

Univerzita Karlova v Praze  
Matematicko-fyzikální fakulta

## DIPLOMOVÁ PRÁCE



Marek Laca

### **Modelování kladného sloupce doutnavého výboje v kyslíku v oblasti středních tlaků**

Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Vedoucí diplomové práce: Doc. RNDr. Věra Hrachová, CSc.

Studijní program: Fyzika, matematické a počítačové  
modelování ve fyzice a technice

2010

Rád by som poďakoval vedúcej svojej diplomovej práce Doc. RNDr. Věře Hrachovej, CSc. za odbornú pomoc pri príprave diplomovej práce, podklady a nepostrádateľné rady. Moje poďakovanie patrí tiež prof. RNDr. Rudolfovi Hrachovi, DrSc. za ochotu vždy pomôcť a poradiť, RNDr. Adolfovi Kaňkovi, Dr. a Mgr. Lukášovi Schmiedtovi za ochotné poskytnutie výsledkov svojich experimentálnych meraní. Ďalej by som rád poďakoval Doc. Mgr. Pavlovi Kudrnovi, Dr. za pomoc pri vyhodnotení spomínaných meraní.

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

V Prahe dňa 1.8.2010

Marek Laca

# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod a cieľ práce</b>	<b>6</b>
<b>2</b>	<b>Prehľad literatúry</b>	<b>7</b>
2.1	Plazma . . . . .	10
2.2	Dútnavý výboj . . . . .	10
2.3	Pozitívny stĺpec v kyslíku . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Teória spojitého popisu plazmatu</b>	<b>14</b>
3.1	Bolzmannova kinetická rovnica . . . . .	14
3.2	Poruchová teória a Boltzmannova kinetická rovnica . . . . .	15
3.3	Zrážkový člen . . . . .	17
3.4	Koeficient difúzie . . . . .	19
<b>4</b>	<b>Model</b>	<b>20</b>
4.1	Systém rovníc . . . . .	20
4.2	Vstupné dáta . . . . .	21
4.3	Evolučný model . . . . .	24
4.4	Výsledky evolučného modelu . . . . .	25
4.5	Stacionárny model s difúziou . . . . .	39
<b>5</b>	<b>Záver a diskusia</b>	<b>41</b>
<b>A</b>	<b>Zoznam reakcií a častíc</b>	<b>43</b>
<b>B</b>	<b>Dvojsondové merania</b>	<b>47</b>
<b>C</b>	<b>Existencia riešenia stacionárneho problému</b>	<b>50</b>
	<b>Literatúra</b>	<b>56</b>

Název práce: Modelování kladného sloupce doutnavého výboje v kyslíku v oblasti středních tlaků

Autor: Marek Laca

Katedra (ústav): Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Vedoucí diplomové práce: Doc. RNDr. Věra Hrachová, CSc.

e-mail vedoucího: HRACHOVA@mbox.troja.mff.cuni.cz

Abstrakt: Úlohou prezentovanéj práce bolo vytvoriť model pozitívneho stĺpca dútnavého výboja v kyslíku v oblasti stredných tlakov (100 -1000 Pa) metódami počítačovej fyziky, konkrétne metódou chemickej kinetiky. Zameral som sa na existenciu dvoch foriem pozitívneho stĺpca výboja v kyslíku, nízko a vysokogradientnú formu s axiálnym elektrickým poľom rádovo 100 V/m a 1 kV/m. Vytvoril som spojitý model nízkoteplotného plazmatu ako stacionárne riešenie rovnice kontinuity so zanedbaním divergentného členu. Model zahrnuje dvanásť rôznych druhov častíc a reakcie medzi nimi: elektróny, základné a excitované stavy atomárneho a molekulárneho kyslíku, samozrejme negatívne a pozitívne ióny.

Za konštantného tlaku som numericky riešil časový vývoj koncentrácie častíc, pokiaľ systém nedosiahol rovnovážny stav. Moje numerické výsledky boli porovnané s experimentálnymi meraniami, ktoré boli vykonané na Katedre fyziky povrchoch a plazmatu. Aby som získal zhodu medzi mojimi a experimentálnymi výsledkami, bolo nutné variovať reakčné koeficienty reakcií, v ktorých dochádza k produkcii náboja.

Klíčová slova: modelovanie, plazma, pozitívny stĺpec, výboj v kyslíku

Title: Modelling of glow discharge positive column of oxygen in the middle pressures region

Author: Marek Laca

Department: Department of Surface and Plasma Science

Supervisor: Doc. RNDr. Věra Hrachová, CSc.

Supervisor's e-mail address: HRACHOVA@mbox.troja.mff.cuni.cz

Abstract: The aim of the presented work was to create model of the glow discharge positive column of the oxygen in the middle pressures (in range 100-1000 Pa) with the methods of the computer physics, specifically with the method of the chemical kinetics. I have focused on the existence of two forms of the discharge positive column in the oxygen, low and high gradient form with axial electrical field about 100 V/m and 1 kV/m. I developed continuous model of the low temperature plasma as the steady state solution of the continuity equation with the neglected divergent member. The model involves twelve different kinds of the particles and reactions among them: electrons, ground and excited states of the atomic and molecular oxygen, of course negative and positive ions. I had numerically solved time evolution of the particle concentration at constant pressure, until the system reached equilibrium state. My numerical results were compared with experimental measurements of the electron density, which had been done in the Department of Surface and Plasma Science. To get a consistency between my results and experimental ones for electron density, I had to variate reaction coefficients of the reactions in which charged particles are produced.

Keywords: modelling, plasma, positive column, discharge in oxygen

# Kapitola 1

## Úvod a cieľ práce

Cieľom mojej práce je vytvoriť model nízкотеплотného plazmatu so zameraním na modelovanie kladného stĺpca dútnavého výboja v čistom kyslíku v oblasti stredných tlakov ( $\sim N \cdot 100$  Pa). Používam postupy počítačovej fyziky a to hlavne metódu chemickej kinetiky. Pri modelovaní beriem do úvahy existenciu dvoch foriem kyslíku, ktoré sa obyčajne vyskytujú v pozitívnom stĺpci za stredných tlakov. Obidve formy sa líšia vo svojich parametroch, ako je napr. pozdĺžne elektrické pole, pomer atomárneho a molekulárneho kyslíku. V práci nadväzujem na experimentálne merania realizované na *Katedre fyziky povrchov a plazmatu*, výsledky experimentov sú vstupnými dátami pre môj model.

V nasledujúcej kapitole najskôr popisujem rôzne postupy modelovania plazmatu s príkladmi prác, ktoré sa daným modelom zaoberajú. V častiach 2.1 - 2.3 sa postupne zaoberám vlastnosťami plazmatu, zameriavam sa konkrétne na dútnavý výboj a špeciálne na oblasť pozitívneho stĺpca. V tretej kapitole sa zaoberám spojitým popisom plazmatu, Boltzmannovou kinetickou rovnicou a z nej odvodzujem rovnicu kontinuity. V časti 3.2 konkrétne popisujem koeficient difúzie a mobility, ich vlastnosti a odvodenie z poruchovej teórie. Následne v časti 3.3 uvádzam spôsob výpočtu reakčných koeficientov. Predposledná štvrtá kapitola obsahuje predpoklady odvodenie a výsledky môjho modelu. V Závere je zhrnutie a plány budúceho postupu.

# Kapitola 2

## Prehľad literatúry

Existujú dva základné smery modelovania plazmatu a ich vzájomné kombinácie:

**Časticové modelovanie**, kedy sú riešené priamo pohybové rovnice súboru častíc v reprezentatívnom objeme plazmatu. Jedná sa teda o výpočet trajektórie každej častice (iontov, elektrónov a neutrálov) na základe pôsobiacich síl. Do úvahy sa zahŕňajú externé sily aj vzájomné pôsobenie častíc. Príkladom takej metódy je *Particle in Cell - Monte Carlo Collision (PIC-MCC)*, popis je napríklad v prácach [2], [24], [25]. Metódou *PIC-MCC* využívajú programy **XPDP1**, **XPDC1**, **XPDS1**, **XPDP2** vyvinuté skupinou **PTSG** (The Plasma Theory and Simulation Group, EECS Department, University of California, Berkeley), ktorými sa zaoberám vo svojej bakalárskej práci [15]. Časticové modely dávajú síce podrobný mikroskopický popis ale sú výpočetne vysoko náročné.

**Spojité modelovanie**, ktoré zahŕňa *modelovanie Boltzmannovej kinetickej rovnice, chemickú kinetiku a difúzne modely*. Tieto modely aproximujú vlastnosti jednotlivých častíc spojitými veličinami ako je rozdeľovacia funkcia, koncentrácia, rýchlosť atď.

Príkladom modelu, berúci do úvahy ambipolárnu difúziu s chemickou kinetikou pozitívneho stĺpca v argóne, je práca [10]. Autori modelujú časový vývoj radiálneho priebehu koncentrácie iontov  $Ar_2^+$ ,  $Ar^+$ , elektrónov  $e$ , neutrálnych častíc  $Ar$ , metastabilných atómov  $Ar^*$  za predpokladu kvazineutrality. Model fitujú na nameraný priebeh koncentrácie elektrónov a následne predpovedajú vývoj koncentrácie metas-

tabilných atómov. Článok s podobným zameraním a modelom autorov Pavlík a kol. [17].

Dôležitá je práca Miroslava Vichera [26], ktorý sa vo svojej dizertačnej práci modeluje koncentrácie častíc v pozitívnom stĺpci metódami chemickej kinetiky a skúma možný vplyv difúzie. Berie do úvahy rozsiahly súbor častíc a vzájomných reakcií medzi nimi. Určuje váhu a príspevky jednotlivých reakcií do celkovej bilancie častíc. Ďalej počíta vplyv zrážok na rozdeľovaciu funkciu elektrónov riešením Boltzmannovej kinetickej rovnice.

Významná a komplexná je práca Dettmera [5], ktorý kombinuje experimentálny prístup s počítačovým modelovaním, výsledky modelovania porovnáva a následne fituje na experimentálne dáta.

Zaoberá sa riešením bilančnej rovnice pre dodaný výkon a energetické straty za predpokladu, že práca vykonaná vonkajším elektrickým poľom v jednotke objemu je radiálne aj axiálne homogénna. (Tento predpoklad vedie na homogénne rozloženie koncentrácie elektrónov.) Porovnáva numerické riešenie s meraním, čo mu slúži následne na určovanie redukovaného elektrického poľa.

Rezonančnou metódou meria koncentráciu elektrónov a porovnáva ju s teoretickým modelom. Vychádza s vyjadrenia výbojového prúdu v závislosti na radiálnom rozložení elektrónov.

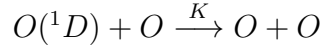
Dettmer vo svojej práci rieši Boltzmannovu kinetickú rovnicu pre elektróny a počíta reakčné koeficienty a driftovú rýchlosť pre rôzne hodnoty redukovaného elektrického poľa, výsledky mu slúžia ako vstupné dáta pre model chemickej kinetiky.

Model chemickej kinetiky aplikuje na vysokogradientnú formu kyslíku a dochádza k záverom, že prevažujúcou formou iontov sú  $O_2^+$ ,  $O^-$ . V oblasti prechodu medzi vysokogradientnou a nízkogradientnou formou dochádza k vyrovnaniu koncentrácie atomárnych a molekulárnych negatívnych iontov. Podľa Dettmera excitovaný stav  $O_2(a^1\Delta)$  hrá dôležitú úlohu pri dvojestupňovej ionizácii a produkcii elektrónov. V oblasti prechodu dochádza k vyrovnaniu procesov záchytu a odlepenia elektrónov, kde hrajú dôležitú úlohu práve častice  $O$  a  $O_2(a^1\Delta)$ .

Ako zdroj vstupných konštánt (mobility, difúzie, reakčných koeficientov) mi poslúžila rozsiahla práca autorov Eliasson a Kogelschatz [7] a tento súbor reakcií som doplnil o štyri reakcie z práce Vichera [26]. Ako sa ukázalo, tieto reakcie hrajú zanedbateľnú úlohu v mojom modeli.

Ďalším možným zdrojom reakčných koeficientov sú práce [23], [9], [1]. Hod-

noty reakčných koeficientov sa môžu značne líšiť podľa literatúry, napr.:



$K = 8,0 \cdot 10^{-12} \text{ cm}^3/\text{s}$  podľa [7] alebo  $K = 7,5 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{s}$  podľa [9].

Zdroj vstupných dát sú pre mňa experimentálne merania, vykonané na *Katedre fyziky povrchov a plazmatu*, Lukáša Schmiedta, Adolfa Kaňku a hlavne práca Viery Řezáčovej [20].

Práca sumarizujúca základné fyzikálne a chemické konštanty autorov Mohr a kol. [16], ktoré som použil vo svojom modeli:

$$\text{Boltzmannova konštanta} \quad k = 1,380\,650\,4 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \quad (2.1)$$

$$\text{hmotnosť elektrónu} \quad m_e = 9,109\,382\,15 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \quad (2.2)$$

$$\text{atómová hmotnosť kyslíku} \quad Mr(O) = 15,994\,914\,619\,56 \text{ g mol}^{-1} \quad (2.3)$$

$$\text{Avogadrova konštanta} \quad N_A = 6,022\,141\,79 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} \quad (2.4)$$

$$\text{elementárny náboj} \quad e = 1,602\,176\,487 \cdot 10^{-19} \text{ C} \quad (2.5)$$

$$\text{permitivita vákua} \quad \epsilon_0 = 8,854\,187\,817 \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1} \quad (2.6)$$

Prevodové vzťahy:

$$1 \text{ J} = 6,241\,509\,65 \cdot 10^{18} \text{ eV} \quad (2.7)$$

$$1 \text{ eV} = 1,602\,176\,487 \cdot 10^{-19} \text{ J} \quad (2.8)$$

$$1 \text{ eV} (/k) = 11604,505 \text{ K} \quad (2.9)$$

$$1 \text{ K} (\cdot k) = 8,617\,343 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \quad (2.10)$$

$$1 \text{ J} (/k) = 7,242\,963 \cdot 10^{22} \text{ K} \quad (2.11)$$

$$1 \text{ K} (\cdot k) = 1,380\,650\,4 \cdot 10^{-23} \text{ J} \quad (2.12)$$

$$1 \text{ Torr} = 133,322 \text{ Pa} \quad (2.13)$$

$$1 \text{ Td} = 10^{-17} \text{ V cm}^2 \quad (2.14)$$

## 2.1 Plazma

Plazmatom sa väčšinou rozumie: „Kvazineutrálny plyn nabitých a neutrálnych častíc, ktorý vykazuje kolektívne chovanie“, ako uvádza Chen [3].

**Kolektívnym chovaním** rozumiem pohyb častíc, ktorý závisí na celkových podmienkach plazmatu a jeho priestorovom rozložení. Častice sa vzájomne ovplyvňujú aj na veľké vzdialenosti, napr. pôsobením elektromagnetických síl.

**Kvazineutralita** znamená, že hustota priestorového náboja v danom mieste je približne nulová. Môže ale dochádzať k lokálnym poruchám koncentrácie náboja.

Pričom elementárny objem musí obsahovať dostatočný počet častíc, aby bolo možné hovoriť o kolektívnom chovaní. Čo je to elementárny objem silne závisí na konkrétnom type plazmatu.

Plazma je prevládajúcim stavom hmoty vo vesmíre, často sa nazýva štvrtým skupenstvom hmoty. Príkladom výskytu plazmatu sú medzihviezdne hmloviny, hviezdy, slnečný vietor a z pozemského plazmatu hlavne výboje v plynoch, plazmochemické reaktory, lasery [3].

## 2.2 Dútnavý výboj

Dútnavý výboj je príkladom nízkoteplotného pozemského plazmatu, ktorý je udržiavaný v dynamickej rovnováhe pomocou externého elektrického poľa. Charakteristika dútnavého výboja, ako uvádza Kracík [13]:

- Vysoký katódový spád  $U_k \sim 100V$ .
- Výboj za nižších tlakov  $p \in [13, 1300] \text{ Pa}$  ( $0, 1 - 10 \text{ Torr}$ ).
- Nízky výbojový prúd  $I \in [1, 100] \text{ mA}$ .
- Nízkoteplotné plazma, teplota elektrónov mnohonásobne prevyšuje teplotu neutrálov  $T_e \gg T_g$ .

Dútnavý výboj sa dá rozčleniť na (Obr. 2.1):

**Katódovú oblasť** , ktorá sa skladá z Astonovho temného priestoru (Aston dark space), katódového svetla (Cathode glow), temného katódového priestoru (Dark cathode space), záporného dútnavého svetla (Negative glow), Faradajovho temného priestoru (Faraday dark space). Vlastnosti katódovej oblasti závisia na pracovnom plyne, materiálu katódy a určujú stabilitu výboja. Dochádza tu k prudkému spádu potenciálu, čo vytvára silné elektrické pole, nezanedbateľný je drift elektrónov v elektrickom poli. Elektróny opúšťajúce elektródu sú silne urýchľované, až dosiahnu v priestore katódového svetla excitačnú energiu, kde dominujú excitačné zrážky. Časť elektrónov preletí bez výrazných energetických strát do temného katódového priestoru, kde dosiahnu ionizačnú energiu častíc plynu. V oblasti záporného dútnavého svetla následne prebiehajú prakticky všetky procesy excitácia, ionizácia, rekombinácia . . . .

**Pozitívny stĺpec** (Positive column) je oblasť so slabým pozdĺžnym elektrickým polom, kde prevládajú procesy excitácie, ionizácie a ambipolárna difúzia nabitých častíc ku stenám trubice. Na stenách následne prebieha rekombinačný zánik nabitých častíc. Pozdĺžne elektrické pole v pozitívnom stĺpci býva v molekulárnych plynach rádovo  $\sim 1$  kV/m a v inertných plynach  $\sim 100$  V/m.

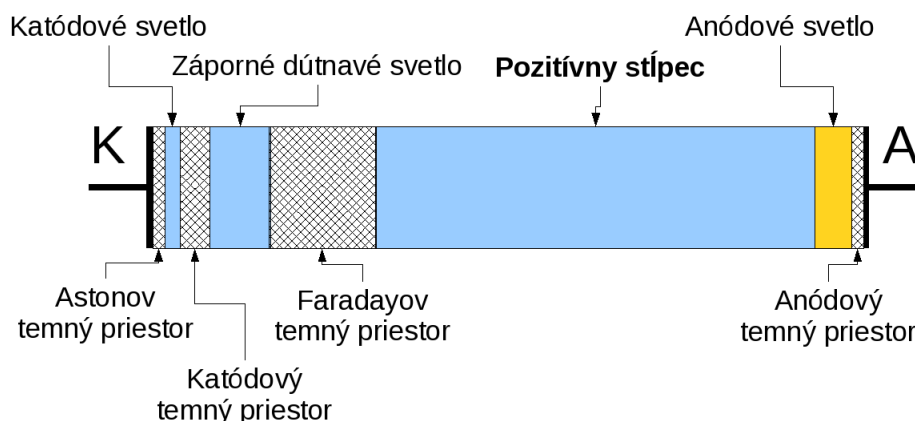
**Anódovú oblasť** , ktorá sa skladá z anódového svetla (Anode glow) a anódového temného priestoru (Anode dark space). V anódovej oblasti dochádza znovu k nárastu elektrického poľa, ale anódový spád je mnohonásobne nižší ako katódový. V anódovej oblasti sa vytvára záporný priestorový náboj, ktorý oddeľuje pozitívny stĺpec od anódy.

## 2.3 Pozitívny stĺpec v kyslíku

Mojím cieľom je modelovať práve oblasť pozitívneho stĺpca dútnavého výboja v kyslíku vo výbojovej trubici.

Charakterizácia pozitívneho stĺpca:

- Pokiaľ je výboj stabilný, pozitívny stĺpec má axiálne homogénne elektrické pole. Výnimkou môže byť súčasná existencia dvoch foriem v kyslíku, ako popisujem nižšie.



Obr. 2.1: Dútnavý výboj

- Prevláda radiálna ambipolárna difúzia nabitých častíc ku stenám trubice a ich následná rekombinácia na stenách.
- Prevládajúcim druhom reakcií je excitácia a ionizácia.
- Možná prítomnosť stacionárnych a bežiacich ionizačných vln.

Zvláštnosťou kyslíku je existencia vysokogradientnej  $E \sim 1 \text{ kV/m}$  a nízkogradientnej formy  $E \sim 100 \text{ V/m}$ , pričom sa môžu vyskytovať súčasne vo výbojovej trubici za stredných tlakov, rádovo  $\sim N \cdot 100 \text{ Pa}$  ( $\sim N \text{ Torr}$ ). Normálna je vysokogradientná forma, neočakávaný je výskyt nízkogradientnej formy pre molekulárny plyn kyslík.

Ako uvádzajú autori vo svojich prácach Schmiedt [22], Řezáčová [20], Dettmer [5], Kocian a Mayor [11], vlastnosti oboch foriem sa dajú nasledujúcim spôsobom zhrnúť:

**T forma** nízkogradientná ( $E \sim 100 \text{ V/m}$ ):

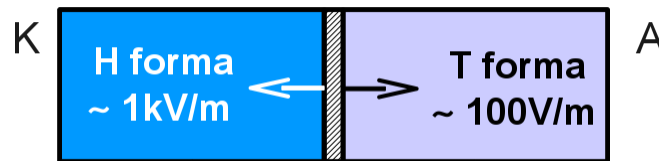
- Vyskytuje sa pri vyšších tlakoch a nižších výbojových prúdoch v porovnaní s H formou [5], [20].
- V T forme sa vyskytuje minimálne množstvo negatívnych iontov. Rôzne zdroje udávajú značne rozdielnu koncentráciu, niektorí autori ich výskyt ani nezistili. Podľa meraní na mojej katedre sa negatívne ionty vyskytujú v oboch formách i keď v nevelkom množstve.

- Podiel atómov a atomárnych iontov prevyšuje podiel molekúl kyslíku približne o 20% [22].
- Klesá stupeň disociácie s rastom výbojového prúdu [11].
- Vyskytuje sa na strane anódy vo výboji, odkiaľ sa s klesajúcim prúdom postupne rozširuje ku katóde [5],[20], ako je znázornené na Obr. 2.2.

**H-forma** vysokogradientná ( $E \sim 1 \text{ kV/m}$ ):

- S rastúcim výbojovým prúdom sa zvyšuje podiel atomárneho kyslíku  $O$  a záporných iontov  $O^-$  [11].
- V H forme sa vyskytuje maximálne okolo 10% negatívnych iontov.
- Vyskytuje sa na strane katódy vo výboji, odkiaľ sa s rastúcim prúdom rozširuje k anóde [5],[20], Obr. 2.2.

Napríklad vo svojej práci Lukáš Schmiedt [22](str.40) uvádza existenciu oboch foriem pri tlaku 800 Pa a výbojových prúdoch 20 – 35 mA, pri tlaku 950 Pa a výbojových prúdoch 30 – 35 mA.



Obr. 2.2: T a H forma

Pri súčasnej existencii T a H formy je prítomný jav hysterézie. Parametre prechodu (výbojový prúd a tlak) závisia na histórii výboja, akým spôsobom sa výboj do prechodu dostal, z T alebo H formy [5]. Týmto javom sa ale vo svojej práci nezaobrám.

# Kapitola 3

## Teória spojitého popisu plazmatu

### 3.1 Boltzmannova kinetická rovnica

Základom spojitého modelovania plazmatu je Boltzmannova kinetická rovnica pre rozdeľovaciu funkciu  $i$ -teho druhu častíc:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_i + \mathbf{c} \cdot \nabla_x f_i + \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} \cdot \nabla_c f_i = \left[ \frac{\delta f_i}{\delta t} \right] \quad (3.1a)$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} f_i d\mathbf{c} = n_i \quad (3.1b)$$

$$\nabla_x = \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad \nabla_c = \left( \frac{\partial}{\partial c_x}, \frac{\partial}{\partial c_y}, \frac{\partial}{\partial c_z} \right)$$

$m_i$ ,  $\mathbf{c}_i$  je hmotnosť a rýchlosť  $i$ -teho druhu častíc,  $\mathbf{F}_i$  pôsobiaca sila.

Zrážkový člen  $\left[ \frac{\delta f_i}{\delta t} \right]$  vyjadruje zmenu rozdeľovacej funkcie v dôsledku vzájomnej interakcie častíc pri zrážkach (rozptyl, excitácia, chemické reakcie...).

Rovnica (3.1b) predstavuje normovanie rozdeľovacej funkcie na koncentráciu častíc  $n_i$  miesto jednotky.

Postupnou integráciou Boltzmannovej kinetickej rovnice podľa rýchlosti je možné získať zákon kontinuity pre  $i$ -ty druh častíc, pričom prepokladajme pôsobiacu silu  $\mathbf{F}$  ako Lorencovu  $\mathbf{F}_L = Q(\mathbf{E} + \mathbf{c} \times \mathbf{B})$ , kde  $Q_i$  náboj  $i$ -teho

druhu častíc.

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial}{\partial t} f_i \mathbf{d}\mathbf{c} + \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{c} \cdot \nabla_x f_i \mathbf{d}\mathbf{c} + \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} \cdot \nabla_c f_i \mathbf{d}\mathbf{c} = \int_{\mathbb{R}^3} \left[ \frac{\delta f_i}{\delta t} \right] \mathbf{d}\mathbf{c} \quad (3.2a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_i + \operatorname{div}_x n_i \mathbf{u}_i = I_i - R_i \quad (3.2b)$$

$$\mathbf{u}_i = \frac{1}{n_i} \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{c} f_i \mathbf{d}\mathbf{c} \quad (3.2c)$$

$\mathbf{u}_i$  je unášavá (posuvná) rýchlosť,  $I_i$  a  $R_i$  členy vzniku a zániku  $i$ -teho druhu častíc v reakciách. Samozrejme platia zákony zachovania hmotnosti a náboja:

$$\sum_i Q_i (I_i - R_i) = 0 \quad (3.3)$$

$$\sum_i m_i (I_i - R_i) = 0 \quad (3.4)$$

Ďalšou integráciou Boltzmannovej kinetickej rovnice, je možné získať zákony zachovania hybnosti, energie, momentu sily a hybnosti atď., podrobný postup a výsledky uvádza Kracík [14](str. 31-51).

## 3.2 Poruchová teória a Boltzmannova kinetická rovnica

Za predpokladu iba malej odchýlky od rovnovážneho stavu, kde chaotická rýchlosť  $w$  mnohonásobne prevláda nad unášavou rýchlosťou ( $\mathbf{c} = \mathbf{u} + \mathbf{w}$ ), je možné rozvinúť rozdeľovaciu funkciu  $f_i$  do rady Lagrangeových polynómov a riešiť Boltzmannovu kinetickú rovnicu s použitím poruchovej teórie.

$$\begin{aligned} f_i &= f_i^0 + \cos \vartheta f_i^1 + \dots \\ &= f_i^0 + \frac{\mathbf{c}}{c} \cdot \mathbf{f}_i^1 + \dots \end{aligned} \quad (3.5)$$

V ďalších úvahách budem používať iba prvé dva členy rozvoja, nultý člen  $f_i^0$  je rozdeľovacia funkcia odpovedajúca termodynamickej rovnováhe, väčšinou sa jedná o Maxwellovo rozdelenie. Porucha  $\mathbf{f}_i^1$ , ktorá predstavuje odchýlku od rovnovážneho stavu, má smer a veľkosť.  $\vartheta$  je uhol ktorý zvierá smer poruchy so smerom rýchlosti. Často krát je vhodné zjednotiť smer poruchy

so z-tovou zložkou rýchlosti  $c_z$  v kartézskych súradniciach, potom  $\vartheta$  je uhol ktorý zviaza sprievodič rýchlosti s osou  $z$ . Mnohé výpočty sa uľahčujú následným prechodom do sférických súradníc  $(\varphi, \vartheta, r)$ .

Dosadením rozvoja do Boltzmannovej kinetickej rovnice, integráciou cez rýchlostný priestorový uhol  $\int_{\Omega} d\omega$ ,  $\int_{\Omega} \mathbf{c} d\omega$ , získam skalárnu a vektorovú rovnicu pre dve neznáme  $f_i^0$ ,  $\mathbf{f}_i^1$ , ako uvádza Kracík [14](str.126-148).

$$\frac{\partial}{\partial t} f_i^0 + \frac{1}{3} \operatorname{div}_x \mathbf{f}_i^1 + \frac{1}{3} \frac{Q_i \mathbf{E}}{m_i} \cdot \left( \frac{2\mathbf{f}_i^1}{c} + \frac{\partial}{\partial c} \mathbf{f}_i^1 \right) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \left[ \frac{\delta f_i}{\delta t} \right] d\omega \quad (3.6a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}_i^1 + c \nabla_x f_i^0 + \frac{Q_i}{m_i} \mathbf{E} \frac{\partial}{\partial c} f_i^0 + \frac{Q_i}{m_i} (\mathbf{B} \times \mathbf{f}_i^1) = \frac{3}{4\pi} \frac{1}{c} \int_{\Omega} \left[ \frac{\delta f_i}{\delta t} \right] \mathbf{c} d\omega \quad (3.6b)$$

Za predpokladu pružných zrážok medzi i-tým a k-tým druhom častíc a  $n_k \gg n_i$ ,  $m_k \gg m_i$  je možné vyjadriť pravé strany (3.6a),(3.6b) [14]:

$$\frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \left[ \frac{\delta f_i}{\delta t} \right] d\omega = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial c} \left( \frac{kT_k c^2 \nu_{ik}}{m_k} \frac{\partial}{\partial c} f_i^0 + \frac{m_i c^3 \nu_{ik}}{m_k} f_i^0 \right) \quad (3.7a)$$

$$\frac{3}{4\pi} \frac{1}{c} \int_{\Omega} \left[ \frac{\delta f_i}{\delta t} \right] \mathbf{c} d\omega = -\nu_{ik} \mathbf{f}_i^1 \quad (3.7b)$$

$T_k$  teplota k-teho druhu častíc,  $\nu_{ik}$  zrážková frekvencia medzi i-tým a k-tým druhom častíc,  $k$  Boltzmannova kinetická konštanta.

Častice u ktorých je vplyv poruchy najsilnejší, vzhľadom k váhe, sú elektróny. Spojením (3.6), (3.7) vznikne diferenciálna rovnica druhého rádu, ktorej riešením, za predpokladu stacionarity  $\frac{\partial}{\partial t} f_e = 0$ ,  $\nabla_x f_e = 0$ ,  $\mathbf{B} = 0$  a zrážkovej frekvencie nezávislej na rýchlosti  $\nu_e \neq \tilde{\nu}(c)$ , je skutočne Maxwellovo rozdelenie [14]:

$$-\frac{1}{3} \frac{e\mathbf{E}}{m_e} \cdot \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial c} \left( c^2 \frac{e}{m_e \nu_e} \mathbf{E} \frac{\partial}{\partial c} f_e^0 \right) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial c} \left( \frac{kT_g c^2 \nu_e}{m_g} \frac{\partial}{\partial c} f_e^0 + \frac{m_e c^3 \nu_e}{m_g} f_e^0 \right) \quad (3.8a)$$

$$f_e^0 = n_e \left( \frac{m_e}{2\pi kT_e} \right)^{3/2} \exp \left( \frac{-m_e c^2}{kT_e} \right) \quad (3.8b)$$

$$T_e = T_g + \frac{m_g}{3k} \left( \frac{eE}{m_e \nu_e} \right)^2 \quad (3.8c)$$

$T_e$ ,  $T_g$  teplota elektrónov a neutrónov,  $e$  elementárny náboj.

Cieľom prechádzajúcich úprav je získať vyjadrenie unášavej rýchlosti  $\mathbf{u}_i$ , s použitím (3.2c),(3.5),(3.6b),(3.7b) a  $\mathbf{B} = 0$ :

$$\begin{aligned} n_i \mathbf{u}_i &= \int_{\mathbb{R}^3} \left( f_i^0 + \frac{\mathbf{c}}{c} \cdot \mathbf{f}_i^1 \right) \mathbf{c} d\mathbf{c} \\ &= -\frac{Q_i}{m_i} \mathbf{E} \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty \frac{c^3}{\nu_i} \frac{\partial}{\partial c} f_i^0 d\mathbf{c} - \frac{4\pi}{3} \nabla_x \int_0^\infty \frac{c^4}{\nu_i} f_i^0 d\mathbf{c} \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$n_i \mathbf{u}_i = \mu_i n_i \mathbf{E} - D_i \nabla_x n_i \quad (3.10)$$

$$D_i = \frac{1}{n_i} \frac{4\pi}{3} \nabla_x \int_0^\infty \frac{c^4}{\nu_i} f_i^0 d\mathbf{c} \quad (3.11)$$

$$\mu_i = -\frac{1}{n_i} \frac{Q_i}{m_i} \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty \frac{c^3}{\nu_i} \frac{\partial}{\partial c} f_i^0 d\mathbf{c} \quad (3.12)$$

Rovnicou (3.10) zavádzam koeficient difúzie a mobility, predpokladám obecnú platnosť tohto vzťahu bez ohľadu na poruchovú teóriu.

$$n_i \mathbf{u}_i = \mu_i n_i \mathbf{E} - D_i \nabla_x n_i \quad (3.13)$$

Dosadením Maxwellovho rozdelenia za  $f_i^0$  a za predpokladu nezávislosti zrážkovej frekvencie na rýchlosti, vyjadrím koeficient difúzie a mobility ako:

$$D_i = \frac{\overline{\lambda_i c}}{3} \quad \mu_i = \frac{Q_i}{m_i \nu_i} \quad (3.14)$$

( $\lambda_i$  je stredná voľná dráha.)

Z rovníc (3.12),(3.11) je možné odvodiť vzťah (pre Maxwellovo rozdelenie) medzi mobilitou a difúziou:

$$\mu_i = \frac{Q_i}{kT_i} D_i \quad (3.15)$$

### 3.3 Zrážkový člen

Zrážkový člen predstavuje zmenu rozdeľovacej funkcie v dôsledku vzájomnej interakcie častíc. Príspevky od jednotlivých reakcií pre dvojzrážku (podobne pre trojzrážku) sa v obecnom tvare dajú napísať ako:

$$\left[ \frac{\delta f_i}{\delta t} \right] = \pm \iint_{\mathbb{R}^3 \Omega} f_j f_k |\mathbf{c}_j - \mathbf{c}_k| \sigma(\tilde{\omega}, |\mathbf{c}_j - \mathbf{c}_k|) d\tilde{\omega} d\mathbf{c}_j \quad (3.16)$$

Diferenciálny účinný prierez  $\sigma$  závisí na rýchlosti častíc vstupujúcich do reakcie a na priestorov uhle rozptylu  $\tilde{\omega}$ . Rýchlosti častíc vstupujúcich a vystupujúcich z reakcie sú vzájomne previazané zákonmi zachovania ,ktoré určujú vzťah medzi  $\mathbf{c}_i$  a  $\mathbf{c}_j, \mathbf{c}_k, \tilde{\omega}$ .

Prírastok alebo úbytok koncentrácie v rovnici kontinuity (3.2b) získam ako plný integrál výrazu (3.16). Zavádzam takzvaný reakčný koeficient  $K$ , ktorý popisuje zmenu koncentrácie i-teho druhu častíc v dôsledku zrážok.

$$I_i = K_{jk}n_jn_k = \iiint_{\mathbb{R}^3\mathbb{R}^3\Omega} f_j f_k |\mathbf{c}_j - \mathbf{c}_k| \sigma(\tilde{\omega}, |\mathbf{c}_j - \mathbf{c}_k|) d\tilde{\omega} d\mathbf{c}_j d\mathbf{c}_k \quad (3.17)$$

Reakčné koeficienty sa buď merajú alebo sa určuje účinný prierez reakcie  $S$ :

$$S_{ij} = \int_{\Omega} \sigma d\tilde{\omega} \quad (3.18)$$

$$K_{jk}n_jn_k = \iint_{\mathbb{R}^3\mathbb{R}^3} f_j f_k S_{ij}(|\mathbf{c}_j - \mathbf{c}_k|) |\mathbf{c}_j - \mathbf{c}_k| d\mathbf{c}_j d\mathbf{c}_k \quad (3.19)$$

Predpokladám, že chaotická rýchlosť mnohonásobne prevláda nad unášavou rýchlosťou, v rovnici (3.19) zanedbám poruchové členy rozdeľovacích funkcií a dosadím za  $f$  Maxwellovo rozdelenie. Nasleduje postup podľa [18](str.74):

$$K_{jk} = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \left( \frac{m_j}{2\pi k T_j} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m_j \mathbf{c}_j^2}{2k T_j}\right) \times \quad (3.20a)$$

$$\times \left( \frac{m_k}{2\pi k T_k} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m_k \mathbf{c}_k^2}{2k T_k}\right) S_{jk} |\mathbf{c}_j - \mathbf{c}_k| d\mathbf{c}_j d\mathbf{c}_k$$

Substitúcia:

$$A = \frac{m_j}{k T_j} + \frac{m_k}{k T_k} \quad \alpha = \left( \frac{m_j}{k T_j} \frac{m_k}{k T_k} \right) \frac{1}{A}$$

$$\mathbf{R}_c = \left( \frac{m_j}{k T_j} \mathbf{c}_j + \frac{m_k}{k T_k} \mathbf{c}_k \right) \frac{1}{A} \quad \mathbf{r}_c = \mathbf{c}_j - \mathbf{c}_k$$

$$K_{jk} = \left( \frac{m_j}{2\pi k T_j} \frac{m_k}{2\pi k T_k} \right)^{3/2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(-\frac{A R_c^2}{2} - \frac{\alpha r_c^2}{2}\right) \times \quad (3.20b)$$

$$\times S_{jk}(r_c) r_c d\mathbf{R}_c d\mathbf{r}_c$$

Výsledný vzťah:

$$K_{jk} = \left( \frac{\eta}{2\pi k T_\eta} \right)^{3/2} 4\pi \int_0^\infty \exp\left(-\frac{\eta r_c^2}{2k T_\eta}\right) r_c^3 S_{jk}(r_c) \mathbf{d}r_c \quad (3.21a)$$

$$\eta = \frac{m_j m_k}{m_j + m_k} \quad T_\eta = \frac{m_j T_k + m_k T_j}{m_j + m_k} \quad \alpha = \frac{\eta}{k T_\eta}$$

Redukovaná hmotnosť  $\eta$  a vážená teplota  $T_\eta$ .

### 3.4 Koeficient difúzie

V rovnici (3.10) zavádzam koeficient difúzie, popisujúci tok častíc v dôsledku gradientu koncentrácie. Pre neutrálne častice je možné z kinetickej teórie plynov odvodiť vzťah pre vlastnú difúziu a difúziu v cudzom (pracovnom) plyne, podľa autorov D'Ans a Lax [4](str.266).

Vlastná difúzia:

$$D = \frac{4(kT)^{1/2}}{3\pi(\pi m)^{1/2} n d_T} \quad (3.22)$$

Účinný priemer molekúl pri zrážkach  $d_T$  závisí na teplote a druhu plynu.

Difúzia i-teho druhu častíc v pracovnom plyne,  $n_g \gg n_i$ :

$$D_i = \frac{2(2kT)^{1/2}}{3\pi(n_i + n_g)\sqrt{\pi}d_T^2} \left( \frac{m_i + m_g}{m_i m_g} \right)^{1/2} \quad (3.23)$$

$$d_T = \frac{d_i + d_g}{2}$$

$n_g$  koncentrácia pracovného plynu,  $d_g$  účinný priemer molekúl pracovného plynu.

(Priemer kyslíku  $d_T(O_2) = 3,6 \text{ \AA}$  [4].)

# Kapitola 4

## Model

### 4.1 Systém rovníc

Môj model pozitívneho stĺpca vychádza z rovnice kontinuity (3.2b) a vyjadrením zrážkového členu pomocou reakčných koeficientov (3.17). Vznikne tak systém parciálnych diferenciálnych rovníc popisujúci zmeny koncentrácie. Pre  $i$ -ty druh častíc, vyskytujúcich sa v mojom modeli, mám rovnicu:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} n_i + \operatorname{div}_x (-D_i \nabla_x n_i + \mu_i n_i \mathbf{E}) = \\ & = - \underbrace{\sum_j K_{ij} n_i n_j - \sum_{jk} L_{ijk} n_i n_j n_k}_{\text{reakcie zániku}} + \underbrace{\sum_{jk} K_{jk} n_j n_k + \sum_{jkl} L_{jkl} n_j n_k n_l}_{\text{reakcie vzniku}} \quad (4.1) \end{aligned}$$

Každá prebiehajúca reakcia pridá jeden člen pravej strany, dvojzrážka  $K_{jk}$ , trojzrážka  $L_{jkl}$ . Samozrejme platia zákony zachovania hmotnosti (3.3) a náboja (3.4). Tento systém nieje úplný, jednotlivé koeficienty môžu závisieť na tlaku, teplote a intenzite elektrického poľa.

Predpoklady:

**Tlak:** Konštantnosť tlaku  $p = \text{konšt.} > 0$ .

**Teplota:** Predpokladám existenciu dvoch konštantných ale rozdielnych teplôt, teplota ťažkých častíc (neutrónov a iontov)  $T$ , teplota elektrónov  $T_e$ .  $T_e \gg T > 0$ .

**Difúzia a mobilita:** Spojitosť koeficientov difúzie a mobility:

$$D_i = \tilde{D}_i(E); \quad \tilde{D}_i \in C(\mathbb{R})$$

$$\mu_i = \tilde{\mu}_i(E); \tilde{\mu}_i \in C(\mathbb{R})$$

Obmedzenosť a odrazenosť od nuly:

$$\forall i : D_i \in [a, b]; b \geq a > 0$$

$$\forall i : |\mu_i| \in [c, d]; d \geq c > 0$$

$$\mu_i = \frac{Q_i}{kT_i} D_i \text{ (Mobilita je pre záporné častice záporná funkcia).}$$

**Reakčné koeficienty:** Spojitosť a obmedzenosť reakčných koeficientov:

$$K_{jk}, L_{jkl} \in C(\mathbb{R})$$

$$1 \gg K_{jk} \geq 0; \quad 1 \gg L_{jkl} \geq 0$$

**Kvazineutralita:** Požiadavka kvazineutrality je oprávnená iba v miestach výskytu čistej T alebo H formy. V oblasti prechodu medzi T a H formou dochádza k prudkým zmenám elektrického poľa, čo nutne vedie k existencii priestorového náboja  $\epsilon \operatorname{div}_x \mathbf{E} = \rho \neq 0$ .

Tento systém rovníc treba doplniť o predpis elektrického poľa alebo potenciálu:

$$\epsilon \Delta \varphi = \sum_i Q_i n_i \quad (4.2)$$

(Permitivita prostredia  $\epsilon$ )

Existujú dve vhodné cesty ďalšieho postupu:

- Riešiť systém (4.1) ako stacionárnu úlohu priestorového rozloženia náboja.
- Zanedbať divergentný člen a riešiť systém (4.1) ako evolučnú úlohu bez difúzie a driftu.

## 4.2 Vstupné dáta

Zdroj reakčných koeficientov, koeficientov difúzie a mobility je pre mňa práca autorov Eliasson a Kogelschatz [7] a tiež práca Vichera [26]. Zoznam reakcií sa nachádza v Dodatku A. Pokiaľ sú reakčné koeficienty udané tabuľkou hodnôt v závislosti na  $E/n$ , používam lineárnu interpoláciu.

V modeli používam nasledujúci súbor častíc:

1. Neutrálne častice a ich excitované stavy:

$$O, O(^1D)$$

$$O_2, O_2(a^1\Delta_g), O_2(b^1\Sigma_g^+)$$

$$O_3$$

2. Nabité častice:

$$\begin{array}{l} e \\ O^-, O_2^-, O_3^- \\ O^+, O_2^+ \end{array}$$

V zjednodušenej forme sú častice značené ako:

$$0, 01D, 02, 02D, 02bS, 03, e, 0-, 02-, 03-, 0+, 02+$$

Niekedy je nutné napočítať reakčný koeficient z účinného prierezu podľa výrazu (3.21). Pokiaľ je účinný prierez po častiach lineárnou funkciou energie, je možné získať analytické vyjadrenie reakčného koeficientu:

$$S_{jk}(r_c) = R\left(\frac{1}{2}\eta r_c^2\right) \quad (4.3a)$$

$$R(w) = A_i w + B_i \text{ pre } w \in [w_i, w_{i+1}] \quad (4.3b)$$

$$T_{eV} = kT_\eta \quad (4.3c)$$

$$\begin{aligned} K_{jk} = 2\sqrt{\frac{2kT_\eta}{\pi\eta}} & \left\{ \exp\left(-\frac{w_0}{T_{eV}}\right) \left(\frac{w_0}{T_{eV}} + 2\right) R(w_0) - \right. \\ & \left. - \exp\left(-\frac{w_{max}}{T_{eV}}\right) \left(\frac{w_{max}}{T_{eV}} + 2\right) R(w_{max}) + \right. \\ & \left. + \sum_{i=0}^{max} (2A_i T_{eV} - B_i) \left[ \exp\left(-\frac{w_i}{T_{eV}}\right) - \exp\left(-\frac{w_{i+1}}{T_{eV}}\right) \right] \right\} \quad (4.3d) \end{aligned}$$

Volná energia vstupujúca do reakcie  $w$  sa zadáva v eV, potom stačí aj teplotu  $T_{eV}$  dosadiť tiež v eV. V prípade reakcie ťažkých častíc s elektrónmi  $m_k \gg m_e$ ,  $T_e \gg T$  je možné vykonať zanedbanie:  $T_\eta \cong T_e$ ,  $\eta = m_e$ .

Z katedry KFPP som získal experimentálne dvojsondové merania pri tlaku  $p = 533$  Pa (4 Torr) a výbojovom prúde  $I = 30$  mA za súčasnej existencie T a H formy. Vyhodnotenie týchto meraní uvádzam v Tabuľke 4.1, viacej informácii je dostupných v Dodatku B.

Vzhľadom k použitej metóde merania považujem ako smerodajný zdroj vstupných dát článok [20] pri tlaku  $p = 500$  Pa (3,75 Torr) a výbojovom prúde  $I = 7$  mA, pretože použitá rezonančná metóda priamo merá koncentráciu elektrónov, hodnoty uvádzam v Tabuľke 4.2.

Na základe uvedených meraní som zvolil ako smerodajnú teplotu:

$$T = 400 \text{ K} \qquad T_e = 34814 \text{ K (3 eV)} \quad (4.4)$$

Tabuľka 4.1: Dvojsondové merania  $p = 533 \text{ Pa}$   $I = 30 \text{ mA}$

	H forma	T forma
$T_e$ [K]	45056	16384
$T_e$ [eV]	3,88	1,41
$E$ [V/cm]	26,7	1,5
Za predpokladu dominancie iontov $O^+$ $O^+$ ( $n(O^+) \gg n(O_2^+)$ )		
$T = 300\text{K}$		
$n_e$ [ $10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ]	7,34	8,00
$T = 400\text{K}$		
$n_e$ [ $10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ]	5,50	5,97
$T = 500\text{K}$		
$n_e$ [ $10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ]	4,39	4,74
Za predpokladu dominancie iontov $O_2^+$ $(n(O^+) \ll n(O_2^+))$		
$T = 300\text{K}$		
$n_e$ [ $10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ]	6,44	7,02
$T = 400\text{K}$		
$n_e$ [ $10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ]	4,82	5,24
$T = 500\text{K}$		
$n_e$ [ $10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ]	3,87	4,16

Tabuľka 4.2: Rezonančná metóda  $p = 500 \text{ Pa}$ ,  $I = 7 \text{ mA}$

	$E$ [V/cm]	$n_e$ [ $10^9 \text{ cm}^{-3}$ ]	$\nu_e$ [ $10^8 \text{ s}^{-1}$ ]
T forma	6	1,8	8
H forma	35	0,9	20

Pri výboji dochádza k ohrevu pracovného plynu a podľa spektroskopických meraní rotačných teplôt v H forme popísaných v článku [21]  $T \in [300, 500]$  K. Rotačná teplota molekúl kyslíku je blízka teplote pracovného plynu.

### 4.3 Evolučný model

Zanedbaním difúzných členov v rovnici (4.1) vznikne čisto evolučný problém chemickej kinetiky, systém obyčajných diferenciálnych rovníc:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}n_i = & - \sum_j K_{ij}n_in_j - \sum_{jk} L_{ijk}n_in_jn_k \\ & + \sum_{jk} K_{jk}n_jn_k + \sum_{jkl} L_{jkl}n_jn_kn_l \end{aligned} \quad (4.5a)$$

$$n_i(t_0) = n_{0i} \quad (4.5b)$$

Tento model môže popísať vývoj koncentrácie v priestorovo homogénnom plazmate (alebo aspoň lokálne homogénnom). Je schopný približne popísať pozitívny stĺpec s T alebo H formou, ale už nie ich súčasnú existenciu ani vzájomný prechod. Môže teda poslúžiť na určenie dominantných reakcií a ich vplyv na koncentráciu častíc.

Cieľom je nájsť, variáciou počiatočných koncentrácií, ustálený stav  $\frac{d}{dt}n_i = 0$ , ktorý by sa svojimi vlastnosťami zhodoval so vstupnými meraniami podľa Tabuľky 4.2.

Vzhľadom k povahe výpočtu stačí dokázať lokálnu existenciu v okolí počiatočných podmienok. Pravá strana rovnice (4.5a) je spojitá, podľa *Peanovej vety* [12](str.67) existuje riešenie na intervale  $[t_0, t_0 + \alpha]$ ;  $\alpha > 0$ .

Posudzovanie váhy reakcie  $V$  k bilancii  $i$ -tej častice je možné pomocou vzťahu:

$$I_i = \sum_{jk} K_{jk}n_jn_k + \sum_{jkl} L_{jkl}n_jn_kn_l \quad (4.6a)$$

$$R_i = \sum_j K_{ij}n_in_j + \sum_{jk} L_{ijk}n_in_jn_k \quad (4.6b)$$

Pri vzniku častice v reakcii:

$$V_{jk} = \frac{K_{jk}n_jn_k}{I_i} \quad (4.6c)$$

Pri zániku častice v reakcii:

$$V_{jk} = -\frac{K_{ij}n_i n_j}{R_i} \quad (4.6d)$$

Celková váha reakcie k bilancii všetkých častíc je

$$C_{ik} = \sum_i |V_{jk}| \quad (4.7)$$

Systém rovníc (4.1) predstavuje takzvaný problém s vysokou tuhosťou (stiff problem), pri numerickom riešení je nutné použiť metódu s adaptívnym krokom. Na numerické riešenie som použil *Matlab*, konkrétne funkciu `ode15s`. Napísať matlabovskú funkciu pre rozsiahly súbor častíc a reakcií by bolo časovo značne náročné a pravdepodobnosť chyby by bola vysoká. Miesto toho som vytvoril skript, ktorý mi spracuje vstupný súbor reakcií a automaticky vygeneruje matlabovskú funkciu.

Pri samotnom výpočte je možné držať koncentráciu vybraných druhov častíc konštantnú, napr.  $O_2$ .

## 4.4 Výsledky evolučného modelu

Numerické výpočty prebehli pri tlaku 500 Pa (3,75 Torr)  $T_e = 34814$  K (3 eV), váhu jednotlivých reakcií posudzujem podľa (4.6),(4.7).

$N^+ - N^- = \sum_i Q_i n_i$  značí rozdiel koncentrácie pozitívnych a negatívnych častíc, určuje do akej miery výsledok zachováva kvazineutralitu.

$3,75 - p$  určuje do akej miery sa zachováva tlak. Pri kontrole tlaku beriem do úvahy iba koncentráciu ťažkých častíc  $p = kT \sum_{i \neq e} n_i$ .

Výsledky uvádzam v Tabuľke 4.3 a vypočítané závislosti koncentrácie častíc na elektrickom poli sú znázornené v Obr. 4.1, 4.2, 4.3, špeciálne iba elektróny v Obr. 4.4.

Tabuľka 4.3: Výsledné koncentrácie častíc [ $\text{cm}^{-3}$ ]

		$E = 6 \text{ Vcm}^{-1}$		
$T$ [K]		300	400	500
$E/N$ [Td]		5,0	6,6	8,3
$O$		7,42e+16	7,03e+16	6,18e+16
$O(^1D)$		6,15e+11	9,74e+11	1,21e+12
$O_2$		4,36e+16	1,72e+16	8,09e+15
$O_2(a^1\Delta_g)$		2,42e+15	1,94e+15	1,15e+15
$O_2(b^1\Sigma_g^+)$		4,91e+14	1,01e+15	1,37e+15
$O_3$		9,18e+12	1,67e+12	4,00e+11
$e$		1,08e+13	2,01e+13	3,11e+13
$O^+$		1,02e+13	1,97e+13	3,09e+13
$O_2^+$		6,03e+11	3,69e+11	2,27e+11
$O^-$		2,87e+9	5,54e+9	6,78e+9
$O_2^-$		1,47e+9	6,08e+8	2,83e+8
$O_3^-$		6,81e+8	9,36e+7	1,47e+7
$3,75 - p$		-2,62e-12	-3,44e-12	-4,42e-11
$N^+ - N^-$		-37	507	80
		$E = 35 \text{ Vcm}^{-1}$		
$T$ [K]		300	400	500
$E/N$ [Td]		29,0	38,7	48,3
$O$		1,15e+17	8,89e+16	7,18e+16
$O(^1D)$		1,49e+12	2,77e+12	3,49e+12
$O_2$		4,23e+15	1,01e+15	3,09e+14
$O_2(a^1\Delta_g)$		8,25e+14	2,02e+14	6,35e+13
$O_2(b^1\Sigma_g^+)$		6,41e+14	3,76e+14	2,30e+14
$O_3$		1,31e+12	7,29e+10	5,66e+9
$e$		1,34e+13	2,26e+13	3,36e+13
$O^+$		1,34e+13	2,26e+13	3,36e+13
$O_2^+$		6,02e+10	2,24e+10	9,12e+9
$O^-$		4,19e+10	2,69e+10	1,56e+10
$O_2^-$		1,26e+8	2,22e+7	5,26e+6
$O_3^-$		2,45e+7	6,32e+5	2,25e+4
$3,75 - p$		1,20e-10	3,34e-11	7,83e-11
$N^+ - N^-$		47	180	282

Váhy vybraných reakcií pri  $E = 6 \text{ Vcm}^{-1}$ ,  $T = 400 \text{ K}$ ,  $T_e = 34814 \text{ K}$ ,  $p = 500 \text{ Pa}$ , ( $E/N = 6,6 \text{ Td}$ ), kompletne výsledky je možné získať na priloženom CD.

$O : 7,03\text{e}+16 \text{ cm}^{-3}$	
R24: $e . O \longrightarrow O^+ . e . e$	-0,965
R38b: $e . e . O^+ \longrightarrow O . e$	0,940
R12b: $O . O . O \longrightarrow O_2 . O$	-0,029
R56: $O^+ . O_2 \longrightarrow O_2^+ . O$	0,025
$O^+ : 1,97\text{e}+13 \text{ cm}^{-3}$	
R24: $e . O \longrightarrow O^+ . e . e$	0,995
R38b: $e . e . O^+ \longrightarrow O . e$	-0,969
R56: $O^+ . O_2 \longrightarrow O_2^+ . O$	-0,026
R25: $e . O_2 \longrightarrow O^+ . O . e . e$	0,005
$O^- : 5,54\text{e}+9 \text{ cm}^{-3}$	
R2: $e . O_2 \longrightarrow O . O^-$	0,789
R5: $O^- . O \longrightarrow O_2 . e$	-0,607
R57c: $O^+ . O^- \longrightarrow O . O$	-0,284
R45a: $O_2^- . O \longrightarrow O^- . O_2$	0,157
$O(^1D) : 9,74\text{e}+11 \text{ cm}^{-3}$	
R37c: $e . O_2^+ \longrightarrow O . O(^1D)$	0,973
R33a: $O(^1D) . O \longrightarrow O . O$	-0,452
R34a: $O(^1D) . O_2 \longrightarrow O . O_2(b^1\Sigma_g^+)$	-0,419
R33b: $O(^1D) . O_2 \longrightarrow O . O_2$	-0,114
$O_2 : 1,72\text{e}+16 \text{ cm}^{-3}$	
R13: $e . O_2 \longrightarrow O_2(a^1\Delta_g) . e$	-0,651
R17: $e . O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O_2 . e$	0,626
R56: $O^+ . O_2 \longrightarrow O_2^+ . O$	-0,158
R23b: $O_2(b^1\Sigma_g^+) . O \longrightarrow O_2 . O$	0,154
R22: $e . O_2 \longrightarrow O_2(b^1\Sigma_g^+) . e$	-0,142
R37a: $e . e . O_2^+ \longrightarrow O_2 . e$	0,109
R12b: $O . O . O \longrightarrow O_2 . O$	0,089
$O_2^+ : 3,69\text{e}+11 \text{ cm}^{-3}$	
R56: $O^+ . O_2 \longrightarrow O_2^+ . O$	0,854
R37a: $e . e . O_2^+ \longrightarrow O_2 . e$	-0,591
R37d: $e . O_2^+ \longrightarrow O . O$	-0,237
R37c: $e . O_2^+ \longrightarrow O . O(^1D)$	-0,171
R19: $O_2(a^1\Delta_g) . O^+ \longrightarrow O_2^+ . O$	0,111

$O_2^-$ : 6,08e+8 cm <sup>-3</sup>	
R45a: $O_2^- . O \longrightarrow O^- . O_2$	-0,493
R36a: $e . O_2 . O_2 \longrightarrow O_2^- . O_2$	0,486
R45b: $O_2^- . O \longrightarrow O_3 . e$	-0,448
R28b: $e . O_3 \longrightarrow O_2^- . O$	0,281
R36b: $e . O . O_2 \longrightarrow O_2^- . O$	0,085
$O_2(a^1\Delta_g)$ : 1,94e+15 cm <sup>-3</sup>	
R13: $e . O_2 \longrightarrow O_2(a^1\Delta_g) . e$	0,999
R17: $e . O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O_2 . e$	-0,961
R19: $O_2(a^1\Delta_g) . O^+ \longrightarrow O_2^+ . O$	-0,032
R55: $e . O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O^+ . O . e . e$	-0,005
$O_2(b^1\Sigma_g^+)$ : 1,01e+15 cm <sup>-3</sup>	
R23b: $O_2(b^1\Sigma_g^+) . O \longrightarrow O_2 . O$	-0,988
R22: $e . O_2 \longrightarrow O_2(b^1\Sigma_g^+) . e$	0,912
R34a: $O(^1D) . O_2 \longrightarrow O . O_2(b^1\Sigma_g^+)$	0,088
R23c: $O_2(b^1\Sigma_g^+) . O_3 \longrightarrow O_2 . O_3$	-0,006
$O_3$ : 1,67e+12 cm <sup>-3</sup>	
R9c: $O . O . O_2 \longrightarrow O . O_3$	0,544
R15b: $O_2(a^1\Delta_g) . O_3 \longrightarrow O_2 . O_2 . O(^1D)$	-0,407
R41: $O_2(b^1\Sigma_g^+) . O_3 \longrightarrow O_2 . O_2 . O$	-0,319
R16: $O_2(a^1\Delta_g) . O_2(a^1\Delta_g) . O_2 \longrightarrow O_3 . O_3$	0,163
R45b: $O_2^- . O \longrightarrow O_3 . e$	0,161
$O_3^-$ : 9,36e+7 cm <sup>-3</sup>	
R53: $e . O_2 . O_3 \longrightarrow O_3^- . O_2$	0,976
R60: $O_3^- . O^+ \longrightarrow O_3 . O$	-0,585
R54b: $O_3^- . O \longrightarrow O_2^- . O_2$	-0,241
R61: $O_3^- . O_2 \longrightarrow O_3 . O_2 . e$	-0,136
$e$ : 2,01e+13 cm <sup>-3</sup>	
R24: $e . O \longrightarrow O^+ . e . e$	0,994
R38b: $e . e . O^+ \longrightarrow O . e$	-0,969
R37a: $e . e . O_2^+ \longrightarrow O_2 . e$	-0,018
R37d: $e . O_2^+ \longrightarrow O . O$	-0,007
R37c: $e . O_2^+ \longrightarrow O . O(^1D)$	-0,005
R25: $e . O_2 \longrightarrow O^+ . O . e . e$	0,005
R55: $e . O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O^+ . O . e . e$	0,001

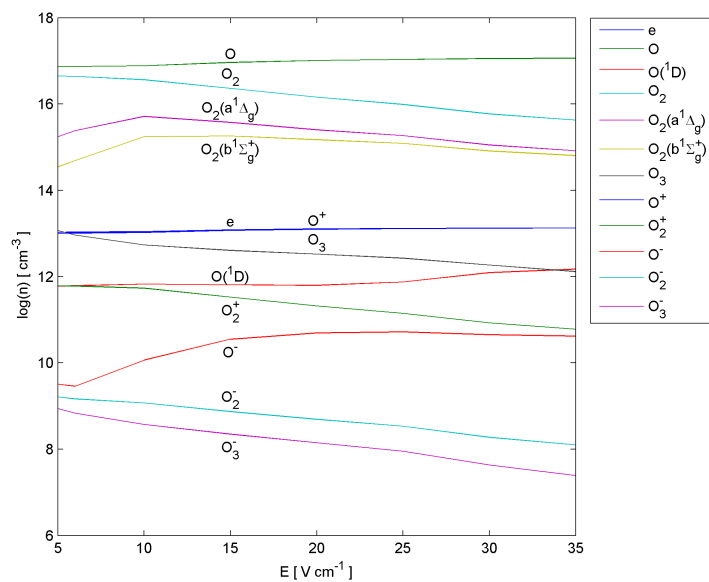
Váhy vybraných reakcií pri  $E = 35 \text{ Vcm}^{-1}$ ,  $T = 400 \text{ K}$ ,  $T_e = 34814 \text{ K}$ ,  
 $p = 500 \text{ Pa}$ , ( $E/N = 38,7 \text{ Td}$ ):

$O : 8,89\text{e}+16 \text{ cm}^{-3}$		
R24:	$e . O \longrightarrow O^+ . e . e$	-0,958
R38b:	$e . e . O^+ \longrightarrow O . e$	0,957
R12b:	$O . O . O \longrightarrow O_2 . O$	-0,040
R7a:	$e . O_2 \longrightarrow O . O . e$	0,026
$O^+ : 2,26\text{e}+13 \text{ cm}^{-3}$		
R24:	$e . O \longrightarrow O^+ . e . e$	1,000
R38b:	$e . e . O^+ \longrightarrow O . e$	-0,998
R56:	$O^+ . O_2 \longrightarrow O_2^+ . O$	-0,001
$O^- : 2,69\text{e}+10 \text{ cm}^{-3}$		
R2:	$e . O_2 \longrightarrow O . O^-$	0,993
R5:	$O^- . O \longrightarrow O_2 . e$	-0,664
R57c:	$O^+ . O^- \longrightarrow O . O$	-0,282
$O(^1D) : 2,77\text{e}+12 \text{ cm}^{-3}$		
R7b:	$e . O_2 \longrightarrow O . O(^1D) . e$	0,959
R33a:	$O(^1D) . O \longrightarrow O . O$	-0,947
R34a:	$O(^1D) . O_2 \longrightarrow O . O_2(b^1\Sigma_g^+)$	-0,041
R37c:	$e . O_2^+ \longrightarrow O . O(^1D)$	0,039
$O_2 : 1,01\text{e}+15 \text{ cm}^{-3}$		
R13:	$e . O_2 \longrightarrow O_2(a^1\Delta_g) . e$	-0,525
R17:	$e . O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O_2 . e$	0,520
R12b:	$O . O . O \longrightarrow O_2 . O$	0,318
R7a:	$e . O_2 \longrightarrow O . O . e$	-0,206
R23b:	$O_2(b^1\Sigma_g^+) . O \longrightarrow O_2 . O$	0,127
R22:	$e . O_2 \longrightarrow O_2(b^1\Sigma_g^+) . e$	-0,124
R7b:	$e . O_2 \longrightarrow O . O(^1D) . e$	-0,095
$O_2^+ : 2,24\text{e}+10 \text{ cm}^{-3}$		
R56:	$O^+ . O_2 \longrightarrow O_2^+ . O$	0,779
R37a:	$e . e . O_2^+ \longrightarrow O_2 . e$	-0,620
R37d:	$e . O_2^+ \longrightarrow O . O$	-0,220
R19:	$O_2(a^1\Delta_g) . O^+ \longrightarrow O_2^+ . O$	0,181
R37c:	$e . O_2^+ \longrightarrow O . O(^1D)$	-0,159
$O_2^- : 2,22\text{e}+7 \text{ cm}^{-3}$		
R45a:	$O_2^- . O \longrightarrow O^- . O_2$	-0,503

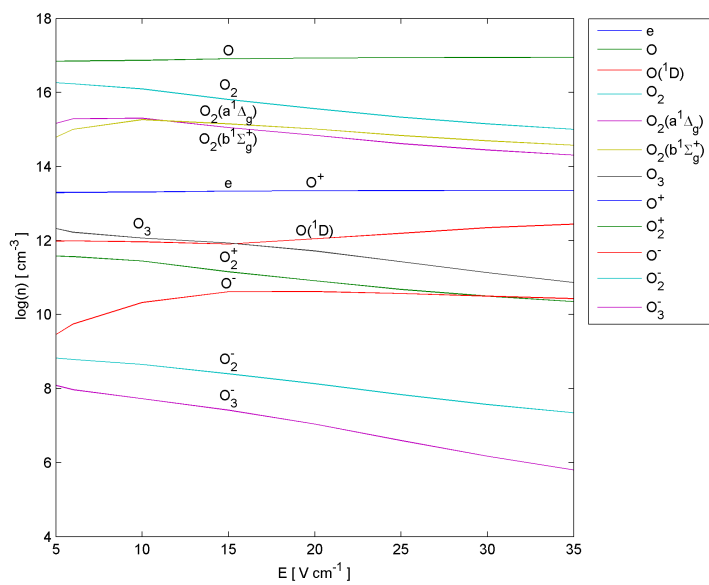
R45b: $O_2^- . O \longrightarrow O_3 . e$	-0,457
R18b: $O_2(a^1\Delta_g) . O^- \longrightarrow O_2^- . O$	0,419
R28b: $e . O_3 \longrightarrow O_2^- . O$	0,305
R36b: $e . O . O_2 \longrightarrow O_2^- . O$	0,156
$O_2(a^1\Delta_g) : 2,02e+14 \text{ cm}^{-3}$	
R13: $e . O_2 \longrightarrow O_2(a^1\Delta_g) . e$	0,999
R17: $e . O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O_2 . e$	-0,990
R19: $O_2(a^1\Delta_g) . O^+ \longrightarrow O_2^+ . O$	-0,008
R55: $e . O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O^+ . O . e . e$	-0,001
$O_2(b^1\Sigma_g^+) : 3,76e+14 \text{ cm}^{-3}$	
R23b: $O_2(b^1\Sigma_g^+) . O \longrightarrow O_2 . O$	-0,997
R22: $e . O_2 \longrightarrow O_2(b^1\Sigma_g^+) . e$	0,969
R34a: $O(^1D) . O_2 \longrightarrow O . O_2(b^1\Sigma_g^+) . e$	0,031
R21: $O^- . O_2(b^1\Sigma_g^+) \longrightarrow O . O_2 . e$	-0,003
$O_3 : 7,29e+10 \text{ cm}^{-3}$	
R9c: $O . O . O_2 \longrightarrow O . O_3$	0,641
R8b: $e . O_3 \longrightarrow O(^1D) . O_2(a^1\Delta_g) . e$	-0,639
R18a: $O_2(a^1\Delta_g) . O^- \longrightarrow O_3 . e$	0,258
R45b: $O_2^- . O \longrightarrow O_3 . e$	0,094
R8a: $e . O_3 \longrightarrow O . O_2 . e$	-0,087
$O_3^- : 6,32e+5 \text{ cm}^{-3}$	
R60: $O_3^- . O^+ \longrightarrow O_3 . O$	-0,679
R51: $O^- . O_3 \longrightarrow O_3^- . O$	0,569
R53: $e . O_2 . O_3 \longrightarrow O_3^- . O_2$	0,418
R54b: $O_3^- . O \longrightarrow O_2^- . O_2$	-0,308
$e : 2,26e+13 \text{ cm}^{-3}$	
R24: $e . O \longrightarrow O^+ . e . e$	0,999
R38b: $e . e . O^+ \longrightarrow O . e$	-0,997
R2: $e . O_2 \longrightarrow O . O^-$	-0,002
R5: $O^- . O \longrightarrow O_2 . e$	0,001
R37a: $e . e . O_2^+ \longrightarrow O_2 . e$	-0,001

Numerickými výpočtami som získal koncentráciu elektrónov rádovo  $10^{13} \text{ cm}^{-3}$ , čo je o tri až štyri rády viac ako vyplýva z meraní. S rastom elektrického poľa sa koncentrácia elektrónov zvyšuje Obr. 4.4, čo sa nezhoduje s rezonančným meraním Tabuľka 4.2. Hlavným procesom vzniku a zániku elektrónov je ionizácia  $O$  a rekombinácia s  $O^+$ .

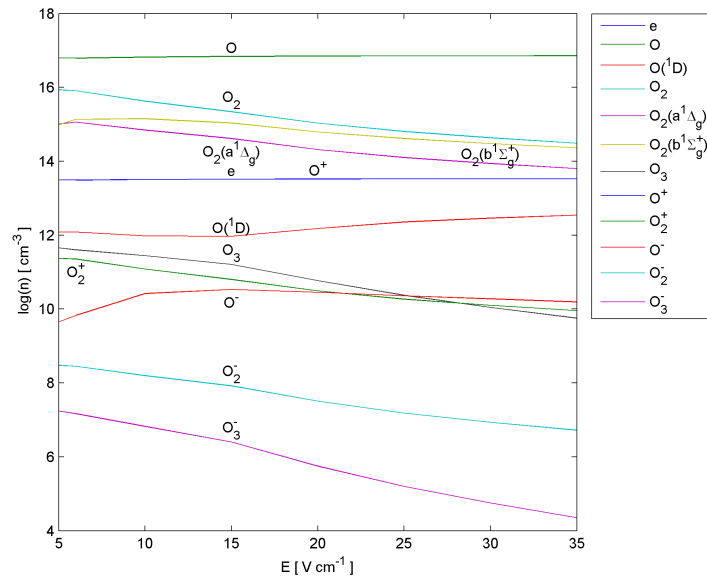
Prevládajúcim typom pozitívnych iontov sú  $O^+$ , pričom sa ich koncentrácia



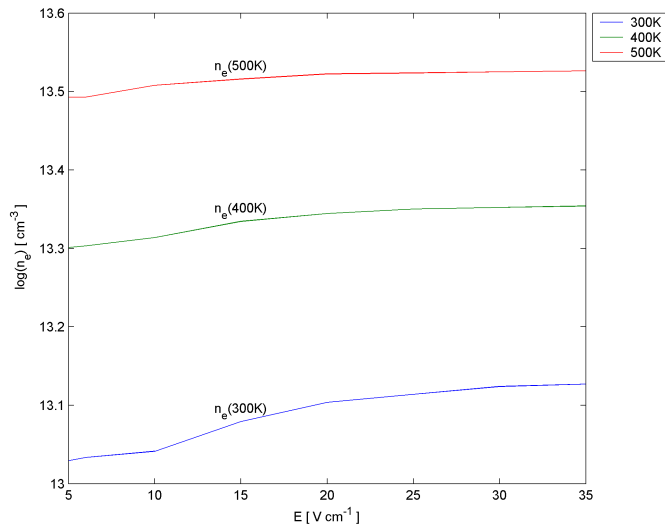
Obr. 4.1: Závislosť koncentrácie častíc pri  $T = 300$  K,  $T_e = 34814$  K,  $p = 500$  Pa



Obr. 4.2: Závislosť koncentrácie častíc pri  $T = 400$  K,  $T_e = 34814$  K,  $p = 500$  Pa



Obr. 4.3: Závislosť koncentrácie častíc pri  $T = 500 \text{ K}$ ,  $T_e = 34814 \text{ K}$ ,  $p = 500 \text{ Pa}$



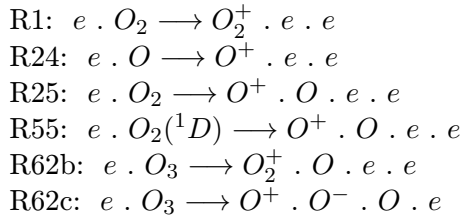
Obr. 4.4: Závislosť koncentrácie elektrónov pri  $T_e = 34814 \text{ K}$ ,  $p = 500 \text{ Pa}$

rádovo zhoduje s koncentráciou elektrónov. Podiel iontov  $O^+$  ku  $O_2^+$  určuje reakcia  $O^+ \cdot O_2 \longrightarrow O_2^+ \cdot O$  a variáciou jej reakčného koeficientu je možné meniť pomer  $O^+$  ku  $O_2^+$ .

Dominantným typom záporných iontov sú  $O^-$  a s rastom elektrického poľa sa podiel  $O^-$  k  $O_2^-$ ,  $O_3^-$  zvyšuje. Záporné ionty predstavujú menej ako 1% záporného náboja.

Atomárny kyslík prevažuje nad molekulárnym pričom s rastúcim elektrickým poľom rastie disociácia kyslíku. Koncentrácie atomárnych častíc  $O$ ,  $O(^1D)$ ,  $O^-$ ,  $O^+$  majú konštantný alebo rastúci charakter, oproti tomu koncentrácie molekulárnych častíc majú čisto klesajúci charakter.

Koncentrácia elektrónov rádovo prevyšuje požadovanú hodnotu podľa Tabuľky 4.2, v celom modeli existuje ale iba šesť reakcií vzniku náboja:



Tisíc násobným znížením reakčných koeficientov spomenutých reakcií dočielim pokles koncentrácie elektrónov rádovo na  $\sim 10^9 \text{ cm}^{-3}$ . U elektrónov začnú pochopiteľne dominovať reakcie záchytu (attachment) a odlepenia (detachment), tie zostali nedotknuté. Pri vzniku pozitívnych iontov sa mnohonásobne zvýšil podiel reakcie R25:  $e \cdot O_2 \longrightarrow O^+ \cdot O \cdot e \cdot e$ .

Váha reakcií pre pozitívne ionty pri  $E = 6 \text{ Vcm}^{-1}$ ,  $T = 400 \text{ K}$ :

$O^+$		
	R56: $O^+ \cdot O_2 \longrightarrow O_2^+ \cdot O$	-0,995
	R25: $e \cdot O_2 \longrightarrow O^+ \cdot O \cdot e \cdot e$	0,587
	R24: $e \cdot O \longrightarrow O^+ \cdot e \cdot e$	0,411
$O_2^+$		
	R56: $O^+ \cdot O_2 \longrightarrow O_2^+ \cdot O$	0,995
	R37d: $e \cdot O_2^+ \longrightarrow O \cdot O$	-0,544
	R37c: $e \cdot O_2^+ \longrightarrow O \cdot O(^1D)$	-0,394

Váha reakcií pre pozitívne ionty pri  $E = 35 \text{ Vcm}^{-1}$ ,  $T = 400 \text{ K}$ :

$O^+$		
	R56: $O^+ \cdot O_2 \longrightarrow O_2^+ \cdot O$	-0,981
	R24: $e \cdot O \longrightarrow O^+ \cdot e \cdot e$	0,832
	R25: $e \cdot O_2 \longrightarrow O^+ \cdot O \cdot e \cdot e$	0,166



Vhodnou variáciou reakčných koeficientov reakcií R24 a R25 je možné dosiahnuť požadovanú koncentráciu elektrónov podľa Tabuľky 4.2 s použitím variačného koeficientu  $\kappa$ ;  $\tilde{K}(R24) = \kappa \cdot K(R24)$

Variácia koeficientov sa u teploty 300 K mierne líši od ostatných, pretože pôvodný postup viedol ku krajne nestabilnému výsledku pri  $E = 35 \text{ Vcm}^{-1}$ . Dosiahnuté výsledky uvádzam v Tabuľke 4.4 a 4.5, pričom sú tiež znázornené v Obr. 4.5, 4.6.

Tabuľka 4.4: Variačný koeficient  $\kappa$

$T$ [K]	$\kappa$		
	300	400	500
R24: $e \cdot O \longrightarrow O^+ \cdot e \cdot e$	1,322e-3	0,645e-3	0,277e-3
R25: $e \cdot O_2 \longrightarrow O^+ \cdot O \cdot e \cdot e$	1,935e-3	2,241e-3	2,865e-3
R1: $e \cdot O_2 \longrightarrow O_2^+ \cdot e \cdot e$	0	1e-3	1e-3
R55: $e \cdot O_2(^1D) \longrightarrow O^+ \cdot O \cdot e \cdot e$	0	1e-3	1e-3
R62b: $e \cdot O_3 \longrightarrow O_2^+ \cdot O \cdot e \cdot e$	0	1e-3	1e-3
R62c: $e \cdot O_3 \longrightarrow O^+ \cdot O^- \cdot O \cdot e$	0	1e-3	1e-3

Uvádzanie výsledkov v závislosti na elektrickom poli je pre porovnanie s experimentálnymi meraniami nepraktické, výhodnejšie je získať závislosť na výbojovom prúde ako v Obr. 4.7. Hustotu prúdu v ose výbojovej trubice môžem odhadnúť ako:

$$i = \sum_j Q_j \mu_j n_j E \quad (4.8)$$

Vzhľadom k tomu, že nepoznám radiálny profil koncentrácie jednotlivých častíc, je možné brať výbojový prúd iba ako približne úmerný hustote prúdu podľa (4.8),  $I \cong C \cdot i$ .

Tabuľka 4.5: Koncentrácie častíc po variácii reakčných koeficientov

	$E = 6 \text{ Vcm}^{-1}$		
$T$ [K]	300	400	500
$E/N$ [Td]	5,0	6,6	8,3
$O$	6,26e+14	1,68e+15	2,36e+15
$O(^1D)$	9,58e+8	2,00e+9	2,75e+9
$O_2$	1,20e+17	8,84e+16	6,94e+16
$O_2(a^1\Delta_g)$	1,77e+14	4,53e+14	6,54e+14
$O_2(b^1\Sigma_g^+)$	3,02e+13	3,97e+13	3,79e+13
$O_3$	2,72e+12	1,55e+12	1,12e+12
$e$	1,80e+9	1,80e+9	1,80e+9
$O^+$	6,29e+5	9,00e+5	1,16e+6
$O_2^+$	2,03e+9	1,94e+9	1,92e+9
$O^-$	8,31e+7	9,71e+7	9,63e+7
$O_2^-$	1,51e+8	4,38e+7	2,39e+7
$O_3^-$	6,76e+5	4,13e+5	2,71e+5
$3,75 - p$	2,66e-13	1,22e-11	4,97e-14
$N^+ - N^-$	0	0	0
	$E = 35 \text{ Vcm}^{-1}$		
$T$ [K]	300	400	500
$E/N$ [Td]	29,0	38,7	48,3
$O$	4,44e+15	6,49e+15	7,95e+15
$O(^1D)$	8,03e+9	9,13e+9	1,10e+10
$O_2$	1,16e+17	8,32e+16	6,35e+16
$O_2(a^1\Delta_g)$	5,45e+14	8,03e+14	9,66e+14
$O_2(b^1\Sigma_g^+)$	6,61e+13	4,98e+13	3,94e+13
$O_3$	6,70e+12	2,98e+12	1,71e+12
$e$	9,00e+8	9,00e+8	9,00e+8
$O^+$	6,28e+5	7,54e+5	8,03e+5
$O_2^+$	2,71e+9	2,25e+9	1,95e+9
$O^-$	1,67e+9	1,28e+9	1,01e+9
$O_2^-$	1,38e+8	6,50e+7	3,91e+7
$O_3^-$	1,15e+7	4,79e+6	2,39e+6
$3,75 - p$	9,77e-10	6,55e-12	-1,73e-11
$N^+ - N^-$	1	0	0

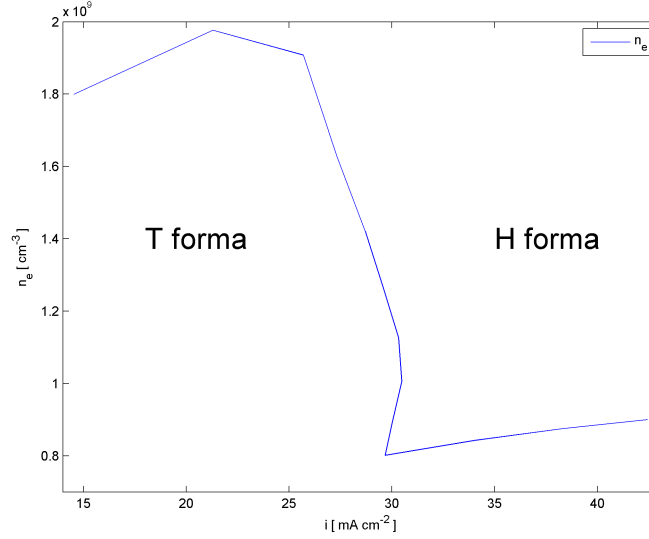


Váhy vybraných reakcií po variácii reakčných koeficientov pri  $E = 35 \text{ Vcm}^{-1}$ ,  
 $T = 400 \text{ K}$ ,  $T_e = 34814 \text{ K}$ ,  $p = 500 \text{ Pa}$ , ( $E/N = 6,6 \text{ Td}$ ):

$O$ 1,68e+15 $\text{cm}^{-3}$	
R34a: $O(^1D) \cdot O_2 \longrightarrow O \cdot O_2(b^1\Sigma_g^+)$	0,658
R9a: $O \cdot O_2 \cdot O_2 \longrightarrow O_3 \cdot O_2$	-0,543
R12a: $O \cdot O \cdot O_2 \longrightarrow O_2 \cdot O_2$	-0,393
R33b: $O(^1D) \cdot O_2 \longrightarrow O \cdot O_2$	0,180
R41: $O_2(b^1\Sigma_g^+) \cdot O_3 \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \cdot O$	0,114
$O^+$ 9,00e+5 $\text{cm}^{-3}$	
R56: $O^+ \cdot O_2 \longrightarrow O_2^+ \cdot O$	-0,993
R25: $e \cdot O_2 \longrightarrow O^+ \cdot O \cdot e \cdot e$	0,775
R24: $e \cdot O \longrightarrow O^+ \cdot e \cdot e$	0,223
$O^-$ 9,71e+7 $\text{cm}^{-3}$	
R2: $e \cdot O_2 \longrightarrow O \cdot O^-$	0,572
R45a: $O_2^- \cdot O \longrightarrow O^- \cdot O_2$	0,427
R5: $O^- \cdot O \longrightarrow O_2 \cdot e$	-0,402
R18a: $O_2(a^1\Delta_g) \cdot O^- \longrightarrow O_3 \cdot e$	-0,231
R26a: $O^- \cdot O_2 \longrightarrow O_2^- \cdot O$	-0,226
$O(^1D)$ 2,00e+9 $\text{cm}^{-3}$	
R15b: $O_2(a^1\Delta_g) \cdot O_3 \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \cdot O(^1D)$	1,000
R34a: $O(^1D) \cdot O_2 \longrightarrow O \cdot O_2(b^1\Sigma_g^+)$	-0,762
R33b: $O(^1D) \cdot O_2 \longrightarrow O \cdot O_2$	-0,208
$O_2$ 8,84e+16 $\text{cm}^{-3}$	
R15b: $O_2(a^1\Delta_g) \cdot O_3 \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \cdot O(^1D)$	0,549
R13: $e \cdot O_2 \longrightarrow O_2(a^1\Delta_g) \cdot e$	-0,435
R23b: $O_2(b^1\Sigma_g^+) \cdot O \longrightarrow O_2 \cdot O$	0,209
R34a: $O(^1D) \cdot O_2 \longrightarrow O \cdot O_2(b^1\Sigma_g^+)$	-0,209
R9a: $O \cdot O_2 \cdot O_2 \longrightarrow O_3 \cdot O_2$	-0,173
$O_2^+$ 1,94e+9 $\text{cm}^{-3}$	
R56: $O^+ \cdot O_2 \longrightarrow O_2^+ \cdot O$	0,993
R37d: $e \cdot O_2^+ \longrightarrow O \cdot O$	-0,554
R37c: $e \cdot O_2^+ \longrightarrow O \cdot O(^1D)$	-0,402
$O_2^-$ 4,38e+7 $\text{cm}^{-3}$	
R36a: $e \cdot O_2 \cdot O_2 \longrightarrow O_2^- \cdot O_2$	0,643
R45a: $O_2^- \cdot O \longrightarrow O^- \cdot O_2$	-0,476
R45b: $O_2^- \cdot O \longrightarrow O_3 \cdot e$	-0,433
R26a: $O^- \cdot O_2 \longrightarrow O_2^- \cdot O$	0,252

$O_2(a^1\Delta_g)$	4,53e+14	$\text{cm}^{-3}$	
R13:	$e \cdot O_2 \longrightarrow O_2(a^1\Delta_g) \cdot e$		0,977
R15b:	$O_2(a^1\Delta_g) \cdot O_3 \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \cdot O(^1D)$		-0,616
R16:	$O_2(a^1\Delta_g) \cdot O_2(a^1\Delta_g) \cdot O_2 \longrightarrow O_3 \cdot O_3$		-0,319
$O_2(b^1\Sigma_g^+)$	3,97e+13	$\text{cm}^{-3}$	
R23b:	$O_2(b^1\Sigma_g^+) \cdot O \longrightarrow O_2 \cdot O$		-0,688
R34a:	$O(^1D) \cdot O_2 \longrightarrow O \cdot O_2(b^1\Sigma_g^+)$		0,688
R22:	$e \cdot O_2 \longrightarrow O_2(b^1\Sigma_g^+) \cdot e$		0,312
R23c:	$O_2(b^1\Sigma_g^+) \cdot O_3 \longrightarrow O_2 \cdot O_3$		-0,174
R41:	$O_2(b^1\Sigma_g^+) \cdot O_3 \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \cdot O$		-0,119
$O_3$	1,55e+12	$\text{cm}^{-3}$	
R15b:	$O_2(a^1\Delta_g) \cdot O_3 \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \cdot O(^1D)$		-0,855
R9a:	$O \cdot O_2 \cdot O_2 \longrightarrow O_3 \cdot O_2$		0,538
R16:	$O_2(a^1\Delta_g) \cdot O_2(a^1\Delta_g) \cdot O_2 \longrightarrow O_3 \cdot O_3$		0,442
R41:	$O_2(b^1\Sigma_g^+) \cdot O_3 \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \cdot O$		-0,112
$O_3^-$	4,13e+5	$\text{cm}^{-3}$	
R61:	$O_3^- \cdot O_2 \longrightarrow O_3 \cdot O_2 \cdot e$		-0,991
R52:	$O^- \cdot O_2 \cdot O_2 \longrightarrow O_3^- \cdot O_2$		0,740
R53:	$e \cdot O_2 \cdot O_3 \longrightarrow O_3^- \cdot O_2$		0,134
$e$	1,80e+9	$\text{cm}^{-3}$	
R36a:	$e \cdot O_2 \cdot O_2 \longrightarrow O_2^- \cdot O_2$		-0,484
R2:	$e \cdot O_2 \longrightarrow O \cdot O^-$		-0,479
R5:	$O^- \cdot O \longrightarrow O_2 \cdot e$		0,337
R45b:	$O_2^- \cdot O \longrightarrow O_3 \cdot e$		0,326
R18a:	$O_2(a^1\Delta_g) \cdot O^- \longrightarrow O_3 \cdot e$		0,194
R50:	$O_2^- \cdot O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \cdot e$		0,058
R21:	$O^- \cdot O_2(b^1\Sigma_g^+) \longrightarrow O \cdot O_2 \cdot e$		0,039
R25:	$e \cdot O_2 \longrightarrow O^+ \cdot O \cdot e \cdot e$		0,016
R61:	$O_3^- \cdot O_2 \longrightarrow O_3 \cdot O_2 \cdot e$		0,012
R37d:	$e \cdot O_2^+ \longrightarrow O \cdot O$		-0,011
R28b:	$e \cdot O_3 \longrightarrow O_2^- \cdot O$		-0,010
R58:	$O_2^- \cdot O_2(b^1\Sigma_g^+) \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \cdot e$		0,009
R37c:	$e \cdot O_2^+ \longrightarrow O \cdot O(^1D)$		-0,008
R24:	$e \cdot O \longrightarrow O^+ \cdot e \cdot e$		0,005

Na Obr. 4.7,4.6 je jasný skok koncentrácie elektrónov medzi T a H formou. Podľa upraveného modelu pri prechode od T k H forme dochádza k prudkému nárastu koncentrácie negatívnych iontov, rastie disociácia kyslíku, rastie koncentrácia negatívnych iontov na úkor elektrónov.



Obr. 4.7: Koncentrácia elektrónov po variácii pri  $T = 400$  K,  $T_e = 34814$  K,  $p = 500$  Pa

## 4.5 Stacionárny model s difúziou

Ďalší možný prístup k obecnému systému rovníc (4.1) je riešiť daný problém ako stacionárnu úlohu priestorového rozloženia koncentrácie:

$$\begin{aligned} & \operatorname{div}_x (-D_i \nabla_x n_i + \mu_i n_i \mathbf{E}) = \\ & = - \sum_j K_{ij} n_i n_j - \sum_{jk} L_{ijk} n_i n_j n_k + \sum_{jk} K_{jk} n_j n_k + \sum_{jkl} L_{jkl} n_j n_k n_l \end{aligned} \quad (4.9)$$

Divergentný člen je možné pomocou substitúcie  $n_i = \bar{n}_i \exp\left(-\frac{Q_i}{kT_i} \varphi\right)$  a rovnice (3.15) upraviť nasledujúcim spôsobom:

$$\begin{aligned} -D_i \nabla_x n_i - \mu_i n_i \nabla_x \varphi &= -D_i \exp\left(-\frac{Q_i}{kT_i} \varphi\right) \nabla_x \bar{n}_i \\ & \quad - \cancel{\mu_i \bar{n}_i \exp\left(-\frac{Q_i}{kT_i} \varphi\right) \varphi \frac{\nabla_x T_i}{T_i}} \end{aligned} \quad (4.10)$$

Člen obsahujúci gradient teploty zanedbávam kvôli predpokladu konštantnej teploty, ako je uvedené v predpokladoch na strane 20.

Rovnicu (4.9) prepíšem pomocou (4.10) do tvaru:

$$\begin{aligned}
& -\operatorname{div}_x \left( D_i e^{-\frac{Q_i}{kT_i} \varphi} \nabla_x \bar{n}_i \right) + \\
& + \sum_j K_{ij} \bar{n}_i \bar{n}_j e^{-\left(\frac{Q_i}{kT_i} + \frac{Q_j}{kT_j}\right) \varphi} + \sum_{jl} L_{ijl} \bar{n}_i \bar{n}_j \bar{n}_l e^{-\left(\frac{Q_i}{kT_i} + \frac{Q_j}{kT_j} + \frac{Q_l}{kT_l}\right) \varphi} = \\
& = \sum_{jl} K_{jl} \bar{n}_j \bar{n}_l e^{-\left(\frac{Q_j}{kT_j} + \frac{Q_l}{kT_l}\right) \varphi} + \sum_{jlr} L_{jlr} \bar{n}_j \bar{n}_l \bar{n}_r e^{-\left(\frac{Q_j}{kT_j} + \frac{Q_l}{kT_l} + \frac{Q_r}{kT_r}\right) \varphi}
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Systém rovníc (4.11) je nutné doplniť o Laplaceovu rovnicu pre potenciál:

$$-\operatorname{div}_x (\epsilon \nabla_x \varphi) = \sum_i Q_i \bar{n}_i e^{-\frac{Q_i}{kT_i} \varphi} \tag{4.12}$$

Pre predchádzajúci systém rovníc (4.11), (4.12) uvažujem okrajovú podmienku  $\mathcal{P}$ :

$$\left. \begin{aligned} \varphi &= \varphi_0 \\ \bar{n}_i &= \bar{n}_{i0} = n_{i0} \exp\left(\frac{Q_i}{kT_i} \varphi_0\right) \end{aligned} \right\} \text{ na } \partial\Omega \tag{4.13}$$

( $\nu$  je vonkajšia normála k integračnej oblasti  $\Omega$ .)

Ďalej uvažujem reštrikciu systému do jednej dimenzie. Ja sa zaujímam o axiálny priebeh koncentrácie častíc a elektrického poľa v smere osi  $z$ , chcem riešiť rovnice (4.11), (4.12) na intervale  $[z_1, z_2]$ . Otázkou je aké funkcie dosadiť za okrajové podmienky v  $\mathcal{P}$ , čo predstavuje krajné hodnoty koncentrácie a potenciálu. Hodnoty koncentrácie v krajných bodoch je možné, za predpokladu nulovosti divergentného člena, získať z predchádzajúceho modelu. Tieto dáta sú ale problematické vzhľadom k výsledkom predchádzajúcej kapitoly. Potenciál plazmatu, koncentráciu a teplotu elektrónov je možné teoreticky získať vyhodnotením jednosondových meraní v T a H forme. Takéto merania boli vykonané na mojej fakulte. Jednosondové merania, ktoré som mal k dispozícii a ktoré som vyhodnocoval, boli ale tak silne zašumené, že sa mi nepodarilo získať relevantné hodnoty ani v rádovej presnosti. V Dodatku C uvádzam dôkaz existencie slabého riešenia pre systém (4.11), (4.12) s okrajovou podmienkou  $\mathcal{P}$ . Dôkaz existencie riešenia je nad rámec mojej práce, pre budúce numerické riešenie metódou konečných prvkov je ale nezbytný.

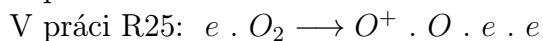
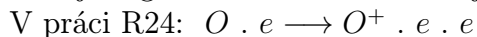
# Kapitola 5

## Záver a diskusia

Na základe spojitého popisu plazmatu som zostavil model chemickej kinetiky, ktorý vychádza z rovnice kontinuity zanedbaním divergentného členu. Ako zdroj vstupných dát mi slúžili merania vykonané na *Katedre fyziky povrchov a plazmatu* so zameraním na oblasť súčasnej existencie T a H formy.

Napočítal som koncentrácie častíc v ustálenom stave pri tlaku 500 Pa v závislosti na pozdĺžnom elektrickom poli a určil som váhy jednotlivých reakcií. Porovnaním mojich výsledkov s experimentálnymi meraniami zisťujem, že mnou určená koncentrácia elektrónov je o tri až štyri rády vyššia ako sú experimentálne hodnoty.

Variáciou reakčných koeficientov reakcií, v ktorých dochádza k vzniku náboja, som dosiahol zhodu s experimentálnymi hodnotami koncentrácie elektrónov v T a H forme. Zistil som, že významnú úlohu pri procesoch vzniku náboja a generácie elektrónov hrajú reakcie:



Podarilo sa teda modelom získať prechod medzi T a H formou pozitívneho stĺpca dútnavého výboja kyslíku so zistením, že významnú úlohu hrajú disociácia a vznik atomárnych iontov.

Vo svojom modeli predpokladám konštantnosť teploty a Maxwelllovo rozdelenie pre všetky uvažované častice. Pre ťažké častice je tento predpoklad dobre splnený, pre elektróny ale už nie. Rovnica (3.8c) popisuje teplotu elektrónov ako kvadratickú funkciu elektrického poľa. Doplniť model o rovnice pre teplotu by znamenalo rozsiahle rozšíriť a skomplikovať celý model.

Zanedbaním divergentného členu neuvažujem straty spôsobené gradientom koncentrácie a elektrického poľa. V pozdĺžnom smere trubice je, vzhľadom

k charakteristike pozitívneho stĺpca, toto zanedbanie opodstatnené, ale už nie v radiálnom smere.

Táto diskusia udáva smer ďalšej práce behom doktorandského štúdia, na ktoré som sa prihlásil.

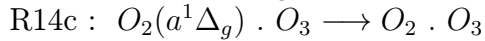
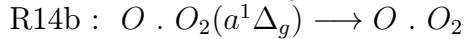
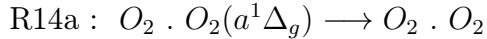
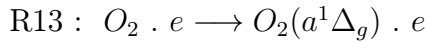
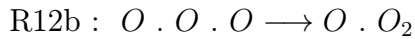
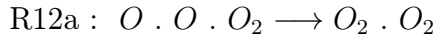
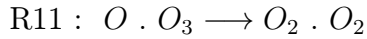
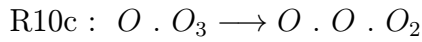
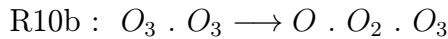
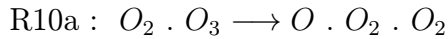
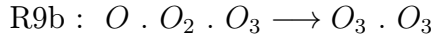
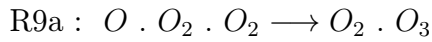
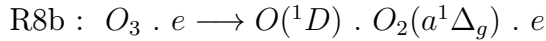
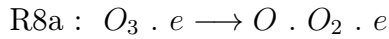
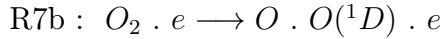
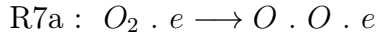
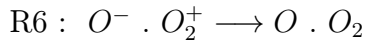
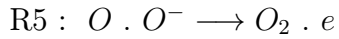
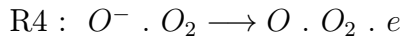
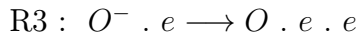
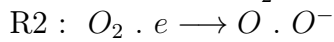
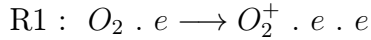
1. Zhromaždiť reakčné koeficienty z rôznych zdrojov a vzájomne ich porovnať, hlavne reakcií vzniku náboja.
2. Rozšíriť model o difúziu v radiálnom smere a určiť radiálny priebeh koncentrácie a zistiť radiálne straty.
3. Získať ďalšie experimentálne výsledky a použiť alternatívny model s difúziou, ktorý popisujem v kapitole 4.5.

# Dodatok A

## Zoznam reakcií a častíc

Častice:  $O$ ,  $O^+$ ,  $O^-$ ,  $O(^1D)$ ,  $O_2$ ,  $O_2^+$ ,  $O_2^-$ ,  $O_2(a^1\Delta_g)$ ,  $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ ,  $O_3$ ,  $O_3^-$ ,  $e$

Počet reakcií: 114



$$\begin{aligned}
\text{R14d} &: O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O_2 . hv \\
\text{R15a} &: O_2(a^1\Delta_g) . O_3 \longrightarrow O . O_2 . O_2 \\
\text{R15b} &: O_2(a^1\Delta_g) . O_3 \longrightarrow O(^1D) . O_2 . O_2 \\
\text{R16} &: O_2 . O_2(a^1\Delta_g) . O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O_3 . O_3 \\
\text{R17} &: O_2(a^1\Delta_g) . e \longrightarrow O_2 . e \\
\text{R18a} &: O^- . O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O_3 . e \\
\text{R18b} &: O^- . O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O . O_2^- \\
\text{R19} &: O^+ . O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O . O_2^+ \\
\text{R20a} &: O . O_3 \longrightarrow O_2 . O_2(a^1\Delta_g) \\
\text{R20b} &: O . O_3 \longrightarrow O_2 . O_2(b^1\Sigma_g^+) \\
\text{R21} &: O^- . O_2(b^1\Sigma_g^+) \longrightarrow O . O_2 . e \\
\text{R22} &: O_2 . e \longrightarrow O_2(b^1\Sigma_g^+) . e \\
\text{R23a} &: O_2 . O_2(b^1\Sigma_g^+) \longrightarrow O_2 . O_2 \\
\text{R23b} &: O . O_2(b^1\Sigma_g^+) \longrightarrow O . O_2 \\
\text{R23c} &: O_2(b^1\Sigma_g^+) . O_3 \longrightarrow O_2 . O_3 \\
\text{R23d} &: O_2(b^1\Sigma_g^+) \longrightarrow O_2 . hv \\
\text{R24} &: O . e \longrightarrow O^+ . e . e \\
\text{R25} &: O_2 . e \longrightarrow O . O^+ . e . e \\
\text{R26a} &: O^- . O_2 \longrightarrow O . O_2^- \\
\text{R26b} &: O^- . O_2 \longrightarrow O_3 . e \\
\text{R27a} &: O . O_2 . e \longrightarrow O^- . O_2 \\
\text{R27b} &: O . e \longrightarrow O^- . hv \\
\text{R28a} &: O_3 . e \longrightarrow O^- . O_2 \\
\text{R28b} &: O_3 . e \longrightarrow O . O_2^- \\
\text{R30} &: O^- . O_2 . O_2^+ \longrightarrow O_2 . O_3 \\
\text{R30b} &: O . O^- . O_2^+ \longrightarrow O . O_3 \\
\text{R31} &: O . O(^1D) . O_2 \longrightarrow O_2 . O_2 \\
\text{R33a} &: O . O(^1D) \longrightarrow O . O \\
\text{R33b} &: O(^1D) . O_2 \longrightarrow O . O_2 \\
\text{R33c} &: O(^1D) . O_3 \longrightarrow O . O_3 \\
\text{R33d} &: O(^1D) \longrightarrow O . hv \\
\text{R34a} &: O(^1D) . O_2 \longrightarrow O . O_2(b^1\Sigma_g^+) \\
\text{R34b} &: O(^1D) . O_2 \longrightarrow O . O_2(a^1\Delta_g) \\
\text{R35a} &: O(^1D) . O_3 \longrightarrow O_2 . O_2 \\
\text{R35b} &: O(^1D) . O_3 \longrightarrow O . O . O_2 \\
\text{R35c} &: O(^1D) . O_3 \longrightarrow O_2 . O_2(a^1\Delta_g) \\
\text{R36a} &: O_2 . O_2 . e \longrightarrow O_2 . O_2^- \\
\text{R36b} &: O . O_2 . e \longrightarrow O . O_2^-
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{R36c} &: O_2 \cdot O_2(a^1\Delta_g) \cdot e \longrightarrow O_2^- \cdot O_2(a^1\Delta_g) \\
\text{R36d} &: O_2 \cdot e \longrightarrow O_2^- \cdot hv \\
\text{R37a} &: O_2^+ \cdot e \cdot e \longrightarrow O_2 \cdot e \\
\text{R37b} &: O_2 \cdot O_2^+ \cdot e \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \\
\text{R37c} &: O_2^+ \cdot e \longrightarrow O \cdot O(^1D) \\
\text{R37d} &: O_2^+ \cdot e \longrightarrow O \cdot O \\
\text{R37e} &: O \cdot O_2^+ \cdot e \longrightarrow O \cdot O_2 \\
\text{R38a} &: O^+ \cdot O_2 \cdot e \longrightarrow O \cdot O_2 \\
\text{R38b} &: O^+ \cdot e \cdot e \longrightarrow O \cdot e \\
\text{R38c} &: O^+ \cdot e \longrightarrow O \cdot hv \\
\text{R39a} &: O \cdot O_2(a^1\Delta_g) \cdot e \longrightarrow O \cdot O_2^- \\
\text{R39b} &: O_2 \cdot O_2(a^1\Delta_g) \cdot e \longrightarrow O_2 \cdot O_2^- \\
\text{R39c} &: O_2(a^1\Delta_g) \cdot O_2(a^1\Delta_g) \cdot e \longrightarrow O_2^- \cdot O_2(a^1\Delta_g) \\
\text{R41} &: O_2(b^1\Sigma_g^+) \cdot O_3 \longrightarrow O \cdot O_2 \cdot O_2 \\
\text{R42a} &: O_2(a^1\Delta_g) \cdot O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O_2 \cdot O_2(b^1\Sigma_g^+) \\
\text{R42b} &: O_2(a^1\Delta_g) \cdot O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \cdot hv \\
\text{R43} &: O_2 \cdot O_2(b^1\Sigma_g^+) \longrightarrow O_2(a^1\Delta_g) \cdot O_2(a^1\Delta_g) \\
\text{R44a3} &: O^+ \cdot O_2^- \cdot O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O_2(a^1\Delta_g) \cdot O_3 \\
\text{R44a1} &: O \cdot O^+ \cdot O_2^- \longrightarrow O \cdot O_3 \\
\text{R44a2} &: O^+ \cdot O_2 \cdot O_2^- \longrightarrow O_2 \cdot O_3 \\
\text{R44b} &: O^+ \cdot O_2^- \longrightarrow O \cdot O_2 \\
\text{R45a} &: O \cdot O_2^- \longrightarrow O^- \cdot O_2 \\
\text{R45b} &: O \cdot O_2^- \longrightarrow O_3 \cdot e \\
\text{R46a} &: O_2 \cdot O_2^+ \cdot O_2^- \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \cdot O_2 \\
\text{R46b} &: O_2^+ \cdot O_2^- \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \\
\text{R46c} &: O_2^+ \cdot O_2^- \longrightarrow O \cdot O \cdot O_2 \\
\text{R46d} &: O \cdot O_2^+ \cdot O_2^- \longrightarrow O \cdot O_2 \cdot O_2 \\
\text{R47} &: O_2 \cdot O_2^- \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \cdot e \\
\text{R47b} &: O_2^- \cdot O_3 \longrightarrow O_2 \cdot O_3 \cdot e \\
\text{R48a} &: O_2^+ \cdot O_3^- \longrightarrow O_2 \cdot O_3 \\
\text{R48b} &: O_2^+ \cdot O_3^- \longrightarrow O \cdot O \cdot O_3 \\
\text{R49} &: O_2^- \cdot O_3 \longrightarrow O_2 \cdot O_3^- \\
\text{R50} &: O_2^- \cdot O_2(a^1\Delta_g) \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \cdot e \\
\text{R51} &: O^- \cdot O_3 \longrightarrow O \cdot O_3^- \\
\text{R52} &: O^- \cdot O_2 \cdot O_2 \longrightarrow O_2 \cdot O_3^- \\
\text{R53} &: O_2 \cdot O_3 \cdot e \longrightarrow O_2 \cdot O_3^- \\
\text{R54a} &: O \cdot O_3^- \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \cdot e \\
\text{R54b} &: O \cdot O_3^- \longrightarrow O_2 \cdot O_2^-
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{R55} &: O_2(a^1\Delta_g) \cdot e \longrightarrow O \cdot O^+ \cdot e \cdot e \\
\text{R56} &: O^+ \cdot O_2 \longrightarrow O \cdot O_2^+ \\
\text{R57a} &: O \cdot O^+ \cdot O^- \longrightarrow O \cdot O_2 \\
\text{R57b} &: O^+ \cdot O^- \cdot O_2 \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \\
\text{R57c} &: O^+ \cdot O^- \longrightarrow O \cdot O \\
\text{R58} &: O_2^- \cdot O_2(b^1\Sigma_g^+) \longrightarrow O_2 \cdot O_2 \cdot e \\
\text{R59} &: O \cdot O^+ \cdot O_2 \longrightarrow O_2 \cdot O_2^+ \\
\text{R60} &: O^+ \cdot O_3^- \longrightarrow O \cdot O_3 \\
\text{R61} &: O_2 \cdot O_3^- \longrightarrow O_2 \cdot O_3 \cdot e \\
\text{R62b} &: O_3 \cdot e \longrightarrow O \cdot O_2^+ \cdot e \cdot e \\
\text{R62c} &: O_3 \cdot e \longrightarrow O \cdot O^+ \cdot O^- \cdot e \\
\text{RV1} &: O_3 \cdot e \longrightarrow O_3^- \cdot hv \\
\text{RV2} &: O_2^+ \cdot e \longrightarrow O_2 \cdot hv \\
\text{RV4} &: O^- \cdot O_2 \longrightarrow O_3^- \cdot hv \\
\text{RV5} &: O \cdot O^+ \longrightarrow O_2^+ \cdot hv
\end{aligned}$$

# Dodatok B

## Dvojsondové merania

Dvojsondové merania za súčasnej existencie T a H formy, Tabuľka B.1. Merania sú znázornené v Obr. B.1,B.2.

Tlak  $p = 533$  Pa (4 Torr)

Výbojový prúd  $I = 30$  mA

Dĺžka sond  $L = 5$  mm

Polomer sond  $r = 50$   $\mu$ m

Plocha sond  $S = 2\pi rL$

Vzdialenosť sond  $d = 1,5$  cm

Tabuľka B.1: Dvojsondové merania VA-charakteristiky

T forma										
$U_s$ [V]	-50	-45	-40	-35	-30	-25	-20	-15	-13	-11
$I_s$ [ $\mu$ A]	-11	-11	-10,5	-9,5	-9	-8	-8	-7,5	-7	-6,5
$U_s$ [V]	-9	-7	-5	-3	-2,2	2	4	6	8	
$I_s$ [ $\mu$ A]	-6,5	-5,5	-4,5	-2,5	0	7,5	8	8	8	
H forma										
$U_s$ [V]	-100	-95	-90	-85	-80	-75	-70	-65	-60	
$I_s$ [ $\mu$ A]	-20,5	-20	-19,5	-19,5	-19	-18,5	-18,5	-16,5	-15	
$U_s$ [V]	-55	-50	-48	-46	-44	-42	-40	-38		
$I_s$ [ $\mu$ A]	-12	-10	-9	-7	-5,5	-3,5	0	0		

Vyhodnotenie meraní:

### Bezzrážková teória

$$\left. \frac{dI_s}{dU_s} \right|_{U_s=0} = \frac{e}{kT_e} \frac{i_1^+ i_2^+}{i_1^+ + i_2^+} \quad (\text{B.1})$$

$i_1^+$  iontový nasýtený prúd prvej sondy pri napätí 0 V. Ak  $S_1 = S_2$ , potom  $i_1^+ \cong i_2^+$ .

$$\left. \frac{dI_s}{dU_s} \right|_{U_s=0} = \frac{e}{kT_e} \frac{i^+}{2} \quad (\text{B.2})$$

$$n_e = \frac{i^+}{e \cdot 0,61 S \sqrt{\frac{kT_e}{M_i}}} \quad (\text{B.3})$$

$M_i$  je hmotnosť pozitívnych iontov.

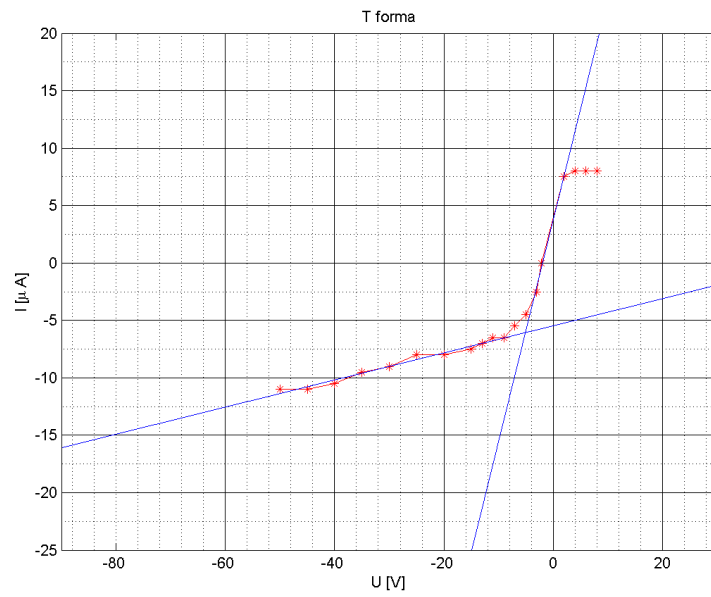
### Spojité teória [6]

$$n^+ = \frac{i_s \ln\left(\frac{\pi L}{4r}\right)}{2\pi L k (T_e + T_i) \mu^+} \quad (\text{B.4})$$

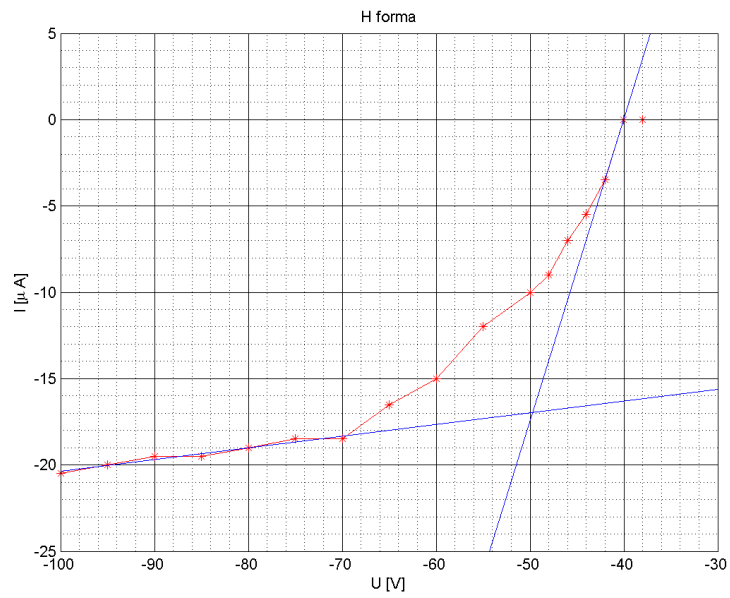
$n^+$  je koncentrácia pozitívnych iontov,  $i_s$  nasýtení iontový prúd,  $T_i$ ,  $\mu^+$  teplota a mobilita pozitívnych iontov.

Za predpokladu  $n_e \gg n^-$ ;  $T = T_i \implies n^+ = n^- + n_e \cong n_e$ .

Bezzrážková teória má dobrú platnosť pre nízke tlaky, za stredných tlakov je nutné použiť spojitú teóriu.



Obr. B.1: Dvojsondové merania T forma



Obr. B.2: Dvojsondové merania H forma

# Dodatok C

## Existencia riešenia stacionárneho problému

Zaoberám sa postupom dôkazu existencie slabého riešenia systému diferenciálnych rovníc (4.11), (4.12) s okrajovou podmienkou  $\mathcal{P}$ , samotné odvodenie popisujem v kapitole 4.5 za vstupných predpokladov popísaných v kapitole 4.1 na strane 20.  $\bar{n}$  a  $c$  sú vektorové funkcie s  $m$  zložkami (v mojom prípade  $m = 12$ ),  $\bar{n} = [\bar{n}_1, \dots, \bar{n}_m]$ ,  $c = [c_1, \dots, c_m]$ . Predpokladám základnú znalosť Sobolevových priestorov a funkcionálnej analýzy.

**Slabá formulácia**, hľadám:

$$\begin{aligned}\bar{n}_i &\in W^{1,2}(\Omega); \quad \bar{n}_i = \bar{n}_{i0} \text{ na } \partial\Omega \\ &\bar{n}_i \geq 0 \\ &i = 1 \dots m \\ \varphi &\in W^{1,2}(\Omega); \quad \varphi = \varphi_0 \text{ na } \partial\Omega\end{aligned}$$

Splňujúce:  $\forall \psi \in W_0^{1,2}(\Omega)$

$$\begin{aligned}&\int_{\Omega} D_i e^{-\left(\frac{Q_i}{kT_i}\varphi\right)} \nabla \bar{n}_i \cdot \nabla \psi \, dz + \\ &+ \int_{\Omega} \sum_j K_{ij} \bar{n}_i \bar{n}_j e^{-\left(\frac{Q_i}{kT_i} + \frac{Q_j}{kT_j}\right)\varphi} \psi + \sum_{jl} L_{ijl} \bar{n}_i \bar{n}_j \bar{n}_l e^{-\left(\frac{Q_i}{kT_i} + \frac{Q_j}{kT_j} + \frac{Q_l}{kT_l}\right)\varphi} \psi \, dz = \\ &= \int_{\Omega} \sum_{jl} K_{jli} \bar{n}_j \bar{n}_l e^{-\left(\frac{Q_j}{kT_j} + \frac{Q_l}{kT_l}\right)\varphi} \psi + \sum_{jlr} L_{jlr} \bar{n}_j \bar{n}_l \bar{n}_r e^{-\left(\frac{Q_j}{kT_j} + \frac{Q_l}{kT_l} + \frac{Q_r}{kT_r}\right)\varphi} \psi \, dz\end{aligned}\tag{C.1}$$

$$\int_{\Omega} \epsilon \nabla \varphi \cdot \nabla \psi \, dz = \int_{\Omega} \sum_i Q_i \bar{n}_i e^{-\frac{Q_i}{kT_i}\varphi} \psi \, dz\tag{C.2}$$

Dôkaz existencie chcem vykonať pomocou Schauderovej vety o pevnom bode, technika dôkazu je rozobraná v knihe [19](kap. 6.5).

Definujem zobrazenie  $\Phi$ :

$$\begin{aligned}\Phi : \bar{n} &\longrightarrow c \\ \Phi(\bar{n}) &= \Phi_2(\bar{n}, \Phi_1(\bar{n}))\end{aligned}\tag{C.3}$$

$$\begin{aligned}\Phi_1 : \bar{n} &\longrightarrow \varphi \\ \varphi &\text{ splňuje :} \\ \varphi &\in W^{1,2}(\Omega); \varphi = \varphi_0 \text{ na } \partial\Omega \\ \int_{\Omega} \epsilon \nabla \varphi \cdot \nabla \psi \, dz &= \int_{\Omega} \sum_i Q_i \bar{n}_i e^{-\frac{Q_i}{kT_i} \varphi} \psi \, dz\end{aligned}\tag{C.4}$$

$$\begin{aligned}\Phi_2 : (\varphi, \tilde{n}) &\longrightarrow c \\ c &\text{ splňuje :} \\ c_i &\in W^{1,2}(\Omega); c_i = \bar{n}_{i0} \text{ na } \partial\Omega \\ &c_i \geq 0 \\ &i = 1 \dots m \\ \int_{\Omega} D_i e^{-\frac{Q_i}{kT_i} \varphi} \nabla_x c_i \cdot \nabla \psi \, dz &+ \\ + \int_{\Omega} \sum_j K_{ij} c_i \bar{n}_j e^{-\left(\frac{Q_i}{kT_i} + \frac{Q_j}{kT_j}\right) \varphi} \psi &+ \sum_{jl} L_{ijl} c_i \bar{n}_j \bar{n}_l e^{-\left(\frac{Q_i}{kT_i} + \frac{Q_j}{kT_j} + \frac{Q_l}{kT_l}\right) \varphi} \psi \, dz = \\ = \int_{\Omega} \sum_{jl} K_{jl} \bar{n}_j \bar{n}_l e^{-\left(\frac{Q_j}{kT_j} + \frac{Q_l}{kT_l}\right) \varphi} \psi &+ \sum_{jlr} L_{jlr} \bar{n}_j \bar{n}_l \bar{n}_r e^{-\left(\frac{Q_j}{kT_j} + \frac{Q_l}{kT_l} + \frac{Q_r}{kT_r}\right) \varphi} \psi \, dz\end{aligned}\tag{C.5}$$

Chcem ukázať, že existuje  $\bar{n}$ :  $\Phi(\bar{n}) = \bar{n}$ . Dôkaz rozdelím do nasledujúcich krokov:

1. Existencia a jednoznačnosť  $\varphi$  ako riešenie rovnice (C.4).
2. Obmedzenosť  $\varphi$ :  
 $\bar{n}_i \in [0, N] \implies |\varphi| \leq C_N$  s.v.  $z \in \Omega$
3. Existencia a jednoznačnosť  $c_i$  ako riešenie rovnice (C.5).

4. Obmedzenosť a pozitivnosť  $c_i$ :  
 $\bar{n}_i \in [0, N] \implies c_i \in [0, N]; \quad \|c_i\|_{W^{1,2}(\Omega)} \leq \bar{C}_N$
5. Slabá spojitosť zobrazenia  $\Phi$ :  
 $\bar{n}^\gamma \rightharpoonup \bar{n} \implies \Phi(\bar{n}^\gamma) \rightharpoonup \Phi(\bar{n})$
6. Pomocou Schauderovej vety o pevnom bode ukázať existenciu  $\bar{n}$ :  
 $\Phi(\bar{n}) = \bar{n}$ .

Postupne jednotlivé kroky:

1. Existencia a jednoznačnosť  $\varphi$  ako riešenie rovnice (C.4):  
Rozložím  $\varphi$  na  $\varphi = \chi + \varphi_0$ ;  $\chi \in W_0^{1,2}(\Omega)$  a zavediem operátor  $A$ :

$$A : W_0^{1,2}(\Omega) \longrightarrow (W_0^{1,2}(\Omega))^*$$

$$\langle A(\chi), \psi \rangle = \int_{\Omega} \epsilon (\nabla \chi + \nabla \varphi_0) \cdot \nabla \psi - \sum_i Q_i \bar{n}_i e^{-\frac{Q_i}{kT_i}(\chi + \varphi_0)} \psi \, dz \quad (\text{C.6})$$

Operátor  $A$  má nasledujúce vlastnosti:

- (a) Potencionálny operátor s potencióálom  $F$ :

$$\langle A(\chi), \psi \rangle = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{F(\chi + s\psi) - F(\chi)}{s}$$

$$F(v) = \int_{\Omega} \epsilon \frac{1}{2} |\nabla v|^2 + \epsilon \nabla v \cdot \nabla \varphi_0 + \sum_i kT_i \bar{n}_i e^{-\frac{Q_i}{kT_i}(v + \varphi_0)} \, dz$$

- (b) Rýdzo monotónny:  $\langle A(v_1) - A(v_2), v_1 - v_2 \rangle > 0; v_1 \neq v_2$
- (c) Koercívny  $\lim_{\|v\| \rightarrow \infty} \frac{\langle A(v), v \rangle}{\|v\|} \rightarrow \infty$

Z teórie potencióálnych operátorov plynie podľa [27] (Proposition 42.11.) slabá zdola polospojitosť potencióálu  $F$ , následne existencia a jednoznačnosť riešenia nasledujúcej úlohy [27] (Theorem 41.A., Proposition 38.7.):

$$A(\chi) = 0$$

2. Obmedzenosť  $\varphi$ :

Ako testovaciu funkciu v (C.4) vezmem  $\psi = \varphi - \varphi_0$  a získam apriórny odhad:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \epsilon \nabla \varphi \cdot \nabla (\varphi - \varphi_0) \, dz &= \int_{\Omega} \sum_i Q_i \bar{n}_i e^{-\frac{Q_i}{kT_i} \varphi} (\varphi - \varphi_0) \, dz \\ &\leq \int_{\Omega} \sum_i kT_i \bar{n}_i e^{-1} e^{-\frac{Q_i}{kT_i} \varphi_0} \, dz \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Poľahky je možné zistiť, že  $\frac{Q_i}{kT_i} (\varphi - \varphi_0) \exp\left(-\frac{Q_i}{kT_i} (\varphi - \varphi_0)\right) \leq e^{-1}$

$$\begin{aligned} \|\varphi\|_{W^{1,2}(\Omega)}^2 &\stackrel{\text{Fr.}}{\leq} C \epsilon \|\nabla \varphi\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\leq C \left( \epsilon \|\nabla \varphi\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla \varphi_0\|_{L^2(\Omega)} + |\Omega| N \sum_i kT_i e^{\frac{|Q_i|}{kT_i} \|\varphi_0\|_{L^\infty(\Omega)}} \right) \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

(Fr. - podľa Friedrichsovej nerovnosti)

Ľavá strana nerovnosti (C.8) je kvadratická v člene  $\|\nabla \varphi\|$ , oproti tomu pravá strana iba lineárna. Nutne teda existuje konštanta

$C_1 : \|\nabla \varphi\|_{L^2(\Omega)} \leq C_1$ . Podľa viet o kompaktnom vnorení je v jednej dimenzii priestor  $W^{1,2}(\Omega)$  kompaktno vnorený do priestoru spojitých funkcií  $C(\Omega)$  a mám k dispozícii nerovnosť:

$$\sup_{\Omega} |\varphi| \leq C_2 \|\varphi\|_{W^{1,2}(\Omega)} \quad (\text{C.9})$$

Kombináciou (C.9), (C.8) dostávam  $\sup_{\Omega} |\varphi| \leq C_N$ , konštanta  $C_N$  závisí na  $N$ .

3. Existencia a jednoznačnosť  $c_i$  ako riešenie rovnice (C.5):

Rozložím  $c_i$  na  $c_i = \chi + \bar{n}_{i0}$ ;  $\chi \in W_0^{1,2}(\Omega)$  a zavediem bilineárnu formu  $B$  a lineárny funkcionál  $f$ :

$$\begin{aligned} B : W_0^{1,2}(\Omega) \times W_0^{1,2}(\Omega) &\longrightarrow \mathbb{R} \\ B(\chi, \psi) &= \int_{\Omega} e^{-\frac{Q_i}{kT_i} \varphi} \nabla \chi \cdot \nabla \psi \, dz \\ &+ \int_{\Omega} \sum_j K_{ij} \chi_i \bar{n}_j e^{-\left(\frac{Q_i}{kT_i} + \frac{Q_j}{kT_j}\right) \varphi} \psi + \sum_{jl} L_{ijl} \chi_i \bar{n}_j \bar{n}_l e^{-\left(\frac{Q_i}{kT_i} + \frac{Q_j}{kT_j} + \frac{Q_l}{kT_l}\right) \varphi} \psi \, dz \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

$$\begin{aligned}
f &: W_0^{1,2}(\Omega) \longrightarrow \mathbb{R} \\
f(\psi) &= \int_{\Omega} \sum_{jl} K_{jl} \bar{n}_j \bar{n}_l e^{-\left(\frac{Q_j}{kT_j} + \frac{Q_l}{kT_l}\right)\varphi} \psi + \sum_{jlr} L_{jlr} \bar{n}_j \bar{n}_l \bar{n}_r e^{-\left(\frac{Q_j}{kT_j} + \frac{Q_l}{kT_l} + \frac{Q_r}{kT_r}\right)\varphi} \psi \, d\mathbf{z}
\end{aligned} \tag{C.11}$$

Bilineárna forma  $B$  je zjavne eliptická a obmedzená, podobne je funkcionál  $f$  tiež obmedzený:

(a)  $B$  je  $W$  - eliptická:

$$B(v, v) \geq \inf(D_i) e^{-\frac{|Q_i|}{kT_i} \|\varphi\|_{L^\infty(\Omega)}} \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)}^2 \stackrel{\text{Fr.}}{\geq} \alpha \|v\|_{W^{1,2}(\Omega)}^2$$

(b)  $B$  je obmedzená:

$$\begin{aligned}
B(v_1, v_2) &\leq N e^{\frac{|Q_i|}{kT_i} \|\varphi\|_{L^\infty(\Omega)}} \|v_1\|_{W^{1,2}(\Omega)} \|v_2\|_{W^{1,2}(\Omega)} \times \\
&\times \left[ \sup(D_i) + \sum_j K_{ij} e^{\frac{|Q_j|}{kT_j} \|\varphi\|_{L^\infty(\Omega)}} + \sum_{jl} L_{ijl} N e^{\left(\frac{|Q_j|}{kT_j} + \frac{|Q_l|}{kT_l}\right) \|\varphi\|_{L^\infty(\Omega)}} \right]
\end{aligned}$$

(c)  $f$  je obmedzený:

$$\begin{aligned}
|f(v)| &\leq \sum_{jlr} (K_{jl} N + L_{jlr} N^2) \|\bar{n}_j\|_{W^{1,2}(\Omega)} \|v\|_{W^{1,2}(\Omega)} \times \\
&\times e^{\left(\frac{|Q_j|}{kT_j} + \frac{|Q_l|}{kT_l} + \frac{|Q_r|}{kT_r}\right) \|\varphi\|_{L^\infty(\Omega)}}
\end{aligned}$$

Podľa Lax-Milgramovej vety existuje práve jedno  $\chi$  splňujúce [8] (str. 297):

$$B(\chi, \psi) = -B(\bar{n}_{i0}, \psi) + f(\psi) \quad \forall \psi \in W_0^{1,2}(\Omega) : \tag{C.12}$$

( $B(\bar{n}_{i0}, \cdot)$  chápem ako lineárny funkcionál.)

4. Obmedzenosť a pozitívnosť  $c_i$ :

Pozitívnosť  $c_i$  je možné ukázať jednoducho, dosadením za testovaciu funkciu  $\psi = c_i^-$  do rovnice (C.5), ľavá strana rovnice (C.5) je pozitívna, zatiaľ čo pravá strana je negatívna:  $0 \leq B(c_i, c_i^-) = f(c_i^-) \leq 0$  a nutne  $c_i^- = 0 \implies c_i \geq 0$ .

( $c_i^- = \min(0, c_i)$ , na hranici  $c_i = \bar{n}_{i0} \geq 0$  a teda viem  $c_i^- = 0$  na  $\partial\Omega$ ,  $c_i^-$  je skutočne regulárna testovacia funkcia.)

Apriórny odhad je možné získať podobným postupom ako v bode 2, použitím testovacej funkcie  $\psi = c_i - \bar{n}_{i0}$  sa dá ukázať, že existuje konštanta  $\bar{C}_N$ :  $\|c_i\|_{W^{1,2}(\Omega)} \leq \bar{C}_N$ .

Obmedzenosť v zmysle  $|c_i| \leq N$  sa mi nepodarilo bohužiaľ dokázať, platnosť môžem iba predpokladať.

5. Slabá spojitosť zobrazenia  $\Phi$ :

Priestor  $W^{1,2}(\Omega)$  je v jednej dimenzii kompaktné vnorený do  $C(\Omega)$  a podľa vlastností kompaktného vnorenia slabá konvergencia vo  $W^{1,2}(\Omega)$  prechádza na silnú konvergenciu v  $C(\Omega)$ . Ďalej je možné ukázať, že:

$$\left. \begin{array}{l} \bar{n}_i^\gamma \rightharpoonup \bar{n}_i \quad \text{v } W^{1,2}(\Omega) \\ \varphi^\gamma \rightarrow \varphi \quad \text{v } C(\Omega) \end{array} \right\} \bar{n}_i^\gamma \exp\left(-\frac{Q_i}{kT_i}\varphi^\gamma\right) \rightharpoonup \bar{n}_i \exp\left(-\frac{Q_i}{kT_i}\varphi\right) \quad \text{v } L^2(\Omega) \quad (\text{C.13a})$$

$$\left. \begin{array}{l} \bar{n}_i^\gamma \rightharpoonup \bar{n}_i \quad \text{v } W^{1,2}(\Omega) \\ c_i^\gamma \rightarrow c_i \quad \text{v } C(\Omega) \end{array} \right\} \bar{n}_i^\gamma c_i^\gamma \rightharpoonup \bar{n}_i c_i \quad \text{v } L^2(\Omega) \quad (\text{C.13b})$$

Nech  $\bar{n}^\gamma \rightharpoonup \bar{n}$  vo  $W^{1,2}(\Omega)$  a  $\varphi^\gamma = \Phi_1(\bar{n}^\gamma)$ ,  $\varphi = \Phi_1(\bar{n})$ . Postupnosť  $\varphi^\gamma$  je podľa bodu 2 obmedzená a je z nej možné vybrať slabo konvergentnú podpostupnosť  $\exists \tau : \varphi^\gamma \rightharpoonup \tau$  vo  $W^{1,2}(\Omega)$ .

Podľa (C.13)  $A^\gamma(\varphi^\gamma - \varphi_0) \rightarrow A^\gamma(\tau - \varphi_0) = 0$ , preto je  $\tau$  riešením úlohy (C.4), z jednoznačnosti riešenia plynie  $\tau = \varphi$ .

Mám dokázané, že keď  $\bar{n}^\gamma \rightharpoonup \bar{n}$ , potom tiež  $\Phi_1(\bar{n}^\gamma) \rightharpoonup \Phi_1(\bar{n})$  vo  $W^{1,2}(\Omega)$ .

Úplne rovnakým spôsobom sa ukáže slabá spojitosť zobrazenia  $\Phi_2$ .

6. Pomocou Schauderovej vety o pevnom bode ukázať, že existuje  $\bar{n}$ :  $\Phi(\bar{n}) = \bar{n}$ .

$$V = \{v \in W^{1,2}(\Omega)^m; |v_i| \leq N; \|v_i\|_{W^{1,2}(\Omega)} \leq \bar{C}_N; i = 1..m\}$$

Množina  $V$  je uzavrená obmedzená konvexná a vďaka kompaktnému vnoreniu tiež prekompaktná v priestore spojitych funkcií.

Ukážem, že zobrazenie  $\Phi : V \rightarrow V$  je spojité v priestore spojitych funkcií. Nech mám postupnosť:

$$\{v^\gamma\} \in V, \quad v^\gamma \rightarrow v \quad \text{v } C(\Omega)$$

Postupnosť  $\{v^\gamma\}$  je obmedzená vo  $W^{1,2}(\Omega)$  a preto je možné z nej vybrať slabo konvergentnú podpostupnosť  $\exists \tau : v^\gamma \rightharpoonup \tau$ , potom ale tiež  $v^\gamma \rightarrow \tau$  v  $C(\Omega)$  a z toho vyplýva rovnosť  $\tau = v$ .

V predchádzajúcom bode som ukázal slabú spojitosť zobrazenia  $\Phi$  vo  $W^{1,2}(\Omega)$  a nutne teda:

$$v^\gamma \rightarrow v \implies \Phi(v^\gamma) \rightarrow \Phi(v) \quad \text{v } C(\Omega)$$

Podľa Schauderovej vety potom existuje aspoň jeden bod  $\bar{n} \in V$  taký, že  $\Phi(\bar{n}) = \bar{n}$  [12] (str. 69) a [19](str. 8).

# Literatúra

- [1] S.G. Belostotsky, D.J. Economou, D.V. Lopaev, T.V. Rakhimova (2005): Negative ion destruction by  $O(^3P)$  atoms and  $O_2(a^1\Delta_g)$  molecules in an oxygen plasma, *Plasma Sources Sci. Technol.*, 14(3):532–542.
- [2] Birdsall C.K., Langdon A.B. (1991): *Plasma physics via computer simulation*, Adam Higler.
- [3] Chen. F.F. (1984) *Úvod do fyziky plazmatu*, Academia, Praha.
- [4] D’Ans J., Lax E. (1970): *Taschenbuch für Chemiker und Physiker Band III, Eigenschaften von Atomen und Molekeln*, Springer, Berlin-Heidelberg-New York.
- [5] Dettmer J.W. (1981): *Discharge processes in the oxygen plasma*, Energy Conversion Branch, Aerospace Power Division.
- [6] Diany A.M., Legrand, J.C., Hrachová V. (1995): Langmuir Probe Diagnostics and Spectroscopic Measurements in the Post-Discharge of a Dinitrogen/Methane Microwave Plasma, *J. Phys. III France*, 5(4):435–445.
- [7] Eliasson B., Kogelschatz B. (1986): *Basic data for modelling of electrical discharges in gases: Oxygen*, Brown Boveri, Baden.
- [8] Evans. L.C. (1999): *Partial differential equations*, American Mathematical Society, Providence, Rhode Island.
- [9] Feoktistov V.A.,Mukhovatova A.V., Popov A.M., Rakhimova T.V. (1995): Self-consistent modelling of low-pressure RF discharges in oxygen plasma, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 28(7):1346–1353.

- [10] Hrachova V., Šicha M., Hrach R. (1993): Dependence of the Radial Profiles of the Plasma Particles Densities on the Afterglow Time in the Flowing Afterglow Plasma, *Contrib. Plasma Phys.*, 33(4):297–305.
- [11] Kocian P., Mayor J.M. (1977): *Proceedings of 13<sup>rd</sup> ICPIG*, Berlin, Germany, 253.
- [12] Kalas J., Ráb M. (2001): *Obyčejné diferenciální rovnice*, Masarykova univerzita, Brno.
- [13] Kracík J., Slavík J.B., Tobiáš J. (1964): *Elektrické výboje*, SNTL, Praha.
- [14] Kracík J., Tobiáš J. (1966) *Základy fyziky plazmatu*, Academia, Praha.
- [15] Laca M. (2008): Modelování okolí emisní sondy, Bc. thesis, Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha.
- [16] Mohr P.J., Taylor B.N., Newell D.B. (2008): CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2006, *Rev. Mod. Phys.*, 80(2):633–730.
- [17] Pavlík J., Glosík J., Šicha M., Tichý M., Potoček P. (1990): A Probe Method for Determination of time Evolution of Metastable Atoms Density in a Flowing Afterglow Plasma, *Contrib. Plasma Phys.*, 30(3):437–448.
- [18] Polak L.S., Ovsjannikov A.A., Sloveckij D.I., Burzel F.B. (1975): *Teoretičeskaja i prikladnaja plazmochimija*, Nauka, Moskva.
- [19] Roubíček T. (2005): *Nonlinear partial differential equations with applications*, volume 153, Birkhäuser, Basel-Boston-Berlin.
- [20] Řezáčová V. (1970): Electron density in the oxygen discharge plasma, *Czech. J. Phys.*, 20(1):126–131.
- [21] Schmiedt L., Morávek M.J., Kaňka A., Hrachová V. (2009): Study of rotational temperature of oxygen DC glow discharge in Silica and Pyrex discharge tubes, *Vacuum*, 84(1):72–74.
- [22] Schmiedt L. (2007): Studium doutnavého výboje v kyslíku za středních tlaků, Master's thesis, Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha.

- [23] Stoffels E., Stoffels W.W., Vender D., Kando M., Kroesen G.M.W., de Hoog F.J. (1995): Negative ions in a radio-frequency oxygen plasma, *Phys. Rev. E*, 51(3):2425–2435.
- [24] Vahedi V., DiPeso G. (1997): Simultaneous Potential and Circuit Solution for Two-Dimensional Bounded Plasma Simulation Codes, *Journal of Computational Physics*, 131(1):149–163.
- [25] Verboncoeur J.P., Alves M.V., Vahedi V., Birdsall C.K. (1993): Simultaneous Potential and Circuit Solution for 1D Bounded Plasma Particle Simulation Codes, *Journal of Computational Physics*, 104(2):321–328.
- [26] Vicher M. (1997): *Studium kyslíkového plasmatu metodami počítačové fyziky*, Ph.D. thesis, Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha.
- [27] Zeidler E. (1985) *Nonlinear functional analysis and its applications. III, Variational methods and optimization*, Springer, New York.