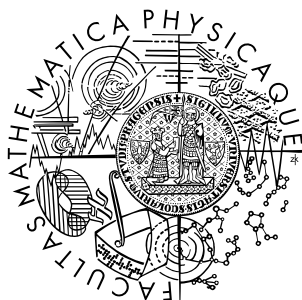


Univerzita Karlova v Praze  
Matematicko-fyzikální fakulta

## BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Štěpán Roučka

### Počítačové modelování interakce nízkoteplotního plazmatu s pevnými látkami

Katedra elektroniky a vakuové fyziky

Vedoucí bakalářské práce: Prof. RNDr. Rudolf Hrach, DrSc.

Studijní program: Obecná fyzika

2006

Děkuji především svému vedoucímu Prof. RNDr. Rudolfu Hrachovi DrSc. za cenné informace poskytnuté při konzultacích. Také děkuji ostatním pracovníkům KEVF, kteří svými připomínkami přispěli ke zvýšení kvality této práce. Za nezbytnou podporu při studiu děkuji svým rodičům. V neposlední řadě patří můj dík také autorům svobodného software, který byl výhradně použit při tvorbě této práce.

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce a jejím zveřejňováním.

V Praze dne

Štěpán Roučka

# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Současné poznatky fyziky plazmatu</b>	<b>5</b>
2.1	Plazma . . . . .	5
2.2	Doutnavý výboj . . . . .	7
2.3	Interakce . . . . .	7
2.4	Sondová diagnostika plazmatu . . . . .	10
2.5	Simulace ve fyzice plazmatu . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Model</b>	<b>14</b>
3.1	Řešení Poissonovy rovnice . . . . .	16
3.2	Řešení pohybových rovnic . . . . .	18
3.3	Interakce . . . . .	18
3.4	Optimalizace . . . . .	23
3.5	Generátor toku částic . . . . .	27
<b>4</b>	<b>Výpočet energetického rozdělení částic</b>	<b>33</b>
4.1	Neselfkonzistentní model . . . . .	33
4.2	Rozdělení elektronů . . . . .	34
4.3	Rozdělení iontů . . . . .	35
<b>5</b>	<b>Dvourozměrný model</b>	<b>41</b>
5.1	Řešení Poissonovy rovnice . . . . .	41
5.2	Potenciál v okolí válcové sondy . . . . .	42
<b>6</b>	<b>Závěr</b>	<b>44</b>
<b>A</b>	<b>Přehled fyzikálních konstant a parametrů modelu</b>	<b>45</b>
	<b>Literatura</b>	<b>46</b>

Název práce: Počítačové modelování interakce nízkoteplotního plazmatu s pevnými látkami

Autor: Štěpán Roučka

Katedra (ústav): Katedra elektroniky a vakuové fyziky

Vedoucí bakalářské práce: Prof. RNDr. Rudolf Hrach, DrSc.

e-mail vedoucího: `rudolf.hrach@mff.cuni.cz`

Abstrakt: Cílem práce je vytvoření jednorozměrného a dvourozměrného modelu interakce plazmatu s vodivou sondou. Jednorozměrný model bude vytvořen za předpokladu rovinné symetrie. Předpokladem dvourozměrného modelu je translační symetrie vzhledem k jedné ose. Implementace modelu je podrobně popsána v textu. Použití modelů je demonstrováno na výpočtu rychlostního rozdělení částic v různých oblastech plazmatu pomocí jednorozměrného modelu a na výpočtu elektrostatického potenciálu v okolí válcové sondy pomocí dvourozměrného modelu.

Klíčová slova: plazma, simulace, stínící vrstva

Title: Computer modelling of plasma-solid interaction

Author: Štěpán Roučka

Department: Department of Electronics and Vacuum Physics

Supervisor: Prof. RNDr. Rudolf Hrach, DrSc.

Supervisor's e-mail address: `rudolf.hrach@mff.cuni.cz`

Abstract: This thesis is aimed at creating one-dimensional and two-dimensional model of interaction between plasma and conductive probe. The one-dimensional model is created assuming planar symmetry. The assumption of the two-dimensional model is translational symmetry with respect to one axis. Implementation of the model is described in the text in detail. Usage of models is demonstrated by computing velocity distribution of particles in different regions using one-dimensional model and by computing electrostatic potential in the vicinity of cylindrical probe using two-dimensional model.

Keywords: plasma, simulation, sheath

# Kapitola 1

## Úvod

Ve fyzice plazmatu existuje mnoho problémů, které jsou jen stěží analyticky řešitelné. Lépe řečeno, existuje jen málo problémů, které *jsou* analyticky řešitelné. I pro tak zdánlivě jednoduchý problém, jako je proud tekoucí na vodivou sondu vnořenou do plazmatu, existuje několik teorií, které se s užitím různých aproximací snaží o co možná nejlepší popis v oblasti své platnosti. Obvykle jsou tyto teorie silně omezeny svými předpoklady o probíhajících interakcích, tlaku a geometrii systému. Pokud chceme zkoumat chování plazmatu, ve kterém probíhají složitější interakce, jako například chemické reakce, je základní metodou samozřejmě experiment. Měření v plazmatu a následná interpretace naměřených dat jsou však samy o sobě velmi komplikované. Proto je výhodné umět provádět počítačové simulace prováděných experimentů, nebo také experimentů, jejichž realizace by byla příliš technicky náročná.

Právě na počítačovou simulaci plazmatu je zaměřena tato práce. Budeme se zabývat částicovou počítačovou simulací, což je, při znalosti vstupních dat jako jsou účinné průřezy interakcí, v principu velmi přesná metoda. Hlavní omezení této metody vyplývá z velké výpočetní náročnosti. Jako základ bude nejprve vytvořen jednorozměrný model interakce plazmatu s pevnou látkou (kap. 3). Na základě tohoto modelu bude potom vytvořen dvourozměrný model (kap. 5).

# Kapitola 2

## Současné poznatky fyziky plazmatu

### 2.1 Plazma

Pojem plazmatu poprvé použil I. Langmuir [1] v roce 1928 v souvislosti s výzkumem silně ionizovaných plynů za nízkého tlaku. Nazval tak tu část objemu plynu, ve které je vyrovnaný náboj iontů a elektronů. Plazma je dle [2], str. 19 definováno jako „kvazineutrální plyn nabitých a neutrálních částic, který vykazuje kolektivní chování”.

Kolektivní chování je způsobeno ionizací částic v plazmatu. Pohybem a změnou koncentrace nabitých částic totiž vzniká elektromagnetické pole, jehož dosah je mnohem větší než v případě například Van der Waalsovy interakce, kterou interagují neutrální částice. Lokální změna v rozložení částic tedy může způsobit odezvu i ve vzdálených oblastech plazmatu.

Kvazineutralita souvisí se stínící schopností plazmatu, jež bude nyní vysvětlena. Avšak dříve než zavedeme pojem kvazineutrality je nutné definovat *teplotu* plazmatu.

Pokud se plyn nachází v tepelné rovnováze, je rozdělení rychlostí jeho částic dáno Maxwellovým rozdělením. Distribuční funkce pro složku rychlosti  $v_i$  potom nabývá tvaru

$$f(v_i) dv_i = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \exp\left(-\frac{mv_i^2}{2k_B T}\right) dv_i, \quad (2.1)$$

kde  $m$  je hmotnost částic,  $k_B$  značí Boltzmannovu konstantu a parametr  $T$  nazýváme teplota. Plazma se skládá z několika složek, mezi něž patří elektrony a obecně ionty různých atomů či molekul s různým stupněm ionizace. Rozdělovací funkce jednotlivých složek plazmatu mohou být různé a tím pádem se mohou lišit i jejich teploty. Dokonce i distribuční funkce pro průmět rychlosti jedné složky do různých směrů může mít různý tvar a teplota je potom anizotropní veličina. Pokud lze všechny částice v plazmatu charakterizovat jedinou teplotou, mluvíme o izotermickém plazmatu, naopak v případě různých teplot pro různé složky se

jedná o neizotermické plazma.

Nyní se již můžeme vrátit k problematice stínění. Když je do plazmatu vnořen určitý náboj nebo objekt s daným potenciálem, jsou k tomuto objektu přitahovány nabitě částice opačné polarity a částice stejné polarity jsou naopak odpuzovány. Tím dochází k odstínění vlivu vloženého náboje a výsledkem je exponenciální pokles potenciálu se vzdáleností od náboje. Podle první teorie stínění, kterou podali Debye a Hückel [3] je charakteristickou vzdáleností poklesu potenciálu takzvaná Debyeova vzdálenost

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B}{\sum_i q_i^2 n_i / T_i}}, \quad (2.2)$$

kde  $\varepsilon_0$  značí permitivitu vakua a  $k_B$  Boltzmannovu konstantu. Suma probíhá přes všechny složky plazmatu, jež mají teplotu  $T_i$ , náboj  $q_i$  a objemovou hustotu  $n_i$ . Oblast v okolí náboje, ve které dochází k odstínění náboje se nazývá stínící vrstva (sheath).

V případě, že se vložený náboj rychle pohybuje, nebo existuje pouze krátkodobě, dojde k tomu, že ionty, které jsou řádově těžší než elektrony, nestihnou zaujmout rovnovážné rozložení. Tvar stínící oblasti je potom dán pouze rozložením elektronů a vztah (2.2) tak přechází do tvaru

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{q_e^2 n_e}}. \quad (2.3)$$

Ve vzdálenosti několika  $\lambda_D$  od náboje bude tedy elektrické pole téměř odstíněno, až na fluktuace řádu  $k_B T_e / q_e$  způsobené tepleným pohybem. O plazmatu říkáme, že je kvazineutrální v případě, že můžeme položit  $n_i \approx n_e \equiv n$ , kde  $n_i$  resp.  $n_e$  je objemová hustota iontů resp. elektronů. Aby byla splněna kvazineutralita, je nutné, aby byla odstíněna vnější elektrická pole. Pro rozměr systému  $L$  potom musí platit

$$L \gg \lambda_D. \quad (2.4)$$

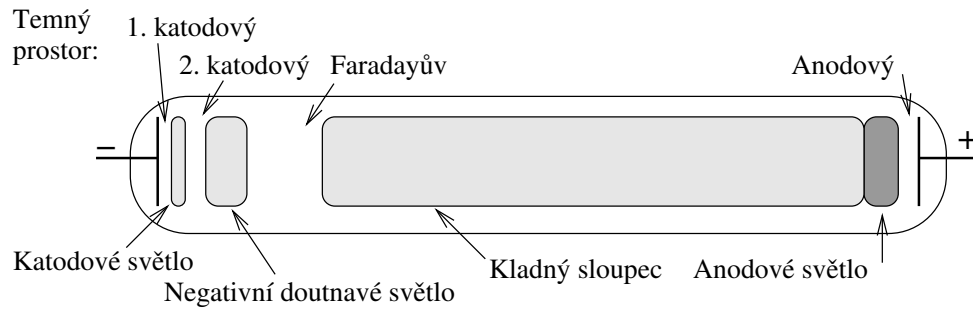
Pro fungování mechanismu stínění je nutné, aby v oblasti o lineárních rozměrech  $\lambda_D$  bylo statisticky významné množství částic, tedy

$$N_D \gg 1, \quad (2.5)$$

kde  $N_D$  je počet nabitých částic v kouli o poloměru  $\lambda_D$ . Poslední podmínkou pro existenci plazmatu je

$$\omega \tau > 1, \quad (2.6)$$

kde  $\omega$  značí frekvenci typických oscilací plazmatu a  $\tau$  je srážková frekvence částic. Tato podmínka zajišťuje dostatečný vliv elektromagnetických sil ve srovnání s působením srážkových procesů. Podmínky (2.4)-(2.6) jsou v přírodě splněny až překvapivě často. Dokonce naprostá většina pozorované hmoty ve vesmíru je



**Obrázek 2.1:** Schéma doutnavého výboje

tvořena plazmatem. Z plazmatu sestávají hvězdy, mlhoviny i meziplanetární a mezihvězdné médium. Na zemském povrchu je však přírodní plazma poměrně vzácné, můžeme ho pozorovat například v podobě bleskových výbojů nebo ohně. Častěji se setkáváme s umělým plazmatem ve formě náplní zářivek, laserů, plazmových obrazovek a podobně.

## 2.2 Doutnavý výboj

Předmětem výzkumu této práce je plazma vznikající kladným sloupci doutnavého výboje v argonu. Doutnavý výboj se skládá z několika oblastí, jejichž rozložení je schematicky znázorněno v obrázku 2.1. Kladný sloupec se nachází poblíž anody, přičemž je od ní oddělen tenkou vrstvou temné anodové oblasti. V této oblasti je pouze slabé elektrické pole a plyn zde obsažený splňuje podmínky plazmatu.

Doutnavý výboj vzniká za relativně nízkých tlaků  $p \approx 10 - 1000$  Pa. Ve všech výpočtech uvažujeme tlak  $p = 133$  Pa = 1 Torr. Teplota iontů  $T_i$  je přibližně rovna teplotě neutrálních atomů, zatímco teplota elektronů  $T_e$  dosahuje hodnot řádově  $10^4$  až  $10^5$  K. Jde tedy o neizotermické plazma. V modelových výpočtech počítáme s  $T_i = 300$  K a  $T_e = 23\,209$  K. Stupeň ionizace je nízký ( $10^{-6}$  až  $10^{-4}$ ), uvažujeme proto koncentraci náboje  $n_e = 10^{15}$  m $^{-3}$ .

## 2.3 Interakce

Kromě dalekodosahového působení elektromagnetických sil je pohyb částic v plazmatu určován především srážkovými interakcemi. Srážkových procesů existuje mnoho druhů. Patří mezi ně pružný rozptyl, přenos náboje, mnoho různých ionizačních a excitačních procesů a často také chemické reakce. Jelikož předmětem zkoumání je kladný sloupec doutnavého výboje v argonu, budou nyní uvedeny dominantní reakce probíhající v této oblasti. Coulombická interakce mezi nabitými částicemi je započtena pouze metodou Particle in Cell, jež bude popsána v kapitole 3.



**Pružný rozptyl iontu na atomu** Při pružném rozptylu iontu na atomu nedochází ke ztrátě kinetické energie. K započtení následků této interakce nám tedy poslouží zákony zachování energie a hybnosti. Budeme postupovat obecně, bez nějakých požadavků na hmotnosti či náboje částic. Nejprve označíme rychlost první resp. druhé interagující částice před srážkou symboly  $v_1$  resp.  $v_2$ . Index  $_{\text{CM}}$  značí, že rychlost je přepočítána do souřadné soustavy spojené s těžištěm, zatímco symbol  $'$  znamená, že jde o rychlost po srážce. Aniž bychom výpočet podstatně zesložili, můžeme provést zobecnění i na případ nepružné srážky. V případě, že se při interakci ztratí nějaká kinetická energie  $E_i$  například ionizací nebo excitací atomu, můžeme psát

$$T' = T - E_i, \quad (2.7)$$

kde  $T$  značí kinetickou energii soustavy. Nyní předpokládejme, že druhá částice je neutrální a bude nás tedy zajímat pouze stav první částice po srážce. Srážkový proces je vhodné analyzovat v těžišťové souřadné soustavě. Přejít do této soustavy se provede následující transformací:

$$\mathbf{v}_{1\text{CM}} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_{\text{CM}}, \quad \mathbf{v}_{\text{CM}} = \frac{M_1 \mathbf{v}_1 + M_2 \mathbf{v}_2}{M_1 + M_2}. \quad (2.8)$$

Nyní započteme následky srážky. Ze zákonů zachování energie a hybnosti plyne v těžišťové soustavě vztah pro rychlost částice po srážce

$$v_{1\text{CM}}'^2 = v_{1\text{CM}}^2 - \frac{2E_i M_2}{M_1(M_1 + M_2)}. \quad (2.9)$$

O pružném rozptylu předpokládáme, že je izotropní v těžišťové soustavě. Pokud označíme  $\mathbf{R}$  jednotkový vektor s rovnoměrným úhlovým rozdělením, platí pro výslednou rychlost

$$\mathbf{v}'_{1\text{CM}} = v'_{1\text{CM}} \mathbf{R}. \quad (2.10)$$

Nakonec transformujeme rychlost zpět do laboratorní soustavy, čímž dostaneme výslednou rychlost po srážce

$$\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}'_{1\text{CM}} + \mathbf{v}_{\text{CM}}. \quad (2.11)$$

**Rezonanční přenos náboje** Při rezonančním přenosu náboje přechází jeden z elektronů neutrálního atomu na kladný iont. Nedochází k předání hybnosti. K přenosu může docházet i mezi různými prvky, aby však taková reakce proběhla, musí být ionizační potenciál iontu alespoň tak velký jako ionizační potenciál atomu.

**Pružná srážka elektronu s atomem** Ačkoliv by bylo možné počítat pružnou srážku elektronu s atomem naprosto stejně jako výše uvedenou srážku iontu s atomem, bude výhodné provést určitá zanedbání vyplývající z vysoké teploty a nízké hmotnosti elektronů. Vzhledem k tomu, že teplota atomů je řádově nižší

než teplota elektronů, a navíc jejich hmotnost je řádově vyšší, předpokládáme, že interagující atomy jsou nehybné. Určíme tedy ztrátu energie při pružném rozptylu v laboratorní soustavě. Orientujeme soustavu souřadnou tak, že částice se pohybuje ve směru osy  $x$ . Platí tedy

$$\mathbf{v}_1 = (v_1, 0, 0), \quad \mathbf{v}_2 = 0, \quad \mathbf{v}_{\text{CM}} = \mathbf{v}_1 \frac{M_1}{M_1 + M_2}. \quad (2.12)$$

Transformací do těžiškové soustavy dostáváme

$$\mathbf{v}_{1\text{CM}} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_{\text{CM}} = \mathbf{v}_1 \frac{M_2}{M_1 + M_2}. \quad (2.13)$$

Nyní provedeme rotaci rychlosti

$$\mathbf{v}'_{1\text{CM}} = v_1 \frac{M_2}{M_1 + M_2} (\cos \theta, \sin \theta \sin \phi, \sin \theta \cos \phi). \quad (2.14)$$

Pokud je rotace izotropní, platí pro úhly rozptylu vztahy

$$\cos \theta \in U(-1, 1), \quad \phi \in U(0, 2\pi),$$

kde  $U(a, b)$  značí rovnoměrné rozdělení na intervalu  $(a, b)$ . Zpětnou transformací dostáváme výslednou rychlost

$$\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}'_{1\text{CM}} + \mathbf{v}_{\text{CM}} = \frac{v_1}{M_1 + M_2} (M_2 \cos \theta + M_1, M_2 \sin \theta \sin \phi, M_2 \sin \theta \cos \phi). \quad (2.15)$$

Pro určení změny kinetické energie  $T$  vypočtu kvadrát rychlosti

$$\begin{aligned} v_1'^2 &= \frac{v_1^2}{(M_1 + M_2)^2} (M_2^2 + 2M_1M_2 \cos \theta + M_1^2) = \\ &= v_1^2 \left( 1 + 2 \frac{M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} (\cos \theta - 1) \right), \end{aligned} \quad (2.16)$$

což lze při označení  $\cos \theta = 1 - 2\gamma$ ,  $\gamma \in U(0, 1)$  a v přiblížení pro  $M_2 \gg M_1$  psát jako

$$v_1'^2 = v_1^2 \left( 1 - 4\gamma \frac{M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \right) \approx v_1^2 \left( 1 - 4\gamma \frac{M_1}{M_2} \right). \quad (2.17)$$

Při pružném rozptylu elektronu hmotnosti  $M_1$  na atomu hmotnosti  $M_2$  dochází tedy ke ztrátě energie elektronu o střední hodnotě  $2M_1/M_2 \cdot T$ .

**Excitace atomu elektronem** Při excitaci se přesně daná část kinetické energie částic přemění v potenciální energii elektronů v atomu. Změna energie je způsobena přechodem elektronu v atomu na vyšší energetickou hladinu. Obecně dochází k mnoha různým přechodům, při nichž se vyměňují různé excitační energie. Pokud nás nezajímají optické vlastnosti plazmatu, které jsou dány do velké míry

právě energetickými přechody v atomech, stačí vybrat jediný přechod, který je za daných podmínek dominantní. Pro potřeby modelu uvažujeme pouze dominantní přechod s excitační energií  $E_e = 11,55$  eV.

Při excitaci dochází také předání kinetické energie atomu podobně jako při pružném rozptylu elektronu na atomu, ve srovnání s excitační energií je však tato ztráta zanedbatelná.

**Ionizace atomu elektronem** Při ionizaci předá volný elektron jednomu z elektronů v atomu dostatek energie na opuštění elektronového obalu. Část kinetické energie – ionizační energie  $E_i$  – se při této interakci přemění v potenciální energii. Zbylá energie se rozdělí mezi volné elektrony. Ionizační energie argonu je  $E_i = 15,76$  eV. Ionizaci způsobenou únikem excitovaného elektronu nebo elektronu z hlubších energetických hladin neuvažujeme.

### 2.3.1 Účinný průřez

Pravděpodobnost realizace určitého srážkového procesu je dána jeho mikroskopickým účinným průřezem  $\sigma$ . V případě, že by částice byly tvořeny tuhými koulemi, má účinný průřez jednoduchou geometrickou interpretaci jako plocha kruhu o poloměru rovném součtu poloměrů částic. V případě jednoduchého modelu částice pohybující se v prostředí nehybných rozptylových center – částic je hustota předvěděpodobnosti pro dolet částice do vzdálenosti  $x$  dána vztahem

$$f(x)dx = n\sigma e^{-n\sigma x}, \quad (2.18)$$

kde  $n$  je hustota rozptylových center. Střední hodnota tohoto rozdělení

$$\lambda = \frac{1}{n\sigma} \quad (2.19)$$

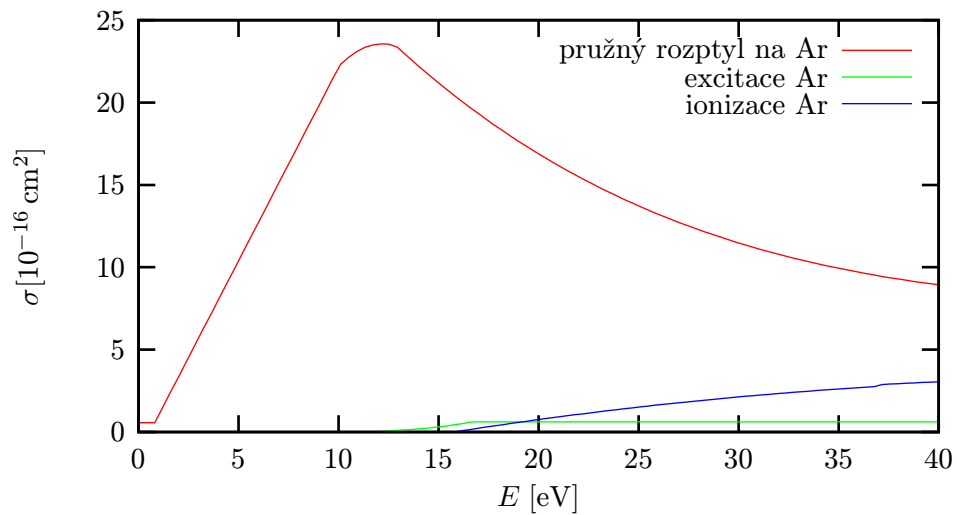
se nazývá střední volná dráha. Pokud může docházet k více různým interakcím, je výsledná střední volná dráha dána vztahem

$$\frac{1}{\lambda} = \sum \frac{1}{\sigma_i n_i}, \quad (2.20)$$

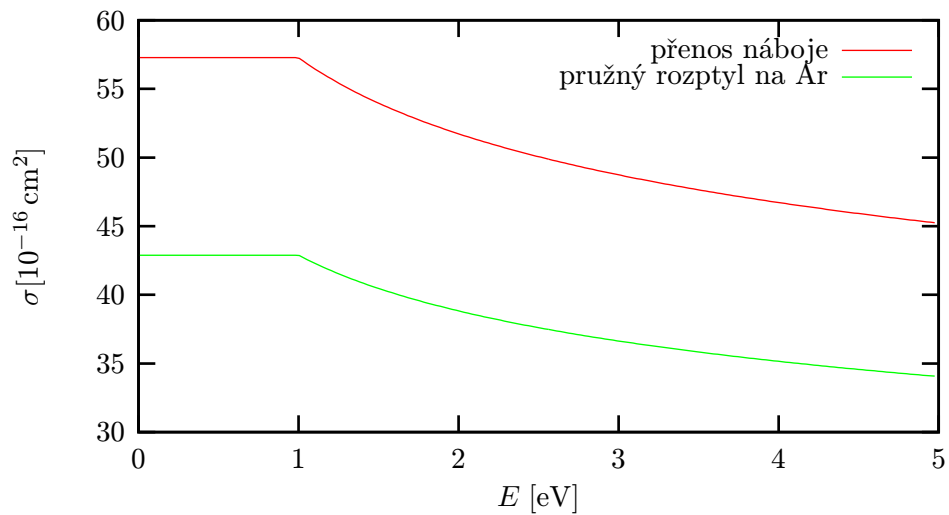
kde účinné průřezy jednotlivých interakcí mohou být energeticky závislé. Účinné průřezy popsaných interakcí byly experimentálně zjištěny [4]. Aproximace jejich energetických závislostí pomocí po částech polynomiálních resp. mocninných funkcí dle [5] jsou vyneseny v grafech 2.2 a 2.3. Konstantnost závislostí pro ionty o nízkých energiích je způsobena nedostatkem experimentálních dat.

## 2.4 Sondová diagnostika plazmatu

Sondová diagnostika je jednou ze základních metod diagnostiky plazmatu. Její princip spočívá ve vložení jedné nebo více vodivých sond do objemu plazmatu.



**Obrázek 2.2:** Účinné průřezy interakcí elektronů v závislosti na energii



**Obrázek 2.3:** Účinné průřezy interakcí iontů v závislosti na energii

Tyto sondy jsou obvykle nazývány *Langmuirovy sondy*. V případě metody jedné sondy je na sondu přivedeno napětí vztahované k referenční elektrodě, obvykle anodě. Měřením voltampérové charakteristiky lze potom určit koncentraci nabitých částic, potenciál plazmatu nebo dokonce energetické rozdělení elektronů. Interpretace naměřených výsledků je však velmi složitá. První teorii vysvětlující výsledky sondových měření na základě distribuční funkce částic v některých speciálních případech podali Mott-Smith a Langmuir [6]. Tato teorie ovšem zanedbává srážkové procesy v oblasti stínící vrstvy, je tedy použitelná pouze za nízkých tlaků. Srovnání různých teorií Langmuirovy sondy lze nalézt v [7]. Užitečnou metodou umožňující lepší pochopení interakce plazmatu se sondou je počítačová simulace [8].

## 2.5 Simulace ve fyzice plazmatu

Simulace ve fyzice plazmatu lze rozdělit do dvou základních skupin na tak zvané spojité a částicové modely. Spojité modely přistupují k jednotlivým složkám plazmatu jako ke kontinuu. Plazma je v tomto případě popsáno soustavou parciálních diferenciálních rovnic, jejichž řešením dostaneme informaci o hustotě a rychlosti toku jednotlivých složek. Řešená soustava je typicky tvořena rovnicí kontinuity

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{v}) = S, \quad (2.21)$$

kde  $n = \int f d\mathbf{p}$  je objemová koncentrace,  $\mathbf{v} = \int \mathbf{p} f d\mathbf{p} / mn$  je rychlost toku a  $S$  je zdrojový člen, daný například ionizací. Symbol  $f$  značí rozdělovací funkci. Dále máme pohybovou rovnici

$$mn \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = qn(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \nabla p - mn\nu\mathbf{v}, \quad (2.22)$$

kde  $q$  resp.  $m$  jsou náboj resp. hmotnost částice a  $\nu$  značí srážkovou frekvenci. V případě rovnovážného stavu musí částice také splňovat Boltzmannovo rozdělení, tedy

$$n = n_0 \exp \left( -\frac{q\phi}{k_B T} \right). \quad (2.23)$$

Elektromagnetické pole je navíc svázáno s koncentrací a tokem částic Maxwellovými rovnicemi

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \nabla^2 \phi = \sum n_i q_i / \varepsilon_0, \quad (2.24)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (2.25)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.26)$$

$$\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{B} = \sum q_i \mathbf{v}_i n_i + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}. \quad (2.27)$$

Řešením vhodné kombinace těchto rovnic pro jednotlivé složky lze dosáhnout výsledků, které jsou v dobré shodě s experimentem. Problém ovšem nastává, pokud v systému hrají významnou roli nelokální efekty způsobené například nezanebatelnou volnou drahou elektronů [9]. Další chybou těchto modelů je neznalost rozdělení rychlostí částic.

Přístupem k plazmatu na nižší úrovni je řešení Boltzmannovy transportní rovnice

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} f \cdot \mathbf{p}/m + \nabla_{\mathbf{p}} f \cdot \mathbf{F} = \Omega, \quad (2.28)$$

kteřá udává vývoj distribuční funkce  $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$  v čase.  $\Omega$  značí srážkový člen. V tomto případě máme tedy plnou informaci o distribuční funkci částic v plazmatu. Zákony zachování (2.21) a (2.22) lze potom chápat jako pouhé momenty této rovnice ve tvaru  $\int \mathbf{p}^n (2.28) d\mathbf{p}$ .

Přístupem na nejnižší úrovni je potom částicový model, který chápe plazma jako soubor částic, jejichž pohyb je dán Newtonovými zákony. V této práci je použit částicový model typu Particle in Cell. Tento model spočívá ve vypočtení nábojové hustoty na stanovené prostorové mříži a následném řešení Poissonovy rovnice (2.24). Částice se potom pohybují v silovém poli, které je určeno na mříži. Jako s částicemi zacházíme pouze s elektrony a ionty, neutrální atomy považujeme za homogenní kontinuum, jehož vliv je do modelu započítán pomocí srážkových procesů.

Srážkové procesy jsou do tohoto typu modelu přidávány metodou Monte Carlo. Na základě známých účinných průřezů uvažovaných interakcí je pro každou částici rozehrána náhodná volná dráha. Poté, co částice svou náhodnou volnou dráhu urazí, je realizována srážka.

Existuje několik požadavků, které musí splňovat zvolený časový krok  $\Delta t$ , krok mříže  $\Delta x$  a počet částic  $N$ . Časový krok  $\Delta t$  musí být menší než typická perioda dějů v plazmatu daná plazmovou frekvencí, frekvencí vnějšího pole a srážkovou frekvencí. Rozměr mřížové buňky musí být menší než typický rozměr plazmatu daný Debyeovou délkou případně tloušťkou stínící vrstvy. Tyto rozměry jsou navíc svázány Courantovou podmínkou  $v\Delta t/\Delta x < 1$ , kde  $v$  je rychlost částic. Počet částic  $N$  musí být dostatečný pro zaručení nízké úrovně šumu. Pro omezení numerického ohřevu by navíc počet částic na jednu buňku prostorové mříže měl být řádu desítek či více [9]. Vše je však omezeno výpočetní silou použitého hardwaru a časovými možnostmi.

Výhodou částicového přístupu oproti spojitým modelům je přesné postihnutí všech jevů v plazmatu. Velkou nevýhodou je však značná výpočetní náročnost těchto modelů. Sofistikovanější tzv. hybridní modely proto využívají kombinace spojitého a částicového přístupu například tím způsobem, že částice zodpovědné za efekty nepostihnutelné ve spojitém modelu jsou započítány částicovým modelem, zatímco zbytek plazmatu je považován za kontinuum.

# Kapitola 3

## Model

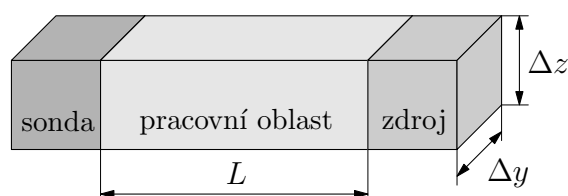
Základním předpokladem je rovinná symetrie systému. Ta způsobuje neexistenci sil ve směru rovnoběžném s rovinou symetrie. Soustava souřadná je orientována tak, aby osa  $x$  byla kolmá na rovinu symetrie. Polohu částic, ani směr jejich pohybu v rovině symetrie není nutné uvažovat, neboť nemají vliv na vývoj systému.

Konfigurace počítačového experimentu je znázorněna na obrázku 3.1. Mezi sondou a neporušené plazma je přivedeno napětí  $U_S$ . Na počátku jsou částice rozmístěny tak, že hustota pravděpodobnosti výskytu částice je nulová na povrchu sondy a lineárně stoupá až k hranici s neporušeným plazmatem (zdrojem), kde spojitě navazuje na hustotu v neporušeném plazmatu. Náhodná počáteční poloha částice  $x$  je generována vztahem

$$x = L\sqrt{\gamma}, \quad \gamma \in U(0, 1), \quad (3.1)$$

kde  $L$  je délka pracovní oblasti a  $U(0, 1)$  značí rovnoměrné rozdělení pravděpodobnosti na intervalu  $(0, 1)$ . Poloha částice ve zbývajících souřadnicích je v rovině symetrii irelevantní a částice ji nemají. Rozměry pracovní oblasti  $\Delta y$  a  $\Delta z$ , respektive jejich součin, jsou důležité pouze pro výpočet nábojové hustoty. Tyto rozměry jsou určeny ze sešívací podmínky pro hustotu na rozhraní pracovní oblasti s neporušeným plazmatem

$$\Delta x \Delta y = \frac{N}{2Ln}, \quad (3.2)$$



**Obrázek 3.1:** Schéma uspořádání experimentu

kde  $N$  značí počet iontů v pracovní oblasti a  $n$  je hustota iontů v neporušeném plazmatu. Na počátku podléhají rychlosti částic Maxwellovu rozdělení, tedy hustota pravděpodobnosti pro složku rychlosti  $v_i$  je dána vztahem

$$f(v_i)dv_i = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \exp\left(\frac{-mv_i^2}{2k_B T}\right) dv_i, \quad (3.3)$$

kde  $T$  resp.  $m$  je teplota resp. hmotnost částic a  $k_B$  značí Boltzmannovu konstantu. Rozdělení celkové rychlosti potom je

$$f(v)dv = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{-mv^2}{2k_B T}\right) dv. \quad (3.4)$$

Pro každou částici je na počátku vygenerována celková rychlost metodou inverzní distribuční funkce, přičemž hodnoty inverzní distribuční funkce jsou vypočteny numericky a tabelovány pro 1000 hodnot rychlosti. Jediná složka rychlosti, jejíž velikost je nutné znát, je složka ve směru osy  $x$ . Tuto složku generujeme z celkové rychlosti vztahem

$$v_x = (2\gamma - 1)v, \quad \gamma \in U(0, 1), \quad (3.5)$$

jenž vychází ze vztahů pro rozehraní náhodného směru.

Zdroj je v nejjednodušším modelu tvořen simulací malé oblasti neporušeného plazmatu. V oblasti zdroje nejsou uvažovány žádné síly, ani interakce mezi částicemi. Částice zdroje mají taktéž maxwellovské rozdělení rychlostí. Řešení pohybových rovnic se s této oblasti redukuje na posun v poloze o  $v_x \Delta t$  po každém časovém kroku  $\Delta t$ . Tato oblast má periodické okrajové podmínky. Pokud ovšem částice dorazí na rozhraní s pracovní oblastí, je jednak v souladu s periodickými okrajovými podmínkami posunuta na protilehlou hranici zdroje, navíc však její kopie pokračuje v pohybu směrem do pracovní oblasti. Takto je generován maxwellovský tok směrem do pracovní oblasti. Rozdělení pravděpodobnosti pro  $x$ -ovou složku rychlosti těchto částic je popsáno vztahem

$$f(v_x)dv_x = \frac{m}{k_B T} v_x \exp\left(\frac{-mv_x^2}{2k_B T}\right) dv_x. \quad (3.6)$$

Z hlediska generování toku do pracovní oblasti mají význam pouze částice pohybující se směrem do pracovní oblasti. Částice s opačným směrem pohybu nejsou ve zdroji obsaženy. Odvození vztahu (3.6) je možné nalézt v kapitole 3.5.

Simulace je provedena metodou molekulární dynamiky, přičemž silové působení částic je vypočítáváno metodou Particle In Cell. Interakce částic jsou do modelu přidávány metodou Monte Carlo. Algoritmus výpočtu lze symbolicky zapsat následovně



**pro**  $t = 0 \dots t_{\max}$   
 řešení Poissonovy rovnice  
**pro** všechny částice  
 řešení pohyb. rovnic  
 srážky  
 opuštění prac. oblasti  
 výpočet nábojové hustoty  
 dodání částic ze zdroje

Podrobné vysvětlení jednotlivých kroků obsahují následující podkapitoly.

### 3.1 Řešení Poissonovy rovnice

Výpočet silového působení metodou Particle in Cell vyžaduje řešení Poissonovy rovnice

$$\nabla^2 U = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}. \quad (3.7)$$

Za předpokladu rovinné symetrie lze problém redukovat na jednorozměrnou rovnici

$$\frac{d^2 U}{dx^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}. \quad (3.8)$$

V modelu je použita diskrétní mříž, obsahující  $h_{\max} + 1$  bodů. Body jsou rozmístěny ekvidistantně s rozestupem  $\Delta x$ . Potenciál v okrajových bodech je dán okrajovými podmínkami

$$U_0 = U_S, \quad U_{h_{\max}} = 0. \quad (3.9)$$

Diskretizací vztahu (3.8) dostáváme rovnici, lépe řečeno soustavu lineárních rovnic

$$\frac{U_{i-1} - 2U_i + U_{i+1}}{\Delta x^2} = -\frac{\rho_i}{\varepsilon_0}, \quad i = 1 \dots h_{\max} - 1. \quad (3.10)$$

Gaussovou eliminační metodou lze vyřešit tuto soustavu v bodě  $U_{h_{\max}-1}$

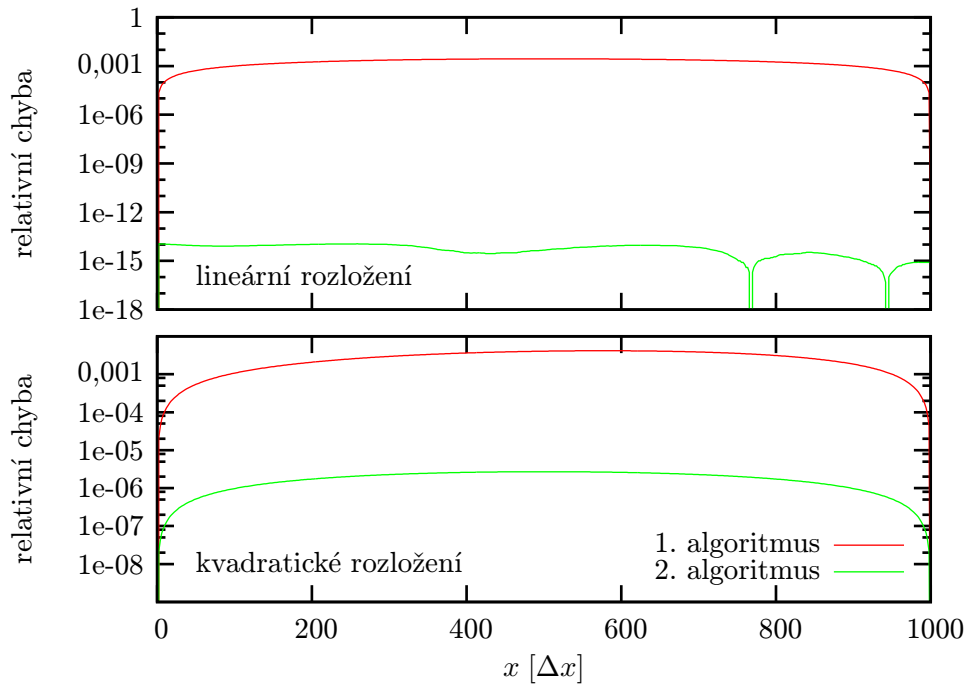
$$U_{h_{\max}-1} = \frac{1}{h_{\max}} \left( U_S + \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{h=1}^{h_{\max}-1} h \rho_h \right). \quad (3.11)$$

Pro výpočet ostatních bodů byla použita rekurentní formule

$$U_{i-1} = \Delta x^2 \frac{\rho_i}{\varepsilon_0} + 2U_i - U_{i+1}, \quad (3.12)$$

odvozená z (3.10).

Modul řešící Poissonovu rovnici byl testován srovnáním s analytickým řešením pro lineární a kvadratickou závislost nábojové hustoty na poloze. Byla ověřena také závislost přesnosti řešení na algoritmu výpočtu nábojové hustoty. První,



**Obrázek 3.2:** Test přesnosti řešení Poissonovy rovnice na lineárním resp. kvadratickém rozložení náboje.

mírně jednodušší algoritmus vypočítával hustotu v  $i$ -tém bodě integrováním náboje mezi  $i$ -tým a  $i+1$ -ním bodem. V druhém, správnějším algoritmu je z důvodu symetrie hustota vypočítána integrováním přes interval délky  $\Delta x$  se středem v  $i$ -tém bodě. V grafu 3.2 je vyneseno podíl chyby k maximální hodnotě potenciálu v závislosti na poloze. Grafy potvrzují lepší přesnost druhého algoritmu. Pro lineární rozložení náboje je relativní chyba řádu  $10^{-14}$ , což je na hranici možností použitého datového typu<sup>1</sup>.

Nábojová hustota byla určována metodou Cloud in Cell. Princip této metody spočívá v nahrazení bodové částice „oblakem“. Při integraci náboje přes elementární buňku se potom náboj částice rozpočítá mezi více buněk. Byl zvolen obdélníkový tvar částice s délkou rovnou délce elementární buňky. Metodu Cloud in Cell lze potom interpretovat jednoduše jako lineární rozpočítání náboje částice mezi dva nejbližší body.

---

<sup>1</sup>64-bit double

## 3.2 Řešení pohybových rovnic

Pohybové rovnice byly řešeny algoritmem Leap-frog v následujícím tvaru:

$$\begin{aligned} F^k &= \nabla\phi \\ v^{k+1/2} &= v^{k-1/2} + \frac{1}{m}F^k \Delta t \\ x^{k+1} &= x^k + v^{k+1/2} \Delta t + \frac{1}{2m}F^k \Delta t^2 \end{aligned} \quad (3.13)$$

Počáteční hodnoty, které tento algoritmus potřebuje jsou  $x^0$  a  $v^{-1/2}$ . To, že počáteční hodnoty nejsou ve stejném čase, nic nemění na dříve diskutovaném rozehrávání náhodné rychlosti částic. Gradient potenciálu je určován numerickou derivací potenciálu a následnou lineární interpolací hodnot dvou nejbližších uzlů.

## 3.3 Interakce

Interakce jsou v modelu simulovány metodou Monte Carlo. V základním modelu přísluší každému typu částic jediný druh interakce, který má navíc střední volnou dráhu nezávislou na energii. Každé částici je přiřazena náhodná volná dráha s rozložením pravděpodobnosti

$$p(x) = \frac{1}{\lambda} e^{-x/\lambda}. \quad (3.14)$$

Z rovnoměrného rozdělení na intervalu  $(0, 1)$  rozehráváme náhodnou volnou dráhu vztahem

$$\xi = -\lambda \ln \gamma. \quad (3.15)$$

Poté, co daná částice dorazí na konec své volné dráhy, dochází k interakci. V případě elektronů jde o pružný rozptyl, což spočívá v náhodné změně směru. Rozptyl do všech směrů probíhá se stejnou intenzitou. Dominantní interakcí iontů je rezonanční přenos náboje. Ten je realizován nahrazením stávajícího iontu nově vygenerovaným. Každé částici je po interakci rozehrána nová volná dráha.

### 3.3.1 Další interakce

V pokročilejší verzi modelu je uvažováno pro každou částici více interakcí s nekonstantním účinným průřezem. Aby nebylo nutné generovat náhodnou volnou dráhu zvláště pro každou interakci, je využito metody nulové srážky. Princip této metody spočívá v přidání další interakce, tzv. nulové srážky. Účinný průřez nulové srážky je právě takový, aby celkový účinný průřez všech interakcí dané částice byl konstantní nezávisle na energii. Pro rozehrávání střední volné dráhy potom lze užít vztahu (3.15) uvedeného výše, přičemž střední volná dráha odpovídá úhrnnému účinnému průřezu všech uvažovaných interakcí. V případě, že částice urazí

svou volnou dráhu, je náhodně vybrána jedna z interakcí, s pravděpodobností úměrnou jejímu účinnému průřezu. Energie částice, potřebná k výpočtu účinného průřezu, je určena rychlostí částice vzhledem k náhodně vygenerovanému neutrálnímu atomu. Rychlost neutrálního atomu je v prvním přiblížení generována výběrem z Maxwellova rozdělení.

**Pružný rozptyl iontu na atomu** Jak již bylo uvedeno, je při interakci náhodně vygenerován atom s rychlostí danou Maxwellovým rozdělením. Pružný rozptyl iontu je potom vypočítáván postupem uvedeným v kapitole 2.3. Vzhledem k tomu, že je kvůli symetrii známa pouze jedna složka rychlosti, je před výpočtem navíc nutné náhodně generovat zbývající dvě složky rychlosti na základě znalosti celkové rychlosti.

**Rezonanční přenos náboje** Interakce se realizuje odstraněním iontu z modelu a jeho nahrazením novým iontem s rychlostí původně neutrálního atomu.

**Pružná srážka elektronu s atomem** Rozptyl je realizován výpočtem výsledné velikosti rychlosti dle vztahu (2.17) a následným náhodným izotropním rozehráním směru rychlosti v laboratorní soustavě. Neuvažujeme tedy korelaci mezi ztrátou energie a úhlem rozptylu.

**Excitace atomu elektronem** Při této interakci je snížena kinetická energie o  $E_e = 11,55 \text{ eV}$  a je rozehrána rychlost v náhodném směru. Změnu energie způsobenou předáním kinetické energie atomu neuvažujeme.

**Ionizace atomu elektronem** Energie soustavy je nejprve snížena o ionizační energii  $E_i = 15,76 \text{ eV}$ . Zbylá energie  $T'$  je rozdělena mezi vzniknuvší elektrony tak, že energie každého z nich je výběrem z rovnoměrného rozdělení  $U(0, T')$ . Směr rychlosti je opět rozehrán náhodně izotropně. Při této interakci vzniká nový pár elektron-iont. Předpokládáme ovšem, že plazma je v rovnováze, což znamená, že tvorba párů elektron-iont je kompenzována rekombinací a difúzí. Vzhledem k tomu, že žádný z těchto procesů neuvažujeme, nejsou vytvářeny ani páry elektron-iont.

### 3.3.2 Energetické rozdělení interagujících částic

Při výpočtu interakcí metodou Monte Carlo je nutné náhodně generovat atom interagující se sledovanou částicí. Nyní se tedy pokusíme zodpovědět, jaké bude energetické rozdělení interagujících částic, a také jak závisí náhodná volná dráha na rychlosti částice vůči okolnímu plynu. Budeme studovat pohyb iontu neutrálním plynem (dělení na ionty a atomy je čistě formální, usnadňuje však orientaci v textu). Sledovaná částice interaguje s atomy interakcí, jejíž účinný průřez označíme  $\sigma$ . Mějme tedy iont pohybující se rychlostí  $v_0$  v plynu s maxwellovským

rozdělením částic. Orientujeme soustavu souřadnic tak, aby  $\mathbf{v}_0 \parallel x$ . Provedeme transformaci do soustavy spojené s částicí. Rozdělení rychlosti částic potom už není maxwellovské, nýbrž následující:

$$f(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m}{2kT}((v_x + v_0)^2 + v_y^2 + v_z^2)\right) dv_x dv_y dv_z. \quad (3.16)$$

Nyní vypočteme, kolik částic s velikostí rychlosti z intervalu  $(v, v + dv)$  narazí na sledovaný iont v časovém intervalu  $(t, t + dt)$ . Na iont narazí všechny částice s rychlostí o velikosti  $v$  nacházející se v čase  $t = 0$  v kulové vrstvě s poloměrem  $vt$  a o tloušťce  $v dt$ , které směřují na iont. Počet částic tedy bude dán integrálem přes kulovou vrstvu  $S$

$$N_{vt} dv dt = \int_S N dV, \quad (3.17)$$

kde  $N dV$  je počet částic v objemu  $dV$ , které směřují na iont. Toto elementární množství je dáno následujícím integrálem

$$N dV = \int n f(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z dV, \quad (3.18)$$

kde  $n$  značí objemovou hustotu částic a integrujeme přes všechny rychlosti velikosti  $v$ , jejichž směrnice protínají iont. Integrační oblast je tedy tvořena průnikem sféry o poloměru  $v$  s kuželem, jehož vrchol leží v počátku prostoru rychlostí a ve vzdálenosti  $vt$  od vrcholu je jeho průřez roven účinnému průřezu interakce  $\sigma$ . Jeho průřez ve vzdálenosti  $v$  tedy bude roven  $\sigma/t^2$ . V případě, že platí  $\sqrt{\sigma} \ll vt$ , lze integrál aproximovat jako součin plochy integrační oblasti a jedné hodnoty integrované funkce

$$N dV = \frac{\sigma}{t^2} n f(v_x, v_y, v_z) dv dV, \quad (3.19)$$

kde  $(v_x, v_y, v_z)$  je vektor velikosti  $v$  směřující z objemu  $dV$  do počátku. Podmínku  $\sqrt{\sigma} \ll vt$  lze splnit volbou dostatečně velkého  $t$ . Jelikož výsledek na  $t$  nezávisí, můžeme ji považovat za splněnou. Pro objem  $dV$  nacházející se v bodě  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  tedy můžeme psát

$$N dV(x, y, z) = \frac{\sigma}{t^2} n f\left(-v \frac{x}{|r|}, -v \frac{y}{|r|}, -v \frac{z}{|r|}\right) dv dV. \quad (3.20)$$

Nyní již můžeme vypočíst integrál (3.17)

$$N_{vt}(v) dv dt = \int_S \frac{n\sigma}{t^2} f\left(-v \frac{x}{|r|}, -v \frac{y}{|r|}, -v \frac{z}{|r|}\right) dv dV. \quad (3.21)$$

Dosadíme ze vztahu (3.16)

$$N_{vt}(v) dv dt = \frac{n\sigma}{t^2} \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \int_S \exp\left(-\frac{m}{2kT}((v_0 - v \frac{x}{|r|})^2 + (v \frac{y}{|r|})^2 + (v \frac{z}{|r|})^2)\right) dv dV. \quad (3.22)$$

Nyní integrál převedeme do sférických souřadnic s užitím vztahů  $x^2 + y^2 + z^2 = r^2$  a  $x/r = \cos \theta$

$$N_{vt}(v) dv dt = \frac{n\sigma}{t^2} \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{m}{2kT} (v_0^2 + v^2) \right) \int_{vt}^{v(t+dt)} dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi r^2 \sin \theta \exp \left( \frac{m}{kT} v v_0 \cos \theta \right) dv. \quad (3.23)$$

Integrál přes radiální souřadnici lze vytknout a spočíst zvlášť. Členy vyšších řádů v  $dt$  zanedbáváme

$$\int_{vt}^{v(t+dt)} r^2 dr = \frac{1}{3} [r^3]_{vt}^{v(t+dt)} = v^3 t^2 dt. \quad (3.24)$$

Integrace přes  $\phi$  je triviální a dává faktor  $2\pi$ . Nakonec dosadíme za  $v_x = v \cos \theta$  a výsledný integrál spočteme substitucí za  $\cos \theta$ .

$$N_{vt}(v) dv dt = n\sigma v^3 dt \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} 2\pi \exp \left( -\frac{m}{2kT} (v_0^2 + v^2) \right) \int_{-1}^1 d \cos \theta \exp \left( \frac{m}{kT} v v_0 \cos \theta \right) dv. \quad (3.25)$$

Konečným výsledkem tedy je

$$N_{vt}(v) dv dt = 4\pi n\sigma v^3 \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{m}{2kT} (v_0^2 + v^2) \right) \sinh \left( \frac{m}{kT} v v_0 \right) \left( \frac{kT}{m v_0 v} \right) dv dt. \quad (3.26)$$

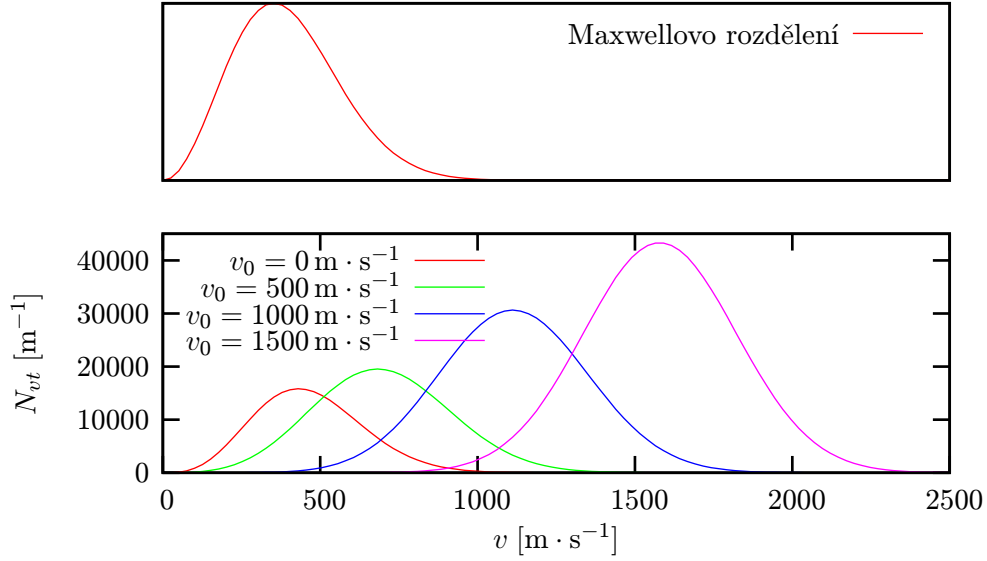
Grafy tohoto nového rozdělení pro různé hodnoty parametru  $v_0$  jsou vyneseny v obrázku 3.3. Parametry plynu odpovídají argonovému plazmatu při teplotě  $T = 300$  K a hustotě atomů  $n = 3 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$ , tlak je tedy přibližně 100 Pa. Účinný průřez interakce je roven  $57 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$ , což zhruba odpovídá rezonančnímu přenosu náboje pomalých iontů.

Abychom zjistili srážkovou frekvenci v závislosti na rychlosti, je nutné výše uvedené rozdělení integrovat přes rychlost

$$N_t dt = \int_0^\infty dv 4\pi n\sigma v^3 \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{m}{2kT} (v_0^2 + v^2) \right) \sinh \left( \frac{m}{kT} v v_0 \right) \left( \frac{kT}{m v_0 v} \right) dt. \quad (3.27)$$

Uvedený integrál lze zestručnit zavedením konstanty  $v_m \equiv \sqrt{2kT/m}$ , která označuje nejpravděpodobnější rychlost částic v plynu.

$$N_t dt = \frac{2n\sigma}{v_0 v_m \sqrt{\pi}} e^{-v_0^2/v_m^2} \int_0^\infty dv v^2 e^{-v^2/v_m^2} \sinh \left( \frac{2v v_0}{v_m} \right) dt. \quad (3.28)$$



**Obrázek 3.3:** Rozdělení vzájemné rychlosti interagujících částic pro různé rychlosti iontu

Integrál je dle [11] roven

$$N_t dt = \frac{n\sigma}{v_0\sqrt{\pi}} \left( \sqrt{\pi}(v_0^2 + v_m^2/2)\text{erf}\left(\frac{v_0}{v_m}\right) + e^{-v_0^2/v_m^2}v_0v_m \right) \quad (3.29)$$

Tato funkce udává střední srážkovou frekvenci iontu. Ze srážkové frekvence lze vztahem

$$\lambda = \frac{v_0}{N_t} \quad (3.30)$$

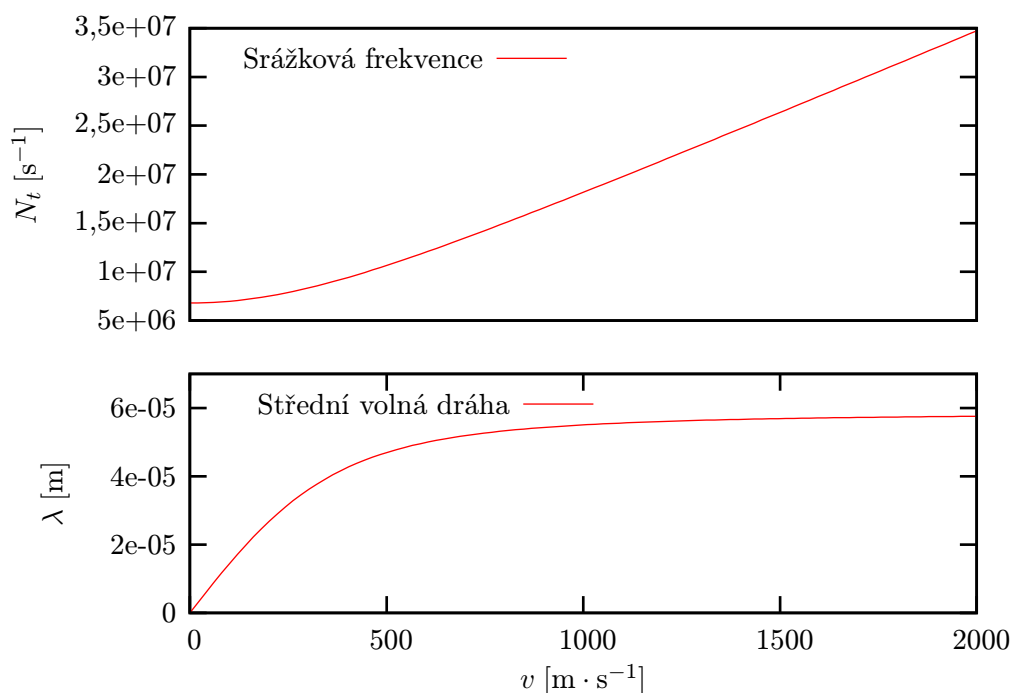
vypočíst střední volnou dráhu. Obě tyto závislosti jsou zakresleny v obrázku 3.4. Střední volná dráha je dle očekávání nulová pro nehybné ionty. Důležitý výsledek dostáváme v limitě rychlých iontů resp. nehybných atomů:

$$\lim_{v_0 \rightarrow \infty} \lambda = \frac{1}{n\sigma}, \quad (3.31)$$

což je známý výsledek pro střední volnou dráhu.

**Důsledky pro model** V modelu je generována náhodná volná dráha podle vztahu (3.31) nezávisle na rychlosti iontu. Z grafu 3.4 je vidět, že tato aproximace je alespoň přibližně splněna pro rychlosti iontu větší než  $500 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ . Hodnota nejpravděpodobnější rychlosti  $v_m$  pro daný plyn je ovšem pouhých  $350 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ . Většina částic tedy tento předpoklad nesplňuje. Tím je způsobeno, že pomalé ionty se v modelu účastní interakcí podstatně méně, než ve skutečnosti.

Základní verze modelu generuje interagující částice výběrem z Maxwellova rozdělení. To je však opět oprávněné pouze tehdy, pokud se částice plynu pohybují



**Obrázek 3.4:** Srážková frekvence a střední volná dráha v závislosti na rychlosti iontu

zanedbatelnou rychlostí ve srovnání s iontem a jejich rychlosti potom nemají vliv na rozdělení. Obrázek 3.5 ilustruje rozdíl mezi maxwellovským rozdělením a limitou výše odvozeného rozdělení pro  $v_0 \rightarrow 0$

$$\lim_{v_0 \rightarrow 0} N_{vt}(v) dv dt = 2 \left( \frac{m}{2k_B T} \right)^2 v^3 \exp \left( \frac{-mv^2}{2k_B T} \right) dv, \quad (3.32)$$

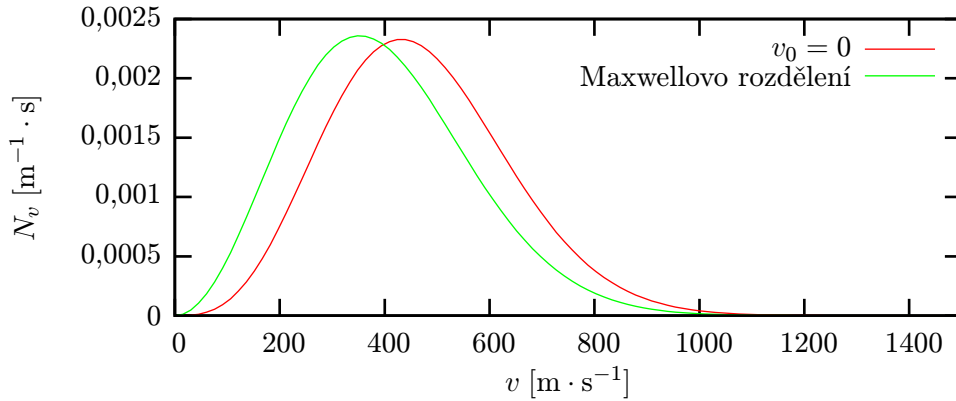
tedy případ nehybného iontu. Je zřejmé, že Maxwellovo rozdělení je oproti (3.32) posunuto k nižším rychlostem. Díky tomu je energie dodaná pomalým iontům v modelu menší než ve skutečnosti.

Výše uvedené nesrovnalosti způsobují, že pomalé ionty se v rozporu skutečností neúčastní interakcí, které by jim dodaly energii. Když navíc k interakci dojde, je jim předána menší energie, než je správné. To v kombinaci s přirozeným ochlazováním rychlých iontů způsobuje celkové ochlazování souboru iontů. Vliv toho, jestli se interagující částice generují z Maxwellova rozdělení, nebo z rozdělení (3.32) bude ilustrován na výpočtu energetického rozdělení částic v okolí sondy (kap. 4).

### 3.4 Optimalizace

Pro urychlení výpočtu jsou používány různé metody. První z nich je adiabatická aproximace, kdy využíváme nízké rychlosti iontů vzhledem k elektronům. Pohyb





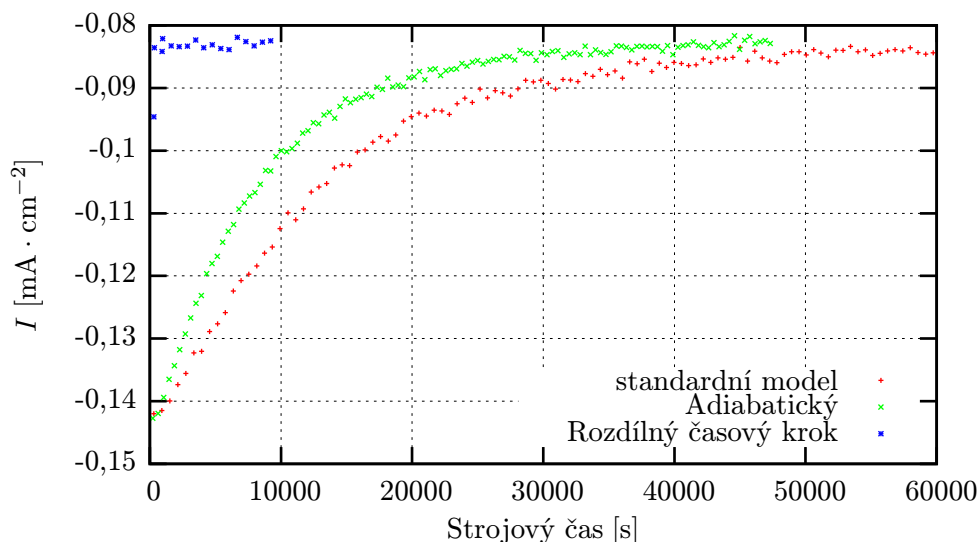
**Obrázek 3.5:** Srovnání vypočteného rozdělení s maxwellovským

iontů proto může být vypočítáván s hrubším časovým krokem. Tím zajistíme, že ve většině kroků řešíme pouze vývoj elektronů a algoritmus tudíž může být přibližně  $2\times$  rychlejší. Pro ještě větší urychlení nebyla Poissonova rovnice přepočítávána po každém pohybu. Konkrétně na každý časový krok iontů délky  $10^{-8}$  s připadalo 1000 kroků elektronů délky  $10^{-11}$  s a 10 řešení Poissonovy rovnice.

Další urychlující metoda již nedává žádnou smysluplnou informaci o časovém vývoji systému. Lze ji využít pouze ke hledání ustáleného stavu. Pohybové rovnice iontů řeším opět s časovým krokem  $10^{-8}$  s, na každý krok v pohybu iontů ovšem připadá pouze jeden časový krok elektronů délky  $10^{-11}$  s. Tím je urychlen vznik stínící vrstvy. Pokud výpočet tímto algoritmem dokonverguje k ustálenému stavu, přestane být potenciál závislý na čase. Kdybychom po ustálení přepnuli na konstantní časový krok, nedojde z pohledu částic k žádné změně. Výsledný stav tedy bude ustálený i v neurychleném modelu.

Rychlost algoritmů byla testována výpočtem ustálení vzorku 50 000 částic. Na sondu bylo připojeno napětí  $+10$  V, zdroj obsahoval 2500 částic. Jako kritérium ustálení plazmatu bylo zvoleno ustálení hodnoty proudu tekoucího na sondu. Na obrázku 3.6 je zobrazen elektrický proud tekoucí na sondu v závislosti na době výpočtu. Z obrázku je zřejmé, že adiabatická aproximace nedosahuje ani dvojnásobného urychlení, zatímco algoritmus s rozdílným časovým krokem je řádově rychlejší. Algoritmus s rozdílným časovým krokem se dále používá v různých modifikacích, jenž spočívají ve vynechávání řešení Poissonovy rovnice. Byla porovnána rychlost těchto modifikací pro  $n = 1, 2, 3, 4, 5, 7$ , kde  $n$  je počet časových kroků mezi přepočtem Poissonovy rovnice. Rychlost těchto výpočtů je zobrazena v grafu 3.7. Z grafu lze rozeznat, že verze, která přepočítává Poissonovu rovnici po každém kroku, je dle očekávání nejpomalejší. Rozdíly v rychlosti ostatních algoritmů jsou ovšem malé a ztrácejí se v šumu.

Jak je uvedeno v dalším odstavci, tvoří výpočet hustoty pouhých 7% výpočtu a celkové urychlení těmito metodami tedy nebude větší. Tyto metody mohou mít význam pro vícerozměrné úlohy, kde samotné řešení Poissonovy rovnice je



**Obrázek 3.6:** Srovnání rychlosti ustálení proudu pro různé algoritmy.

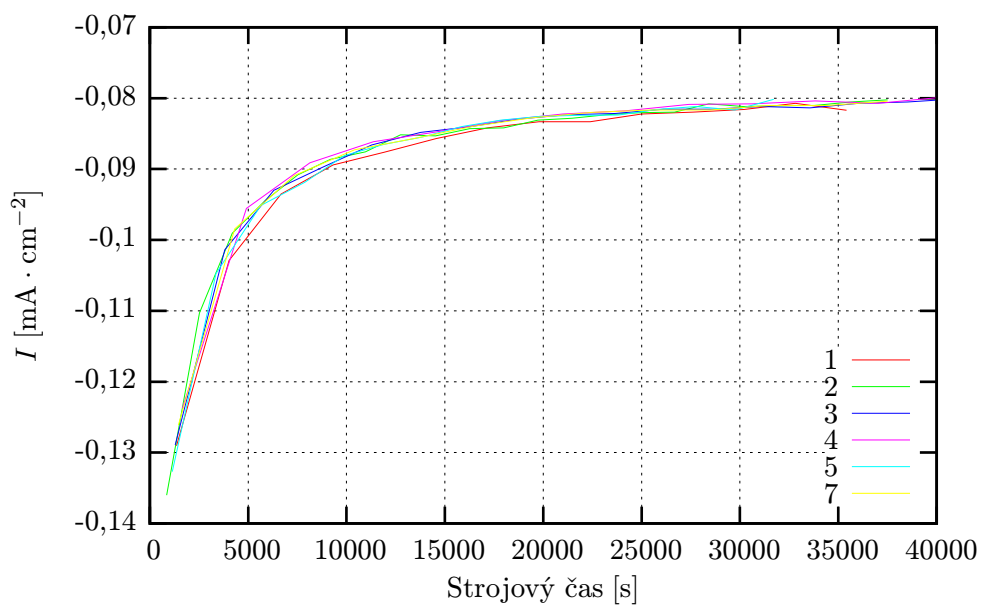
nezanedbatelně náročné.

Dále porovnáme časovou náročnost jednotlivých částí výpočtu. Za tímto účelem bylo nutné rozdělit vnitřní cyklus programu probíhající přes všechny částice na několik cyklů, z nichž každý vykonával jednu ze zkoumaných částí výpočtu. Doba běhu těchto cyklů byla již snadno měřitelná. Naměřená doba však neodpovídá skutečnému času, který procesor strávil počítáním dané úlohy, neboť je v ní započítán také běh cyklu. Proto byla navíc změřena doba trvání prázdného cyklu, která byla potom od ostatních časů odečtena. Bylo ověřeno, že takto určené časy dávají v součtu dobu běhu nerozděleného cyklu s maximální chybou 5 %. K měření časové náročnosti bylo použito systémového volání `getrusage()`, které mělo na použitém systému<sup>2</sup> rozlišení 0,001 s. Měření bylo provedeno pro  $10^6$  částic. Na obrázku 3.8 je vynesena časová náročnost jednotlivých částí algoritmu v průběhu výpočtu. V tabulce 3.1 jsou uvedeny střední hodnoty časů potřebných pro daný výpočet. Doba potřebná pro vyřešení Poissonovy rovnice není uvedena neboť pro mříž s 1000 body trvalo její vyřešení řádově 0,001 s což je zanedbatelné. Při měření bylo nutné vypnout optimalizace, jelikož kompilátor v rámci optimalizací zruší prázdný cyklus. Zapnutím optimalizací se doba běhu cyklu snížila na 0,46 s, došlo tedy k uručení téměř o 40 %.

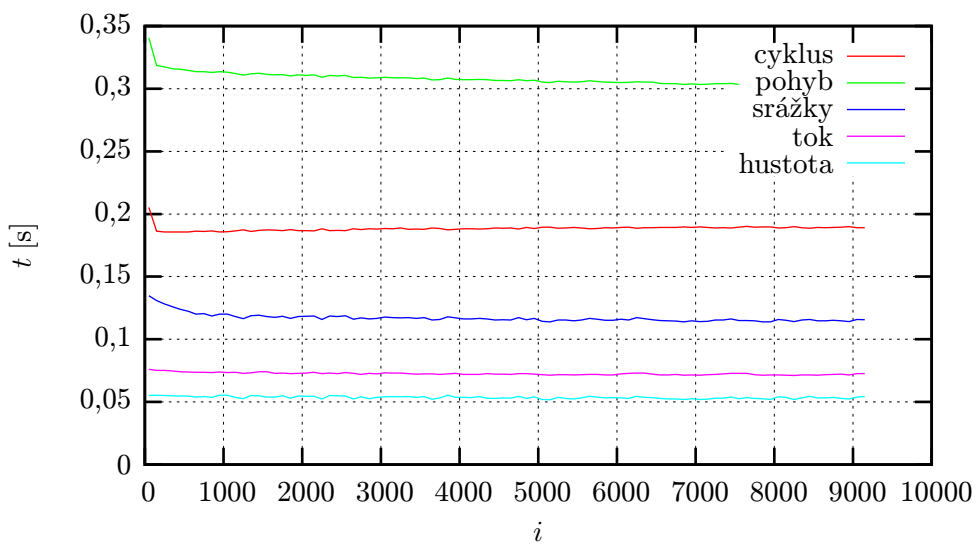
	cyklus	pohyb	srážky	tok	hustota	celkem
$t[s]$	0,188	0,308	0,117	0,072	0,053	0,74
%	25,6	41,6	15,8	9,81	7,25	100

**Tabulka 3.1:** Srovnání časové náročnosti jednotlivých částí algoritmu.

<sup>2</sup>SW: Linux 2.6.8, gcc 3.3.4, Ubuntu 4.10; HW: mobile AMD Athlon™ 1400+



**Obrázek 3.7:** Srovnání rychlosti ustálení proudu pro různé algoritmy.



**Obrázek 3.8:** Srovnání časové náročnosti jednotlivých částí algoritmu.

### 3.5 Generátor toku částic

Pokusíme se popsat rozhraní s plazmatem analyticky, a tím odstranit nutnost simulovat neporušené plazma. Nejprve určíme, kolik částic má přilétnout za jednotku času. Tento výpočet lze řešit následující úvahou: Všechny částice s  $x$ -ovou složkou rychlosti  $v_x$  ve vzdálenosti od rozhraní menší než  $v_x$  doletí do pracovní oblasti. Množství částic s rychlostí z intervalu  $(v_x, v_x + dv_x)$  obsažené v délce  $v_x$  označím  $n_{v_x} dv_x$ . Potom  $n_{v_x} dv_x$  je náhodná veličina s Poissonovým rozdělením. Celkový počet částic bude součet  $n_{v_x}$  přes všechny rychlosti. Střední hodnota  $n_{v_x} dv_x$  je dána vztahem

$$\mathbb{E}[n_{v_x} dv_x] = \mathbb{E}[n_{v_x}] dv_x = \rho f(v_x) v_x dv_x. \quad (3.33)$$

kde  $\rho$  je délková hustota částic a  $f(v_x) dv_x$  značí hustotu pravděpodobnosti pro  $x$ -ovou složku částice dle vztahu 2.1. Jelikož střední hodnota součtu je součtem středních hodnot, bude střední hodnota celkového počtu částic určena vztahem

$$\mathbb{E}[n] = \int_0^\infty \mathbb{E}[n_{v_x}] dv_x = \int_0^\infty \rho f(v_x) v_x dv_x \quad (3.34)$$

Po dosazení za  $f(v_x) dv_x$  z 2.1 dostáváme integrál

$$\mathbb{E}[n] = \int_0^\infty \rho \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m}{2k_B T}} \exp\left(\frac{-mv_x^2}{2k_B T}\right) v dv. \quad (3.35)$$

Hodnota tohoto integrálu je

$$\mathbb{E}[n] = \rho \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}. \quad (3.36)$$

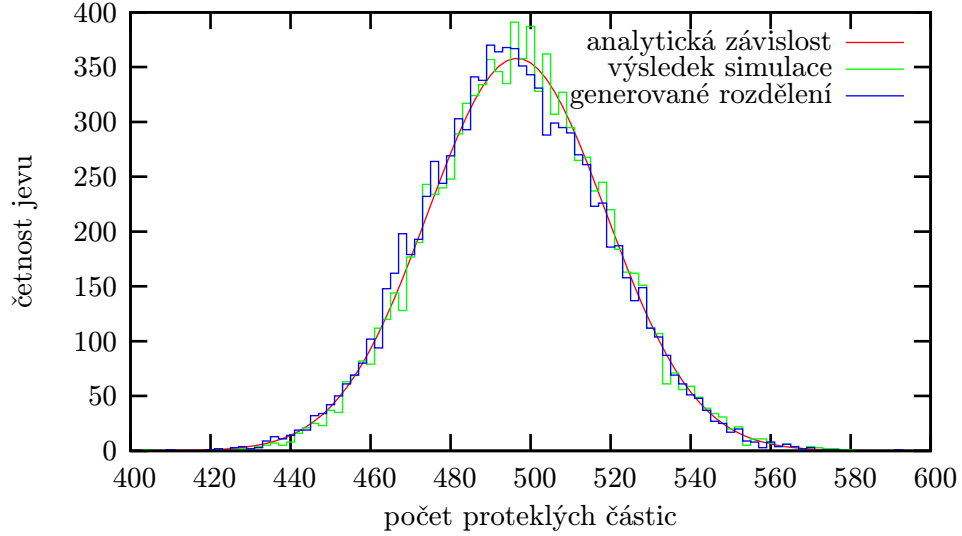
Jelikož disperze Poissonova rozdělení je rovna jeho střední hodnotě a navíc součet Poissonových rozdělení dává opět Poissonovo rozdělení, platí pro disperzi počtu částic

$$D[n] = \mathbb{E}[n], \quad (3.37)$$

Další užitečnou vlastností Poissonova rozdělení je, že při velké střední hodnotě je dobře aproximováno Normálním rozdělením, což je v souladu s centrální limitní větou. Počty částic tedy budeme generovat s rozdělením daným vztahem

$$f(n) = \frac{1}{\sqrt{\mathbb{E}[n]2\pi}} \exp\left(-\frac{(n - \mathbb{E}[n])^2}{2\mathbb{E}[n]}\right). \quad (3.38)$$

Srovnáním tohoto Gaussovského rozdělení s rozdělením vzniklým simulací neporušeného plazmatu bylo ověřeno, nakolik je aproximace oprávněná. Data pocházejí ze simulace oblasti délky 0,1 mm, obsahující 50 000 částic po dobu 10 000 časových kroků. Částice měly parametry iontů  $\text{Ar}^+$  při teplotě 300 K. Hmotnost iontů je  $6,68 \cdot 10^{-26}$  kg. Dle vztahu (3.36) byla vypočtena střední hodnota počtu částic



**Obrázek 3.9:** Rozdělení počtu částic opustivších zdroj pro pravidelně obnovovaný zdroj.

vyletujících ze zdroje  $E[n] = 497$ . V Grafu 3.9 jsou vyneseny výsledky simulace ve srovnání s přibližnou závislostí (3.38). Vzhledem k tomu, že počáteční stav zdroje je generován metodou Monte Carlo, je možné, že takto vytvořený zdroj bude mít v rámci nějaké fluktuace mírně vyšší, nebo nižší teplotu, než je střední hodnota teploty. Je proto nutné zdroj pravidelně regenerovat, čímž se tyto fluktuace vyruší. V experimentu byl vyměňován zdroj každých 100 kroků. Pro ilustraci jsme provedli stejný experiment bez regenerace zdroje. Výsledek je zakreslen v grafu 3.10. Z grafu je zřejmé vychýlení těchto rozdělení způsobené fluktuacemi teploty. Testovali jsme kvalitu aproximace i při 2000 částicích ve zdroji, kdy již přestává platit aproximace normálním rozdělením. Výsledek je zakreslen v grafu 3.11. I při nízkém počtu částic je rozdělení stále dobře aproximováno. Pro střední hodnotu  $E[n] < 10$  je aproximace již příliš nepřesná a namísto výběru z normálního rozdělení jsou generována čísla  $\lceil E[n] \rceil$  a  $\lfloor E[n] \rfloor$  s takovou pravděpodobností, aby jejich střední hodnota byla rovna  $E[n]$ .

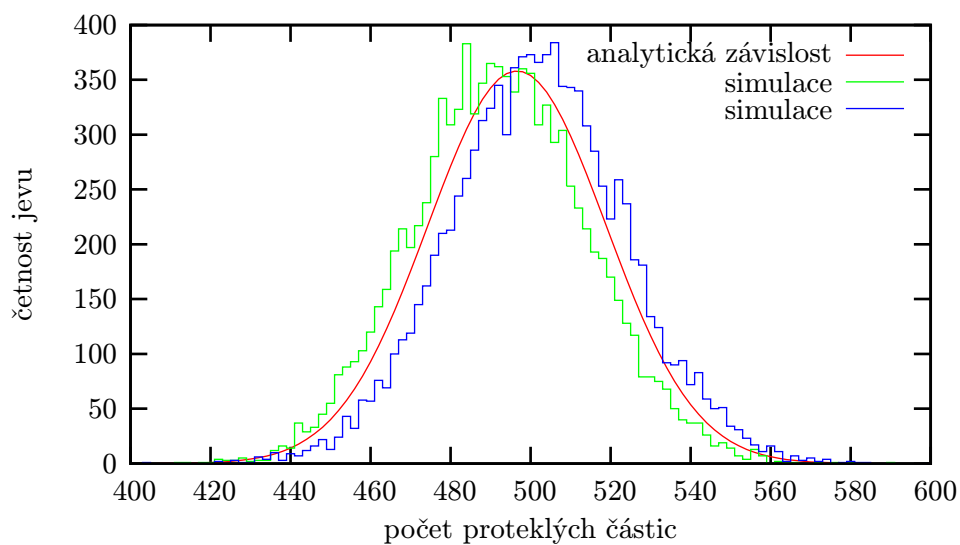
Dále určíme rozdělení  $x$ -ové složky rychlosti vyletujících částic. Vyjdeme ze vztahu (3.33), který lze interpretovat jako nenormovanou hustotu pravděpodobnosti pro  $v_x$ . Normujeme vydělením  $E[n]$  a dostáváme požadované rozdělení  $x$ -ové složky rychlosti

$$f_{\text{flux}}(v) dv = \frac{m}{k_B T} v \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right). \quad (3.39)$$

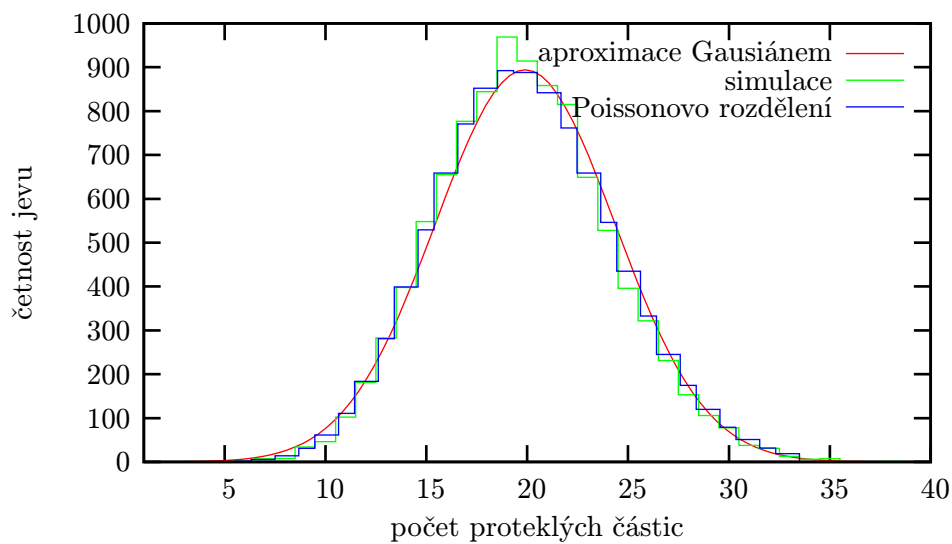
V grafu 3.12 jsme porovnali tento teoretický vztah s daty získanými simulací neporušeného plazmatu, a také s tabulkovým generátorem tohoto rozdělení.

Poslední zbývající parametr částice je její celková rychlost, jež je určena vztahem

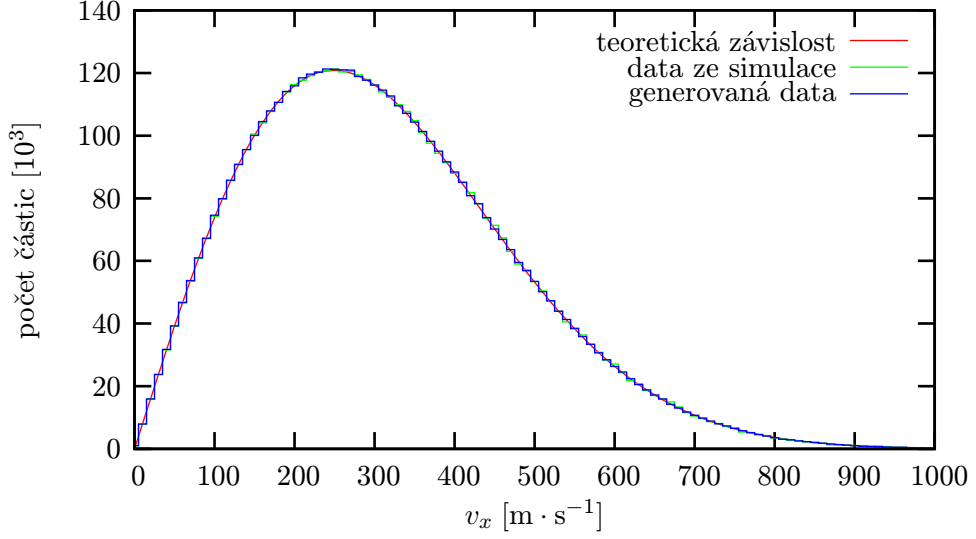
$$v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}, \quad (3.40)$$



**Obrázek 3.10:** Vychýlená rozdělení počtu částic opustivších zdroj pro neobnovovaný zdroj.



**Obrázek 3.11:** test pro malý počet (2000) částic.



**Obrázek 3.12:** Rozdělení  $x$ -ové složky rychlosti částic opouštějících zdroj.

kde  $v_x$  a  $v_y$  jsou náhodné proměnné s rozložením pravděpodobnosti dle (2.1), kdežto  $v_x$  podléhá rozložení (3.39). Celkovou rychlost částice vypočítáváme tak, že vygenerujeme jednotlivé složky s odpovídajícími rozděleními a dle vztahu (3.40) vypočteme celkovou rychlost. Provedeme srovnání takto generovaných rychlostí s daty ze simulace a také s dále odvozenou teoretickou závislostí. Výpočet výsledného rozdělení provedeme v několika krocích. Nejprve určíme rozdělení  $v_x^2$  a  $v_y^2$  z transformačního vztahu pro pravděpodobnosti

$$f_\gamma(\gamma) = \sum_{x, g(x)=\gamma} f_\xi(x) \left| \frac{dg(x)}{dx} \right|^{-1}, \quad \gamma = g(\xi), \quad (3.41)$$

kde  $\gamma$  resp.  $\xi$  jsou náhodné proměnné s distribučními funkcemi  $f_\gamma$  resp.  $f_\xi$ . Pokud je funkce  $g$  prostá, má suma ve vztahu 1 pouze jeden člen. Umocnění na druhou sice není prosté, je však sudé a stačí tedy započítat pouze jednu větev a výsledek vynásobit 2. Označíme  $\xi \equiv v_{x,y}^2$ , potom dosazením (2.1) do (3.41) dostáváme.

$$f_\xi(\xi) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m}{2k_B T}} \exp\left(\frac{-m\xi}{2k_B T}\right) \frac{1}{\sqrt{\xi}}, & \xi \geq 0 \\ 0, & \xi < 0. \end{cases} \quad (3.42)$$

Hustota pravděpodobnosti je zřejmě nulová pro  $\xi < 0$ , u dalších rozdělení, kde je tato skutečnost také zřejmá, již nebudeme explicitně opakovat. Dále určíme velikost rychlosti v rovině symetrie, označenou  $\gamma \equiv v_x^2 + v_y^2$ . Rozdělení pravděpodobnosti součtu dvou náhodných veličin je konvolucí jejich rozdělení

$$f_\gamma(\gamma) = f_\xi * f_\xi(\gamma) = \int_{-\infty}^{\infty} f_\xi(x) f_\xi(\gamma - x) dx. \quad (3.43)$$

Pro jednoduchost zavedeme značení  $\sqrt{2k_B T/m} \equiv v_m$  pro nejpravděpodobnější celkovou rychlost částic s maxwellovským rozdělením. Do integrálu (3.43) dosadíme z (3.42), přičemž díky nulovosti pro  $\xi < 0$  lze omezit integrační oblast.

$$\begin{aligned}
f_\gamma(\gamma) &= \frac{1}{v_m^2 \pi} \int_0^\gamma \exp\left(\frac{-x}{v_m^2}\right) \frac{1}{\sqrt{x}} \exp\left(\frac{x-\gamma}{v_m^2}\right) \frac{1}{\sqrt{\gamma-x}} dx = \\
&= \frac{1}{v_m^2 \pi} \exp\left(\frac{-\gamma}{v_m^2}\right) \int_0^\gamma \frac{1}{\sqrt{x(\gamma-x)}} dx = \\
&= \frac{1}{v_m^2} \exp\left(\frac{-\gamma}{v_m^2}\right).
\end{aligned} \tag{3.44}$$

Rozdělení kvadrátu  $x$ -ové složky  $\zeta \equiv v_x^2$  vypočteme dosazením (3.39) do transformačního vztahu (3.41)

$$f_\zeta = \frac{1}{v_m^2} \exp\left(\frac{-\zeta}{v_m^2}\right). \tag{3.45}$$

Docházíme k zajímavému zjištění, že rozdělení velikosti  $x$ -ové složky rychlosti je shodné s rozdělením velikosti složky rychlosti kolmé na  $x$ . Dalším krokem je výpočet kvadrátu celkové rychlosti, značíme  $\chi = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$ , přičemž v souladu s předchozím označením platí  $\chi = \gamma + \zeta$ . Rozdělení této veličiny tedy bude dáno následující konvolucí

$$f_\chi(\chi) = f_\gamma * f_\zeta = \int_{-\infty}^{\infty} f_\gamma(x) f_\zeta(\chi-x) dx. \tag{3.46}$$

Dosadíme z (3.45) a (3.45) a opět užitím nulovosti pro  $\gamma < 0$  a  $\zeta < 0$  vychází integrál

$$f_\chi(\chi) = \int_0^\chi \frac{1}{v_m^4} \exp\left(\frac{-x}{v_m^2}\right) dx = \frac{\chi}{v_m^4} \exp\left(\frac{-\chi}{v_m^2}\right). \tag{3.47}$$

Nakonec provedeme transformaci  $v = \sqrt{\chi}$  dosazením do (3.41).

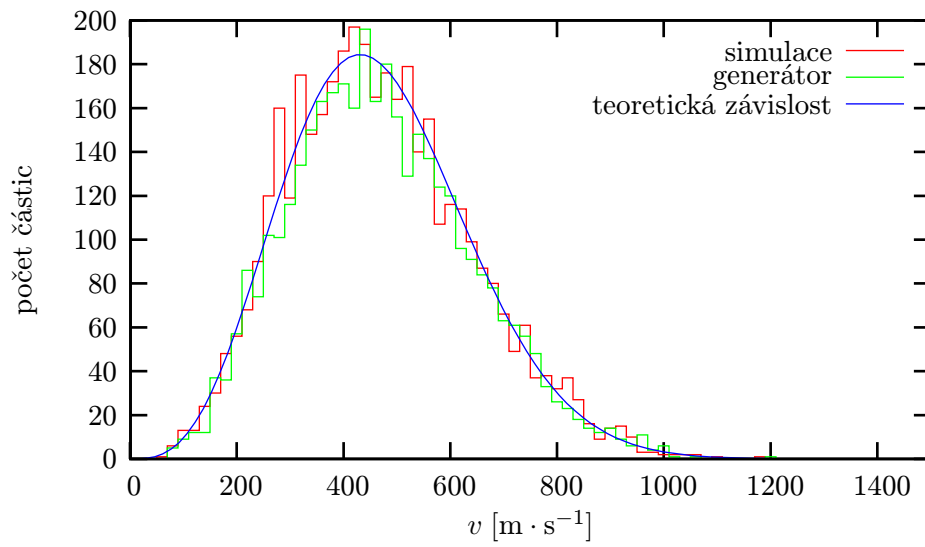
$$f_v = \frac{2}{v_m^4} v^3 \exp\left(\frac{-v^2}{v_m^2}\right). \tag{3.48}$$

Po dosazení za  $v_m$  dostáváme finální formuli

$$f_v = 2 \left(\frac{m}{2k_B T}\right)^2 v^3 \exp\left(\frac{-mv^2}{2k_B T}\right). \tag{3.49}$$

V grafu 3.13 je vynesena tato závislost ve srovnání s generátorem toku a simulací neporušeného plazmatu. Všechny zobrazené závislosti vykazují dobrou shodu.





**Obrázek 3.13:** Rozdělení celkové rychlosti částic opouštějících zdroj. Teoretická závislost ve srovnání s generátorem toku a s daty vypočtenými simulací neporušeného plazmatu s délkovou hustotou  $2 \cdot 10^7$  částic·m<sup>-1</sup>.

# Kapitola 4

## Výpočet energetického rozdělení částic

V této kapitole bude vypočteno energetické rozdělení částic v různých částech pracovní oblasti. Pro dostatečně přesné určení energetického rozdělení v daném bodě je nutné pozorovat průchod řádově  $10^6$  částic. Při tomto výpočtu lze využít již dříve vypočtené parametry plazmatu v rovnováze v tak zvaném neselfkonzistentním modelu.

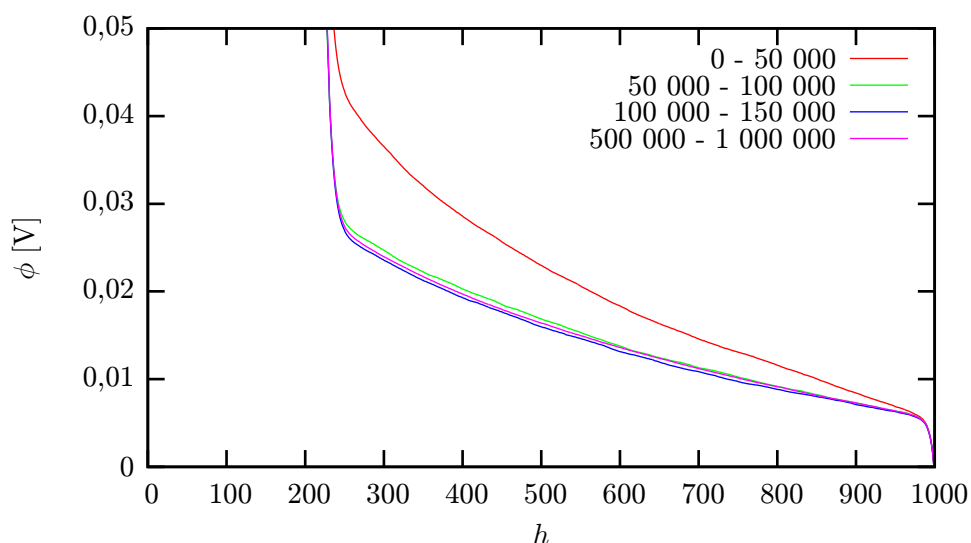
### 4.1 Neselfkonzistentní model

Neselfkonzistentní model spočívá v započtení coulombické interakce jako vtištěné síly. Tím dochází k urychlení výpočtu, neboť není nutné přepočítávat nábojovou hustotu ani Poissonovu rovnici. Díky tomu, že potenciál není určen rozložením částic, lze tento výpočet provádět také jednočásticově.

V neselfkonzistentním modelu je důležité kvalitně určit vtištěný potenciál selfkonzistentním výpočtem. Pomocí selfkonzistentního modelu je tedy nalezen rovnovážný stav a od zvoleného okamžiku ustálení je po několik kroků středován potenciál. Pro odhad přesnosti určení potenciálu bylo použito obvyklého vzorce pro střední kvadratickou odchylku

$$\sigma^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(x_i - \bar{x})^2}{N-1}, \quad \bar{x} = \sum_{j=1}^N \frac{x_j}{N}. \quad (4.1)$$

Bylo obtížné určit kritérium ustálení výpočtu, vypočetl jsem tedy potenciál pro různé počty kroků a grafy jsem poté vizuálně porovnal. V grafu 4.1 jsou zobrazeny potenciály vzniklé středováním v různých intervalech. Výpočet byl proveden s užitím rozdílných časových kroků pro ionty a elektrony. Ačkoliv potenciál na sondě je roven 10 V, jsou zobrazeny pouze hodnoty potenciálu nepřesahující 0,05 V, aby vynikly rozdíly mezi grafy na malých potenciálech. Dle grafu jsem odhadl, že potenciál je po uplynutí 100 000 kroků neměnný. Maximální střední



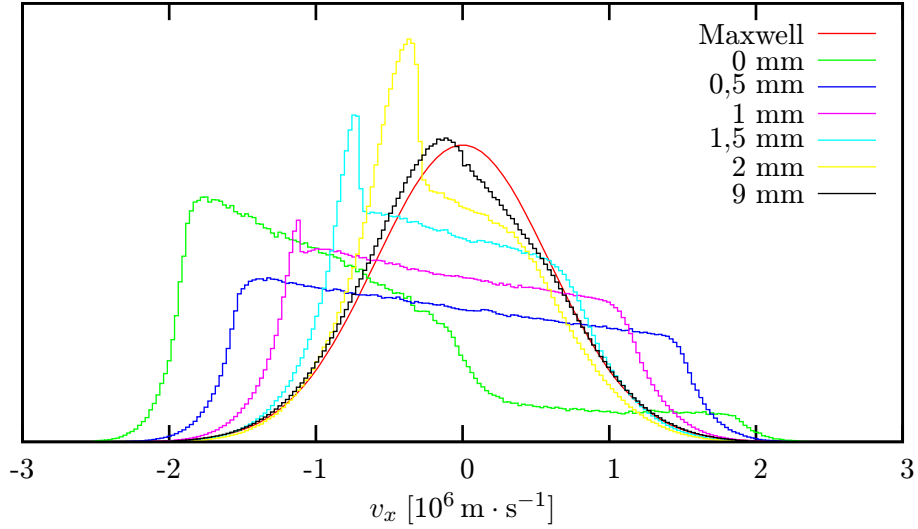
**Obrázek 4.1:** Potenciály vypočtené různou dobou simulace.

kvadratická odchylka nepřesáhla 0,04 V. Odchylka v potenciálu určeném středováním 100 000 hodnot tedy je řádově  $10^{-3}$  V. V dalších výpočtech je použit potenciál vypočtený středováním v intervalu 400 000 až 500 000 kroků.

Po zvoleném okamžiku ustálení a určení střední hodnoty potenciálu byl potenciál zafixován na své střední hodnotě a výpočet pokračoval dále. V případě, že potenciál je správně určen, mělo by rozložení nábojové hustoty zůstat setrvalé i po přechodu na neselfkonzistentní výpočet. Bylo však pozorováno, že rozložení náboje se začalo měnit. Hodnoty potenciálu byly přepočítávány i při neselfkonzistentním výpočtu. Ukázalo se, že potenciál fluktuuje s rozptylem řádově 1 V. Dlouhodobě se však drží poblíž hodnoty určené selfkonzistentním výpočtem. Tyto fluktuace jsou důsledkem neselfkonzistence. Pokud by totiž taková fluktuace vznikla v selfkonzistentním výpočtu, byla by okamžitě potlačena zpětnou vazbou, která zde chybí.

## 4.2 Rozdělení elektronů

Pomocí neselfkonzistentního jednočásticového modelu byla zkoumána rozdělení rychlosti elektronů v různých vzdálenostech od sondy. Potenciál sondy vůči plazmatu byl nastaven na 10 V. V pracovní oblasti bylo vytvořeno několik vrstev-detektorů nenulové tloušťky. Vždy, když se procházející částice nacházela v některé z vrstev, byla její rychlost a  $x$ -ová složka rychlosti přičtena do histogramu příslušejícího dané vrstvě. Tloušťka vrstev byla zvolena jako  $2 \cdot 10^{-5}$  m. Rozdělení  $x$ -ové složky rychlosti je vyneseno v grafu 4.2 ve srovnání s Maxwellovým rozdělením složky rychlosti (2.1). Záporná rychlost znamená směr na sondu. Z grafu je zřejmé urychlování částic elektrickým polem. Výrazný peak v záporné části rozdělení je způsoben urychlujícím polem. Kdyby totiž elektrony neinteragovaly



**Obrázek 4.2:** Rozdělení  $x$ -ové složky rychlosti elektronů v různých vzdálenostech od sondy ve srovnání s teoretickým Maxwellovým rozdělením.

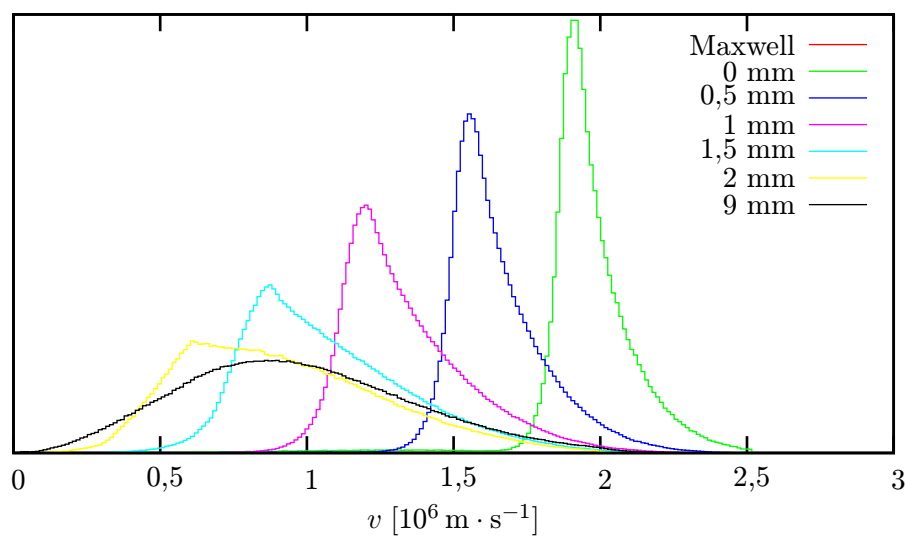
s neutrálními atomy, bylo by rozdělení na rozhraní s neporušeným plazmatem tvořeno pouze „zápornou polovinou“ Gaussova rozdělení, která by se s klesající vzdáleností od sondy posouvala směrem k zápornějším rychlostem. Vrcholek této poloviny by byl právě v místě pozorovaného peaku. Část rozdělení napravo od peaku je tedy tvořena elektrony, které se předtím alespoň jednou rozptýlily na neutrálním atomu. Rozdělení celkové rychlosti je vyneseno v grafu 4.3 ve srovnání s Maxwellovým rozdělením celkové rychlosti (3.4). Z grafu je opět zřejmé urychlování a tedy stoupající energie s klesající vzdáleností od sondy.

### 4.3 Rozdělení iontů

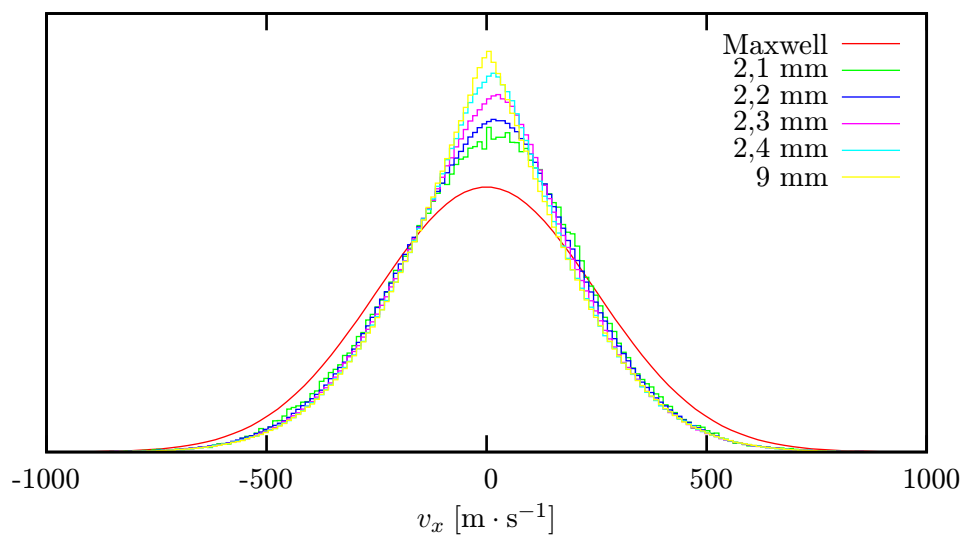
Rozdělení iontů bylo zkoumáno stejným způsobem, jako rozdělení elektronů. Potenciál sondy byl opět nastaven na 10 V. Rozdělení v různých vzdálenostech od sondy jsou vynesena v grafech 4.4 a 4.5. Grafy vykazují posunutí k nižším teplotám ve srovnání s teoretickým maxwellovským rozdělením. Uvažované interakce, tedy rezonanční přenos náboje a pružný rozptyl, by však energii odebírat neměly. Jak je ukázáno v kapitole 3.3.2, problém tkví v nesprávném rozehrávání rychlosti interagujících částic a střední volné dráhy.

Při tvorbě grafů 4.4 a 4.5 byla vždy druhá částice pro výpočet interakce generována výběrem z Maxwellova rozdělení. To však platí pouze v limitě velmi rychlých iontů. V opačné limitě nehybných iontů je rychlost interagujících atomů výběrem z rozdělení

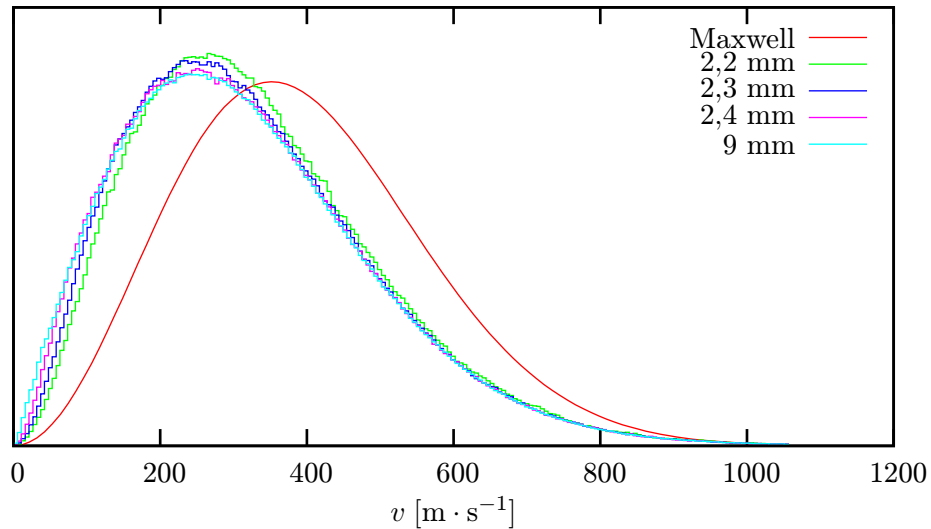
$$f_v dv = 2 \left( \frac{m}{2k_B T} \right)^2 v^3 \exp \left( \frac{-mv^2}{2k_B T} \right) dv, \quad (3.32)$$



**Obrázek 4.3:** Rozdělení celkové rychlosti elektronů v různých vzdálenostech od sondy ve srovnání s teoretickým Maxwellovým rozdělením.



**Obrázek 4.4:** Rozdělení  $x$ -ové složky rychlosti iontů v různých vzdálenostech od sondy ve srovnání s teoretickým Maxwellovým rozdělením.



**Obrázek 4.5:** Rozdělení celkové rychlosti iontů v různých vzdálenostech od sondy ve srovnání s teoretickým Maxwellovým rozdělením.

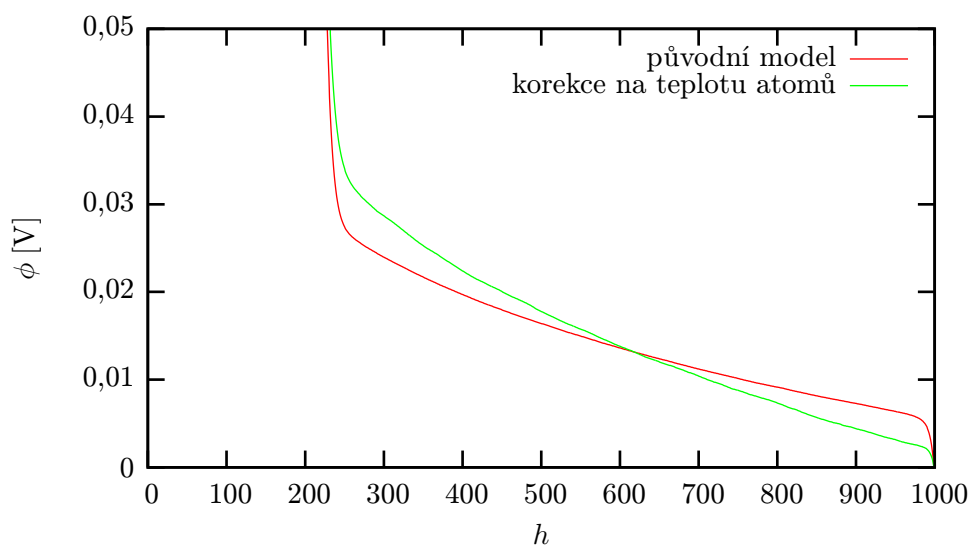
odvozeného v kapitole 3.3.2.

Výpočet byl poté zopakován pro srovnání s rychlostí neutrálních atomů generovanou z rozdělení (3.32). Nejprve byl selfkonzistentním výpočtem určen potenciál. Výsledný potenciál je v grafu 4.6 srovnán s dříve vypočteným výsledkem. Z grafu je zřejmé, že nově vypočtený potenciál lépe navazuje na oblast nenarušeného plazmatu. Relativně prudký nárůst původně vypočteného potenciálu poblíž hranice s nenarušeným plazmatem svědčí o výskytu zvýšené hustoty kladného náboje v této oblasti. Tu lze vysvětlit nefyzikálním ochlazováním iontů přiletujících ze zdroje. Ionty v plazmatu měly nižší teplotu než na jakou byl nastaven zdroj a docházelo k tomu, že ze zdroje přilétalo více částic, než kolik jich odlétalo. Tím vzniklo pozorované nahromadění kladného náboje poblíž zdroje.

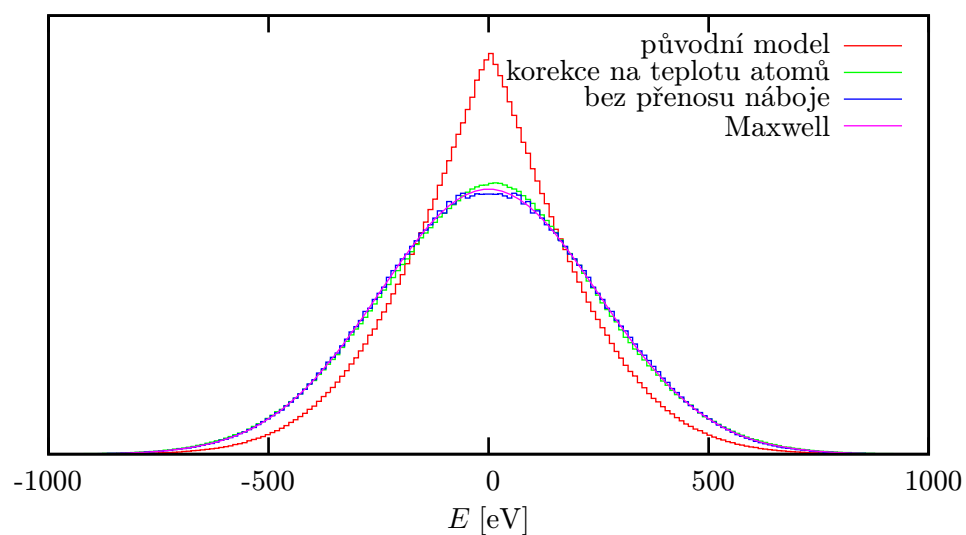
Pozorovaný nárůst potenciálu zřejmě také kompenzuje nadměrný počet iontů přilétajících ze zdroje a tím umožňuje vznik rovnováhy.

Srovnání výsledků těchto výpočtů je znázorněno v grafech 4.8 a 4.7. Závislost střední volné dráhy na teplotě plynu nebyla uvažována. Je zřejmé, že při generování rychlosti z (3.32), je ochlazování výrazně potlačeno. Při úplném zanedbání přenosu náboje jsou sice výsledky nerozeznatelné od Maxwellova rozdělení, avšak jsou fyzikálně nesprávné. Ukazuje se tedy, že limita pomalých iontů je pro ionty o teplotě stejné, jako je teplota plynu, lepší aproximací než dříve použitá limita rychlých iontů.

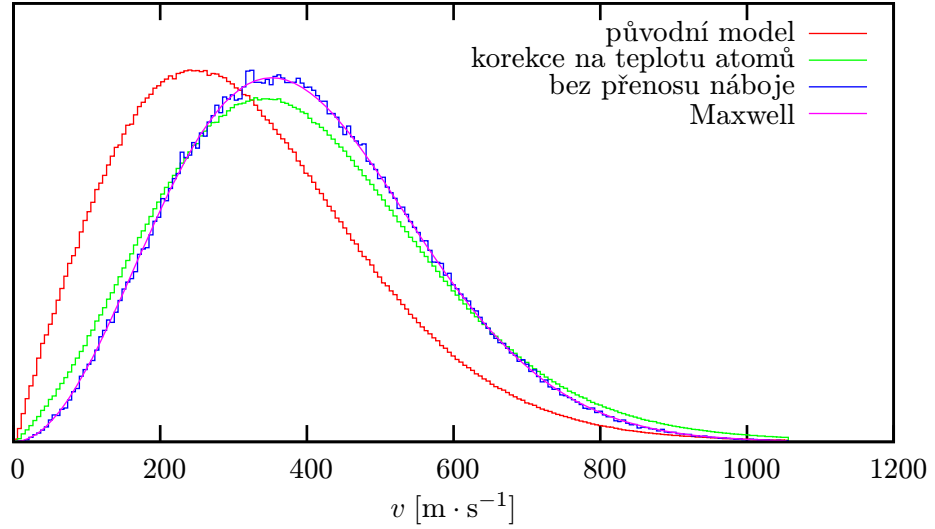
V grafech 4.9 a 4.10 je vyneseno rozdělení rychlosti iontů pro různé vzdálenosti od sondy. Pro generování rychlosti neutrální přitom bylo užito vztahu (3.32). Rozdělení rychlosti se neměnilo se vzdáleností, což je stejný výsledek, jaký lze dle [13], str. 56 očekávat pro plyn neinteragujících částic. Rozdělení rychlosti částic v brzděném poli lze totiž určit užitím rovnice kontinuity, která říká, že toku částic



**Obrázek 4.6:** Elektrostatický potenciál vypočtený různými metodami.



**Obrázek 4.7:** Rozdělení  $x$ -ové složky rychlosti iontů poblíž rozhraní s neporušeným plazmatem vypočtené různými metodami ve srovnání s teoretickým Maxwellovým rozdělením.



**Obrázek 4.8:** Rozdělení celkové rychlosti iontů poblíž rozhraní s neporušeným plazmatem vypočtené různými metodami ve srovnání s teoretickým Maxwellovým rozdělením.

o rychlosti v intervalu  $(v_x, v_x + dv_x)$  ve sledované oblasti odpovídá stejný tok částic v oblasti neporušeného plazmatu. Matematicky lze tento fakt zapsat jako

$$f(v_x)v_x dv_x = f^0(v_x^0)v_x^0 dv_x^0, \quad (4.2)$$

kde  $v_x^0$  je rychlost částic v neporušeném plazmatu, které mají stejnou celkovou energii jako sledované částice v brzděném poli. Nechť se částice v brzděném poli nacházejí na elektrostatickém potenciálu  $\phi$ , potom ze zákona zachování energie plyne

$$\frac{1}{2}mv_x^2 + q\phi = \frac{1}{2}m(v_x^0)^2. \quad (4.3)$$

Diferencováním tohoto vztahu dostaneme

$$v_x dv_x = v_x^0 dv_x^0. \quad (4.4)$$

Dosazením tohoto vztahu do rovnice (4.2) dostáváme

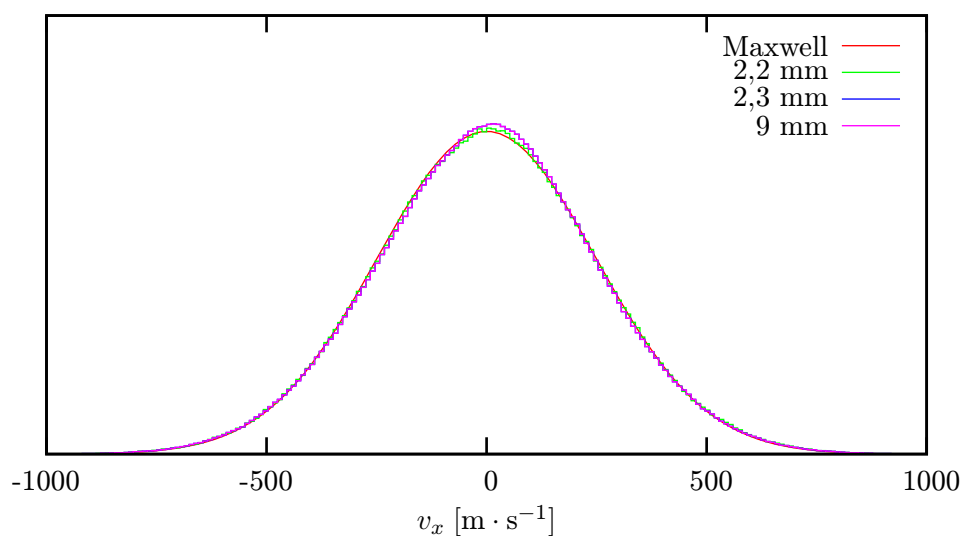
$$f(v_x) = f^0(v_x^0). \quad (4.5)$$

Pokud je rozdělení rychlostí  $f^0$  maxwellovské, tak ze vztahu (4.5) plyne, že i rozdělení  $f$  je maxwellovské a platí

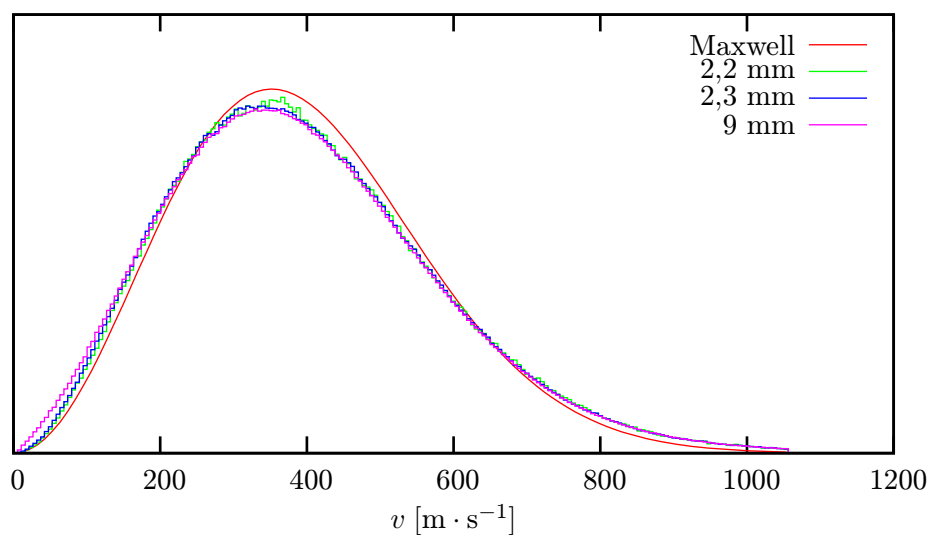
$$f(v_x) = f^0(v_x) \exp\left(-\frac{q\phi}{k_B T}\right). \quad (4.6)$$

Jak bylo možné očekávat, množství částic na potenciálu  $\phi$  je sníženo boltzmannovským faktorem  $\exp(-q\phi/k_B T)$ . Tvar rozdělovací funkce však zůstává maxwellovský.





**Obrázek 4.9:** Rozdělení  $x$ -ové složky rychlosti iontů v různých vzdálenostech od sondy ve srovnání s teoretickým Maxwellovým rozdělením. Interagující částice jsou generovány z rozdělení (3.32).



**Obrázek 4.10:** Rozdělení celkové rychlosti iontů v různých vzdálenostech od sondy ve srovnání s teoretickým Maxwellovým rozdělením. Interagující částice jsou generovány z rozdělení (3.32).

# Kapitola 5

## Dvourozměrný model

Jednorozměrný model sice poskytuje mnoho informací o chování plazmatu v okolí kovové sondy, možnosti jeho rozšíření jsou však značně omezené. Kromě rovinné konfigurace jej lze použít pouze pro válcovou a sférickou sondu. V případě rovinné symetrie má navíc vliv sondy na ionizaci plazmatu nekonečný dosah. Pokud bychom totiž zdvojnásobili velikost pracovní oblasti, pokles ionizace mezi sondou a neporušeným plazmatem bude opět přibližně lineární a tvar stínící oblasti se tím změní. Předpoklad rovinné symetrie tedy nutně dává v reálu nedosažitelné výsledky, které mají nanejvýše kvalitativní vypovídací hodnotu. V jednorozměrném modelu je také prakticky nemožné započítat působení magnetického pole, které má přitom ve fyzice plazmatu zásadní význam, neboť slouží k manipulaci s plazmatem například v tokamaku nebo v magnetronu.

Pro studium obecnější geometrie elektrod a případně také magnetického pole je tedy nutné použít nejméně dvourozměrný model. Od jednorozměrného modelu se liší především v konfiguraci počítačového experimentu. Předpokládá se translační symetrie ve směru  $z$ . Čtvercová pracovní oblast je obklopena neporušeným plazmatem, které je simulováno s užitím dříve vytvořeného analytického popisu rozhraní. Uprostřed oblasti je umístěna válcová sonda. Základní algoritmus dvourozměrného modelu zůstává stejný jako u jednorozměrného modelu, liší se pouze implementace jednotlivých kroků. Především jsou u každé částice známy všechny tři složky rychlosti a dvě polohové souřadnice. Další podstatný rozdíl spočívá v řešení Poissonovy rovnice pro skalární potenciál. Řešení pohybových rovnic je zcela analogické jednorozměrnému případu. Použité srážkové procesy jsou stejné jako u jednorozměrného modelu. Jejich implementace je opět analogická a v tomto případě dokonce jednodušší, neboť pracujeme s plnou informací o rychlosti částice. Podstatné odlišnosti budou dále uvedeny.

### 5.1 Řešení Poissonovy rovnice

Řešení Poissonovy rovnice

$$\nabla^2 U = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (5.1)$$

ve dvou dimenzích je podstatně výpočetně náročnější než v jedné dimenzi. Řešení je hledáno na dvourozměrné kartézské mříži. Diskretizací vztahu (5.1) dostáváme

$$\frac{U_{i-1,j} - 2U_{ij} + U_{i+1,j}}{\Delta x^2} + \frac{U_{i,j-1} - 2U_{ij} + U_{i,j+1}}{\Delta y^2} = -\frac{\rho_i}{\varepsilon_0}, \quad (5.2)$$

$$i = 1 \dots h_{\max} - 1, \quad j = 1 \dots h_{\max} - 1.$$

Za předpokladu, že  $\Delta x = \Delta y$ , lze vytvořit následující iterační formuli

$$U'_{ij} = \frac{1}{4}(U_{i+1,j} + U_{i-1,j} + U_{i,j+1} + U_{i,j-1} + (\Delta x)^2 \frac{\rho}{\varepsilon_0}), \quad (5.3)$$

kde  $U'_{ij}$  je nová hodnota potenciálu. Iterací tohoto vztahu lze potenciál vypočítat s libovolnou přesností. K urychlení konvergence výpočtu je použito superrelaxační metody (SOR). Ta spočívá ve vynásobení iteračního kroku faktorem  $\omega \in (1, 2)$ , tj. kombinací nové hodnoty se starou hodnotou potenciálu.

$$U'_{ij} = U_{ij} + \omega \left( \frac{1}{4}(U_{i+1,j} + U_{i-1,j} + U_{i,j+1} + U_{i,j-1} + (\Delta x)^2 \frac{\rho}{\varepsilon_0}) - U_{ij} \right). \quad (5.4)$$

Dle [12], str 866 je optimální volbou parametru  $\omega$

$$\omega = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho_{\text{jac}}^2}}, \quad \rho_{\text{jac}} = \cos(\pi/h_{\max}). \quad (5.5)$$

Jelikož tvar sondy je válcový, je potřeba na rozhraní se sondou použít speciální diferenční schéma. V okolí sondy je zachována pravoúhlost mříže. Pro druhou derivaci v bodě  $U_{ij}$ , kde vzdálenost bodů  $U_{i+1,j}$  resp.  $U_{i-1,j}$  je  $r$  resp.  $l$  platí

$$\frac{d^2 U_{ij}}{dx^2} \approx \frac{2}{l+r} \left( \frac{U_{i+1,j}}{r} - U_{ij} \left( \frac{1}{r} + \frac{1}{l} \right) + \frac{U_{i-1,j}}{l} \right). \quad (5.6)$$

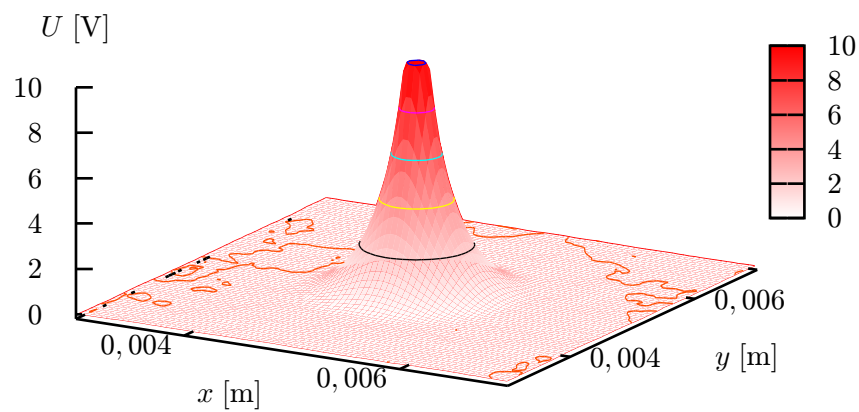
Analogickým postupem dostaneme iterační vztah

$$U_{ij} = \frac{r l t b}{r l + t b} \left( \frac{\rho}{2\varepsilon_0} + \frac{U_{i+1,j}}{r(r+l)} + \frac{U_{i-1,j}}{l(r+l)} + \frac{U_{i,j+1}}{t(t+b)} + \frac{U_{i,j-1}}{b(t+b)} \right), \quad (5.7)$$

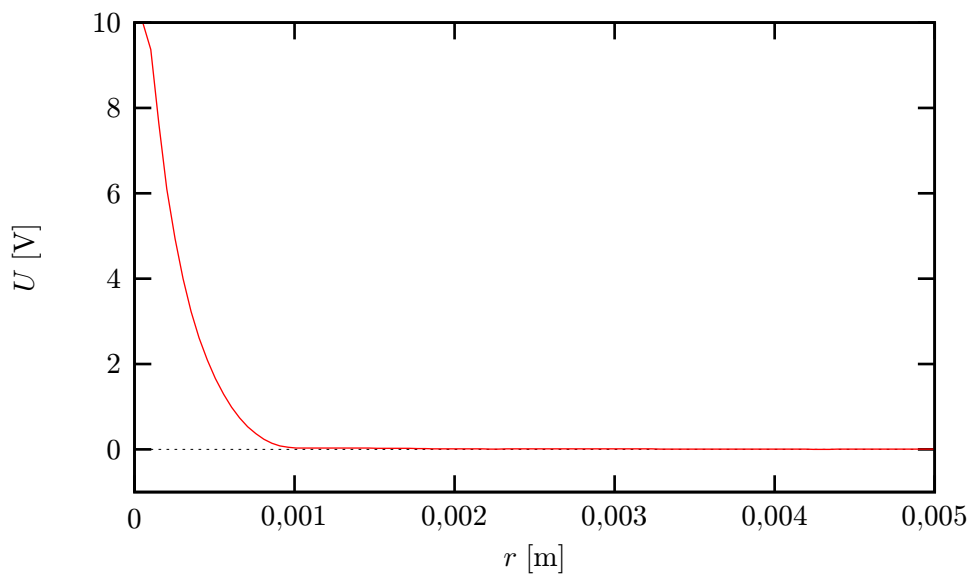
kde  $t$  resp.  $b$  jsou vzdálenosti bodů  $U_{i,j+1}$  resp.  $U_{i,j-1}$ .

## 5.2 Potenciál v okolí válcové sondy

Pomocí dvourozměrného modelu byl vypočten potenciál v okolí válcové sondy. Poloměr sondy byl zvolen jako  $100 \mu\text{m}$ . Potenciál byl určován na mříži velikosti  $200 \times 200$  při velikosti pracovní oblasti  $1 \times 1 \text{ cm}^2$ . Jelikož s rostoucím rozměrem mříže prudce roste doba potřebná k výpočtu potenciálu, byl pro urychlení výpočtu nejprve nalezen rovnovážný stav na mříži  $100 \times 100$  a po ustálení bylo přepnuto na jemnější mříž. Na obrázku 5.1 je projekce potenciálu v části pracovní oblasti v okolí sondy. Na obrázku 5.2 je zobrazen potenciál středovaný přes úhlovou souřadnici.



**Obrázek 5.1:** Potenciál v okolí válcové sondy o poloměru  $100\ \mu\text{m}$



**Obrázek 5.2:** Potenciál v okolí válcové sondy o poloměru  $100\ \mu\text{m}$

# Kapitola 6

## Závěr

Byl vytvořen jednorozměrný a dvourozměrný model interakce plazmatu s pevnou látkou – vodivou sondou. V případě jednorozměrného modelu byl zvolen rovinný tvar sondy, zatímco ve dvourozměrném modelu měla sonda tvar nekonečného válce. Možnosti vytvořených modelů byly ilustrovány výpočtem energetického rozdělení nabitých částic poblíž rovinné sondy (kap. 4) a výpočtem elektrostatického potenciálů v okolí válcové sondy (kap. 5).

Při vytváření modelu modelu byl zvláštní důraz kladen na přesnost výpočtu srážkových interakcí (kap. 3.3). Ukázalo se, že tato problematika je především v případě iontů poměrně složitá. Na základě požadavku na vyrovnanou teplotu iontů v objemu plazmatu byla zvolena vhodná aproximace pro generování interagujících atomů (kap. 4). Závislost energetického rozdělení interagujících atomů a střední volné dráhy na rychlosti sledované částice si však zasluhuje podrobnější zkoumání.

Další zpřesňování výpočtu interakcí by však nemělo smysl bez upřesnění vstupních dat, kterými jsou účinné průřezy interakcí. Případné rozšiřování vytvořeného modelu by se tedy mělo zaměřit na získání přesnějších experimentálních dat především pro účinné průřezy iontů o nízkých energiích.

# Příloha A

## Přehled fyzikálních konstant a parametrů modelu

symbol	popis	hodnota	jednotka
Fyzikální konstanty			
$\varepsilon_0$	Permitivita vakua	$8,854187817 \cdot 10^{-12}$	$\text{F} \cdot \text{m}^{-1}$
$k_B$	Boltzmannova konstanta	$1,380662 \cdot 10^{-23}$	$\text{J} \cdot \text{K}^{-1}$
$q_e$	Náboj elektronu	$-1,602189 \cdot 10^{-19}$	C
$M_e$	Hmotnost elektronu	$9,109534 \cdot 10^{-31}$	kg
$M_{\text{Ar}^+}$	Hmotnost iontu $\text{Ar}^+$	$6,68173 \cdot 10^{-26}$	kg
Parametry plazmatu			
$T_i$	Teplota iontů	300	K
$T_e$	Teplota elektronů	23209	K
$n$	Koncentrace nabitých částic	$1 \cdot 10^{15}$	$\text{m}^{-3}$
Parametry 1D modelu			
$U_s$	Napětí na sondě vůči plazmatu	10	V
$L$	Délka pracovní oblasti	1	cm
Parametry 2D modelu			
$U_s$	Napětí na sondě vůči plazmatu	10	V
$x_{\text{max}}$	Délka pracovní oblasti	1	cm
$y_{\text{max}}$	Šířka pracovní oblasti	1	cm
$r_s$	Poloměr válcové sondy	100	$\mu\text{m}$

# Literatura

- [1] Langmuir, I.: Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. **14**, 627-637 (1928)
- [2] Chen, F. F.: Úvod od fyziky plazmatu, Academia, Praha 1984
- [3] Debye, P., Hückel, E.: Physikalische Zeitschrift. **24**, 185-206 (1923)
- [4] Brown, S. C.: Basic Data of Plasma Physics: The Fundamental Data on Electrical Discharges in Gases, AIP Press, New York 1994
- [5] Horváth, M.: Doktorská práce, Univerzita Karlova, Praha 2002
- [6] Mott-Smith, H. M., Langmuir, I.: Phys. Rev., **28**, 727-763 (1926)
- [7] Sudit, D. I., Woods, R. C.: J. Appl. Phys., **76**, 4488-4498 (1994)
- [8] Trunec, D., Španěl, P., Smith, D., Contrib. Plasma Phys., **42**, 91-98 (2002)
- [9] Kim, H. C., Iza, F., Yang, S. S., Radmilović-Radjenović, M., Lee, J. K.: J. Phys. D: Appl. Phys. **38**, 283-R301 (2005)
- [10] Rektorys, K. a kol.: Přehled užití matematiky, Prometheus, Praha 2003
- [11] <http://integrals.wolfram.com>
- [12] Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., Flannery, B. P.: Numerical Recipes in C, Cambridge University Press 1992
- [13] Hutchinson, I., H.: Principles of Plasma Diagnostics, Cambridge University Press 1987
- [14] Mikulčák, J., Klimeš, B., Široký, J., Šůla, V., Zemánek, F.: Matematické fyzikální a chemické tabulky, Prometheus, Praha 1997.