve směsi s argonem v poměru 1 : 1 za celkového průtoku pracovní směsi 10 sccm a tlaku 1.7 Pa. Depoziční rychlost změřená pomocí SE z tlouštěk připravených vrstev byla za těchto podmínek ~ 7 nm/min. Statický kontaktní úhel vody na těchto vrstvách byl $(100 \pm 2)^\circ$, jejich RMS drsnost změřená pomocí AFM byla zhruba 2 nm.

2.1.2 Optimalizace procesu leptání

Připravené vrstvy plazmového polymeru o tloušťkách typicky ~ 160 nm byly opracovávány v kyslíkovém plazmatu. Pro leptání byl použit stejný typ výboje jako v případě depozice, jen zde byla přidána směs kyslíku a argonu, o celkovém průtoku 3 sccm.

Optimalizace složení směsi: Při konstantním příkonu 60 W a tlaku 3 Pa jsme měnili poměr leptací směsi tak, abychom dosáhli maximální leptací rychlosti. V tab. 1 jsou uvedeny tloušťky vzorků před leptáním d_0 a jejich změna po pětiminutovém leptání Δd v příslušné směsi argonu a kyslíku. Vidíme, že největší leptací rychlosti, ~ 10 nm/min, bylo dosaženo ve směsi $Ar/O_2 = 0.5/2.5$ sccm.

Tabuľka 1: Změna (úbytek) vrstvy plasmového polymeru Δd při leptání v chemicky aktivním plazmatu s uvedeným poměrem kyslíku a argonu při tlaku 3 Pa celkovém průtoku 3 sccm a výkonu 60 W po dobu 5 min

Ar/O_2	0/3	1/11	1/5	1/2	2/1	3/0
d_0 [nm]	183.7	189.2	169.4	163.6	145.2	160
Δd [nm]	39.2	48.9	49.3	42	19.3	0

OES - aktinometrie: Abychom danou závislost leptací rychlisti na složení směsi vysvětlili, provedli jsme charakterizaci plazmatu OES. Jak je řečeno výše, pro leptání má zásadní význam atomární kyslík. Zajímala nás tedy závislost jeho koncetrace na leptací směsi. Pro jednotlivé leptací směsi jsme metodou uvedenou v 1.3.8 s užitím intenzit čar atomárního kyslíku O (844 nm) a argonu Ar (750 nm) jsme ze známé koncentrace argonu [18] spočetli koncentraci atomárního kyslíku. Další zajímavou hodnotou je poměr takto spočtené koncentrace a koncentrace molekulárního kyslíku v leptací směsi, který bychom mohli nazvat efektivitou atomarizace kyslíku. Koncentrace atomárního kyslíku se zvyšujícím se průtokem O_2 roste. V daném rozsahu měření byl poměr O/O_2 nejvyšší pro námi zvolený poměr $Ar/O_2 = 0.5/2.5$.

Chemické složení povrchové vrstvy - XPS: Vzorky opracované plazmatem v různých leptacích směsích jsme proměřili XPS a tím určili složení povrchové vrstvy. Výsledky měření jsou uvedeny na obr. 5. Rozklad uhlíkového peaku C 1s na jednotlivé komponenty pro určení zastoupení různých vazeb, ve kterých se C ve vrstvě vyskytuje je na obr. 6. Pro ilustraci je tento rozklad ukázán na obr. 7.

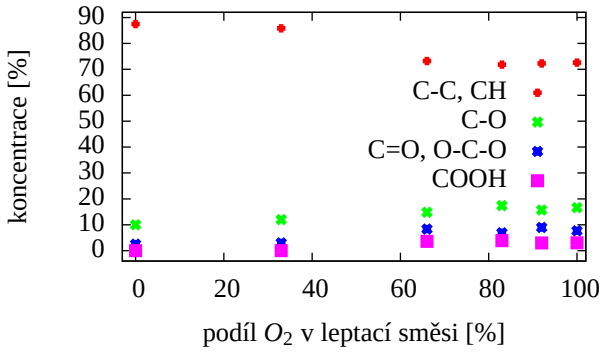
Z grafů vidíme, že od 66% kyslíku ve směsi je celkové množství kyslíku ve vrstvě konstantní. Stejný trend je vidět v případě rozkladů C 1s spekter - od 66% O_2 v leptací směsi se zastoupení jednotlivých vazeb uhlíku již nemění. Tyto výsledky naznačují, že s měnící se koncentrací atomárního kyslíku dochází ke změně rychlosti leptání avšak mechanizmus leptání je ve směsích obsahujících dostatečné množství kyslíku podobný.

2.1.3 Závislost na tlaku

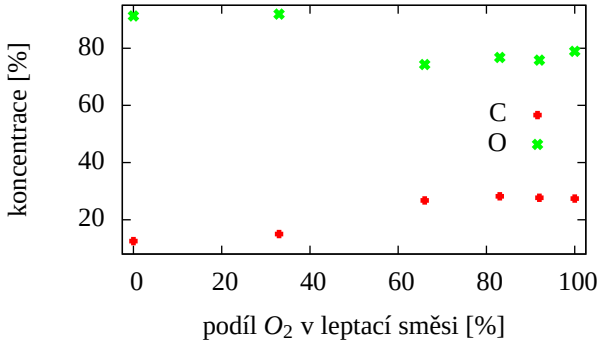
Doposavad jsme leptací proces optimalizovali z pohledu poměru argonu a kyslíku ve směsi a ostatní parametry jako tlak a výkon jsme nechávali neměnné. Tento postup jsme volili, protože se dalo očekávat, že na leptací směsi bude leptání velmi závislé, navíc nemonotóně, zatímco závislost na ostatních parametrech bude slabá. K ověření tohoto předpokladu byly změřeny leptací rychlosti při tlacích 3, 5, 6, 7.5 a 9 Pa za konstantního výkonu 60 W a konstantním poměru směsi $O_2/Ar = 0.5/2.5$ sccm. S těmito parametry bylo provedeno leptání vzorků, u kterých byla následně určena změna tloušťky a proměřena povrchová vrstva pomocí XPS.

Chemické složení vrstev plazmového polymeru leptaných za různých tlaků v daném rozsahu prakticky neliší, stejně tak rychlost leptání byla při různých tlacích v rámci chyby měření konstantní a to $\sim$

[18] kterou známe, neboť Ar je inertní plyn



Obr. 5: Závislost zastoupení různých vazeb na leptací směsi (leptáno při tlaku 5 Pa celkovém průtoku 3 sccm a výkonu 60 W po dobu 5 min)



Obr. 6: Závislost koncentrace uhlíku (C) resp. kyslíku (O) v povrchové vrstvě plazmového polymeru na leptací směsi (leptáno při tlaku 5 Pa celkovém průtoku 3 sccm a výkonu 60 W po dobu 5 min)

10 nm/min. Z tohoto důvodu jsme pro další experimenty zvolili pracovní tlak 3 Pa který jsme použili při předchozím studiu leptání v závislosti na složení směsi.

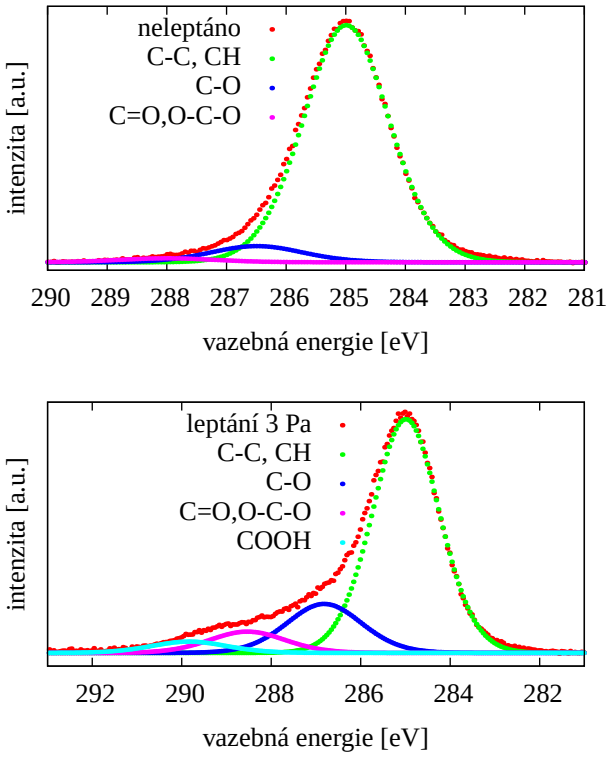
2.1.4 Změna vlastností vrstev vlivem leptání

Po nalezení vhodných podmínek pro leptání, kdy je leptací rychlost v dané oblasti parametrů maximální, se můžeme zaměřit na změny povrchových vlastností vrstev plazmového polymeru vlivem působení kyslíkového plazmatu.

Vrstvy plazmového polymeru připravené postupem popsaným v 2.1.1 jsme leptali kyslíkovým plazmatem[19] po různou dobu a následně měřili, jak se smáčivost (WCA) a složení povrchové vrstvy (XPS) tímto působením mění v závislosti na době leptání.

Smáčivost: Měřili jsme statický kontaktní úhel vody po ustálení (10 s). WCA na nadeponovaných

[19]hořícím při výkonu 60 W, tlaku 3 Pa a leptací směsi $O_2/Ar = 0.5/2.5$ sccm



Obr. 7: Ukázka rozkladu uhlíkového peaku na jednotlivé komponenty representující výskyt uhlíku v různých vazbách. Měření před leptáním (horní), po leptání (dolní) (při tlaku 5 Pa celkovém průtoku 3 sccm a výkonu 60 W po dobu 5 min ve směsi $Ar/O_2 = 0.5/2.5$ sccm)

vrstvách před leptáním byl $(100 \pm 2)^\circ$. Obecně se po opracování kyslíkovým plazmatem snížil, čím déle byl materiál leptání vystaven, tím více klesl. Tytéž vzorky byly proměřeny druhý den[20]. Konkrétní hodnoty poklesu WCA po leptání a následné stárnutí vrstvy uvádí tab. 2. U vzorků leptaných 40 s a 5 min bylo měření provedeno i osmý den po leptání.

Tabuľka 2: Změna WCA, původní $(100 \pm 2)^\circ$, po různě dlouho trvajícím leptání kyslíkovým plazmatem[19]. Měření bylo opakováno i s časovým odstupem a bylo pozorováno stárnutí vrstev. Nejistota měření je $\sim 2^\circ$.

den	10 s	30 s	40 s	1 min	5 min
1.	29°	27°	23°	17°	10°
2.	32°	31°	26°	27°	25°
8.			40°		35°

Z výsledků je vidět, že změny způsobující výrazné snížení kontaktního úhlu s časem relaxují. Při krátkodobém vystavení plazmového polymeru leptání je jed-

[20]Měření nebyla prováděna na stejných místech, šlo o paralelní nepřekrývající se řady kapek rovnoběžných se směrem zasouvání sklíčka do plazmatu.

nak pokles WCA menší, jednak je změna méně stabilní.

2.2 Kovové klastry

Jak je zmíněno na začáku druhé kapitoly, kovové klastry mohou vykazovat anomální absorpci způsobenou plasmonovou resonancí. Tu můžeme popsat Drude-Somerfeldovým modelem vodivosti kovů [8], kde se vodivostní elektrony chovají jako ideální plyn: jsou volné (neuvažuje se působení iontů), nezávislé (zanedbává se vzájemná interakce), srážky jsou okamžité a bezpaměťové. Klastry omezí možnost pohybu tohoto plynu na malou oblast. Budeme -li elektromagnetickým zářením působit na strukturu klastrů, vzniknou v důsledku omezení pohybu podélné kmity v kovové částici a bude existovat frekvence, související s velikostí klastru, permitivitami kovu a okolí apod., při které se energie do podélných kmitů předá nejlépe - to nazýváme resonancí a částicím odpovídajícím popsanému vlnění říkáme plazmony. Elektromagnetické záření tedy předá energii kmitům v klastru, což makroskopicky pozorujeme jako absorpci. Poloha této absorpce závisí jednak na velikosti jednotlivých klastrů jednak na kolektivním chování, které se liší podle toho, jakým způsobem vrstva roste a klastry agregují.

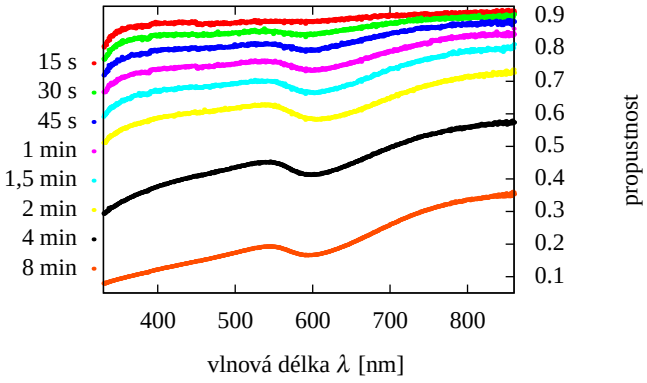
Například u mědi a stříbra je resonanční frekvence v oblasti vlnových délek, na kterých pracují lasery užívané pro různá měření. Přesná poloha, jak již bylo naznačeno, závisí nejen na velikosti klastrů, jejich tvaru a druhu kovu, ale i na vlastnostech materiálu, který klastry obklopuje.

Příprava vzorků: Kovové klastry byly deponovány pomocí nanoklastrového zdroje Haberlandova typu. (viz oddíl 1.2.3). Byl použit měděný terč, neboť Cu klastry jsou jedním ze studovaných materálů pro SERS a zároveň je to zajímavý materiál i z pohledu bioaplikací pro své antibakteriální účinky. Zejména je vyzdvihována nižší toxicita mědi a její nižší cena v porovnání s často užívaným stříbrem [15].

Jako podložky bylo použito jednak sklo pro následné měření smáčivosti a optické propustnosti UV-VIS, jednak leštěný křemík pro proměření AFM a SEM. Po optimalizaci depozičního procesu[21] byl tlak v komoře nastaven na 50 Pa, proud magnetronem na 200 mA, čemuž odpovídalo napětí $\sim$ 270 V. Stálost rychlosti naprašování byla kontrolována pomocí krystalového měřiče tloušťky [22] umístěného naproti výstupní štěrbině agregační komory.

[21] kterou se zde nezabýváme neb nebyla předmětem této práce

[22] Princip tohoto měření je popsán v oddíle 1.3.7.



Obr. 8: Propustnost vrstvy kovových klastrů deponovaných různou dobu pro vlnové délky 350 - 900 nm

2.2.1 Vlastnosti klastrů

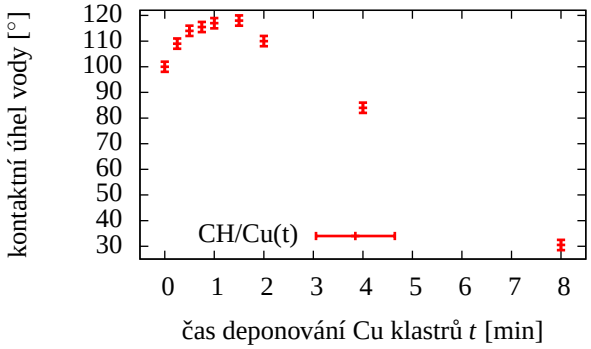
UV/VIS spektroskopie: Měděné klastry deponované na sklo různý čas byly proměřeny na UV-VIS spektrometru. Na obr. 8 je vynesena závislost propustnosti na vlnové délce pro klastrové vrstvy s příslušnými dobami depozice. Vidíme, že v okolí vlnové délky 600 nm skutečně pozorujeme anomální absorpci. S rostoucí depoziční dobou, tedy s rostoucí vrstvou, klesá přirozeně propustnost v celé oblasti vlnových délek - vrstva byla i pouhým okem méně průhledná. Zároveň se stává výraznějším i absorpční minimum, což je efekt, na který se cílí.

Smáčivost: Při snaze zjistit WCA kovových klastrů nadeponovaných na skle se projevila již zmiňovaná nízká stabilita vrstev. Nanesená kapka vody odplavovala klastry v místě kontaktu povrchů a z měření je tak těžko usuzovat na vlastnosti nesmočené vrstvy. Smáčivost a další vlastnosti kovových klastrů byly proto zkoumány již v rámci kompozitních vrstev.

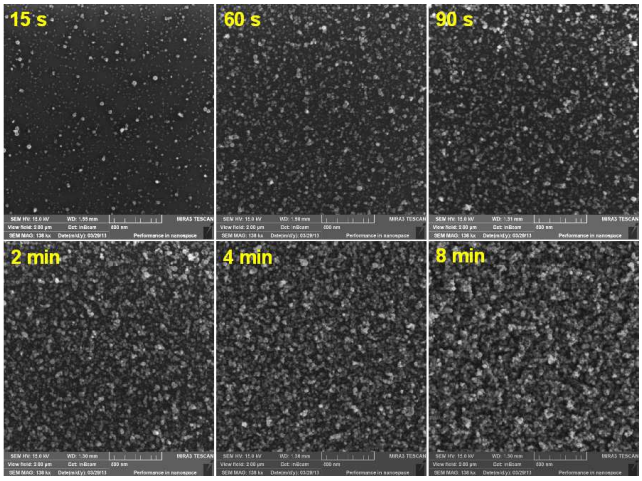
2.3 Nanokompozitní vrstvy

2.3.1 Vlastnosti klastrů v kompozitní vrstvě

Pro měření WCA byly připraveny různě silné vrstvy klastrů, ovšem sklo (křemík) byly nejprve překryty vrstvou plazmového polymeru ($\sim$ 7 nm). Deponované klastry se do připravené matrice pevněji zabudovaly a při měření smáčivost měli menší tendenci migrovat. Na obr. 9 je vynesena závislost WCA na době depozice vrstvy klastrů na plazmově polymerní matrici. Po nanesení kapky vody jsme systém nechali vždy 10 s ustálit. U velkých depozičních časů (8 min) jsme



Obr. 9: Závislost WCA vrstvy klastrů na plazmovém polymeru (∼ 7 nm) na době depozice klastrů



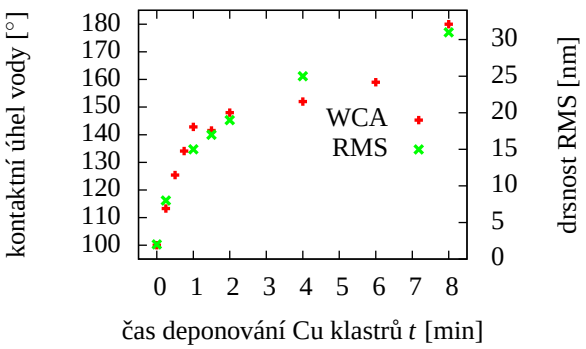
Obr. 10: Snímky vrstev CH(7 nm)/Cu(t) ze SEM

opět pozorovali unášení klastrů vodou na rozhraní. Vrstva byla pravděpodobně tak silná, že svrchní klastry již nebyly v kontaktu s polymerní matricí a vrstvy klastr/klastr jsou pravděpodobně stejně nestabilní jako vrstvy sklo/klastr.

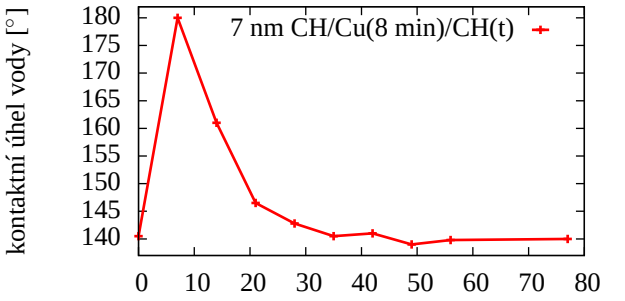
Stejným způsobem byly připraveny vzorky CH(7 nm)/Cu(t) na leštěný křemík a proměřeny na SEM. Snímky jsou na obr. 10

2.3.2 Klastry překryté plazmovým polymerem

Superhydrofobní vrstvy: V předchozím oddíle jsme zkoumali morfologii samotných klastrů. Jak bylo zmíněno v sekci 1.3.5, lze zdrsněním povrchu hydrofobních materiálů připravit superhydrofobní (SHF) vrstvy . Za tímto účelem jsme připravli vrstvy - plazmový polymer (7 nm)/měděné klastry (různé časy depozice)/ plazmový polymer (7 nm) a to jak na sklo, pro měření WCA, tak na křemík, pro měření AFM a SEM. Na obr. 11 jsou vyneseny honoty WCA (levá y-ová osa) a drsnosti (RMS - pravá y-ová osa) z měření AFM v závislosti na době depozice klastrů.



Obr. 11: Závislost WCA (levá y-ová osa) a drsnosti RMS (pravá y-ová osa) na době depozice klastrů ve vrstvách 7 nmCH/Cu(t)/7 nm CH

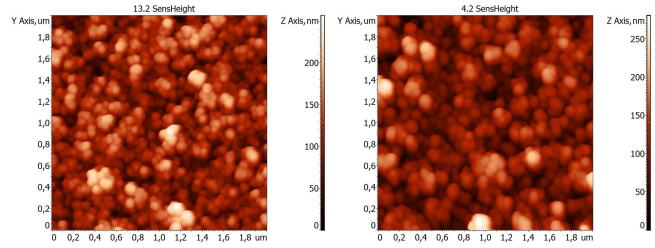


Obr. 12: Vymizení SHF s rostoucí tloušťkou překryvové vrstvy CH ve vrstvách CH(7 nm)/Cu(8min)/CH

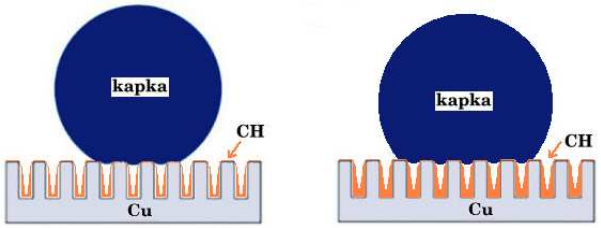
Vrstvy, kde byly klastry deponovány 8 a více minut byly SHF. Na grafu lze rovněž vidět pozitivní korelaci mezi WCA a RMS, kterou předpovídá Cassie-Baxterův model smáčivosti. Tímto měřením jsme tedy jednak podložili teoretický model, jednak dosáhli aplikačně zajímavých výsledků.

Vymizení superhydrofobicity: Aby kompozitní vrstvy CH/Cu/CH zdědily morfologii vrstvy klastrů (zvětšila se drsnost), je důležité vymezit, kdy je vrstva překryvového plazmového polymeru ještě dostatečně tenká. Superhydrofobního chování jsme dosáhli při překrytí klastrů sedmi nanometrovou vrstvou polymeru. Dále nás zajímalo, jak se budou povrchy chovat při silnějších překryvových vrstvách. Měřili jsme WCA na vrstvách CH(7 nm)/Cu(8min)/CH v závislosti na tloušťce svrchní vrstvy polymeru. Na obr. 12 můžeme pozorovat, že kontaktní úhel s rostoucí tloušťkou svrchního CH od sedmi nanometrů klesal a od ∼ 40 nm se ustálil na hodnotě ∼ 140°.

Snižování WCA s rostoucí překryvovou vrstvou polymeru souvisí se změnou drsnosti povrchu vrstvy. Pro podložení této hypotézy jsme pořídili snímky z



Obr. 13: AFM - 7 nm CH/Cu(8min)/7 nm CH (vlevo), 7 nm CH/Cu(8min)/35 nm CH (vpravo)



Obr. 14: chování kapek s přibývající vrstvou CH

AFM a SEM v lomu.

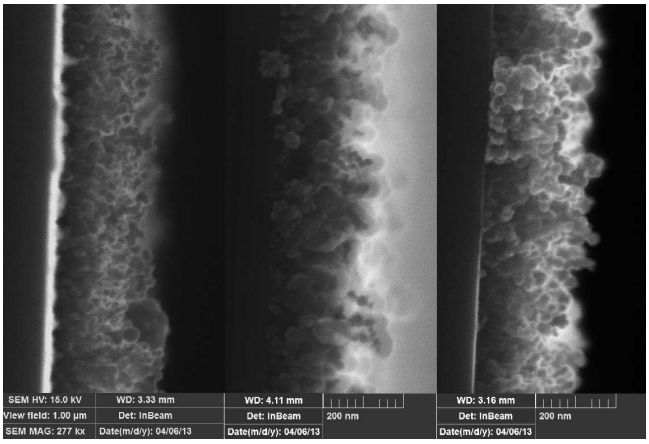
Z AFM jsme dostali hodnoty RMS drsnosti a stejně jako u pozorování vzrůstu superhydrofobicity s množstvím nadeponovaných klastrů, kde jsme pozorovali korelaci v souladu s teorií, porovnali jsme i zde honoty kontaktních úhlů a RMS pro vzorky s různými překryvovými vrstvami. Žádnou korelaci dat jsme však nepozorovali.

Plazmový polymer vyplňuje postupně póry mezi klastry, jak ilustruje obr . 14. Právě pórovitost hraje v Cassie-Baxterově modelu superhydrofobicity klíčovou úlohu. Změna morfologie zapříčiněná tímto procesem však zřejmě není popsatelná hodnotou RMS (která je navíc jen jednou statistickou veličinou) na AFM s tímto rozlišením.

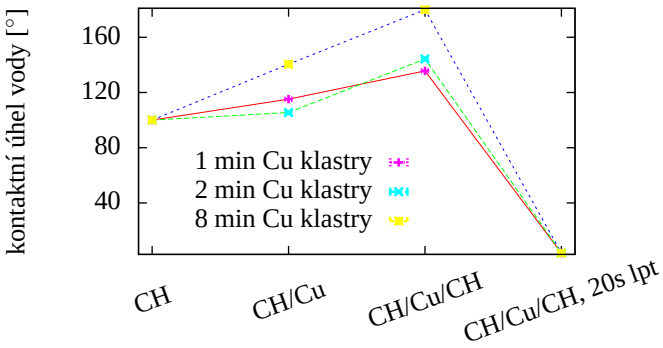
Oprávněnost tvrzení, že pokles kontaktního úhlu je dán morfolií, jejíž změnu nelze popsat RMS, podkládáme proto vizuálním výstupem měření AFM na obr. 13, kde vidíme, že struktura klastrů vlevo je ostřejší než struktura vpravo. A také snímkem SEM v lomu (obr. 15), kde můžeme porovnat dokonce nepřekryté klastry s vrstvami překrytými 7 a 35 nm.

Leptáním SHF vrstvy 7 nmCH/Cu(8 min)/7 nm CH klesl WCA na honoty $\sim 4°$[23], tedy ze SHF povrchu se stal superhydrofilní. Toto pozorování je rovněž v soulasu s Cassie-Baxterovým modelem - leptané vrstvy plazmového povrchu mají kontaktní úhel pod 90° (viz. tab. 2). Vytvořením tohoto materiálu na povrchu s vhodným typem drsnosti lze vnik superhydrofilní vrstvy očekávat.

[23] Přesnost určení kontaktního úhlu u takto reaktivních povrchů je obtížné, systém není ve sabilní rovnováze.



Obr. 15: SEM v lomu: [vlevo] CH/Cu(8min), [uprostřed] CH/Cu(8 min)/CH(35 nm), [vpravo] CH/Cu(8 min)/CH(7 nm)



Obr. 16: WCA plazmově polymerní vrstvy a kompozitních vrstev s různými dobami depozice měděných klastrů.

Závěr

Zkoumali jsme interakci chemicky aktivního kyslíkového plazmatu s vrstvami plazmového polymeru. Nalezli jsme optimální podmínky pro tento proces a proměřili změny vlastností vrstev plazmového polymeru (smáčivosti a chemického složení) způsobené leptáním. Zabývali jsme se vlastnostmi měděných klastrů (optickou propustností a morfologií). Kombinací vstev plazmového polymeru a měděných klastrů se nám podařilo připravit superhydrofobní vrstvy, které po odleptání přešly na superhydrofilní. Byl pozorován efekt vymizení superhydrofobních vlastností, pokud byla překryvová vrstva plazmového polymeru příliš silná.

Na obr. 16 jsou pro shrnutí vyneseny WCA různých vrstev - čistě polymerních, měděných klastrů (různé doby depozice) v polymerní matrici, klastrů s různou dobou depozice překrytých sedmi nanometry polymeru a nakonec tytéž vrstvy opracované 20 s v kyslíkovém plazmatu.

Literatúra

[1] ECKERTOVÁ, Ludmila: *Physics of thin films*, second edition, SNTL 1986

[2] O. Polonskyi, P. Solař, O. Kylián, M. Drábik, A. Artemenko, J.Kousal, J. Hanuš, J. Pešička, I. Matolínová, E. Kolíbalová, D. Slavínská, H. Biederman: *Nanocomposite metal/plasma polymer films prepared by means of gas aggregation cluster source*, Thin Solid Films (2011)

[3] VIKOVÁ, Martina: studijní materiál "9smac1.pdf"

[4] V. AUBRECHT: *Fyzika a diagnostika plazmatu* . Olomouc 2008. Habilitační práce na Univerzitě Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta.

[5] J. HANUŠ: *Depozice homogenních plazmově polymerních systémů*. Matematicko-fyzikální fakulta UK v Praze 2003

[6] http://www.ntmdt.com/spm-principles/view/semicontact-error-mode

[7] http://en.wikipedia.org/wiki/Surface_roughness

[8] N.W.ASHCROFT, N.D. MEMIN: *Solid State Physics*, Sounders college publishing, 1975

[9] H. YASUDA: *Plasma polymerization*, Academic Press 1985

[10] J. HANUŠ: *Měření tloušťky tenkých vrstev, drsnosti a povrchové energie*, přednáška 20.3.2013

[11] H FUJIWARA, *Spectroscopic ellipsometry: principles and applications*, John Wiley & Sons Ltd., 2007

[12] F.D.EGITTO, *Plasma etching and modification of organic polymers*, Pure & Appl Chem., Vol 62, No. 9, pp. 1699-1708, 1990

[13] J.F.BATTNEY, *IEEE Transcription on Electron Devices. ED - 24(2)*, 140 - 146 (1977)

[14] LYDIE SALSAC, THOMAS NELIS: *Glow Discharges – Introduction to Glow Discharges*, Glow Discharge dot Com

[15] KVÍTEK L.: *Studium přípravy a aplikačních možností nanočástic stříbra*. Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, Vysoké učení technické v Brně

Tlakem indukované změny v magnetickém chování sloučenin typu $RECo_2$

Jaroslav Valenta[1]*
Školitel: Jiří Prchal[1]‡

[1] MFF UK, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2, Česká republika

Abstrakt

Předmětem našeho studia byly tlakové změny ve sloučenině $HoCo_2$ a v substituovaném vzorku $Ho(Co_{1-x}Si_x)_2$, kde x = 0,025. Provedená měření elektrického odporu, tepelné kapacity, magnetizace a střídavé magnetické susceptibility za atmosférického tlaku u sloučeniny $HoCo_2$ ukázaly výskyt dvou magnetických přechodů: změnu snadného směru magnetizace při teplotě $T_R \sim 16$ K a Curieovu teplotu $T_C \sim 80$ K. Dále byla pozorována anomálie odpovídající přetočení magnetizace magnetických klastrů Co do směru shodného se směrem magnetických momentů Ho při teplotě $T_f \sim 125$ K. Působením hydrostatického tlaku až 3 GPa se všechny stanovené teploty posouvají, a to T_R do vyšších teplot, zatímco T_C a T_f klesají. Za příčinu změny stanovených teplot je považováno slábnutí Co magnetizmu a síla výměnné interakce mezi Ho-Co podmřížemi. Experiment mionové spinové rotace prokázal vliv tlaku i na rozpad magnetických klastrů Co při teplotě $T^* > T_f$ klesající do nižších teplot při zvyšování tlaku. Odtud je patrné, že tlak přímo ovlivňuje i výměnnou interakci mezi Co-Co.

Klíčová slova: vzácná zemina, $HoCo_2$, magnetické uspořádání, hydrostatický tlak, parimagnetismus

1 Úvod

$RECo_2$ (RE = vzácná zemina) krystalizuje v kubické Lavesově fázi typu $MgCu_2$ (C15) s prostorovou grupou Fd-3m. Tyto sloučeniny jsou zajímavé především díky dvěma druhům přítomného magnetizmu. RE má lokalizovaný 4f magnetický moment, zatímco Co magnetizmus je indukovaný rozštěpením spinových podpásů, které závisí na vnitřním poli. Naproti tomu ve sloučeninách $REFe_2$ je pro Fe splněno Stonerovo kritérium vždy a proto je Fe magnetický moment nezávislý na vnitřním poli [M. S. S. Brooks et al., 1991], zatím co v $RENi_2$ je pro Ni podmínka pro vznik feromagnetizmu daná Stonerovým kritériem velmi vzdálená [F. Garcia et al., 1998]. Ve sloučeninách $RECo_2$ je pro Co Sonerovo kritérium téměř splněno, a proto je vznik Co magnetického momentu závislý na vnitřním poli a lokalizovaných 4f momentech na RE.

Ve sloučeninách $RECo_2$, kde se na místě vzácné zeminy vyskytuje Y nebo Lu (nemagnetické RE), je pozorovaný Pauliho paramagnetizmus a metamagnetický přechod v nízkých teplotách a vysokých magnetických polích ~ 70 T [T. Goto et al., 1994]. Pokud mají RE magnetický moment (RE = Ce až Yb), indukce Co magnetického momentu je dosaženo díky silnému vnitřnímu magnetickému poli od 4f magnetických momentů RE. Pod Curieovou teplotu T_C jsou obě magnetické podmřížky RE a Co feromagnetické. Magnetické momenty lehkých RE a Co se vůči sobě uspořádávají paralelně, zatím co u sloučenin obsahující těžké RE je mezimřížková interakce antiferomagnetická a vede k výslednému feromagnetickému pořádku.

V případě RE = Dy, Ho, Er nastává při Curieově teplotě T_C fázový přechod 1. druhu [S. Kmhelevskyi and P. Mohn, 2000]. Vlivem zvýšení intenzity molekulárního pole od feromagneticky uspořádaných 4f magnetických momentů nastává itinerantní magnetický přechod Co podmříže. Tento jev se objevuje při určitých hodnotách mřížových parametrů a pod jistou velikostí teploty uspořádání [S. Kmhelevskyi and P. Mohn, 2000]. Změny charakteru fázového přechodu na 2. druh lze dosáhnout ředěním RE nebo Co podmříže atomy jiných prvků [R. Houser et al., 2000] a nebo aplikací vnějšího tlaku [O. Syshchenko et al., 2001].

V nedávné době byla provedena detailní studie sloučeniny $ErCo_2$ [J. Herrero-Albillos et al., 2007] s výsledkem potvrzení výskytu Co magnetického momentu i nad teplotou magnetického uspořádání. Pomocí experimentu magnetického dichroismu (XMCD) bylo zjištěno, že Co magnetický moment přetrvává i v paramagnetické oblasti a ponechává si svojí antiparalelní orientaci vůči erbiovému magnetickému momentu do teploty $T_f > T_C$. Tato konfigurace byla následně nazvána parimagnetickou [J. Herrero-Albillos et al., 2007]. Teplota, při níž se obracejí Co magnetické momenty do směru shodného s Er magnetickými momenty a aplikovaným magnetickým polem se nazývá

* valeja@centrum.cz
‡ prchal@karlov.mff.cuni.cz

flipping temperature T_f (teplota překlopení). Anomálie spojená s T_f je pozorovaná i v měření střídavé magnetické susceptibility ve velmi malém či nulovém vnějším magnetickém poli [J. Herrero-Albillos et al., 2007].

Existence Co magnetického momentu a parimagnetického uspořádání se prokázala i ve sloučeninách $DyCo_2$, $HoCo_2$ a $TmCo_2$ [C. M. Bonilla et al., 2013]. Měření maloúhlového neutronového rozptylu (SANS) prokázalo přítomnost krátkodosahové korelace mezi magnetickými momenty kobaltu ve sloučenině $ErCo_2$ a $HoCo_2$. Velikost korelační délky, a tedy i velikost magnetických kobaltových klastrů, je v okolí T_f přibližně 7 Å u obou vzorků [J. Herrero-Albillos et al., 2007]; [C. M. Bonilla et al., 2012]. Velikost magnetických klastrů s rostoucí teplotou klesá a změřená teplota zániku magnetických klastů je T^*_{SANS} = 160 K pro $ErCo_2$ [J. Herrero-Albillos et al., 2007]. Na sloučenině $ErCo_2$ byl proveden tlakový experiment do 3 GPa. Ukázal tlakový vývoj teploty T_f s tlakovým koeficientem $\partial T_f/\partial p$ ~ -4,5 K/GPa [M. Míšek et al., (2012)].

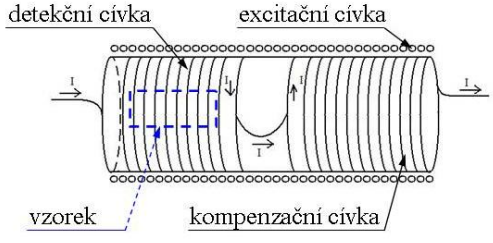
Mikroskopický experiment mionové spinové rotace (μSR), provedený na sloučenině $ErCo_2$, ukazuje přítomnost silných krátkodosahových korelací pod teplotou T^* ~ 127 K. Záznam měření mionové spinové rotace obsahuje nad Curieovou teplotou T_C dvě složky středního lokálního magnetického pole. Jedna složka odpovídá mionové depolarizaci od náhodně se orientujících (paramagnetických) Er magnetických momentů a druhá složka ukazuje přítomnost spin-spinových (klastrových) korelací. Se zmenšujícími se spinovými korelacemi rapidně klesá příspěvek druhé složky a nad teplotou T^* zůstává pouze příspěvek od náhodně orientovaných Er magnetických momentů [C. M. Bonilla et al., (2011)].

2 Experimentální metody

Uvedené polykrystalické vzorky $HoCo_2$ a $Ho(Co_{1-x}Si_x)_2$, x = 0,025 byly připraveny z čistých prvků Ho (čistota 3N), Co (čistota 4N5) a Si (čistota 6N) v jednoobloukové peci. Polykrystalické vzorky byly žíhány, zabalené v tantalové folii uvnitř vyečerpané ampule (vakuum řádu 10^{-3} Pa) z křemenného skla, při teplotě 950 °C po dobu 240 hodin. Provedená charakterizace vzorků (rentgenová prášková difrakce, skenovací elektronová mikroskopie a energeticky disperzní rentgenová analýza) ukázala výskyt feromagnetické fáze $HoCo_3$ v množství do 3%, a čisté Ho do 1% u sloučeniny $HoCo_2$. Ve sloučenině $Ho(Co_{1-x}Si_x)_2$, x = 0,025 bylo objeveno malé množství cizí feromagnetická fáze $Ho(Co_{1-x}Si_x)_3$, x = 0,025.

Měření v atmosférickém tlaku bylo provedeno v aparaturách: a) PPMS14 T (Quantum Design, magnetické pole do 14 T, rozsah měřených teplot 1,8 – 350 K), b) MPMS7 (magnetometr se SQUIDovým detektorem, Quantum Design, magnetické pole do 7 T, rozsah měřených teplot 1,8 – 400 K) a c) Closed Cycle Refrigerator (CCR, Janis Research, rozsah teplot 4,5 – 325 K). Elektrický odpor byl měřen standardní čtyřbodovou metodou v aparaturách PPMS14 T a CCR. Měrné teplo se měřilo v aparatuře PPMS relaxační metodou. Střídavá magnetická susceptibilita byla měřena v aparatuře MPMS7 s frekvencí 9 Hz, jež dávala nejlepší poměr šum vs. signál vzorku.

Měření za vysokého hydrostatického tlaku se provádělo pomocí dvou typů tlakových cel: a) jednovrstvá tlaková cela (z CuBe bronzy), s nominálním tlakem do 1,2 GPa, která byla zkonstruovaná pro měření v aparatuře MPMS7 [J. Kamarád et al., 2004]. U tohoto typu cely byl použit vřetenový olej OL3 jako tlakové výměnné médium, a tlak byl určen pomocí tlakové závislosti supravodivého přechodu olova. b) Druhým typem použité tlakové cely je dvouvrstvá tlaková cela (vyrobená z NiCrAl a z CuBe bronzy), s nominálním tlakem do 3 GPa, která je navržena pro měření v aparaturách PPMS14 T a CCR. Jako tlakové výměnné médium pro tento typ tlakové cely byl použit olej Daphne 7373 a tlak uvnitř cely se určoval manganinovým manometrem. Měření střídavé magnetické susceptibility za hydrostatického tlaku do 3 GPa se provádělo s použitím dvojvrstvé tlakové cely a vlastnoručně vyrobeného miniaturního detekčního setu cívek zobrazeného na Obr. **1** vsazeného dovnitř tlakové cely. Miniaturní detekční set cívek je vyroben z 50 μm Cu drátku a skládá se ze dvou hlavních částí. Vnitřní cívka je v tzv. gradientním uspořádání obsahující dvě cívky – detekční cívka, v níž je zafixován vzorek a kompenzační cívka, která je vinuta stejným drátkem, ale v opačném smyslu (obě cívky mají stejný počet závitů ~ 50). Vnější (excitační) cívka je vinuta přes celý set vnitřních cívek a zastává funkci indukce excitačního střídavého magnetického pole. Měření střídavé magnetické susceptibility s miniaturním detekčním setem cívek bylo měřeno v aparatuře CCR s použitím lock-in zesilovaže (Stanford Research, model SR830) generujícího výstupní napětí o amplitudě 0,5 V a frekvenci 234 Hz do obvodu excitační cívky.



Obr. 1: Popis detekčního setu cívek.

Experiment mionové spinové rotace (μSR) byl proveden na vzorku $HoCo_2$ v institutu PSI (Paul Scherrer Institut) na zařízení GPD (General Purpose Decay-Channel Spectrometer) s použitím tlakové cely (ze slitiny označené MP35N) s nominálním tlakem do 2,0 GPa. Jako výměnné tlakové médium u této cely byl použit olej Daphne 7373 a tlak uvnitř cely byl stanoven pomocí tlakové závislosti supravodivého přechodu india.

V μSR experimentu je mionový paprsek, který je téměř 100% polarizovaný, naveden do vzorku. Mion se následně usadí zpravidla v některé z intersticiálních poloh krystalové mříže a jeho spin začne interagovat s lokálním magnetickým polem daným symetrií krystalového pole v dané pozici. Po uplynutí doby života se mion rozpadá na pozitron, elektronové neutrino a mionové antineutrino. Směr vyzářeného pozitronu je převážně určen orientací mionového spinu před rozpadem částice. Pozitrony jsou následně detekovány v určitých časech detektory vpředu (F) a vzadu (B) vůči původnímu směru mionů. Tomu odpovídají změřené histogramy $N_F(t)$ a $N_B(t)$. Jelikož rozpad mionu je radioaktivní proces, součet obou histogramů dává exponenciální závislost. Pro lepší znázornění mionové polarizace se zavádí asymetrická funkce $A(t)$ vztahem:

$$A(t) = \frac{N_F(t) - N_B(t)}{N_F(t) + N_B(t)}. \qquad (1)$$

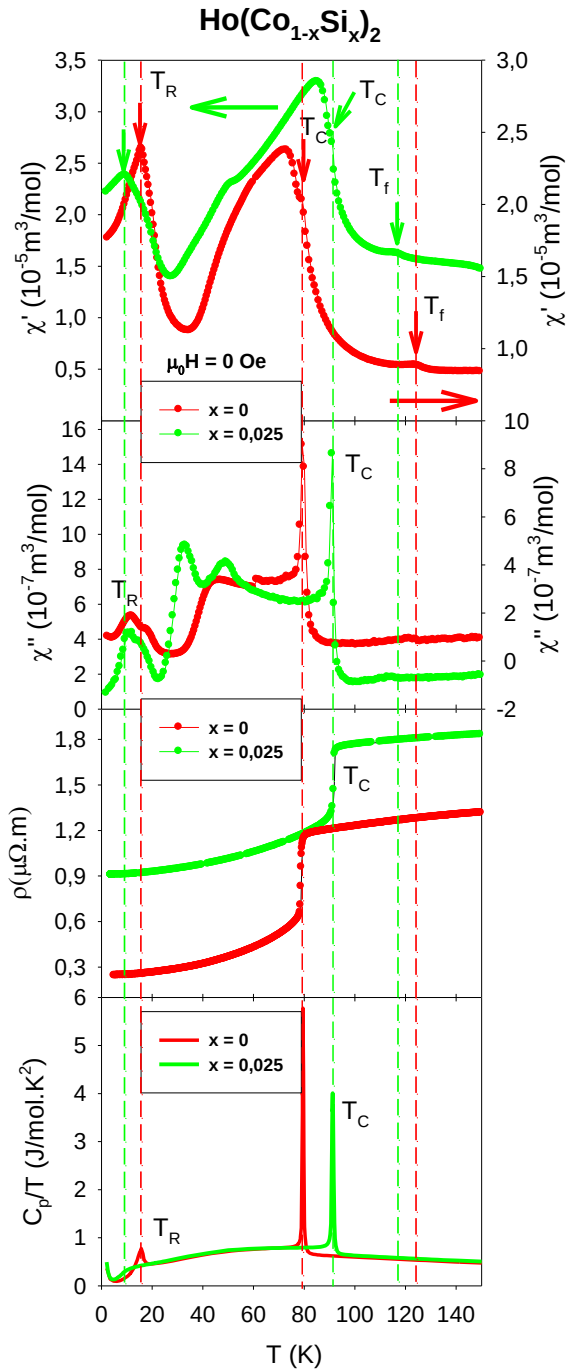
3 Experimentální výsledky

3.1 Atmosférický tlak

V měřených teplotních závislostech střídavé magnetické susceptibility, elektrického odporu a měrného tepla jsou pozorovány tři anomálie - viz Obr. 2.

V nízkých teplotách je pozorována anomálie kolem teploty T_R u obou vzorků v datech střídavé magnetické susceptibility, viz Obr. 2. Anomálie je projevem změny snadné osy magnetizace ze směru [110] do [100] při ohřevu [E. Gratz, (1983)]. Teplota, při níž nastává změna snadné osy magnetizace, se nazývá teplota spinové reorientace T_R a odpovídá teplotě $T_R = (16{,}4 \pm 0{,}5)$ K pro $HoCo_2$ a $T_R = (8{,}0 \pm 0{,}7)$ K pro $Ho(Co_{1-x}Si_x)_2$, x = 0,025.

Další pozorovaná anomálie se vyskytuje ve všech měřeních a je projevem magnetického uspořádání na dlouhou vzdálenost při Curieově teplotě T_C. Z dat měrného tepla (viz Obr. 2) vidíme, že je fázovým přechodem prvního druhu. Stanovené Curieovy teploty pro oba vzorky jsou $T_C = (79{,}5 \pm 0{,}1)$ K pro $HoCo_2$ a $T_C = (91{,}2 \pm 0{,}2)$ K pro $Ho(Co_{1-x}Si_x)_2$, x = 0,025. V změřených datech elektrického odporu se magnetický fázový přechod projevuje rapidním poklesem v okolí T_C. Tento pokles je přisuzován náhlé změně hustoty 3d(Co) stavů na fermiho mezi E_F (metamagnetický přechod) [O. Syshchenko et al., 2001].



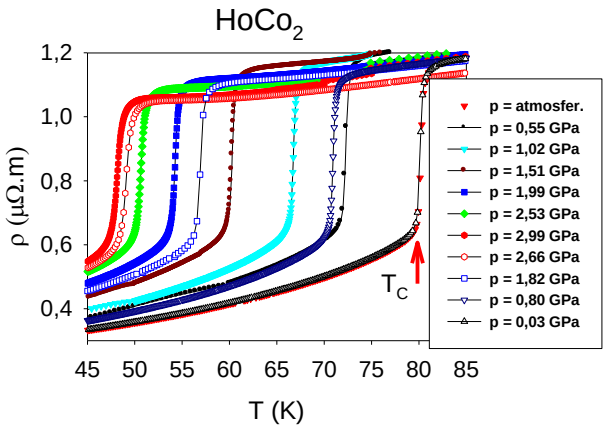
Obr. 2: Teplotní závislosti střídavé magnetické susceptibility (reálná χ' a imaginární část χ''), elektrického odporu a měrného tepla.

Nad Curieovou teplotou T_C v paramagnetické oblasti je pozorovaná anomálie při teplotě $T_f = (125 \pm 1)$ K pro $HoCo_2$ a $T_f = (117 \pm 1)$ K pro $Ho(Co_{1-x}Si_x)_2$, x = 0,025. Anomálie je pozorovaná pouze v datech střídavé magnetické susceptibility a je velice citlivá na vnější magnetické pole. Její

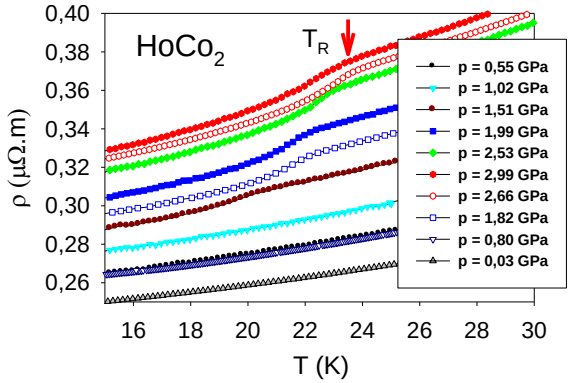
původ je v překlopení magnetizace Co klastrů do směru shodného se směrem Ho magnetických momentů [C. M. Bonilla et al., 2012]. Se substitucí Si na pozici Co atomu se teplota T_f posunula do nižších teplot.

3.2 Hydrostatický tlak, $HoCo_2$

Teplotní závislost elektrického odporu při hydrostatickém tlaku do 3 GPa ukazuje monotónní vývoj skokové změny hodnot el. odporu při T_C (viz Obr. 3). Aplikací hydrostatického tlaku se T_C posouvá k nižším teplotám a pozorovaná je také zmenšující se výška rapidní změny el. odporu, což je v souladu s předchozími výsledky [O. Syshchenko et al., 2001]. Při vyšších hydrostatických tlacích se v záznamu el. odporu objevila anomálie, jejíž teplota je velice blízká určeným teplotám spinové reorientace T_R (viz Obr. 4) z měření AC-magnetické susceptibility. S dalším zvyšováním tlaku se teplota T_R posouvá k vyšším teplotám a stává se hůře identifikovatelnou. Potlačení anomálie kolem T_R bylo popsané již v literatuře [O. Syshchenko et al., 2001].

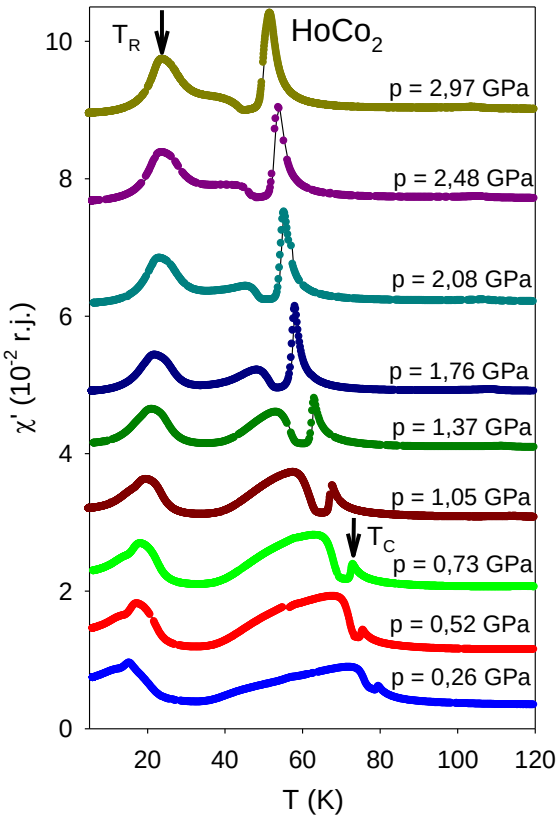


Obr. 3: Detailní zobrazení vlivu tlaku na rapidní změnu el. odporu při T_C.

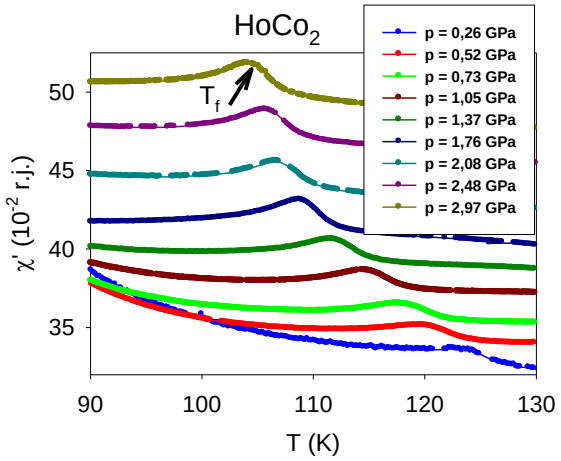


Obr. 4: Tlakový vliv na anomálii spinové reorientace při T_R.

Tlaková měření střídavé magnetické susceptibility při hydrostatickém tlaku ukazují tlakem indukované změny teplot všech přechodů (viz Obr. 5 a Obr. 6). Teplota spinové reorientace T_R se vlivem tlaku posouvá k vyšším teplotám s tlakovým koeficientem $\partial T_R/\partial p$ = (3,2±0,2) K/GPa, což je v souladu s daty el. odporu. Curieova teplota T_C v záznamu střídavé magnetické susceptibility, v atmosférickém tlaku, odpovídá inflexnímu bodu v nárůstu absolutní hodnoty $\chi'(T)$ (viz Obr. 2). Působením tlaku nastává zajímavá změna charakteru anomálie při teplotách blízkých T_C. Inflexní bod, jak je vidět v atmosférickém tlaku (viz Obr. 2), se začíná vlivem tlaku měnit ve vrchol a hrbol v nižších teplotách se postupně potlačuje a zároveň posouvá do nižších teplot rychleji než T_C (viz Obr. 5). Vypočtený tlakový koeficient je $\partial T_C/\partial p$ = (-12,9±0,5) K/GPa. Anomálie, při které nastává překlopení magnetizace Co magnetických klastrů T_f, se působením tlaku posouvá do nižších teplot (viz Obr. 6) s tlakovým koeficientem $\partial T_f/\partial p$ = (-9,7±0,4) K/GPa.



Obr. 5: Změřené teplotní závislosti AC-magnetické susceptibility pro různé tlaky. Křivky jsou posunuty o konstantu pro lepší přehlednost.



Obr. 6: Vlivu tlaku na anomálii odpovídající překlopení magnetizace Co klastrů. Pro lepší přehlednost jsou křivky posunuty o konstantu.

3.3 Hydrostatický tlak, $Ho(Co_{1-x}Si_x)_2$, x = 0,025

Tlaková měření střídavé magnetické susceptibility ukazují stejný charakter změny teplot přechodů jako pro mateřskou sloučeninu $HoCo_2$.

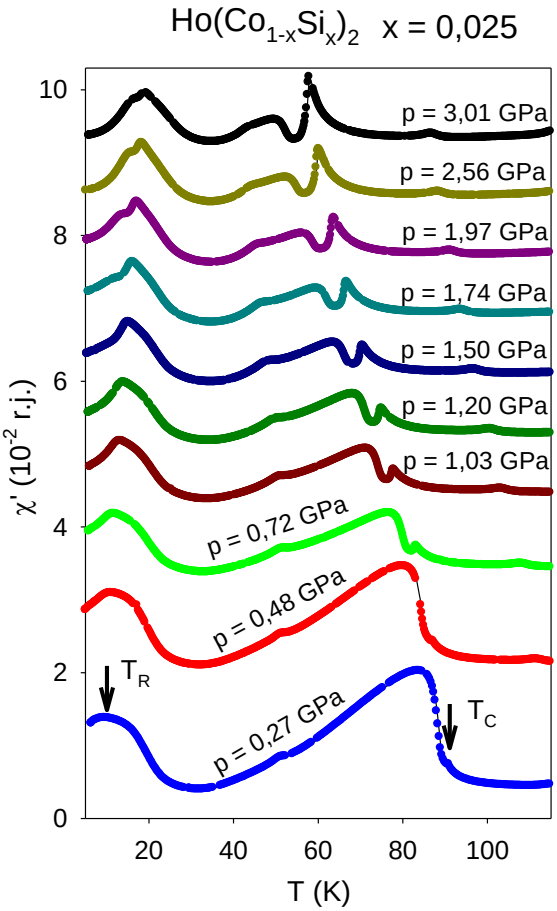
Teplota spinové reorientace T_R se vlivem tlaku posouvá do vyšších teplot (viz Obr. 7) s tlakovým koeficientem $\partial T_R/\partial p$ = (4,8±0,2) K/GPa. Curieova teplota klesá s rostoucím tlakem ($\partial T_C/\partial p$ = (-15,1±0,5) K/GPa) a je doprovázena výraznou změnou charakteru anomálie kolem T_C (viz Obr. 7), jako u sloučeniny $HoCo_2$. Obdobný vliv, jako na T_C, má hydrostatický tlak i na teplotu překlopení magnetizace Co klastrů T_f (viz Obr. 8), která se posouvá také k nižším teplotám s tlakovým koeficientem $\partial T_f/\partial p$ = (-14,1±0,4) K/GPa.

3.4 Mionová spinová rotace, $HoCo_2$

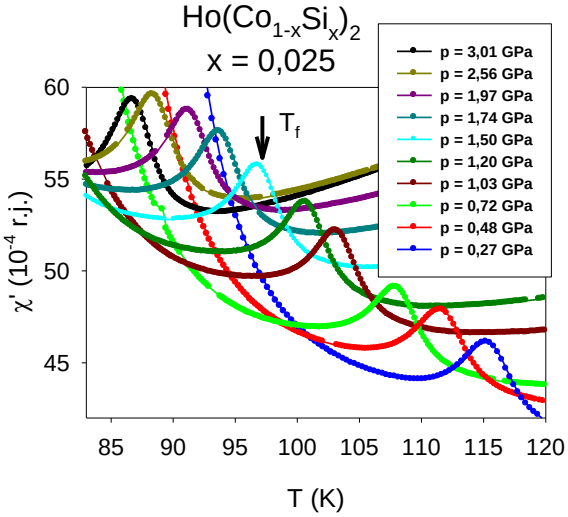
Experiment mionové spinové rotace byl proveden na vzorku $HoCo_2$ a to ve dvou tlakových bodech $p_1 \approx 0{,}2$ GPa a $p_2 \approx 1{,}95$ GPa.

V magneticky uspořádaném stavu ($T < T_C$) je přítomno nenulové střední magnetické pole $\langle B_\mu \rangle$, které způsobí precesi mionového spinu kolmo ke směru pole, což vede k oscilaci časového záznamu asymetrie $A(t)$ (viz Obr. 9). Pro magneticky uspořádaný polykrystalický vzorek, měřený v nulovém magnetickém poli a v tlakové cele, lze záznam popsat vztahem:

$$A(t) = \frac{2}{3}(A_0 - A_{PC})\exp(-\lambda_{tr}t)\cos(\gamma_\mu \langle B_\mu \rangle t + \varphi) + \quad (2)$$
$$\frac{1}{3}(A_0 - A_{PC})\exp(-\lambda_{lg}t) +$$
$$A_{PC}\left(\frac{1}{3} + \frac{2}{3}\left[1-(\lambda_{PC}t)^2\right]\exp\left(-\frac{1}{2}(\lambda_{PC}t)^2\right)\right).$$



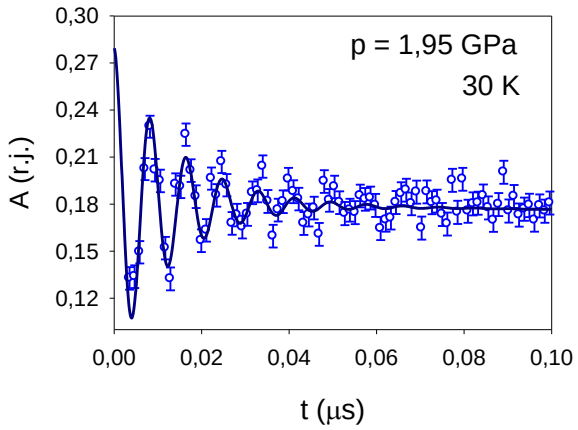
Obr. 7: Zobrazené teplotní záznamy reálné části AC-magnetické susceptibility pro substituovaný vzorek. Křivky jsou posunuty o konstantu pro lepší přehlednost.



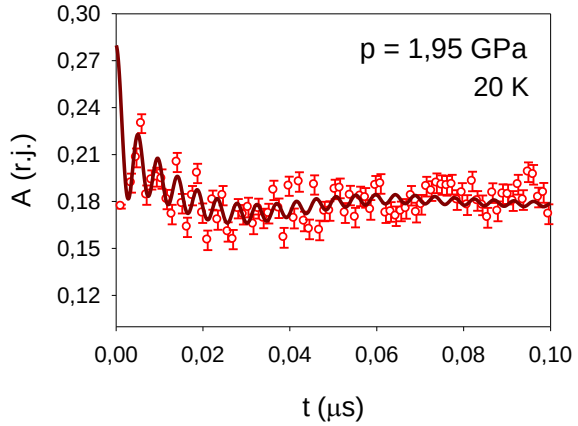
Obr. 8: Detail tlakového vlivu na anomálii kolem T_f pro substituovany vzorek.

První dva členy v rovnici (2) udávají signál od vzorku a poslední člen je příspěvek paramagnetického materiálu tlakové cely k celkovému záznamu. Příspěvek tlakové cely je přítomen ve všech našich měřeních μSR a dále na něj nebudeme poukazovat.

V nízkých teplotách $T < T_R$ bylo pozorováno druhé lokální magnetické pole. V tomto případě byl pozorován záznam skládající se ze dvou oscilačních frekvencí, jak můžeme vidět na Obr. 10.



Obr. 9: Ukázka záznamu asymetrie v teplotách $T_R < T < T_C$.

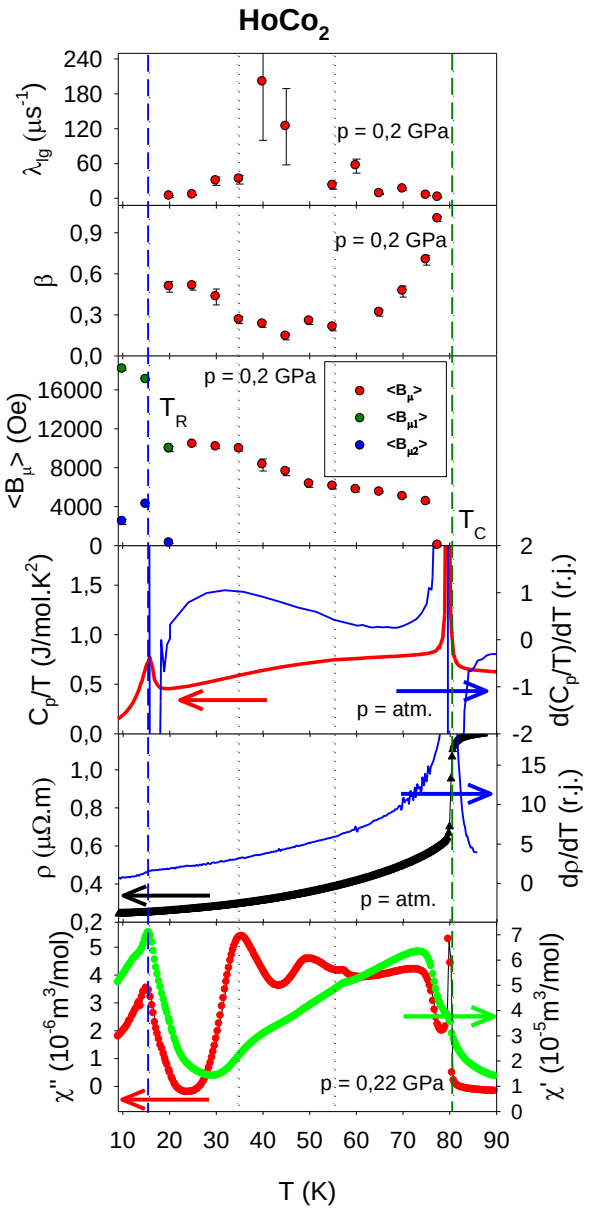


Obr. 10: Ukázka záznamu asymetrie v teplotách $T < T_R$.

V tlaku $p_1 = 0{,}2$ GPa byla v oblasti teplot $T_R < T < T_C$ pozorovaná anomálie ve vývoji parametru longitudinální relaxační rychlosti λ_{lg}, jenž diverguje, a nastává změna charakteru chování středního magnetického pole (viz Obr. 11). Změřená data v této teplotní oblasti byla fitována obecnou exponenciální funkcí s parametrem β:

$$\exp\left[-\left(\lambda_{lg} t\right)^{\beta}\right], \qquad (3)$$

která nahradila exponenciálu ve druhém členu rovnice (2). Výsledky fitů v různých teplotách jsou zobrazeny na Obr. 11 i v porovnání s výsledky měření dalších fyzikálních veličin.



Obr. 11: Srovnání výsledků dosažených měřením μSR, měrného tepla, el. odporu a AC-magnetické susceptibility v $HoCo_2$ v podobných tlakových bodech.

Nad Curieovou teplotou T_C se již oscilace neobjevují, neboť střední magnetické pole je nulové. Výsledný záznam μSR v paramagnetickém stavu odpovídá klesající exponenciále:

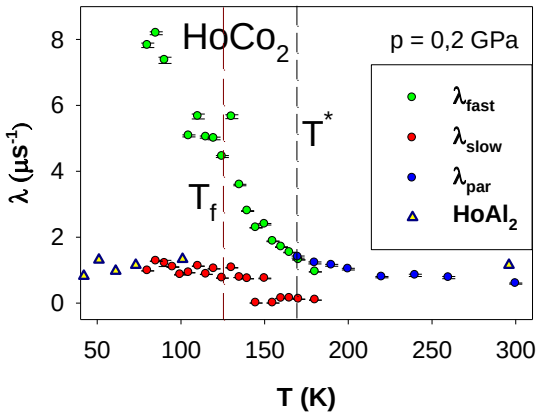
$$A(t) = A_0 \exp\left(-\lambda_{par} t\right), \qquad (4)$$

kde $\lambda_{par} = \gamma_\mu^2 \left\langle B_\mu^2 \right\rangle \tau_C$ je paramagnetická relaxační rychlost. Avšak data nad teplotou T_C nemohla být fitována pouze vztahem (4) až do jisté teploty T^*. Vhodnější popis naměřených dat při teplotách $T_C < T < T^*$ je dosažen dvěma exponenciálními funkcemi s rozdílnými relaxačními rychlostmi:

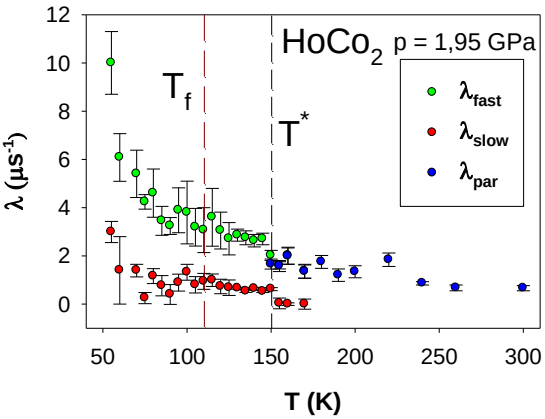
$$A(t) = A_{fast} \exp\left(-\lambda_{fast} t\right) + A_{slow} \exp\left(-\lambda_{slow} t\right). \qquad (5)$$

První příspěvek na pravé straně rovnice (5) označený *fast* udává rychlý pokles asymetrie

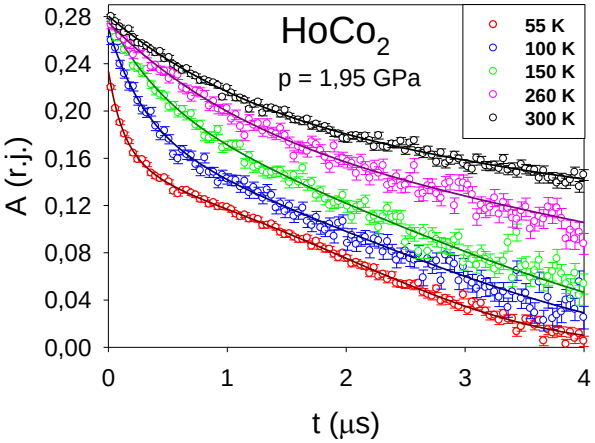
v záznamu μSR. Druhý člen na pravé straně odpovídá pozvolnému klesání hodnoty asymetrie a je označen *slow*. S rostoucí teplotou relaxační rychlost λ_{fast} rychle klesá, zatím co relaxační rychlost λ_{slow} se s teplotou nemění, jak můžeme vidět na Obr. 12 a Obr. 13 pro oba měřené tlaky. Při teplotách T^* odpovídají záznamy lépe fitu dle vztahu (4). Ukázka záznamu μSR pro několik teplot nad T_C je zobrazena v Obr. 14.



Obr. 12: Teplotní vývoj relaxačních rychlostí v tlakovém bodě p_1 = 0,2 GPa. V grafu jsou zahrnuta i data měřená na sloučenině $HoAl_2$ [O. Hartmann et al., (1986)].



Obr. 13: Teplotní vývoj relaxačních rychlostí v tlakovém bodě p_2 = 1,95 GPa.



Obr. 14: Ukázka záznamů μSR měřených v několika různých teplotách nad T_C.

4 Diskuze

Provedené experimenty na sloučeninách $HoCo_2$ a $Ho(Co_{1-x}Si_x)_2$, x = 0,025 ukazují výskyt tří charakteriskických teplot pro obě sloučeniny.

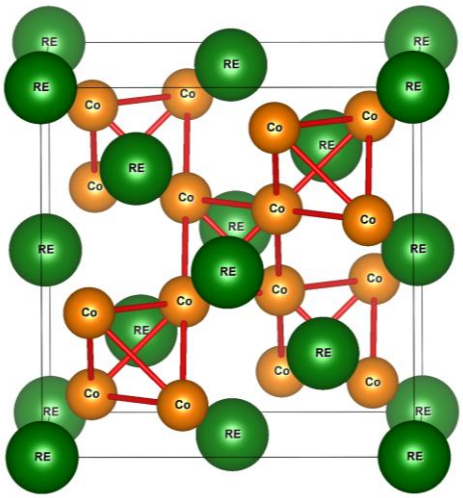
V nízkých teplotách byl pozorován přechod mezi dvěma magnetickými fázemi lišícími se směrem snadné osy magnetizace při teplotě T_R (viz Obr. 2). Vlivem aplikovaného hydrostatického tlaku se teplota T_R posouvá do vyšších teplot (viz Obr. 4 a Obr. 5). Navrhované vysvětlení posuvu T_R k vyšším teplotám vychází z tlakem indukovaného snížení Co magnetického momentu v uspořádaném stavu [O. Syshchenko et al., 2001]. S tímto návrhem je v souladu fakt, že ve sloučenině $Ho(Co_{0,975}Si_{0,025})_2$ vzrostl Co magnetický moment (podle [T.D. Cuong, (1998)]), zatím co teplota spinové reorientace se posunula do nižších teplot viz Obr. 2. Aplikací tlaku T_R roste i u substituovaného vzorku (viz Obr. 7). Výsledky mionové spinové rotace ukazují pod T_R výskyt dvou středních lokálních magnetických polí (viz Obr. 11), jež jsou zřejmě způsobeny jiným směrem magnetizace a distorzí krystalové mříže na ortorombickou, a tedy změnu symetrie. Změna symetrie vede ke dvěma intersticiálním pozicím s různě silným lokálním magnetickým polem, kde se miony usazují s podobnou pravděpodobností.

V rámci experimentu μSR na sloučenině $HoCo_2$ byla objevena neznámá anomálie vyskytující se kolem teploty 40 K v tlaku 0,2 GPa. Anomálie se projevuje změnou charakteru chování středního lokálního magnetického pole a divergencí relaxační rychlosti (viz Obr. 11). Změřená data byla fitována obecnou exponenciální funkcí (4) a byla získána teplotní závislost parametru β, jež se podobá výsledkům dosaženým na spinovém skle, které byly experimentálně změřeny a rovněž teoreticky předpovězeny [G. M. Rotaru et. al., (2009)]. V okolí teplot, při kterých se vyskytuje tato anomálie měřená pomocí μSR, je pozorována neznámá a

dosud nevysvětlená anomálie v imaginární části střídavé magnetické susceptibility (viz Obr. 11), která poukazuje na energetické ztráty a zvýšenou dynamiku v materiálu. V teplotní závislosti měrného tepla je vidět jistá změna směrnice ukazující na změnu entropie. Teplotní záznam elektrického odporu v tomto oboru hodnot žádné anomálie nevykazuje, jen v jeho derivaci je rozpoznatelná anomálie odpovídající spinové reorientaci. Tento stav zvýšených dynamických procesů v magneticky uspořádaném stavu $HoCo_2$ je nečekaným poznatkem v celé skupině sloučenin $RECo_2$ a zasluhuje důkladnější studium.

Při teplotě magnetického uspořádání T_C k magnetickému fázovému přechodu prvního druhu, jak ukazují teplotní závislosti měrného tepla i elektrického odporu (viz Obr. 2). Pro sloučeniny $RECo_2$, kde RE = Dy, Ho a Er, nastává magnetický fázový přechod 1. druhu a jeho charakter se popisuje obecně uznávaným scénářem: velmi silné molekulární pole způsobené silnými 4f(RE) magnetickými momenty zprostředkované 5d(RE)-3d(Co) hybridizací způsobí rozštěpení Co spinových podpásů a indukci Co magnetického momentu (metamagnetický přechod) [O. Syshchenko et al., 2001]. Metamagnetický přechod je doprovázen „zamrznutím“ spinových fluktuací na Co pozicích způsobujících dramatický pokles elektrického odporu (viz Obr. 2 a Obr. 3). Působením tlaku se rapidní pokles elektrického odporu zmenšuje, což se vysvětluje ztrátou Co magnetického momentu kvůli tlakem indukované neefektivnosti výměny mezi Ho-Co-Ho vedoucí k menšímu rozštěpení Co spinových podpásů [O. Syshchenko et al., 2001]. Ztráta Co magnetického momentu by mohla stát i za dramatickou změnou charakteru anomálie kolem Curieovy teploty pozorovanou v obou vzorcích při měření střídavé magnetické susceptibility (viz Obr. 5 a Obr. 7). Si substituce posunula Curieovu teplotu do vyšší teploty (viz Obr. 2). Za posun Curieovy teploty není zodpovědná změna meziatomových vzdáleností ani výměnná interakce mezi Ho-Co se nemění [T.D. Cuong, (1998)]. Substitucí 3p kovu (Si,Al) namísto Co atomu v paramagnetických sloučeninách $RECo_2$, kde RE = Y, Lu a Sc, vzniká pro určité koncentrace slabý feromangetizmus [D. Michels et al., (1990)]; [M. Aoki et al., (1990)]. To ukazuje, že zvýšení T_C může být způsobeno hybridizací 3p(Si) stavů se stavy 3d(Co) a 5d(Ho), podporující magnetizmus Co podmříže do jistých hodnot koncentrace Si. Hybridizace 3p(Si)-3d(Co) pásů může také zvýšit magnetický moment Co.

V paramagnetickém stavu je pozorovaná anomálie odpovídající překlopení magnetizace Co magnetických klastrů do směru shodného s magnetickými momenty Ho při teplotě T_f. Tato anomálie je pozorovaná v datech střídavé magnetické susceptibility a je velice citlivá na přiložené vnější magnetické pole, které ji potlačí již při 100 Oe. Vykonaný experiment maloúhlového rozptylu neutronů (SANS) ukázal v těchto teplotách výskyt Co magnetických klastrů s korelační délkou ~ 7 Å pro $HoCo_2$ a $ErCo_2$ v teplotě $\sim T_f$ [J. Herrero-Albillos et al., 2007]; [C. M. Bonilla et al., 2012]. Korelační délka je velice blízká hodnotě mřížové konstanty elementární buňky a tak vzbuzuje ideu, že kobalt vytváří magnetické klastry za pomoci čtyř tetraedrů tvořených Co atomy uvnitř elementární buňky (viz Obr. 15).

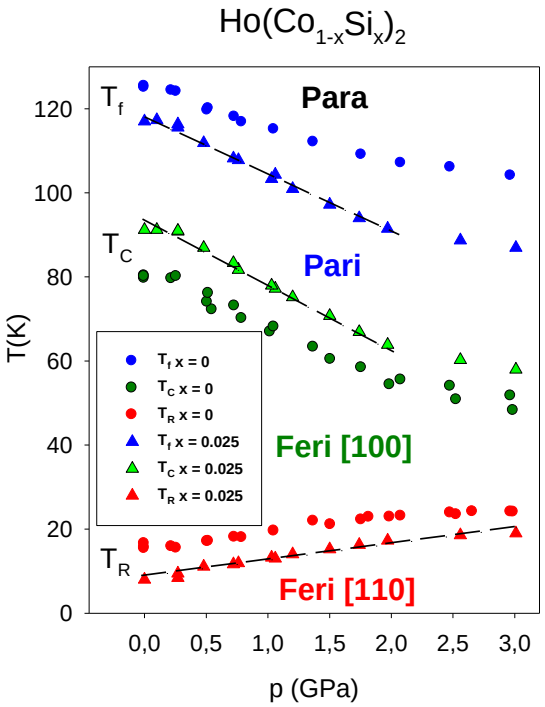


Obr. 15: Znázornění krystalové struktury sloučeniny $RECo_2$ krystalizující v Lavesově fázi typu $MgCu_2$ (s použitím programu Vesta [K. Momma and F. Izumi, (2011)])

Záznamy μSR v teplotách $T_C < T < T^*$ byly fitovány dvěma exponeniálními funkcemi (5). Shoda tohoto fitu s naměřenými daty ukazuje na výskyt silné krátkodosahové korelace mezi magnetickými spiny v paramagnetické oblasti. Krátkodosahová korelace nutí spiny mionu rychleji se zorientovat a projevuje se rychlejším poklesem asymetrie, jak je patrno v Obr. 14. Silným krátkodosahovým korelacím odpovídá vysoká hodnota relaxační rychlosti λ_{fast} (viz Obr. 12 a Obr. 13). Tyto silné krátkodosahové korelace mají pravděpodobně svůj původ v kobaltových kolektivních útvarech (klastrech), stejně jako ve sloučenině $ErCo_2$ [C. M. Bonilla et al., (2011)]. Relaxační rychlost λ_{slow} v druhé exponenciále rovnice (5) by měla odpovídat paramagnetickým fluktuacím lokalizovaných magnetických momentů Ho. Této λ_{slow} odpovídá relaxační rychlost získaná z měření vzorku $HoAl_2$ zobrazená na Obr. 12, jelikož sloučenina $HoAl_2$ obsahuje pouze magnetické momenty Ho, které se uspořádávají pod teplotou 32 K [O. Hartmann et al., (1986)]. Relaxační rychlost λ_{fast} je ~3krát větší než λ_{slow} a rychle klesá s rostoucí teplotou až do teploty T^*, kde jsou srovnatelné obě relaxační rychlosti a přecházejí na relaxační rychlost λ_{par} s následným potlačením

jedné z rychlostí vyskytujících se pod T^*. Teplota T^* představuje hodnotu, při které již nelze rozpoznat přítomnost silnějšího lokálního magnetického pole pocházejícího od magnetických klastrů. Nad teplotou T^* lze již změřené spektrum fitovat pouze jednou exponenciálou (viz rovnice (4)), náležící čistě paramagnetickému stavu, s relaxační rychlostí λ_{par}. Ztráta korelací mezi Co magnetickými momenty vede ke zmenšování Co magnetických klastrů a k jejich rozpadu při teplotě blízké T^*.

Posun teploty překlopení magnetizace Co magnetických klastrů T_f k nižším teplotám v důsledku substituce Si na pozici Co atomu (viz Obr. 2), je zřejmě způsoben zvýšením spinových fluktuací Co magnetických klastrů vlivem hybridizace 3p(Si)-3d(Co) pásů a také narušením integrity Co magnetických momentů vlivem Si substituce na pozici Co atomu uvnitř kobaltového magnetického klastru. Vlivem tlaku se teplota překlopení magnetizace Co magnetických klastrů T_f posouvá do nižších teplot u obou měřených vzorků (viz Obr. 16). Pokles může být způsoben slábnutím síly interakce mezi Ho-Co, čímž je vysvětlován i posun Curieovy teploty T_C s rostoucím tlakem, a také snížením Co magnetické susceptibility v teplotách nad T_C. Podobné tlakové koeficienty naznačují spojitost mezi jevy odehrávajících se při teplotách T_C a T_f vlivem zmenšující se interakce mezi Ho-Co. Podobný vliv tlaku, jako na T_f, je pozorován i u teploty T^* ukazující na obdobný proces způsobující pokles T_f a T^*. Nicméně, na rozpadu Co magnetických klastrů by neměla mít vliv zmenšující se síla interakce mezi Ho-Co, ale mezi Co-Co. Nemůžeme však vyloučit podobný vliv tlaku na obě interakce.



Obr. 16: Tlakový fázový diagram teplot přechodů pro obě studované sloučeniny.

Poděkování

Tato práce vznikla v rámci magisterského studia na Katedře fyziky kondenzovaných látek, Matematicko-fyzikální fakulty Univerzity Karlovy v Praze. Rád bych zde poděkoval svému vedoucímu panu Jiřímu Prchalovi. Dále bych chtěl poděkovat konzultantům práce panu Vladimíru Sechovskému a panu Martinu Míškovi.

Poděkování patří také institutu PSI, za možnost provedení mionového experimentu a local-contactu panu Rustemu Khasanovovi.

Literatura

[M. S. S. Brooks et al., 1991]] M. S. S. Brooks, L. Nordstrom and B. Johansson (1991). Magnetism of RFe_2 compounds, *J. Appl. Phys.* **69**, 5683

[F. Garcia et al., 1998] F. Garcia, H. Dos Santos, M. R. Soares, A. Y. Takeuchi and S. F. da Cunha (1998). Recovery of $ErCo_2$ Fermi level by ubstitution of Co by Ni and Fe, *J. Appl. Phys.* **83**, 6969

[T. Goto et al., 1994] T. Goto, H. Aruga Katori, T. Sakakibara and K. Murata (1994). Itinerant electron metamagnetism and related phenomena in Co-based intermetallic compounds, *J. Appl. Phys.* **76**, 6682

[S. Kmhelevskyi and P. Mohn, 2000] S. Khmelevskyi and P. Mohn (2000). The order of the magnetic phase transitions in RCo_2 intermetallic compounds, *J. Phys.: Condens. Matter* **12**, 9453

[R. Houser et al., 2000] R. Hauser, E. Bauer and E. Gratz et al., (2000). Decoupling of the magnetic ordering of the rare-earth and the Co sublattice in $Er_{1-x}Y_xCo_2$ compounds driven by substitution or pressure, *Phys. Rev. B* **61**, 1198

[O. Syshchenko et al., 2001] O. Syshchenko, T. Fujita, V. Sechovský, M. Diviš and H. Fujii (2001). Magnetism in $HoCo_2$ and $ErCo_2$ under high pressure, *J. Alloys Comp.* **317,** 438

[C. M. Bonilla et al., 2012] C. M. Bonilla, I. Calvo, J. Herrero-Albillos et al., (2012). New magnetic configuration in paramagnetic phase of $HoCo_2$, *J. Appl. Phys.* **111**, 07E315

[C. M. Bonilla et al., 2013] C. M. Bonilla, J. Herrero-Albillos and F. Bartolomé et al. (2013). Parimagnetism in RCo_2 series (R = Dy, Ho, and Tm), http://arxiv.org/abs/1302.0775

[J. Herrero-Albillos et al., 2007] J. Herrero-Albillos, F. Bartolomé and L. M. García et al. (2007). Observation of a different magnetic disorder in $ErCo_2$, *Phys. Rev. B* **76**, 094409

[M. Míšek et al., (2012)] M. Míšek, J. Prokleška, V. Sechovský, J. Prchal et al. (2012). Effects od high pressure on the magnetism of $ErCo_2$, *J. Appl. Phys.* **111**, 07E132

[C. M. Bonilla et al., (2011)] C. M. Bonilla, N. Marcano, J. Herrero-Albillos et al. (2011). μSR study of short-range magnetic order in the paramagnetic regime of $ErCo_2$, *Phys. Rev. B* **84**, 184425

[J. Kamarád et al., 2004] J. Kamarád, Z. Machátová and Z. Arnold (2004). High pressure cells for magnetic measurements – Destruction and functional tests, *Rev. Sci. Instrum.* **75**, 5022

[E. Gratz, (1983)] E. Gratz (1983). Measuremetns of lattice distortion in $RECo_2$ (RE = Ho, Nd) using x-ray powder diffraction, *Solid State Commun.* **48**, 825

[T.D. Cuong, (1998)] T.D. Cuong: Magnetism and related properties of $RECo_2$ compounds: Co - dilution, disertační práce, MFF UK, Praha, 1998

[G. M. Rotaru et. al., (2009)] G. M. Rotaru, B. Roessli, A. Amato et. al. (2009). Spin-glass state and long-range magnetic order in Pb(Fe1/2Nb1/2)O3 see via neutron scattering and muon spin rotation, *Phys. Rev. B* **79**, 184430

[D. Michels et al., (1990)] D. Michels, J. Timlin and T. Mihalisin (1990). Magnetic susceptibility and resistivity of $R(Co,Al)_2$ where R = Y,Sc and A = Al, Si, *J. Appl. Phys.* **67**, 5289

[M. Aoki et al., (1990)] M. Aoki and H. Yamada (1990). Electronic structure and magnetism of C15-type Laves phase compounds $Y(Co,Al)_2$ and $Y(Co,Si)_2$, *Physica B* **177**, 259

[K. Momma and F. Izumi, (2011)] K. Momma and F. Izumi (2011). VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data, *J. Appl. Crystallogr.* **44**, 1272

[O. Hartmann et al., (1986)] O. Hartmann, E. Karlson, R. Wappling et al. (1986). Study of paramagnetic fluctuations in rare earth aluminium intermetallics, *J. Phys. F* **16**, 1593 (1986)

Evolution of magnetism in $UCo_{1-x}Ru_xGe$

Michal Vališka[1*]

Supervisor: Jiří Pospíšil[1†]

Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University in Prague
Ke Karlovu 5 121 16 Praha 2

Abstract: This work studies the $UCo_{1-x}Ru_xGe$ system on the border of magnetic instability. Proper study of magnetic and transport properties of poly crystals with different Ru content revealed complex change of these parameters through the series. UCoGe is a weak ferromagnet with $T_C \sim 3\,K$ and low magnetic moment $0.035\,\mu_B/f.u.$. We observed rapid increase of these two quantities up to the concentration of Ru of $x_{max} \approx 0.1$. Background of this increase was studied on the single crystal grown by floating zone method. Polarized neutron diffraction experiment performed on this single crystal with composition of $UCo_{0.88}Ru_{0.12}Ge$ explained strengthening of magnetism with a change of mutual orientation of magnetic moments on the uranium and cobalt site. Previously reported antiparallel alignment for the UCoGe is changed to the parallel orientation for the doped $UCo_{0.88}Ru_{0.12}Ge$ when cobalt moment is reoriented. Strong anisotropy of the $UCo_{0.88}Ru_{0.12}Ge$ projects to the temperature dependence of resistivity and to the thermal expansion properties. This primal increase of T_C and magnetic moment is followed by decrease when approaching the concentration $x_{cr} \approx 0.31$ where magnetic order disappears. Closer study of the critical exponents of temperature dependencies of resistivity, specific heat and the concentration dependency of the T_C are pointing on the presence of Non-Fermi liquid behavior possibly indicating the presence of the Quantum Critical Point.

Keywords: UCoGe, ferromagnetism, polarized neutron diffraction, Quantum Critical Point

1 Introduction

Within the family of uranium intermetallics are few compounds which exhibit unique coexistence of ferromagnetism and superconductivity. These are UGe_2[Saxena et al., 2000], URhGe [Aoki et al., 2001], UIr[Akazawa et al., 2004] and this family of so called uranium based ferromagnetic superconductors is hitherto closed by the UCoGe[Huy et al., 2007a]. In these compounds *5f* electrons are believed to be itinerant and carrying both the superconductivity and ferromagnetic order. This breaks the standard BCS theory, because the field caused by ferromagnetism would destroy spin-singlet Cooper pairs. New mechanisms are proposed to bring these compound to SC state. Cooper pairs are thought to be in spin triplet-state where pairing mechanism is provided by critical spin fluctuations [Fay and Appel, 1980]. URhGe and UCoGe compounds belong to the broad family of UTX compounds where U $5f$ electrons are hybridized with d electrons of transition element T from the second half of $3d$, $4d$ or $5d$ series and X denotes one of the p elements. Various combinations of mentioned elements lead to different crystal structures and to broad set of magnetic ground-states and properties[Sechovsky and Havela, 1998]. Magnetically ordered compounds of this family are mostly strongly uniaxial systems with large magnetocrystalline anisotropy. This work is focused on the UCoGe compound in the frame of Ru doping on the Co place. Idea of this study is based on the ground state of the UCoGe itself that is more or less weak and subtle. In fact, former studies reported no magnetic ordering for UCoGe[Troc and Tran, 1988, Buschow et al., 1990]. It has been already shown, that applied external pressure can suppress its ordering temperature[Hassinger et al., 2008] same as for the case of UGe_2[Saxena et al., 2000]. Nevertheless path to the increase of Curie temperature and to the overall stabilization of magnetic order leads to the transition metal doping. Pospíšil et al.[Pospisil et al., 2009] have shown that even small amount of different transition element on the site of cobalt dramatically increase robustness of magnetic order. This increase of T_C goes hand in hand with the lowering of temperature for superconducting transition, below the temperature of 0.4 K. URhGe as a second ambient pressure ferromagnetic superconductor offers similar increase of the ordering temperature[Sakarya et al., 2008]. It

*michal.valiska@gmail.com
†j.pospisil@centrum.cz

can be achieved by alloying with the isostructural URuGe compound which has paramagnetic ground state[Troc and Tran, 1988]. However further increase of Ru concentration leads to the suppression of ferromagnetism and whole system ends in the Quantum Critical Point (QCP) where ordering temperature is zero. We decided to carefully study similar influence of Ru doping but on the UCoGe compound which itself lies in the vicinity of the ferromagnetic instability. While it is a unique example of very weak ferromagnet we expect that any change caused by doping would be more pronounced then in the case of magnetically more robust URhGe. We expect similar results to the study of U(Co,Fe)Ge system where alloying with paramagnetic UFeGe leads to the decrease of ordering temperature towards the QCP[Huang et al., 2013].

2 Results

2.1 Study of $UCo_{1-x}Ru_xGe$ compounds

2.1.1 Preparation of Polycrystalline Samples

In order to study the development of magnetic state of the UCoGe compound with the additional Ru doping in detail we prepared series of polycrystalline samples with composition $UCo_{1-x}Ru_xGe$ where $x = 0.1-0.9$ with the step of 0.1 and also $x = 0.2-0.35$ with finer step of 0.01. All these samples were prepared by the same procedure from stoichiometric amount of pure elements. We used commercially accessible initial elements of high purity (Co 99.995%, Ge 99.9999 + % and Ru 99.95%). Further we used natural U with initial purity of 99.85%. According to the known influence of U purity on the quality of the UCoGe compound[Pospisil et al., 2011] we used technique of solid state electrotransport (SSE) for additional purification. Melting process was realized in the mono-arc furnace under protective Ar atmosphere on the copper crucible cooled by water. All samples were re-melted at least three times and flipped before each melting process in order to achieve better homogeneity. No sign of evaporation was observed during the melting process. Each sample was separately wrapped into the Ta foil with purity of 99.99% and sealed in a quartz tube under the vacuum of 10^{-6} mbar and annealed in resistance furnace at 885 °C for 14 days and then slowly cooled down to the room temperature to avoid internal stresses.

2.1.2 Characterization of the Sample Composition and Structure

Patterns from the X-ray powder diffraction were evaluated by standard Rietveld technique [Rietveld, 1969] using FullProf[Rodriguez-Carvajal, 1993]/WinPlotr [Roisnel and Rodriguez-Carvajal,] software as a refinement of measured data with respect to the already published crystallographic data for UCoGe ($a = 6.852$ Å, $b = 4.208$ Å, $c = 7.226$ Å)[Canepa et al., 1996] and URuGe ($a = 6.678$ Å, $b = 4.359$ Å, $c = 7.539$ Å)[Troc and Tran, 1988] compound.

Results of the refinement confirmed composition of our samples without any additional impurities or different phases. UCoGe and URuGe compounds posses orthorhombic TiNiSi structure. Volume of the unit cell of UCoGe is smaller ($V = 208.3$ Å^3) of about 5% than for the URuGe compound ($V = 219.5$ Å^3). Thus the isostructural doping of the Ru on the Co site leads to linear variation of the lattice parameters according to the Vegard's law[Vegard, 1921]. While the b and c unit cell parameters are increased with higher concentration of Ru atoms the a parameter is shortened. It leads to the volume expansion of the whole unit cell. Expected volume increase is also in agreement with the difference of the covalent radii of Co (126 pm) and Ru (146 pm)[Cordero et al., 2008]. Despite this negative pressure effect we can observe unexpected contraction of the distance between two nearest uranium atoms d_{U-U} leading to the higher overlap between the $5f$ wave functions centered on the U ions. It might look like a conflicting evidence with the volume increase, but the zig-zag chain with the d_{U-U} is approxiamtely along the a axis and it is the only cell parameter that is contracted with the doping (see Figure 1).

2.1.3 Magnetization Measurements

When alloying ferromagnetic UCoGe with the URuGe which has paramagnetic ground state we should expect changes in the magnetic properties within the $UCo_{1-x}Ru_xGe$ system. Thus we measured temperature and field dependence of magnetization for all polycrystalline samples of UCoGe with gradually increasing concentration of Ru. Measurements were performed in broad temperature range from 1.8 K to the room temperature and up to external magnetic fields of 7 T. Samples for the measure-

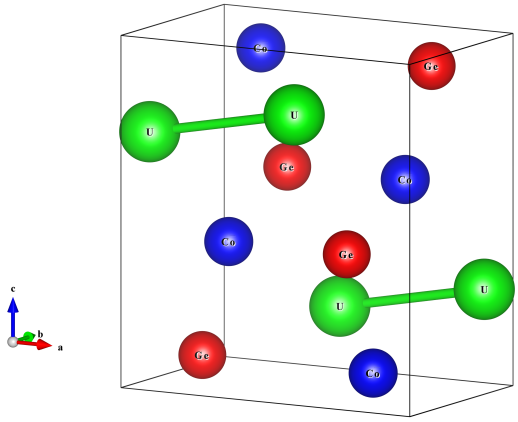


Figure 1: Unit cell of the UCoGe with the marked distance between two nearest uranium atoms pointing approximately along the a axis.

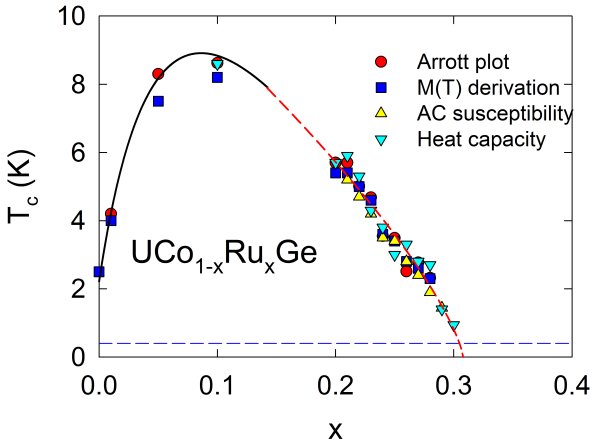


Figure 2: Phase diagram based on measurements of polycrystalline samples. T_C is taken as a result of Arrott plot analysis. Other estimations from the derivative of the temperature dependence of magnetization and from the AC susceptibility are plotted as well. Black solid line is only guide for the eye while the red dashed part is a fit of $T_C \sim (x_{cr} - x)^{3/4}$. Additional data points are from the specific heat data. Blue dashed line is a temperature limit for the heat capacity measurements at 0.4 K.

ments were cut by precise wire saw in to the roughly cubic shape with dimension of $2 \times 2 \times 2\,\mathrm{mm}^3$. We used bulk material instead of powder, because powderizing brings additional internal stress in to the system[Pospisil et al., 2011]. It would in fact destroy the effect of annealing that should release these stresses and could lead to the change of magnetic properties (e.g. shift of the T_C). We supposed that size of the bulk material used for measurement is significantly bigger then grains so we treated it as texture free poly crystal. At first we focused on the development of ordering temperature T_C. The estimation of ordering temperature from the temperature dependence of magnetization is affected by the necessary presence of, even if small, external magnetic field. Thus we decided to estimate the value of T_C for each concentration as a result of the Arrott plot[Arrott, 1957] (M^2 over H/M) analysis of isotherms. Thus obtained curves are strongly nonlinear. This effect can be the first sign of the nearness of a magnetic instability[Yeung et al., 1986]. Thus obtained values for each concentration are plotted in the phase diagram in Figure 2.

Minimum of the derivative of a temperature dependence of magnetization was taken as another estimation of ordering temperatures which are consequently plotted in the phase diagram in Figure 2. We also performed measurement of AC susceptibility where the maximum of the real part χ' roughly corresponds with the inflexion point on the high temperature side of the imaginary part peak. These values are also plotted in the phase diagram in Figure 2. The sample with $x = 0.29$ was used for AC susceptibility measurement in lower temperatures using the same device as Prokleška et al.[Prokleska et al., 2010] used for the study of UCoGe single crystal.

Low temperature part of the temperature dependence of magnetization is plotted in Figure 3. Results of previous measurements revealed that both the original spontaneous magnetic moment of $0.03\,\mu_B$ and ordering temperature $T_C = 3\,\mathrm{K}$ of parent UCoGe are rapidly increased when we increase the concentration of Ru (see inset of Figure 3 and Figure 2). This trend changes at concentration $x_{max} \approx 0.1$ where ordering temperature is enhanced up to the $T_{C,max} = 9\,\mathrm{K}$ and magnetic moment reaches its maximum of $0.11\,\mu_B$. This is more than three times higher than in the case of the undoped parent UCoGe compound. Increase of the magnetic moment can be the sign of progress towards the more localized magnetism compared to the itinerant one in the case of UCoGe.

With increased concentration of Ru we observe decrease of the T_C as well as the magnetic moment. Curie temperature goes to zero at some critical concentration $x_{cr} \approx 0.3$ where magnetic order disappears. The evolution of the value of the spontaneous magnetic moment (obtained from the magnetization curves measured at 1.85 K) is displayed in the inset

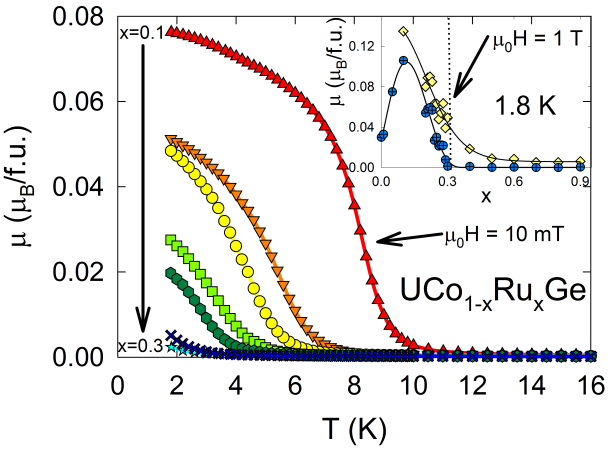


Figure 3: Temperature dependence of magnetization for different concentrations of Ru measured in external magnetic field of 10 mT. Vertical arrow on the left side shows decreasing value of magnetic moment with increased x. Inset shows development of spontaneous magnetic moment with increased Ru content (blue circles) from the magnetization curves measured at 1.8 K. Bright yellow diamonds show values of magnetic moment from the same magnetization loop in 1 T. Dotted line in the inset shows the approximate position of the critical concentration.

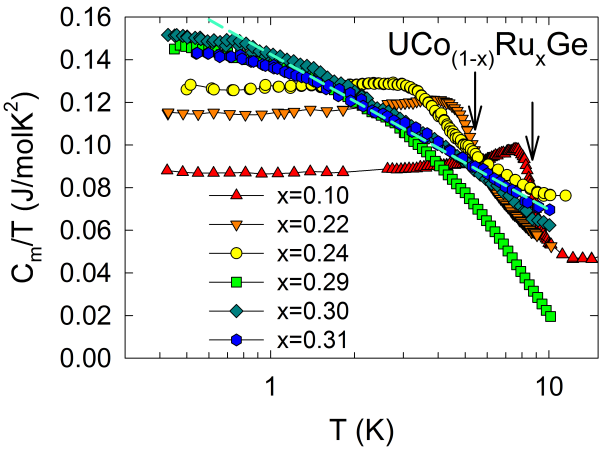


Figure 4: Electron specific heat divided by temperature for samples with different Ru content in the log scale. Only few concentrations are plotted for clarity. Black arrows shows the position of T_C for the $x = 0.10$ and $x = 0.22$ at the inflection point. Dashed cyan line shows linear dependence of the specific heat for $x = 0.31$.

of Figure 3. This inset also shows the value of magnetic moment measured in the higher magnetic field of 1 T. While the spontaneous magnetic moment is suppressed to the zero, there is still some induced moment in the higher field of 1 T. This fact together with the positive slope of Arrott plots[Mira et al., 2002] brings us to the conclusion, that the transition from ferromagnetic order to the paramagnetic state forced by the Ru substitution is continuous and thus of second order.

According to the prediction for the dependence of the T_C on the value of control parameter (x) by Millis and Hertz[Millis, 1993, Hertz, 1976] we are able to estimate the value of critical concentration x_{cr}. Ordering temperature should obey $T_C \sim (x_{cr} - x)^{3/4}$. Fit on the measured values of T_C gives estimation for the critical concentration as $x_{cr} \approx 0.308(9)$.

2.1.4 Heat Capacity Measurements

Heat capacity measurements were performed in the range of $0.4 - 300$ K. Data treatment revealed, that we can observe dramatic change of the temperature dependence of the C/T ratio for different concentrations of Ru. Due to the broad transitions for $0.1 < x < 0.3$ we used inflection points of the C/T vs. T curve for an estimation of the T_C. Thus obtained values are plotted in the phase diagram in Figure 2 showing good agreement with previous results from magnetization measurements. We consequently subtracted phonon contribution resulting from the fit of the lattice specific heat $C_{lat}(T) = \beta T^3$ (giving the values of $\beta \approx (0.52 - 0.56) \cdot 10^{-3}\,\mathrm{J \cdot mol^{-1} K^{-4}}$ i.e. Debye temperature of $151 - 155$ K) in the temperature interval between T_C and approximately 20 K for each sample with different concentration of Ru. For further analysis we plotted magnetic contribution of heat capacity (resulting from the subtraction of the C_{lat}) C_m/T as a function of a logarithm of T (see Figure 4).

It shows almost linear trend indicating possible presence of NFL behavior for $x \approx 0.31$ which is characterized by logarithmic dependence of specific heat divided by temperature $C_m(T)/T = c \ln(T_0/T)$[Millis, 1993, Hertz, 1976]. This is expected for critical concentration where it might indicate presence of QCP. Anomaly at T_C is smeared down and shifted to lower temperatures with higher concentration of Ru. As the system approaches the QCP we can also observe dramatic increase of Sommerfeld gamma coefficient from former $57\,\mathrm{mJ/mol \cdot K^2}$[Gasparini et al., 2010] for parent

UCoGe up to the $160\,\mathrm{mJ/mol\cdot K^2}$ at $x = 0.3$ near x_{cr} (see panel c) in the Figure 11). This quantity is consequently lowered for higher concentrations $x > x_{cr}$.

2.1.5 Resistivity Measurements

High temperature resistivity for all measured polycrystalline samples shows initial increase up to the maximum at T_0. Same effect is also observed in the resistivity data measured on the single crystal of parent compound UCoGe[Pospisil et al., 2011]. This resistivity increase effect is connected with spin fluctuations when $T^{5/3}$ spin fluctuation model was applicable at temperatures below knee[Pospisil et al., 2011]. Our data measured on polycrystalline samples reveal general increasing dependency of the temperature T_0 on the Ru content x. It corresponds to the fact that for URuGe compound the knee is not present in the data measured on the polycrystalline samples up to the 300 K[Tran et al., 1990]. Resulting temperature dependencies of resistivity ratios for selected polycrystalline samples are plotted in Figure 5.

It is obvious, that increased Ru content dramatically changes curvature of the low temperature part of resistivity in the $UCo_{1-x}Ru_xGe$ system. While resistivity of the less doped samples shows almost quadratic temperature dependence those with higher Ru content scales rather linearly with the temperature. Linear temperature dependence of resistivity is according to the Millis and Hertz[Millis, 1993, Hertz, 1976] sign of NFL behavior in the three dimensional ferromagnet. Results of the $\rho = \rho_0 + AT^n$ fits are plotted in the panel b) of the Figure 11 and obtained curves are also viewed in the Figure 5. For $x = 0.31$ we observe almost linear temperature dependence of resistivity ($n = 1.1$).

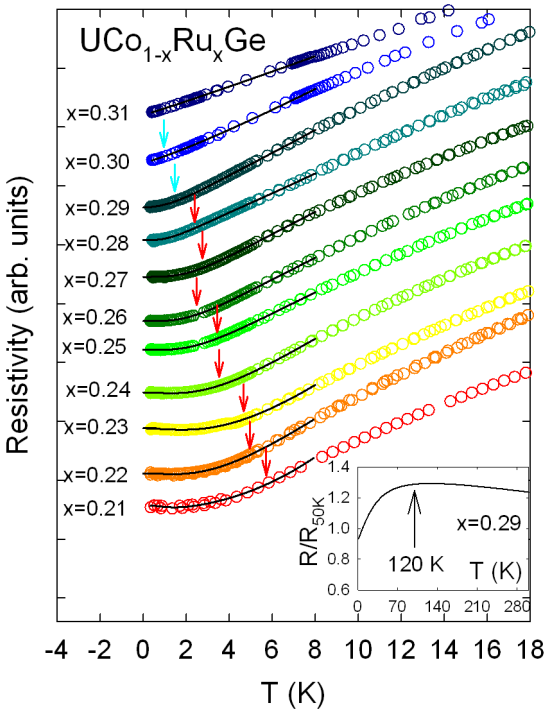


Figure 5: Temperature dependence of resistivity for selected polycrystalline samples with gradual Ru content. Red arrows denote the T_C obtained from the Arrott plots, cyan arrows point on the T_C obtained from the heat capacity data. Solid lines are fits with the $\rho = \rho_0 + AT^n$. All curves are arbitrary vertically shifted for better clarity. Inset shows typical development of resistivity (for $x = 0.29$) in broad temperature range. It shows maximum in the resistivity (T_0), in this case approximately at 120 K.

2.2 $UCo_{0.88}Ru_{0.12}Ge$ Single Crystal Study

Increase of the magnetic moment (see Figure 3) and simultaneous development of the ordering temperature with increasing Ru content found in poly crystals study reveal some change of the magnetic properties in the system in microscopic range. In order to reveal background of this process and to be able to study also anisotropy properties we step to the preparation of the single crystal near x_{max} where T_C and spontaneous magnetic moment reach their maximum. Single crystal was prepared by the floating zone method in the optical furnace. Quality of the as grown crystal was verified by the Laue method. It proved its single crystalline character and high quality. Body of the crystal was consequently shaped by precise wire saw in to the proper form of the samples for further measurements. XRPD analysis revealed composition of the crystal as $UCo_{0.88}Ru_{0.12}Ge$.

2.2.1 Magnetization Measurements

Measurements of the magnetization curves at various temperatures in the applied magnetic field up to the 9 T revealed expected and very strong magnetocrystalline anisotropy. Magnetization loops measured with external field along all three crystallographic directions at the temperature of 1.8 K are plotted in Figure 6.

Rapid increase of the magnetization with applied external magnetic field along the c axis reveals that this axis is magnetic easy axis. It exhibits spon-

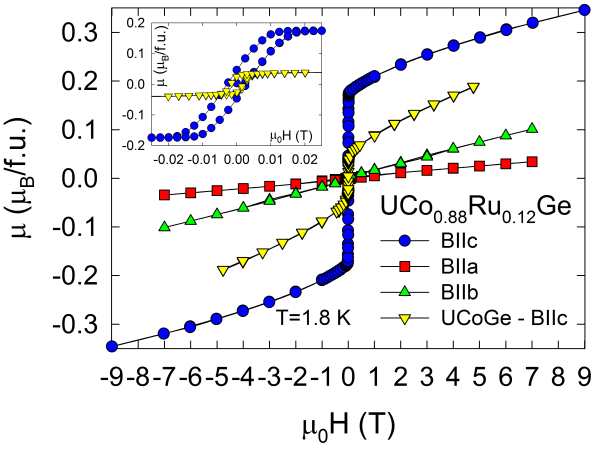


Figure 6: Magnetization loops for single crystalline sample with different orientation of an applied external magnetic field. Magnetization loop for the parent compound UCoGe with field aligned with the c axis is plotted for comparison[Pospisil et al., 2011]. Inset of the figure shows low field region where small hysteresis is apparent.

taneous magnetic moment of $0.21\,\mu_B$ in 1 T. This value is about 85 % higher then for the parent compound [Pospisil et al., 2011]. It follows our results from the polycrystalline samples study. Observed small hysteresis is increased in the doped system from initial ~ 4 mT for UCoGe up to the ~ 5.8 mT for $UCo_{0.88}Ru_{0.12}Ge$. As expected magnetization changes slowly when external field is applied along the a and b axis. These two directions corresponds to the magnetically hard axis and behave paramagnetic like. Magnetization for the c axis increases approximately linearly with no sign of saturation in the region above 1 T.

2.2.2 Polarized Neutron Diffraction - PND

We used PND to investigate the microscopic mechanism that stands behind the anomalous increase of magnetic moment and T_C up to the concentration x_{max} in comparison to parent UCoGe. We performed unpolarized neutron experiment on the D9 device in ILL at first for perfect information about the crystal structure of the investigated material. We measured set of more than 350 nonequivalent reflections at the temperature of 11 K (i.e. above T_C). Corresponding structure model resulting from the structure of parent compound[Canepa et al., 1996] was refined by standard Rietveld technique [Rietveld, 1969]

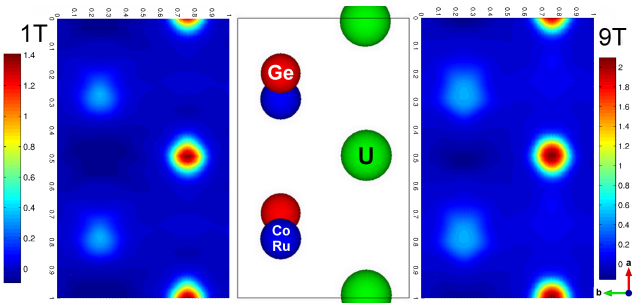


Figure 7: Projection of the spin density to the $a-b$ plane as a result of the maximum entropy method. Left panel shows data from 1 T scan and right panel shows data from higher field (9 T).

using FullProf[Rodriguez-Carvajal, 1993]/WinPlotr [Roisnel and Rodriguez-Carvajal,] software. Anisotropic extinction corrections for single crystals were used during the refinement. Refinement adjusted the content of Ru in our sample. According to the neutron diffraction it posses 13.5 ± 0.8 % of Ru on the cobalt position. Consequently followed the PND experiment on D3,ILL. We measured in two magnetic fields applied along the c axis (1 T a 9 T) in both cases below ordering temperature (i.e. at 1.65 K). Flipping ratios were collected for the set of Bragg reflections up to the $\frac{\sin\theta}{\lambda} = 0.9$ Å. Magnetic structure factors were evaluated using equation $R = \frac{I^+}{I^-} = \frac{F_N(\mathbf{Q})+F_M(\mathbf{Q})}{F_N(\mathbf{Q})-F_M(\mathbf{Q})}$ with structure factors resulting from the unpolarized diffraction and flipping ratios from PND. We used maximum entropy method in MAXENT software as a part of CCSL[Brown et al., 1999] as a tool for the evaluation of the spin density map. Results of this method are plotted in Figure 7.

We can observe positive density both on the U and Co (Ru) sites. For estimation of magnetic moments on the ions we integrated densities in spheres centered on the atomic positions. Diameter of the sphere was estimated according to the density extent around the atom. Results of this integration are in good agreement with values from the spin density model mentioned below. Data treatment based on the MAXENT method cannot provide us information about the spin and orbital component of the magnetic moment of each atom. For this reason is necessary to make up a spin density model. Model works on the basis of dipolar approximation and its fitting was done by FullProf[Rodriguez-Carvajal, 1993]/WinPlotr [Roisnel and Rodriguez-Carvajal,] software. Our

model involved magnetic moment centered on the U and Co ions. Regrettably spherical integrals are similar for both possible ion states of – U^{3+} and U^{4+}. It makes it almost impossible to find the valency of U ion within this method. This method confirmed positive magnetic density both on the U and Co site. It also shows expected anti-parallel alignment of orbital and spin component on the U ion where orbital momentum is parallel to the momentum on Co. Results of this model are summarized in the Figure 12.

2.2.3 Resistivity Measurements

Further study of the anisotropy properties of the well doped $UCo_{0.88}Ru_{0.12}Ge$ shows significant difference between resistivity dependence along the b and c axes. Temperature dependence of resistivity for b and c axis is plotted in Figure 8. Resistivity is slightly increasing down to the $\sim 227\,K$ for current applied along the b axis and then it slowly goes down to the anomaly near 7.6 K corresponding to the T_C. Similar dependence but with more pronounced maximum at far lower temperature $\sim 40\,K$ is observed for the c axis. Shoulder on the resistance curve is again present at 7.6 K. Resistivity ratio R/R_{300} dependence for c axis below T_C obeys Fermi liquid quadratic dependence together with the electron-spin wave scattering term. Inset of the Figure 8 also shows no trace of anomaly corresponding to the T_C in the external magnetic field of 9 T. The resistivity data are strongly influenced by external magnetic field (9 T) up to temperature 50 K where encounter with zero field data. Data for the b axis are quadraticaly dependent on temperature as well.

2.2.4 Dilatometry Measurements

Dilatometry measurements were performed in the laboratory of TU Vienna in helium cryostat at temperatures down to the 3 K using capacitance dilatometry cell[Rotter et al., 1998]. Thermal expansion measurements shows large anisotropy for all three axes (see Figure 9). Elastic properties above 60 K consistently correlate with the magnetocrystalline anisotropy behavior. Magnetic easy axis c shows smallest relative extension. Thus it is elastically hardest axes. Contradictory to that is magnetically hardest a axes that exhibit largest relative change (cell parameter a). This axis shows highest relative length change pointing on the elastically softest direction.

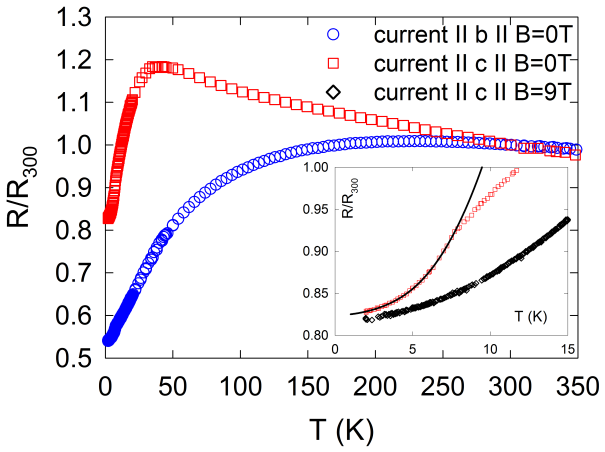


Figure 8: Temperature dependence of resistivity measured along the b and c axis of $UCo_{0.88}Ru_{0.12}Ge$ single crystal. Inset shows low temperature region where solid line represents the fit with quadratic dependence and black diamonds are data from measurement in magnetic field of 9 T.

And same as for magnetization curves b axis exhibits intermediate behavior. It is like that down to the 60 K where we can observe crossing between b and c axis. It is due to the change of curvature for the c axis below 60 K. Temperature dependence of relative length change exhibits some kind of bump at approximately 40 K. This anomaly has its counterpart at resistivity data measured along the c axis where it also has maximum in temperature dependence (Figure 8). Thermal expansion above T_C holds the hierarchy of the axis in the order $a-b-c$ which is only reversed form of sequence $c-b-a$ present in magnetization data. However this similarity is broken below T_C. In ordered state is b axis increased with lowering temperature. On the other hand a and c axes are shortened. T_C estimated from the thermal expansion data is in very good agreement with results of the heat capacity measurements and from temperature dependence of resistivity. All quantities are plotted in Figure 10 together with the coefficient of linear thermal expansion $\alpha(T)$. Coefficient of linear thermal expansion $\alpha(T) = \frac{1}{l}\frac{\partial l}{\partial T}$ is obtained as a numerical derivation of the relative length change with the temperature.

We used thermal expansion data for further investigation of the anisotropic properties of $UCo_{0.88}Ru_{0.12}Ge$. We fitted the data by additive relations assuming the vibrational and electron-magnetic contribution[Dev Mukherjee et al., 1998]. Obtained

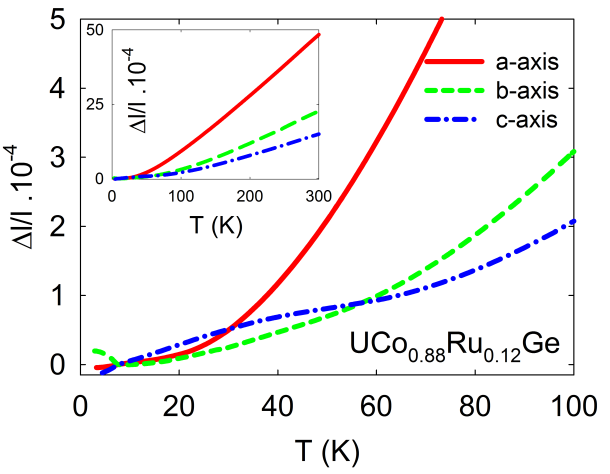


Figure 9: Thermal expansion at zero magnetic field for all three axes in the intermediate temperature range. Inset shows behavior at broad temperature range up to the room temperature. Relative values are shifted so they have zero value at Curie temperature $T_C = 7.6\,\mathrm{K}$.

Debye temperatures from the fit are 197 K, 345 K and 400 K for the a, b and c respectively. These values can be compared with the Debye temperature resulting from the heat capacity measurements 144 K. High Debye temperature of the magnetic easy axis shows that c direction is much harder than a axis that is almost aligned with the shortest distance between two nearest uranium atoms. In order to find out the uniaxial and hydrostatic pressure dependence of T_C we used the estimation by Ehrenfest relation $\frac{dT_C}{dp_i} = \frac{V_m \Delta\alpha_i}{\Delta(C/T)}$, where i stands for the different axis and $\Delta\alpha_i$ is a step in the linear thermal expansion coefficient and $\Delta(C/T)$ is a step in the specific heat divided by temperature both at the T_C. And finally $V_m = 3.14 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3 \cdot mol^{-1}}$ is the molar volume of the compound. Value of the step of anomaly at specific heat divided by temperature was determined as $\Delta(C/T) = 0.061\,(2)\,\mathrm{J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-2}}$. Calculated uniaxial pressure dependencies reveal that ferromagnetic order cannot be suppressed by uniaxial pressure along a and c direction – both values are positive. If we simply estimate linear pressure dependence of T_C we obtain critical pressure p_{cr} of $-11\,(1)$ GPa and $-5.1\,(4)$ GPa for a and c axis respectively. On the other hand, negative uniaxial pressure dependence for b axis promises possibility for suppression of the ordering temperature. Linear extrapolation gives us critical pressure of $1.5\,(1)$ GPa

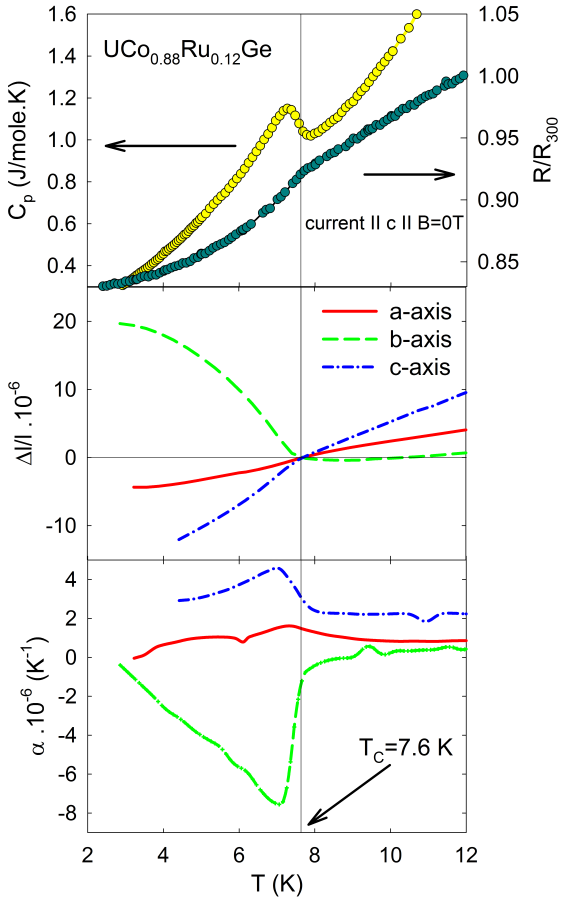


Figure 10: Comparison of heat capacity, resistivity along the c axis and thermal expansion data in the vicinity of $T_C = 7.6\,\mathrm{K}$. All quantities are measured in zero magnetic field. Solid line indicates the ordering temperature.

what is experimentally easily accessible value. We can also calculate hydrostatic pressure dependence. For this purpose we summed coefficients of linear thermal expansion along all three axes. If we use Ehrenfest relation for the step of volumetric expansion estimated as $\Delta\beta = 6.6\,(1) \cdot 10^{-6}\,\mathrm{K^{-1}}$ we obtain negative hydrostatic pressure dependence of $\frac{dT_C}{dp_{hstat}} = -3.4\,(2)\,\mathrm{K \cdot GPa^{-1}}$ which leads to experimentally accessible value of critical hydrostatic pressure $p_{cr,hydrostat} = 2.2\,(2)$ GPa where ferromagnetism should disappear.

3 General Discussion

Proper study of the $UCo_{1-x}Ru_xGe$ system revealed linear change of the lattice parameters leading to the overall volume increase. While the cell param-

eter a is shortened the parameter d_{U-U} is reduced as well. This lead to the increase of the hybridization between $5f$ states on the neighboring U ions. As a consequence we should observe suppression of the magnetic order. Nevertheless there is initial increase of the T_C and the magnetic moment. Both these quantities reaches their maximum at concentration $x_{max} \approx 0.1 - 0.12$ where T_C reaches the value of $T_{C,max} \approx 9\,K$ and spontaneous magnetic moment is $0.11\,\mu_B$(see Figure 11 and 3). This is in agreement with results of Pospíšil et al.[Pospisil et al., 2009]. Expected decrease of T_C and the magnetic moment comes after this strengthening of the magnetic order. It is caused by contraction of the d_{U-U} parameter and it is also result of the non-isoelectronic substitution of the Ru on the Co site. While removing one electron from the d shell we increase hybridization of the d and f orbitals and ferromagnetic order is even more reduced. Proper study of temperature dependence of specific heat and resistivity shows dramatic change of the behavior of these quantities similar to the case of U(Rh,Ru)Ge[Huy et al., 2007b] and U(Co,Fe)Ge[Huang et al., 2013] system. Heat capacity data revealed almost linear dependence of the C_m/T in the logarithmic temperature scale for the sample with $x = 0.31$ (see Figure 4). It should be the sign of NFL behavior. Another effect pointing on the dramatic change in the system is rapid increase of the Sommerfeld gamma coefficient (see panel c) in Figure 11). It reaches the value of $160\,mJ/mol \cdot K^2$ for $x = 0.3$. Further increase of Ru content leads to the decrease of this value. Refinement of the resistivity revealed another evidence for the NFL behavior in the system. Fitting of the equation $\rho = \rho_0 + AT^n$ on the low temperature part of the resistivity shows decrease of the n coefficient down to the value of 1.1 (see Figure 5 and panel b) in Figure 11). Linear temperature dependency of the resistivity is a sign of the NFL behavior in the three dimensional ferromagnet[Millis, 1993, Hertz, 1976]. All these signs bring us to the conclusion that we have strong evidence of the NFL behavior within the system for the concentration near critical concentration x_{cr}. Above mentioned findings are summarized in Figure 11. This set of three panels shows that there exists some certain critical concentration where ferromagnetic order disappears and NFL behavior is observed at the same time. Comparison with the results of Huy et al.[Huy et al., 2007b] on the similar U(Rh,Ru)Ge system and Huang et al.[Huang et al., 2013] on the even more analogous U(Co,Fe)Ge might point on the presence of Ferromagnetic QCP present at the critical concentration x_{cr}. The red stripe in Figure 11 marks the region where x_{cr} should be present (i.e. between $x = 0.30$ and $x = 0.31$). For more accurate specifying of the value we took use of the fact, that decrease of T_C scales according to the theoretical predictions and resultes in the value for critical concentration of $x_{cr} = 0.308(9)$. We also elucidated the mechanism which stands behind the initial increase of magnetic moment and T_C in the system. We prepared high quality single crystal near concentration x_{max} with composition of $UCo_{0.88}Ru_{0.12}Ge$. It exhibited strong magnetocrystalline anisotropy (see Figure 6) and it shows to be uniaxial ferromagnet with c axis as the magnetic easy axis. It is in general agreement with parent UCoGe compound, but the value of spontaneous magnetic moment is significantly higher ($0.21\,\mu_B$). Curie temperature is enhanced as well ($T_C = 7.6\,K$). We performed PND on this single crystal in order to find out the values and directions of magnetic moments in the compound. MAXENT method revealed magnetic moment both on the U and Co ions (see Figure 7). This is in agreement with the results for the parent compound according to the Prokeš et al.[Prokes et al., 2010]. But contrary to the negative spin density on Co site for UCoGe, we observed positive spin density both on the U and Co ion. This is pointing to the fact, that magnetic moments on the U and Co in the $UCo_{0.88}Ru_{0.12}Ge$ are no more anti parallel like in the case of UCoGe, but they point in the same direction. This leads to the increase of the magnetic moment and T_C which was observed in previous study on poly crystals (see Figure 13). Compared quantities and directions of magnetic moments are shown in Figure 12. We propose two mechanisms of the spin reorientation on the Co site. Similarly to the spin-flip and spin-flop metamagnetic transitions either gradual or sudden reorientation of magnetic moment on the cobalt ion are possible. Proper study of this reorientation and possible connection with the presence of the superconductivity is necessary.

Strong anisotropy properties of the $UCo_{0.88}Ru_{0.12}Ge$ single crystal were observed also on the resistivity data exhibiting maximum in the temperature dependence of resistivity at $\sim 40\,K$ if measured along the c axis. On the other hand temperature dependence of resistivity along the b axis shows only broad plateau. Resistivity is

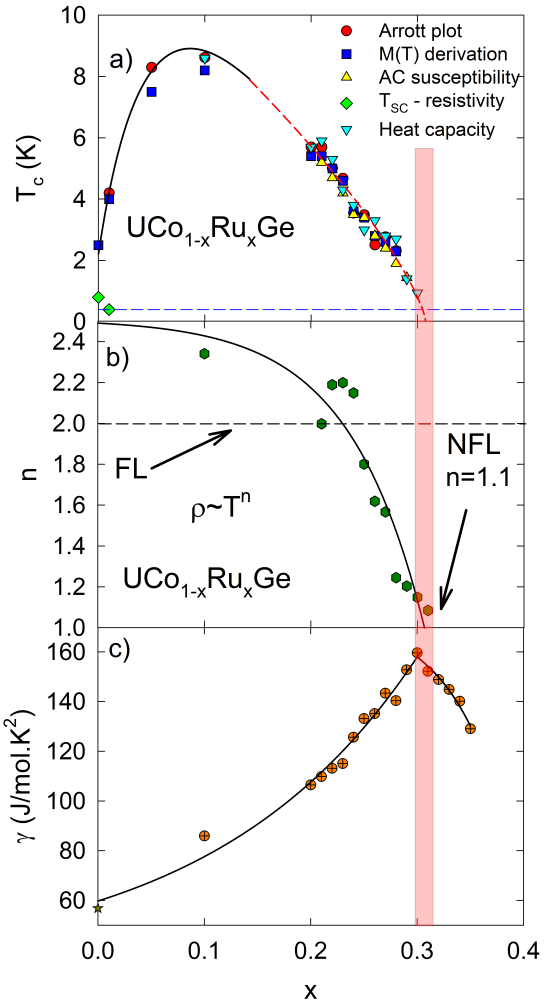


Figure 11: Panel a) shows phase diagram based on measurements of polycrystalline samples. Plot is supplemented by the results of the resistivity measurement revealing occurrence of superconductivity in the parent UCoGe compound and in the polycrystalline $UCo_{0.99}Ru_{0.01}Ge$. These two data points were taken from work of Pospíšil et al.[Pospisil et al., 2009]. Black solid line is only guide for the eye while the red dashed part is a fit of $T_C \sim (x_{cr} - x)^{3/4}$. Blue dashed line represents the lowest temperature limit for performed measurement(0.4 K). Panel b) shows coefficients n from fitting of the low temperature dependence of resistivity with equation $\rho = \rho_0 + AT^n$. Dashed line shows the expected value for the ordinary Fermi liquid behavior. And finally panel c) shows development of Sommerfeld γ coefficient obtained from the heat capacity data. Data point for parent UCoGe which is marked by gold star is taken from the work of Gasparini et al.[Gasparini et al., 2010]. Red stripe shows the region of critical concentration x_{cr} with possible Quantum Critical Point.

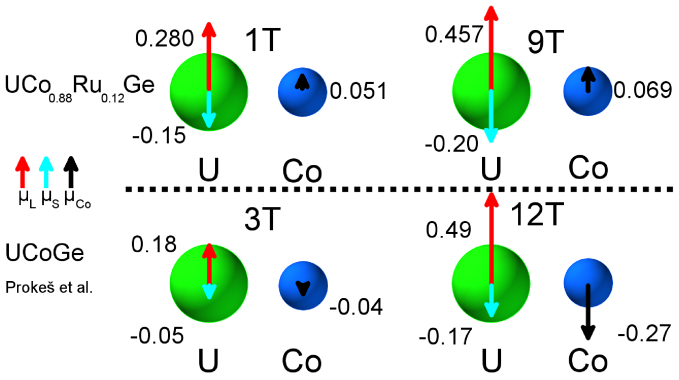


Figure 12: Comparison of the direction and values of magnetic moments and their components for the parent UCoGe compound[Prokes and Gukasov, 2009] and results of our work on the doped $UCo_{0.88}Ru_{0.12}Ge$. Red arrows show orbital momentum, cyan arrows stands for spin component and black arrows marks momentum on the cobalt site. All values are in the units of Bohr magneton (μ_B) and lengths of all arrows are in the relative scale.

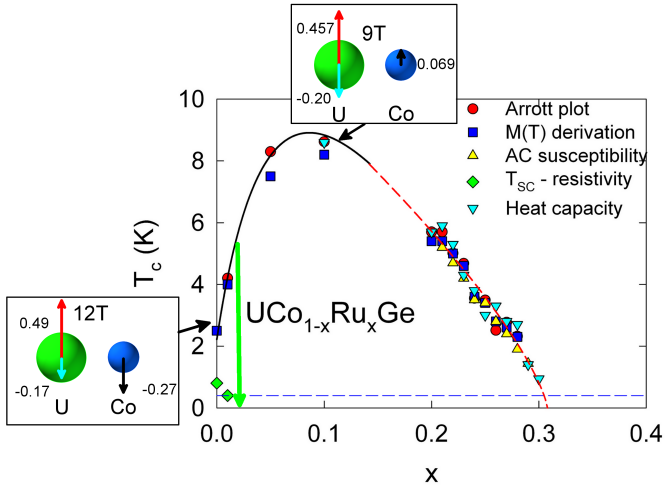


Figure 13: Phase diagram of the $UCo_{1-x}Ru_xGe$ system together with the sketches of the orientation of the magnetic moment on the uranium and cobalt site. We used the same notation as in the Figure 2. Data for the UCoGe are taken from Prokeš et al.[Prokes and Gukasov, 2009]. Green arrow shows the region where magnetic moment on the cobalt site should be zero. It is expected at the same concentration where superconductivity disappears.

quadratic dependent on the temperature at lower temperatures for both the c and b direction. Dilatometry study on the $UCo_{0.88}Ru_{0.12}Ge$ compound revealed that thermal expansion is strongly anisotropic as well. Calculations based on the Ehrenfest relations revealed that uniaxial pressure applied along the a or c axis should increase the T_C while the pressure on the b axis should suppress ferromagnetic order in the compound at 1.5 GPa. Similar result as for the b direction counts also for the hydrostatic case where critical value of the applied pressure should be approximately 2.2 GPa.

4 Conclusions

This work brings unique report on the development of the magnetic order in the $UCo_{1-x}Ru_xGe$. Broad range of measurements performed on the poly crystals reveal dramatic increase both of the T_C and the magnetic moment with increasing Ru content. Background of this magnetic order strengthening was studied on single crystal with composition $UCo_{0.88}Ru_{0.12}Ge$ that is in vicinity of x_{max}. PND experiments performed on this single crystal revealed presence of magnetic moments both on the U and Co sites. Moments on these ions are oriented parallel 12, i.e. opposite to the case of parent UCoGe[Prokes and Gukasov, 2009]. Calculations based on Ehrenfest relations using dilatometry and HC data revealed strong anisotropy of the system expressed by different response of T_C on the uniaxial pressure. Anisotropy of transport properties is also noticeable on the temperature dependence of resistivity (see Figure 8). Rapid increase of the ordering temperature and magnetic moment is changed for concentrations $x > x_{max}$ where steady decrease of these quantities is observed. The tendency how T_C changes with x is in very good agreement with theoretical predictions for three dimensional ferromagnets exhibiting NFL behavior[Millis, 1993, Hertz, 1976] with the critical concentration $x_{cr} \approx 0.308$. Signs of NFL behavior are also observed in the heat capacity (see Figure 4 and panel c) in Figure 11) and resistivity data (see Figure 5 and panel b) in Figure 11). It might be a sign of possible presence of the QCP at critical concentration x_{cr}. Our results show, that U(Co,Ru)Ge system is similar to the previously reported U(Rh,Ru)Ge[Huy et al., 2007b] or U(Co,Fe)Ge[Huang et al., 2013] where QCP was reported.

Acknowledgments

We would like to thank to V. Sechovsky, J. Prokleska, B. Vondrackova, G. Nenert, A. Stunnault, K. Prokes, M. Kriegisch and H. Müller for their help. This work was supported by Charles University Grant Agency Project # 719612.

References

[Akazawa et al., 2004] Akazawa, T., Hidaka, H., Fujiwara, T., Kobayashi, T. C., Yamamoto, E., Haga, Y., Settai, R., and Onuki, Y. (2004). Pressure-induced superconductivity in ferromagnetic uir without inversion symmetry. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 16(4):L29.

[Aoki et al., 2001] Aoki, D., Huxley, A., Ressouche, E., Braithwaite, D., Flouquet, J., Brison, J.-P., Lhotel, E., and Paulsen, C. (2001). Coexistence of superconductivity and ferromagnetism in urhge. *Nature*, 413(6856):613–616.

[Arrott, 1957] Arrott, A. (1957). Criterion for ferromagnetism from observations of magnetic isotherms. *Physical Review*, 108(6):1394–1396.

[Brown et al., 1999] Brown, P. J., Matthewman, J., David, W., Forsyth, J., Matthewman, J., and Wright, J. (1999). The cambridge crystallographic subroutine library.

[Buschow et al., 1990] Buschow, K. H. J., Bruck, E., van Wierst, R. G., de Boer, F. R., Havela, L., Sechovsky, V., Nozar, P., Sugiura, E., Ono, M., Date, M., and Yamagishi, A. (1990). Specific heat and magnetic behavior of utge compounds. *Journal of Applied Physics*, 67(9):5215–5217.

[Canepa et al., 1996] Canepa, F., Manfrinetti, P., Pani, M., and Palenzona, A. (1996). Structural and transport properties of some utx compounds where t=fe, co, ni and x=si, ge. *Journal of Alloys and Compounds*, 234(2):225–230.

[Cordero et al., 2008] Cordero, B., Gomez, V., Platero-Prats, A. E., Reves, M., Echeverria, J., Cremades, E., Barragan, F., and Alvarez, S. (2008). Covalent radii revisited. *Dalton Transactions*, 0(21):2832–2838.

[Dev Mukherjee et al., 1998] Dev Mukherjee, G., Bansal, C., and Chatterjee, A. (1998). Thermal expansion analysis of $fe_{3-x}mn_xal$ alloys. *Physical Review B*, 58(10):6172–6179.

[Fay and Appel, 1980] Fay, D. and Appel, J. (1980). Coexistence of p-state superconductivity and itinerant ferromagnetism. *Physical Review B*, 22(7):3173–3182.

[Gasparini et al., 2010] Gasparini, A., Huang, Y. K., Huy, N. T., Klaasse, J. C. P., Naka, T., Slooten, E., and de Visser, A. (2010). The superconducting ferromag-

net ucoge. *Journal of Low Temperature Physics*, 161(1-2):134–147.

[Hassinger et al., 2008] Hassinger, E., Aoki, D., Knebel, G., and Flouquet, J. (2008). Pressure-temperature phase diagram of polycrystalline ucoge studied by resistivity measurement. *Journal of the Physical Society of Japan*, 77(7):073703.

[Hertz, 1976] Hertz, J. A. (1976). Quantum critical phenomena. *Physical Review B*, 14(3):1165–1184.

[Huang et al., 2013] Huang, K., Hamlin, J. J., Baumbach, R. E., Janoschek, M., Kanchanavatee, N., Zocco, D. A., Ronning, F., and Maple, M. B. (2013). Ferromagnetic quantum critical point in $uco_{1-x}fe_xge$. *Physical Review B*, 87(5):054513. PRB.

[Huy et al., 2007a] Huy, N. T., Gasparini, A., de Nijs, D. E., Huang, Y., Klaasse, J. C. P., Gortenmulder, T., de Visser, A., Hamann, A., Gorlach, T., and von Lohneysen, H. (2007a). Superconductivity on the border of weak itinerant ferromagnetism in ucoge. *Physical Review Letters*, 99(6):067006.

[Huy et al., 2007b] Huy, N. T., Gasparini, A., Klaasse, J. C. P., de Visser, A., Sakarya, S., and van Dijk, N. H. (2007b). Ferromagnetic quantum critical point in urhge doped with ru. *Physical Review B*, 75(21):212405.

[Millis, 1993] Millis, A. J. (1993). Effect of a nonzero temperature on quantum critical points in itinerant fermion systems. *Physical Review B*, 48(10):7183–7196.

[Mira et al., 2002] Mira, J., Rivas, J., Rivadulla, F., and Lopez Quintela, M. A. (2002). Identification of first- and second-order magnetic phase transitions in ferromagnetic perovskites. *Physica B: Condensed Matter*, 320(1-4):23–25.

[Pospisil et al., 2011] Pospisil, J., Prokes, K., Reehuis, M., Tovar, M., Poltierova Vejpravova, J., Prokleska, J., and Sechovsky, V. (2011). Influence of sample preparation technology and treatment on magnetism and superconductivity of ucoge. *Journal of the Physical Society of Japan*, 80(Copyright (C) 2011 The Physical Society of Japan):084709.

[Pospisil et al., 2009] Pospisil, J., Vejpravova, J. P., Divis, M., and Sechovsky, V. (2009). Ferromagnetism in ucoge stabilized by transition metal doping. *Journal of Applied Physics*, 105(7):07E114.

[Prokes et al., 2010] Prokes, K., de Visser, A., Huang, Y. K., Fak, B., and Ressouche, E. (2010). Anomalous spin distribution in the superconducting ferromagnet ucoge studied by polarized neutron diffraction. *Physical Review B*, 81(18):180407R.

[Prokes and Gukasov, 2009] Prokes, K. and Gukasov, A. (2009). Magnetization densities in urhsi studied by polarized neutron diffraction. *Physical Review B*, 79(2):024406.

[Prokleska et al., 2010] Prokleska, J., Pospisil, J., Vejpravova Poltierova, J., Sechovsky, V., and Sebek, J. (2010). Low temperature ac susceptibility of ucoge crystals. *Journal of Physics: Conference Series*, 200:012161.

[Rietveld, 1969] Rietveld, H. (1969). A profile refinement method for nuclear and magnetic structures. *Journal of Applied Crystallography*, 2(2):65–71.

[Rodriguez-Carvajal, 1993] Rodriguez-Carvajal, J. (1993). Recent advances in magnetic structure determination by neutron powder diffraction. *Physica B: Condensed Matter*, 192(1-2):55–69.

[Roisnel and Rodriguez-Carvajal,] Roisnel, T. and Rodriguez-Carvajal, J. Winplotr: a windows tool for powder diffraction patterns analysis. In Delhez, R. and Mittemeijer, E., editors, *EPDIC 7 - Seventh European Powder Diffraction Conference*. Trans Tech Publications.

[Rotter et al., 1998] Rotter, M., Muller, H., Gratz, E., Doerr, M., and Loewenhaupt, M. (1998). A miniature capacitance dilatometer for thermal expansion and magnetostriction. *Review of Scientific Instruments*, 69(7):2742–2746.

[Sakarya et al., 2008] Sakarya, S., Huy, N. T., van Dijk, N. H., de Visser, A., Wagemaker, M., Moleman, A. C., Gortenmulder, T. J., Klaasse, J. C. P., Uhlarz, M., and Löhneysen, H. (2008). Evolution of ferromagnetic order in urhge alloyed with ru, co and si. *Journal of Alloys and Compounds*, 457(1-2):51–56.

[Saxena et al., 2000] Saxena, S. S., Agarwal, P., Ahilan, K., Grosche, F. M., Haselwimmer, R. K. W., Steiner, M. J., Pugh, E., Walker, I. R., Julian, S. R., Monthoux, P., Lonzarich, G. G., Huxley, A., Sheikin, I., Braithwaite, D., and Flouquet, J. (2000). Superconductivity on the border of itinerant-electron ferromagnetism in uge2. *Nature*, 406(6796):587–592.

[Sechovsky and Havela, 1998] Sechovsky, V. and Havela, L. (1998). *Chapter 1 Magnetism of ternary intermetallic compounds of uranium*, volume Volume 11, pages 1–289. Elsevier.

[Tran et al., 1990] Tran, V. H., Troc, R., and Urski, D. (1990). Electrical resistivity investigations of ut(si, ge) series. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 87(3):291–298.

[Troc and Tran, 1988] Troc, R. and Tran, V. H. (1988). Magnetic properties of ut(si, ge) series. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 73(3):389–397.

[Vegard, 1921] Vegard, L. (1921). Die konstitution der mischkristalle und die raumfüllung der atome. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 5(1):17–26.

[Yeung et al., 1986] Yeung, I., Roshko, R. M., and Williams, G. (1986). Arrott-plot criterion for ferromagnetism in disordered systems. *Physical Review B*, 34(5):3456–3457. PRB.

Steinmetzov zákon v magneticky mäkkých kompozitných materiáloch na báze železa

Vladimír Vojtek[1]*
Školiteľ: Peter Kollár[1‡]

[1] Katedra fyziky kondenzovaných látok , Ústav fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta, UPJŠ, Park Angelinum 9, 041 54 Košice, Slovenská republika

Abstrakt

V tejto práci bola skúmaná trojica prstencových vzoriek magneticky mäkkých kompozitov, pričom cieľom bolo preskúmať Steinmetzov zákon pre túto skupinu materiálov. Analýzou závislostí hysteréznych strát od maximálnej magnetickej indukcie boli nájdené oblasti platnosti Steinmetzovho zákona i príslušné hodnoty koeficientov pre jednotlivé vzorky. Pomocou Rayleigho zákona bol navyše nájdený fyzikálny význam jednotlivých koeficientov v oblasti veľmi malých magnetických polí. Zároveň bol navrhnutý nový lineárny model opisujúci vetvy hysteréznej slučky v jednotlivých jej častiach lineárnou funkciou a určujúci hodnoty hysteréznych strát v závislosti od maximálnej magnetickej indukcie a prislúchajúcej hodnoty koercitívneho poľa, vhodný pre magneticky mäkké kompozity, v ktorom na rozdiel od Steinmetzovho zákona má každá veličina jednoznačný fyzikálny rozmer.

Kľúčové slová: Hysterézne straty, Magneticky mäkké kompozitné materiály, Steinmetzov zákon

1 Úvod

Neoddeliteľnou súčasťou dnešných elektronických zariadení sú rôzne magnetické materiály, pričom jednou z hlavných charakteristík každého takéhoto materiálu sú jeho celkové magnetické straty W, ktoré predstavujú časť energia, ktorá sa v magnetiku, ktoré je vystavené vonkajšiemu časovo premennému magnetickému poľu, nenávratne „stráca“ (mení sa na zväčša neužitočné teplo) v dôsledku javov, ktoré v danom materiáli prebiehajú (zmena doménovej štruktúry, tok vírivých prúdov).

Celkové magnetické straty vo všeobecnosti rozdeľujeme na tri zložky a to hysterézne straty W_h, straty vírivými prúdmi W_v a anomálne (zvyškové) straty W_a [Coey, 2009] pričom platí

$$W = W_h + W_v + W_a . \qquad (1)$$

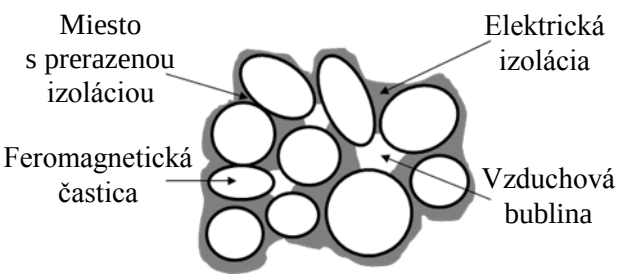
Nakoľko práve magnetické straty sú jedným z hlavných kritérií, ktoré určujú aplikačný potenciál daného materiálu, sú už dlhodobo dôležitým predmetom výskumu vo fyzike, metalurgii, či chémii, pričom bolo vytvorených viacero fyzikálnych modelov opisujúcich správanie sa magnetických strát v závislosti od rôznych parametrov a veličín [Kollár et al., 2013], [Goodenough, 2002]. Jedným z takýchto modelov je aj emirický Steinmetzov zákon, opisujúci priebeh hysteréznych strát v závislosti od maximálnej magnetickej indukcie, ktorá pri premagnetovaní vo feromagnetiku vzniká

$$W_h = K_h B_{\max}^{x} , \qquad (2)$$

pričom multiplikatívny koeficient K_h aj exponent x sú reálne parametre, ktorých hodnota je daná typom materiálu a zahŕňajú v sebe rôzne štrukturálne aspekty ovplyvňujúce magnetizačné procesy vo feromagnetiku [Steinmetz, 1984]. Steinmetzov zákon bol pôvodne vytvorený a aplikovaný na plechy, s postupom času však tento zákon našiel uplatnenie pre rôzne iné magnetické materiály (rôzne druhy zliatin), doposiaľ však nebol overený pre magneticky mäkké kompozitné materiály. Tie v súčasnej dobe nachádzajú široké využitie v praxi, častokrát práve ako náhrada tradične používaných valcovaných plechov a preto je potrebné skúmať Steinmetzov zákon práve v týchto materiáloch.

2 Magneticky mäkké kompozity

Magneticky mäkké kompozity predstavujú materiály zložené z malých feromagnetických častíc, rozmerov desiatky až stovky mikrometrov, ktoré sú od seba navzájom oddelené elektricky izolačnou vrstvou, tak ako je to schematicky znázornené na Obr. 1 [Kronmüller and Parkin, 2007].



Obr. 1 Schematicky znázornený kompozitný materiál s poruchami (prerazená izolácia, vzduchové bubliny).

* vojtek.vlado@gmail.com
‡ peter.kollar@upjs.sk

Tieto materiály vykazujú jedinečné fyzikálne vlastnosti, ako sú najmä vysoký špecifický elektrický odpor, veľmi nízke straty vírivými prúdmi a relatívne vysoká magnetická permeabilita, pričom zároveň ponúkajú rôzne možnosti v trojrozmernom tvarovaní vzorky a v redukcii veľkosti a hmotnosti zariadení. Vďaka týmto vlastnostiam magneticky mäkké kompozity v posledných desaťročiach postupne nahrádzajú tradičné materiály používané v niektorých elektronických aplikáciách, ako sú valcované plechy, ferity, či amorfné a nanokryštalické materiály. Majú široké využitie pri výrobe alternátorov, generátorov, elektrických motorov alebo tiež v transformátoroch a aplikáciách pri vysokých teplotách a nachádzajú tak využitie v rôznych elektronických a elektrotechnických aplikáciách, telekomunikačných, počítačových aj automobilových technológiách [Shokrollahi and Janghorban, 2007].

Výroba takýchto materiálov začína prípravou prášku, pozostávajúceho z magneticky mäkkých častíc (zväčša čo najčistejšie železo), ktoré sú obalené elektricky izolačnou vrstvou (organický alebo anorganický materiál) zabraňujúcou toku nežiaducich vírivých prúdov medzi časticami v striedavom magnetickom poli. Následne je takýto prášok zmiešaný s vhodných mazivom (pre ľahšie spracovanie), či spojivom (pre dosiahnutie vyššej pevnosti) a zlisovaný do požadovaného tvaru. Na rozdiel od valcovaných plechov tak možno jedným lisovaním vyrobiť súčiastku aj pomerne komplikovaného geometrického tvaru pozostávajúcu z jediného kusu. Pri kompaktovaní je však nutné dbať na to, aby nedošlo ku poškodenie izolačnej vrstvy medzi časticami, čo by spôsobilo následne nárast strát vírivými prúdmi. Takto zlisovaný kompozit sa na záver vystaví tepelnej úprave (žíhanie do teploty aj 700°C). Jednotlivé parametre, ako sú veľkosť častíc, teplota žíhania, tlak pri lisovaní, či stupeň porozity výsledného materiálu, musia byť pre dosiahnutie požadovaných vlastností kompozitu počas celého výrobného procesu prísne kontrolované. Pre výsledné hodnoty permeability, celkových magnetických strát, či remanentnej magnetizácie je zároveň rozhodujúci geometrický tvar častíc a ich pomerné zastúpenie voči izolačnej vrstve. Jednotlivé vlastnosti však zmenou týchto parametrov nie je možné meniť individuálne, nakoľko spolu vzájomne súvisia. Zvolené výrobné parametre sú teda výsledkom správne zvolených kompromisov.

3 Experiment

V experimentálnej časti práce bola pre každú vzorku zmeraná séria kvázistatických hysteréznych slučiek pri rôznych hodnotách maximálnej magnetickej indukcie, pre ktoré boli vyčíslené veľkosti hysteréznych strát a tie boli ďalej analyzované.

3.1 Vzorky a experimentálne metódy

Pre štúdium Steinmetzovho zákona v magneticky mäkkých kompozitoch na báze železa bola použitá trojica vzoriek tohto materiálu. Išlo o prstencové vzorky vyrobené práškovou metalurgiou na Ústave materiálového výskumu Slovenskej akadémie vied v Košiciach (zamestnanci Ing. Radovan Bureš, Csc. a Ing. Mária Fáberová).

Prvá zo vzoriek bola zhotovená z komerčne vyrábaného materiálu Somaloy® 700 (Höganäs AB, Švédsko) výrobcom odporúčanou technológiou. Ide o železný prášok, ktorého častice sú obalené v tenkej elektricky izolačnej vrstve, pričom objemový podiel magnetickej zložky voči izolácii je 98,7 obj. %. Táto vzorka bola označená skratkou SOM.

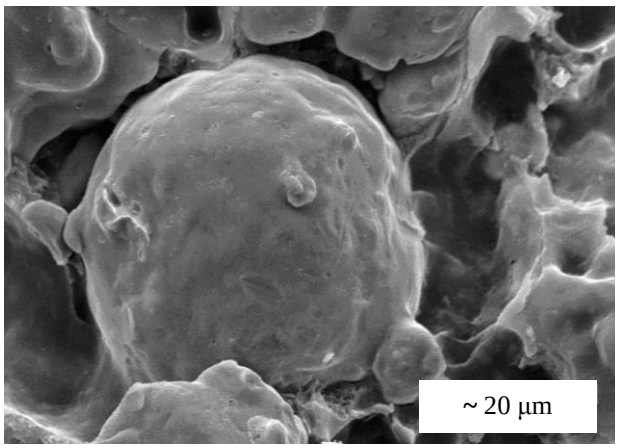
Vo zvyšných dvoch vzorkách tvoril magnetickú zložku železný prášok ASC 100.29 (čistota železa 95 %) od švédskeho výrobcu Höganäs AB a ako izolačná vrstva bola použitá fenol-formaldehydová živica Bakelit ATM, pričom obe vzorky boli zhotovené rovnakým postupom. V jednej zo vzoriek bol objemový podiel feromagnetických častíc ku izolačnej vrstve 90:10, podľa čoho bola vzorka označená skratkou Fe90/ATM10. V druhej vzorke bol tento podiel zložiek 80:20, a teda vzorka bola označená Fe80/ATM20.

Parametre skúmaných vzoriek i výrobných postupov sú zapísané v Tab. 1.

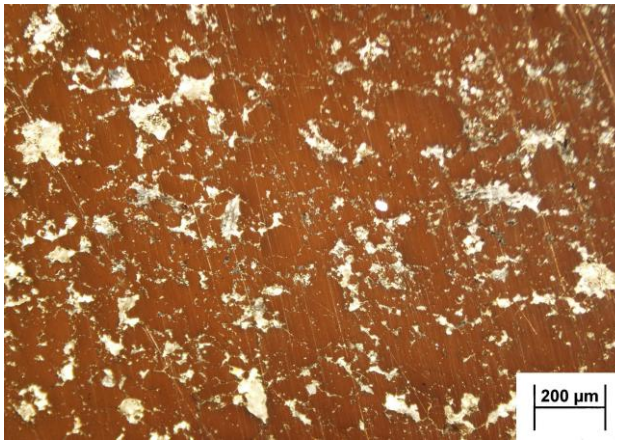
Tab. 1: Parametre skúmaných vzoriek a ich výrobných postupov.

Vzorka	SOM	Fe90/ ATM10	Fe80/ ATM20
Výška [mm]	2,77	2,67	2,44
Vnút. priemer[mm]	17,65	17,74	17,90
Vonk. priemer [mm]	24,11	24,12	24,14
Hmotnosť [g]	3,868	3,438	3,030
Teplota žíhania [°C]	530	165	165
Tlak lisovania [MPa]	800	600	600

Pomocou skenovacieho elektrónového mikroskopu JEOL JSM-7000F bola zhotovená snímka feromagnetickej častice obalenej v izolačnej vrstve z lomu vzorky Fe90/ATM10 (Obr. 2) a pomocou svetelného optického mikroskopu OLYMPUS GX71 s digitálnym spracovaním obrazu bola sledovaná mikroštruktúra tejto vzorky v polarizovanom svetle (Obr. 3). Obe pozorovania boli realizované Ing. R. Burešom, CSc. a Ing. M. Fáberovou na SAV v Košiciach.



Obr. 2 Snímka feromagnetickej častice obalenej v izolačnej vrstve z lomu vzorky Fe90/ATM10.



Obr. 3 Mikroštruktúra vzorky Fe90/ATM10 (biela farba – živica).

Skúmané vzorky prešli povrchovou úpravou, čím boli z ich povrchu odstránené nerovnosti. Následne bolo na vzorky navinuté primárne vinutie na vytváranie budiaceho magnetického poľa a sekundárne vinutie na detekciu odozvy skúmaných vzoriek.

Na meranie kvázistatických hysteréznych slučiek bola použitá meracia aparatúra využívajúca komutačnú metódu s princípom založenom na integrovaní indukovaného napätia v sekundárnom vinutí fluxmetrom. Samotné meranie bolo riadené počítačom prostredníctvom programu, vytvoreného v grafickom vývojovom prostredí LabView.

Pred samotnými meraniami hysteréznych slučiek bola najprv každá vzorka demagnetovaná. Následne boli vykonané merania hysteréznych slučiek v oblasti veľmi malých polí (s intenzitou niekoľko desiatok A/m), t.j. v Rayleigho oblasti. Intenzita aplikovaného magnetického poľa sa postupne pri každom ďalšom meraní zvyšovala, až boli dosiahnuté maximálne prípustné hodnoty (niekoľko desiatok tisíc A/m) dané najmä termoelektrickými vlastnosťami drôtu a počtom závitov primárneho vinutia.

3.2 Merania v Rayleigho oblasti

Meraniami hysteréznych slučiek sa začalo v oblasti veľmi malých vonkajších magnetických polí (s intenzitou niekoľko desiatok A/m), t.j. v Rayleigho oblasti. Veľkou výhodou takýchto meraní je platnosť Rayleigho zákona [Chikazumi, 1997], [Hajko et al., 1982] ktorý umožňuje analytické vyjadrenie krivky prvotnej magnetizácie kvadratickou funkciou

$$B = \mu_0 \mu_{poč}^{(r)} H + \mu_0 \nu H^2 , \qquad (3)$$

kde B je magnetická indukcia feromagnetika, μ_0 je magnetická permeabilita vákua, $\mu^{(r)}_{poč}$ je relatívna počiatočná permeabilita magnetika, H je intenzita vonkajšieho magnetického poľa a ν je Rayleigho konštanta súvisiaca s nevratnými posunmi doménových stien feromagnetika. V Rayleigho oblasti možno zároveň vyjadriť aj hysteréznu slučku prostredníctvom parabolických kriviek

$$B = \mu_0 \left(\mu_{poč}^{(r)} + \nu H_{\max} \right) H \pm \frac{\nu}{2} \mu_0 \left(H_{\max}^2 - H^2 \right), \qquad (4)$$

kde H_{max} je hodnota intenzity vonkajšieho magnetického poľa prislúchajúca maximálnej magnetickej indukcii B_{max} (vrchol slučky), pričom znamienko plus zodpovedá hornej vetve a znamienko mínus dolnej vetve hysteréznej slučky.

Aproximovaním experimentálne nameraných kriviek prvotných magnetizácií kvadratickou funkciou (3) a zvlášť horných a dolných vetiev niekoľkých hysteréznych slučiek v čo najmenších magnetických poliach parabolami (4), boli určené hodnoty relatívnych počiatočných permeabilít a Rayleigho konštánt pre každú zo skúmaných vzoriek (Tab. 2).

Tab. 2: Relatívne počiatočné permeability a Rayleigho konštanty skúmaných vzoriek.

Vzorka	SOM	Fe90/ ATM10	Fe80/ ATM20
Relatívna počiatočná permeabilita [-]	122,0	55,1	46,4
Rayleigho konštanta [m/A]	1,750	0,097	0,066

Vďaka analytickému vyjadreniu hysteréznej slučky umožňuje Rayleigho model jednoznačne určiť hysterézne straty rovné ploche kvázistatickej slučky a to preintegrovaním cez jej hornú a dolnú vetvu (4) [Bertotti, 1998]

$$W_h = \oint_{HS_{stat}} H \, dB = \frac{4}{3} \mu_0 \nu H_{\max}^3 , \qquad (5)$$

pričom vyjadrením H_{max} ako funkcie B_{max} pomocou vzťahu (3), možno hysterézne straty vyjadriť aj v tvare

$$W_h = \frac{1}{6\mu_0^2 \nu^2} \left(-\mu_0 \mu_{poč}^{(r)} + \sqrt{\left(\mu_0 \mu_{poč}^{(r)} \right)^2 + 4\mu_0 \nu B_{\max}} \right)^3 . \qquad (6)$$

V snahe priblížiť závislosť (6) formálne čo najviac ku Steinmetzovmu zákonu (2) možno tento vzťah rozvinúť do Taylorovho rádu v okolí $B_{max}=0$ (Maclaurinov rád), nakoľko celý Rayleigho zákon platí len v okolí malých magnetických indukcií

$$W_h = \frac{4\nu}{3\left(\mu_{poč}^{(r)}\right)^3 \mu_0^2} B_{\max}^3 - \frac{4\nu^2}{\left(\mu_{poč}^{(r)}\right)^5 \mu_0^3} B_{\max}^4 + \\ + \frac{12\nu^3}{3\left(\mu_{poč}^{(r)}\right)^7 \mu_0^4} B_{\max}^5 + O\left(B_{\max}^6\right) \quad . \qquad (7)$$

Zanedbaním členov stupňa vyššieho ako 3 vo vzťahu (7) možno pre hysterézne straty v oblasti veľmi malých magnetických polí písať

$$W_h \approx \frac{4\nu}{3\left(\mu_{poč}^{(r)}\right)^3 \mu_0^2} B_{\max}^3 , \qquad (8)$$

kde pomocou substitúcie

$$K_h \equiv \frac{4\nu}{3\left(\mu_{poč}^{(r)}\right)^3 \mu_0^2} , \qquad (9)$$

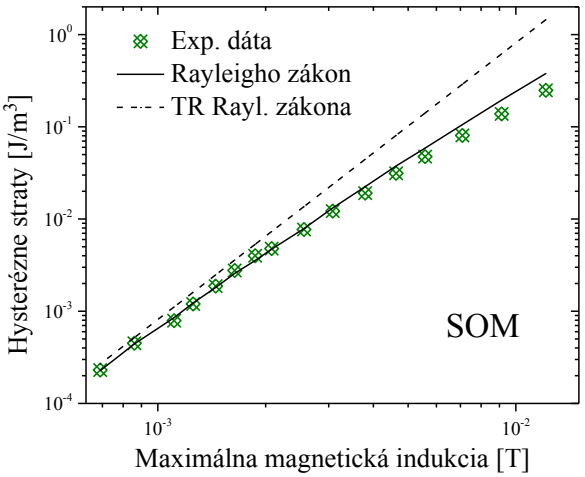
je vzťah (8) formálne totožný so Steinmetzovým zákonom (2) s hodnotou exponentu $x=3$.

Týmto postupom teda bol nájdený fyzikálny význam koeficientov v Steinmetzovom zákone v oblasti veľmi malých magnetických polí, pričom multiplikatívny koeficient je v tejto oblasti daný výlučne materiálovými parametrami a exponent tu nadobúda konštantnú hodnotu.

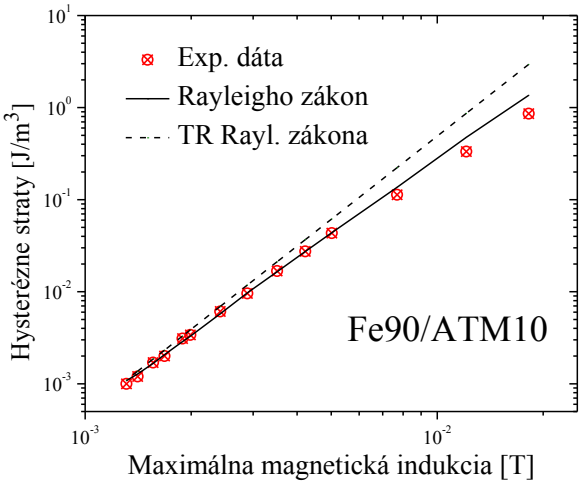
Platnosť vzťahu (8) bola experimentálne potvrdená, čo je zobrazené na Obr. 4, Obr. 5 a Obr. 6, kde spolu s experimentálne nameranými hodnotami hysteréznych strát pri rôznych hodnotách maximálnej magnetickej indukcie (izolované body), je zobrazený aj priebeh hysteréznych strát získaných z Rayleigho zákona (6) (plná čiara) i z jeho Taylorovho rozvoja do rádu 3 (8) (prerušovaná čiara). Na daných obrázkoch vidno v oblasti veľmi malých polí zhodu výsledkov všetkých troch postupov, pričom postupne so zvyšujúcou sa hodnotou B_{max} dochádza prirodzene najskôr k odklonu závislosti z Taylorovho rozvoja Rayleigho zákona a neskôr aj závislosti získanej z pôvodného Rayleigho zákonom od samotných experimentálnych dát.

3.3 Merania nad Rayleigho oblasťou

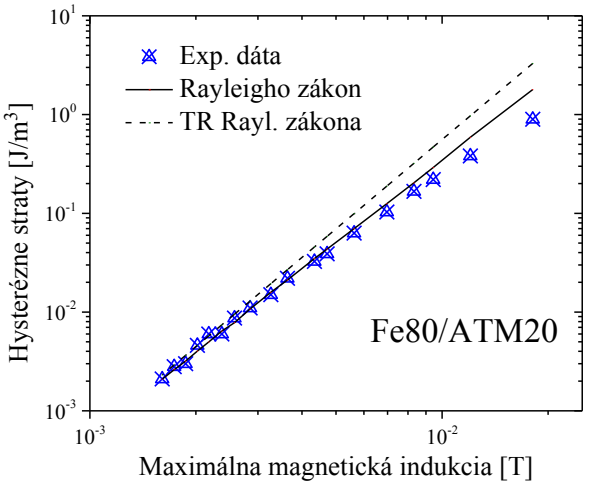
Meraniami hysteréznych slučiek sa pokračovalo aj pri vyšších hodnotách maximálnej magnetickej indukcie a to až do maximálnej možnej prípustnej hodnoty danej použitým primárnym vinutím. Z každej nameranej slučky bola určená hodnota hysteréznych strát a tieto dáta boli analyzované za účelom nájdenia oblasti platnosti Steinmetzovho zákona a určenia hodnôt jeho koeficientov.



Obr. 4 Porovnanie priebehu hysteréznych strát získaných z rôznych postupov pre vzorku SOM.



Obr. 5 Porovnanie priebehu hysteréznych strát získaných z rôznych postupov pre vzorku Fe90/ATM10.



Obr. 6 Porovnanie priebehu hysteréznych strát získaných z rôznych postupov pre vzorku Fe80/ATM20.

Samotná analýza bola realizovaná pomocou metódy tzv. kĺzavého okna, kde okno predstavovalo podmnožinu piatich sa sebou idúcich maximálnych magnetických indukcií. V každom okne bol priebeh hysteréznych strát aproximovaný mocninovou funkciou v tvare Steinmetzovho zákona (2), pričom získané hodnoty príslušných koeficientov boli priradené strednému prvku okna, t.j. tretej hodnote maximálnej magnetickej indukcie v danom okne. Posúvaním („kĺzaním“) okna od najmenších hodnôt indukcií ku maximálnym, bol týmto postupom získaný priebeh koeficientov Steinmetzovho zákona v celom meranom intervale magnetických indukcií, ktorý je zobrazený pre každú skúmanú vzorku na Obr. 7, Obr. 8 a Obr. 9 spolu aj s ich počiatočnými hodnotami získanými z Taylorovho rozvoja Rayleigho zákona do rádu 3 (8).

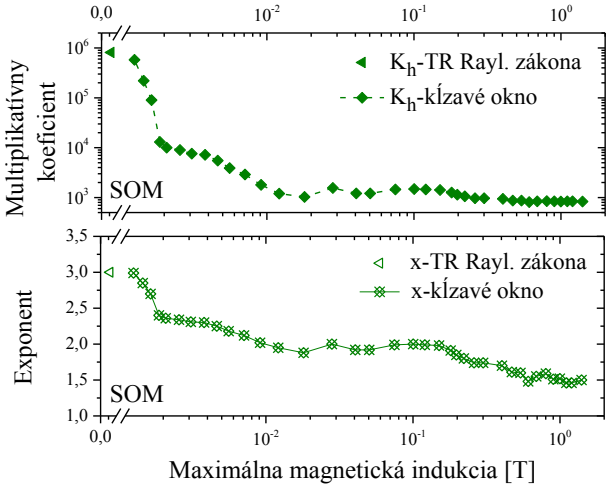
Zo zobrazených priebehov koeficientov u každej vzorky vidieť najprv v oblasti najmenších polí prudký pokles ako multiplikatívneho koeficientu tak aj exponentu, avšak od hodnôt maximálnych magnetických indukcií približne 10^{-2} T ich hodnoty klesajú už len pozvoľna, dokonca v niektorých oblastiach vykazujú konštantný priebeh. Z takéhoto pomaly sa meniaceho nerastúceho priebehu možno vyvodiť záver, že Steinmetzov zákon možno pre magneticky mäkké kompozity použiť pri takmer ľubovoľnej hodnote maximálnej magnetickej indukcii, ale len v dostatočne malom intervale. Ako univerzálnu oblasť platnosti tohto zákona je prirodzené vyhlásiť najväčší možný interval, kde nedochádza ku žiadnej, prípadne minimálnej zmene hodnôt koeficientov. Pre možné vzájomné porovnanie koeficientov pre skúmané vzorky, bol za oblasť platnosti Steinmetzovho zákona pre študované magneticky mäkké kompozitné materiáli vyhlásený prienik takýchto maximálnych intervalov, t.j. oblasť $B_{max} \in \langle 0{,}3; 1{,}2 \rangle$ T.

Pre zaujímavosť je vhodné upozorniť na skutočnosť, že v priebehoch na Obr. 7, Obr. 8 a Obr. 9 vidieť u každej vzorky istú koreláciu medzi koeficientami x a K_h, nakoľko vykazujú identickú monotónnosť v celom meranom intervale B_{max}, avšak pre vzorky Fe90/ATM10 a Fe80/ATM20 sa pri hodnotách B_{max} rádovo 1 T táto korelácia stráca.

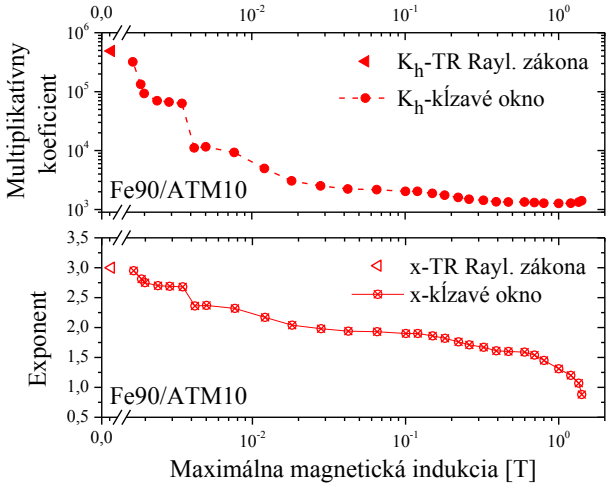
Po určení oblasti platnosti Steinmetzovho zákona pre študované materiáli boli v týchto intervaloch určené hodnoty oboch koeficientov pre skúmané vzorky, pričom tieto hodnoty sú zapísané v Tab. 3.

Tab. 3: Hodnoty koeficientov Steinmetzovho zákona pre skúmané vzorky v oblasti $B_{max} \in \langle 0{,}3; 1{,}2 \rangle$ T.

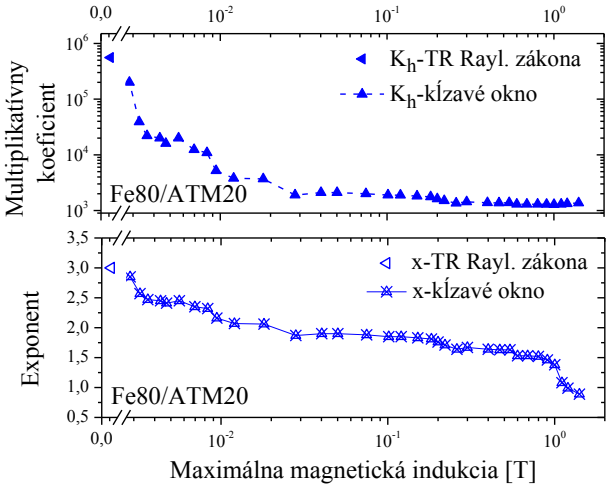
Vzorka	SOM	Fe90/ ATM10	Fe80/ ATM20
Multiplikatívny koeficient K_h	834	1274	1272
Exponent x	1,54	1,50	1,48



Obr. 7 Závislosť hodnôt koeficientov v Steinmetzovom zákone od maximálnej magnetickej indukcie pre vzorku SOM.

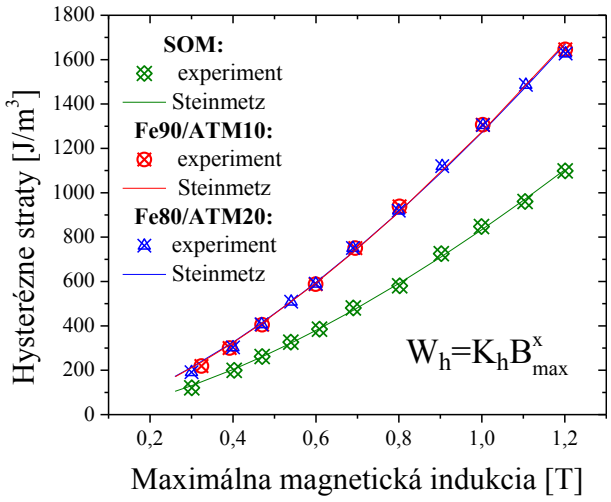


Obr. 8 Závislosť hodnôt koeficientov v Steinmetzovom zákone od maximálnej magnetickej indukcie pre vzorku Fe90/ATM10.



Obr. 9 Závislosť hodnôt koeficientov v Steinmetzovom zákone od maximálnej magnetickej indukcie pre vzorku Fe80/ATM20.

Experimentálne namerané hodnoty hysteréznych strát v závislosti od maximálnej magnetickej indukcie sú spolu s priebehom Steinmetzovho zákona daného koeficientami z Tab. 3 pre každú skúmanú vzorku zobrazené na Obr. 10.



Obr. 10 Experimentálne získané hodnoty hysteréznych strát (izolované body) preložené krivkami danými Steinmetzovým zákonom s hodnotami koeficientov zapísaných v Tab. 3(spojité krivky).

Na Obr. 10 vidieť, že krivky dané Steinmetzovým zákonom výborne vystihujú skutočnú závislosť hysteréznych strát od maximálnej magnetickej indukcie, pričom absolútna hodnota relatívnej odchýlky medzi experimentálnymi dátami a vypočítanými stratami zo Steinmetzovho modelu v celom intervale $B_{max} \in \langle 0{,}3; 1{,}2 \rangle$ T dosahuje hodnoty do 5%. Z Obr. 10 je tiež zrejmé, že vzorky Fe90/ATM10 a Fe80/ATM20, ktoré boli pripravené rovnakým technologickým postupom a z rovnakej magnetickej i izolačnej zložky, majú hodnoty hysteréznych strát veľmi blízke. V dôsledku rôznej hodnoty súčiniteľa plnenia majú tieto vzorky síce rôzne hodnoty svojich vnútorných demagnetizačných faktorov, ten však na plochu slučky a teda ani na hysterézne straty nevplýva. Vzorka SOM v tomto intervale maximálnych magnetických indukcií vykazuje výrazne nižšie hodnoty hysteréznych strát, čo je pravdepodobne spôsobené najmä jej odlišným výrobným postupom. V dôsledku iného tlaku lisovania a teploty žíhania (Tab. 1) vznikajú vo vzorke iné vnútorné pnutia, čo výrazne ovplyvňuje magnetizačné procesy prebiehajúce vo vzorke a teda i veľkosť samotných hysteréznych strát.

Týmto postupom teda bola potvrdená platnosť Steinmetzovho zákona pre magneticky mäkké kompozitné materiály na báze železa, čo doposiaľ nebolo urobené.

3.4 Lineárny model

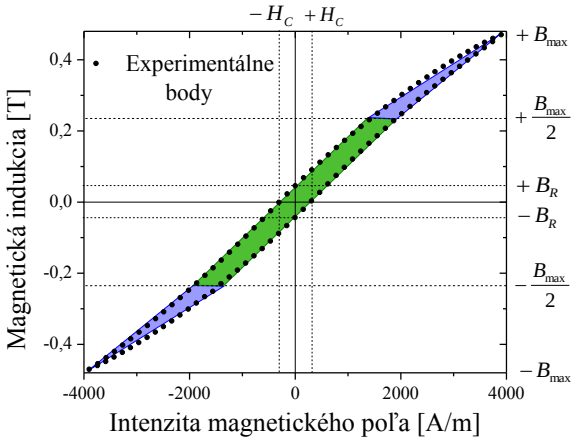
Možnosť analytického vyjadrenia krivky prvotnej magnetizácie a hysteréznej slučky v Rayleigho oblasti je veľkou výhodou, nakoľko veľkosť hysteréznych strát pri ľubovoľne zvolenej maximálnej magnetickej indukcii v tejto oblasti možno predpovedať len na základe materiálových parametrov bez samotného merania hysteréznej slučky. Z tohto dôvodu je prirodzená snaha analyticky vyjadriť magnetizačné krivky aj pri vyšších magnetických poliach, čo v súčasnosti viac-menej úspešne umožňujú viaceré matematické modely, ako napríklad hyperbolický model využívajúci funkciu *tanh*, či eliptický model opisujúci hysteréznu slučku ako elipsu. Pri obidvoch modeloch však do samotných matematických vzťahov vstupuje množstvo parametrov, bez priradeného fyzikálneho významu, čo značne komplikuje ich využitie v praxi. Súčasťou tejto práce je preto návrh nového modelu, využívajúceho pre opis hysteréznej slučky postupne v jednotlivých jej častiach jednoduchú lineárnu funkciu, a preto bol tento model nazvaný *lineárny*.

Podľa tohto modelu možno hysteréznu slučku s vrcholmi so súradnicami [$-H_{max}$, $-B_{max}$] a [H_{max}, B_{max}], hodnotou koercitívneho poľa H_C a hodnotou remanentnej magnetickej indukcie B_R rozdeliť v zvislom smere na tri časti (Obr. 11):

A.) $B \in \langle -B_{\max}, -\frac{1}{2}B_{\max} \rangle$,

B.) $B \in \langle -\frac{1}{2}B_{\max}, \frac{1}{2}B_{\max} \rangle$,

C.) $B \in \langle \frac{1}{2}B_{\max}, B_{\max} \rangle$.



Obr. 11 Experimentálne zmeraná hysterézna slučka a farebne znázornený lineárny model opisujúci hysteréznu slučku v jednotlivých jej častiach lineárnou funkciou.

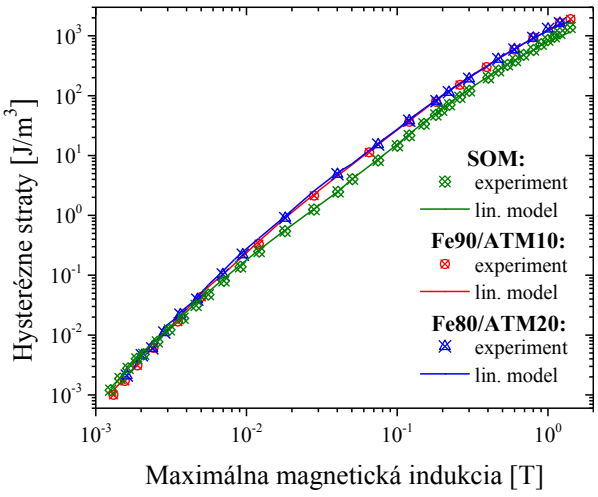
Časť B.) možno geometricky reprezentovať rovnobežníkom, pričom jeho šírka je daná dvojnásobkom hodnoty H_C, výška hodnotou B_{max} a jeho sklon pomerom B_R/H_C.

Časti A.) a C.) zas geometricky vytvárajú trojuholníky, s dĺžkou základne rovnou dvojnásobku hodnoty H_C a s výškou rovnou polovičnej hodnote B_{max}, pričom ich ramená spájajú vrcholy hysteréznej slučky s vrcholmi rovnobežníka v časti B.).

Výpočet plochy takejto hysteréznej slučky danej lineárnym modelom resp. veľkosti prislúchajúcich hysteréznych strát možno pomocou základných planimetrických vzorcov pre výpočet plochy trojuholníka a rovnobežníka jednoducho vypočítať nasledovne

$$W_h = S_{A.)} + S_{B.)} + S_{C.)} = \frac{1}{2} H_C\, B_{\max} + \\ + 2\, H_C\, B_{\max} + \frac{1}{2} H_C\, B_{\max} = 3\, H_C\, B_{\max} \quad , \qquad (10)$$

Pre potvrdenie platnosti vzťahu (10) z lineárneho modelu, boli takto vypočítané hysterézne straty porovnané s experimentálnymi dátami, čo je zobrazené na Obr. 12, kde vidieť výbornú zhodu medzi výsledkami z oboch postupov v celom meranom intervale maximálnych magnetických indukcií. Tento model teda možno použiť v širokom intervale maximálnych magnetických indukcií.

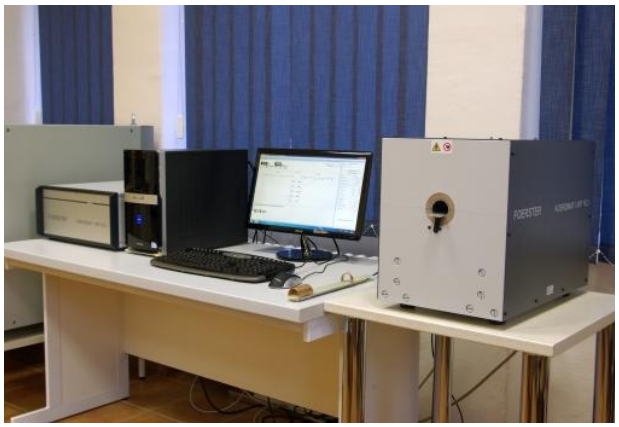


Obr. 12 Porovnanie hodnôt hysteréznych strát získaných experimentálne (izolované body) a výpočtom pomocou lineárneho modelu (spojitá čiara).

Porovnaním vzťahu (10) pre výpočet hysteréznych strát z lineárneho modelu so Steinmetzovým zákonom (2) možno vidieť ich vzájomnú podobnosť, avšak na rozdiel od Steinmetzovho zákona, kde vystupujú dva reálne koeficienty závislé od materiálu a jedna premenná, vo vzťahu (10) z lineárneho modelu sú hysterézne straty funkciou dvoch premenných. Mocninová závislosť hysteréznych strát vo vzťahu (2) sa tak akoby čiastočne preformulovala do závislosti na hodnote koercitívneho poľa, ktoré sa prirodzene s meniacou hodnotou maximálnej magnetickej indukcie mení. Vzťah (10) a teda samotný lineárny model tak akoby poodhaľoval fyzikálne pozadie chovania sa hysteréznych strát. Pri zvyšovaní intenzity vonkajšieho magnetického poľa, ktorému je materiál vystavený, narastá odozva magnetika na toto budenie, teda zvyšuje sa prirodzene hodnota maximálnej magnetickej indukcie (hysterézna slučka sa predlžuje v zvislom smere, t.j. $W_h \sim B_{max}$) a zároveň v dôsledku magnetizačných procesov narastá aj hodnota koercitívneho poľa (hysterézna slučka sa rozširuje v horizontálnom smere, t.j. $W_h \sim H_C$), pokiaľ magnetikum nie je v nasýtení. Lineárny model teda v sebe zahŕňa rast slučky v obidvoch smeroch. Vyjadrením závislosti koercitívneho poľa od maximálnej magnetickej indukcie mocninovou funkciou pre konkrétny materiál a dosadením do vzťahu (10) možno prirodzene dospieť priamo ku Steinmetzovmu zákonu. Avšak nespornou výhodou tohto zápisu získaného z lineárneho modelu je možnosť priradenia jednoznačného fyzikálneho rozmeru každej veličine, ktorá v ňom vystupuje, čo v prípade Steinmetzovho zákona nie je možné. Steinmetzov koeficient x totiž vo všeobecnosti môže nadobúdať ľubovoľnú reálnu hodnotu, a teda maximálnej magnetickej indukcii, ktorá je na tento koeficient v Steinmetzovom zákone umocnená, nemožno jednoznačne priradiť fyzikálnu jednotku, ale tento zákon treba chápať ako čisto matematickú závislosť. Vzťah (10) z lineárneho modelu je však z fyzikálneho hľadiska rozmerovo korektný.

V praxi je však rozhodujúcim kritériom pre použiteľnosť modelu spôsob, akým možno dospieť ku hodnotám koeficientov, resp. veličín vystupujúcich v konkrétnom modely. Pre určenie koeficientov v Steinmetzovom zákone je nutné merať sériu kvázistatických hysteréznych slučiek, čo si vyžaduje pomerne dlhý merací čas (meranie jednej hysteréznej slučky trvá rádovo desiatky minút). Následne však na základe hodnôt týchto koeficientov možno predpovedať hysterézne straty prislúchajúce slučke s ľubovoľnou hodnotou maximálnej magnetickej indukcie v celom intervale platnosti tohto zákona. Na rozdiel od toho pri použití lineárneho modelu potrebujeme pre určenie hysteréznych strát pri konkrétnej hodnote maximálnej magnetickej indukcie poznať len prislúchajúcu hodnotu koercitívneho poľa, ktorú možno nájsť napríklad meraním koerzimatom (Obr. 13), pričom dĺžka takéhoto merania sa pohybuje rádovo v sekundách. Takéto meranie navyše nevyžaduje pracné navíjanie primárneho a sekundárneho vinutia na vzorku, sú tu však kladené isté nároky na tvar vzorky. Ako isté

obmedzenie lineárneho modelu je nutné uviesť skutočnosť, že tento model dostatočne vystihuje tvar hysteréznej slučky len do oblasti polí, v ktorých nedochádza ku výraznému zakriveniu slučky, kedy sa jej koncové časti značne odkláňajú od lineárneho priebehu. Výber medzi Steinmetzovým a lineárnym modelom teda vždy závisí od skúmaného materiálu, tvaru vzorky, pracovnej oblasti maximálnej magnetickej indukcie a iných požiadaviek výskumu.



Obr. 13 Foerster Koerzimat 1.097 HCJ na meranie hodnoty koercitívneho poľa v závislosti od maximálnej magnetickej indukcie.

4 Záver

Po experimentálnom nameraní kvázistatických hysteréznych slučiek, vyhodnotení hysteréznych strát a analýze ich závislosti na maximálnej magnetickej indukcii, bol pre skúmané vzorky vyvodený nasledujúci záver.

Steinmetzov zákon pôvodne navrhnutý pre plechy rovnako dobre platí aj pre magneticky mäkké kompozity. Za oblasť jeho platnosti, bol pre skúmanú trojicu vzoriek zvolený interval $B_{max} \in \langle 0{,}3; 1{,}2 \rangle$ T, kde boli pre každú vzorku nájdené aj príslušné hodnoty koeficientov vystupujúcich v tomto modeli.

Použitím Rayleigho zákona, bol navyše v oblasti veľmi malých magnetických polí nájdený fyzikálny význam koeficientov vystupujúcich v Steinmetzovom zákone. Hodnota multiplikatívneho koeficientu je v tejto oblasti daná výlučne materiálovými parametrami ako je počiatočná permeabilita a Rayleigho konštanta, zatiaľ čo hodnota exponentu tu nadobúda konštantnú hodnotu 3.

Nakoniec bol navrhnutý nový model pre opis tvaru hysteréznej slučky využívajúci viacero lineárnych funkcií v jednotlivých jej častiach (tzv. lineárny model), umožňujúci výpočet hysteréznych strát len pomocou hodnoty maximálnej magnetickej indukcie a prislúchajúcej hodnoty koercitívneho poľa. Nespornou výhodnou tohto modelu voči Steinmetzovmu zákonu je možnosť jednoznačného priradenia fyzikálneho rozmeru každej vystupujúcej veličine a nižšie experimentálne nároky pri hľadaní potrebných parametrov. Lineárny model však nemožno použiť na vyjadrenie hysteréznych slučiek v oblasti magnetických polí blízkych nasýteniu feromagnetika, kedy dochádza k značnému zakrivovaniu koncových častí slučky.

Poďakovanie

Ďakujem svojmu školiteľovi prof. RNDr. Petrovi Kollárovi, CSc. za odborné vedenie, ochotný prístup, cenné podnety a užitočné rady pri štúdiu skúmanej problematiky a písaní tejto práce. Poďakovanie zároveň patrí zamestnancom Slovenskej akadémie vied v Košiciach Ing. Radovanovi Burešovi, Csc. a Ing. Márii Fáberovej za prípravu vzoriek.

Literatúra

[Coey, 2009] Coey, J. M. D. (2009). *Magnetism and Magnetic Materials*. Cambridge University Press, New York.

[Kollár et al., 2013] Kollár, P., Birčáková, Z., Füzer, J., Bureš, R. and Fáberová, M. (2013). Power loss separation in Fe-based composite materials. *J. Magn. Magn. Mater.*, 327: 146-150.

[Goodenough, 2002] Goodenough, J. B. (2002). Summary of Losses in Magnetic Materials. *IEEE Trans. Magn.*, 38: 3398-3408.

[Steinmetz, 1984] Steinmetz, C. P. (1984). On the law of hysteresis. *Proc. IEEE*, 72: 197-221.

[Shokrollahi and Janghorban, 2007] Shokrollahi, H. and Janghorban, K. (2007). Soft magnetic composite materials (SMCs). *J. Mater. Process. Technol.*, 189: 1-12.

[Kronmüller and Parkin, 2007] Kronmüller, H. and Parkin, S. (2007). *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*. Volume 4: Novel Materials. 1st ed. John Wiley & Sons, Chichester.

[Chikazumi, 1997] Chikazumi, S. (1997). *Physics of Ferromagnetism.* Oxford University Press Inc., New York.

[Hajko et al., 1982] Hajko, V., Potocký, L. and Zentko, A. (1982). *Magnetizačné procesy*. Vydavateľstvo technickej a ekonomickej literatúry, Bratislava.

[Bertotti, 1998] Bertotti G.(1998). *Hysteresis in magnetism*. 1st ed. Academic Press, San Diego.

Nanoštruktúry v prevencii a terapii neurodegeneratívnych chorôb

Hana Vrbovská[1*]
Školiteľ: Melánia Babincová[1†]
[1] Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

Lipozómy sú nanočastice, ktoré v súčasnosti nachádzajú čoraz širšie uplatnenie na poli medicíny a medicínskeho výskumu. Ich najväčšou výhodou je to, že sú pre ľudský organizmus netoxické a nevyvolávajú imunitnú odpoveď a vhodnou modifikáciou sa dajú cielene dopravovať ku špecifickým orgánom alebo tkanivám. Taktiež sa zistilo, že lipozómy určitej veľkosti sú schopné prechádzať hematoencefalickou bariérou. Toto zistenie je kľúčové pre návrhy nových metodík prevencie, či terapie niektorých ochorení, ktoré súvisia s poškodením centrálnej nervovej sústavy, akými sú napríklad Alzheimerova, či Parkinsonova choroba.

My sme v našej práci používali lipozómy ako jednoduchý model bunkovej membrány, na ktorom sme skúmali procesy lipoperoxidácie a antioxidačnú aktivitu niektorých látok – extraktu z plodu palmy acai, extraktu zo ženšenu, kyseliny lipoovej a kyseliny kofeínovej. Všetky látky prejavili pomerne dobré antioxidačné vlastnosti a mohli by byť vo forme lipozómov použité v prevencii Alzheimerovej a Parkinsonovej choroby, ktoré obe súvisia aj s oxidačným stresom.

Okrem toho sme skúmali interakcie dopamínu, ktorého nedostatok je popísaný v Parkinsonovej chorobe, s lipozómami a magnetolipozómami, študovali sme jeho percento zabudovania v unilamelárnych a multilamelárnych lipozómoch a jeho kontrolované uvoľňovanie z magnetolipozómov pomocou metódy vysokofrekvenčného ohrevu.

Kľúčové slová: lipozómy, antioxidanty, neurodegeneratívne ochorenia, dopamín, magnetolipozómy

1 Úvod

1.1 Lipozómy a magnetolipozómy

Lipozómy sú sférické častice tvorené fosfolipidovými membránami, ktoré sa nazývajú aj lamely. Prvýkrát ich popísal Bangham, ktorý skúmal vlastnosti fosfolipidov [Bangham and Horne, 1964]. V závislosti od spôsobu prípravy môžu vznikať lipozómy, ktoré obsahujú len jednu lamelu (unilamelárne – ULL) alebo viac koncentricky usporiadaných lamel (multilamelárne - MLL). Líšia sa taktiež veľkosťou, poznáme malé (niekoľko desiatok nm) až gigantické (rozmery bunky – niekoľko desiatok µm) lipozómy.

Bangham zistil, že keď sa fosfolipidový film hydratuje vodou, lipozómy sa postupne samoorganizujú. Táto ich schopnosť je spôsobená amfifilným charakterom molekuly fosfolipidu. Väčšina fosfolipidov je odvodená od glycerolu, na ktorý sa esterovo viažu dve vyššie nasýtené alebo nenasýtené mastné kyseliny a cez fosfátový zvyšok naviazaná jednoduchá organická molekula, napríklad cholín alebo lecitín. Jedinou výnimkou je sfingomyelín, ktorý sa neodvodzuje od glycerolu, ale od sfingozínu. Práve toto chemické zloženie podmieňuje správanie fosfolipidov – zvyšok kyseliny fosforečnej je negatívne nabitý a náboj môžu niesť aj niektoré skupiny v organickej molekule; ale dlhé reťazce, mastných kyselín sú vysoko nepolárne. Molekula fosfolipidu sa preto vo vodnom prostredí vždy snaží zaujať takú polohu, aby neprichádzalo k interakciám nepolárnych častí s polárnou vodou – hydrofilné časti molekuly, nazývané tiež hlavičky, sa orientujú do vodného prostredia, zatiaľ čo hydrofóbne reťazce mastných kyselín, nazývané tiež chvostíky, sa orientujú k sebe. Vzniká tak typická fosfolipidová štruktúra – fosfolipidová dvojvrstva, ktorá tvorí základ biomembrán. Dvojvrstvy a lipozómy však nie sú jediné štruktúry, ktoré môžu z fosfolipidov vznikať, v závislosti od konkrétnych vlastností fosfolipidu môžu vznikať aj micely alebo invertované micely.

To, že fosfolipidová dvojvrstva tvorí základ biomembrán, predstavuje najväčšiu výhodu lipozómov oproti ostatným, v biologických systémoch používaným, nanočasticiam. Sú biodegradovateľné, netoxické pre organizmus a nevyvolávajú odpoveď imunitného systému. Preto je vhodné ich používať ako prenášače liečiv a iných látok v organizme, v génovej terapii či imunoterapii. Aby mohli lipozómy slúžiť ako prenášače liečiv, musí sa najprv zabezpečiť ich stabilita v krvnom riečisku. Obyčajne sú vychytávané bunkami monocytovo-fagocytárneho

* h.vrbovska@gmail.com
† babincova@fmph.uniba.sk

systému a hromadia sa v slezine a pečeni [Uhumwango and Okor, 2005]. Ich stabilita sa zvyšuje pridávaním cholesterolu či polyetylénglykolu. Ďalšou dôležitou otázkou vo využití lipozómov na terapiu je ich cielenie k určitému orgánu či tkanivu. Dosahuje sa pripájaním špecifických antigénov, glykoproteínov, apoproteínov alebo hormónov. Takto modifikované lipozómy sú dokonca schopné prechádzať hematoencefalickou bariérou do mozgu a uvoľňovať priamo v mieste látky, ktoré by sa do mozgu inak nedostali [Huwyler et al., 1996].

Okrem využitia lipozómov ako prenášačov liečiv existuje ešte jedna stratégia ich využitia – ako modelových systémov, na ktorých sa skúmajú vlastnosti membrán a procesov, ktoré na nich prebiehajú. My sme v predloženej práci skúmali proces lipoperoxidácie a účinky rôznych antioxidantov na tento proces.

Magnetolipozómy sú lipozómy, ktoré buď vo vodnej alebo v lipidovej fáze majú zabudované magnetické nanočastice. Rovnako ako do lipozómov, je možné do nich zabudovať rôzne látky a liečivá. Ich výhodou je ich ľahké cielenie na miesto určenia pomocou externého magnetického poľa [Babincová et al., 2001]. Navyše je z nich možné kontrolovane uvoľňovať zabudované liečivo pomocou vysokofrekvenčného poľa, ktoré spôsobuje rotáciu a teda aj zohrievanie magnetických častíc pomocou Brownovho-Néelovho efektu, kedy častice buď mechanicky alebo zvýšením svojej teploty perforujú membránu lipozómov a spôsobujú tak vyliatie ich obsahu v mieste určenia [Babincová et al., 2000].

1.2 Antioxidanty

Reaktívne metabolity kyslíka sa v organizme tvoria aj za fyziologických aj za patologických podmienok. Biologicky významné štruktúry poškodzujú najmä reaktívne metabolity kyslíka hlavne tým, že ich oxidujú, preto sa vo všeobecnosti označujú ako prooxidanty. Aby sa zachovala neporušenosť bunky, musí existovať určitý systém, ktorý dokáže prooxidanty účinne eliminovať. Týmto systémom sú antioxidanty, zlúčeniny, ktoré dokážu reagovať s molekulami voľných radikálov za vzniku produktov neradikálového charakteru. Za fyziologických podmienok existuje medzi prooxidantmi a antioxidantmi rovnováha. Ak sa táto rovnováha poruší v prospech prooxidantov, v organizme dochádza k hromadeniu oxidačne poškodených molekúl, čo môže vyústiť do patologického procesu [Ďuračková, 1998].

V ľudskom tele existuje viacero mechanizmov, ktoré majú za úlohu bojovať s oxidačným stresom. Sú to mechanizmy, ktoré zabraňujú tvorbe voľných radikálov, systémy, ktoré vychytávajú už vzniknuté voľné radikály – tzv. antioxidanty v pravom zmysle slova, ktoré ďalej podľa mechanizmu účinku môžeme deliť na:

- scavengery, ktoré vychytávajú radikálové molekuly a premenia ich na neradikálové produkty,
- trappery, ktoré lapajú silné radikály a premieňajú na stabilnejšie radikály,
- quenchery, ktoré zhášajú voľné radikály.

Okrem týchto má organizmus ešte zbierku reparačných mechanizmov, ktoré dokážu opraviť oxidačne poškodené molekuly.

My sme sa venovali výskumu antioxidačných vlastností extraktov zo ženšenu a plodu palmy acai, kyseliny lipoovej a kyseliny kofeínovej.

Pojmom ženšen sa označuje niekoľko rastlín druhu *Panax*, ktoré sa vyskytujú najmä v zmiešaných lesoch na východe a severovýchode Číny, vo východnom Rusku a v horách v Severnej Kórei. Ako liečivú rastlinu ju používala najmä tradičná východná ľudová medicína, najmä ako prostriedok na upokojenie, proti nespavosti, na liečenie dýchavičnosti a búšenia srdca. Obsahuje biologicky aktívne látky – ginsenoidy, ktoré patria medzi triterpénové saponíny. Výskumu ginsenoidov sa venovali viaceré štúdie, ktoré zistili mnohé priaznivé účinky týchto látok pri mnohých syndrómoch a ochoreniach, napr. pri diabete, či kolorektálnej rakovine [Cho et al., 2006], [Li et al., 2010]. Ginsenoidy dokážu chelátovo viazať niektoré ióny prechodných kovov a vychytávať peroxylové a hydroxylové radikály [Kitts et al., 2000], vďaka čomu môžeme ženšen zaradiť medzi antioxidanty.

Juhoamerická palma acai sa do širšieho povedomia verejnosti dostala pomerne nedávno. Jej plodom sú tmavofialové kôstkovice, ktorým sa pripisujú mnohé priaznivé účinky na ľudský organizmus. Obsahujú množstvo polyfenolov – antocyanínov, proantocyanidínov a iných flavonoidov, u ktorých bola zistená antioxidačná aktivita [Kang et al., 2010]. Dužina acai dobre vychytáva peroxylový radikál, peroxynitrit a hydroxylový radikál [Schauss et al., 2006], znižuje hladinu non-HDL cholesterolu [De Souza et al., 2012] a stimuluje aktivitu makrofágov [Schauss et al., 2006].

Kyselina lipoová je vo vode nerozpustná látka, ktorá patrí medzi tioly. Spomedzi antioxidantov je významná najmä tým, že antioxidačné vlastnosti má aj v oxidovanom (kyselina lipoová) aj v redukovanom (kyselina dihydrolipoová) stave [Navari-Izzo et al., 2002]. Organizmus je schopný kyselinu lipoovú podávanú v strave resorbovať a distribuovať do všetkých tkanív, vrátane mozgu [Packer and Tritschler, 1996]. Dokáže vychytávať hydroxylové radikály a singletový kyslík a chelátovo viaže niektoré ióny kovov (Mn^{2+}, Zn^{2+}, Cu^{2+}) [Packer et al., 1995]. Kyselina dihydrolipoová vychytáva peroxylové a hydroxylové radikály

a chelátovo viaže ión Fe^{2+} aj Fe^{3+}. [Packer et al., 1995] Pozitívne účinky má kyselina lipoová aj na niektoré ochorenia, ktoré primárne nesúvisia s oxidačným stresom – diabetes [Packer et al., 1995], [Nickander et al., 1996], ischemicko-reperfúzne stavy, pri otrave hubami, pacientov nakazených vírusom HIV a pacientov s neurodegeneratívnymi ochoreniami [Packer et al., 1995].

Kyselina kofeínová je vo vode nerozpustná látka, ktorá obsahuje fenolové aj akrylové skupiny. Dokáže vychytávať hydroxylové radikály [Iwahashi et al., 1990], zhášať singletový kyslík, vychytávať superoxid [Foley et al., 1999] a chelátovo viazať Fe^{2+} [Gülçin, 2006]. Okrem toho prejavuje antihypergylkemické účinky, zvyšuje tvorbu glykogénu a má ďalšie pozitívne účinky [Jung et al., 2006].

1.3 Neurodegeneratívne ochorenia

Neurodegeneratívne ochorenia tvorí skupina ochorení, pri ktorých dochádza k progresívnej degenerácii neurónov vo špecifických oblastiach mozgu a miechy. Môžu byť sporadické alebo sa vyskytujú familiárne [Mačák et al., 2012]. Existuje mnoho paralel medzi rôznymi neurodegeneratívnymi ochoreniami. Vyskytujú sa pri nich genetické mutácie, najčastejšie v génoch, ktoré spolu nijako nesúvisia; akumulácie patologických foriem proteínov, ktoré majú zmenenú sekundárnu, či terciárnu štruktúru; poškodenia kaskád degradujúcich intracelulárne toxické proteíny; poškodenie bunkových membrán; dysfunkcie mitochondrií; poruchy axonálneho transportu; či chorobná stimulácia kaskád navodzujúcich apoptózu. Medzi neurodegeneratívne ochorenia patrí napríklad Alzheimerova choroba a Parkinsonova choroba.

1.4 Alzheimerova choroba

Alzheimerova choroba je progresívne ochorenie, ktoré postihuje mozog. Dochádza pri nej k neurofibrilárnej degenerácii spojenej s poruchami symbolických funkcií a s demenciou [Hulín, 2002]. Nastupuje väčšinou po 60. roku života. U postihnutých postupne dochádza k poruchám pamäti, orientácie a intelektu. Objavujú sa poruchy kôrových funkcií a podkôrovej sivej hmoty, choroba sa končí smrťou pacienta.

V mozgu pacienta trpiaceho Alzheimerovou chorobou dochádza k hromadeniu neurofibrilárnych klbiek a senilných plakov. Senilné plaky sú nahromadenia patologického bielkovinového fragmetu β-amyloidu, ktorý má podobu amyloidových fibríl. Neurofibrilárne klbká sú najzávažnejšou poruchou cytoskeletu, ktorá sa pri Alzheimerovej chorobe vyskytuje. Sú to nahromadenia neurofilamentov so strednou až vysokou molekulovou hmotnosťou a mikrotubulov stabilizujúceho proteínu τ.

Okrem týchto nálezov sa v mozgu postihnutom Alzheimerovou chorobou detekovali aj oxidačne poškodené bielkoviny, lipidy, sacharidy a nukleové kyseliny. Dôkazy oxidačného poškodenia nervovej sústavy u pacientov s Alzheimerovou chorobou zahŕňa aj prítomnosť železa vo zvýšenej koncentrácii, zmeny na enzýmoch antioxidačného ochranného systému a markery oxidačného poškodenia proteínov a lipidov [Good et al., 1996]. V súčasnosti sa teória, že oxidačný stres je dôsledkom patologických zmien na mozgu postupne vymieňa za teóriu, že patologické zmeny na mozgu sú dôsledkom oxidačnej záťaže a vznikajú ako kompenzačné mechanizmy [Sayre et al., 1997].

1.5 Parkinsonova choroba

Parkinsonova choroba sa prejavuje poruchou motorických funkcií, ktorá je charakterizovaná svalovou rigiditou, stratou mimiky tváre, ohnutým držaním tela, pomalým pohybom a charakteristickým trasom, ktorý je najviac patrný, keď je postihnutý v pokoji. U časti pacientov sa vyvíja demencia podobná Alzheimerovej chorobe. Rovnako ako u Alzheimerovej choroby sa najčastejšie rozvíja po 60. roku života [Mačák et al., 2012].

Spomínané príznaky sú spôsobené stratou neurónov v substantia nigra a locus caeruleus, ktoré tvoria dopamín, zároveň sú obe tieto miesta depigmentované. Strácajú sa neuróny, ktoré tvoria neuromelanín a objavujú sa Lewyho telieka – acidofilné guľovité útvary, obklopené úzkym svetlým dvorcom, zložené z jemných filamentov a granulárneho materiálu [Mačák et al., 2012].

Nedávne štúdie odhalili významnú úlohu mitochondriálnej dysfunkcie v patogenéze Parkinsonovej choroby, čo súvisí so zvýšeným oxidačným stresom, ktorému je vystavený mozog pacienta postihnutého touto chorobou [Henchcliffe and Beal, 2008].

2 Materiály a metódy

2.1 Použité chemikálie

Na prípravu lipozómov bol použitý sójový lecitín M = 750 g/mol, SIGMA; chloroform CH_3Cl, M = 119,38 g/mol, SLAVUS Bratislava; ultračistá deionizovaná voda H20, M = 18,02 g/mol, CENTRALCHEM.

Použili sme tieto komerčne dostupné antioxidanty: ženšen, EDEN Pharma, SR; acai,

EDEN Pharma, SR; kyselina lipoová $C_8H_{14}O_2S_2$, M = 206,6 g/mol, MERCK; kyselina kofeínová $C_9H_8O_4$, M = 180,16 g/mol, SIGMA ALDRICH.

Na vyvolanie peroxidácie sme používali Fentonove činidlo: peroxid vodíka H_2O_2, M = 34,02g/mol, 30%, Chemické závody Sokolov; síran železnatý $FeSO_4.7H_2O$, M = 278,05g/mol, SLAVUS Bratislava a ultračistá deionizovaná voda H_20, M = 18,02 g/mol, CENTRALCHEM.

Na spektrofotometrické merania Kleinovho peroxidačného indexu sme použili etylalkohol pre UV C_2H_5OH, M = 46,07 g/mol, CENTRALCHEM.

Na skúmanie interakcií dopamínu s lipozómami a magnetolipozómomami sme použili dopamín $C_8H_{11}NO_2$, M = 153,18 g/mol, SIGMA ALDRICH. Magnetolipozómy boli pripravené z dipalmytoylfosfatidylcholínu (DPPC) $C_{40}H_{80}NO_8P$, M = 734,039 g/mol, SIGMA ALDRICH; dietyléteru $C_4H_{10}O$, M = 74,12 g/mol, SIGMA ALDRICH; chloroformu CH_3Cl, M = 119,38 g/mol, SLAVUS Bratislava; a dextránmagnetitových nanočastíc (10 nm).

2.2 Príprava lipozómov a zabudovanie rôznych látok do lipozómov

Na prípravu lipozómov sme zvolili Banghamovu hydratačnú metódu – hydratovaním lipidového filmu pri nej vznikajú multilamelárne lipozómy. Unilamelárne lipozómy sme pripravovali sonifikáciou alebo extrúziou, v prípade, že sme potrebovali skúmať unilamelárne lipozómy uniformnej veľkosti.

Vzhľadom k tomu, že multilamelárne lipozómy sa skladajú z dvojvrstiev, ktoré sú od seba oddelené vodnou fázou, existujú dve stratégie zabudovávania skúmaných látok – do vodnej fázy alebo do lipidovej fázy. Miesto zabudovania sa volí podľa rozpustnosti danej látky, pričom látky, ktoré sa rozpúšťajú vo vode, sa zabudovávajú do vodnej fázy a látky rozpustné v nepolárnych rozpúšťadlách sa zabudovávajú do lipidovej fázy.

Lipozómy boli pripravené nasledovným spôsobom:

- Sójový lecítín (5 mg na 1 ml výsledného množstva) sme rozpustili v chloroforme. Ak sa do lipozómov zabudovávali látky rozpustné v nepolárnych rozpúšťadlách, pridali sme ich do vzniknutého lipidového roztoku.
- Lipidový roztok sme nechali odpariť vo vákuovej odparke – na stene nádoby vznikol tenký lipidový film.
- Film sme hydratovali deionizovanou vodou, alebo, v prípade, že sme do lipozómov zabudovávali látku rozpustnú vo vode, roztokom tejto látky. Mechanickým pretrepávaním po dobu asi 15 min sme získali koloidný roztok multilamelárnych lipozómov.
- Unilamelárne lipozómy sme pripravili sonifikáciou po dobu 20 min (sonikátor Brown Labsonic 2000). Unilamelárne lipozómy uniformnej veľkosti sme získali extrúziou cez 50 nm filter (Avestin, Kanada).

2.3 Príprava magnetolipozómov so zabudovaným dopamínom

Na prípravu magnetolipozómov sme rozpustili 100 mg DPPC v 20 ml zmesi dietyléteru a chloroformu (1:1) v banke s okrúhlym dnom. Do roztoku lipidu sme pridali 3 ml dextránmagnetitu. Vzniknutá emulzia bola sonikovaná po dobu 5 min pri teplote T = 40°C (sonikátor Brown Labsonic 2000) pri 35 kHz pod dusíkovou atmosférou. Po odparení rozpúšťadla sa vzniknutý film hydratoval roztokom dopamínu v deionizovanej vode. Nezabudované magnetické častice a dopamín boli odstránené pomocou centrifugácie (Neofuge 23R) pri 20000 rpm po dobu 40 min. Nezabudovaný magnetit bol odstránený magnetickou dekantáciou.

Pretrepaním vznikli MLL, ktoré boli 15 min sonikované pri T = 42°C – vznik ULL so zabudovaným 1 mmol/l roztokom dopamínu.

2.4 Sledovanie lipoperoxidácie a antioxidačnej aktivity, metóda absorpčnej spektrofotometrie, Kleinovho peroxidačného indexu a metóda oxymetrie

Peroxidáciu lipidových membrán sme navodili pomocou Fentonovho činidla (13,4 mg $FeSO_4.7H_2O$ + 3,76 ml H_2O + 240 µl H_2O_2), ktoré sme 1 hod nechali pôsobiť na 1 ml lipozómov so zabudovaným antioxidantom.

Stupeň peroxidácie bol hodnotený Kleinovým peroxidačným indexom, ktorý sa stanovuje pomocou metódy absorpčnej spektrofotometrie. Absorpčná spektrofotometria využíva schopnosť niektorých látok absorbovať fotón a prejsť tak z nižšej energetickej hladiny na vyššiu energetickú hladinu, čo sa pri prechode svetelného lúča s intenzitou I_0 danou látkou prejaví jeho zoslabením. Toto zoslabenie popisuje Lambertov-Beerov-Boguerov zákon:

$$I = I_0 e^{-\varepsilon c l} \quad (1)$$

kde veličiny ε, c a l predstavujú charakteristiku prostredia, cez ktoré lúč prechádza, pričom ε je mólový absorpčný koeficient, c je koncentrácia látky a l je optická dráha, resp. hrúbka absorbujúcej vrstvy. Množstvo absorbovaného svetla popisuje bezrozmerná fyzikálna veličina – absorbancia:

$$A = \varepsilon . c . l \quad (2)$$

Absorbancia bola meraná na jednolúčovom UV-VIS spektrofotometri Shimadzu UV-mini 1240

a jednolúčovom UV-VIS spektrofotometri Jenway 7315.

Kleinov peroxidačný index je pomer absorbancií pri charakteristických vlnových dĺžkach:

$$PI = \frac{A_{233}}{A_{215}} \quad (3)$$

Pri λ = 233 nm absorbujú konjugované diény, ktoré vznikajú pri procese lipoperoxidácie, pričom ich absorbancia sa s narastajúcim stupňom peroxidácie zvyšuje a pri λ = 215 nm absorbujú skupiny charakteristické pre neperoxidované lipozómy.

Pri určovaní stupňa peroxidácie sme peroxidované lipozómy pripravili vyššie popísaným postupom a následne sme ich rozrušili v etanole (pomer etanol : peroxidované lipozómy bol 20:1). Etanol sme na lipozómy nechali pôsobiť po dobu 15 min, aby došlo k úplnému rozrušeniu lipozómov na lipidy. Absorpčné spektrum sme merali v intervale vlnových dĺžok 200 – 400 nm, pričom sme ako referenčný roztok používali etanol pre UV. Pre meranie v UV oblasti bola použitá kremenná kyveta.

Oxymetria je metóda, ktorá meria obsah kyslíka vo vzorke. Počas peroxidácie lipozómov dochádza k spotrebe kyslíka, čiže obsah rozpusteného kyslíka vo vzorke, ktorá je peroxidovaná je menší ako vo vzorke, ktorá oxidácii vystavená nebola. Na meranie bol použitý oxymeter inoLab Oxi 740. Pred každým meraním sa najprv vyčistí senzor na elektróde a elektróda sa naplní roztokom ELY/G, ktorý dodáva výrobca zariadenia. Pripravenú elektródu potom vkladáme do redestilovanej vody, zistíme jej strmosť a obsah kyslíka, ktorý by sa mal zhodovať s hodnotami, ktoré sú pre danú teplotu tabelované.

2.5 Percento zabudovania

Percento zabudovania látky predstavuje množstvo látky, ktoré zostanem uzatvorené v lipozómoch po hydratovaní lipidového filmu. Lipozómy pripravené štandardným spôsobom sme centrifúgovali pri 20000 rpm a odobrali pelet. Objem supernatantu sme stanovili pomocou absorpčnej spektrofotometrie na základe vopred zistenej kalibračnej krivky danej látky.

2.6 Metóda vysokofrekvenčného ohrevu

Pomocou vysokofrekvenčného poľa je možné zahriať magnetické častice obsiahnuté v magnetolipozómoch na hypertermickú teplotu. Na zahrievanie pomocou VF poľa sme používali VF generátor GV6A (ZEZ Rychnov). Frekvencia použitého poľa bola 3,5 MHz. Použitý generátor má tieto parametre:

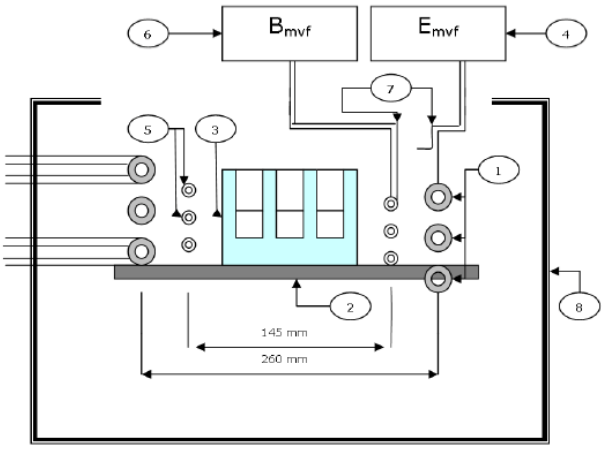
- maximálne napätie na rezonančnej cievke: U_{mvf} = 4,5 kV (možno regulovať)
- maximálny výkon: P_{mvf} = 6 kW (možno regulovať)
- maximálny príkon: P_{max} = 10 kVA
- magnetická indukcia: B = 1,13 mT

Schéma použitého prístroja je uvedená na obr. 1.

Teplota vzoriek bola meraná na mikrovoltmetri-pikoampérmetri BM 545 (Tesla), ktorý sleduje termoelektrické napätie $U_{Cu\text{-}Ko}$ ako rozdiel potenciálov na koncoch vodičov termočlánku na rozsahu 1 mV. Jeden koniec termočlánku meria teplotu miestnosti T_m– je neustále ponorený do olejového kúpeľa. Teplotu vzoriek sme merali druhým koncom termočlánku a vypočítali zo vzťahu:

$$T_v = T_m + \frac{U_{Cu-Ko}}{K} \quad (4)$$

kde K je stredná hodnota citlivosti merania K = 41 μV/°C.



Obr. 1: Schéma generator GV6A - 1. trojzávitová indukčná medená cievka (ϕ = 24 mm) rezonančného obvodu chladená vodou 2. nosná teflónová platňa 3. merané vzorky tepelne izolované polystyrénom 4. merač amplitúdy VF napätia 5. indukčný medený závit (ϕ = 0,7 mm) 6. merač amplitúdy indukcie VF magnetického poľa 7. vysokonapäťové vodiče (15 kV) napojené k E_{mvf} a B_{mvf} 8. uzemnený plášť alebo vodivá platňa kondenzátora

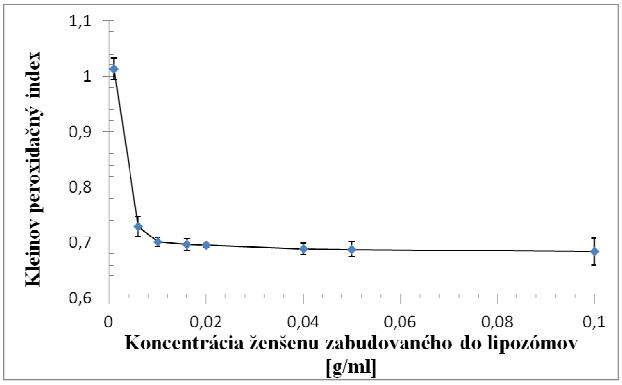
3 Výsledky a diskusia

3.1 Vplyv rôznych antioxidantov na peroxidáciu lipozómov

Na systéme ULL sme sledovali antioxidačnú aktivitu niektorých vybraných látok v rôznych koncentráciách. Skúmali sme antioxidačné vlastnosti extraktov zo ženšenu a plodu palmy acai a antioxidačnú aktivitu kyseliny lipoovej a kyseliny kofeínovej. Na kvantifikáciu antioxidačnej aktivity sme používali Kleinov peroxidačný index, ktorý

sme najprv stanovili pre neperoxidované aj peroxidované lipozómy bez zabudovaných antioxidantov. Peroxidačný index neperoxidovaných lipozómov je $PI = 0{,}528 \pm 0{,}017$ (n = 5, SD) a peroxidačný index peroxidovaných lipozómov je $PI = 1{,}064 \pm 0{,}037$ (n = 5, SD). Z toho vyplýva, že čím nižší peroxidačný index skúmaný antioxidant dosiahne, tým silnejšia je jeho antioxidačná aktivita.

Ženšen je druh rastliny, ktorý sa už od staroveku často používal najmä v ľudovej východnej medicíne na liečenie rôznych ochorení. V súčasnosti sa mu venuje pozornosť najmä kvôli vysokému obsahu ginsenoidov, ktoré sú jeho hlavnou bioaktívnou zložkou a majú mnohé pozitívne biologické účinky. Účinky tejto rastliny sú skôr známe z populárnej literatúry, kde sa zdôrazňuje najmä jeho úloha v procese starnutia, pri ktorom sa tvorí aj množstvo voľných radikálov.

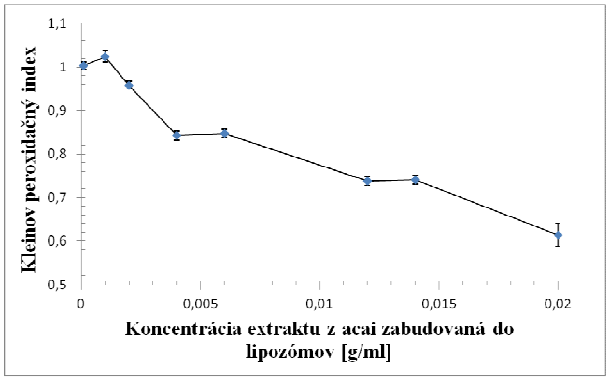


Graf 1: Závislosť Kleinovho peroxidačného indexu od koncentrácie extraktu zo ženšenu zabudovaného do ULL; n = 5, SD

Ako je vidieť na grafe 1 peroxidačný index so stúpajúcou koncentráciou zabudovaného antioxidantu klesá. Už pri nízkej koncentrácii ($c = 0{,}006$ *g/ml*) je jeho hodnota $PI = 0{,}729 \pm 0{,}018$. S ďalším zvýšením koncentrácie jeho hodnota klesá až po koncentráciu ženšenu $c = 0{,}1$ *g/ml*, kedy dosahuje meraný peroxidačný index *PI hodnotu* $0{,}684 \pm 0{,}024$.

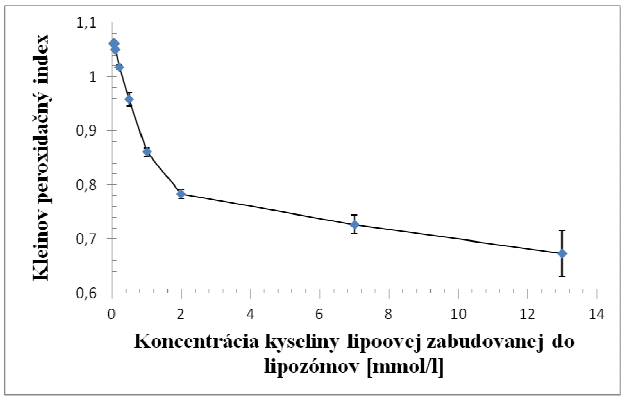
Plodu palmy acai sa vo vedecko-populárnych kruhoch v poslednom čase tiež venuje zvýšená miera pozornosti. Pripisujú sa jej mnohé pozitívne účinky na organizmus, preto sme sa rozhodli preskúmať jej antioxidačné vlastnosti v procese peroxidácie.

Ako je vidno na grafe 2, PI so stúpajúcou koncentráciou extraktu z acai zabudovaného do ULL klesá. Pri najnižších koncentráciách, $c = 0{,}0001$ *g/ml* a $c = 0{,}001$ *g/ml* je antioxidačná aktivita extraktu z acai takmer zanedbateľná – $PI = 1{,}003 \pm 0{,}008$ a $PI = 1{,}024 \pm 0{,}013$. Avšak pri vyšších koncentráciách acai antioxidačná aktivita vzrastá až do koncentrácie $c = 0{,}02$ *g/ml*, kedy je $PI = 0{,}614 \pm 0{,}027$.



Graf 2: Závislosť Kleinovho peroxidačného indexu od koncentrácie extraktu z plodu palmy acai zabudovaného do ULL; n = 5, SD

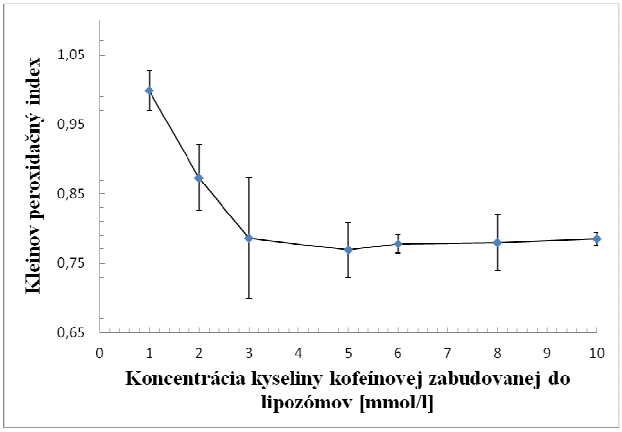
Antioxidačné schopnosti kyseliny lipoovej sú z literatúry známe už dlhšiu dobu, avšak nikdy neboli skúmané v procese lipoperoxidácie, preto sme sa rozhodli zhodnotiť jej aktivitu aj v tomto smere. Kyselinu lipoovú sme na rozdiel od extraktov z acai a ženšenu zabudovávali do lipidovej fázy lipozómov.



Graf 3: Závislosť Kleinovho peroxidačného indexu od koncentrácie kyseliny lipoovej zabudovanej do ULL; n = 5, SD

Z grafu 3 je vidno, že pri koncentrácii c = 0,05 mmol/l kyselina lipoová ešte nevykazuje žiadnu antioxidačnú aktivitu ($PI = 1{,}061 \pm 0{,}004$), ale so stúpajúcou koncentráciou peroxidačný index klesá až na hodnotu $PI = 0{,}673 \pm 0{,}042$ ($c = 13$ *mmol/l*). Kyselina lipoová je teda veľmi silný antioxidant, ktorý dokáže vychytávať voľné radikály, najmä hydroxylové, ktoré vznikajú počas lipoperoxidácie.

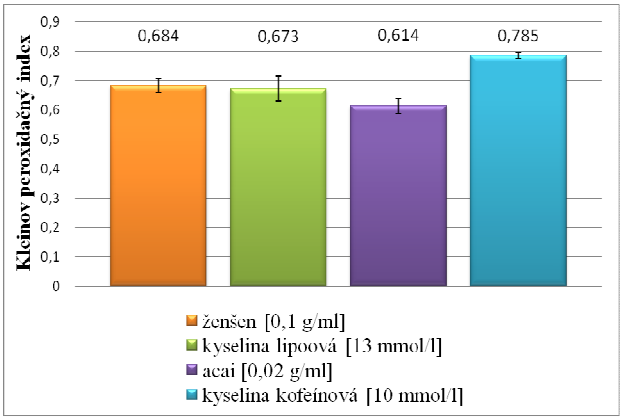
Antioxidačné účinky kyseliny kofeínovej už boli skúmané na viacerých modeloch, preto sme sa ich rozhodli preveriť aj na systéme unilamelárnych lipozómov podrobených Fentonovej reakcii. Kyselina kofeínová obsahuje fenolové a akrylové skupiny a nachádza sa v káve a argánovom oleji. Rovnako ako kyselina lipoová je rozpustná v nepolárnych rozpúšťadlách, preto sme ju zabudovávali do lipidovej fázy lipozómov.



Graf 4: Závislosť Kleinovho peroxidačného indexu od koncentrácie kyseliny kofeínovej zabudovanej do ULL; n = 5, SD

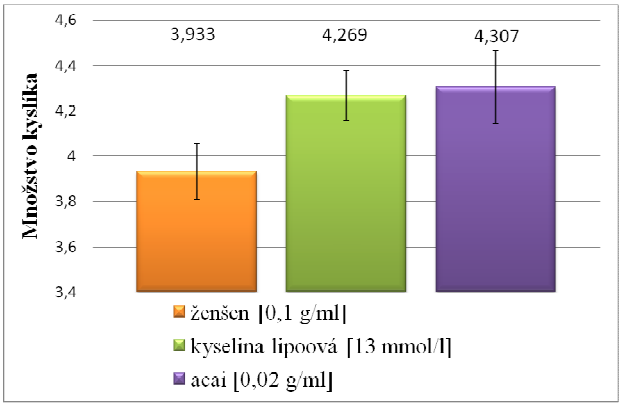
Ako je vidieť na grafe 4, peroxidačný index kyseliny kofeínovej s narastajúcou koncentráciou, ktorú sme zabudovali do ULL, klesá. V malých množstvách *c = 1 mmol/l* kyselina kofeínová nepôsobí ako antioxidant *PI = 0,998 ± 0,029*. V najvyššej použitej koncentrácii (*c = 10 mmol/l*) dosahuje peroxidačný index PI = *0,785 ± 0,009*.

Kyselina kofeínová má čiastočné antioxidačné účinky, ale v porovnaní s ostatnými študovanými antioxidantmi je jej antioxidačná kapacita nižšia.



Graf 5: Vzájomné porovnanie Kleinových peroxidačných indexov najvyšších použitých koncentrácií antioxidantov

Na grafe 5 je vidno, že antioxidant, ktorý dosiahol najnižší peroxidačný index pri najvyššej sledovanej koncentrácii (*c = 0,02 g/mol*) *PI = 0,614 ± 0,027*, je extrakt z plodu palmy acai. Veľmi podobné a takmer rovnako také dobré výsledky ako acai dosiahol aj extrakt zo ženšenu a kyselina lipoová. Extrakt zo ženšenu sme skúmali pri najvyššej koncentrácii *c = 0,1 g/ml*, v ktorej dosiahol *PI = 0,684 ± 0,024* a kyselinu lipoovú pri koncentrácii *c = 13 mmol/l*, v ktorej dosiahla *PI = 0,673 ± 0,042*. Najslabším antioxidantom bola kyselina kofeínová, ktorá pri koncentrácii *c = 10 mmol/l* dosiahla peroxidačný index len *PI = 0,785 ± 0,009*. Napriek o niečo vyššiemu peroxidačnému indexu u kyseliny kofeínovej však môžeme povedať, že všetky štyri látky sú účinné antioxidanty a pri podávaní do organizmu, či už v strave alebo v podobe lipozómov sa môžu vo významnej miere podieľať na zlepšení oxidačného stresu, ktorý sa podieľa na patogenéze niektorých aj neurodegeneratívnych ochorení.



Graf 6: Množstvo kyslíka vo vzorkách peroxidovaných ULL, do ktorých boli zabudované antioxidanty – extrakty zo ženšenu a acai a kyselina lipoová; n = 5, SD

Antioxidačnú aktivitu sme porovnávali aj použitím metódy oxymetrie, ktorá meria priamu spotrebu kyslíka vo vzorke. Antioxidačnú aktivitu sme vyhodnocovali na základe porovnania s množstvom kyslíka vo vzorke neperoxidovaných a vo vzorke peroxidovaných lipozómov.

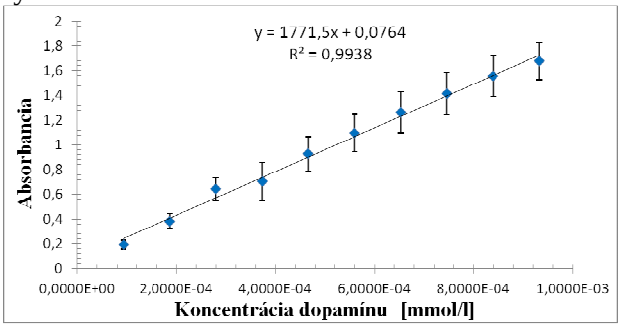
Peroxidované lipozómy obsahovali *0,267 ± 0,06* kyslíka, kým množstvo kyslíka v neperoxidovaných lipozómoch bolo *4,473 ± 0,134*. Čím vyššie do tohto intervalu spadali namerané hodnoty množstva kyslíka vo vzorkách ULL so zabudovanými antioxidantmi, tým silnejšia bola ich antioxidačná aktivita.

Rovnako ako pri Kleinovej metóde peroxidačných indexov, sa aj tu ako najsilnejší antioxidant preukázal extrakt z plodu palmy acai (graf 6), vo vzorke ktorého bolo množstvo kyslíka *4,307 ± 0,161*. Na druhom mieste bola kyseliny lipoová, kde množstvo kyslíka vo vzorke kleslo na hodnotu *4,269 ± 0,11*. Vo vzorke s extraktom zo ženšenu bolo množstvo kyslíka *3,933 ± 0,125*.

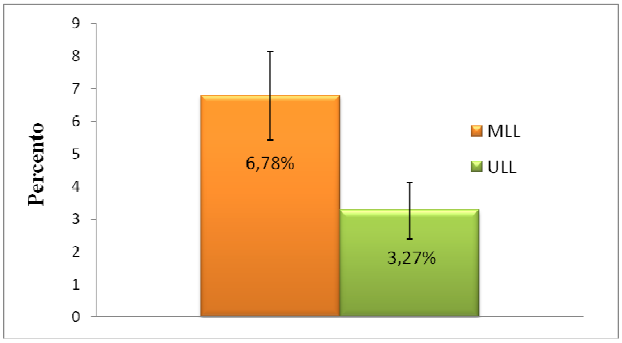
3.2 Interakcie dopamínu s lipozómami a magnetolipozómami

Dopamín je vo vode rozpustná látka, ktorá má významnú úlohu v ľudskom organizme. Patrí medzi katecholamíny a účinkuje ako neurotransmiter a hormón. V mozgu je zodpovedný za učenie sa systémom odmien. Ako intravenózny liek pôsobí na sympatikový nervový systém, zvyšuje srdcovú frekvenciu a krvný tlak. Neprechádza

hematoencefalickou bariériou, preto pri podaní intravenózne nemá účinok na centrálny nervový systém.



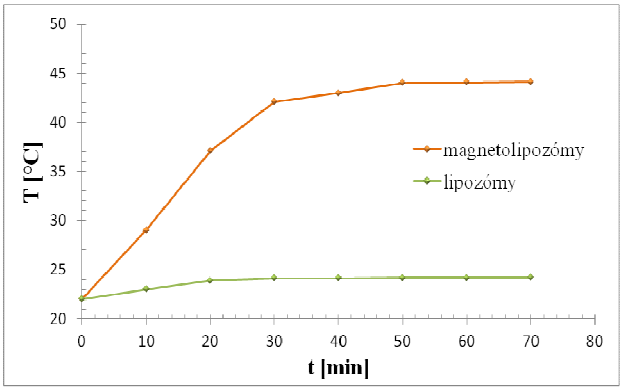
Graf 7: Kalibračná krivka dopamínu



Graf 8: Percento zabudovania dopamínu (*c = 0,933 mmol/l)* do MLL a ULL s veľkosťou častíc 50 nm

Ako je vidieť na grafe 8, zistili sme, že v MLL je zabudované približne *6,78 ± 1,36 %* množstva z celkového použitého množstva roztoku dopamínu. V 50 nm veľkých ULL, ktoré sme pripravili metódou extrúzie, je zabudované len približne *3,27 ± 0,86 %* z celkového použitého množstva dopamínu.

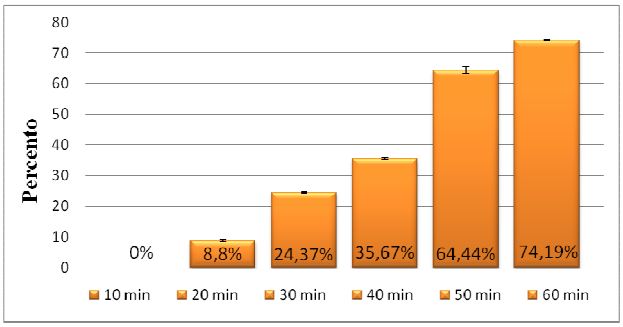
Rozdiel je spôsobený zánikom vodných fáz medzi jednotlivými lamelami multilamalárnych lipozómov, ktoré sú počas extrúzie, pri prechode 50 nm filtrom z MLL oddelené a zostáva len jedna lamela sférického tvaru, ktorá je vyplnená vodnou fázou.



Graf 9: Vysokofrekvenčný ohrev lipozómov a magnetolipozómov; n = 8, SD

Metódou vysokofrekvenčného ohrevu sme skúmali zahrievanie DPPC lipozómov a magnetolipozómov, aby sme zistili za akú dobu sa pri nami používaných dextránmagnetitových nanočasticiach (10 nm) dosiahne hypertermická teplota T = 42 - 44°C.

Ako je vidno na grafe 9, zahrievali sa len magnetolipozómy, teplota lipozómov sa držala na pomerne konštantnej teplote *T = 24°C*. Teplota magnetolipozómov s dextránmagnetitom s časticami veľkými 10 nm sa však zvyšovala až na hodnotu *T = 44,12 ± 0,1°C*. Hypertermickú teplotu *T = 42,07 ± 0,07°C* dosiahli magnetolipozómy za čas *t = 30 min*, počas nasledujúcich 40 min sa ich teplota zvyšovala už len málo.



Graf 10: Percento z celkového zabudovaného množtva dopamínu (*c = 1 mmol/l*), ktoré vytieklo z magnetolipozómov po rôzne dlhom ohreve vysokofrekvenčným poľom

Na grafe 10 je uvedené percento z celkového množstva dopamínu, ktorý bol zabudovaný do magnetolipozómov, ktoré sa počas zahrievania vo VF poli z magnetolipozómov uvoľnilo. Čím dlhšie boli magnetolipozómy vystavené účinkom VF poľa, tým viac dopamínu sa z nich uvoľnilo. Hypertermickú teplotu magnetolipozómy dosahujú po 30 minútach v poli, avšak najväčší skok v úniku dopamínu z magnetolipozómov sme zaznamenali medzi *t = 40 min* a *t = 50 min*. Čiastočne je spôsobený tým, že DPPC má teplotu fázového prechodu *T = 42°C*, pri ktorej dochádza k zmene fázy lipidu na kvapalno-kryštalickú, čím sa zvyšuje permeabilita lipidovej membrány.

Po ohreve trvajúcom len *10 min* sa z magnetolipozómov neuvoľnil žiaden, alebo len spektrofotometricky nedetekovateľné množstvo dopamínu. S narastajúcim časom sa množstvo uvoľneného dopamínu zvyšovalo až na hodnotu *74,19 ± 0,13%*, ktoré sa uvoľnilo po zahrievaní po dobu *t = 60 min.*

4 Záver

V práci sme skúmali antioxidačné vlastnosti niektorých vybraných látok – extraktu z plodu palmy acai, extraktu zo ženšenu, kyseliny lipoovej a kyseliny kofeínovej. Všetky prejavili pomerne

dorbré antioxidačné schopnosti – ako najsilnejší antioxidant v procese lipoperoxidácie sa preukázal extract z plodu palmy acai, avšak veľmi dobré výsledky mal aj extract zo ženšenu a kyselina lipoová. V porovnaní s ostatnými antioxidantmi bola kyselina kofeínová najslabšia, ale aj napriek tomu je jej antioxidačná kapacita pomerne vysoká.

Podávanie týchto látok do organizmu v podobe lipozómov, môže zabezpečiť prevenciu pred vznikom niektorých ochorení, ktoré súvisia s oxidačným stresom, napríklad Alzheimerova, či Parkinsonova choroba. Výhoda použitia týchto antioxidantov v lipozómoch ako nosičoch je výhodná aj z toho dôvodu, že lipozómy do určitej veľkosti dokážu prechádzať cez hematoencefalickú bariéru a dostať sa tak presne na miesta v mozgu, kde je ich treba.

Skúmali sme aj interakcie dopamínu s lipozómami a magnetolipozómami. Dopamín sa do multilamelárnych aj unilamelárnych lipozómov zabudováva pomerne ľahko, avšak jeho percento zabudovania, najmä v ULL nie je veľmi vysoké.

Pomocou metódy vysokofrekvenčného ohrevu sme skúmali kontrolované uvoľňovanie dopamínu z magnetolipozómov. Dopamín sa z nich uvoľňoval postupne, ale po dlhšom pôsobení VF poľa, v pomerne vysokých množstvách.

Taktiež použitie lipozómov a magnetolipozómov ako prenášačov dopamínu do mozgu u pacientov postihnutých Parkinsonovou chorobou je perspektívna metóda liečby tohto neurodegeneratívneho ochorenia.

Poďakovanie

Za odborné vedenie, cenné rady a trpezlivosť ďakujem prof. RNDr. Melánii Babincovej, CsC.

Literatúra

[Babincová et al., 2000] Babincová, M., Šusteková, E. and Babinec, P.(2000). Heating of superparamagnetic coloid in high-frequency magnetic field: implication for electromagnetic hypertermia. *Czechoslovak Journal of Physics*, 50:979-981.

[Babincová et al., 2001] Babincová, M., Babinec, P. and Bergemann, C. (2001). High gradient magnetic capture of ferrofluid: Implication for drug targeting and tumor embolization. *Zeitschrift für Naturforschung*, 56:909-911.

[Bangham and Horne, 1964] Bangham, A.D. and Horne, R.W. (1964). Negative staining of phospholipids and their structural modification by surface-active agents as observed in the electron microscope. *J Mol Biol.*, 8:660–668.

[Cho et al., 2006] Cho, W.C.S., Chung, W.-S., Lee, S.K.W., Leung, A.W.N., Cheng, C.H.K. and Yue, K.K.M. (2006). Ginsenoid Re of Panax ginseng posses significant antioxidant and antihyperlipidemic efficacies in streptozotocin-induced diabetic rats. *European Journal of Pharmacology*, 550:173-179.

[De Souza et al., 2012] De Souza, M.O., Silva, M., Silva, M.E., Oliveira, R. de P. and Pedrosa, M.L. (2010). Diet supplementation with acai (Euterpe oleracea Mart.) pulp improves biomarkes of oxidative stress and the serum lipid profile in rats. *Nutrition*, 26:804-810.

[Ďuračková, 1998] Ďuračková, Zdena. *Voľné radikály a antioxidanty v medicíne (I).* Bratislava: Slovak Academic Press, 1998. ISBN 80-88908-11-6

[Foley et al., 1999] Foley, S., Navartnam, S., McGarvey, D.J., Land E.J., Truscott, T.G. and Rice-Evans, C.A. (1999). Singlet oxygen quenching and the redox properties of hydroxycinnamic acids. *Free Radic Biol Med.* 26:1202-1208.

[Good et al., 1996] Good, P.F., Werner, P., Hsu, A., Olanow, C.W. and Perl, D.P. (1996). Evidence of neuronal oxidative damage in Alzheimer's disease. *American Journal of Pathology*, 149:21-27.

[Gülçin, 2006] Gülçin, Ilhami. (2006). Antioxidant activity of caffeic acid (3,4-dihydroxycinnamic acid). *Toxicology*, 217:213-220.

[Henchcliffe and Beal, 2008] Henchcliffe, C. and Beal, M.F. (2008). Mitochondrial biology and oxidative stress in Parkinson disease pathogenesis. *Nature Clinical Practice Neurology.* 4:600-609.

[Hulín, 2002] Hulín, Ivan. *Patofyziológia.* 6. Vydanie. Bratislava: Slovak Academic Press, 2002. ISBN 80-89104-05-3

[Huwyler et al., 1996] Huwyler, J., Wu, D. and Pardrige, W.M. (1996). Brain drug delivery of small molecules using immunoliposomes. *Proc Natl Acad Sci U S A*, 93:14164-14169.

[Iwahashi et al., 1990] Iwahashi, H., Ishii, T., Sugata, R. and Kido, R. (1990). The effects of caffeic acid and its related catechols on hydroxyl radical formation by 3-hydroxyanthranilic acid, ferric chloride, and hydrogen peroxide. *Arch Biochem Biophys.* 276:242-247.

[Jung et al., 2006] Jung, U.J., Lee, M-K., Park, Y.B., Jeon, S-M. and Choi, M-S. (2006). Antihyperglycemic and antioxidant properties of caffeic acid in db/db mice. *The Journal of Pharmacology and Experimental Therapeutics.* 318:476-483.

[Kang et al., 2010] Kang, J., Li, Z., Wu, T., Jensen, G.S., Schauss, A.G. and Wu, X. (2010). Anti-oxidant capacities of flavonoid compounds isolated from acai pulp (Euterpe oleracea Mart.). *Food Chemistry*, 122:610-617.

[Kitts et al., 2000] Kitts, D.D., Wijewickreme, A.N. and Hu, C. (2000). Antioxidant properties of North American ginseng extract. *Molecular and Cellular Biochemistry*, 203:1-10.

[Li et al., 2010] Li, B., Wang, C., He, T., Yuan, C. and Du, W. (2010). Antioxidants potentiate american ginseng –induced killing of colorectal cancer cells. *Cancer Lett.*, 289:62-70.

[Mačák et al., 2012] Mačák, J., Mačáková, J., and Dvořáčková, J. *Patologie*. 2. doplnené vydanie. Praha: Grada Publishing, 2012. ISBN 978-80-247-3530-6.

[Navari-Izzo et al., 2002] Navari-Izzo, F., Quartacci, M.F. and Sgherri, C. (2002). Lipoic acid: a unique antioxidant in the detoxication of activated oxygen species. *Plant Physiol Biochem.,* 40:463-470.

[Nickander et al., 1996] Nickander, K.K., McPhee, B.R., Low, P.A. and Tritschler, H.J. (1996). Alpha-lipoic acid: Antioxidant potency against lipid peroxidation of neural tissues in vitro and implications for diabetic neuropathy. *Free Radical Biology & Medicine,* 21:631-639.

[Packer and Tritschler, 1996] Packer, L. and Tritschler, H.J. (1996). Alpha-lipoic acid: the metabolic antioxidant. *Free Radical Biology & Medicine,* 20:625-626.

[Packer et al., 1995] Packer, L.,Witt, E.H. and Tritschler, H.J. (1995). Alpha-lipoic acid as biological antioxidant. *Free Radical Biology & Medicine,* 19:227-250.

[Sayre et al., 1997] Sayre, L.M., Zelasko, D.A., Harris, P.L.R., Perry, G., Salomon, R.G. and Smith, M.A. (1997). 4-Hydroxynonenal-derived advanced lipid peroxidation end products are increased in Alzheimer's disease. *Journal of Neurochemistry*, 68:2092-2097.

[Schauss et al., 2006] Schauss, A.G., Wu, X., Prior, L.R., Ou, B., Huang, D., Owens, J., Agarwal, A., Jensen, G.S., Hart, A.N. and Schanbrom, E. (2006). Antioxidant capacity and other bioactive capacities of the freeze-dried amazonian palm berry, euterpe oleraceae Mart. (Acai). *J Agric Food Chem.,* 54:8604-8610.

[Uhumwango and Okor, 2005] Uhumwangho, M.U. and Okor, R.S. (2005). Current trends in the production and biomedical applications of liposomes: a review. *Journal of Medicine and Biomed. Res.,* 4:9-21

Models of a Dust Cloud near the Galactic Center

Michal Zajaček[1*]

Supervisor: Vladimír Karas[2†]

[1] Astronomical Institute of the Charles University in Prague, V Holešovičkách 2, 180 00 Prague 8
[2] Astronomical Institute of the Academy of Sciences of the Czech Republic, Fričova 298, 251 65 Ondřejov

Abstract: We present three models of a recently discovered cloud of gas and dust moving on a highly elliptical orbit near the central black hole in our Galaxy. We concentrate on the velocity gradient temporal evolution as well as geometrical properties of the dust component of the cloud and compare them with observations performed by Gillessen et al. (2012).

Keywords: Interstellar medium (ISM) - dust cloud, Galaxy-nucleus

1 Introduction

Recently, a cloud structure has been reported to fall directly into the accretion zone of the supermassive black hole (SMBH) in the Galactic Center [Gillessen et al., 2012]. [Gillessen et al., 2012] obtained L-band ($3.8\,\mu$m) images with the adaptive optics NACO instrument as well as deep integral field spectroscopy using SINFONI at the VLT. A new set of observations was published, which enabled to update the orbital elements of the cloud structure [Gillessen et al., 2013].

A number of models of the cloud and its origin have been proposed. [Gillessen et al., 2012, Gillessen et al., 2013] performed a simple test-particle simulation, which matches the observations so far. Other theories include a recent nova outburst which ejected a ring-like shell of gas [Meyer and Meyer-Hofmeister, 2012], a young planetary nebula [Gillessen et al., 2012], a protoplanetary disc that gradually evaporates [Murray-Clay and Loeb, 2012], and a collision between a low-mass main-sequence star and a stellar mass black hole [Miralda-Escudé, 2012]. Moreover, hydrodynamical simulations discussing various scenarios have also been performed [Schartmann et al., 2012, Burkert et al., 2012], although there are no significant hydrodynamical effects observed so far. In the near future, however, the cloud is expected to disintegrate by its hydrodynamical interaction with the surrounding environment.

In this contribution, we revisit particle simulations of the cloud performed previously by Gillessen et al. Besides a high dispersion dust cloud, we study a low dispersion cloud, a cloud-star system, and a protoplanetary disc model. We show that the effect of hydrodynamic drag of the interstellar medium acting on dust particles is very small in comparison with the gravitational force and neglect it. Finally, we compare the models and discuss the differences.

1.1 Conditions near the Galactic Center

All objects orbiting the supermassive black hole interact with hot plasma supplied by stellar winds of hot, massive stars that lie within the central parsec of the Galaxy. The hydrodynamic effects of this interaction depend on the temperature and density profile of the ISM near SgrA*. For the purposes of this work, we use a semi-analytical relations for electron temperature T_e and electron density n_e radial profiles [Broderick and Loeb, 2006] based on the models of radiatively inefficient accretion flows. The parameters were fitted using millimeter to centimeter observations of SgrA*, its emission polarization, and the size of the emitting region at 1.3 mm. The following relations were found for the profiles:

$$n_\mathrm{e} = n_\mathrm{e}^0 \left(\frac{r}{r_\mathrm{s}}\right)^{-1.1} \exp(-z^2/2\rho^2) \qquad (1)$$

$$T_\mathrm{e} = T_\mathrm{e}^0 \left(\frac{r}{r_\mathrm{s}}\right)^{-0.84}, \qquad (2)$$

where $r_\mathrm{s} = 2GM/c^2$ is the Schwarzchild radius, ρ is a cylindrical radius, and z is a vertical coordinate. In these radial dependencies, we consider quantities n_e and T_e to be vertically averaged, so radial profiles may be approximated as power-law functions. The parameters of the model that fit observations best are $n_\mathrm{e}^0 = 3.5\times10^7\,\mathrm{cm}^{-3}$ and $T_\mathrm{e}^0 = 9.5\times10^{10}\,\mathrm{K}$ [Broderick et al., 2011]. Both profiles are plotted in

*michal.zajacek@mail.mcgill.ca
†vladimir.karas@cuni.cz

Figure 1. Electrons are decoupled from ions at small distances from SMBH, therefore we also plotted ion temperatures that are ~ 1 to 5 times higher than electron temperatures resulting from MHD simulations (e.g., [Dexter et al., 2010]).

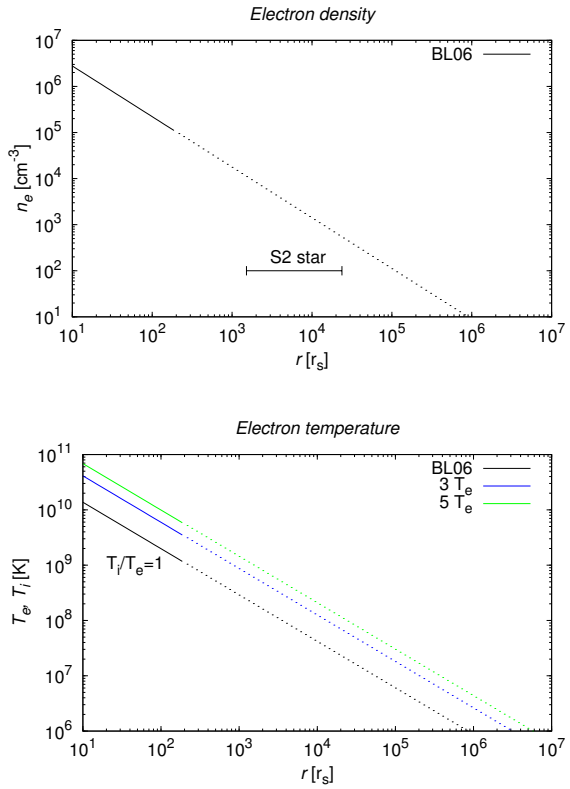


Figure 1: Electron density (top), electron and ion temperature profiles (bottom) according to [Broderick and Loeb, 2006] (BL06). Extrapolated values are plotted with dots.

1.2 Motion near SgrA*

In order to include hydrodynamic effects while studying the motion of objects near SgrA* (dust particles, main-sequence stars, compact objects), one should first find out if their motion is subsonic or supersonic. According to Fig. 1, the gas near the center is hot and sparse, so we may use the ideal-gas approximation. According to Fig. 2, where we compare characteristic orbital speed $v_{\rm orb} = \sqrt{GM_{\rm SMBH}/r}$ and the sound speed $c_{\rm s} = \sqrt{\gamma k T_{\rm e}/\mu m_{\rm u}}$ (k is Boltzmann constant, γ adiabatic factor, $m_{\rm u}$ atomic mass unit, μ relative mass), the orbital speed is clearly supersonic for distances less than 10^6 Schwarzschild radii.

In case of dust particles or colder gas clumps with

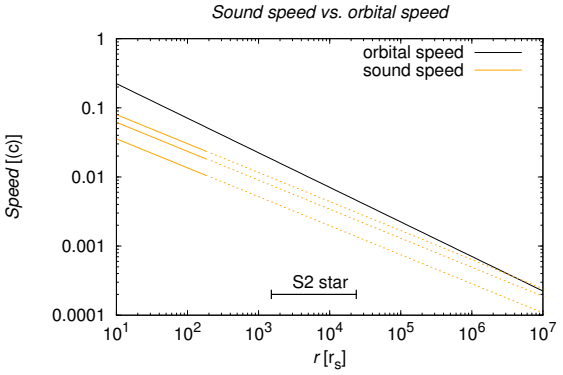


Figure 2: Comparison of the characteristic keplerian orbital speed to sound speed as a function of distance from the Galactic center (units in speed of light).

the mass m located in the hot plasma environment, we estimate the acceleration due to the hydrodynamic drag $a_{\rm drag}$ as follows:

$$a_{\rm drag} \approx \frac{\pi R_{\rm eff}^2}{m} \rho_{\rm e} v_{\rm rel}^2 \,, \tag{3}$$

where $R_{\rm eff}$ is an effective interaction radius of the body, $\rho_{\rm e}$ is the density of surrounding environment, and $v_{\rm rel}$ is the relative velocity of the body with respect to the environment. In particular, for dust particles with diameter $d_{\rm D}$, average density $\rho_{\rm d}$, and moving with relative velocity $v_{\rm rel}$, the relation 3 may be rewritten to the form:

$$a_{\rm drag} \approx \frac{3}{2} \left(\frac{\rho_{\rm e}}{\rho_{\rm d}} \right) \frac{v_{\rm rel}^2}{d_{\rm D}} \,. \tag{4}$$

For the radial density profile, we use the relation 1 multiplied by atomic mass unit $m_{\rm u}$, so $\rho_{\rm e} = n_{\rm e} m_{\rm u}$.

We see that the drag force acting on a dust particle is negligible since the gravitational acceleration is at least 10^9 times greater.

2 Results

We performed numerical simulations of the cloud while passing near the SMBH using the symplectic integrator `Swift` [Levison and Duncan, 1994]. For the nominal trajectory of the object, we used the updated orbital elements found by fitting observed data [Gillessen et al., 2013] (see Table 1).

For illustration, we plot the nominal trajectory in the coordinate system of the SMBH with three

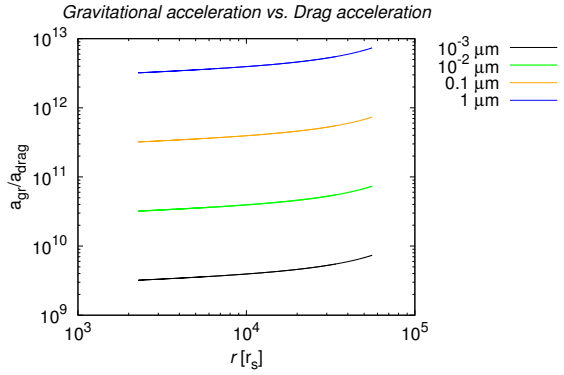


Figure 3: The ratio of gravitational acceleration to drag acceleration due to interaction of dust particles with interstellar medium for $10^{-3}\,\mu$m, $10^{-2}\,\mu$m, $0.1\,\mu$m, and $1\,\mu$m dust grains.

	[Gillessen et al., 2012]	[Gillessen et al., 2013]
Semi-major axis[mas]	521 ± 28	666 ± 39
Semi-major axis[pc]	0.021 ± 0.001	0.027 ± 0.002
Eccentricity	0.9384 ± 0.0066	0.9664 ± 0.0026
Inclination [°]	106.55 ± 0.88	109.48 ± 0.81
Position angle of ascending node [°]	101.5 ± 1.1	95.8 ± 1.1
Longitude of periastron [°]	109.59 ± 0.78	108.50 ± 0.74
Epoch of periastron [yr]	2013.51 ± 0.04	2013.69 ± 0.04
Orbital period (yr)	137 ± 11	198 ± 18

Table 1: Orbital elements for the nominal trajectory of the cloud approaching the SMBH.

marked positions (see Fig. 4). The range of the clockwise disk of young stars, with which the cloud shares approximately the same inclination, is also plotted.

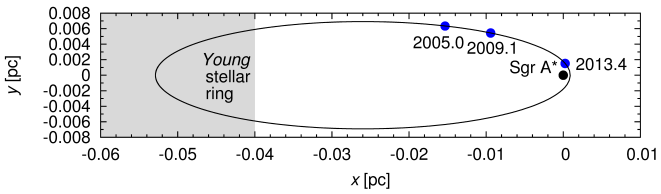


Figure 4: The nominal trajectory of the cloud

When observed from the Earth, the projected trajectory of the cloud crosses visually several trajectories of *S stars* within $1''$ of the Sgr A* (see Fig. 5).

2.1 Model I: Big velocity dispersion

The simplest model of the cloud is a test-particle model with no hydrodynamic drag. Figure 3 shows that this treatment is justified for a cloud consisting only of dust particles. For clarity and illustration, we plot the the temporal evolution of 3D velocity, 3D distance (Fig. 6), and the line of sight velocity component transformed to the local standard of rest (Fig. 7).

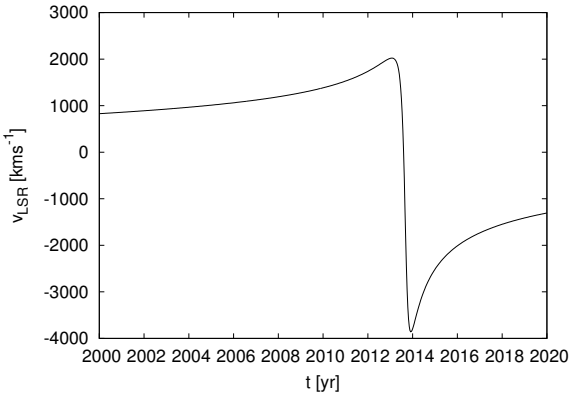


Figure 7: The temporal evolution of the line of sight velocity component transformed to the local standard of rest (LSR).

Our N-particle model consists of 10000 particles. The initial conditions were set for the epoch 2000.0. We assume that the positions and the velocities are distributed according to the Gaussian distribution in the position-velocity phase space and the velocities are assumed to be isotropic. The initial FWHMs are 25 mas and 120 kms^{-1}.

In Fig. 8, we plot the evolution of the cloud in right ascension and declination coordinates.

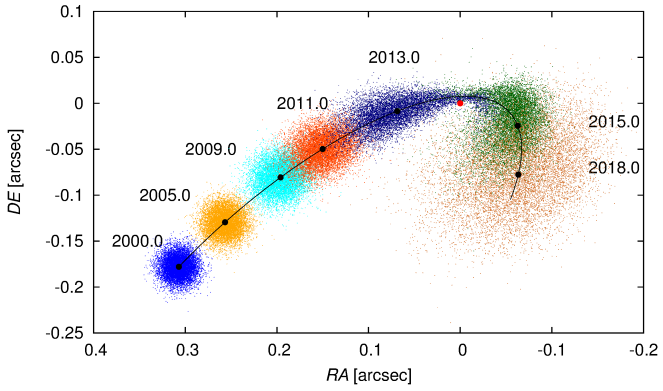


Figure 8: The evolution of the cloud along the nominal trajectory as seen from the Earth.

It is also useful to plot the projected distance of the cloud from the SMBH with respect to the line of sight velocity component since it enables one to see the rapid increase of velocity and its gradient while approaching the pericenter (see Fig. 9).

2.2 Model II.: Small velocity dispersion

Case A: First, we investigate the case when a massive star could reside inside the cloud. As before, we start the integration in 2000.0. Our N-particle cloud consists of 5000 particles and 1 star with the mass $10\,M_{\odot}$. We set up the parameters in such a way so that the velocity of most particles is less than the escape velocity of the star at a given radius. The FWHMs of the Gaussian distributions are 25 mas and $12\,\mathrm{kms}^{-1}$.

We plot the evolution of the cloud-star system in right ascension and declination plane (see Fig. 10).

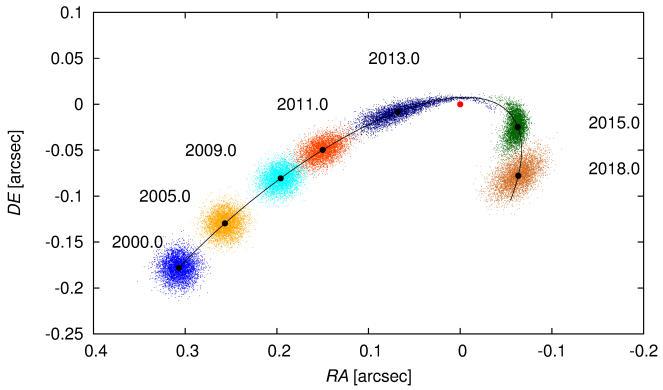


Figure 10: The evolution of the cloud-star system along the nominal trajectory as seen from the Earth.

As in case of a purely dust cloud, we plot the projected distance of the cloud from the SMBH with respect to the line of sight velocity component (see Fig. 11).

Case B: We investigate a dust cloud as before, but we start with a small velocity dispersion (FWHM $12\,\mathrm{kms}^{-1}$). This time we study the evolution of the cloud during the whole period. The results are plotted in the position-velocity graph (Fig. 12).

2.3 Model III.: Protoplanetary disc

Finally, we test the idea of a protoplanetary disc put forward by [Murray-Clay and Loeb, 2012]. We produce a disc consisting of 5000 particles with keplerian velocities. The disc radius is 10 AU and has a uniform distribution of inclination from $-30°$ to $30°$. The mass of the star is set to $10\,M_{\odot}$. The integration lasts from the epoch 2000.0 to 2020.0.

In Fig.13, we plot the evolution of the disc-star system along the nominal trajectory.

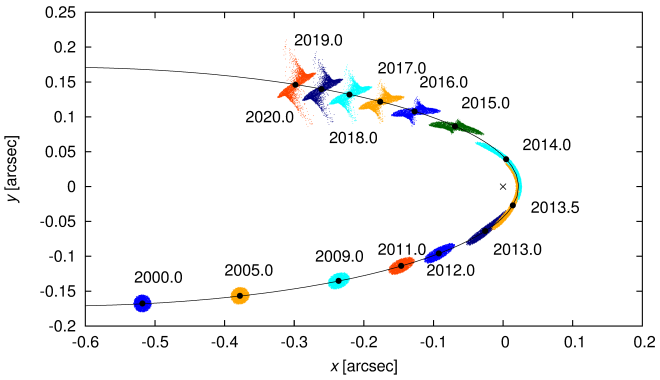


Figure 13: The evolution of the disc-star system along the nominal trajectory.

In order to see the evolution of the disc structure in detail, we plot disc profiles for the epochs 2000.0, 2013.5, and 2020.0 (Fig.14).

3 Discussion

The high dispersion Gaussian distribution (FWHM $120\,\mathrm{kms}^{-1}$) is derived from the observation of Brγ line [Gillessen et al., 2013]. However, the low dispersion model may still hold for the component of the cloud closer to its center. This component may still be observed after the pericenter passage, while the high dispersion component will be dispersed in the ambient gas. We see in position velocity diagrams that the cloud always develops a high-velocity tail before the pericenter passage, which is more profound for a high-dispersion regime. This tail is also observed, which favours more the high-dispersion model. From the dynamical point of view, the presence of a star does not influence the cloud much, therefore both models (with or without a star) are plausible now. Further spectroscopic observations are needed to exclude one or the other. The protoplanetary disc model may be excluded from the infrared observations, but the presence of such a disc in the strong gravity regime is interesting to explore.

4 Conclusion

We studied three models of the cloud approaching the Galactic Center:

- a high dispersion model (without a star),
- a low dispersion model (with and without a star),
- a protoplanetary disc model.

We discuss the differences between these models that are mainly seen in position-velocity diagrams.

In the future, we plan to continue modelling this interesting structure that we are lucky to observe. We are also focusing on possible hydrodynamic effects that become more important as the cloud approaches the pericenter. New observations right before and after the pericenter passage will help constrain the models.

Acknowledgments

I thank Miroslav Brož, PhD. (Astronomical Institute of the Charles University in Prague) for the help with the `Swift` integration package as well as for his insights concerning this study. The work on this project was partially supported by the Grant Agency of the Charles University in Prague (GAUK), project 879113 ("The study of neutron stars in the galactic centre").

References

[Broderick et al., 2011] Broderick, A. E., Fish, V. L., Doeleman, S. S., and Loeb, A. (2011). Constraining the Structure of Sagittarius A*'s Accretion Flow with Millimeter Very Long Baseline Interferometry Closure Phases. *ApJ*, 738:38.

[Broderick and Loeb, 2006] Broderick, A. E. and Loeb, A. (2006). Frequency-dependent Shift in the Image Centroid of the Black Hole at the Galactic Center as a Test of General Relativity. *ApJL*, 636:L109–L112.

[Burkert et al., 2012] Burkert, A., Schartmann, M., Alig, C., Gillessen, S., Genzel, R., Fritz, T. K., and Eisenhauer, F. (2012). Physics of the Galactic Center Cloud G2, on Its Way toward the Supermassive Black Hole. *ApJ*, 750:58.

[Dexter et al., 2010] Dexter, J., Agol, E., Fragile, P. C., and McKinney, J. C. (2010). The Submillimeter Bump in Sgr A* from Relativistic MHD Simulations. *ApJ*, 717:1092–1104.

[Gillessen et al., 2009] Gillessen, S., Eisenhauer, F., Trippe, S., Alexander, T., Genzel, R., Martins, F., and Ott, T. (2009). Monitoring Stellar Orbits Around the Massive Black Hole in the Galactic Center. *ApJ*, 692:1075–1109.

[Gillessen et al., 2013] Gillessen, S., Genzel, R., Fritz, T. K., Eisenhauer, F., Pfuhl, O., Ott, T., Cuadra, J., Schartmann, M., and Burkert, A. (2013). New Observations of the Gas Cloud G2 in the Galactic Center. *ApJ*, 763:78.

[Gillessen et al., 2012] Gillessen, S., Genzel, R., Fritz, T. K., Quataert, E., Alig, C., Burkert, A., Cuadra, J., Eisenhauer, F., Pfuhl, O., Dodds-Eden, K., Gammie, C. F., and Ott, T. (2012). A gas cloud on its way towards the supermassive black hole at the Galactic Centre. *Natur*, 481:51–54.

[Levison and Duncan, 1994] Levison, H. F. and Duncan, M. J. (1994). The long-term dynamical behavior of short-period comets. *Icar*, 108:18–36.

[Meyer and Meyer-Hofmeister, 2012] Meyer, F. and Meyer-Hofmeister, E. (2012). A nova origin of the gas cloud at the Galactic center? *A& A*, 546:L2.

[Miralda-Escudé, 2012] Miralda-Escudé, J. (2012). A Star Disrupted by a Stellar Black Hole as the Origin of the Cloud Falling toward the Galactic Center. *ApJ*, 756:86.

[Murray-Clay and Loeb, 2012] Murray-Clay, R. A. and Loeb, A. (2012). Disruption of a proto-planetary disc by the black hole at the milky way centre. *Nature Communications*, 3.

[Schartmann et al., 2012] Schartmann, M., Burkert, A., Alig, C., Gillessen, S., Genzel, R., Eisenhauer, F., and Fritz, T. K. (2012). Simulations of the Origin and Fate of the Galactic Center Cloud G2. *ApJ*, 755:155.

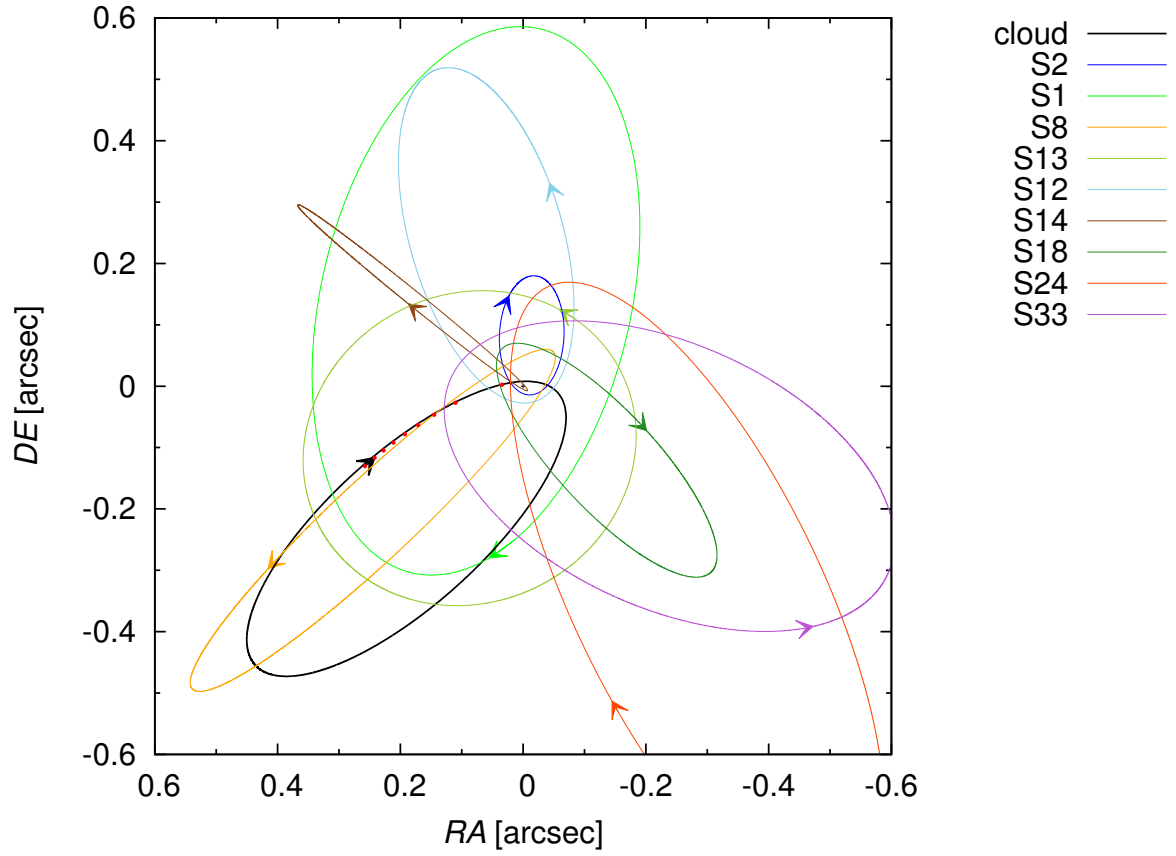


Figure 5: The trajectory of the cloud as seen from the Earth. For illustrative purposes, the trajectories of several S stars were plotted within $1''$ of the Sgr A*. The coordinate system was chosen so that Sgr A* is at the origin. The data for computing projections on the celestial plane were taken from [Gillessen et al., 2013] and [Gillessen et al., 2009].

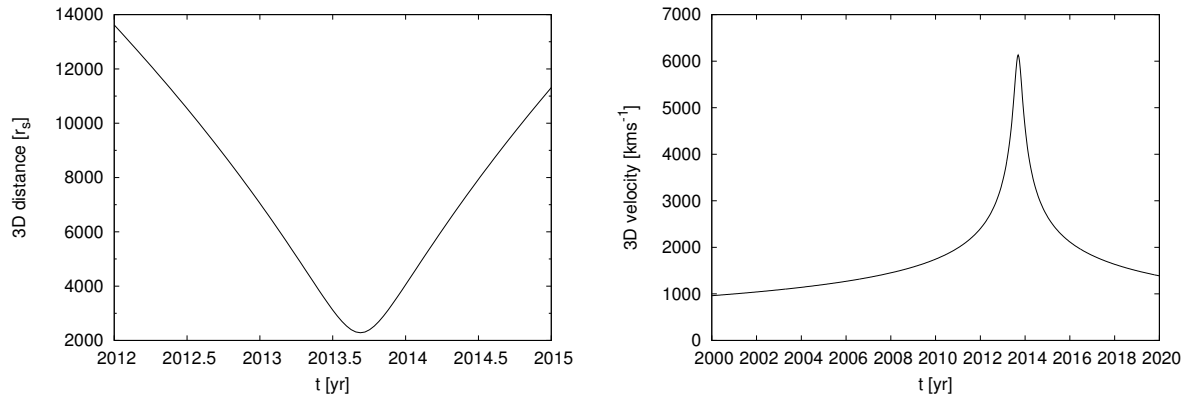


Figure 6: The temporal evolution of 3D distance of the cloud from the SMBH in Schwarzschild radii (left) and of 3D velocity (right).

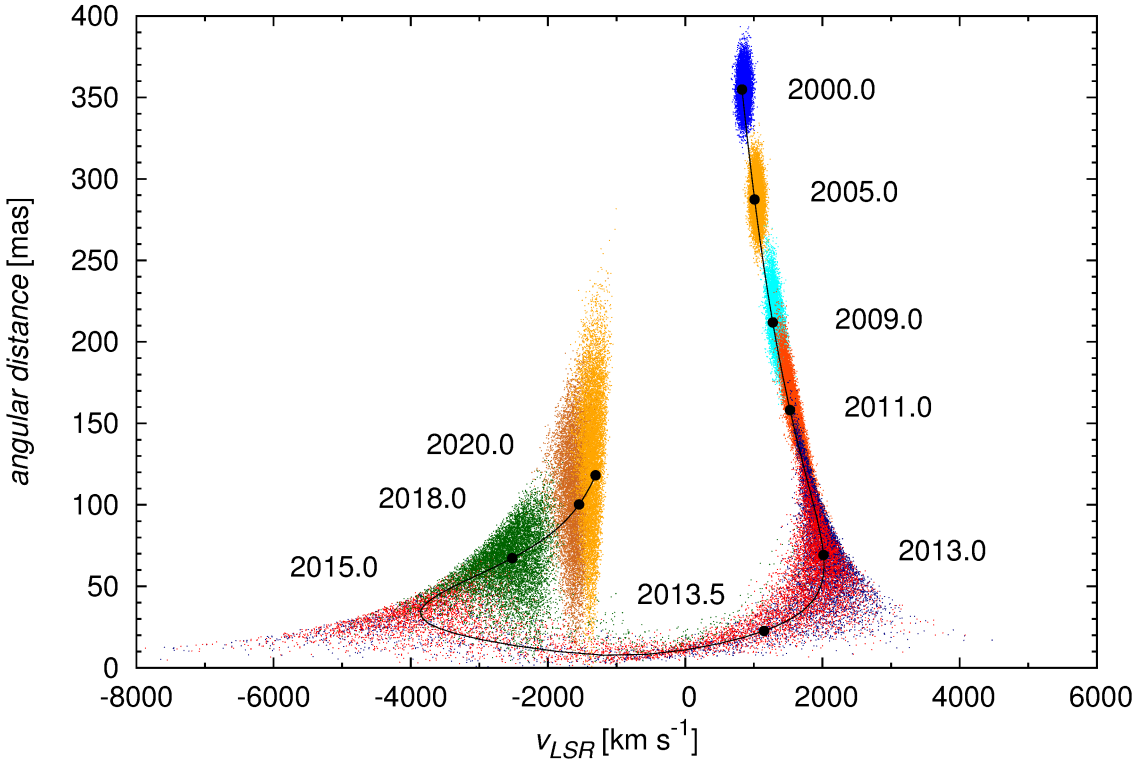


Figure 9: The position-velocity graph with a few marked positions on the nominal orbit for given years.

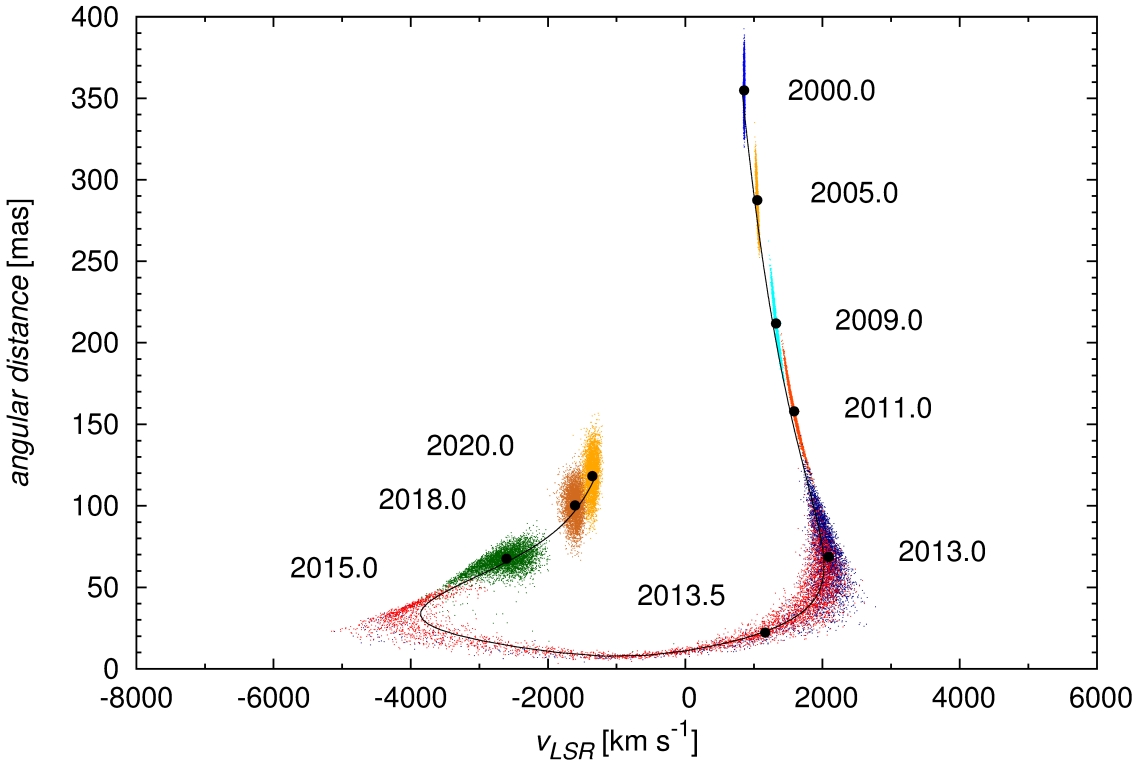


Figure 11: The position-velocity graph of the cloud-star system with a few labelled positions of the star for chosen years.

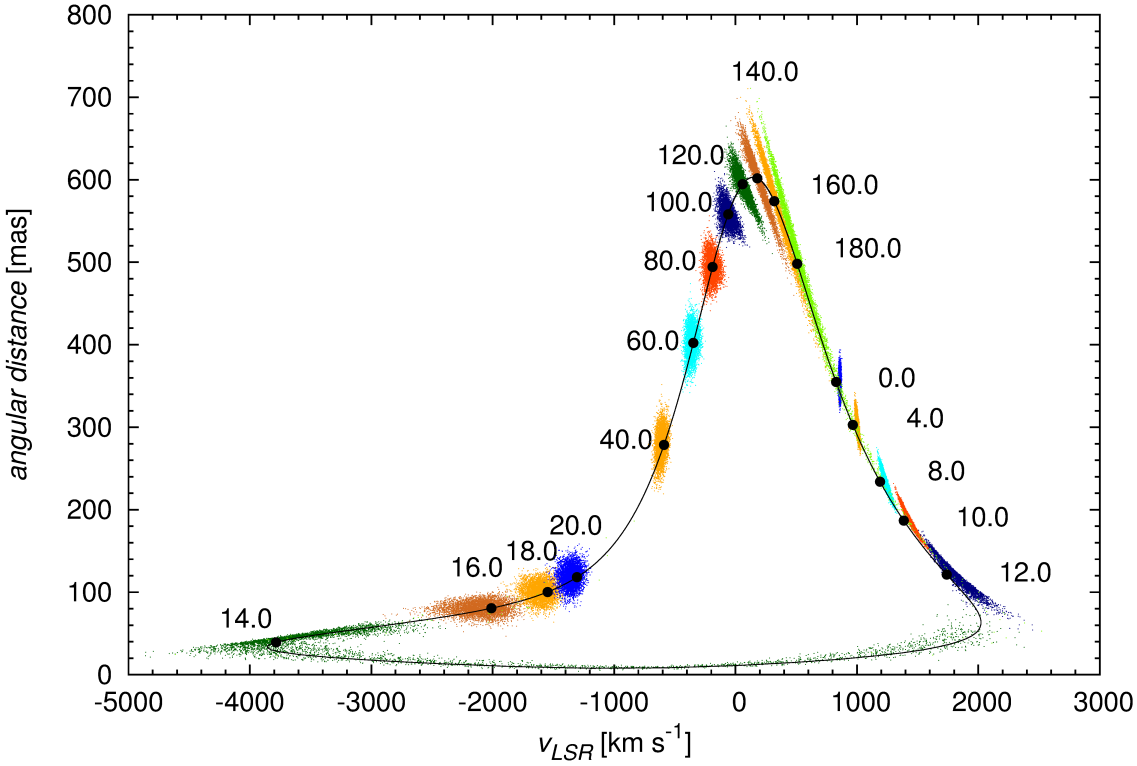


Figure 12: The position-velocity plot of the cloud with an initially small velocity dispersion (FWHM 12 kms^{-1}). The initial position is marked as 0.0 and the subsequent positions are labelled as elapsed years from the initial one.

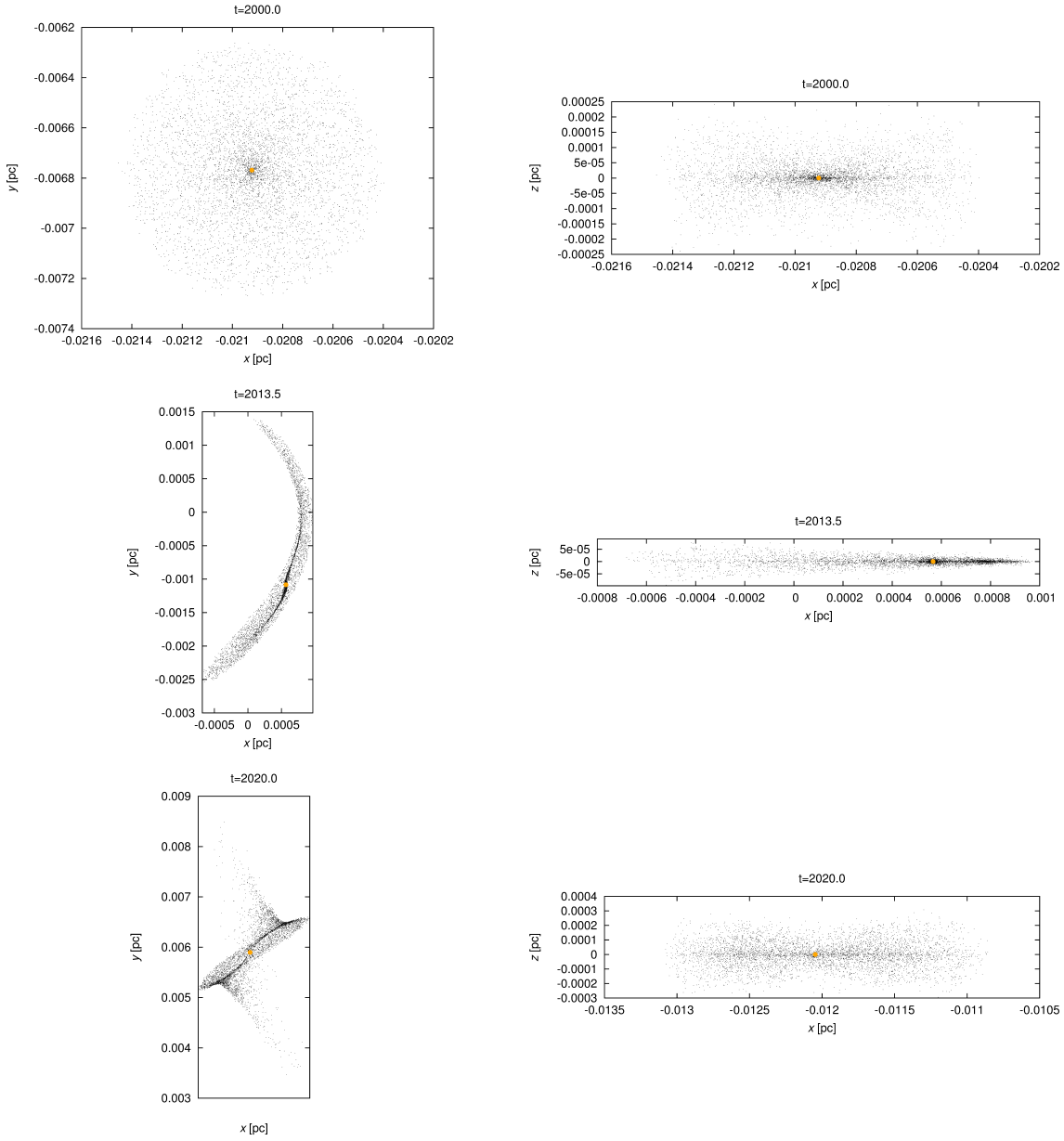


Figure 14: The disc profiles for the epochs 2000.0, 2013.5, and 2020.0.

Šírenie tepla v ochranných diódach

Simona Zajkoska[1*]
Školiteľ: Peter Bokes[1†]

[1] Ústav jadrového a fyzikálneho inžinierstva, FEI STU, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovenská republika

Abstrakt

Ochranné, TVS, diódy sa zapájajú v závernom smere v sérii pred obvod, ktorý majú chrániť pred prepätím. Ak je priložené napätie V väčšie ako prierazné napätie V_{BR} spustí sa v dióde lavínový jav, stane sa priepustnou, uzemní prepäťovú špičku a tým ochráni obvod. Lavínový jav je nedeštruktívny, vratný proces. Kvôli vysokým prierazným prúdom a napätiam pri ňom dochádza k veľkej produkcii tepla, ktoré ak nie je dobre odvádzané, môže spôsobiť zničenie diódy. Cieľom tejto práce je vytvoriť simuláciu na výpočet rozloženia tepla v TVS dióde generovaného na bodovom p-n priechode.

Kľúčové slová: Ochranné diódy, Lavínový jav, Vedenie tepla, Prierazné napätie

1 Úvod

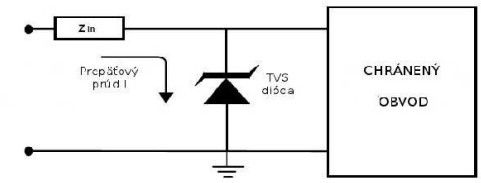
Ochranné alebo TVS (Transient Voltage Suppressor) diódy sú polovodičové súčiastky s PN priechodom navrhnuté tak, aby chránili zvyšok obvodu pred prepätím. Pracujú na princípe lavínového javu pri prieraznom napätí v závernom smere. Na prepätie reagujú oveľa rýchlejšie ako iné druhy ochrán.

Lavínový jav sa objaví rádovo po pikosekundách [SI96-01, 2000] . Vďaka tomu sú ideálnou voľbou na ochranu pred krátkymi vysokonapäťovými špičkami spôsobenými napr. bleskami, indukčnými spínačmi alebo elektrostatickými výbojmi. TVS diódy sa zapájajú v sérii pred obvodom, ktorý majú chrániť(Obr. 1).
Pri normálnych prevádzkových podmienkach v závernom smere, $V < V_{BR}$, predstavujú vysokú impedanciu a nemajú na činnosť obvodu žiaden vplyv. Ak priložené napätie prekročí hranicu prierazného napätia, $V > V_{BR}$, dióda sa zapne, spustí sa v nej lavínový jav, prepäťová špička sa uzemní a tým sa obvod ochráni.

K lavínovému javu dochádza na slabo dopovaných p-n priechodoch so širokou ochudobnenou oblasťou. Pri prieraznom napätí elektróny a diery vchádzajúce do tejto oblasti získajú obrovské zrýchlenie ako dôsledok silného elektrického poľa. Ak je kinetická energia týchto častíc dostatočná, po kolízii s inými atómami vyvolajú sekundárnu ionizáciu. Následne sú aj sekundárne ióny v ochudobnenej oblasti urýchlené. Proces sa opakuje a počet ionizovaných častíc exponenciálne narastá. Účinnosť lavínového javu je vyjadrená takzvaným multiplikačným faktorom M pomocou nasledovného empirického vzťahu [B. Van Zeghbroeck, 2011], [R. Victor Jones, 2001]:

$$M = \frac{1}{1 - \left| \frac{V}{V_{BR}} \right|^n} \qquad (1)$$

Pre 2 < n < 6, kde V je priložené záverné napätie a V_{BR} je prierazné napätie diódy.

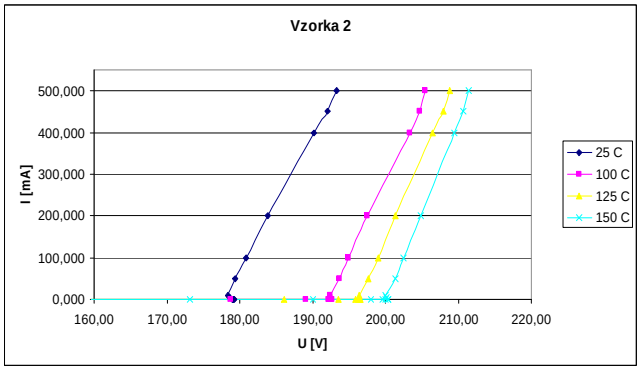


Obr.1: Zapojenie ochrannej diódy

So zvyšujúcou sa teplotou sa zväčšuje rozptyl na kryštalickej mriežke a dochádza k strate energie nosičov elektrického náboja v ochudobnenej oblasti p-n priechodu. Časť svojej kinetickej energie odovzdávajú nosiče, elektróny a diery, kryštalickej mriežke. Dôsledok je, že nosiče elektrického náboja, musia prekonávať väčší potenciálový rozdiel, alebo väčšie napätie, pri generovaní elektrón- dierového páru [S. M. Sze, 2007]. So zvyšujúcou sa teplotou sa preto zvyšuje aj V_{BR} (Obr.2), ochranné diódy teda majú kladný teplotný koeficient.

Lavínový jav je nedeštruktívny, vratný proces. Vo svojej podstate nespôsobuje trvalé zmeny v kryštalickej mriežke, ktoré by mohli poškodiť činnosť elektrického prvku. Ak hodnota priloženého záverného napätia klesne pod hodnotu V_{BR}, lavínový jav sa zastaví a súčiastka sa vráti do normálneho prevádzkového režimu. Avšak, teplo vyprodukované veľkým prierazným prúdom a napätím, ak nie je zabezpečený jeho dostatočný odvod, môže zapríčiniť zničenie diódy.

* simona.zajkoska@gmail.com
† peter.bokes@stuba.sk



Obr. 2: Experimentálne odmeraná teplotná závislosť I-V krivky jednočipovej diódy, V_{BR} sa so zvyšujúcou teplotou zväčšuje.

Cieľom tejto práce je vytvoriť simuláciu na výpočet rozloženia teploty pozdĺž diódy. Teplo je generované na bodovom p-n priechode.

2 Rovnice vedenia tepla a zavedenie prirodzených jednotiek

Prenos tepla medzi 2 telesami alebo vnútri jedného, ktorého častice sa nepohybujú sa nazýva vedenie. Jeho základným vzťahom je Fourierova rovnica vedenia tepla (2). Vyjadruje množstvo tepla, ktoré prejde za čas dt, plochou S, kolmou na smer šírenia tepla, a v dôsledku rozdielu teploty dT na dĺžke dx:

$$\frac{dQ}{dt} = -\lambda S \frac{dT}{dx} \qquad (2)$$

Kde λ je tepelná vodivosť látky. Realizácia zákona zachovania energie je pri prenose tepla vzťah (3) vyjadrujúci zmenu teploty vrstvy spôsobenú zmenou množstva prechádzajúceho tepla, ktoré ňou prechádza.

$$\frac{Q_x}{\Delta t} - \frac{Q_{x+\Delta x}}{\Delta t} = m.c_P.\frac{\Delta T}{\Delta t} \qquad (3)$$

Pričom m je hmotnosť vrstvy a cp jej merná tepelná kapacita. Q_x je teplo prechádzajúce plochou v mieste x a $Q_{x+\Delta x}$ teplo prechádzajúce plochou v mieste $x+\Delta x$. Ak do nej zahrnieme aj generáciu tepla vo vrstve, vzťah 3 prejde na tvar:

$$\dot{Q}_x + \dot{g}S\Delta x - \dot{Q}_{x+\Delta x} = \rho S \Delta x c_p \frac{\Delta T}{\Delta t} \qquad (4)$$

Kde ρ je hustota látky a $\dot{q}$ je teplo generované jednotkou objemu p-n priechodu. Jeho okamžitá veľkosť je rovná súčinu napätia a prúdu na p-n priechode.

$$q(t) = I(t)U(I(t)) \qquad (5)$$

Tvar volt-ampérovej charakteristiky je daný nasledovným vzťahom [R. H. Haitz, 1969].

$$U = U_{BR0} + \alpha \Delta T U_{BR0} + R(T)I(t) \qquad (6)$$

Kde U_{BR0} je jej prierazné napätie diódy pri 25°C, α-kladný teplotný koeficient, $R(T)$ je teplotne závislý odpor polovodiča a ΔT je rozdiel teplôt na p-n priechode.

Po dosadení Fourierovho vzťahu (2) do rovnice 4 a jej nasledovnej úprave, dostaneme výslednú rovnicu vedenia tepla v smere x, kolmom na p-n priechod (7).

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial^2 x} + \dot{g} \qquad (7)$$

Na rozhraní dvoch prvkov sa zachováva hustota tepelného [Shabany, 2010]:

$$-\lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x}|_{x+} = -\lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x}|_{x-} \qquad (8)$$

V našom modeli je dióda zostavená z vrstiev kremíka, spájky a medi s PN priechodom v kremíku. Vzhľadom k zloženiu spájky (92.5% Pb, 5% Sn, 2.5% Ag), je nahradená len olovom.

Na zjednodušenie výpočtu použijeme tzv. prirodzené jednotky. Prenásobením prirodzených jednotiek vhodnou konštantou z SI sústavy dostaneme opäť jednotky SI sústavy. Zavedením prirodzených jednotiek do rovnice 7 pre prípad kremíka dostaneme:

$$\lambda_{Si}\frac{T_1}{(L_{SiR})^2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + q_{max}\dot{q} = C_{Si}\rho_{Si}\frac{T_1}{\tau_{Si}}\frac{\partial u}{\partial \tau} \qquad (9)$$

V rovnici 9 sme použili substitúciu pre teplotu $T = T1\ u$ a pre polohu $X = L_{SiR}x$, kde L_{SiR} je dĺžka pravej časti kremíka, meraná od PN priechodu. Veličiny u a x sú bezrozmerné a konštanty L_{SiR}, T_1 sú udávané v jednotkách SI sústavy .Rovnicu 7 vydelíme $qmax$, výraz $(\lambda_{Si}T_1)/((L_{SiR})^2 q_{max})$ položíme rovný 1, konštanta T_1 sa bude rovnať $((L_{SiR})^2 q_{max})/\lambda_{Si}$. Konštantu τ_1 určíme keď výraz (6) položíme rovný 1.

$$\frac{\rho_{Si} c_{Si} T_1}{q_{\max}\tau_1} = 1 \qquad (10)$$

Rovnica vedenia tepla pre kremík v prirodzených jednotkách má tvar:

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dot{q} \qquad (11)$$

Pre olovo rovnica 7 s použitím substitúcii pre X a T prejde na tvar:

$$c_{Pb}\rho_{Pb}\frac{T_1}{\tau_1} = \lambda_{Pb}\frac{T_1}{(L_{SiR})^2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \qquad (12)$$

Dosadením výrazov za T_1 a τ_1 dostaneme vzťah vedenia tepla pre olovo v prirodzených jednotkách:

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = \frac{\lambda_{Pb}}{\rho_{Pb}c_{Pb}}\frac{\rho_{Si}c_{Si}}{\lambda_{Si}}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \qquad (13)$$

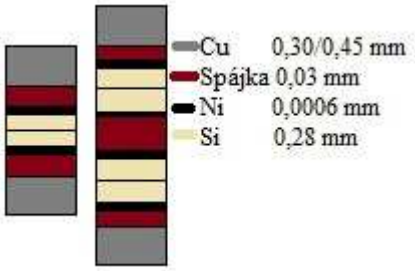
Materiálové konštanty spolu označíme ako premennú KPb(14).

$$KPb = \frac{\lambda_{Pb}}{\rho_{Pb} c_{Pb}} \frac{\rho_{Si} c_{Si}}{\lambda_{Si}} \quad (14)$$

Pre odvodenie rovnice vedenia tepla pre meď postupujeme podobne ako v prípade olova.

3 Štruktúra TVS diódy a jej model

Cieľom tejto práce je zostrojiť simuláciu na výpočet teploty jedno- a dvoj čipovej ochrannej diódy. Dvoj čipová dióda sa od jedno čipovej líši tým, že má 2 p-n priechody, ktoré sa nachádzajú v strede kremíkového čipu (Obr. 3).



Obr. 3: Štruktúra TVS jedno čipovej (v ľavo) a dvoj čipovej diódy.

V našom modeli diódy, ktorý sme použili pri výpočte, boli použité nasledovné zjednodušenia:

- vzhľadom k zloženiu spájky (92.5% Pb, 5% Sn, 2.5% Ag), bola nahradená len olovom
- nikel, kvôli jeho zanedbateľnej šírke, mal na výpočet minimálny vplyv, preto sme ho do modelu nezahrnuli
- šírka p-n priechodu je v porovnaní so šírkou Si čipu zanedbateľná. O p-n priechode preto uvažujeme ako plošnom a nie objemovom elemente.

Model diódy je teda tvorený meďou, olovom a kremíkovým čipom s plošným p-n priechodom. Teplotu počítame pozdĺž diódy len v jednom smere, pričom teplo je generované plošným zdrojom na p-n priechode.

4 Riešenie pomocou explicitnej metódy

Vzťah 11, výsledná rovnica pre vedenie tepla v kremíku v prirodzených jednotkách, je parabolická diferenciálna rovnica druhého rádu. Numericky ju môžeme riešiť pomocou explicitnej metódy konečných diferencií [Smith, 1975]. Majme funkciu *u*, ktorá je funkcia len premennej *x*. Vzchádzajúc z Taylorovho rozvoja si môžeme druhú deriváciu *u*, podľa *x* vyjadriť ako:

$$\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right) \approx \frac{1}{(\Delta x)^2}\{u(x+\Delta x) - 2u(x) + u(x-\Delta x)\} \quad (15)$$

Teraz predpokladajme, že *u* je funkciou dvoch nezávislých premenných *x* a τ. Priestor, na ktorom chceme funkciu *u* riešiť si rozdeľme na pravidelnú obdĺžnikovú sieť so stranami Δx a Δt. Ľubovoľné súradnice bodu *P(x,t)* budú dané ako $x=i\Delta x$, $\tau=j\Delta t$, kde *i*, *j* sú ľubovoľné celé čísla. Vychádzajúc zo vzťahu 15, hodnotu funkcie *u* v bode *P*, $u_P=u(i\Delta x,j\Delta t)=u_{i,j}$, vypočítame nasledovne:

$$\left(\frac{\delta^2 u}{\delta x^2}\right)_{i,j} \cong \frac{u\{(i+1)\Delta x, j\Delta t\} - 2u\{i\Delta x, j\Delta t\} + u\{(i-1)\Delta x, j\Delta t\}}{(\Delta x)^2} \quad (16)$$

Zjednodušene zapísané ako:

$$\left(\frac{\delta^2 u}{\delta x^2}\right)_{i,j} \approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} \quad (17)$$

Aplikáciou rovnice (17) na vzťah (11) dostaneme:

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + q(0,j) \quad (18)$$

Jeho úpravou odvodíme výsledný explicitný vzťah pre výpočet teploty v kremíku, v priestorovom bode *x* v časovom okamihu $\tau=(j+1)\Delta t$ pomocou 3 bodov z predchádzajúceho časového kroku $\tau=j\Delta t$:

$$u_{i,j+1} = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}\left(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}\right) + \Delta t q(0,j) + u_{i,j} \quad (19)$$

Keďže ku generácii tepla v dióde dochádza len v kremíku, vzťah 19 bude mať pre oblasť olova a medi tvar:

$$u_{i,j+1} = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\left(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}\right) + u_{i,j} \quad (20)$$

V oboch prípadoch, (19) a (20), podiel $\Delta t/\Delta x^2$ označuje konštantu stability systému (21) a musí spĺňať podmienku

$$\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} < 0.5 \quad (21)$$

4.1 Okrajové podmienky

Rovnice (19) a (20) sme riešili pri 2 druhoch okrajových podmienok a síce, pri konštantnej teplote a pri zmiešanej okrajovej podmienke.

Pri prvom type okrajovej podmienky je teplota na okrajoch diódy v každom časovom okamihu fixovaná ako konštantná, rovnajúca sa teplote prostredia *uRT*.

$$T(L_{CuL}, \tau) = uRT$$

$$T(L_{CuR}, \tau) = uRT \quad (22)$$

Pri druhom type okrajovej podmienky, tzv. zmiešanej okrajovej podmienke, dochádza

na okrajoch diódy k odvodu tepla prostredím, vzduchom.

$$-\lambda_{Cu}\left.\frac{\delta T}{\delta x}\right|_{(L_{CuL},t)} = h\left[URT - T\left(L_{CuL},t\right)\right]$$

$$-\lambda_{Cu}\left.\frac{\delta T}{\delta x}\right|_{(L_{CuR},t)} = h\left[T\left(L_{CuR},t\right) - URT\right]$$

Kde *h* je koeficient prúdenia tepla pre vzduch je rovný *1.0 W/(m²°C)*.Po úprave a v prirodzených jednotkách budú mať teploty rozhraní meď- vzduch nasledovný tvar:

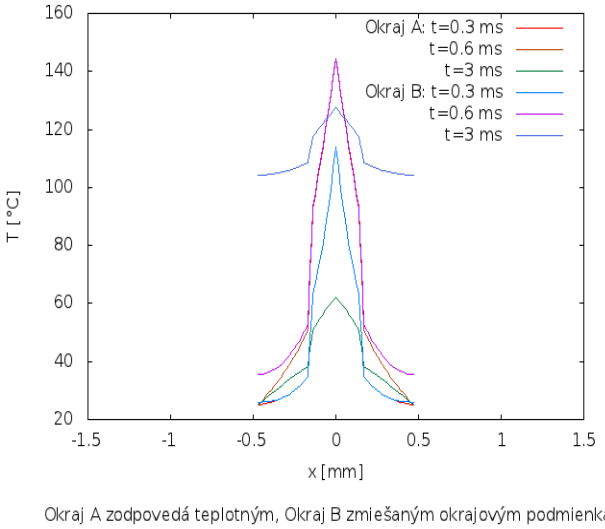
$$uCuL\ [0] = \frac{uRT + \left(\lambda_{Cu}/(\Delta x_{Cu} h)\right) uCuL\ [1]}{1.0 + \left(\lambda_{Cu}/(\Delta x_{Cu} h)\right)}$$

$$uCuR[NCu-1] = \frac{uRT + \left(\lambda_{Cu}/(\Delta x_{Cu} h)\right) uCuR[NCu-2]}{1.0 + \left(\lambda_{Cu}/(\Delta x_{Cu} h)\right)}$$

(24)

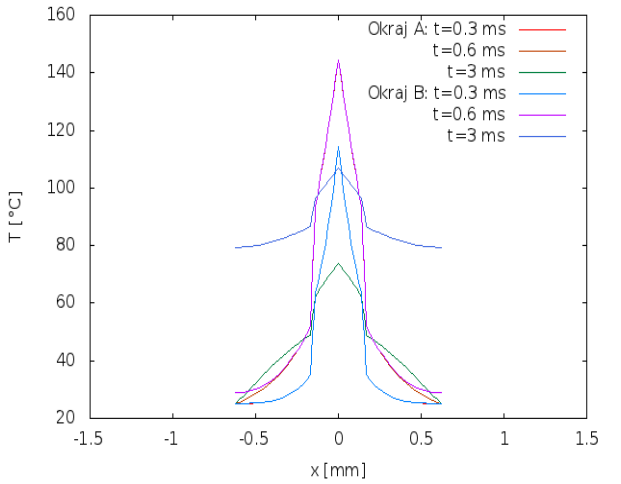
Pričom *uCuL[0]* je teplota ľavého rozhrania, *uCuR[NCu-1]* je teplota pravého rozhrania a podiel $(\lambda_{Cu}/(\Delta x_{Cu}°C))$ bol vo funkcii *boundcon* označený ako *InterC*.

Firma SEMIKRON vyrába TVS diódy v dvoch variantoch hrúbky medeného prívodu a síce 0,30 a 0,45 mm. Vplyv okrajových podmienok na výpočet sme skúmali tak, že pre oba prípady hrúbky Cu prívodu sme počítali priebeh teploty pozdĺž jednočipovej diódy v rôznych časových okamihoch a pre oba typy okrajových podmienok (Obr.4), (Obr.5).



Okraj A zodpovedá teplotným, Okraj B zmiešaným okrajovým podmienkar

Obr.4: Priebeh teploty pre jednočipovú diódu v rôznych časových okamihoch pre oba typy okrajových podmienok a 0,30 mm hrúbku Cu prívodu.



Okraj A zodpovedá teplotným, Okraj B zmiešaným okrajovým podmienkar

Obr.5: Priebeh teploty pre jednočipovú diódu v rôznych časových okamihoch pre oba typy okrajových podmienok a 0,45 mm hrúbku Cu prívodu

Z obrázkov 4 a 5 vyplýva, že s narastajúcim časom v oblasti lineárneho nárastu prúdového impulzu, sa rozdiel vypočítaných teplotných priebehov pri konštantnej teplotnej a pri zmiešanej okrajovej podmienke zväčšuje. Pri zväčšení hrúbky medeného prívodu z 0,30 mm na 0,45 mm, (Obr.5) sa rozdiel medzi výpočtami zmenšil, aj naďalej je však veľmi výrazný. Pri ďalšom výpočte boli preto použité zmiešané okrajové podmienky

5 Implemetácia metodiky a štruktúra programu

Šírenie tepla v dióde je funkciou priestoru a času. Základnými vstupnými konštantami do programu sú šírky jednotlivých elementov diódy zadaných v jednotkách SI (napr. L_{SiR},L_{PbR}) a počet priestorových diskretizácii týchto elementov(napr. *NSi*,*NPb*). Poloha (vzdialenosť) je v programe vyjadrená v násobkoch L_{SiR}- šírka pravej časti kremíka. Začiatok súradnicovej sústavy sme zvolili na ľavom p-n priechode, ktorý sme aproximovali bodovým zdrojom tepla. Šírku jednotlivých elementov diódy, ako napr. L_{PbR}; L_{PbL}, udávame od začiatku súradnicovej sústavy po koncový bod elementu. Momentálne sme zvolili symetrický systém, teda šírka jednotlivých elementov diódy napravo a naľavo od PN priechodu (L_{PbR}; L_{PbL}) je rovnaká, rovnako ako aj veľkosť priestorovej diskretizácie. Veľkosť priestorovej diskretizácie v olove potom vypočítame ako :

$$\Delta x_{Pb} = \frac{\left(L_{PbR} - L_{SiR}\right)/L_{SiR}}{NPb - 1} \qquad (25)$$

Kde *NPb* je počet priestorových diskretizácii v spájke. Polohu v prirodzených jednotkách určíme ako $x = i\Delta x_{Pb}$ kde $i \in \langle 0; NPb-1 \rangle$. Obdobne

postupujeme aj pri určovaní počtu delení všetkých ostatných prvkov diódy.

Rovnica vedenia tepla v spájke a medi má v prirodzených jednotkách tvar:

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = K \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \qquad (26)$$

Kde konštantu K_{Pb} vypočítame podľa vzťahu (14), obdobne aj K_{Cu}. V programe sa teplota v týchto častiach počíta podľa vzťahu 20. V kremíku má rovnica vedenia tepla podobu vzťahu 11. Výpočet teploty v Si prebieha v programe podľa vzťahu 19.

Na rozhraniach medzi jednotlivými časťami diódy musí platiť spojitosť hustoty tepelného toku (8). V prípade rozhrania Si- Pb rovnica (8) v prirodzených jednotkách prejde na tvar:

$$\lambda_{Si} \frac{u_{roz} - u_{Si}[NSi-2]}{\Delta x_{Si}} = \lambda_{Pb} \frac{u_{Pb}[1] - u_{roz}}{\Delta x_{Pb}} \qquad (27)$$

Označnie $u_{Si}[NSi-2]$ zodpovedá teplote v mieste $x=(NSi-2).\Delta x_{Si}$, podobne $u_{Pb}[1]$ pre $x=1\Delta x_{Pb}$. Zavedieme si novú premennú *InterCPbSi* .

$$InterCPbSi = \frac{\lambda_{Si}}{\lambda_{Pb}} \frac{\Delta x_{Pb}}{\Delta x_{Si}} \qquad (28)$$

Dosadením vzťahu 28 do rovnice 27 dostaneme výsledný výraz pre výpočet teploty na rozhrani Si-Pb:

$$u_{roz} = \frac{InterCPbSi(u_{Si}[NSi-2]) + u_{Pb}[1]}{InterCPbSi + 1} \qquad (29)$$

Podobne postupujeme pri odvodení vzťahov na výpočet teploty na všetkých rozhraniach okrem p-n priechodv.

Ako už bolo spomínané, na každom p-n priechode sa v dôsledku Joulových strát generuje teplo, preto vzťah na spojitosť hustoty tepelného toku má na priechode tvar:

$$-\frac{\partial u}{\partial x}|_{PN+} = -\frac{\partial u}{\partial x}|_{PN-} + \dot{q} \qquad (30)$$

6 Konvergencia

Priebeh teploty pozdĺž diódy počítame explicitnou metódou konečných diferencií (19), (20). Aby bol systém výpočtu stabilný, konštanty stability (21) musia byť menše ako 0,5. Pre priestorový krok v kremíku v prirodzených jednotkách platí vzťah $\Delta x_{Si}=1,0/(NSi-1)$. Veľkosť časového kroku vypočítame z podmienky stability ako $\Delta t=a(\Delta x)^2$, pre $0< a <0.5$. Časový krok Δt má v každom prvku diódy inú veľkosť. Ako časový krok systému sa vyberá vždy najmenší z vypočítaných Δt.

Napätie na TVS dióde je funkciou času a teploty, má tvar podľa vzťahu 6. Kde U_{BR} je jej prierazné napätie, α- kladný teplotný koeficient a $R(T)$ je teplotne závislý odpor polovodiča. Odpor diódy so zvyšujúcou sa teplotou lineárne klesá:

$$R = (R_0 + R_0 \beta \Delta T) \qquad (31)$$

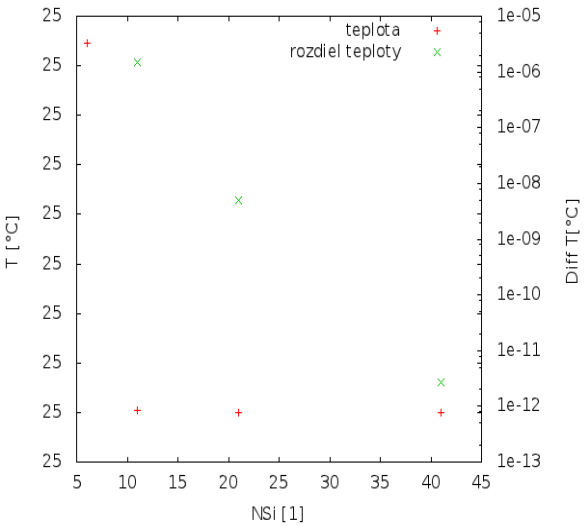
Pričom R_0 je odpor diódy pri 25°C a β je záporný teplotný koeficient. Na základe rozptylu experimentálnych meraní sme si stanovili požadovanú presnosť hodnoty napätia ako $\pm 0{,}1V$. Dosadením vzťahu 31 do rovnice 6 následným upravením sme dostali presnosť určenia teploty.

$$\Delta T = \frac{0{,}1V}{\alpha T_1 U_{BR}} \qquad (32)$$

na ktorú sme dokonvergovali jej numericky výpočet.

Keďže teplota je funkciou priestoru a času, bolo treba postupne dokonvergovať veľkosť priestorového a následne aj časového kroku. Rozmery priestorovo- časovej mriežky sme konvergovali v kremíkovej časti jedno čipovej diódy. Pri vhodne zvolenej, konštantnej, veľkosti časového kroku bola pomocou narastajúceho počtu priestorových diskretizácií *NSi* menená veľkosť priestorového kroku Δx_{Si}.

Výpočet teploty prebiehal vždy v rovnakom časovom okamihu a v rovnakej vzdialenosti od p-n priechodu. Už pri *NSi=11* bolo dosiahnutá presnosť teploty o dva rády vyššia ako bolo požadované zo vzťahu 33 (Obr.6) . Rozdiel teplôt, *Diff T*, bol počítaný ako rozdiel dvoch za sebou idúcich teplôt pri dvojnásobnom zmenšení priestorového kroku.

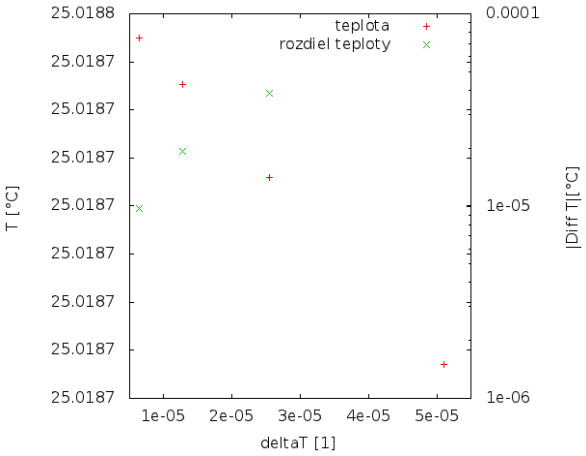


Obr.6: Priebeh teploty a rozdiel teplôt ako funkcia počtu priestorových delení

Pre ďalší výpočet sme zvolili *NSi=10*. Počet delení v spájke a medi bol potom zvolený úmerne k ich šírke a *NSi*.

Konvergencia teploty podľa veľkosti časového kroku prebieha pri *NSi=10* v rovnakom časovom okamihu τ a pri konštantnej vzdialenosti od p-n priechodu. Meníme len veľkosť koeficientu *a* a tým aj veľkosť časového kroku *deltaT*. Už pri *a=0,494*

sme dostali o rád vyššiu presnosť ako bola vyžadovaná podľa vzťahu 32. Závislosť rozdielu teplôt od veľkosti časového kroku má klesajúcu tendenciu (Obr.7), pričom rozdiel teplôt je udávaný ako dvoch za sebou nasledujúcich teplôt pri polovičnom zmenšení časového kroku.

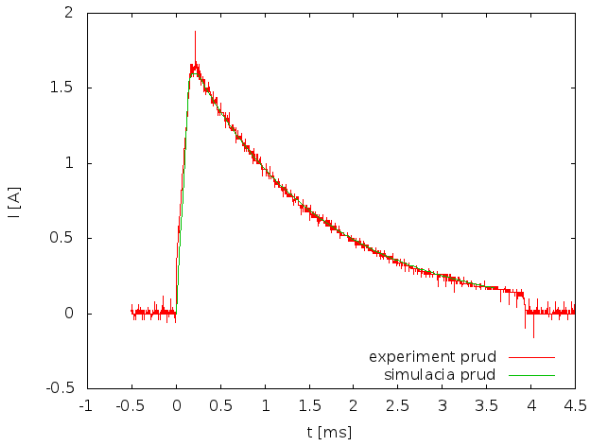


Obr.7: Priebeh teploty a rozdiel teplôt ako funkcia veľkosti časového kroku

Pre ďalší výpočet boli použité hodnoty *NSi=10* a *a=0,494*.

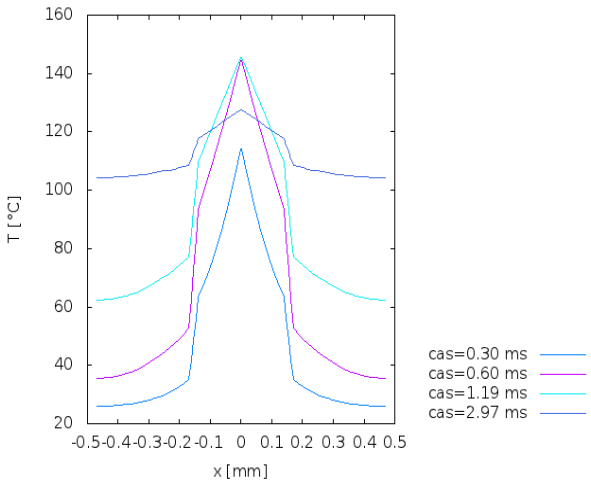
7 Porovnanie výsledkov získaných zo simulácie a experimentu

Tvar prúdového pulzu ako aj veľkosti konštánt U_{BR}, R_0, α, β využitých v simulácii sme získali z experimentu, ktorý sme realizovali v testovacích laboratóriách firmy SEMIKRON vo Vrbovom. Z odmeraných volt- ampérových charakteristík jedno a dvoj čipových diód pri rôznych teplotách sme pomocou lineárnych interpolácii získali teplotne závislé hodnoty pre U_{BR} a R ako aj ich teplotné koeficienty α a β [Zajkoska, 2013]. Tvar prúdového pulzu získaného z merania sme nahradili v programe lineárnou a exponenciálnou funkciu(Obr.8).



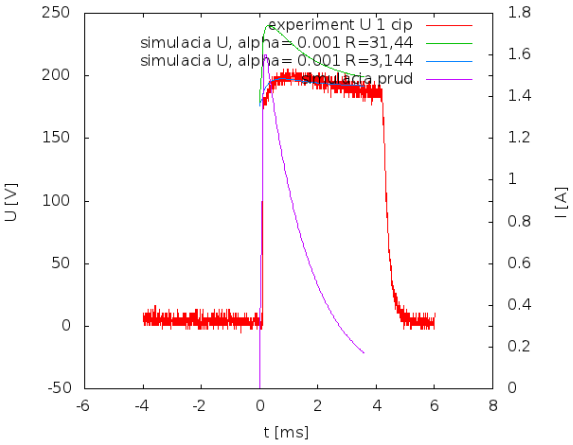
Obr.8: Porovnanie prúdového pulzu zo simulácie a z experimentu

Pomocou konštánt získaných z experimentu sme počítali priebeh teploty pozdĺž jedno čipovej diódy v rôznych časoch(Obr.9).



Obr.9: Priebehy teplôt v jedno čipovej dióde v rôznych časoch.

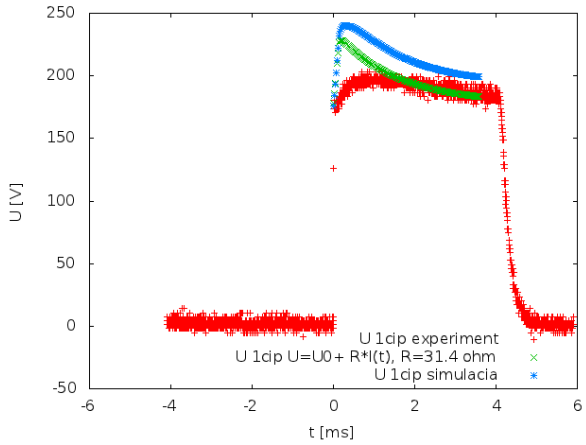
Za účelom overenia presnosti simulácie, sme porovnali vypočítané priebehy napätia s experimentálne nameranými (Obr.10).



Obr.10: Porovnanie experimentálne nameraného napätia jedno čipovej diódy s so simuláciou pre R= 31,4 a 3,144 Ω.

Napäťové odozvy TVS diód boli merané pri záťažových prúdových pulzoch pomocou Calvinovej 4 bodovej metódy. Priebeh napätia bol zaznamenávaný na osciloskope *LeCroy64Xi*.

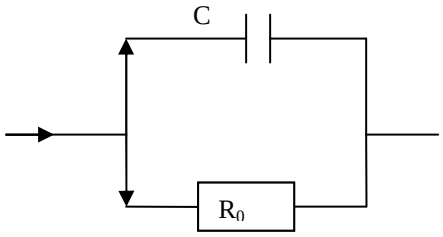
Aby sme vylúčili chybu v simulácii, okrem porovnania s nameranými údajmi sme ju porovnali aj s teplotne nezávislým napätím, získaným zo vzťahu:*U=U0+RI(t)*, kde aj odpor *R* bol konštantný, rovný 31.4 Ω. (Obr. 11).



Obr. 11: Porovnanie napätí na jedno čipovej dióde získaných zo simulácie, experimentu a teplotne nezávislého napätia.

7.1 Vplyv kapacity diódy

Rozdiely zistené porovnaním napätia získaného zo simulácie a z merania, Obr. 9 a Obr. 10, evokovali, že môžu byť spôsobené aj kapacitným nabíjaním diódy. Veľkosť kapacity meraných diód sme nemali k dispozícii, preto sme vychádzali z predpokladu, že ak sa dióda kapacitne nabíja, má nasledovnú náhradnú schému (Obr. 12).



Obr. 12: Náhradná schéma zapojenia kapacitne nabíjajúcej sa diódy

Kde C je kapacita diódy a R_0 je jej teplotne nezávislý odpor. Z obrázka 12 sme odčítali približnú veľkosť časovej konštanty RC obvodu ako $\tau \approx 1ms$. Približnú veľkosť kapacity diódy sme vypočítali ako

$$C = \frac{\tau}{R_0} \approx \frac{10^{-6}\,s}{31{,}44\Omega} = 31{,}8\mu F \qquad (33)$$

Meranie napäťových odoziev bolo uskutočnené na diódach od firmy SEMIKRON, typu TGL41-180A a TGL41-350A. Tie by mali mať približne rovnaké vlastnosti ako TVS diódy zo série P4KE od firmy Littelfuse [Littelfuse]. V katalógu TVS diód od firmy Littelfuse je uvedené, že séria P4KE má pri frekvencii $f=1MHz$ a pri prieraznom napätí $U_{BR} \approx 100\text{-}200V$ kapacitu $C \approx 10\text{-}20\ pF$. Nami vypočítaná veľkosť kapacity diódy od firmy SEMIKRON by bola $C=31{,}8\ \mu F$. Z toho usudzujeme, že rozdiel medzi napätiami získanými zo simulácie a z experimentu nie je spôsobený kapacitným nabíjaním diódy.

7.2 Vplyv koeficientu tepelnej vodivosti

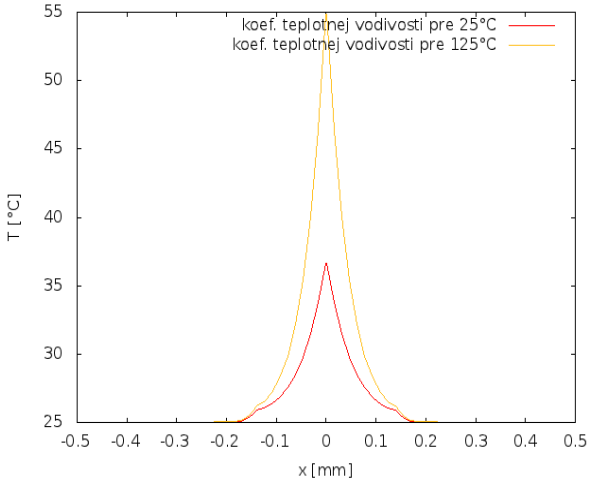
Koeficient, súčiniteľ, tepelnej vodivosti λ vyjadruje množstvo tepla, ktoré musí za jednotku času prejsť telesom aby bol na jednotku dĺžky jednotkový teplotný spád. Vo všeobecnosti koeficient tepelnej vodivosti nie je konštanta. Vo väčšine kovov je to napr. s narastajúcou teplotou mierne klesajúca funkcia. Ak však rozdiel teplôt nie je veľký, zmena λ sa pri kovoch zanedbáva. Kryštalické tuhé látky ako diamant a polovodiče, napr. kremík sú dobrými tepelnými a zlými elektrickými vodičmi. Toto je jeden z dôvodov, prečo je kremík vhodný napr. na výrobu integrovaných obvodov. V tabuľke 1 je uvedený prehľad teplotných vodivostí λ pre všetky prvky diódy pri izbovej teplote a pri 125°C[Lide, 2004].

T [°C]	**λ_{Si}** [W/m/°C]	**λ_{Pb}** [W/m/°C]	**λ_{Cu}** [W/m/°C]
25	148	35,3	40,1
125	76,2	32,8	38,6

Tab. 1: Koeficienty tepelnej vodivosti pre všetky prvky diódy pre 25 °C a 125 °C.

Výsledný priebeh teploty v dióde závisí aj od koeficientu tepelnej vodivosti (9), (12). Vplyv λ na výpočet teploty pozdĺž diódy je vidno na obrázku 12, kde je porovnanie teploty počítanej pomocou λ pri 25 °C a v tom istom časovom okamihu aj pomocou λ pre 125 °C, (Obr.13).

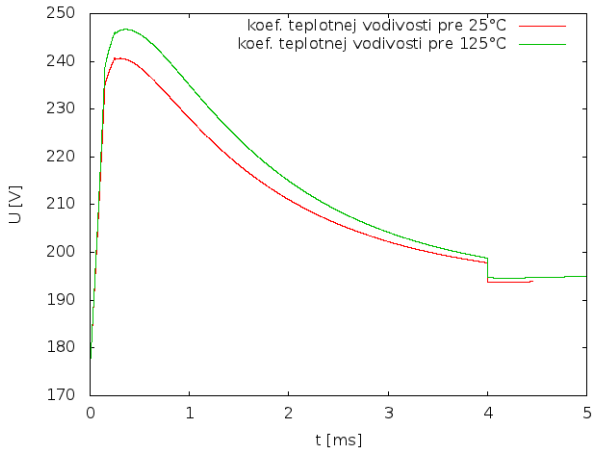
Volt-ampérová krivka je teplotne závislá funkcia (6). Overili sme vplyv veľkosti koeficientu tepelnej vodivosti λ na veľkosť napätia na p-n priechode (Obr. 14)



Obr. 13: Priebeh teploty v jednočipovej dióde počítanej pomocou λ pre 25 °C a λ 125 °C.

Z obrázka 13 vyplýva, že pre správny výpočet teploty pozdĺž diódy treba brať do úvahy teplotnú závislosť koeficientu λ. Podľa obrázka 14, kde rozdiel v napäťových píkoch na p-n priechode je cca. 2,5 %, sme usúdili, že rozdiel medzi napätím

získaným zo simulácie a z experimentu (Obr. 11), nie je spôsobený tým, že sme v simulácii použili konštantnú veľkosť koeficientu λ.



Obr. 14: Napätie na p-n priechode počítané pri λ pre 25 °C a λ 125 °C.

8 Záver

V práci sme popísali návrh a implementáciu programu na výpočet priebehu teploty pozdĺž jedno a dvoj čipovej diódy pomocou explicitnej metódy pri 2 druhoch okrajových podmienok. Ako je vidno z obrázkov 10 a 11, simuláciou vypočítané hodnoty napätia sa nezhodujú s experimentálne odmeranými priebehmi. Z obrázku 8 vyplýva, že záťažový prúdový pulz bol v simulácii modelovaný správne. Kvôli vylúčeniu chyby v simulácii sme experimentálne a simuláciou vypočítané hodnoty napätia porovnali s teplotne nezávislým napätím (Obr. 11). Pri zmenšení oporu diódy sa simulácia (modrá krivka) priblížila k teplotne nezávislému napätiu (zelená krivka). Z toho usudzujeme, že rozdiel medzi vypočítanými a nameranými dátami je dominantne spôsobený nesprávnym modelom I-V charakteristiky v lavínovom režime pri vyšších prúdových hustotách.

Namerané volt-ampérové charakteristiky diódy pri rôznych teplotách naznačujú, že odpor diódy je nielen teplotne závislá funkcia, ale aj pri veľkých prúdových hustotách klesajúca funkcia (Obr.2). Kvôli výkonovému obmedzeniu zdroja napätia sa nám žiaľ, toto tvrdenie nepodarilo overiť.

Na presný výpočet teploty pozdĺž diódy treba bližšie špecifikovať tvar volt-ampérovej krivky diódy pri veľkých prúdových hustotách a tiež treba brať do úvahy koeficient tepelnej vodivosti ako funkciu teploty.

Poďakovanie

Ďakujem Ing. Jánovi Halajovi a firme SEMIKRON za pomoc pri realizovaní experimentálnych meraní a vedúcemu práce za pomoc a trpezlivosť pri jej vypracovaní.

Literatúra

[SI96-01, 2000] What are TVS Diodes? (2000) Ku dňu 10.4. 2013 dostupné na: http://www.semtech.com/images/promo/What_are_TVS_Diodes.pdf

[Van Zeghbroeck, 2011] Van Zeghbroeck, B. Principles of Semiconductor Devices (2011), Ku dňu 10.4. 2013 dostupné na: http://ecee.colorado.edu/~bart/book/book/contents.htm

[Victor Jones, 2001] Victor Jones, R., Electronic Devices and Circuits- Zener and Avalanche Breakdown/ Diodes (2001). Ku dňu 10.4. 2013 dostupné na: http://people.seas.harvard.edu/~jones/es154/lectures/lecture_2/breakdown/breakdown.html

[Sze, 2007] Sze, S. M. Principles of Semiconductor Devices (Wiley 2007)ISBN-I 3: 978-0-47 **1-1** 4323-9

[Haitz, 1969] Haitz, R. H. A Method for Heat Flow Resistance Measurements (1969) *IEEE Transactions on Electron Devices*,*3:* 438-444

[Shabany, 2010] Shabany, Y. Heat Transfer-Thermal Managment of Electronics (CRC Press 2010) ISBN: 978-1-4398-1467-3

[Smith, 1975] Smith, G. D. Numerical Solution of Partial Differential Equations (Oxford University Press, 1975) ISBN: 0-19-859611-1

[Zajkoska, 2013] Zajkoska, S. Šírenie tepla v ochranných diódach s p-n priechodom (FEI STU 2013) diplomová práca v príprave

[Littelfuse] Littelfuse TVS Diode Catalog, p. 71. Ku dňu 5.5. 2013 dostupné na: http://www.littelfuse.com/data/en/Product_Catalogs/Littelfuse_TVS_Diode_Catalog.pdf

[Lide, 2004] Lide, D. R. Handbook of chemistry and physics (CRC Press, 2004)

Korekcie na efekty ovplyvňujúce koincidenčné merania ^{22}Na v aerosóloch atmosféry Bratislavy

Jakub Zeman [1]
Školiteľ: Ivan Sýkora [2]
FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava
Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, FMFI UK, Mlynská Dolina, 842 48 Bratislava

Abstrakt

V tejto práci sa zameriavame na meranie aktivity aerosólov, ktoré sú pravidelne, každý týždeň, odberané pri Katedre jadrovej fyziky a biofyziky na aerosolové filtre. Sústredíme sa na kozmogénny rádionuklid ^{22}Na. Počas leta 2012 boli prevedené koincidenčné merania niekoľkých mesačných vzoriek s cieľom vyhodnotiť koncentrácie stanovené touto metódou a porovnať ich s jednodetektorovými meraniami. Práca sa zaoberá koincidečnými meraniami a vyhodnocovaním jednotlivých korekcií spojených so spracovaním dát z týchto meraní. Boli ohodnotené korekcie na časové rozdelenie signálov detektorov a sumačný efekt pre píkovú detekčnú účinnosť kryštálu NaJ(Tl).

Kľúčové slová: kozmogénny rádionuklid ^{22}Na, koincidenčné zapojenie detektorov, časové rozdelenie signálov, píková detekčná účinnosť.

1 Úvod

Kozmické žiarenie, ktoré rovnomerne dopadá na zemskú atmosféru je príčinou tvorby kozmogénnych rádionuklidov. Spravidla sa delí na dve skupiny. Primárne kozmické žiarenie je to, ktoré vstupuje do vrchnej časti atmosféry, pochádza z nášho Slnka a medzihviezdneho priestoru [Gais, 2002]. Pri interakcii primárneho kozmického žiarenia s atómami a molekulami plynov tvoriacich atmosféru dochádza k tvorbe sekundárneho kozmického kozmického žiarenia. Kozmogénne rádionuklidy sú v atmosfére produkované hlavne v jadrových reakciách medzi protónmi a sekundárnymi neutrónmi kozmického žiarenia s jadrami atmosférických plynov, pričom sa v zásade jedná o jadrá dusíka, kyslíka a argónu. Tieto reakcie prebiehajú v rôznych vrstvách atmosféry, avšak najviac izotopov je produkovaných v hornej stratosfére, odkiaľ sú tieto rádionuklidy transportované rôznymi mechanizmami do troposféry. Z tohto hľadiska zohráva významnú úlohu monitoring koncentrácií týchto izotopov v prízemnej vrstve atmosféry, čím sa sledujú sezónne variácie, prípadne korelácie s faktormi ako je množstvo zrážok, teplota a pod.[Jas,2005]. My venujeme pozornosť izotopu ^{22}Na.

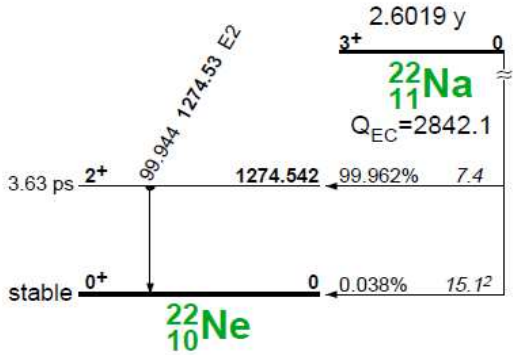
2 Kozmogénny rádionuklid ^{22}Na

Tento rádionuklid nachádzajúci sa v atmosfére má dvojaký pôvod. Na jednej strane kozmogénny, ktorému sa venujeme, ale aj antropogénny, ako pozostatok testov nukleárnych zbraní. Z vyhodnotenia našich predošlých meraní [Zem, 2012] vidíme, že hodnoty objemovej aktivity ^{22}Na sú dnes na takej úrovni, že vo vzorkách dominuje kozmogénne ^{22}Na, nie pozostatkové z jadrových výbuchov [Bhan., 1965].

Izotop ^{22}Na je vytváraný vo vrchných vrstvách atmosféry v interakciách jadier argónu s vysokoenergetickými neutrónmi sekundárneho kozmického žiarenia:

$$n + Ar \longrightarrow {}^{22}Na + x$$

Následne je rôznymi mechanizmami transportovaný do nižších vrstiev atmosféry. ^{22}Na sa rozpadá na ^{22}Ne dvoma spôsobmi. V ~10% elektrónovým záchytom a v ~90% β+ premenou. Schéma premeny je na obr. 1 [Firestone,1996]:



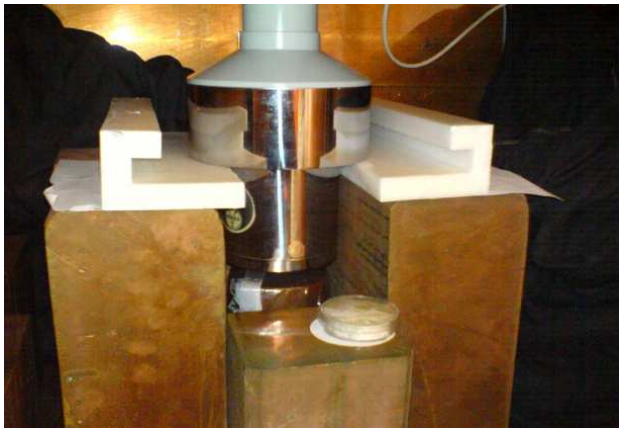
Obr. 1: Rozpadová schéma ^{22}Na

Po β+ premene sa pri anihilácii pozitrónu emitujú dve gama kvantá s energiami 511 keV. Práve registrácia jedného z týchto anihilačných kvánt spolu s registráciou deexcitačného gama kvanta s energiou 1274,5 keV sa využíva pri koincidenčnom meraní.

[1] jakupko.zeman@gmail.com
[2] ivan.sykora@fmph.uniba.sk

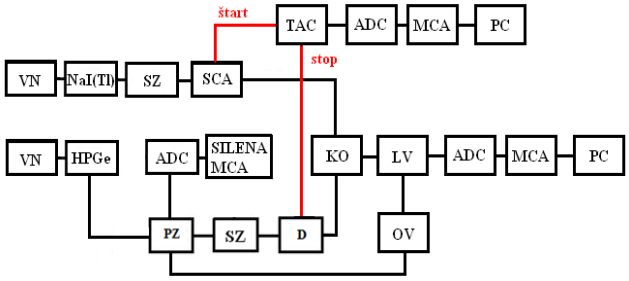
3 Koincidenčné merania aktivity aerosólových vzoriek

Počas leta 2012 boli prevedené koincidenčné merania v nízkopozaďovom tieniacom kryte. Pre stanovenie nízkej aktivity ^{22}Na našich aerosólových vzoriek sme použili koincidenčné zapojenie scintilačného kryštála NaJ(Tl) a polovodičového detektora HPGe. Geometria merania je zachytená na obr. 2:



Obr. 2: Zapojenie detektorov v koincidencii

Zospodu bol umiestnený polovodičový HPGe detektor, zhora vo vzdialenosti 2cm nad ním bol umiestnený scintilačný kryštál NaJ(Tl) rozmerov 100x100 mm (výška x priemer). Na obrázku je aj zachytená geometria meranej vzorky (nízky biely valec). Počas týždňa sa presáva vzduch cez kruhové nitrocelulózové filtre, na ktorých sa zachytávajú aerosóly, na ktorých je naviazaný, spolu s inými rádionuklidmi a kovmi, nami sledovaný ^{22}Na. Vzorky sa vyhodnocujú buď týždenne (vyššie koncentrácie, napr. ^{137}Cs, ^{7}Be), alebo sa spája 4 – 5 týždňových vzoriek do jednej mesačnej (nízke koncentrácie, náš ^{22}Na). Filtre sú poukladané do škatuľky s priemerom 52 mm a výškou 13 – 16 mm podľa veľkosti vzorky, teda množstva filtrov (obvykle 100 - 125 ks). Schéma zapojenia koincidenčnej meracej aparatúry je na obr. 3:

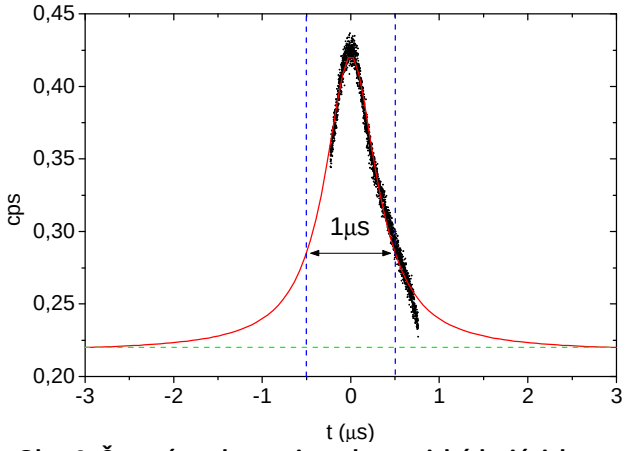


Obr. 3: Schéma zapojenia detektorov v koincidenčnom meraní: VN – zdroj vysokého napätia, SZ – spektrometrický zosilňovač, SCA – jednokanálový amplitúdový analyzátor, ADC – analógovo-digitálny prevodník, PZ – predzosilňovač, TAC - časovo-amplitúdový prevodník, D – diskriminátor, KO – koincidenčný obvod, LV – lineárne vráta, OV – oneskorovacie vedenie, MCA – mnohokanálový amplitúdový analyzátor, PC – počítač.

Nakoľko, vo všeobecnosti, použitie dvojných koincidencií vyžaduje viaceré korekcie, predstavuje koincidenčná $\gamma - \gamma$ metóda komplexný problém. Pre ohodnotenie jednotlivých korekčných parametrov sa sledujú vplyvy niekoľkých faktorov [Nich, 2004]. Medzi hlavné, ktoré najviac ovplyvňujú koincidenčné merania patria: schéma premeny sledovaného rádionuklidu, citlivosť detekčnej aparatúry na druh žiarenia emitovaného sledovaným rádionuklidom, rozlišovací čas koincidenčného obvodu, vplyv pozadia, sumačný efekt.

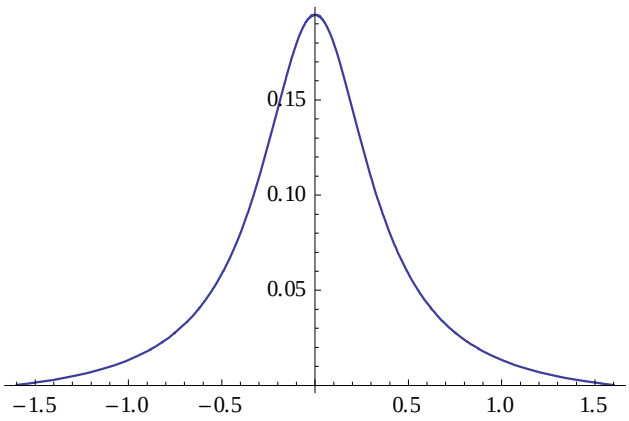
3.1 Ohodnotenie časového rozdelenia impulzov

Časový analyzátor TAC slúžil na to, aby sme mohli ohodnotiť časové spektrum signálov z oboch detektorov. Signál z NaJ(Tl) bol použitý ako štartovací, ktorý spúšťal TAC, ktorý následne bol zastavený signálom z HPGe. Tým sme získali časové spektrum, zaznamenané na obr. 4:



Obr. 4: Časové spektrum impulzov prichádzajúcich na koincidenčný obvod

Z tvaru tohto spektra sme mohli ohodnotiť, aké je časové rozdelenie signálov, ktoré prichádzajú na koincidenčný obvod. Tým sme mohli určiť pomer signálov, ktoré sú prepúšťané naším koincidenčným obvodom a tých, ktoré celkove prichádzajú na koincidenčný obvod. Tento pomer sme pracovne nazvali „koincidenčná účinnosť". Najskôr sme odpočítali pozadie píku spektra a následne sme určili koincidenčnú účinnosť ako pomer plochy so šírkou zodpovedajúcou rozlišovaciemu času koincidenčného obvodu, čo bola 1μs, a plochy, ktorá zodpovedala hraniciam časového rozdelenia signálov (1,6 μs). Postup je znázornený na obr. 5:



Obr. 5: Ohodnotenie koincidenčnej účinnosti

Koincidenčná účinnosť ε_k bola ohodnotená ako :

$$\varepsilon_k = \frac{S_k}{S_i} = 0.71 \qquad (4.)$$

3.2 Ohodnotenie korekcie píkovej detekčnej účinnosti pre NaJ(Tl) kryštál

Píková detekčná účinnosť vyjadruje schopnosť daného detektora registrovať dopadajúce gama kvantá. Na správnom určení tejto veličiny závisí výsledné určenie aktivity vzorky, ktorá je predmetom nášho skúmania. Navyše pri nízkych koncetráciách rádionuklidov, ktorými sa zaoberáme zastáva táto úloha popredné miesto v spracovaní dát z meraní. Pre určenie píkovej detekčnej účinnosti e_f sme vychádzali zo základného vzťahu:

$$e_f = \frac{CPS}{A\, k_\gamma} \qquad (5.)$$

kde *CPS* je početnosť registrovaná v píku úplnej absorbcie za jednotku času, *A* je aktivita žiariča/vzorky, k_γ je relatívna intenzita gama čiary s konkrétnou hodnotou energie. Scintilačný kryštál NaJ(Tl) bol použitý na detekciu gama kvánt s energiou 511 keV. Naším cieľom bolo určiť korekciu píkovej detekčnej účinnosti 100x100 mm kryštálu na 511 keV sumačný efekt. Postupovali sme tak, že sme najskôr určili teoretické hodnoty účinností pre viaceré energie a vzdialenosti kryštál – bodový zdroj podľa vzťahu (6.) [Vart, 1975]:

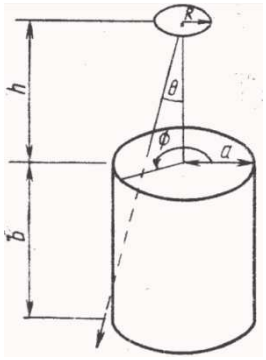
$$\boldsymbol{\varepsilon_f(E) = \frac{1}{2\,\Omega}\left\{ \int_0^{\theta_1} f(\theta)\, d\theta + \int_{\theta_1}^{\theta_2} g(\theta)\, d\theta \right\}} \qquad (6.)$$

Pre funkcie *f (θ)* a *g (θ)* platí:

$$\boldsymbol{f(\theta) = \left(1 - e^{\frac{-\mu(E)\, b}{\cos\theta}}\right) \sin\theta} \qquad (7.)$$

$$\boldsymbol{g(\theta) = \left(1 - e^{\frac{-\mu(E)\, h}{\cos\theta} - \frac{-\mu(E)\, a}{\sin\theta}}\right) \sin\theta} \qquad (8.)$$

Tento vzťah vychádza zo schémy na obr. 6:



Obr. 6: Schematické zobrazenie pre výpočet píkovej účinnosti pre bodový zdroj [Vart, 1975]

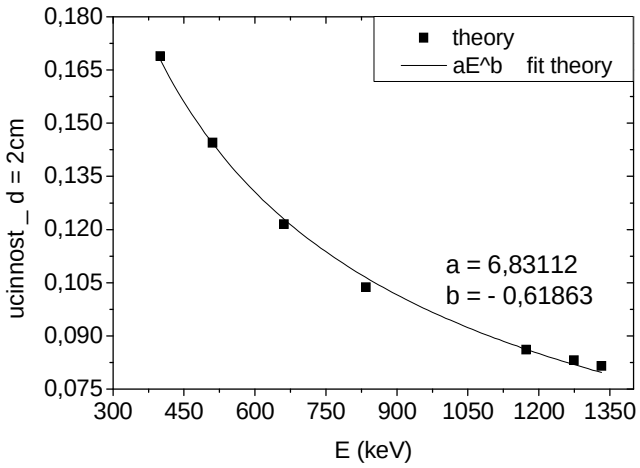
Vo vzťahu figurujú viaceré veličiny. Hodnota hmotnostného koeficientu zoslabenia μ bola určená z [Mašk, 1982], a = 5 cm, b = 10 cm, h sa menilo pre jednotlivé vzdialenosti. Ostatné hodnoty sme určili nasledovne [Vart, 1975]:

$$\theta_1 = arctg\ \frac{a}{b+h} \qquad (8.)$$

$$\theta_2 = arctg\ \frac{a}{h} \qquad (9.)$$

$$\Omega = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{h}{\sqrt{h^2 + a^2}}\right) \qquad (10.)$$

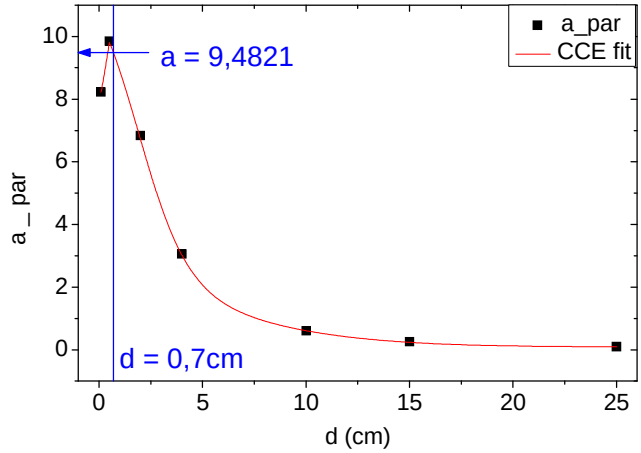
Na tento výpočet sme použili počítačový program. Tieto hodnoty sme porovnávali s hodnotami píkových účinností určených pre experimentálne merania. Previedli sme merania pre viaceré zdroje v rôznych vzdialenostiach, aby sme získali priebeh účinnosti v závislosti od energie pre jednotlivé vzdialenosti. Použili sme tieto bodové žiariče: ^{137}Cs (661,6 keV), ^{54}Mn (834,8 keV), ^{60}Co (1173,2 a 1332,5 keV) a ^{22}Na (511 a 1274,5 keV). Merali sme vo vzdialenostiach 0,1 cm, 0,5 cm, 2 cm, 4 cm, 10 cm, 15 cm a 25 cm. Na obr. 7 je znázornená závislosť píkovej detekčnej účinnosti určenej od energie pre vzdialenosť 2cm:



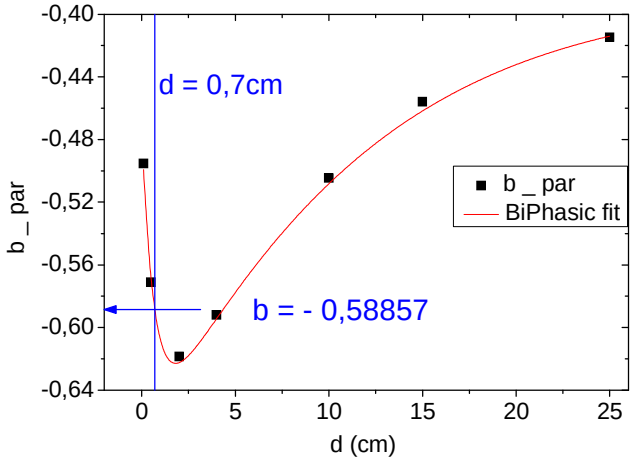
Obr. 7: Priebeh hodnôt píkovej účinnosti určených podľa vzťahu (6.) pre bodový zdroj vo vzdialenosti 2cm od kryštála NaJ(Tl) 10x10 cm

Pri určovaní korekcie pre 511 keV čiaru ^{22}Na sme vychádzali z porovnania teoreticky vypočitaných hodnôt s experimentálnymi meraniami. Teoretickými hodnotami účinností sme preložili funkciu aE^b. Pre každú vzdialenosť sme tak dostali hodnoty parametrov a,b. Následne, pre jednotlivé vzdialenosti, sme ohodnotili korekciu na rozdiely medzi teoretickými a experimentálnymi hodnotami bez prítomnosti sumačného efektu. Túto korekciu sme ohodnotili pre vzdialenosť 0,7 cm, čo je vzdialenosť, v ktorej boli merané aerosólové vzorky. Spracovanie a určenie jednotlivých parametrov korekčnaj funkcie pre vzdialenosť 0,7 cm sa nachádza na obrázkoch 9, 10 a 11. Z týchto hodnôt sme mohli zostaviť korekčnú funkciu, ktorou sme fitovali priebeh hodnôt píkových účinností určených z merania vo vzdialenosti 0,7cm. Korekčná funkcia takto určená má tvar:

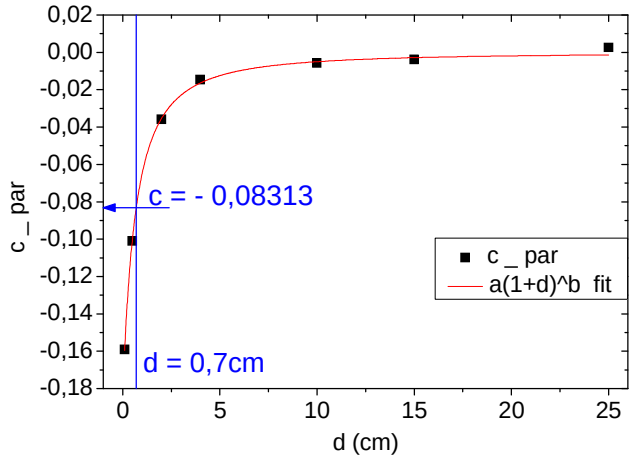
$$\varepsilon_f = a\,E^b + c \qquad (11.)$$



Obrázok 9: Priebeh parametra *a* s určením jeho hodnoty pre vzdialenosť 0,7 cm

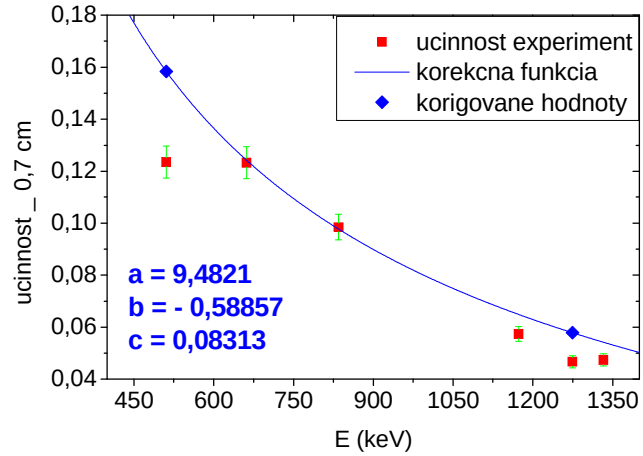


Obrázok 10: Priebeh parametra *b* s určením jeho hodnoty pre vzdialenosť 0,7 cm



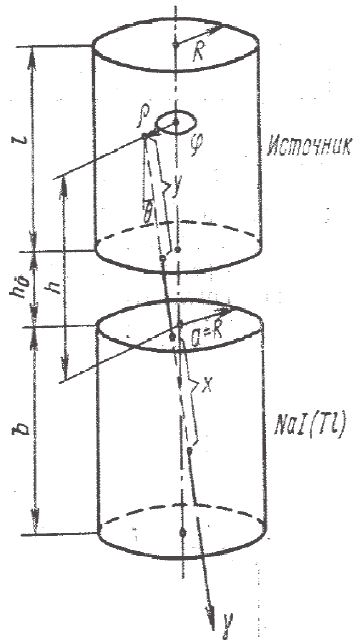
Obrázok 11: Priebeh parametra *c* s určením jeho hodnoty pre vzdialenosť 0,7 cm

Pre vzdialenosť 0,7 cm sme určili sme korekciu na sumačný efekt pre 511 keV gama kvantá (obr. 12):



Obrázok 12: Korekcia píkovej detekčnej účinnosti pre vzdialenosť 0,7 cm na sumačný efekt 511 keV gama kvánt pre bodový žiarič

Hodnota tejto korekcie predstavuje 22 ± 3,3 %.



Obrázok 13: Schéma použitá pri výpočte píkovej detekčnej účinnosti NaJ(Tl) kryštálu pre objemový žiarič [Vart, 1975]

Naším cieľom bolo použiť túto hodnotu pre ohodnotenie korekcie na sumačný efekt 511 keV gama kvánt pre objemový žiarič rozmerov našej vzorky. Postupovali sme tak, že sme vypočítali píkovú detekčnú účinnosť pre objemový žiarič podľa schémy na obr. 13, kde jednotlivé rozmery boli podľa našej geometrie: polomer žiariča a = 2 cm, výška kryštálu b = 10 cm, vzdialenosť povrchov kryštál – žiarič h_0 = 0,7 cm, výška žiariča l = 1,3 cm. Potom sme podľa vzťahu [Vart, 1975] vypočítali píkovú detekčnú účinnosť:

$$\varepsilon_f(E)=\frac{1}{\pi l a^2}\int_{h_0}^{h_0+l} dh \int_0^a \rho\, d\rho \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi \times$$

$$\times\left\{\int_0^{\theta_1} f(\theta)\sin\theta\, d\theta + \int_{\theta_1}^{\theta_2} g(\theta)\sin\theta d\theta\right\} \quad (12.)$$

Kde:

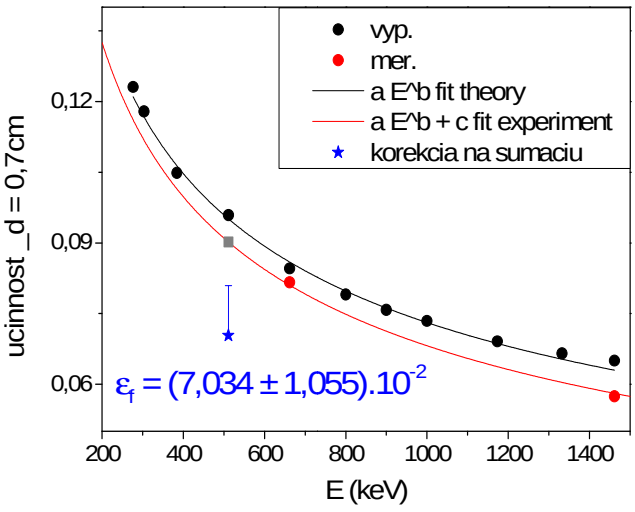
$$\theta_1 = arctg\,\frac{-\rho\sin\varphi+\sqrt{a^2-\rho^2\cos^2\varphi}}{h+b} \quad (13.)$$

$$\theta_2 = arctg\,\frac{-\rho\sin\varphi+\sqrt{a^2-\rho^2\cos\varphi}}{h} \quad (14.)$$

$$f(\theta)=\left(1-e^{\frac{-\mu(E)\,b}{\cos\theta}}\right)e^{\frac{-\tau(E)\,(h-h_0)}{\cos\theta}} \quad (15.)$$

$$g(\theta)=\left(1-e^{-\mu(E)\left[\frac{-\rho\sin\varphi+\sqrt{a^2-\rho^2\cos^2\varphi}}{\sin\theta}-\frac{h}{\cos\theta}\right]}\right)e^{\frac{-\tau(E)\,(h-h_0)}{\cos\theta}}$$

Kde μ(E) je hmotnostný koeficient zoslabenia pre NaJ(Tl) a τ(E) hmotnostný koeficient zoslabenia vo vzduchu. Vypočítali sme píkovú detekčnú účinnosti vo vzdialenosti 0,7 cm pre viaceré energie tak, aby sme pokryli interval energií 200 – 1500 keV. Týmito hodnotami sme preložili krivku aE^b , čím sme určili parametre *a*, *b*. Pre našu geometriu sme zmerali objemové kalibračné žiariče. Potom sme preložili týmito hodnotami funkciu $aE^b + c$ pričom sme použili hodnoty parametrov *a*, *b* z fitu teoreticky vypočítaných hodnôt. Z tejto krivky sme určili hodnotu píkovej detekčnej účinnosti na 511 keV gama kvantá, aká by zodpovedala tejto energii, ak by neexistoval sumačný efekt. Potom sme použili ohodnotenie korekcie píkovej detekčnej účinnosti na sumačný efekt pre bodový žiarič. Následne sme určili korekciu píkovej detekčnej účinnosti na sumačný efekt 511 keV gama kvánt pre scintilačný kryštál NaJ(Tl) pre rozmery našich vzoriek aerosólov. Spracovanie tohto výsledku je na obr. 14.



Obrázok 14: Porovnanie hodnôt vypočítanej píkovej detekčnej účinnosti s hodnotami určenými z meraní a následné určenie korigovanej hodnoty pre energiu 511 keV

Nakoniec sme teda určili hodnotu píkovej detekčnej účinnosti na 511 keV gama kvantá s korekciou na sumačný efekt pre NaJ(Tl) kryštál pre naše vzorky aerosólov:

$$\varepsilon_f\ (511\ keV) = (7{,}034 \pm 1{,}055).10^{-2}$$

3.3 Ohodnotenie korekcie píkovej detekčnej účinnosti pre HPGe detektor

Pre stanovenie miery, akou vplýva sumačný efekt na určenie početnosti v píkoch úplnej absorbcie pre HPGe detektor sa zavádza korekčný faktor C_1. Vychádzajme zo vzťahu (17.), podľa ktorého je početnosť za sekundu v píku úplnej absorbcie gama kvánt s energiou E_1 rovná:

$$CPS_1 = A\,\varepsilon_1\,k_{\gamma 1} \qquad (17.)$$

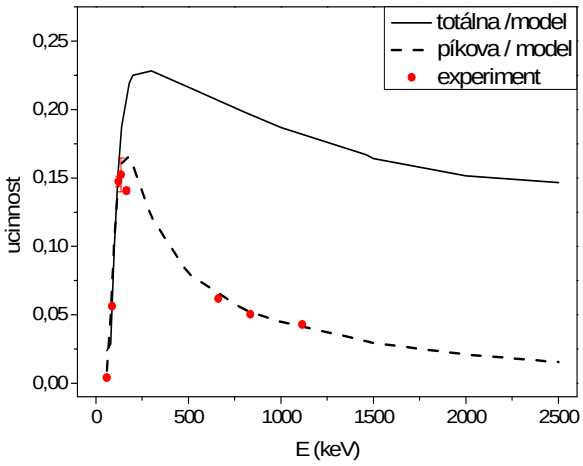
kde A je aktivita žiariča, ε_1 je píková detekčná účinnosť pre gama kvantá s energiou E_1, $k_{\gamma 1}$ je počet gama kvánt s energiou E1 na rozpad. V skutočnosti však bude táto početnosť v dôsledku sumačného efektu menšia a my budeme merať početnosť:

$$CPS_1' = A\,\varepsilon_1\,k_{\gamma 1} - A\,\varepsilon_1\,k_{\gamma 1}\,k_{\gamma 2}\,\varepsilon_2^T \qquad (18.)$$

kde $k_{\gamma 2}$ je počet gama kvánt s energiou E_2 na rozpad, ε_2^T je pravdepodobnosť detekcie gama kvanta s energiou E_2, nazývaná totálna účinnosť. Korekčný faktor na sumačný efekt C_1 určíme ako pomer početností:

$$C_1 = \frac{CPS_1}{CPS_1'} = \frac{1}{1 - k_{\gamma 2}\varepsilon_2^T} \qquad (19.)$$

V našom prípade sa jedná o jadro rádionuklidu ^{22}Na (obr. 1). Toto jadro sa rozpadá dvomi spôsobmi; elektrónovým záchytom a β+ premenou. Pri elektrónovom záchyte (~ 10% premien) sa dostáva na vzbudenú hladinu ^{22}Ne, odkiaľ sa deexcitáciou gama kvanta s energiou 1274,5 keV dostáva na základnú hladinu. Pri β+ premene (~ 90% premien) uvoľnený pozitrón anihiluje s elektrónom, čím dochádza k vyžiareniu dvoch anihilačných gama kvánt s energiou zodpovedajúcou pokojovým hmotnostiam týchto častíc, teda po 511 keV. Sledovali sme koincidenčné sumovanie gama kvánt s energiami 511 keV a 1274,5 keV s cieľom určiť korekčný faktor na sumačný efekt 1274,5 keV gama kvánt registrovaných v polovodičovom HPGe detektore. Korekčný faktor sme určovali dvomi spôsobmi, aby sme mohli oba prístupy porovnať. Prvým bolo teoretické určenie $C_1^{Teor.}$, pričom sme vychádzali zo vzťahu (19). Totálnu aj píkovú účinnosť pre bodový žiarič sme určili pomocou Monte–Carlo simulácií v programovacom balíku GEANT 3 (obr. 16).



Obrázok 16: Závislosť totálnej a píkovej účinnosti určenej modelovaním s hodnotami určenými z experimentálneho merania

Z tohto priebehu sme určili hodnoty totálnej účinnosti pre 511 keV ε_2^T = 0,2063 ± 0,0016 a píkovej detekčnej účinnosti pre 1274,5keV ε_1 = 0,0365 ± 0,0003. Podľa vzťahu (19.) sme určili hodnotu korekčného faktora $C_1^{Teor.}$ = 1,58 ± 0,03.

Druhý spôsob bolo experimentálne určenie korekčného faktora pomocou merania etalónového žiariča. Z merania tohto žiariča sme zaznamenali početnosť v píku úplnej absorbcie 1274,5 keV gama kvánt CPS_1'. Vypočítali sme píkovú detekčnú účinnosť bez korekcie na sumáciu ako CPS/(A k_γ) a zo vzťahu (17.) sme určili CPS_1 a . Podľa vzťahu (19.) sme z pomeru týchto početností určili korekčný faktor $C_1^{Exp.}$. Merali sme viaceré bodové žiariče ^{22}Na v tesnej geometrii. Z týchto meraní sme určili strednú hodnotu korekčného faktora ako vážený priemer jednotlivých hodnôt $C_1^{Exp.}$ = 1,52 ± 0,06.

Porovnaním $C_1^{Teor.}$ = 1,58 ± 0,03 a $C_1^{Exp.}$ = 1,52 ± 0,06 sme určili C_1 ako ich aritmetický priemer: C_1 = 1,55 ± 0,04. Táto hodnota teda zodpovedala korekcii píkovej detekčnej účinnosti na sumačný efekt pre 1274,5 keV gama kvantá. Korekcia pre objemový žiarič, rozmerov našej vzorky spočívala v predelení namodelovanej účinnosti pre objemový žiarič, ktorá bola (2,686 ± 0,019).10^{-2}, korekčným faktorom C_1:

$$\varepsilon_f\,(1274{,}5\ keV) = (1{,}733 \pm 0{,}021).10^{-2}$$

Takto sme určili korekciu píkovej detekčnej účinnosti HPGe detektora na sumačný efekt 1274,5 keV gama kvánt pre objemový žiarič rozmeru našej vzorky.

4 Dosiahnuté výsledky

Venovali sme sa ohodnoteniu korekcií pre koincidenčné merania aerosólových vzoriek. Zaujímali sme sa o kozmogénny rádionuklid ^{22}Na, v ktorého spektre sa nachádzajú dve γ čiary; 511 keV a 1274,5 keV. Počas leta 2012 boli zmerané v koincidenčnom zapojení detektorov mesačné vzorky aerosólových filtrov. Pre toto meranie sme použili polovodičový HPGe detektor a scintilačný kryštál NaJ(Tl). Zamerali sme sa na ohodnotenie korekcie na rozlišovací čas koincidenčného obvodu a korekcie na sumačný efekt 511 keV γ čiary detekovaného gama kvanta scintilačným kryštálom NaJ(Tl) rozmerov 10x10cm.

Hodnotu korekcie na obmedzenia spôsobené 1 μs rozlišovacím časom koincidenčného obvodu sme určili zo vzťahu (4.). Jej hodnota bola:

$$\varepsilon_k = 0{,}71 \pm 0{,}14$$

Pri hodnotení korekcie píkovej detekčnej účinnosti na sumačný efekt anihilačnej 511 keV gama čiary izotopu ^{22}Na sme postupne určovali hodnoty píkových detekčných účinností kryštálu NaJ(Tl). Podľa vzťahu (6.) sme vypočítali hodnoty píkových detekčných účinností pre bodové žiariče viacerých energií vo vzdialenostiach 0 – 25 cm. Z experimentálnych meraní bodových zdrojov žiarenia sme určili píkové detekčné účinnosti pre jednotlivé energie a vzdialenosti. Z fitov závislostí účinností od energie sme zistili hodnoty parametrov pre teoreticky a experimentálne určené účinnosti. Porovnaním teoretických a experimentálnych priebehov účinností od energie sme určili závislosť parametrov korekčnej funkcie od vzdialenosti. Pre vzdialenosť 0,7 cm sme týmto spôsobom našli hodnoty parametrov korekčnej funkcie, čím sme následne boli schopní určiť hodnotu korekcie na sumačný efekt anihilačnej 511 keV gama čiary ^{22}Na pre bodový žiarič. Hodnota tejto korekcie bola (22 ± 3,3) %. Hodnotu neistoty sme odhadli z neistôt použitých fitov na 15%, nakoľko presný výpočet by bol značne komplikovaný. Naším cieľom ale bolo určiť korekciu pre objemový žiarič rozmerov našej vzorky. Podľa vzťahu (12.) sme vypočítali hodnoty píkovej detekčnej účinnosti pre objemový žiarič tak, aby sme pokryli požadovaný interval energií. Porovnali sme tieto hodnoty s hodnotami z merania objemového etalónového žiariča a použili sme korekciu 22% z bodového žiariča. Výsledná korigovaná hodnota píkovej účinnosti NaJ(Tl) kryštálu na sumačný efekt pre 511 keV bola:

$$\varepsilon_f\,(511\ \text{keV}) = (7{,}034 \pm 1{,}055).10^{-2}$$

Ďalšou korekciou, ktorú sme ohodnotili bola korekcia píkovej detekčnej účinnosti na sumačný efekt deexcitačných 1274,5 keV gama kvánt pre HPGe detektor. Idea bola rovnaká ako pri korekcii 511 keV pre NaJ(Tl). Postupovali sme tak, že sme určovali hodnotu korekčného faktora píkovej detekčnej účinnosti na sumačný efekt pre bodový žiarič, ktorú sme potom použili pre ohodnotenie objemového žiariča, našej vzorky. Podľa vzťahu (19.), z namodelovanej píkovej a totálnej účinnosti a z experimentálneho merania bodových žiaričov sme určili teoretickú a experimentálnu hodnotu tohto faktora. Z priemeru týchto hodnôt sme určili korekčný faktor $C_1 = 1{,}55 \pm 0{,}04$. Hodnota korekcie píkovej detekčnej účinnosti na sumačný efekt 1274,5 keV gama kvánt pre HPGe detektor pre objemový žiarič bola:

$$\varepsilon_f\,(1274{,}5\ \text{keV}) = (1{,}733 \pm 0{,}021).10^{-2}$$

Hodnoty týchto korekcií použijeme pre určenie aktivity aerosólových vzoriek meraných v koincidenčnom zapojení detektorov HPGe a NaJ(Tl).

5 Záver

V tejto práci sme sa venovali ohodnoteniu korekcií pre koincidenčné merania aerosólových vzoriek. Naším cieľom bolo ohodnotiť korekcie na rozlišovaciu dobu koincidenčného obvodu a na sumačný efekt pre anihilačné 511 keV a deexcitačné 1274,5 keV gama kvantá izotopu ^{22}Na. Účelom ohodnotenia týchto korekcií je určenie aktivity aerosólových vzoriek meraných v koincidenčnom zapojení HPGe detektora a scintilačného NaJ(Tl) kryštálu.

Poďakovanie

Chcem sa poďakovať svojmu školiteľovi, doc. Ivanovi Sýkorovi, ktorý mi poskytol študijnú literatúru, prístup k experimentálnym dátam a viedol ma počas celej prípravy tejto práce.

Použitá literatúra

[Firestone,1996] Firestone R.B. et al. (1996), Table of isotopes, eight edition, p. 272, 456, Wiley-Interscience.

[Jas,2005] Jasiulionis R., Wershofen H. (2005), A study of vertical diffusion of the cosmogenic radionuclides ^{7}Be and ^{22}Na in the atmosphere, *Journal of Environmental Radioactivity* 79, p. 157-169, ELSEVIER.

[Gais, 2002] Cosmic Rays. Revised March 2002 by T.K. Gaisser and T. Stanev (Bartol Research Inst., Univ. of Delaware); revised September 2005 by P.V. Sokolsky (Univ. of Utah) and R.E. Streitmatter (NASA)

[Nich, 2004] Nichiporov D., Luckjashin V., Kostjuchenko V. (2004), Measurement of the activity of 11C and 22Na sources using a 4π–β–γ coincidence system, *Applied Radiation and Isotopes 60*, p. 703 – 716, ELSEVIER

[Bhan., 1965] Bhandari et al. (1965), Stratospheric circulation studies based on natural and artificial radioactive tracer elements, *Tata Institute of Fundamental Research*, p.398.

[Mašk, 1982] Maškovič V. P. (1982), Zaščita od ionizirujuščich izlučeni; Spravočnik 3izd, 296 s., Energoatomizdat, Moskva

[Vart, 1975] Vartanov N.A., Samoljov P.S. (1975), Prikladnaja scintilljacinnaja gama-spektrometria, 2 izd., 408 s., Moskva

[Zem, 2012] Zeman J. (2012), Kozmogénne rádionuklidy v atmosfére Bratislavy, ŠVK 2012, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského, Bratislava.