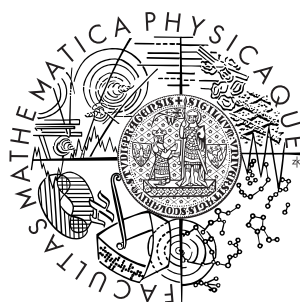


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Marek Laca

Modelování okolí emisní sondy

Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Pavel Kudrna, Dr.

Studijní program: Obecná fyzika

2008

Rád by som poďakoval vedúcemu svojej bakalárskej práce Mgr. Pavlovi Kudrnovi, Dr. za odbornú pomoc pri príprave bakalárskej práce, podklady a nepostrádateľné rady, ochotu vždy pomôcť a poradiť.

Prehlasujem, že som svoju bakalársku prácu napísal samostatne a výhradne s použitím citovaných prameňov. Súhlasím so zapožičiavaním práce a jej zverejňovaním.

V Prahe dňa 7.8. 2008

Marek Laca

Obsah

1	Úvod a ciele práce	6
1.1	Plazma	6
1.2	PTSG	8
2	Simulácia plazmatu	9
3	Modelovanie emisie elektrónov medzi rovinnými elektródami	13
3.1	Teoretické riešenie	14
3.2	Popis programu XPDP1	18
3.3	Nasimulované závislosti	22
3.4	Rady k nastaveniu programu XPDP1	26
4	Záver	31
	Literatúra	32
A	Príklad vstupného súboru	33
B	CD-rom	35

Název práce: Modelování okolí emisní sondy

Autor: Marek Laca

Katedra (ústav): Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Pavel Kudrna, Dr.

e-mail vedoucího: pavel.kudrna@mff.cuni.cz

Abstrakt: V tejto práci študujem pomocou počítačovej simulácie rozloženie a vlastnosti priestorového náboja v okolí emisnej sondy v závislosti na externých podmienkach. Elektróny zo sondy vystupujú termoemisiou a vytvárajú v jej okolí priestorový náboj. Pre samotnú simuláciu som použil jednodimenzionálny elektrostatický program XPDP1, ktorý bol vyvinutý skupinou The Plasma Theory and Simulation Group, Berkeley. Program simuluje plazmu medzi dvomi rovinnými elektródami metódou Particle in cell (PIC). Program umožňuje aplikovať externé magnetické pole a zrážky medzi nabitými časticami a neutrálnymi časticami pozadia. Za emisnú sondu považujem katódu. Simulácie prebehli pri konštantnom emisnom prúde z katódy s rozdielnou tepelnou energiou elektrónov a pri rozdielnom napätí.

Klíčová slova: plazma, emisná sonda, XPDP1

Title: Model of the emissive probe
Author: Marek Laca
Department: Department of Surface and Plasma Science
Supervisor: Mgr. Pavel Kudrna, Dr.
Supervisor's e-mail address: pavel.kudrna@mff.cuni.cz

Abstract: In the present work I study distribution and characteristic of the spatial charge in surrounding of emissive probe in dependence on external conditions with numerical simulations. Electrons are emitted from the probe surface by the thermo emission and create spatial charge around the electrode. In the simulation I have used one dimensional plasma electrostatic code XPDP1 developed by The Plasma Theory and Simulation Group, Berkeley. This electrostatic software simulates plasma between two planar electrodes by using Particle in cell (PIC) method. The software allows implementation of external magnetic field and collisions between the charged particles and the neutral background. I consider the cathode as the emissive probe. The simulations were made at the constant emissive current from the cathode with various thermal energy of electrons and various voltages.

Keywords: plasma, emissive probe, XPDP1

Kapitola 1

Úvod a ciele práce

Cieľom mojej práce je simulovať priestorový náboj, ktorý sa vytvára termoe emisiou v okolí emisnej sondy, pomocou simulačného programu **XPDP1**. Samotný program pracuje metódou *Particle in Cell (PIC)* a umožňuje simulovať plazma medzi rovinnými elektródami. Chcem namodelovať priebeh niekoľkých charakteristík náboja v okolí sondy pri rôznych vonkajších parametroch a popísať tak jeho chovanie. V celej prvej kapitole čerpám hlavne z [3] [4] [5].

1.1 Plazma

Plazmatom sa väčšinou rozumie „kvazineutrálny plyn nabitých a neutrálnych častíc, ktorý vykazuje kolektívne chovanie“ [3], v širšom slova zmysle sa vynecháva požiadavka kvazineutrality.

Kolektívnym chovaním sa myslí pohyb častíc, ktorý nezávisí iba na lokálnych podmienkach ale aj na celkovom priestorovom rozložení a stave plazmatu.

Kvazineutralita znamená, že sa hustota kladných a záporných častíc približne rovná, pričom ale nedôjde k úplnému vyrušeniu elektromagnetických síl. Môže ale dochádzať k lokálnym zmenám koncentrácie nabitých častíc.

Plazma má charakteristickú schopnosť odtieniť vložené elektrické potenciály. Akýkoľvek vodič vložený do plazmatu, s rozdielnym potenciálom ako je

potenciál plazmatu v danom mieste, je okamžite obklopený časticami opačného náboja. Vložený potenciál potom exponenciálne klesá so vzdialenosťou od vodiča až približne k hodnote potenciálu plazmatu [4].

Plazma je vo vesmíre prevládajúcim stavom hmoty, pričom z plazmatu sú plynné medzihviezdne mlhoviny, hviezdy, slneční vietor a naše Slnko je jedna veľká žeravá plazmatická guľa. Plazma sa často považuje za štvrté skupenstvo hmoty. Zem je síce z tak bohatého výskytu plazmatu výnimka aj tak môžeme plazma na Zemi nájsť v bleskoch alebo v tokamakoch, vytvára svit polárnej žiary, vodivý plyn v žiarivkách, atď.

Jednou s najstarších a najpoužívanejších metód skúmania plazmatu je meranie pomocou elektrických sond, ktoré sa umiestňujú do plazmatu. SONDY SÚ OBECE RÔZNEHO TVARU, V PRAXI SA VÄČŠINOU POUŽÍVAJÚ GUĽOVÉ, VALCOVÉ ALEBO PLOŠNÉ.

Langmuirova sonda sú dve kovové elektródy vložené do plazmatu. Z nameranej voltampérovej charakteristiky sa následne určujú vlastnosti plazmatu [5].

Jednosondová metóda, veľkosť povrchu elektród, ktorý je v kontakte s plazmatom, sa rádovo líši.

Dvojsondová metóda, veľkosť povrchu elektród, ktorý je v kontakte s plazmatom, sa približne rovná a je zanedbateľná v porovnaní s rozmerom plazmatu.

Táto metóda vyžaduje zmerať priebeh voltampérovej charakteristiky, čo je nevýhodné hlavne v časovo premennom plazmate.

Emisná sonda je vodič vložený do plazmatu, pričom zo žhaveného povrchu sú emitované elektróny, ktoré vytvárajú v jej blízkom okolí záporný priestorový náboj. Pokiaľ je sonda na „plávajúcom potenciáli“ (medzi sondou a plazmatom netečie žiadny prúd), tak pole priestorového náboja vracia všetky ďalšie emitované elektróny späť na sondu. „Plávajúci potenciál“ je blízky potenciálu plazmatu v mieste sondy. Výhodou emisnej sondy je, že dovoľuje okamžite zmerať potenciál v danom bode plazmatu.

1.2 PTSG

Skupina **PTSG (The Plasma Theory and Simulation Group)**, **EECS Department, University of California, Berkeley**, sa zaoberá vývojom programov na časticovú simuláciu plazmatu. V priebehu rokov vyvinula programi **XPDP1**, **XPDC1**, **XPDS1**, **XPDP2** a ďalšie, ktoré simulujú ohraničené plazma medzi dvomi elektródami metódou *Particle in Cell (PIC)*. Všetky tieto programy sú voľne k dispozícii pre kohokoľvek [11].

- **XPDP1**, jednodimenzionálny program simulujúci plazma, pracujúci s dvomi rovinnými elektródami v kartézskych súradniciach. Podrobný popis 1d simulácie plazmatu [10].
- **XPDP2**, dvojdimenzionálny program simulujúci plazma v kartézskych súradniciach. Podrobný popis 2d simulácie plazmatu [7],[8].
- **XPDC1**, jednodimenzionálny program simulujúci plazma medzi valcovými elektródami, pracujúci v cylindrických súradniciach, [10].
- **XPDS1**, jednodimenzionálny program simulujúci plazma vo sférických súradniciach medzi sférickými elektródami, [10].

Kapitola 2

Simulácia plazmatu

V tejto kopitole sa opieram o knihu [1], väčšina poznatkov pochádza práve z nej. Plazma je možné študovať teoreticky, experimentálne alebo pomocou počítačového modelovania. Jedným smerom modelovania je *časticové modelovanie*, pri ktorom sa riešia kinetické rovnice pre jednotlivé častice a vzájomná interakcia na mikroskopickú úroveň.

Už pri prvých časticových simuláciách sa ukázalo, že počítat silu pôsobiacu na časticu ako súčet čiastkových príspevkov od všetkých ostatných častíc nieje priamo vhodné. Jednak sa elektrická sila chová ako $\sim r^{-2}$ a pre $r \rightarrow 0$ diverguje, jednak na vzájomné pôsobenie medzi N časticami je nutné vypočítat $N(N - 1)/2$ síl.

Miesto toho sa môže použiť metóda *Particle in Cell*. Oblasť, v ktorej prebieha výpočet, sa rozdelí do buniek s uzlami. Následne program vykonáva simuláciu plazmatu v cykle, Obr. 2.1:

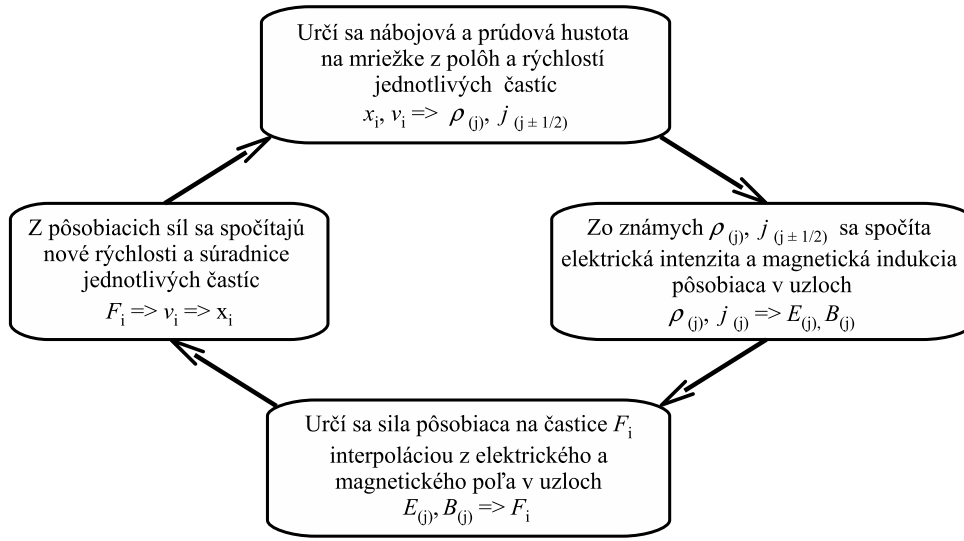
1. Určí sa fiktívny náboj $Q_{(j)}$ a nábojová hustota $\rho_{(j)}$ v j -tom uzle, interpoláciu z polohy častíc ležiacich v príľahlých bunkách, takzvané „váženie“ [1]. Nasledujúci spôsob „váženia“ sa nazýva práve *Particle in Cell*.

V prípade 1d, pozri Obr. 2.2:

$$Q_{(j)} = q_i \frac{x}{\Delta X} \quad (2.1a)$$

$$Q_{(j-1)} = q_i \frac{(\Delta X - x)}{\Delta X} \quad (2.1b)$$

$$\rho_{(j)} = \frac{Q_{(j)}}{V} \quad (2.2)$$



Obrázok 2.1: Programový cyklus.

V týchto vzťahoch sú q_i, v_i náboj a rýchlosť i -tej častice. V je objem bunky (v 1d $V = \Delta X$, v 2d $V = \Delta X \Delta Y$).

V prípade 2d v kartézskych súradniciach, pozri Obr. 2.3:

$$Q_{(j,k)} = q_i \frac{xy}{\Delta X \Delta Y} \quad (2.3a)$$

$$Q_{(j,k-1)} = q_i \frac{y(\Delta X - x)}{\Delta X \Delta Y} \quad (2.3b)$$

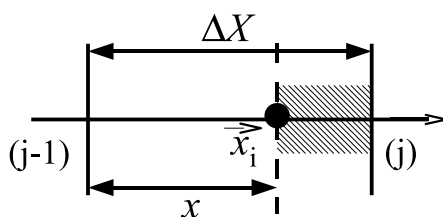
$$Q_{(j-1,k)} = q_i \frac{x(\Delta Y - y)}{\Delta X \Delta Y} \quad (2.3c)$$

$$Q_{(j-1,k-1)} = q_i \frac{(\Delta X - x)(\Delta Y - y)}{\Delta X \Delta Y} \quad (2.3d)$$

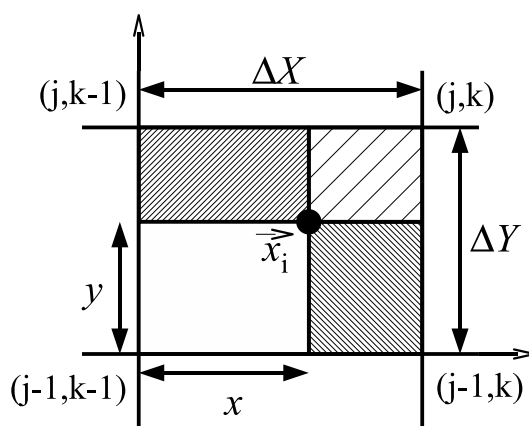
$$\rho_{(j,k)} = \frac{Q_{(j,k)}}{V} \quad (2.4)$$

Pokiaľ sa nejedná o čiste elektrostatický problém, je nutné navyše určiť z polohy a rýchlosti častíc hustotu prúd tečúceho na stranách buniek medzi uzlami $\vec{J}_{(j \pm 1/2, k \pm 1/2)}$.

2. Spočíta sa elektrická intenzita a magnetická indukcia \vec{E}_j, \vec{B}_j pôsobiaca



Obrázok 2.2: Metóda *Particle in Cell* v 1d.



Obrázok 2.3: Metóda *Particle in Cell* v kartézskych súradniciach v 2d.

v uzloch zo známej nábojovej a prúdovej hustoty. Množstvo spôsobov výpočtu, podľa konkrétnej situácie, je popísaných v už spomínanej knihe [1]. Jedným zo spôsobov je napríklad použitie Fourierovej a inverznej Fourierovej transformácie.

3. Sila pôsobiaca na i -tu časticu sa interpoluje z intenzity sily v okolitých uzloch, rovnakým spôsobom „váženia“ ako v bode 1. Napríklad pre elektrickú silu v 1d bude:

$$F_i = q_i \left(E_{(j)} \frac{x}{\Delta X} + E_{(j-1)} \frac{\Delta X - x}{\Delta X} \right) \quad (2.5)$$

4. Zo síl pôsobiacich na častice sa spočítajú ich nové rýchlosti \vec{v}_i a polohy \vec{x}_i .

$$\vec{F}_i(t) = m_i \frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d}t} \vec{v}_i(t) \quad (2.6a)$$

$$\frac{\vec{F}_i(t)}{m_i} = \frac{\vec{v}_i(t + \Delta t/2) - \vec{v}_i(t - \Delta t/2)}{\Delta t} \quad (2.6b)$$

$$\vec{v}_i(t) = \frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d}t} \vec{x}_i(t) \quad (2.7a)$$

$$\vec{v}_i(t + \Delta t/2) = \frac{\vec{x}_i(t + \Delta t) - \vec{x}_i(t)}{\Delta t} \quad (2.7b)$$

Celý cyklus sa opakuje.

Pre simuláciu plazmatu je ešte potrebné modelovať zrážky s neutrálnym plynom. Pre prípad simulácie elektrónov vo vákuu toto nieje nutné.

Kapitola 3

Modelovanie emisie elektrónov medzi rovinnými elektródami

Budem modelovať správanie elektrónového oblaku medzi dvomi rovinnými paralelnými elektródami vo vákuu. Obidve elektródy ležia v rovine yz a všetky veličiny považujem iba za funkcie súradnice x . Usporiadanie je znázornené na Obr. 3.1 [11]. Za plošnú emisnú sondu môžem považovať katódu (pravá elektróda), z ktorej sú termoemisiou emitované elektróny. Elektróny teda vylietavajú z pravej elektródy smerom doľava. Stacionárny prúd tečúci medzi elektródami je závislý len na ich vzdialenosti a napätí, ktoré je priložené na elektródy. Pri dostatočnej emisii by prúd nemal závisieť na emisných vlastnostiach katódy.

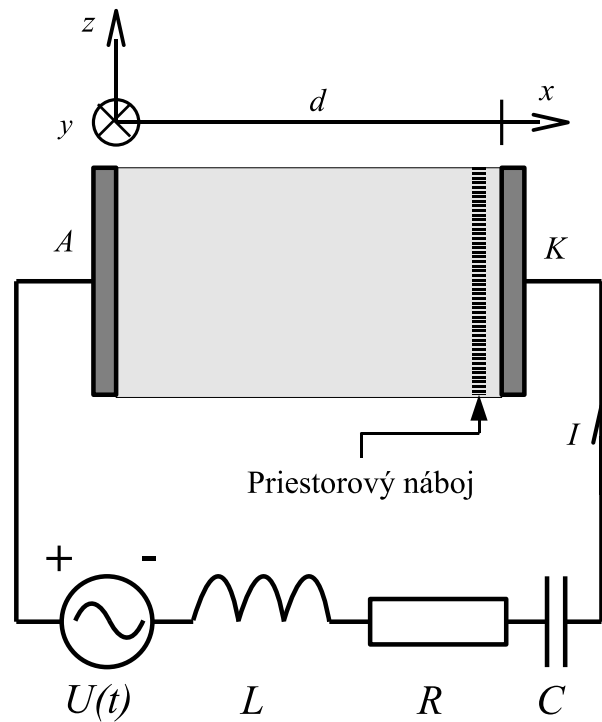
V prípade, že je emisný prúd z katódy dostatočne veľký, v priestore medzi elektródami sa vytvorí priestorový elektrický náboj, ktorý odtieni elektrické pole vytvárané napätím elektród. V dôsledku toho predpokladám existenciu minima potenciálu medzi elektródami v bode x_0 :

$$x_0 \in \langle 0, d \rangle$$

$$\vec{E}(x_0) = -\nabla\varphi(x_0) = 0 \quad (3.1a)$$

\vec{E} , φ sú iba funkciami súradnice x

$$E_x(x_0) = -\frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d}x}\varphi(x_0) = 0 \quad (3.1b)$$



Obrázok 3.1: Rovinné usporiadanie.

3.1 Teoretické riešenie

Pri riešení sa opieram hlavne o knihu [6]. V prípade nulovej kinetickej energie $E_k(d)$ emitovaných elektrónov z katódy dôjde k odstieneniu elektrického poľa priamo na katóde, podrobnejšie [6].

$$\begin{aligned}
 E_k(d) &\rightarrow 0 \\
 &\Downarrow \\
 x_0 &\rightarrow d \\
 \vec{E}(d) &\rightarrow 0 \\
 \nabla\varphi(d) &\rightarrow 0
 \end{aligned}$$

Samozrejme, uvedený záver je nutné chápať v podobe limít. Keby bola kinetická energia všetkých emitovaných elektrónov nulová, nemôže medzi elektródami tiecť prúd pri ľubovlnom napätí. V reálnom prípade môžu byť rýchlosti elektrónov veľmi malé ale nenulové.

V prípade nulovej kinetickej energie emitovaných elektrónov budú mať všetky elektróny na katóde **rovnakú** rýchlosť. Není teda nutné brať do úvahy štatistické rozdelenie a rozlišovať medzi strednou rýchlosťou a rýchlosťou konkrétnej častice. Môžem priamo písať pre rýchlosť elektrónu $v = \langle v \rangle$, $v^2 = \langle v^2 \rangle$.

Potenciál $\varphi(x)$ medzi elektródami je určený priloženým napätím a rozložením elektrónov v priestore a musí spĺňať *Poissonovu rovnicu*:

$$\Delta\varphi(x) = \frac{-\rho(x)}{\varepsilon_0} \quad (3.2a)$$

$$\frac{\mathbf{d}^2}{\mathbf{d}x^2}\varphi(x) = \frac{-\rho(x)}{\varepsilon_0} \quad (3.2b)$$

Pričom nábojovú hustotu ρ je možné vyjadriť pomocou plošnej hustoty prúdu j a rýchlosti elektrónov v :

$$\begin{aligned} \vec{j} &= (j, 0, 0) \\ \vec{v} &= (v, 0, 0) \\ j &= \rho v \end{aligned} \quad (3.3)$$

Zo *Zákona zachovania mechanickej energie* môžem napísať:

$$E_k(d) - e\varphi(d) = \frac{1}{2}m_e v^2(x) - e\varphi(x) \quad (3.4)$$

Potenciál v bode d kladiem $\varphi(d) = 0$, $E_k(d) = 0$ (m_e , $-e$ hmotnosť a náboj elektrónu).

Úpravou (3.4) dostanem:

$$\frac{1}{2}m_e v^2(x) = e\varphi(x) \quad (3.5a)$$

$$v < 0$$

$$v = - \left(\frac{2e\varphi(x)}{m_e} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.5b)$$

Po dosadení do (3.2b) dostanem diferenciálnu rovnicu druhého rádu [6]:

$$\frac{\mathbf{d}^2}{\mathbf{d}x^2}\varphi(x) = \frac{j}{\varepsilon_0} \left(\frac{m_e}{2e} \right)^{\frac{1}{2}} (\varphi(x))^{-\frac{1}{2}} \quad (3.6)$$

Na riešenie tejto rovnice je potrebné predpísať dve okrajové podmienky, obidve som už použil $\varphi(d) = 0$, $\frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d}x}\varphi(d) = 0$.

$$\begin{aligned}\frac{\mathbf{d}^2}{\mathbf{d}x^2}\varphi(x) &= \frac{j}{\varepsilon_0} \left(\frac{m_e}{2e}\right)^{\frac{1}{2}} (\varphi(x))^{-\frac{1}{2}} \quad / \cdot \frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d}x}\varphi(x) \\ \frac{1}{2} \frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d}x} \left(\frac{\mathbf{d}\varphi(x)}{\mathbf{d}x}\right)^2 &= \frac{j}{\varepsilon_0} \left(\frac{m_e}{2e}\right)^{\frac{1}{2}} (\varphi(x))^{-\frac{1}{2}} \frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d}x}\varphi(x) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{d}\varphi(x)}{\mathbf{d}x}\right)^2 &= \frac{j}{\varepsilon_0} \left(\frac{m_e}{2e}\right)^{\frac{1}{2}} 2(\varphi(x))^{\frac{1}{2}} - C\end{aligned}$$

Z okrajových podmienok $\frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d}x}\varphi(d) = 0$, $\varphi(d) = 0$ určím konštantu $C = 0$

$$\begin{aligned}(\varphi(x))^{-\frac{1}{4}} \frac{\mathbf{d}\varphi(x)}{\mathbf{d}x} &= 2 \left(\frac{j}{\varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{m_e}{2e}\right)^{\frac{1}{4}} \\ \frac{4}{3} (\varphi(x))^{\frac{3}{4}} &= 2 \left(\frac{j}{\varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{m_e}{2e}\right)^{\frac{1}{4}} (x - D)\end{aligned}$$

Z okrajovej podmienky $\varphi(d) = 0$ určím konštantu $D = d$.
Výsledný vzťah pre potenciál [6]:

$$\varphi(x) = \left(\frac{9j}{4\varepsilon_0}\right)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{m_e}{2e}\right)^{\frac{1}{3}} (x - d)^{\frac{4}{3}} \quad (3.7)$$

Po dosadení $U = \varphi(0)$ do rovnice (3.7) dostávam pre hustotu prúdu takzvaný *Langmuirov trojpolovicový vzťah*, v ktorom sa nevyskytuje žiadna termoemisioná veličina.

$$j(U) = \frac{4\varepsilon_0}{9d^2} \left(\frac{2e}{m_e}\right)^{\frac{1}{2}} U^{\frac{3}{2}} \quad (3.8)$$

Zo závislosti hustoty náboja je jasne viditeľné ako sa v okolí katódy vytvára priestorový náboj, ktorý odtieni napätie na elektródach:

$$\varphi(x) = U \left(\frac{x - d}{d}\right)^{\frac{4}{3}} \quad (3.9a)$$

$$\rho(x) = -\varepsilon_0 U \frac{4}{9} \left(\frac{1}{d}\right)^{\frac{4}{3}} \left(\frac{1}{x - d}\right)^{\frac{2}{3}} \quad (3.9b)$$

Všetky odvodené vzťahy majú obmedzenú platnosť, pokiaľ je termoemisioný prúd dostačujúci na vytváranie priestorového náboja a platí predpoklad

nulovej kinetickej energie emitovaných elektrónov. Po prekonaní istého kritického napätia už nieje emisia dostačujúca a prúd tečúci medzi elektródami začína závisieť na emisnom prúde katódy [6].

Užitočné je ešte odvodiť podiel emisného a celkového prúdu tečúceho medzi elektródami pri nenulovej kinetickej energii emitovaných elektrónov. Medzi elektródami sa vytvorí potenciálová jama práve v bode x_0 podľa (3.1). Na elektróny pôsobí sila v smere rastu potenciálu a elektróny sú teda elektrickou silou vytlačované von z potenciálovej jamy späť na katódu. Len málo z nich má dostatočnú rýchlosť na prekonanie tejto sily. Pre elektróny ktoré sú schopné prekonať potenciálovú jamu musí platiť že majú na jej dne v bode x_0 nenulovú kinetickú energiu:

$$\begin{aligned} E_k(x_0) &> 0 & \varphi(x_0) &= -\varphi_h \\ E_k(x_0) + eh &= E_k(d) > e\varphi_h \end{aligned} \quad (3.10a)$$

$$\frac{1}{2}m_e v^2(d) > e\varphi_h \quad (3.10b)$$

$$v < 0$$

φ_h predstavuje práve hĺbku potenciálovej jamy.

Predpokladám *Maxwell-Boltzmanovo rozdelenie* rýchlostí. Pravdepodobnosť, že sa elektrón nachádza v stave s rýchlosťou v .

$$P(v) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{(\frac{1}{2}m_e v^2 - e\varphi)}{k_B T}\right) \quad (3.11)$$

(k_B Boltzmanova konštanta, T teplota, Z normovacia konštanta.) Vyjadrim teda hustotu prúdu pre elektróny splňujúce podmienku (3.10b), treba pripomenúť $\varphi(d) = 0$.

$$j = \rho(d) \int_{-\infty}^{-v_0} v \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{m_e v^2}{2k_B T}\right) \mathbf{d}v \quad (3.12a)$$

$$\frac{1}{2}m_e v_0^2 = e\varphi_h \quad \text{podľa (3.10b)}$$

$$j = \frac{-\rho(d) k_B T}{Z m_e} \exp\left(-\frac{e\varphi_h}{k_B T}\right) \quad (3.12b)$$

Hustotu emisného prúdu z pravej elektródy, s x-ovou súradnicou d , môžem

písať ako:

$$j_s = \rho(d) \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^0 v \exp\left(-\frac{m_e v^2}{2k_B T}\right) \mathbf{d}v \quad (3.13a)$$

$$j_s = \frac{-\rho(d) k_B T}{Z m_e} \quad (3.13b)$$

Elektróny majú len jediný stupeň volnosti a je možné dať do súvislosti stredú kinetickú energiu jedného emitovaného elektrónu s teplotu:

$$\langle E_k(d) \rangle = \frac{1}{2} k_B T \quad (3.14)$$

Vydelením vzťahov (3.12b),(3.13b) dostávam pomer celkového a emisného prúdu:

$$\frac{j}{j_s} = \exp\left(-\frac{e\varphi_h}{2\langle E_k(d) \rangle}\right) \quad (3.15)$$

Vzorec (3.15) zodpovedá predstave, s nárastom hĺbky potenciálovej jamy skutočne klesá celkový prúd a tým aj pomer (3.15).

3.2 Popis programu XPDP1

Ako už bolo spomenuté, **XPDP1** je jednodimenzionálny elektrostatický program simulujúci plazma metódov *Particle in Cell* medzi dvomi rovinnými elektródami v kartézskych súradniciach s externým RLC obvodom. Schéma programu Obr. 3.1.

U **XPDP1** sa zapisujú počiatočné podmienky do vstupného súboru „meno.inp“, pričom aktuálny stav systému môže byť uložený v pomocnom súbore „meno.dmp“. Možnosti spúšťania programu sú popísané v nápovede získateľné obvyklým príkazom „xpdp1 -h“, v Obr. 3.2 je znázornené grafické rozhranie programu.

Vstupný súbor sa delí na dve časti, ktoré popisujú:

1. Globálne parametre systému.
2. Charakteristiké vlastnosti každého druhu častíc, ktorý sa vyskytuje v simulácii (ióny, elektróny, neutrálne častice).



Obrázok 3.2: Grafické rozhranie programu **XPDP1**.

Podrobný popis vstupného súboru a nastavení jednotlivých veličín spoločne s ovládaním programu je možné nájsť v manuáli [9]. Ja všetky vstupné hodnoty kôli obsiahlosti nebudem menovať a zameriam sa tie ktoré považujem za podstatné.

Nasledujúce parametre som použil pri všetkých simuláciách, pri ktorých nie je určená hodnota mením podľa potreby.

- Odpor, kapacita a indukčnosť externého obvodu:
 $extR = 0 \Omega$
 $extC = 10^{10} \text{ F}$
 $extL = 0 \text{ H}$
 Napätie zdroja:
 $V(t) = U$
 Pre $extR = 0$, $extL = 0$, $extC \rightarrow \infty$ sa jedná o zapojenie na krátko, pričom je napätie U priamo aplikované na elektródy.
- Veľkosť externého magnetického poľa $B = 0 \text{ T}$, rovnako sa na pozadí nevyskytuje žiadna fixná nábojová ani prúdová hustota.
- Tlak a teplota neutrálneho plynu pozadia:
 $p_{poz} = 1,33 \cdot 10^{-8} \text{ Pa} \cong 10^{-10} \text{ Torr}$
 $k_B T_{poz} = 0,026 \text{ eV}$
 ($T_{poz} = 301,7 \text{ K}$, k_B Boltzmanova konštanta)
 Simulácia prebieha vo vákuu, čím sa úplne potláča ionizácia. Niesu prítomné žiadne častice, ktoré by sa mohli ionizovať. V simulácii nepre-

bieha ani sekundárna emisia elektrónov. Všetky častice, ktoré dopadnú na elektródu sa okamžite pohltia.

- Plocha a vzdialenosť elektród:

$$S = 10^{-5} \text{ m}^2$$

$$d = 0,02 \text{ m}$$

Časový krok:

$$\Delta t = 4 \cdot 10^{-12} \text{ s}$$

Počet buniek: $nc = 500$

Počet častíc na jednu superčasticu: $nc2p = 8$.

Program samotný simuluje pohyb superčastíc, pričom každá predstavuje $nc2p$ častíc. Malo by platiť, že superčastica neprekoná za jeden časový krok väčšiu vzdialenosť ako je rozmer bunky.

$$v\Delta t \leq \frac{d}{nc} \quad (3.16)$$

V každej mojej simulácii je rýchlosť superčastíc menšia ako 10^7 ms^{-1} a tak je podmienka (3.16) vždy splnená.

Simulujem jediný druh častíc a to elektróny. Častice sa generujú s náhodnou rýchlosťou podľa *Maxwell-Boltzmanovho rozdelenia*. Pre každý druh častíc sa určujú nasledujúce vlastnosti:

- Hmotnosť a náboj častice:

$$m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$q_e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

- Driftová a tepelná rýchlosť v smere osi x :

$$v_{dx} = 0 \text{ ms}^{-1}$$

$$v_{tx} \text{ ms}^{-1}$$

V programe sa separátne určujú hodnoty pre $v > 0$ a $v < 0$, ja ich ale vždy zadávam zhodné.

- Driftová a tepelná rýchlosť v smere y, z :

$$v_{dy} = 0 \text{ ms}^{-1}$$

$$v_{ty} = 0 \text{ ms}^{-1}$$

$$v_{dz} = 0 \text{ ms}^{-1}$$

$$v_{tz} = 0 \text{ ms}^{-1}$$

Vzhľadom k tomu, že **XPDP1** je jednodimenzionálny program a každá častica sa môže pohybovať len v smere osi x , rýchlosť v smere y, z sa

určuje iba kôli pôsobeniu externého magnetického poľa $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$, ale v mojom prípade je vždy $B = 0$ T. Hodnoty v_{dy} , v_{ty} , v_{dz} , v_{tz} mi teda neovplyvňujú priebeh simulácie.

- Emisná prúdová hustota z ľavej a pravej elektródy:

$$J_{sL} = 0 \text{ Am}^{-2}$$

$$J_{sR} \text{ Am}^{-2}$$

- Počiatočná hustota častíc medzi elektródami: $n = 0 \text{ m}^{-3}$

Pri simuláciach už mením iba parametre: napätie U , tepelná rýchlosť v_{tx} , hustota emisného prúdu J_{sR} .

Elektróny sa emitujú na pravej elektróde (katóda) podľa *Maxwell - Boltzmannovho rozdelenia* s čiste tepelnou rýchlosťou v smere osi x .

Pre mňa bude ale výhodnejšie udávať miesto rýchlosti strednú kinetickú energiu emitovaných elektrónov. Vzťah medzi tepelnou rýchlosťou a strednou kinetickou energiou pre môj konkrétny prípad:

$$v_t^2 = \langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2 \quad (3.17a)$$

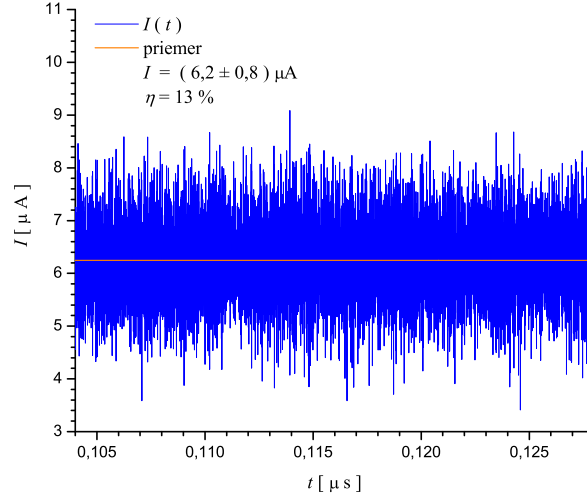
$$\langle E_k(d) \rangle = \frac{1}{2} m_e v_{tx}^2 \quad (3.17b)$$

Najdôležitejšie charakteristiky, ktoré mi program **XPDP1** vygeneruje sú závislosť potenciálu na x-ovej súradnici a prúdu na čase. Vzhľadom k tomu, že okamžitý prúd v čase výrazne fluktuuje, všetky hodnoty prúdu ktoré uvádzam sú už priemerované cez 6000 krokov. V Obr. 3.3 je znázornený ukázkový priebeh okamžitého prúdu v čase a je možné si vytvoriť predstavu o fluktuáciách.

Tabuľky [2] uvádzajú vzťah pre hustotu emisného prúdu:

$$j_s = 1,2 \cdot 10^6 T^2 \exp\left(-\frac{\Phi}{k_B T}\right) \quad (3.18)$$

Emisná sonda sa vyrába často z Wolfrámu, ktorého teplota topenia pri normálnom tlaku $T_{topenia} = 3660 \text{ K}$ a výstupná práca elektrónov $\Phi \simeq 4,5 \text{ eV}$ [2]. Podľa vzťahu (3.18) dosahuje hustota emisného prúdu maximálne $J_s \simeq 1 \cdot 10^7 \text{ Am}^{-2}$. Preto emisný prúd zásadne volím nižší ako je táto hodnota.



Obrázok 3.3: Priebeh okamžitého prúdu pri $U = 20 \text{ V}$, $\langle E_k(d) \rangle = 30 \text{ meV}$, prúd fluktuuje v intervale $\pm 13\%$.

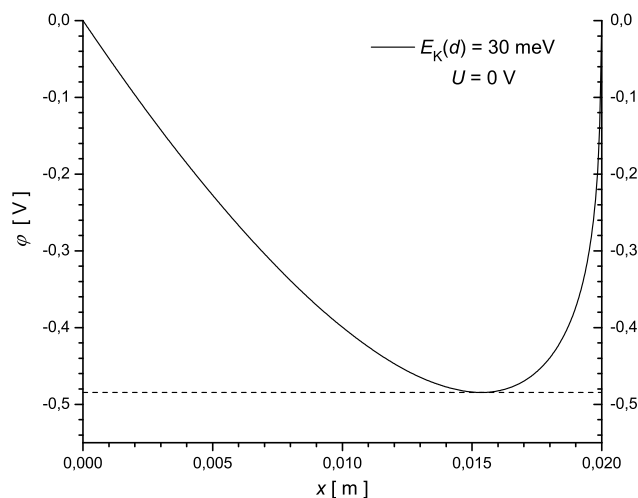
3.3 Nasimulované závislosti

Nasledujúce závislosti boli nasimulované pri parametroch:

$$\begin{aligned}
 J_{sR} &= 22 \text{ Am}^{-2} \\
 \langle E_k(d) \rangle &\in \langle 1, 300 \rangle \text{ meV} \\
 U &\in \langle 0, 200 \rangle \text{ V}
 \end{aligned}$$

Emisný prúd zodpovedá približne emisii Wolfrámu pri 2000 K. Zo vzťahu (3.14) odpovedá tejto teplote stredná kinetická energia elektrónov 86 meV.

V Obr. 3.4 je vykreslený typický priebeh potenciálu medzi elektródami pri nulovom napätí a strednej kinetickej energii emitovaných elektrónov 30 meV a podobne v Obr. 3.5 pri $U = 20 \text{ V}$, $\langle E_k(d) \rangle = 100 \text{ meV}$. Z priebehu potenciálu je jasne viditeľný bod minima s nulovou deriváciou, čo potvrdzuje predpoklad (3.1). Emisný prúd je teda dostatočný na vytvorenie priestorového náboja, ktorý odtieni napätie na elektródach. Práve existencia bodu s nulovou deriváciou je kľúčová pri odvodzovaní *Langmuirovho vzťahu*. Pri všetkých simuláciach teda dbám na existenciu tohto bodu, aby nebolo prekročené kritické napätie popísané na strane 13. Príkladom je priebeh poten-

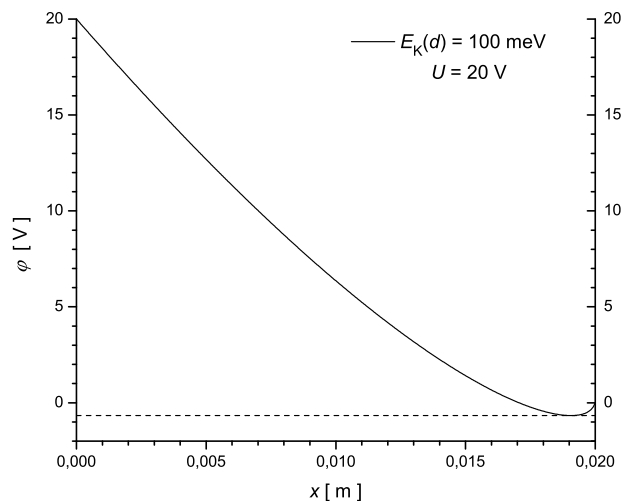


Obrázok 3.4: Priebeh potenciálu pri nulovom napätí a strednej kinetickej energii 30 meV.

ciálu pri napätí $U = 240 \text{ V}$, $\langle E_k(d) \rangle = 30 \text{ meV}$ v Obr. 3.6, keď už neexistuje žiadny bod, v ktorom by bola derivácia nulová.

Ako sa mení priebeh potenciálu medzi elektródami pri zmene strednej kinetickej energie emitovaných elektrónov je znázornené v Obr. 3.8, 3.9. Hĺbka potenciálovej jamy rastie s rastúcou energiou elektrónov, funkcia $h = h(\langle E_k \rangle)$ je vykreslená v Obr. 3.10. Nakoniec je v Obr. 3.11 znázornená zmena potenciálu pri zmene napätia na elektródach.

Ďalšou zaujímavou závislosťou je voltapérová charakteristika katódy pre rôzne energie emitovaných elektrónov. Typický priebeh VA-charakteristiky je vykreslený v Obr. 3.7 a podobne je v Obr. 3.15, 3.14 znázornené ako sa VA-charakteristika mení pri zmene energie. Nasimulované hodnoty prúdu som sa pokúsil preložiť funkciou $I(U) = a + bU^c$, vychádzam z *Langmuirovho vzťahu*. Predpokladám, že mocninný koeficient c by mal s klesajúcou energiou konvergovať k hodnote $3/2$. Prítomnosť koeficientu a je nutná, pri nenulovej kinetickej energii emitovaných elektrónov tečie prúd medzi elektródami aj



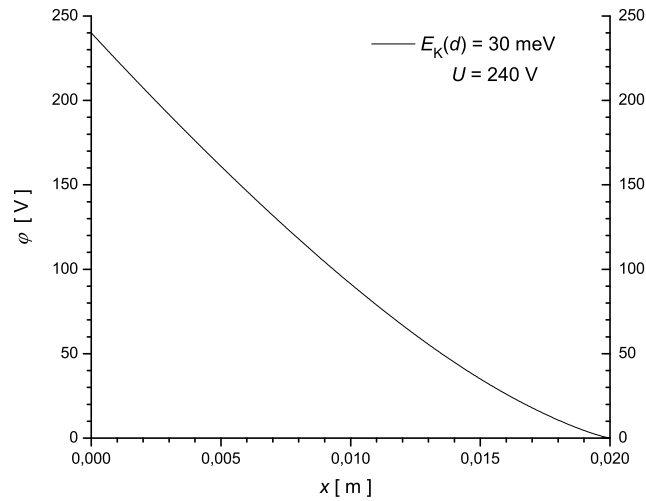
Obrázok 3.5: Priebeh potenciálu pri strednej kinetickej energii 100 meV a napätí 20 V.

pri nulovom napätí.

$$\begin{aligned}
 I(U) &= a + bU^c & (3.19) \\
 \langle E_k(d) \rangle &\rightarrow 0 \\
 c &\rightarrow \frac{3}{2}
 \end{aligned}$$

Aj keď funkcia (3.19) popisuje priebeh prúdu evidentne veľmi dobre, hodnota koeficientu c má tendenciu rásť s rastúcim počtom bodov, ktoré sú použité pri regresi, čo nasvedčuje, že sa nejedná o mocninnú závislosť. Funkcia $c = c(\langle E_k(d) \rangle)$ je vykreslená v Obr. 3.12, pričom pre $\langle E_k(d) \rangle < 20$ meV výrazne presahuje hodnotu 1,5.

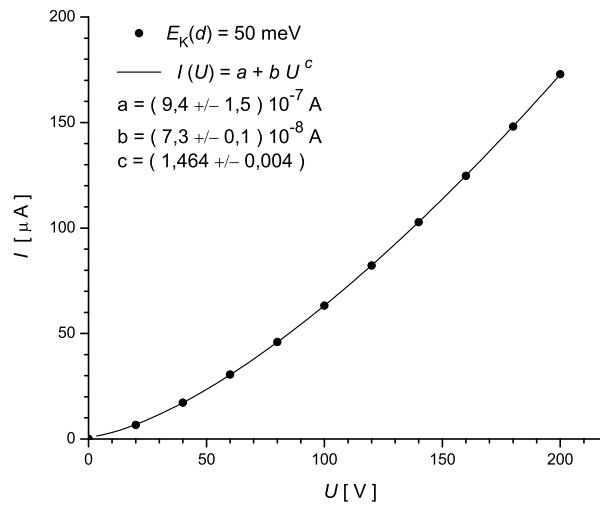
Áké presné sú jednotlivé simulácie a hodnoty z nich pochádzajúce? Priblížené posúdenie dáva vzťah (3.15) spájajúci hodnoty J_{sR} , E_k , ktoré sa zadávajú ako konštanty pri štarte programu, a hodnoty φ_h , I , ktoré získavam ako výsledok simulácie. Podľa vzťahu (3.15) teda môžem odhadnúť hustotu emisného prúdu j_o a porovnať ju so skutočnou hodnotou $J_{Rs} = 22 \text{ Am}^{-2}$, Obr. 3.13. Čím bližšie je odhad j_o k 22 Am^{-2} , tým presnejší výsledok dáva simulácia. Výsledky pre energie menšie ako 20 meV sa znovu výrazne líšia od prepokladu.



Obrázok 3.6: Priebeh potenciálu pri $U = 240 \text{ meV}$, $\langle E_k(d) \rangle = 30 \text{ meV}$.

Celkovo sú mnou vykonané simulácie so strednou kinetickou energiou emitovaných elektrónov menšiou ako 20 meV problematické a výrazne sa odlišujú od teórie:

- Regresný koeficient c funkcie prúdu na napätí (3.19) je u týchto energií väčší ako 1,5.
- Samotná voltampérová charakteristika leží pod *Langmuirovou krivkou*, ktorá predstavuje najmenší možný prúd, ktorý môže medzi elektródami tečť. *Langmuirov vzťah* bol odvodený za predpokladu $\langle E_k(d) \rangle \rightarrow 0$ a pri akejkoľvek energii $\langle E_k(d) \rangle > 0$ musí teda tečť väčší prúd medzi elektródami.
- V Obr. 3.13 je viditeľný jasný odklon odhadovanej hustoty emisného prúdu od skutočnej hodnoty. Pomer celkového a emisného prúdu (3.15) je veľmi malý, menší ako 0,02 %. To predstavuje situáciu, keď na anódu dopadne len niekoľko superčastíc za 6000 krokov, každá z nich výrazne mení celkový prúd medzi elektródami a spôsobuje vysoké fluktuácie.



Obrázok 3.7: Voltampérová charakteristika pri strednej kinetickej energii 50 meV.

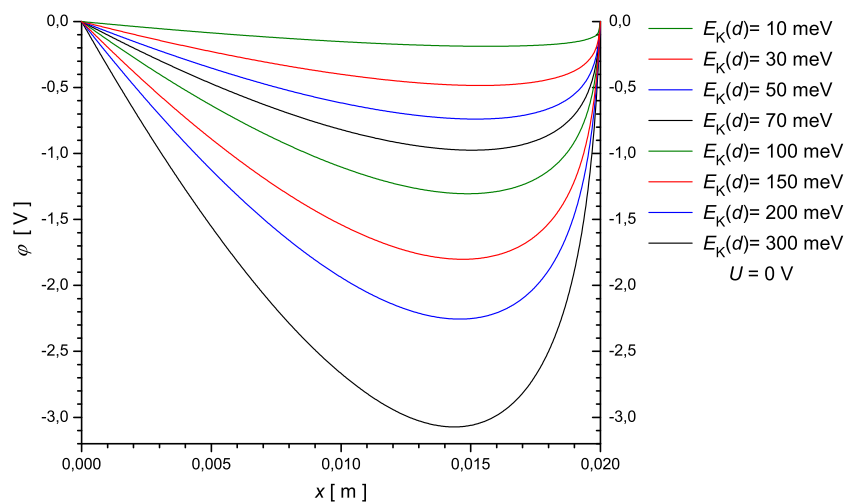
3.4 Rady k nastaveniu programu XPDP1

Najhoršie výsledky som dosiahol pri nízkom pomere celkového a emisného prúdu (3.15). Pre pripomenutie celkový prúd medzi elektródami nezávisí na emisnom prúde, zmenou emisného prúdu je teda možné získať lepší výsledok. Najhladší priebeh charakteristík sa dosiahne pri čo najmenšej veľkosti superčastice. Čím väčší počet superčastíc tým sa relatívne viac potláčajú fluktuácie. Ideálne predstavuje jedna superčastica práve jednu reálnu časticu.

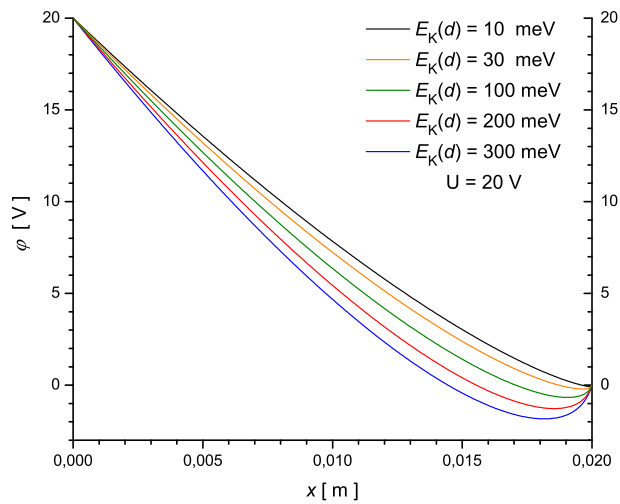
Hustota emisného prúdu musí byť dostačujúca na vytvorenie priestorového náboja v okolí katódy. Inak povedané, s klesajúcou hustotou emisného prúdu klesá aj kritické napätie, za ktorým už nieje emisia dostatočná.

Návrh ako nastaviť vstupné parametre programu **XPDP1**:

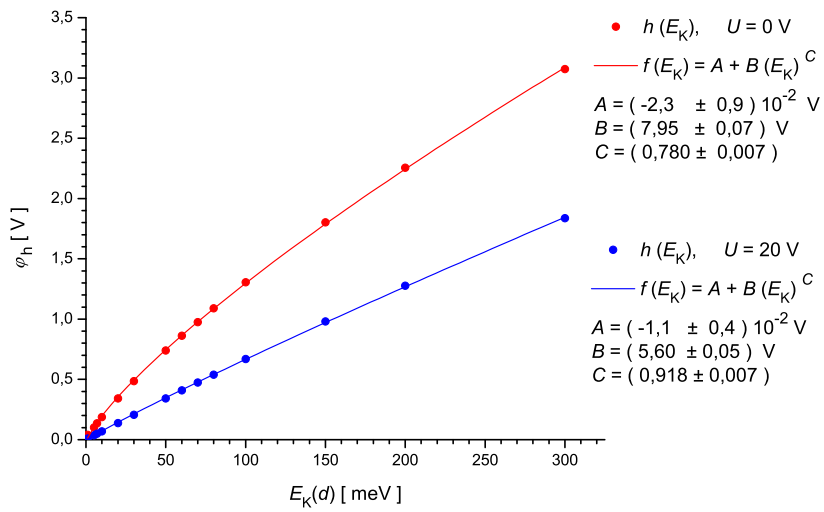
1. Rozhodnúť pri akom maximálnom napätí budú prebiehať simulácie.
2. Metódou „nástreľu“ určiť približne minimálnu hustotu emisného prúdu.
3. Upraviť plochu elektród a veľkosť superčastice, tak aby sa simuloval čo najväčší počet malých superčastíc.



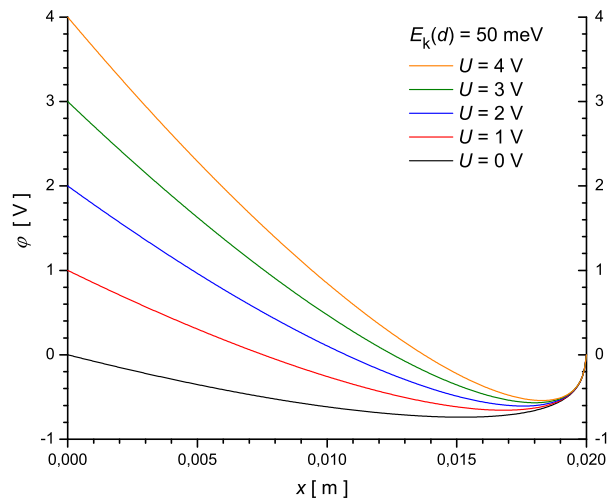
Obrázok 3.8: Závislosť priebehu potenciálu na strednej kinetickej energii pri $U = 0$ V.



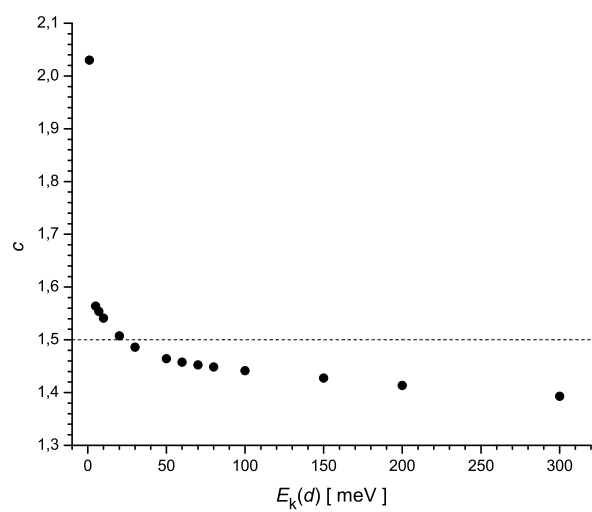
Obrázok 3.9: Závislosť priebehu potenciálu na strednej kinetickej energii pri $U = 20$ V.



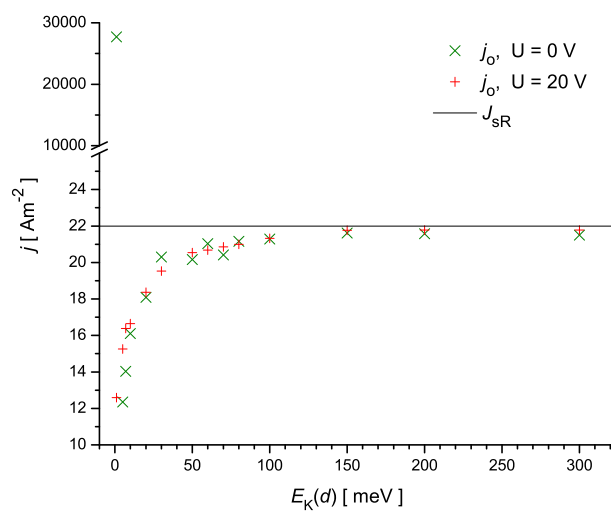
Obrázok 3.10: Hĺbka potenciálovej jamy.



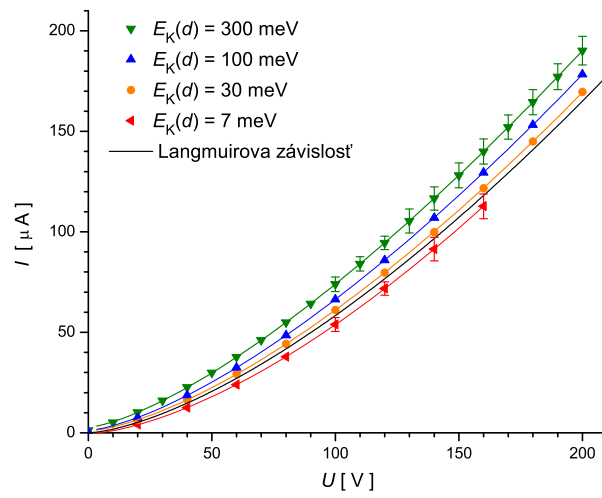
Obrázok 3.11: Zmena priebehu potenciálu pri zmene napätia, $E_k(d) = 50 \text{ meV}$.



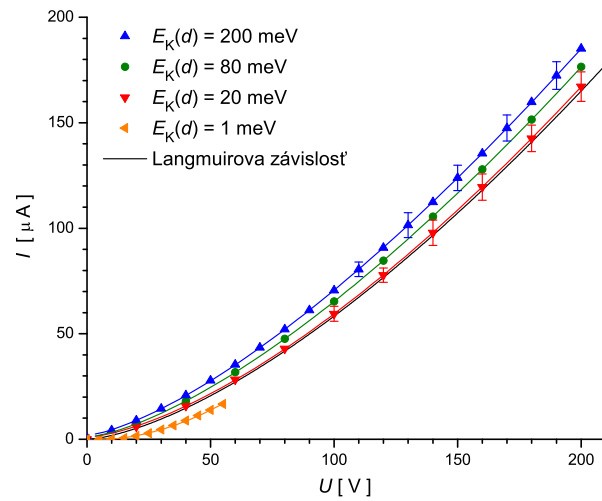
Obrázok 3.12: Závislosť regresného koeficientu $c = c(\langle E_k(d) \rangle)$.



Obrázok 3.13: Porovnanie skutočnej a odhadnutej hustoty emisného prúdu.



Obrázok 3.14: Zmena voltampérovej charakteristiky pri zmene energie emitovaných elektrónov.



Obrázok 3.15: Zmena voltampérovej charakteristiky pri zmene energie emitovaných elektrónov.

Kapitola 4

Záver

Program **XPDP1** má najväčšie problémy nasimulovať situáciu pri nízkom pomere celkového a emisného prúdu, keď sa na celkovom prúde medzi elektródami podiela iba minimum častíc. Táto situácia nastáva práve pri malej strednej kinetickej energii emitovaných elektrónov, v mojich simuláciach pri energii menšej ako 20 meV. Túto hodnotu považujem za hranicu presnosti programu.

Simulácie potvrdili existenciu priestorového náboja v okolí katódy, ktorý odtieni vonkajšie elektrické pole a vytvára typický priebeh potenciálu s bodom minima vid' Obr. 3.4. V bode minima nepôsobí na elektróny žiadna elektrická sila. Hĺbka potenciálovej jamy rastie s rastúcou strednou kineticou energiou a podľa očakávania klesá s rastúcim napätím na elektródach vid' Obr. 3.8, 3.11.

Nasimulované voltampérové charakteristiky sa blížia k *Langmuirovmu vzťahu*, ale tiež poukazujú na obmedzujúce predpoklady jeho odvodenia popísané na strane 14.

Pokračovaním práce by mohla byť simulácia valcovej a guľovej emisnej sondy pomocou jednodimenzióálnych programov **XPDC1**, **XPDS1**, následne prechod do viacerých rozmerov. To sú už ale úlohy pre môjho nástupcu.

Literatúra

- [1] Birdsall C.K. a Langdon A.B. (1991): *Plasma physics via computer simulation*, Adam Higler, 3–27, 309–315.
- [2] Brož J., Roskovec V., Valouch M. (1980): *Fyzikální a matematické tabulky*, SNTL, Nakladatelství technické literatury, Praha, 70–71, 112.
- [3] Chen F. F. (1984): *Úvod do fyziky plazmatu*, Academia, Praha, 17–31.
- [4] Kudrna P. (1993): *Sondová diagnostika plazmatu v přechodovém režimu tlaků*, Diplomová práce, Praha, 7–10.
- [5] Pfau S., Tichý M. a další (15th February 2001): *Low Temperature Plasma Physics, Fundamental Aspects and Applications*, WILEY-VCH Verlag Berlin GmbH, 9–12.
- [6] Sedlák B., Štoll I. (2002): *Elektřina a magnetismus*, Academia, Praha, 453–458.
- [7] Vahedi V., Birdsall C.K., Lieberman M.A., DiPeso G. a Rognlien T.D. (July 1993): *Verification of frequency scaling laws for capacitive radio-frequency discharges using two-dimensional simulations*, Phys. Fluids B 5 (7), pp. 2719–2729.
- [8] Vahedi V. a DiPeso G. (1997): *Simultaneous Potential and Circuit Solution for Two-Dimensional Bounded Plasma Simulation Codes*, J. Comp. Phys. 131, pp. 149–163.
- [9] Vahedi V., Verboncoeur J.P., Birdsall C.K.: *XPDP1, Plasma device 1 dimensional bounded electrostatic code, Reference manual*, xpdp1.ps
- [10] Verboncoeur J.P., Alves M.V., Vahedi V. a Birdsall C.K. (February 1993): *Simultaneous Potential and Circuit Solution for 1d bounded Plasma Particle Simulation Codes*, J. Comp. Physics, 104, pp. 321–328.
- [11] <http://ptsg.eecs.berkeley.edu/>

Dodatok A

Príklad vstupného súboru

Jedná sa o vstupný súbor „katoda_20V.inp“, ktorý bol použitý na simulovanie elektrónového oblaku pri podmienkach $\langle E_k(d) \rangle = 30 \text{ meV}$, $U = 20 \text{ V}$, $J_{sR} = 22 \text{ Am}^{-2}$.

```
katoda.inp
--nsp---nc---nc2p---dt[s]---length[m]---area[m^2]---epsilon---B[Tesla]---PSI[D]---
  2   500   8   4e-12   0.02   1e-5   1.0   0.0   0.0

--rhoback[C/m^3]---backj[Amp/m^2]---dde---extR[Ohm]---extL[H]---extC[F]---q0[C]-
  0.0   0.0   0.0   0   0.0   1e10   0.0

--dcramped---source---dc[V|Amp]---ramp[(V|Amp)/s]---ac[V|Amp]---f0[Hz]---theta0[D]-
  0   v   20   0.0   0.0   0.0   0.0

--secondary---e_collisional---i_collisional---reflux---nfft---n_ave---nsmoothing---ntimestep---
  0   1   2   0   256   256   5   0

--seec(electrons)---seec(ions)---ion species---Gpressure[Torr]---GTemp[eV]---imp---
  0.0   0.0   2   1e-10   0.026   0

---GAS---psource---nstrt---vol_source---begin_pt---end_pt---ionization_energy
  1   0   0   0   0   0.03   0

SPECIES 1

----q[C]-----m[Kg]-----j0L[Amp/m^2]---j0R[Amp/m^2]----initn[m^-3]----k---
-1.602e-19   9.11e-31   0.0   22   0.0   1

--vx0L[m/s]---vxtL[m/s]---vxcL[m/s]---vxLloader(0=RNDM,1=QS)---
  0.0   1.0272e+05   0.0   1

--vx0R[m/s]---vxtR[m/s]---vxcR[m/s]---vxRloader
  0.0   1.0272e+05   0.0   1

--v0y[m/s]---vty[m/s]---vyloader---v0z[m/s]---vtz[m/s]---vzloader---
  0.0   0   1   0.0   0   1
```

```

--nbin---Emin[eV]---Emax[ev]---max-np--
  50      0.0      10.0      30000000

-For-Mid-Diagnostic--nbin---Emin[eV]---Emax[eV]---XStart--XFinish--
                    100      0.01      15.0      0.045      0.055

-For-vel_dist-vx_lower-vx_upper-nxbin-vy_lower-vy_upper-nybin-vz_lower-vz_upper-nzbin-
      -1.5e6      1.5e6      0      -1.5e6      1.5e6      0      -1.5e6      1.5e6      0

SPECIES 2

----q[C] ----m[Kg]---j0L[Amp/m^2]---j0R[Amp/m^2]----initn[m^-3]----k---
  1.602e-19      3.6e-29      0.0      0.0      0.0      1

--vx0L[m/s]---vxtL[m/s]--vxcL[m/s]---vxLloader(0=RNDM,1=QS)--
  0.0      9e3      0.0      1

--vx0R[m/s]---vxtR[m/s]--vxcR[m/s]---vxRloader
  0.0      9e3      0      1

--v0y[m/s]---vty[m/s]---vyloader---v0z[m/s]---vtz[m/s]--vzloader--
  0.0      0.0      1      0.0      0.0      1

--nbin---Emin[eV]---Emax[ev]---max-np--
  50      0.0      10.0      30000000

-For-Mid-Diagnostic--nbin---Emin[eV]---Emax[eV]---XStart--XFinish--
                    100      0.01      15.0      0.045      0.055

-For-vel_dist-vx_lower-vx_upper-nxbin-vy_lower-vy_upper-nybin-vz_lower-vz_upper-nzbin-
      -1.5e6      1.5e6      0      -1.5e6      1.5e6      0      -1.5e6      1.5e6      0

```

Dodatok B

CD-rom

Na priloženom CD-ROM disku je uložený pre každú vykonanú simuláciu vstupný súbor, nagenovaný priebeh potenciálu a časový priebeh okamžitého prúdu. Súbory sú triedené do stromovej štruktúry podľa strednej kinetickej energie emitovaných elektrónov a priloženého napätia na katódach.