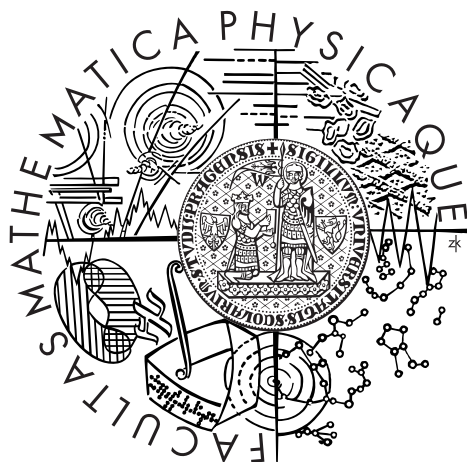


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Vojtěch Hrubý

Studium interakce plazma-pevná látka postupy počítačové fyziky

Katedra fyziky povrchů a plazmatu

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

Studijní program: Obecná fyzika

2007

Děkuji panu profesoru Hrachovi za významnou odbornou i duchovní podporu, své přítelkyni Janě za motivaci při práci a také projektu GNU za poskytnutí většiny softwaru použitého při tvorbě modelů.

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

V Praze dne 28. 5. 2007

Vojtěch Hrubý

Název práce: Studium interakce plazma-pevná látka postupy počítačové fyziky

Autor: Vojtěch Hrubý

Katedra (ústav): Katedra fyziky povrchů a plazmatu

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

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

Abstrakt: Práce je věnována počítačovému modelování procesů probíhajících při interakci plazmatu s kovovou elektrodou do plazmatu vnořenou. Vstupní data pro modelování jsou převzata z experimentů probíhajících v nízkoteplotním elektropozitivním plazmatu v kladném sloupci doutnavého výboje při středních tlacích. Na základě vyvinutých částicových modelů diskutujeme výsledky sondové diagnostiky plazmatu a srovnáváme závěry modelování s předpovědmi klasické Langmuirovy teorie odvozené pro velmi nízké tlaky a jejími rozšířeními pro tlaky vyšší.

Klíčová slova: Nízkoteplotní plazma, Langmuirova sonda, počítačový model

Title: Study of plasma-solid interaction by methods of computational physics

Author: Vojtěch Hrubý

Department: Department of Surface and Plasma Science

Supervisor: Prof. RNDr. Rudolf Hrach, DrSc.

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

Abstract: In the present work we study processes during interaction of plasma with metal probes using computer simulation. Input data for simulation are taken from experiments in low temperature plasma in the positive column of discharge in middle pressures. We discuss probe characteristics computed by the particle simulation. Conclusions of simulation are compared with results of the Langmuir's theory for very low pressures.

Keywords: Low temperature plasma, Langmuir's probe, computer simulation

Obsah

Obsah	4
1. Úvod	5
2. Seznámení s problematikou	6
2.1 Popis plazmatu	6
2.2 Srážkové procesy v plazmatu	6
2.3 Langmuirova sonda	8
2.4 Teorie Choua, Talbota a Willise	9
3. Cíl práce	11
4. Vytvořené modely	12
4.1 Generátor náhodných čísel	12
4.2. Maxwelllovo rozdělení rychlostí	12
4.3. Jednorozměrný model rovinné sondy	14
4.4. Jednorozměrný válcový model válcové sondy	17
4.5. Dvourozměrný model	21
5. Výsledky a diskuse	24
6. Shrnutí a závěr	29
Literatura	30
Příloha A: Použitá symbolika	31

1. Úvod

Pod pojmem plazma zpravidla myslíme plynné prostředí složené z neutrálních částic, iontů a elektronů. Náboj v plazmatu nemusí být v objemu rozložený rovnoměrně. Zásadní vliv na rozložení náboje v plazmatu mají okrajové oblasti. V této práci se zabýváme interakcí plazmatu a kovové sondy s předpětím. Sonda vložená do rovnovážného plazmatu vytvoří nerovnovážné podmínky, které vedou k rozdílnému pohybu kladného a záporného náboje vlivem gradientu potenciálu. Po relaxační době se plazma ustálí v novém stavu. V okolí sondy vznikne stínící vrstva běžně zvaná *sheath*.

V plazmatu současně probíhá mnoho dalších procesů. Na chování plazmatu mají zásadní vliv srážky částic. Srážkové procesy jsou stále předmětem důkladného experimentálního a teoretického zkoumání. Teprve při jejich dobrém pochopení můžeme vytvořit kvalitní modely plazmatu.

Tato práce se zabývá modelováním těchto jevů v plazmatu, především pak procesů ve stínící vrstvě. Zabýváme se zde interakcí rovinné sondy a plazmatu v jednorozměrném přiblížení, těžiště práce leží ve tvorbě válcového jednorozměrného modelu válcové sondy a pro porovnání s teoretickými poznatky je použit dvourozměrný neselfkonzistentní model válcové sondy.

Existují různé teorie pro výpočet sondové charakteristiky. Nejstarší Langmuirova teorie nezapočítává vliv srážek v sheathu, a proto platí pouze při nízkých tlacích. Následně vznikla celá řada korekčních metod. Výsledky této práce jsou srovnávány s teorií Choua, Talbota a Willise, která formou korekce přináší výrazné rozšíření teorie do oblasti vyšších tlaků.

2. Seznámení s problematikou

2.1 Popis plazmatu

Nízkoteplotní plazma je složeno ze třech druhů částic — elektronů, iontů a neutrálních atomů. V obecném případě můžeme mít více druhů iontů a neutrálů. Dále uvažujme pouze elektropozitivní plazma složené z neutrálních atomů argonu, iontů Ar^+ a elektronů. Předpokládejme, že v rovnovážném nenarušeném plazmatu splňují jednotlivé složky Maxwellovo rozdělení rychlostí

$$p(v) = \frac{2}{v_0^3 \sqrt{2\pi}} \cdot v^2 \cdot \exp\left(-\frac{v^2}{2v_0^2}\right), \quad (1)$$

kde

$$v_0 = \sqrt{\frac{k_B T}{m}}. \quad (2)$$

Parametr T znamená teplotu částic a určuje šířku rozdělení. Tato teplota je rozdílná pro každý druh částic, a proto takové plazma označujeme jako neizotermické. Teplotu iontů počítejme $T_i = 300 \text{ K}$ a teplotu elektronů $T_e = 23\,600 \text{ K}$, což odpovídá energii $E_e = 2 \text{ eV}$. Pokud by rychlosti elektronů splňovaly skutečně Maxwellovo rozdělení rychlostí, vyskytovala by se v plazmatu část elektronů, jejichž energie by byla vyšší než ionizační potenciál argonu a docházelo by k ionizaci neutrálů. Ve skutečnosti dojde k rovnováze mezi rekombinací a ionizací.

2.2 Srážkové procesy v plazmatu

Interakci částic v plazmatu rozdělíme pro potřeby modelů na dvě skupiny — vzájemné interakce nabitých částic a srážky nabitých částic s neutrály.

Vzájemné interakce nabitých částic, v našem případě to budou elektrony a kladné ionty argonu, budeme modelovat přímo jako interakci podle Coulombova zákona. Coulombova síla je dalekodosahová, a proto je nutné počítat současně interakci všech nabitých částic navzájem. S výhodou zde využijeme existence potenciálu elektrického pole. Magnetické pole budeme pro jeho malou velikost zanedbávat.

Srážky nabitých částic s neutrály probíhají při působení složitých krátkodosahových sil, které nelze snadno popsat. V této práci budeme vycházet z energetických

závislostí účinných srážkových průřezů jednotlivých interakcí, které vypočítala podle experimentálních dat Bogaertsová v [1].

Pro pružný rozptyl elektronu na neutrálním atomu argonu je účinný průřez

$$\sigma_{\text{ela}} = 10^{-16} \left| \frac{6}{\left(1 + \frac{E}{0,1} + \left(\frac{E}{0,6}\right)^2\right)^{3,3}} - \frac{1,1E^{1,4}}{\left(1 + \left(\frac{E}{15}\right)^{1,2}\right)\left(1 + \left(\frac{E}{5,5}\right)^{2,5} + \left(\frac{E}{60}\right)^{4,1}\right)^{0,5}} \right| +$$

$$+ 10^{-16} \frac{0,05}{\left(1 + \frac{E}{10}\right)^2} + 10^{-16} \frac{0,01E^3}{1 + \left(\frac{E}{12}\right)^6} \text{ cm}^2, \quad (3)$$

pro excitaci neutrálního atomu argonu elektronem

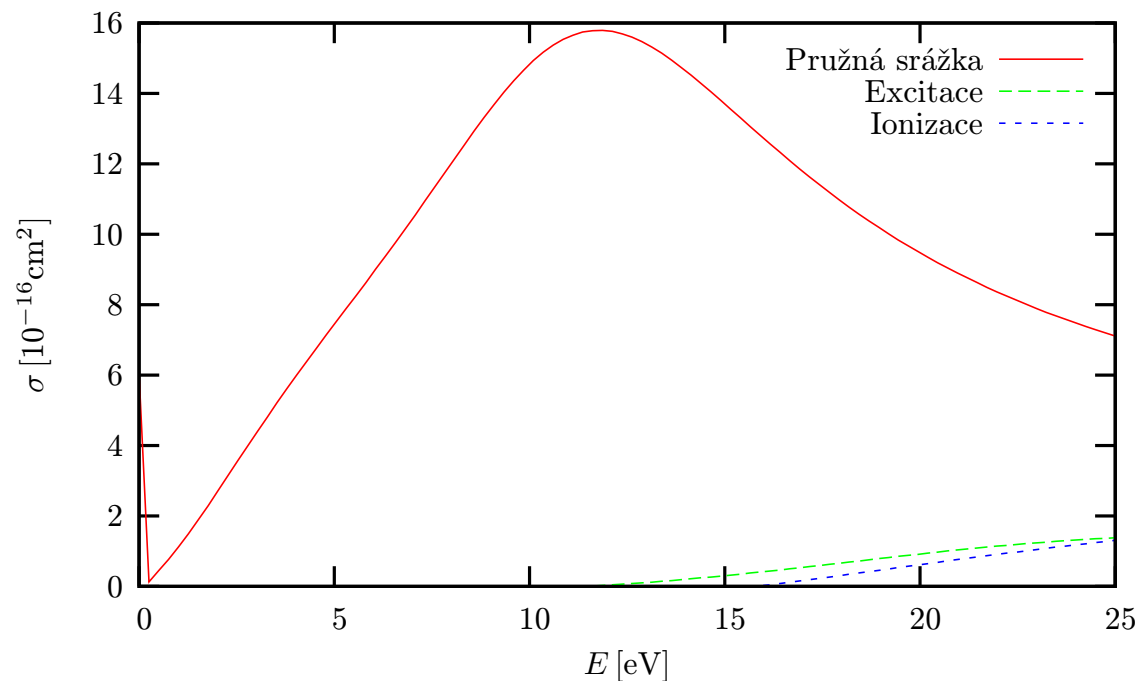
$$\sigma_{\text{exc}} = \frac{3,4 \cdot 10^{-18} (E - 11,5)^{1,1} \left(1 + \left(\frac{E}{15}\right)^{2,8}\right)}{1 + \left(\frac{E}{23}\right)^{5,5}} +$$

$$+ \frac{2,3 \cdot 10^{-18} (E - 11,5)}{\left(1 + \frac{E}{80}\right)^{1,9}} \text{ cm}^2 \quad (4)$$

a pro ionizaci neutrálního atomu argonu elektronem

$$\sigma_{\text{ion}} = \frac{9,7 \cdot 10^{-14} (E - 15,8)}{(70 + E)^2} + 6 \cdot 10^{-18} (E - 15,8)^2 \exp\left(-\frac{E}{9}\right) \text{ cm}^2, \quad (5)$$

kde E je energie elektronu v eV.



Obrázek 1.: Účinné průřezy různých druhů srážek při tlaku 133 Pa

Tyto závislosti jsou vyneseny na obrázku 1. Při pružné srážce dochází k malé ztrátě energie elektronu, při excitaci elektron ztratí část své energie ve prospěch excitace atomu argonu a při ionizaci ztrácí elektron energii, která je potřeba k uvolnění dalšího elektronu z elektronového obalu neutrálního atomu argonu.

Ve všech těchto případech dochází také ke změně směru pohybu elektronu. Pro jednoduchost předpokládejme úhlově izotropní rozptyl, přestože tento předpoklad není zcela oprávněný.

Srážky iontů s neutrály jsou pro naše modely méně důležité, protože zkoumáme elektronovou větev charakteristiky. Pro jednoduchost se omezíme pouze na pružné srážky. Účinný průřez těchto srážek budeme považovat za nezávislý na energii iontu.

2.3 Langmuirova sonda

Jednou z nejčastějších metod zkoumání nízkoteplotního plazmatu je sondová diagnostika. Langmuirova sonda je tvořena kovem nejčastěji ve formě tenkého drátku, který je vsunutý do zkoumaného místa v plazmatu. Pro různé aplikace lze použít dále například rovinnou nebo kulovou sondu, případně sondu se složitějším geometrickým uspořádáním.

V této práci se zabýváme elektronovou částí voltampérové charakteristiky. V takovém případě je na sondu připojeno kladné předpětí oproti nenarušenému plazmatu. Sonda s předpětím naruší kvazineutralitu plazmatu a vlivem vzniklého elektrického pole dojde přeskupení elektronů a iontů do nové rovnováhy. Vznikne tak stínící vrstva, která odstiňuje nenarušené plazma od sondy a kterou nazýváme sheath. V této vrstvě se nachází jen zanedbatelné množství kladných iontů, protože jsou odpuzovány kladným předpětím sondy. Elektrony jsou naopak přitahovány k sondě a vyrovnávají kladné předpětí. Elektrony dopadající na sondu vytvářejí elektrický proud, který měříme a jehož závislost na předpětí sledujeme.

Za hranicí sheathu leží ještě oblast slabě narušeného plazmatu, kterou nazýváme presheath. Teprve ve vzdálenosti několikanásobku tloušťky sheathu od sondy se nachází zcela nenarušené plazma. Z tohoto důvodu musíme zahrnout do modelů oblast výrazně větší než tloušťka sheathu.

Pro plazma můžeme například podle [2] vypočítat takzvanou Debyeovu stínící délku

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{n_e e^2}}. \quad (6)$$

p [Pa]	λ_D [mm]
13,3	1,06
39,1	0,61
133	0,34
665	0,15

Tabulka 1.: Debyeovy délky pro různé tlaky v použitém modelu

V nenarušeném plazmatu jsou vzdálenosti, na kterých se mění potenciál, podstatně větší než λ_D . Naopak rozměry sheathu jsou srovnatelné s λ_D . Příklady Debyeových délek pro různé tlaky v našem modelu jsou uvedeny v tabulce 1.

2.4 Teorie Choua, Talbota a Willise

Teorie Choua, Talbota a Willise (dále ChTW) je popsána v [3]. Rozšiřuje pomocí korekčního členu původní Lagmuirovu teorii popsanou rovněž v [3] na tlaky, při kterých již nelze zanedbat srážky v sheathu.

Zavedme normalizované veličiny

$$\eta = -\frac{eV}{k_B T_e}, \quad (7)$$

$$\chi = \frac{R}{r}, \quad (8)$$

$$I_e^* = \frac{I_e}{2\pi R l \cdot n_e e \sqrt{k_B T_e / 2\pi m_e}}. \quad (9)$$

a

$$\tau = \frac{T_e}{T_i}. \quad (10)$$

Veličiny s indexem p platí pro povrch sondy. Normalizovaný proud v závislosti na předpětí je podle teorie ChTW

$$I_e^* = \left(\exp(-\eta_p) + J_e / K_e \right)^{-1}, \quad (11)$$

kde J_e je korekční člen

$$J_e = \int_0^1 \exp \eta d\chi \quad (12)$$

a K_e je Knudsenovo číslo pro elektrony

$$K_e = \frac{\lambda_e}{R}. \quad (13)$$

V [3] je (12) počítán pomocí interpolačního vztahu

$$J_e = J_{e\infty} + \frac{J_{e0} - J_{e\infty}}{1 + K_e} \quad (14)$$

Pro J_{e0} platí přibližně vztah

$$J_{e0} = \eta_p C_0, \quad (15)$$

kde C_0 je konstanta závislá na geometrii soustavy. Výpočet $J_{e\infty}$ je složitější a vyžaduje numerickou integraci

$$J_{e\infty} = J_{e\infty}^{(1)} + J_{e\infty}^{(2)} = \int_0^{\eta_s} g(\tau, \delta_s, \eta) d\eta + \int_{\eta_s}^{\eta_p} h(\tau, \delta_s, \eta) d\eta, \quad (16)$$

kde η_s je normovaný potenciál v absorpčním radiu a je řešením implicitní rovnice

$$\eta_s = \frac{4}{\pi\tau} \left(4 \exp(-2\eta_s) - 1 \right). \quad (17)$$

Konkrétní tvar funkcí g a h je uveden v [3]. Parametr δ_s je numericky určená konstanta.

V původní práci [4] se uvádí, že výpočet J_e je velmi komplikovaný a těžko lze dosáhnout uspokojivé přesnosti. Z tohoto důvodu v této práci nebude J_e počítáno z teorie, ale omezíme se na odhad z počítačového experimentu.

3. Cíl práce

Cílem této práce je vytvořit různé modely interakce plazmatu s Langmuirovou sondou a porovnat jejich výsledky s teoretickými poznatky. Prvním stupněm práce bude tvorba jednorozměrného modelu rovinné sondy. S rovinnou sondou se v praxi setkáváme jen málo. Tento model však poslouží k otestování programátorských postupů, které budou aplikovány v dalších modelech.

Dalším krokem práce bude vytvoření jednorozměrného válcového modelu interakce plazmatu a válcové Langmuirovy sondy. Válcová sonda je velmi často používána pro diagnostiku nízkoteplotního plazmatu a díky tomu existují dobře vypracované teorie k této geometrické konfiguraci, například výše zmíněná teorie Choua, Talbota a Willise.

Samotný jednorozměrný válcový model nemá ještě dostatečnou vypovídací hodnotu, a proto bude rozšířen o neselfkonzistentní dvourozměrný model válcové sondy. V tomto modelu neprobíhá výpočet průběhu potenciálu v plazmatu, ale potenciál je převzat z výsledků jednorozměrného válcového modelu.

Sondové charakteristiky získané výpočty ve dvourozměrném neselfkonzistentním modelu budou porovnány s výsledky teorie Choua, Talbota a Willise.

4. Vytvořené modely

4.1 Generátor náhodných čísel

Modely interakce plazmatu s pevnou látkou popisované v této práci jsou založeny na metodách molekulární dynamiky a Monte Carlo. V metodě Monte Carlo provádíme podle našeho modelu různé transformace náhodné veličiny s rovnoměrným rozdělením. Z tohoto důvodu je potřeba věnovat pozornost generátoru náhodných čísel.

Náhodnou veličinu s rovnoměrným rozdělením na intervalu $(0; 1)$ budeme značit γ . Interval je zleva otevřený, abychom vyloučili případné dělení nulou. Pravděpodobnost, že by generátor náhodných čísel vrátil nulovou hodnotu, je sice minimální a v některých algoritmech dokonce nulová, ale vyloučíme-li tuto hodnotu již v definici, nebudeme muset ošetřovat dělení nulou v programech.

Všechny vytvořené programy používaly jako generátor funkci

```
long int random(void);
```

programovacího jazyka C s překladačem GCC verze 4.1.2. Pro porovnání byl jednorozměrný model rovinné sondy spuštěn také s Parkovým-Millerovým generátorem popsaným v [5], pro který platí vztah

$$I_{j+1} = aI_j \bmod m, \quad (18)$$

kde

$$a = 7^5 \quad \text{a} \quad m = 2^{31} - 1. \quad (19)$$

Tento generátor je podle [5] vhodný pro posuzování kvality jiných generátorů. Programy dosáhly stejných výsledků s tímto generátorem i s generátorem překladače GCC v rámci požadované chyby výpočtu.

4.2. Maxwellovo rozdělení rychlostí

Jak již bylo výše uvedeno, částice v nenarušeném plazmatu splňují Maxwellovo rozdělení rychlostí, jehož rozdělovací funkce je (1), tedy

$$p(v) = \frac{2}{v_0^3 \sqrt{2\pi}} \cdot v^2 \cdot \exp\left(-\frac{v^2}{2v_0^2}\right),$$

kde

$$v_0 = \sqrt{\frac{k_B T}{m}}.$$

Generování rychlostí podle Maxwellova rozdělení se nutně vícekrát v modelech aplikuje. Pro tyto účely existuje několik metod.

Přímočará metoda vede k numerickému výpočtu integrálu rozdělovací funkce

$$F(x) = \int_0^x p(v) dv, \quad (20)$$

ze kterého můžeme snadno rozehrát náhodnou rychlost s Maxwellovým rozdělením inverzní funkcí

$$v_\gamma = F^{-1}(\gamma). \quad (21)$$

Tímto způsobem získáme pouze velikost rychlosti. V modelech však převážně potřebujeme znát také složky rychlosti, které rozehrajeme podle vzorců

$$v_x = v \cos \varphi \sin \theta, \quad (22)$$

$$v_y = v \sin \varphi \sin \theta, \quad (23)$$

$$v_z = v \cos \theta, \quad (24)$$

kde úhly jsou rozehrané podle vztahů

$$\varphi = 2\pi\gamma_1 \quad (25)$$

a

$$\theta = \arccos(1 - 2\gamma_2). \quad (26)$$

Velkou předností této metody je možnost jejího použití i pro jiná rozdělení, než je Maxwellovo. V celé práci byla použita lichoběžníková metoda numerické integrace.

Alternativní metoda generování rychlostí s Maxwellovým rozdělením vychází z poznatku, že v trojrozměrném prostoru mají odpovídající kartézské složky rychlosti gaussovské rozdělení, které můžeme snadno rozehrát vzorcem uvedeným v [6]

$$v_i = v_0 \sqrt{-2 \log \gamma_1} \sin 2\pi\gamma_2. \quad (27)$$

Pro správnou funkci modelu je nutné co nejlépe splnit okrajové podmínky. Hranice pracovní oblasti by měla umožňovat správný průchod částic dovnitř a ven. Pokud částice

projde hranicí ven, je z modelu vyřazena. Tok částic do pracovní oblasti je simulován tzv. *zdrojem*. Zdroj je tvořen generátorem částic s rozdělením rychlostí podle toku Maxwellova rozdělení ve směru kolmém na plochu hranice oblasti.

V modelech byly vyzkoušeny dvě varianty zdroje. V první variantě je rychlost ve směrech y a z , které jsou rovnoběžné s rovinou hranice, rozehrávána opět pomocí vzorce (27). Ve směru x je však nutné generovat rychlost podle toku Gaussova rozdělení, pro který můžeme odvodit vzorec

$$v_x = v_0 \sqrt{-2 \log \gamma}. \quad (28)$$

Odvození bylo provedeno hledáním inverzní funkce F^{-1} , která vystupuje ve vztahu (21). Tuto inverzní funkci vypočítáme integrálem

$$F(x) = \int_0^x v_x p(v_x) dv_x, \quad (29)$$

kde $p(v_x)$ je Gaussova rozdělovací funkce $\Gamma(0; 1)$.

Ve finální verzi modelů však byla použita obecnější varianta. Vně hranice pracovní oblasti modelujeme nenarušené plazma, ze kterého necháme procházet částice do pracovní oblasti. Tato metoda je obecnější, protože ji lze aplikovat i na jiná rozdělení rychlostí, pro která nemusí existovat analytický transformační vztah z náhodné veličiny γ .

4.3. Jednorozměrný model rovinné sondy

V jednorozměrném modelu je modelována interakce plazmatu a nekonečně rozlehlé rovinné sondy. Model pracuje pouze v jedné souřadnici x , jejíž osa je kolmá na sondu. Pro popis rychlosti jsou potřeba minimálně dvě souřadnice — rychlost v_x a například rychlost kolmá na osu x , kterou můžeme označit v_{yz} . Ve vytvořeném modelu však byla použita kompletní informace o rychlosti v_x , v_y a v_z z důvodu snadnější přenositelnosti do válcového modelu.

Pohyb a vzájemná interakce částic plazmatu jsou modelovány hybridním způsobem, který spojuje metodu molekulární dynamiky a metodu Monte Carlo, aby bylo dosaženo přijatelné výkonnosti programu. Modelované plazma je zde chápáno jako směs kladných iontů Ar^+ , elektronů a neutrálních atomů argonu. Pohyb iontů a elektronů je modelován metodou molekulární dynamiky s použitím Verletova algoritmu, který je

popsaný v [6]. Pro výpočet pohybu těchto částic je potřeba vypočítat jejich vzájemné silové působení a vliv elektrického pole sondy. Sonda je umístěna v poloze $x = 0$ a její potenciál vůči plazmatu je V_0 , což je často nazýváno předpětím sondy. Délka pracovní oblasti je $L = 0,01$ m a potenciál v této vzdálenosti od sondy je definován $V_L = 0$ V.

Síla působící na částici v libovolném bodě je počítána metodou *particle-in-cell* (PIC), která je popsána v [6]. Pracovní oblast je rozdělena na 1000 stejně dlouhých intervalů, ve kterých se provede součet přítomného náboje. Potenciál v libovolném bodě je určen Poissonovou rovnicí

$$\frac{d^2u}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon_0}, \quad (30)$$

kde $\rho(x)$ je hustota náboje a u je potenciál. Za účelem výpočtu potenciálu metodou PIC rovnici diskretizujeme do tvaru

$$u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1} = -(\Delta x)^2 \frac{\rho_i}{\varepsilon_0}, \quad (31)$$

kde Δx je délka jednoho intervalu. Okrajové podmínky této úlohy jsou výše zmíněné potenciály V_0 a V_L . Řešení pomocí Gaussovy eliminace je popsáno v [7]. Pro potenciál u_{N-1} platí

$$u_{N-1} = \frac{V_0 + (N-1)V_L + \sum_{k=1}^{N-1} k\rho_k/\varepsilon_0}{N}. \quad (32)$$

Díky tomu, že $u_N = V_L$ a $u_0 = V_0$, pak lze vypočítat potenciál v libovolném bodě podle vztahu (31).

Neutrální atomy jsou modelovány zcela odlišným způsobem. Vzhledem k tomu, že nejsou ovlivněny elektrickým polem, jejich pohyb není z hlediska tvorby stínící vrstvy zajímavý přímo, ale pouze z hlediska srážek s ionty a elektrony. Pro modelování těchto srážkových procesů je velmi vhodná a efektivní metoda Monte Carlo založená na výpočtu náhodné volné dráhy popsaná v [6].

Náhodnou volnou dráhu rozehrajeme podle vzorce

$$\lambda_\gamma = -\lambda \log \gamma, \quad (33)$$

kde λ je střední volná dráha iontu nebo elektronu. Jakmile částice urazí tuto dráhu, modelujeme srážku. Jak již bylo výše uvedeno, účinné průřezy a tím i příslušné volné

dráhy různých typů srážek závisí na energii částice, a proto je nutné použít metodu nulové srážky. Pro celkový účinný průřez srážek platí

$$S = S_1 + S_2 + \dots + S_{k-1} + S_k = \frac{1}{\lambda n}, \quad (34)$$

kde S_1 až S_{k-1} jsou skutečné srážkové procesy a S_k je tzv. *nulová srážka*. Při nulové srážce nedojde k žádné změně pohybu částice, pouze se provede nové rozehrání náhodné volné dráhy. Účinný průřez nulové srážky volíme tak, aby celkový účinný průřez S byl konstantní. Jedině v takovém případě je konstantní také celková střední volná dráha a platí vzorec (33).

Metodu nulové srážky používáme pro rozehrávání srážek elektronů s neutrálními atomy. Pro rozehrávání srážek iontů s neutrálními atomy postačuje použití vzorce (33), protože považujeme v tomto modelu účinný průřez výše zmíněné pružné srážky iontů s neutrálními atomy za nezávislý na energii iontu.

Kdybychom sondu odstranili a nechali v počátku pouze prázdný prostor, který by odebíral částice, projevila by se jen difúze plazmatu, pro kterou platí

$$\frac{d^2 n(x)}{dx^2} = 0, \quad (35)$$

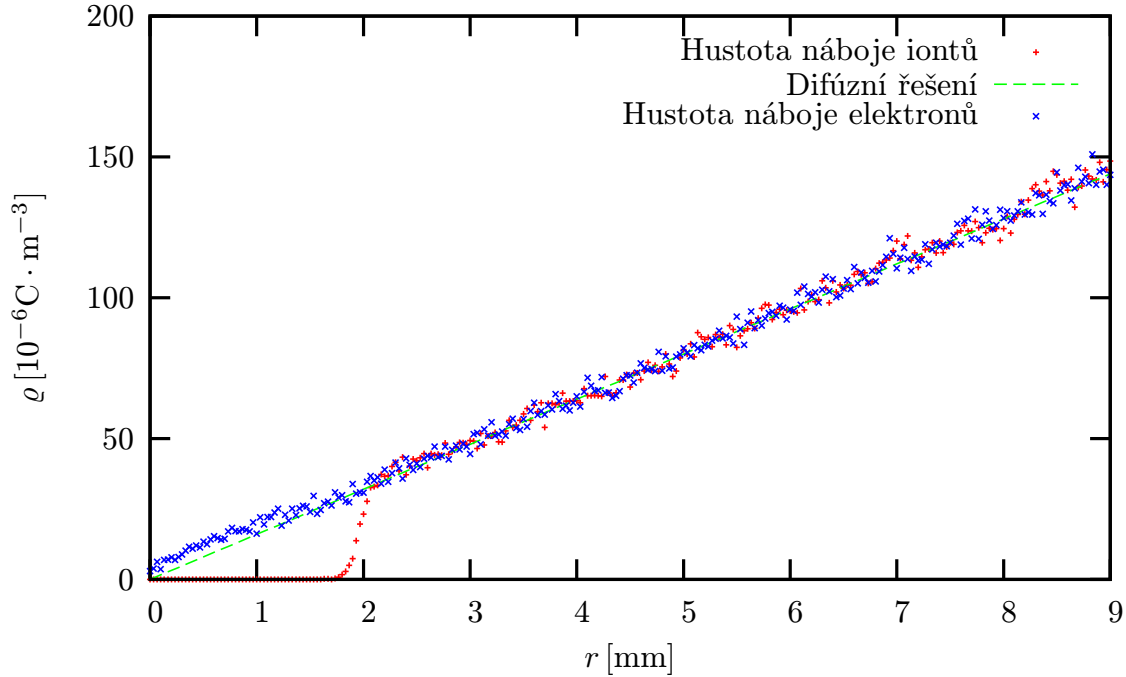
kde $n(x)$ je koncentrace částic. Uvážíme-li okrajové podmínky $n(0) = 0$ a $n(L) = n$, pak koncentrace částic v pracovní oblasti závisí na souřadnici x lineárně

$$n(x) = \frac{1}{2} n \frac{x}{L}. \quad (36)$$

Pokud je na sondu přiloženo napětí, vytvoří se v jejím okolí přechodová oblast, která se v průběhu potenciálu v plazmatu projeví jako ostrý zlom a současně prudkým nárůstem koncentrace iontů. Tyto jevy jsou patrné na obrázcích 2 a 7.

Výše uvedená linearita difúzního řešení závislosti koncentrace částic na souřadnici x je zásadním nedostatkem jednorozměrného modelu, protože vlastnosti modelované stínící vrstvy pak silně závisí na délce pracovní oblasti.

Pro snížení šumu výsledných rozdělení koncentrací částic byl použit filtr Savitzkého-Golaye podle [5].



Obrázek 2.: Hustota nabitých částic v pracovní oblasti 1D modelu při tlaku 133 Pa a předpětí na sondě 5 V.

4.4. Jednorozměrný válcový model válcové sondy

Langmuirova sonda je ve skutečných aparaturách nejčastěji tvořena tenkým drátkem, a proto je velmi důležité studovat vlastnosti válcové sondy. Nejmeněrozměrný model, kterým lze popsat válcovou sondu, je jednorozměrný válcový model.

Pro výpočty je velmi výhodné využít válcové symetrie sondy a ztotožnit osu sondy s osou z válcového souřadného systému (r, φ, z) . Ve výpočtech sledujeme pouze souřadnici r .

Tato geometrie ovšem vyžaduje korekce ve Verletově algoritmu výpočtu pohybu nabitých částic. Zde je již nezbytné pracovat s kompletní třírozměrnou informací o rychlosti. Válcová geometrie je určena transformací souřadnic

$$\begin{aligned}
 x &= r \cos \varphi, \\
 y &= r \sin \varphi, \\
 z &= z
 \end{aligned}
 \tag{37}$$

Pro rychlosti v kartézské soustavě pak platí

$$\dot{x} = \dot{r} \cos \varphi - r \dot{\varphi} \sin \varphi,$$

$$\begin{aligned}\dot{y} &= \dot{r} \sin \varphi + r \dot{\varphi} \cos \varphi, \\ \dot{z} &= \dot{z}.\end{aligned}\tag{38}$$

Další derivací dostáváme zrychlení v kartézské soustavě

$$\begin{aligned}\ddot{x} &= \ddot{r} \cos \varphi - 2\dot{r}\dot{\varphi} \sin \varphi - r\ddot{\varphi} \sin \varphi - r\dot{\varphi}^2 \cos \varphi, \\ \ddot{y} &= \ddot{r} \sin \varphi + 2\dot{r}\dot{\varphi} \cos \varphi + r\ddot{\varphi} \cos \varphi - r\dot{\varphi}^2 \sin \varphi, \\ \ddot{z} &= \ddot{z}.\end{aligned}\tag{39}$$

Vhodným vynásobením rovnic $\sin \varphi$ a $\cos \varphi$ a sečtením, resp. odečtením dostaneme

$$\ddot{r} = \ddot{x} \cos \varphi + \ddot{y} \sin \varphi + \frac{(r\dot{\varphi})^2}{r}, \quad \text{tedy} \quad \frac{dv_r}{dt} = a_r + \frac{v_\varphi^2}{r}\tag{40}$$

a

$$\frac{d(r\dot{\varphi})}{dt} = \dot{y} \cos \varphi - \dot{x} \sin \varphi - \frac{\dot{r}(r\dot{\varphi})}{r}, \quad \text{tedy} \quad \frac{dv_\varphi}{dt} = -\frac{v_r v_\varphi}{r}.\tag{41}$$

V posledních úpravách bereme v úvahu, že síla působí pouze do středu soustavy. Pod symbolem a_r rozumíme zrychlení způsobené celkovou centrální silou

$$a_r = \frac{F}{m}.\tag{42}$$

Rychlost v_z částice se nemění, protože v tomto směru nepůsobí žádná síla a osa z je totožná s kartézskou osou.

Poissonovu rovnici vyřešíme metodou popsanou v [7]. Potřebujeme numericky vyřešit Poissonovu rovnici ve válcových souřadnicích

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{du}{dr} = -\frac{\rho(r)}{\varepsilon_0}.\tag{43}$$

Souřadnici r popíšeme diskrétně rozdělením na n intervalů délky Δr . Pro uzlové body číslované indexem $i \in \langle 0; n \rangle$ pak přibližně platí

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_i} \cdot \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta r} = -\frac{\rho_i}{\varepsilon_0}.\tag{44}$$

Po drobné úpravě dostaneme

$$u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1} + \frac{\Delta r}{2r_i}(u_{i+1} - u_{i-1}) = p_i, \quad \text{kde} \quad p_i = -(\Delta r)^2 \frac{\rho_i}{\varepsilon_0},\tag{45}$$

což můžeme dále upravit do přehledného tvaru

$$u_{i+1} \left(1 + \frac{1}{2i}\right) - 2u_i + u_{i-1} \left(1 - \frac{1}{2i}\right) = p_i.$$

Koeficienty p_i získáme ze znalosti rozložení náboje v plazmatu. Dále máme zadané okrajové podmínky

$$u_p = V_0 \quad \text{a} \quad u_n = V_L,$$

kde index p odkazuje na hranici sondy. Toto zadání postačuje k nalezení potenciálu ve všech uzlech mezi sondou a okrajem pracovní oblasti. Úlohu můžeme přepsat maticově

$$\begin{pmatrix} \cdot & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 1 + \frac{0.5}{p-1} & 0 & 0 & 0 \\ 1 - \frac{0.5}{p} & -2 & 1 + \frac{0.5}{p} & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{0.5}{p+1} & -2 & 1 + \frac{0.5}{p+1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \frac{0.5}{p+2} & -2 & 1 + \frac{0.5}{p+2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ V_0 \\ u_{p+1} \\ \cdot \\ u_{n-1} - V_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ p_1 \\ \cdot \\ p_{n-1} \end{pmatrix} \quad (46)$$

zkráceně

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{p}. \quad (47)$$

Podari-li se nám vypočítat potenciál u_{p+1} , pak můžeme vypočítat ze znalosti V_0 i hodnoty potenciálu ve všech ostatních bodech. Použijeme Gaussovu eliminační metodu. Každou rovnici vynásobíme koeficientem K_i a rovnice sečteme. Koeficienty K_i volíme tak, aby celkový koeficient před u_i byl nulový. To ovšem nelze splnit pro okrajové potenciály V_0 , V_L a u_{p+1} , což je řešení našeho problému. Takové koeficienty K_i splňují posloupnost

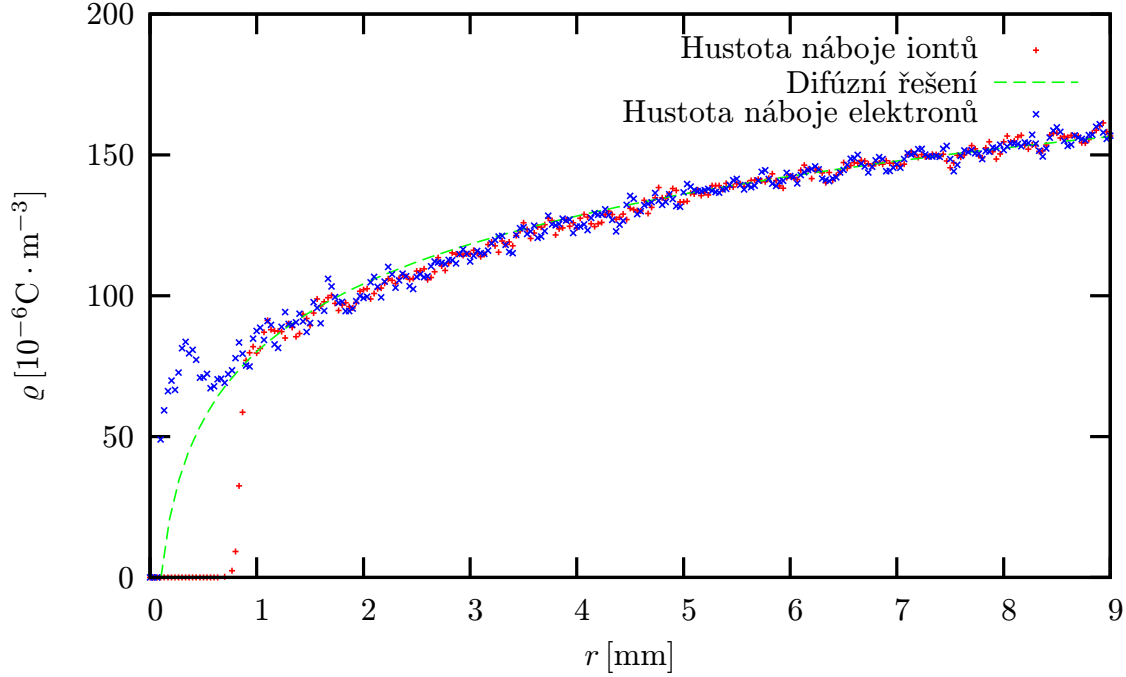
$$K_{n-1} = 1 \quad (48)$$

$$K_{n-2} = \frac{2}{1 + \frac{0.5}{n-2}} \quad (49)$$

$$K_i = \frac{2K_{i+1} - K_{i+2} \left(1 - \frac{0.5}{i+2}\right)}{1 + \frac{0.5}{i}}. \quad (50)$$

Z Gaussovy eliminace pak plyne

$$u_{p+1} = \frac{K_p V_0 \left(1 - \frac{0.5}{p}\right) - \sum_{i=p+1}^{n-1} K_i p_i + V_L K_{n-1}}{2K_p - K_{p+1} \left(1 - \frac{0.5}{p+1}\right)}. \quad (51)$$



Obrázek 3.: Hustota náboje iontů a hustota náboje elektronů v pracovní oblasti válcového modelu při tlaku 133 Pa a předpětí na sondě 5 V.

Také pro válcový model můžeme vypočítat difúzní řešení závislosti objemové koncentrace částic na souřadnici. Úloha

$$\Delta n = 0 \quad (52)$$

přechází ve válcových souřadnicích na tvar

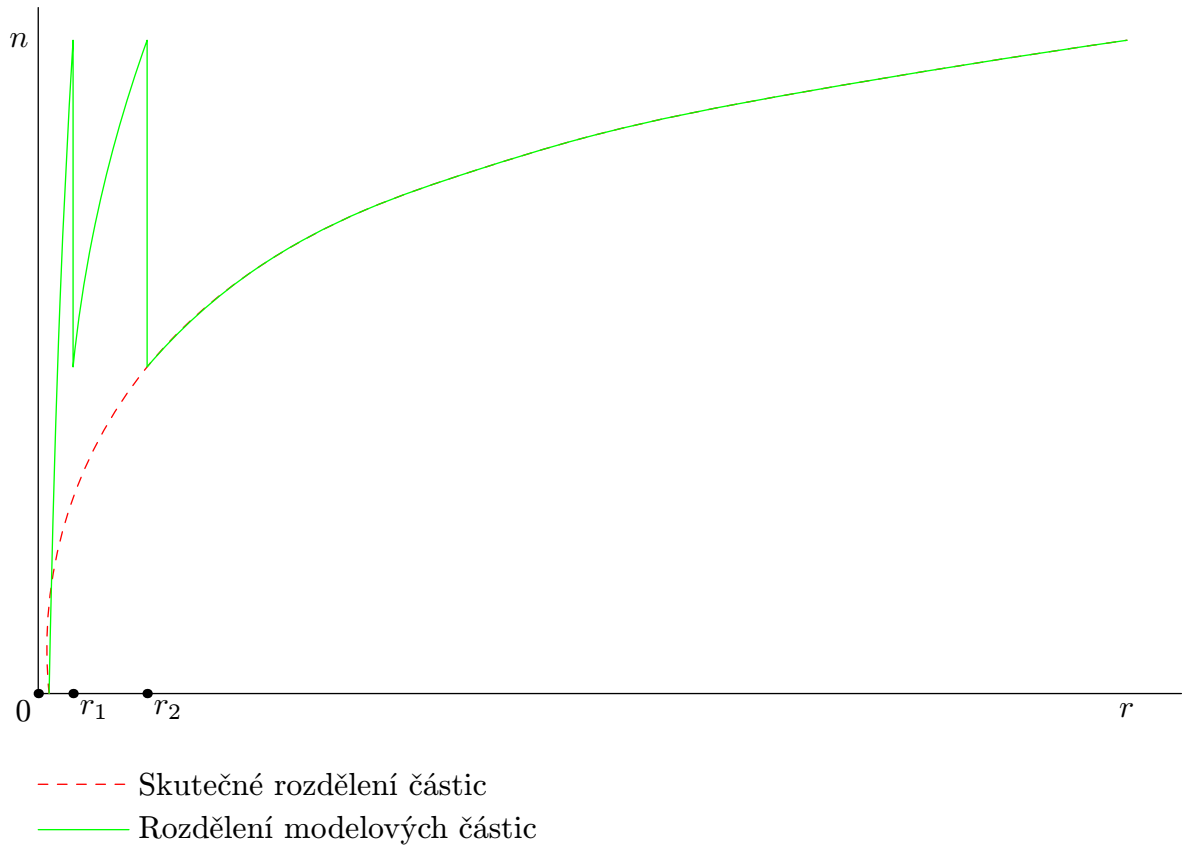
$$\frac{d^2 n}{dr^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{dn}{dr} = 0. \quad (53)$$

Pro okrajové podmínky $n(R) = 0$ a $n(L) = n$ dostaneme řešení

$$n(x) = n \frac{\ln x/R}{\ln L/R}. \quad (54)$$

Na rozdíl od modelu rovinné sondy se zde setkáváme se zvýšeným šumem v blízkosti sondy. Díky válcové konfiguraci v této oblasti na jednotku vzdálenosti r od sondy připadá méně částic než ve větší vzdálenosti. Současně však požadujeme co největší přesnost výpočtu právě v blízkosti sondy. Z tohoto důvodu můžeme použít umělý obrat a zavést statistickou váhu částic.

Každé částici přiřadíme novou vlastnost — statistickou váhu, která nemá přímý fyzikální význam. Částice ve větší vzdálenosti od sondy než r_2 mají váhu 1 a mají



Obrázek 4.: Náčrtek rozdělení částic skutečných a modelových ve válcovém modelu se statistickými vahami

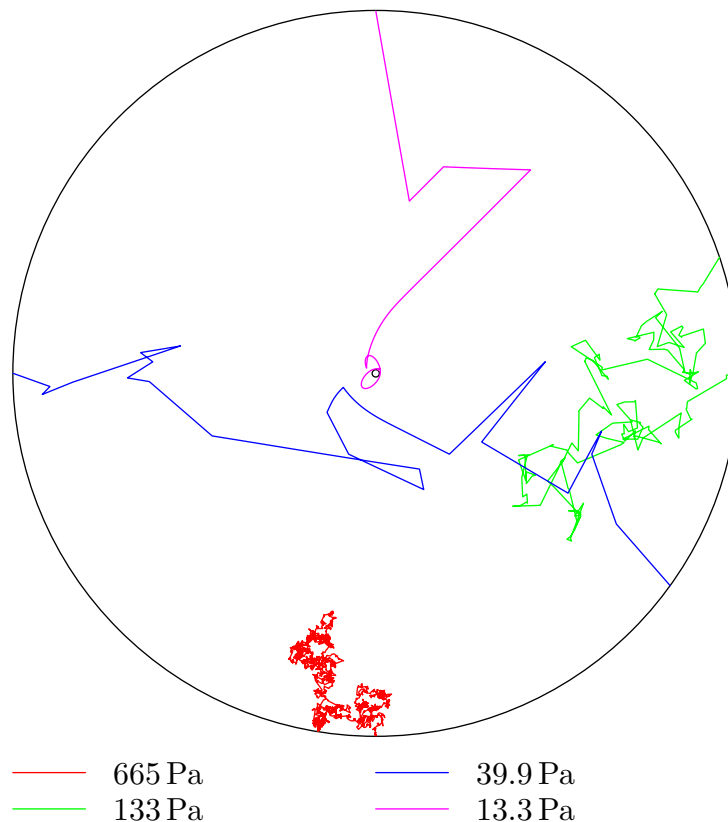
přímý fyzikální význam. Částice v oblasti ohraničené r_1 a r_2 mají statistickou váhu 0,5, což znamená, že mají poloviční náboj a hmotnost a přispívají tak poloviční měrou k výslednému rozdělení náboje. Aby byly zachovány kolektivní vlastnosti plazmatu, je jich potřeba dvojnásobný počet. V vzdálenosti menší než r_1 se nacházejí částice se statistickou vahou 0,25 a je jich čtyřnásobný počet. Tímto způsobem lze snížit šum při zachování počtu částic v pracovní oblasti, což je žádoucí vzhledem k rychlosti výpočtu. Koncentrace modelových částic pro difúzní řešení je uvedena na obrázku 4.

4.5. Dvourozměrný model

Dvourozměrný model přináší oproti výše popsanému válcovému modelu lepší přiblížení ke skutečnému chování válcové sondy. Pracovní oblastí je kruh o poloměru L , jehož středem prochází kolmo na jeho plochu osa sondy. Pohyb částic sledujeme ve dvou souřadnicích a počítáme všechny tři složky rychlosti.

V této práci byla použita neselfkonzistentní metoda výpočtu sondové charakteristiky v dvourozměrném modelu. Předpokládejme, že potenciál v plazmatu je jen zanedbatelně ovlivněn polem jedné nabitě částice. Díky tomuto předpokladu můžeme modelovat pohyb jediné částice ve statickém poli pracovní oblasti pod vlivem srážkových procesů. Průběh potenciálu počítáme v jednorozměrném modelu a výsledky použijeme jako závislost potenciálu na vzdálenosti od sondy bez ohledu na úhel.

Model srážek s neutrály je stejný jako v předchozích případech.



Obrázek 5.: Trajektorie elektronů v pracovní oblasti za různých tlaků při předpětí 10 V

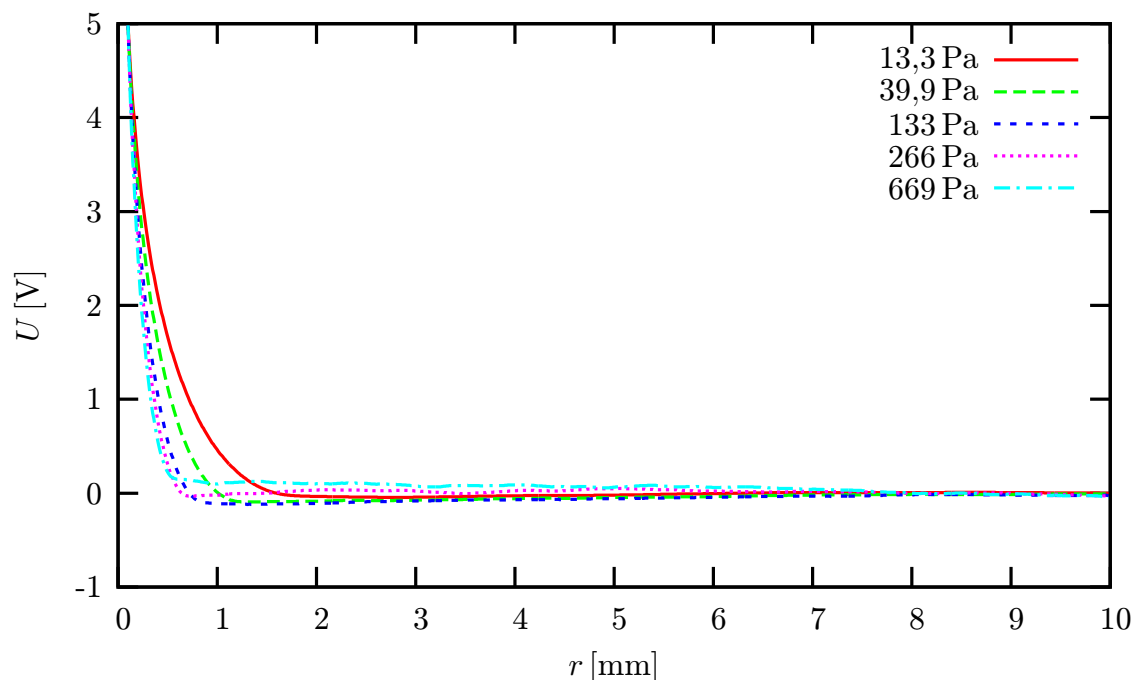
Do pracovní oblasti vchází z okraje elektron a sledujeme jeho trajektorii. Pro různé tlaky jsou vyneseny příklady takových trajektorií na obrázku 5. Z poměru počtu elektronů, které dopadly na sondu, a vstoupivších elektronů dále můžeme vypočítat s přihlédnutím k dalším parametrům modelu proud na sondu. Výsledkem celého modelu je potom voltampérová charakteristika — viz obr. 9.

Pro posouzení splnění teoretických předpokladů je také vhodné sledovat energetické rozdělení elektronů dopadajících na sondu. Pro výsledky tohoto modelu byly nakresleny

histogramy na obrázku 8 včetně srovnání s Maxwellovým rozdělením energií při předpětí na sondě 5 V, což znamená, že zanedbáme-li srážky v sheathu, měly by elektrony mít maxwellovské rozdělení posunuté o 5 eV.

5. Výsledky a diskuse

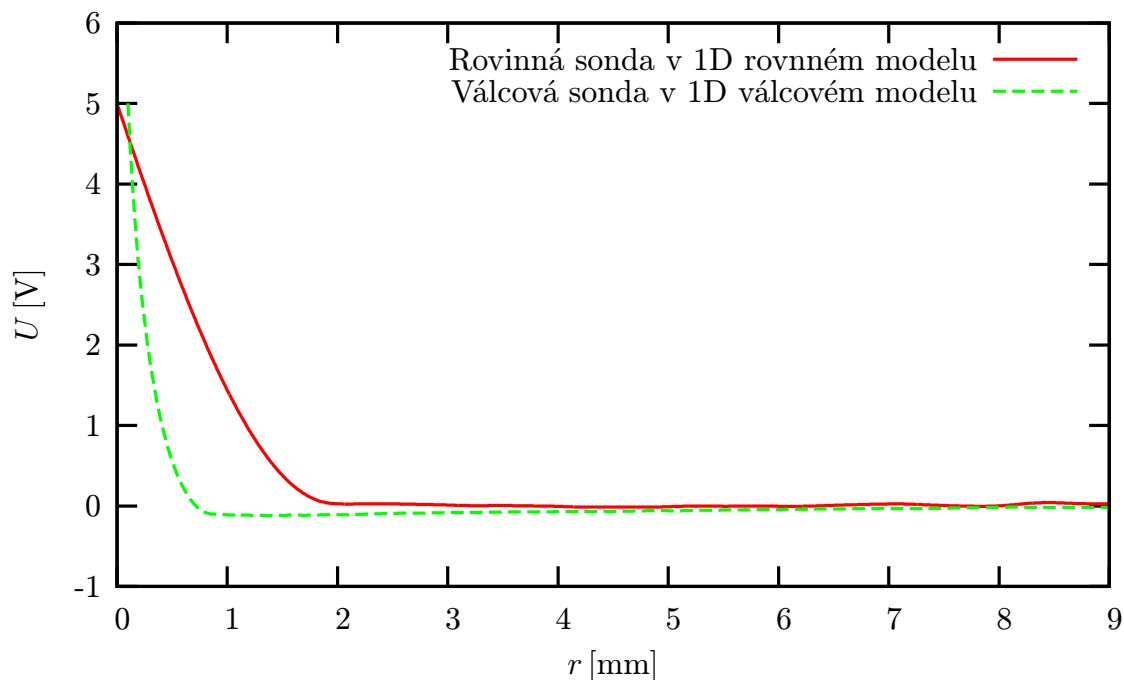
Jednorozměrný model rovinné sondy dobře posloužil k seznámení s problematikou a k testování základních postupů při částicovém modelování plazmatu. Získané výsledky odpovídají dosavadním znalostem získaným při použití rovinných sond v diagnostice plazmatu a také v plazmochemických technologiích s rovinným substrátem.



Obrázek 6.: Závislost potenciálu na vzdálenosti od sondy pro různé tlaky při předpětí 5 V v ustáleném stavu

Jednorozměrný válcový model válcové sondy přinesl očekávané výsledky. Průběhy potenciálu pro různé tlaky jsou uvedeny na obrázku 6. Je z něj patrné, že tloušťka sheathu s rostoucím tlakem klesá, což je v souladu se závislostí Debyeovy délky na tlaku (tabulka 1).

Koncentraci elektronů a iontů v závislosti na vzdálenosti od sondy pro tlak 133 Pa ukazuje obrázek 3. Tyto závislosti kvalitativně odpovídají naší předpovědi. Od určité vzdálenosti od sondy koncentrace elektronů i iontů odpovídá difúznímu řešení. V blízkosti sondy skutečně vzniká sheath. Ionty jsou zcela vytlačeny do vzdálenější oblasti, často zvané *presheath*, koncentrace elektronů je naopak výrazně vyšší než difúzní řešení. Za pozornost stojí mimo jiné zvlnění koncentrace, které zřetelně vystupuje nad šum.



Obrázek 7.: Závislost potenciálu na vzdálenosti od sondy pro různé konfigurace při tlaku 133 Pa v ustáleném stavu

Obrázek 7 demonstruje kvalitativní odlišnosti v průběhu potenciálu pro rovinnou a válcovou sondu. Podobnou odlišnost můžeme také pozorovat na obrázcích 2 a 3. V případě rovinné sondy jsou elektrony v sheathu sondou kladným předpětím přitahovány a také urychlovány, a proto se jejich koncentrace oproti difúznímu řešení zvyšuje jen málo. Ve válcové konfiguraci musíme vzít v úvahu ještě jeden efekt — elektrony jsou vlivem radiální geometrie v blízkém okolí sondy „stlačovány“ do menšího objemu, a proto pozorujeme u povrchu sondy výrazné maximum koncentrace elektronů.

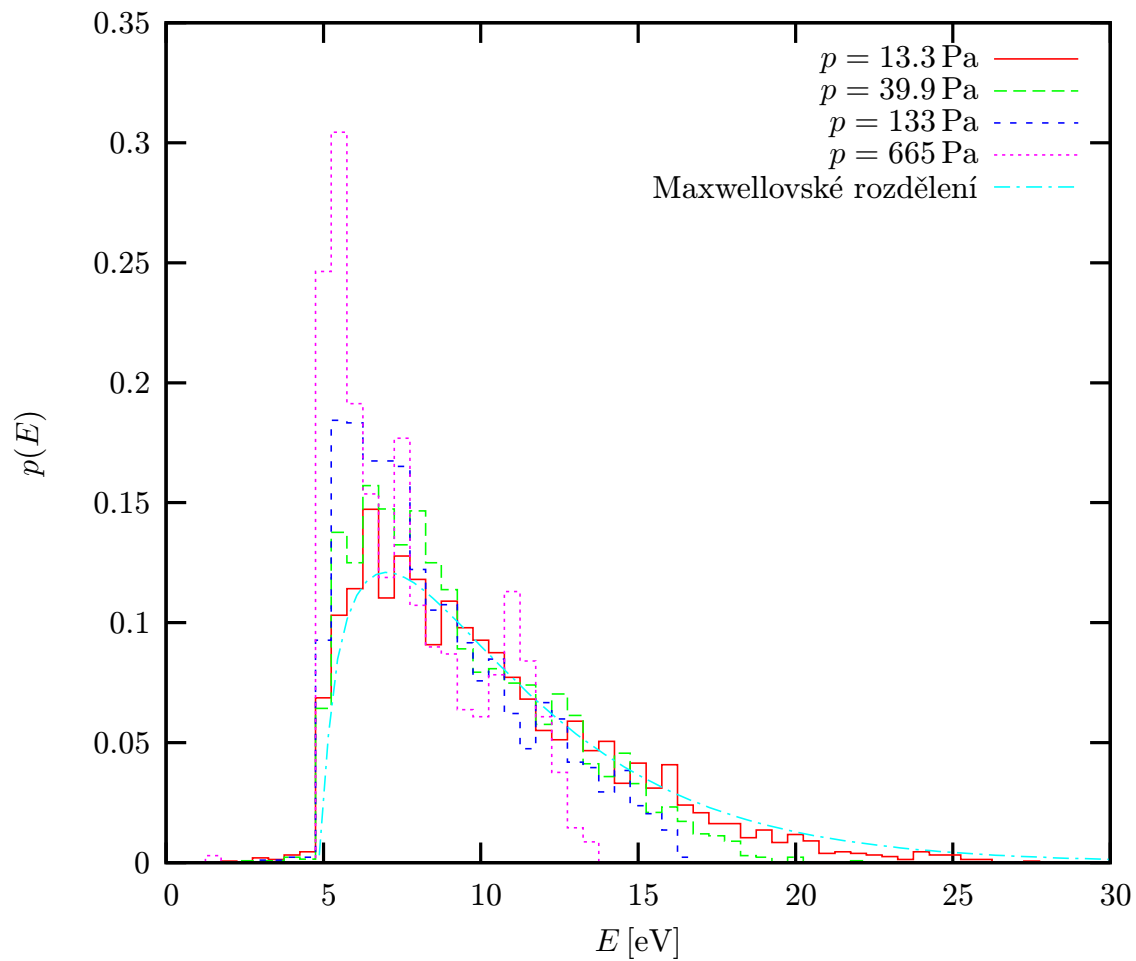
Výsledné voltampérové elektronové charakteristiky získané výpočty neselfkonzistentního dvourozměrného modelu válcové sondy jsou vyneseny na obrázku 9. Současně jsou v grafu uvedeny teoretické závislosti s odhadnutým koeficientem J_e teorie ChTW.

Závislost opravného koeficientu lze vyjádřit závislostí

$$J_e = 0,371 + \frac{39,1}{p}, \quad (55)$$

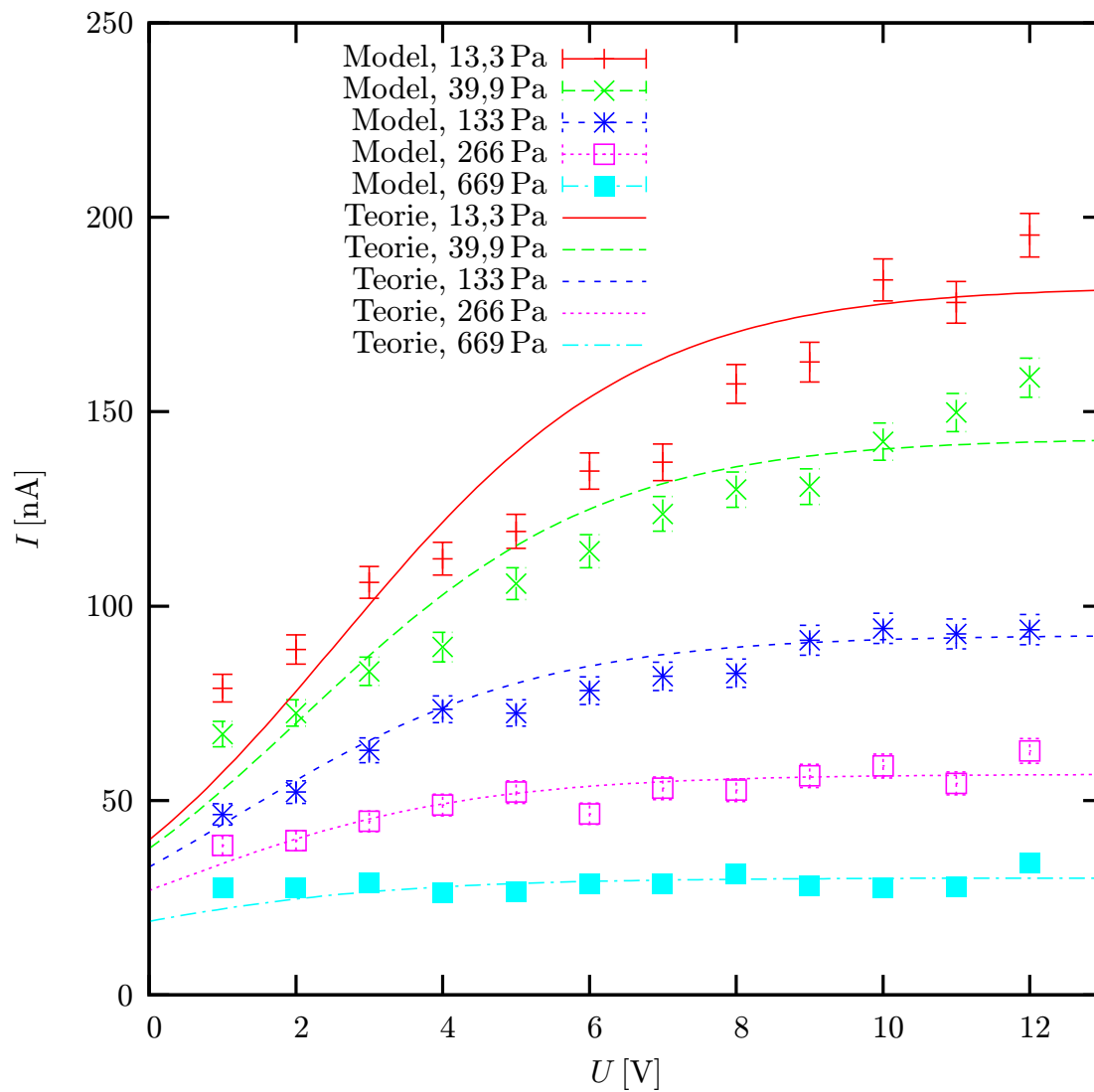
kde p je tlak v jednotce Pa. Tato závislost je vynesena v grafu na obrázku 10. Závislost (55) byla vypočtena funkcí `fit` programu `gnuplot`.

Obrázek 8 zobrazuje rozdělení kinetické energie elektronů dopadajících na sondu. Povšimněme si, že vysoké energie jsou zastoupeny výrazně méně, než by odpovídalo

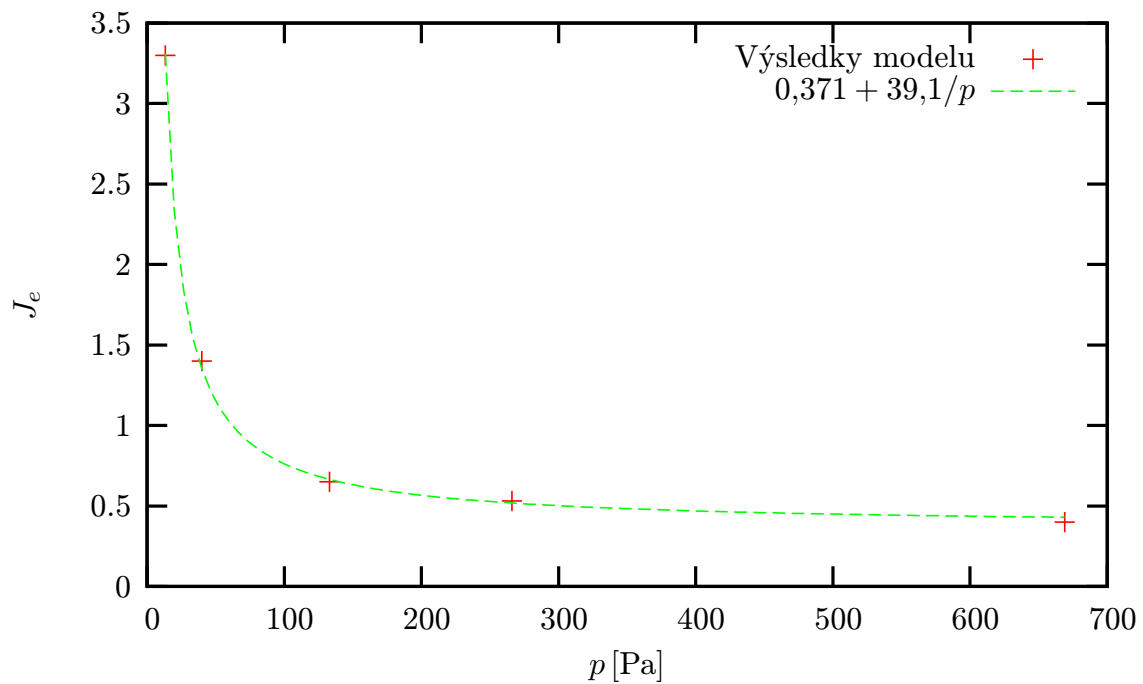


Obrázek 8.: Rozdělení energie dopadajících elektronů při předpětí 5 V

Maxwellovu rozdělení. Je to specifická vlastnost metody particle-in-cell, ve které nedochází k blízké interakci elektronů, která by zvyšovala rychlost části elektronů a „maxwellizovala“ by tak elektronovou rozdělovací funkci.



Obrázek 9.: Elektronová voltampérová charakteristika



Obrázek 10.: Závislost korekce J_e na tlaku

p [Pa]	J_e
13,3	3,3
39,9	1,4
133	0,65
266	0,53
669	0,40

Tabulka 2.: Tabulka korekcí

6. Shrnutí a závěr

V předložené práci se podařilo vytvořit selfkonzistentní jednorozměrné modely rovinné a válcové sondy a neselfkonzistentní dvourozměrný model válcový model válcové sondy při interakci s nízkoteplotním plazmatem při různých tlacích. Zjištěné závislosti byly porovnány s teorií Choua, Talbota a Willise se závěrem, že získané výsledky jsou v souladu s touto teorií, přičemž bylo nutné jeden parametr vystupující v teorii odhadovat.

Je však nutné vzít v úvahu, že s rostoucím tlakem v systému roste také vliv srážkových procesů mezi nabitými a neutrálními částicemi, což zásadně ovlivňuje průběh interakce plazmatu s pevnou látkou. Částicové modelování v plazmatu je zvláště v selfkonzistentní podobě velmi silný prostředek, ale závisí na vnějších údajích, které je nutné získat experimentálně. Pro věrnost počítačového modelu jsou důležité nejen energetické závislosti účinného průřezu srážek, o kterých lze v literatuře najít relativně velké množství informací, ale také jejich úhlová rozdělení, která zatím nejsme schopni z experimentů získat s dostatečnou přesností.

Z tohoto hlediska je také potřeba hodnotit výsledky této práce. Pro použité srážkové procesy je shoda s teorií Choua, Talbota a Willise dobrá. V budoucnu však bude potřeba doplnit z literatury nové poznatky o srážkových procesech a provést novou analýzu počítačových a teoretických výstupů.

Závěrem uvedme ještě vybrané technické parametry řešení problému. Všechny modely byly připraveny v programovacím jazyku C, překládány kompilátorem GCC verze 4.1.2 a spouštěny na procesoru AMD Athlon 1800+. Počet částic v modelu byl $1 \cdot 10^6$, počet kroků 6000 a doba výpočtu pro jednu konfiguraci přibližně dvě hodiny při časovém kroku pro elektrony $t_e = 1 \cdot 10^{-12}$ s a pro ionty $t_i = 1 \cdot 10^{-9}$ s.

Lze konstatovat, že při využití symetrie problému, kdy lze pracovat s jedno- a dvoudimenzionálními modely, je částicové modelování plně adekvátní technikou pro zkoumání interakce plazmatu s pevnou látkou. Při přechodu k více dimenzím a s rostoucím tlakem v systému efektivita kódů klesá, a proto bude potřeba v budoucnu věnovat zvýšenou pozornost programátorské stránce řešení. Do této oblasti spadají například umělé obraty. Příkladem takové techniky je metoda statistických vah, která je popsána na stranách 20 a 21 této práce.

Literatura

- [1] Bogaerts, A., Gijbels, R.: *IEEE Trans. Plasma Science*, 27 (1999) 1406.
- [2] Chen, F. F.: *Principles of plasma processing*, Plenum/Kluwer Publishers, Los Angeles 2002.
- [3] David, P.: *Srovnání sondových metodik pro měření parametrů plazmatu za středních tlaků*, kandidátská dizertační práce, MFF UK, Praha 1985.
- [4] Chou, Y. S. a kol.: *Kinetic Theory of a Spherical Electrostatic Probe in a Stationary Plasma*, *Physics of Fluids* 9 (1966) 2150–2167.
- [5] Press, W. H. a kol.: *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, Cambridge 1992.
- [6] Hrach, R.: *Počítačová fyzika I*, PF UJEP, Ústí nad Labem 2003.
- [7] Birdsall, C. K., Langdon, A. B.: *Plasma physics via computer simulation*, Adam Hilger, Bristol 1991.

Příloha A: Použitá symbolika

γ ... náhodná veličina s rovnoměrným rozdělením na intervalu $(0; 1)$. Interval je zleva otevřený, aby bylo zabráněno nežádoucímu dělení nulou.

k_B ... Boltzmannova konstanta

m_e ... hmotnost elektronu

m_i ... hmotnost iontu Ar^+

T_e ... teplota elektronu

T_i ... teplota iontu Ar^+

n_e ... objemová koncentrace elektronů

n_i ... objemová koncentrace iontů Ar^+

λ_D ... Debyeova stínící délka

$\lambda, \lambda_e, \lambda_i$... střední volná dráha obecně, elektronu a iontu

λ_γ ... náhodná volná dráha elektronu nebo iontu

$\sigma_{\text{ela}}, \sigma_{\text{exc}}, \sigma_{\text{ion}}$... účinný průřez pružné srážky elektronu s neutrální částicí, excitace a ionizace neutrální částice elektronem

u ... potenciál elektrického pole

ρ ... objemová hustota náboje

ϵ_0 ... permitivita vakua

e ... elementární náboj

x, y, z ... souřadnice v kartézské soustavě

v_x, v_y, v_z, v_{yz} ... rychlosti v kartézské soustavě, $v_{yz} = \sqrt{v_y^2 + v_z^2}$

r, φ, z ... souřadnice ve válcové soustavě

v_r, v_φ, v_z ... rychlosti ve válcové soustavě

R, l ... poloměr a délka Langmuirovy válcové sondy