

Plazma

Pod pojmem plazma většinou myslíme plynné prostředí, které se skládá z neutrálních částic, iontů a elektronů. Poměr množství neutrálních a nabitých částic může být zcela různý — nabitě částice v případě slabě ionizovaného plazmatu tvoří výrazně méně než procenta plynu, v tokamacích se naopak setkáváme i s plně ionizovaným plazmatem. Kladné a záporné náboje se však v plazmatu nemusí vyskytovat rovnoměrně rozdělené v objemu. Mohou vznikat oblasti s prostorovým nábojem nebo i proudy. Tyto jevy jsou zdrojem elektrického pole, které uvádí nabitě částice do komplikovaného pohybu. Po uplynutí relaxační doby plazma odstíní z velké části potenciály tak, aby byla koncentrace kladného a záporného náboje v rovnováze.

Ve vnitřních oblastech plazmatu v rovnováze není důvod k velkým rozdílům v koncentraci kladného a záporného náboje. Zcela rozdílná situace panuje v okolí stěn a zvláště pak v blízkosti sondy s připojeným potenciálem. Ve své bakalářské práci se věnuji především sondám s kladným potenciálem, protože studuji elektronovou složku plazmatu. Umístíme-li do nenarušeného plazmatu sondu s kladným potenciálem, kladně nabitě částice budou od sondy odpuzovány a záporně nabitě částice budou přitahovány. Současně okolní nenarušené plazma splňuje Maxwellovo rozdělení rychlostí, a proto z něj přicházejí do sondou narušené oblasti nové částice. Po uplynutí relaxační doby dojde k vytvoření rovnováhy. Ve své práci modeluji plazma, které se skládá z neutrálních atomů argonu, z kladně nabitých iontů argonu a z volných elektronů. V rovnováze se v okolí sondy vytvoří tenká stínící vrstva, která obsahuje pouze zanedbatelné množství kladných iontů. Tato vrstva se běžně nazývá *sheath*.

Modelování jevů v sheathu

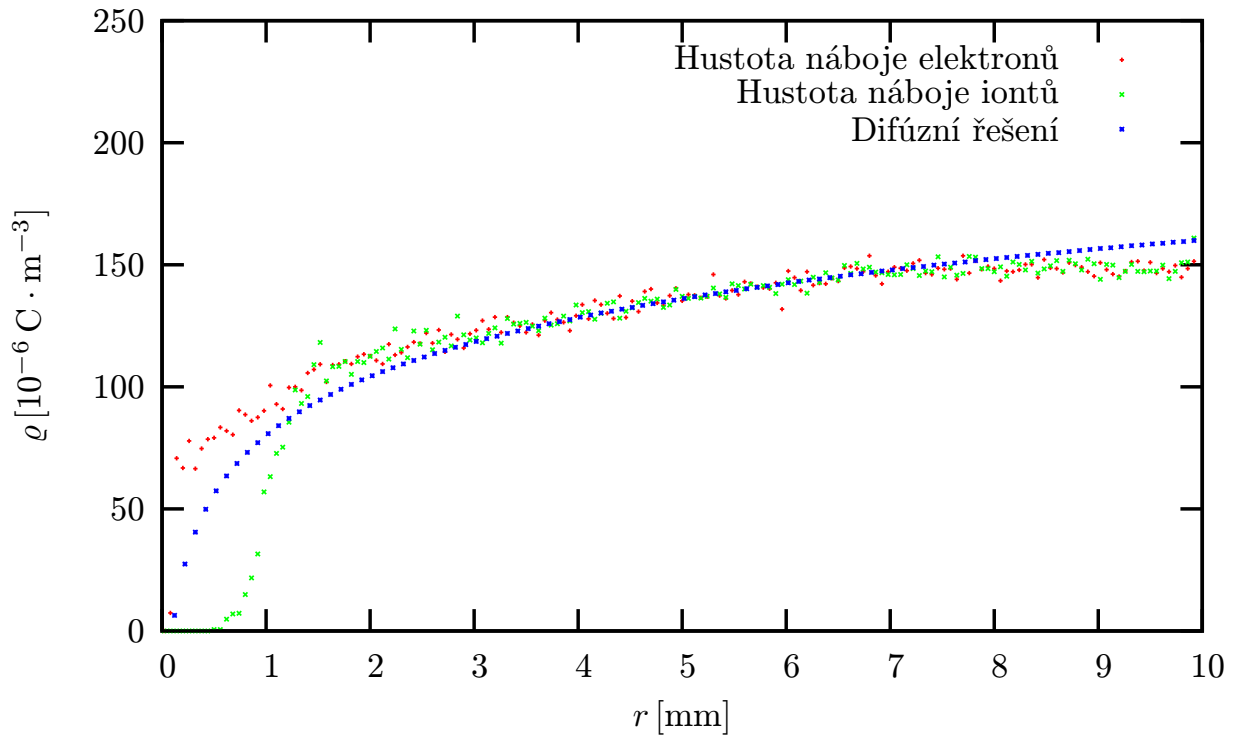
S příchodem rychlé počítačové techniky se otevřela nová možnost zkoumání jevů v sheathu — počítačový model. Ve své bakalářské práci se pokouším ze základních, především teoretických, poznatků o plazmatu vytvořit počítačový model, který by dokázal podat informace o významných jevech v okolí sondy. Analýzou těchto jevů by mohlo být možné rozšířit naše znalosti o charakteristikách Langmuirových sond. Langmuirova sonda je tvořena vodičem, často tenkým drátem válcového průřezu, který slouží k odebírání iontového nebo elektronového proudu z plazmatu. Podle [1] nebyl zatím vytvořen ucelený teoretický popis těchto sond, který by zohlednil i srážkové procesy v plazmatu, které jsou významné zvláště při vyšších tlacích.

Můj počítačový model plazmatu je rozdělen na dvě hlavní části: nabitě a neutrální částice. Každá část vyžaduje specifický přístup při výpočtech.

Nabitě částice jsou modelovány metodou molekulární dynamiky. Pohyb každé z nich se řídí Newtonovými rovnicemi, které jsou v modelu řešeny numericky Verletovým algoritmem, který představuje kompromisní volbu mezi přesností výpočtu a nároky na použitý hardware. Částice jsou pod vlivem dvou významných interakcí: coulombické a srážek s neutrály. V pracovní oblasti modelu jsou dva zdroje elektrických sil: nabitě částice a sonda. Pro výpočet síly na určitou částici je vhodné vypočítat potenciál elektrického pole v okolí částice. K tomuto účelu používám metodu *particle-in-cell (PIC)*, popis viz [2], která je dostatečně rychlá, aby byl výpočet proveditelný. Hledaná síla je potom záporně vzatým gradientem tohoto potenciálu. Použití metody PIC přináší mnohé další výhody, které výrazně zjednodušují výpočet.

Srážkové procesy představují podstatně větší problém. Jejich modely se stále vyvíjejí. Zde již nelze snadno oddělit nabitě a neutrální částice, protože mezi nimi dochází ke srážkám. V principu by bylo možné modelovat tyto srážky z prvních principů, ale takový model by nebyl prakticky proveditelný na současném hardware. Srážky je proto potřeba modelovat zcela odlišným způsobem. Pro tyto účely je výhodné použít metodu Monte Carlo.

Základem metody Monte Carlo je náhodná veličina. Například pro srážku je typická okamžitá vzdálenost mezi srážkami, kterou lze nahradit náhodnou veličinou, jejíž střední hodnota bude stejná jako střední volná dráha. V takovém případě není potřeba modelovat pohyb neutrálních částic, který z hlediska sondy není rozhodující, ale postačí srážky nabitých částic s neutrálními částicemi modelovat metodou Monte Carlo. Vzhledem k tomu, že zkoumané argonové plazma je ionizované jen velmi málo, metoda Monte Carlo přináší obrovské urychlení výpočtu.



Graf 1.: Rozdělení hustoty nabitých částic v plazmatu. Válcová sonda o polo-měru 0,1 mm je umístěna v počátku souřadnice r a její potenciál je 10 V vůči nenarušenému plazmatu.

Zásadní otázkou při realizaci modelu byla volba dimenze problému. Pro válcovou sondu se nabízí možnost práce ve válcových souřadnicích. V první části výpočtu jsem vytvořil jednorozměrný válcový model. Osa sondy je shodná s osou z . To je nejjednodušší možné přiblížení k trojrozměrné reálné situaci. Tato metoda přináší jednu zásadní chybu: částice nemůže sondu obletět. Na počátku

je pracovní oblast naplněná nenarušeným plazmatem, jehož koncentrace je difúzním řešením mezi vzdáleným plazmatem o konstantní koncentraci a nulovou koncentrací v těsné blízkosti sondy. Po spuštění výpočtu dojde vlivem pohybu nabitých částic k relaxaci a k ustálení sheathu. Příklad takového stavu je vyneseno v grafu 1.

V případě válcové konfigurace bylo nutné vypořádat se s šumem v blízkém okolí sondy, protože v této oblasti se nachází příliš malé množství částic a současně je požadována co největší přesnost výpočtu. Z tohoto důvodu jsem zavedl takzvané statistické váhy. Pokud se částice přiblíží k sondě, rozpadne se na dvě fiktivní částice se statistickou vahou 0,5. V ještě menší vzdálenosti od sondy dochází k dalšímu umělému rozpadu na částice s vahou 0,25. Důsledným započítáváním vah lze při stejných nárocích na strojový čas dosáhnout podstatně přesnějších výsledků.

Jednorozměrný model je již ve své podstatě velmi zjednodušený, a proto chceme-li srovnávat numerické výsledky s teoretickými poznatky, je potřeba model rozšířit minimálně do dvou dimenzí, aby se uplatnilo například obléhání sondy nabitými částicemi. Rozhodl jsem se rozšířit svůj model do dvou dimenzí neselfkonzistentním způsobem. To znamená, že potenciál v plazmatu nebudu počítat přímo z hustoty náboje přítomných nabitých částic, ale použiji výsledky jednorozměrného válcového modelu. Tento přístup se opírá o předpoklad, že pohyb jedné částice má zanedbatelný vliv na celkový potenciál v ustáleném plazmatu.

Pracovní oblastí neselfkonzistentního dvourozměrného modelu bude opět váleček s plazmatem, v jehož ose bude umístěna válcová sonda. Z oblasti nenarušeného plazmatu budou přicházet nabité částice a budou se pohybovat v ustáleném elektrickém poli a budou podstupovat srážky s ostatními částicemi podle dostupných srážkových modelů. Z těchto výsledků bych chtěl určit voltampérovou charakteristiku sondy. Voltampérová charakteristika totiž závisí na srážkových procesech v plazmatu, které jsou z experimentálních dat známy jen přibližně.

Zhodonocení dosavadní práce

Ve své práci jsem se nejprve seznámil s vlastnostmi Maxwellova rozdělení rychlostí a metodami generování náhodné rychlosti splňující toto rozdělení. Pokračoval jsem v tvorbě jednorozměrného kartézského modelu rovinné sondy v plazmatu. Tato část sloužila především k seznámení se s problematikou počítačového modelování plazmatu.

Model jsem dále rozšířil na válcovou jednorozměrnou konfiguraci. Nyní je potřeba do výpočtu začlenit co nejlepší modely srážek. Následovat bude generování závislosti potenciálu na souřadnici v ustáleném stavu a jeho využití v neselfkonzistentním modelu. Nakonec bych rád porovnal své výsledky s dostupnými teoretickými poznatky.

Literatura

- [1] Chen, F. F.: *Principles of plasma processing*, Los Angeles, 2002
- [2] Hrach, R.: *Počítačová fyzika I*, PF UJEP Ústí nad Labem, 2003