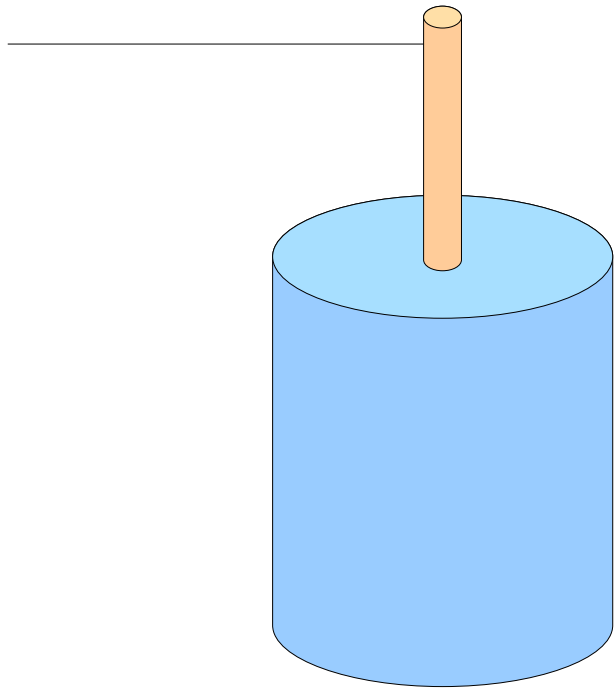


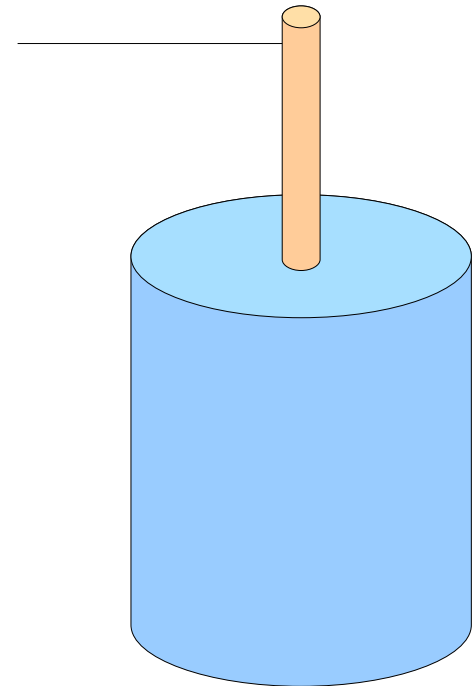
Počítačový model plazmatu



Vojtěch Hrubý
listopad 2007

Situace

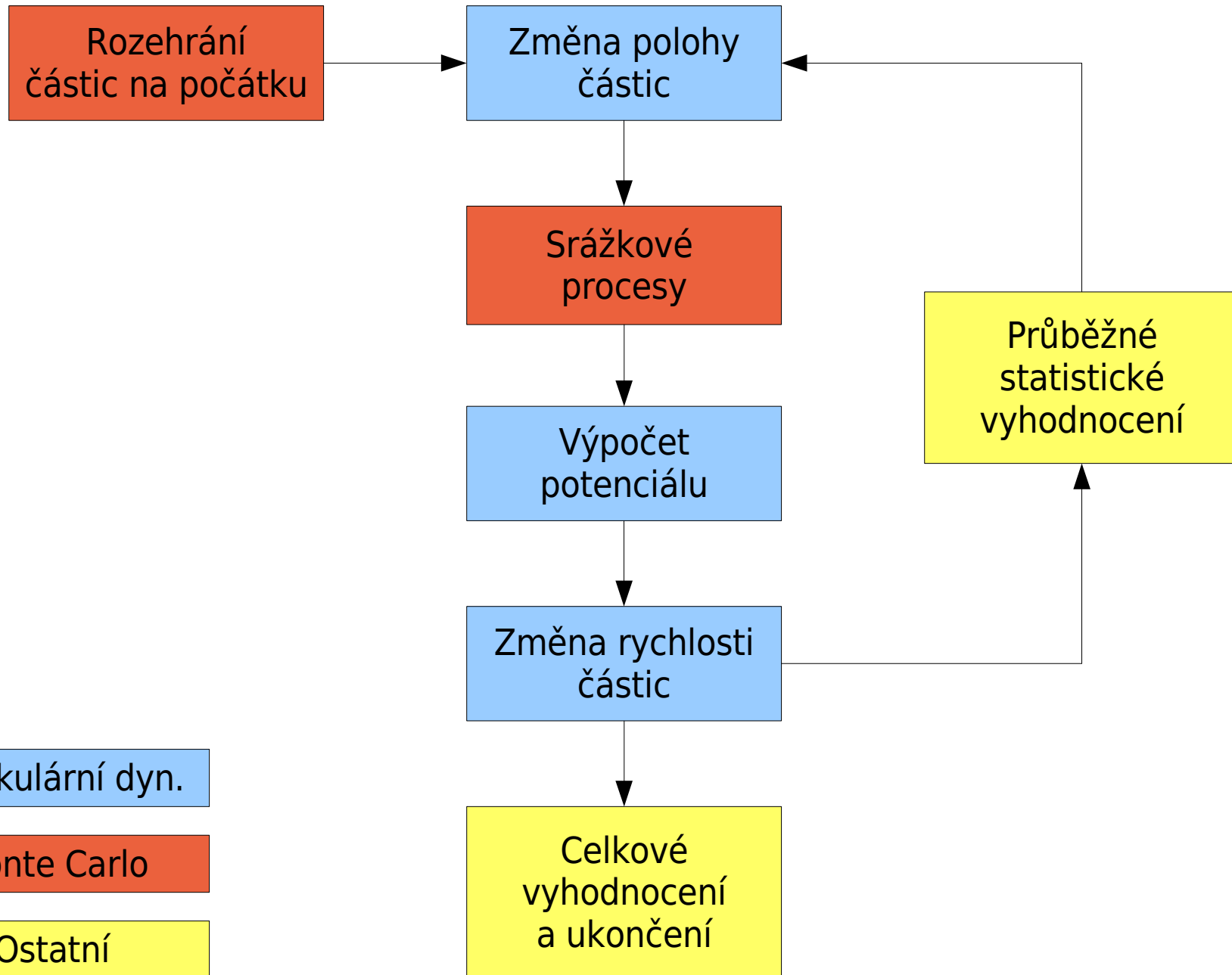
- Zajímá nás, co se děje v okolí kovové sondy ponořené do plazmatu.
- Na válcovou sondu přivedeme napětí U
- Očekáváme, že se okolo sondy vytvoří prostorový náboj, který ji odstíní.
- Proč na počítači?
 - Langmuirova teorie – bez srážek
 - Rozšíření o srážky je složité
 - počítačový model to umožňuje za „rozumnou cenu“



Parametry modelu

- Nízkoteplotní elektropozitivní argonové plazma při tlaku 133 Pa
- Koncentrace nabitých částic: $1 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3}$
- Dimenze:
 - 2D prostorově
 - 3D rychlostně
- Pracovní oblast: Kruh s průměrem 1 cm
- Válcová kovová sonda na potenciálu 10 V uprostřed prac. obl.
- Metoda: Částicový model s kombinací molekulární dynamiky a metody Monte Carlo

Blokové schéma modelu



Rozehrání počátečního stavu částic

- Modelujeme pouze pohyb nabitých částic. Neutrální pozadí je simulováno srážkovými procesy.
- Všechna data o částicích jsou uložena v jednorozměrných polích, každá částice má svůj index. Pole mají větší délku, než je počet částic na počátku, aby mohla pojmout případné větší množství částic při fluktuacích.
- Polohu rozehráváme s rovnoměrným rozdělením
- Rychlosti rozehráváme s Maxwellovým rozdělením (nicméně model lze snadno upravit i pro jiná rozdělení)

Molekulární dynamika

- Pohyb nabitých částic je modelován metodou molekulární dynamiky (tedy deterministicky v rámci chyby metody).
- Používáme algoritmus 2. řádu (Verlet), protože síly nezávisí na rychlostech.
- Potenciál elektrického pole získáme řešením Laplaceovy rovnice

$$\Delta \varphi(x, y) = -\frac{\rho(x, y)}{\epsilon_0}$$

- S dimenzí výrazně roste náročnost řešení Lap. rovnice
 - 1D Thomasova metoda
 - 2D superrelaxační metoda (náš případ)
 - 3D metoda konečných prvků (COMSOL)

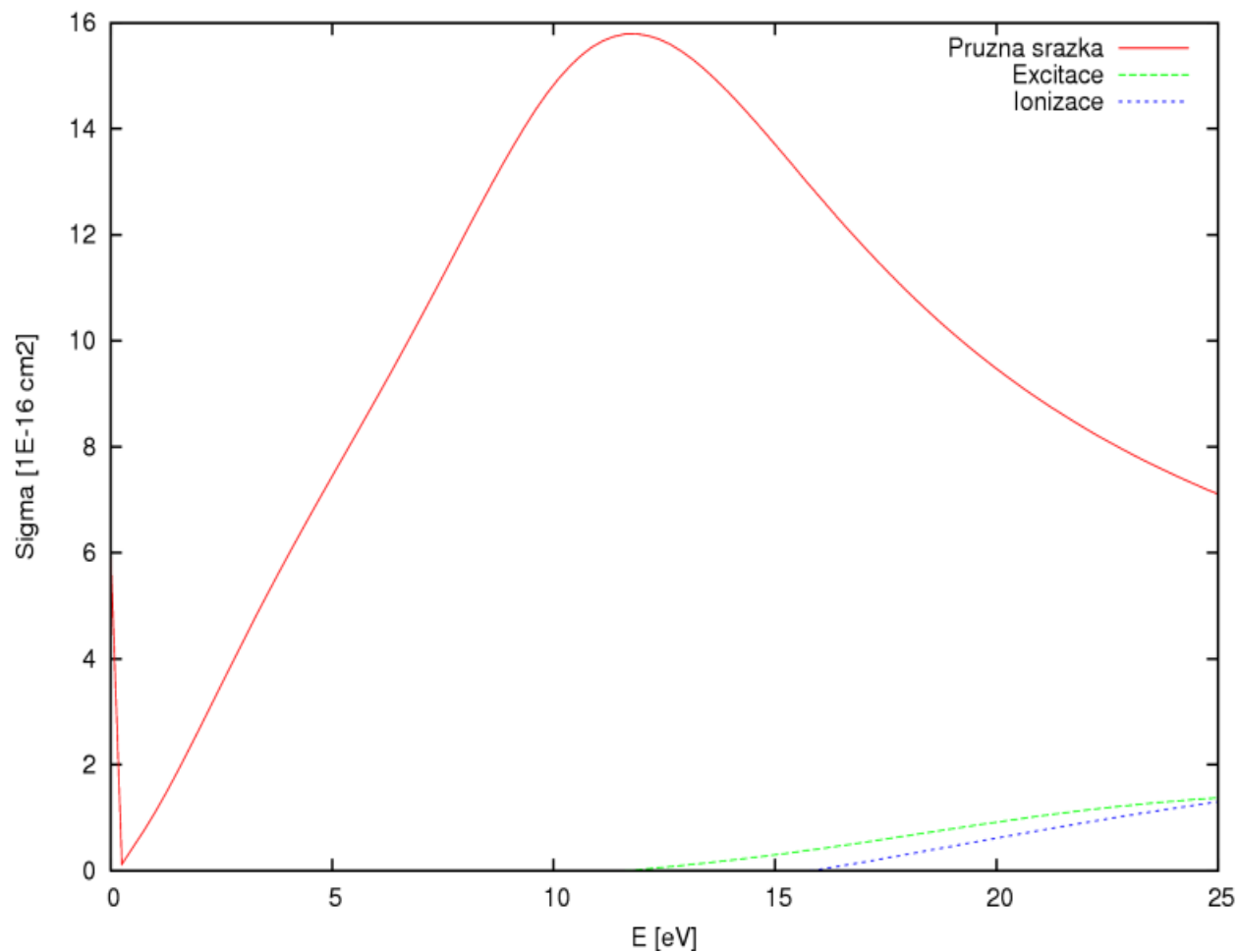
Slabiny molekulární dynamiky

- Potřebujeme časový krok $\Delta t = 1 \cdot 10^{-12}$ s kvůli rychlému pohybu elektronů. S tímto krokem by však výpočet trval neúměrně dlouho kvůli pomalému pohybu iontů. Pro ionty proto používáme větší krok $\Delta t = 1 \cdot 10^{-9}$ s. V každé iteraci však pohneme **současně** elektrony i ionty s **různými** kroky.
 - Mají výsledky smysl? Časový průběh ne, ustálený stav ano.
- Nefyzikální ohřev
 - díky přítomnosti vnějších polí a proměnnému počtu částic nelze posoudit.

Modelování srážek metodou Monte Carlo

- Srážky nabitých částic s neutrálními jsou náhodné, jejich pravděpodobnost je určena účinnými průřezy závislými na energii.
- Srážky elektron – neutrální:
 - pružná srážka
 - excitace
 - ionizace
- Srážky iont – neutrální:
 - charge transfer
 - pružný rozptyl

Účinné průřezy srážek elektron - neutrál



Data: Bogaerts, A., Gijbels, R., IEEE Trans. Plasma Science, 27 (1999) 1406.

Realizace programu

- Jazyk C:
 - nízká reže
 - velmi dobrá přenositelnost
 - široká podpora na v různých OS a na různém HW
 - v možnost komunikace s balíky MATLAB a COMSOL
- Modularizace:
 - možnost využít některé celky ve více modelech
- Nevýhody:
 - nepřehlednost datových struktur

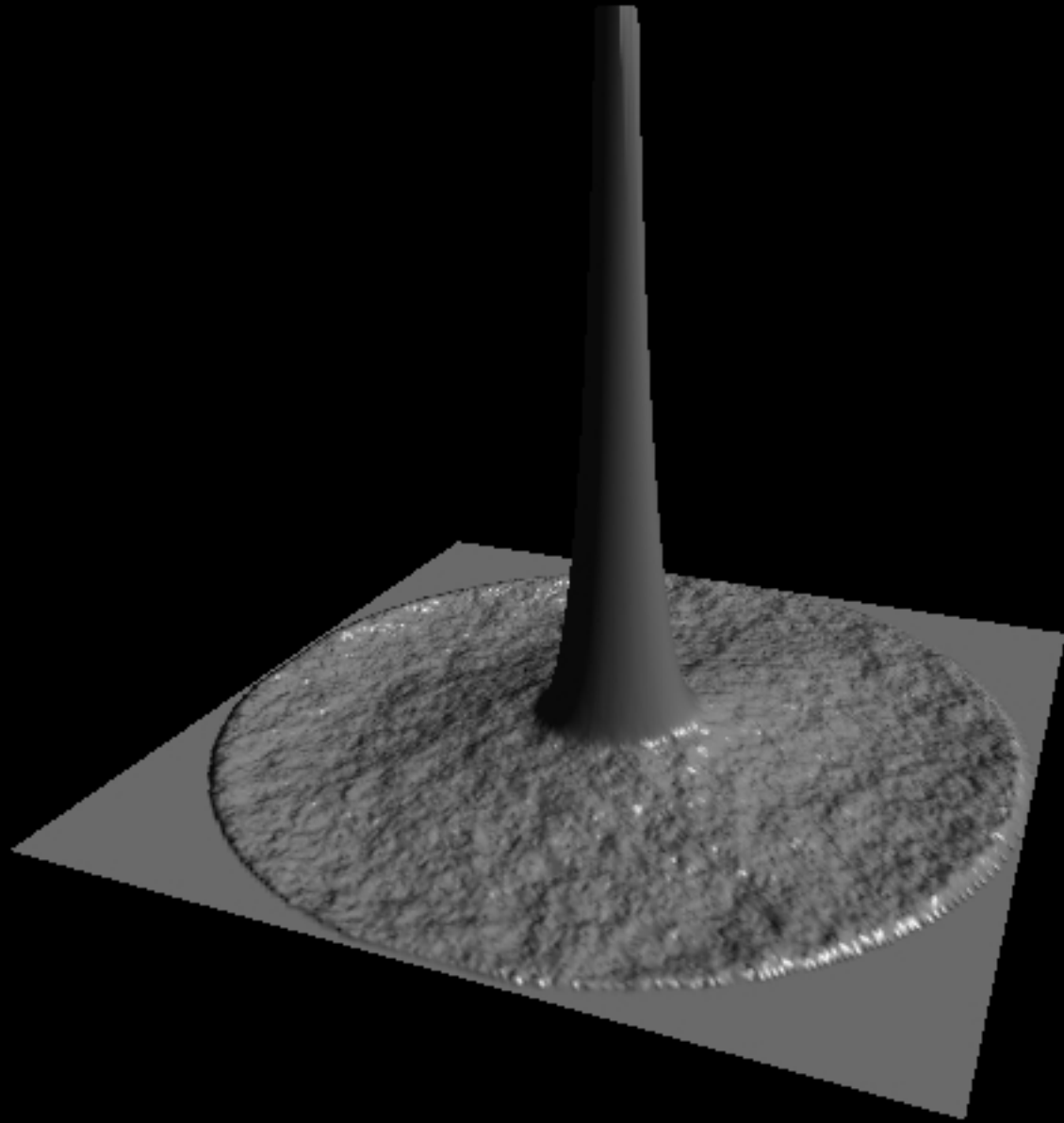
Optimalizace

- V nejdůležitější oblasti (blízko sondy) je nejmenší množství částic na mezikruží, tj. výsledky znehodnoceny šumem.
- Řešení:
 - Statistické váhy částic, tj. částice v blízkosti sondy nechť mají menší statistickou váhu, ale úměrně se musí zvýšit jejich koncentrace.
 - Horší vyhodnocování výsledků (nutno zvážit, které jevy jsou statistickými vahami ovlivněny).

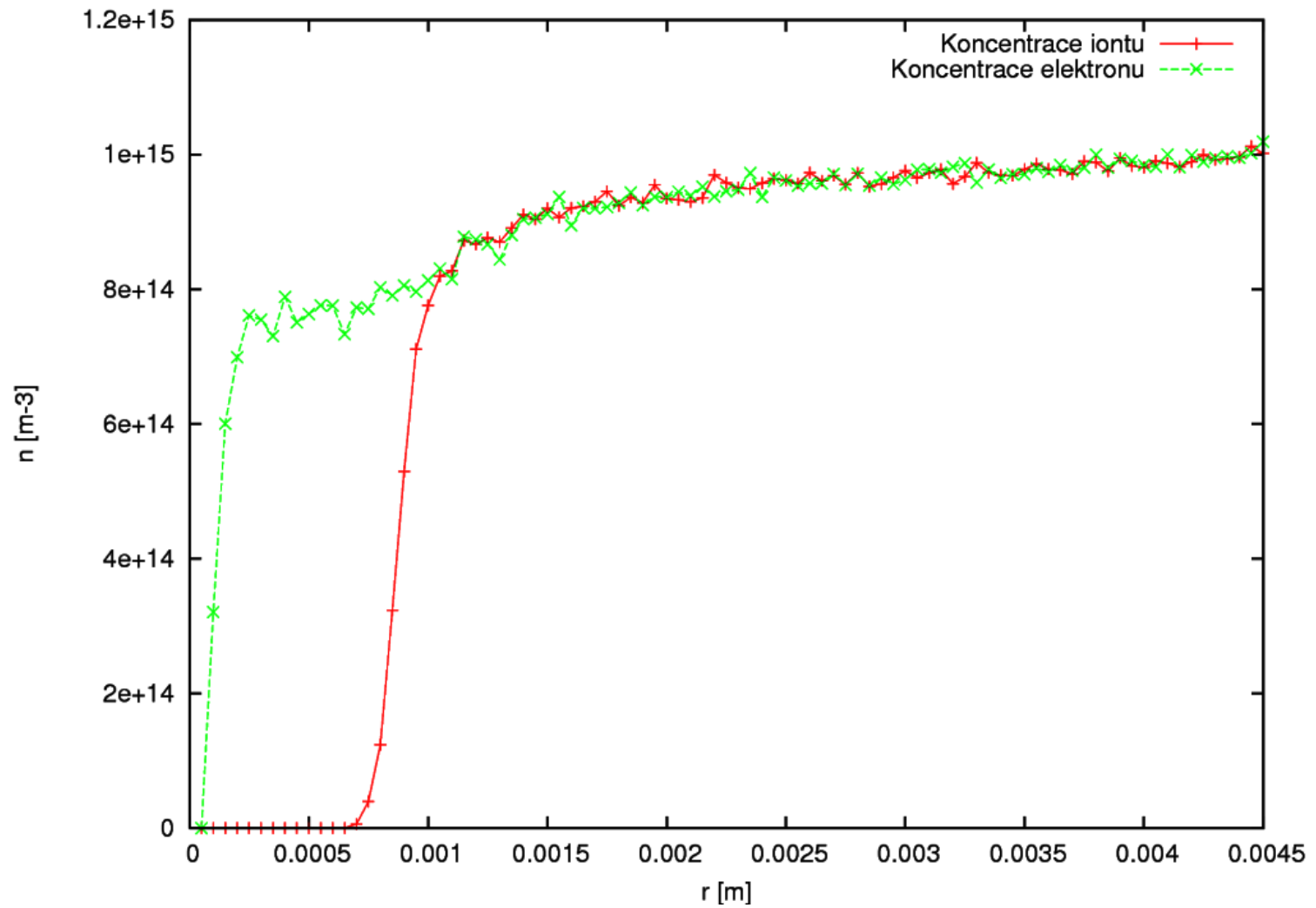
Výsledky výpočtu

Na následujících stranách jsou výsledky modelu

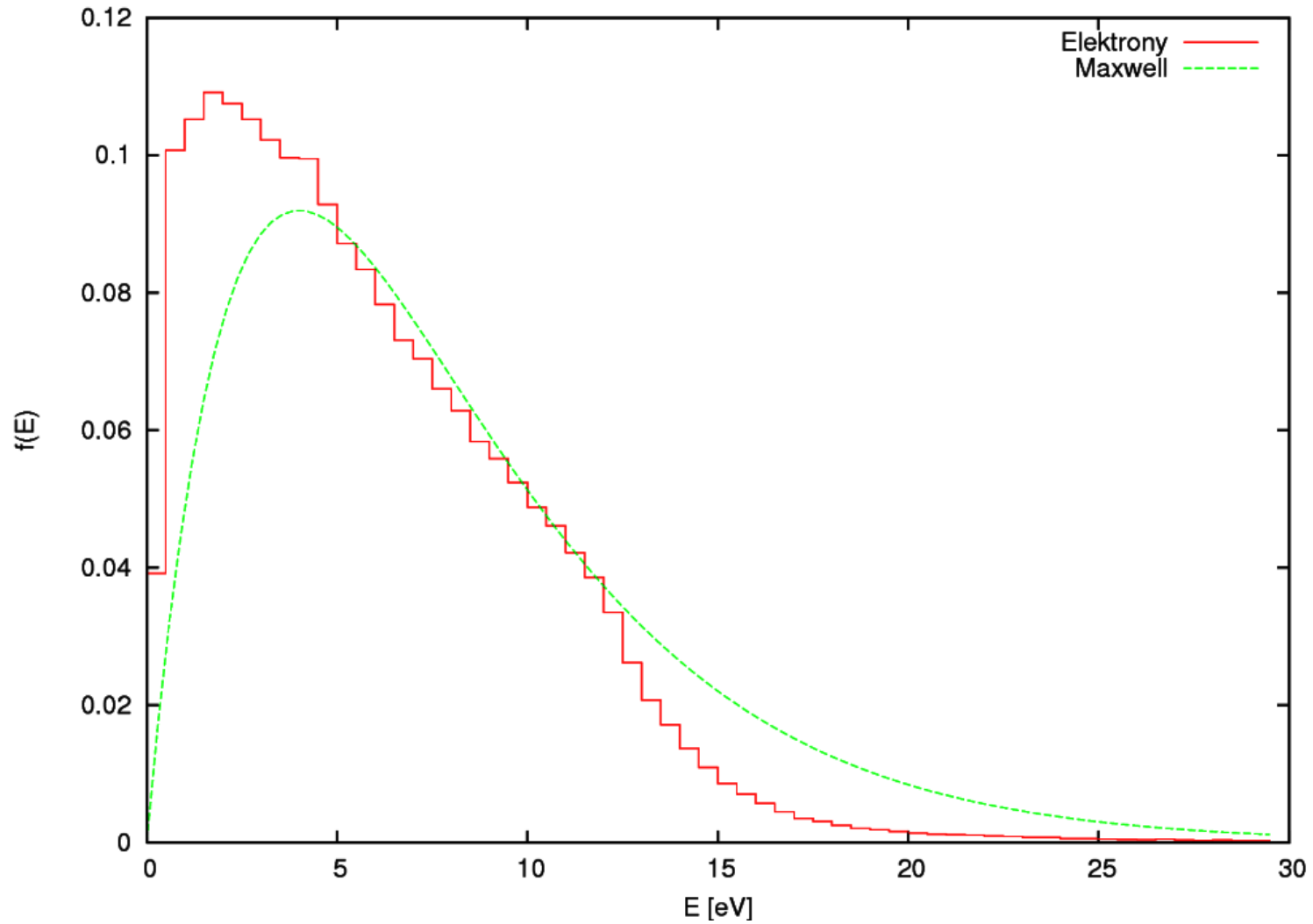
- Průběh potenciálu v závislosti na poloze v ustáleném stavu
- Úhlové rozdělení elektronů dopadajících na sondu
- Energetické rozdělení elektronů dopadajících na sondu
- Energetické rozdělení elektronů v plazmatu



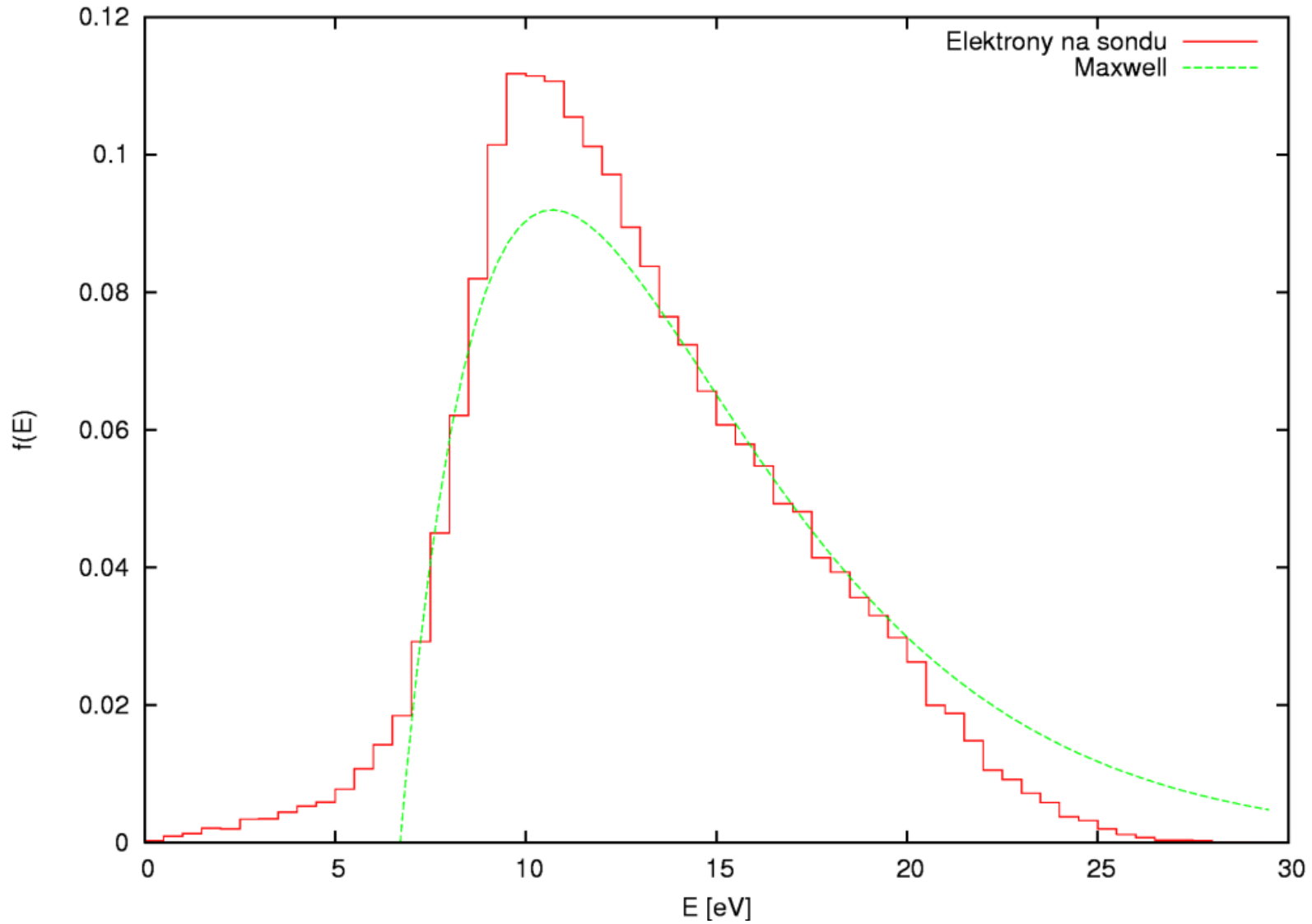
Koncentrace částic v závislosti na vzdálenosti od sondy



Rozdělení energie elektronů v nenarušeném plazmatu



Rozdělení energie elektronů dopadajících na sondu



Úhlové rozdělení elektronů dopadajících na sondu

