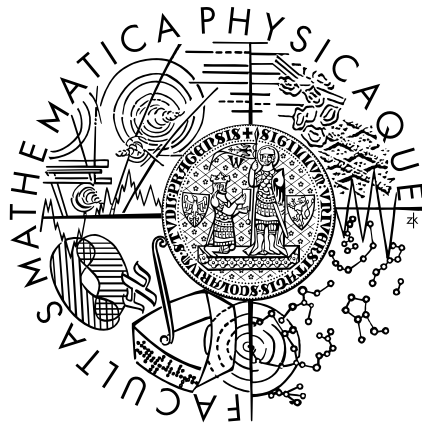


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta



Dizertační práce

Pokročilé techniky počítačového modelování ve fyzice plazmatu

f11 - Matematické a počítačové modelování

Autor: **Mgr. Petr Jelínek**
Školitel: **prof. RNDr. Rudolf Hrach, DrSc. (KFPP MFF UK)**
Konzultanti: **doc. RNDr. Věra Hrachová, CSc. (KFPP MFF UK)**
RNDr. Marián Karlický, DrSc. (AsÚ AV ČR)

PRAHA 2007

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto dizertační práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných zdrojů.

Souhlasím se zapůjčováním této dizertační práce v knihovně MFF UK v Praze.

V Praze dne 13.3.2007

.....

Petr Jelínek

Poděkování

Úspěšné dokončení této dizertační práce by se neobešlo bez podpory lidí, kterým bych zde rád touto cestou poděkoval.

V první řadě bych rád poděkoval svému školiteli prof. RNDr. Rudolfu Hrachovi, DrSc. za podnětné vedení během mého studia, za ochotu a pomoc při závěrečném sepisování této práce. Dále bych chtěl poděkovat oběma svým konzultantům, doc. RNDr. Věře Hrachové, CSc. z KFPP MFF UK a RNDr. Mariánu Karlickému, DrSc. z AsÚ AV ČR za rady a konzultace v problémech týkajících se fyziky plazmatu. RNDr. Miroslavu Bártovi, Ph.D. z AsÚ AV ČR děkuji za konzultace týkající se MHD simulací. Děkuji též Mgr. Zdeňku Hubičkovi, Ph.D. a Mgr. Petru Virostkovi z Fyzikálního ústavu AV ČR za poskytnutá experimentální data k modelování RF výboje. Také bych velice rád poděkoval doc. RNDr. Josefu Blažkovi, CSc. z KF PF JU v Českých Budějovicích za některé rady v obtížných problémech, týkajících se zejména teoretické fyziky. Děkuji též všem svým učitelům z MFF UK, přátelům a lidem, kteří mě na této cestě ovlivnili tak, že práce mohla být úspěšně dokončena.

Na závěr bych velice rád poděkoval i svým rodičům a všem svým blízkým za podporu během celého mého studia a za trpělivost, kterou se mnou měli nejen během sepisování této práce.

Obsah

Prohlášení	3
Poděkování	4
Seznam používaných symbolů	8
Předmluva	9
1 Přehled poznatků z literatury	11
1.1 Teoretický úvod do fyziky plazmatu	11
1.1.1 Definice plazmatu	11
1.1.2 Druhy a vlastnosti plazmatu	13
1.1.3 Srážky v plazmatu	15
1.1.4 Stínící vrstva plazmatu	18
1.1.5 Diagnostika plazmatu	19
1.1.6 Využití plazmatu a jeho aplikace v praxi	21
1.2 Počítačové modelování ve fyzice plazmatu	22
1.2.1 Částicové modelování	23
1.2.2 Spojité modelování	26
1.2.3 Hybridní modelování	29
1.3 MHD simulace ve fyzice plazmatu	31
1.3.1 Úvod	31
1.3.2 MHD rovnice a jejich popis	32
1.3.3 Numerické řešení MHD rovnic	33
2 Cíle doktorské práce	35

3	Částicový model plazmatu	36
3.1	Úvod	36
3.2	Selfkonzistentní model	39
3.2.1	Rovinná geometrie	39
3.2.2	Válcová a kulová geometrie	46
3.2.3	Porovnání výsledků ve všech zmíněných geometriích	48
3.3	Neselfkonzistentní model	49
3.3.1	Rovinná geometrie	49
4	Spojité model plazmatu	52
4.1	Úvod	52
4.2	1D Spojitý model	54
4.2.1	Rovinná geometrie	54
4.2.2	Válcová geometrie	56
4.2.3	Kulová geometrie	57
4.3	2D Spojitý model	58
4.3.1	Rovinná geometrie	58
4.3.2	Válcová geometrie	60
5	Hybridní model plazmatu	63
5.1	Úvod	63
5.2	Řešení hybridního modelu	63
5.3	Výsledky z hybridního modelu	65
6	Praktická aplikace hybridního modelu	71
6.1	Modelování argonového plazmatu za vyšších tlaků	71
6.2	Modelování směsi O ₂ /Ar	75
6.3	Modelování RF výboje v argonu	80
7	Závěr	91
	Seznam obrázků	93
	Seznam tabulek	97

A	Autorovy publikace v recenzovaných časopisech a recenzovaných sbornících	98
A.1	Recenzované časopisy	98
A.2	Recenzované sborníky	99
B	Autorovy ostatní publikace	101
	Literatura	103

Seznam používaných symbolů

i, j, k	sčítací indexy
i, e, g	indexy pro ionty, elektrony a neutrální částice
μ_e, μ_i	koeficienty pohyblivosti elektronů a iontů
D_e, D_i	koeficienty difúze elektronů a iontů
n_e, n_i	koncentrace elektronů a iontů
$\mathbf{j}_e, \mathbf{j}_i$	hustota toku elektronů a iontů
T_e, T_i, T_g	teplota elektronů, iontů a neutrálních částic
k_B	Boltzmannova konstanta ($1,38054 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$)
p	tlak plynu
e	elementární náboj ($1,60210 \cdot 10^{-19} \text{ C}$)
ε_0	permitivita vakua ($8,85419 \cdot 10^{-12} \text{ F} \cdot \text{m}^{-1}$)
μ_0	permeabilita vakua ($1,25664 \cdot 10^{-6} \text{ N} \cdot \text{A}^{-2}$)
U, U_i	potenciál, ionizační potenciál
\mathbf{E}	intenzita elektrického pole
m_i	hmotnost i -té částice
\mathbf{r}_i	polohový vektor i -té částice
\mathbf{v}_i	rychlost i -té částice
\mathbf{F}_i	síla působící na i -tou částici
$\Delta t, \Delta x, \Delta h$	časový krok, prostorové kroky
r_e, r_i	změna počtu částic (zdrojové členy rovnice kontinuity)
r_s	poloměr sondy, válcové i kulové
$U_{\text{rf}}, U_{\text{dc}}$	střídavé napětí, stejnosměrné napětí
$U(\mathbf{r}, t)$	potenciál v místě \mathbf{r} v čase t
ω, ω_i	úhlová frekvence, plazmová frekvence
I_e, I_i, I_d, I	elektronový, iontový, posuvný a celkový proud
λ_D	Debyeova stínící vzdálenost
N_D	počet částic v Debyeově sféře
τ	střední doba mezi srážkami
λ	střední volná dráha
ξ	náhodná volná dráha
γ	náhodné číslo
σ	účinný průřez reakce
$\langle X \rangle$	střední hodnota veličiny X
$\delta_{i,j}$	Kroneckerovo delta

Předmluva

Plazma se v současné době využívá v široké řadě aplikací, a to nejen v průmyslu, ale také například v lékařství nebo v biologii. Pro dokonalý popis plazmatu je ve všech případech nutné znát procesy, které se v plazmatu za různých podmínek odehrávají. Z tohoto důvodu experimentální fyzikové staví různé aparatury pro měření vlastností plazmatu například za různých tlaků, pro různá napětí, pro stejnosměrný nebo RF výboj, pro různé směsi pracovních plynů, atd. Experimenty ovšem mohou být v některých případech dosti finančně náročné a někdy i obtížně proveditelné. Předchozí věta platí nejen pro nízkoteplotní plazma, ale též pro plazma horké, kde se některé charakteristiky plazmatu mohou opravdu velmi obtížně měřit a experimentální zařízení bývají v tomto případě dost drahá.

Z tohoto důvodu se s rozvojem výpočetní techniky některé obtížně realizovatelné experimenty nebo třeba jen jejich části provádějí právě s pomocí výpočetní techniky. V některých případech dokonce počítačové simulace mohou plně nahradit realizaci celého experimentu. Někdy se také počítačové simulace provádějí pro teoretické potvrzení experimentálně zjištěných závislostí a v nejlepším případě pak slouží k předpovídání vlastností daného fyzikálního problému za jinak definovaných podmínek. V současné době jsou počítačové simulace, někdy též nazývané počítačový experiment, nedílnou a důležitou součástí pro poznávání fyzikálního obrazu světa.

Předkládaná dizertační práce se zabývá aplikací algoritmů počítačového modelování ve fyzice plazmatu. Práce je rozdělena do sedmi kapitol.

První část je věnována souhrnu získaných poznatků z literatury fyziky plazmatu, teoretickému úvodu do problematiky plazmatu a poznatkům z oblasti počítačového modelování v této problematice.

Ve druhé kapitole je možné nalézt cíle předkládané doktorské práce.

Další kapitoly se už věnují vlastním výsledkům, které jsme aplikovanými postupy počítačového modelování během doktorského studia získali. Konkrétně třetí kapitola se věnuje výsledkům získaným pomocí metody částicového modelování, čtvrtá se zabývá spojitým modelováním ve fyzice nízkoteplotního plazmatu a pátá kapitola pak kombinací obou předchozích postupů, takzvaným hybridním modelováním.

V šesté kapitole je možné najít některé praktické aplikace hybridního modelu,

použité pro řešení některých aktuálních problémů v oblasti fyziky nízkoteplotního plazmatu, například modelování procesů za vyšších tlaků, modelování RF výboje v plazmatu a dále také například modelování procesů ve směsi O_2/Ar plazmatu za různých tlaků.

Poslední, sedmá, kapitola je věnována shrnutí výsledků práce během celého doktorského studia na KFPP MFF UK v Praze.

Výsledky všech výpočtů byly získány vlastními programy, napsanými v programovacím jazyce Compaq Visual Fortran 6.5. Obrázky byly kresleny pomocí programového balíku MATLAB 6.0 a 7.0 a také s využitím programu ORIGIN 6.1. Výpočty byly prováděny na počítačích v laboratoři počítačové fyziky na KFPP MFF UK v Praze.

Kapitola 1

Přehled poznatků z literatury

1.1 Teoretický úvod do fyziky plazmatu

Fyzika plazmatu je stále se rozvíjející vědní obor, který je starší již více než sto let. Výboji v plynech se zabývali někteří významní fyzikové jako J. S. E. Townsend, který byl žákem J. J. Thomsona, který objevil elektron při studiu katodového záření a který je také autorem slavného pudinkového modelu atomu, dále například N. Tesla, který se zabýval už v roce 1891 RF výbojem v plynu. S fyzikou plazmatu jsou ovšem neodmyslitelně spojena hlavně jména dvou fyziků – I. Langmuira a L. Tonkse. Zejména první jmenovaný přispěl svými pracemi k významným objevům a pokrokům ve fyzice plazmatu.

1.1.1 Definice plazmatu

Často se říká, že vesmír se skládá z 99% z plazmatu. S plazmatem se ve vesmíru můžeme setkat ve hvězdách, mlhovinách, kometárních chvostech, ale také v podobě slunečního nebo hvězdného větru. Na Zemi, přestože je součástí vesmíru, ovšem plazma v přirozeném stavu téměř nenajdeme. Ne každý ionizovaný plyn totiž můžeme nazvat plazmatem. Důvod je možné nalézt v tzv. Sahově rovnici [1]:

$$\frac{n_i}{n_g} \approx 2,4 \times 10^{21} \frac{T^{\frac{3}{2}}}{n_i} \exp\left(-\frac{U_i}{k_B T}\right), \quad (1.1)$$

kde n_i je hustota iontů a n_g hustota neutrálních částic, U_i ionizační energie

plynu a T je teplota plynu. Tato rovnice udává stupeň ionizace plynu v tepelné rovnováze. Pokud bychom například spočítali poměr ionizovaných a neutrálních částic pro vzduch, kde $n \approx 3 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$, $T \approx 300 \text{ K}$ a $U_i = 14,5 \text{ eV}$ (pro dusík), dostali bychom následující poměr:

$$\frac{n_i}{n_g} \approx 10^{-122}. \quad (1.2)$$

Tedy ačkoli je i vzduch v opravdu nepatrné míře ionizován, přesto není možné ho nazývat plazmatem. Z rovnice (1.1) můžeme nahlédnout, že při zvyšování teploty postupně poměr n_i/n_g vzrůstá a konečně při velmi vysokých teplotách se plazma stává plně ionizovaným. Proto plazma v přirozeném stavu můžeme najít v kosmických objektech, kde jsou velmi vysoké teploty (Slunce, hvězdy, planetární mlhoviny, ...), spíše než na Zemi, kde se plazma vyskytuje v přirozeném stavu jen velmi zřídka, například v podobě blesků. Z tohoto důvodu je někdy možné setkat se s označením plazmatu jako se čtvrtým skupenstvím hmoty.

Definice plazmatu je ovšem celá řada, např. v literatuře [1] můžeme nalézt tuto definici plazmatu:

Plazma je kvazineutrální plyn složený z nabitých a neutrálních částic, vykazující kolektivní chování.

Jiná formulace pojmu plazma, kterou můžeme najít například v literatuře [2] je následující:

Fyzikální plynné plazma se skládá z různých druhů částic, elektricky nabitých či neutrálních v rozličných kvantových stavech.

V první z definic plazmatu je zaveden pojem *kvazineutrarity*, matematicky tato formulace znamená, že:

$$n_i \approx n_e = n_g, \quad (1.3)$$

tedy koncentrace elektronů a iontů se rovná koncentraci neutrálních částic a plazma se jeví jako neutrální.

Druhým pojmem je *kolektivní chování*. Jak již bylo řečeno v plazmatu se nacházejí nabitě částice, ty svým pohybem vytvářejí lokální náboje, které vytvářejí elektrická pole. Elektrická pole jsou dalekodosahová, tedy ovlivňují

pohyb částic i na vzdálenějších místech. *Kolektivním chováním* tedy rozumíme pohyby, které závisí nejen na lokálních podmínkách, ale také na stavu plazmatu ve vzdálených oblastech.

Z historického pohledu slovo plazma pochází z řeckého $\pi\lambda\alpha\sigma\mu\alpha$ a znamená něco uzpůsobeného, ovšem z hlediska kolektivního chování plazma samo o sobě nemá sklon přizpůsobovat se vnějším vlivům. Při využití v praxi plazma podrobujeme vnějším vlivům a zásahům, přičemž se projevují některé jeho základní vlastnosti. Tyto vlastnosti budou popsány v několika následujících kapitolách.

1.1.2 Druhy a vlastnosti plazmatu

V předchozí kapitole byla zmíněna Sahaova rovnice (1.1), ze které v závislosti na teplotě vyplývá stupeň ionizace plazmatu. Podle kritéria teploty lze plazma v zásadě rozdělit na dva druhy:

- izotermické plazma
- neizotermické plazma

V izotermickém plazmatu mají všechny částice stejnou teplotu, tedy mezi teplotami částic platí:

$$T_e = T_i = T_g.$$

S izotermickým plazmatem, kterému se také někdy říká horké nebo vysokoteplotní, se na Zemi v přirozeném stavu nesetkáme. Uměle je možné izotermické plazma v současné době vytvořit v nejlepším případě na několik sekund v laboratořích pro nukleární fúzi.

S neizotermickým plazmatem se na Zemi už můžeme setkat častěji. Tento druh plazmatu, který se někdy také nazývá nízkoteplotní, studené, výbojové nebo laboratorní plazma je charakterizováno následující relací:

$$T_e \gg T_i, T_g,$$

tedy platí, že teplota elektronů je mnohem větší než teplota iontů a neutrálních částic, v laboratorním plazmatu to může být až o několik řádů.

Ve fyzice plazmatu se teplota často udává v elektronvoltech, přičemž platí převodní vztah:

$$1 \text{ eV} \doteq 11\,600 \text{ K}.$$

V izotermickém plazmatu se teploty mohou pohybovat i v řádu desítek keV, naopak v neizotermickém – laboratorním plazmatu se setkáváme s teplotami elektronů kolem jednotek eV oproti teplotám iontů a neutrálních částic, které se pohybují kolem pokojové teploty ≈ 300 K, tedy zhruba několika setin elektronvoltu.

Zajímavé je i to, že dokonce jeden typ částic může mít v plazmatu různé teploty. Pokud je totiž v plazmatu přítomno magnetické pole, tak Lorentzova síla působící v jednom směru na částici bude jiná než síla působící na ni ve směru kolmém a tedy rychlosti částice budou náležet Maxwellovým rozdělením s rozdílnými teplotami T_{\perp} a T_{\parallel} , [1].

Základní vlastností plazmatu je jeho schopnost odstínit elektrické potenciály, které do něj byly vloženy [1]. Pokud totiž plazma narušíme vložení potenciálu, například sondou, na které je určité napětí, potom se kolem sondy vytvoří nábojový oblak a vně tohoto oblaku bude již plazma nenarušené. Pro tloušťku takového oblaku je možné odvodit vztah pro tzv. Debyeovu stínící vzdálenost [1], [2]:

$$\lambda_D = \left(\frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{n e^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.4)$$

Toto vyjádření je ovšem pouze přibližné, v přesnějším vyjádření Debyeova vztahu vystupuje i teplota iontů T_i [1].

Pro průběh potenciálu v okolí rovinné sondy lze pak odvodit vztah:

$$\phi = \phi_0 \exp\left(-\frac{|x|}{\lambda_D}\right). \quad (1.5)$$

Jak již bylo řečeno, v plazmatu musí existovat podmínka kvazineutality, tedy že koncentrace elektronů je zhruba rovna koncentraci iontů. Tuto podmínku lze ještě vyjádřit následující relací, kde vystupuje právě zavedený pojem Debyeovy stínící vzdálenosti:

$$L \gg \lambda_D,$$

kde L je charakteristický rozměr systému. Pokud by ovšem byl v nábojovém oblaku malý počet částic, pak by pojem Debyeova stínění postrádal smysl, proto musí pro počet částic v tzv. Debyeovské sféře platit následující relace:

$$N_D = n \frac{4}{3} \pi \lambda_D^3 \gg 1.$$

Právě jsme zavedli druhé kritérium, které musí plazma splňovat, abychom ho mohli nazvat plazmatem.

Uvedeme zde ještě poslední, třetí, podmínku pro plazma. Tato podmínka se týká srážek v plazmatu. Pokud bude ω tzv. plazmatická frekvence a τ střední doba mezi srážkami s neutrálními atomy, pak podle výše zmíněné třetí podmínky musí platit:

$$\omega\tau > 1.$$

Tato relace vyjadřuje, že plazma je více ovlivňováno elektromagnetickými silami, než srážkami.

1.1.3 Srážky v plazmatu

V plazmatu jsou srážky částic velice důležitým procesem. Například při vytváření nových částic, z neutrálních částic se mohou stávat nabitě nebo naopak rekombinací v objemu nebo na stěnách mohou nabitě částice zanikat a vznikat tak neutrální částice. Popis srážek v plazmatu je poměrně komplikovanou záležitostí, proto v této kapitole popíšeme zejména srážky, které jsme používali pro naše výpočty v argonovém plazmatu.

V argonovém plazmatu předpokládáme tři typy částic – elektrony, kladné argonové ionty a neutrální částice. Neutrální částice v modelu v podstatě slouží jen ke srážkám s nabitými částicemi. Abychom ale nemuseli v částicových modelech s těmito neutrálními částicemi počítat, neboť by narůstaly nároky na výpočetní čas, řeší se tento problém zavedením tzv. účinného průřezu, resp. střední volné dráhy pro nabitě částice:

$$\frac{1}{\lambda} = \sum_{i=1}^k \frac{1}{\lambda_i}, \quad (1.6)$$

kde k je počet procesů v plazmatu. Podrobnější popis střední volné dráhy a účinného průřezu lze nalézt například v literatuře [25, 26]. Dílčí nebo i celkové střední volné dráhy mohou být konstantami, většinou ovšem závisejí na energii částice. V praxi se používají různé aproximace závislostí účinných průřezů na energii částice, pro naše účely jsme používali aproximace pro elektrony [6] a pro kladné argonové ionty [49]. V našich výpočtech jsme používali sadu srážek, které ve svých výpočtech používá řada autorů, například v pracích [4, 7, 8, 11].

Ve výpočtech prakticky zanedbáváme coulombovské srážky [19], tedy srážky mezi částicemi stejného znaménka. Důležitou vlastností coulombovských interakcí je, že ve slabě ionizovaném plazmatu jsou její účinky malé ve srovnání

s procesy srážek mezi nabitými a neutrálními částicemi [49].

Používané srážkové procesy v našich výpočtech v argonovém plazmatu byly tedy následující:

- Elektrony

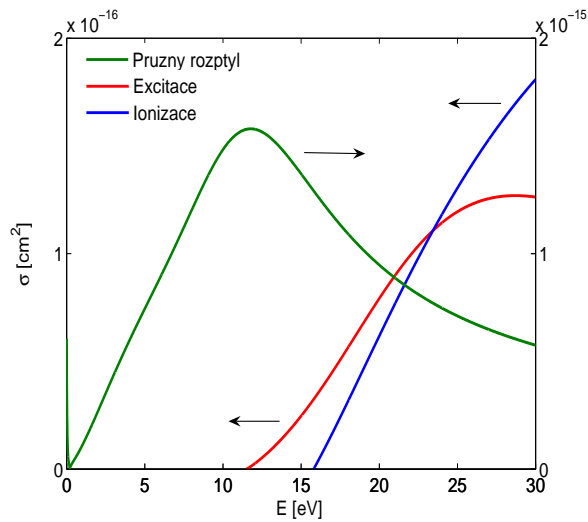
Tabulka 1.1: Srážkové procesy – elektrony

(1) $e + \text{Ar} \longrightarrow e + \text{Ar}$	Pružný rozptyl
(2) $e + \text{Ar} \longrightarrow e + \text{Ar}^*, (E_{\text{ex}} = 11,55 \text{ eV})$	Excitace
(3) $e + \text{Ar} \longrightarrow e + \text{Ar}^+ + e, (E_i = 15,76 \text{ eV})$	Ionizace

- Kladné argonové ionty

Tabulka 1.2: Srážkové procesy – argonové ionty

(4) $\text{Ar}^+ + \text{Ar} \longrightarrow \text{Ar} + \text{Ar}^+$	Rezonanční přenos náboje
(5) $\text{Ar}^+ + \text{Ar} \longrightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar}$	Pružný rozptyl

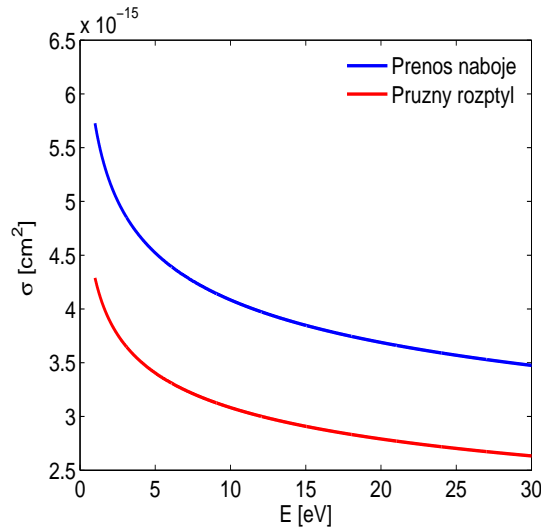


Obrázek 1.1: Účinné průřezy pro srážky elektronů s Ar atomy

Podrobnější informace k jednotlivým procesům neuvádíme, lze je nalézt např. v literatuře [11] nebo [49]. Pro ilustraci uvádíme pouze grafické znázornění závislosti účinných průřezů na energii částice.

Na obrázku 1.1 jsou uvedeny účinné průřezy pro srážky elektronů s argonovými atomy. Zeleně je vyznačen pružný rozptyl, červeně excitace a modře ionizace argonového atomu elektronem.

Na obrázku 1.2 jsou zobrazeny účinné průřezy pro srážky kladných argonových iontů s neutrálními částicemi. Červená křivka odpovídá pružnému rozptylu a modrá potom rezonančnímu přenosu náboje.



Obrázek 1.2: Účinné průřezy pro srážky Ar^+ s Ar atomy

Účinný průřez reakce vyjadřuje v podstatě pravděpodobnost srážky mezi částicemi. Pro stejné účely můžeme ještě používat tzv. *střední volnou dráhu* částice, což je dráha, kterou částice průměrně uletí, než dojde ke srážce. V praxi se ještě používá tzv. *náhodná volná dráha*, jejíž definici a následující matematické vyjádření lze nalézt například v [25, 26, 34]:

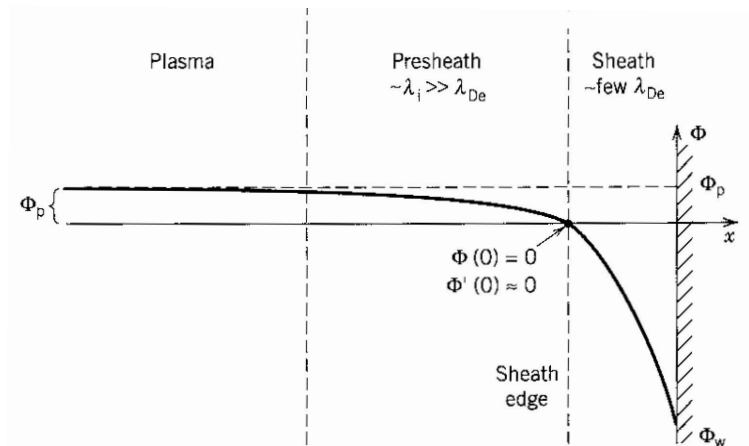
$$\xi_i = -\lambda \cdot \ln \gamma_i, \quad (1.7)$$

kde λ je právě střední volná dráha a veličina γ je rovnoměrně rozdělená náhodná veličina v intervalu $(0, 1)$. Tento vzorec však platí pro případ, že veličina λ je konstantou. Jak bylo ale popsáno výše, tato veličina v našem

případě závisí na energii částice. Musíme tedy použít postup, nazývaný *metoda nulové srážky*, který byl poprvé navržen v roce 1972 [59]. Tuto poměrně dobře známou metodu zde nebudeme detailněji popisovat, podrobný popis lze nalézt například v [11] nebo [39].

1.1.4 Stínící vrstva plazmatu

Jak již bylo napsáno v úvodní kapitole, jednou ze základních vlastností plazmatu je jeho schopnost odstínit do něj vložené elektrické potenciály. Okolo vložené elektrody se vytvoří stínící vrstva, kterou je možno rozdělit na dvě části tzv. *sheath* a *presheath*, popsány detailněji např. v [47]. Za touto vrstvou můžeme považovat plazma za nenarušené. V oblasti sheathu dochází



Obrázek 1.3: Sheath a presheath – převzato z [47]

k hlavnímu odstínění přivedeného potenciálu a v této oblasti dochází k elektrické interakci s vloženým substrátem. V tomto případě mluvíme o tzv. elektrodovém sheathu.

Plazma ale také interaguje se stěnami nádoby, ve které je umístěno. Vytvoření sheathu je totiž způsobeno velkým rozdílem hmotností elektronů a iontů a k vytvoření stínící vrstvy dochází i v případě, že do plazmatu není vložen elektrický potenciál. V důsledku své malé hmotnosti se elektrony pohybují vůči

iontům mnohem ($10^2 \div 10^3$ krát) rychleji. Po vložení objektu do plazmatu se objekt vlivem zvýšeného toku elektronů rychle nabíjí záporně vůči plazmatu na tzv. plovoucí potenciál. Takto vytvořené elektrické pole odpuzuje ostatní elektrony a přitahuje částice s kladným nábojem. Podmínkou pro vytvoření sheathu v tomto případě je, aby celkový proud, tekoucí na vložený objekt, byl nulový.

Modelováním procesů, odehrávajících se právě v oblasti sheathu a presheathu jsme se částečně věnovali i v této dizertační práci a v některých našich publikacích [J1, J2, J3]. Dále se tomuto problému věnuje také řada dalších publikací, například [12, 13, 16, 20, 21, 42, 43].

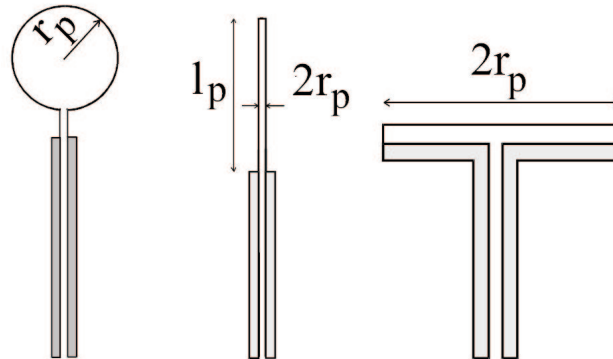
1.1.5 Diagnostika plazmatu

Plazma je možné charakterizovat pomocí několika parametrů. Těmito parametry jsou například koncentrace částic, jejich teplota, srážková frekvence pro dané interakce, koeficienty difúze a pohyblivosti, rozdělovací funkce rychlostí či energií nabitých částic, atd.

Parametry plazmatu je možné v praxi měřit pomocí celé řady metod. Tyto metody je možné rozdělit na dva druhy [66]:

- aktivní (kontaktní) metody
- pasivní (bezkontaktní) metody.

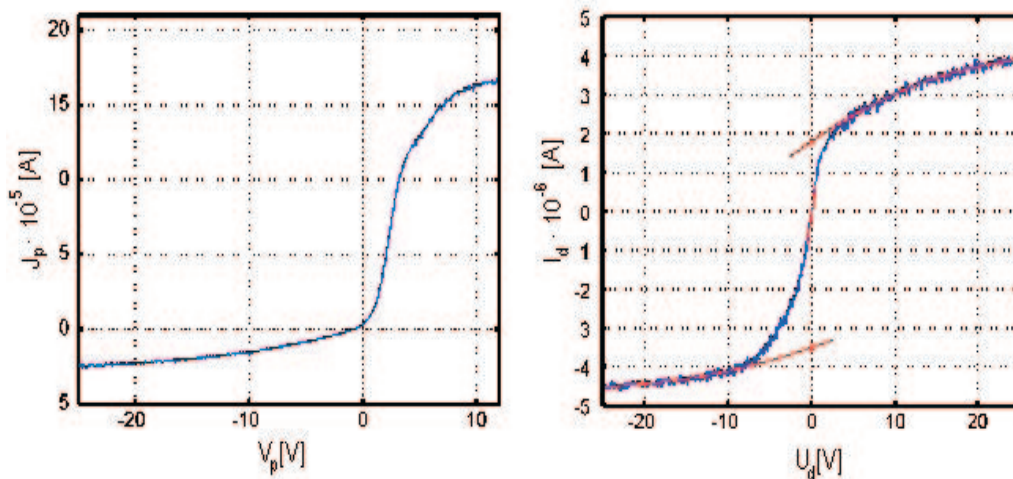
V prvním případě, jak již název napovídá, do plazmatu přímo *něco* vkládáme. Historicky nejstarší kontaktní metodou je měření parametrů plazmatu pomocí tzv. sondových měření. Metodikou měření pomocí jedné sondy se ve 20-tých letech minulého století zabývali Mott-Smith a Langmuir [67]. Do plazmatu se vkládá speciálně upravená elektroda, která může mít různý tvar, např. kulový, válcový nebo rovinný – obrázek 1.4. Na sondu se přivádí napětí a s jeho změnou se společně měří proud procházející sondou. Takto lze získat voltampérovou charakteristiku, někdy nazývanou též sondová charakteristika. Z této charakteristiky pak můžeme určit teplotu částic, koncentrace a potenciál plazmatu. Na obrázku 1.5 je možno vidět typické sondové charakteristiky měřené pomocí jedné a dvou rovinných sond. Podrobnějším popisem sondové charakteristiky se zde zabývat nebudeme, detailní informace lze najít například v literatuře [47] nebo [48]. Dále byly vypracovány i metody měření



Obrázek 1.4: Různé typy sond [69]

pomocí dvou sond, pomocí nichž se dá měřit například elektrické pole v plazmatu. Původní sondové teorie byly vypracovány pouze pro velmi nízké tlaky, kdy lze srážky uvnitř sheathu zanedbat (tzv. bezsrážková teorie). S určitými omezeními je možno je používat až do 133 Pa (tj. jednoho torru). Z tohoto důvodu byly později vypracovány teorie, zabývající se měřením v plazmatu i při vyšších tlacích.

Pro měření parametrů v horkém plazmatu se využívají jiné, mnohem komp-



Obrázek 1.5: Sondová charakteristika – jednosondová a dvousondová

likovanější typy a tvary sond. Některé typy těchto sond je možné nalézt např. v práci [38].

Jak již bylo uvedeno, druhou skupinou metod pro zjišťování charakteristik plazmatu jsou tzv. pasivní neboli bezkontaktní metody. Do této skupiny patří například *optické* nebo *mikrovlnné* metody, i když i u těchto metod existují také aktivní varianty. Velkou výhodou bezkontaktních metod je fakt, že plazma není přímo narušováno a tedy jeho charakteristiky nejsou přímo ovlivňovány měřicí metodou tak, jak je tomu právě v případě použití měření pomocí aktivních metod.

1.1.6 Využití plazmatu a jeho aplikace v praxi

Plazma se v současné době hojně využívá v celé řadě aplikací. Velmi rozšířenými aplikacemi jsou plazmatické úpravy povrchů materiálů, nanášení speciálních vrstev – tvrdých, polymerních, polovodivých, piezoelektrických, hydrofilních, atd.

Z průmyslových aplikací můžeme dále zmínit osvětlovací systémy založené na plazmatu, zobrazovací jednotky (plazmové televizory, monitory, ...), plazmochemie (plazmové leptání, ...) nebo také například lasery.

Další využití plazmatu pak můžeme najít například v biologii, lékařství, ale i v aplikacích pro ochranu životního prostředí.

V budoucnu se také plánuje využití plazmatu v iontových motorech pro pohon kosmických lodí.

V lékařství se plazma používá ke sterilizaci chirurgických nástrojů. V biologii pak například k ošetřování osiva. V prvním případě k odstranění škodlivých mikroorganismů z povrchu, dále k narušování povrchové struktury semena pro lepší klíčivost nebo naopak k depozici vrstvy z důvodu ochrany před škodlivými vlivy – vlhkostí a následným plesnivěním.

Při použití v oblasti životního prostředí dokážeme pomocí vysokoenergetického plazmového výboje likvidovat škodlivý odpad rozkladem na jednotlivé atomy. Pomocí plazmatu také můžeme destruovat škodlivé látky ve vzduchu (Volatile Organic Compounds).

Doposud jsme mluvili o aplikacích nízkoteplotního plazmatu v praxi. Samozřejmě se počítá i s praktickými aplikacemi v oblasti vysokoteplotního plazmatu. Zejména by se mělo jednat o řízenou termonukleární reakci, tedy takové jaká probíhá ve hvězdách, například i v našem Slunci. V současné

době se staví termonukleární reaktory typu tokamak [1], které by v budoucích letech měly být schopné dodávat elektrickou energii.

1.2 Počítačové modelování ve fyzice plazmatu

Počítačové modelování je poměrně mladá disciplína, která se začala prudce rozvíjet společně se zdokonalováním počítačů. Vedle klasických směrů – teoretické fyziky a experimentální fyziky existuje tedy ještě další nový směr – počítačová fyzika. Počítače se v současné době využívají v mnoha oblastech fyziky, my však budeme v našem případě hovořit o použití metod počítačové fyziky ve fyzice plazmatu.

Vzhledem k tomu, jakým způsobem je formulován fyzikální problém, můžeme použít různé metody počítačové fyziky. Z tohoto hlediska se v počítačových simulacích ve fyzice plazmatu se setkáváme s následujícími, nejčastěji používanými technikami počítačového modelování:

- částicové modelování
- spojitě modelování
- hybridní modelování.

V některých případech nás mohou zajímat polohy a rychlosti konkrétních částic, například kvůli stanovení jejich energetického a úhlového rozdělení rychlostí, či zobrazení jejich hustoty nebo koncentrací ve studované oblasti. Právě pro tyto účely se velmi dobře hodí technika částicová. Pokud nás ale zajímá plazma jako celek, tedy budeme-li ho chtít popsat na úrovni makroskopické, kde pro nás bude důležitá například rychlost proudění, tlak, hustota toku, atd., pak použijeme pro popis techniku spojitě modelování. Každá z uvedených metod má samozřejmě své výhody i nevýhody, a právě s cílem potlačit nevýhody a využít co největšího počtu výhod obou zmíněných metod se vyvinula metoda, nazývaná jako hybridní. Existuje ještě další řada metod používaných pro řešení problémů ve fyzice plazmatu, např. řešení Boltzmannovy či Vlasovovy kinetické rovnice [57], atd. Pro řešení našich problémů ale plně postačují tři výše uvedené techniky počítačového modelování. Jejich podrobnější popis uvedeme v následujících několika kapitolách.

1.2.1 Částicové modelování

Metoda částicového modelování patří mezi jedny z nejsilnějších prostředků, jak popsat studovaný fyzikální jev. Tato metoda k popisu jevu totiž využívá znalosti poloh a rychlostí všech částic v modelu a zkoumá ho tedy na mikroskopické úrovni. Získané výsledky mají proto mnohem větší vypovídající hodnotu než například z modelování spojitého, popsaného v následující kapitole. Problémem tohoto přístupu je ovšem velká časová náročnost výpočtu [40] právě kvůli velkému počtu částic v modelu a výpočtu polohy a rychlosti u každé z částic.

Podle způsobu výpočtu pomocí částicových modelů je můžeme rozdělit na dva druhy:

- selfkonzistentní přístup
- neselfkonzistentní přístup.

V prvním případě, tedy v případě selfkonzistentního přístupu, se elektrické pole nebo ekvivalentní rozložení elektrického potenciálu počítá přímo z hustoty náboje, tedy z rozložení částic v pracovní oblasti, na základě řešení Poissonovy rovnice (1.11). Síly působící na jednotlivé částice se nepočítají pomocí přímé metody z důvodu velké časové náročnosti, ale pomocí silnějších metod. Nejčastěji, a námi též používanou metodou je metoda *Particle-in-Cell* (PIC), detailněji popsána dále.

V druhém případě, při neselfkonzistentním modelování, získáváme rozložení elektrického potenciálu „jiným“ způsobem, než přímým výpočtem z polohy částic v jednotlivých buňkách pracovní oblasti. Získáváme ho například pomocí spojitého modelování, z teorie nebo přímo z experimentu. Nespornou výhodou této metody je její rychlost. Při výpočtech se většinou používá $\approx 10^4$ částic pro výpočet sondových charakteristik a $\approx 10^6 \div 10^7$ částic pro výpočet rozdělení částic dopadajících na substrát. Zejména ve druhém případě je počet částic v modelu srovnatelný nebo dokonce vyšší než v selfkonzistentním modelu. Ovšem přístup k řešení problému je zcela odlišný. Zatímco v případě selfkonzistentního přístupu počítáme v našich modelech s 10^6 částic každého druhu najednou a je třeba provést velké množství iterací, v případě neselfkonzistentního modelování se sleduje vždy trajektorie jedné částice; částice se do pracovní oblasti posílají jedna po druhé, což

výpočet značně urychlí. Nevýhodou tohoto přístupu je ovšem to, že přesnost výsledku značně závisí na přesnosti předpokladu o rozložení potenciálu nebo elektrického pole na vstupu výpočtu. Další nevýhodou tohoto přístupu je, že hůře potlačuje fluktuace, neboť zde není možnost, aby se projevilo kolektivní chování nabitých částic.

Metoda molekulární dynamiky

Při řešení fyzikálních problémů pomocí částicového modelování je třeba řešit pohybové rovnice pro každou částici zvlášť. Řeší se tedy Newtonovy pohybové rovnice ve tvaru:

$$\mathbf{F}_i = m_i \ddot{\mathbf{r}}_i. \quad (1.8)$$

Pro řešení pohybových rovnic existuje celá řada algoritmů [3, 32].

Například v astronomii, v rámci sluneční soustavy, kde se většinou řeší problém malého počtu těles, se používá jako jedna z metod pro řešení pohybových rovnic Rungeova-Kuttova metoda vyššího, nejčastěji čtvrtého řádu. Ve fyzice plazmatu je ovšem situace výrazně odlišná. V pracovní oblasti je, jak již bylo napsáno, řádově 10^6 částic a je tedy třeba hledat metody, které jsou pro výpočet rychlejší. Nejjednodušším algoritmem pro výpočet poloh a rychlostí částic, když známe sílu působící na částice, v našem případě elektrickou, je tzv. Eulerův algoritmus [25, 33]:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i^{k+1} &= \mathbf{r}_i^k + \mathbf{v}_i^k \Delta t + \frac{1}{2m_i} \mathbf{F}_i^k \Delta t^2 \\ \mathbf{v}_i^{k+1} &= \mathbf{v}_i^k + \frac{1}{m_i} \mathbf{F}_i^k \Delta t \\ \mathbf{F}_i^{k+1} &= \dots \end{aligned} \quad (1.9)$$

Výhodou tohoto algoritmu je, že je univerzálně použitelný pro všechny typy sil, tedy i pro síly, které závisí na rychlosti částice. Jeho nevýhodou je, že je pouze prvního řádu přesnosti v Δt .

Dalším algoritmem, který zde uvádíme a který jsme téměř ve všech našich částicových výpočtech používali, je tzv. Verletův algoritmus [25, 33]:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i^{k+1} &= \mathbf{r}_i^k + \mathbf{v}_i^k \Delta t + \frac{1}{2m_i} \mathbf{F}_i^k \Delta t^2 \\ \mathbf{F}_i^{k+1} &= \dots \\ \mathbf{v}_i^{k+1} &= \mathbf{v}_i^k + \frac{1}{2m_i} (\mathbf{F}_i^k + \mathbf{F}_i^{k+1}) \Delta t. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Tato metoda je druhého řádu přesnosti, ale není už univerzálně použitelná například pro problémy, kde se vyskytuje magnetické pole. Nám ovšem tento algoritmus plně postačoval, neboť v našich modelech jsme magnetické pole nezaváděli. Další nevýhodou tohoto algoritmu je potřeba udržovat v paměti dva vektory sil, v čase t_k a v čase $t_k + \Delta t$.

Particle-in-Cell

Jak již bylo napsáno výše, v částicových modelech plazmatu počítáme s velkým počtem částic a metoda pro výpočet přímého silového působení není pro tento účel vhodná. Existují metody, které jsou pro tyto problémy vhodnější. Jednou z nejpoužívanějších metod je metoda nazývaná Particle-in-Cell (PIC) [9, 10]. Podstatou této metody je rozdělení pracovní oblasti na N buněk určité velikosti. V jednotlivých buňkách se stanoví celkový náboj Q_i od částic, které se v nich nacházejí, a vydělí se objemem i -té buňky. Takto dostaneme nábojovou hustotu ρ_i , kterou dosadíme do Poissonovy rovnice:

$$\Delta U_i = -\frac{\rho_i}{\varepsilon_0}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (1.11)$$

Metod pro výpočet náboje v buňkách je opět celá řada [9, 10, 25, 26]. Nejjednodušší, ale zároveň nejméně přesná, je metoda prosté sumace náboje v jednotlivých buňkách, tzv. metoda Nearest-Grid-Point (NGP). Další často používanou metodou je metoda nazývaná Cloud-in-Cell (CIC), kdy jsou náboje „rozmazány“ do nejbližších uzlů mříže pomocí lineární interpolace. Tato metoda je jen o málo výpočetně náročnější, ale přesnější než výše zmíněná metoda NGP. Existují samozřejmě i další přesnější metody, například Triangular-Shape-Cloud (TSC), které jsou ale mnohem náročnější na výpočet, ale i na naprogramování, zvláště ve více dimenzích.

Poissonova rovnice (1.11) je eliptickou parciální diferenciální rovnicí, jejíž řešení lze nalézt metodou sítí [3, 32]. V případě řešení problému v 1D se jedná o řešení tzv. třídiagonální matice, pro kterou se používá Gaussova eliminační metoda (GEM) ve speciální úpravě právě pro třídiagonální matici, tzv. Thomasův algoritmus [10]. Po vyřešení Poissonovy rovnice dostáváme rozložení potenciálu U_i v jednotlivých bodech mříže. Z něj pak můžeme vypočítat intenzitu elektrického pole E_i v těchto bodech:

$$\mathbf{E} = -\nabla U. \quad (1.12)$$

Tato rovnice se řeší diferenčními schématy typu:

$$E_i = -\frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2\Delta x}. \quad (1.13)$$

Ze znalosti elektrického pole můžeme vypočítat sílu působící na k -tou částici s nábojem q_k :

$$\mathbf{F}_k(\mathbf{r}, t) = q_k \mathbf{E}(\mathbf{r}, t). \quad (1.14)$$

Známe-li sílu, působící na částice, vypočítáme pro ně pohybové rovnice například některou z metod (1.9) nebo (1.10). Tento postup opakujeme tak dlouho, dokud nedostaneme ustálené řešení problému.

Nebudeme zde popisovat volbu délky prostorového kroku, ani problémy spojené s volbou okrajových podmínek, podrobnější informace lze nalézt např. v [9] nebo [26].

Mimo uvedenou metodu PIC existují ještě další postupy, například takové, pomocí kterých je možné počítat sílu přímo z náboje – multipólový rozvoj, další metody jsou například P³M, Ewaldova sumace, Barnesův-Huttův algoritmus nebo rychlá multipólová metoda (FMM).

1.2.2 Spojité modelování

Spojité modelování ve fyzice plazmatu je další, často používanou metodou. Používá se hlavně pro svoji velkou výhodu a tou jsou nevelké nároky na výpočetní čas. Díky této metodě je možné studovat daný fyzikální jev na makroskopické úrovni, můžeme zde tedy například hovořit o pojmech tlak, teplota, koncentrace, rychlost proudění, atd.

Výhodou této metody je, že popis fyzikálního jevu na makroskopické úrovni odpovídá přímo pojmům experimentální fyziky. Získané výsledky se tak dají jednodušeji interpretovat.

Nevýhodou spojitého modelování ovšem je relativní nepřesnost získaných výsledků, neboť o částicích pohybujících se v modelovaném prostředí nemáme prakticky žádné informace.

Základní rovnice pro nejjednodušší spojitý model ve fyzice plazmatu jsou následující (předpokládáme zde dva typy nabitých částic – elektrony a kladné ionty):

- Rovnice kontinuity pro oba typy částic

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \mathbf{j}_i = r_i, \quad (1.15)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \mathbf{j}_e = r_e.$$

- Rovnice pro toky částic

$$\mathbf{j}_i = \mu_i n_i \mathbf{E} - D_i \nabla n_i, \quad (1.16)$$

$$\mathbf{j}_e = -\mu_e n_e \mathbf{E} - D_e \nabla n_e.$$

- Poissonova rovnice

$$\nabla^2 U = -\frac{e}{\varepsilon_0} (n_i - n_e). \quad (1.17)$$

Tuto soustavu pěti rovnic je třeba vyřešit pro získání rozdělení potenciálu v pracovní oblasti, případně intenzity elektrického pole. Řešení uvedené soustavy je poměrně komplikované a soustava se zjednoduší, pokud do rovnic (1.15) dosadíme toky částic z rovnic (1.16). Rovnici (1.17) můžeme pak ještě přepsat do tvaru:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{e}{\varepsilon_0} (n_i - n_e), \quad (1.18)$$

neboť

$$\nabla^2 U = -\nabla \cdot \mathbf{E}. \quad (1.19)$$

Po těchto úpravách pak získáme soustavu třech rovnic pro tři neznámé, n_i, n_e, \mathbf{E} . Tuto soustavu je možné řešit různými způsoby, např. metodou konečných prvků (FEM). Pro naše účely ovšem plně postačuje řešení pomocí tzv. Scharfetterova-Gummelova exponenciálního algoritmu, který je detailněji popsán níže.

Scharfetterův-Gummellův algoritmus

V této kapitole je naznačeno jednoduché odvození vzorce pro výpočet hustoty toku částic, používaných ve spojitéch výpočtech pomocí Scharfetterova-Gummelova algoritmu [56].

Tento poměrně jednoduchý algoritmus používá mnoho autorů ve svých pracích, které se týkají právě buď přímo spojitéch [5] nebo hybridních modelů plazmatu [4], [44], [53] nebo [54].

Mějme rovnici kontinuity (1.15) a rovnici pro tok částic (1.16) :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = r, \quad (1.20)$$

$$j = bn - a \frac{\partial n}{\partial x} \quad (b \equiv \pm \mu E, a \equiv D). \quad (1.21)$$

Rovnici kontinuity rozepíšeme pomocí diferenčního schématu na následující tvar, kde veličina Δ je prostorový krok:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = -\frac{j_{i+1/2} - j_{i-1/2}}{\Delta} = \frac{j_{i-1/2} - j_{i+1/2}}{\Delta}. \quad (1.22)$$

Rovnici pro tok částic znásobíme z obou stran exponenciálním členem:

$$j_{i+1/2} e^{-b(x-x_i)/a} = \left(-a \frac{\partial n}{\partial x} + bn \right) e^{-b(x-x_i)/a} = -a \frac{\partial}{\partial x} (n e^{-b(x-x_i)/a}), \quad (1.23)$$

zintegrujeme tak, jak je naznačeno dále a upravíme:

$$\int_{x_i}^{x_{i+\Delta}} j_{i+1/2} e^{-b(x-x_i)/a} dx = -a \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial}{\partial x} (n e^{-b(x-x_i)/a}) dx, \quad (1.24)$$

$$j_{i+1/2} \int_0^{\Delta} e^{-bx'/a} dx = -a (n e^{-b(x-x_i)/a})|_{x_i}^{x_{i+1}}, \quad (1.25)$$

$$j_{i+1/2} \frac{a}{b} (e^{-b\Delta/a} - 1) = a(n_i - n_{i+1} e^{-b\Delta/a}). \quad (1.26)$$

Po výše naznačených krocích dostáváme výsledné vyjádření pro tok částic v jednotlivých bodech mříže:

$$j_{i+1/2} = b \frac{n_i - n_{i+1} e^{-b\Delta/a}}{1 - e^{-b\Delta/a}}. \quad (1.27)$$

Po dosazení do rovnice (1.22) dostáváme diferenční rovnici pro jednu proměnnou – koncentraci částic. Tato rovnice vede na třídiagonální matici, která je jednoduše řešitelná pomocí Thomasova algoritmu.

Přímé aplikace Scharfetterova-Gummelova algoritmu jsou uvedeny v kapitolách vlastních výsledků získaných buď pomocí spojitého nebo hybridního modelování.

1.2.3 Hybridní modelování

Předmětem této podkapitoly bude popis tzv. hybridního modelování ve fyzice nízkoteplotního plazmatu.

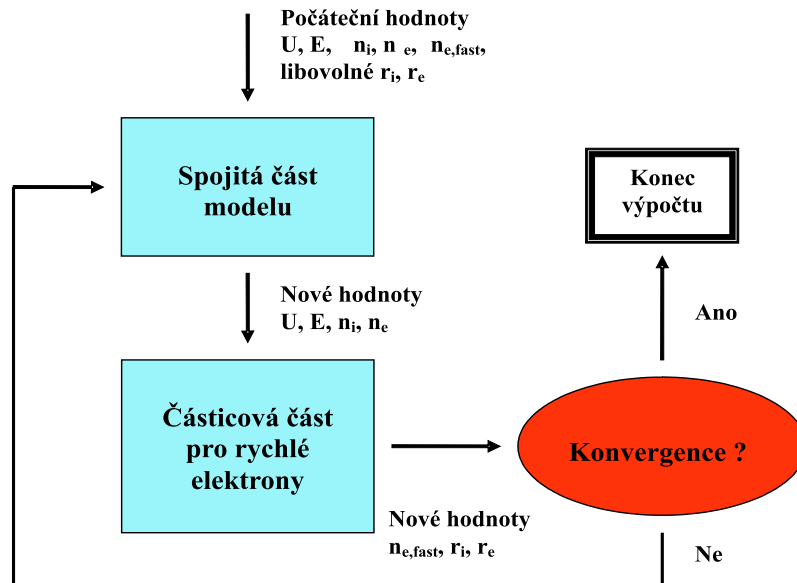
Pod pojmem *hybrid*, které pochází z řeckého $\nu\beta\rho\iota\delta\eta\varsigma$ si nejspíše představíme kombinaci několika přístupů, metod, atd. Skutečně, podle definice slova hybrid se jedná o nový přístup, který kombinuje či spojuje použití dvou nebo více metod řešení problému. Tak se můžeme s tímto slovem setkat historicky například v řecké mytologii (Kentauři – kombinace lidí a zvířat) a v současné době v biologii, matematice, technice, ale také, jak je popsáno dále i ve fyzice plazmatu.

Při počítačovém modelování ve fyzice plazmatu se s hybridními technikami [37], [53], [54] můžeme setkat poměrně často. Různí autoři ale chápou význam hybridního modelování různě a tak se můžeme setkat s hybridními modely různých typů. V publikacích můžeme najít například kombinaci neselekčně konzistentního a spojitého modelování, dále kombinaci částicového modelu pro elektrony a spojitého pro ionty. Existuje také hybridní model kombinující spojitý přístup pro tu část pracovní oblasti, kde je plazma nenarušené nebo narušené jen nepatrně, a částicového modelování, kde je plazma silně narušené například vloženou sondou, tedy v podstatě rozdělení na modelování procesů v sheathu a presheathu. Velice zjednodušeně můžeme za hybridní pokládat i model kombinující metodu Monte Carlo a metodu molekulární dynamiky, tedy jen v rámci částicového modelování. V této práci jsme používali hybridní model kombinující spojitý přístup pro ionty a „pomalé“ elektrony, a částicový model pro „rychlé“ elektrony [18]. Detailnější popis

tohoto přístupu je uveden v následujícím odstavci.

Jak již bylo napsáno v předchozích podkapitolách, při modelování ve fyzice plazmatu je možné v zásadě použít dvě základní metody – částicové a spojitě modelování. Obě techniky mají své výhody a samozřejmě také své nevýhody. Cílem hybridního modelování v jakékoliv podobě uvedené výše, je spojit obě zmíněné metody a pokusit se tak využít předností obou z nich. Z částicového modelu se tedy snažíme převzít jeho přesnost a ze spojitěho modelu jeho rychlost.

Základní myšlenkou námi používané varianty hybridního modelu je rozdělení částic na tzv. „pomalé“ a „rychlé“. Do kategorie pomalých částic budou určitě patřit ionty, neboť ty jsou mnohem těžší než lehké elektrony a pohybují se pomaleji. Ovšem i některé elektrony je možné zařadit mezi „pomalé“ a použít pro ně rovnice spojitěho modelování. V našem případě se jedná o elektrony, které mají energii menší, než je energie potřebná k ionizaci argonového atomu, tj. 15,76 eV.



Obrázek 1.6: Postup výpočtu hybridním modelem

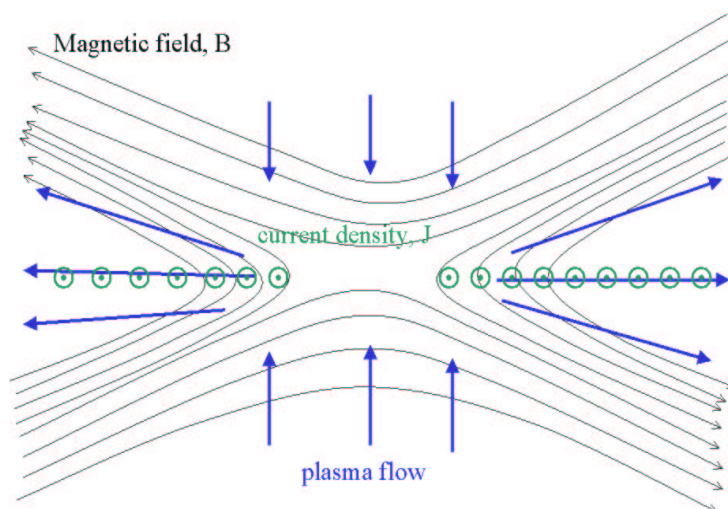
Na obrázku 1.6 je naznačen postupný průběh výpočtu v hybridním modelu. Na začátku výpočtu se pomocí spojitě části modelu vypočítá elektrické pole, poté se částicově vypočítá počet nově vzniklých „pomalých“ částic, jak

elektronů, tak iontů při srážkách. Tyto hodnoty se pak dosadí do rovnic spojitě části modelu. Celý proces se opakuje tak dlouho, dokud nedosáhneme potřebného ustálení a přesnosti výpočtu.

1.3 MHD simulace ve fyzice plazmatu

1.3.1 Úvod

Tato kapitola se zabývá dalšími numerickými postupy, užívanými při modelování ve fyzice plazmatu. Je zde zařazena jen pro úplnost, neboť se zabývá modelováním procesů v plazmatu, kde se nachází magnetické pole. Sám autor se těmito problémy přímo nezabýval, nicméně získal určité poznatky rešeršního charakteru. Jeden z autorových konzultantů se zabývá problémy ve sluneční fyzice, kde se právě MHD rovnice řeší [72]. Zabývá se zde tzv. rekonekcí magnetického pole (obr. 1.7), což je problém, který se vyskytuje nejen ve sluneční fyzice, ale třeba také v případě jaderné fúze na Zemi – v tokamaku.



Obrázek 1.7: Schematický pohled na magnetickou rekonekci ve 2D

Tato kapitola tedy bude spíše sloužit jako souhrn poznatků, načerpaných

z literatury v poslední části autorova doktorského studia, případně pro další kolegy, kteří by měli zájem se tímto problémem zabývat. Popíšeme zde rovnice magnetohydrodynamiky (MHD) a naznačíme postup při numerickém řešení soustavy MHD rovnic (1.28).

Tento přístup a popis numerické metody tedy může být užitečný například kolegům, kteří se zabývají modelováním procesů v horkém plazmatu v tokamaku.

1.3.2 MHD rovnice a jejich popis

Na tomto místě uvedeme soustavu MHD rovnic, užívaných např. při výpočtech v práci [72], a jejich stručný popis.

Při řešení problémů ve fyzice plazmatu pomocí MHD rovnic se předpokládá, jako by bylo plazma složeno ze směsi tekutin. V nejjednodušším případě předpokládáme tekutiny dvě – „elektronovou“ a „iontovou“. Popis chování těchto tekutin lze popsat právě pomocí MHD rovnic. Postupné odvození MHD rovnic zde uvádět nebudeme, toto odvození lze nalézt například v literatuře [1].

Jako první ze sady MHD rovnic (1.28) je uvedena rovnice kontinuity (nultý moment Boltzmannovy kinetické rovnice [2]), dále druhou rovnicí můžeme pokládat za „pohybovou“ rovnici pro tekutinu, která je prvním momentem Boltzmannovy kinetické rovnice [2], třetí rovnicí je tzv. indukční rovnice, kterou dostaneme aplikací operace rotace na Ohmův zákon. Konečně poslední rovnicí je rovnicí pro hustotu energie. Tato soustava rovnic tvoří tzv. self-konzistentní soustavu polí a pohybů a je numericky řešitelná, např. pomocí metody, kterou uvádíme v následující kapitole.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) &= 0, \\
 \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} &= -\nabla p + \mathbf{j} \times \mathbf{B} + \rho g, \\
 \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \nabla \times (\eta \mathbf{j}), \\
 \frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{S} &= 0,
 \end{aligned} \tag{1.28}$$

kde ve vztazích (1.28) proudová hustota \mathbf{j} , celková hustota energie U a vektor toku \mathbf{S} jsou postupně dány následovně:

$$\begin{aligned}\mathbf{j} &= \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{B}, \\ U &= \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \rho v^2 + \frac{B^2}{2\mu_0}, \\ \mathbf{S} &= \left(U + p + \frac{B^2}{2\mu_0} \right) \mathbf{v} - \frac{(\mathbf{v}\mathbf{B})}{\mu_0} \mathbf{B} + \frac{\eta}{\mu_0} \mathbf{j} \times \mathbf{B}.\end{aligned}$$

1.3.3 Numerické řešení MHD rovnic

Jedno z možných a různými autory, např. [73] dosti často používaných řešení MHD rovnic, je založeno na řešení pomocí Laxova-Wendroffova algoritmu. Podstatou řešení MHD rovnic touto metodou je převedení sady MHD rovnic (1.28) na následující tvar:

$$\frac{\partial u_i(x, t)}{\partial t} = - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial F_{i,j}(u_i(x, t))}{\partial x_j}. \quad (1.29)$$

První, třetí a čtvrtou rovnicí na tento tvar můžeme jednoduše převést. Největší „problémy“ nám tak dělá druhá rovnice. Nicméně i tato rovnice se dá po jistých matematických úpravách převést na vhodný tvar rovnice (1.29). Upravená rovnice pak vypadá následujícím způsobem:

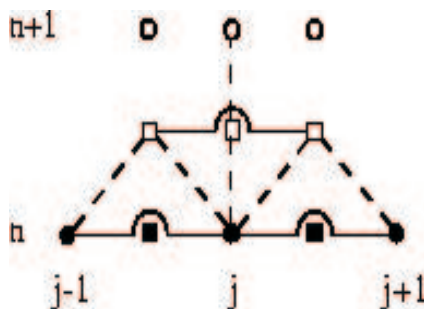
$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} = - \nabla_j \left[\rho v_i v_j - \frac{B_i B_j}{\mu_0} + \delta_{ij} \left(\frac{B^2}{2\mu_0} + p \right) \right]. \quad (1.30)$$

Nyní tak máme vhodně upravené všechny rovnice ze sady (1.28). Levá strana ve formě zápisu (1.29) odpovídá vektoru:

$$u = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v_x \\ \rho v_y \\ \rho v_z \\ B_x \\ B_y \\ B_z \\ U \end{pmatrix}. \quad (1.31)$$

Pravou stranu rovnice (1.29) zde rozepisovat nebudeme, protože je mnohem obsáhlejší a komplikovanější než její levá strana.

Po převedení MHD rovnic na tvar (1.29) použijeme již zmíněné Laxovo-Wendroffovo schéma, které je schématicky naznačeno na obrázku 1.8.



Obrázek 1.8: Schéma pro řešení MHD rovnic pomocí Laxovy-Wendroffovy metody

V matematické podobě Laxovo-Wendroffovo schéma s polovičním krokem, známé také jako „klasická“ Laxova-Wendroffova metoda vypadá takto:

$$u_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2} (u_{j+1}^n + u_j^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} (F_{j+1}^n - F_j^n) \quad (1.32)$$

nebo jako metoda leap-frog:

$$u_j^{n+1/2} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{j+1/2}^{n+1/2} - F_{j-1/2}^{n+1/2}). \quad (1.33)$$

Výsledky výpočtů pomocí této metody je možné najít například v již zmíněné publikaci [72].

Dalším možným způsobem řešení MHD rovnic je řešení pomocí metody konečných prvků (FEM). Tento přístup bychom rádi vyzkoušeli v programovém balíku FEMLAB – **F**inite **E**lement **M**ethod **L**ABoratory (nyní COMSOL Multiphysics), který je specializován pro řešení parciálních diferenciálních rovnic různými numerickými metodami, mimo jiné například i metodou FEM.

Kapitola 2

Cíle doktorské práce

Cílem předkládané dizertační práce bylo studium fyzikálních procesů probíhajících v objemu nízkoteplotního plazmatu při jeho interakci s povrchy pevných látek.

Úkolem autora bylo zaměřit se v dizertační práci zejména na:

- metodiku částicového modelování pro různé geometrie
- metodiku spojitého modelování pro různé geometrie
- metodiku hybridního modelování pro různé geometrie
- metodiku neselfkonzistentního počítačového modelování
- rozšíření hybridního modelu interakce plazma-pevná látka do více rozměrů
- studium fyzikálních procesů, probíhajících při sondové diagnostice v nízkoteplotním plazmatu

Kapitola 3

Částicový model plazmatu

3.1 Úvod

V této kapitole jsou prezentovány pouze některé výsledky, získané pomocí částicového modelování v 1D. Jak již bylo napsáno, hlavním cílem této práce bylo vytvořit hybridní model a výsledky v této kapitole slouží spíše jako test k ověření již dříve vytvořených modelů [12, 13, 16, 22, 23, 35]. Nejsou zde popisovány výsledky získané pomocí 2D modelu, neboť podrobněji se jimi zabývá dizertační práce [38]. Jsou zde uvedeny výsledky našich výpočtů, které jsme publikovali v odborných časopisech nebo na mezinárodních konferencích.

Zabývali jsme se jak modelováním selfkonzistentním – kapitola 3.2, tak modelováním neselfkonzistentním – kapitola 3.3 v argonovém plazmatu, ale také ve směsi kyslíkovo-argonového plazmatu pro různé tlaky, rozměry pracovní oblasti, předpětí na sondě a různé rozměry sond.

Počáteční rozložení částic v pracovní oblasti bylo rovnoměrně rozdělené, případně odpovídalo řešení difúzní rovnice a částice tak byly v pracovní oblasti nagenеровány von Neumannovou metodou [25, 26], aby došlo k urychlení konvergence výpočtu. Pracovní oblast byla v případě všech geometrií 1 cm dlouhá a jako okrajové podmínky byly voleny předpětí na sondě na jednom okraji pracovní oblasti a nulová hodnota potenciálu na konci pracovní oblasti. V modelu byl také řešen zdroj částic, který simuloval tok nabitých částic z nenarušeného plazmatu směrem k sondě. V prvních modelech byl problém zdroje částic vyřešen pomocí periodických okrajových podmínek,

kteřé byly aplikovány právě v oblasti nenarušeného plazmatu. V dalších modelech byly tyto okrajové podmínky nahrazeny skutečným zdrojem částic. Tento zdroj byl realizován jako rozšířená pracovní oblast, kde se nacházely částice, přicházející do oblasti presheathu a sheathu. Na počátku výpočtu měly všechny částice v pracovní oblasti i ve zdroji Maxwellovo rozdělení rychlostí, odpovídající vztahu:

$$\varrho(v) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \cdot \left(\frac{m}{k_{\text{B}}T}\right)^{3/2} \cdot v^2 \cdot \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_{\text{B}}T}\right). \quad (3.1)$$

Existují různé metody, jak počítačově nagenarovat Maxwellovo rozdělení, my jsme v našich modelech používali vyjádření pomocí vzorce, uvedeného v [26]:

$$v = \sqrt{-\ln \gamma_1 - \ln \gamma_2 \cdot \cos(2\pi\gamma_3)^2}, \quad (3.2)$$

kde γ_1, γ_2 a γ_3 jsou náhodná čísla s rovnoměrným rozdělením z intervalu $(0, 1)$. Dále během výpočtu byly po určitém počtu kroků znovu nagenarovány polohy a rychlosti částic ve zdroji, aby Maxwellovo rozdělení rychlostí zůstalo zachováno. Srážky nabitých částic s neutrálními částicemi při simu-

Tabulka 3.1: Parametry DC výboje v argonu použité v částicovém modelu

Modelový plyn	Ar, O ₂ /Ar
Koncentrace částic	1·10 ¹⁵ m ⁻³
Tlak plynu	0,1 ÷ 10 torr
Napětí na sondě	1 ÷ 10 V
Počet elektronů v modelu	1·10 ⁶
Počet kladných argonových iontů v modelu	1·10 ⁶
Časový krok – elektrony	1·10 ⁻¹¹ s
Časový krok – argonové ionty	1·10 ⁻⁸ s
Teplota elektronů	23 200 K ≈ 2,0 eV
Teplota kladných argonových iontů	300 K ≈ 0,026 eV

lacích v argonovém plazmatu byly realizovány, jak jsme již zmínili, pomocí metody nulové srážky. Sada srážek používaných v modelu je pro elektrony uvedena v tabulce 1.1, pro ionty v tabulce 1.2.

Energetické ztráty při srážkách nabitých částic s neutrálními částicemi lze počítačově vyjádřit způsobem uvedeným níže.

Srážky elektron - neutrální částice

- Pružný rozptyl

Při této interakci se počítá relativní ztráta energie elektronu při srážce s neutrální částicí následujícím způsobem:

$$\Delta E = \frac{2m}{M}(1 - \cos \chi),$$

kde m je hmotnost elektronu, M je hmotnost neutrální částice a χ je úhel rozptylu.

- Excitace

Při tomto typu srážky ztrácí elektron excitační energii 11,55 eV. Novou energii (v elektronvoltech) elektronu, který se srazil s neutrálem, vypočítáme podle následujícího vztahu:

$$E_n = E_o - 11,55 \text{ eV},$$

kde E_n je energie po srážce a energie E_o je energie, kterou měl elektron před srážkou.

- Ionizace

Při ionizační srážce je vytvořen pár elektron – iont. Původní elektron ztratí ionizační energii 15,76 eV a zbytek energie se náhodně rozdělí mezi původní a nově vzniklý elektron. Pro původní elektron můžeme ztrátu energie symbolicky zapsat následovně:

$$E_n = \gamma \cdot (E_o - 15,76 \text{ eV}), \quad \gamma \in \langle 0, 1 \rangle,$$

význam E_n a E_o je stejný, jako v předchozím případě.

Srážky iont – neutrální částice

- Pružný rozptyl

Při tomto typu srážky předpokládáme srážku dvou tuhých koulí. Pak můžeme použít následující relaci výpočet nové energie:

$$E_n = E_o(1 - \gamma),$$

kde γ je náhodné číslo, $\gamma \in \langle 0, 1 \rangle$.

- Rezonanční přenos náboje

Tato srážka je počítačově realizována tak, že se vygeneruje neutrální částice s Maxwellovým rozdělením rychlostí a po srážce přiřadíme iontu rychlost, kterou měla původní neutrální částice před jejím vstupem do srážky.

V případě modelování ve směsi O_2/Ar byl použit pro všechny typy nabitých částic pouze pružný rozptyl z důvodu nedostatečného množství experimentálních dat ke srážkám. Zejména chyběla data k interakcím mezi ionty.

V 1D částicovém modelu, jak již bylo zmíněno, byla řešena Poissonova rovnice pomocí Thomasova algoritmu. Z této rovnice pak dostáváme rozložení potenciálu v pracovní oblasti. Rovnici lze obecně napsat ve tvaru:

$$\nabla^2 U = \frac{\partial^2 U}{\partial q^2} + \frac{s}{q} \frac{\partial U}{\partial q} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}, \quad (3.3)$$

kde $s = 0, 1, 2$ pro rovinnou, válcovou, resp. kulovou geometrii. Náboj v jednotlivých buňkách byl sumován metodou CIC a pro výpočet pohybových rovnic částic byl použit Verletův algoritmus (1.10).

3.2 Selfkonzistentní model

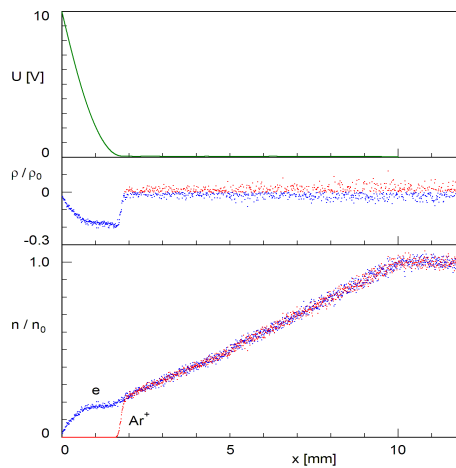
3.2.1 Rovinná geometrie

Modelování argonového plazmatu

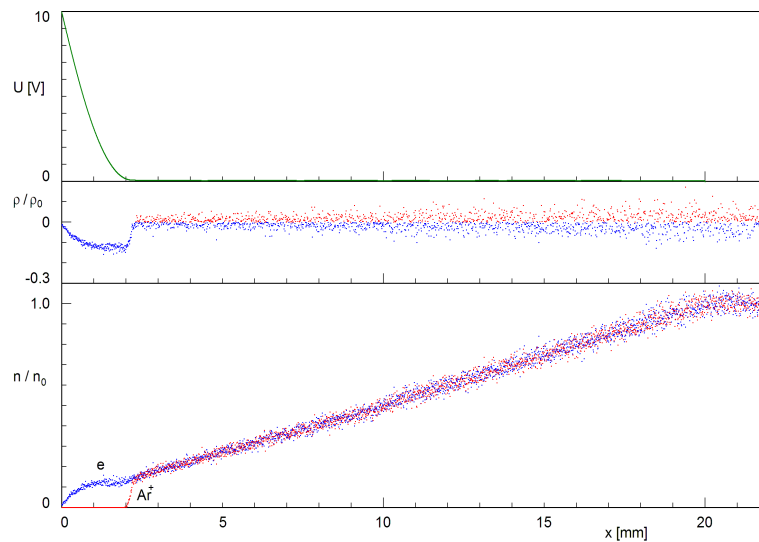
Částicovými výpočty v argonovém plazmatu, zejména v rovinné geometrii, jsme se zabývali nejpodrobněji a publikovali zde několik prací, např. [J1, J6, J8, J18]. Rovinná geometrie byla volena z důvodu jednoduchosti a také proto, že v řadě aplikací, například průmyslových, se používá substrát tvaru ploché destičky, která se vkládá do plazmatu.

V práci [J1] jsme se například zabývali vlivem geometrie studovaného problému a vlivem velikosti pracovní oblasti na získané výsledky. Na obrázcích 3.1 a 3.2 jsou zobrazeny výsledky našich výpočtů. Je zde zachyceno rozložení potenciálu, náboje a koncentrace částic pro dvě různé velikosti pracovní oblasti v rovinné geometrii. V obou případech bylo na sondu aplikováno předpětí +10 V. Jak je z těchto obrázků vidět a jak je v práci [J1] diskutováno, získané výsledky pro 1D rovinnou geometrii jsou podstatně ovlivněny

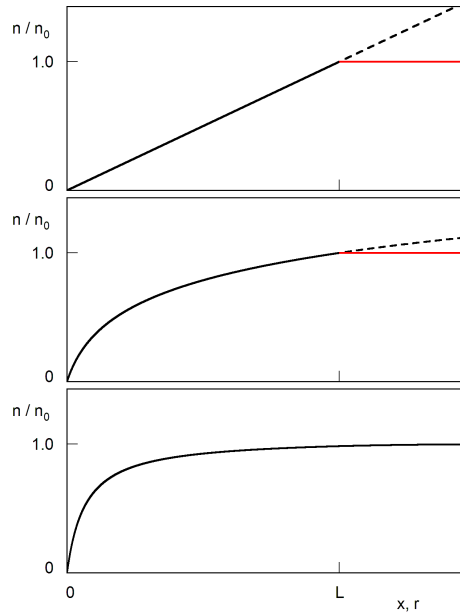
geometrií systému. Přesnější výsledky lze získat ve válcové geometrii, ovšem fyzikálně nejpřesnější výsledky získáme pouze v kulové geometrii. Vysvětlení lze najít po vyřešení difúzní rovnice, které uvádíme v grafické podobě jako obrázek 3.3 a také pro srovnání s výsledky získanými našimi modely. V práci [J6] jsme studovali rozdělení rychlostí elektronů v závislosti na vzdálenosti od sondy. V tomto modelu jsme volili tři různé vzdálenosti od sondy



Obrázek 3.1: Potenciál, náboj a koncentrace částic, délka oblasti 1 cm

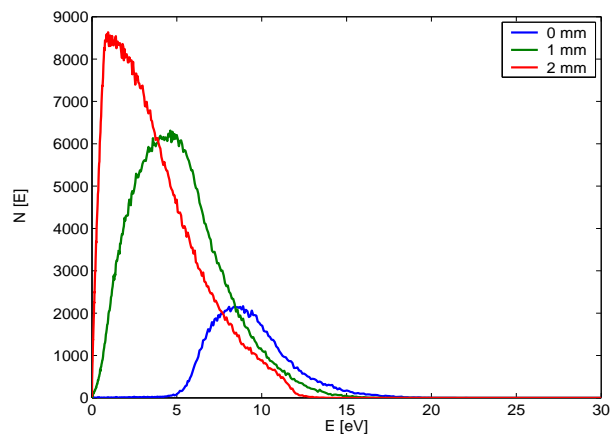


Obrázek 3.2: Potenciál, náboj a koncentrace částic, délka oblasti 2 cm

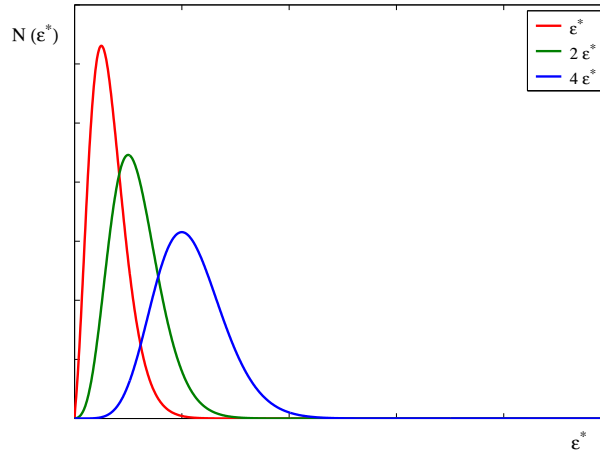


Obrázek 3.3: Řešení difúzní rovnice – rovinná, válcová a kulová geometrie

vnořené do plazmatu. První případ odpovídal poloze přímo na sondě, druhá poloha byla volena jako střed sheathu a konečně třetí byla na jeho okraji. Výsledky našich výpočtů jsou zobrazeny na obrázku 3.4.



Obrázek 3.4: Energetická rozdělení elektronů, předpětí +10 V – normováno ke koncentraci částic



Obrázek 3.5: Maxwelllovo rozdělení rychlostí pro různé driftové rychlosti ve směru osy x – normováno ke koncentraci částic

Pro energetické rozdělení částic s přidáním *driftové* rychlosti ve směru osy x byl v práci [J6] odvozen následující vztah:

$$dP(E^*, E^* + dE^*) = \exp(-E^* - \varepsilon^*) \cdot \frac{\sinh(2\sqrt{\varepsilon^* E^*})}{\sqrt{\pi\varepsilon^*}} \cdot dE^*, \quad (3.4)$$

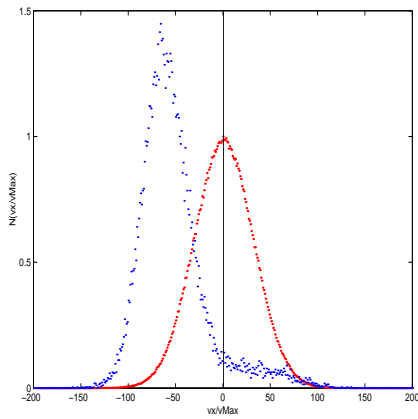
kde

$$\varepsilon^* = \frac{mv_{\text{drift}}^2}{2k_B T}, \quad E^* = \frac{mv^2}{2k_B T}. \quad (3.5)$$

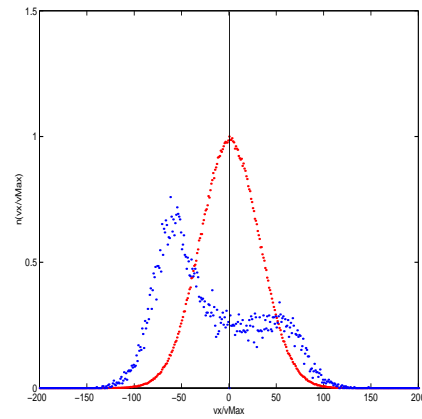
Na obrázku 3.5 je zobrazen graf funkce (3.4) pro různé driftové rychlosti ve směru osy x . Tento graf uvádíme pro možné srovnání s výsledky našich výpočtů rozdělení rychlostí elektronů v různých vzdálenostech od sondy, vnořené do plazmatu.

Z obrázku 3.4 je patrné, že nejvíce je původní Maxwelllovo rozdělení rychlostí ovlivněno přímo na sondě a s rostoucí vzdáleností od sondy jsou rychlosti elektronů ovlivněny již méně. To odpovídá tomu, že v blízkosti sondy je největší potenciálový spád, elektrony jsou zde silně urychlovány elektrickým polem a tudíž získávají velkou driftovou rychlost a dochází tak k porušení Maxwellovy rozdělovací funkce pro rychlosti. Jak je vidět, namodelované výsledky jsou v souladu i s teoretickým vztahem (3.4), graficky znázorněným na obrázku 3.5.

V publikaci [J18] jsme zkoumali vliv změny tlaku na rozdělení rychlostí elektronů. Zabývali jsme se pouze nižšími tlaky, pro vyšší tlaky jsme z důvodu větší časové náročnosti výpočtu používali hybridní model. Modrou barvou jsou na obrázcích 3.6 a 3.7 zobrazena rozdělení x -ové složky rychlostí elektronů v blízkosti sondy vnořené do plazmatu, červeně jsou zobrazena teoretická Maxwellova rozdělení.



Obrázek 3.6: Rozdělení x -ové složky rychlosti elektronů; 0,1 torr



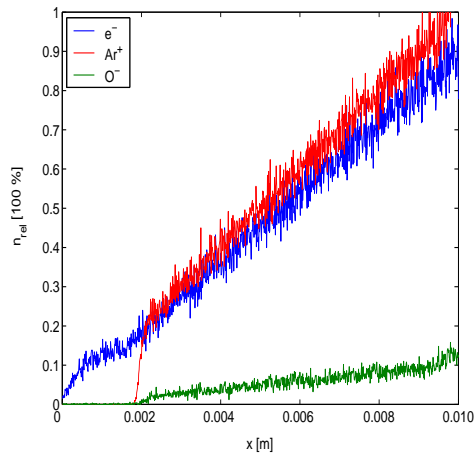
Obrázek 3.7: Rozdělení x -ové složky rychlosti elektronů; 1,0 torr

Na obrázcích je vidět, že se maximum x -ové složky rychlosti „posouvá“ směrem doleva, což je způsobeno umístěním sondy v plazmatu. Elektrony jsou přitahovány směrem k sondě, roste počet elektronů se zápornou x -ovou složkou rychlosti. Z obou uvedených obrázků je patrné, že pro nižší tlaky je počet elektronů, které mají vyšší rychlost, větší. To je způsobeno delší střední volnou dráhou, mezi srážkami, proto elektrony mohou mezi srážkami získat v elektrickém poli větší rychlosti. Z tohoto důvodu také dochází k vyššímu počtu excitačních a ionizačních srážek. Tímto problémem jsme se podrobněji zabývali ve výpočtech pomocí hybridních modelů a následně připravili pro publikování v [J4].

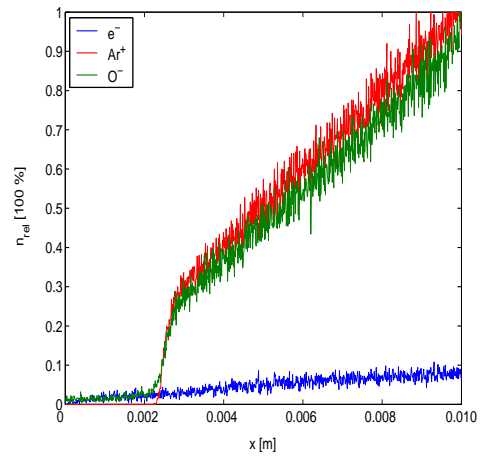
Modelování směsi O_2/Ar

V této podkapitole stručně zmíníme výsledky získané selfkonzistentním modelem pro směs O_2/Ar a prezentované na mezinárodní konferenci 17th *International Symposium on Plasma Chemistry* v Kanadě a následně publikovaných v [J11]. Vzhledem k neúplnosti informací o srážkových procesech

ve směsi O_2/Ar plazmatu se jednalo pouze o modelovou studii, která měla především podchytit vliv dvou typů nosičů záporného náboje na procesy v plazmatu. Ve zmíněné publikaci jsme se zabývali změnou tloušťky sheathu v závislosti na koncentraci záporných kyslíkových iontů v pracovní oblasti. Relativní koncentrace záporných kyslíkových iontů O^- byla volena od 10% až do 90%. Jak již bylo řečeno, ze srážek byly uvažovány pouze pružné rozptyly pro všechny typy částic z důvodu nedostatku experimentálních dat, především dat pro vzájemné interakce mezi ionty. Experimentální data k těmto simulacím byla čerpána převážně z publikace [24] a dále potom z publikací [41] a [52].



Obrázek 3.8: Graf koncentrace nabitých částic, relativní koncentrace záporných iontů O^- – 10%

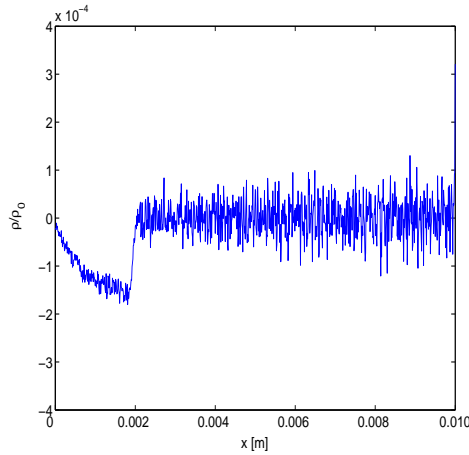


Obrázek 3.9: Graf koncentrace nabitých částic, relativní koncentrace záporných iontů O^- – 90%

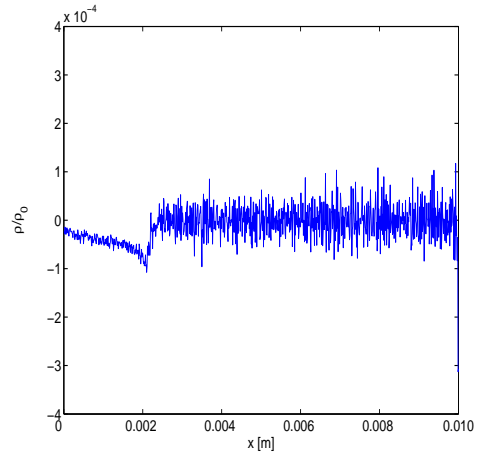
Výsledky našich výpočtů jsou zobrazeny na obrázcích 3.8–3.11. Z důvodu snažšího porovnání získaných výsledků uvádíme výsledky pouze pro relativní koncentrace negativních iontů O^- 10% a 90%.

Na obrázcích 3.8 a 3.9 jsou znázorněny koncentrace nabitých částic v pracovní oblasti, na obrázcích 3.10 a 3.11 je pak zobrazeno rozložení hustoty elektrického náboje jako funkce vzdálenosti od sondy.

Z uvedených obrázků a ještě lépe z obrázků v naší publikaci [J10] je patrné, že pro větší koncentrace záporných iontů O^- je tloušťka sheathu větší. Na obrázcích 3.10 a 3.11 je možné porovnat rozložení hustoty elektrického náboje pro obě zmíněné koncentrace O^- . V případě nižší koncentrace O^-



Obrázek 3.10: Rozložení hustoty náboje, relativní koncentrace záporných iontů O^- – 10%



Obrázek 3.11: Rozložení hustoty náboje, relativní koncentrace záporných iontů O^- – 90%

je prostorová hustota náboje v oblasti sheathu větší než v případě vyšších koncentrací O^- . Vysvětlení je možné dostat při pohledu na obrázky 3.8 a 3.9. Na obrázku 3.8, kde je nízká koncentrace záporných iontů O^- , je v oblasti sheathu velká koncentrace elektronů a nulová koncentrace kladných argonových iontů. Z tohoto důvodu je prostorový náboj tvořen z velké části vlastně jen elektrony.

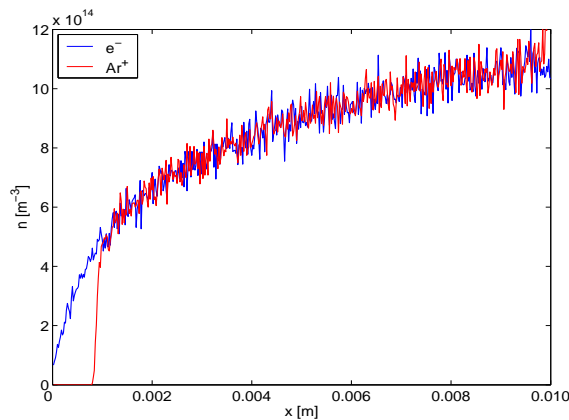
Naproti tomu v případě velké koncentrace O^- v pracovní oblasti je celkový prostorový náboj v oblasti sheathu sice také záporný, ale jak je z obrázku vidět, je menší než v prvním případě. To je způsobeno nízkou koncentrací lehkých elektronů, které se v sheathu téměř vůbec nevyskytují, a také nízkou koncentrací záporných iontů O^- v sheathu. V oblasti sheathu je koncentrace záporných iontů nízká z toho důvodu, že tyto ionty dopadají společně s elektrony na sondu, která je přitahuje, ale jsou oproti elektronům mnohem těžší, takže se ve směru k sondě pohybují pomaleji a jejich koncentrace v okolí sondy klesá. Celkový prostorový náboj je tak nižší, než v případě nižší koncentrace O^- a vyšší koncentrace elektronů.

Těmito úvahami je též možné vysvětlit různé tloušťky sheathu v závislosti na koncentraci záporných kyslíkových iontů O^- .

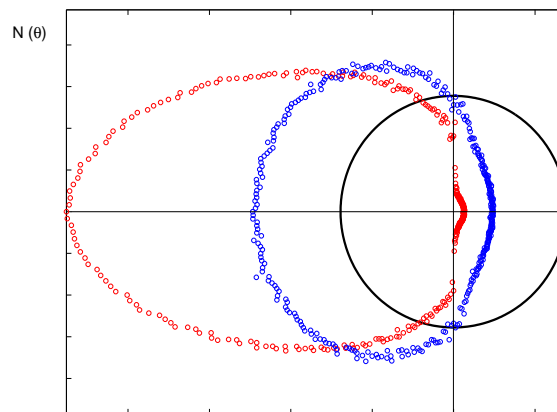
Výsledky získané pomocí částicového modelování lze porovnat s výsledky získanými hybridním modelem, popsáním v kapitole 5.

3.2.2 Válcová a kulová geometrie

V této kapitole uvádíme některé výsledky, získané výpočty ve válcové a kulové geometrii. Válcovou geometrii jsme volili v našich výpočtech proto, že v praxi se sonda válcového tvaru dosti často používá například v diagnostice plazmatu [69].

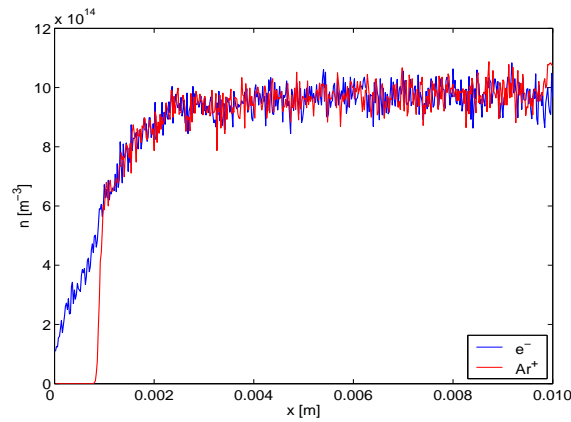


Obrázek 3.12: Koncentrace nabitých částic – válcová geometrie

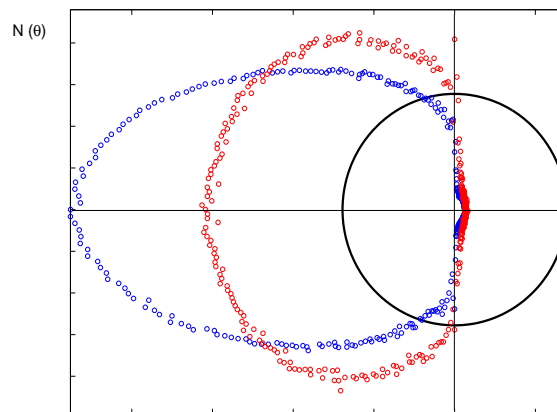


Obrázek 3.13: Úhlová rozdělení rychlostí elektronů v blízkosti válcové sondy různých rozměrů – normováno ke koncentraci částic

Na obrázcích 3.12 a 3.14 jsou znázorněny koncentrace nabitých částic v pracovní oblasti. Tyto výsledky mohou být porovnány s řešením difúzní rovnice,



Obrázek 3.14: Koncentrace nabitých částic – kulová geometrie



Obrázek 3.15: Úhlová rozdělení rychlostí elektronů v blízkosti kulové sondy různých rozměrů – normováno ke koncentraci částic

znázorněné na obrázku 3.3. Jako poloměr sond jsme v obou případech uvažovali hodnoty $r_s = 0,0001$ m, tedy takový rozměr, který se běžně používá při experimentech. Pro porovnání výsledků jsme tytéž výpočty prováděli se sondami s poloměrem desetkrát větším, tedy s poloměrem $r_s = 0,001$ m.

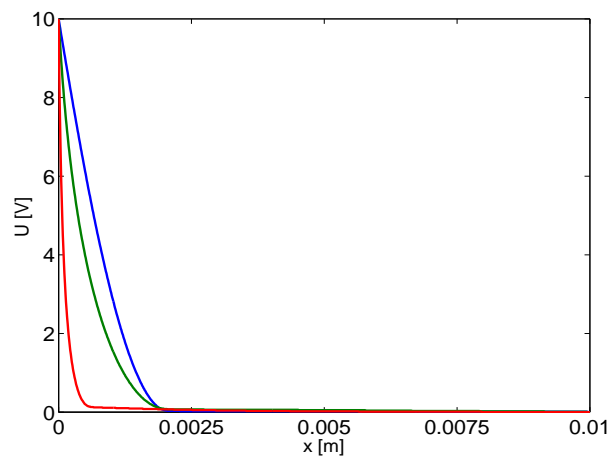
Na obrázcích 3.13 a 3.15 jsou zobrazena úhlová rozdělení rychlostí elektronů pro válcovou, resp. kulovou sondu pro oba zmíněné poloměry r_s . V obou případech jsou modře zobrazeny výsledky pro sondy s poloměrem $0,001$ m, červeně pro sondy s poloměrem $0,0001$ m a černě jsou zobrazena teoretická

Maxwellova rozdělení. Poloha v pracovní oblasti, odkud jsme získávali data, byla zvolena uprostřed sheathu, protože zde byly patrné největší rozdíly mezi namodelovanými výsledky. Bylo též zjištěno, že při zvětšení poloměru sondy desetkrát, vzrostla tloušťka sheathu v obou případech zhruba dvakrát.

Dále jsme se v práci [J7] zabývali úhlovým rozdělením rychlostí částic v pracovní oblasti, opět pro různé vzdálenosti od sondy, ale také pro různé časové kroky pro elektrony a ionty. Šlo zde o srovnání výsledků z 1D a 2D modelu, ale jak již bylo řečeno, 2D modelem se podrobněji zabývá dizertační práce [38].

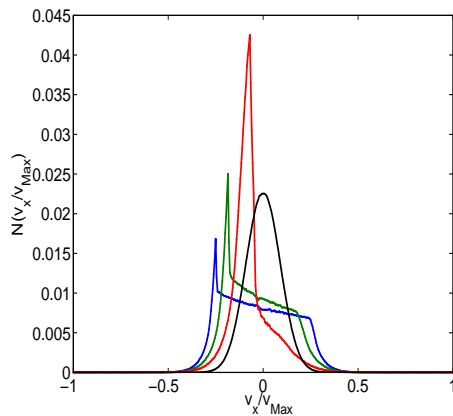
3.2.3 Porovnání výsledků ve všech zmíněných geometriích

V publikaci [J2] jsme studovali energetická rozdělení elektronů, rozdělení jejich x -ové složky rychlosti a rozdělení potenciálu pro různé geometrie – rovinnou, válcovou a kulovou a pro různé vzdálenosti od vnořeného substrátu – poloha přímo na substrátu, ve středu a na okraji sheathu. V této kapitole jsou prezentovány výsledky pro všechny geometrie, ale pouze ve středu sheathu, neboť zde jsou patrné největší rozdíly.

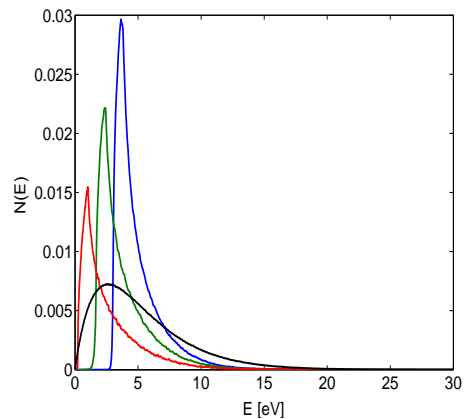


Obrázek 3.16: Rozložení potenciálu v pracovní oblasti pro rovinnou, válcovou a kulovou geometrii

Na obrázku 3.16 je zobrazeno rozložení potenciálu jako funkce vzdálenosti od sondy. Modře je zobrazen potenciál pro rovinnou geometrii, zeleně pro válcovou a červeně pro kulovou geometrii. Na obrázcích 3.17 a 3.18 jsou znázorněna rozdělení x -ové složky rychlosti a energetická rozdělení elektronů pro všechny zmíněné geometrie. Barvy odpovídají popisu, uvedenému výše, navíc jsou zde ještě černou barvou zobrazena teoretická Maxwellova rozdělení.



Obrázek 3.17: Rozdělení x -ové složky rychlosti elektronů pro různé geometrie



Obrázek 3.18: Energetická rozdělení elektronů pro různé geometrie

Z obrázku 3.16 je vidět, že největší potenciálový spád je u kulové sondy. Tomu odpovídají i výsledky na obrázku 3.18, z něhož je patrné, že díky velkému potenciálovému spádu získávají elektrony uprostřed sheathu největší rychlost oproti ostatním geometriím. Diskuzi všech získaných výsledků, tedy pro všechny tři polohy v pracovní oblasti – přímo na vnořeném substrátu, ve středu a na okraji sheathu – a pro všechny geometrie lze nalézt v již zmíněné publikaci [J2].

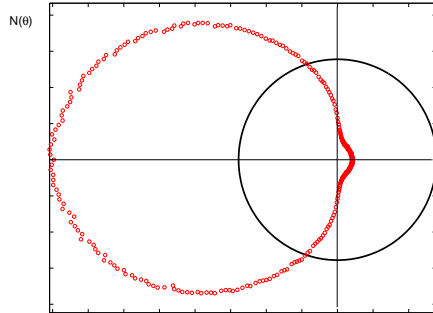
3.3 Neselfkonzistentní model

3.3.1 Rovinná geometrie

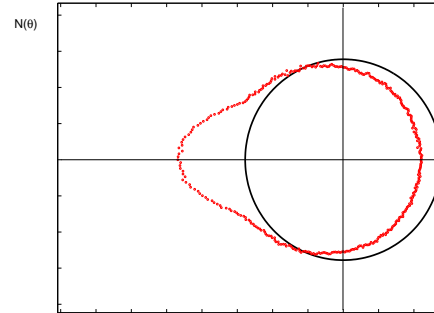
V této podkapitole uvádíme výsledky výpočtů v argonovém plazmatu, získané pomocí neselfkonzistentního modelu.

Výsledky výpočtů byly prezentovány v rámci mezinárodní konference 32nd

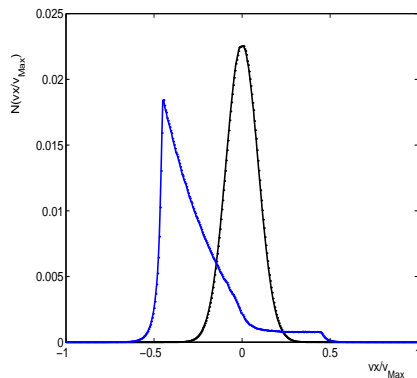
EPS Plasma Physics Conference v Tarragoně ve Španělsku.



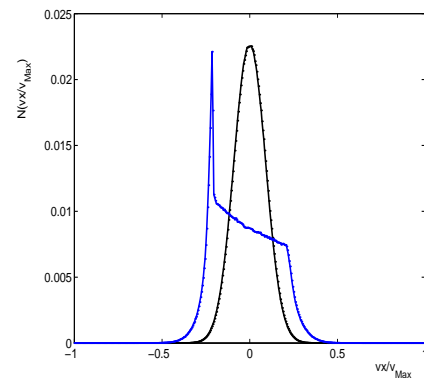
Obrázek 3.19: Úhlové rozdělení rychlostí elektronů na povrchu sondy



Obrázek 3.20: Úhlové rozdělení rychlostí elektronů 1 mm od povrchu sondy



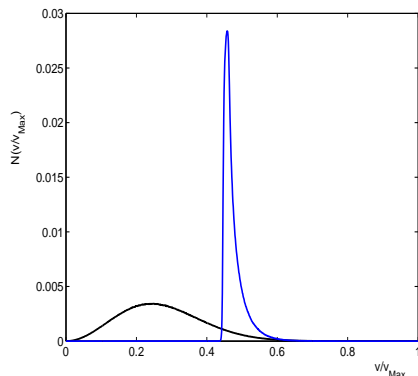
Obrázek 3.21: Rozdělení x -ové složky rychlosti elektronů na povrchu sondy



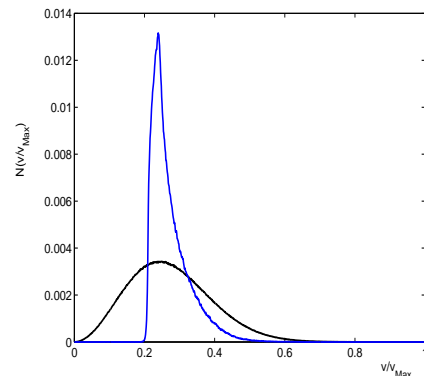
Obrázek 3.22: Rozdělení x -ové složky rychlosti elektronů 1 mm od povrchu sondy

V příspěvku, z této konference jsme se zabývali studiem úhlového rozdělení rychlostí elektronů, dále rozdělením jejich celkové rychlosti a rozdělením x -ové komponenty rychlosti v závislosti na vzdálenosti od substrátu.

Hlavní předností výpočtu pomocí neselfkonzistentního modelu byla možnost použít relativně většího počtu částic v blízkosti sondy, neboť pro výpočet úhlových a rychlostních, resp. energetických rozdělení částic je třeba získat data od co největšího počtu částic v daném úseku pracovní oblasti. Počáteční



Obrázek 3.23: Rozdělení celkové rychlosti elektronů na povrchu sondy



Obrázek 3.24: Rozdělení celkové rychlosti elektronů 1 mm od povrchu sondy

rozložení potenciálu v pracovní oblasti bylo získáno z našich dřívějších selfkonzistentních modelů. Všechny obrázky jsou převzaty z publikace [J9] a jsou normovány ke koncentraci částic. Na obrázku 3.19 je zobrazeno úhlové rozdělení rychlostí elektronů přímo na substrátu, vloženém do plazmatu, na obrázku 3.20 pak stejné rozdělení, ale ve vzdálenosti 1 mm od sondy, tedy zhruba uprostřed sheathu. Červenou barvou jsou zobrazena výše zmíněná úhlová rozdělení, černá barva v obou případech pak odpovídá teoretickému Maxwellovu rozdělení.

Obdobně na obrázcích 3.21 a 3.22 jsou modrou barvou zobrazena rozdělení x -ové složky rychlostí elektronů pro různé vzdálenosti od sondy, černá barva opět odpovídá teoretickým Maxwellovým rozdělením.

Na obrázcích 3.23 a 3.24 je zobrazeno ve výše uvedených barvách rozdělení celkových rychlostí elektronů v závislosti na vzdálenosti od vnořené sondy. Získané výsledky odpovídají výsledkům diskutovaným v předchozích kapitolách, které se věnovaly selfkonzistentnímu modelování v různých geometriích. Přímoou diskuzi výsledků zde provádět nebudeme, šlo pouze o ověření spolehlivosti tohoto modelu. Podrobnější diskuzi lze nalézt v publikaci [J9].

Kapitola 4

Spojité model plazmatu

4.1 Úvod

V této kapitole se budeme věnovat výsledkům získaným pomocí jednoduchých spojitých modelů v argonovém plazmatu.

Spojitém modelováním procesů v argonovém plazmatu se zabývá celá řada autorů, např. v publikacích [5, 64, 68]. Jak již bylo řečeno, pro spojitě modely se používají rovnice (1.15), (1.16) a (1.17), které lze řešit podle již také zmíněného Scharfetterova-Gummelova algoritmu. Nyní ale musíme dořešit problém koeficientů D a μ , tedy koeficientů difúze a pohyblivosti pro oba typy částic, používaných v našich modelech, neboť ty ovlivňují vlastnosti plazmatu. Tyto hodnoty můžeme získat buď z experimentu nebo je určit teoreticky. My jsme hodnoty pohyblivosti pro kladné argonové ionty převzali z publikace [17], kde je pro výpočet uveden tzv. Frostův vzorec:

$$\mu_i = \mu_0 \sqrt{1 + a \left(\frac{E}{p} \right)}. \quad (4.1)$$

Hodnoty parametrů μ_0 a a jsou uvedeny v tabulce 4.1. Veličina E je intenzita elektrického pole a p je tlak. Hodnoty pohyblivosti pro elektrony v argonovém plazmatu byly vypočítány podle následujícího aproximativního vzorce, uvedeného v [50]:

$$\mu_e = \frac{1,148 \cdot 10^9}{T_e^{1,55} p}, \quad (4.2)$$

Tabulka 4.1: Hodnoty parametrů a a μ_0 , převzato ze [17]

Iont a plyn	μ_0 [$\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$]	a [$\text{torr} \cdot \text{cm} \cdot \text{V}^{-1}$]
He ⁺ He	9200	0,0400
Ne ⁺ Ne	3500	0,0400
Ar ⁺ Ar	1460	0,0264

T_e je teplota elektronů uváděná v kelvinech a p je tlak plynu v torrech. Hodnoty difúzních koeficientů D je možné spočítat pomocí tzv. Einsteinova vzorce:

$$D_{e,i} = \frac{\mu_{e,i} k_B T_{e,i}}{e}. \quad (4.3)$$

Tím jsou známy všechny parametry nutné k výpočtu. V našem případě jsme tento jednoduchý spojitý model používali jen jako test pro výsledný hybridní model. Ověřovali jsme ho na již otestovaných výsledcích z částicového modelování s parametry výpočtu, které byly úplně stejné, jako v případě částicového modelování. Uvádíme výsledky pro porovnání s částicovými modely pro rovinnou, válcovou i kulovou geometrii v 1D a oproti částicovým modelům i ve 2D.

Tabulka 4.2: Parametry DC výboje v argonu použité ve spojitém modelu

Modelový plyn	argon
Koncentrace částic	$1 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3}$
Tlak plynu	1 torr
Napětí na sondě	+10 V
Potenciál neporušeného plazmatu	0 V
Časový krok pro elektrony	$1 \cdot 10^{-9} \text{ s}$
Časový krok pro kladné ionty	$1 \cdot 10^{-9} \text{ s}$
Délka pracovní oblasti	$1 \cdot 10^{-2} \text{ m}$
Poloměr sond – válcové i kulové	$1 \cdot 10^{-4} \text{ m}$
Koeficienty μ_e, D_e	z rovnice (4.1), resp. (4.3)
Koeficienty μ_i, D_i	z rovnice (4.2), resp. (4.3)

4.2 1D Spojitý model

V této kapitole popíšeme metodu řešení 1D spojitého modelu pomocí zmíněného Scharfetterova-Gummelova exponenciálního algoritmu.

Obecně můžeme rovnici (1.15) v jednodimenzionálním případě napsat pro jednoduchost ve tvaru pro jeden typ částic takto:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{q^n} \frac{\partial(q^n j_q)}{\partial q} = r, \quad (4.4)$$

kde q je obecná souřadnice a $n = 0, 1, 2$ pro rovinnou, válcovou, resp. kulovou geometrii.

Rovnici (1.16) přepíšeme jako:

$$j_q = bn - a \frac{\partial n}{\partial q}, \quad (b = \pm \mu E_q, a = D). \quad (4.5)$$

Rovnici (4.5) upravíme pomocí Scharfetterova-Gummelova exponenciálního algoritmu na tvar:

$$j_{i+1/2} = \frac{b_{i+1/2} [n_{i+1} - n_i \exp(-\rho_{i+1/2})]}{1 - \exp(-\rho_{i+1/2})}. \quad (4.6)$$

Po diskretizaci rovnice (4.4) a dosazení za tok částic z diskretizované rovnice (4.6) dostáváme soustavu lineárních rovnic pro jednu neznámou – pro koncentraci částic n . Tato rovnice, jak již bylo řečeno, se dá jednoduše numericky řešit pomocí tzv. Thomasova algoritmu [3], neboť se jedná o třídiagonální problém. Výše popsaný postup a výsledky jsou diskutovány v následujících kapitolách, věnujících se různým geometriím studovaného problému.

4.2.1 Rovinná geometrie

Nejjednodušším případem pro studium je jednodimenzionální problém v rovinné geometrii. Rovnice (4.4) a (4.5) přepíšeme do tvaru:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} = 0, \quad (4.7)$$

$$j_x = bn - a \frac{\partial n}{\partial x}, \quad (b = \pm \mu E_x, a = D). \quad (4.8)$$

V rovnici (4.7) jsme pro jednoduchost položili $r = 0$. Protože výpočty provádíme pouze v jedné dimenzi, není nutné u toku částic používat index. Výše uvedeným postupem obě rovnice zdiskretizujeme a dostaneme tak rovnici vhodnou pro Thomasův algoritmus:

$$\frac{n_{i,k+1} - n_{i,k}}{\Delta t} + \frac{X_i^+ n_{i+1,k+1} + X_i^- n_{i-1,k+1} + X_i^c n_{i,k+1}}{\Delta x} = 0, \quad (4.9)$$

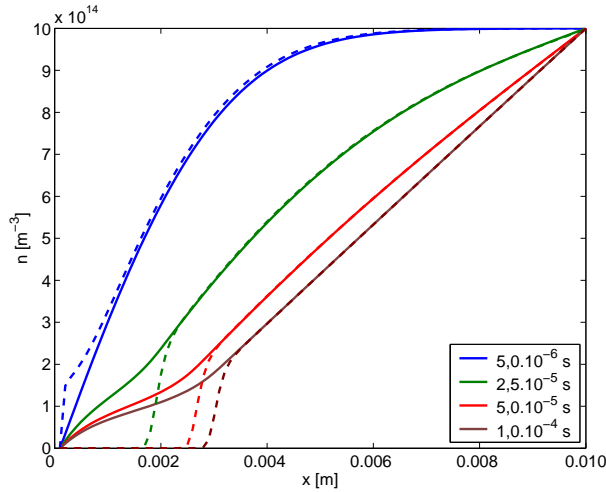
kde

$$X_i^+ = \frac{b_{i+1/2}}{1 - \exp(-\rho_{i+1/2})}, \quad (4.10)$$

$$X_i^- = \frac{b_{i-1/2} \exp(-\rho_{i+1/2})}{1 - \exp(-\rho_{i-1/2})}, \quad (4.11)$$

$$X_i^c = -X_i^+ \exp(-\rho_{i+1/2}) - X_i^- \exp(\rho_{i-1/2}), \quad (4.12)$$

$$\rho_{i+1/2} = -\frac{b_{i+1/2}}{a_{i+1/2}} \Delta x. \quad (4.13)$$



Obrázek 4.1: Časový vývoj koncentrace elektronů a iontů – rovinná sonda

4.2.2 Válcová geometrie

Pro válcovou geometrii dostáváme podle vztahu (4.4) následující vyjádření rovnice kontinuity:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho j_\rho) = 0. \quad (4.14)$$

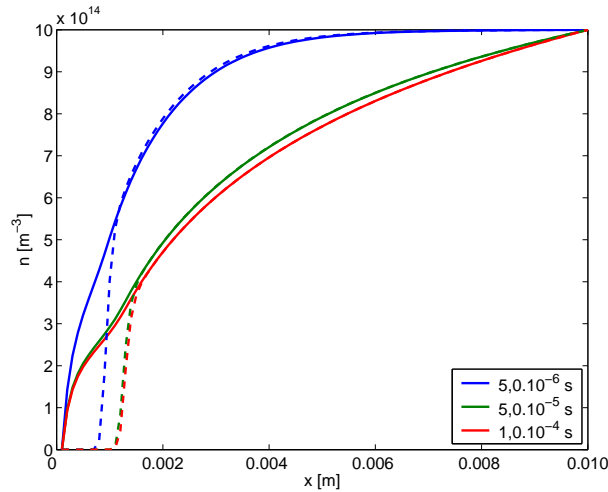
Rovnice pro tok částic zůstává stejná jako v případě rovinné geometrie:

$$j_\rho = bn - a \frac{\partial n}{\partial \rho}, \quad (b = \pm \mu E_\rho, a = D). \quad (4.15)$$

Zdiskretizovaná rovnice kontinuity ve válcové geometrii, vhodná pro řešení Thomasovým algoritmem má následující tvar:

$$\frac{n_{i,k+1} - n_{i,k}}{\Delta t} + \frac{1}{(r_s + i\Delta\rho)} \cdot \frac{P_i^+ n_{i+1,k+1} + P_i^- n_{i-1,k+1} + P_i^c n_{i,k+1}}{\Delta\rho} = 0. \quad (4.16)$$

Koeficienty P_i^+ , P_i^- , P_i^c a ρ_i zůstávají v případě válcové geometrie stejné jako v předchozím případě. Veličina r_s je poloměr sondy.



Obrázek 4.2: Časový vývoj koncentrace elektronů a iontů – válcová sonda

4.2.3 Kulová geometrie

V kulové geometrii můžeme rovnici kontinuity (4.4) vyjádřit v následujícím tvaru:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 j_r) = 0. \quad (4.17)$$

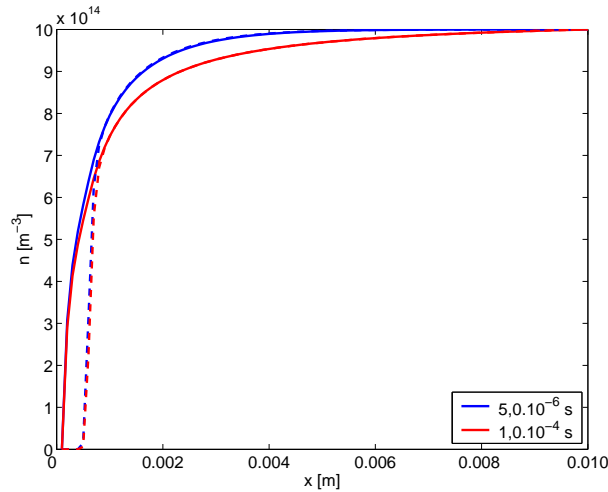
Rovnice pro tok částic zůstává opět stejná tak jako v obou předchozích případech:

$$j_r = bn - a \frac{\partial n}{\partial r}, \quad (b = \pm \mu E_r, a = D). \quad (4.18)$$

Opět zdiskretizujeme rovnici kontinuity, tentokrát v kulové geometrii, abychom ji mohli vyřešit pomocí Thomasova algoritmu:

$$\frac{n_{i,k+1} - n_{i,k}}{\Delta t} + \frac{1}{(r_s + i\Delta r)^2} \cdot \frac{R_i^+ n_{i+1,k+1} + R_i^- n_{i-1,k+1} + R_i^c n_{i,k+1}}{\Delta r} = 0. \quad (4.19)$$

Koeficienty R_i^+ , R_i^- , R_i^c a ρ_i zůstávají i v případě kulové geometrie nezměněny. Poloměr sondy je opět r_s .



Obrázek 4.3: Časový vývoj koncentrace elektronů a iontů – kulová sonda

Na obrázcích 4.1–4.3 jsou zobrazeny grafy časových vývoje koncentrací elektronů a kladných argonových iontů v celé pracovní oblasti pro různé geo-

metrie. V případě válcové a kulové geometrie byly zvoleny průměry sond, vložených do plazmatu, 0,0001 m, tedy takový rozměr, který se běžně používá při experimentech. Z uvedených obrázků je patrné, že nejrychleji se dostaneme k ustálenému stavu v kulové geometrii.

Tyto výsledky jsou zde uvedeny pouze jako testové, pro možnost porovnání s řešením difúzní rovnice, uvedeným na obrázku 3.3. Z porovnání vyplývá, že námi vytvořený spojitý model je v pořádku.

4.3 2D Spojitý model

V této kapitole krátce popíšeme výsledky získané pomocí 2D spojitého modelu v rovinné a válcové geometrii. Kulovou geometrií jsme se ve 2D nezabývali, tato geometrie ve dvou prostorových dimenzích nemá smysl.

4.3.1 Rovinná geometrie

Ve dvou prostorových dimenzích musíme rovnici kontinuity (1.15) přepsat do následujícího tvaru:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-\mu n E_x - D \frac{\partial n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(-\mu n E_z - D \frac{\partial n}{\partial z} \right) = 0. \quad (4.20)$$

Nyní máme dvě složky intenzity elektrického pole a také toku částic. Dále zde existují dvě prostorové souřadnice, z tohoto důvodu musíme zvolit prostorový krok pro oba směry. V našem případě jsme volili čtvercovou síť, tedy:

$$\Delta x = \Delta z \equiv \Delta h$$

Rovnici (4.20) přepíšeme do tvaru vhodného pro řešení prostředky numerické matematiky, především provedeme diskretizaci a po několika drobných úpravách ji převedeme na tvar:

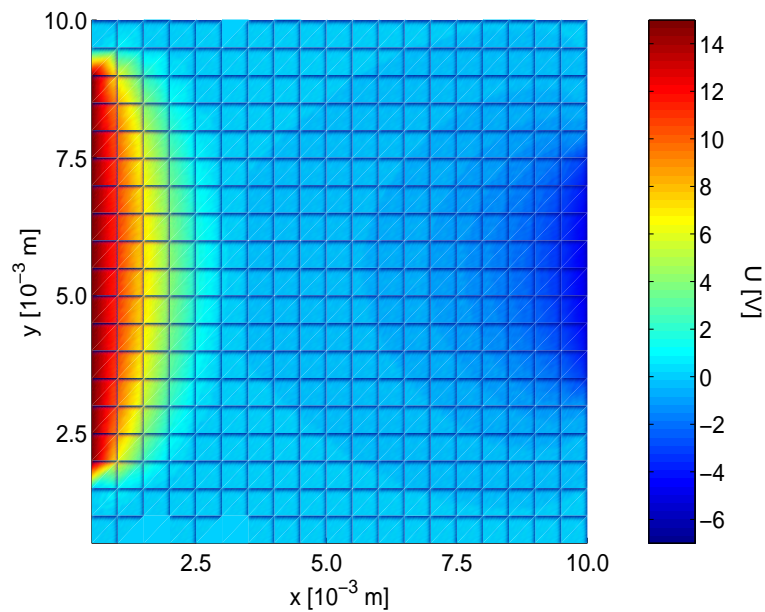
$$n_{i,j}^{k+1} \left(1 - \alpha X_{i,j}^C - \alpha Y_{i,j}^C \right) - \alpha X_{i,j}^+ n_{i+1,j}^{k+1} - \alpha X_{i,j}^- n_{i-1,j}^{k+1} - \alpha Y_{i,j}^+ n_{i,j+1}^{k+1} - \alpha Y_{i,j}^- n_{i,j-1}^{k+1} = n_{i,j}^k, \quad (4.21)$$

kde $\alpha \equiv \Delta t / \Delta h$. Koeficienty $X_{i,j}^C, X_{i,j}^+, X_{i,j}^-$, společně s „novými“ koeficienty pro druhou prostorovou souřadnici $Y_{i,j}^C, Y_{i,j}^+, Y_{i,j}^-$ mají stejný význam a formu vyjádření jako v případě 1D geometrií.

Tuto rovnici nemůžeme již jednoduše řešit pomocí Thomasova algoritmu, pro její vyřešení jsme zvolili Jacobiho iterační metodu [3]. Obdobně nemůžeme jednoduchým diferenčním schématem řešit Poissonovu rovnici (1.17). Tuto eliptickou parciální diferenciální rovnici převedeme na tvar:

$$U_{i,j}^{k+1} = \frac{\Delta h^2}{4} \frac{e}{\varepsilon_0} (n_{i,j}^+ - n_{i,j}^-) + \frac{1}{4} (U_{i,j+1}^k + U_{i,j-1}^k + U_{i+1,j}^k + U_{i-1,j}^k) \quad (4.22)$$

a vyřešíme ji opět Jacobiho iterační metodou.



Obrázek 4.4: Rozložení elektrického potenciálu v okolí dvou substrátů různých velikostí

Na obrázku 4.4 je zobrazeno rozložení elektrického potenciálu v okolí dvou substrátů různých velikostí, vnořených do plazmatu. Na obou těchto substrátech je odlišný potenciál; $+15$ V a -7 V.

Toto geometrické uspořádání by mohlo být vhodné například pro měření v plazmatu pomocí dvou sond, případně při měřeních či aplikacích, kde se využívají substráty různých velikostí. Dalším vhodným uspořádáním by mohlo být například „pole“ sond, tedy systém několika sond třeba i různých rozměrů, umístěných vedle sebe nebo proti sobě. Pomocí tohoto modelu by bylo možné řešit i některé problémy výbojů v tryskách.

4.3.2 Válcová geometrie

Budeme se zabývat válcovou geometrií ve dvou rozměrech ρ, z . Válcová geometrie je výhodná proto, že při reálných experimentech, například při měření charakteristik plazmatu, se dosti často používá právě válcová sonda.

Vložení rovnice (4.5) do rovnice (4.4) a rozepsáním ve 2D válcové geometrii, dostáváme pro rovnici kontinuity následující vztah:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(-\mu \rho n E_\rho - \rho D \frac{\partial n}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(-\mu n E_z - D \frac{\partial n}{\partial z} \right) = 0. \quad (4.23)$$

Opět zde existují dvě složky intenzity elektrického pole a toků částic. Volili jsme takovou orientaci, že celý problém je rotačně symetrický kolem osy z , tedy problém vlastně řešíme v prostoru proměnných ρz . Tak jako v případě 2D rovinné geometrie jsme volili čtvercovou síť, tedy:

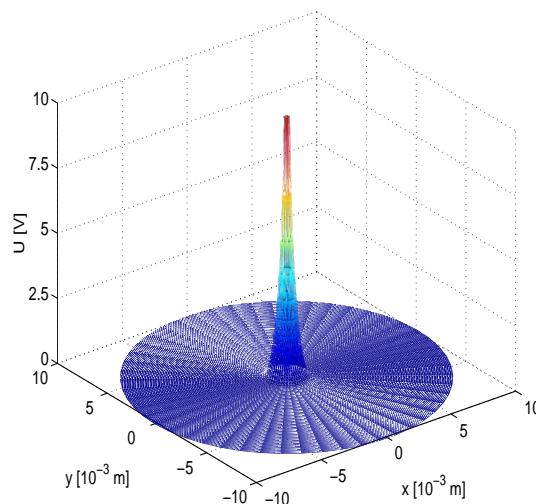
$$\Delta \rho = \Delta z \equiv \Delta h.$$

Rovnici (4.23) stejně jako v předchozím případě zdiskretizujeme a po malých úpravách převedeme na tvar vhodný pro numerický výpočet:

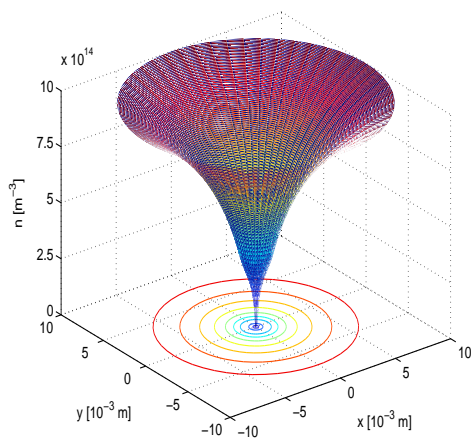
$$\begin{aligned} n_{i,j}^{k+1} \left(1 - \frac{\alpha}{r_s + i\Delta h} P_{i,j}^C - \alpha Z_{i,j}^C \right) - \frac{\alpha}{r_s + i\Delta h} P_{i,j}^+ n_{i+1,j}^{k+1} - \\ - \frac{\alpha}{r_s + i\Delta h} P_{i,j}^- n_{i-1,j}^{k+1} - \alpha Z_{i,j}^+ n_{i,j+1}^{k+1} - \alpha Z_{i,j}^- n_{i,j-1}^{k+1} = n_{i,j}^k, \end{aligned} \quad (4.24)$$

kde stejně jako v předchozím případě je $\alpha \equiv \Delta t / \Delta h$ a r_s je poloměr sondy. Koefficienty $P_{i,j}^C, P_{i,j}^+, P_{i,j}^-$ jsou zavedeny pro souřadnici ρ a koefficienty $Z_{i,j}^C, Z_{i,j}^+, Z_{i,j}^-$ pak pro souřadnici z , oba mají opět stejné vyjádření, tak jako v případě 2D rovinné geometrie. Řešení výše uvedené rovnice stejně jako řešení Poissonovy rovnice jsme provedli opět Jacobiho iterační metodou. Vyjádření Poissonovy rovnice pro Jacobiho iterační metodu je tentokrát trochu složitější než v případě 2D rovinné geometrie:

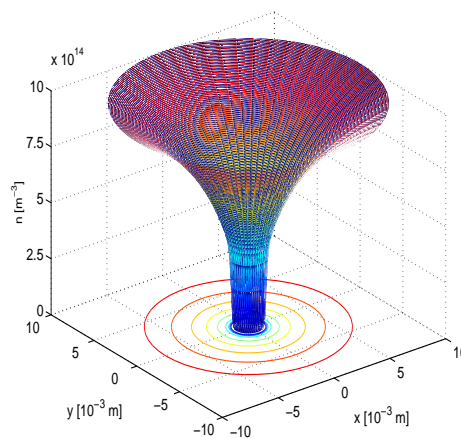
$$\begin{aligned} U_{i,j}^{k+1} &= \frac{1}{4} \left[U_{i-1,j}^{k+1} \left(1 - \frac{\Delta h}{2(r_s + i\Delta h)} \right) + U_{i+1,j}^{k+1} \left(1 + \frac{\Delta h}{2(r_s + i\Delta h)} \right) \right] + \\ &+ \frac{1}{4} \left[U_{i,j-1}^k + U_{i,j+1}^k \right] + \frac{\Delta h^2}{4} \frac{e}{\varepsilon_0} (n_{i,j}^+ - n_{i,j}^-). \end{aligned} \quad (4.25)$$



Obrázek 4.5: Potenciál v okolí válcové sondy



Obrázek 4.6: Koncentrace elektronů v okolí válcové sondy



Obrázek 4.7: Koncentrace iontů v okolí válcové sondy

Na obrázcích 4.5–4.7 jsou zobrazeny některé výsledky, které jsme obdrželi z 2D spojitého modelu ve válcové geometrii.

Jako příklad uvádíme rozložení potenciálu v pracovní oblasti v okolí válcové sondy s poloměrem 0,0001 m, obrázek 4.5. Na obrázcích 4.6 a 4.7 jsou pak zobrazeny koncentrace elektronů a kladných argonových iontů v okolí sondy

zmíněného poloměru a ve stejně velké pracovní oblasti. Jak je z obrázků patrné, rozložení koncentrací nabitých částic opět dobře souhlasí s řešením difúzní rovnice, uvedené na obrázku 3.3.

Kapitola 5

Hybridní model plazmatu

5.1 Úvod

Hlavním cílem předkládané dizertační práce bylo vytvořit hybridní model [45, 53, 55, 61], pro použití ve fyzice nízkoteplotního plazmatu. Jak již bylo zmíněno v předchozích kapitolách, hybridní model zde chápeme jako kombinaci částicového a spojitého modelování. V této kapitole uvádíme první výsledky získané právě pomocí této metody. Získané výsledky byly prezentovány na *WDS'06 – Week of Doctoral Students 2006* a následně publikovány v [J13]. V následující kapitole jsou už potom prezentovány aplikace námi vytvořeného hybridního modelu na konkrétní fyzikální problémy.

Jak již bylo dříve napsáno, v našem pojetí hybridního modelu je základní myšlenkou rozdělit částice na tzv. „pomalé“ a „rychlé“. Mezi pomalé částice patřily kladné argonové ionty, v případě modelování směsi O_2/Ar také záporné kyslíkové ionty a elektrony, které mají energie nižší, než je ionizační energie pro argon, tedy $E_i < 15,76$ eV. Naopak elektrony s energií minimálně rovnou nebo větší než E_i , patřily mezi rychlé částice. Pomalé částice byly simulovány pomocí spojitého modelování, zatímco rychlé částice pak pomocí modelování částicového.

5.2 Řešení hybridního modelu

Postup, jakým výpočet probíhal, je detailněji naznačen na obrázku 1.6. Výpočet začíná ve spojitě části modelu, do něhož jsou vstupem údaje o koncentraci

nabitých částic a libovolná hodnota koeficientů r_e a r_i . Po prvním kroku se pomocí spojitého modelu vypočítají nové hodnoty koncentrací nabitých částic. Ty pak dále slouží pro výpočet Poissonovy rovnice (1.17). Poissonovu rovnici pro výpočty pomocí hybridního modelu je nutné upravit z (1.17) na tvar:

$$\nabla^2 U = -\frac{e}{\varepsilon_0}(n_i - n_e - n_{e,\text{fast}}), \quad (5.1)$$

kde $n_{e,\text{fast}}$ je koncentrace rychlých elektronů.

Na počátku výpočtu musíme koncentraci těchto rychlých elektronů nějakým způsobem odhadnout. Vycházeli jsme z předpokladu, že rozdělení rychlostí částic lze vypočítat ze vzorce (3.1). Výpočet vede na řešení tzv. Gaussova integrálu, který je řešitelný pomocí gamma funkce (5.3). Použitím tohoto výpočtu ovšem dostaneme rozdělení rychlostí částic v intervalu od nuly do nekonečna. My ale potřebujeme pro naše výpočty pouze ty částice, jejichž energie je větší než E_i , zajímá nás tedy pouze „jistá“ část Maxwellovy rozdělovací funkce. Tento výpočet jsme proto provedli pomocí neúplné gamma funkce:

$$P(a, x) \equiv \frac{\gamma(a, x)}{\Gamma(a)} \equiv \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^x t^{a-1} e^{-t} dt, \quad (a > 0), \quad (5.2)$$

kde $\Gamma(a)$ je gamma funkce:

$$\Gamma(a) = \int_0^{\infty} t^{a-1} e^{-t} dt. \quad (5.3)$$

Pomocí neúplné gamma funkce (5.2) dokážeme zjistit počet částic s energiemi od nuly do ionizační energie E_i a dále tento počet odečteme od počtu všech částic s energiemi v intervalu od nuly do nekonečna. Tímto jednoduchým postupem zjistíme počet částic s energiemi od ionizační energie E_i do nekonečna, tedy koncentraci rychlých elektronů.

Tímto výpočtem bylo zjištěno, že:

$$\Delta P = | P(1,5, E_1 = 15,76 \text{ eV}) - P(1,5, E_2) | = 0,1\%,$$

tzn. že zhruba 0,001 z celkového počtu všech elektronů je rychlých, tj. majících energie větší nebo rovné než E_i .

Tento počet rychlých elektronů je možné předpokládat na počátku výpočtu a pro tok částic ze zdroje, tedy v případech, kdy je plazma nenarušené. Budeme tedy přesně znát počet rychlých elektronů, které budou přicházet každý časový krok do pracovní oblasti. Během dalších výpočtů už ale musíme počet rychlých elektronů zjišťovat tak, že budeme sledovat energie rychlých elektronů a po každém kroku, kdy dojde ke srážce těchto elektronů s neutrální částicí, zjistíme, zda je jejich energie menší nebo větší, než ionizační energie E_i . Na základě toho rozhodneme, zda elektron zařadíme již mezi pomalé elektrony nebo zůstane ještě v kategorii rychlých elektronů. Právě popsany postup výpočtu obstarává částicová část hybridního modelu, ve spojitě části modelu pak dopočítáváme koncentrace a toky částic v pracovní oblasti. Pokud bychom měli tedy ještě jednou shrnout, co která část hybridního modelu vykonává, schéma by vypadalo následovně:

- Částicová část hybridního modelu

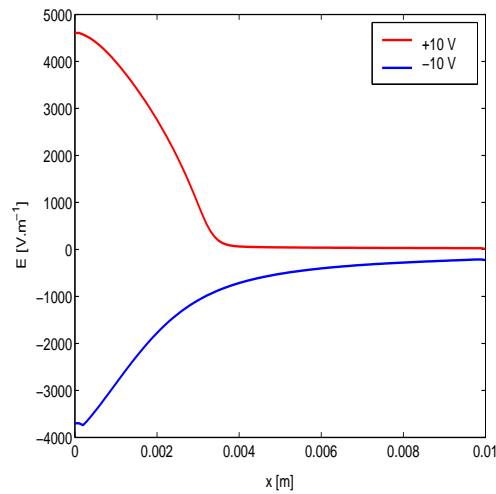
V této části modelu se počítají pohybové rovnice pomocí Verletova algoritmu pro rychlé elektrony. Dále se v této části modelu realizují srážky mezi částicemi a zjišťuje se tak počet nově vzniklých pomalých a rychlých částic, který je pak vstupem do rovnic kontinuity a Poissonovy rovnice. Z ní dopočítáme rozložení elektrického pole.

- Spojitá část hybridního modelu

Pomocí této části hybridního modelu počítáme Scharfettero-vým-Gummelovým algoritmem „upravené“ rovnice kontinuity, čímž dostáváme hodnoty koncentrací pomalých částic, které jsou dále vstupem do Poissonovy rovnice.

5.3 Výsledky z hybridního modelu

V tomto odstavci krátce popíšeme první výsledky, získané pomocí hybridního modelu. Jednalo se opět o model argonového plazmatu, ale tentokrát byly výpočty prováděny pro kladné i záporné předpětí, vložené na rovinnou sondu. Na obrázku 5.1 je zobrazena intenzita elektrického pole pro předpětí +10 V (červená barva) a pro -10 V (modrá barva). Z obrázku je patrné, že pro



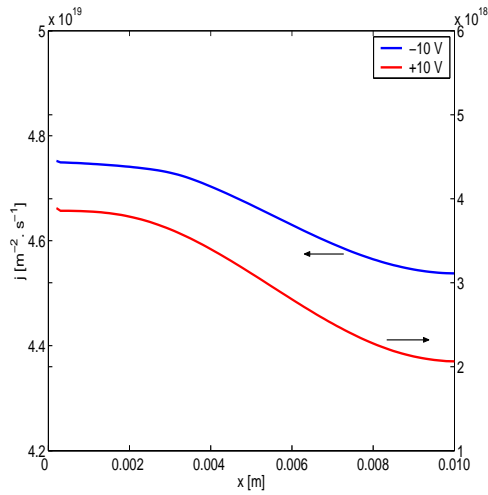
Obrázek 5.1: Intenzita elektrického pole

záporné napětí na sondě elektrický potenciál neklesá tak rychle, jako je tomu v případě kladného napětí. To je způsobeno tím, že se poblíž sondy nyní nacházejí těžší ionty, které se pohybují pomaleji a proto snižují celkový náboj v okolí vložené sondy a pokles potenciálu není proto tak výrazný.

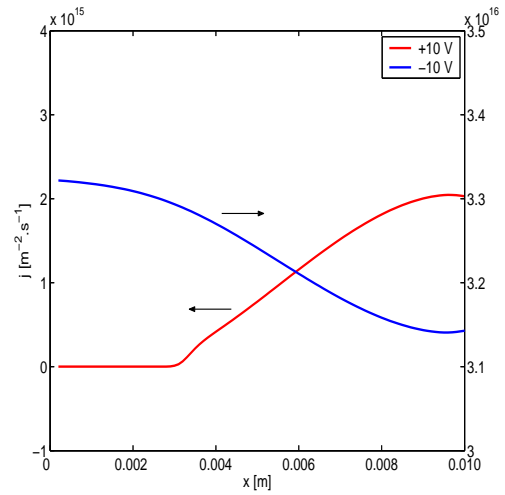
Na obrázcích 5.2 a 5.3 jsou zobrazeny toky částic – elektronů a kladných argonových iontů, opět pro kladné a záporné předpětí vložené na sondu. Při pohledu na obrázek 5.2, který ukazuje tok pomalých elektronů v pracovní oblasti a výsledky porovnáme pro kladné a záporné předpětí, zjistíme, že tento tok je nižší právě pro kladné předpětí. Tento jev je způsoben tím, že při kladném napětí na sondě přecházejí urychlované elektrony ze skupiny pomalých elektronů do skupiny rychlých elektronů a proto se tok pomalých elektronů snižuje. S rostoucí rychlostí přirozeně klesá i koncentrace rychlých elektronů, neboť celkový tok částic je konstantní. Naproti tomu pro záporné napětí, dochází k opačnému procesu: rychlé elektrony, které pronikají do sheathu, jsou elektrickým polem zpomaleny a přecházejí do skupiny pomalých elektronů.

U kladných argonových iontů je situace jednodušší. Již pro malá kladná napětí je jejich tok na sondu prakticky nulový, jejich tepelná energie je totiž mnohem nižší než energie elektronů.

Níže uvedený obrázek 5.4 ilustruje další jev. Přesáhne-li energie elektronů

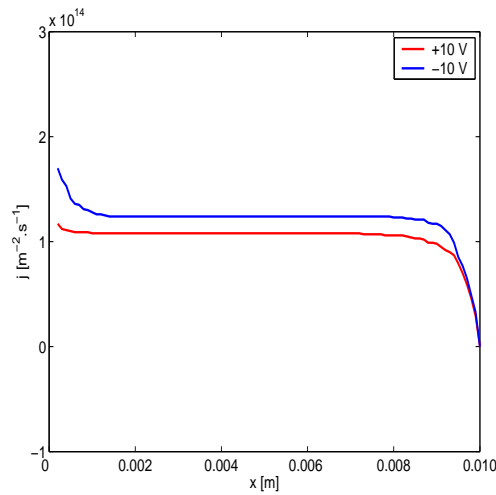


Obrázek 5.2: Tok pomalých elektronů v pracovní oblasti



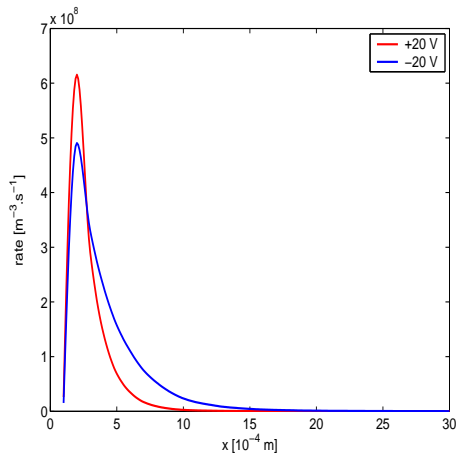
Obrázek 5.3: Tok kladných argonových iontů v pracovní oblasti

excitační a ionizační energie neutrálních atomů, k čemuž dochází častěji v případě kladného napětí na sondě, dochází k nepružným srážkám a tím pak také k úbytku jejich toku.

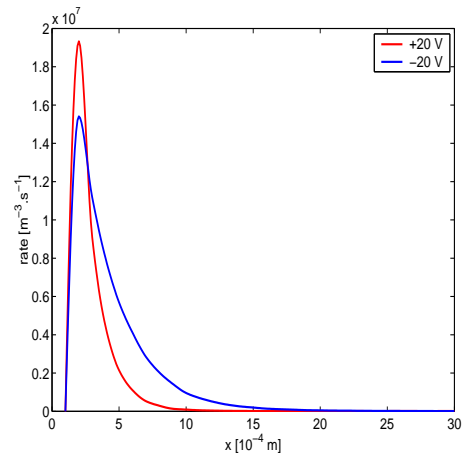


Obrázek 5.4: Tok rychlých elektronů v pracovní oblasti

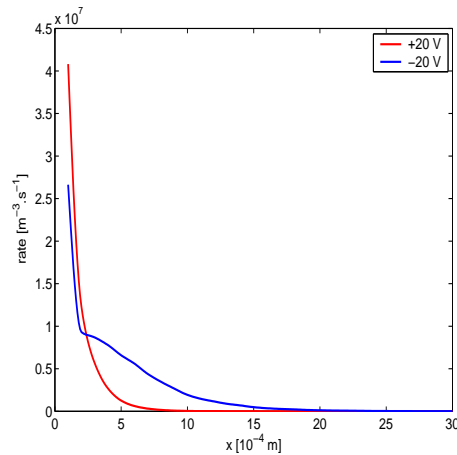
Všechny uvedené obrázky a grafy zobrazující průběhy koncentrací všech typů částic, tedy jak pomalých, tak i rychlých lze nalézt v publikaci [J13].



Obrázek 5.5: Počet pružných srážek – rychlé elektrony



Obrázek 5.6: Počet excitačních srážek – rychlé elektrony



Obrázek 5.7: Počet ionizačních srážek – rychlé elektrony

Na obrázcích 5.5, 5.6 a 5.7 jsou zobrazeny počty srážek rychlých elektronů s neutrálními částicemi v oblasti sheathu pro kladné i záporné předpětí na sondě. Křivky nakreslené červenou barvou odpovídají kladnému napětí na sondě, modré křivky potom napětí zápornému. Z uvedených obrázků je zřejmé, že skutečně v případě přivedeného kladného napětí dochází k nárůstu všech typů srážek v oblasti sheathu. V případě pružného rozptylu lze pozorovat nárůst, který ovšem není tak velký, jako v případě excitačních nebo ionizačních srážek. Největší nárůst je zřejmý u ionizačních srážek, zobraze-

ných v grafu 5.7. To je způsobeno tím, co jsme již dříve popisovali, totiž že energie elektronů v případě kladného napětí na sondě roste a vzrůstá tak pravděpodobnost excitačních a ionizačních srážek.

V tabulce 5.1 uvádíme průměrně relativní počty pružných, excitačních a ionizačních srážek pro různé hodnoty kladného napětí, přivedeného na sondu. Z uvedené tabulky je patrné, že skutečně s rostoucím napětím roste počet ion-

Tabulka 5.1: Tabulka relativního počtu srážek rychlých elektronů pro různá napětí na sondě

Napětí [V]	Pružná srážka [%]	Excitace [%]	Ionizace [%]
+30	92,02	2,82	5,16
+20	92,32	2,81	4,87
+10	92,79	2,80	4,41
+ 5	93,31	2,78	3,90

izačních a excitačních srážek a klesá tak počet pružných srážek, jak bylo již dříve popisováno a vysvětleno. Z tabulky ale můžeme též vidět, že počet excitačních srážek roste pomaleji než počet srážek ionizačních. Možné vysvětlení nabízí pohled na obrázek 1.1, kde je vidět, že pro rostoucí energie částic účinné průřezy pro excitační srážky jsou nižší než v případě ionizačních srážek, kde s rostoucí energií účinný průřez reakce roste, alespoň do hodnoty 30 eV. To jsou zhruba energie, které se v našich modelech mohou vyskytnout. Samozřejmě, že účinné průřezy všech zmiňovaných reakcí od určité hodnoty energie klesají – [11], [49].

Na závěr v tabulce 5.2 uvádíme časový test porovnání všech typů modelů v závislosti na tlaku modelového plynu. Se zvyšujícím se tlakem se mění střední volná dráha srážek a celkově roste doba ustálení výpočtu. Z tabul-

Tabulka 5.2: Porovnání rychlostí jednotlivých modelů – závislost na tlaku

Tlak/model	Částicový model	Spojité model	Hybridní model
0,1 torr	≈ 1,4 h	≈ 12,5 s	≈ 0,2 h
1,0 torr	≈ 15,6 h	≈ 12,7 s	≈ 1,7 h
10,0 torr	≈ 159,6 h	≈ 13,0 s	≈ 19,3 h

ky je patrné, že pomocí hybridního modelu byl výpočet oproti částicovým výpočtům urychlen zhruba osmkrát. U spojitého modelu se čas výpočtu v závislosti na tlaku nemění z toho důvodu, že zde nejsou generovány srážky a proto nedochází k prodloužení času výpočtu.

Uvedený test byly prováděn na počítači AMD Sempron 2800, 512 MB RAM.

Kapitola 6

Praktická aplikace hybridního modelu

Tato kapitola obsahuje některé možné aplikace námi vytvořeného hybridního modelu plazmatu. Popíšeme zde výsledky simulací pro některé konkrétní řešené fyzikální problémy, jako například modelování procesů za středních a vyšších tlaků, modelování směsi kyslíkovo-argonového plazmatu nebo modelování procesů v RF výboji. Některé z výsledků byly publikovány buď v mezinárodních vědeckých časopisech nebo jako příspěvky na různých mezinárodních konferencích.

6.1 Modelování argonového plazmatu za vyšších tlaků

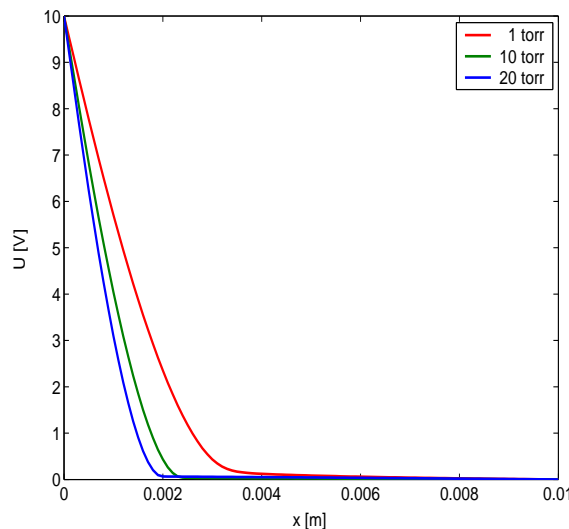
Jak jsme se již zmínili v úvodní kapitole, plazma se v současné době využívá v široké řadě průmyslových aplikací, ale nejen v nich. Z tohoto důvodu by bylo výhodné zapalovat výboj a využívat tak plazma při normálním, tedy atmosférickém tlaku. Toto využití by bylo výhodné zejména v průmyslu při plazmatickém opracování materiálů, dále například při opracovávání textilií nebo v lékařství a biologii pro likvidaci nebezpečných bakterií. V současné době se již některé aplikace ve fyzice plazmatu realizují právě za vyšších tlaků a experimentální výzkum v této oblasti intenzivně probíhá. Z tohoto důvodu je ovšem třeba také teoretický výzkum procesů, které se za těchto vyšších, případně atmosférických tlaků v plazmatu odehrávají. Pro tyto účely

se velice dobře dají využít prostředky počítačového modelování.

Počítačovým modelováním procesů za nižších až středních tlaků jsme se zabývali například v publikaci [J10]. Jednalo se o modelování směsi elektronegativního plazmatu pro tlaky $1 \div 10$ torr a s různými koncentracemi negativních iontů. V tomto případě byly výsledky získávány pomocí částicového modelování. Bohužel ale se pro tyto výpočty částicový přístup příliš nehodí z důvodu velké časové náročnosti výpočtu. Při vyšších tlacích totiž dochází v plazmatu k vyššímu počtu srážek nabitých částic s neutrálními částicemi a doba konvergence k ustálenému stavu je proto mnohem delší a díky tomu silně narůstá doba výpočtu.

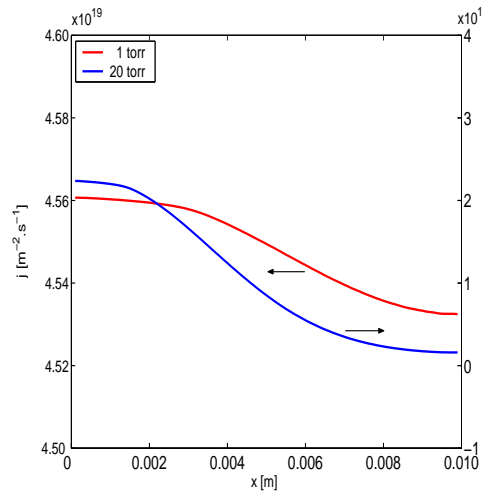
Z tohoto důvodu jsme se pro tyto výpočty pokusili použít techniku hybridního modelování. Sice zde existuje částicová část realizující srážky mezi nabitými a neutrálními částicemi které prodlužují dobu výpočtu, ta ale obsahuje pouze rychlé elektrony, neboť pomalé elektrony a kladné argonové ionty jsou modelovány spojitým přístupem. Některé získané výsledky z těchto výpočtů byly opět publikovány buď v mezinárodních vědeckých časopisech nebo na mezinárodních konferencích ve formě ústních či posterových příspěvků, viz např. [J3], [J4] nebo [J20].

V tomto odstavci popíšeme některé výsledky modelování za středních až vyšších tlaků, získané pomocí hybridního modelu. Jednalo se opět o model

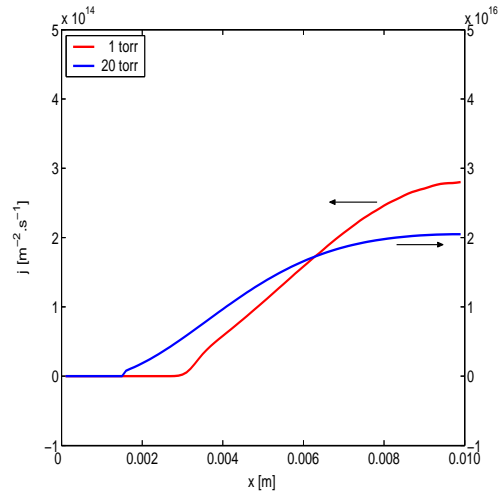


Obrázek 6.1: Rozložení potenciálu v pracovní oblasti pro různé tlaky

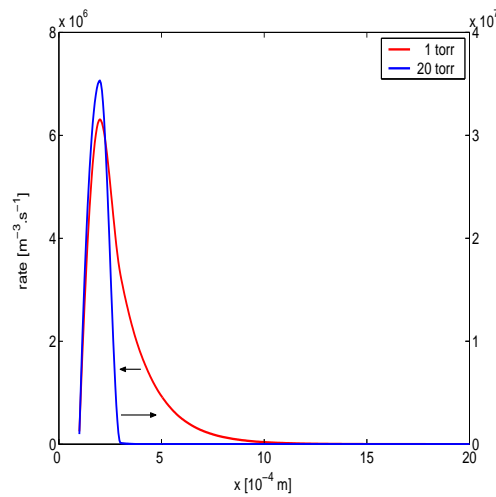
argonového plazmatu v rovinné geometrii, předpětí na sondě bylo zvoleno +10 V a tlak modelového plynu v rozmezí 1 ÷ 20 torr.



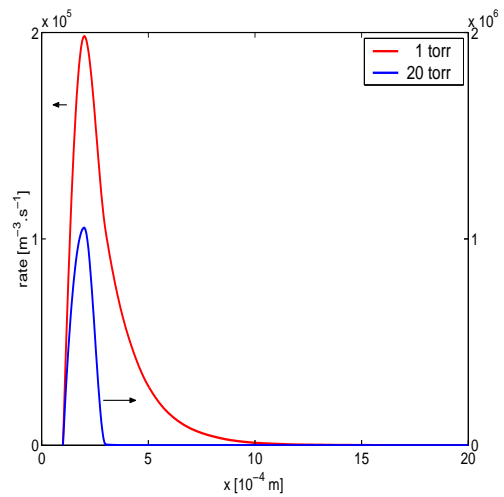
Obrázek 6.2: Tok elektronů v pracovní oblasti



Obrázek 6.3: Tok kladných iontů v pracovní oblasti

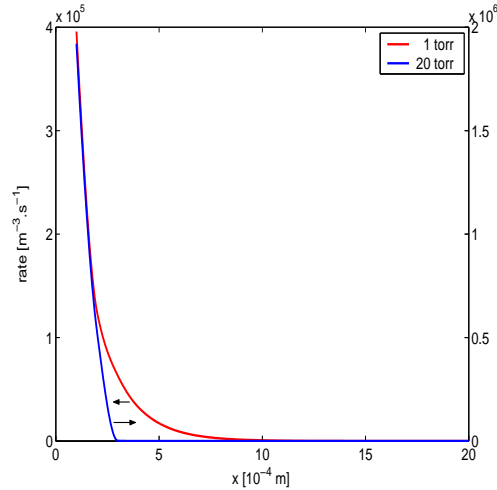


Obrázek 6.4: Počet pružných srážek pro různé tlaky



Obrázek 6.5: Počet excitačních srážek pro různé tlaky

Na obrázku 6.1 je zobrazeno rozložení potenciálu v pracovní oblasti pro různé tlaky. Je vidět, že pro vyšší tlaky je tloušťka sheathu užší než pro nižší tlaky. V literatuře [47] je uvedeno, že tloušťka sheathu je zhruba úměrná



Obrázek 6.6: Počet ionizačních srážek pro různé tlaky

páté odmocnině střední volné dráhy iontů. Ovšem toto platí pro případ, kdy je na sondě záporné předpětí. V našem případě, kdy je na sondě kladné předpětí, tloušťka sheathu pro rostoucí tlak také klesá. Tento jev může být vysvětlen tak, že pro vyšší tlaky je v okolí vnořené sondy vyšší koncentrace elektronů, protože při častějších srážkách s neutrálními částicemi se kromě elektronů, pohybujících se směrem k sondě, objevuje i narůstající počet elektronů, pohybujících se směrem od sondy. Tedy v případě vyšších tlaků se v okolí sondy v důsledku srážek hromadí záporný prostorový náboj tloušťka sheathu klesá.

Na obrázcích 6.2 a 6.3 jsou znázorněny toky pomalých elektronů a kladných argonových iontů. Z obrázku 6.2 je vidět, že při vyšších tlacích je tok elektronů vyšší než při nižších tlacích. Tento výsledek koresponduje s tím, že v okolí sondy je vyšší koncentrace elektronů z důvodů uvedených výše a tak za určitý čas dopadá na plochu větší počet částic. Tok kladných argonových iontů (obrázek 6.3) v oblasti sheathu je nulový v obou uvedených případech, protože kladná sonda je z oblasti odpuzuje. Z obrázku je též patrné, že tok argonových iontů roste za sheathem rychleji pro vyšší tlaky, což je způsobeno opět vyšší koncentrací těchto iontů v pracovní oblasti.

Na obrázcích 6.4, 6.5 a 6.6 jsou zobrazeny počty srážek rychlých elektronů s neutrálními částicemi pro různé tlaky modelového plynu. Je známo, že při

vyšších tlacích klesá střední volná dráha částic a dochází tak k vyššímu počtu srážek. To je dobře vidět na všech zmíněných obrázcích, kde opravdu při vyšších tlacích narůstá počet všech srážek. Výrazný nárůst lze dle očekávání pozorovat u pružných srážek, neboť by měl klesat celkový počet excitačních a ionizačních srážek. Očekávali bychom, že pro vyšší tlaky budou rychlé elektrony rychleji ztrácet svou energii a nebudou mít dostatek energie na excitaci a tím spíše na ionizaci neutrálního atomu a tedy z tohoto důvodu bude klesat počet nepružných srážek. Na obrázcích 6.5 a 6.6 je ale vidět, že tomu tak není. Tento výsledek je překvapivý, ovšem i zde je možné dospět k pravděpodobnému vysvětlení celého problému. Podle vzorce pro výpočet střední volné dráhy [26]:

$$\lambda = \frac{1}{n\sigma}, \quad (6.1)$$

kde σ je účinný průřez reakce je vidět, že střední volná dráha je nepřímo úměrná součinu koncentrace neutrálních částic a účinného průřezu reakce. Účinný průřez reakce, jak již bylo napsáno a jak je vidět z obrázku 1.1, závisí na energii částice. S rostoucí koncentrací neutrálních částic n klesá střední energie elektronů a tedy i účinný průřez σ pro excitaci a ionizaci. Můžeme ale předpokládat že existuje jakási kritická hodnota koncentrace, kdy je střední volná dráha pro nepružný rozptyl minimální. Mohou ale existovat i jiná vysvětlení zmíněného problému, neboť zde určitě hrají důležitou roli i další jevy, protože s tlakem se mění i ostatní parametry plazmatu – zejména stupeň ionizace, ale i podíl metastabilních částic, atd.

Tímto zajímavým problémem bychom se s pomocí hybridního modelu mimojině rádi zabývali v některé z našich dalších prací.

6.2 Modelování směsi O₂/Ar

V této kapitole stručně popíšeme výsledky modelování pomocí hybridního modelu ve směsi O₂/Ar plazmatu. Této problematice jsme se již věnovali v kapitole o částicovém modelování, kde jsme také naznačovali, že později provedeme srovnání výsledků částicového a hybridního modelu. Na rozdíl od částicového modelu jsou zde prezentovány výsledky vedle rovinné geometrie i pro zbývající dvě geometrie, tj. válcovou a kulovou geometrii. Dále jsou

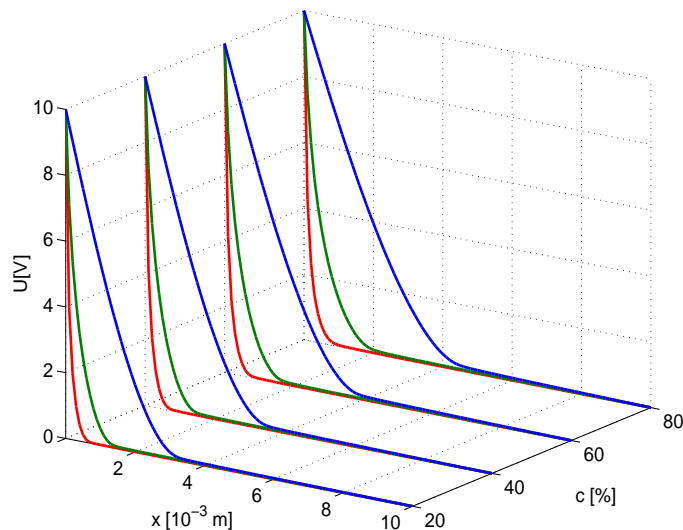
uvedeny některé výsledky získané hybridním modelem ve 2D pro válcovou geometrii. Oproti částicovým modelům jsou zde také vyobrazeny grafy reprezentující jednotlivé proudy tekoucí na sondu pro různé koncentrace záporných kyslíkových iontů O⁻.

Postup řešení tohoto problému je v podstatě stejný jako v předchozích případech. Pomocí Scharfetterova-Gummelova algoritmu se vyřeší rovnice (1.15) a (1.16). Pouze u Poissonovy rovnice (1.17) dojde ke změně na pravé straně, neboť nyní máme v modelu navíc záporné kyslíkové ionty. Poissonovu rovnici se započtením záporných kyslíkových iontů přepíšeme do následujícího tvaru:

$$\nabla^2 U = -\frac{e}{\varepsilon_0}(n_i^+ - n_i^- - n_e - n_{e,\text{fast}}). \quad (6.2)$$

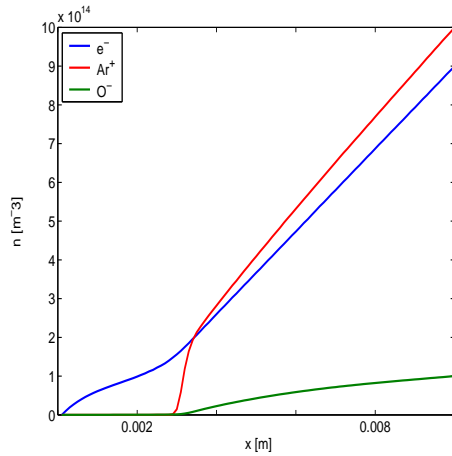
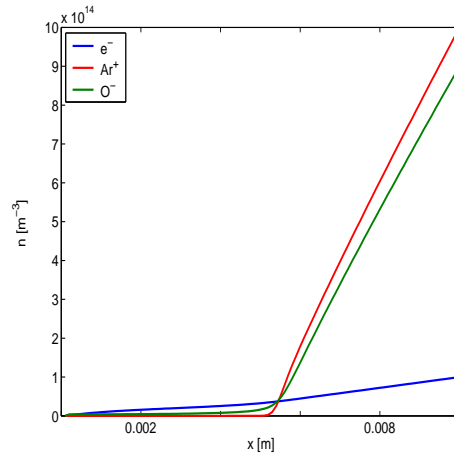
Parametry tohoto výboje jsou stejné jako v případě spojitého modelu směsi O₂/Ar.

V níže uvedených obrázcích jsou zobrazeny výsledky našich výpočtů. Tyto výsledky zde nebudeme již diskutovat, neboť bychom pouze opakovali argumenty z kapitoly, kde jsme se zabývali částicovým modelováním ve směsi plazmatu O₂/Ar.



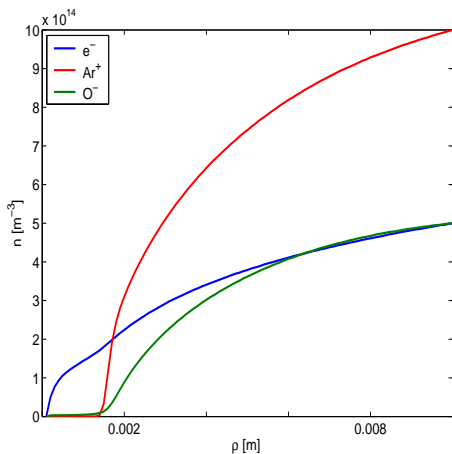
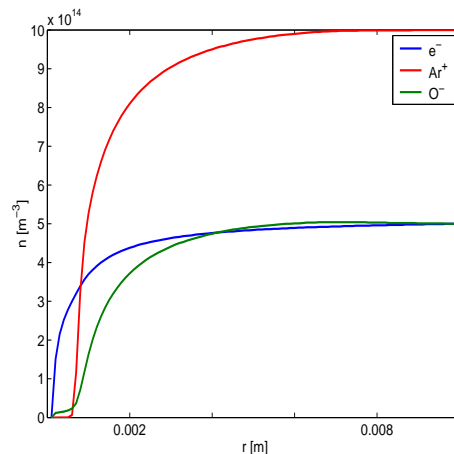
Obrázek 6.7: Potenciál pro různé koncentrace negativních iontů

Na obrázku 6.7 je zobrazen průběh potenciálu v pracovní oblasti pro všechny zmiňované geometrie – rovinnou, válcovou i kulovou – a pro některé vybrané

Obrázek 6.8: Koncentrace částic, rovinná sonda – 10% O⁻Obrázek 6.9: Koncentrace částic, rovinná sonda – 90% O⁻

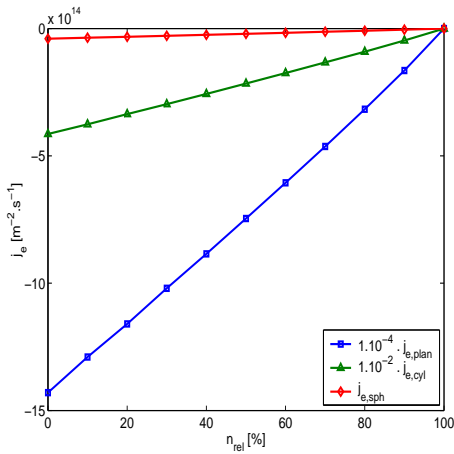
koncentrace negativních kyslíkových iontů.

Na obrázcích 6.8 a 6.9 uvádíme koncentrace nabitých částic pro dvě různé koncentrace negativních iontů, pro porovnání s výsledky částicového modelování, viz obrázky 3.8 a 3.9. Na obrázcích 6.10 a 6.11 jsou pak zobrazeny koncentrace částic ve válcové a kulové geometrii, oba pro relativní koncentraci záporných kyslíkových iontů 50%.

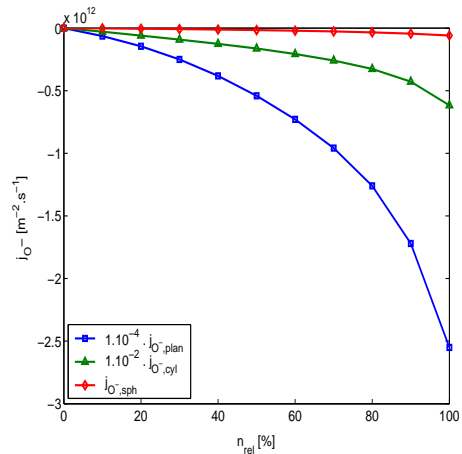
Obrázek 6.10: Koncentrace částic, válcová sonda – 50% O⁻Obrázek 6.11: Koncentrace částic, kulová sonda – 50% O⁻

Obrázky 6.12–6.13 zachycují toky elektronů a záporných kyslíkových iontů na

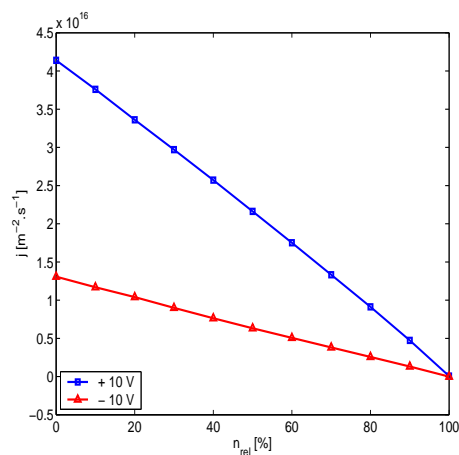
sondách všech geometrií a různé koncentrace kyslíkových iontů. Na obrázku 6.14 je pak zobrazen celkový tok nabitých částic na válcové sondě, opět pro různé koncentrace O⁻, ale také pro kladné i záporné napětí, přivedené na sondu.



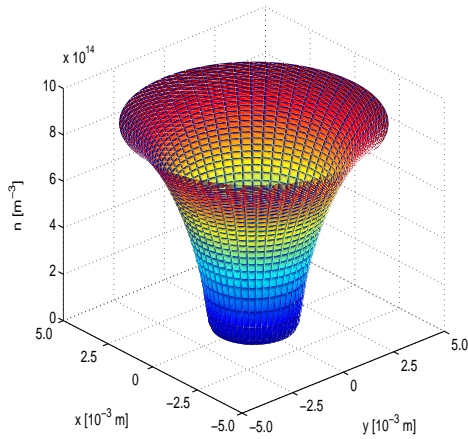
Obrázek 6.12: Tok elektronů na sondu pro všechny geometrie v závislosti na koncentraci O⁻; předpětí +10 V



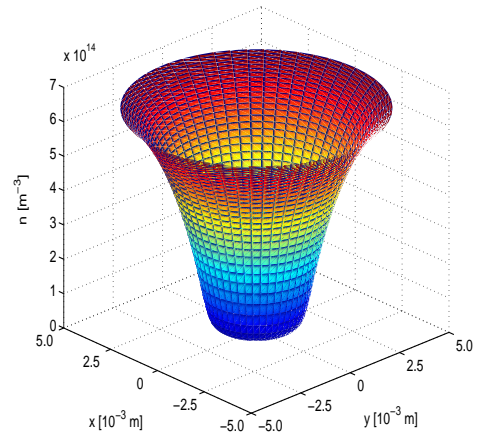
Obrázek 6.13: Tok záporných iontů na sondu pro všechny geometrie v závislosti na koncentraci O⁻; předpětí +10 V



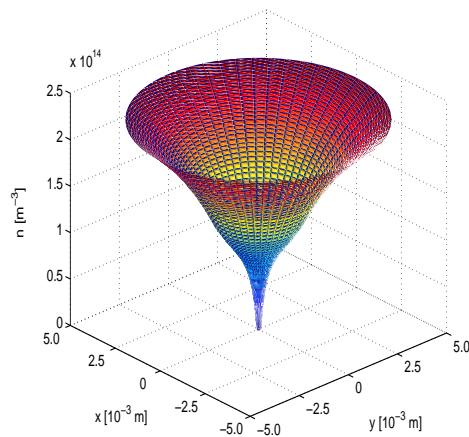
Obrázek 6.14: Porovnání celkového toku částic na sondu pro válcovou geometrii v závislosti na koncentraci O⁻ a předpětí na sondě



Obrázek 6.15: Koncentrace kladných argonových iontů ve 2D – relativní koncentrace záporných iontů 70%



Obrázek 6.16: Koncentrace záporných kyslíkových iontů ve 2D – relativní koncentrace záporných iontů 70%



Obrázek 6.17: Koncentrace elektronů ve 2D – relativní koncentrace záporných iontů 70%

Z obrázku 6.12 je patrné, že absolutní hodnota elektronového proudu klesá v závislosti na zvyšující se koncentraci O⁻ lineárně. To je výsledek, který není nijak překvapující. Na druhou stranu ovšem z obrázku 6.12 je vidět, že absolutní hodnota proudu, tvořeného zápornými kyslíkovými ionty, s ros-

toucí koncentrací O^- roste, což samo o sobě také není překvapivé, ovšem nárůst proudu zde již nemá lineární charakter – je zde patrná mnohem silnější závislost. Podobné chování bylo pozorováno i u čistě částicových modelů. Je možné vysvětlit ho tak, že při dostatečném množství elektronů ve směsi má sheath převážně elektronovou povahu a teprve pokud je koncentrace elektronů nízká, zapojují se do tvorby sheathu záporné ionty. Domníváme se tedy, že tento jev je pravděpodobně způsoben větší tloušťkou sheathu v závislosti na koncentraci O^- , jak již bylo diskutováno a jak je také vidět na obrázku 6.7. Kyslíkové ionty totiž mohou získat v širším sheathu vyšší rychlosti a z toho důvodu nejenže roste lineárně jejich koncentrace, navíc k tomu také roste jejich rychlost. Z tohoto důvodu celkový tok na sondu narůstá mnohem rychleji, než bychom očekávali. K podrobnějšímu studiu a přesnějšímu vysvětlení tohoto jevu, například po doplnění sady srážkových procesů ve směsi O_2/Ar , bychom se velice rádi vrátili v některé z našich dalších prací. V obrázku 6.14 je zobrazen celkový tok nabitých částic na sondu pro různé koncentrace O^- a pro napětí na sondě $+10$ V (modrá barva) a -10 V (červená barva). Je vidět, že v celkový proud s rostoucí koncentrací O^- klesá. To je způsobeno tím, že těžší záporné ionty jsou mnohem méně pohyblivé než elektrony, proto výraznou část celkového proudu tvoří právě proud elektronový. S poklesem koncentrace elektronů klesá i celkový proud. Jak můžeme z obrázku vidět, tento pokles je patrný dokonce i v případě záporného napětí na sondě. Zde je celkový proud opět z větší části tvořen elektronovým proudem, neboť i přesto, že je sonda záporná, elektrony s velkou energií se k sondě dostanou a přispějí tak k celkovému proudu. Samozřejmě se také projevuje, i když ne v tak velké míře, proud kladných argonových iontů. Pokles celkového proudu není proto už tak silný jako v prvním případě. Poslední tři uvedené obrázky – 6.15, 6.16 a 6.17 ukazují koncentrace kladných argonových iontů, záporných kyslíkových iontů a elektronů ve 2D válcové geometrii.

6.3 Modelování RF výboje v argonu

Tato část dizertační práce byla vypracována ve spolupráci s Fyzikálním ústavem AV ČR v Praze. Budeme se zde zabývat počítačovým modelováním procesů v RF výboji. Pracovníci oddělení nízkoteplotního plazmatu na Fyzi-

kálním ústavu AV ČR v Praze se pokoušejí deponovat tenké vrstvy za pomoci RF výbojů v argonovém plazmatu nebo ve směsi plazmatu O_2/Ar .



Obrázek 6.18: Experimentální zařízení na FzÚ AV ČR pro depozici tenkých vrstev

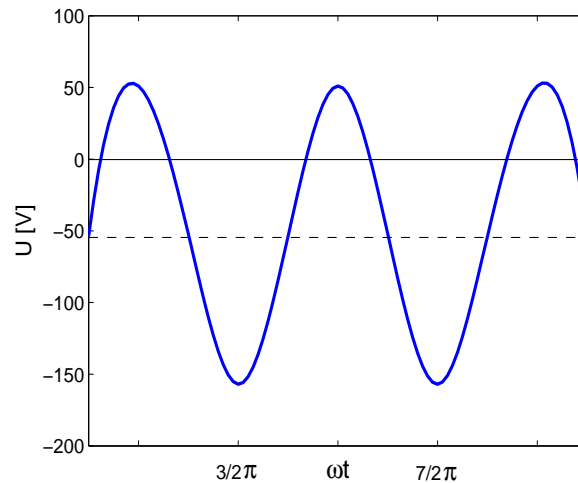
Na obrázku 6.18 je zobrazena jedna z aparatur, používaných na FzÚ AV ČR právě pro tyto účely.

Praktickým využitím RF výboje a různými měřeními v tomto výboji se zabývá řada autorů ve svých publikacích, např. v [31], [70] nebo [71]. V literatuře existuje řada publikací, věnovaná různým modelům a metodám počítačového modelování procesů v RF výbojích, např. [14], [15] nebo [27]–[30]. V některých publikacích se autoři zabývají nejen simulacemi v argonovém plazmatu, ale také v plazmatu různých směsí plynů, podrobnější informace lze nalézt např. v [46], [58], [61], [62] nebo [65]. Ve všech zmíněných publikacích lze nalézt různé přístupy k řešení problému – částicové modelování [36], [51], spojitý přístup [5], [63], [65] a konečně také modelování pomocí hybridní techniky, např. [6], [45] nebo [60].

V této podkapitole popíšeme některé z výsledků, které jsme získali právě při použití hybridního modelu. Objektem počítačového modelování v tomto případě bylo opět argonové plazma, ovšem tentokrát na vnořeném substrátu nebylo časově stálé napětí, ale bylo přivedeno proměnné RF napětí o frekvenci 13,56 MHz. Průběh tohoto napětí na vloženém substrátu je možné vyjádřit pomocí následujícího vztahu:

$$U(\mathbf{r}, t) = U_{\text{dc}} + U_{\text{rf}} \sin(\omega t), \quad (6.3)$$

kde U_{rf} je amplituda RF napětí na substrátu, ω je úhlová frekvence a U_{dc} je hodnota stejnosměrné složky napětí, která se po několika RF cyklech na substrátu ustálí, viz obrázek 6.19. Na tomto obrázku je vykreslen průběh



Obrázek 6.19: Potenciál na RF elektrodě

napětí na substrátu pro amplitudu RF napětí $U_{\text{rf}} = 104,0$ V. Plnou čarou, která je rovnoběžná s osou x , je vyznačena střední hodnota původního napětí, přivedeného na substrát, čárkovaně pak hodnota U_{dc} , jejíž hodnota je -53 V. Je tedy vidět, že v ustáleném stavu se střední hodnota v tomto případě posune níže. Je také vidět, že maximální hodnota napětí je zhruba $+50$ V, zatímco minimální hodnota je zhruba -150 V. Toto posunutí stejnosměrné složky napětí do záporných hodnot je způsobeno vyšší rychlostí elektronů ve srovnání s rychlostí kladných argonových iontů. V ustáleném stavu kapacitně

vázaného RF výboje se střední tok elektronů, které jsou záporné, musí rovnat toku kladných argonových iontů. Nárůst záporného náboje na elektrodě tak probíhá až do okamžiku, kdy se tyto zmíněné toky vyrovnají:

$$\langle I_e \rangle + \langle I_i \rangle = 0. \quad (6.4)$$

V tabulce 6.1 uvádíme experimentálně zjištěné hodnoty napětí U_{rf} a U_{dc} , společně s naměřenými hodnotami koncentrací částic ve výboji. Na počátku

Tabulka 6.1: Tabulka naměřených hodnot napětí U_{rf} a stejnosměrné složky napětí U_{dc} na substrátu

U_{rf} [V]	U_{dc} [V]	n_e [m^{-3}]
159,0	-103,0	$1,4 \cdot 10^{16}$
143,0	-95,0	$1,0 \cdot 10^{16}$
134,0	-88,0	$9,0 \cdot 10^{15}$
104,0	-53,0	$1,4 \cdot 10^{16}$
57,0	-11,7	$1,4 \cdot 10^{16}$

řešení problému RF výboje byly z provedeného experimentu vstupem pouze U_{rf} a koncentrace elektronů n_e . Z tohoto důvodu bylo třeba přijít na metodu, jak stejnosměrnou složku napětí U_{dc} vypočítat. Tento problém jsme vyřešili v podstatě iteračním způsobem. Vyšli jsme z již zmíněného předpokladu, že součet celkového toku nabitých částic na substrát musí být nulový, a proto musí platit vztah (6.4).

Na počátku výpočtu jsme zvolili libovolnou hodnotu U_{dc} a sledovali hodnoty toků nabitých částic na substrát. Pokud byl celkový tok záporný, U_{dc} jsme zvýšili, naopak, pokud byl celkový tok kladný, hodnotu U_{dc} jsme snížili. Tento postup jsme opakovali tak dlouho, až byl celkový tok přibližně rovný nule. Podobný postup používali autoři v práci [6].

V případě experimentu je možné změřit celkový proud, skládající se z elektronové a iontové složky a z posuvného proudu, tekoucí na sondu, ale nelze změřit jeho jednotlivé složky. Pro potřeby experimentátorů je ale třeba znát právě tyto jednotlivé složky proudů na vnořeném substrátu, hlavně pak proudu iontového, který je důležitý z hlediska depozice tenkých vrstev. Z hlediska našeho hybridního modelu to není výrazný problém, neboť z výpočtů

přímo vycházejí hodnoty toků jednotlivých částic – rovnice (1.16). Jednotlivé složky celkového proudu je možno vyjádřit následovně:

- elektronový proud

$$I_e = -en_{e0}(k_B T_e / 2\pi m_e)^{\frac{1}{2}} \exp(eU / k_B T_e) = -ej_e \quad (6.5)$$

- iontový proud

$$I_i = en_i u_i = ej_i \quad (6.6)$$

- posuvný proud

$$I_d = \frac{\partial D}{\partial t} = \varepsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t}. \quad (6.7)$$

Ve všech těchto případech uvažujeme jednotkovou plochu. Celkový proud na substrát vyjádříme jako součet jednotlivých výše uvedených příspěvků:

$$I = I_e + I_i + I_d = e(j_i - j_e) + I_d. \quad (6.8)$$

Modelování RF výboje může být problematické pro případy, kdy se úhlová frekvence podstatně liší od tzv. plazmové frekvence [1]:

$$\omega_i = \sqrt{\frac{n_i e^2}{m_i \varepsilon_0}}. \quad (6.9)$$

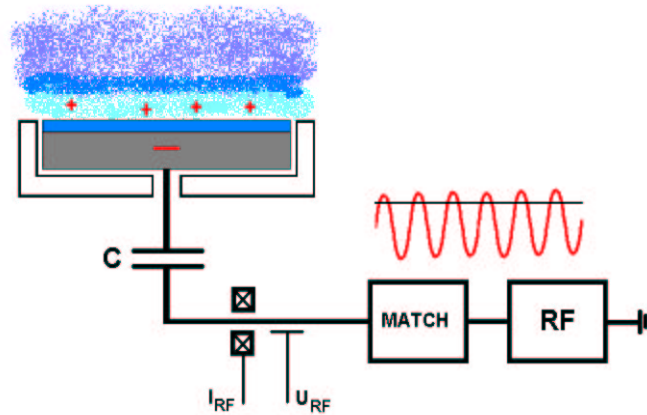
Jde o to, že ionty jsou mnohem těžší než elektrony a proto v důsledku své velké hmotnosti „nestíhají“ při $\omega > \omega_i$ ve svém pohybu sledovat změny proměnného elektrického pole. Při výpočtech nastávají problémy i tehdy, platí-li opačný případ, tedy když $\omega < \omega_i$. Z tohoto důvodu se v některých modelech, např. v [6] zavádí pro ionty tzv. efektivní hodnota elektrického pole, tedy jakási střední hodnota pole, kterou lze vyjádřit následujícím způsobem:

$$\frac{\partial E_{\text{eff}}}{\partial t} = \nu_m (E - E_{\text{eff}}), \quad (6.10)$$

kde

$$\nu_m = \frac{e}{\mu_i m_i}. \quad (6.11)$$

V našem případě ovšem zhruba platí, že plazmová frekvence ω_i je rovna úhlové frekvenci ω a z tohoto důvodu toto efektivní pole v našich výpočtech uvažovat nemusíme.



Obrázek 6.20: Schematické experimentální uspořádání RF výboje

Nyní popíšeme experimentální uspořádání a uvedeme popis příslušného modelu. Schematické uspořádání experimentu je uvedeno na obrázku 6.20. Je zde zobrazen zdroj RF signálu a substrát, na který je toto RF napětí přivedeno. Okolo substrátu je patrný oblak prostorového náboje, který se zde v ustáleném stavu objeví, dále za tímto prostorovým nábojem předpokládáme už nenarušené plazma. Náš 1D model v rovinné geometrii byl, jak se ukázalo, dostatečný pro popis jevů, odehrávajících se v tomto RF výboji.

Modelovali jsme argonové plazma za podmínek uvedených v tabulce 6.2. V oblasti za prostorovým nábojem, tedy v nenarušeném plazmatu jsme před-

Tabulka 6.2: Parametry RF výboje v argonu použité v hybridním modelu

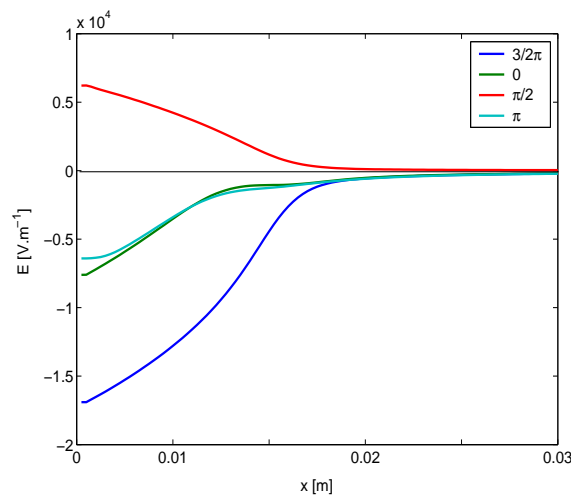
Modelový plyn	argon
Koncentrace částic	$9 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3} \div 1,4 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$
Tlak plynu	0,01 torr
Amplituda napětí na substrátu	$\approx 50 \div 160 \text{ V}$
Frekvence přivedeného signálu	13,56 MHz
Časový krok – elektrony	$1,2291 \cdot 10^{-11} \text{ s}$
Časový krok – argonové ionty	$1,2291 \cdot 10^{-11} \text{ s}$

pokládali nulové napětí a koncentrace nenarušeného plazmatu. Hlavním cílem prováděných výpočtů bylo zjistit průběhy a hodnoty jednotlivých složek

proudu, tekoucího na substrát. Uvádíme zde ale ještě další výsledky, které jsme z našich výpočtů obdrželi. Jedná se například o rozložení potenciálu, rozdělení koncentrací během RF cyklu, atd. Přestože jsme původně naše výpočty prováděli pomocí hybridního modelu, bylo zjištěno, že pro tento problém, kde jsou poměrně nízké tlaky – tabulka 6.2, nejsou srážky dominantním jevem, neboť střední volná dráha elektronů je ve srovnání s tloušťkou sheathu mnohem větší. Z tohoto důvodu je možné srážky rychlých elektronů s neutrálními částicemi zanedbat a tím pak urychlit výpočet.

Na obrázcích 6.21–6.27 uvádíme některé výsledky, získané pomocí našeho hybridního modelu.

Na obrázku 6.21 je zobrazeno rozložení elektrického potenciálu na substrátu během jednoho RF cyklu. Z obrázku je patrná asymetrie, diskutovaná již

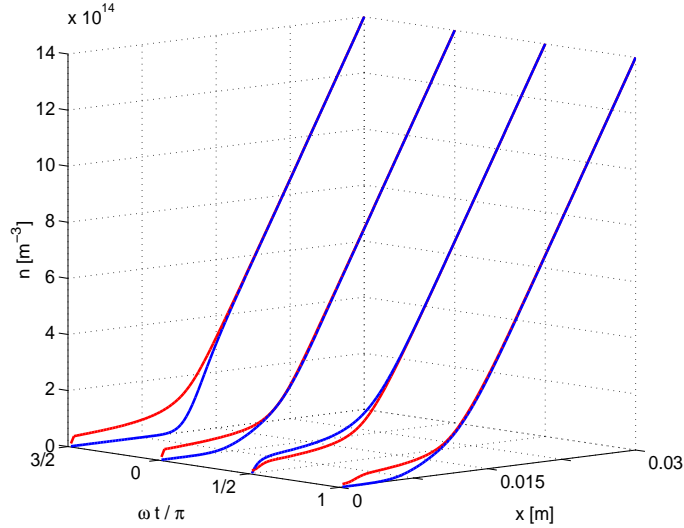


Obrázek 6.21: Rozložení elektrického pole v pracovní oblasti během jednoho RF cyklu

v souvislosti s obrázkem 6.19. Pro fázi $\frac{3}{2}\pi$, kdy nastává minimum, je intenzita elektrického pole v absolutní hodnotě větší než v případě maxima $\frac{\pi}{2}$. Z obrázku je také patrná změna tloušťky sheathu, nejužší je pro 0π a π , dále pak pro $\frac{\pi}{2}$ a nejsilnější pro $\frac{3}{2}\pi$. Důvodem proč je sheath silnější pro záporné napětí, jsme se již zabývali v předchozích kapitolách.

Na obrázku 6.22 je znázorněn časový vývoj koncentrace elektronů – modrá barva, a kladných argonových iontů – červená barva, v celé pracovní oblasti

během jednoho RF cyklu. Pro fázi $\frac{3}{2}\pi$, kdy přichází záporná půlvlna, jsou k substrátu přitahovány kladné ionty, zatímco elektrony jsou odpuzovány, narůstá koncentrace iontů a koncentrace elektronů klesá. Při $\omega t = 0$, kdy

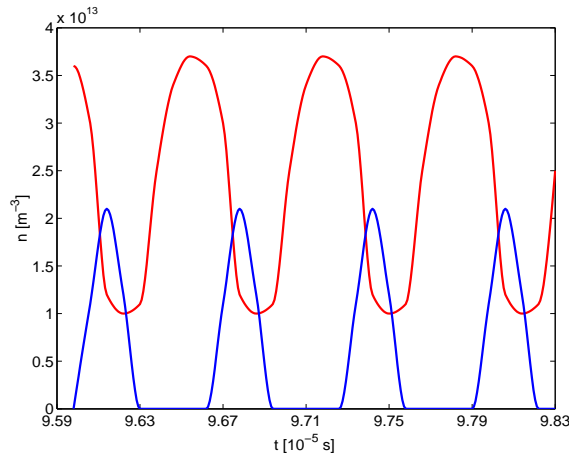


Obrázek 6.22: Časový vývoj koncentrací nabitých částic v pracovní oblasti během jednoho RF cyklu

se hodnota napětí $U(0, t)$ vlastně rovná hodnotě stejnosměrné složky napětí U_{dc} , která je záporná, se k substrátu dostávají už elektrony s vysokými energiemi a jak si na obrázku můžeme všimnout, roste jejich koncentrace v okolí substrátu. Posléze při hodnotě $\omega t = \frac{1}{2}\pi$ nastává maximum a $U(0, t)$ nabývá kladných hodnot. V tomto okamžiku koncentrace elektronů v okolí substrátu silně narůstá, neboť je pro elektrony přitažlivý a také díky tomu, že elektrony mají nižší hmotnosti a větší rychlosti než ionty a reagují tak rychleji na změny elektrického pole. Koncentrace iontů naopak klesá, ale ne tak rychle, jako v případě elektronů, právě díky jejich velké hmotnosti a menší pohyblivosti. Při $\omega t = \pi$ je hodnota $U(0, t)$ opět záporná a elektrony jsou od substrátu odpuzovány a kladné ionty naopak přitahovány. Pokud se ale podíváme podrobněji na obrázek, povšimneme si zajímavého jevu. Zatímco elektrony reagují na změny elektrického pole okamžitě, u kladných iontů dochází k jakési „setrvačnosti“. Přestože na substrátu je už kladné napětí, koncentrace iontů nedosahuje takových hodnot jako v případě, když $\omega t = 0$. Toto je zřejmě způsobeno již zmíněnou menší pohyblivostí iontů a delší dobou

konvergence do ustáleného stavu.

Obrázek 6.23 ukazuje změny koncentrací nabitých částic na substrátu v ustáleném stavu. Modře jsou opět označeny elektrony, červeně kladné argonové



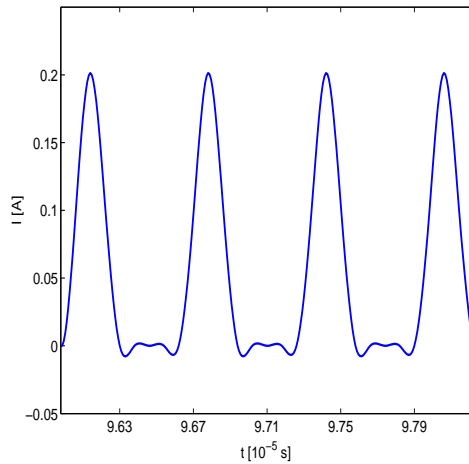
Obrázek 6.23: Změny koncentrací částic na povrchu substrátu v ustáleném stavu

ionty. Tento obrázek v podstatě potvrzuje to, co bylo řečeno v předchozím odstavci. V první řadě koncentrace kladných iontů nepoklesne nikdy na nulu, tak jako v případě elektronů. Toto je zčásti důsledkem okrajových podmínek pro elektrony $n_{e0} = 0$ a pro ionty $\frac{\partial n_{i0}}{\partial x} = 0$, zčásti důsledkem rozdílných pohyblivostí obou typů částic. Dále jsou též viditelné rychlé změny koncentrací elektronů při průchodu opačných půlvln. Povšimneme-li si změn koncentrace kladných iontů, vidíme pomalejší pokles koncentrace v případě změny záporné půlvlny na kladnou, zatímco nárůst koncentrace iontů v případě opačné změny je vyšší. Toto potvrzuje závěry, ke kterým jsme dospěli v předchozích odstavcích.

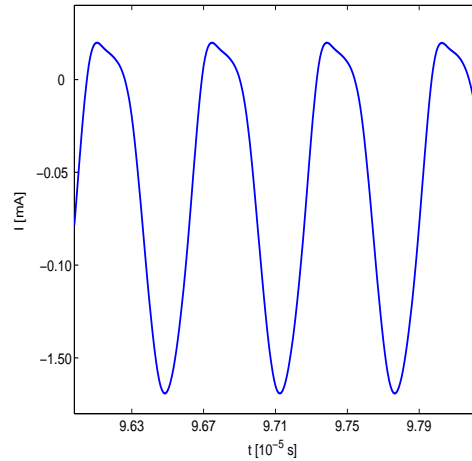
Na obrázcích 6.24–6.27 jsou zachyceny jednotlivé složky celkového proudu a celkový proud, tekoucí na substrát během jednoho RF cyklu.

Výsledný proud získaný z našeho modelu je možno porovnat s posledním uvedeným obrázkem 6.28, který reprezentuje experimentálně naměřené hodnoty celkového proudu – modrá barva a napětí – červená barva na vloženém substrátu.

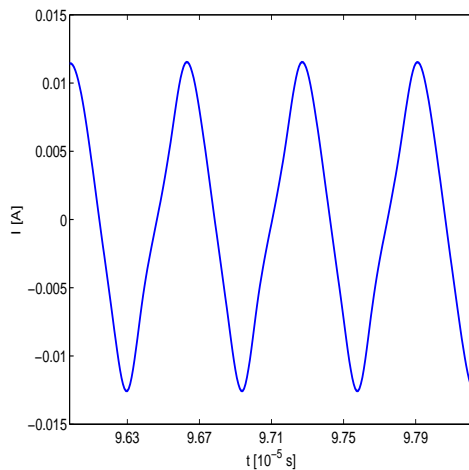
Při porovnání obou obrázků vidíme, až na některé odlišnosti, celkem dobrou



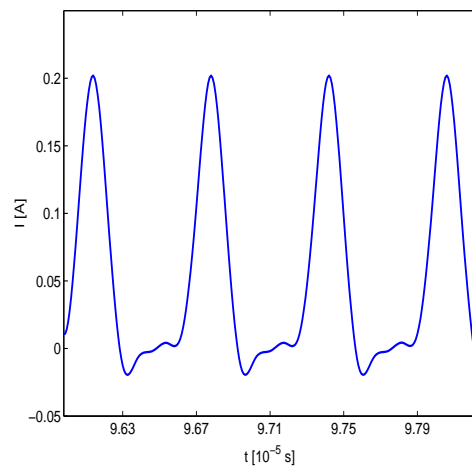
Obrázek 6.24: Elektronový proud na substrátu v ustáleném stavu



Obrázek 6.25: Iontový proud na substrátu v ustáleném stavu



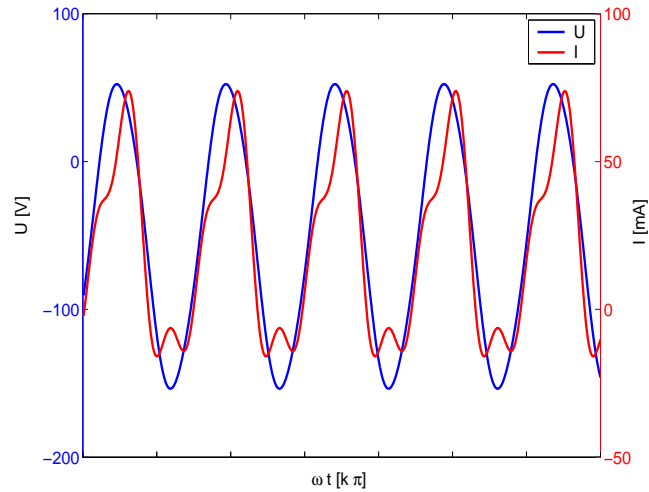
Obrázek 6.26: Posuvný proud na substrátu v ustáleném stavu



Obrázek 6.27: Výsledný proud na substrátu v ustáleném stavu

shodu mezi modelovými a experimentálně zjištěnými tvary křivek výsledného proudu. Přesné vysvětlení těchto odlišností nepodáváme, ovšem vzhledem k tomu, že jde o poměrně jednoduchý model, dá se očekávat, že s postupným vylepšením modelu dostaneme i realističtější a přesnější výsledky.

Hybridní model se ukázal být pro řešení problémů RF výboje velice výhodný, proto plánujeme rozšíření a vylepšení stávajícího hybridního modelu a dále připravujeme zejména model RF výboje ve směsi O_2/Ar , která se na FzÚ



Obrázek 6.28: Výsledný proud a napětí na vloženém substrátu v ustáleném stavu – získáno z experimentu

AV ČR používá též k depozicím tenkých vrstev. Stejně tak bychom se chtěli zabývat například simulacemi pulzních výbojů. Jednalo by se tedy opět o časově proměnné napětí, ovšem přiváděné na substrát v jednotlivých pulzech.

Počítačovými simulacemi tohoto problému se zabývají například autoři v publikaci [55].

Kapitola 7

Závěr

Předkládaná dizertační práce s názvem *Pokročilé techniky modelování ve fyzice plazmatu* se zabývá aplikacemi algoritmů počítačového modelování ve vybraných problémech fyziky nízkoteplotního plazmatu.

Hlavním cílem této dizertační práce bylo vytvořit efektivní algoritmus, který by byl vhodný pro řešení celé řady problémů ve fyzice plazmatu. Byl vytvořen algoritmus pro řešení problémů ve 2D jako kombinace dvou dosti často používaných technik počítačového modelování ve fyzice plazmatu, tj. částicové a spojitě. Uvedený postup se nazývá hybridní modelování. Postup vytváření vícerozměrného hybridního modelu během doktorského studia je možné shrnout v následujících třech bodech:

- Částicový model – na pracovišti, kde byla dizertační práce vypracována, se jeho pracovníci zabývali částicovými modely různých problémů ve fyzice plazmatu. Z tohoto důvodu jsme tedy už jen navázali na stávající programy a výsledky z těchto upravených modelů jsme porovnali s výsledky, získanými pomocí předchozích částicových modelů.
- Spojitý model – na pracovišti v podstatě neexistoval žádný počítačový model, který by řešil problémy ve fyzice plazmatu právě tímto přístupem. Z tohoto důvodu bylo třeba tento model postupně vytvořit, nejdříve jako jednodušší 1D model, posléze ho rozšířit na 2D model. Výsledky získané pomocí tohoto spojitěho modelu jsme mohli pak porovnávat s výsledky z částicových modelů. V okamžiku, kdy výsledky získané z obou modelů byly v dobré shodě, mohli jsme přistoupit k závěrečné fázi přípravy hybridního modelu.

- Hybridní model – jak již bylo několikrát zmíněno, jedná se o kombinaci obou předchozích přístupů. Hybridní model byl vytvářen hlavně z důvodu nižší spotřeby výpočetního času. Výsledky z hybridního modelu jsme dostali podstatně rychleji než z klasického částicového modelu, na druhou stranu jsme ale zase ztratili některé informace, například o rychlostech částic. Na závěr jsme tento hybridní model aplikovali na některé konkrétní problémy, řešených v současné době ve fyzice nízkoteplotního plazmatu.

Cílem této práce bylo mimo jiné realizovat algoritmy a vytvořit programy, které by mohly sloužit i následujícím studentům a doktorandům k řešení různých problémů z fyziky plazmatu, na kterých by mohli dále stavět a také je podle potřeby rozšiřovat a vylepšovat.

Všechny programy vytvořené autorem této dizertační práce v rámci doktorského studia v letech 2003–2007 jsou v elektronické podobě k dispozici v laboratoři počítačové fyziky KFPP MFF UK.

Závěrem lze konstatovat, že všechny vytyčené cíle doktorské práce, uvedené v kapitole 2, byly úspěšně splněny.

Seznam obrázků

1.1	Účinné průřezy pro srážky elektronů s Ar atomy	16
1.2	Účinné průřezy pro srážky Ar^+ s Ar atomy	17
1.3	Sheath a presheath – převzato z [47]	18
1.4	Různé typy sond [69]	20
1.5	Sondová charakteristika – jednosondová a dvousondová	20
1.6	Postup výpočtu hybridním modelem	30
1.7	Schematický pohled na magnetickou rekonekci ve 2D	31
1.8	Schéma pro řešení MHD rovnic pomocí Laxovy-Wendroffovy metody	34
3.1	Potenciál, náboj a koncentrace částic, délka oblasti 1 cm	40
3.2	Potenciál, náboj a koncentrace částic, délka oblasti 2 cm	40
3.3	Řešení difúzní rovnice – rovinná, válcová a kulová geometrie	41
3.4	Energetická rozdělení elektronů, předpětí +10 V – normováno ke koncentraci částic	41
3.5	Maxwellovo rozdělení rychlostí pro různé driftové rychlosti ve směru osy x – normováno ke koncentraci částic	42
3.6	Rozdělení x -ové složky rychlosti elektronů; 0,1 torr	43
3.7	Rozdělení x -ové složky rychlosti elektronů; 1,0 torr	43
3.8	Graf koncentrace nabitých částic, relativní koncentrace záporných iontů O^- – 10%	44
3.9	Graf koncentrace nabitých částic, relativní koncentrace záporných iontů O^- – 90%	44
3.10	Rozložení hustoty náboje, relativní koncentrace záporných iontů O^- – 10%	45
3.11	Rozložení hustoty náboje, relativní koncentrace záporných iontů O^- – 90%	45

3.12	Koncentrace nabitých částic – válcová geometrie	46
3.13	Úhlová rozdělení rychlostí elektronů v blízkosti válcové sondy různých rozměrů – normováno ke koncentraci částic	46
3.14	Koncentrace nabitých částic – kulová geometrie	47
3.15	Úhlová rozdělení rychlostí elektronů v blízkosti kulové sondy různých rozměrů – normováno ke koncentraci částic	47
3.16	Rozložení potenciálu v pracovní oblasti pro rovinnou, válcovou a kulovou geometrii	48
3.17	Rozdělení x -ové složky rychlosti elektronů pro různé geometrie	49
3.18	Energetická rozdělení elektronů pro různé geometrie	49
3.19	Úhlové rozdělení rychlostí elektronů na povrchu sondy	50
3.20	Úhlové rozdělení rychlostí elektronů 1 mm od povrchu sondy .	50
3.21	Rozdělení x -ové složky rychlosti elektronů na povrchu sondy .	50
3.22	Rozdělení x -ové složky rychlosti elektronů 1 mm od povrchu sondy	50
3.23	Rozdělení celkové rychlosti elektronů na povrchu sondy	51
3.24	Rozdělení celkové rychlosti elektronů 1 mm od povrchu sondy	51
4.1	Časový vývoj koncentrace elektronů a iontů – rovinná sonda .	55
4.2	Časový vývoj koncentrace elektronů a iontů – válcová sonda .	56
4.3	Časový vývoj koncentrace elektronů a iontů – kulová sonda . .	57
4.4	Rozložení elektrického potenciálu v okolí dvou substrátů různých velikostí	59
4.5	Potenciál v okolí válcové sondy	61
4.6	Koncentrace elektronů v okolí válcové sondy	61
4.7	Koncentrace iontů v okolí válcové sondy	61
5.1	Intenzita elektrického pole	66
5.2	Tok pomalých elektronů v pracovní oblasti	67
5.3	Tok kladných argonových iontů v pracovní oblasti	67
5.4	Tok rychlých elektronů v pracovní oblasti	67
5.5	Počet pružných srážek – rychlé elektrony	68
5.6	Počet excitačních srážek – rychlé elektrony	68
5.7	Počet ionizačních srážek – rychlé elektrony	68
6.1	Rozložení potenciálu v pracovní oblasti pro různé tlaky	72

6.2	Tok elektronů v pracovní oblasti	73
6.3	Tok kladných iontů v pracovní oblasti	73
6.4	Počet pružných srážek pro různé tlaky	73
6.5	Počet excitačních srážek pro různé tlaky	73
6.6	Počet ionizačních srážek pro různé tlaky	74
6.7	Potenciál pro různé koncentrace negativních iontů	76
6.8	Koncentrace částic, rovinná sonda – 10% O^-	77
6.9	Koncentrace částic, rovinná sonda – 90% O^-	77
6.10	Koncentrace částic, válcová sonda – 50% O^-	77
6.11	Koncentrace částic, kulová sonda – 50% O^-	77
6.12	Tok elektronů na sondu pro všechny geometrie v závislosti na koncentraci O^- ; předpětí +10 V	78
6.13	Tok záporných iontů na sondu pro všechny geometrie v závislosti na koncentraci O^- ; předpětí +10 V	78
6.14	Porovnání celkového toku částic na sondu pro válcovou geometrii v závislosti na koncentraci O^- a předpětí na sondě	78
6.15	Koncentrace kladných argonových iontů ve 2D – relativní koncentrace záporných iontů 70%	79
6.16	Koncentrace záporných kyslíkových iontů ve 2D – relativní koncentrace záporných iontů 70%	79
6.17	Koncentrace elektronů ve 2D – relativní koncentrace záporných iontů 70%	79
6.18	Experimentální zařízení na FzÚ AV ČR pro depozici tenkých vrstev	81
6.19	Potenciál na RF elektrodě	82
6.20	Schematické experimentální uspořádání RF výboje	85
6.21	Rozložení elektrického pole v pracovní oblasti během jednoho RF cyklu	86
6.22	Časový vývoj koncentrací nabitých částic v pracovní oblasti během jednoho RF cyklu	87
6.23	Změny koncentrací částic na povrchu substrátu v ustáleném stavu	88
6.24	Elektronový proud na substrátu v ustáleném stavu	89
6.25	Iontový proud na substrátu v ustáleném stavu	89
6.26	Posuvný proud na substrátu v ustáleném stavu	89

6.27 Výsledný proud na substrátu v ustáleném stavu	89
6.28 Výsledný proud a napětí na vloženém substrátu v ustáleném stavu – získáno z experimentu	90

Seznam tabulek

1.1	Srážkové procesy – elektrony	16
1.2	Srážkové procesy – argonové ionty	16
3.1	Parametry DC výboje v argonu použité v částicovém modelu .	37
4.1	Hodnoty parametrů a a μ_0 , převzato ze [17]	53
4.2	Parametry DC výboje v argonu použité ve spojitém modelu .	53
5.1	Tabulka relativního počtu srážek rychlých elektronů pro různá napětí na sondě	69
5.2	Porovnání rychlostí jednotlivých modelů – závislost na tlaku .	69
6.1	Tabulka naměřených hodnot napětí U_{rf} a stejnosměrné složky napětí U_{dc} na substrátu	83
6.2	Parametry RF výboje v argonu použité v hybridním modelu .	85

Dodatek A

Autorovy publikace v recenzovaných časopisech a recenzovaných sbornících

A.1 Recenzované časopisy

- [J1] Hrach, R., Jelínek, P., Šimek, J., Bařina, O., Vicher, M., Self-consistent particle modelling of plasma-solid interaction: Influence of substrate geometry, *Czech. J. Phys. Suppl. C*, **54**, 671–675, 2004.
- [J2] Jelínek, P., Šimek, J., Hrach, R., Computational study of processes in plasma sheaths surrounding probes of various geometries, *Czech. J. Phys.* **56**, B809–B814, 2006.
- [J3] Jelínek, P., Hrach, R., One-dimensional hybrid model of plasma-solid interaction in argon plasma at higher pressures, *Journal of Physics: Conference Series*, 2006 (přijato k tisku).
- [J4] Jelínek, P., Hrach, R., Bartoš, P., Techniques for computational study of plasma-solid interaction at higher pressures, *Vacuum*, 2007 (přijato k tisku).
- [J5] Bartoš, P., Hrach, R., Jelínek, P., Multidimensional fluid-particle modelling technique in low-temperature argon plasma at low pressure, *Vacuum*, 2007 (přijato k tisku).

A.2 Recenzované sborníky

- [J6] Jelínek, P., Hrach, R., Self-Consistent Particle Modelling of Plasma Sheaths Surrounding Probes with Various Geometries, in *WDS'04 Proceedings of contributed papers: Part III – Physics*, ed. by J. Šafránková, Matfyzpress, 600–605, 2004. (ISBN 80-86732-32-0).
- [J7] Jelínek, P., Šimek, J., Bartoš, P., Hrach, R., Computational Study of Energy and Angular Distributions of Charged Particles in Low-Temperature Plasmas, in *WDS'05 Proceedings of contributed papers: Part III – Physics*, ed. by J. Šafránková, Matfyzpress, 631–636, 2005. (ISBN 80-86732-59-2).
- [J8] Bartoš, P., Jelínek, P., Hrach, R., Fluid Modelling of Plasma Behaviour in the Vicinity of Planar and Cylindrical Probes, in *WDS'05 Proceedings of contributed papers: Part III – Physics*, ed. by J. Šafránková, Matfyzpress, 625–630, 2005. (ISBN 80-86732-59-2).
- [J9] Jelínek, P., Hrach, R., Šimek, J., Sedlák, D., Effective Modelling of Plasma Sheath Based on Improved Non self-consistent Particle Simulation Technique, 32nd EPS Plasma Physics Conference, Tarragona, Spain, 27th June–1st July, 2005. 4 p.
- [J10] Hrach, R., Hrachová, V., Šimek, J., Jelínek, P., Study of plasma-solid interaction in electronegative gas mixtures at low and medium pressures, 32nd EPS Plasma Physics Conference, Tarragona, Spain, 27th June–1st July, 2005. 4 p.
- [J11] Jelínek, P., Hrach, R., Šimek, J., Hrachová, V., Bartoš, P., The Role of Negative Ions in the Sheath Formation, in e-Proc. of 17th International Symposium on Plasma Chemistry, Toronto, Canada, August 7–12, 2005. 6 p.
- [J12] Šimek, J., Hrach, R., Sedlák, D., Jelínek, P., Study of plasma-solid interaction in electronegative gases by the combination of particle simulation technique and evolutionary modelling, in e-Proc. of 17th International Symposium on Plasma Chemistry, Toronto, Canada, August 7–12, 2005. 5 p.

-
- [J13] Jelínek, P., Hrach, R., Combined Particle and Fluid Model of Argon Plasma, in *WDS'06 Proceedings of contributed papers: Part III – Physics*, ed. by J. Šafránková and J. Pavlů, Matfyzpress, 198–203, 2006. (ISBN 80-86732-86-X).
- [J14] Šimek, J., Hrach, R., Jelínek, P., Computational Study of Negative Ions Influence on Plasma Sheath Formation, Proc. Conference on Computational Physics 2006, Gyeongju, Republic of Korea, August 29–September 1, 2006.

Dodatek B

Autorovy ostatní publikace

- [J15] Jelínek, P., Moravec, Z., Výpočet MOID a její vývoj pro několik vybraných nebeských těles, Sborník 10. konference MATLAB 2002, Praha, 223–226, 2002. (ISBN 80-7080-500-5).
- [J16] Jelínek, P., Blažek, J., Špatenka, P., Studium elektrického pole a srážek sekundárně emitovaných elektronů ve stěnové vrstvě plazmatu, Sborník 11. konference MATLAB 2003, Praha, 270–275, 2003. (ISBN 80-7080-526-9).
- [J17] Hrach, R., Jelínek, P., Šimek, J., Bařina, O., Computational Study of Interaction of Low-Temperature Plasma with Substrates of Various Geometries, Europhysics Conf. on Comp. Phys., Europhysics Conference Abstracts, Vol. **28 D**, pp. 117, Genova, Italy, 1–4 September 2004. (ISBN 2-914771-19-3).
- [J18] Sedlák, D., Hrach, R., Bařina, O., Jelínek, P., Šimek, J., Study of Plasma Solid Interaction by the Combination of Particle Simulation Technique and Evolutionary Modelling, Europhysics Conf. on Comp. Phys., Europhysics Conference Abstracts, Vol. **28 D**, pp. 212-213, Genova, Italy, 1–4 September 2004. (ISBN 2-914771-19-3).
- [J19] Jelínek, P., Hrach, R., Blažek, J., Špatenka, P., Investigations of collisional plasma sheath in the vicinity of planar probe, in e-Proc. of 12th International Conference on Plasma Physics, Nice, France, 5 p., 2004. <http://hal.ccsd.cnrs.fr/ccsd-00001965>.

- [J20] Olejníček, J., Píchal, J., Jelínek, P., Blažek, J., Špatenka, P., Diagnostika interferogramů v prostředí MATLAB, Sborník 12. konference MATLAB 2004, Praha, 435–440, 2004. (ISBN 80-7080-550-1).
- [J21] Jelínek, P., Hrach, R., Šimek, J., Combined Particle and Fluid Model of Plasma-Solid Interaction, Proc. Conference on Computational Physics 2006, Gyeongju, Republic of Korea, August 29–September 1, 2006.
- [J22] Jelínek, P., Bárta M., MHD Simulations in Plasma Physics, in e-Proc. Technical Computing Prague 2006, Praha, 6 stran, 2006. (ISBN 80-7080-616-8).

Literatura

- [1] Chen, F. F.: *Úvod do fyziky plazmatu*, Academia, Praha 1984.
- [2] Kracík, J., Tobiáš, J.: *Fyzika plazmatu*, Academia, Praha 1966.
- [3] Ralston, A.: *Základy numerické matematiky*, Academia, Praha 1973.
- [4] Bogaerts, A., Gijbels, R.: Hybrid Monte Carlo-fluid model of a direct current glow discharge, *J. Appl. Phys.* **78**, 2233 (1995).
- [5] Passchier, J. D. P., Goedheer, W. J.: A two-dimensional fluid model for an argon rf discharge, *J. Appl. Phys.* **74**, 3744 (1993).
- [6] Bogaerts, A., Gijbels, R., Goedheer, W.: Hybrid Modeling of a Capacitively Coupled Radio Frequency Glow Discharge in Argon: Combined Monte Carlo and Fluid Model, *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 4404 (1999).
- [7] Bogaerts, A., Gijbels, R.: Two-Dimensional Model of a Direct Current Glow Discharge: Description of the Argon Metastable Atoms, Sputtered Atoms, and Ions, *Analytical Chemistry* **68**, 2676 (1996).
- [8] Bogaerts, A., Gijbels, R.: Mathematical description of a direct current glow discharge in argon, *Fresenius J. Anal. Chem.* **355**, 853 (1996).
- [9] Birdsall, C. K., Langdon, A. B., *Plasma Physics via Computer Simulation*, Adam-Hilger, Bristol, 1991.
- [10] Hockney, R. W., Eastwood, J. W., *Computer Simulation Using Particles*, McGraw-Hill, New York, 1981.

-
- [11] Vahedi, V., Surendra, M.: A Monte Carlo collision model for the particle-in-cell method: applications to argon and oxygen discharges, *Computer Physics Comm.* **87**, 179 (1995).
- [12] Hrach, R., Hrachová, V., Vicher, M.: Sheath evolution in electronegative plasma, *Computer Physics Comm.* **14**, 505 (2002).
- [13] Mareš, R., Hrach, R., Vicher, M.: PIC and fluid model of plasma sheath, *Czech. J. Phys.* **52**, D705 (2002).
- [14] Boeuf, J. P.: Numerical model of rf glow discharges, *Phys. Rev. A* **36**, 2782 (1987).
- [15] Hammond, E. P., Mahesh, K., Moin, P.: A Numerical Method to Simulate Radio-Frequency Plasma Discharges, *J. Comp. Phys.* **176**, 402 (2002).
- [16] Cenian, A., Chernukho, A., Leys, C.: Particle-in-cell Monte Carlo (PIC-MC) simulations of plasma-wall interactions in low-pressure AR plasma, *Radiation Physics and Chemistry* **68**, 109 (2003).
- [17] Frost, L. S.: Effect of Variable Ionic Mobility on Ambipolar Diffusion, *Phys. Rev.* **105**, 354 (1957).
- [18] Surendra, M., Graves, B. D., Jellum, G. M.: Self-consistent model of a direct-current glow discharge: Treatment of fast electrons, *Phys. Rev. A* **41**, 1112 (1990).
- [19] Weng, Y., Kushner, M. J.: Method for including electron-electron collisions in Monte Carlo simulations of electron swarms in partially ionized gases, *Phys. Rev. A* **42**, 6192 (1990).
- [20] Conrad, J. R.: Sheath thickness and potential profiles of ion-matrix sheaths for cylindrical and spherical electrodes, *J. Appl. Phys.* **62**, 777 (1987).
- [21] Chen, X. P.: Sheath criterion and boundary conditions for an electrostatic sheath, *Phys. Plasmas* **5**, 804 (1998).

- [22] Lawler, J. E., Kortshagen, U.: Self-consistent Monte Carlo simulations of the positive column of gas discharges, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **32**, 3188 (1999).
- [23] Kawamura, E., Ingold, J. H.: Particle in cell simulations of low pressure small radius positive column discharges, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **34**, 3150 (2001).
- [24] Gudmundsson, J. T., Kimura, T., Lieberman, M. A.: Experimental studies of O₂/Ar plasma in a planar inductive discharge, *Plasma Sources Sci. Technol.* **8**, 22 (1999).
- [25] Hrach, R., *Numerické metody ve fyzikální elektronice I.*, skripta MFF UK, Praha, 1981.
- [26] Hrach, R., *Počítačová fyzika I.*, skripta PF UJEP, Ústí nad Labem, 2003.
- [27] Sobolewski, M. A., Sheath model for radio-frequency-biased, high-density plasmas valid for all ω/ω_i , *Phys. Rev. E* **62**, 8540 (2000).
- [28] Xiang, N., Waelbroeck, F. L., Collisional sheath dynamics in the intermediate radio-frequency regime, *J. Appl. Phys.* **95**, 860 (2003).
- [29] Edelberg, E. A., Aydil, E. S., Modeling of the sheath and the energy distribution of ions bombarding rf-biased substrates in high density plasma reactors and comparison to experimental measurements, *J. Appl. Phys.* **86**, 4799 (1999).
- [30] Dai, Z.-L., Wang, Y.-N., Simulations of ion transport in a collisional radio-frequency plasma sheath, *Phys. Rev. E* **69**, 036403-1-6 (2004).
- [31] Braithwaite, N. St. J., Internal and external electrical diagnostics of RF plasmas, *Plasma Sources Sci. Technol.* **6**, 133 (1999).
- [32] Vitásek, E., *Numerické metody*, SNTL, Praha, 1987.
- [33] Nezbeda, I., Kolafa, J., Kotrla, M., *Úvod do počítačových simulací: Metody Monte Carlo a molekulární dynamiky*, Karolinum, Praha, 2003.

-
- [34] Dřímál, J., Trunec, D., *Metoda Monte Carlo – základy a aplikace ve fyzice*, Brno, 1994.
- [35] Vicher, M., Entlicher, M., Model of Plasma Sheath Region Using Variable Particle Weights, *Czech. J. Phys.* **50**, 477 (2000).
- [36] Neyts, E., Yan, M., Bogaerts, A., Gijbels, R., Particle-in-cell/Monte Carlo simulations of a low-pressure capacitively coupled radio-frequency discharge: Effect of adding H₂ to an Ar discharge, *J. Appl. Phys.* **93**, 5025 (2003).
- [37] Fiala, A., Pitchford, L. C., Boeuf, J. P., Two-dimensional, hybrid model of low-pressure glow discharges, *Phys. Rev. E* **49**, 5607 (1994).
- [38] Šimek, J., *Doktorská dizertační práce*, MFF UK Praha, Praha, 2006.
- [39] Birdsall, C. K., Particle-in-cell charged-particle simulations, plus Monte Carlo collisions with neutral atoms, PIC-MCC, *IEEE Trans. on Plasma Science* **19**, 65 (1991).
- [40] Greengard, L., Rokhlin, V., A fast algorithm for particle simulations, *J. Comp. Phys.* **73**, 325 (1987).
- [41] Kono, A., Intrinsic sheath edge conditions for sheath instability in low-pressure electronegative plasmas, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36**, 465 (2003).
- [42] Franklin, R. N., The plasma-sheath boundary region, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36**, R309 (2003).
- [43] Bauernfeing, P., Lergon, H. G., Evolution of the maximum ion impact energy at an electrode during sheath and presheath formation, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **37**, 1648 (2004).
- [44] Bogaerts, A., Gijbels, R., Role of Ar²⁺ and Ar₂⁺ ions in a direct current argon glow discharge: A numerical description, *J. Appl. Phys.* **86**, 4124 (1999).

-
- [45] Bogaerts, A., Gijbels, R., Goedheer, W. J., Comparison between a radio-frequency and direct current glow discharge in argon by a hybrid Monte Carlo-fluid model for electrons, argon ions and fast argon atoms, *Spectrochim. Acta B* **54**, 1335 (1999).
- [46] De Bleeker, K., Herrebout, D., Bogaerts, A., Gijbels, R., Descamps, P., One-dimensional modelling of a capacitively coupled rf plasma in silane/helium, including small concentrations of O₂ and N₂, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36**, 1826 (2003).
- [47] Lieberman, M. A., Lichtenberg, A. J., *Principles of Plasma Discharges and Material Processing*, John Wiley & Sons, New York 1994.
- [48] Raizer, Y. P., *Gas Discharge Physics*, Springer, Berlin 1991.
- [49] Horváth, M., Doktorská dizertační práce, MFF UK Praha, Praha, 2002.
- [50] Chen, Z. F., Jones, H. G., Electron mobility calculations for mercury-argon low pressure gas discharges, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **17**, 337 (1984).
- [51] Bogaerts, A., Gijbels, R., Monte Carlo model for the argon ions and fast argon atoms in a radio-frequency discharge, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **27**, 1406 (1999).
- [52] Annaratone, B. M., Antonova, T., Thomas, H. M., Morfill, G. E., Diagnostics of the Electronegative Plasma Sheath at Low Pressures Using Microparticles, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 185001-1 (2004).
- [53] Kutasi, K. Donkó, Z., Hybrid model of a plane-parallel hollow-cathode discharge, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33**, 1081 (2000).
- [54] Donkó, Z., Hybrid model of a rectangular hollow cathode discharge, *Phys. Rev. E* **57**, 7124 (1998).
- [55] Bogaerts, A., Gijbels, R., Hybrid Monte Carlo-fluid model for a microsecond pulsed glow discharge, *J. Anal. At. Spectrom.* **15**, 895 (2000).
- [56] Scharfetter, D. L., Gummel, H. K., *IEEE Trans. Electron. Devices* **16**, 64 (1969).

-
- [57] Vasenkov, A. V., Shizgal, B. D., Numerical study of a direct current plasma sheath based on kinetic theory, *Phys. Plasmas* **9**, 691 (2002).
- [58] Sommerer, T. J., Kushner, M. J., Numerical investigation of the kinetics and chemistry of rf glow discharge plasmas sustained in He, N₂, O₂, He/N₂/O₂, He/CF₄/O₂ and SiH₄/NH₃ using Monte Carlo-fluid hybrid model, *J. Appl. Phys.* **71**, 1654 (1992).
- [59] Skullerud, H. R., Null collision method, *Techn. Report EIP 72-1*, Norwegian Inst. of Technology, Trondheim 1972.
- [60] Ventzek, P. L. G., Hoekstra, R. J., Kushner, M. J., Two-dimensional modeling of high plasma density inductively coupled sources for materials processing, *J. Vac. Sci. and Technol. B: Microelectronics and Nanometer Structures* **12**, 461 (1994).
- [61] Ventzek, P. L. G., Sommerer, T. J., Hoekstra, R. J., Kushner, M. J., Two-dimensional hybrid model of inductively coupled plasma sources for etching, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 605 (1993).
- [62] Nienhuis, G. J., Goedheer, W. J., Hamers, E. A. G., van Sark, G. J. H. M., Bezemer, J., A self-consistent fluid model for radio-frequency discharges in SiH₄-H₂ compared to experiments, *J. Appl. Phys.* **82**, 2060 (1997).
- [63] Graves, D. B., Fluid model simulations of a 13.56-MHz rf discharge: Time and space dependence of rates of electron impact excitation, *J. Appl. Phys.* **62**, 88 (1987).
- [64] Herrebout, D., Bogaerts, A., Yan, M., Gijbels, R., Goedheer, W., Dekempeneer, E., One-dimensional fluid model for an rf methane plasma of interest in deposition of diamond-like carbon layers, *J. Appl. Phys.* **90**, 570 (2001).
- [65] Herrebout, D., Bogaerts, A., Yan, M., Gijbels, R., Goedheer, W., Vanhulsel, A., Modeling of a capacitively coupled radio-frequency methane plasma: Comparison between a one-dimensional and a two-dimensional fluid model, *J. Appl. Phys.* **92**, 2290 (2002).

- [66] Huddlestone, R. H., Leonard, S. L., *Plasma Diagnostic Techniques*, Academic Press, New York, 1965.
- [67] Mott-Smith, H. M., Langmuir, I., The Theory of Collectors in Gaseous Discharges, *Phys. Rev.* **28**, 727 (1926).
- [68] Bukowski, J. D., Graves, D. B., Vitello, P., Two-dimensional fluid model of an inductively coupled plasma with comparison to experimental spatial profiles, *J. Appl. Phys.* **80**, 2614 (1996).
- [69] Hippler, R., Pfau, S., Schmidt, M., Schoenbach, K. H., *Low Temperature Plasma Physics – Fundamental Aspects and Applications*, WILEY-WCH Verlag Berlin GmbH, Berlin, 2001.
- [70] Virostko, P., Hubička, Z., Adámek, P., Čada, M., Olejníček, J., Tichý, M., Šícha, M., Measurement of Plasma Parameters in Low Temperature High Density Hollow Cathode Plasma Jet Working in Magnetic Field, *Contrib. Plasma Phys.* **46**, 445 (2006).
- [71] Hubička, Z., Čada, M., Adámek, P., Virostko, P., Olejníček, J., Deyneka, A., Jastrabík, L., Jurek, K., Suchaneck, G., Guenther, M., Gerlach, G., Boháč, P., Investigation of the RF pulse modulated plasma jet system during the deposition of $\text{Pb}(\text{Zr}_x \text{Ti}_{1-x})\text{O}_3$ thin films on polymer substrates, *Surf. Coat. Technol.* **200**, 940 (2005).
- [72] Kliem, B., Karlický, M., Benz, A. O., Solar flare radio pulsations as a signature of dynamic magnetic reconnection, *Astron. Astrophys.* **360**, 715 (2000).
- [73] Sankaran, K., Martinelli, L., Jardin, S. C., Choueiri, E. Y., A flux-limited numerical method for solving the MHD equations to simulate propulsive plasma flows, *Int. J. Numer. Meth. Engng.* **53**, 1415 (2002).