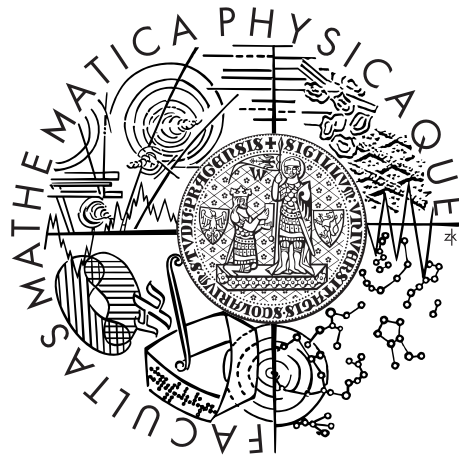


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Marek Munzar

Výpočet energie nabitých a neutrálních částic v aktivním a dohasínajícím výboji

Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Štěpán Roučka, Ph.D.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Obecná fyzika

Praha 2016

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Název práce: Výpočet energie nabitých a neutrálních částic v aktivním a dohasínajícím výboji

Autor: Marek Munzar

Katedra: Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Štěpán Roučka, Ph.D., Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Abstrakt: Cílem této práce bylo vytvoření počítačového modelu, který by simuloval průběh experimentu prováděného na aparatuře SA CRDS. Program má dva výsledky. První je určení koncentrací složek plazmatu v aktivním výboji. Druhý výsledek je teplota elektronů po vypnutí výboje. K vytvoření modelu bylo potřeba určit probíhající interakce a jejich rychlostní koeficienty. V této práci je důležitá metoda chemické kinetiky.

Klíčová slova: plazma, výboj, dohasínající výboj, molekuly, energetické rozdělení, vibrační excitace, rotační excitace

Title: Calculation of the energy of charged and neutral particles in a discharge and in the afterglow

Author: Marek Munzar

Department: Department of Surface and Plasma Science

Supervisor: RNDr. Štěpán Roučka, Ph.D., Department of Surface and Plasma Science

Abstract: The aim of this work was to create a computer model that would simulate the process of the experiment performed on the apparatus SA CRDS. The program has two results. The first is determination of the concentrations of plasma's species in the active discharge. The second result is electron temperature in the afterglow. To create the model we needed to determine ongoing interactions and their rate constants. The method of chemical kinetics is important in this work.

Keywords: plasma, discharge, afterglow, molecules ,energy distribution, vibrational excitation, rotational excitation

Velice děkuji vedoucímu této práce RNDr. Štěpánovi Roučkovi, Ph.D. za uvedení do problematiky a mnoho cenných informací poskytnutých během konzultací. Zároveň děkuji dalším členům KFPP za připomínky, které pomohly zvýšit kvalitu práce. Závěrem děkuji své rodině a blízkým, jejichž podpora mne provází po celou dobu.

Obsah

Úvod	2
1 Plazma	5
1.1 Definice a kritéria plazmatu	5
1.2 Nízkoteplotní plazma	6
1.3 Interakce	7
1.3.1 Veličiny charakterizující srážky	7
1.3.2 Srážky elektronu s neutrálními částicemi	9
1.3.3 Rekombinace	11
1.3.4 Difúze	12
2 Model	14
2.1 Chemická kinetika	14
2.2 Numerické řešení obyčejných diferenciálních rovnic	15
2.3 Popis programu	16
2.3.1 Rozdělovací funkce	17
2.3.2 Koncentrace	17
2.3.3 Teplota	19
3 Aplikace modelu	20
3.1 Experimentální pozadí	20
3.2 Vstupní data	20
3.3 Výpočet rozdělovací funkce	22
3.4 Výpočet v aktivním výboji	24
3.5 Výpočty během chladnutí	29
4 Diskuze	37
5 Závěr	38
Literatura	39
Seznam obrázků	42
Seznam tabulek	43
Přílohy	44

Úvod

V chladném plazmatu mezihvězdného prostoru je významný ion H_3^+ , který má roli nosiče protonů, viz Oka (2013). Jako takový je často zodpovědný za spuštění reakcí, které následně vedou ke vzniku dalších komplexnějších molekul. Bez přítomnosti H_3^+ by takovéto procesy probíhaly značně pomaleji.

Důležitý proces, ke kterému dochází, je elektron-iontová rekombinace. Právě studiem této rekombinace za nízkých teplot se zabývají experimenty laboratoře elementárních procesů Katedry fyziky povrchů a plazmatu. Tyto experimenty jsou prováděny v dohasínajícím výbojovém plazmatu za teplot 40 – 300 K. Plazma používané při těchto měřeních je tvořeno elektrony a ionty H_3^+ , přičemž jako nosný plyn slouží helium s malou příměsí argonu a vodíku. Jelikož jsou však některé reakce prudce závislé na teplotě, je zapotřebí termalizaci plazmatu ověřovat pomocí počítačových modelů. Pro potřeby výpočtů teploty elektronů je využíván jednoduchý spojitý model energetické bilance elektronů, viz Roučka (2012).

V původním modelu je zahrnuto chlazení elektronů elastickými srážkami s neutrálními částicemi, chlazení elastickými i neelastickými srážkami s ionty a rovněž ohřev elektronů procesem srážkové radiativní rekombinace. Symbolicky je možné napsat, že model řeší následující diferenciální rovnice pro časový vývoj vnitřní energie elektronového plynu U :

$$\frac{dU}{dt} = Q_{elastic} + Q_{e-i} + Q_{rot} + Q_{crr} \quad (1)$$

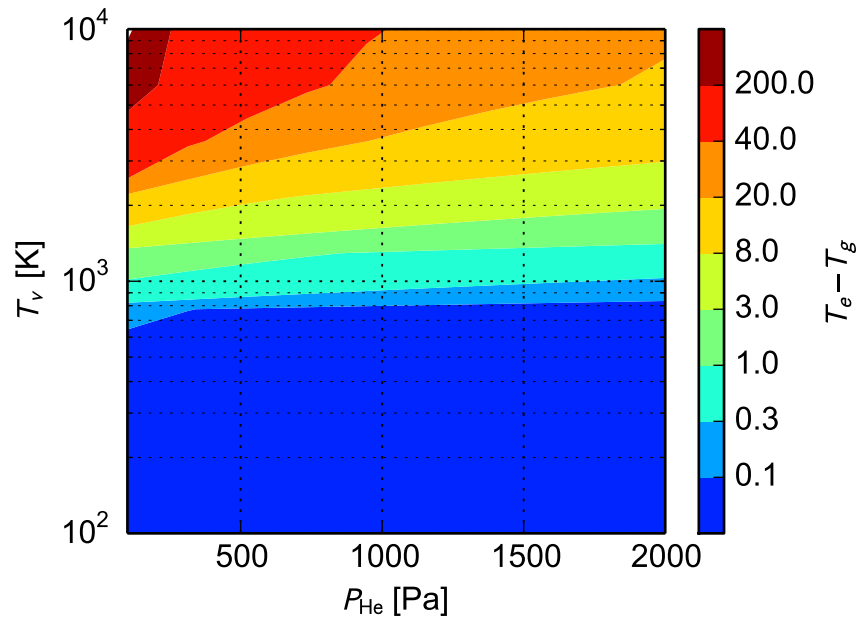
Vysvětlení jednotlivých členů, popis modelu a jeho aplikace v analýze experimentálních dat jsou uvedeny v Roučka (2012).

Tento model byl rozšířen o vlivy srážek elektronů s molekulami vodíku, které byly v původním modelu zanedbány z důvodů nízké koncentrace vodíku. V nových experimentech se ovšem rovněž studuje, jaký vliv může mít vyšší koncentrace H_2 na rekombinaci. Stávající model je mimo jiné i proto rozšířen o srážky elektronů s molekulami vodíku, konkrétně o srážky elastické, neelastické a super-elastické. Poslední zmíněné na rozdíl od předchozích dvou způsobují ohřev, nikoliv chlazení elektronů. Do (1) tak přidáme nové členy reprezentující tyto procesy.

$$\frac{dU}{dt} = Q_{elastic} + Q_{e-i} + Q_{rot} + Q_{crr} + Q_{inelastic} + Q_{super-elastic}. \quad (2)$$

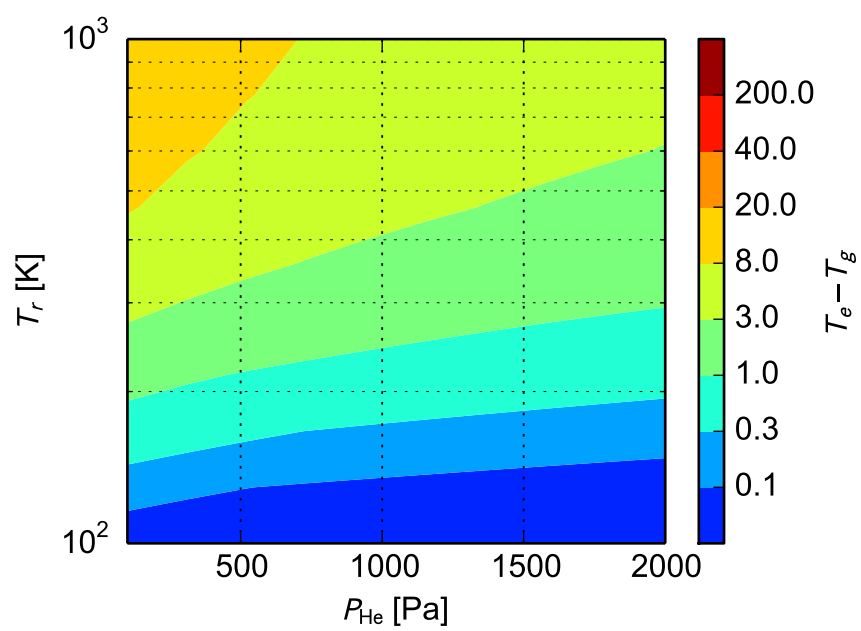
Neelastické a super-elastické srážky jsou v programu uvažovány pro rotační hladiny $J = 0, 1, 2, 3$ a pro vibrační hladiny $v = 0, 1, 2, 3$.

Z výsledků modelu uvažujícího srážky s vodíkem vyplývá, že se molekulární vodík začne výrazně projevovat, změní-li se rotační či vibrační teplota vybuze-
ných molekul uvažovaná v modelu. Graf 1, respektive 2, zobrazují simulaci, jak výsledná teplota elektronů závisí na tlaku a teplotě vibrační se stálou teplotou rotační, respektive rotační se stálou teplotou vibrační. Navíc dle Vankan a kol. (2004) se nezávisle na typu a podmínkách zkoumaného plazmatu objevují molekuly vodíku vybuze-
né do vyšších rotačních hladin, které se neřídí Boltzmanovým rozdělením, které je pro nižší hladiny použito ve stávajícím modelu. Tyto molekuly vybuze-
né do vyšších hladin pak mohou hrát významnou roli při dalším přerozdělování energie. Dle Vankan a kol. (2004) k tomuto dochází především asociativní rekombinací atomárního vodíku na stěnách výbojky.



Obrázek 1: Teplota elektronů jako funkce tlaku helia a vibrační teploty vybuze-
ných molekul vodíku

Je tedy zapotřebí vytvoření nového modelu pro popis vibračních a rotačních populací molekul ve výboji, s čímž souvisí zahrnutí reakcí se stěnami výbojky. Dále pak přesnější identifikace teploty vibračně a rotačně vybuze-
ných molekul. Součástí dalšího postupu bude také identifikace relevantních procesů, které by mohly rovněž vést k redistribuci energie.



Obrázek 2: Teplota elektronů jako funkce tlaku helia a rotační teploty vybuzených molekul vodíku.

1. Plazma

Plazma je termín užívaný ve dvou oborech.¹ Prvním z nich je lékařství, ve kterém jej zavedl v devatenáctém století Jan Evangelista Purkyně pro tekutou složku krve. Dalším je fyzika, kde pojmu plazma použil jako první Irving Langmuir (1928). Langmuir zkoumal ionizovaný plyn za nízkého tlaku. Jako plazma označil tu část objemu, v níž je vyrovnán náboj elektronů a iontů.

Pro snadnější rozeznávání pojmů používá čeština označení *ta* plazma pro složku krve a *to* plazma pro fyzikální plazma, které dle odhadů tvoří až 99% hmoty ve vesmíru. Právě tomuto plazmatu je věnována tato práce.

1.1 Definice a kritéria plazmatu

Definice toho, co je plazma, se od Langmuirova článku vyvinula. V rámci této práce je uvažována formulace dle (Chen, 1984, s. 19):

„Plazma je kvazineutrální plyn nabitých a neutrálních částic, který vykazuje kolektivní chování.“

Nyní je potřeba uvést význam užitých výrazů. Představíme-li si plyn neutrálních částic, pak v něm na sebe částice působí pouze skrze vzájemné srážky. Gravitační síla je zde zanedbatelná a elektromagnetická pole nemají na neutrální částice vliv. Naproti tomu nabitě částice v plazmatu jsou ovlivňovány elektromagnetickými poli. Navíc svým pohybem mohou způsobit vznik lokální koncentrace pozitivního či negativního náboje, čímž samy vytvoří elektrické pole. Takové pole pak ovlivňuje pohyb jiných nabitých částic i na vzdáleném místě. Částice v plazmatu na sebe tedy nepůsobí pouze skrze srážky, ale mohou se ovlivňovat i na větší vzdálenosti. To je významem kolektivního chování.

Kvazineutralitou je myšleno, že množství pozitivního a negativního náboje je přibližně v rovnováze. Je-li n_e koncentrace elektronů a n_i koncentrace kladných iontů, pak kvazineutralita znamená možnost psát $n_e \approx n_i$, což souhlasí s Langmuirovou definicí.

Kvazineutralita souvisí rovněž s procesem stínění, avšak nejprve je třeba vyřešit problém teploty v plazmatu. Je-li plyn v tepelné rovnováze, pak pro rozdělení jeho rychlostí platí Maxwellovo rozdělení. Rozdělovací funkce pro složku rychlosti v_i je tvaru

$$f(v_i)dv_i = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \exp\left(-\frac{mv_i^2}{2k_B T}\right) dv_i, \quad (1.1)$$

přičemž m je hmotnost částice, k_B značí Boltzmannovu konstantu a T je teplota, která zde má roli parametru. Plazma se skládá z různých složek, z nichž každá má svou rozdělovací funkci. Tyto funkce mohou být různé a rozdílné složky plazmatu tak mohou mít různé teploty. Liší-li se teploty jednotlivých složek, označuje se plazma jako neizotermické, jsou-li teploty všech složek shodné, mluví se o izotermickém plazmatu.

¹Plazma je rovněž označení tmavozeleně zbarveného chalcedonu, odrůdy křemene.

Nyní se vrátíme k pojmu stínění. Jde o proces, který se projeví, pokud je do plazmatu vložen elektrický náboj nebo vodič na určitém potenciálu. Do jeho okolí jsou pak přitahovány náboje opačné polarity, zatímco u nábojů se shodnou polaritou dochází k odpuzování. Tímto dochází k odstínění vnořeného elektrického pole. V případě, že by v plazmatu došlo k narušení kvazineutrality, je tato procesem stínění opět nastolena. Dle (Debye a Hückel, 1923) elektrický potenciál náboje klesá v plazmatu exponenciálně a charakteristická vzdálenost poklesu se nazývá *Debyeova vzdálenost*. Platí pro ni vztah

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B}{\sum_i n_i q_i^2 / T_i}}. \quad (1.2)$$

Sčítá se přes všechny nabitě složky plazmatu, q_i je náboj, n_i koncentrace a T_i teplota příslušné složky. V případě, kdy náboj působí pouze krátce, eventuálně se pohybuje, může dojít k situaci, kdy jej ionty, ve srovnání s elektrony hmotnější, s vyšší setrvačností a nižší tepelnou rychlostí, nestihnou „sledovat“. Stínění je pak zajištěno především elektrony a (1.2) se zjednoduší na

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B}{n_e q_e^2 / T_e}}. \quad (1.3)$$

Představuje-li Debyeova vzdálenost λ_D vzdálenost, na níž dochází k odstínění vloženého náboje, pak pro zachování kvazineutrality musí platit, že lineární rozměry plazmatu L jsou značně větší, tedy

$$L \gg \lambda_D. \quad (1.4)$$

Aby však ke stínění mohlo vůbec dojít, musí být ve stínící vrstvě dostatek částic. Označíme-li N_D jako počet částic ve sféře poloměru λ_D , je dalším kritériem

$$N_D \gg 1. \quad (1.5)$$

Posledním požadavkem kladeným na plazma je převaha elektromagnetické interakce nad vlivem srážek s neutrálními částicemi. Je-li ω frekvence typických oscilací plazmatu a τ střední doba mezi srážkami, musí proto platit

$$\omega\tau > 1. \quad (1.6)$$

1.2 Nízkoteplotní plazma

Existuje mnoho různých způsobů dělení plazmatu, obvykle dle oblasti zájmu. Nás bude nejvíce zajímat dělení plazmatu na vysokoteplotní a nízkoteplotní. Pro toto rozdělení není fyzikálními důvody dána přesná hranice, dle konvence se ale používá pojmenování vysokoteplotní pro iontové teploty vyšší než 10^6 K. Takové plazma je nám známo především z niter hvězd a ze snah o ovládnutí fúzní reakce. O plazmatu nízkoteplotním mluvíme při iontových teplotách menších než 10^5 K a má široké technické využití. Jmenovitě jde například o sterilizaci v lékařství, nanášení barev, povrchové úpravy materiálů, v plazmochemii, jako zdroj osvětlení či plazmové obrazovky. Právě nízkoteplotním plazmatem se zabývá tato práce.

V nízkoteplotním plazmatu je dosaženo jen částečné ionizace, což znamená, že je v něm stále nezanedbatelné množství neutrálních částic. Teplota iontů je často shodná či blízká teplotě neutrálních částic, obvykle nepřesahující stovky kelvinů, zatímco elektrony, které jsou lehčí a pohyblivější, dosahují teplot několika desítek tisíc kelvinů. Díky částečné ionizaci nejsou kolize nabitých částic zcela rozhodující, značný vliv mají také srážky s neutrálními částicemi.

1.3 Interakce

V nízkoteplotním plazmatu probíhá množství rozličných interakcí. Mezi nabitými částicemi se jedná především o Coulombické srážky a rekombinaci, pro interakce elektronu s neutrální částicí může jít o srážky elastické, neelastické či super-elastické. Rovněž může docházet k chemickým reakcím a vlivná je difúze, jež vede k interakci se stěnou. Než si blíže projdeme jednotlivé procesy, podíváme se jak charakterizovat srážky.

1.3.1 Veličiny charakterizující srážky

Při vyšetřování srážek vyjdeme z jednoduchého případu. Předpokládáme jeden typ částic představujících nehybné terče a druhý typ na ně nalétávajících ve vzájemně rovnoběžném svazku. Pak pravděpodobnost interakce charakterizujeme veličinou zvanou účinný průřez, značený σ . Zavedeme jej jako počet interakcí ku toku nalétávajících částic. Zavedením diferenciálního účinného průřezu $d\sigma$ je možné sledovat pravděpodobnost odražení částice do určitého místa v prostoru. Účinný průřez pak určíme integrací diferenciálního přes celý prostorový úhel Ω , tedy

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (1.7)$$

Vyřešíme zde blíže jednoduchý případ pružné srážky dvou ideálně tuhých koulí. Geometrickou představu lze získat z obrázku 1.1. Nechť částice představující terč má poloměr R a nalétávající částice má poloměr r . Vertikální vzdálenost jejich středů označíme b a nazveme impaktní parametr. Diferenciální účinný průřez je pak závislý na velikosti b . Můžeme psát

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi b db}{2\pi \sin\theta d\theta}, \quad (1.8)$$

přičemž nás zajímá velikost a výraz můžeme dát do absolutní hodnoty. Ve chvíli srážky označíme α úhel dopadu, který je roven úhlu odrazu. Doplněk do úhlu velikosti π v původním směru pohybu částice je θ . Platí tedy

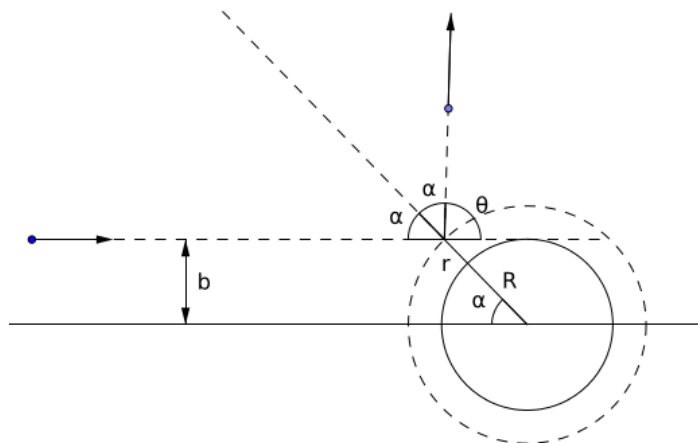
$$2\alpha + \theta = \pi. \quad (1.9)$$

Pro impaktní parametr platí

$$b = (R + r) \sin\alpha. \quad (1.10)$$

Kombinací (1.9) s (1.10) a následným dosazením do (1.8) dostaneme

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(R + r)^2}{4}. \quad (1.11)$$



Obrázek 1.1: Ilustrace pro odvození účinného průřezu.

Nyní je možné z (1.7) určit účinný průřez pro srážku dvou tuhých koulí jako

$$\sigma = \pi (R + r)^2. \quad (1.12)$$

Obecněji bude účinný průřez nabývat statistického významu a bude závislý na vzájemné rychlosti srážejících se částic. Pro další výpočty tak bude důležitá znalost rychlostí rozdělovací funkce. Pro plyn v tepelné rovnováze platí Maxwellovo rozdělení, viz. (1.1). Obecně však může mít rozdělovací funkce jinou podobu, může se vyvíjet v čase a být funkcí prostorových souřadnic, tedy $f = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$. Časový vývoj rozdělovací funkce je dán srážkami částic. Rozepsáním derivace této funkce podle času tak dostaneme

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_s, \quad (1.13)$$

kde levá strana rovnice představuje změnu f v důsledku srážek. Tato rovnice se nazývá Boltzmannova a má mnoho dalších podob, které využívají různých zjednodušení.

Pro určení vzdálenosti, kterou může částice urazit aniž se srazí, se užívá střední volné dráhy:

$$\lambda = \frac{1}{n\sigma(v)}, \quad (1.14)$$

přičemž n je koncentrace částic, s nimiž se může srazit. Střední doba mezi srážkami pro částice pohybující se rychlostí v je dána výrazem

$$\tau = \frac{1}{\nu}, \quad (1.15)$$

kde ν je střední srážková frekvence, pro niž platí vztah

$$\nu = n\langle\sigma(v)v\rangle. \quad (1.16)$$

Zde $\langle \rangle$ značí střední hodnotu. Veličina popisující, jak často srážka (reakce) probíhá, se nazývá rychlostní koeficient. Budeme jej značit k a platí pro něj vztah

$$k = \langle\sigma(v)v\rangle. \quad (1.17)$$

Každou interakci můžeme zapisovat ve tvaru chemických reakcí jako



eventuálně jako



kde k je rychlostní koeficient dané reakce.

1.3.2 Srážky elektronu s neutrálními částicemi

Srazí-li se elektron s neutrální částicí (atomem či molekulou), může jít o srážku elastickou, neelastickou nebo super-elastickou. V každém z těchto případů dochází k předání jisté energie mezi elektronem a neutrální částicí. Tok energie označíme Q a vyjádříme jej charakteristickým časem pro přenos energie ε_τ , který je definován vztahem

$$Q = \frac{\Delta\mathcal{E}}{\varepsilon_\tau}, \quad (1.20)$$

kde $\Delta\mathcal{E}$ je změna energie elektronu.

Elastické srážky

V případě elastických srážek platí zákony zachování hybnosti i kinetické energie. Rovnice (1.20) přechází dle (Roučka, 2012) do tvaru

$$Q = \frac{3}{2}k_B \frac{T - T_e}{\varepsilon_\tau}, \quad (1.21)$$

kde T je teplota neutrální částice a T_e je teplota elektronů. Pro elastické srážky lze vyjádřit teplotní relaxační čas jako součin středního času mezi srážkami a zlomku střední elektronové energie ztracené srážkou, kterou můžeme při zanedbání pohybu neutrálních částic vyjádřit jako $\Delta E = 2Em_e/m_g$, přičemž m_e je hmotnost elektronu a m_g hmotnost neutrální částice. Teplotní relaxační čas můžeme tedy vyjádřit následovně

$$\varepsilon_\tau = \tau E / \Delta E = \frac{m_g}{2m_e} \frac{1}{nk}. \quad (1.22)$$

Zde n je koncentrace neutrálních částic a k rychlostní koeficient srážky. Dosazením (1.22) do (1.21) dostáváme tok energie pro elastické srážky elektronu s neutrální částicí.

Neelastické srážky

Při neelastických srážkách může docházet k excitaci, ionizaci či dokonce disociaci. Při excitaci elektron předává část své energie neutrální částici, čímž jí vybudí, excituje. Jde-li o srážku s atomem, jedná se o elektronickou excitaci, kdy je elektron atomu vybuděn na vyšší energetickou hladinu. U srážek s molekulou může navíc docházet k excitaci rotační či vibrační.

Použijeme označení i a j pro dva různé kvantové stavy. Účinný průřez pro srážky, kdy částice přechází z energetické hladiny i na energetickou hladinu j ,

označíme σ_{ij} . Charakteristický čas přenosu energie pak zapíšeme dle (Spitzer, 2004) jako

$$\varepsilon_\tau = \tau = \frac{1}{n_i \langle \sigma_{ij}(v)v \rangle}, \quad (1.23)$$

přičemž n_i značí koncentraci částic s energetickou hladinou i . Obdobně jako σ_{ij} budeme značit rychlostní koeficient přechodu mezi hladinami i a j jako k_{ij} . Změna energie $\Delta\mathcal{E}$ je nyní dána rozdílem energie nové a původní hladiny. V případě rotačních hladin přibližně platí

$$E_{rot} = \frac{J(J+1)\hbar}{2MR_e^2}, \quad (1.24)$$

kde M je redukovaná hmotnost molekuly, R_e je meziatomová vzdálenost, J označuje energetickou hladinu a \hbar je redukovaná Planckova konstanta.

Pro energie vibračních hladin platí přibližně vztah

$$E_{vib} = \left(v + \frac{1}{2}\right) \omega_e. \quad (1.25)$$

V uvedeném vztahu v představuje vibrační energetickou hladinu a ω_e je vibrační konstanta příslušející dané částici.

Pro přesnější určení rotačních a vibračních dvouatomových molekul se používají korekce vyšších řádů, jež jsou tabelovány například v (Huber a Herzberg, 1979).

Ionizace je proces, kdy volný elektron předá jednomu z elektronů neutrální částice dostatek energie, aby mohl opustit elektronový obal. Část kinetické energie se přemění v energii potenciální a zbylá se rozdělí mezi dva volné elektrony. Ionizace může rovněž probíhat srážkou elektronu s excitovanou částicí, kdy již k uvolnění elektronu stačí menší množství energie.

Disociace je proces, při kterém dojde v důsledku srážky k přerušení vazeb mezi atomy molekuly a ta se štěpí na menší části.

Super-elastické srážky

Super-elastické srážky jsou zde chápány jako srážky elektronu s excitovanou částicí, při kterých dochází k ohřívání elektronu a deexcitaci částice. Charakteristický čas přenosu energie lze určit obdobně jako v případě srážek neelastických, ovšem místo účinných průřezů σ_{ij} je třeba uvažovat σ_{ji} a jim odpovídající rychlostní koeficienty k_{ji} . Uvažujeme přitom, že $i < j$. Ne vždy jsou však tyto účinné průřezy známy a rychlostní koeficient je třeba určit jinak. Jsou-li známa data pro přechod z hladiny i na hladinu j , pak lze vycházet z principu detailní rovnováhy, viz Spitzer (2004). Ten říká, že v případě termodynamické rovnováhy musí platit rovnost jistého procesu r a procesu k němu inverznímu r' . Pro dva energetické stavy, které přecházejí jeden v druhý, z nichž jeden označíme A a druhý B, pak musí platit

$$k_{ij}[e^-][A] = k_{ji}[e^-][B], \quad (1.26)$$

kde $[]$ značí koncentrace částic v daném stavu. Pro rotační hladiny odtud v případě tepelné rovnováhy vyplývá vztah

$$\frac{[A]}{[B]} = \frac{(2J_A + 1) \exp\{-E_A/k_B T\}}{(2J_B + 1) \exp\{-E_B/k_B T\}} = \frac{(2J_A + 1)}{(2J_B + 1)} \exp\left(\frac{E_B - E_A}{k_B T}\right) = \frac{k_{ji}}{k_{ij}}. \quad (1.27)$$

Rychlostní koeficient pro deexcitaci super-elastickými srážkami vyjádříme jako

$$k_{ji} = k_{ij} \frac{(2J_A + 1)}{(2J_B + 1)} \exp\left(\frac{E_B - E_A}{k_B T}\right). \quad (1.28)$$

V případě vibračních hladin platí o něco jednodušší formule

$$k_{ji} = k_{ij} \exp\left(\frac{E_B - E_A}{k_B T}\right). \quad (1.29)$$

1.3.3 Rekombinace

Rekombinace v plazmatu způsobuje úbytek nabitých částic. Mohou se jí účastnit elektron s iontem, eventuálně dva opačně nabité ionty. Dle zákonů zachování energie a hybnosti se vzniklá neutrální částice musí zbavit nadbytečné energie. K tomu může v případě srážky dvou částic docházet například vnitřní excitací



či vyzářením fotonu (radiativní rekombinace)



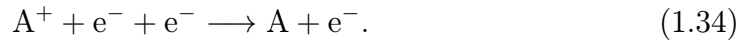
kde ω je frekvence vyzářeného fotonu. Mluvíme přitom o binární rekombinaci. Rekombinuje-li molekulární iont, je nejpravděpodobnější disociace na neutrální fragmenty, tedy



Ternární rekombinace pak znamená, že se srážky účastní ještě třetí částice, která nadbytečnou energii odnáší:



Třetí částicí, která odnáší přebytečnou energii, může být rovněž další elektron



V tom případě mluvíme o srážkové radiativní rekombinaci (CRR - Collisional-Radiative-Recombination).

Stevelfelt a kol. (1975) provedli kvantově mechanické výpočty, které ukazují, že srážkově radiativní rekombinaci s rychlostním koeficientem K_{CRR} je možné uvažovat jako



kde pro rychlostní koeficient α_{CRR} platí vztah

$$\alpha_{CRR} = 3,8 \cdot 10^{-9} T_e^{-4,5} n_e + 1,55 \cdot 10^{-10} T_e^{-0,63} + 6 \cdot 10^{-9} T_e^{-2,18} n_e^{0,37} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}. \quad (1.36)$$

Zde T_e je teplota elektronů zadána v kelvinech, n_e je koncentrace elektronů v cm^{-3} . Jednotlivé členy ve vyjádření α_{CRR} popořadě popisují:

1. srážkovou rekombinaci,
2. radiativní rekombinaci,
3. opravu související se vzájemným ovlivňováním srážkových a radiativních procesů.

Stevelfeltova formule je dobře platná pro atomové a ionty některé jednoduché molekuly.

1.3.4 Difúze

Difúze v plazmatu může způsobit tok neutrálních částic na stěnu a tam jejich následnou asociaci. V případě nabitých částic tam může docházet k rekombinaci, tedy zániku nabitých částic a odvodu energie. Začneme jednodušším případem, difúzí neutrálních částic.

Pro neutrální částice můžeme difúzi popsat rovnicí

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\Delta n. \quad (1.37)$$

D představuje koeficient difúze, pro nějž platí

$$D = \frac{k_B T}{m\nu}, \quad (1.38)$$

kde ν představuje srážkovou frekvenci.

Rovnici (1.37) lze řešit separací proměnných. Prostorová část má řešení v podobě množiny vlastních funkcí zvaných difúzní módy, pro které platí

$$\Delta n_j = -\frac{n_j}{\Lambda_j^2}, \quad (1.39)$$

přičemž $-1/\Lambda_j^2$ je vlastním číslem a Λ_j nazývá se difúzní délka, které odpovídá modu n_j . Je vidět, že časová závislost je exponenciální. Řešení tak nalzáme ve tvaru

$$n(\mathbf{x}, t) = n_j(\mathbf{x}) \exp(-Dt/\Lambda_j^2). \quad (1.40)$$

Funkce n_j tvoří ortogonální systém. Řešení pro libovolnou okrajovou podmínku tak lze rozepsat do řady, která bude obsahovat členy typu (1.40). Zbývá určit okrajovou podmínku pro konkrétní fyzikální problém a najít řešení difúzní rovnice. V této práci budeme uvažovat válcovou výbojovou trubici o výšce h_0 a poloměru podstavy r_0 . Za okrajovou podmínku zvolíme nulovou koncentraci částic na stěnách aparatury. Tato podmínka nebude nikde přesně splněna, je však slušnou aproximací pro krátké volné dráhy částic a vysokého absorpčního koeficientu stěn. Kombinací předchozího tak dostáváme ve válcových souřadnicích

$$n_0 = n_0(0,0) \cos\left(\frac{\pi z}{h_0}\right) J_0\left(\frac{2,405r}{r_0}\right), \quad (1.41)$$

kde J_0 je Besselova funkce nultého řádu a je uvažován jen nejnižší difúzní mod. Umístíme-li počátek souřadné soustavy do středu válce, je difúzní délka řešení

$$\frac{1}{\Lambda_0^2} = \left(\frac{\pi}{h_0}\right)^2 + \left(\frac{2,405}{r_0}\right)^2. \quad (1.42)$$

Dosazení řešení do difúzní rovnice vede na

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{D}{\Lambda_0^2} n. \quad (1.43)$$

Člen na pravé straně rovnice má význam úbytku částic v důsledku difúze. Z hlediska chemické kinetiky (viz níže) se formálně shoduje se členem úbytku rovnice prvního řádu s rychlostním koeficientem D/Λ_0^2 , tedy můžeme formálně psát

$$k_{difuze} = \frac{D}{\Lambda_0^2}. \quad (1.44)$$

Případ, kdy difundují nabité částice, je situace složitější. Mimo koeficientu difúze potřebujeme rovněž takzvanou pohyblivost μ . Ta je dána vztahem

$$\mu = \frac{|q|}{m\nu}, \quad (1.45)$$

kde q je elementární náboj. Elektrony i ionty mají své koeficienty difúze a pohyblivosti, které budeme rozlišovat indexy e pro elektrony a i pro ionty. Uvážení elektrického náboje a pole, které vytvářejí, vede k zavedení koeficientu ambipolární difúze

$$D_a = \frac{\mu_i D_e + \mu_e D_i}{\mu_i + \mu_e}. \quad (1.46)$$

Jelikož srážková frekvence je úměrná tepelné rychlosti, která je úměrná $m^{-1/2}$, dostáváme, že i pohyblivost je úměrná $m^{-1/2}$. Protože elektron je řádově lehčí než ionty, můžeme psát $\mu_e \gg \mu_i$. Za tohoto předpokladu můžeme koeficient ambipolární difúze přepsat následovně

$$D_a \approx D_i + \frac{\mu_i}{\mu_e} D_e. \quad (1.47)$$

Tento výraz s uvážením Einsteinova vztahu $\mu = |q| D/k_B T$ upravíme na tvar

$$D_a \approx \left(1 + \frac{T_e}{T_i}\right) D_i. \quad (1.48)$$

Nyní můžeme v rovnici (1.37) místo D použít D_a a další postup je totožný s předchozím.

2. Model

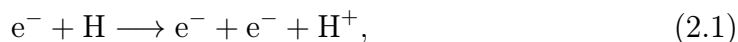
Ve fyzice plazmatu se při modelování dle potřeby využívají rozdílné přístupy a sice modely částicové a spojité. Částicové modely sledují každou částici zvlášť. Při vhodných vstupních datech se jedná o velmi přesnou metodu. Sledování každé jednotlivé částice však klade obrovské nároky na paměť a čas výpočtu. Dále se tedy používají modely spojité, které uvažují jednotlivé složky jako kapaliny, spojitá prostředí, která se vyvíjejí jako celek. Obvykle se jedná o kapaliny elektronů, iontů a v případě potřeby neutrálů, které se vzájemně prolínají. Výhodou spojitých modelů jsou především nižší nároky na paměť a rychlejší výpočet. Jsou ovšem také méně přesné a některé jevy nejsou schopné zahrnout. Osvojil se proto přístup hybridního modelování, které kombinuje přístup obou předchozích. Tam, kde je třeba vyšší přesnosti, se volí částicový přístup, jinak využívá spojitého modelu pro úsporu času.

V modelu, kterým se zabývá tato práce, nám nejde tolik o chování jednotlivých částic, ba dokonce ani o chování složek plazmatu. Zajímají nás celkové koncentrace jednotlivých složek, jejich vývoj a teplota. Volíme tedy spíše statistický přístup a využíváme chemické kinetiky, jež bude popsána níže.

2.1 Chemická kinetika

V modelu chemické kinetiky pohlížíme na probíhající interakce jako na chemické reakce. Každá taková reakce ovlivňuje koncentrace jednotlivých složek plazmatu v závislosti na koncentraci částic účastnících se reakce a na rychlostním koeficientu dané reakce. Chemické reakce reprezentujeme obyčejnou diferenciální rovnicí, viz následující příklad.

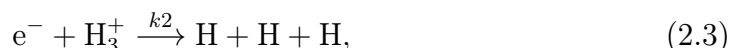
Mějme reakci



jejíž rychlostní koeficient je k_1 . Ionizací atomárního vodíku se zvýší koncentrace elektronů a kladných vodíkových iontů, zatímco koncentrace neutrálního atomárního vodíku poklesne. Pro všechny tři zmíněné typy částic tak sestavíme diferenciální rovnici. Příspěvek od uvedené reakce bude ve všech rovnicích stejný, lišit se bude pouze znaménkem podle toho, zda částice vzniká, nebo zaniká. Konkrétně například pro koncentraci elektronů bude mít rovnice následující tvar

$$\frac{d[e^-]}{dt} = k_1[e^-][H]. \quad (2.2)$$

Zde $[A]$ značí koncentraci částice A . Za každou další uváženou reakci přibude v rovnici další člen. Budeme-li tak uvažovat následující rekombinaci



dostaneme pro složky e^- , H , H^+ , H_3^+ následující soustavu diferenciálních rovnic:

$$\begin{aligned}\frac{d[e^-]}{dt} &= k_1[e^-][H] - k_2[e^-][H_3^+], \\ \frac{d[H]}{dt} &= -k_1[e^-][H] + 3k_2[e^-][H_3^+], \\ \frac{d[H^+]}{dt} &= k_1[e^-][H], \\ \frac{d[H_3^+]}{dt} &= -k_2[e^-][H_3^+].\end{aligned}$$

Číslo násobící příspěvek určité reakce pro daný druh částic lze chápat jako násobnost a je určeno rozdílem počtu vzniklého počtu částic daného druhu na pravé straně chemické rovnice a počtu částic daného druhu účastnících se reakce. V druhé reakci vznikají tři atomy $[H]$ a srážky se neúčastní žádný, proto je v diferenciální rovnici násobeno číslem tři. Obecněji můžeme pro každou reakci i zavést veličinu r_i charakterizující její příspěvek

$$r_i = k_i \prod_{\text{reaktanty}} [X_j], \quad (2.4)$$

kde X_j představuje koncentrace částic účastnících se reakce. Označíme-li dále násobnost reakce i pro prvek X_α jako $N_{i\alpha}$, můžeme příslušnou diferenciální rovnici jednoduše zapsat jako

$$\frac{d[X_\alpha]}{dt} = \sum_i N_{i\alpha} r_i. \quad (2.5)$$

V chemicky aktivním plazmatu bude probíhat mnoho nejrůznějších reakcí. Rovněž počet různých druhů složek může být vysoký. Dostaneme tak soustavu nelineárních rovnic, které můžeme řešit pouze numericky.

2.2 Numerické řešení obyčejných diferenciálních rovnic

Často se stává, že rovnice, či jejich soustava, nemá analytické řešení a jedinou možností je hledat řešení numerické. Nejjednodušší metodou pro řešení diferenciálních rovnic je pak Eulerova metoda. Mějme soustavu rovnic

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(\mathbf{y}). \quad (2.6)$$

Její přibližné řešení dostaneme při zadání počáteční podmínky \mathbf{y}_0 užitím rekurentního vztahu

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{y}_n), \quad (2.7)$$

kde h je délka integračního kroku. Uvedená metoda je explicitní Eulerova metoda, tedy nová hodnota \mathbf{y}_{n+1} je vyjádřena explicitně. Jedná se o metodu prvního řádu přesnosti. Není proto příliš spolehlivá, při hledání řešení potřebuje velmi malý krok h , jinak se od přesného řešení rychle odchýlí, není stabilní. V praxi se obvykle nevyužívá pro hledání řešení, nachází však slušné uplatnění u takzvaných

vícekových metod, které potřebují jednu či více počátečních hodnot navíc. Z explicitních schémat je více užívaná metoda Runge-Kutty, zvláště čtvrtého řádu.

V případě řešení soustavy rovnic, z nichž se každá vyvíjí jinou rychlostí, je u explicitních metod dán časový krok nejrychleji probíhajícím dějem, aby bylo možné uchovat stabilitu. Jsou-li rozdíly v rychlostech vývoje velmi výrazné, mluvíme o „stiff“-problému, o soustavě s velkou tuhostí, a udržení požadované velikosti kroku je velmi omezujícím požadavkem. V takovém případě je lepší užití implicitních metod. Eulerova metoda v implicitním tvaru bude zapsána následovně:

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{y}_{n+1}). \quad (2.8)$$

Implicitní metody mají tu výhodu, že jsou nepodmíněně stabilní pro lineární diferenciální rovnice a i v případě nelineárních problémů dávají dobré výsledky. Nevýhodou je, že v každém kroku je pro určení \mathbf{y}_{n+1} nutné řešit celou soustavu nelineárních rovnic.

Uvážíme-li však, že změna \mathbf{y} je v každém kroku malá, můžeme funkci \mathbf{f} v bodě \mathbf{y}_n rozvinout řadu a následně linearizovat. Tím dostaneme vyjádření

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \left(\mathbf{1} - h \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right)^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{y}_n), \quad (2.9)$$

které nazýváme semi-implicitní Eulerova metoda. Parciální derivace představuje jakobián.

Pro praktické výpočty komplikovanějších problémů je výhodné používat proměnný časový krok. Toho lze dosáhnout tím, že v každém kroku se provádí výpočet danou metodou a současně metodou o řád přesnější. Následně dojde k porovnání obou výsledků. Pokud je jejich rozdíl větší než daná tolerance, dojde ke zmenšení kroku a celý proces se opakuje, dokud není dosaženo patřičné shody. Tím je možné podrobněji sledovat oblasti, kde dochází k prudkým změnám, a naopak v oblastech, kde je vývoj klidný, ušetřit výpočetní čas prodloužením kroku. Další možností ve snaze o dosažení přesnějšího řešení, je použití vícekové metody. Uvedená Eulerova i zmíněná Runge-Kuttova metoda, jsou jednokrokové, k vyjádření nové hodnoty \mathbf{y}_{n+1} využívají pouze jednu předchozí hodnotu \mathbf{y}_n . Je-li metoda m -kroková, využívá předchozí hodnoty $\mathbf{y}_n, \dots, \mathbf{y}_{n-m+1}$. Příkladem je „zpětná diferenciální formule“ (backward differentiation formula - BDF), které je v této práci užíváno.

2.3 Popis programu

Jak již bylo řečeno, smyslem programu je určení vývoje koncentrací jednotlivých složek plazmatu a teploty. Jedná se o jednoduchý skript psaný v jazyce python. Využívá přitom knihoven numpy a scipy, které jsou vytvářeny pro nasazení ve vědeckých výpočtech. Knihovny numpy je využito především pro počítání s poli, která umí snadno uchopit jako vektory, či obecněji matice, se kterými dovede efektivně počítat. K tomu patří i jakési rozšíření běžně užívaných funkcí, které tak mohou počítat s celým tímto polem. Z knihovny scipy je využito zavedení řídkých matic, řešení diferenciálních rovnic a interpolace dat.

2.3.1 Rozdělovací funkce

Pro následující výpočty je důležitá znalost energetické rozdělovací funkce pro elektrony. V rámci modelu jsou uvažovány dvě možnosti. První z nich využívá v celém průběhu výpočtu Maxwellovo rozdělení, tedy

$$f(E)dE = \frac{2\pi\sqrt{E}}{(\pi k_B T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE. \quad (2.10)$$

Další možností je řešit Boltzmannovu rovnici (1.13). Tento postup vyžaduje znalost působící síly, která je zde dána elektrickým polem, a určení srážkových procesů, které budou zahrnuty ve srážkovém členu. K řešení Boltzmannovy rovnice je využit program ELENDIF (Morgan a Penetrante, 1990), jehož název je odvozen z anglického *electron energy distribution function*.

2.3.2 Koncentrace

Výpočet koncentrací vychází z rovnic chemické kinetiky popsané výše. Běh skriptu se dá stručně popsat několika kroky:

1. načtení vstupních dat,
2. sestavení diferenciálních rovnic,
3. řešení diferenciálních rovnic.

Načtení vstupních dat

Vstupní data zde představují jednak částice, které v modelu uvažujeme, jejich počáteční koncentrace a případně data potřebná pro další výpočty (atomová hmotnost, atomový poloměr), dále uvažované reakce probíhající v plazmatu s jejich rychlostními koeficienty. Tato data jsou uložena v samostatných souborech.

Soubor obsahující reakce je na začátku výpočtů vygenerován odděleným skriptem na základě souboru obsahující příslušná data. Ta představují pro každou reakci sadu účinných průřezů, nebo fitovací funkce, eventuálně přímo rychlostní koeficient. Jsou-li k dispozici účinné průřezy, je rychlostní koeficient spočítán dle (1.17) s jedním rozdílem. Není zde uvažován nehybný terč tvořený částicemi jednoho druhu. Namísto toho hledáme pravděpodobnost srážky dvou (eventuálně více) částic. Střední hodnota je určena integrálem

$$\langle \sigma(v)v \rangle = \int \sigma(v)v f(v) dv, \quad (2.11)$$

který je počítán numericky užitím lichoběžníkového pravidla. Rozdělovací funkci je možné načíst ze souboru, jinak je použita Maxwellova.

Fitovací funkce dávají jako výsledek rychlostní koeficient pro maxwellovské rozdělení. Je jich užito v případě, kdy nejsou k dispozici vhodné účinné průřezy. Přímo rychlostní koeficienty jsou určeny pro reakce, u nichž se v průběhu celého modelu uvažují konstantní hodnoty. Některé reakce jsou navíc popsány jistým klíčovým slovem, kterého je později v modelu užito. Jedná se především o reakce, jejichž průběh závisí na koncentraci a je třeba je často aktualizovat. Konkrétně je

to rekombinace atomárních iontů popsaná Stevefeltovou formulí (1.36) a normální i ambipolární difúze. Své označení mají rovněž elastické srážky s elektrony.

Počáteční koncentrace jsou uloženy do vektoru \mathbf{n} . Jednotlivé druhy částic mají přiřazený index dle pořadí, v němž byly načteny ze souboru obsahující vstupní koncentrace. Při načítání reakcí dochází k vytvoření dvou matic. První pojmenujeme matice reaktantů a označíme \mathbf{R} , druhá bude maticí produktů s označením \mathbf{P} . Jejich rozměry jsou: počet reakcí \times počet složek plazmatu. Jak již názvy matic napovídají, \mathbf{R} představuje levou část chemických rovnic, tedy částice, které se účastní reakcí, zatímco \mathbf{P} zastupuje produkty těchto reakcí. Například na pozici R_{ij} tak bude počet částic oindexovaných j účastnících se i -té reakce, nejčastěji jedna. Pokud se srážky daná částice neúčastní, bude tento prvek nula.

Jelikož uvažovaných složek plazmatu může být mnoho, čemuž odpovídá množství nejrůznějších reakcí, bude mnoho prvků matic nulových, tedy může být výhodné uchovávat tyto matice jako řídké, čehož bude později využito pro výpočet.

Nakonec zavedeme ještě jednu matici a to matici změn \mathbf{Z} , danou vztahem

$$\mathbf{Z} = \mathbf{P} - \mathbf{R}. \quad (2.12)$$

Význam matice je zřejmý, charakterizuje pro každou reakci vznik či zánik částic daného typu. Vyjadřuje tak násobnost ve smyslu, jak je zmíněna výše v odstavci pojednávajícím o rovnicích chemické kinetiky.

Sestavení diferenciálních rovnic

Sestavení diferenciálních rovnic je provedeno pro každou reakci ve smyslu rovnice (2.5). Pro i -tou reakci je tedy zapotřebí násobit rychlostní koeficient k_i s koncentracemi částic účastnících se reakce. V případě, kdy se srážky účastní více částic stejného druhu, příslušnou mocninou dané koncentrace. Je-li R_{ij} nenulové, chceme pro j -tý prvek vektoru koncentrací \mathbf{n} spočítat

$$n_j^{R_{ij}}.$$

To je nezbytné spočítat pro všechna nenulová R_{ij} a na závěr všechna tato čísla vzájemně vynásobit. Pro i -tou reakci tedy vlastně požadujeme určit

$$\prod_{j, R_{ij} \neq 0} n_j^{R_{ij}}.$$

Možnost využití maticových výpočtů knihovny numpy a vyhnutí se tak vnořeným cyklům zpomalujících výpočet je možné použitím vlastností funkce logaritmu a jeho implementaci v numpy. Tato implementace je důležitá v případě, kdy jsou některé koncentrace nulové. Logaritmus z numpy v takovém případě počítá limitu a vrací mínus nekonečno. Toho se zbavíme následným použitím exponenciály podobných vlastností, která pro mínus nekonečno vrací nulu. Abychom se vyhnuli potížím s nultými mocninami, uchováваме matici reakcí \mathbf{R} pomocí knihovny scipy.sparse jako řídkou. Tím jsou z výpočtu zcela vynechány částice, které se neúčastní dané reakce.

Výsledkem naznačeného výpočtu je vektor, jenž zbývá vynásobit s vektorem rychlostních koeficientů k . Potřebujeme však násobit jednotlivé členy, tedy jeden z vektorů transponovat a následně mezi jejich součin vložit jednotkovou matici. To

je díky numpy možné pomocí takzvaného *element wise* násobení. Posledním krokem je násobit výsledný vektor zleva transponovanou maticí \mathbf{Z} , čímž dostaneme vektor, jehož j -tý prvek odpovídá časové derivaci j -tého typu částic. Sestavení soustavy diferenciálních rovnic je tak možné vyjádřit zápisem

$$\frac{d\mathbf{n}}{dt} = \mathbf{Z}^T \cdot (\mathbf{k}^T \cdot \mathbf{E} \cdot \exp(\mathbf{R} \cdot \log(\mathbf{n}))), \quad (2.13)$$

v němž \mathbf{E} je jednotková matice. Zápis je však nutné chápat pouze symbolicky.

Řešení soustavy diferenciálních rovnic

Řešení soustavy (2.13) probíhá za použití numerického řešiče *lsoda* obsaženého v knihovně *scipy*. Pro stiff-problémy využívá metodu BDF, tedy metodu víceřadkovou, s proměnným časovým krokem.

2.3.3 Teplota

Tato práce předpokládá nízkoteplotní neizotermické plazma s elektronovou teplotou T_e a teplotou T_g , která je shodná pro ionty a neutrální částice. T_g pokládáme za neměnnou, zatímco u T_e očekáváme možnost změny. Při vyšetřování této teploty vycházíme z rovnice (2) zmíněné v úvodu, která vychází z práce (Roučka, 2012). Vztah je užíván v následující podobě:

$$\frac{dU}{dt} = Q_{elastic} + Q_{coulombic} + Q_{vib}. \quad (2.14)$$

Členy pravé strany rovnice popořadě vyjadřují chlazení elastickými srážkami s neutrály, chlazení coulombickými srážkami s kladnými ionty a chlazení i ohřev srážkami s vibračně vybuzenými molekulami vodíku. Efekt coulombických srážek je započítán dle (Roučka, 2012).

Jelikož účinné průřezy, a s nimi rovněž rychlostní koeficienty, jsou skrze tepelný pohyb závislé na teplotě, jsou na ní silně závislé veškeré srážkové procesy s elektrony. To znamená, že i vývoj koncentrací je velmi úzce provázán se změnou elektronové teploty. Rovnice (2.14) je proto přidána k soustavě (2.13) a vývoj teploty i koncentrací je sledován současně.

3. Aplikace modelu

V této kapitole se podíváme na výsledky aplikace modelu na konkrétní fyzikální problém. Simulace se bude sestávat ze dvou částí. První je simulace zapnutého výboje, kde nám půjde o určení koncentrací jednotlivých složek plazmatu poté, co dosáhne rovnováhy. V druhé části dojde k vypnutí výboje, čímž se přeruší dodávání energie a začne chladnutí elektronů. V této fázi je hlavní oblastí zájmu určit rychlost chladnutí a najít teplotu, na níž se elektrony ustálí. Před tím, než se pustíme do rozboru výsledků, se podíváme na výsledky experimentů.

3.1 Experimentální pozadí

Jak již bylo zmíněno, na KFPP probíhají experimenty zkoumající rekombinaci iontů. Nám se konkrétně jedná o rekombinaci iontu H_3^+ studovanou na aparatuře SA-CRDS (Stationary Afterglow Cavity Ring-Down Spectroscopy), jejíž schematické znázornění je na obrázku (3.1). Jde o výbojku ponořenou v lázni z kapalného dusíku a obklopenou mikrovlnným rezonátorem, která umožňuje zapálení mikrovlnného výboje při teplotě 77 K. Ta je umístěna mezi zrcadly cavity ring down spektrometru. Velmi zjednodušeně se principiálně jedná o dutinu vytvořenou dvěma za sebou postavenými vysoce odrazivými zrcadly, kde na první z nich dopadá laserový paprsek. Část světla, která projde do dutiny, se následně odráží v jejím vnitřku a je pohlcována jeho prostředím, přičemž část projde ven druhým zrcadlem, kde dochází k detekci. Množství detekovaného světla se odvíjí od toho, kolik jej bylo absorbováno v dutině, což se odvíjí od množství absorpční látky. Tím je možno detekovat koncentraci látky absorbující světlo dané vlnové délky použitého laseru. Podrobný popis aparatury je možné nalézt v (Dohnal, 2013). Schéma aparatury lze nahlédnout pod obrázkem (3.1).

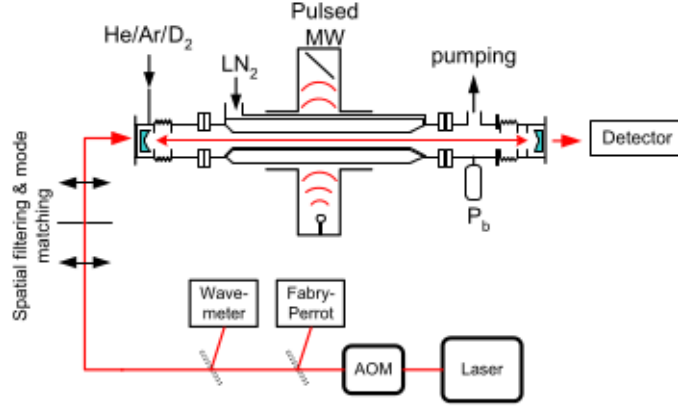
Jedním ze zkoumaných způsobů rekombinace iontu H_3^+ je CRR. Ta by se dle teoretických předpovědí a odhadů daných Stevefeltovou formulí měla začít výrazněji projevovat při velmi nízkých teplotách. Dle (Dohnal a kol., 2012) však nebyl žádný výraznější projev CRR zaznamenán.

Jedním z důvodů, proč by tomu tak mohlo být, je značná závislost na elektronové teplotě. Teplota uvažovaná v odhadu, shodná s teplotou neutrálních částic, je 77 K, avšak již při 100 K by byl příspěvek CRR znatelně slabší. Je proto zapotřebí určit teplotu elektronů, která se v prováděném experimentu nedá přímo proměřovat, pomocí počítačového modelu.

Neutrální částice tvořící nosný plyn jsou tvořeny převážně heliem s příměsí argonu a molekulárního vodíku.

3.2 Vstupní data

Pro zahájení výpočtu potřebujeme znát některé základní parametry. Především jde o tlak P a teploty jednotlivých složek. Díky nim je možné určit vstupní



Obrázek 3.1: Schéma měřicí aparatury SA-CRDS, převzato z (Dohnal, 2013), kde lze také nalézt podrobnější popis funkce aparatury.

veličina	hodnota	
P	1000	Pa
T_g	77	K
$[e^-]$	10^5	cm^{-3}
$[\text{He}]$	10^{17}	cm^{-3}
$[\text{H}_2]$	10^{14}	cm^{-3}
$[\text{Ar}]$	10^{14}	cm^{-3}

Tabulka 3.1: Výchozí podmínky.

koncentraci neutrálního plynu jako

$$[\text{X}] = \frac{P}{k_B T_g}, \quad (3.1)$$

kde T_g představuje teplotu plynu, která bude dle předpokladů shodná s teplotou iontů. Dominantním neutrálním plynem je přitom helium. Koncentrace argonu a molekulárního vodíku jsou pak zhruba tisíc krát menší. Pro zahájení reakcí potřebuje model nenulovou vstupní koncentraci elektronů, které jsou zodpovědné za vznik dalších reaktivních částic. Vstupní koncentraci elektronů lze přitom volit libovolně, je-li řádově menší než z experimentů očekávaná hodnota $[e^-] \approx 10^{11}$, aniž by to významně ovlivnilo výsledek. Je možné rovněž zadat koncentraci kladných iontů shodnou s koncentrací elektronů, čímž bude již od počátku splněna podmínka kvazineutality. Na konečné koncentrace to ovšem nemá vliv.

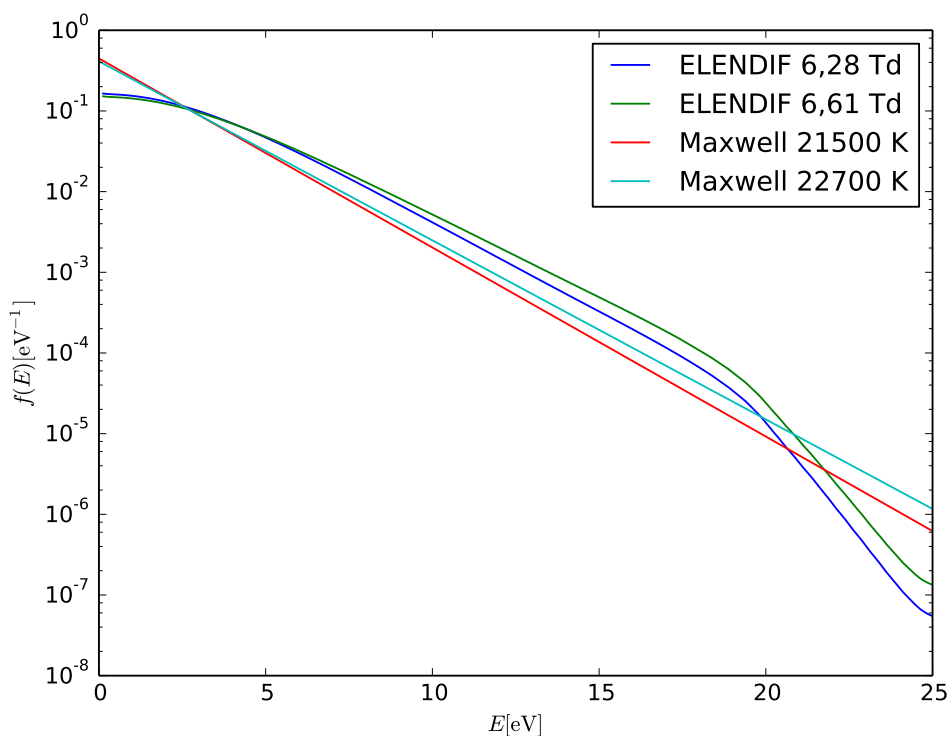
Přehled počátečních dat je shrnut v tabulce (3.1). Záměrně není uvedena elektronová teplota, ke které se vrátíme v následujícím oddíle.

Vstupní jsou rovněž data potřebná k určení rychlostních koeficientů jednotlivých reakcí. K těm je však nejprve potřeba určit rozdělovací funkci.

3.3 Výpočet rozdělovací funkce

Celý model je postaven na srážkových procesech různého typu, jejichž průběh závisí na energii účastníků se částic. Prvním krokem je proto určení rozdělovací funkce. Začneme řešením rovnice (1.13) užitím programu ELENDIF. Pro ten je třeba zadat působící elektrické pole a předpokládané srážky. Byl proveden hrubý odhad pro působení elektrického pole. Ten je ovšem komplikován možností vytvoření vlastního pole částicemi v plazmatu, proto bylo provedeno více simulačních výpočtů a na jejich základě určeny hodnoty, jejichž využití vede k výsledkům odpovídajícím experimentálním pozorováním. Srovnání vypočtených rozdělení pro různé hodnoty pole je vidět v grafu (3.2). Vykreslené hodnoty jsou vyděleny funkcí \sqrt{E} , díky čemuž získá maxwellovské rozdělení v logaritmické škále lineární podobu.

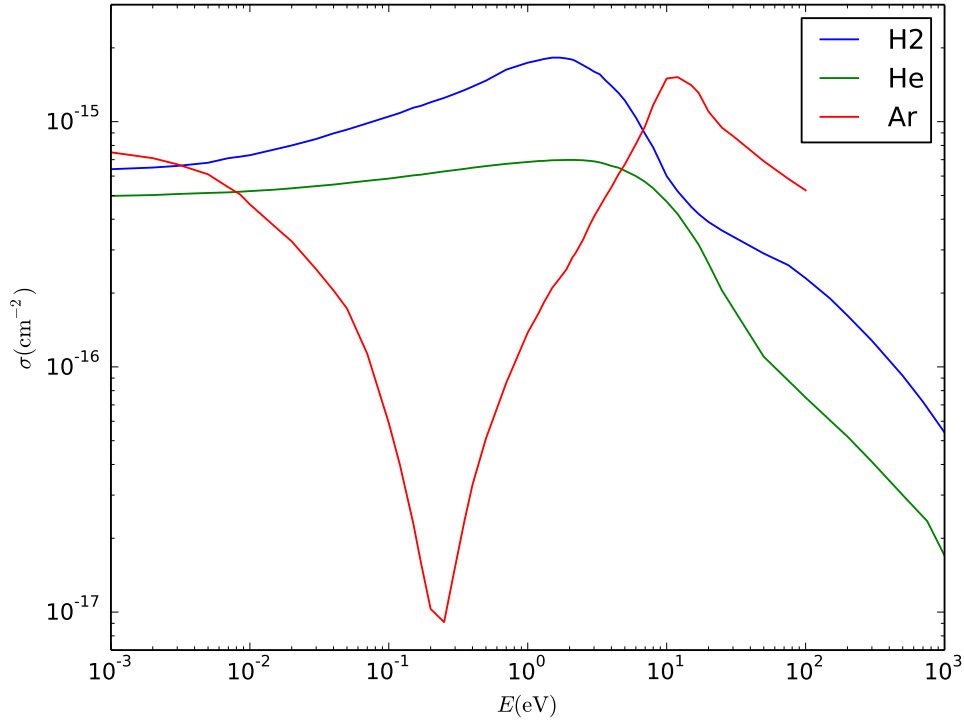
Poznamenejme ještě, že plazma je generováno mikrovlnným zářením. Důsledkem je, že dostáváme střídavý proud. Ve výpočtu ovšem uvažujeme proud stejnosměrný. V práci (Baeva a kol., 1999) bylo však ukázáno, že to není problém a v daných podmínkách lze k určení rozdělovací funkce užít neměnné elektrické pole.



Obrázek 3.2: Elektronové rozdělovací funkce v závislosti na E/n .

Srážkové procesy brané v úvahu jsou čerpány z (Phelps), kde jsou zaznamenány jejich účinné průřezy. Jde o přenos hybnosti elastickými srážkami elektronů s heliem, argonem a molekulárním vodíkem. Dále jsou odsud čerpána data pro srážky neelastické, konkrétněji ionizaci, elektronickou excitaci a v případě vodíku

excitaci vibrační a rotační. Pro vodík je rovněž započítána disociativní excitace. Přehled těchto srážek je uveden v tabulce (3.2). Graf (3.3) znázorňuje účinné průřezy pro elastické srážky.



Obrázek 3.3: Účinné průřezy pro elastické srážky neutrálních částic s elektrony.

Využití rozdělovací funkce vypočtené programem ELENDFIF je vhodné pro užití v aktivním výboji, je však nepraktické pro sledování dohasínající výboje. Místo složitějšího zasahování do samotného ELENDFIFu a jeho úprav je proto pro chladnutí využito Maxwellovo rozdělení (2.10). Jediným parametrem, který je zde potřebný, je teplota elektronů T_e . Musí přitom být dosaženo co nejlepší shody s rozdělením daným ELENDFIFem, což dává podmínku na T_e . Elektronovou teplotu hledáme tak, že necháme proběhnout výpočet pro aktivní výboj s rozdělením daným ELENDFIFem, následně tentýž výpočet provedeme s užitím Maxwellova rozdělení. Elektronovou teplotu pak volíme takovou, aby si tyto výsledky co nejlépe odpovídaly. Pokud by tomu tak nebylo, pak by při přechodu na Maxwellovo rozdělení v začátku chladnutí výboje mohlo dojít ke skoku, který by ovlivňoval výsledek. Navíc v případě, kdy najdeme T_e takovou, že jsou si výsledky obou rozdělení blízké, můžeme využít pro běh celého výpočtu dané Maxwellovo rozdělení. To bude užitečné, neboť data pro některé reakce jsou přímo předkládána pro toto rozdělení.

přenos hybnosti	$e^- + \text{He} \longrightarrow e^- + \text{He}$
	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H}_2$
	$e^- + \text{Ar} \longrightarrow e^- + \text{Ar}$
elektronová excitace	$e^- + \text{He} \longrightarrow e^- + \text{He}(1s^1 2s^1 1S)$
	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H}_2(A^3\Sigma)$
	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H}_2(B^1\Sigma)$
	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H}_2(B^3\Sigma)$
	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H}_2(C^1\Pi)$
	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H}_2(C^3\Pi)$
	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H}_2(D^3\Pi)$
	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H}_2(G^1\Sigma)$
	$e^- + \text{Ar} \longrightarrow e^- + \text{Ar}^*$
vibrační excitace	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H}_2(v = 0, 1, 2, 3)$
rotační excitace	$e^- + \text{H}_2(J = 0) \longrightarrow e^- + \text{H}_2(J = 2)$
	$e^- + \text{H}_2(J = 1) \longrightarrow e^- + \text{H}_2(J = 3)$
disociativní excitace	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H} + \text{H}^*$
ionizace	$e^- + \text{He} \longrightarrow e^- + e^- + \text{He}^+$
	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + e^- + \text{H}_2^+$
	$e^- + \text{Ar} \longrightarrow e^- + e^- + \text{Ar}^+$

Tabulka 3.2: Reakce pro výpočet elektronové rozdělovací funkce.

3.4 Výpočet v aktivním výboji

Během aktivního výboje je předpokládána stálá energie elektronů, která je udržována elektrickým polem. Stačí tak určit rozdělovací funkci pouze na začátku výpočtu a v dalším používat jednu spočítané rychlostní koeficienty. Započítané srážky jsou zde rozděleny na dvě skupiny. První jsou procesy, kterých se účastní elektrony, druhou tvoří srážky mezi ostatními částicemi, tedy ionty a neutrální částice. Jelikož teplotu iontů i neutrálních částic bereme za stejnou a neměnnou, jsou se vstupních souborů rovnou načteny přímo rychlostní koeficienty, které platí po celou dobu výpočtu. Nyní se blíže zaměříme na srážky s elektrony.

Výpočty jsou provedeny pro dvě rozdělovací funkce elektronové energie s různými intenzitami elektrického pole z předchozího odstavce, a sice 6,28 Td a 6,61 Td. Výsledky pro nižší či vyšší intenzity již se příliš odchyľují od experimentálních dat. V tabulce (3.3) jsou zaznamenány srážky neutrálních částic a iontů s elektrony při intenzitě elektrického pole 6,61 Td. Reakce (1)–(3) jsou elastické srážky, které v této části simulace nemají příliš význam, neboť neovlivňují změny koncentrací. Jsou zde uvedeny kvůli svému významu při chladnutí a možnosti srovnání s ostatními srážkami. Reakce (4) je excitace helia do svého metastabilního stavu, který má významnou roli při formulaci iontu H_3^+ . Procesy (5)–(9) představují vibrační excitace molekulárního vodíku. Srážky (10)–(15) jsou pak odpovídající deexcitace. Rychlostní koeficienty deexcitací, k nimž nebyla získána dostatečná data, jsou určeny na základě principu detailní rovnováhy dle rovnice (1.29).

Srážkové procesy (16)–(19) pak představují ionizaci a (20)–(21) disociaci. Zbylé reakce jsou rekombinace. Rychlosti rekombinace iontů H^+ , He^+ a Ar^+ , tedy

Rov. č.	Reakce	k [cm ³ s ⁻¹]	Zdroj
(1)	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H}_2$	$1,42 \cdot 10^{-7}$	Phelps
(2)	$e^- + \text{He} \longrightarrow e^- + \text{He}$	$6,93 \cdot 10^{-8}$	Phelps
(3)	$e^- + \text{Ar} \longrightarrow e^- + \text{Ar}$	$7,50 \cdot 10^{-8}$	Phelps
(4)	$e^- + \text{He} \longrightarrow e^- + \text{He}^m$	$1,08 \cdot 10^{-14}$	Reiter
(5)	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H}_2(v = 1)$	$2,81 \cdot 10^{-9}$	Reiter
(6)	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H}_2(v = 2)$	$6,11 \cdot 10^{-10}$	Reiter
(7)	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H}_2(v = 3)$	$2,73 \cdot 10^{-11}$	Reiter
(8)	$e^- + \text{H}_2(v = 1) \longrightarrow e^- + \text{H}_2(v = 2)$	$3,75 \cdot 10^{-9}$	Reiter
(9)	$e^- + \text{H}_2(v = 2) \longrightarrow e^- + \text{H}_2(v = 3)$	$5,62 \cdot 10^{-9}$	Reiter
(10)	$e^- + \text{He}^m \longrightarrow e^- + e^- + \text{He}^+$	$2,98 \cdot 10^{-8}$	Reiter
(11)	$e^- + \text{H}_2(v = 1) \longrightarrow e^- + \text{H}_2$	$3,71 \cdot 10^{-9}$	DR
(12)	$e^- + \text{H}_2(v = 2) \longrightarrow e^- + \text{H}_2$	$1,07 \cdot 10^{-9}$	DR
(13)	$e^- + \text{H}_2(v = 2) \longrightarrow e^- + \text{H}_2(v = 1)$	$4,80 \cdot 10^{-9}$	Reiter
(14)	$e^- + \text{H}_2(v = 3) \longrightarrow e^- + \text{H}_2$	$6,32 \cdot 10^{-11}$	DR
(15)	$e^- + \text{H}_2(v = 3) \longrightarrow e^- + \text{H}_2(v = 2)$	$7,10 \cdot 10^{-9}$	Reiter
(16)	$e^- + \text{H} \longrightarrow e^- + e^- + \text{H}^+$	$6,88 \cdot 10^{-12}$	Reiter
(17)	$e^- + \text{He} \longrightarrow e^- + e^- + \text{He}^+$	$2,63 \cdot 10^{-16}$	Reiter
(18)	$e^- + \text{Ar} \longrightarrow e^- + e^- + \text{Ar}^+$	$1,27 \cdot 10^{-11}$	Phelps
(19)	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + e^- + \text{H}_2^+$	$6,45 \cdot 10^{-13}$	Reiter
(20)	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H} + \text{H}$	$3,36 \cdot 10^{-10}$	Reiter
(21)	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + e^- + \text{H}^+ + \text{H}$	$1,54 \cdot 10^{-14}$	Reiter
(22)	$e^- + \text{H}^+ \longrightarrow \text{H}$	$3,02 \cdot 10^{-13}$	Stevelfelt
(23)	$e^- + \text{He}^+ \longrightarrow \text{He}$	$3,02 \cdot 10^{-13}$	Stevelfelt
(24)	$e^- + \text{Ar}^+ \longrightarrow \text{Ar}$	$3,02 \cdot 10^{-13}$	Stevelfelt
(25)	$e^- + \text{H}_2^+ \longrightarrow e^- + \text{H}^+ + \text{H}$	$7,99 \cdot 10^{-8}$	Reiter
(26)	$e^- + \text{H}_2^+ \longrightarrow e^- + e^- + \text{H}^+ + \text{H}^+$	$1,46 \cdot 10^{-13}$	Reiter
(27)	$e^- + \text{H}_3^+ \longrightarrow \text{H} + \text{H} + \text{H}$	$2,58 \cdot 10^{-8}$	Reiter
(28)	$e^- + \text{H}_3^+ \longrightarrow e^- + \text{H}^+ + \text{H} + \text{H}$	$2,12 \cdot 10^{-11}$	Reiter
(29)	$e^- + \text{H}_3^+ \longrightarrow \text{H} + \text{H}_2$	$0,54 \cdot 10^{-8}$	Reiter
(30)	$e^- + \text{H}^- \longrightarrow e^- + e^- + \text{H}$	$1,02 \cdot 10^{-7}$	Reiter
(31)	$e^- + \text{H}^- \longrightarrow e^- + e^- + e^- + \text{H}^+$	$6,35 \cdot 10^{-13}$	Reiter

Tabulka 3.3: Uvažované procesy mezi elektrony a ostatními částicemi. Označení DR znamená výpočet dle principu detailní rovnováhy.

rovníc (22)–(24), jsou určeny Stevelfeltovou formulí (1.36). V plazmatu řešeném v této práci je přitom dosaženo takových hodnot koncentrace a teploty elektronů, že je zcela dominantní druhý člen formule, který je závislý pouze na elektronové teplotě. Zbylé dva členy mají i v průběhu narůstající koncentrace elektronů zanedbatelný význam.

Pro druhé uvažované pole s intenzitou 6,28 Td je většina rychlostních koeficientů poměrně blízká, pouze několik hodnot se liší více než o polovinu. V tabulce (3.4) jsou uvedeny relativní rozdíly hodnot pro obě intenzity po vynásobení příslušnou mocninou deseti, jejichž rozdíl je patrný již na prvním či druhém platném desetinném místě. Pro názornější představu uveďme příklad. Jsou-li dva

Rov. č.	Reakce	$\Delta(k_{6,61} - k_{6,28})$
(2)	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H}_2$	0,12
(3)	$e^- + \text{Ar} \longrightarrow e^- + \text{Ar}$	0,64
(4)	$e^- + \text{He} \longrightarrow e^- + \text{He}^m$	0,51
(6)	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H}_2(v = 2)$	0,26
(10)	$e^- + \text{He}^m \longrightarrow e^- + e^- + \text{He}^+$	0,49
(14)	$e^- + \text{H}_2(v = 3) \longrightarrow e^- + \text{H}_2$	0,12
(16)	$e^- + \text{H} \longrightarrow e^- + e^- + \text{H}^+$	2,62
(17)	$e^- + \text{He} \longrightarrow e^- + e^- + \text{He}^+$	1,45
(18)	$e^- + \text{Ar} \longrightarrow e^- + e^- + \text{Ar}^+$	0,51
(19)	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + e^- + \text{H}_2^+$	2,76
(20)	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + \text{H} + \text{H}$	1,03
(21)	$e^- + \text{H}_2 \longrightarrow e^- + e^- + \text{H}^+ + \text{H}$	0,66
(25)	$e^- + \text{H}_2^+ \longrightarrow e^- + \text{H}^+ + \text{H}$	0,58
(26)	$e^- + \text{H}_2^+ \longrightarrow e^- + e^- + \text{H}^+ + \text{H}^+$	0,59
(28)	$e^- + \text{H}_3^+ \longrightarrow e^- + \text{H}^+ + \text{H} + \text{H}$	0,85
(30)	$e^- + \text{H}^- \longrightarrow e^- + e^- + \text{H}$	0,10
(31)	$e^- + \text{H}^- \longrightarrow e^- + e^- + e^- + \text{H}^+$	2,53

Tabulka 3.4: Relativní rozdíl mezi rychlostními koeficienty pro elektrická pole o intenzitě 6,61 Td a 6,28 Td.

rychlostní koeficienty $2,03 \cdot 10^{-7}$ a $8,7 \cdot 10^{-8}$, pak obě čísla jsou násobena faktorem 10^{-7} . Tím dostaneme $2,03 - 0,87$, což je zmíněný relativní rozdíl uvedený v tabulce. Číslování rovnic odpovídá předchozí tabulce.

Zbývá doplnit vzájemné interakce iontů a neutrálních částic. Jak již bylo řečeno, teplota neutrálních částic, která je shodná s teplotou iontů, je v celém průběhu výpočtu brána za konstantní. Platí proto, že tyto reakce mají po celou dobu stejný rychlostní koeficient a příslušná data stačí načíst pouze jednou. Přehled těchto reakcí je uveden v tabulce (3.5). Některá data přitom nejsou určena pro teplotu $T_g = 77$ K. Hodnoty některých reakcí jsou určeny pro teploty kolem 300 K a jsou jako takové použity pro nedostatek bližších dat. Koeficienty některých reakcí byly nalezeny pro obě teploty a jejich hodnoty se shodují, příkladem je reakce (9). Uvedená hodnota pro 77 K je brána z online databáze KIDA a odpovídá hodnotě pro 298 K brané z (Karpas a kol., 1979). V tabulce je proto uvedeno, jaké teplotě odpovídají příslušné rychlostní koeficienty. Předpokládáme přitom, že i ty brané pro vyšší teplotu, u nichž není možnost srovnání, jsou dostatečně přesné. Z důvodů velikosti tabulky a její přehlednosti jsou reference na literaturu označeny čísly, která jsou vysvětlena v poznámce pod tabulkou.

Z výpočtu jsou zcela vypuštěny srážkové procesy způsobující přenos náboje mezi neutrální částicí a iontem stejného typu (například $\text{H}_2^+ - \text{H}_2$). Důvodem je, že takovýto přenos náboje ve výsledku nemění celkovou koncentraci a pro potřeby této simulace by se tak jedno o zbytečné výpočty navíc.

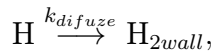
Naproti tomu je důležité uvážit vliv difúze. Právě difúze atomárního vodíku a jeho následná asociace na stěně výbojky má dle (Vankan a kol., 2004) významný vliv na vznik vibračně a rotačně excitovaného molekulárního vodíku. Tyto dva

Rov. č.	Reakce		$k \begin{matrix} [\text{cm}^3 \text{s}^{-1}], \\ [\text{cm}^6 \text{s}^{-1}] \end{matrix}$	$T[\text{K}]$	Ref.	
(1)	$\text{H} + \text{H} + \text{H}$	\longrightarrow	$\text{H} + \text{H}_2$	$4,74 \cdot 10^{-32}$	300	[14]
(2)	$\text{H}^+ + \text{H}^-$	\longrightarrow	$\text{H}_2^+ + \text{e}^-$	$3,08 \cdot 10^{-9}$	77	[12]
(3)	$\text{H}^+ + \text{H}^-$	\longrightarrow	$\text{H} + \text{H}$	$4,54 \cdot 10^{-7}$	77	[12]
(4)	$\text{H}^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	\longrightarrow	$\text{H}_3^+ + \text{He}$	$3,00 \cdot 10^{-29}$	300	[6]
(5)	$\text{H}^+ + \text{H}_2 + \text{H}_2$	\longrightarrow	$\text{H}_3^+ + \text{H}_2$	$3,00 \cdot 10^{-29}$	300	[15]
(6)	$\text{H}^+ + \text{He} + \text{He}$	\longrightarrow	$\text{HeH}^+ + \text{He}$	$9,00 \cdot 10^{-32}$	300	[8]
(7)	$\text{H}_2^+ + \text{Ar}$	\longrightarrow	$\text{ArH}^+ + \text{H}$	$1,24 \cdot 10^{-9}$	298	[4]
(8)	$\text{H}_2^+ + \text{He}$	\longrightarrow	$\text{HeH}^+ + \text{H}$	$1,30 \cdot 10^{-10}$	298	[17]
(9)	$\text{H}_2^+ + \text{H}$	\longrightarrow	$\text{H}_2 + \text{H}^+$	$6,40 \cdot 10^{-10}$	77	[12]
(10)	$\text{H}_2^+ + \text{H}_2$	\longrightarrow	$\text{H}_3^+ + \text{H}$	$2,00 \cdot 10^{-9}$	77	[12]
(11)	$\text{H}_2^+ + \text{H}^-$	\longrightarrow	$\text{H}_2 + \text{H}$	$4,54 \cdot 10^{-7}$	77	[12]
(12)	$\text{H}_3^+ + \text{H}^-$	\longrightarrow	$\text{H}_2 + \text{H}_2$	$4,54 \cdot 10^{-7}$	77	[12]
(13)	$\text{He}^+ + \text{H}$	\longrightarrow	$\text{He} + \text{H}^+$	$1,90 \cdot 10^{-15}$	77	[12]
(14)	$\text{He}^+ + \text{He} + \text{He}$	\longrightarrow	$\text{He}_2^+ + \text{He}$	$1,00 \cdot 10^{-31}$	300	[9]
(15)	$\text{He}^+ + \text{H}_2$	\longrightarrow	$\text{H}_2^+ + \text{He}$	$2,55 \cdot 10^{-14}$	78	[10]
(16)	$\text{He}^+ + \text{H}_2$	\longrightarrow	$\text{H}^+ + \text{H} + \text{He}$	$1,50 \cdot 10^{-13}$	78	[10]
(17)	$\text{He}^+ + \text{H}^-$	\longrightarrow	$\text{H} + \text{He}$	$4,54 \cdot 10^{-7}$	77	[12]
(18)	$\text{He}_2^+ + \text{Ar}$	\longrightarrow	$\text{Ar}^+ + \text{He} + \text{He}$	$2,00 \cdot 10^{-10}$	200	[2]
(19)	$\text{He}_2^+ + \text{H}^-$	\longrightarrow	$\text{H} + \text{He} + \text{He}$	$4,54 \cdot 10^{-7}$	77	[12]
(20)	$\text{He}^m + \text{H}_2$	\longrightarrow	$\text{H}_2^+ + \text{He} + \text{e}^-$	$2,86 \cdot 10^{-11}$	300	[13]
(21)	$\text{He}^m + \text{H}_2$	\longrightarrow	$\text{HeH}^+ + \text{H} + \text{e}^-$	$3,20 \cdot 10^{-12}$	300	[13]
(22)	$\text{He}^m + \text{He}^m$	\longrightarrow	$\text{He}_2^+ + \text{e}^-$	$5,00 \cdot 10^{-9}$	300	[18]
(23)	$\text{He}^m + \text{He}^m$	\longrightarrow	$\text{He}^+ + \text{He} + \text{e}^-$	$5,00 \cdot 10^{-9}$	300	[5]
(24)	$\text{He}^m + \text{Ar}$	\longrightarrow	$\text{Ar}^+ + \text{He} + \text{e}^-$	$7,00 \cdot 10^{-11}$	300	[7]
(25)	$\text{Ar}^+ + \text{H}_2$	\longrightarrow	$\text{ArH}^+ + \text{H}$	$6,70 \cdot 10^{-10}$	80	[1]
(26)	$\text{Ar}^+ + \text{H}_2$	\longrightarrow	$\text{H}_2^+ + \text{Ar}$	$5,04 \cdot 10^{-11}$	80	[1]
(27)	$\text{ArH}^+ + \text{H}_2$	\longrightarrow	$\text{H}_3^+ + \text{Ar}$	$9,50 \cdot 10^{-10}$	80	[1]
(28)	$\text{HeH}^+ + \text{H}_2$	\longrightarrow	$\text{H}_3^+ + \text{He}$	$1,50 \cdot 10^{-9}$	300	[3]
(29)	$\text{HeH}^+ + \text{H}$	\longrightarrow	$\text{He} + \text{H}_2^+$	$9,00 \cdot 10^{-10}$	300	[11]
(30)	$\text{H}^- + \text{H}$	\longrightarrow	$\text{H}_2 + \text{e}^-$	$1,25 \cdot 10^{-9}$	77	[12]

Pozn:[1] – Bedford a Smith (1990), [2] – Bohme a kol. (1970), [3] – Bohme a kol. (1980), [4] – Bowers a Elleman (1969), [5] – Deloche a kol. (1976), [6] – Glosík a kol. (2015), [7] – Glosík a kol. (1999), [8] – Chatterjee a Johnsen (1990), [9] – Ikezoe a kol. (1987), [10] – Johnsen a kol. (1980), [11] – Karpas a kol. (1979), [12] – KIDA, [13] – Martin a kol. (1989), [14] – Palla a kol. (1983), [15] – Plašil a kol. (2012), [16] – Pollard a kol. (1991), [17] – Theard a Huntress (1974), [18] – Larsson a Orel (2008).

Tabulka 3.5: Uvažované procesy mezi ionty a neutrálními částicemi.

procesy lze chápat jako následující reakce:



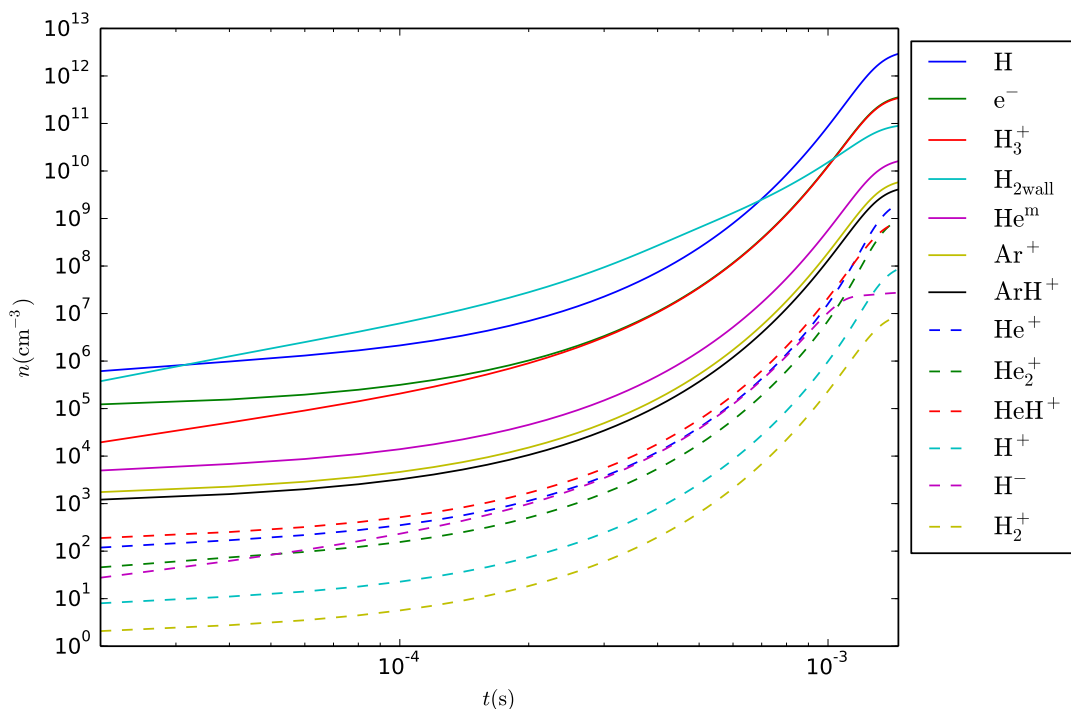
První z rovnic reprezentuje difúzi, která je započítána formálně jako rovnice che-

mické kinetiky dle (1.43) s rychlostním koeficientem (1.44). Pro určení k_{difuze} je potřeba znalost rozměrů výbojky. Výbojka je válcová s průměrem $r = 15\text{mm}$ a délkou $l \approx 5\text{cm}$. Při výpočtu s těmito rozměry je první člen v (1.42) zanedbatelný a vystačíme tak se znalostí průměru.

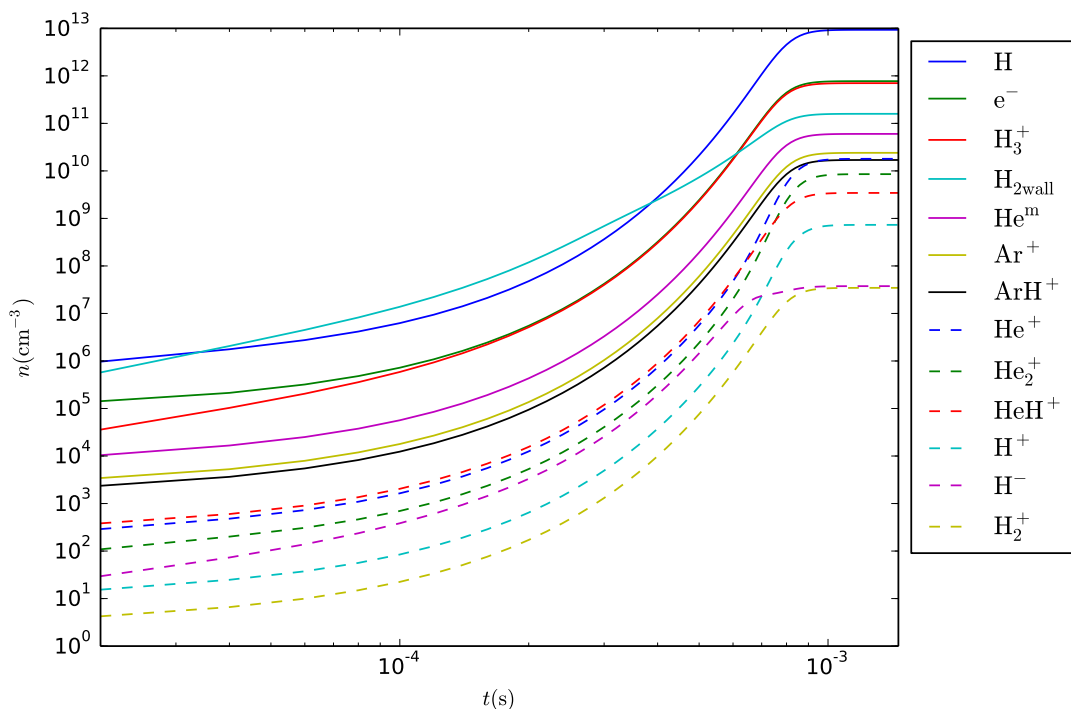
Rozdělení takto vzniklých molekul vodíku mezi jednotlivé excitační hladiny je v programu uváženo na základě (Vankan a kol., 2004) a to následovně. Uvažujeme-li vibrační hladinu i , pak jí příslušející část je $9 * 10^{-(i+1)}$. Simulace započítává vibrační hladiny $v = 0,1,2,3$. Rotační hladiny v této práci nerozlišujeme. Důvody budou blíže řešeny v části věnující se chladnutí.

Dále je uvažována difúze vibračně vybuzených molekul vodíku, které na stěně deexcitují. Důležitá je rovněž ambipolární difúze, která je počítána dle (1.48). Ambipolární difúze je pro ionty započítána obdobně jako výše zmíněná difúze atomárního vodíku. Místo asociace na stěně výbojky je však uvažována rekombinace s elektrony.

V grafech (3.5) a (3.4) jsou vyneseny vývoje koncentrací jednotlivých složek plazmatu. Graficky nejsou vyneseny koncentrace neutrálních složek, tedy helia, argonu a molekulárního vodíku, neboť ty se v průběhu mění jen málo a řádově jsou stále stejné. Jelikož jsou navíc řádově vyšší než koncentrace ostatních složek, není jejich vývoj v grafech patrný a jejich zahrnutí vede pouze k menší přehlednosti zbývajících částic.



Obrázek 3.4: Vývoj koncentrací v aktivním výboji pro elektrické pole 6,28 Td. Legenda je řazena dle výsledných koncentrací od největší po nejmenší.



Obrázek 3.5: Vývoj koncentrací v aktivním výboji pro elektrické pole 6,61 Td. Legenda je řazena dle výsledných koncentrací od největší po nejmenší.

Výsledky simulace aktivního výboje jsou k nahlédnutí v tabulce (3.6). Rozdělovací funkci získané ELENDFem pro elektrické pole 6,61 Td vcelku dobře odpovídají výsledky s užitím Maxwellova rozdělení při elektronové teplotě 22700 K. ELENDFu pro 6,28 Td pak slušně odpovídá Maxwellovo rozdělení s teplotou elektronů 21500 K. Porovnání rozdělovacích funkcí je vidět v grafu (3.6).

Experimentální výsledky předpovídají koncentraci elektronů v řádu 10^{11} , čemuž pro zachování kvazineutality musí odpovídat koncentrace iontů. Dominantním iontem by pak měl být H_3^+ , který by měl tvořit asi 90% kladných iontů. V případě silnějšího elektrického pole tvoří H_3^+ téměř 91% kladných iontů, avšak jeho koncentrace spolu s elektronovou se blíží hodnotám o řád vyšším. V případě slabšího pole tvoří H_3^+ 95% kladných iontů.

3.5 Výpočty během chladnutí

Ve chvíli, kdy se ustálí koncentrace počítané během aktivního výboje, začne program simulovat chlazení elektronů. Jak bylo řečeno výše, dojde k přechodu na Maxwellovu rozdělovací funkci s elektronovou teplotou určenou při výpočtech v aktivním výboji. Na závěr necháme počítat celý průběh pouze s užitím Maxwellova rozdělení a srovnáme výsledky. Dříve se však podíváme na procesy ovlivňující teplotu.

Vzhledem k vysokým koncentracím neutrálních částic hrají významnou roli srážky elektronů právě s nimi. Vysoce pravděpodobné jsou elastické srážky, které způsobují ochlazování elektronů a jejichž příspěvek k vývoji teploty je dán vzta-

	ELENDIF _{6,61} [cm ⁻³]	Maxwell ₂₂₇₀₀ [cm ⁻³]	ELENDIF _{6,28} [cm ⁻³]	Maxwell ₂₁₅₀₀ [cm ⁻³]
e ⁻	7,74 · 10 ¹¹	7,80 · 10 ¹¹	4,05 · 10 ¹¹	4,21 · 10 ¹¹
H ₂	8,57 · 10 ¹⁴	8,69 · 10 ¹⁴	8,95 · 10 ¹⁴	9,01 · 10 ¹⁴
H ₂ ⁺	3,46 · 10 ⁷	4,55 · 10 ⁷	1,04 · 10 ⁷	1,49 · 10 ⁷
H	9,32 · 10 ¹²	4,83 · 10 ¹²	3,43 · 10 ¹²	1,85 · 10 ¹²
H ⁺	7,32 · 10 ⁸	3,41 · 10 ⁸	1,13 · 10 ⁸	6,96 · 10 ⁷
H ₃ ⁺	7,03 · 10 ¹¹	6,91 · 10 ¹¹	3,89 · 10 ¹¹	3,98 · 10 ¹¹
H ⁻	3,76 · 10 ⁷	2,70 · 10 ⁷	2,82 · 10 ⁷	2,10 · 10 ⁷
He	9,41 · 10 ¹⁷	9,41 · 10 ¹⁷	9,41 · 10 ¹⁷	9,41 · 10 ¹⁷
He ⁺	1,80 · 10 ¹⁰	2,83 · 10 ¹⁰	2,62 · 10 ⁹	5,99 · 10 ⁹
H _{2wall}	1,59 · 10 ¹¹	1,14 · 10 ¹¹	9,65 · 10 ¹⁰	7,08 · 10 ¹⁰
Ar	9,41 · 10 ¹⁴	9,41 · 10 ¹⁴	9,41 · 10 ¹⁴	9,41 · 10 ¹⁴
Ar ⁺	2,40 · 10 ¹⁰	2,48 · 10 ¹⁰	6,72 · 10 ⁹	7,43 · 10 ⁹
ArH ⁺	1,70 · 10 ¹⁰	1,75 · 10 ¹⁰	4,75 · 10 ⁹	5,26 · 10 ⁹
He ₂ ⁺	8,55 · 10 ⁹	1,37 · 10 ¹⁰	1,24 · 10 ⁹	2,86 · 10 ⁹
HeH ⁺	3,44 · 10 ⁹	4,52 · 10 ⁹	9,93 · 10 ⁸	1,43 · 10 ⁹
H ₂ (<i>v</i> = 1)	5,88 · 10 ¹³	5,35 · 10 ¹³	3,45 · 10 ¹³	3,15 · 10 ¹³
H ₂ (<i>v</i> = 2)	1,64 · 10 ¹³	1,27 · 10 ¹³	8,37 · 10 ¹²	6,34 · 10 ¹²
H ₂ (<i>v</i> = 3)	2,72 · 10 ¹²	2,11 · 10 ¹²	9,53 · 10 ¹¹	7,35 · 10 ¹¹
He ^{<i>m</i>}	6,01 · 10 ¹⁰	1,15 · 10 ¹¹	1,84 · 10 ¹⁰	3,76 · 10 ¹⁰

ELENDIF - rozdělovací funkce spočtená ELENDIFem; index - intenzita pole [Td]

Maxwell - Maxwellova rozdělovací funkce; index - teplota elektronů [K]

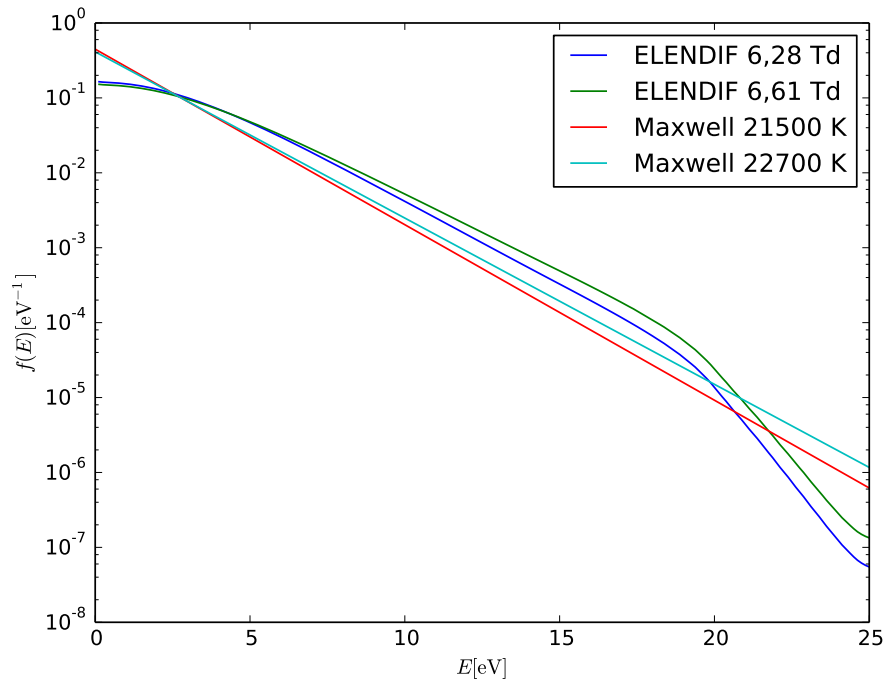
Tabulka 3.6: Výsledné koncentrace při aktivním výboji.

hem (1.21). Dále se samozřejmě jedná o chlazení neelastickými srážkami, jejichž vliv je blíže popsán v sekci (1.3.2), a rovněž super-elastické srážky způsobující ohřev rozebírané v téže části této práce. Ze super-elastických srážek přitom uvažujeme pouze vibrační deexcitaci molekulárního vodíku.

V průběhu této práce bylo kvůli srovnání výsledků provedeno vícero simulací pomocí původního modelu uvedeného v (Roučka, 2012), i pomocí jeho rozšíření o vliv neelastických a super-elastických srážek s molekulárním vodíkem programovaném v rámci studentského projektu zmíněného v úvodu. Z těch vyplynulo, že s výjimkou CRR rekombinace jsou super-elastické srážky způsobující vibrační deexcitaci dominantním procesem ohřevu. Proto zde byla pozornost věnována vibračním hladinám.

Mezi důležité procesy při chlazení patří rovněž coulombické srážky. V modelu jsou uvažovány coulombické srážky elektronů s kladnými ionty. Vzájemné coulombické srážky mezi elektrony nejsou započítány. Předpokládáme ale, že jsou zodpovědné za rychlé vyrovnávání teploty mezi elektrony a že díky tomu jsme oprávněni používat Maxwellovo rozdělení.

Jelikož při experimentech nebyla pozorována CRR rekombinace, není zde započítána. Ohřev je tak možný díky srážkám elektronů s vibračně vybudzenými molekulami vodíku. Z toho důvodu nás zajímá obsazení vibračních hladin těchto excitovaných molekul. Vývoj koncentrací těchto molekul během celého vývoje —

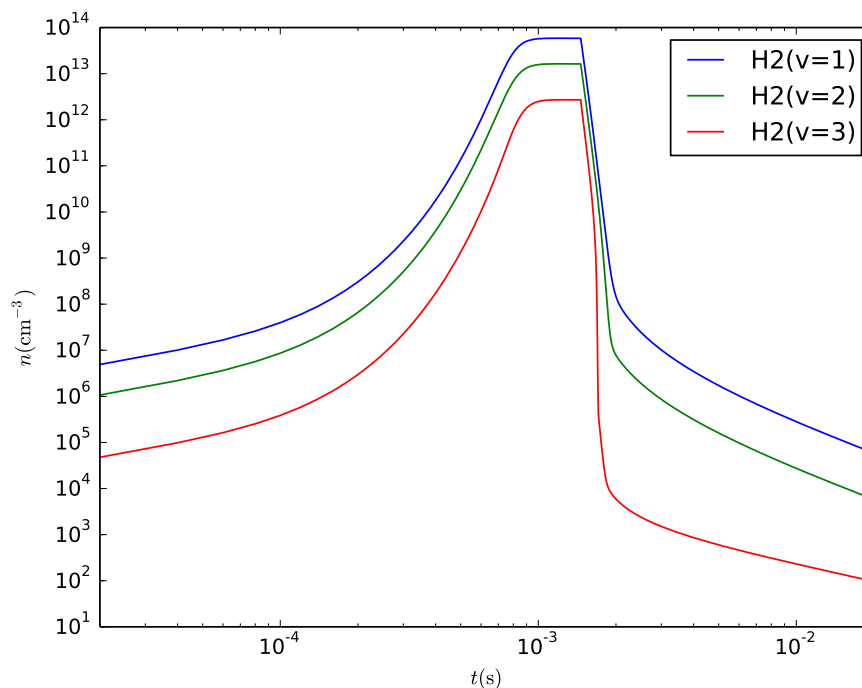


Obrázek 3.6: Srovnání užitých rozdělovacích funkcí a k nim přiřazeným Maxwellovým.

aktivního výboje i následného chlazení — je zobrazen v grafu (3.7). V něm je názorně vidět pokles vybuzeného vodíku, který by mohl ohřívat elektrony. Dá se tak očekávat, že k ohřevu příliš docházet nebude.

Pro lepší představu o vývoji obsazení vibračních hladin H_2 a jejich souvislosti s teplotou je v grafech (3.8) a (3.9) vynesena vývoj jejich koncentrací a vývoj teploty elektronů při chlazení. Grafy doplníme tabulkou (3.7). V té jsou porovnány procesy způsobující vznik a zánik první vibrační hladiny. Druhá a třetí hladina se vyvíjí podobným způsobem. V tabulce (3.8) jsou zaznamenány příspěvky uvažovaných procesů k vývoji teploty. Jedná se o chladnutí elastickými srážkami, coulombickými srážkami a poslední je součet neelastických srážek se super-elastickými, tedy chladnutí s ohřevem.

V okamžiku vypnutí výboje teplota elektronů prudce klesá. Dominantní vliv na chladnutí přitom mají elastické srážky, z nichž se nejvýrazněji projevují srážky s heliem, jehož koncentrace je nejvyšší. O řád méně přispívají k chladnutí neelastické srážky. Vliv coulombických srážek je zde slabý kvůli vysoké teplotě elektronů. Ve vývoji koncentrace první vibrační hladiny H_2 se nejvíce projevuje difúze, která vede k deexcitaci na stěně. Pouze o málo slabší je excitace způsobená srážkami s elektrony, která brzdí pokles obsazení hladiny. Přibližně v čase $1 \cdot 10^{-7}$ s začíná slábnout efekt chlazení neelastickými srážkami. Elastické srážky mají rovněž menší efekt, u nich však ztráta není zdaleka tak výrazná. Naopak coulombické srážky začínají být efektivnější. Téměř o řád poklesla excitace molekul H_2 elektrony, zatímco difúze má prakticky stejný účinek.



Obrázek 3.7: Vývoj koncentrací vibračně excitovaných molekul vodíku.

t [s]	$v_0 \rightarrow v_1$ [cm ⁻³]	$v_1 \rightarrow v_0$ [cm ⁻³]	$v_1 \rightarrow v_2$ [cm ⁻³]	$v_2 \rightarrow v_1$ [cm ⁻³]	asoc. H [cm ⁻³]	difúze [cm ⁻³]
0,0	$1,6 \cdot 10^{18}$	$-1,5 \cdot 10^{17}$	$-1,7 \cdot 10^{17}$	$6,0 \cdot 10^{16}$	$2,5 \cdot 10^{16}$	$-1,6 \cdot 10^{18}$
$1,0 \cdot 10^{-7}$	$1,7 \cdot 10^{17}$	$-5,5 \cdot 10^{16}$	$-1,6 \cdot 10^{16}$	$1,8 \cdot 10^{16}$	$2,5 \cdot 10^{16}$	$-1,6 \cdot 10^{18}$
$1,5 \cdot 10^{-7}$	$2,9 \cdot 10^{16}$	$-2,2 \cdot 10^{16}$	$-2,7 \cdot 10^{15}$	$6,3 \cdot 10^{15}$	$2,5 \cdot 10^{16}$	$-1,6 \cdot 10^{18}$
$4,2 \cdot 10^{-7}$	$1,9 \cdot 10^7$	$-1,7 \cdot 10^{12}$	$-9 \cdot 10^6$	10^{12}	$2,5 \cdot 10^{16}$	$-1,6 \cdot 10^{18}$
$9,8 \cdot 10^{-7}$	0	$-9 \cdot 10^4$	0	$1 \cdot 10^3$	$2,5 \cdot 10^{16}$	$-1,6 \cdot 10^{18}$
$4 \cdot 10^{-5}$	0	$-4 \cdot 10^3$	0	52	$3,8 \cdot 10^{15}$	$-5,2 \cdot 10^{17}$
$1 \cdot 10^{-4}$	0	-14	0	0	$2,9 \cdot 10^{14}$	$-1,1 \cdot 10^{17}$
$3 \cdot 10^{-4}$	0	0	0	0	$1,0 \cdot 10^{13}$	$-3,1 \cdot 10^{14}$

Tabulka 3.7: Sledování příspěvků k vývoji koncentrace $H_2(v = 1)$ ve vybraných časech po zhasnutí výboje.

Slábnoucí význam elastických i neelastických srážek a pozvolna rostoucí význam srážek coulombických při chlazení pokračuje zhruba do času $1,5 \cdot 10^{-7}$ s, kdy super-elastické srážky převáží nad neelastickými a dočasně zastaví pokles elektronové teploty. Chvíli dokonce způsobí mírný nárůst této teploty. Koncentrace vybuzených částic stále podléhá téměř neměnné hodnotě difúze a je udržována znovu zhruba o řád slabší elektronovou excitací. Přibližně do $4,2 \cdot 10^{-7}$ s vzrůstá vliv coulombických srážek, klesá vliv elastických srážek. Ohřev super-elastickými srážkami stále převažuje nad chlazením neelastickým. Hodnota kolísá, chvíli klesá, chvíli stoupá, ale stále převažuje ohřev. Koncentrace je stále snižována difúzí a jediným významným procesem, který ji částečně vyrovnává, je asociace atomárního vodíku na stěně výbojky. Když se blížíme 10^{-6} s, ohřev vibrační deexcitací začíná být silnější než chlazení elastickými srážkami.

t [s]	elastické s. [eV · s ⁻¹]	neelastik.+supr.el. s. [eV · s ⁻¹]	coulombické s. [eV · s ⁻¹]
0,0	-38207299	-1413493	-69782
$1,0 \cdot 10^{-7}$	-3528897	-80765	-115795
$1,5 \cdot 10^{-7}$	-1709511	-1247	-130995
$4,2 \cdot 10^{-7}$	-93102	1234	-167111
$9,8 \cdot 10^{-7}$	-12164	122030	-109790
$4 \cdot 10^{-5}$	-11983	36540	-24581
$1 \cdot 10^{-4}$	-8751	19171	-10446
$3 \cdot 10^{-4}$	-630	1213	-593

Tabulka 3.8: Sledování příspěvků k vývoji elektronové teploty ve vybraných časech po zhasnutí výboje.

Podmínky se drží relativně v rovnováze přibližně do času $3 \cdot 10^{-5}$ s, kdy dochází k stále výraznějšímu poklesu koncentrace vibračně vybuzených molekul vodíku. V souvislosti s tím začíná opět rychleji klesat i teplota elektronů. Se zánikem iontů výrazně klesá vliv coulombovských srážek. Ohřev super-elastickými srážkami je poměrně významný, kombinací příspěvků elastických a coulombických srážek je však překonán a nadále pokračuje chladnutí.

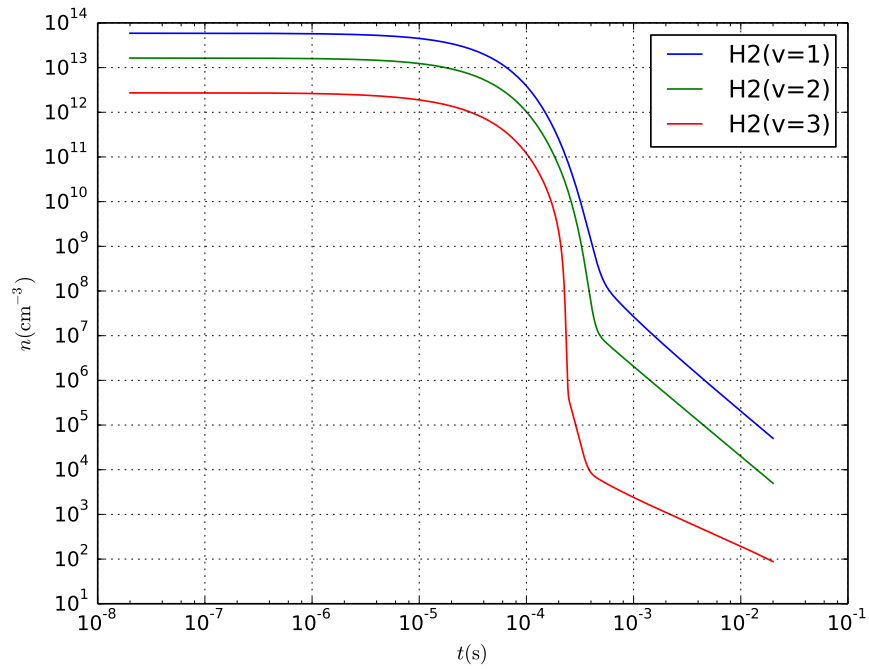
Kolem 10^{-4} s, tedy času srovnatelného s charakteristickou dobou difúze, došlo k poklesu vybuzených molekul. Důsledkem toho samozřejmě pokleslo množství super-elastických srážek. Po zbytek výpočtu zůstává ohřev vibrační deexcitací blízky kombinací efektu elastických a coulombických srážek, přesto však slabší a teplota elektronů klesá až k dosažení rovnováhy s neutrálními částicemi.

V rámci diskuze bude zahrnuto srovnání s vyhodnocením experimentálních výsledků, jež lze nahlédnout v grafu (3.10).

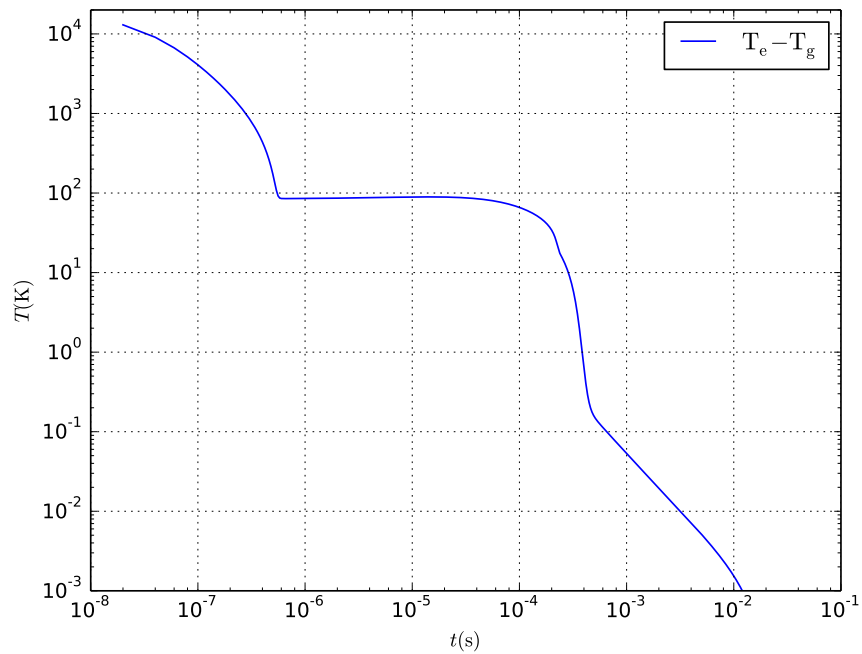
Graf (3.11) zobrazuje vývoj koncentrací po vypnutí výboje a následného chlazení. Je z něj vidět, že velmi rychle vymizí téměř veškeré ionty s výjimkou H_3^+ , jehož koncentrace se prakticky vyrovná s koncentrací elektronů. Tento graf, stejně jako graf sledující obsazení vibračních hladin molekulárního vodíku, je pořízen z výpočtu, který začínal se silnějším elektrickým polem. Druhý případ však dává velice podobné výsledky.

Poslední prováděný výpočet, jak bylo předesláno, byl celý spuštěn s Maxwellovým rozdělením a to při teplotě 22700 K. Jelikož i výpočty, které pro aktivní výboj využívaly rozdělení dané ELENDIFem, přešly pro chlazení na Maxwellovo rozdělení, není příliš překvapením, že i tyto výsledky odpovídají předchozím. Elektronová teplota ve všech prováděných výpočtech klesla na tutéž hodnotu.

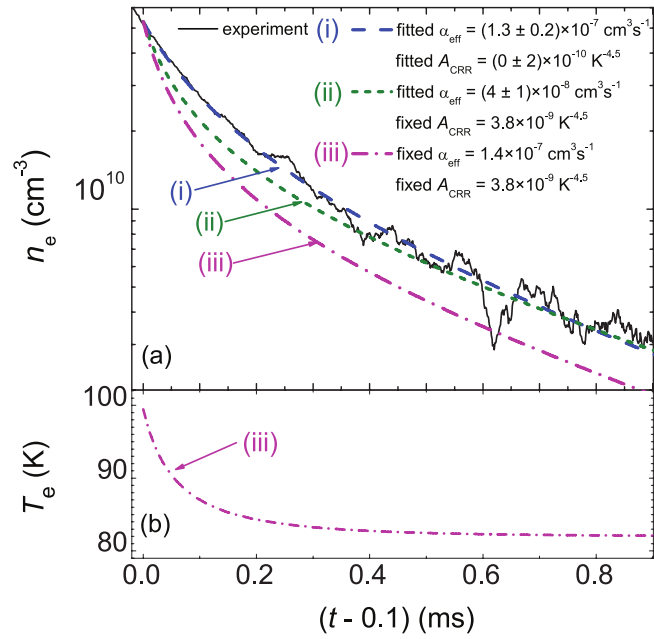
Původní model, v němž byly neměnné koncentrace, předpovídal v případě, kdy v něm nebyla uvažována CRR rekombinace, vyrovnání elektronové teploty



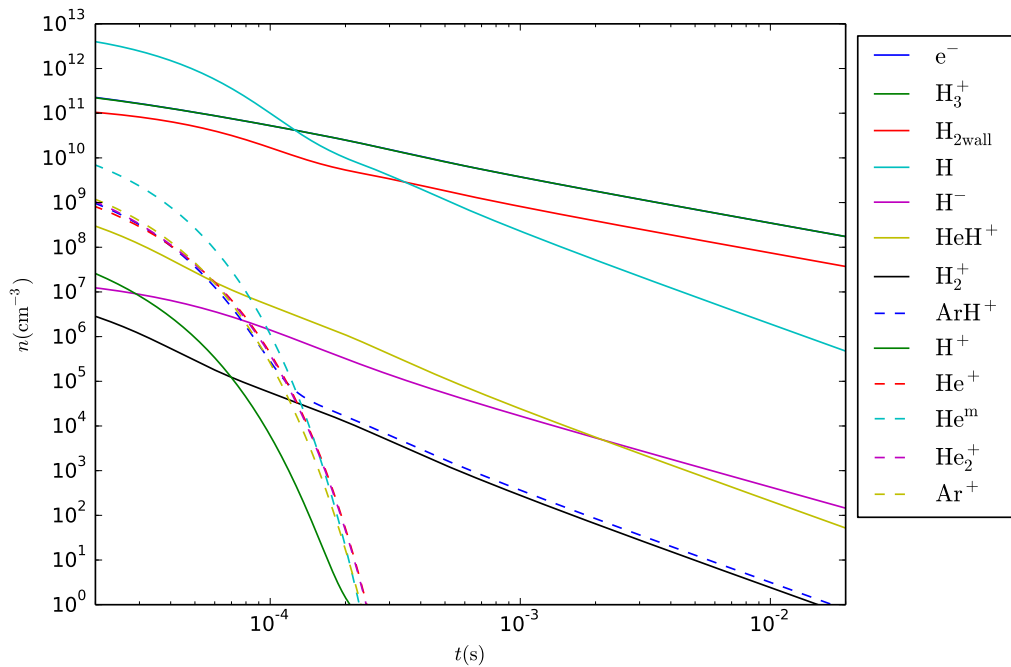
Obrázek 3.8: Vývoj koncentrací vibračních hladin H_2 po vypnutí výboje.



Obrázek 3.9: Vývoj elektronové teploty po vypnutí výboje.



Obrázek 3.10: Graf srovnávající experimentální data s teoretickým výpočtem. Shody dosaženo při nulovém vlivu CRR. Přebráno z (Dohnal a kol., 2012).



Obrázek 3.11: Vývoj koncentrací po vypnutí výboje. Legenda je řazena dle výsledných koncentrací od největší po nejmenší.

s teplotou nosného plynu. V našem případě se koncentrace měnily. Počet vibračně vybuzených molekul vodíku na rozdíl od předchozího silně poklesl a tedy i možnost ohřevu se snížila. Dle očekávání se tedy i zde teplota elektronů vyrovnala se svým okolím.

V závěru byl spuštěn jeden běh programu, který uvažoval i proces CRR. Ten je implementován dle (Roučka, 2012). V tomto případě výsledná teplota elektronů jen lehce přesahovala 78 K. To je v rozporu s domněnkou, že CRR způsobí zahřátí elektronů, čímž opět přestane probíhat, a proto není pozorován.

4. Diskuze

Původní model, v němž byly neměnné koncentrace, předpovídal v případě, kdy v něm rovněž nebyla uvažována CRR rekombinace, vyrovnání elektronové teploty s teplotou nosného plynu. V našem případě se koncentrace měnily. Počet vibračně vybuzených molekul vodíku na rozdíl od předchozího silně poklesl a tedy i možnost ohřevu se snížila. Dle očekávání se tedy i zde teplota elektronů vyrovnala se svým okolím.

Podstatné ovšem je, jak dlouho trvá, než je vyrovnání dosaženo. Experimentální měření bylo prováděno za předpokladu, že k vyrovnání teplot dojde v čase 50–150 μs . Výsledky obdržené v této práci naznačují, že během tohoto času by teploty nemusely být dostatečně vyrovnány a sledování v něm by tak bylo takřka na hranici použitelnosti.

Tato práce byla zaměřena především na sledování vlivu vibračně excitovaných molekul vodíku na elektronovou teplotu. Ačkoliv vlivem super-elastických srážek došlo k dočasnému vyrovnání teploty elektronů na vyšší hodnotě, než jakou mají neutrální částice, elektrony byly nakonec uchlazeny. Chladící procesy, tedy především elastické a coulombické srážky, však ke konci simulace převyšovaly ohřev způsobený deexcitací jen mírně. Zde mohla sehrát svou roli zjednodušení použitá ve výpočtech. Především jde o zánik vibračně vybuzených molekul, který byl dán především difúzí na stěnu. Model předpokládá, že vybuzená molekula při srážce se stěnou deexcituje na základní hladinu. Je možné, že dojde ke snížení energetické hladiny, nikoli však k úplné deexcitaci. Tu by pak způsobovala až vícenásobná srážka se stěnou. Uvažujeme-li o „shluku“ částic u stěny, pak by nebyla v pořádku okrajová podmínka, kterou jsme použili při řešení rovnice difúze.

Mezi další procesy, které v této práci nejsou uvažovány, a mohly by způsobovat nárůst teploty elektronů, by byly nejspíše především super-elastické srážky. Jednalo by se jednak o rotačně vybuzené molekuly, které byly v této práci zanedbány, dále například o elektronické excitace. Rotačně vybuzené částice mají menší energii a měly by mít menší vliv než vibrační excitace. Může jich ovšem být značně více. Elektronicky excitované částice zde reprezentovaly metastabilní atomy helia, jejichž efekt k ohřevu nebyl uvažován. Metastabilní helium však po vypnutí výboje velice rychle zaniklo. Možný vliv jiných elektronických stavů však nelze zcela vyloučit.

5. Závěr

Byl vytvořen model simulující experimentální podmínky plazmatu v měřicí aparatuře SA-CRDS. Model je složen ze dvou částí. V první části pomocí metod chemické kinetiky určuje koncentrace částic v aktivním výboji. Po vyrovnání koncentrací dochází k přechodu do druhé části programu – simulace chladnutí poté, co je výboj vypnut. Tato fáze výpočtu sleduje především vývoj elektronové teploty.

Celý model stojí na chemické kinetice a je pro něj velice důležité, aby měl k dispozici co možná nejpřesnější data určující průběh jednotlivých srážkových procesů. Jedná se zejména o sady účinných průřezů, eventuálně, nejsou-li k dispozici, fitovací funkce pro rychlostní koeficienty.

Pro výpočet je důležitá znalost elektronové rozdělovací funkce. Ta byla nejprve spočítána programem ELENDIF. Následně bylo ukázáno, že při volbě vhodné teploty lze dosáhnout dobré aproximace užitím Maxwellova rozdělení. Výpočty byly provedeny pro několik rozdělovacích funkcí, jejichž vstupní parametry se drobně lišily. Obdržené výsledky se přitom dostatečně shodují.

Výsledky modelu ukazují, jak je chladnutí elektronů ovlivňováno vibračně vybuzenými molekulami vodíku. Ty v modelu zanikají především difúzí a následnou deexcitací na stěně. Přes ohřev způsobený super-elastickými srážkami elektronů s vibračně vybuzenými molekulami vodíku se teplota elektronů vyrovná na teplotu neutrálních částic. Tento výsledek nezměnila u dodatečného výpočtu ani eventuální přítomnost procesu CRR.

Výsledky modelu tak naznačují v souladu s experimenty, že elektronová radiativní rekombinace iontu H_3^+ v konaných měřeních neprobíhá.

Literatura

- BAEVA, M., LUO, X., PFELZER, B. a UHLENBUSCH, J. (1999). Theoretical investigation of pulsed microwave discharge in nitrogen. *Plasma Sources Science and Technology*, **8**(3), 404.
- BEDFORD, D. a SMITH, D. (1990). Variable-temperature selected ion flow tube studies of the reactions of Ar^+ , Ar_2^+ and ArH_n^+ ($n = 1-3$) ions with H_2 , HD and D_2 at 300 K and 80 K. *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes*, **98**(2), 179–190.
- BOHME, D. K., ADAMS, N. G., MOSEMAN, M., DUNKIN, D. B. a FERGUSON, E. E. (1970). Flowing Afterglow Studies of the Reactions of the Rare-Gas Molecular Ions He_2^+ , Ne_2^+ , and Ar_2^+ with Molecules and Rare-Gas Atoms. *The Journal of Chemical Physics*, **52**, 5094–5101.
- BOHME, D. K., MACKAY, G. I. a SCHIFF, H. I. (1980). Determination of proton affinities from the kinetics of proton transfer reactions. VII. the proton affinities of O_2 , H_2 , Kr, O, N_2 , Xe, CO_2 , CH_4 , N_2O , and CO. *The Journal of Chemical Physics*, **73**(10), 4976–4986.
- BOWERS, M. T. a ELLEMAN, D. D. (1969). Kinetic Analysis of the Concurrent Ion-Molecule Reactions in Mixtures of Argon and Nitrogen with H_2 , D_2 , and HD Utilizing Ion-Ejection-Ion-Cyclotron-Resonance Techniques. *The Journal of Chemical Physics*, **51**(10), 4606–4617.
- CHATTERJEE, B. K. a JOHNSEN, R. (1990). An estimating formula for ion-atom association rates in gases. *The Journal of Chemical Physics*, **93**(8), 5681–5684.
- CHEN, F. F. (1984). *Úvod do fyziky plazmatu*. ACADEMIA, Praha.
- DEBYE, P. a HÜCKEL, E. (1923). Zur Theorie der Elektrolyte. I. Gefrierpunktniedrigung und verwandte Erscheinungen. *Physikalische Zeitschrift*, **24**(9), 185–206.
- DELOCHE, R., MONCHICOURT, P., CHERET, M. a LAMBERT, F. (1976). High-pressure helium afterglow at room temperature. *Phys. Rev. A*, **13**, 1140–1176.
- DOHNAL, P. (2013). *Electron Ion Recombination in Low Temperature Plasma*. Disertační práce, MFF UK.
- DOHNAL, P., HEJDUK, M., VARJU, J., RUBOVIČ, P., ROUČKA, Š., KOTRÍK, T., PLAŠIL, R., GLOSÍK, J. a JOHNSEN, R. (2012). Binary and ternary recombination of para- H_3^+ and ortho- H_3^+ with electrons: State selective study at 77–200 K. *The Journal of Chemical Physics*, **136**(24).
- GLOSÍK, J., BÁNÓ, G., PLAŠIL, R., LUCA, A. a ZAKOUREIL, P. (1999). Study of the electron ion recombination in high pressure flowing afterglow: recombination of $\text{NH}_4^+(\text{NH}_3)_2$. *International Journal of Mass Spectrometry*, **189**(2–3), 103–113.

- GLOŠÍK, J., DOHNAL, P., RUBOVIČ, P., KÁLOSI, Á., PLAŠIL, R., ROUČKA, Š. a JOHNSEN, R. (2015). Recombination of H_3^+ ions with electrons in He/ H_2 ambient gas at temperatures from 240 k to 340 k. *Plasma Sources Science and Technology*, **24**(6), 065017.
- HUBER, K. a HERZBERG, G. (1979). *Molecular Spectra And Molecular Structure: Constants Of Diatomic Molecules*, volume IV of *Molecular Spectra And Molecular Structure*. Van Nostrand Reinhold, New York. ISBN 0-442-23394-9.
- IKEZOE, Y., MATSUOKA, S., TAKEBE, M. a VIGGIANO, A. (1987). *Gas Phase Ion-Molecule Reaction Rare Constant*. The Mass Spectroscopy Society, Tokyo, Japan.
- JOHNSEN, R., CHEN, A. a BIONDI, M. A. (1980). Dissociative charge transfer of He^+ ions with H_2 and D_2 molecules from 78 to 330 k. *The Journal of Chemical Physics*, **72**(5), 3085–3088.
- KARPAS, Z., ANICICH, V. a HUNTRESS, W. T. (1979). An ion cyclotron resonance study of reactions of ions with hydrogen atoms. *The Journal of Chemical Physics*, **70**(6), 2877–2881.
- KIDA. [online databáze]. [cit. 15. 4. 2016] Dostupné z: URL <http://kida.obs.u-bordeaux1.fr/>.
- LANGMUIR, I. (1928). Oscillations in ionized gases. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **14**(2), 627–637.
- LARSSON, R. a OREL, A. E. (2008). *Dissociative Recombination of Molecular Ions*. Cambridge University Press, Cambridge.
- MARTIN, D. W., WEISER, C., SPERLEIN, R. F., BERNFELD, D. L. a SISK, P. E. (1989). Collision energy dependence of product branching in Penning ionization: $\text{He}^*(2^1s, 2^3s) + \text{H}_2, \text{D}_2, \text{and HD}$. *The Journal of Chemical Physics*, **90**(3), 1564–1576.
- MORGAN, W. a PENETRANTE, B. (1990). ELENDIF: A time-dependent Boltzmann solver for partially ionized plasmas. *Computer Physics Communications*, **58**(1), 127 – 152.
- OKA, T. (2013). Interstellar H_3^+ . *Chemical Reviews*, **113**(12), 8738–8761.
- PALLA, F., SALPETER, E. E. a STAHLER, S. W. (1983). Primordial star formation - The role of molecular hydrogen. *Astrophysical Journal*, **271**, 632–641.
- PHELPS, A. V. Compilation of electron cross sections. [online]. Release Date: June 24, 2008 [cit. 10. 3. 2016]. Dostupné z: http://jilawww.colorado.edu/avp/collision_data.
- PLAŠIL, R., ZYMAK, I., JUSKO, P., MULIN, D., GERLICH, D. a GLOŠÍK, J. (2012). Stabilization of $\text{H}^+ \text{H}_2$ collision complexes between 11 and 28k. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **370**(1978), 5066–5073.

- POLLARD, J. E., JOHNSON, L. K., LICHTIN, D. A. a COHEN, R. B. (1991). State-selected reactive scattering. I. $\text{H}_2^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_3^+ + \text{H}$. *The Journal of Chemical Physics*, **95**(7), 4877–4893.
- REITER, D. The Data File HYDHEL: Atomic and Molecular Data for EIRENE. [online]. Release Date: March 15, 2016 [cit. 15. 4. 2016]. Dostupné z: <http://www.eirene.de/html/hydhel.html>.
- ROUČKA, Š. (2012). *Laboratory astrochemistry and applications of computer simulations*. Disertační práce, MFF UK.
- SPITZER, L. (2004). *Physical Processes in the Interstellar Medium*. Wiley-VCH Verlag GmbH.
- STEVEFELT, J., BOULMER, J. a DELPECH, J. F. (1975). Collisional-radiative recombination in cold plasmas. *Phys. Rev. A*, **12**, 1246–1251.
- THEARD, L. P. a HUNTRESS, W. T. (1974). Ion-molecule reactions and vibrational deactivation of H_2^+ ions in mixtures of hydrogen and helium. *The Journal of Chemical Physics*, **60**(7), 2840–2848.
- VANKAN, P., SCHRAM, D. a ENGELN, R. (2004). High rotational excitation of molecular hydrogen in plasmas. *Chemical Physics Letters*, **400**(1-3), 196–200.

Seznam obrázků

1	Teplota elektronů jako funkce tlaku helia a vibrační teploty vybuzených molekul vodíku	3
2	Teplota elektronů jako funkce tlaku helia a rotační teploty vybuzených molekul vodíku.	4
1.1	Ilustrace pro odvození účinného průřezu.	8
3.1	Schéma měřicí aparatury SA-CRDS, převzato z (Dohnal, 2013), kde lze také nalézt podrobnější popis funkce aparatury.	21
3.2	Elektronové rozdělovací funkce v závislosti na E/n	22
3.3	Účinné průřezy pro elastické srážky neutrálních částic s elektrony.	23
3.4	Vývoj koncentrací v aktivním výboji pro elektrické pole 6,28 Td. Legenda je řazena dle výsledných koncentrací od největší po nejmenší.	28
3.5	Vývoj koncentrací v aktivním výboji pro elektrické pole 6,61 Td. Legenda je řazena dle výsledných koncentrací od největší po nejmenší.	29
3.6	Srovnání užitých rozdělovacích funkcí a k nim přiřazeným Maxwellovým.	31
3.7	Vývoj koncentrací vibračně excitovaných molekul vodíku.	32
3.8	Vývoj koncentrací vibračních hladin H_2 po vypnutí výboje.	34
3.9	Vývoj elektronové teploty po vypnutí výboje.	34
3.10	Graf srovnávající experimentální data s teoretickým výpočtem. Shody dosaženo při nulovém vlivu CRR. Přebráno z (Dohnal a kol., 2012).	35
3.11	Vývoj koncentrací po vypnutí výboje. Legenda je řazena dle výsledných koncentrací od největší po nejmenší.	35

Seznam tabulek

3.1	Výchozí podmínky.	21
3.2	Reakce pro výpočet elektronové rozdělovací funkce.	24
3.3	Uvažované procesy mezi elektrony a ostatními částicemi. Označení DR znamená výpočet dle principu detailní rovnováhy.	25
3.4	Relativní rozdíl mezi rychlostními koeficienty pro elektrická pole o intenzitě 6,61 Td a 6,28 Td.	26
3.5	Uvažované procesy mezi ionty a neutrálními částicemi.	27
3.6	Výsledné koncentrace při aktivním výboji.	30
3.7	Sledování příspěvků k vývoji koncentrace $H_2(v = 1)$ ve vybraných časech po zhasnutí výboje.	32
3.8	Sledování příspěvků k vývoji elektronové teploty ve vybraných časech po zhasnutí výboje.	33

Přílohy

K tištěné verzi je přiloženo DVD s programem.