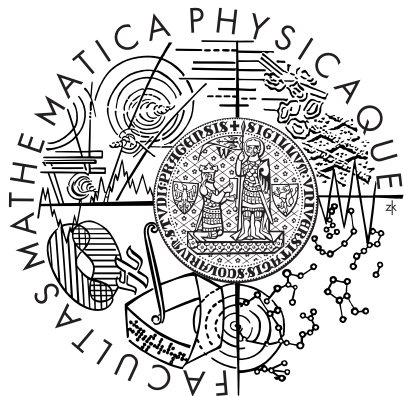


Univerzita Karlova v Praze  
Matematicko-fyzikální fakulta



## DIPLOMOVÁ PRÁCE

Vojtěch Hrubý

### **Studium interakce plazma-pevná látka pomocí hybridního modelování**

Katedra fyziky povrchů a plazmatu

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

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Fyzika povrchů a ionizovaných prostředí

2009

Děkuji panu prof. RNDr. Rudolfu Hrachovi, DrSc. za obětavou pomoc a vynikající spolupráci během mého studia a přípravy diplomové práce.

Paní doc. RNDr. Věře Hrachové, CSc. děkuji za četné konzultace a za výbornou výuku fyziky plazmatu.

Panu Mgr. Lukáši Schmiedtovi děkuji za pomoc při měření.

Děkuji své rodině a přátelům za duchovní i materiální pomoc, bez které bych tuto práci nezvládl.

Paní MUDr. Elišce Roučkové děkuji za návrat mezi zdravé.

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

V Praze dne 17. dubna 2009

Vojtěch Hrubý

# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod</b>	<b>6</b>
<b>2</b>	<b>Základní poznatky fyziky plazmatu</b>	<b>7</b>
2.1	Definice plazmatu . . . . .	7
2.2	Klasifikace plazmatu . . . . .	8
2.3	Kinetika plazmatu . . . . .	9
2.4	Boltzmannova rovnice . . . . .	11
2.5	Diagnostika nízkoteplotního plazmatu . . . . .	12
2.6	Interakce plazmatu s povrchy pevných látek . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Počítačová fyzika</b>	<b>17</b>
<b>4</b>	<b>Hybridní modelování</b>	<b>20</b>
4.1	Vztahy metod . . . . .	20
4.2	Částicové modelování . . . . .	21
4.3	Spojité modelování . . . . .	26
4.3.1	Numerické metody řešení soustav parciálních diferenciálních rovníc . . . . .	28
4.4	Obvyklé hybridní modely . . . . .	32
4.4.1	Energetický model . . . . .	32
4.4.2	Prostorový model . . . . .	33
4.4.3	Iterační model . . . . .	35
4.4.4	Další hybridní modely . . . . .	36
<b>5</b>	<b>Cíle diplomové práce</b>	<b>37</b>
<b>6</b>	<b>Srovnání vybraných hybridních modelů</b>	<b>38</b>
6.1	Energetický model . . . . .	38
6.2	Prostorový model . . . . .	40
6.3	Iterační model . . . . .	41
6.4	Kritéria srovnání . . . . .	42

<i>OBSAH</i>	4
6.5 Výsledky srovnání . . . . .	43
6.6 Diskuze výsledků srovnání . . . . .	44
<b>7 Hybridní model ve 2D</b>	<b>48</b>
7.1 Spojitá část . . . . .	48
7.2 Částicová část . . . . .	50
7.3 Srážkové procesy . . . . .	51
7.4 Zdroj částic . . . . .	52
7.5 Výsledky modelu . . . . .	57
<b>8 Hybridní model ve 3D a jeho aplikace</b>	<b>61</b>
8.1 Sonda konečných rozměrů . . . . .	61
8.2 Substrát s nerovným povrchem . . . . .	68
<b>9 Závěr</b>	<b>78</b>
<b>Literatura</b>	<b>80</b>
<b>Přílohy</b>	<b>83</b>

**Název práce:** Studium interakce plazma-pevná látka pomocí hybridního modelování

**Autor:** Vojtěch Hrubý

**Katedra:** Katedra fyziky povrchů a plazmatu

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

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

**Abstrakt:** V této práci je studována interakce plazmatu s vnořeným substrátem metodami počítačové fyziky. Prezentovány jsou různé zjednodušené jednodimenzionální hybridní modely válcové Langmuirovy sondy v plazmatu pozitivního sloupce doutnavého výboje v argonu. Efektivita a přesnost těchto modelů je porovnávána s částicovým a spojitým modelem. Dále je rozvíjen iterativní hybridní model založený na kombinaci spojitého modelu řešeného metodou konečných prvků a částicového modelu Monte Carlo. Modelem jsou řešeny úlohy vyžadující plně třídimenzionální přístup. Výsledky výpočtu jsou získány v přijatelném čase, zachována je do značné míry také informace o jednotlivých částicích. Na základě naměřených parametrů plazmatu je modelována konečná Langmuirova sonda v plazmatu s driftem. Dále je studována interakce plazmatu a kovového substrátu s nerovnostmi ve tvaru polokoule různého poloměru. Na základě modelu skupiny polokoulí pravidelně rozmístěných na substrátu jsou diskutovány změny elektrického pole v blízkosti substrátu v závislosti na vzdálenosti nerovností.

**Klíčová slova:** Interakce plazma-pevná látka, hybridní modelování, nízkoteplotní plazma

**Title:** Study of plasma-solid interaction by means of hybrid modelling

**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 this thesis the interaction of plasma with an immersed substrate is studied by means of the computational physics. Various simplified one-dimensional hybrid models of the cylindrical Langmuir probe in the plasma of the positive column of argon glow discharge are presented and their efficiency and accuracy are compared with particle and fluid models. An iterative hybrid model based on combination of FEM fluid model and Monte Carlo particle model is developed and used to solve problems demanding fully three-dimensional approach. The results are obtained in a reasonable time preserving a good deal of particle information. A finite cylindrical Langmuir probe in plasma with drift is modelled according to measured plasma properties. Interaction of plasma and a metal substrate with one semi-spherical protrusion of various radii is investigated. Groups of semi-spherical protrusions with different distances on the substrate are studied and the changes of distribution of electric field near the surface of substrate are discussed.

**Keywords:** Plasma-solid interaction, hybrid modelling, low-temperature plasma

# Kapitola 1

## Úvod

Pojem *plazma* se v nedávné době dostal do povědomí široké veřejnosti díky velkoplošným plazmovým obrazovkám, přestože se s plazmatem setkáváme již mnoho let například v obyčejných zářivkách. Ve fyzice byl tento pojem zaveden v roce 1928 Irvingem Langmuirem [1], který tak nazval oblast ionizovaného plynu, ve které je vyrovnaný náboj iontů a elektronů, takže výsledný prostorový náboj je velmi malý. Fyzika plazmatu prošla do dnešní doby prudkým vývojem. Pomohla nám lépe porozumět pro člověka tak vzdáleným jevům jako polární záře nebo sluneční vítr a přinesla nám řadu nových technologií, jejichž produkty denně používáme.

Studium plazmatu není lehký úkol. Plazma nám dokonce dovede aktivně bránit ve zkoumání jeho parametrů. Stejně principy lze na druhou stranu využít v plazmatických technologiích. To platí také o interakci plazmatu s pevnou látkou. Od raných dob studia plazmatu se používá sondová diagnostika plazmatu. Přestože sonda plazma narušuje, na základě teoretických, experimentálních a modelových předpokladů lze do jisté míry určit parametry plazmatu nenarušeného. Získané poznatky ovšem nachází své využití například v plazmatickém opracovávání povrchů pevných látek.

Procesy v plazmatu a při interakci plazmatu s pevnou látkou jsou velmi složité, a proto je řada úloh analyticky neřešitelná. Počítačové modelování nám umožňuje řešit mnohem širší okruh úloh, který se s rostoucím výkonem počítačů neustále zvětšuje. Přesto mnohé úlohy nelze zatím ani s použitím počítačů vyřešit snadno, a proto hledáme složitější, ale efektivnější metody. Hybridní modelování nám přináší řadu takových metod. Některé z nich budou v této práci prezentovány a porovnány. Dále ukážeme řešení konkrétních úloh vybranou metodou v plně trojrozměrné geometrii.

# Kapitola 2

## Základní poznatky fyziky plazmatu

### 2.1 Definice plazmatu

V knize [2] je plazma definováno následujícím způsobem:

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

Pojmy *kvazineutrální* a *kolektivní chování* je potřeba rozebrat hlouběji.

V neutrálním plynu na sebe částice působí pouze při srážkách, protože gravitační síla je zanedbatelná a žádná elektrická síla mezi nimi nepůsobí. Srážky tak plně rozhodují o pohybu částic. V plazmatu se vyskytují i nabitě částice, které mohou vytvářet prostorové náboje, které vedou ke vzniku elektrického pole. Coulombova síla je dalekodosahová a náboje v plazmatu tak mohou na sebe působit i na velké vzdálenosti. Pohyb částic v plazmatu tedy nezávisí jen na lokálních podmínkách, ale také na stavu plazmatu ve větších vzdálenostech. Této vlastnosti říkáme *kolektivní chování*.

Díky existenci pohyblivých nabitých částic plazma dokáže odstínit vložené elektrické potenciály. Toto odstínění však není dokonalé díky tepelným pohybům nabitých částic. V okolí každého elektrického potenciálu se vytvoří stínící vrstva, jejíž efektivní poloměr je dán tepelnou energií nabitých částic. Část nabitých částic totiž může z potenciálové jámy uniknout právě díky tepelné energii, a proto malé potenciály mohou pronikat hlouběji do plazmatu a způsobovat elektrická pole i mimo stínící vrstvu. Na základě podobných úvah lze odvodit takzvanou Debyeovu délku

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k T^*}{n e^2}}, \quad (2.1)$$

kde  $\varepsilon_0$  je permitivita vakua,  $k$  je Boltzmannova konstanta,  $n$  je koncentrace elektronů v nenarušeném plazmatu,  $e$  je elementární náboj a

$$\frac{1}{T^*} = \frac{1}{T_+} + \frac{1}{T_-}, \quad (2.2)$$

kde  $T_+$  teplota kladně nabitých částic a  $T_-$  je teplota záporně nabitých částic. Tento vztah platí v případě, že kladně i záporně nabité částice mají srovnatelné hmotnosti. V případě elektropozitivního plazmatu, které je tvořeno elektrony, kladnými ionty a neutrály, je stínění vykonáváno především elektrony. Jejich teplota je pak pro Debyeovu délku rozhodující a  $T^*$  je přibližně rovno  $T_e$ .

Debyeova délka je mírou stínící vzdálenosti. V této práci je řada výpočtů provedena pro pozitivní sloupec doutnavého výboje v argonu při tlaku 133 Pa s parametry přibližně  $n = 1,0 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3}$  a  $T_e = 23\,200 \text{ K}$ . Tomu odpovídá Debyeova délka  $\lambda_D = 0,33 \text{ mm}$ .

Systém lze považovat za *kvazineutralní*, pokud jeho rozměr  $L$  výrazně převyšuje Debyeovu délku  $\lambda_D$ . To znamená, že zavedeme-li do systému vnější potenciál nebo objeví-li se v systému lokální prostorový náboj, převážná část systému zůstane díky stínění bez velkých elektrických polí. Současně musí být koncentrace nabitých částic dostatečná, aby ve stínící vrstvě bylo velké množství částic. Kdyby bylo ve vrstvě jen několik nabitých částic, Debyeovo stínění by ztrácelo smysl.

Na plazma klademe ještě jednu podmínku: Frekvence plazmových oscilací

$$\omega_p = \sqrt{\frac{e^2 n_e}{\varepsilon_0 m_e}}, \quad (2.3)$$

kde  $e$  je elementární náboj,  $n_e$  je koncentrace elektronů a  $m_e$  je hmotnost elektronu, musí být větší než srážková frekvence elektronů s neutrály. V opačném případě je dominantní kinetika neutrálního plynu a elektromagnetická interakce je potlačena.

## 2.2 Klasifikace plazmatu

Plazma může mít mnoho různých podob, které sice splňují kritéria plazmatu, ale přesto se liší natolik, že vyžadují odlišné způsoby studia. Základní dělení plazmatu převezmeme z publikací [3] a [2].

Podle míry ionizace dělíme plazma na *slabě ionizované* a *silně ionizované*. Ve slabě ionizovaném plazmatu je koncentrace nabitých částic o několik řádů menší než koncentrace neutrálních částic. Nabité částice se proto sráží především s neutrálními částicemi. V silně ionizovaném plazmatu je naopak koncentrace neutrálních částic velmi malá, až nulová. V tomto případě jsou dominantní interakce mezi nabitými částicemi. Toto dělení má velký fyzikální význam: Srážky nabitých



částic s neutrály ve slabě ionizovaném plazmatu jsou dané krátkodosahovými silami, zatímco nabitě částice v silně ionizovaném plazmatu na sebe působí Coulombovou silou, která je dalekodosahová. Díky tomu se vlastnosti slabě a silně ionizovaného plazmatu výrazně liší.

Dělení podle teploty je založené spíše na konvenci. Plazma považujeme za vysokoteplotní, pokud je silně ionizované ve smyslu Sahovy rovnice [2]

$$\frac{n_i}{n_n} \sim 2,4 \cdot 10^{21} \frac{T^{3/2}}{n_i} \exp(-U_i/k_B T), \quad (2.4)$$

kteřá udává poměr hustot ionizovaných  $n_i$  a neutrálních  $n_n$  atomů plynu při teplotě  $T$ ,  $U_i$  je ionizační energie plynu a  $k_B$  je Boltzmannova konstanta v jednotkách SI. Sahova rovnice platí pro plyn v tepelné rovnováze, kdy k ionizaci dochází srážkami neutrálních částic. Zvyšujeme-li teplotu původně neutrálního plynu, stupeň ionizace zůstává nízký, dokud se  $U_i$  nestane jen nevelkým násobkem  $k_B T$ . Potom poměr  $n_i/n_n$  začne prudce narůstat, protože atomy mají dostatečnou tepelnou energii k odtržení elektronu při vzájemné srážce. Dalším zvyšováním teploty dosáhneme až plné ionizace.

S vysokoteplotní plazmatem se setkáváme v kosmu, v laboratorních podmínkách pak například při termonukleární fúzi. Nízkoteplotní plazma tvoří například pozitivní sloupec doutnavého výboje.

Podle teploty lze dělit plazma ještě odlišným způsobem — na *izotermické* a *neizotermické*. Plazma totiž může mít „několik teplot najednou“. Každá složka plazmatu (elektrony, různé druhy iontů a neutrály) může mít vlastní energetické rozdělení, kterému odpovídá určitá teplota nebo střední energie v případě, že rozdělení není maxwellovské. Příčinou je příliš malá frekvence srážek mezi částicemi různého druhu, která nestačí k dosažení celkové tepelné rovnováhy. Teploty různých složek se mohou lišit i o několik řádů. S tímto jevem se často setkáváme v nízkoteplotním slabě ionizovaném plazmatu. Vysokoteplotní plazma je naopak izotermické.

V této práci se budeme zabývat především nízkoteplotním částečně ionizovaným neizotermickým plazmatem.

## 2.3 Kinetika plazmatu

Kinetická teorie plazmatu nám přináší důležitý a užitečný matematický aparát pro popis jevů v plazmatu. Klíčovým pojmem je *rozdělovací funkce*  $f_i(\vec{r}, \vec{v}, t)$ , která udává počet částic  $i$ -tého druhu v objemovém elementu konfiguračního prostoru  $d\Omega = dx dy dz$  a v objemovém elementu rychlostního prostoru  $dC = dv_x dv_y dv_z$  v čase  $t$ . Poloha elementů je dána vektory  $\vec{r}$  a  $\vec{v}$ . Koncentrace částic  $i$ -tého druhu

v bodě  $\vec{r}$  je integrálem rozdělovací funkce přes celý rychlostní prostor  $C$

$$n_i(\vec{r}, t) = \int_C f_i(\vec{r}, \vec{v}, t) dC. \quad (2.5)$$

Pomocí rozdělovací funkce definujeme střední hodnotu veličin, které charakterizují vlastnosti částic plazmatu. Střední hodnota veličiny  $\varphi(\vec{r}, \vec{v}, t)$  je definována

$$\langle \varphi \rangle = \frac{1}{n} \int_C \varphi f dC. \quad (2.6)$$

Velmi důležitou veličinou pro naše další výpočty je rychlost  $\vec{v}$ . Pomocí střední hodnoty lze rychlost rozdělit na dvě složky

$$\vec{v} = \vec{c} + \vec{u}, \quad (2.7)$$

kde  $\vec{c}$  je *chaotická rychlost* a  $\vec{u}$  je *driftová rychlost*. Pro tyto rychlosti platí vztahy

$$\langle \vec{c} \rangle = 0, \quad a \quad \vec{u} = \langle \vec{v} \rangle. \quad (2.8)$$

S chaotickou a driftovou rychlostí úzce souvisí střední hodnota kinetické energie částic, pro kterou platí

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle = \frac{1}{2} m (\langle u^2 \rangle + \langle c^2 \rangle + \langle \vec{u} \cdot \vec{c} \rangle) = \frac{1}{2} m (u^2 + \langle c^2 \rangle) \\ &= \frac{1}{2} m u^2 + \frac{1}{2} m \langle c^2 \rangle. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Střední hodnota energie je tedy součtem energie driftového a chaotického pohybu.

Již několikrát jsme použili pojem *teplota*, ale nedefinovali jsme jej, protože úzce souvisí s rozdělovací funkcí a se střední hodnotou energie. Je-li plyn v tepelné rovnováze, nejpravděpodobnější rozdělení rychlostí částic je Maxwellovo rozdělení. V jednorozměrném případě, například pro komponentu  $v_x$ , je podle [2] příslušná rozdělovací funkce dána vztahem

$$f(v_x) = n \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \exp\left(-\frac{1}{2} m v_x^2 / k_B T\right), \quad (2.10)$$

kde  $m$  je hmotnost částice,  $k_B$  je Boltzmannova konstanta a  $T$  je teplota. Vypočítáme-li pro tento případ střední hodnotu kinetické energie částice, dostaneme

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} k_B T. \quad (2.11)$$

Pro třírozměrný pohyb s izotropním rozdělením je Maxwellovo rozdělení dáno vztahem

$$f(v) = n 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{1}{2} m v^2 / k_B T\right), \quad (2.12)$$

který lze odvodit ze vztahu (2.10) integrací přes všechny směry v třírozměrném prostoru. Pro tento případ vypočítáme střední hodnotu kinetické energie částice

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} k_B T. \quad (2.13)$$

Obecně platí, že na každý stupeň volnosti připadá energie  $\frac{1}{2} k_B T$ .

Ve fyzice plazmatu je obvyklé udávat teplotu částic v jednotkách energie. S ohledem na závislost na dimenzi se uvádí energie odpovídající právě  $k_B T$ , například pro  $k_B T = 1$  eV je  $T = 11\,600$  K.

## 2.4 Boltzmannova rovnice

Rozdělovací funkce  $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$  každé komponenty plazmatu musí splňovat Boltzmannovu rovnici

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \nabla_c f = \frac{\delta f}{\delta t}, \quad (2.14)$$

kde  $\nabla_c$  je gradient v rychlostním prostoru,  $m$  je hmotnost částice,  $\vec{F}$  je makroskopická síla působící na částice komponenty a člen na pravé straně zahrnuje srážky s ostatními částicemi, tedy především mikroskopické interakce. Pokud je srážkový člen zanedbatelný a síla  $\vec{F}$  je výhradně elektromagnetická, rovnice (2.14) se nazývá *Vlasovova*.

Řešení Boltzmannovy rovnice je velmi složité. Velmi významné jsou takzvané *momenty Boltzmannovy rovnice*, které získáme integrací Boltzmannovy rovnice přes rychlostní prostor. Tyto momenty jsou pouze důsledky Boltzmannovy rovnice. Nultý moment získáme integrací samotné Boltzmannovy rovnice přes rychlostní prostor. Výpočet je proveden například v [2]. Předpokládáme-li pouze elektromagnetickou makroskopickou sílu, dostaneme *rovnici kontinuity*

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\vec{u}) = 0. \quad (2.15)$$

Dochází-li v plazmatu ke srážkám, při kterých se mění počet částic určitého druhu, například ionizace a rekombinace, na pravé straně rovnice kontinuity se objeví takzvané *členy vzniku a zániku částic*. Tyto členy mají obvykle tvar součinu

$$\pm k \prod_j n_j, \quad (2.16)$$

kde  $k$  je rychlostní koeficient interakce a součin probíhá přes všechny druhy částic, které se srážky účastní.

První moment Boltzmannovy rovnice získáme tak, že ji vynásobíme vektorem rychlosti a opět vyintegrujeme přes celý rychlostní prostor. Výsledek nakonec vynásobíme  $m$  a dostaneme podle [2] *pohybovou rovnici pro tekutinu*

$$mn \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} \right) = qn(\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B}) - \nabla \cdot \mathbf{P} + \vec{P}_{ij}, \quad (2.17)$$

kde  $\mathbf{P}$  je tenzor napětí a  $\vec{P}_{ij}$  vyjadřuje změnu hybnosti vlivem srážek.

Vynásobením Boltzmannovy rovnice členem  $\frac{1}{2}mv^2$  a integrací bychom analogicky dostali rovnici pro tok tepla.

První dva až tři momenty tvoří základní rovnice spojitých modelů plazmatu. Jejich řešení je méně náročné než řešení Boltzmannovy kinetické rovnice. Na druhou stranu tyto výsledky nedávají úplnou informaci o rozdělovací funkci.

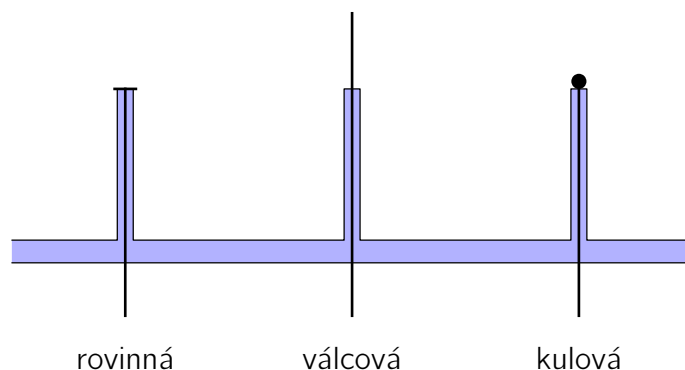
## 2.5 Diagnostika nízkoteplotního plazmatu

Pro měření parametrů plazmatu byla vyvinuta řada metod. Základní metody lze hrubě rozdělit na čtyři skupiny:

- sondové,
- vysokofrekvenční,
- optické,
- korpuskulární.

Sondová diagnostika je velmi blízká tématu této práce, protože je založena na interakci plazmatu s kovovou sondou. Metody sondové diagnostiky, které navrhl Irving Langmuir (viz například [4]), patří mezi nejstarší metody diagnostiky plazmatu. Sondy mohou mít různé geometrie. Nejčastěji se setkáváme s rovinovou, válcovou a kulovou sondou, které jsou schematicky znázorněny na obrázku 2.1. Stručně popíšeme základy sondové diagnostiky podle [5] a [3]. Vložíme-li do plazmatu vodič na daném potenciálu, separací náboje se vytvoří v jeho okolí stínící vrstva (*sheath*). Změříme-li voltampérovou charakteristiku jedné sondy podle obrázku 2.2 nebo dvou sond podle 2.3, můžeme přibližně určit některé parametry sheathu a nenarušeného plazmatu. Nejjednodušší analýza voltampérové charakteristiky založená na takzvané bezesrážkové teorii vyžaduje splnění následujících požadavků:

1. V sheathu se nabitě částice pohybují bez srážek.
2. Sonda neemituje.



Obrázek 2.1: Nejčastější sondy pro diagnostiku nízkoteplotního plazmatu. Modrá barva znázorňuje izolaci, například sklo aparatury.

3. Za vrstvou je nenarušené plazma.
4. Proud na sondu jsou nezávislé.
5. Elektronů a iontů mají v plazmatu Maxwellovo rozdělení.

První požadavek představuje zásadní omezení této metody jen na nízké tlaky. Příklad naměřené voltampérové charakteristiky jedné sondy je uveden na obrázku 2.4. Měření bylo provedeno se sondou o poloměru  $22,5 \mu\text{m}$  a délce  $2,5 \text{ mm}$  při tlaku  $10 \text{ Pa}$  v pulzním magnetronu.

Z charakteristiky lze podle bezesrážkové teorie určit v první řadě teplotu elektronů a koncentraci nabitých částic. Předpokládáme plazma tvořené elektrony, jednonásobnými kladnými ionty a neutrálními částicemi. Teplotu elektronů získáme ze směrnice závislosti logaritmu elektronového proudu na napětí

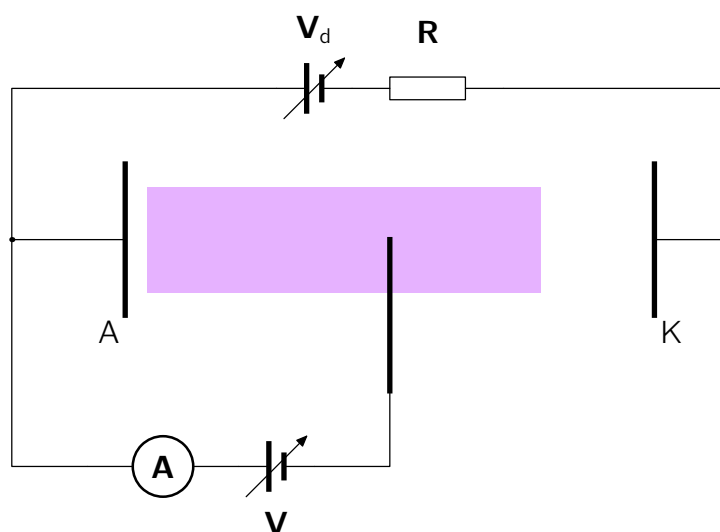
$$\ln |I_-| = \ln |I_{-p}| + \frac{e(U - U_p)}{k_B T_e}, \quad (2.18)$$

kde  $I_{-p}$  je nasycený elektronový proud,  $U_p$  je potenciál plazmatu a  $T_e$  je teplota elektronů. Lineární závislost odpovídá maxwellovskému rozdělení energie elektronů. Není-li závislost lineární, lze skutečnou rozdělovací funkci přibližně určit analýzou této závislosti.

Koncentraci iontů určíme z iontového proudu  $I_{+f}$ , který je extrapolací iontového proudu do bodu  $U = U_f$ . Koncentrace iontů je dána vztahem

$$n_i = \frac{|I_{+f}|}{eS} \sqrt{\frac{m_i}{k_B T_e}}, \quad (2.19)$$

kde  $e$  je elementární náboj,  $S$  je plocha sondy a  $m_i$  je hmotnost iontu.



Obrázek 2.2: Schéma jednosondové diagnostiky v pozitivním sloupci doutnavého výboje

Koncentraci elektronů získáme na základě nasyceného elektronového proudu

$$n_e = 4 \frac{|I_{-p}|}{eS} \sqrt{\frac{\pi m_e}{8 k_B T_e}}, \quad (2.20)$$

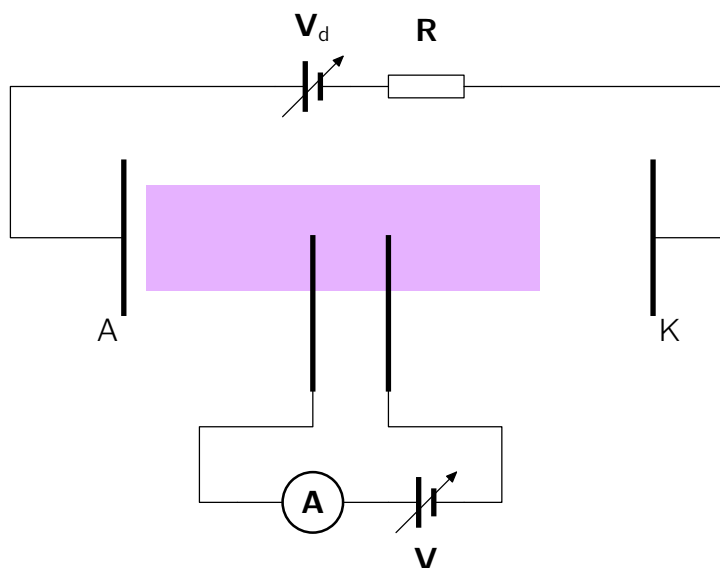
kde  $m_e$  je hmotnost elektronu. Koncentrace elektronů a iontů by si měly být rovny z důvodu kvazineutality plazmatu. Ve skutečnosti se výsledky liší kvůli nepřesnostem měření a nedostatečnému splnění podmínek platnosti teorie.

Ve voltampérové charakteristice dvou sond je dominantní vliv iontů. Jsou-li sondy shodné, charakteristika je symetrická, tvořená iontovými větvemi a přechodovou oblastí v okolí nulového proudu. V tomto případě můžeme obdobně určit koncentraci iontů a teplotu elektronů.

## 2.6 Interakce plazmatu s povrchy pevných látek

Nabitě částice z plazmatu, které projdou stínicí vrstvou, dopadají na povrch vnořené pevné látky – sondy, substrátu v plazmochemických technologiích, na stěnu výbojky, apod. Co se s těmi částicemi dále děje, závisí na vlastnostech vnořené látky.

Pokud se jedná o kovovou elektrodu zapojenou do vnějšího obvodu, ve zjednodušené teorii sondové diagnostiky se předpokládá, že nabitá částice bude z plazmatu odstraněna a její náboj přispěje k sondovému proudu. Elektron z plazmatu

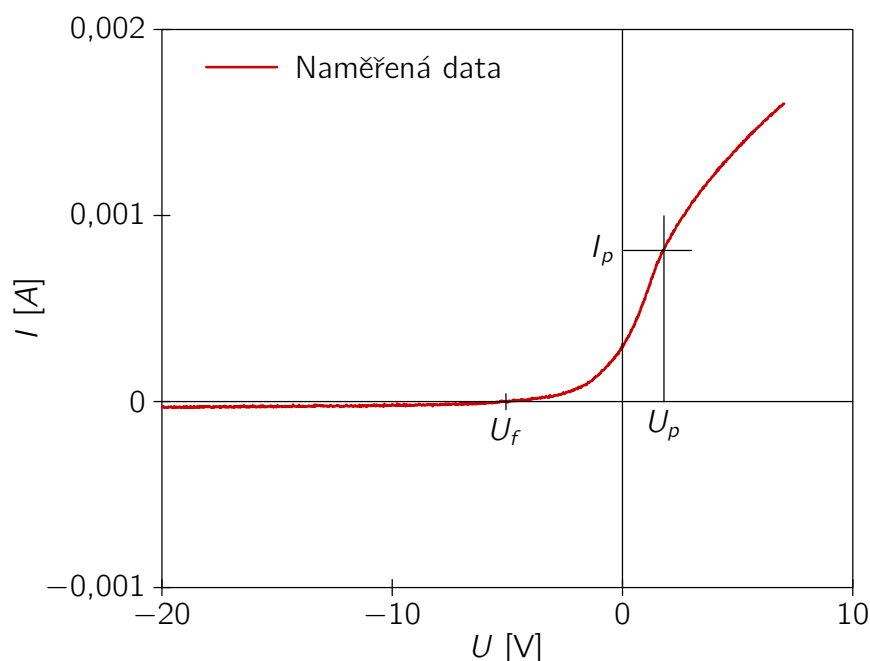


Obrázek 2.3: Schéma dvousondové diagnostiky v pozitivním sloupci doutnavého výboje

vstoupí do elektrody a dále bude procházet vnějším obvodem. Ionť, kladný nebo záporný, bude na povrchu sondy neutralizován, jeho náboj vstoupí do vnějšího obvodu a v plazmatu zůstane z iontu neutrální částice. Při přesnější analýze je však nutné uvažovat i další fyzikální procesy, zejména pro elektrony, z nichž nejdůležitější je elektronová sekundární emise ze sondy pod dopadem rychlejších elektronů z plazmatu, která může jak zeslabovat, tak i zesilovat sondový proud.

Pokud se jedná o substrát dielektrický nebo i o kovový, jenž ale není připojen na vnější obvod, dojde k nabíjení povrchu substrátu dopadem nabitých částic z plazmatu. Přitom se projeví rozdílná pohyblivost jednotlivých komponent plazmatu, takže např. v elektropozitivním plazmatu se substrát nabíjí záporně. Důsledkem bude lokální elektrické pole, jež ovlivní plazma v okolí substrátu. Tento efekt je vždy přítomný ve skleněných výbojkách, kde vede k vytvoření radiálního elektrického pole a k ambipolární difuzi nabitých částic plazmatu.

Speciálním případem jsou různé plazmochemické technologie nebo sondová diagnostika v chemicky aktivním plazmatu. Zde je substrátem původně kovová elektroda nebo sonda zapojená do vnějšího obvodu, na níž je vloženo určité předpětí mající za úkol vytáhnout z plazmatu příslušně nabité ionty. Pokud ale tyto částice začnou na povrchu substrátu chemicky reagovat a vytvářet dielektrickou vrstvu, povrch přestane odvádět náboj do vnějšího obvodu a začne se nabíjet. Proti čistě dielektrickému substrátu nebo stěně výbojky je ale situace odlišná v tom, že vytvářená vrstva je obvykle tenká a má nenulovou elektrickou vodivost. Výsledný



Obrázek 2.4: Příklad naměřené voltampérové charakteristiky jedné sondy. Data poskytl Mgr. Jan Klusoň.  $U_f$  je plovoucí potenciál a  $U_p$  je potenciál plazmatu s odpovídajícím proudem  $I_p$ .

náboj na povrchu rostoucí vrstvy je proto dán kombinací náboje přiváděného z plazmatu a náboje odváděného dielektrikem do vnějšího obvodu. Výsledkem bude napěťový spád v dielektriku a pokles předpětí substrátu. Tento proces se musí brát v úvahu při plazmochemických technologiích a naopak může být využíván při sondové diagnostice chemicky aktivního plazmatu. Analýza sondového proudu v takovém případě je však velmi obtížná a bez aplikace počítačového modelování těchto procesů prakticky vyloučená.

Vedle uvedených úvah obecně platných existují i speciální případy, kdy procesy na elektrodách nabývají zvláštní důležitost. Příkladem může být sondová diagnostika pomocí žhavé sondy, kdy rozhodujícím procesem je termoemise elektronů ze sondy.



# Kapitola 3

## Počítačová fyzika

Ve dvacátém století se k experimentální a teoretické fyzice přidal třetí výrazný směr — počítačová fyzika. Přesná definice tohoto pojmu zřejmě ještě není ustálená. Většina fyziků dnes ke své práci používá počítač. Počítačovou fyzikou však nazýváme pouze takovou vědeckou práci nebo metodiku vědecké práce, při které je práce počítače dominantní metodou řešení problému. Původní vzájemnou spolupráci teoretické a experimentální fyziky počítačová fyzika rozšířila o mnoho nových možností: Pro teoretickou fyziku se stala vítaným pomocníkem tam, kde analytické výpočty nejsou možné, experimentální fyzice dala možnost dopředu simulovat náročné experimenty, které se těžko opakují. S rostoucím výkonem dostupné počítačové techniky a s rozvojem nových metod se spolupráce dále prohlubuje.

V krátké historii počítačové fyziky vznikla řada dílčích směrů:

- Počítačové modelování

V počítači vytváříme zjednodušený model studovaného fyzikálního jevu. Model řešíme řadou numerických metod. Obvykle se jedná o řešení obyčejných a parciálních diferenciálních rovnic, řešení soustav diferenciálních rovnic a statistické výpočty. Na základě výsledků modelu můžeme předpovídat výsledky experimentů, optimalizovat technologické procesy a podobně.

- Zpracování obrazu

Z obrazu, který je výsledkem pozorování, získáváme počítačovými metodami fyzikální, biologické a další informace. Zpracování obrazu se široce uplatňuje v medicíně, řízení experimentu, automatizaci výroby, atd.

- Počítačová grafika

Výsledky měření nebo výpočtu obvykle požadujeme znázornit v grafické formě. Za tímto účelem již vznikla řada užitečných programů, které obvykle plně postačují našim potřebám.

- Integrální transformace

Řadu úloh lze efektivněji řešit tak, že je převedeme integrální transformací do obrazu, se kterým provedeme vhodnou operaci, a provedeme zpětnou integrální transformaci. Popularita integrálních transformací prudce vzrostla objevením rychlé Fourierovy transformace v roce 1965. V dnešní době se stále více uplatňuje tzv. waveletová transformace.

- Symbolické manipulace

Na rozdíl od numerických metod symbolickými manipulacemi získáme výsledek ve tvaru matematického vzorce. Většinu fyzikálních problémů nicméně tímto způsobem řešit nelze.

- Moderní směry počítačové fyziky

Do této kategorie patří například evoluční programování a neuronové sítě.

Směry počítačové fyziky se stále vyvíjejí a výše uvedený seznam proto není konečný a úplný.

Nejčastěji používaným směrem je *počítačové modelování*, kterým se zabývá také tato práce. Příbuzným oborem je *matematické modelování*, jehož cílem je matematická formulace fyzikálních jevů a jejich matematická analýza — řešitelnost, stabilita, konvergence a podobně. Cílem počítačové modelování, na rozdíl od matematického, je nalezení konkrétního řešení problému pomocí počítače.

Řešíme-li fyzikální problém počítačovým modelováním, procházíme podle [6] následujícími kroky:

1. formulace problému,
2. vytvoření modelu,
3. řešení modelu,
4. analýza výsledků.

Počítačové modelování má ovšem také řadu úskalí. Prakticky každý model je zjednodušený, protože nevíme vše a možnosti počítačů jsou omezené. Při zjednodušování nikdy nemáme jistotu, že jsme nezanedbali podstatný rys problému. Výsledky modelu nevypovídají o studovaném jevu přímo, odpovídají pouze našemu modelu. Z těchto důvodů je velmi důležité srovnávat výsledky s experimentem a také sledovat, zda odpovídají poznatkům teoretické fyziky. Často tato „zpětná vazba“ vede k upřesnění modelu, případně k iteračnímu postupu.

Počítačové modelování zahrnuje řadu různých technik. Nejčastější metody lze shrnout do následujících kategorií:

- Částicové metody

Studovaný jev popisujeme na mikroskopické úrovni. Podrobně sledujeme chování jednotlivých částic. Nejčastěji se setkáváme s deterministickou *metodou molekulární dynamiky* a stochastickou *metodou Monte Carlo*. Výsledky těchto metod jsou velmi detailní, v řadě případů jsou však takové výpočty příliš náročné na strojový čas.

- Spojité metody

Jev popíšeme makroskopicky pomocí veličin jako hustota, teplota, rychlost proudění a řešíme parciální diferenciální rovnice, které vyjadřují zákony zachování — nejčastěji energie, hybnosti a rovnici kontinuity. Výsledky jsou podstatně méně detailní než výsledky částicových modelů. Rychlost výpočtu však bývá výrazně vyšší.

- Hybridní metody

Představují kompromisní řešení, kdy kombinujeme výše uvedené metody modelování k dosažení co nejpřesnějších výsledků v krátkém čase.

V následující kapitole rozebereme detailněji částicové, spojitě a hybridní modely používané ve fyzice plazmatu.

# Kapitola 4

## Hybridní modelování

Se slovem *hybridní* se setkáváme v mnoha oblastech lidské činnosti. Zpravidla jej používáme tam, kde chceme zdůraznit, že jsme využili ty lepší vlastnosti z každé části celku — při křížení v zahradnictví, v automobilovém průmyslu a podobně. Jako snadno představitelný příklad nám poslouží *hybridní trolejbus*. Trolejbus i autobus všichni známe a víme, jaké jsou jejich výhody a nevýhody. Trolejbus je tichý a šetrný k městskému ovzduší, ale je závislý na trolejovém vedení. Autobus je nezávislý, ale v dopravní zácpě dokáže vydatně přispět ke smogu. Zkusme spojit výhody autobusu a trolejbusu. Od takového vozidla budeme čekat alespoň částečnou nezávislost i šetrnost k prostředí města. Řešení může mít různé podoby — například hybridní trolejbus. Do trolejbusu zkrátka zabudujeme spalovací motor. Ve městě bude trolejbus napájený z trolejového vedení a na vesnici pojede na naftu. Zdánlivě je to jednoduché, ale k úspěšnému výsledku vede nelehká cesta. Musíme sestavit složitější převodovku, vyrovnat se s vyšší celkovou hmotností a podobně.

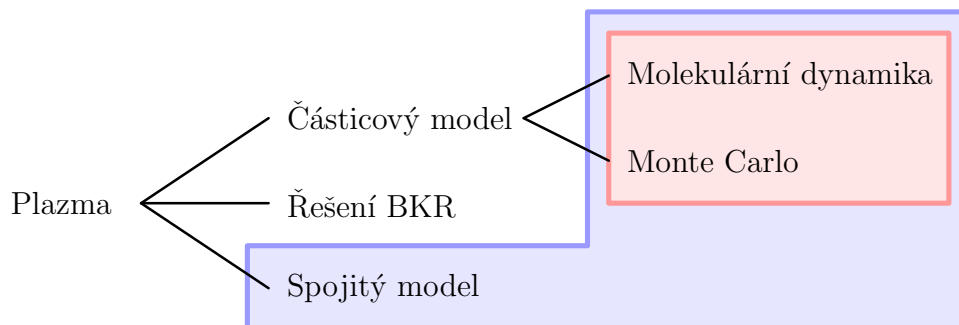
S obdobnými problémy se setkáváme v modelování ve fyzice. Některé metody jsou velmi přesné a časově náročné, jiné dávají výsledky nesrovnatelně rychleji, ale s velkou chybou. Hybridní modely by měly vést k co nejlepším výsledkům v přiměřeném čase. Dosahují toho kombinací různých přístupů k jednomu fyzikálnímu problému. Obvykle však nelze převzít jen ty lepší vlastnosti, a proto musíme hledat kompromisní řešení.

V následujícím textu budou popsány nejprve základní metody modelování v nízkoteplotním plazmatu. Plynele na ně naváže popis hybridních modelů.

### 4.1 Vztahy metod

Základní srovnání metod používaných v počítačovém modelování nízkoteplotního plazmatu lze najít například v [6]. Níže diskutované metody jsou stručně zobrazeny

na diagramu na obrázku 4.1. Tato práce se zabývá především „velkým hybridním modelem“, který je vymezen modrou barvou.



Obrázek 4.1: Metody modelování v plazmatu. Červenou barvou je vyznačen „malý hybridní model“, modrou barvou „velký hybridní model“.

## 4.2 Částicové modelování

Částicové modely počítají pohyb a interakce jednotlivých částic. Podrobně se této problematice věnuje například [7]. Ve fyzice plazmatu obvykle postačuje klasická Newtonova pohybová rovnice

$$\vec{F} = m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2}, \quad (4.1)$$

kde  $\vec{F}$  je síla působící na částici,  $m$  je hmotnost částice a  $\vec{r}$  je polohový vektor částice. Známe-li síly působící na každou částici a počáteční polohy a rychlosti všech částic, můžeme tuto obyčejnou diferenciální rovnici řešit. Polohy a rychlosti částic postupně počítáme v časových krocích  $\Delta t$ .

Pro výpočet existuje řada algoritmů:

1. Eulerův algoritmus: Patří k metodám prvního řádu přesnosti v čase. Nové polohy, rychlosti a síly částic získáme ze schématu

$$\begin{aligned} \vec{r}_i^{k+1} &= \vec{r}_i^k + \vec{v}_i^k \Delta t \\ \vec{v}_i^{k+1} &= \vec{v}_i^k + \frac{1}{m_i} \vec{F}_i^k \Delta t \\ \vec{F}_i^{k+1} &= \dots \end{aligned} \quad (4.2)$$

Index  $k$  odpovídá času,  $i$  je index částice.

2. Verletovy algoritmy: Diferenční schéma v této práci používaného Verletova algoritmu druhého řádu přesnosti v čase je

$$\begin{aligned}\vec{r}_i^{k+1} &= \vec{r}_i^k + \vec{v}_i^k \Delta t + \frac{1}{2m_i} \vec{F}_i^k \Delta t^2 \\ \vec{F}_i^{k+1} &= \dots \\ \vec{v}_i^{k+1} &= \vec{v}_i^k + \frac{1}{2m_i} \left( \vec{F}_i^k + \vec{F}_i^{k+1} \right) \Delta t\end{aligned}\tag{4.3}$$

Verletovy algoritmy představují dobrý kompromis mezi přesností a náročností výpočtu a jsou vhodné pro systémy mnoha částic. Nevýhodou je podmínka, že síla nesmí záviset na rychlosti částic. To je ovšem v této práci splněno.

3. Algoritmy vyšších řádů: Nejsou v této práci používány, protože jsou výpočetně náročné a jejich přesnost by mimo jiné díky srážkovým procesům v plazmatu zůstala nevyužita.

V celé práci je používán výše popsáný Verletův algoritmus. Pro řešení pohybových rovnic dále potřebujeme znát síly, které působí na částice. V nízkoteplotním plazmatu jsou významné dva druhy interakcí částic: Coulombické silové působení nabitých částic a jejich srážky s neutrálními částicemi. Z pohledu počítačové fyziky tyto interakce řešíme po řadě metodou molekulární dynamiky a metodou Monte Carlo. Spojení těchto metod někdy bývá nazýváno „malým hybridním modelem“.

Výpočet elektrických sil působících na částice lze řešit řadou algoritmů. V této práci používáme standardní algoritmus PIC (*Particle-in-Cell*) ve variantě CIC (*Cloud-in-Cell*), viz např. [7]. V pracovní oblasti sestrojíme síť vhodné geometrie a v uzlových bodech vypočítáme potenciál elektrického pole  $\varphi$  řešením Poissonovy rovnice na základě hustoty náboje částic v síti  $\varrho$

$$\Delta\varphi = -\frac{\varrho}{\varepsilon_0}.\tag{4.4}$$

Intenzitu elektrického pole pak vypočítáme vztahem

$$\vec{E} = -\nabla\varphi.\tag{4.5}$$

Existuje řada možností, jak řešit Poissonovu rovnici. Ve vyšších dimenzích představuje řešení Poissonovy rovnice časově velmi náročný úkol. Podle práce [8] v 1D a 2D tvoří výpočet sil, resp. řešení Poissonovy rovnice méně než 50% celkové doby výpočtu. V 3D výpočtu je to přibližně 99%. V 1D případě se obvykle používá přímé řešení Thomasovým algoritmem [9]. V 2D zvláště dříve byla často používána superrelaxační metoda (*Successive Overrelaxation, SOR*, viz [10]), která vyniká snadnou implementací, ale postupně byla nahrazena efektivnějšími metodami. Příkladem je metoda LU dekompozice řídké matice s knihovnou UMFPACK [11].

V plně trojrozměrném modelu se setkává více nesnází. Optimalizaci řešení Poissonovy rovnice je potřeba věnovat velkou pozornost. Východiskem mohou být silné metody jako multigridy, konjugované gradienty a metoda konečných prvků. Současně má však 3D model velmi vysoké nároky na počet částic v modelu. Máme-li krychlovou síť o rozměru  $200 \times 200 \times 200$  uzlů a požadujeme průměrně deset částic v každé buňce, počet částic v modelu bude  $8 \cdot 10^7$ , což je na hranici kapacity paměti běžného osobního počítače. Bohužel tyto požadavky jsou minimální, má-li mít model vůbec smysl. Úměrně těmto požadavkům také roste doba výpočtu a výpočet i relativně malého modelu může trvat řádově měsíce. Odtud mimo jiné plyne snaha vytvářet hybridní modely, které by měly výrazně nižší hardwarové a časové nároky.

Mezi slabiny metody molekulární dynamiky patří takzvaný nefyzikální ohřev. Při numerickém řešení pohybových rovnic se díky konečnému časovému kroku mírně zvyšuje kinetická energie částic. Volíme proto dostatečně malý časový krok, aby nefyzikální ohřev během počítaného časového intervalu byl zanedbatelný.

Již bylo uvedeno, že srážky nabitých částic s neutrálními částicemi modelujeme metodou Monte Carlo. Každý druh srážky je charakterizován především srážkovým průřezem, který je obvykle funkcí vzájemné energie interagujících částic. V grafu 4.2 jsou vyneseny závislosti srážkového průřezu na energii pro pružné, excitační a ionizační srážky elektronů s neutrály argonu při tlaku 133 Pa podle Bogaertsové [12]. Známe-li srážkové průřezy, musíme najít vhodný algoritmus, kterým rozhodneme, ve kterém okamžiku se konkrétní částice srazí. V oboru nízkých a středních tlaků se nejčastěji používá takzvaná „metoda nulové srážky“ popsaná v [13]. Vychází z úvahy, že náhodnou volnou dráhu částice můžeme metodou Monte Carlo generovat podle vzorce

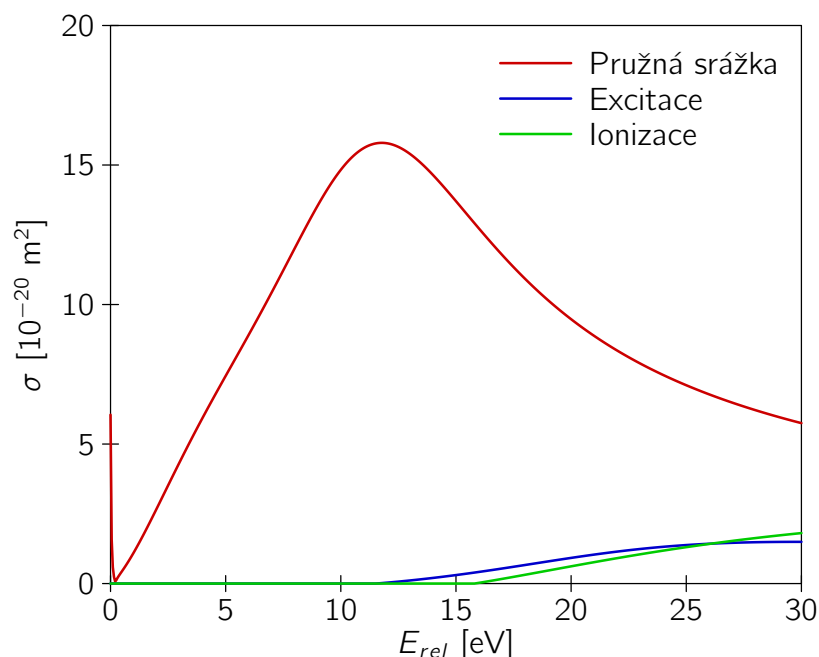
$$s = -\lambda \log \gamma, \quad (4.6)$$

kde  $\lambda = 1/n\sigma$  je střední volná dráha částice,  $n$  je koncentrace terčů,  $\sigma$  je srážkový průřez a  $\gamma$  je náhodné číslo z intervalu  $(0, 1)$  s rovnoměrným rozdělením, za předpokladu, že  $\lambda$  je konstantní. Tento předpoklad obvykle splněn není. Nicméně zavedeme-li umělý konstantní srážkový průřez  $\sigma_0$ , můžeme generovat odpovídající náhodné volné dráhy  $s$  s tím, že při každé takové události metodou výběru rozhodneme, ke kterému typu srážky došlo. Možné srážky však musíme rozšířit o „nulovou srážku“, při které částice pokračuje v pohybu, jako by k žádné srážce nedošlo. Srážkový průřez „nulové srážky“ je pak právě takový, aby pro libovolnou energii platilo

$$\sigma_0 = \sum_i \sigma_i(\epsilon), \quad (4.7)$$

kde  $i$  běží přes všechny druhy srážek včetně „nulové srážky“.

Metoda nulové srážky je vhodná tam, kde střední je doba mezi srážkami výrazně větší než časový krok pohybu částice. Pro vyšší tlaky používáme odlišné



Obrázek 4.2: Srážkové průřezy pro interakci elektronů s neutrály argonu

metody, které jsou efektivnější a nevyžadují nežádoucí zkracování časového kroku pohybu částice. V práci [14] je popsán model srážek nezávislý na volbě kroku, který je pro vyšší tlaky vhodnější.

Tato metoda dále předpokládá, že terče jsou nehybné. V případě srážek elektronů s neutrály je tento předpoklad přibližně splněný, protože rychlost elektronů je mnohem větší než rychlost neutráľů. Srážky iontů s neutrály tento předpoklad nesplňují, protože rychlosti částic jsou srovnatelné a terče tedy nelze považovat za nehybné. Možné řešení tohoto problému je uvedeno v práci [14]. Rychlost terče se při srážce negeneruje na základě maxwellovského rozdělení, ale z upraveného rozdělení, které chybu kompenzuje.

Výše popsaný částicový model označujeme jako *selfkonzistentní*, tj. *sám sobě odpovídající*. Nejen v oblasti hybridního modelování se však také setkáváme s *ne-selfkonzistentním* částicovým modelem. V selfkonzistentním modelu se částice pohybují pod vlivem vnějších a vzájemných sil, které jsou za běhu modelu průběžně počítány. V neselfkonzistentním modelu jsou síly pevně dány například potenciálem elektrického pole a nabitě částice se pohybují bez vzájemné interakce.

Předností neselfkonzistentního modelu vynikají při modelování v třídimenziálním prostoru. Obvyklý selfkonzistentní model je zatím spíše za hranicí našich výpočetních možností. V neselfkonzistentním modelu jsou síly dány, a proto se vyhneme časově náročnému výpočtu sil. Navíc není nutné uchovávat v paměti infor-



maci o všech částicích najednou, protože spolu v modelu neinteragují. Mezi další výhody patří snadná a efektivní paralelizace výpočtu. Každé vlákno počítá pohyb jedné částice nezávisle a vlákna se ovlivňují pouze v okamžiku průběžného ukládání výsledků.

Než se rozhodneme použít neselfkonzistentní přístup, musíme zvážit, zda je pro naši úlohu vhodný. Neselfkonzistentní model lze použít tam, kde nejsou podstatné síly mezi jednotlivými částicemi. To v plazmatu může být splněno díky stínění. Pro pohyb dílčích částic sledovaný ve větším měřítku jsou pak rozhodující prostorové náboje a vnořené substráty. Níže uvádíme několik příkladů použití neselfkonzistentních modelů. Současně také zodpovíme otázku, jak zjistit síly působící na částice.

- **Kombinace s analytickým výpočtem**

V některých jednoduchých případech dokážeme vypočítat působící síly analyticky na základě teorie nebo experimentálních poznatků. Tématu této práce se blíží například publikace [15], která se zabývá studiem pohybu elektronů v okolí Langmuirovy sondy. Potenciál elektrického pole je jednoduše zadán aproximativní funkcí v závislosti na vzdálenosti od nekonečné válcové sondy. Pro každou hodnotu předpětí na sondě je sledován pohyb 10 000 částic, což umožňuje provést výpočet v krátkém čase pro velké množství hodnot předpětí.

Zásadní nevýhodou této metody je omezení na případy, kde jsme schopni síly působící na částice takto jednoduše popsat.

- **Kombinace s metodou PIC**

Neselfkonzistentní model můžeme použít k upřesnění výsledků selfkonzistentního modelu založeného na metodě PIC. Počet částic, se kterým pracuje PIC model, bývá obvykle menší, než jaký je potřeba k určení například energetického rozdělení částic dopadajících na sondu. Mezi možná řešení patří výpočet pomocí neselfkonzistentního modelu, ve kterém počítáme pohyb částic v potenciálu daném PIC modelem. Počet částic v této fázi může být výrazně vyšší než v PIC modelu bez zvýšených nároků na operační paměť.

Postup je výhodný z hlediska počítačového i fyzikálního, protože v obou modelech používáme mnoho shodných metod, například řešení pohybových rovnic, řešení srážek s neutrály a okrajové podmínky.

- **Kombinace se spojitým modelem**

Především v třídimenzionálních úlohách je předchozí příklad stále příliš náročný na výpočetní prostředky. Selfkonzistentní PIC model můžeme nahradit spojitým modelem, který je sice výrazně méně náročný, ale také méně

přesný. Neselfkonzistentním modelem můžeme získat velmi detailní výsledky, které ale odpovídají nepřesnému potenciálu elektrického pole. Nicméně tyto výsledky můžeme použít k opravě původního spojitého modelu. Tato myšlenka tvoří základ iteračního hybridního modelu, který bude níže detailněji popsán.

Z těchto příkladů je zřejmé, že neselfkonzistentní částicový model je spíše pomocným prostředkem, který sám nemůže plně nahradit selfkonzistentní výpočet.

### 4.3 Spojité modelování

Spojité model nahrazuje diskrétní částice spojitými veličinami, které popisují jejich chování jako tekutinu. Místo souřadnic konkrétních částic, jejich energií a podobně zavádíme odpovídající koncentraci, hustotu energie a pod. Prostorový a časový vývoj veličin určují odpovídající parciální diferenciální rovnice: momenty Boltzmannovy kinetické rovnice (2.14), Maxwellovy rovnice, materiálové vztahy a podobně.

Minimální sada rovnic pro popis nízkoteplotního dvousložkového plazmatu se skládá z následujících rovnic:

- Rovnice kontinuity pro elektrony

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_e = r_e. \quad (4.8)$$

- Rovnice kontinuity pro ionty

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_i = r_i. \quad (4.9)$$

- Tok elektronů

$$\vec{J}_e = n_e \mu_e \vec{E} - D_e \nabla n_e. \quad (4.10)$$

- Tok iontů

$$\vec{J}_i = n_i \mu_i \vec{E} - D_i \nabla n_i. \quad (4.11)$$

- Poissonova rovnice

$$\Delta \varphi = -\frac{e}{\varepsilon_0} (n_i - n_e). \quad (4.12)$$

- Potenciál elektrického pole

$$\vec{E} = -\nabla \varphi. \quad (4.13)$$

V rovnicích výše jsou  $n_e$  a  $n_i$  koncentrace elektronů a iontů,  $\mu_e$  a  $\mu_i$  jsou pohyblivosti (se znaménkem),  $D_e$  a  $D_i$  jsou koeficienty difuze a  $r_e$  a  $r_i$  představují členy vzniku a zániku příslušných částic nepružnými srážkami.

Tyto parciální diferenciální rovnice s odpovídajícími okrajovými podmínkami lze řešit různými metodami. Pro jednodušší geometrická uspořádání lze použít metodu konečných diferencí. Pro složitější geometrie a především ve třech dimenzích je vhodnější metoda konečných prvků.

Abychom mohli tuto soustavu numericky řešit, potřebujeme znát zmíněné koeficienty difuze  $D$  a pohyblivosti  $\mu$ . Můžeme je získat přímo z experimentu, nebo je můžeme vypočítat z jiných parametrů plazmatu. V [16] jsou pro elektrony tyto koeficienty odvozeny z Boltzmannovy kinetické rovnice vztahy

$$D = \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty \frac{c^4}{\nu} f_0(c) dc \quad (4.14)$$

a

$$\mu = \frac{q}{m} \cdot \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty \frac{c^3}{\nu} \frac{df_0(c)}{dc} dc, \quad (4.15)$$

kde  $q$  je náboj elektronu,  $m$  je hmotnost elektronu a  $f_0(c)$  je nenarušená rozdělovací funkce. Konečně  $\nu$  je srážková frekvence daná obecně vztahem

$$\nu = n_g c \sigma(c), \quad (4.16)$$

kde  $n_g$  je koncentrace neutrálních částic a  $\sigma(c)$  je účinný průřez pružné srážky elektronu s neutrálními částicemi. Je-li srážková frekvence nezávislá na rychlosti a rozdělení maxwellovské, snadno dostaneme vztahy

$$D = \frac{kT}{m\nu} \quad (4.17)$$

a

$$\mu = \frac{q}{m\nu} \quad (4.18)$$

Tyto vztahy jsou velmi často užívány, ale je nutné pamatovat na to, že podmínky, za kterých byly odvozeny, jsou velmi přísné. Je-li to možné, je vhodnější použít vztahy (4.14) a (4.15).

Pro ionty budeme považovat koeficient difuze a pohyblivost za konstanty. V modelech totiž budeme pracovat s kladným předpětím, díky kterému se ionty budou vyskytovat především v oblastech slabě narušeného plazmatu. Kdybychom požadovali přesnější popis difuze a driftu iontů, lze v literatuře najít vhodné aproximativní závislosti parametrů na elektrickém poli, pro argon viz například [17].

Základním nedostatkem spojitých modelů je jejich malá vypovídací schopnost. Výsledkem výpočtu jsou totiž závislosti veličin jako koncentrace, střední energie a

podobně na poloze v čase. Na rozdíl od částicového modelu nemůžeme zjistit parametry jednotlivých částic. To je současně důvod nepřesnosti těchto výpočtů. Obvykle musíme totiž a priori předpokládat rozdělovací funkce částic, abychom mohli určit koeficienty reakcí a difuze a pohyblivosti částic. Odtud se již dostáváme opět k myšlence hybridního modelu, který nám může poskytnout chybějící informace.

### 4.3.1 Numerické metody řešení soustav parciálních diferenciálních rovnic

V následujícím textu stručně uvedeme základní metody, které se obvykle používají pro řešení parciálních diferenciálních rovnic spojitých modelů. Výše uvedenou soustavu upravíme do vhodného tvaru dosazením z (4.10) do (4.8) a z (4.11) do (4.9). Pro jednoduchost zde budeme považovat  $D_e$ ,  $\mu_e$ ,  $D_i$  a  $\mu_i$  za konstanty a členy  $r_e$  a  $r_i$  rovné nule. Výsledkem jsou následující rovnice

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\mu_e n_e \vec{E}) - D_e \Delta n_e = 0, \quad (4.19)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\mu_i n_i \vec{E}) - D_i \Delta n_i = 0. \quad (4.20)$$

Do soustavy patří rovněž výše uvedená Poissonova rovnice. Rovnice (4.19) a (4.20) se liší pouze v koeficientech a nazýváme je transportními rovnicemi. Naším cílem je nalézt funkce  $n_e(\vec{r}, t)$ ,  $n_i(\vec{r}, t)$  a  $\vec{E}(\vec{r}, t)$ , respektive  $\varphi(\vec{r}, t)$  pro zadané počáteční a okrajové podmínky.

Pro jednoduché geometrické podmínky postačuje metoda konečných diferencí. V pracovní oblasti sestojíme mříž a spojitě prostorové souřadnice nahradíme diskretními indexy uzlů mříže. Obdobně provedeme diskretizaci času. Diferenciální operátory nahradíme diskretními výrazy, například

$$\frac{\partial n}{\partial x} \sim \frac{n_{i+1}^j - n_{i-1}^j}{2\Delta x}, \quad \frac{\partial n}{\partial t} \sim \frac{n_i^{j+1} - n_i^j}{\Delta t} \quad a \quad \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \sim \frac{n_{i-1}^j - 2n_i^j + n_{i+1}^j}{\Delta x^2}, \quad (4.21)$$

kde  $i$  je index prostorové souřadnice  $x$  a  $j$  je index času. Parciální diferenciální rovnice tak převedeme na soustavu lineárních algebraických rovnic. Použití těchto výrazů vede k tzv. FTCS (*forward time, centered space*) schématu — prostorové difference určujeme z hodnot v  $j$ -tém časovém kroku prostorově symetricky, časové difference z kroků  $j$  a  $j + 1$ . Přestože toto schéma vede ke snadnému algoritmu, jeho použití je omezené velmi nepříznivými podmínkami konvergence, podrobněji viz [18].

Z hlediska konvergence jsou pro transportní rovnici vhodnější implicitní schémata. V těchto schématech se obecně v diskretizaci prostorových derivací objevují hodnoty v časovém kroku  $j + 1$ . Jako příklad uvádíme Crankovo-Nicolsonovo

schéma podle [18]

$$\frac{\partial n}{\partial x} \sim \frac{1}{2} \left( \frac{n_{i+1}^j - n_{i-1}^j}{2\Delta x} + \frac{n_{i+1}^{j+1} - n_{i-1}^{j+1}}{2\Delta x} \right), \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \sim \frac{1}{2} \left( \frac{n_{i-1}^j - 2n_i^j + n_{i+1}^j}{\Delta x^2} + \frac{n_{i-1}^{j+1} - 2n_i^{j+1} + n_{i+1}^{j+1}}{\Delta x^2} \right). \quad (4.23)$$

Diskretizace časové derivace je shodná s předchozím případem. Nevýhodou implicitních schémat je výrazně vyšší výpočetní náročnost. V každém kroku řešíme velkou soustavu lineárních algebraických rovnic, jejíž matice je řídká. V současné době jsou ovšem k dispozici kvalitní knihovny pro manipulaci s řídkými maticemi, například již zmiňovaná knihovna UMFPACK.

Řada autorů používá takzvaný Scharfetterův-Gummelův algoritmus, jehož odvození a použití v jednorozměrném modelu je stručně popsáno v [19]. Dvoudimenzionální válcová varianta tohoto algoritmu je podrobně popsána v [20].

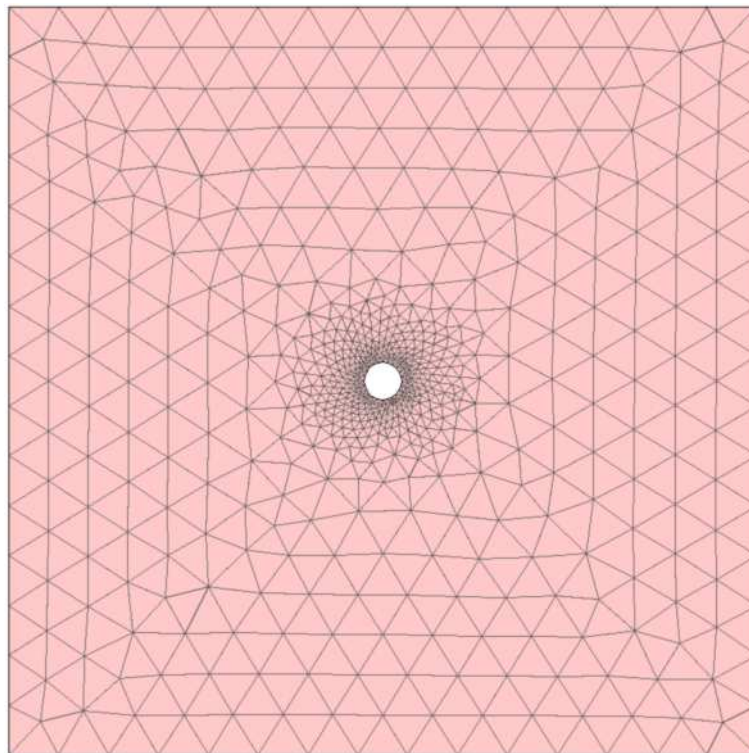
Řešení transportní rovnice představuje pouze část výpočtu. V praxi řešíme soustavu minimálně tří rovnic, která zahrnuje transportní rovnice pro elektrony a ionty a Poissonovu rovnici. V každém časovém kroku řešením transportních rovnic získáme nové hodnoty koncentrací elektronů a iontů, na základě kterých řešíme Poissonovu rovnici. Získaný potenciál elektrického pole v dalším kroku vstupuje do transportních rovnic.

Cílem této práce je tvorba plně třídimenzionálních modelů. V takovém případě je velmi vhodná metoda konečných prvků (*Finite Element Method, FEM*). Na rozdíl od metody konečných diferencí, která snadno popisuje problémy s jednoduchou geometrií, metoda konečných prvků dokáže pracovat na velmi složité síti, kterou lze snadno přizpůsobit i jinak protichůdným požadavkům. Modelujeme-li například interakci relativně malé sondy s plazmatem, požadujeme současně jemnou síť v okolí sondy a velkou pracovní oblast. Kdybychom chtěli použít rovnoměrnou pravoúhlou síť, na jakou jsme zvyklí z metody konečných diferencí, problém by byl s dostupnými výpočetními prostředky téměř neřešitelný. V metodě konečných prvků vytvoříme v okolí geometricky složité sondy velmi jemnou síť a ve vzdálenějších oblastech ji ponecháme výrazně hrubší. Tímto způsobem lze výpočet podstatně zefektivnit. Příklad dvoudimenzionální sítě pro okolí válcové sondy je uveden na obrázku 4.3.

V této práci se nebudeme podrobně zabývat teoretickými detaily metody konečných prvků. Pro řešení konkrétních problémů budeme používat komerční software COMSOL Multiphysics, přesto považujeme za vhodné alespoň stručně uvést základní myšlenky této metody. Postupovat budeme podle [21].

Zvolíme si obecnou úlohu na oblasti  $\Omega$ , která se často nazývá *doména*, s hranicí  $\partial\Omega$ . V oblasti  $\Omega$  požadujeme splnění diferenciální rovnice

$$a(u) = f, \quad (4.24)$$



Obrázek 4.3: Příklad 2D sítě v okolí nekonečné válcové sondy pro metodu konečných prvků

kde  $u$  je hledaná funkce. Na hranici má řešení splňovat Dirichletovu hraniční podmínku

$$b_0(u) = g_0 \quad (4.25)$$

nebo Neumannovu podmínku

$$b_1(u) = g_1. \quad (4.26)$$

Na rozdíl od metody konečných diferencí, ve které hledáme přibližné řešení jen v uzlových bodech mříže, výsledkem metody konečných prvků je aproximativní funkce  $\hat{u}$ , kterou lze vyjádřit lineární kombinací *bázových funkcí*  $\phi_k$

$$\hat{u} = \sum_{k=1}^N \phi_k u_k. \quad (4.27)$$

Vzhledem k tomu, že  $\hat{u}$  není přesné řešení, definujeme podle zadání úlohy rezidua

$$r_\Omega = a(\hat{u}) - f, \quad r_0 = b_0(\hat{u}) - g_0 \quad \text{a} \quad r_1 = b_1(\hat{u}) - g_1. \quad (4.28)$$

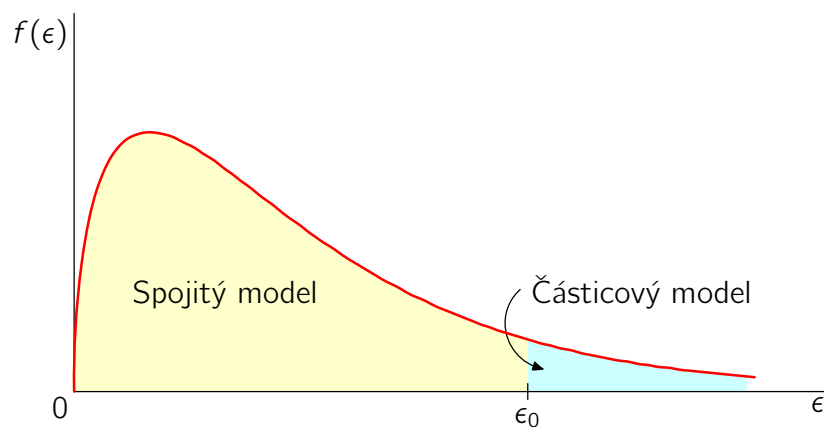
Aproximativní řešení  $\hat{u}$  hledáme takové, aby rezidua byla v určitém smyslu minimální. Toho dosáhneme splněním nulovosti součtu integrálů

$$\int_{\Omega} w_l r_{\Omega} d\Omega + \int_{\partial\Omega_0} w_l^0 r_0 d\partial\Omega + \int_{\partial\Omega_1} w_l^1 r_1 d\partial\Omega = 0, \quad (4.29)$$

kde  $w_l$  jsou *váhové funkce*. Rovnice (4.29) se nazývá *slabá formulace*. Soustava rovnic (4.24), (4.25) a (4.26) se analogicky nazývá *silná formulace*. Slabá formulace není ekvivalentní silné formulaci. Každé řešení silné formulace je současně řešením slabé formulace, nicméně slabou formulaci splňují i další řešení. Typickým rozdílem formulací jsou různé požadavky na spojitost řešení a jeho derivací.

Zatím jsme nespecifikovali, jakou konkrétní podobu mají báze funkce  $\phi_k$  a váhy  $w_l$ . Velmi vhodné jsou funkce s kompaktním nosičem, které jsou nenulové jen nad malým počtem elementů mříže. Integrály v rovnici (4.29) pak můžeme přepsat jako sumu integrálů přes jednotlivé elementy. Báze funkce volíme jako interpolační funkce v rámci elementů — nejčastěji lineární nebo kvadratické. Váhy  $w_l$  jsou obvykle shodné s báze funkce  $\phi_k$  (tzv. Galerkinova formulace), ale není to nutné.

Zavedením těchto funkcí převedeme rovnici (4.29) na soustavu lineárních rovnic pro koeficienty  $u_k$ . Konkrétní metodu řešení soustavy je potřeba volit s ohledem na požadovanou přesnost, rychlost a dostupné prostředky. COMSOL nabízí mimo jiné metody LU dekompozice (UMFPACK, SPOOLES), přímé řešiče (PARADISO), iterativní metody (GMRES, konjugované gradienty, BiCGStab). Na základě koeficientů  $u_k$  podle vztahu (4.27) získáme aproximativní řešení úlohy  $\hat{u}$ .

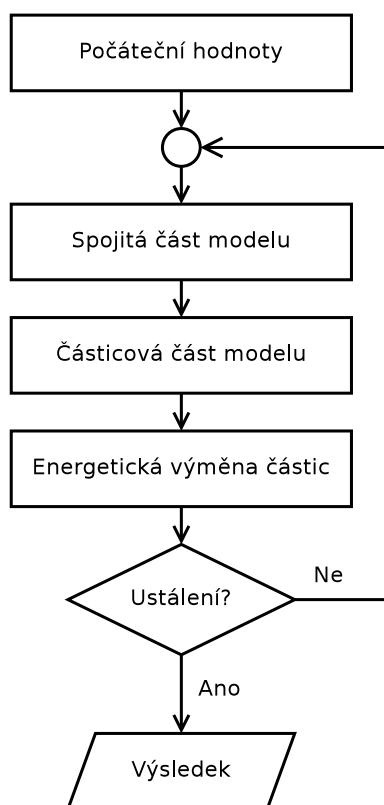


Obrázek 4.4: Schéma rozdělení elektronů na „rychlé“ (nad  $\epsilon_0$ ) a „pomalé“ (pod  $\epsilon_0$ )

## 4.4 Obvyklé hybridní modely

Možností, jak kombinovat metody modelování plazmatu, je obrovské množství. Základní přehled je uveden například v [22]. V této práci bude provedeno srovnání tří hybridních modelů, které označíme názvy *iterační*, *energetický* a *prostorový model*.

### 4.4.1 Energetický model



Obrázek 4.5: Zjednodušené schéma energetického modelu

Touto metodou se zabývá například [19]. Hranice mezi částicovým a spojitým modelem je dána nějakou významnou hodnotou energie elektronu. Například v pozitivním sloupci doutnavého výboje v argonu je to nejnižší energie elektronu potřebná k excitaci atomu argonu v základním stavu. Elektrony s vyšší energií, než je tato prahová energie, podstupují nepružné excitační a ionizační srážky, což narušuje elektronovou rozdělovací funkci, která je pro nižší energie například max-



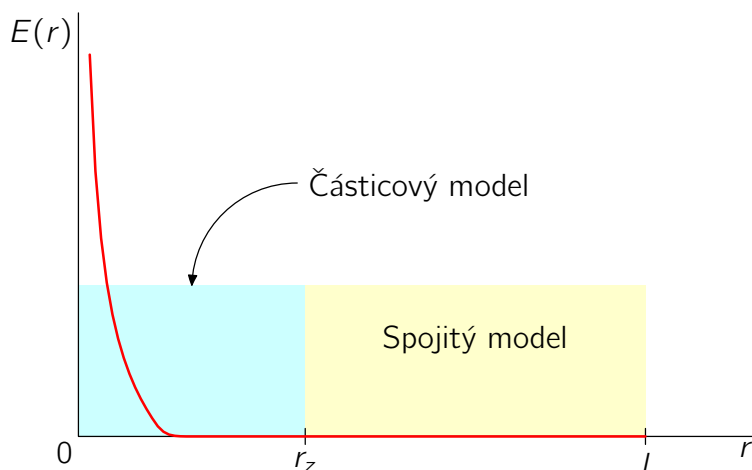
wellovská. Elektrony tedy rozdělíme na „pomalé“ a „rychlé“ podle jejich energie. Pro přesně maxwellovskou rozdělovací funkci je situace znázorněna na obrázku 4.4.

Tato metoda je velmi výhodná, pokud v pracovní oblasti jen velmi málo elektronů přesahuje prahovou energii danou vlastnostmi neutrálů. Nevýhodou je nutnost předpokládat rozdělovací funkci pomalých elektronů, což je problematické například v blízkosti sondy na relativně vysokém potenciálu vůči teplotě elektronů.

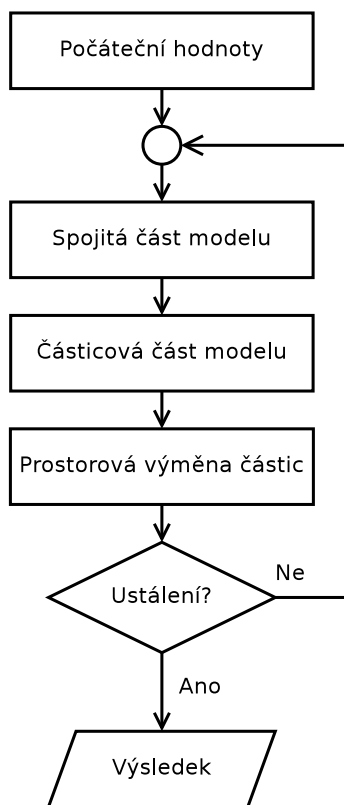
Elektrony při svém pohybu mohou vlivem elektrického pole a srážek zvyšovat i snižovat svou energii. Pokud energie „rychlého“ elektronu klesne pod prahovou energii, je přesunut do spojitě části modelu. Model však musí zahrnovat také opačný proces — „pomalé“ elektrony mohou zvýšit svou energii nad prahovou energii. V takovém případě je potřeba tento elektron zařadit do částicové části modelu. Nicméně ze spojitě části modelu z principu neznáme parametry jednotlivých elektronů, a proto využíváme pravděpodobnostního přístupu. Na základě velikosti elektrického pole, které především způsobuje urychlování elektronů, určíme počet elektronů, které přejdou do částicového modelu, a jejich konkrétní parametry rozehrajeme metodou Monte Carlo.

V průběhu výpočtu, který je uveden na obrázku 4.5, se v každém časovém kroku střídá částicový a spojitý model. V každém kroku je dále potřeba provést výše uvedenou výměnu částic mezi modely podle jejich energie. Jsou-li časové změny veličin spojitěho modelu dostatečně malé, lze spojitou část počítat s delším časovým krokem s tím, že na jeden krok spojitěho modelu připadne několik kroků částicového modelu podle poměru délek časových kroků.

#### 4.4.2 Prostorový model



Obrázek 4.6: Rozdělení pracovní oblasti prostorového hybridního modelu



Obrázek 4.7: Zjednodušené schéma prostorového modelu

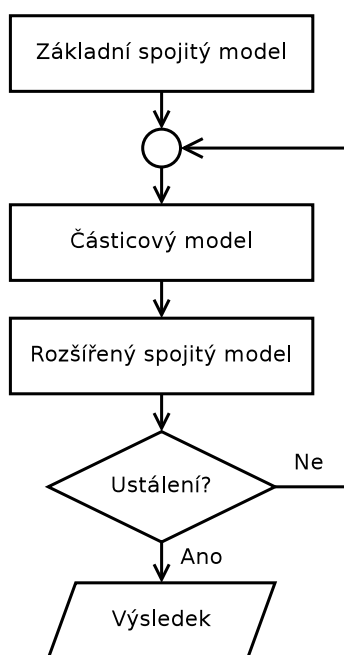
V řadě řešených problémů v nízkoteplotním plazmatu pozorujeme, že jen relativně malá část zkoumané oblasti vyžaduje výpočet částicovým modelem. Nabízí se tedy myšlenka rozdělit pracovní oblast na dvě části. Tam, kde požadujeme přesnější výpočet, použijeme částicový model a zbytek oblasti popíšeme spojitým modelem. Pokud částicový model pracuje na malé oblasti, můžeme výpočet tímto způsobem výrazně urychlit.

Jako příklad nám poslouží válcová Langmuirova sonda. Na obrázku 4.6 je nakresleno schéma modelu interakce sondy s plazmatem ve válcové geometrii 1d3v (tj. prostorová souřadnice  $r$  a složky rychlosti  $v_r$ ,  $v_\varphi$  a  $v_z$ ). Poloměr válcové pracovní oblasti je  $l$  a sonda o poloměru  $r_p$  má osu shodnou s osou souřadného systému. Na obrázku je červeně vynesena intenzita elektrického pole v okolí sondy. Dále od určité vzdálenosti od počátku menší než  $r_z$  je elektrické pole velmi malé a jen velmi málo narušuje plazma. Naopak blíže k sondě se nachází stínící oblast, ve které je plazma silně narušené. V praxi se ukazuje, že z důvodu stability výpočtu je vhodné umístit hranici mezi částicovým modelem ( $r < r_z$ ) a spojitým modelem ( $r > r_z$ ) dostatečně daleko od výrazně narušené oblasti.

Na obrázku 4.7 je schematicky uveden postup výpočtu prostorového modelu. V každém časovém kroku provedeme spojitý i částicový výpočet v odpovídajících oblastech a zajistíme výměnu částic mezi oblastmi. Stejně jako v energetickém hybridním modelu nemusí být délka časového kroku stejná pro obě části modelu.

### 4.4.3 Iterační model

Tato metoda je podrobně popsána v [23], dříve také například v [24]. Základní schéma běhu iteračního modelu je uvedeno na obrázku 4.8. Nejprve provedeme



Obrázek 4.8: Zjednodušené schéma iteračního modelu (podle [23])

výpočet jednoduchým spojitým modelem, který je popsán v kapitole 4.3. Výsledné prostorové rozdělení potenciálu elektrického pole převezmeme do neselfkonzistentního částicového modelu. Nyní necháme elektrony (případně ionty) pohybovat se v pevně daném elektrickém poli a na základě analýzy jejich pohybu upřesníme koeficienty v rovnicích spojitého modelu. Pracovní oblast můžeme vhodně rozdělit na buňky, ve kterých zjistíme rozdělovací funkci. Rozdělovací funkci totiž potřebujeme znát pro výpočet koeficientu difuze a pohyblivosti (vzorce (4.14) a (4.15)). Tyto upřesněné koeficienty následně vstupují do spojitého modelu. Tento proces opakujeme, až dosáhneme ustáleného stavu.

Tento postup je vhodný především pro hledání ustáleného stavu. Příkladem takového problému je interakce substrátu s plazmatem v pozitivním sloupci dout-

naváho výboje. Metoda není vhodná pro řešení problémů s výraznými změnami v čase, například iontová implantace skokovou změnou napětí.

#### 4.4.4 Další hybridní modely

V literatuře se lze setkat s řadou variant hybridních modelů, které často vznikají jako kombinace výše popsanych modelů. Například v [25] je popsán model argonového výboje s příměsí vodíku. Celkem třináct druhů částic je modelováno převážně energeticky děleným modelem a nalezneme zde navíc mimo jiné spojitý model pro neutrální částice H a  $H_2$ , který započítává produkci a zánik neutrálů v reakcích a difúzi.

# Kapitola 5

## Cíle diplomové práce

Cílem této práce je rozvoj hybridních metod modelování ve fyzice plazmatu a jejich aplikace na konkrétní problémy. Tyto modely nacházejí uplatnění tam, kde výpočty čistě částicovými modely mají příliš velké nároky na hardware a dobu výpočtu a poměrně nenáročné spojitě modely nepodávají dostatečně detailní a přesné výsledky. Problémy interakce plazmatu s pevnou látkou, které vyžadují plně třídimenzionální přístup, jsou typickým příkladem.

Vzhledem k tomu, že existuje řada přístupů k hybridnímu modelování, vyzkoušíme nejprve několik nejčastějších variant a porovnáme je se základním částicovým a spojitým modelem. Budeme diskutovat jejich přednosti a nevýhody na základě aplikace na zjednodušený problém nekonečné válcové sondy.

Vybranou metodu hybridního modelování rozpracujeme dále tak, abychom mohli řešit plně třídimenzionální úlohy. Hlavní principy modelu představíme ve dvoudimenzionální geometrii vzhledem k větší názornosti obrázků a grafů. Výsledným modelem budou řešeny dva problémy — konečná válcová sonda v plazmatu s driftem a interakce plazmatu s vodivým substrátem s nerovnostmi.

# Kapitola 6

## Srovnání vybraných hybridních modelů

Typické hybridní modely, které byly představeny v kapitole 4, zrealizujeme a porovnáme jejich výsledky a efektivitu. Do srovnání zahrneme také částicový a spojitý model. Abychom se mohli soustředit především na metody hybridního modelování, budeme řešit poměrně jednoduchý problém — nekonečně dlouhou válcovou sondu vnořenou do nízkoteplotního argonového plazmatu. Tato úloha je v prostoru jednorozměrná, což výrazně usnadňuje počítačové řešení spojitě částí modelů.

### 6.1 Energetický model

Průběh výpočtu energetickým modelem je uveden ve schématu 4.5. Podle potřeby si stanovíme hraniční energii mezi spojitou a částicovou částí modelu, viz obrázek 4.4. Model můžeme rozdělit do čtyř bloků:

1. řešič Poissonovy rovnice (4.12),
2. spojitý řešič pro „pomalé“ elektrony,
3. částicový řešič pro „rychlé“ elektrony,
4. spojitý řešič pro ionty.

Řešič Poissonovy rovnice na základě prostorové hustoty náboje a okrajových podmínek vypočítá potenciál elektrického pole v uzlových bodech mříže. V jednodimenzionálním případě používáme Thomasův algoritmus [9].

Spojitý řešič pro „pomalé“ elektrony řeší transportní rovnici

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot (-n_e \mu_e \nabla \varphi - D_e \nabla n_e) = 0, \quad (6.1)$$

kteřá plyne z rovnic (4.8) a (4.10). Metodou konečných diferencí tuto rovnici převedeme na soustavu lineárních algebraických rovnic, které opět řešíme Thomasonovým algoritmem. Analogicky postupujeme v případě spojitého řešiče pro ionty.

Částicový řešič je založen na metodách Monte Carlo a molekulární dynamiky. Pohyb „rychlých“ elektronů je dán elektrickým polem, jehož potenciál počítá řešič Poissonovy rovnice, a srážkami s atomy neutrálního pozadí. Účinné průřezy těchto srážek podle [12] jsou uvedeny na obrázku 4.2.

Po startu modelu nastavíme počáteční podmínky. Spojitým řešičem pro ionty a pro „pomalé“ elektrony vypočítáme změnu koncentrace iontů a „pomalých“ elektronů za čas  $\Delta t$ . Částicovým řešičem vypočítáme nové polohy „rychlých“ elektronů za čas  $\Delta t$ . Následuje výměna částic mezi spojitým a částicovým řešičem elektronů, pro kterou jsou užitečné následující poznatky.

Pro zjednodušení zavedeme bezrozměrnou energii

$$\epsilon = \frac{E}{kT}. \quad (6.2)$$

Maxwellovské rozdělení pro tuto bezrozměrnou energii má tvar

$$f(\epsilon)d\epsilon = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\epsilon}\exp(-\epsilon)d\epsilon. \quad (6.3)$$

Energie  $\epsilon_0$  tvoří zmíněnou hranici. Na obrázku 4.4 vidíme, že „rychlých“ elektronů je obvykle výrazně méně než „pomalých“. Současně pro popis „pomalých“ elektronů postačuje spojitý model počítající s maxwellovským rozdělením. Naopak „rychlé“ elektrony je nutné modelovat částicově, protože vstupují do nepružných srážek, které výrazně mění jejich energii.

Pro realizaci modelu této kategorie potřebujeme několik vzorců, pomocí kterých generujeme „rychlé“ elektrony na počátku i v průběhu výpočtu. Koncentrace částic, které mají vyšší energii než  $\epsilon_0 = E_0/kT$ , je

$$n(\epsilon_0) = n_0 \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Gamma(1,5, \epsilon_0) = n_0 \frac{\Gamma(1,5, \epsilon_0)}{\Gamma(1,5)}, \quad (6.4)$$

kde  $\Gamma(a, x)$  je horní neúplná gamma funkce definovaná

$$\Gamma(a, x) = \int_x^\infty t^{a-1} e^{-t} dt. \quad (6.5)$$

V programech byla použita funkce `gamma_q` z knihovny Boost [26] definovaná

$$\text{gamma\_q}(a, x) = \frac{\Gamma(a, x)}{\Gamma(a)}. \quad (6.6)$$

V metodě Monte Carlo potřebujeme rozehrávat energie „rychlých“ elektronů. Využijeme k tomu inverzní neúplnou horní gamma funkci. Snadno generujeme náhodná čísla  $\xi$  s rovnoměrným rozdělením na intervalu  $(0, \xi_0)$ , kde

$$\xi_0 = \frac{\Gamma(1,5, \epsilon_0)}{\Gamma(1,5)}. \quad (6.7)$$

Energie elektronu odpovídající danému  $\xi$  je dána inverzní neúplnou horní gamma funkcí

$$\epsilon = \Gamma^{-1}(1,5, \xi \cdot \Gamma(1,5)). \quad (6.8)$$

Tuto funkci poskytuje rovněž knihovna Boost. Vygenerované energie přiřadíme jednotlivým elektronům a na počátku volíme jejich směr náhodně. V průběhu simulace vyřazujeme z částicového modelu elektrony, jejichž energie klesla pod  $\epsilon_0$ . Nutné je zohlednit také opačný proces — „pomalé“ elektrony získávají energii v elektrickém poli a jejich část přechází do částicového modelu.

Elektrické pole v blízkosti sondy narušuje energetické rozdělení elektronů. Přímo z modelu však můžeme zjistit pouze část rozdělovací funkce — pro  $\epsilon > \epsilon_0$ . Pro menší energie musíme rozdělovací funkci zadat. Nejjednodušší možností je uvažovat pro „pomalé“ elektrony lokální termodynamickou rovnováhu (*local thermodynamic equilibrium, LTE*). V takovém případě mají „pomalé“ elektrony maxwellovské rozdělení a jejich teplota vlivem elektrického pole roste. V podmínkách typických pro nízké až střední tlaky, zvláště v oblastech silného elektrického pole (např. v okolí sond), elektrony lokální rovnováhy zcela nedosahují, protože jejich střední volná dráha je příliš dlouhá. Dále je vhodné přejít od LTE k částečné lokální termodynamické rovnováze (*partial LTE, PLTE*, podrobnosti například v [27]), která zahrnuje v bilanční rovnici energie více zdrojů.

Nyní známe koncentraci iontů a celkovou koncentraci elektronů po uplynutí časového kroku. Z koncentrací vypočítáme prostorovou hustotu náboje, která vstupuje do řešiče Poissonovy rovnice. Jejím vyřešením získáme potenciál elektrického pole a postupujeme do dalšího časového kroku.

Opakováním tohoto postupu vypočítáme průběh parametrů plazmatu v čase podle požadavků zadání.

## 6.2 Prostorový model

Základní bloky prostorového modelu jsou podobné jako v případě energetického modelu:

1. řešič Poissonovy rovnice (4.12),
2. spojitý řešič pro elektrony,



3. částicový řešič pro elektrony,
4. spojitý řešič pro ionty.

Spojitý a částicový řešič pro elektrony pracují na různých částech pracovní oblasti — částicový řešič v blízkosti sondy ( $r < r_z$  na obrázku 4.6) a spojitý řešič ve zbytku oblasti ( $r > r_z$ ). V bodě  $r_z$  musím provést navázání spojitě a částicové části.

Přechod z částicové části do spojitě řešíme tak, že koncentraci elektronů částicového modelu v malém intervalu  $(r_z - dr, r_z)$  použijeme jako Dirichletovu okrajovou podmínku spojitě části. Délku intervalu  $dr$  zvolíme shodnou s elementem osy  $r$ . Případně je možné provést extrapolaci do bodu  $r_z$  na základě průběhu koncentrace ve více bodech částicové části modelu blízko  $r_z$ .

Současně musíme zajistit přechod částic z oblasti spojitěho modelu do částicového. Ze spojitěho modelu můžeme určit pouze koncentraci elektronů, ale neznáme jejich rychlostní rozdělení. První pokusy založené na předpokladu maxwellovského rozdělení byly neúspěšné, protože rozdělení rychlostí je narušené elektrickým polem. Rychlosti částic vstupujících do částicového modelu proto generujeme pomocným neselfkonzistentním modelem, který je virtuálně umístěn vpravo od bodu  $r_z$  — tedy vně částicové části hybridního modelu. V pomocném neselfkonzistentním modelu počítáme pohyb elektronů pod vlivem elektrického pole daného spojitým modelem a srážek s neutrály. Okrajové podmínky jsou periodické a kopie částic současně vstupují do částicové části hybridního modelu. Takto zaručíme velmi dobré navázání spojitěho a částicového modelu.

Výpočet pohybu elektronů je opět proveden metodami molekulární dynamiky a Monte Carlo. Elektrická síla působící na elektrony je získávána z rozdělení potenciálu elektrického pole, který je počítán řešičem Poissonovy rovnice, který pracuje stejným způsobem jako v energetickém modelu. Spojitý řešič pro ionty je shodný s energetickým modelem.

Také v tomto případě postupujeme po jednotlivých časových krocích požadovaného časového intervalu.

## 6.3 Iterační model

Iterační model se skládá z následujících bloků:

1. standardní spojitý model,
2. neselfkonzistentní částicový model elektronů.

Standardní spojitý model byl popsán v kapitole 4.3. Rovnice (4.8) až (4.11) byly po diskretizaci implicitním schématem řešeny Thomasovým algoritmem. Po-

issonova rovnice byla diskretizována podle schématu (4.21) a rovněž řešena Thomasovým algoritmem.

V neselfkonzistentním částicovém modelu počítáme pohyb elektronů v elektrickém poli, které získáváme ze spojitého modelu. Elektrony vpouštíme do pracovní oblasti „po jednom“, a proto má výpočet nižší nároky na operační paměť než částicový selfkonzistentní model. Elektrony se v pracovní oblasti srážejí s neutrálními atomy argonu. Uvažujeme srážky pružné, excitační a ionizační, jejichž srážkové průřezy jsou uvedeny v grafu 4.2.

Na základě vzorkování rychlostí elektronů v buňkách mříže postupně sestavujeme rozdělovací funkci pro každou buňku. Z rozdělovací funkce na konci neselfkonzistentního výpočtu integracemi (4.14) a (4.15) získáme nové koeficienty difuze a pohyblivosti pro každou buňku samostatně.

Nové koeficienty předáváme zpět do spojitého modelu a počítáme vývoj koncentrací částic a potenciálu v dalším časovém intervalu, na jehož konci předáme potenciál elektrického pole do další iterace neselfkonzistentního modelu. Takto postupujeme do konce celkového časového intervalu.

## 6.4 Kritéria srovnání

Zde srovnávané hybridní modely se od sebe podstatně liší, a proto je obtížné najít kritéria, podle kterých bychom je mohli srovnat.

Nejjednodušší a asi nejžádanější je srovnání celkové doby běhu programu. Pro toto srovnání byly použity k řešení odpovídajících problémů stejné algoritmy. Mnohé části programů jsou shodné pro všechny modely. Všechny programy byly záměrně napsané bez použití paralelizace, protože možnosti paralelizace považujeme za samostatné kritérium.

Velmi důležité je kritérium přesnosti výsledků. Bohužel výsledky těchto modelů nelze přímo srovnat s experimentem. Vhodnou náhradou je srovnání s klasickým částicovým selfkonzistentním modelem. Srovnáme především průběh potenciálu elektrického pole v okolí válcové sondy.

Obtížné je hodnotit vhodnost metody pro daný problém. Každý model nám dává jiné informace. Prostorový model detailně popisuje blízké okolí sondy, ale zbytek pracovní oblasti jen velmi povrchně. Energetický model v celé oblasti sleduje rychlé elektrony, ale informace o pomalých elektronech je velmi zkreslená. Hodnocení modelu pak závisí současně na tom, zda popisuje daný problém dostatečně fyzikálně správně a zda jeho výsledky odpovídají na naše otázky. Toto hodnocení proto nemůže být obecné.

Modely srovnáváme ve velmi jednoduché podobě, v praxi však potřebujeme mnohem složitější modely. Velký význam má otázka, jaké budou nároky daného modelu ve vyšších dimenzích nebo například za vyšších tlaků. Mezi odpovědi patří

například očekávané paměťové nároky a možnosti paralelizace kódu.

## 6.5 Výsledky srovnání

Nejprve uvedeme konkrétní parametry srovnávaných modelů.

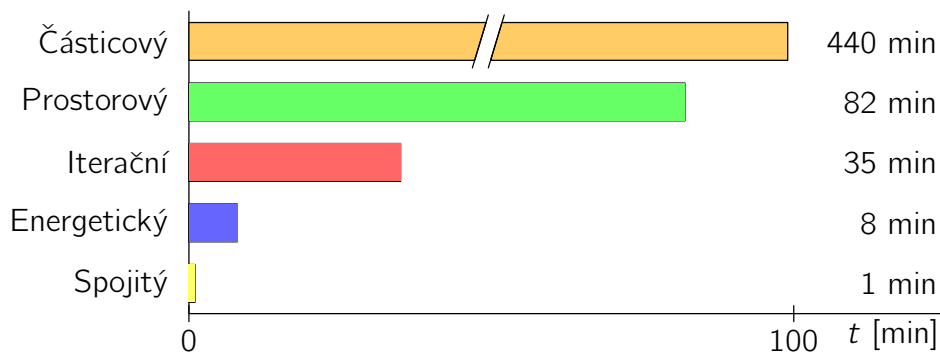
- **Společné parametry všech modelů:** Modely popisují interakci válcové sondy s nízkoteplotním argonovým plazmatem. V souřadnici jsou modely jednodimenzionální, v rychlostech jsou třídimenzionální (tzv. 1d3v model). Osa  $r$  je ekvidistantně diskretizována na 200 bodů sítě. Délka pracovní oblasti je  $l = 1$  cm. Poloměr Langmuirovy válcové sondy je  $r_p = 0,1$  mm. Na sondu je přivedeno předpětí  $U = 5$  V. Okraj modelu je tvořen nenarušeným plazmatem s koncentrací elektronů a iontů  $n_e = n_i = 1 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3}$ . Energetické rozdělení elektronů a iontů v nenarušeném plazmatu považujeme za maxwellovské s teplotami  $T_e = 23200$  K a  $T_i = 300$  K. Uvedené výsledky jsou vzorkem v čase  $t = 1 \cdot 10^{-4}$  s.
- **Iterační model:** Časový krok ve spojitěho modelu je shodný pro elektrony i ionty  $\Delta t_f = 1 \cdot 10^{-10}$  s. Časový krok částicového modelu elektronů je  $\Delta t_e = 5 \cdot 10^{-12}$  s. V každé iteraci vstupuje do pracovní oblasti  $1 \cdot 10^5$  elektronů.
- **Energetický model:** Časový krok je v částicové i spojitě části modelu stejný, ale liší se pro elektrony ( $\Delta t_e = 5 \cdot 10^{-12}$  s) a pro ionty ( $\Delta t_i = 5 \cdot 10^{-9}$  s). Počet elektronů v částicovém modelu silně závisí na aktuálním stavu. V ustáleném stavu je jejich počet přibližně  $5 \cdot 10^4$ , což odpovídá částicovému modelu s přibližně  $7 \cdot 10^6$  elektronů. Maximální počet elektronů v průběhu ustalování je přibližně  $1,5 \cdot 10^5$ .
- **Prostorový model:** Model pracuje s různými časovými kroky pro elektrony ( $\Delta t_e = 5 \cdot 10^{-12}$  s) a ionty ( $\Delta t_i = 5 \cdot 10^{-9}$  s). Pro zjednodušení vazby mezi částicovou a spojitou částí modelu jsou použity tyto kroky i ve spojitě části, přestože by postačoval delší krok. Hranice mezi částicovým a spojitým modelem se nachází ve vzdálenosti 0,25 cm od počátku souřadnic. Částicový model je tedy omezen na 25% pracovní oblasti, zbylých 75% zabírá spojitý model. Počet částic v částicové části je proměnný a pohybuje se okolo  $6 \cdot 10^5$  částic. Koeficienty difúze a pohyblivosti jsou považovány za konstantní v celé oblasti spojitěho modelu.
- **Částicový model:** Časový krok je různý pro elektrony ( $\Delta t_e = 5 \cdot 10^{-12}$  s) a ionty ( $\Delta t_i = 5 \cdot 10^{-9}$  s). Celkový počet částic je v modelu přibližně  $4 \cdot 10^6$  podle aktuálních fyzikálních podmínek.

- **Spojité model:** Jde o základní spojitý model s konstantními koeficienty difuze a pohyblivosti

$$\begin{aligned} D_e &= 520 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}, \\ D_i &= 0,033 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}, \\ \mu_e &= -170 \text{ m}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}, \\ \mu_i &= 0,45 \text{ m}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}. \end{aligned}$$

- **Spojité model s LTE:** Na rozdíl od základního spojitého modelu jsou zde koeficienty difuze a pohyblivosti proměnné. Zjednodušeně předpokládáme, že energie, kterou elektrony získávají v elektrickém poli, je díky srážkám lokálně přerozdělována na maxwellovské rozdělení. Teplota elektronů se mění a podle ní se mění také koeficienty difuze a pohyblivosti.

Doba běhu jednotlivých zkoumaných hybridních modelů je uvedena na obrázku 6.1. Pro srovnání uvádíme též údaj pro základní čistě spojitý model a částicový model. Na obrázku 6.2 jsou grafy průběhu koncentrace elektronů a iontů. Průběhy potenciálu jsou vyneseny do grafů 6.3 a 6.4.



Obrázek 6.1: Výsledky srovnání vybraných modelů.

## 6.6 Diskuze výsledků srovnání

Porovnání doby výpočtu splnilo naše očekávání: Výpočet spojitým modelem je o několik řádů rychlejší než částicovým modelem již v jednodimenzionálním případě. Při přechodu do více dimenzí se tento rozdíl dále prohlubuje. Hybridní modely jednoznačně přináší velkou časovou úsporu oproti částicovému modelu, nicméně jejich vzájemné porovnání je problematické. Každý z nich přináší proti základnímu spojitému modelu jiné vylepšení — například prostorový model je zaměřený na

oblast sheathu, zatímco iterační model je globální. Proto je potřeba při srovnávání hybridních modelů brát v úvahu další kritéria.

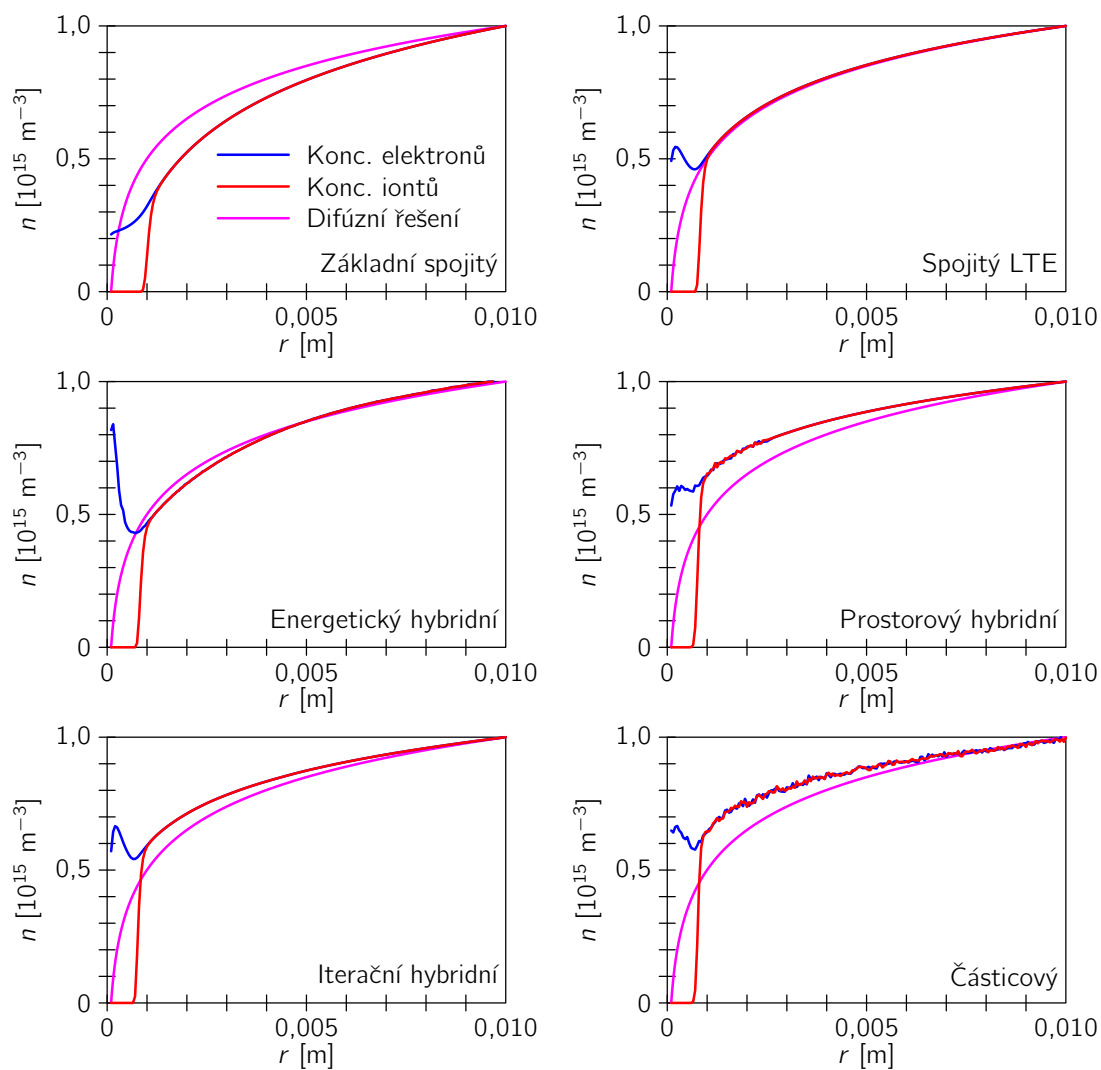
Srovnáme-li modely podle průběhů koncentrace elektronů a iontů, viz obrázek 6.2, pozorujeme, že nejvíce se výsledkům částicového modelu blíží prostorový a iterační model. Naopak výsledky energetického modelu nejsou uspokojivé. Energetický model totiž předpokládá, že rozdělovací funkce elektronů je blízká maxwellovské a liší se především ve vyšších energiích. Zvolené předpětí je nicméně dostatečně velké, aby v okolí sondy byla rozdělovací funkce podstatně více narušená. Prostorový model a iterační model takové předpoklady na rozdělovací funkci nemají.

Průběhy potenciálu elektrického pole v grafech 6.3 a 6.4 rovněž ukazují, že nejlepší shody s částicovým modelem dosáhl iterační model a prostorový model.

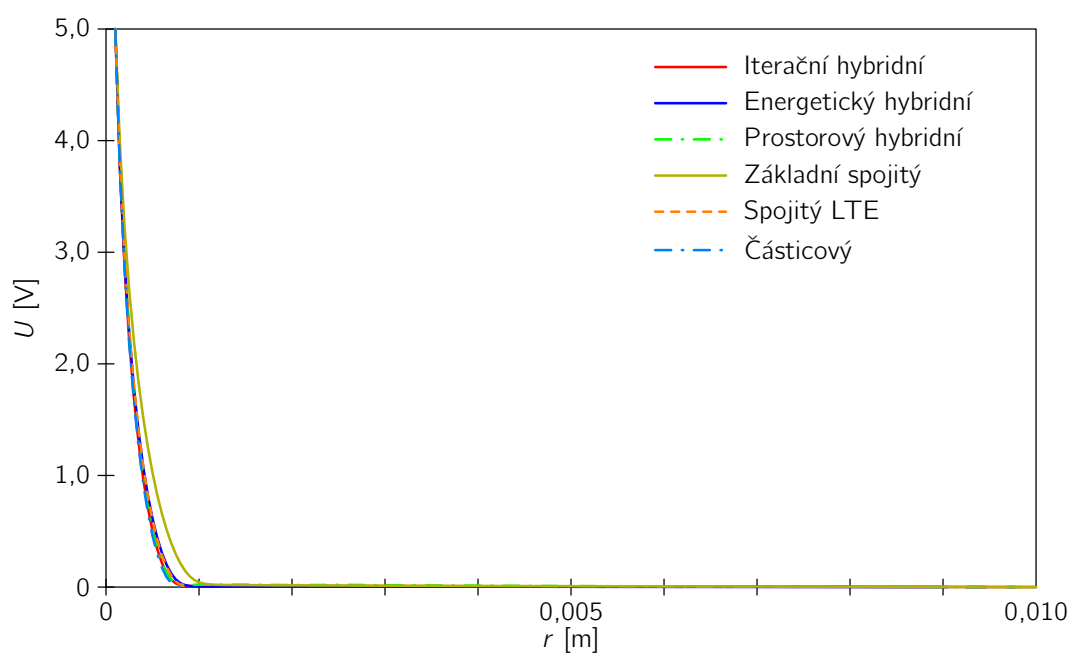
Z hlediska možností paralelizace je nejvýhodnější iterační model. Částicová fáze výpočtu je totiž tvořena neselfkonzistentním částicovým modelem, jehož paralelizace je velmi jednoduchá a efektivní. Jednotlivá vlákna výpočtu jsou téměř nezávislá a může jich v jeden okamžik pracovat velké množství — v praxi jsme úspěšně vyzkoušeli 8 vláken na čtyřjádrovém procesoru Intel i7. Paralelizace energetického a prostorového modelu by byla složitější a méně efektivní, protože v těchto případech je částicový výpočet selfkonzistentní.

Při přechodu k 2D a 3D výpočtům má iterační model také významné výhody. Střídání částicové a spojitě části totiž umožňuje použít zcela odlišné prostředky pro jejich řešení. V třídimenzionálním případě lze spojitou část řešit profesionálními nástroji — například COMSOL Multiphysics. Naopak částicový model je vhodné naprogramovat v jazyce C++ či ve Fortranu s paralelizací. Předávání dat mezi fázemi iteračního modelu je ve srovnání s ostatními hybridními modely velmi jednoduché a nepředstavuje velkou překážku při použití komerčního softwaru.

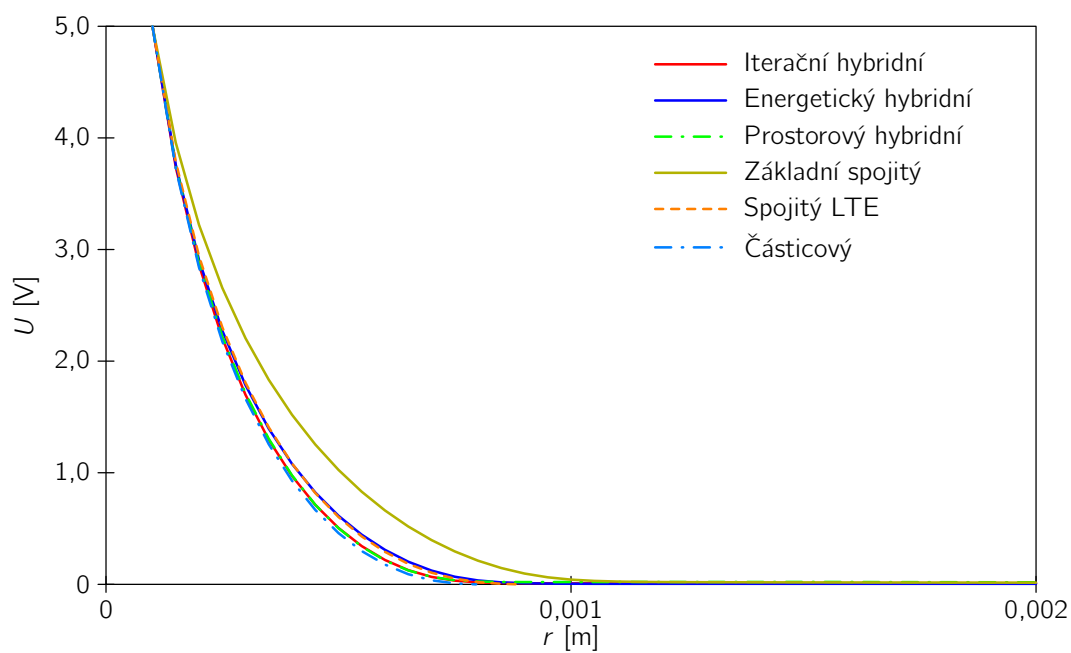
Na základě výsledků srovnání a zkušeností z realizace jednotlivých variant hybridních modelů jsme pro další rozvoj vybrali iterační model.



Obrázek 6.2: Výsledky srovnání vybraných modelů: Závislost koncentrace elektronů a iontů na vzdálenosti od sondy.



Obrázek 6.3: Výsledky srovnání vybraných modelů: Průběh potenciálu.



Obrázek 6.4: Výsledky srovnání vybraných modelů: Detail průběhu potenciálu.

# Kapitola 7

## Hybridní model ve 2D

Na základě výsledků kapitoly 6 a praktických zkušeností při tvorbě hybridních modelů jsme se rozhodli pokračovat ve vývoji iteračního hybridního modelu.

Vzhledem k časové náročnosti výpočtů ve třech dimenzích zařazujeme ještě kapitolu věnovanou dvoudimenzionálnímu modelu. Zde uvedené metody se totiž již jen málo liší od plně 3D modelu, ale výpočty jsou méně časově náročné a výsledky lze snáze zobrazit. V kapitole 8 pak uvedeme jen mírné úpravy, které je potřeba učinit při přechodu k třírozměrným modelům.

Popisované metody budeme demonstrovat na modelu sondy vnořené do plazmatu s driftem. Mějme nekonečnou válcovou sondu o poloměru  $r = 0,1$  mm ve čtvercové pracovní oblasti s hranou délky  $L = 10$  mm v pozitivním sloupci doutnavého výboje v argonu při tlaku 133 Pa. Podél osy  $x$  zavedeme vnější elektrické pole o velikosti  $E = 160$  V m<sup>-1</sup>. Koncentrace elektronů a iontů v nenarušeném plazmatu je  $n_e = n_i = 1,0 \cdot 10^{15}$  m<sup>-3</sup>. Elektrony budou podstupovat pružné, excitační a ionizační srážky s neutrály argonu se srážkovými průřezy podle grafu 4.2. Ionty budeme modelovat výhradně spojitě s koeficientem difuze  $D_i = 0,012$  m<sup>2</sup> s<sup>-1</sup> a  $\mu_i = 0,46$  m<sup>2</sup> V<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup> podle [23]. Předpětí na sondě bude  $U_0 = 5,0$  V.

### 7.1 Spojitá část

Spojitou část modelu tvoří tři parciální diferenciální rovnice vycházející ze vztahů (4.8) až (4.13).

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot (n_e \mu_e \vec{E} - D_e \nabla n_e) = r_e, \quad (7.1)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot (n_i \mu_i \vec{E} - D_i \nabla n_i) = r_i, \quad (7.2)$$

$$\Delta U = -\frac{e}{\varepsilon_0} (n_i - n_e) \quad (7.3)$$



a vztah  $\vec{E} = -\nabla U$ , kde  $n_e$  je koncentrace elektronů a  $n_i$  je koncentrace jednonásobných argonových iontů. Tuto soustavu řešíme metodou konečných prvků programem COMSOL Multiphysics. Pro rovnice (7.1) a (7.2) zvolíme aplikační mód „PDE, General Form (g)“, pro Poissonovu rovnici (7.3) je vhodný mód „Electrostatics (es)“. V grafickém prostředí navrhne geometrii domény, ve které budeme provádět výpočet, a sestojíme síť pro metodu konečných prvků. Vzhledem k malému poloměru křivosti válcové sondy je vhodné v jejím okolí síť zjemnit, viz obrázek 4.3. Ve srovnání s modelem popsáním v [23] náš model neobsahuje rovnici pro tok energie, protože potřebné informace získává z detailnějšího částicového modelu.

Na hranicích domény musíme definovat hraniční podmínky. Na vnější hranici požadujeme parametry nenarušeného plazmatu:

- $U = 0,8 \text{ V}$  na hraně  $x = -5 \text{ mm}$ ,
- $U = -0,8 \text{ V}$  na hraně  $x = 5 \text{ mm}$ ,
- $\vec{n} \cdot \vec{E} = 0$  na ostatních hranách,
- $n_e = 1,0 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3}$ ,
- $n_i = 1,0 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3}$ .

Vnitřní hranice je tvořena sondou s parametry

- $U = 5 \text{ V}$ ,
- $-\vec{n} \cdot \vec{j}_e = -n_e \mu_e \vec{E} \cdot \vec{n} - \frac{1}{4} v_{th} n_e$ ,
- $n_i = 0 \text{ m}^{-3}$ .

Pro koncentraci elektronů používáme Neumannovu podmínku podle [23], ve které  $\vec{n}$  je normála k hranici směrem ven z domény,  $j_e$  je tok elektronů podle (4.10),  $\mu_e$  je pohyblivost elektronů se znaménkem a konečně

$$v_{th} = \sqrt{\frac{8k_B T_e}{\pi m_e}} \quad (7.4)$$

je tepelná rychlost elektronů v blízkosti sondy. Koncentraci iontů v blízkosti elektrody předpokládáme nulovou vzhledem k jejich nízké energii, která je nedostatečná k průniku iontů k sondě.

## 7.2 Částicová část

Částicovou část problému řešíme samostatným programem v jazyce C++. Ze spojitého modelu získáváme elektrické pole, které COMSOL pro zjednodušení výpočtu interpoluje ze sítě FEM na pravoúhlou rovnostrannou mříž. Každá složka elektrického pole je uložena v samostatném textovém souboru. Program částicového modelu načte do operační paměti elektrické pole a provede výpočet pohybu elektronů v pracovní oblasti. Elektronů do oblasti vstupují ze zdroje, jehož podrobnější popis uvedeme dále, a jejich pohyb je ukončen buď dopadem na sondu, nebo opuštěním pracovní oblasti.

Pohyb elektronů je určen lokálním elektrickým polem a srážkami s částicemi neutrálního pozadí. Průběžně sledujeme rychlost elektronů, abychom na konci výpočtu mohli předat do spojitě části modelu prostorové rozdělení koeficientů difuze a pohyblivosti, rychlostní koeficienty reakcí a podobně. K tomu obecně potřebujeme znát rozdělovací funkci elektronů v každé buňce pravoúhlé mříže, což ovšem výrazně zvyšuje nároky na operační paměť. Proto zpracováváme data průběžně. V každé buňce počítáme čtyři parametry:

- Koeficient difuze (4.14):

$$D_e = \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty \frac{c^3}{n_g \sigma_{ela}(c)} f_0(c) dc. \quad (7.5)$$

- Srážková frekvence

$$\nu_e = \int_0^\infty n_g c \sigma_{ela}(c) f_0(c) dc. \quad (7.6)$$

- Koeficient excitace

$$k_{exc} = \int_0^\infty c \sigma_{exc}(c) f_0(c) dc. \quad (7.7)$$

- Koeficient ionizace

$$k_{ion} = \int_0^\infty c \sigma_{ion}(c) f_0(c) dc. \quad (7.8)$$

Funkce  $\sigma_{ela}$ ,  $\sigma_{exc}$  a  $\sigma_{ion}$  jsou srážkové průřezy elastické, excitační a ionizační srážky, viz graf 4.2. Srážkovou frekvenci nepotřebujeme přímo, naopak potřebujeme pohyblivost elektronů  $\mu_e$ . Přímý výpočet pohyblivosti podle (4.15) je pro náš model nevhodný, protože obsahuje derivaci rozdělovací funkce. Proto počítáme nejprve srážkovou frekvenci, ze které následně určíme koeficient pohyblivosti podle (4.18). Tento postup pochopitelně není přesný, nicméně velmi usnadňuje výpočet. Navíc chyba způsobená numerickou derivací rozdělovací funkce v přímé metodě podle (4.15) by byla značná.

Všechny uvedené parametry získáváme integrací přes rozdělovací funkci. Například pro difuzi převedeme integrál na součet

$$D_e = \frac{1}{N} \cdot \frac{4\pi}{3} \sum_i \frac{c_i^3}{n_g \sigma_{ela}(c_i)}, \quad (7.9)$$

kde  $i$  běží přes všechny vzorky dané buňky a  $N$  je počet vzorků. Tento součet můžeme provádět průběžně. Pro každou buňku potřebujeme čtyři částečné součty a počet vzorků v buňce. Kdybychom v každé buňce ukládali rozdělovací funkci, paměťové požadavky by byly přibližně desetinásobné.

Výhodou tohoto neselfkonzistentního částicového modelu je snadná paralelizace. Běh jednotlivých částic pracovní oblastí je totiž téměř nezávislý. Pouze v okamžiku vzorkování dat do buněk mříže a při získávání nové částice ze zdroje se vlákna výpočtu ovlivňují. Výpočty byly prováděny na čtyřjádrovém procesoru Intel i7. Využili jsme současně hyperthreading, který umožnil pracovat s osmi vlákny. Tímto přístupem jsme výrazně urychlili výpočet oproti původní variantě popsané v [23], která byla založená na komerčním softwaru MATLAB.

Vzhledem k tomu, že v částicovém modelu používáme metodu Monte Carlo, bylo nutné zvolit vhodný generátor náhodných čísel. Ve všech výpočtech jsme použili generátor Mersenne Twister MT19937 popsaný v publikaci [28], ve které je generátor doporučen právě pro výpočty metodou Monte Carlo. Generátor jsme úspěšně otestovali programem Diehard [29].

### 7.3 Srážkové procesy

Pro tuto práci jsou nejvýznamnější srážky elektronů s atomy neutrálního argonového pozadí. Uvažujeme srážky pružné, excitační a ionizační. Příslušné srážkové průřezy jsou uvedeny na obrázku 4.2 podle [12]. Programové řešení srážkových procesů je založené na metodě nulové srážky popsané v kapitole 4.2.

Při pružné srážce dochází k přerozdělení energie elektronu a neutrálního atomu. Má-li elektron před srážkou kinetickou energii  $E_0$ , jeho energie po srážce bude

$$E = E_0 \left( 1 - 2 \frac{m_e}{m_g} \gamma \right), \quad (7.10)$$

kde  $m_e$  je hmotnost elektronu,  $m_g$  je hmotnost neutrálu a  $\gamma$  je náhodné číslo z intervalu  $(0, 1)$ .

Aby mohlo dojít k excitační nebo ionizační srážce, musí mít elektron energii vyšší, než je prahová energie příslušné interakce. Při srážce o tuto část energie přichází. V případě ionizace navíc část své energie předává sekundárnímu elektronu. Prahová energie uvažované excitace je  $E_e = 11,55$  eV, pro ionizaci pak

$E_i = 15,76$  eV. Úhlové rozdělení elektronu po srážce považujeme pro jednoduchost za izotropní.

Problematické srážkových procesů se věnujeme podrobněji v publikaci, která tvoří přílohu této diplomové práce. Publikace je v tisku v časopise Vacuum. Studovali jsme v obecnější rovině vliv těžkých záporných iontů a různého složení plynu neutrálního pozadí na utváření stínící vrstvy v okolí válcové sondy. Publikované výsledky byly získány selfkonzistentním částicovým modelem, plánujeme však přenesení použitých technik do hybridního modelu.

## 7.4 Zdroj částic

Běžnou součástí částicových modelů je takzvaný zdroj částic. Obvykle totiž pracovní oblast modelu zabírá jen malou část objemu plazmatu. Plazma mimo pracovní oblast v takovém případě nahrazujeme zdrojem částic, ze kterého vchází částice do pracovní oblasti. Částice odcházející z pracovní oblasti jsou z modelu odstraňovány.

Na zdroj částic jsou kladeny různé požadavky, které vedou k různým způsobům realizace zdroje částic v modelu:

- **Zdroj popsaný vzorcem**

Rychlostní rozdělení je popsáno vzorcem (například tok Maxwellova rozdělení). Tato varianta je nejméně flexibilní, protože vhodné analytické vzorce existují jen pro velmi omezené množství případů.

- **Zdroj se zadanou rozdělovací funkcí**

Rychlostní rozdělení je popsáno tabulkou. Je však nutné generovat na základě tohoto rozdělení tok částic. Metoda je vhodná, pokud máme dané rychlostní rozdělení (například z experimentu).

- **Zdroj s pomocným modelem**

Rychlostní rozdělení je výsledkem pomocného částicového modelu. Před samotným výpočtem do pomocného modelu nasadíme částice s libovolným rychlostním rozdělením a necháme je interagovat s okolím, dokud nenastane rovnováha. Teprve po tomto ustálení částice necháme vstupovat do modelu. Metoda je vhodná, pokud máme dané srážkové procesy, vnější pole, a pod.

V průběhu vývoje modelů jsme vyzkoušeli po řadě všechny tři metody a ukázalo se, že zdroj s pomocným modelem je pro náš problém nejvýhodnější. Jedině v tomto případě se totiž podařilo výrazně potlačit vliv existence hranice modelu na výsledky výpočtu. To je velmi dobře patrné na průběhu koeficientu excitace  $k_{exc}$  argonových neutrální elektronem. V tabulce 7.4 převzaté z práce [23] jsou uvedeny

$l$ [m]	$k_{exc}$ [m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]
0,000 – 0,001	$3,45990 \cdot 10^{-16}$
0,001 – 0,002	$1,28772 \cdot 10^{-17}$
0,002 – 0,003	$2,55010 \cdot 10^{-18}$
0,003 – 0,004	$4,06769 \cdot 10^{-19}$
0,004 – 0,005	$2,82774 \cdot 10^{-19}$
0,005 – 0,006	$3,94909 \cdot 10^{-19}$
0,006 – 0,007	$2,88464 \cdot 10^{-19}$
0,007 – 0,008	$2,98691 \cdot 10^{-19}$
0,008 – 0,009	$5,72011 \cdot 10^{-19}$
0,009 – 0,010	$7,68077 \cdot 10^{-19}$
0,010 – 0,011	$7,87768 \cdot 10^{-19}$
0,011 – 0,012	$8,80815 \cdot 10^{-19}$
0,012 – 0,013	$1,17279 \cdot 10^{-18}$
0,013 – 0,014	$1,22711 \cdot 10^{-18}$
0,014 – 0,015	$1,37210 \cdot 10^{-18}$
0,015 – 0,016	$1,51285 \cdot 10^{-18}$
0,016 – 0,017	$2,13103 \cdot 10^{-18}$
0,017 – 0,018	$2,81576 \cdot 10^{-18}$
0,018 – 0,019	$3,93644 \cdot 10^{-18}$
0,019 – 0,020	$1,16404 \cdot 10^{-17}$

Tabulka 7.1: Příklad závislosti koeficientu excitace na vzdálenosti od válcové sondy. Data převzata z práce [23].

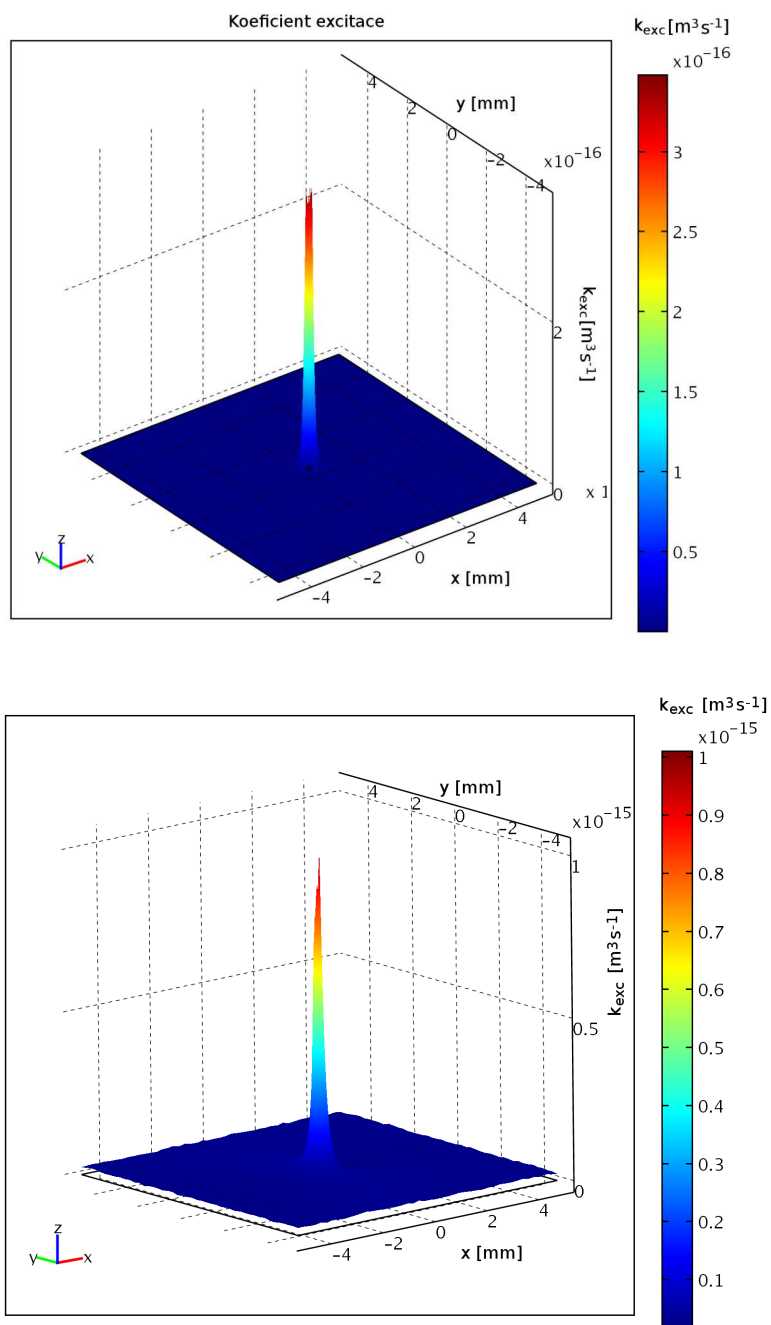
výsledky částicové části hybridního modelu v ustáleném stavu. Očekávali bychom, že v silně narušeném plazmatu (tj. pro malé  $l$ ) se bude koeficient excitace výrazně měnit a v slabě narušeném plazmatu (pro velké  $l$ ) se bude měnit velmi pomalu. Naše očekávání je velmi dobře splněno v oblasti od sondy do poloviny pracovní oblasti. Dále od sondy, kde je elektrické pole prakticky zanedbatelné, ovšem dochází k výraznému nárůstu téměř o dva řády. K tomuto jevu dochází, pokud zdroj není dobře přizpůsobený modelu. Elektrony generované zdrojem při průchodu pracovní oblastí podstupují nepružné srážky a mění se s rostoucí vzdáleností jejich rozdělovací funkce. Výsledky pak silně závisí na volbě velikosti pracovní oblasti, což je nežádoucí.

Chceme-li vliv tohoto jevu podstatně zmenšit, je nutné zajistit, aby zdroj generoval částice s takovým rozdělením, které se nebude v pracovní oblasti samovolně měnit. Právě to umožňuje snadno výše uvedená třetí varianta zdroje. Zdroj je tvořen malým částicovým modelem objemu plazmatu. V jeho malém objemu se nachází částice, které podstupují stejné interakce jako částice v pracovní oblasti

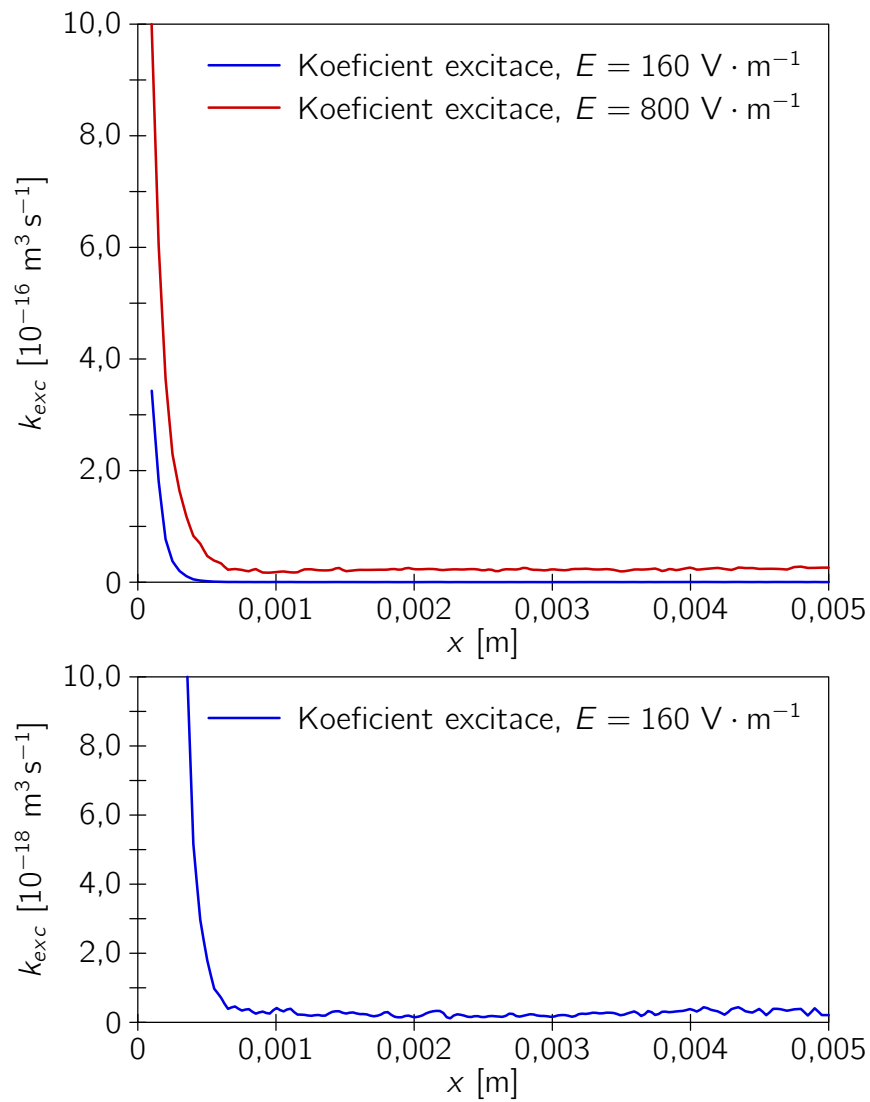
modelu. Pro kompenzaci nepružných srážek je nutné dodávat z vnějšku energii. Toho přirozeně docílíme zavedením konstatního podélného elektrického pole, které je typické například pro pozitivní sloupec doutnavého výboje.

Takto řešený zdroj částic jsme testovali v jednoduchém 2D modelu s výše uvedenými parametry pro vnější elektrické pole  $160 \text{ V m}^{-1}$  a  $800 \text{ V m}^{-1}$ . Správné přizpůsobení zdroje je doloženo v grafech 7.1 a 7.2, na kterých je vynesena závislost koeficientu excitace na souřadnicích v ustáleném stavu.

Na řezu 7.2 je zřejmé, že rozhraní zdroje a modelu nemá vliv na velikost koeficientu excitace v rámci šumu, který záměrně nebyl filtrován. Naopak sonda s osou v počátku souřadnic má na průběh koeficientu excitace ve svém okolí předpokládaný vliv ve shodě s [23].



Obrázek 7.1: Koefficient excitace v 2D pracovní oblasti modelu pro  $E = 160 \text{ V} \cdot \text{m}^{-1}$  (nahore) a  $E = 800 \text{ V} \cdot \text{m}^{-1}$  (dole)

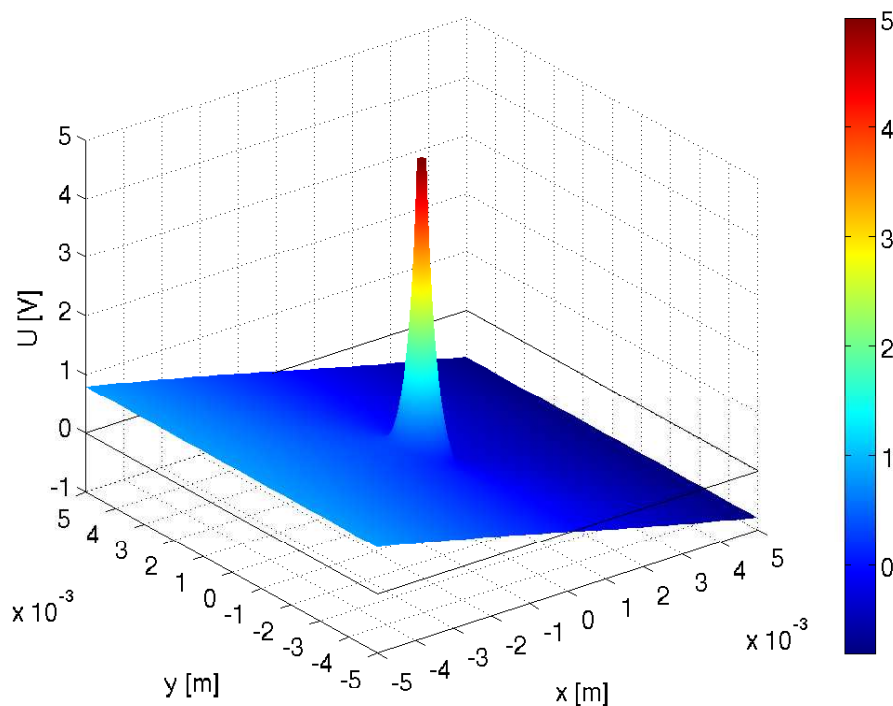


Obrázek 7.2: Koeficient excitace, řez pro  $x > 0$  a  $y = 0$  z grafu 7.1. V dolním grafu je vynesěn detail.



## 7.5 Výsledky modelu

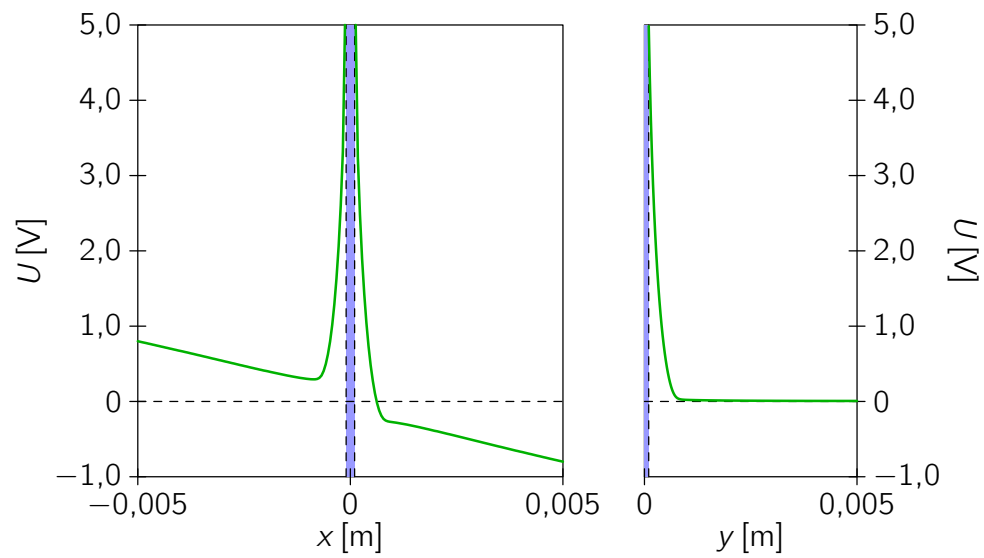
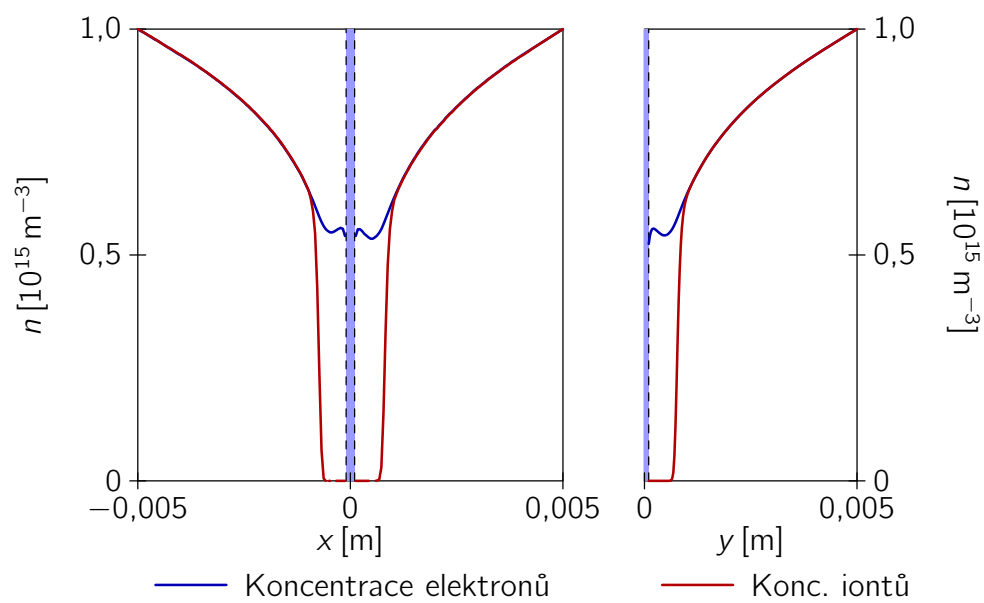
V následujících grafech shrneme podstatné výsledky modelu. Potenciál elektrického pole v celé pracovní oblasti je uveden na obrázku 7.3. Na obrázku 7.4 uvádíme potenciál v řezech podle osy  $x$  (podél vnějšího elektrického pole) a  $y$  (kolmo na elektrické pole). Řez podle osy  $y$  je symetrický, a proto uvádíme jen pravou větev.

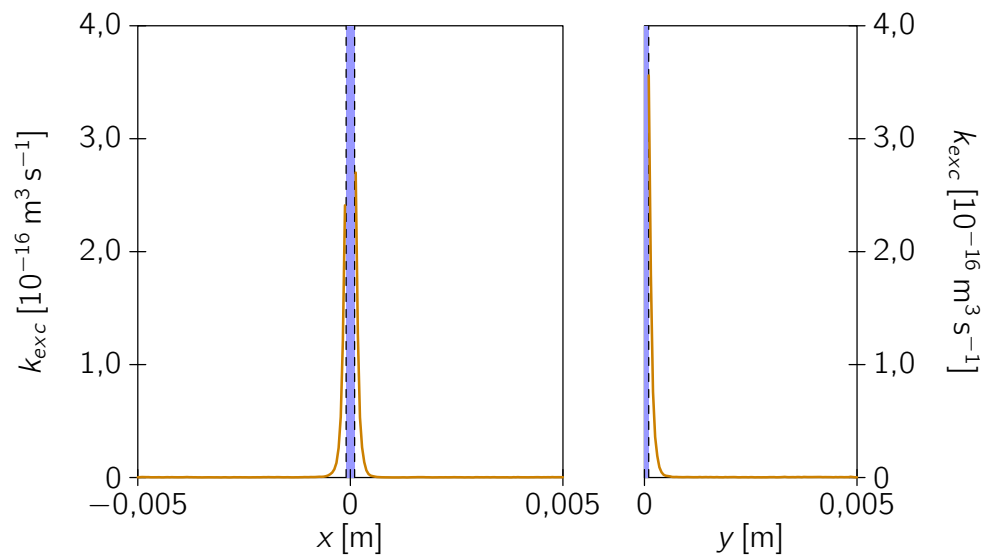
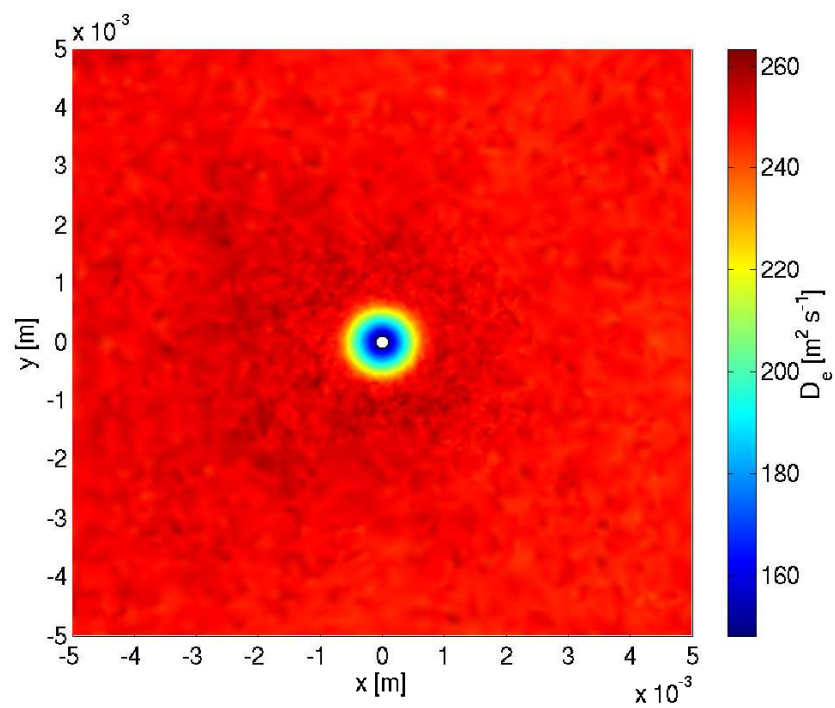


Obrázek 7.3: Potenciál elektrického pole v pracovní oblasti

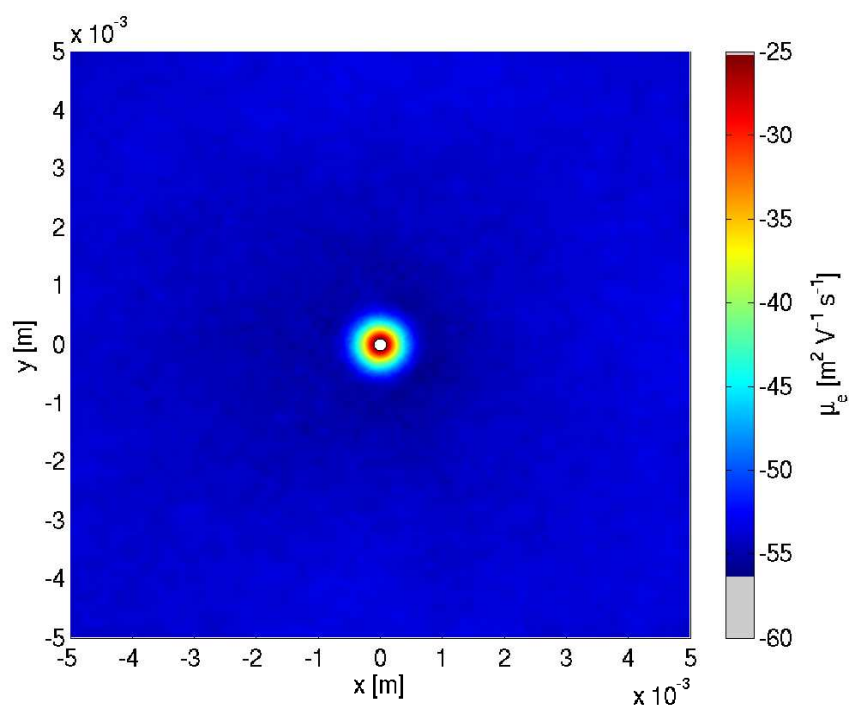
Průběhy koncentrace elektronů a iontů jsou uvedeny opět v řezech na obrázku 7.5. Výsledky jsou zřetelně v souladu s odpovídajícími průběhy na obrázku 6.2.

Na dalších obrázcích uvádíme výsledky částicové části modelu — koeficient excitace na obrázku 7.6, koeficient difuze elektronů na obrázku 7.7 a pohyblivost elektronů na obrázku 7.8. Z grafů je zřejmé, že v okolí sondy se tyto parametry výrazně mění. To vysvětluje chybné výsledky základního spojitého modelu, ve kterém je považujeme za konstanty.

Obrázek 7.4: Potenciál elektrického pole, řez podle os  $x$  a  $y$ .Obrázek 7.5: Koncentrace elektronů a iontů, řez podle os  $x$  a  $y$

Obrázek 7.6: Koeficient excitace, řez podle os  $x$  a  $y$ 

Obrázek 7.7: Koeficient difuze elektronů v pracovní oblasti



Obrázek 7.8: Pohyblivost elektronů v pracovní oblasti

# Kapitola 8

## Hybridní model ve 3D a jeho aplikace

Plně třírozměrný hybridní model, jehož výsledky budou tvořit hlavní náplň této kapitoly, je založen na dvourozměrném modelu, který jsme popsali v předchozí kapitole. Tento přechod nepřináší, poněkud překvapivě, žádné výrazné komplikace. Pochopitelně vzrostou nároky na operační paměť a na čas potřebný k výpočtu, a proto musíme věnovat podstatně větší pozornost konstrukci sítě pro metodu konečných prvků. Standardní síť generovaná programem COMSOL Multiphysics je obvykle naprosto nedostatečná. Modelování interakce plazmatu s pevnou látkou totiž vyžaduje velmi jemnou síť v oblasti stínící vrstvy. Takto jemnou síť však nelze použít v celé oblasti, protože nároky na operační paměť by byly příliš velké.

COMSOL Multiphysics umožňuje interaktivní tvorbu sítě. Následujícím jednoduchým postupem jsme získali ve většině případů dostatečně vhodnou síť: Na površích substrátu, sondy a geometricky složitějších objektů jsme vytvořili jemnou síť (označenou *Finer*). Síť na zbývajících hranicích oblasti a v objemu jsme sestrojili jako normální (označenou *Normal*), v některých případech jsme navíc snížili hodnotu parametru *Element growth rate*.

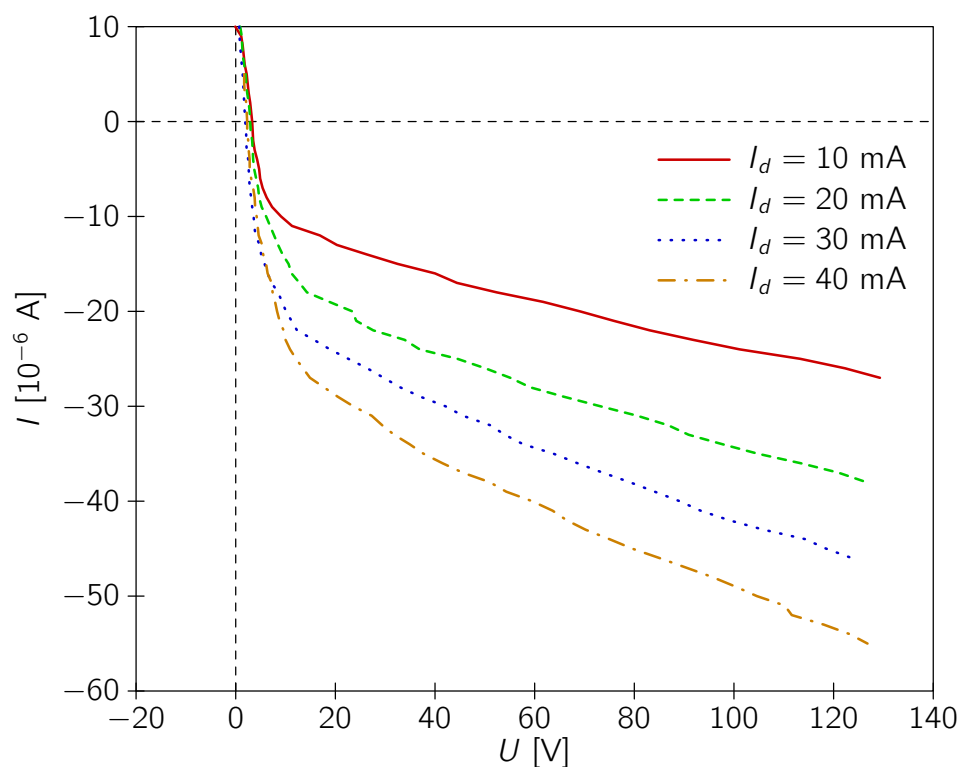
Vzhledem k rozsahu sítě jsme pro řešení soustavy lineárních rovnic použili iterativní řešič FGMRES (*flexible generalized minimum residual*).

### 8.1 Sonda konečných rozměrů

V této podkapitole ukážeme výpočet stínící vrstvy v okolí sondy konečných rozměrů pro reálné parametry plazmatu získané ze sondového měření. Měření jsme provedli v laboratoři doc. Hrachové na Katedře fyziky povrchů a plazmatu MFF UK v Praze. Parametry měřicí aparatury a výboje byly následující:

Výboj:	Doutnavý v argonu, $p = 150$ Pa
Výbojový proud:	$I_d = 10 - 40$ mA
Materiál výbojové trubice:	Pyrex
Diagnostika:	Dvousondová
Vzdálenost sond:	$d = 15$ mm
Poloměr sondy:	$r_p = 0,05$ mm
Aktivní délka sondy:	$l_p = 5,0$ mm

Metodou dvou sond jsem určil základní parametry plazmatu v pozitivním sloupci doutnavého výboje pro čtyři výbojové proudy. Naměřené sondové charakteristiky jsou uvedeny na obrázku 8.1, zjištěné parametry v plazmatu uvádíme v tabulce 8.1.

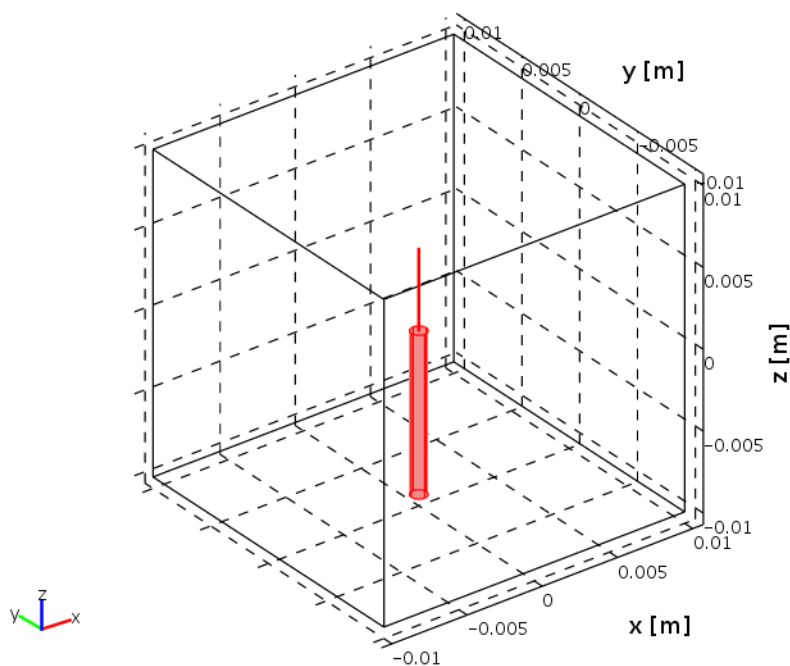


Obrázek 8.1: Naměřené sondové charakteristiky pro různé výbojové proudy  $I_d$

Budeme modelovat interakci plazmatu s použitou sondou při výbojovém proudu 20 mA. Na obrázku 8.2 je znázorněna geometrie úlohy. Pracovní oblast je tvořena krychlí o straně 20 mm. Válcová sonda výše uvedených rozměrů je uchycena ve válcovém dielektriku o poloměru 0,5 mm. Na sondu je přiveden potenciál 5 V. Předpokládáme, že sonda neemituje. Na rovině  $x = -10$  mm je definován potenciál  $U_+ = 1,96$  V, v rovině  $x = 10$  mm je  $U_- = -1,96$  V. Tím je dáno

Výbojový proud $I_d$ [mA]	10	20	30	40
Teplota elektronů $T_e$ [K]	15 200	18 400	18 540	19 810
Konc. elektronů $n_e$ [m <sup>-3</sup> ]	$4,9 \cdot 10^{16}$	$7,1 \cdot 10^{16}$	$8,7 \cdot 10^{16}$	$9,4 \cdot 10^{16}$
Elektrické pole $E$ [V m <sup>-1</sup> ]	220	196	127	152

Tabulka 8.1: Experimentálně určené parametry plazmatu

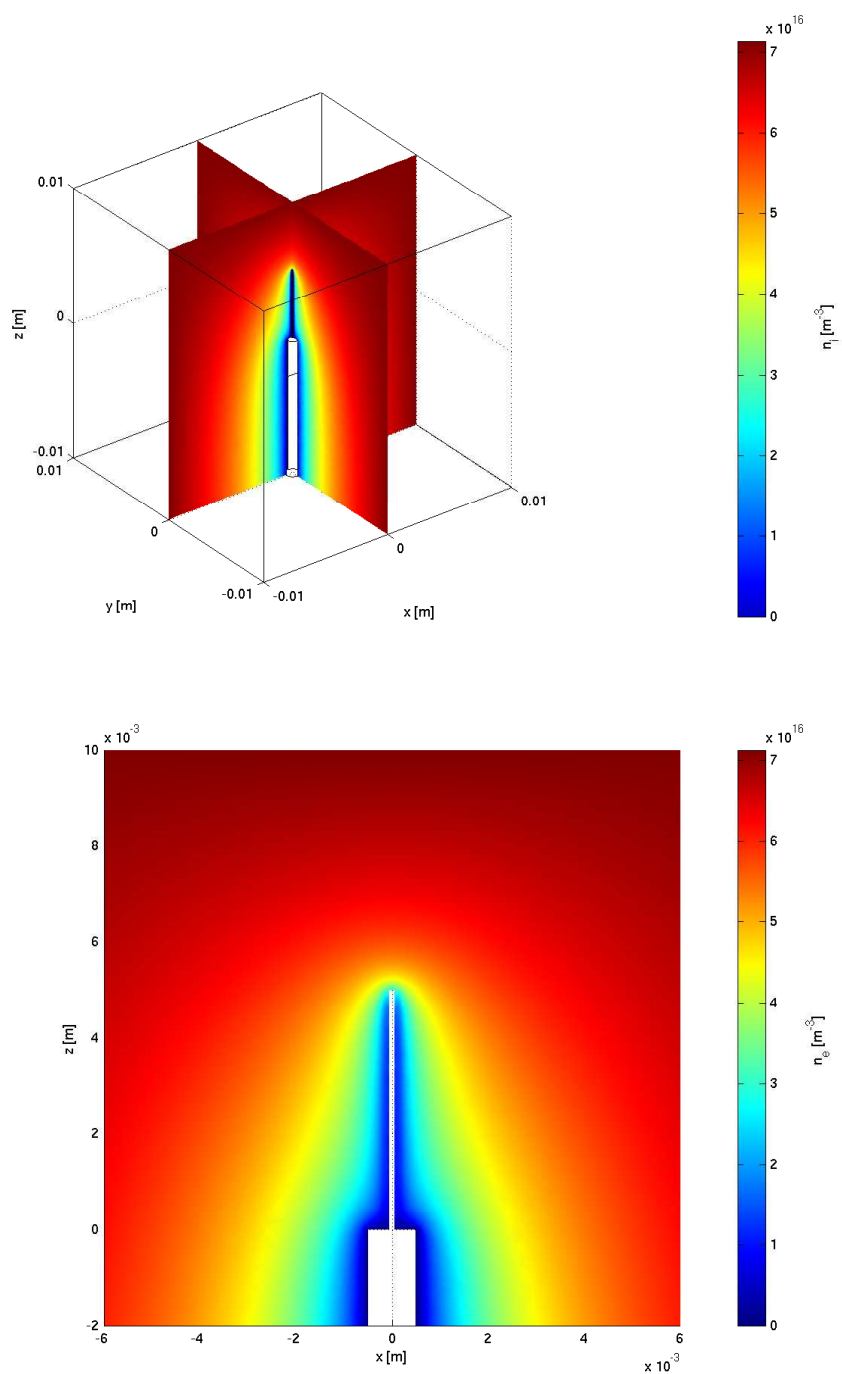


Obrázek 8.2: Geometrie konečné válcové sondy

vnější pole o velikosti  $E = 196 \text{ V m}^{-1}$ . Na povrchu dielektrika předpokládáme pro jednoduchost nulový náboj.

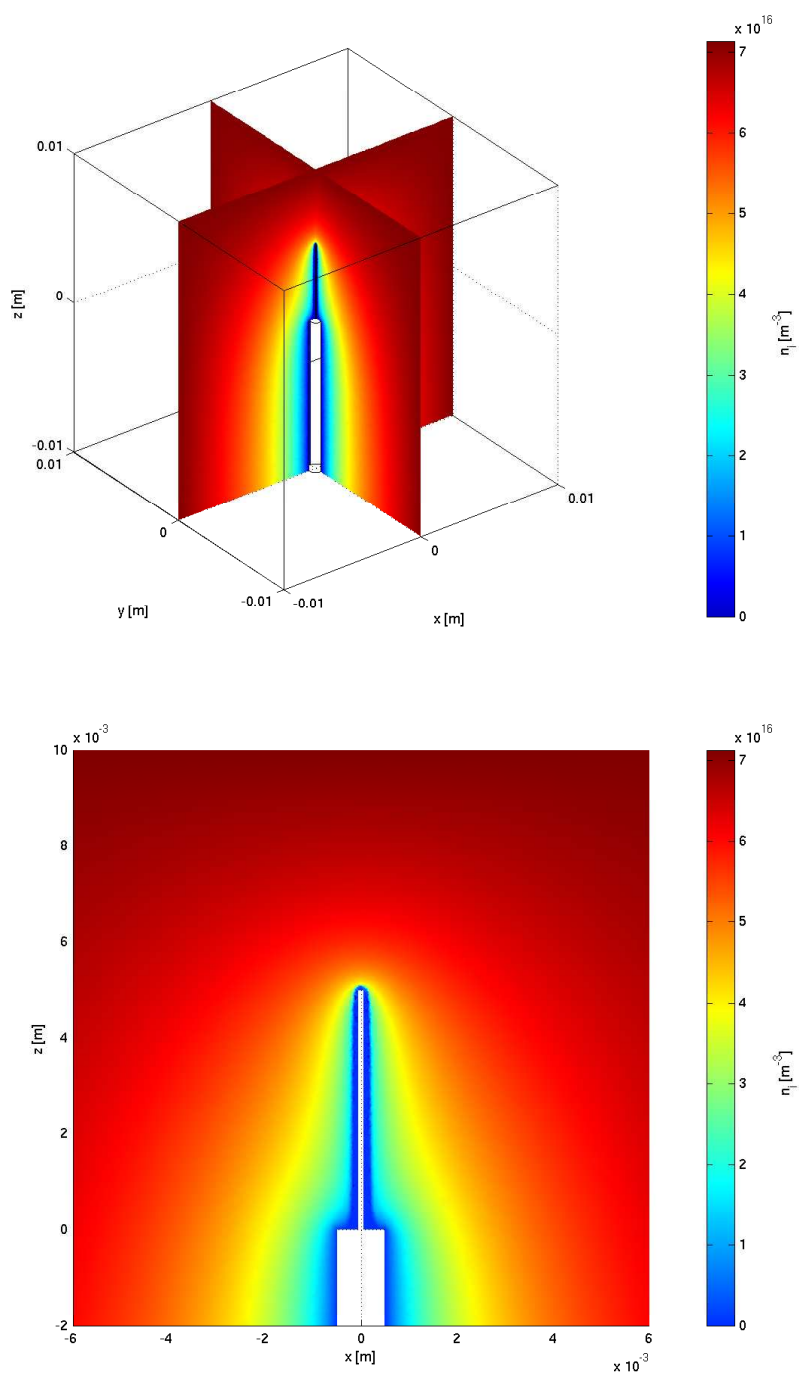
Koncentrace elektronů a iontů v nenarušeném plazmatu je  $n_e = n_i = 7,1 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$ . Na sondě je koncentrace iontů nulová. Pro koncentraci elektronů na povrchu sondy použijeme Neumannovu podmínku shodně s kapitolou 7.

Výpočet probíhá stejným způsobem jako v modelu popisovaném v kapitole 7, pouze je rozšířen do plně třídimenzionální podoby. Na obrázcích 8.3, 8.4 a 8.5 uvádíme průběhy koncentrace elektronů a iontů a potenciálu elektrického pole v pracovní oblasti. Na obrázku 8.6 je uvedena rozdělovací funkce elektronů dopadajících na sondu zvlášť pro hrot (maximálně 1 mm od konce sondy) a pro válcovou část (zbytek povrchu sondy).

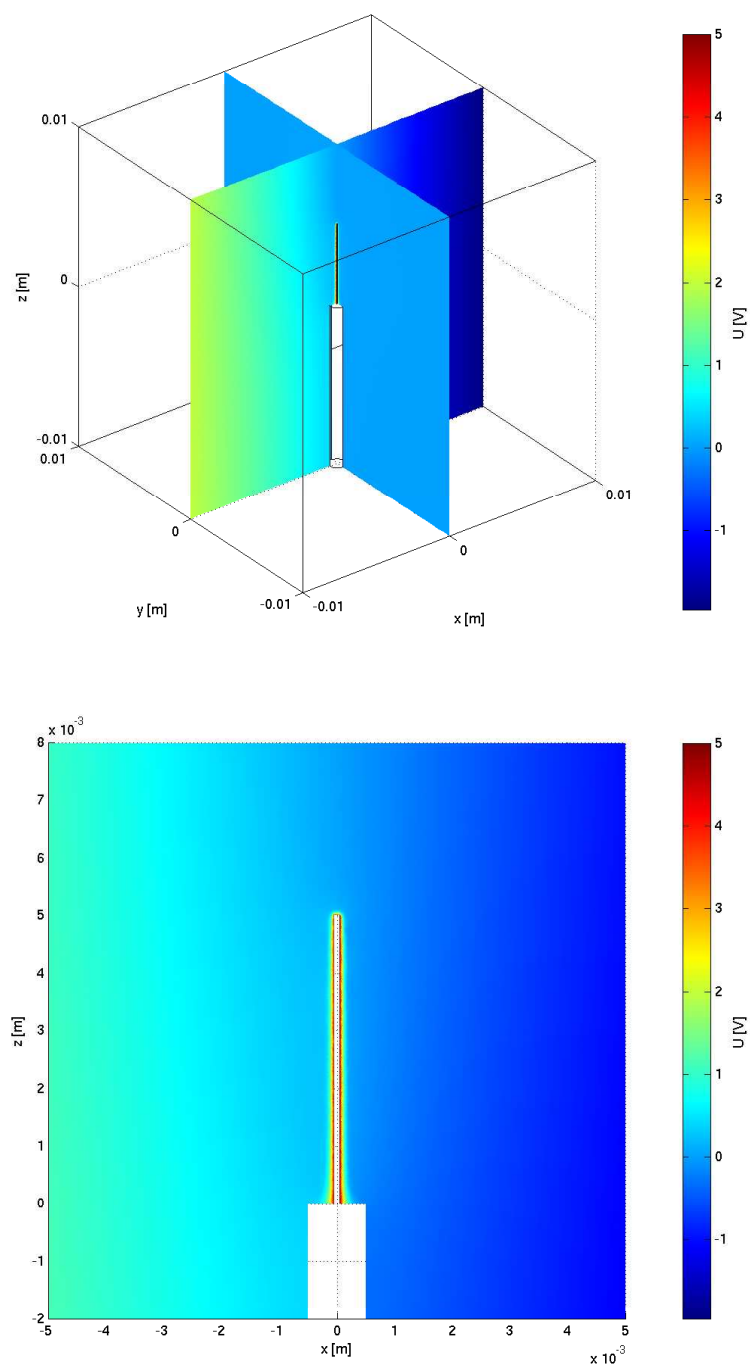


Obrázek 8.3: Koncentrace elektronů v okolí válcové sondy (řezy a detail)

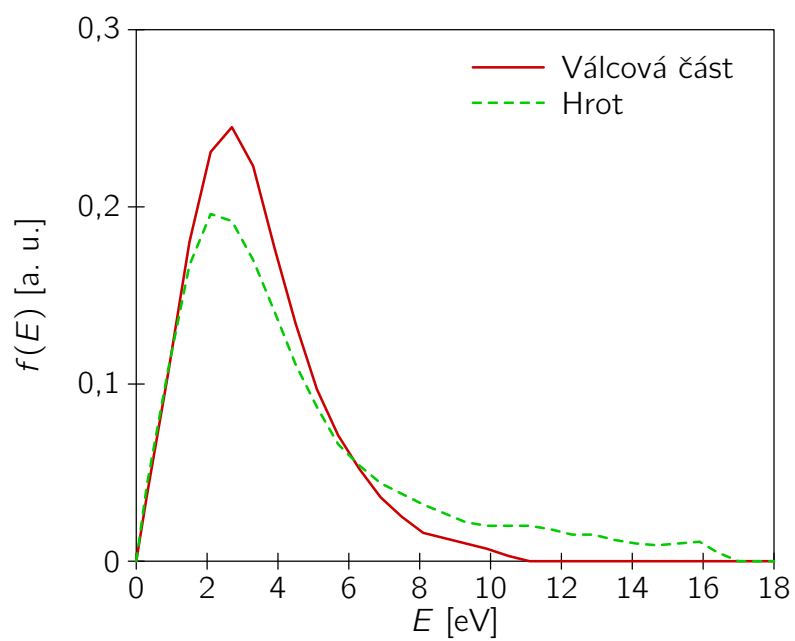




Obrázek 8.4: Koncentrace iontů v okolí válcové sondy (řezy a detail)



Obrázek 8.5: Potenciál elektrického pole v okolí válcové sondy (řezy a detail)



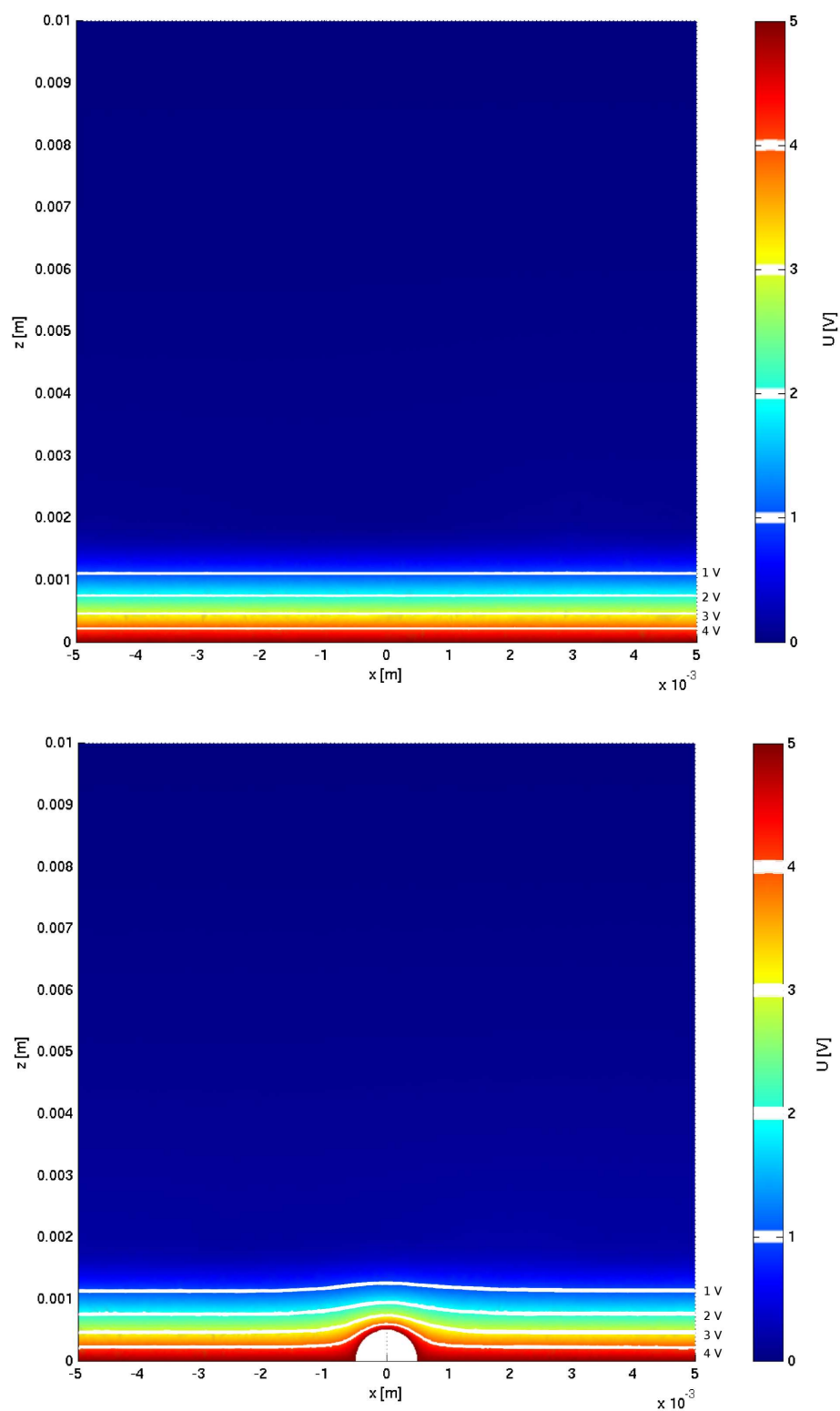
Obrázek 8.6: Rozdělovací funkce elektronů dopadajících na sondu

## 8.2 Substrát s nerovným povrchem

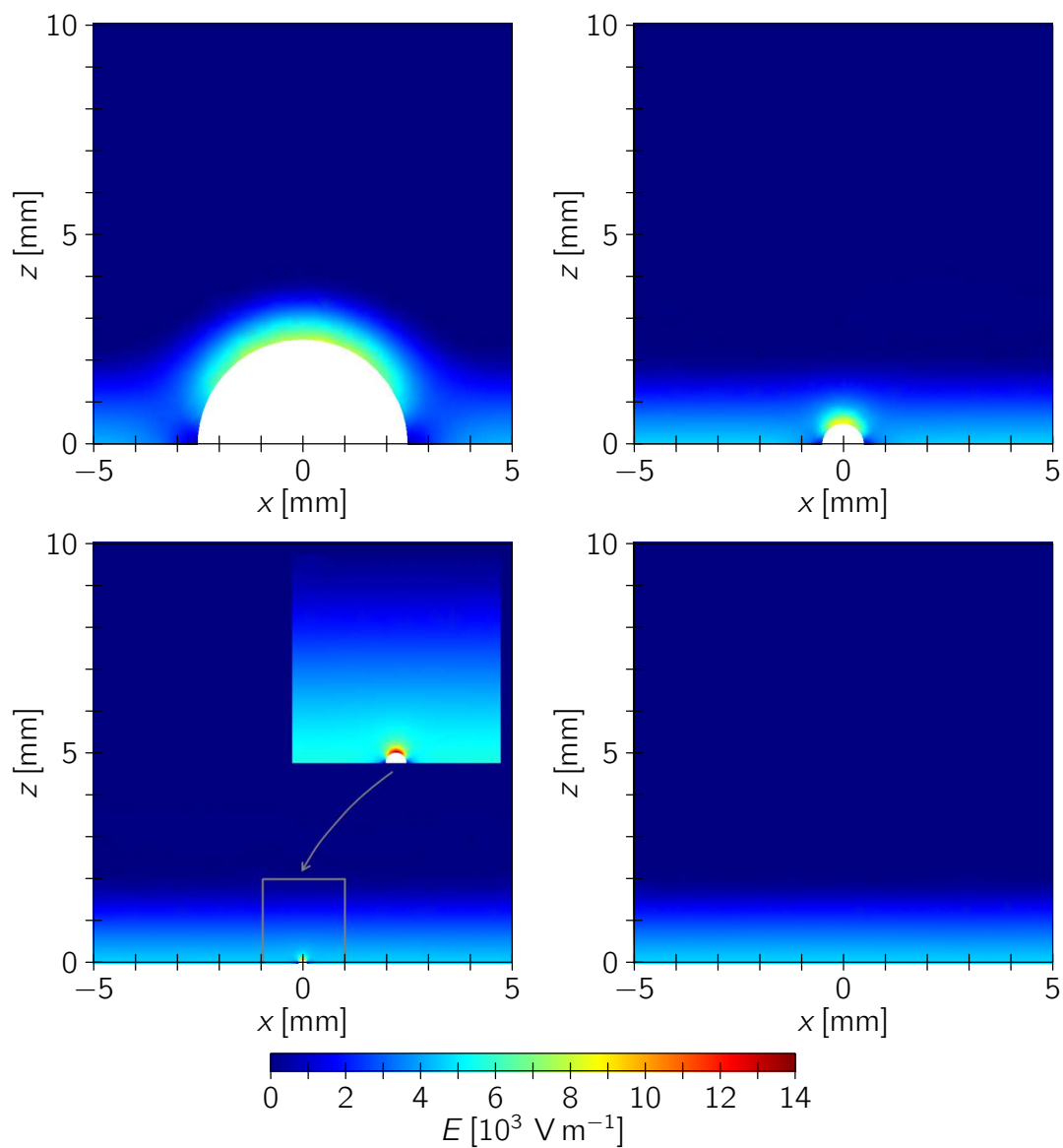
Plně třírozměrný model interakce plazmatu s pevnou látkou je vhodný pro řešení řady problémů se složitou povrchovou strukturou substrátu. V literatuře se setkáváme nejčastěji s dvourozměrnými modely, které jsou však omezeny na zjednodušené geometrické uspořádání — například [30] a [31]. Náš model takové omezení nemá.

Nejprve jsme provedli řadu výpočtů v jednodušší geometrii. Substrát je tvořen nekonečnou vodivou deskou v rovině  $z = 0$  s jednou nerovností ve tvaru polokoule. Střed podstavy polokoule je umístěn v počátku souřadnic. Pracovní oblast modelu je tvořena krychlí o straně  $L = 10$  mm, jejíž spodní stěna leží v rovině desky. Na substrát je přiveden potenciál 5 V. Koncentraci elektronů a iontů v nenarušeném argonovém plazmatu při tlaku 133 Pa uvažujeme  $n_e = n_i = 1,0 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3}$ . Srážky elektronů s neutrály argonu modelujeme podle popisu v kapitole 7.3. Výpočet jsme provedli pro tři různé poloměry polokoule: 2,5 mm, 0,5 mm, 0,1 mm a pro substrát bez nerovnosti.

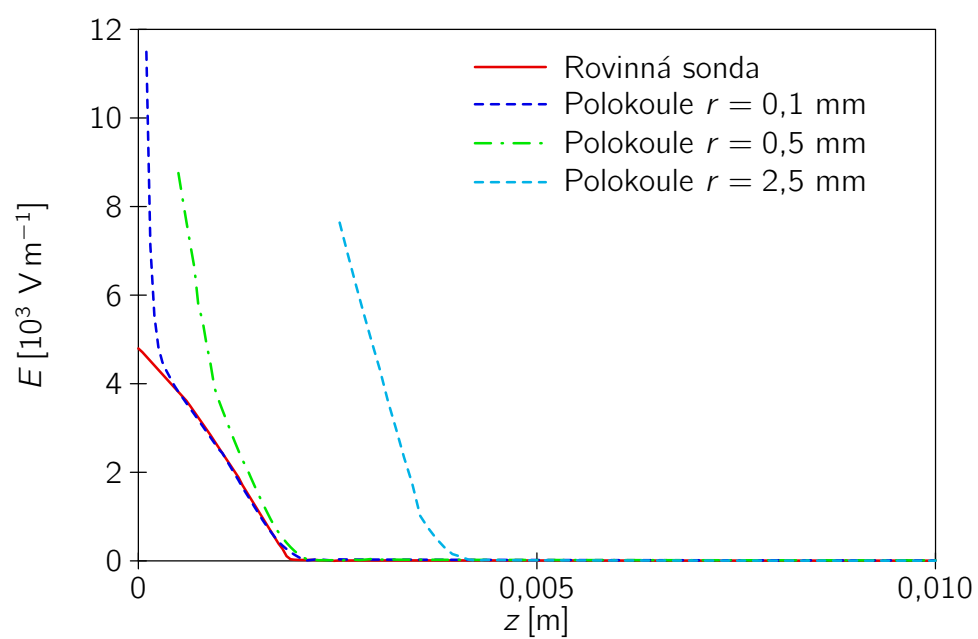
Výsledky jsou shrnuty na následujících grafech. Na obrázku 8.7 uvádíme průběh potenciálu elektrického pole v řezu rovinou  $y = 0$ . Velikost elektrického pole pro všechny konfigurace shrnují obrázky 8.8 a 8.9, na kterém uvádíme pole podél osy  $z$ . Z grafů je patrné, že nerovnosti výrazně mění elektrického pole v těsné blízkosti povrchu. Na vrcholu nerovností dochází k podstatnému zesílení pole.



Obrázek 8.7: Potenciál elektrického pole nad rovinným substrátem bez nerovnosti a s nerovností ve tvaru polokoule o poloměru  $r = 0,5$  mm



Obrázek 8.8: Elektrické pole nad rovinným substrátem s nerovností ve tvaru polokoule o poloměru 2,5 mm, 0,5 mm, 0,1 mm a bez nerovnosti



Obrázek 8.9: Rovinný substrát s nerovností ve tvaru polokoule o různém poloměru  $r$ .

V dalších výpočtech jsme studovali substrát s více nerovnostmi v pravidelném uspořádání. Vzdálené nerovnosti se vzájemně neovlivňují a lze je studovat odděleně. Přiblížíme-li nerovnosti tak, že jejich vzdálenost je srovnatelná s jejich velikostí, vykazují složitější chování.

Na následujících obrázcích prezentujeme výsledky dvou konfigurací. V obou případech jsme na substrát umístili šestnáct polokoulí o poloměru  $r = 0,5$  mm. Uspořádání je čtvercové. Konfigurace se liší vzdáleností středů podstav polokoulí. V prvním případě, který označíme jako těsné uspořádání, je tato vzdálenost  $r_1 = 1,0$  mm, v druhém případě, který nazveme volné uspořádání, pak je  $r_2 = 1,25$  mm. Na obrázku 8.10 uvádíme jako příklad vizualizaci sítě na substrátu s volným uspořádáním polokoulí.

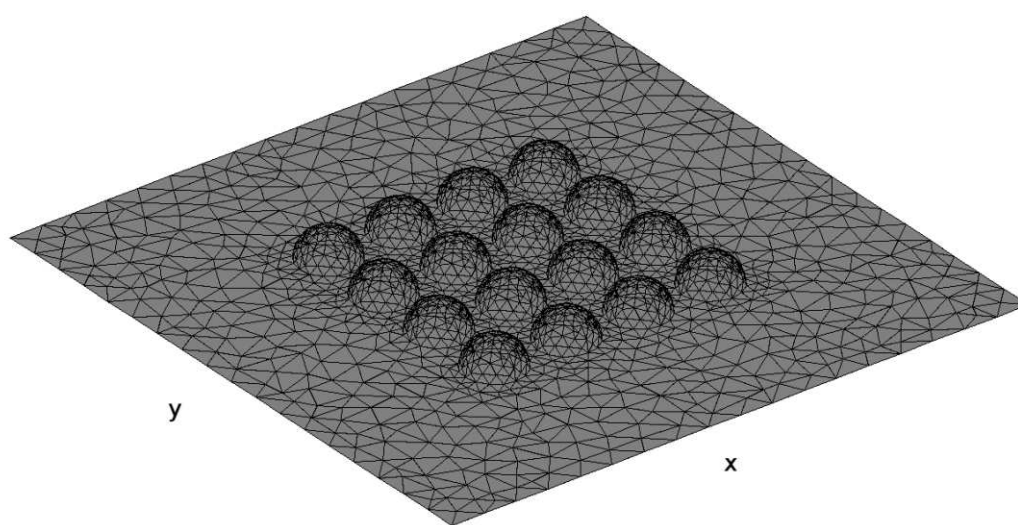
Velikost elektrického pole nad substrátem s těsným uspořádáním shrnují obrázky 8.11 a 8.12, pro volné uspořádání uvádíme odpovídající výsledky na obrázcích 8.13 a 8.14. V případě těsného uspořádání dochází k lokalizaci silného elektrického pole nad vnitřními polokoulemi a v mezerách elektrické pole výrazně klesá až k nule. Nad okrajovými polokoulemi se průběh elektrického pole blíží k výše uvedenému příkladu se samostatnou polokoulí.

Výsledky konfigurace s volným uspořádáním polokoulí ukazují, že již při relativně malém oddálení polokoulí dochází k výraznému přiblížení k případu samostatné polokoule. Rozdíly mezi vnitřní a okrajovou polokoulí se snižují, což je patrné ze srovnání křivek A (nad okrajovou polokoulí) a B (nad vnitřní polokoulí) na obrázku 8.14 s těsným uspořádáním na obrázku 8.12.

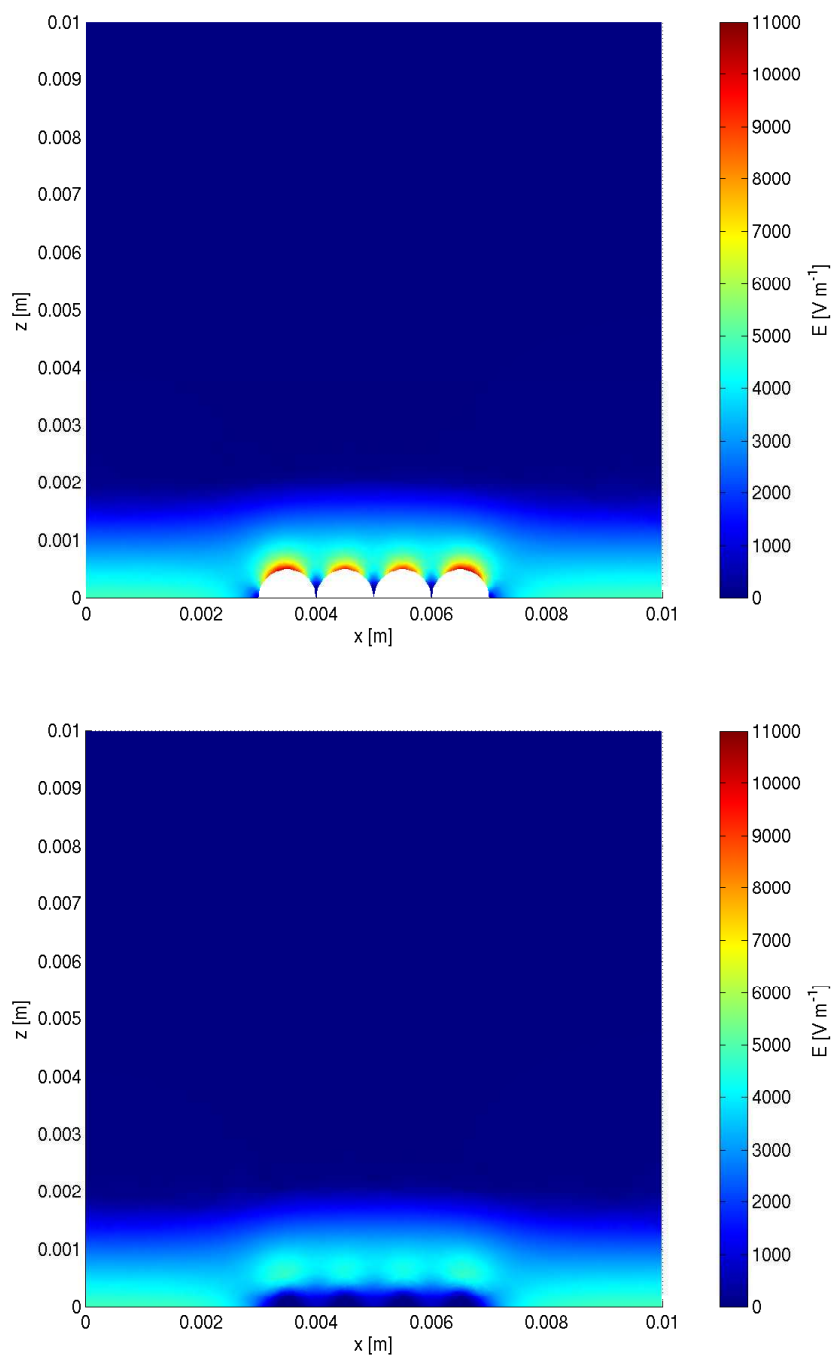
Výpočet jedné konfigurace trval obvykle několik hodin. Přesnou dobu lze těžko stanovit, protože závisela na mnoha faktorech. Jedna iterace spojitěho části trvala nejvýše několik minut, což je v celkovém čase zanedbatelné. Částicový model dokázal díky paralelizaci na osm vláken na čtyřjádrovém procesoru Intel i7 s hyperthreadingem zpracovat  $10^6$  částic za 15 minut. V rámci jedné iterace jsme požadovali  $3 \cdot 10^6$  až  $10 \cdot 10^6$  částic. Po třetí iteraci již nedocházelo k podstatným změnám výsledků. Další iterace sloužily především k získání detailnějších výsledků. Do celkové doby výpočtu je potřeba zahrnout také přípravu geometrie, konstrukci vhodné sítě metody konečných prvků a případné úpravy v kódu částicového modelu. Tyto činnosti v některých případech trvaly delší dobu než samotný výpočet.

Získané výsledky budou prezentovány na mezinárodní konferenci CIP 09 v Marseille a poslány do tisku do časopisu European Physical Journal - Applied Physics. Abstrakt je přílohou diplomové práce.

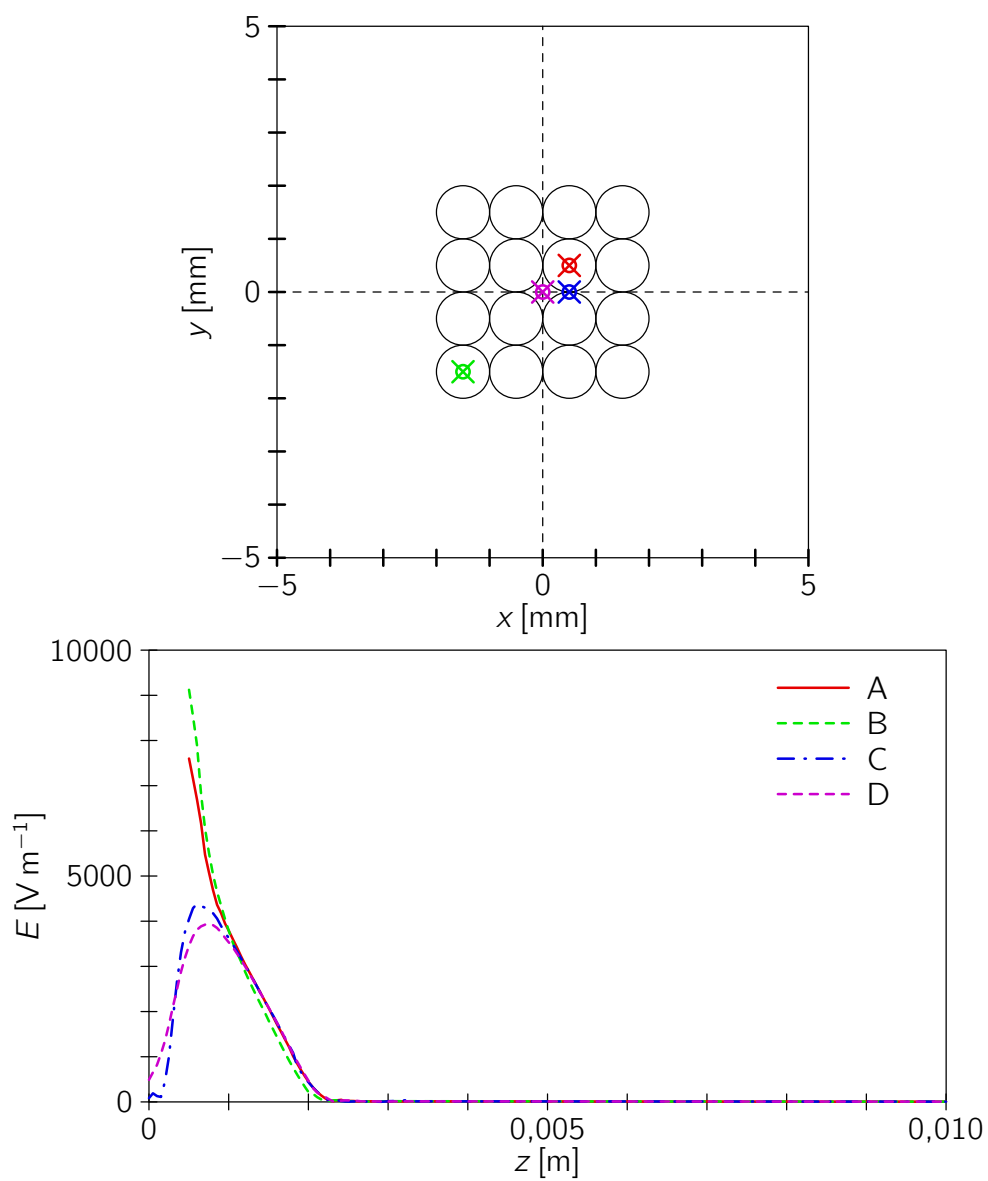




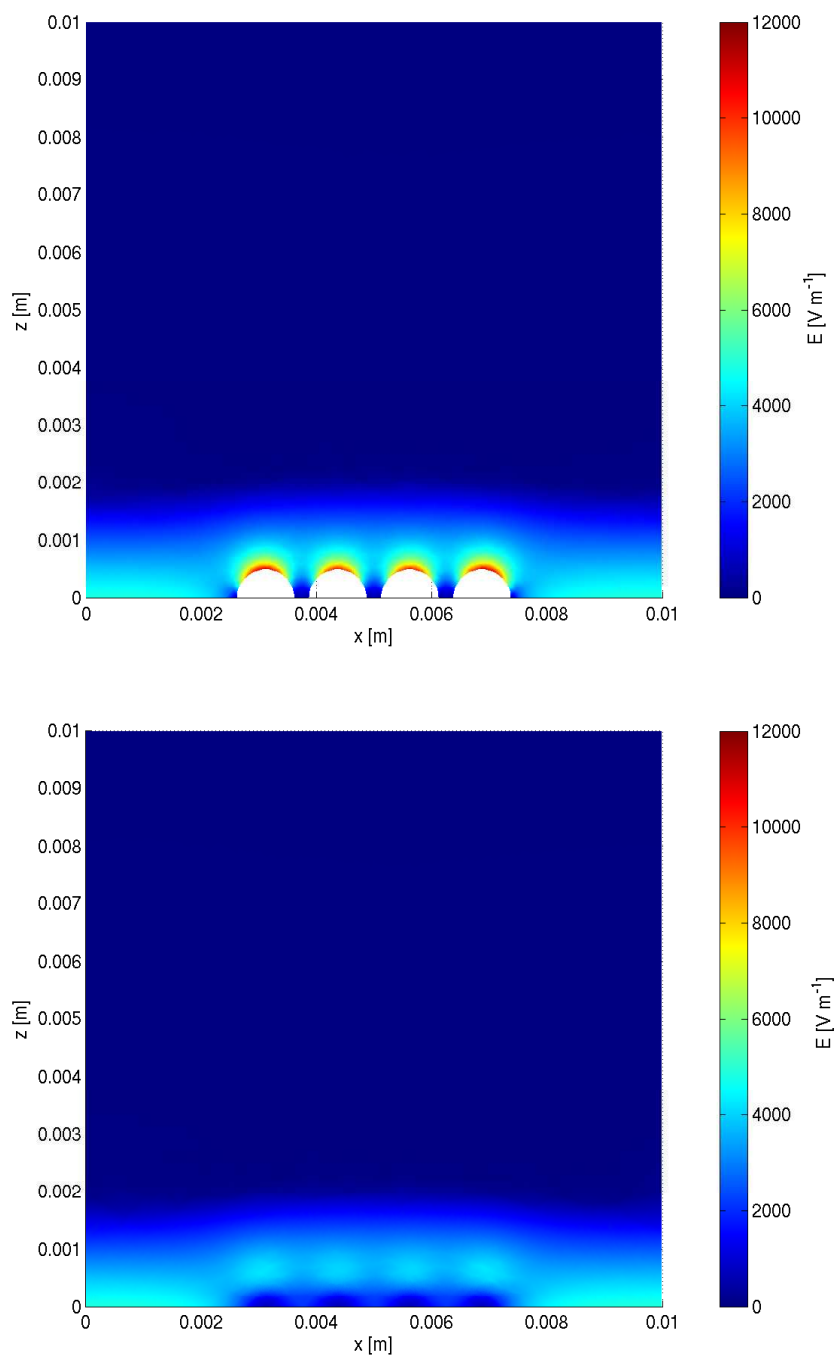
Obrázek 8.10: Vizualizace sítě metody konečných prvků na nerovném substrátu.



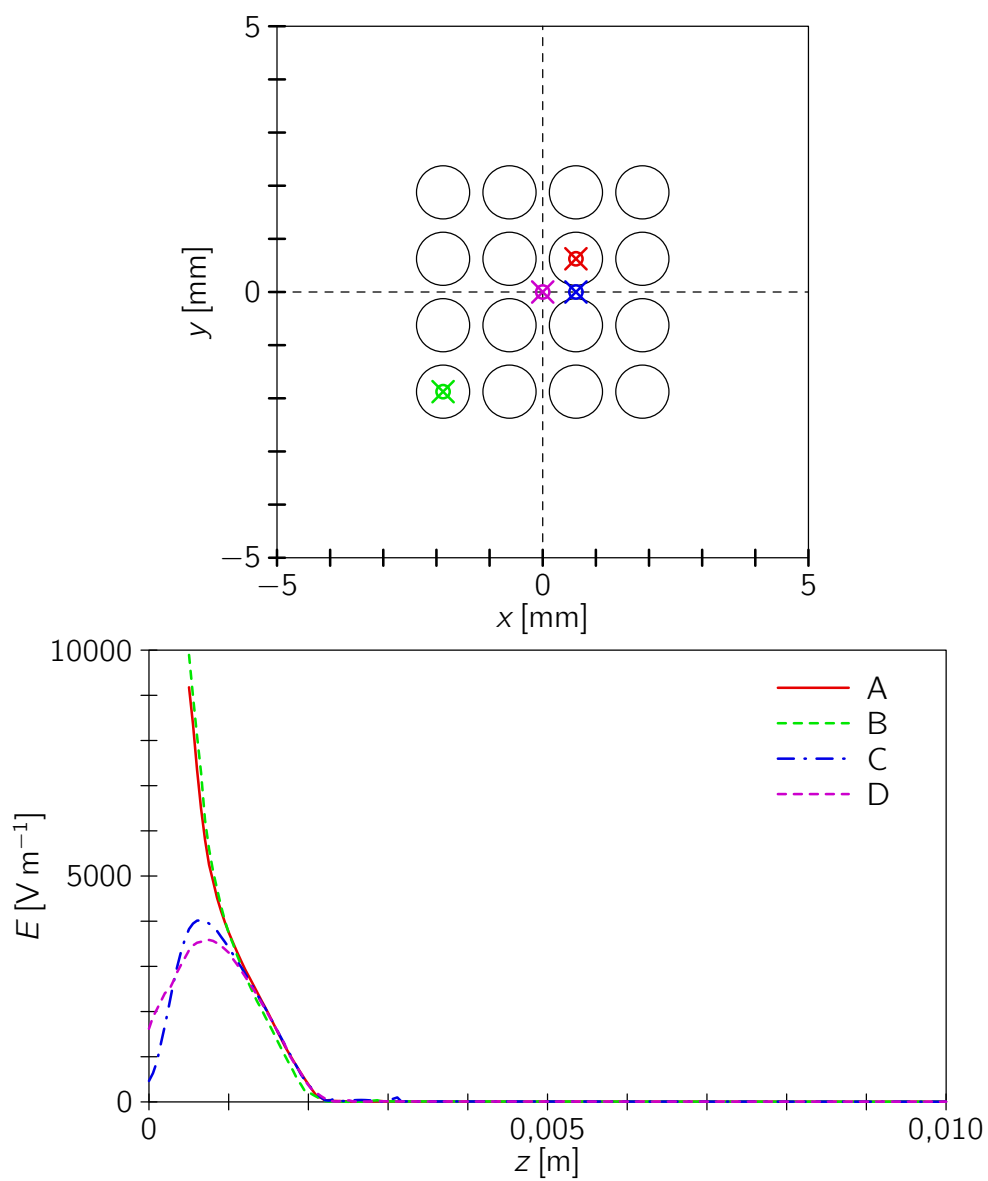
Obrázek 8.11: Velikost elektrického pole nad substrátem s nerovnostmi těsného uspořádání (nahore: pole nad nerovnostmi, dole: pole nad mezerou)



Obrázek 8.12: Průběh velikosti elektrického pole ve směru osy  $z$  nad substrátem s nerovnostmi těsného uspořádání (nahore: geometrie substrátu s vyznačenou polohou vzorků)



Obrázek 8.13: Velikost elektrického pole nad substrátem s nerovnostmi vlného uspořádání (nahore: pole nad nerovnostmi, dole: pole nad mezerou)



Obrázek 8.14: Průběh velikosti elektrického pole ve směru osy  $z$  nad substrátem s nerovnostmi volného uspořádání (nahore: geometrie substrátu s vyznačenou polohou vzorků)

# Kapitola 9

## Závěr

V této práci jsme se věnovali hybridním metodám modelování interakce plazmatu a pevné látky, které nám umožňují studovat geometricky složité konfigurace vyžadující plně třídimenzionální přístup při poměrně krátké době výpočtu.

V kapitole 6 jsme provedli srovnání různých metod hybridního modelování se základními metodami. Všemi metodami byla řešena stejná úloha — nekonečná válcová sonda v nízkoteplotním argonovém plazmatu — a byly porovnány výsledky modelu a doba výpočtu. Zjištěné doby výpočtů hybridními modely byly podle našeho očekávání výrazně kratší než výpočet částicovým modelem a delší než spojitým modelem. Provedli jsme porovnání průběhů potenciálu a koncentrací elektronů a iontů v pracovní oblasti a došli jsme k závěru, že se výsledky hybridních modelů výrazně blíží k výsledkům částicového modelu, který považujeme za referenční.

Na základě výsledků srovnání v kapitole 6 a praktických zkušeností při vývoji modelů jsme se rozhodli dále rozvíjet iterační hybridní model. Navázali jsme na práci [23] a vytvořili jsme plně třídimenzionální iterační hybridní model. Náš model ve srovnání s [23] přinesl řadu inovací. Spojitá část je řešena metodou konečných prvků v programu COMSOL Multiphysics. Koeficienty difuze a pohyblivosti vystupující ve spojitě části modelu jsou získávány z částicového selfkonzistentního modelu ve velmi husté mříži, díky které dostáváme velmi detailní výsledky především v blízkosti substrátu. Získání těchto výsledků je však podmíněno vysokým počtem částic v částicovém modelu. Toho jsme dosáhli kompletním přepracováním částicového modelu, který je nově tvořen samostatným programem v jazyce C++ s velmi efektivní paralelizací, která umožňuje plné využití dostupných počítačových prostředků.

V kapitole 7 jsme vyvinutý model prezentovali na jednoduchém dvoudimenzionálním příkladu. Podrobněji jsme se také věnovali problematice zdroje částic v částicovém modelu. Ukázali jsme, že přizpůsobení zdroje podmínkám v pracovní oblasti modelu vede k výraznému zlepšení výsledků na okraji oblasti.

Aplikace plně třídimenzionálního hybridního modelu jsme uvedli v kapitole 8. Na základě naměřených parametrů plazmatu jsme vytvořili model konečné válcové sondy s nevodivým uchycením k aparatuře v nízkoteplotním plazmatu s driftem. Výsledky výpočtu jsou prezentovány na řadě grafů. Dále jsme model použili k výpočtu stínící vrstvy v okolí rovinného substrátu s nerovnostmi ve tvaru polokoule. Studovali jsme vliv poloměru křivosti polokoulí a prostorového uspořádání především na velikost elektrického pole v blízkosti substrátu.

Vyvinutý model budeme dále rozšiřovat. Očekáváme, že model bude vhodný pro oblast vyšších tlaků. Rozvoj tímto směrem je limitovaný především částicovou částí modelu. Dále budeme rošřřovat model do oblasti multikomponentního plazmatu. Přílohou diplomové práce je publikace z této oblasti.

Výsledky diplomové práce budeme prezentovat na mezinárodních konferencích a budeme usilovat o jejich publikaci v odborných časopisech.

# Literatura

- [1] Langmuir, I.: Oscillation in ionized gases, *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.*, **14** 628, 1928.
- [2] Chen, F. F.: *Úvod do fyziky plazmatu*, Academia, Praha, 1984.
- [3] Martišovitš, V.: *Základy fyziky plazmy*, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK Bratislava, Bratislava, 2004.
- [4] Langmuir, I., Mott-Smith, H. M.: The Theory of Collectors in Gaseous Discharges, *Phys. Rev.*, **28** 727, 1926.
- [5] Swift, J. D., Schwar, M. J. R.: *Electrical Probes for Plasma Diagnostics*, Iliffe Books Ltd., London, 1970.
- [6] Hrach, R.: *Počítačová fyzika*, PF UJEP, Ústí nad Labem, 2003.
- [7] Hockney, R. W., Eastwood, J. W.: *Computer Simulation Using Particles*, Taylor and Francis, New York, 1988.
- [8] Šimek, J.: *Dizertační práce: Rozvoj metod počítačové fyziky pro fyziku plazmatu a fyziku tenkých vrstev*, MFF UK v Praze, Praha, 2006.
- [9] Birdsall, C. K., Langdon, A. B.: *Plasma physics via computer simulation*, Adam Hilger, Bristol, 1991.
- [10] Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., Flannery, B. P.: *Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing, Third Edition*, Cambridge University Press, New York, 2007.
- [11] Davis, T. A.: Algorithm 832: UMFPACK V4.3—an unsymmetric-pattern multifrontal method, *ACM Transactions on Mathematical Software*, **30** 196–199, 2004.
- [12] Bogaerts, A., Gijbels, R.: Monte Carlo model for the argon ions and fast argon atoms in a radio-frequency discharge, *IEEE Trans. Plasma Science*, **27** 1406, 1999.



- [13] Skullerud, H. R.: The stochastic computer simulation of ion motion in a gas subjected to a constant electric field, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **1** 1567, 1968.
- [14] Roučka, Š.: *Diplomová práce: Studium interakce plazma-pevná látka při středních tlacích*, MFF UK v Praze, Praha, 2008.
- [15] Trunec, D. et al.: Monte Carlo Simulations of the Electron Currents Collected by Electrostatic Probes, *Contrib. Plasma Phys.*, **44** 577–581, 2004.
- [16] Huxley, L. G. H., Crompton, R. W.: *The Diffusion and Drift of Electrons in Gases*, v ruském jazyce, Mir, Moskva, 1977.
- [17] Robertson, S., Sternovsky, Z.: Monte Carlo model of ion mobility and diffusion for low and high electric fields, *Phys. Rev. E*, **67** 046405, 2003.
- [18] Fletcher, C. A. J.: *Computational Techniques for Fluid Dynamics, Volume 1, Second Edition*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1991.
- [19] Jelínek, P.: *Dizertační práce: Pokročilé techniky počítačového modelování ve fyzice plazmatu*, MFF UK v Praze, Praha, 2007.
- [20] Passchier, J. D. P., Goedheer, W. J.: A two-dimensional fluid model for an argon rf discharge, *J. Appl. Phys.*, **74** 3744, 1993.
- [21] Wendt, J. F.: *Computational Fluid Dynamics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1992.
- [22] Kim, H. C. et al.: Particle and fluid simulations of low-temperature plasma discharges: benchmarks and kinetic effects, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **38** R283–R301, 2005.
- [23] Bartoš, P.: *Dizertační práce: Hybridní modelování ve fyzice plazmatu*, MFF UK v Praze, Praha, 2007.
- [24] Bogaerts, A., Gijbels, R., Goedheer, W.: Hybrid Modeling of a Capacitively Coupled Radio Frequency Glow Discharge in Argon: Combined Monte Carlo and Fluid Model, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **38** 4404–4415, 1999.
- [25] Bogaerts, A., Gijbels, R.: Effect of small amounts of hydrogen added to argon glow discharges: Hybrid Monte Carlo-fluid model, *Phys. Rev. E*, **65** 056402, 2002.
- [26] *Boost C++ Libraries* [online], poslední revize 23. 4. 2008 [cit. 7. 11. 2008]. Dostupné z: <<http://www.boost.org/>>.

- [27] Kroesen, G. M. W. et al.: The Energy Balance of a Plasma in Partial Local Thermodynamic Equilibrium, *IEEE Trans. Plasma Science*, **18** 985, 1990.
- [28] Matsumoto, M., Nishimura, T.: Mersenne Twister: A 623-Dimensionally Equi-distributed Uniform Pseudo-Random Number Generator, *ACM Trans. on Modeling and Computer Simulation*, **8** 3–30, 1998.
- [29] *The Marsaglia Random Number CDROM including the Diehard Battery of Tests of Randomness* [online], poslední revize v r. 1995 [cit. 27. 3. 2009]. Dostupné z: <<http://www.stat.fsu.edu/pub/diehard/>>.
- [30] Demokan, O., Filiz, Y.: Ion-matrix sheaths related to planar targets with semicylindrical grooves, *J. Appl. Phys.*, **93** 83, 2003.
- [31] Miyagawa, Y. et al.: Plasma analysis for the plasma immersion ion implan-tation processing by a PIC-MCC simulation, *Comp. Phys. Comm.*, **177** 84–87, 2007.

# Přílohy

K diplomové práci přikládáme výsledky naší publikační činnosti:

- Hrubý, V., Hrach, R., Šimek, J.: Computational study of plasma composition influence on sheath formation  
*Proc. JVC-12/EVC-10 Balatonalmádi, Maďarsko, 22. až 26. 9. 2008*  
*Vacuum (v tisku)*
- Hrach, R., Hrubý, V.: Computational analysis of plasma interaction with uneven substrates  
*Proc. CIP 2009 Marseille, Francie, 22. až 26. 6. 2009*