

Modelování plazmatu

Přednášky k předmětu KFY/MPPL

Tomáš Kozák

Katedra fyziky, Západočeská univerzita v Plzni, 2020



EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání



ESF projekt Západočeské univerzity v Plzni
reg. č. CZ.02.2.69/0.0/0.0/16_015/0002287

Obsah

- 1 Úvod do modelování plazmatu
- 2 Řešení Boltzmannovy rovnice pro elektrony
- 3 Globální (prostorově-průměrované) modely
- 4 Částicové Monte Carlo simulace
- 5 Particle in Cell/Monte Carlo simulace

1 Úvod do modelování plazmatu

① Plazma – vlastnosti a parametry

② Fyzikální popis plazmatu

Dynamika plazmatu

Elektromagnetické pole

Interakce částic

Zdroje reakčních dat

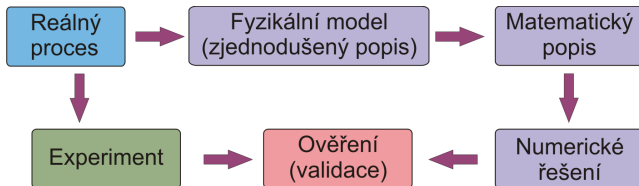
③ Úlohy

Modelování plazmatu

Řešení komplexní úlohy z fyziky plazmatu. Chceme výpočtem stanovit **parametry zkoumaného plazmatu** (výboje), např. hustotu, teplotu, koncentraci určitých částic, a jeho interakci s okolím, např. tok iontů na substrát, depoziční rychlost apod.

Realita je složitá \Rightarrow musíme použít správný **fyzikální model** – rozumně zjednodušený popis fyzikální reality. Aplikací známé teorie dostaneme matematický popis problému v podobě diferenciálních rovnic, které numericky řešíme s pomocí počítače.

Důležitou součástí modelování je zhodnocení věrohodnosti získaných výsledků. Nejlépe porovnáním s experimentem. **Musíme znát slabiny modelu.**



Plazma – definice

Plazma je ionizovaný plyn skládající se z neutrálních částic (atomů nebo molekul) a **volných iontů a elektronů**. Volné elektrony a ionty vznikají **ionizací**. K tomu je potřeba relativně velké množství energie.

Ionizační energie částic (eV)

| Vzácné plyny | | Plyny | | Kovy | |
|--------------|------|----------------|------|------|-----|
| He | 24.6 | H | 13.6 | Ti | 6.8 |
| Ne | 21.6 | O ₂ | 12.1 | Fe | 7.9 |
| Ar | 15.8 | N ₂ | 15.6 | Cu | 7.7 |
| Kr | 14.0 | | | Zn | 9.4 |

$$1 \text{ eV} = e/k_B (\text{K}) = 11605 \text{ K}$$

$$293 \text{ K} = 0.025 \text{ eV}$$

Plazma – parametry

Základní fyzikální veličiny (pro každý druh částic)

- koncentrace (hustota) částic n (m^{-3}) nebo tlak p (Pa)
- teplota částic T (K)

$$p = nkT$$

Bezrozměrné charakteristiky

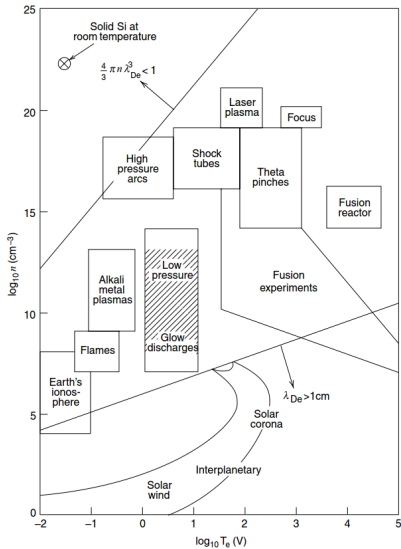
- podíl teploty iontů a elektronů T_i/T_e
- stupeň ionizace n_e/n_n

Plazma – parametry

Plazma se vyskytuje v různých formách a jeho parametry se liší v rozmezí několika řádů.

Debyeova délka – škála stínění náboje

$$(1-1) \quad \lambda_D = \left(\frac{\epsilon_0 k_B T_e}{e^2 n_e} \right)^{1/2} = \frac{v_{th}}{\omega_{pe}}$$



Plazma – vlastnosti

V důsledku elektromagnetické interakce nabitých částic (dlouhý dosah) vykazuje plazma tzv. **kolektivní chování** – stínění náboje, elektromagnetické vlny.

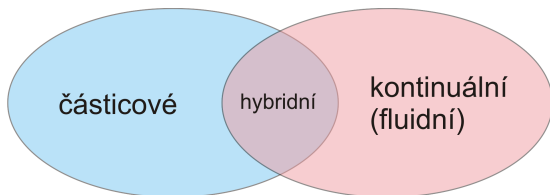
Kvazineutralita

Pro $l \gg \lambda_D$ platí $n_i \approx n_e$. Kvazineutralita je narušena blízko předmětu vloženého do plazmatu (stěna, elektroda) – vzniká přielektrodová oblast o tloušťce $s \approx \lambda_D$ nebo dochází k ovlivnění vnějším potenciálem $\Phi \gg T_e$.

Plazma – stupeň ionizace

- V plazmatu s **nízkým stupněm ionizace** (*weakly ionized*), $n_e/n \lesssim 10^{-3}$, dominují interakce nabitých částic s neutrálními (krátký dosah). Vliv **Coulombovské interakce** mezi nabitými částicemi lze **zanedbat**.
- V plazmatu s **vysokým stupněm ionizace** (*strongly ionized*), $n_e/n \gtrsim 10^{-3}$, je **potřeba vzít v úvahu Coulombovské srážky** mezi nabitými částicemi.

Přístupy k modelování plazmatu



Částicové modely

- jednotlivé částice simulovány jako “kuličky” s vzájemnou interakcí
- 1 (Test particle) Monte Carlo
 - 2 Direct Simulation Monte Carlo
 - 3 Particle-In-Cell

Kontinuální modely

- řešení rovnic proudění tekutin
- 1 Vícesložková tekutina – každý typ částic je lokálně v termodynamické rovnováze ($\lambda \ll L$), obvykle máme $T_e \gg T_i \gtrsim T$
 - 2 Magnetohydrodynamika – jednosložková (nabitá) tekutina ($T_e = T_i = T$)

Software pro počítačové simulace

Jednotlivé přístupy jsou velmi odlišné – **neexistuje jeden typ softwaru pro simulaci libovolného plazmatu.**

Nejvíce rozvinutý je **kontinuální přístup** (zobecnění simulace proudění tekutin, metoda konečných prvků na výpočetní síti) – komerční balíky Comsol a CFD-ACE, univerzitní-komerční Plasimo, HPEM. Často kombinovány s Monte Carlo moduly (hybridní simulace).

Globální (prostorově-průměrované) kontinuální modely zaměřené na reakční kinetiku v objemu plazmatu – GlobalKin, ZDPlasKin.

Programy využívající částicovou **Particle-in-cell metodu** – komerční VSim, dostupný XOOPIC.

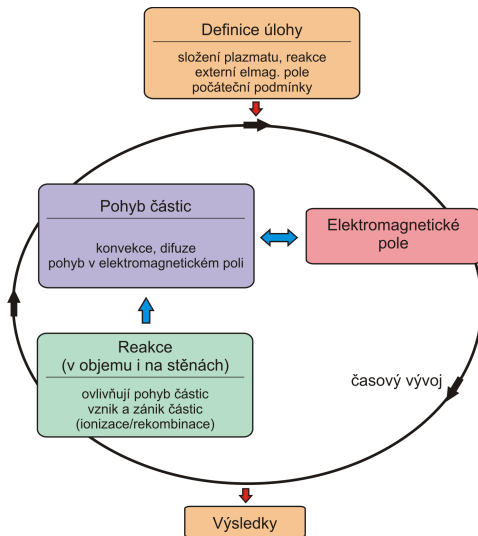
Menší (univerzitní) software **zaměřený na specifické úlohy** (nejsou self-konzistentní) – RSD (reaktivní naprašování), SIMTRA (transport rozprášených atomů, Monte Carlo), BOLSIG (Boltzmannova rovnice pro elektrony).

Fyzikální popis plazmatu

Znáte nějaké rovnice, které popisují chování plazmatu?

Fyzikální popis plazmatu

Co vše musíme vzít v úvahu při řešení problému z oblasti fyziky plazmatu?



Složení plazmatu

Obecně: neutrální částice, ionty, elektrony

Příklad: argonové plazma

- **Minimum:** Ar, Ar⁺, e⁻
- **Detailněji:** Ar, Ar(4s), Ar(4p), Ar(4d), Ar⁺, Ar₂^{*}, Ar₂⁺, e⁻
- **Maximum:** desítky hladin Ar (viz srážkově radiační model¹)

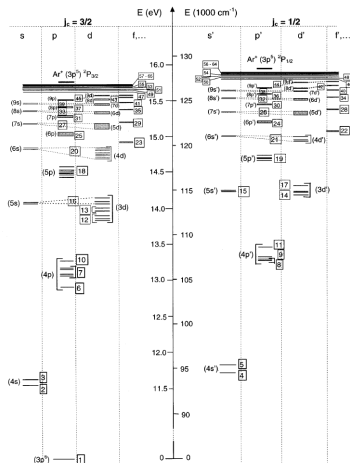


FIG. 1. Energy level scheme of the argon atom, illustrating all the effective levels incorporated in the model.

¹Annemie Bogaerts, Renaat Gijbels a Jaroslav Vlcek. "Collisional-radiative model for an argon glow discharge". In: *J. Appl. Phys.* 84.1 (1998), s. 121. ISSN: 00218979. DOI: 10.1063/1.368009. URL: <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jap/84/1/10.1063/1.368009>

Částicový popis plazmatu

Jednotlivé částice plazmatu mají hmotnost m_i , náboj q_i , polohu \mathbf{r}_i a hybnost \mathbf{p}_i .

Jejich pohyb vyjadřují Newtonovy pohybové rovnice

$$(1-2) \quad \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = \mathbf{F} = \mathbf{F}_{\text{em}} + \mathbf{F}_{\text{int}}$$

$$(1-3) \quad \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i}$$

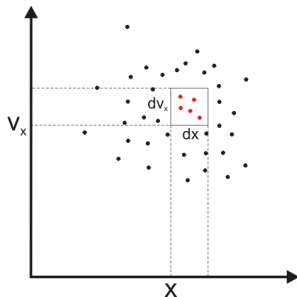
Částicový popis plazmatu

Rozdělovací funkce ve fázovém prostoru $f_j(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ pro částice typu j

$f_j d^3v d^3x$ = počet částic v čase t s polohou \mathbf{x}
a rychlostí \mathbf{v}

Koncentrace částic n_j

$$(1-4) \quad n_j(t, \mathbf{x}) = \int f_j(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d^3v$$



Ilustrace fázového prostoru v 1D.

Částicový popis plazmatu – Boltzmannova rovnice

Boltzmannova rovnice (BR) – Zákon zachování částic ve fázovém prostoru.

$$(1-5) \quad \frac{d}{dt} f_j(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = \sum_k S_{jk}$$

$$(1-6) \quad \frac{\partial f_j}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}) f_j + \frac{1}{m_j} (\mathbf{F}_j \cdot \nabla_{\mathbf{v}}) f_j = \sum_k S_{jk}$$

Srážkový integrál S_{jk} zahrnuje všechny **binární** pružné i nepružné srážky (reakce).

Částicový popis plazmatu – Boltzmannova rovnice

Praktické poznámky

- Obecně integro-diferenciální rovnice pro funkci 7 proměnných (čas, poloha, rychlost) – pro každý typ částic.
- Analytické řešení jen ve speciálních případech s omezenou dimenzionalitou. V praxi rozumné jedině **numerické řešení**. Existují různé varianty zjednodušení rovnice, viz přednáška 2.
- **Nutné řešit BR** pokud částice **nejsou v termodynamické rovnováze**, tj. rozdělovací funkce není maxwellovská, má složitější průběh. To bývá **obvykle případ elektronů v nízkoteplotním plazmatu**.

Kontinuální popis – momenty BR

Obecnou rozdělovací funkci lze charakterizovat pomocí **momentů n -tého řádu**

$$(1-7) \quad \mu_n = \int (x - c)^n f(x) dx.$$

Integrací BR přes rychlost s příslušnou hodnotou n dostaneme **rovnice pro momenty rozdělovací funkce** (závislé pouze na čase a souřadnici). Pro přesný popis bychom potřebovali nekonečnou řadu momentů.

Je-li rozdělovací funkce lokálně v rovnováze, je rozdělení rychlostí maxwellovské s danou teplotou \rightarrow můžeme se omezit na první tři momenty BR (nultý, první a druhý) – tzv. **kontinuální přístup**.

Kontinuální popis – momenty BR

Vynásobením BR veličinou ϕ_j a integrací BR přes rychlost dostáváme základní rovnice mechaniky kontinua (zákony zachování).

$$(1-8) \quad \int \phi_j \frac{\partial f_j}{\partial t} d^3 v + \int \phi_j (\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}) f_j d^3 v + \int \frac{\phi_j}{m_j} (\mathbf{F}_j \cdot \nabla_{\mathbf{v}}) f_j d^3 v = \\ = \int \phi_j \sum_k S_{jk} d^3 v$$

| ϕ_j | Rovnice |
|-----------------------|--------------------------------------|
| 1 | Rovnice kontinuity (ZZ počtu částic) |
| m_j | Rovnice kontinuity (ZZ hmotnosti) |
| q_j | ZZ náboje |
| $m_j \mathbf{v}$ | ZZ hybnosti |
| $\frac{1}{2} m_j v^2$ | ZZ energie |

Integrály rozdělovací funkce

Koncentrace částic

$$(1-9) \quad n_j(t, \mathbf{x}) = \int f_j d^3v$$

Hustota částic

$$(1-10) \quad \rho_j(t, \mathbf{x}) = \int m_j f_j d^3v$$

Tok částic

$$(1-11) \quad \Gamma_j(t, \mathbf{x}) = n_j \mathbf{u}_j = \int \mathbf{v} f_j d^3v$$

Střední rychlost

$$(1-12) \quad \mathbf{u}_j(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{n_j} \int \mathbf{v} f_j d^3v$$

Rovnice kontinuity

Nejčastěji pracujeme s **koncentrací** částic

$$(1-13) \quad \frac{\partial n_j}{\partial t} + \nabla \cdot (n_j \mathbf{u}_j) = \sum_k R_{jk}$$

méně často je vhodné pracovat s hustotou

$$(1-14) \quad \frac{\partial \rho_j}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_j \mathbf{u}_j) = m_j \sum_k R_{jk}$$

Tzv. **zdrojový člen** (source term) R_{jk} vyjadřuje rychlost přírůstku (úbytku) částic v důsledku reakcí.

Zákon zachování hybnosti

$$(1-15) \quad m_j n_j \left[\frac{\partial \mathbf{u}_j}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] = n_j \mathbf{F}_j - \nabla \cdot \mathbf{P}_j + \mathbf{f}_j$$

Tenzor tlaku

$$(1-16) \quad (\mathbf{P}_j)_{\alpha\beta} = m_j \int (v_\alpha - u_{j\alpha})(v_\beta - u_{j\beta}) f_j d^3 v$$

Obvykle bývá zjednodušeno na $\nabla \cdot \mathbf{P}_j = \nabla p_j$.

Vnitřní síly v důsledku srážek (tření)

$$(1-17) \quad \mathbf{f}_j = \int m_j \mathbf{v} \sum_k S_{jk} d^3 v$$

Zákon zachování energie

$$(1-18) \quad \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho_j u_j^2 + e_j \right) + \nabla \cdot \left(\frac{1}{2} \rho_j u_j^2 \mathbf{u}_j + e_j \mathbf{u}_j + \mathbf{P}_j \cdot \mathbf{u}_j + \mathbf{q}_j \right) = \\ = \mathbf{j}_j \cdot \mathbf{E} + \varepsilon_j$$

Energie neuspořádaného pohybu

$$(1-19) \quad e_j = \int \frac{1}{2} m_j (\mathbf{v} - \mathbf{u}_j) f_j d^3 v$$

Změna energie v důsledku srážek

$$(1-20) \quad \varepsilon_j = \sum_j \int \frac{1}{2} m_j v^2 S_{jk} d^3 v$$

Použití částicového / kontinuálního popisu

Knudsenovo číslo

$$(1-21) \quad \text{Kn} = \frac{\lambda}{L},$$

L je charakteristický rozměr a λ je střední volná dráha částice.

- Pro $\text{Kn} \ll 1$ (na škále L velmi mnoho srážek) dochází rychle k relaxaci rozdělovací funkce $\Rightarrow f(\mathbf{v})$ je lokálně blízko rovnováhy a lze ji dobře popsat pomocí momentů n , \mathbf{u} a T .
- Pro $\text{Kn} \gtrsim 1$, $f(\mathbf{v})$ není lokálně v rovnováze a je třeba řešit Boltzmannovu rovnici.

Elektromagnetické pole

Maxwellovy rovnice

$$(1-22) \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}$$

$$(1-23) \quad \nabla \times \mathbf{H} = \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{J}$$

$$(1-24) \quad \epsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} = \rho$$

$$(1-25) \quad \mu_0 \nabla \cdot \mathbf{H} = 0$$

kde \mathbf{J} je proudová hustota a ρ je hustota náboje.

Elektromagnetické pole

Často používané předpoklady

- Konstantní (externí) magnetické pole \mathbf{B}
- Zanedbáme indukované magnetické pole

$$(1-26) \quad \nabla \times \mathbf{E} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{E} = -\nabla\Phi$$

vede na **Poissonovu rovnici**

$$(1-27) \quad \epsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} = -\epsilon_0 \nabla^2 \Phi = \rho$$

Na nabitě částice působí Loretzova síla

$$(1-28) \quad \mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

Reakce v plazmatu – přehled

Jaké znáte typy interakcí částic v plazmatu?

Reakce v plazmatu – přehled

Reakce elektron – atom/molekula

| Typ | Varianta | Příklad |
|--------------|--------------------|---|
| Ionizace | atomu | $e + \text{Ar} \longrightarrow 2e + \text{Ar}^+$ |
| | molekuly | $e + \text{O}_2 \longrightarrow 2e + \text{O}_2^+$ |
| | disociativní | $e + \text{O}_2 \longrightarrow 2e + \text{O} + \text{O}^+$ |
| (De)excitace | elektronických st. | $e + \text{Ar} \longleftrightarrow e + \text{Ar}(4s)$ |
| | vibračních st. | $e + \text{O}_2 \longleftrightarrow e + \text{O}_2(v_1)$ |
| Disociace | molekuly | $e + \text{O}_2 \longrightarrow e + \text{O} + \text{O}$ |
| El. záchyt | | $e + \text{O}_2 + \text{X} \longrightarrow \text{O}_2^- + \text{X}$ |
| | | $e + \text{O}_2 \longrightarrow \text{O} + \text{O}^-$ |

Reakce elektron – ion

| Typ | Varianta | Příklad |
|-------------|---------------|---|
| Rekombinace | tříčástečková | $e + \text{Ar}^+ + \text{X} \longrightarrow \text{Ar} + \text{X}$ |
| | disociativní | $e + \text{O}_2^+ \longrightarrow \text{O} + \text{O}$ |

Reakce v plazmatu – přehled

Reakce atomů, molekul a iontů

| Typ | Varianta | Příklad |
|---|------------|---|
| Elastická Ionizace Přenos náboje Disociace | Penningova | $\text{Ar} + \text{Ar} \longrightarrow \text{Ar} + \text{Ar}$ $\text{Ar}^* + \text{Ar} \longrightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar} + e$ $\text{Ar}^+ + \text{Ar} \longrightarrow \text{Ar} + \text{Ar}^+$ $\text{O}_2 + \text{X} \longrightarrow \text{O} + \text{O} + \text{X}$ |

Interakce částic – mikroskopický popis

Interakce částic (reakce) je výsledkem vzájemného silového působení. Z předchozích přednášek znáte interakční potenciály mezi atomy v pevné látce. V plazmatu (zejména nízkotlakém) se obvykle při popisu interakcí omezujeme na **binární srážky**, tj. v jeden okamžik interagují pouze dvě částice.

Interakce

- **neutrálních částic** nebo **nabité a neutrální částice** lze bez problémů považovat za binární – interakční potenciál neutrálního atomu omezen jen na rozměr atomu (síly krátkého dosahu)
- **nabíých částic** – coulombovské síly dlouhého dosahu – lze popsat pomocí série několika binárních srážek

Popis binárních srážek

Dvě částice s hmotnostmi m_1 , m_2 a rychlostmi \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 .

Relativní rychlost $\mathbf{v}_r = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$

Relativní energie $\varepsilon_r = 1/2 m_r v_r^2$

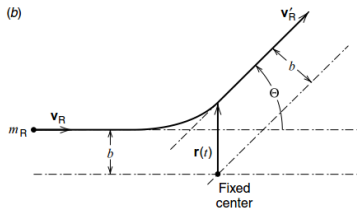
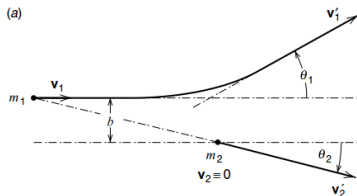
Redukovaná hmotnost

$$m_r = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$$

Binární srážky rozlišujeme

- Pružné – celková kinetická energie částic se zachovává
 $v'_r = v_r$
- Nepružné – část kinetické energie se přemění na vnitřní energii (excitace, ionizace)

$$\varepsilon'_r = \varepsilon_r - \Delta\varepsilon$$



Popis binárních srážek

Úhel rozptylu Θ je určen **parametrem b** (zámrná vzdálenost, viz předchozí obrázek) a **interakčním potenciálem** působícím mezi částicemi. Pro pružné srážky lze závislost $\Theta(b)$ vyjádřit klasicky z rovnic pro pohyb hmotných bodů v interakčním potenciálu. Tento popis dává výsledky v dobré shodě s kvantově-mechanickými výpočty.

Pro nepružné srážky musíme vyjít z kvantově-mechanické struktury částic (existence excitovaných stavů). Interakce mají pravděpodobnostní charakter. Dvě částice s danou energií mohou reagovat různými způsoby → existuje několik interakčních kanálů s různou pravděpodobností.

Pro modelování binárních srážek je vhodný **pravděpodobnostní popis**. Parametr b není určován na základě poloh částic (má velikost řádově jako rozměr částice), ale je generován z příslušného rozdělení pomocí náhodných čísel – viz Monte Carlo metody.

Parametry binárních srážek

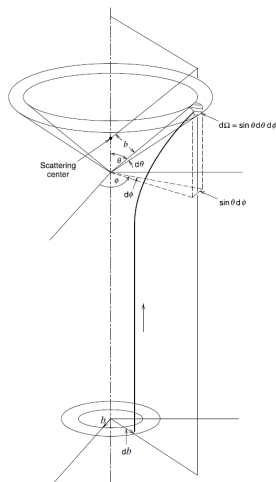
Účinný průřez interakce – plocha která způsobuje rozptyl svazku nalétávajících částic.

Diferenciální účinný průřez

$$(1-29) \quad \sigma_{\text{dif}}(v_r, \Theta) = \frac{1}{\Gamma} \frac{dN}{d^2\Omega dt}$$

Celkový účinný průřez

$$(1-30) \quad \sigma(v_r) = 2\pi \int_0^\pi \sigma_{\text{dif}}(v_r, \Theta) \sin \Theta d\Theta$$



Střední volná dráha

Frekvence srážek je počet srážek **jedné nalétávající částice** s terčovými částicemi (koncentrace n_t) za jednotku času

$$(1-31) \quad \nu = n_t \sigma(v_r) v_r$$

Střední volná dráha je průměrná dráha, kterou nalétávající částice urazí mezi srážkami

$$(1-32) \quad \lambda = \frac{v_r}{\nu} = \frac{1}{n_t \sigma(v_r)}$$

Poznámka: Uvedené výrazy platí pro jednu rychlost nalétávající částice. V případě souboru částic je potřeba vystředovat výraz $\sigma(v_r) v_r$ přes rozdělovací funkci.

Přenos hybnosti při binární srážce

Účinný průřez pro přenos hybnosti (změna hybnosti nalétávající částice)

$$(1-33) \quad \sigma_m(v_r) = 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos \Theta) \sigma_{\text{dif}}(v_r, \Theta) \sin \Theta d\Theta$$

Pro nepružné srážky obvykle nemáme diferenciální účinný průřez, zajímá nás zejména celková pravděpodobnost nepružné srážky. Pak je obvykle brán σ_m roven celkovému účinnému průřezu (neboli izotropní rozptyl po nepružné srážce).

Přenos energie při pružné srážce

Podíl energie nalétávající částice předané terčové částici při pružné srážce je

$$(1-34) \quad f_{\varepsilon} = \frac{2m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\sigma_m}{\sigma} .$$

Pro $m_1 \ll m_2$, např. pro elektrony a atomy dostaneme

$$(1-35) \quad f_{\varepsilon} = \frac{2m_1}{m_2} \frac{\sigma_m}{\sigma} .$$

Jednoduché modely pružných srážek

V určitých aplikacích je popis pomocí účinného průřezu $\sigma(v_r)$ (zadáno např. tabulkou hodnot) zbytečně složitý. Využívá se zjednodušených modelů účinných průřezů, které lze jednoduše vyjádřit pomocí několika parametrů. Aplikovatelné zejména pro neutrální částice (využíváno v simulacích proudění).

Model tvrdých koulí (hard sphere)

Účinný průřez je konstantní, nezávisí na vzájemné rychlosti částic.

$$(1-36) \quad \sigma(v_r) = \pi d_{12}^2,$$

kde $d_{12} = \frac{1}{2}(d_1 + d_2)$ a d_i je průměr částice (koule).

Úhel rozptylu

$$(1-37) \quad \cos(\Theta/2) = b/d, \quad b \in \langle 0; d \rangle.$$

To vede na rovnoměrné rozdělení $\cos(\Theta)$.

Jednoduché modely pružných srážek

Model proměnných tvrdých koulí (variable hard sphere, VHS)

Účinný průřez jako u tvrdých koulí, ale d se zmenšuje s rostoucí rychlostí

$$(1-38) \quad \sigma(v_r) = \pi d^2, \quad d = d_{\text{ref}} \left(\frac{v_{r,\text{ref}}}{v_r} \right)^\nu.$$

Index $_{\text{ref}}$ značí referenční hodnoty. Tento model zachycuje závislost viskozity tekutiny na teplotě.

Úhel rozptylu je stejný jako u tvrdých koulí

$$(1-39) \quad \cos(\Theta/2) = b/d, \quad b \in \langle 0; d \rangle.$$

Jednoduché modely pružných srážek

Model proměnných měkkých koulí (variable soft sphere, VSS)

Účinný průřez jako u proměnných tvrdých koulí

$$(1-40) \quad \sigma(v_r) = \pi d^2, \quad d = d_{\text{ref}} \left(\frac{v_{r,\text{ref}}}{v_r} \right)^\nu.$$

Úhel rozptylu závisí na parametru α

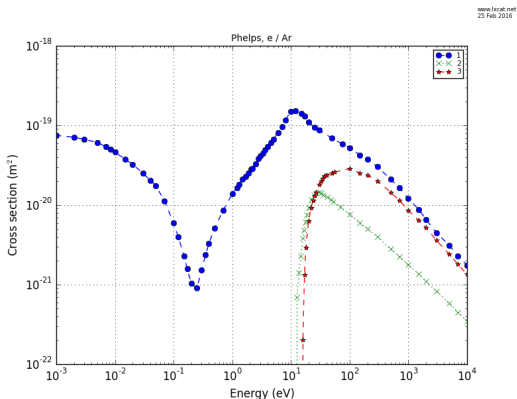
$$(1-41) \quad \cos(\Theta/2) = (b/d)^\alpha, \quad b \in \langle 0; d \rangle.$$

Pomocí parametru α lze ovlivňovat přenos hybnosti při srážce, $\alpha < 1$ preferuje rozptyl pod malými úhly.

Nepružné srážky

U nepružných srážek dochází ke změně vnitřního uspořádání částice, např. excitace, ionizace, záchyt elektronu, apod. Tyto jevy nelze přesně popsat bez kvantové mechaniky.

V modelování využíváme změřené nebo vypočtené **účinné průřezy**, nejčastěji ve formě **tabulkových dat**.



Srážkový integrál

Srážkový integrál v Boltzmannově rovnici (pro pružnou srážku)

$$\mathbf{v}_j \rightarrow \mathbf{v}'_j, \mathbf{v}_k \rightarrow \mathbf{v}'_k$$

$$\mathbf{v}_{jk} = \mathbf{v}_j - \mathbf{v}_k$$

$$(1-42) \quad S_{jk} = \int [f_j(\mathbf{v}'_j)f_k(\mathbf{v}'_k) - f_j(\mathbf{v}_j)f_k(\mathbf{v}_k)] v_{jk} \sigma_{\text{dif}}(v_{jk}, \theta) d^2\Omega d^3v_k$$

$$(1-43) \quad d^2\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$$

Reakce – kontinuální popis

Při použití kontinuálního popisu dostáváme na pravé straně rovnice kontinuity rychlost změny koncentrace částic v důsledku srážek – **reakční rychlost**.

Reakční rychlost

$$(1-44) \quad R_{jk} = \int f_j(\mathbf{v}_j) f_k(\mathbf{v}_k) \sigma_{jk}(v_{jk}) v_{jk} d^3 v_j d^3 v_k \quad (\text{m}^{-3} \text{s}^{-1})$$

V rozdělovacích funkcích je ukryta závislost na koncentraci jednotlivých reaktantů, neboť $n_j = \int f_j(\mathbf{v}_j) d\mathbf{v}_j$. To je srozumitelné i z makroskopického hlediska: více reagujících částic znamená přímo úměrně větší počet vzájemných interakcí. Můžeme zavést **reakční konstantu** K_{jk} ($\text{m}^3 \text{s}^{-1}$)

$$(1-45) \quad R_{jk} = n_j n_k K_{jk}.$$

Reakční konstanta tedy nezávisí na množství interagujících částic, ale jen na jejich rychlostech (normalizovaných rozdělovacích funkcích).

Reakce – kontinuální popis

Příklad: vyjádřete reakční rychlost a reakční konstantu pro ionizaci argonu elektronem.

Reakce probíhá podle této rovnice: $e + \text{Ar} \longrightarrow 2e + \text{Ar}^+$

Reaguje elektron s atomem Ar, reakční rychlost tedy můžeme vyjádřit jako

$$(1-46) \quad R_{iz} = n_e n_{\text{Ar}} K_{iz} .$$

Protože $m_e \ll m_{\text{Ar}}$ a elektrony jsou urychlovány el. polem, platí $v_e \gg v_{\text{Ar}}$. Pak relativní rychlost při vzájemné srážce $v_r = |\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_{\text{Ar}}| \approx v_e$ a pro izotropní $f_e(v_e)$ dostaneme

$$(1-47) \quad K_{iz} = \int_0^{\infty} f_e(v_e) \sigma_{iz}(v_e) v_e dv_e$$

Reakce – kontinuální popis

Často bývají účinné průřezy vyjádřeny jako funkce energie. Transformací $v_e \rightarrow \varepsilon$ lze odvodit (platí nejen pro elektrony)

$$(1-48) \quad K = \left(\frac{2}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} \sigma(\varepsilon) \varepsilon^{\frac{1}{2}} f(\varepsilon) d\varepsilon$$

Reakční konstanty bývají obvykle změřeny pro rovnovážné (Maxwellovo) rozdělení s teplotou T

$$(1-49) \quad f_M = 2 \left(\frac{\varepsilon}{\pi(k_B T)^3}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_B T}\right)$$

viz např. NIST Chemical Kinetics Database² pro neutrální částice.

Pro použití v modelech s nerovnovážným (ale známým) rozdělením je potřeba reakční konstanty spočítat, viz (1-48) a přednáška 2.

²National Institute of Standards and Technology. NIST Chemical Kinetics Database. URL: <http://kinetics.nist.gov>.

Reakce – kde hledat atomová a chemická data

- NIST Atomic Spectra Database
<http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm>
- NIST Chemistry Webbook
<http://webbook.nist.gov/chemistry>

Reakce – kde hledat účinné průřezy?

- Databáze účinných průřezů (souhrn z vědeckých článků)
 - LXCat (Plasma Data Exchange Project)
<http://nl.lxcat.net>
 - NIST Electron-Impact Cross Sections for Ionization and Excitation
<http://www.nist.gov/pml/data/ionization/>
 - Compilation of data assembled by Phelps
<http://jilawww.coloradu.edu/avp/>
 - Atomic and molecular data research center, NIFS, Japan
<http://dbshino.nifs.ac.jp/>
 - Atomic and molecular data unit, IAEA
www-amdis.iaea.org
 - Phys4Entry
users.ba.cnr.it/imip/cscpal38/phys4entry/
 - NIST Chemical Kinetics Database
kinetics.nist.gov/kinetics

Reakce – kde hledat účinné průřezy?

- Vědecké články (konkrétní případ)
 - Experiment – obvykle malý rozsah hodnot
 - Výpočet – přesnost se stále zlepšuje
- Semiempirické formule, viz přednášky Fyzika plazmatu (J. Vlček)

Reakční konstanty pro Ar plazma

Kompilace odvozených reakčních konstant³

| Number | Reaction | Rate Constant (m ³ /s) | Source |
|--------|---|--|--------|
| 1 | e + Ar elastic scattering | $2.336E-14 T_e^{1.609} \times e^{0.0618(\ln T_e)^2 - 0.1171(\ln T_e)^3}$ | a |
| 2 | e + Ar → Ar ⁺ + 2e | $2.34E-14 T_e^{0.59} e^{-17.44/T_e}$ | a |
| 3 | e + Ar → Ar* + e | $2.48E-14 T_e^{0.33} e^{-12.78/T_e}$ | a,b |
| 4 | e + Ar → Ar(4s) + e | $5.0E-15 T_e^{0.74} e^{-11.56/T_e}$ | c |
| 5 | e + Ar(4s) → Ar + e | $4.3E-16 T_e^{0.74}$ | d |
| 6 | e + Ar → Ar(4p) + e | $1.4E-14 T_e^{0.71} e^{-13.2/T_e}$ | c |
| 7 | e + Ar(4p) → Ar + e | $3.9E-16 T_e^{0.71}$ | d |
| 8 | Ar(4s) + e → Ar(4p) + e | $8.9E-13 T_e^{0.51} e^{-1.59/T_e}$ | c |
| 9 | Ar(4p) + e → Ar(4s) + e | $3.0E-13 T_e^{0.51}$ | d |
| 10 | e + Ar(4s) → Ar ⁺ + 2e | $6.8E-15 T_e^{0.67} e^{-4.20/T_e}$ | c |
| 11 | e + Ar(4p) → Ar ⁺ + 2e | $1.8E-13 T_e^{0.61} e^{-2.61/T_e}$ | c |
| 12 | e + Ar _m → Ar _r + e | 2E-13 | c |
| 13 | Ar _r → Ar + hν | 3.0E7 s ⁻¹ | d,e |
| 14 | Ar(4p) → Ar + hν | 3.2E7 s ⁻¹ | d,e |

Notes: T_e in volts. The notation E-8 means 10⁻⁸. Subscripts m and r denote metastable and resonance 4s levels.

^aFit by Gudmundsson (2002) in the range 1 ≤ T_e ≤ 7 V.

^bAverage energy loss-weighted excitation rate constant for ε_{ex} = 12.14 V.

^cKannari et al. (1985).

^dAshida et al. (1995).

^eAverage first-order rate constant in units of s⁻¹.

Poznámka: Pozor na interval platnosti fitu.

³Michael A. Lieberman a Allan J. Lichtenberg. *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing: Second Edition*. New York: Wiley, 2005, s. 1-757. ISBN: 0471720011. DOI: 10.1002/0471724254.

Úlohy k procvičení

- 1 Napište rovnici kontinuity pro elektrony v Ar plazmatu. Uvažujte interakci elektronu s Ar atomy formou elastické srážky, excitace a ionizace.
- 2 Vyčíslete maximální možný podíl kinetické energie, který předá elektron při elastické srážce s atomem Ar v klidu. Analogicky vyčíslete tento podíl pro iont Ar^+ dopadající na (stojící) atom Al.
- 3 Z databáze LXCat si stáhněte účinné průřezy pro interakci elektronu s atomem Ar: elastická srážka, excitace, ionizace; vykreslete je v grafu.
- 4 Vypočtěte přibližně střední volnou dráhu elektronu v Ar v závislosti na tlaku Ar pro energii elektronu ≈ 10 eV a teplotu Ar 300 K.
- 5 Z databáze LXCat si stáhněte účinné průřezy pro srážku Ar^+ s atomem Ar: elastická srážka, zpětný rozptyl (backscattering); vykreslete je v grafu.
- 6 Vypočtěte přibližně střední volnou dráhu Ar^+ iontu v Ar v závislosti na tlaku Ar pro teplotu Ar 300 K.

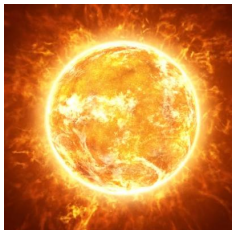
2 Řešení Boltzmannovy rovnice pro elektrony

- 1 Popis metody řešení BR – program BOLSIG+
- 2 Praktické využití řešení BR
- 3 Úlohy

Motivace

Jsou elektrony v plazmatu v termodynamické rovnováze?

Jak je to ve Slunci, a jak v magnetronech (doutnavý výboj)?



Motivace

- Lehké elektrony jsou “motorem” plazmového výboje.
- Elektrony jsou urychlovány elektrickým polem, energii ztrácí zejména během nepružných srážek.
- U nízkoteplotního plazmatu často není rozdělovací funkce elektronů maxwellovská – vliv elektrického pole a nepružných srážek.
- **Transportní a reakční konstanty**, objevující se v kontinuálních modelech, **závisejí na rozdělovací funkci elektronů**.

Určení rozdělovací funkce elektronů

Řešení Boltzmannovy rovnice (BR) pro rozdělovací funkci elektronů $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ v elektrickém poli.

$$(2-1) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}})f + \frac{e}{m}(\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{v}})f = S_c(f)$$

Srážkový člen $S_c(f)$ závisí jen na koncentraci ostatních částic v plazmatu, ne na jejich rychlosti. Rychlost elektronů je řádově větší než rychlost atomů.

Příklad **ne-selfkonzistentního výpočtu** – zkoumáme pouze elektrony ve specifických podmínkách, musíme doplnit informaci o koncentraci ostatních částic a o elektrickém poli. Výsledky můžeme použít následně v komplexní simulaci.

Metody numerického řešení Boltzmannovy rovnice

- Monte Carlo – aproximace rozdělovací funkce souborem částic, transport a srážky metodou Monte Carlo (viz přednáška 4)
- Analytické zjednodušení BR
 - two-term approximation (Bolsig+)
 - multiterm approximation
 - time-dependent two-term approximation

Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models

G J M Hagelaar and L C Pitchford

Centre de Physique des Plasmas et de leurs Applications de Toulouse,
Université Paul Sabatier, 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex 9, France

Received 13 June 2005

Published 5 October 2005

Online at stacks.iop.org/PSST/14/722

Na následujících slajdech bude popsán princip řešení BR pro elektrony, jak je implementován v programu BOLSIG⁺⁴. Program je vhodný pro výpočet rozdělovací funkce elektronů a odvozených transportních a reakčních konstant pro použití ve kontinuálních modelech.

⁴Gerjan Hagelaar. *Bolsig+*. 2016. URL: <http://www.bolsig.laplace.univ-tlse.fr/>, G J M Hagelaar a L C Pitchford. "Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models". In: *Plasma Sources Sci. Technol.* 14.4 (2005), s. 722–733. ISSN: 0963-0252. DOI: 10.1088/0963-0252/14/4/011. URL: <http://stacks.iop.org/0963-0252/14/i=4/a=011?key=crossref.2a24e96f0d2a1cd028c8141d01c6b2b0http://stacks.iop.org/0963-0252/14/i=4/a=011>.

Zjednodušující předpoklady

Obecné řešení BR je velmi obtížné (6+1 dimenzí), je potřeba provést výrazné zjednodušení použitím vhodných předpokladů:

- 1 **Elektrické pole a srážkové pravděpodobnosti** (koncentrace částic) **jsou homogenní** $\Rightarrow f$ je symetrické v rychlosti podle osy $z \parallel \mathbf{E}$ a mění se v prostoru jen ve směru z .

$$(2-2) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + v \cos \theta \frac{\partial f}{\partial z} - \frac{e}{m} E \left(\cos \theta \frac{\partial f}{\partial v} + \frac{\sin^2 \theta}{v} \frac{\partial f}{\partial \cos \theta} \right)$$

- 2 Elektrické pole \mathbf{E} je stacionární nebo osciluje s vysokou frekvencí.
- 3 Rovnice (2-2) je rozvinuta v $\cos \theta$ do řady Legendrových polynomů (sférické harmonické funkce) – řeší se rovnice pro koeficienty rozvoje. Obvykle se používají pouze **první dva členy**, tedy *two-term approximation*.

Aproximace dvěma členy rozvoje

$$(2-3) \quad f(t, z, v, \cos \theta) = f_0(t, z, v) + f_1(t, z, v) \cos \theta$$

Dvě funkce dvou prostorových proměnných, f_0 je izotropní část, f_1 je anizotropní část.

Izotropní část je normalizovaná dle

$$(2-4) \quad 4\pi \int_0^\infty f_0 v^2 dv = n,$$

kde n je koncentrace elektronů.

Dostáváme dvě rovnice pro f_0 a f_1 .

Časová závislost rozdělovací funkce

Funkce f nemůže být konstantní v čase i prostoru, neboť některé procesy (ionizace, záchyt) nezachovávají počet elektronů. Koncentrace elektronů se pro zadané podmínky v čase mění v závislosti na rychlosti reakcí.

Bolsig+ předpokládá následující rozklad na součin energetické a časové/prostorové závislosti:

$$(2-5) \quad f_{0,1}(t, z, \varepsilon) = \frac{1}{2\pi\gamma^3} F_{0,1}(\varepsilon) n(z, t),$$

kde $\gamma = (2e/m)^{1/2}$ a energie $\varepsilon = (v/\gamma)^2$ s normalizací

$$(2-6) \quad \int_0^\infty \varepsilon^{1/2} F_0 d\varepsilon = 1.$$

Dvě varianty prostoro-časové závislosti koncentrace elektronů

Reálná situace je obvykle podobná jedné z následujících zjednodušených variant.

- ① Jen **časová závislost** (ionizací se elektrony množí a přibývají na místě)

$$(2-7) \quad \frac{\partial n}{\partial z} = 0,$$

$$(2-8) \quad \frac{\partial n}{\partial t} = n\nu_i = nN\gamma \int_0^\infty \left(\sum_{k=iz} x_k \sigma_k - \sum_{k=at} x_k \sigma_k \right) \varepsilon F_0 d\varepsilon,$$

kde N je celková koncentrace atomů (molekul), ν_i je frekvence srážek vedoucí na produkci nebo zánik elektronu, x_k je molární podíl částice k a σ_k je účinný průřez.

Dostaneme

$$(2-9) \quad F_1 = \frac{E}{N} \frac{1}{\tilde{\sigma}_m} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon}$$

Dvě varianty prostoro-časové závislosti koncentrace elektronů

- ② Jen **prostorová závislost** (oblak elektronů se pohybuje, při ionizaci přibývají ve směru z – Townsendova lavina)

$$(2-10) \quad \frac{\partial n}{\partial z} = -\alpha n = \frac{v_i}{u} n,$$

$$(2-11) \quad \frac{\partial n}{\partial t} = 0,$$

kde α je Townsendův koeficient a u je střední rychlost.
Dostaneme

$$(2-12) \quad F_1 = \frac{1}{\sigma_m} \left(\frac{E}{N} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} + \frac{\alpha}{N} F_0 \right)$$

Střídavé elektrické pole

Předpokládáme časovou závislost elektrického pole

$$(2-13) \quad E(t) = E_0 e^{i\omega t}$$

Lze použít, pokud změna energie elektronu je malá během jedné periody

$$(2-14) \quad \frac{\omega}{N} \gg \frac{2m}{M} \sigma_m \gamma \epsilon^{1/2}$$

Dostaneme

$$(2-15) \quad F_1 = \frac{E_0}{N} \frac{\tilde{\sigma}_m - iq}{\tilde{\sigma}_m^2 + q^2} \frac{\partial F_0}{\partial \epsilon},$$

kde $q = \omega/N\gamma\epsilon^{1/2}$.

Srážkové členy

Srážky mění rozložení částic v energiovém prostoru $F_0(\varepsilon)$.

- pružné srážky
- nepružné srážky – diskrétní změna energie o ε_{ex} (excitační energie)
- ionizace – závisí na dělení energie mezi 2 elektrony, dva zjednodušené modely:
 - *equal sharing* = oba elektrony mají stejnou energii
 - *zero sharing* = původní elektron má původní energii $-\varepsilon_{\text{iz}}$, druhý má nulovou energii
- záchyt – odstraní elektron z rozdělení
- srážky elektron–elektron

Numerické řešení

Výsledná rovnice pro F_0 je rovnice konvekce a difuze v energiovém prostoru

$$(2-16) \quad \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\tilde{W}F_0 - \tilde{D} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right) = \tilde{S},$$

člen \tilde{S} ale není lokální.

Numerické řešení využívá dělení na energiové intervaly (1d síť v energiovém prostoru) a diskretizaci (pomocí diferencí). Rovnice je obecně nelineární – využívá se iterační algoritmus.

Praktické využití

Výsledky řešení BR jsou nejčastěji využívány k popisu elektronů a jejich reakcí v kontinuálním modelu.

- Výpočet rozdělovací funkce elektronů
- Výpočet reakčních konstant z účinného průřezu pro danou rozdělovací funkci
- Výpočet transportních koeficientů (mobilita, difuze) → rovnice kontinuity v kontinuálním modelu

Co je to E/N ?

V odvozených rovnicích pro řešení BR se často vyskytuje parametr E/N , kde E je elektrické pole a N je celková koncentrace částic (se kterými elektron interaguje). Navíc nikdy nejsou tyto veličiny oddělené. Z toho plyne, že řešení **nezávisí na absolutní hodnotě E , ale pouze na poměru E/N** . Stejně tak některé výsledky (transportní koeficienty) jsou nutně normované na koncentraci N .

E/N je redukované elektrické pole (reduced electric field).

Často se používá odvozená jednotka Townsend:

$$1 \text{ Td} = 10^{-21} \text{ Vm}^2 = 10^{-17} \text{ Vcm}^2.$$

Typické hodnoty pro redukované el. pole se pohybují v řádech 1 – 1000 Td.

Využití pro výpočet koeficientů do kontinuálního modelu

Shrnutí klíčových předpokladů řešiče BR

- homogenní elektrické pole
- homogenní nebo exponenciálně rostoucí hustota elektronů
- slabá anizotropie (dva členy rozvoje)

V kontinuálních modelech se zobecňují výsledky BR na obecnější podmínky v plazmatu. **Předpokládáme**, že transportní a reakční koeficienty odpovídají řešení BR pro dané **lokální hodnoty E/N nebo T_e** .

Koeficienty mobility a difuze

Tok elektronů lze vyjádřit jako

$$(2-17) \quad \Gamma = -\mu n E - \frac{\partial D n}{\partial z},$$

kde koeficienty mobility a difuze jsou

$$(2-18) \quad \mu N = -\frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{\tilde{\sigma}_m} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \quad \text{a}$$

$$(2-19) \quad D N = \frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{\tilde{\sigma}_m} F_0 d\varepsilon.$$

Srovnajte se známými vzorci pro maxwellovskou rozdělovací funkci:

$$(2-20) \quad \mu = \frac{e}{m \nu_m} \quad \text{a}$$

$$(2-21) \quad D = \frac{k_B T_e}{m \nu_m}.$$

Reakční konstanty

Reakční konstanta (m^3s^{-1})

$$(2-22) \quad k_k = \gamma \int_0^\infty \varepsilon \sigma_k F_0 d\varepsilon$$

a rychlost reakce

$$(2-23) \quad R_k = nN_k k_k = nN x_k k_k.$$

n – koncentrace elektronů, N_k – koncentrace částic, x_k – relativní koncentrace částic, N – celková koncentrace částic

Koncepce využití v kontinuálním modelu

- V dané buňce výpočetní sítě známe hodnoty T_e – jsou řešením zákona zachování energie.
- Předpokládáme, že rozdělovací funkce elektronů odpovídá stacionárnímu řešení BR vedoucímu k hodnotě T_e (local field approximation, LFA).
- Vyhledáme hodnoty transportních a reakčních konstant pro danou teplotu a použijeme je pro další časový krok v rovnicích kontinuity, ZZ hybnosti a energie.

Vstupní soubory pro BOLSIG+

Nejlépe stáhnout z databáze **LxCat** – data přímo v požadovaném formátu. Je důležité vědět co nejvíce o použitých reakcích (identifikace cílových stavů).

Možné typy reakcí:

- elastická srážka (ELASTIC) – účinný průřez pro přenos hybnosti
- excitace (vibračních i elektronových stavů) (EXCITATION)
- ionizace (IONIZATION)
- excitace rotačních stavů (ROTATION)
- elektronový záchyt (ATTACHMENT)
- celkový přenos hybnosti (EFFECTIVE) – není jasně definováno, v budoucnu snaha nepoužívat

Detaily, viz manuál k programu Bolsig+.

Vstupní parametry výpočtu v BOLSIG+

- *E/N* nebo *Mean energy* – jedna hodnota nebo série hodnot
- Pro *Maxwellian mean energy* je rozdělovací funkce na pevno maxwellovská, jinak program počítá i rozdělovací funkci
- Pokud je více druhů interagujících částic (např. Ar + O₂), je potřeba zadat jejich relativní koncentrace

Parametry konvergence a další varianty výpočtu, viz manuál.

Započtení vlivu Coulombovských interakcí

- Zaškrtnutím pole $e-e$ collisions, případně $e-i$ collisions
- Nutno zadat stupeň ionizace a hustotu plazmatu
- **Stupeň ionizace** – hlavní parametr pro výpočet srážek $e-e$ a $e-i$
- **Hustota plazmatu** – má jen malý efekt (výpočet Coulombova logaritmu), stačí řádový odhad

Zpětné reakce

```
^^IEXCITATION
```

```
^^IAr <-> Ar*
```

```
^^I11.5 6.0
```

```
^^I
```

- Automatické započtení zpětné reakce (deexcitace)
- Ve vstupním souboru nutno zapsat oboustranou šipku (viz druhý řádek v ukázce výše)
- Účinný průřez zpětné reakce dle principu detailní rovnováhy

$$g_{\text{low}}\varepsilon\sigma(\varepsilon) = g_{\text{high}}(\varepsilon - \Delta\varepsilon)\sigma_{\text{inv}}(\varepsilon - \Delta\varepsilon)$$

- Parametr 6.0 je statistická váha (g) excitovaného stavu
- Nutno samozřejmě zadat koncentraci excitovaného stavu

Úlohy k procvičení

- 1 Nainstalujte (rozbalte) si program BOLSIG+. Seznamte se s grafickým uživatelským rozhraním. K dispozici je manuál v pdf, vzorový vstupní soubor a databáze účinných průřezů. Zkuste si, například, vykreslit účinné průřezy pro interakce, zadat výpočet a sérii výpočtů, vykreslit vypočtené výsledky a prozkoumat soubor s uloženými výsledky.
- 2 Pro přiložený soubor účinných průřezů Ar (*Ar_Lisbon.txt*) vypočtete reakční konstanty pro elastický přenos hybnosti, excitaci do prvního excitovaného stavu (11.5 eV) a ionizaci, v rozsahu střední energie elektronů (mean energy) 2 – 10 eV:
 - a) pro maxwellovskou rozdělovací funkci
 - b) pro rozdělovací funkci spočtenou programem

Vykreslete získané závislosti do grafu (reakční konstanta jako funkce energie elektronů) a porovnejte.

- 3 Porovnejte tvar rozdělovací funkce elektronů spočtené programem s maxwellovskou rozdělovací funkcí, např. pro energii elektronů 5 eV. Data jsou vypočtena v předchozím kroku, stačí vykreslit do grafu.

Úlohy k procvičení

- 4 Vypočtěte rozdělovací funkci elektronů ve výboji v Ar v závislosti na stupni ionizace se započtením srážek e–e. Jaký vliv mají interakce e–e na rozdělovací funkci? Ukažte graficky a diskutujte.

3 Globální (prostorově-průměrované) modely

- 1 Princip globálních modelů
- 2 Transport částic v globálním modelu
- 3 Odvození jednoduchého modelu
- 4 Využití programu ZDPlasKin

Motivace

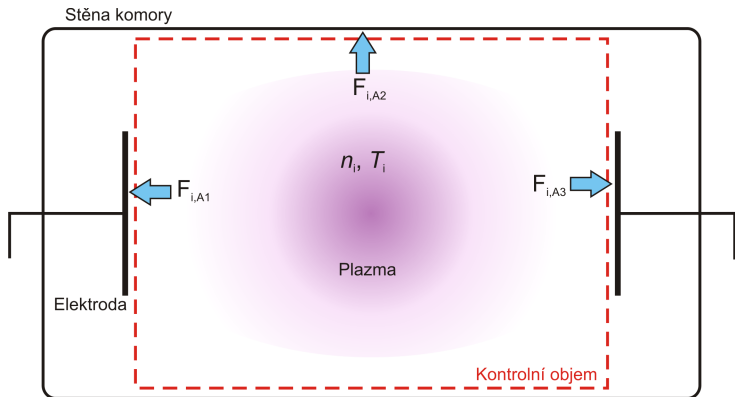
V simulaci plazmatu chceme vypočítat časový vývoj koncentrací částic v plazmatu případně další parametry (energie, reakční rychlosti, apod.).

Řešení praktických úloh (celý plazmový reaktor) s velkým množstvím různých druhů částic (desítky) je výpočetně náročné. Při použití kontinuálního popisu jsou tyto úlohy realizovatelné, ale časově náročné. Při použití částicového přístupu jsou již prakticky nerealizovatelné.

Řešením je dramatické zjednodušení prostorových závislostí → **prostorově-průměrovaný** (0-D, globální) **model**

- zaměření na reakční kinetiku výboje (velké množství reakcí)
- lze využít jako první aproximaci pro prostorově rozlišené simulace

Schéma globálního modelu



Rovnice globální modelu

Globální model využívá **kontinuálního** popisu pro kontrolní objem – rovnice zákonů zachování počtu částic a energie v kontrolním objemu. Kontrolní objem zahrnuje celý výboj nebo jeho význačnou část. Rovnice získáme integrací zákonů zachování (1–8) přes kontrolní objem.

Předpoklady

- Aplikovatelnost kontinuálního přístupu (může být problém u nízkých tlaků)
- **Prostorové rozložení** částic v kontrolním objemu je **homogenní** nebo má definovaný stacionární průběh

Bilance částic v globálním modelu

Zákon zachování částic

$$(3-1) \quad V \frac{dn_i}{dt} = \sum_k F_{i,k} + \sum_j R_{i,j} = \sum_k \Gamma_{i,k} A_k + \sum_j R_{j,k}$$

k čísluje plochy představující hranici kontrolního objemu a j čísluje objemové reakce, $F_{i,k}$ a $\Gamma_{i,k}$ je tok a hustota toku částic i přes plochu k (o velikosti A_k) a $R_{i,j}$ je reakční rychlost reakce j .

Poznámka: n_i je **střední** koncentrace částic

Bilance energie v globálním modelu

Zákon zachování energie

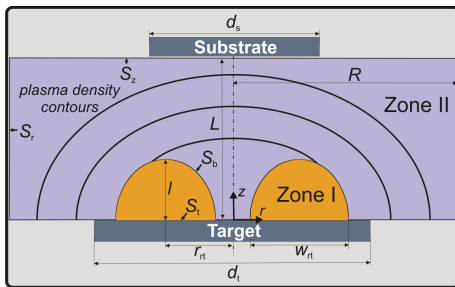
$$(3-2) \quad V \frac{d\left(\frac{3}{2} n_i k_B T_i\right)}{dt} = P_{e,i} + \sum_k \Gamma_{i,k}^e A_k + \sum_j P_{i,k},$$

kde $\Gamma_{i,k}^e$ je hustota toku energie částic i přes plochu k , $P_{i,j}$ je časová změna energie částic i (výkon) v důsledku srážek j a $P_{e,i}$ je výkon dodaný částicím i z externího zdroje (elektrické pole).

Klíčové body sestavení globálního modelu

- Definice kontrolního objemu
- Stanovení toků přes hranice kontrolního objemu v závislosti na známých středních hodnotách (n_i , T_i)
- Zahrnutí důležitých objemových a povrchových reakcí

Příklad globálního modelu magnetronového výboje se dvěma kontrolními objemy (zóna I a II) – bylo nutno rozdělit kvůli velké nehomogenitě plazmatu v magnetickém poli a mimo něj.⁵



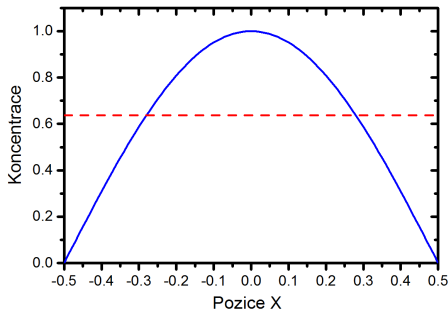
⁵Tomáš Kozák a Andrea Dagmar Pajdarová. "A non-stationary model for high power impulse magnetron sputtering discharges". In: *J. Appl. Phys.* 110.10 (2011), s. 103303. ISSN: 00218979. DOI: 10.1063/1.3656446. URL: <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jap/110/10/10.1063/1.3656446>.

Prostorové rozložení koncentrace částic

Koncentrace částic v kontrolním objemu obvykle není homogenní. Pracujeme-li se středními nebo maximálními hodnotami veličin v kontrolním objemu, je potřeba to mít na paměti při interpretaci výsledků.

Tok částic na stěny je určen nejen střední hodnotou koncentrace, ale i mechanismem transportu částic – např. difuze ke stěnám komory.

Příklad: Profil koncentrace nabitých částic mezi dvěma paralelními elektrodami při uvažování difuze.



Ambipolární difuze – připomenutí

V kvazineutrálním plazmatu je pohyb iontů a elektronů svázaný (elektrickým polem). Koeficient difuze je stejný pro ionty i elektrony, tzv. **ambipolární difuze**.

$$(3-3) \quad D_a = \frac{\mu_i D_e + \mu_e D_i}{\mu_i + \mu_e} \approx D_i \left(1 + \frac{T_e}{T_i} \right)$$

Koeficient difuze pro libovolný typ částic

$$(3-4) \quad D = \frac{k_B T}{m \nu_m} = \frac{\pi}{8} \lambda^2 \nu_m,$$

kde $\nu_m = n \sigma_m \bar{v}_r$ je frekvence přenosu hybnosti.

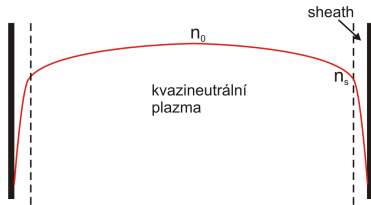
Tok nabitých částic na stěnu

Pro nabité částice je vhodné volit okrajovou podmínku $n = n_s$ and $u = u_B$, viz Bohmova podmínka, na rozhraní plazma-sheath. Pak tok na stěnu je

$$\Gamma = n_s u_B.$$

Bohmova rychlost

$$(3-5) \quad u_B = \left(\frac{kT_e}{m_i} \right)^{\frac{1}{2}}$$



Řešíme jen transport v kvazineutrální oblasti plazmatu, v sheathu platí známé analytické rovnice (např. Child-Langmuirův vztah). Potřebujeme stanovit koncentraci n_s v závislosti na n_0 (koncentrace ve výboji)

Uvažujeme, že koncentrace iontů u stěny $n_s = hn_0$, kde h je bezrozměrný parametr. Pak tok iontů vyjádříme jako

$$(3-6) \quad \Gamma = n_s u_B = hn_0 u_B$$

Existují různé modely podle režimu transportu.

Režimy transportu nabitých částic

- Bezesrážkový (collisionless): $L < \lambda_i$
Ionty urychlovány potenciálem plazmatu, nejsou brzděny srážkami
- Režim proměnné mobility (variable mobility): $L \approx \lambda_i$
Srážková rychlost iontů je dána $u_i > v_{th,i} \rightarrow$ mobilita nepřímo úměrná rychlosti
- Difúze (diffusion): $L \gg \lambda_i$
Střední rychlost $u_i \ll v_{th,i}$, dominuje difuze (D konstantní)

Tok nabitých částic na stěnu – pokračování

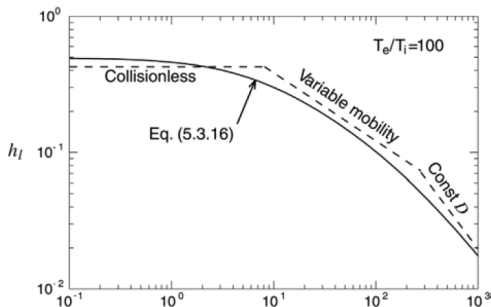
Heuristické řešení pro všechny režimy ve válcové geometrii dává následující vzorce pro bezrozměrné parametry:

h_L pro koncentraci u podstavy válce – transport podél osy

$$(3-7) \quad h_L = \frac{n(L/2)}{n(0)} \approx \frac{0.86}{[3 + L/2\lambda_i + (0.86Lu_B/\pi D_a)^2]^{1/2}}$$

h_R pro koncentraci u pláště válce – transport radiálně

$$(3-8) \quad h_R = \frac{n(R)}{n(0)} \approx \frac{0.8}{[4 + R\lambda_i + (0.8Ru_B/1.25D_a)^2]^{1/2}}$$



Jednoduchý stacionární model

Analytické vyádření zákona zachování počtu elektronů a iontů a zákona zachování energie ve výboji.

Definice proměnných a parametrů

- Elektropozitivní stacionární plazma ve válcovém objemu
 - průměr $D = 2R$, délka L
- Částice: e^- , Ar, Ar^+
 - kvazineutrální plazma $n_e = n_i = n_0$
 - koncentrace Ar n_g
- Reakce: Ionizace, Excitace, Elastické srážky ($e + Ar$)
 - K_{iz} , K_{ex} , K_{el}
- Homogenní koncentrace v objemu
 - toky iontů na stěny pomocí faktorů h_L , h_R

Bilance částic

Ve **stacionárním stavu** je rychlost vzniku iontů rovna rychlosti ztrát na stěnách

$$(3-9) \quad n_0 u_B A_{\text{eff}} = n_0 n_g K_{\text{iz}} V,$$

kde efektivní plocha stěn bere v úvahu koncentraci plazmatu na stěnách

$$(3-10) \quad A_{\text{eff}} = 2\pi R^2 h_L + 2\pi R L h_R.$$

Koncentrace n_0 se vykrátí a dostaneme

$$(3-11) \quad \frac{K_{\text{iz}}(T_e)}{u_B(T_e)} = \frac{A_{\text{eff}}}{n_g V}$$

Z bilance částic stanovíme teplotu elektronů – nelineární rovnice pro T_e .

n_0 – koncentrace iontů (elektronů), n_g – koncentrace Ar, $V = \pi R^2 L$, K_{iz} – reakční konstanta ionizace

Bilance energie

Ve **stacionárním stavu** je celkový absorbovaný výkon (ionty a elektrony) roven energetickým ztrátám v objemu a na stěnách.

$$(3-12) \quad P_{\text{abs}} = n_0 n_g (K_{\text{iz}} \varepsilon_{\text{iz}} + K_{\text{ex}} \varepsilon_{\text{ex}} + K_{\text{el}} \varepsilon_{\text{el}}) + n_0 u_B A_{\text{eff}} (\varepsilon_i + \varepsilon_e)$$

Zavedeme **energii** potřebnou na vytvoření **jednoho páru ion–elektron**

$$(3-13) \quad \varepsilon_c = (K_{\text{iz}} \varepsilon_{\text{iz}} + K_{\text{ex}} \varepsilon_{\text{ex}} + K_{\text{el}} \frac{3m_e}{m_g} k_B T_e) / K_{\text{iz}}.$$

S využitím bilance částic dostaneme

$$(3-14) \quad P_{\text{abs}} = n_0 u_B A_{\text{eff}} (\varepsilon_c + \varepsilon_i + \varepsilon_e).$$

Z této **bilance energie stanovíme koncentraci plazmatu** n_0 (pro zadaný výkon P_{abs}).

Ztráta energie při dopadu nabitých částic na stěnu

Pro **maxwellové elektrony** platí $\varepsilon_e = 2k_B T_e$.

Pro ionty $\varepsilon_i = k_B T_e/2 + eU_s$

| Okrajová podmínka | U_s |
|--------------------|---|
| Plovoucí potenciál | $k_B T_e \ln \left(\frac{m_g}{2\pi m_e} \right)^{1/2}$ |
| DC | U_{dc} |
| Symetrický RF | $0.4 U_{rf}$ |
| Asymetrický RF | $0.8 U_{rf}$ |

Stacionární globálního model - ukázka implementace

Zdrojový kód v Matlabu – viz *stacModel.m*

Parametry modelu:

- válcová trubice: $D = 2 \text{ cm}$, $L = 10 \text{ cm}$
- $p = 10 \text{ Pa}$, $P_{\text{abs}} = 100 \text{ W}$
- plovoucí potenciál na všech stěnách
- reakční konstanty K_{iz} , K_{ex} , K_{el} spočteny z účinných průřezů za předpokladu maxwellovské rozdělovací funkce

Výsledky:

$$T_e = 2.1 \text{ eV}$$

$$n_0 = 5.8 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$$

$$n_0/n_g = 2.4 \times 10^{-3}$$

Obecný nestacionární model – shrnutí

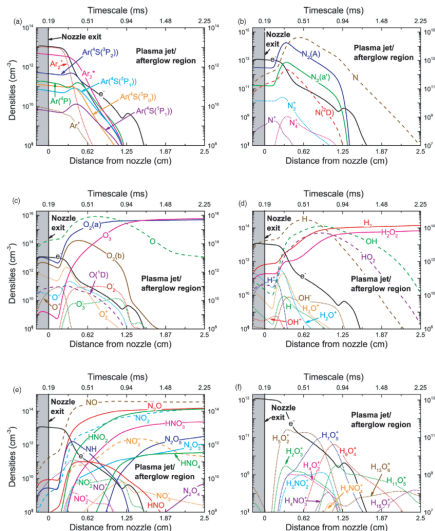
V obecném nestacionárním modelu pro N různých typů částic (vyjma elektronů) máme

- N bilancí částic, viz rovnice (3–1) pro n_i
- Bilanci energie elektronů, viz rovnice (3–2) pro T_e nebo BR rovnici pro elektrony
- Bilance energie iontů a neutrálů (pokud dochází ke změně jejich teploty), pro T_i and T , analogicky rovnici (3–2)
- Definice objemových reakcí a reakcí na površích (včetně příslušných reakčních konstant)
- Počáteční koncentrace částic

Výsledná soustava ODR se řeší numericky.

Obecný nestacionární model – příklad

Výboj typu “plasma jet” ve vzduchu⁶



⁶W. Van Gaens a A. Bogaerts. “Kinetic modelling for an atmospheric pressure argon plasma jet in humid air”. In: *J. Phys. D: Appl. Phys.* 46.27 (2013), s. 275201. DOI: 10.1088/0022-3727/46/27/275201.

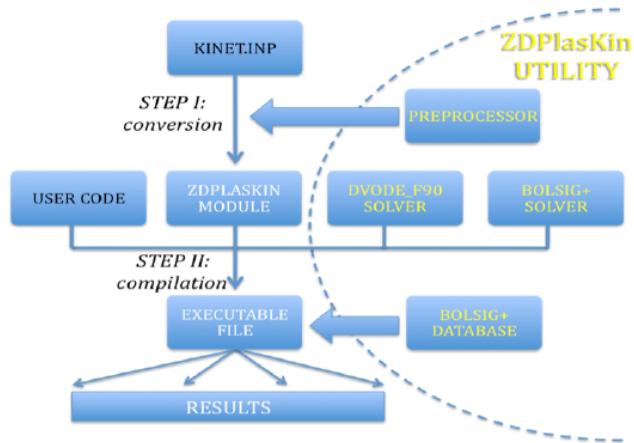
Program ZDPlasKin

Zero-dimensional Plasma Kinetics solver⁷

- Řešení reakční kinetiky v oblasti o konstantním objemu – časový vývoj koncentrace částic
- Propojeno s Bolsig+ – automaticky zahrnut výpočet reakčních konstant pro reakce elektronů
- Desítky typů částic, stovky reakcí
- Čitelný vstupní soubor
- Vyžaduje naprogramování krátkého hlavního programu – definice vstupních parametrů, průběh výpočtu, výstupy (jazyk Fortran)

⁷Sergey Pancheshnyi. *ZDPlasKin*. 2016. URL: <http://www.zdplaskin.laplace.univ-tlse.fr/>.

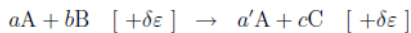
ZDPlasKin – struktura



ZDPlasKin – struktura

$$\frac{d[N_i]}{dt} = \sum_{j=1}^{j_{max}} Q_{ij}(t)$$

- bilance částic



- reakční rovnice

$$R_j = k_j[A]^a[B]^b$$

- reakční rychlost

$$Q_A = (a' - a)R, \quad Q_B = -bR, \quad Q_C = cR$$

$$\frac{N_{gas}}{\gamma - 1} \frac{dT_{gas}}{dt} = \sum_{j=1}^{j_{max}} \pm \delta\varepsilon_j \cdot R_j + P_{elast} \cdot [N_e]$$

- bilance energie těžkých částic

Z řešení BR získáme i celkový výkon ztracený při srážkách elektronů. Program neřeší explicitně povrchové reakce a jejich příspěvek k bilanci energie. Změny počtu částic v důsledku povrchových reakcí je možno započítat jako objemové reakce.

Primární vstup je opět E/N . Program sám neřeší elektrické pole.

ZDPlasKin – vstupní soubor

```
#
# TWO-REACTION TEST CASE
#
# This test case corresponds to an Ar plasma consisting of electrons, atomic
# ions, and neutrals. The charged particles are supposed to be generated by
# direct electron impact ionization and lost by 3-body recombination.
#

ELEMENTS                                Výčet prvků
e Ar
END

SPECIES                                  Výčet druhů částic (složených z výše uvedených prvků)
e Ar Ar+
END

BOLSIG                                   Výčet druhů částic využitých při řešení BR
Ar                                         Od jakého stupně ionizace zapnout interakce e-e
set electron collisions 1.0D-3           Název souboru s účinnými průřezy
set dbfile MYDB.DAT
END

REACTIONS                                 Výčet reakcí
e + Ar => e + e + Ar+                 ! Bolsig Ar->Ar+   Reakční konstanta vypočtená řešičem BR
e + Ar+ + Ar => Ar + Ar                 ! 1.0d-25         Reakční konstanta zadaná výrazem
END
```

Možnost zápisu reakcí

Lze využít standardních matematických funkcí Fortranu a definovaných proměnných T_e (teplota elektronů v K) a T_{gas} (teplota těžkých částic v K). Řádky uvozené \$ jsou přímo zkopírovány do zdrojového kódu. Lze je využít pro definici vlastních funkcí a proměnných.

```
REACTIONS
$ use globalData
$ real :: rate1, rate2
$ rate1 = 0.1*totalArea
$ rate2 = myFunction(Te)

E + CO2 => CO2 + E      ! BOLSIG+ ELASTIC_CO2
E + CO2 => E + CO2(E1)  ! BOLSIG+ CO2 -> CO2(E1)
E + O3 + ANY_NEUTRAL => O3^- + ANY_NEUTRAL ! 5.39E-29*Te**(-0.5)
O + CO2 => CO + O2      ! 2.80E-11*exp(-26.5e3/Tgas)
C + CO2 => CO + CO      ! 1.00E-15
O2(E1) => O2            ! 2.6E-4
END
```

Rychlost reakce je vždy dána reakční konstantou \times koncentrací všech reaktantů!

Pozor na jednotky u reakčních konstant – rozměry v **cm**, teploty v **K**.

Párování reakcí s Bolsig+

Nejnovější verze dat z databáze LXCat obsahuje v hlavičce reakce více informací, včetně parametru PROCESS:

```
EXCITATION
Ar -> Ar(4s[3/2]2)
1.154800e+1
SPECIES: e / Ar
PROCESS: E + Ar -> E + Ar(4s[3/2]2), Excitation
PARAM.: E = 11.548 eV, complete set
COMMENT: Khakoo M A et al 2004 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 37 247.
UPDATED: 2011-10-17 08:43:49
COLUMNS: Energy (eV) | Cross section (m2)
```

Tento proces bude správně spárován s reakcí uvedenou takto

```
E + AR => E + AR      ! BOLSIG+ E + Ar -> E + Ar(4s[3/2]2), Excitation
```

Klíčový řetězec pro spárování reakce je parametr PROCESS. Pokud není v souboru přítomen, reakce se páruje podle druhého řádku v hlavičce reakce. Pak je třeba reakci zapsat jako

```
E + AR => E + AR      ! BOLSIG+ Ar -> Ar(4s[3/2]2)
```

Program ZDPlasma

Program pro řešení globálního modelu plazmatu využívající modul ZDPlasKin. Program navíc zahrnuje

- Definici parametrů globálního modelu a jejich načtení
- Načtení počátečních a okrajových podmínek
- Načtení časového průběhu výkonu dodaného do plazmatu
- Řešení časového vývoje soustavy ODR s využitím funkcí modulu ZDPlasKin
- Výpis koncentrací částic a parametrů plazmatu ve stanovených intervalech

ZDPlasma – bilance energie

Program ZDPlasKin vyžaduje zadání E/N . Pro praktické využití globálního modelu je užitečnější možnost zadat celkový absorbovaný výkon (lze lépe změřit než E). Pro konstantní elektrické pole platí

$$(3-15) \quad P = \mathbf{J}\mathbf{E} \approx e\mu_e n_e E^2 = \sigma_e E^2$$

Celkový dodaný výkon je spotřebován převážně při srážkách elektronů, P_c (získáme z Bolsig+), a při rekombinaci elektronů a iontů na površích, P_s (řešeno v hlavním programu).

Předpokládáme, že při rekombinaci jednoho iontu a elektronu na povrchu ztratíme energii

$$(3-16) \quad \varepsilon_s = 2k_B T_e + \frac{1}{2}k_B T_e + qU_s,$$

kde U_s je efektivní elektrický potenciál povrchu (viz jednoduchý globální model výše).⁸

E/N je během výpočtu nastavováno tak, aby celkový spotřebovaný výkon byl roven předepsanému výkonu

⁸Člen $2k_B T_e$ platí přesně jen pro maxwellovské elektrony, ale pro jednoduchost používáme obecně.

ZDPlasma – povrchové reakce

ZDPlasKin automaticky kontroluje zákon zachování částic a náboje v reakcích. Pro zapsání povrchových reakcí, kde částice “zanikají” (typicky rekombinace iontů a elektronů), je potřeba zavést “virtuální” částice představující částice na površích a vyjádřit rychlost reakce dle zvoleného modelu transportu (např. difuze).

$$(3-17) \quad \left(\frac{dn}{dt}\right)_s = \Gamma_s \frac{A_s}{V} = n_s v_s \frac{A_s}{V}$$

ELEMENTS

e Ar
END

SPECIES

e Ar Ar⁺
Ar(w)⁺ e(w)
END

REACTIONS

```
$ use globalData: pressure
$ real :: diff_rate
$ diff_rate = 1200.0/gas_pressure
e => e(w)          ! diff_rate
Ar+ => Ar(w)+    ! diff_rate
END
```


ZDPlasma – příprava výpočtu

- V adresáři `reactions` vytvořit zdrojový soubor reakcí `[nazev].inp`
- V hlavním adresáři `zkompilovat program` příkazem

```
^^I^^I./compile [nazev]
^^I^^I
```

Je vytvořen spustitelný soubor `[nazev]`

- `src` – zdrojové kódy hlavního programu
- `zdblaskin` – zdrojové kódy knihovny ZDPlasKin
- `reactions` – soubory reakcí ve formátu ZDPlasKin (`*.inp`) a z nich preprocesorem připravené zdrojové soubory (`*.f90`)
- `item` – zkompilované objektové soubory

ZDPlasma – spuštění výpočtu

Výpočet spuštěn příkazem v adresáři, kde se nachází příslušný spustitelný soubor

```
./[nazev]
```

Soubory vstupních dat musejí být ve stejném adresáři

- **BOLSIGDB.DAT** – data pro Bolsig+, název souboru musí odpovídat definici v souboru reakcí. (Název souboru na disku musí být velkými písmeny, jinak není programem nalezen.)

```
^^Iset dbfile BOLSIGDB.DAT  
^^I
```

- **inputParameters.txt** – parametry výpočtu
- **inputDensity.txt** – počáteční koncentrace
- **inputPower.txt** – průběh dodaného výkonu
- **inputBoundary.txt** (nepovinné) – definice reaktantů pro simulaci povrchových reakcí a příslušných parametrů (napětí)

ZDPlasma – vstupní soubory

inputParameters.txt

Soubor ve formátu *Fortran namelist* může obsahovat následující parametry

- volume – objem plazmatu (cm^{-3})
- gastemp – teplota částic (K)
- tEnd – délka simulace (s)
- dt – časový krok (s)
- dtOut – interval zápisu do výstupních souborů (s)
- inputEN – varianta vstupu
 - .true. – zadání E/N
 - .false. – zadání výkonu (default)

Časový krok je potřeba volit dostatečně malý pro rozlišení časových změn v koncentracích – záleží na rychlosti reakcí. Typicky bude potřeba $dt < 10^{-6}\text{s}$.

ZDPlasma – vstupní soubory

inputDensity.txt

Počáteční koncentrace částic v cm^{-3} . Neuvedené částice mají koncentraci automaticky 10^{-10} cm^{-3} .

Formát

[název1] [koncentrace1]

Příklad

| | |
|-----------------|--------|
| Ar | 1.0e17 |
| Ar ⁺ | 1.0e10 |
| e | 1.0e10 |

ZDPlasma – vstupní soubory

inputPower.txt nebo inputEN.txt

Obsahuje tabulku (2 sloupce) hodnot času (s) a příslušných hodnot výkonu (W), příp. E/N (Td). V každém časovém okamžiku se pracuje s hodnotou získanou lineární interpolací z této tabulky.

Formát

| | |
|------|------|
| [t1] | [P1] |
| [t2] | [P2] |
| [t3] | [P3] |
| ... | |

Příklad

| | |
|--------|-------|
| 0.0 | 0.0 |
| 1.0e-3 | 100.0 |
| 1.0 | 100.0 |

ZDPlasma – vstupní soubory

inputBoundary.txt

Obsahuje seznam typů částic použitých pro zavedení reakcí pro rekombinaci iontů na površích. Uvádí se pouze reakce iontů, předpokládá se, že s každým iontem je ztracen i jeden elektron (kvazineutralita). Název typů částic slouží pro identifikaci těchto reakcí.

Energie ztracená při dopadu iontů na povrch je spočtena ze zadané hodnoty potenciálu povrchu, viz U_s v rovnici (3–16). Druhý sloupec obsahuje T, pokud je povrch vodivý, nebo F, pokud je nevodivý. V případě nevodivého povrchu je potenciál povrchu roven **potenciálu plovoucí elektrody** (hodnota ve třetím sloupci je ignorována).

Formát

[název1] [vodivá / nevodivá] [potenciál1]

Příklad

| | | |
|--------------------|---|-------|
| Ar(t) ⁺ | T | 500.0 |
| Ar(w) ⁺ | F | 0.0 |

ZDPlasma – výstupní soubory

- `density.txt` – vývoj koncentrace jednotlivých částic definovaných v reakčním souboru
- `plasma.txt` – vývoj parametrů plazmatu (E/N , N , T_e , skutečný spotřebovaný výkon)

4 Částicové Monte Carlo simulace

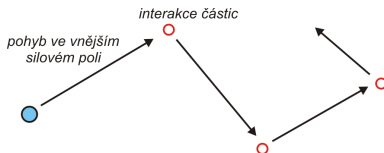
- 1 Princip, vzorkování hustoty pravděpodobnosti
- 2 Algoritmus řešení
- 3 Aplikace
- 4 Úlohy

Motivace

Pro částice mimo termodynamickou rovnováhu a pro $Kn = \lambda/l \gtrsim 1$ je potřeba pro přesný popis transportu částic řešit Boltzmannovu rovnici.

Pro nízké tlaky a velké střední volné dráhy s velkou rezervou platí $\lambda \gg l_{\text{int}}$, kde l_{int} je charakteristický dosah interakce mezi částicemi. Platí, že **interval interakce** (zhruba rozměr atomů) **je mnohem menší než interval mezi dvěma srážkami částic**.

Pohyb částic lze rozdělit na pohyb působením vnějšího pole a jednotlivé interakce (srážky) měnící (skokově) rychlost částic.



Matematický model – diskretizace

Rozdělovací funkce částic $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ je aproximována souborem N (virtuálních) částic s danou polohou (\mathbf{r}_i) a rychlostí (\mathbf{v}_i).

$$(4-1) \quad f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}) \delta(\mathbf{v}_i - \mathbf{v})$$

Jedná se o návrat k **diskrétnímu popisu hmoty**. V praxi N nemůže odpovídat reálnému počtu částic. Stačí ale podstatně méně simulačních částic k dostatečně přesnému vzorkování rozdělovací funkce a k přesnému výpočtu makroskopických veličin (střední rychlost, energie, apod.).

Varianty částicových Monte Carlo metod

- *Single particle/Test particle*

Částice sledujeme po jedné. Na začátku je částice vygenerována podle určitého rozdělení pravděpodobnosti, po skončení je výsledek zaznamenán pro statistické zpracování

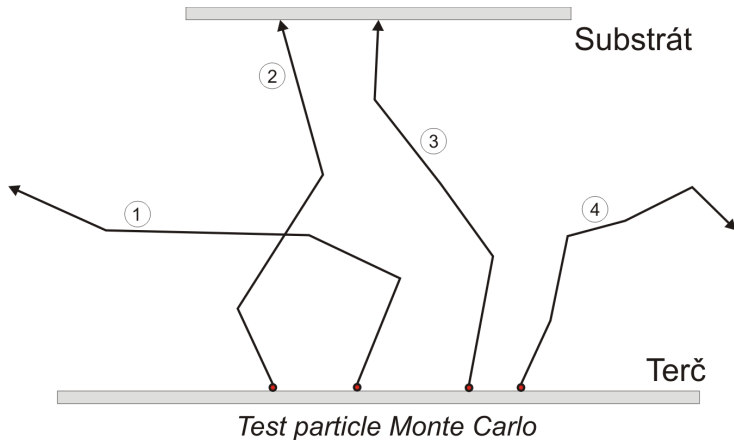
- *Multiple test particle*

Sledujeme celý soubor částic najednou, ale částice mezi sebou neinteragují. Výstupem může být i statistika z celého souboru částic v daném čase.

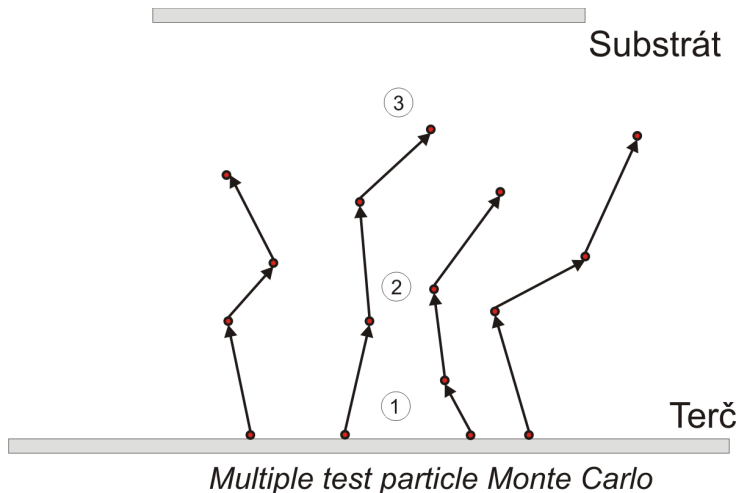
- *Direct simulation Monte Carlo*

Sledujeme soubor částic, částice mezi sebou interagují. V každém kroku jsou částice posunuty o stejný časový krok a jsou řešeny statisticky jejich srážky mezi sebou. Využívá se při simulaci proudění za nízkých tlaků.

Příklad – transport rozprášených částic

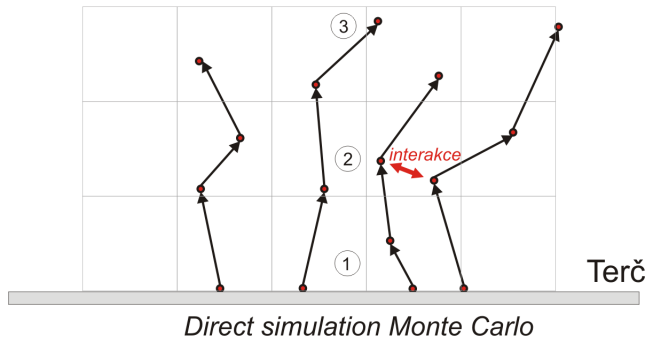


Příklad – transport rozprášených částic



Příklad – transport rozprášených částic

Substrát



Direct simulation Monte Carlo

- Potřeba řešit vzájemné srážky mezi simulovanými částicemi
- Pro vyhledávání potenciálních srážkových partnerů je simulační oblast rozdělena na buňky
- Je potřeba uchovávat a aktualizovat částice nacházející se v dané buňce

Vzorkování hustoty pravděpodobnosti

V Monte Carlo metodách potřebujeme získat hodnotu veličiny (vzorek), pro kterou známe hustotu pravděpodobnosti, s jakou nabývá veličina různých hodnot. Potřebujeme **generátor náhodných čísel**.

Nejčastěji používané **metody vzorkování hustoty pravděpodobnosti**

- 1 Přímá metoda (Inverze distribuční funkce)
- 2 *Rejection method*

Generování náhodných čísel

Existují generátory skutečně náhodných čísel, generovaných na základě reálných jevů, např. šum v elektrických obvodech, intervaly rozpady částic. V Počítačových programech se nejčastěji používají generátory **pseudonáhodných čísel**.

Generátor využívá **deterministický matematický algoritmus** generující sekvenci celých čísel na základě zadaného počátečního nastavení (**seed**). Ne všechny generátory jsou stejně dobré. Každý generátor se jednou začne opakovat a je potřeba aby tento cyklus byl co nejdelší a zároveň, aby bylo počítání náhodných čísel co nejméně náročné.

Programovací jazyky nebo matematický software obvykle mají nějakou implementaci generátoru pseudonáhodných čísel. Mezi dobré a hojně používané patří např. **Mersenne Twister**.⁹

¹¹<http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/m-mat/MT/emt.html>

Vzorkování rozdělení – přímá metoda

Hledáme vzorek x rozdělovací funkce $f(x) \in \langle a, b \rangle$. Vypočteme normalizovanou distribuční funkci $F(x)$

$$(4-2) \quad F(x) = \int_a^x f(x') dx'$$

s normalizační podmínkou

$$(4-3) \quad \int_a^b F(x) dx = 1.$$

Pak pro libovolné x platí $F(x) \in \langle 0, 1 \rangle$ a můžeme přiřadit $F(x) = r$, kde r je náhodné reálné číslo z intervalu $\langle 0, 1 \rangle$.

Vzorek x rozdělovací funkce je

$$(4-4) \quad x = F^{-1}(r).$$

Analyticky lze vyjádřit pouze pro funkce F , pro které lze vyjádřit **inverzní funkci**.

Vzorkování rozdělení – příklad

Popište postup získání vzorku jedné složky rychlosti částice v_1 víte-li, že má (jednorozměrnou) maxwellovskou rozdělovací funkcí

$$f(v_1) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{mv_1^2}{2k_B T} \right)$$

Vzorkování rozdělení – řešení příkladu

Pro zjednodušení zavedeme $\beta = m/(2k_B T)$, pak

$$(4-5) \quad f(v_1) = (\beta/\pi)^{\frac{1}{2}} \exp(-\beta v_1^2).$$

Použijeme **přímou** metodu. Integrací dostaneme distribuční funkci

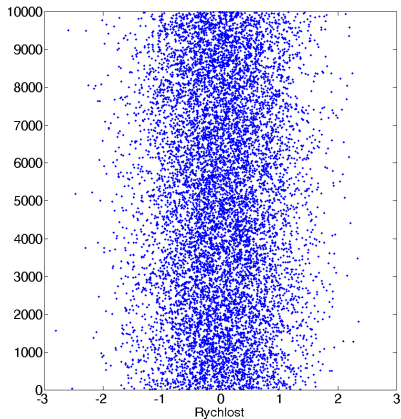
$$(4-6) \quad F(v_1) = \int_{-\infty}^{v_1} f(v'_1) dv'_1 = \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf}(\sqrt{\beta} v_1) \right].$$

Položíme $F(v_1) = r$, kde r je náhodné číslo rovnoměrně rozložené na intervalu $(0, 1)$ a vyjádříme v_1 (neboli hledáme inverzní funkci k F).

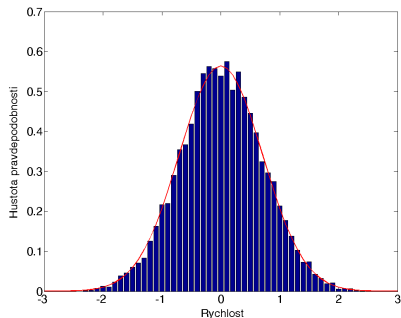
$$(4-7) \quad v_1 = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \operatorname{erf}^{-1}(2r - 1)$$

Vzorkování rozdělení – řešení příkladu

náhodné vzorky
rychlosti



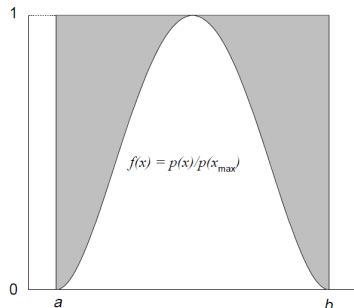
histogram rozdělení
a porovnání s teorií



Rejection method

Hledáme vzorek x rozdělovací funkce $f(x) \in \langle a, b \rangle$. Vypočteme $g(x) = f(x) / \max[f(x)]$.

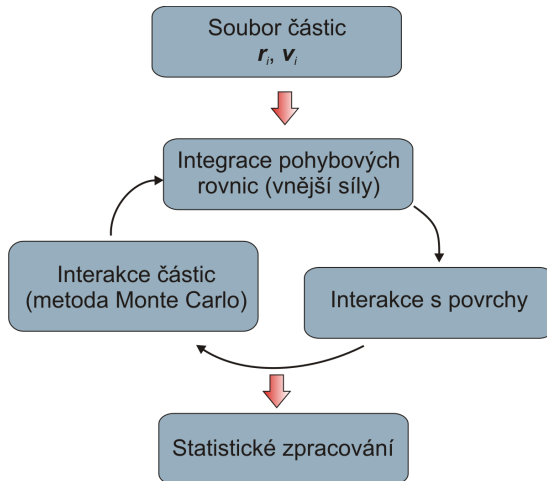
- 1 Pomocí náhodného čísla r_1 vygenerujeme $x = a + (b - a)r_1$
- 2 Testujeme $g(x) < r_2$, pokud je **splněno**, **přijmeme x jako náš vzorek**, pokud ne, opakujeme znovu bod 1.



Lze použít pro libovolnou rozdělovací funkci (i numericky zadanou). Pro „úzké a vysoké“ rozdělovací funkce je ale neefektivní – musíme mnohokrát vybírat vhodný vzorek a testovat.

Obecný algoritmus Monte Carlo simulace a jeho implementace

Algoritmus Monte Carlo simulace



Pohyb částic ve vnějším poli

Řešení pohybových rovnic částice v intervalu do další interakce.

$$(4-8) \quad m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = q [\mathbf{E}(\mathbf{r}_i) + \mathbf{v}_i \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_i)]$$

$$(4-9) \quad \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i$$

Pro numerické řešení se využívají obvyklé algoritmy pro řešení ODR (Euler, Verlet, Runge-Kutta) nebo, speciálně pro pohyb v magnetickém poli, Borisův algoritmus. **Pro neutrální částice je řešením rovnoměrný pohyb po přímce.**

$$(4-10) \quad \mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t)$$

$$(4-11) \quad \mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t$$

Výpočet pravděpodobnosti srážky

Z definice srážkového členu v Boltzmannově rovnici a definice účinného průřezu vyplývá pravděpodobnost srážky sledované částice v časovém intervalu $(0, \Delta t)$

$$(4-12) \quad P = \nu \Delta t,$$

kde $\nu = n\sigma(v_r)v_r$ je frekvence srážek. V případě více možných srážek se srážkové frekvence sčítají ($\nu_1 + \nu_2 + \dots$).

Musí platit $\Delta t\nu \ll 1$, jinak bychom mohli za časový krok Δt „propást“ více srážek.

Výpočet intervalu do srážky

Při implementaci metody *Test particle* je výhodné integrovat pohybové rovnice s proměnným časovým krokem. Musíme vědět, **kdy dojde k další srážce**. K tomu se používá pravděpodobnostní přístup (metoda Monte Carlo) – pomocí generátoru náhodných čísel zvolíme interval do následující srážky tak, aby odpovídal pravděpodobnosti srážky sledované částice (Poissonovo rozdělení).

$Q(t)$ je pravděpodobnost, že částice (začínající pohyb v čase $t = 0$) se v intervalu $(0, t)$ **nesrazí**. Platí

$$(4-13) \quad \frac{dQ}{dt} = -\nu Q.$$

Výpočet intervalu do srážky

Obecným řešením s počáteční podmínkou $Q(0)=1$ je

$$(4-14) \quad Q(\Delta t) = \exp\left(-\int_0^{\Delta t} \nu dt\right)$$

Pro ν konstantní dostaneme

$$(4-15) \quad Q(\Delta t) = \exp(-\nu \Delta t)$$

Pravděpodobnost srážky v čase $t < \Delta t$ (distribuční funkce)

$$(4-16) \quad P(\Delta t) = 1 - Q(\Delta t) = 1 - \exp(-\nu \Delta t).$$

Výpočet intervalu do srážky

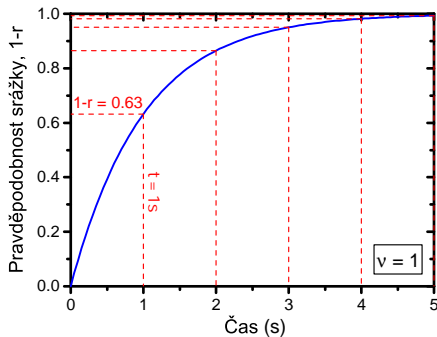
Obecný algoritmus

- 1 Zvolíme náhodné číslo $r \in (0, 1)$
- 2 Spočteme Δt z rovnice (přímá metoda)

$$(4-17) \quad 1 - Q(\Delta t) = r$$

Pro ν konstantní dostaneme

$$(4-18) \quad \Delta t = -\frac{1}{\nu} \ln(1 - r)$$



Výpočet intervalu do srážky

Výpočet v případě, kdy ν není konstantní je komplikovaný, viz integrál v (4–15). V praxi se používá *null-collision method*. Zavedeme maximální konstantní srážkovou frekvenci $\nu_{\max} = \max_t \sum_i \nu_i(t)$ a generujeme čas do další srážky podle rovnice (4–18).

Algoritmu *null-collision method*

- 1 $\Delta t_{\min} = -1/\nu_{\max} \ln(1 - r)$
- 2 $P_{\max} = 1 - \exp(-\nu_{\max} \Delta t)$
- 3 $P_i = 1 - \exp\left(-\int_0^{\Delta t} \nu dt\right)$, ke srážce i skutečně dojde s pravděpodobností $P_i/P_{\max} \leq 1$
- 4 Testujeme $P_i/P_{\max} \leq r_2$ (další náhodné číslo) – pokud splněno, provedeme srážku

Výpočet pravděpodobnosti srážky – DSMC

U DSMC metody hledáme počet srážek mezi N virtuálními částicemi (o váze w) ve sledované buňce (V_c). Pravděpodobnost srážky dvou částic je

$$(4-19) \quad P = w\sigma v_r \Delta t / V_c .$$

Tato pravděpodobnost je pro malé Δt velmi malá. Efektivnější postup je nejdříve stanovit počet srážek nezávisle na rychlosti jednotlivých částic a poté ověřit pro jednotlivé dvojice.

- 1 Pro každou buňku určit $P_{\max} = w(\sigma v_r)_{\max} \Delta t / V_c$
- 2 Počet srážek (dvojice částic) je $N_c = \frac{1}{2} N^2 P_{\max}$
- 3 Pro náhodně vybrané dvojice je pravděpodobnost uskutečnění srážky P/P_{\max}

Realizace srážky

- 1 Určíme **úhel rozptylu** $\Theta = f(r)$ – vzorkování diferenciálního účinného průřezu $\sigma_{\text{dif}}(v_r, \Theta)$ a rovinu srážky (úhel $\phi = 2\pi r_2$)

Příklady

- Pro model pevných koulí (HS)

$$\cos(\Theta) = 2r - 1$$

- Pro stíněný Coulombovský potenciál (srážka elektron–atom)

$$\cos(\Theta) = 1 - \frac{2r}{1 + 8\varepsilon(1 - r)}$$

Realizace srážky

Předpokládáme \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 , m_1 , m_2 , definujeme $\mathbf{g} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$, $g = |\mathbf{g}|$ a $g_{23} = \sqrt{g_2^2 + g_3^2}$

- 2 Určíme vektor \mathbf{k}_\perp definující rovinu srážky, např.

$$(4-20) \quad k_{\perp 1} = g_{23} \sin \Theta \cos \phi$$

$$(4-21) \quad k_{\perp 2} = -(g_1 g_2 \cos \phi + g g_3 \sin \phi) \frac{\sin \Theta}{g_{23}}$$

$$(4-22) \quad k_{\perp 3} = -(g_1 g_3 \cos \phi - g g_2 \sin \phi) \frac{\sin \Theta}{g_{23}}$$

- 3 Spočteme rychlosti po srážce (zákon zachování hybnosti a energie)

$$(4-23) \quad \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_1 - \frac{m_2}{m_1 + m_2} (\mathbf{g}(1 - \cos \Theta) + \mathbf{k}_\perp)$$

$$(4-24) \quad \mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_2 + \frac{m_1}{m_1 + m_2} (\mathbf{g}(1 - \cos \Theta) + \mathbf{k}_\perp)$$

Příklady využití Monte Carlo simulací v nízkotlakém plazmatu

Simulace transportu elektronů v elektrickém a magnetickém poli



ELSEVIER

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 421 (1999) 234–240

**NUCLEAR
INSTRUMENTS
& METHODS
IN PHYSICS
RESEARCH**
Section A

Monte Carlo simulation of electron drift and diffusion in counting gases under the influence of electric and magnetic fields

S.F. Biagi

Department of Physics, Oliver Lodge Laboratory, The University of Liverpool, Liverpool L69 7ZE, UK

Received 20 July 1998; received in revised form 26 August 1998

- Řešení Boltzmannovy rovnice (jiný přístup než Bolsig+)
- Výpočet mobility a koeficienty difuze v závislosti na E/N

Monte Carlo simulation of ionization in a magnetron plasma

J. E. Miranda, M. J. Goeckner, J. Goree, and T. E. Sheridan

Department of Physics and Astronomy, The University of Iowa, Iowa City, Iowa 52242-1410

(Received 22 August 1989; accepted 20 November 1989)

A Monte Carlo simulation of electrons emitted from the cathode of a planar magnetron is tested against experiments that were reported by Wendt, Lieberman, and Meuth [*J. Vac. Sci. Technol. A* **6**, 1827 (1988)] and by Gu and Lieberman [*J. Vac. Sci. Technol. A* **6**, 2960 (1988)]. Comparing their measurements of the radial profile of current and the axial profile of optical emission to the ionization profiles predicted by the model, we find good agreement for a typical magnetic field strength of 456 G. We also find that at 456 G the product of the average number of ionizations $\langle N_i \rangle$ and the secondary electron emission coefficient γ is ~ 1 . This indicates that secondary emission contributes significantly to the ionization that sustains the discharge. At 171 G, however, $\langle N_i \rangle \gamma \ll 1$, revealing that cathode emission is inadequate to sustain a discharge at a low magnetic field.

- Výpočet počtu iontů generovaných sekundárními elektrony v magnetickém poli magnetronu
- Vliv intenzity magnetického pole

Monte Carlo Simulation of Ions in a Magnetron Plasma

Matthew J. Goekner, John A. Goree, and Terrence E. Sheridan, Jr.

Abstract—A simulation of ion dynamics in a planar magnetron discharge is performed using separate three-dimensional Monte Carlo codes for the electrons and ions. First, to predict the ionization sites, the orbits of energetic electrons are simulated for prescribed dc electric and magnetic fields, subject to collision with neutrals at random intervals. In the second code the predicted sites are used as the starting positions of ion trajectories. The ion trajectories are followed taking into account collisions with neutrals, turbulent electric fields, and the dc fields. We report results for ion impact on the cathode and substrate anode surfaces (energy, angle, and spatial distribution) and ion parameters in the plasma (density, drift velocity, random energy, and transit time). To test these results we compare them to several previously reported experiments, and in most cases find good agreement. These simulation methods not only are useful for gaining an understanding of magnetron plasma operation, but may also aid in designing magnetrons.

simulation rather than a continuum model. Complicated trajectories dominate magnetron trajectories are calculated assuming collisionless electric and magnetic fields, plus a turbulent electric field. In the next section we describe the magnetron discharge in detail the assumptions made in the simulation. In the present simulation predictions of ion density and impact angle on the electrodes. A comparison of simulation and experimental measurements of ion density, energy [11], and transit time [12]. We also discuss the electric field and ion-neutral collisions and ion trajectories while the influence of turbulent

Simulace sekundárních elektronů a iontů v magnetronu

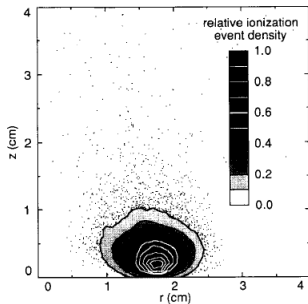


Fig. 11. Ionization event density contours. This data from the electron simulation shows that the ionization events are concentrated near $r = 1.7$ cm, $z = 0.25$ cm, which is closer to the cathode than the ion density peak in Fig. 10. This difference is attributable to the transit time of the ions, which is longer in the presheath ($z > 0.5$ cm) than in the cathode sheath.

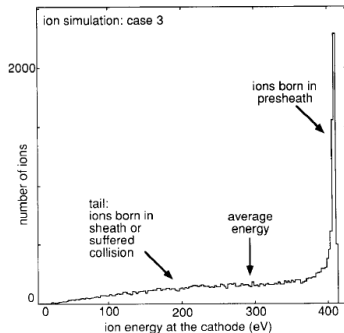


Fig. 4. Energy distribution of ion impact at the cathode. A large fraction of the ions are born in the sheath or lose energy in a collision; these strike the cathode with less than the maximum energy. The mean impact energy is 293.02 ± 1.34 eV for a cathode bias of -400 V.



Three-dimensional Monte Carlo simulation of sputtered atom transport in the process of ion-plasma sputter deposition of multicomponent thin films

P.K. Petrov^{a,*}, V.A. Volpyas^a, R.A. Chakalov^b

^aDepartment of Electron Ion and Vacuum Technology, Electrotechnical University, 5, Prof. Popov Str., 197376 St. Petersburg, Russia

^bInstitute of Electronics, Bulgarian Academy of Sciences, 72, Tzarigradsko Chaussee, 1784 Sofia, Bulgaria

Received 30 December 1997; accepted 3 July 1998

Available online at www.sciencedirect.com



ELSEVIER

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 243 (2006) 313–319



www.elsevier.com/locate/nimb

Monte Carlo simulation of the transport of atoms in DC magnetron sputtering

S. Mahieu ^{*}, G. Buyle, D. Depla, S. Heirwegh, P. Ghekiere, R. De Gryse

Ghent University, Department of Solid State Sciences, Krijgslaan 281/S1, 9000 Ghent, Belgium

Received 13 July 2005; received in revised form 5 September 2005

Available online 9 November 2005

Využití v hybridních modelech

I ve výbojích, které lze dobře (většinou) popsat pomocí fluidního modelu je nutné sledovat energetické částice, např. sekundární elektrony, ionty. Pak mluvíme o hybridním modelu kombinujícím více simulačních metod.

Simulace obsahuje **periodicky se opakující kroky**

- 1 Monte Carlo – transport rychlých částic (elektrony ionty) + prostorové rozložení jejich reakcí
- 2 Fluidní model – transport těžkých částic a pomalých elektronů + elektrické pole

Mark J Kushner. "Hybrid modelling of low temperature plasmas for fundamental investigations and equipment design". In: *J. Phys. D: Appl. Phys.* 42.19 (2009), s. 194013. ISSN: 0022-3727. DOI: 10.1088/0022-3727/42/19/194013

Program SIMTRA

Simulation of Metal Transport

<http://draftugentbe.webhosting.be/index.php?p=137>

- Simulace transportu rozprášených atomů v magnetronovém výboji
- Předpokládá **konstantní koncentraci pracovního plynu** v komoře
- **Výhody**: grafické uživatelské rozhraní, definice prakticky libovolné geometrie komory
- **Nevýhody**: neúplná dokumentace, konstantní koncentrace pracovního plynu, pouze jeden rozprašovaný terčový materiál
- **Výstupy**: počet atomů dopadlých na „substrát“, úhlové a energiové rozdělení atomů a další

Úlohy k procvičení

- 1 Nainstalujte (rozbalte) si program SIMTRA. Seznamte se s grafickým uživatelským rozhraním. V adresáři programu je dispozici manuál v pdf a vzorové vstupní soubory.
- 2 V programu vytvořte válcovou komoru (poloměr 20 cm, délka 30 cm). Pracovní plyn je Ar o tlaku p . Do komory umístěte kruhový magnetron (stačí povrch – terč) o poloměru 6 cm. Rozprašovaný materiál terče je hliník, jako profil rozprašování použijte přiložený soubor *racetrackGaussian6cm.txt*. Ve vzdálenosti x od terče umístěte kruhový substrát o poloměru 3 cm. Ostatní parametry výpočtu zvolte dle vlastního uvážení.
- 3 Vyberte si jednu z následujících variant:
 - a) pro konstantní tlak Ar, $p = 1$ Pa, měňte vzdálenost terč–substrát, x , v rozmezí 5 – 20 cm.
 - b) pro konstantní vzdálenost terč–substrát, $x = 10$ cm, měňte tlak Ar, p , v rozsahu 0.5 – 5 Paa proveďte alespoň 5 výpočtů ve vybrané sérii.
- 4 Pro každou variantu určete podíl atomů Al, které dopadnou na substrát, z celkového počtu rozprašených atomů. Získanou závislost znázorněte graficky.

5 Particle in Cell/Monte Carlo simulace

- 1 Teorie
- 2 Aplikace, software
- 3 Cvičení – ukázka programu XOOPIC

Motivace

V úvodní přednášce jsme nastínili, co vše je potřeba vzít v úvahu při sestavení simulace plazmatu – zejména pohyb částic, interakce v objemu a na površích, elektromagnetické pole.

Dosud jsme popisovali metody, které obvykle řešily pouze část celého problému, např. pouze pohyb jednoho typu částic (single particle Monte Carlo), rozdělovací funkci elektronů, nebo řešily úlohu komplexně, ale se značným zjednodušením určitých detailů (globální modely, které neberou v potaz prostorové rozložení částic).

Cílem je samozřejmě získat co nejpřesnější a nejucelenější popis (model) plazmatu. V této přednášce ukážeme metodu Particle In Cell/Monte Carlo (PIC/MC, nebo jen PIC), která popisuje plazma uceleně (v angl. *self-consistent simulation*). Přitom by mělo být i vidět, že tato metoda je oproti předchozím výrazně výpočetně náročnější a nelze ji tedy univerzálně použít na všechny řešené problémy.

Charakteristika metody

- Řešení Boltzmannovy rovnice pro nabité částice spolu s rovnicemi pro elmag. pole
- Diskretizace pomocí souboru „virtuálních“ částic (*superparticles*) – stejně jako u DSMC metody
- Statistický popis interakcí metodou Monte Carlo
- Řešení elektromagnetického pole
 - Elektrostatický případ: \mathbf{B} konstantní, \mathbf{E} z Poissonovy rovnice
 - Elektromagnetický případ: výpočet \mathbf{E} i \mathbf{B}

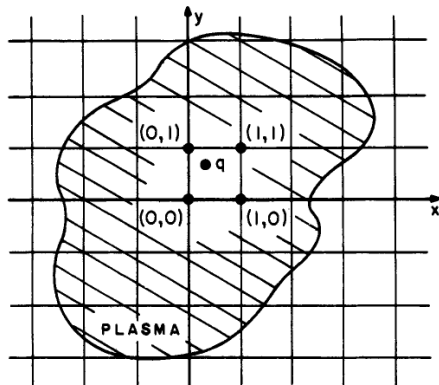
Více informací:

C K Birdsall. "Particle-in-cell charged-particle simulations, plus Monte Carlo collisions with neutral atoms, PIC-MCC". In: *IEEE Trans. Plasma Sci.* 19.2 (1991), s. 65–85. ISSN: 0093-3813. DOI: 10.1109/27.106800

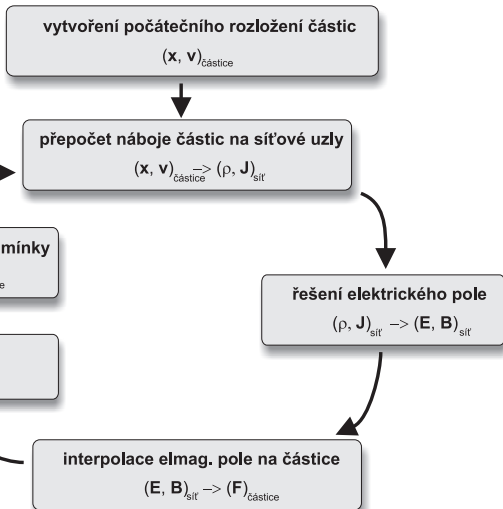
C K Birdsall a A B Langdon. *Plasma physics via computer simulation*. Bristol: IOP Publishing, 1991

Výpočetní síť

- Síť se využívá pro výpočet hustoty náboje ρ a proudové hustoty \mathbf{J}
- Nabitá částice v buňce přispívá svým nábojem k okolním uzlům sítě
- ρ a \mathbf{J} vystupují v (Maxwellových) rovnicích pro výpočet \mathbf{E} a \mathbf{B}
- Síla působící na nabitou částici se interpoluje z hodnot pole na okolních uzlech sítě



Algoritmus metody



Algoritmus metody

- Soubor N částic pro každý simulovaný typ (parametry m , q), matice \mathbf{r}_i a \mathbf{v}_i
- Matice ρ_j , \mathbf{E}_j , \mathbf{B}_j pro uzly sítě
- Cyklus výpočtu se opakuje s konstantním časovým krokem Δt
- Interakce částic mezi sebou nebo s homogenním pozadím jsou řešeny metodou MC stejně jako Monte Carlo simulací (viz přednáška 4)

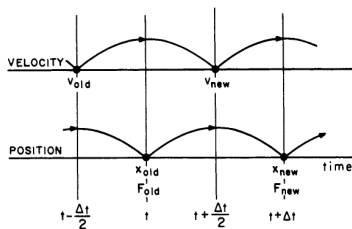
Integrace pohybových rovnic

- Stejný problém u všech částicových metod

$$(5-1) \quad m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = q[\mathbf{E}(\mathbf{r}_i) + \mathbf{v}_i \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_i)]$$

$$(5-2) \quad \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i$$

- U PIC potřebujeme rychlý algoritmus, časový krok je malý (viz frekvence plazmatu), nároky na paměť relativně vysoké – stačí metoda nízkého řádu
- Například **leap-frog method**



Řešení rovnic elektromagnetického pole

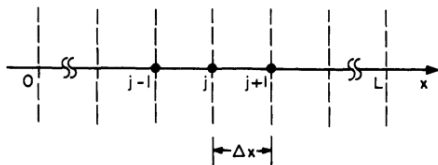
V elektrostatickém případě pouze **Poissonova rovnice**

$$(5-3) \quad \nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$

Numerické řešení na výpočetní síti (její uzly) lze realizovat různými metodami, např. metoda konečných diferencí, metoda konečných prvků, rychlá Fourierova transformace (FFT).

Příklad konečných diferencí v 1D

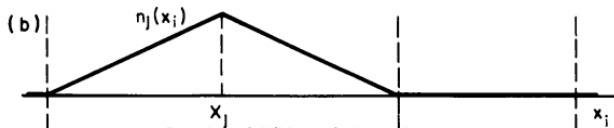
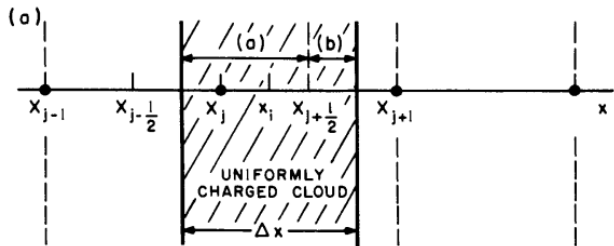
$$(5-4) \quad \frac{\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1}}{(\Delta x)^2} = -\frac{\rho_j}{\epsilon_0}$$



Interpolace veličin mezi částicemi a uzly sítě

Pro výpočet elmag. pole je potřeba přepočítat příspěvky náboje jednotlivých částic na uzly sítě.

Nejčastěji se používá **lineární interpolace na ukolní uzly** – v 1D případě naznačeném níže částice na pozici x_i přispívá svým nábojem na dva okolní uzly X_j a X_{j+1} úměrně tomu, jak je ke nim blízko. Částice lze chápat jako oblaky náboje s rozměrem Δx .



Interpolace veličin mezi částicemi a uzly sítě

Při integraci pohybových rovnic pro částice naopak potřebujeme hodnoty elektrického pole spočítané na uzlech sítě interpolovat do místa, kde se nachází částice. Opět se používá nejčastěji lineární interpolace.

Pro 1D případ, kdy částice i je na souřadnici x_i , uzly sítě mají souřadnice X_j ($j = 1, 2, \dots, N$) a platí $X_j \leq x_i \leq X_{j+1}$ a $\Delta x = X_{j+1} - X_j$:

- lineární interpolace náboje částic na okolní uzly sítě

$$(5-5) \quad q_j = q_c \frac{X_{j+1} - x_i}{\Delta x}$$

$$(5-6) \quad q_{j+1} = q_c \frac{x_i - X_j}{\Delta x}$$

- lineární interpolace elektrického pole na pozici částice

$$(5-7) \quad E(x_i) = \frac{X_{j+1} - x_i}{\Delta x} E_j + \frac{x_i - X_j}{\Delta x} E_{j+1}$$

Stabilita a přesnost algoritmu

- Omezený počet částic v buňce sítě a omezená velikost buňky vede na nepřesnosti – numerický šum
- Šumu se nelze vyhnout, ale musí být rozumně malý → požadavky na počet částic v buňce, velikost buňky a časový krok
- Během simulace se z principu algoritmu **nezachovává celková energie částic** – tzv. numerické zahřívání (angl. *numerical heating*)

Stabilita a přesnost algoritmu – limity metody

- Algoritmus *leap-frog* pro integraci pohybových rovnic je stabilní pro $\omega\Delta t < 2$, kde ω je nejvyšší frekvence částic v plazmatu (plazmová frekvence ω_{pe} případně gyrační frekvence ω_{ce})
- Rozumná volba pro minimální kumulaci nepřesností je

$$(5-8) \quad \omega\Delta t \approx 0.2$$

- Částice by neměly během jednoho cyklu přeskočit více buněk, to vede na numerické zahřívání

$$(5-9) \quad \frac{v_i\Delta t}{\Delta x} \leq 1$$

- Síť musí být dostatečně jemná abychom mohli rozlišit prostorové změny potenciálu (např. přielektrokové oblasti)

$$(5-10) \quad \Delta x \leq \lambda_D$$

Stabilita a přesnost algoritmu – limity metody

Plazmová frekvence

$$(5-11) \quad \omega_{pe} = \left(\frac{e^2 n_e}{\epsilon_0 m_e} \right)^{\frac{1}{2}} \propto n_e^{1/2}$$

Debyeova délka

$$(5-12) \quad \lambda_{De} = \left(\frac{\epsilon_0 k_B T_e}{e^2 n_e} \right)^{1/2} \propto n_e^{-1/2}$$

Závěr: S rostoucí koncentrací plazmatu výrazně rostou výpočetní nároky – je nutno zmenšovat velikost sítě i zkracovat časový krok.

Příklady využití metody v praxi

- Studium fundamentálních procesů v plazmatu – vlny v plazmatu, nestability
- Interakce laser-plazma
- Urychlování elektronů a iontů
- Ionosféra, plazma ve vesmíru
- Výboje za sníženého tlaku – výpočetní nároky limitují velikost simulované oblasti



Detailed structure of dc glow discharges — effects of pressure, applied voltage, and γ -coefficient

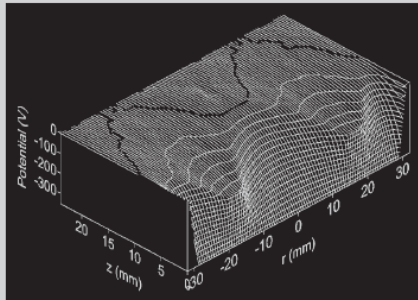
K Nanbu and J Kageyama, *Institute of Fluid Science, Tohoku University Sendai 980-77, Japan*

By use of the Particle-in-Cell/Monte-Carlo method, structures of dc glow discharges in argon are examined for p_0 (gas pressure) = 26–74 mTorr, V_0 (applied voltage) = 500–1000 V, and γ (secondary electron emission coefficient) = 0.1–0.3. A self-consistent simulation is performed by using a set of the most accurate collision cross sections. Recourse to approximations and assumptions that are not necessarily valid is avoided as far as possible. The effects of p_0 , V_0 , and γ on the discharge are systematically examined. In the bulk plasma there do exist high-energy beam electrons. Although the number of these electrons is very small, their contribution to the mean electron energy is appreciable. A time-independent spatial oscillation of plasma density is found for some discharge conditions. For the same conditions similar oscillation of mean ion velocity and excitation rate are observed. Copyright © 1996 Elsevier Science Ltd.

Simulace dc magnetronového výboje

Summary: A 2d3v numerical model of a DC sputter magnetron is presented. The model is fully self-consistent and kinetic. Based on the Particle-in-Cell/Monte Carlo Collisions technique it includes modules for the gas heating and the diffusion transport of the sputtered atoms. An external electric circuit is incorporated to achieve the calculation of the cathode voltage in a self-consistent manner, as well as the simulation of the constant current regime. The model is applied to a laboratory magnetron operated in argon.

Calculated distribution of the electric potential, V , at $p = 10$ mTorr. The white line corresponds to $V = 0$ V.

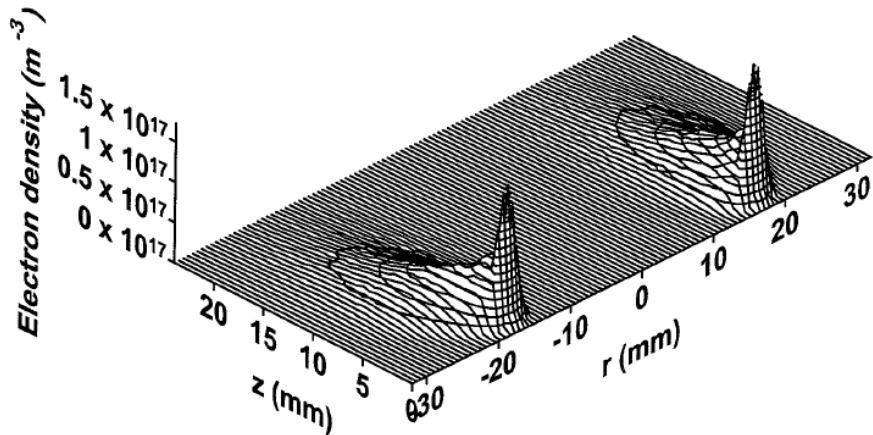


PIC – MCC Numerical Simulation of a DC Planar Magnetron

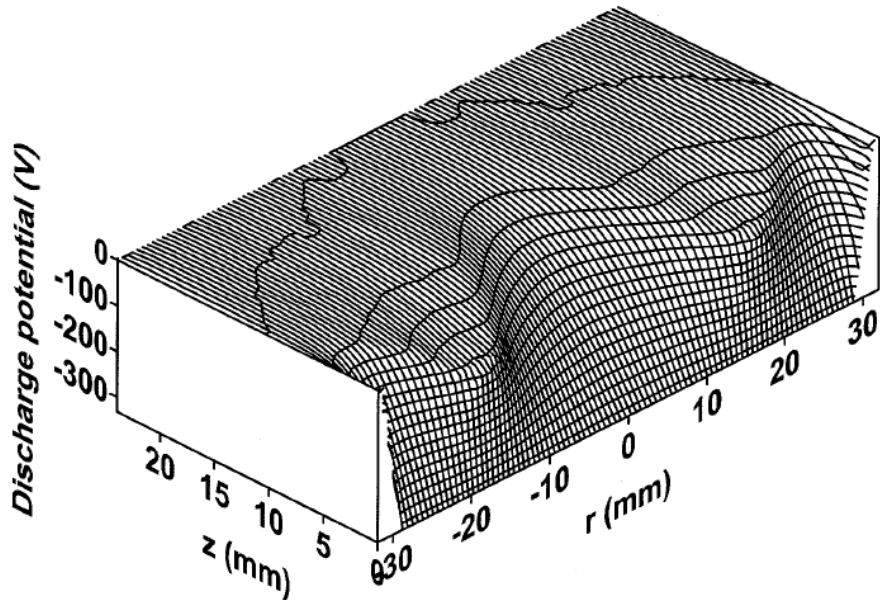
Ivan Kolev, Annemie Bogaerts*

Research group PLASMANT, Department of Chemistry, University of Antwerp, Universiteitsplein 1, 2610 Wilrijk, Belgium
E-mail: ivan.kolev@ua.ac.be

Hustota elektronů v magnetronovém výboji



Potenciál plazmatu v magnetronovém výboji



Software

Komerční

- VSim – <https://www.txcorp.com/>
- LSP – <http://www.lpsuite.com/LSP/index.html>

Volně dostupné

- XOOPIC, XPDP – Plasma Theory and Simulation Group, University of Berkeley, <http://ptsg.egr.msu.edu>

XOOPIC

- Objektově orientovaný PIC/MC software
- 2d3v – pouze 2d geometrie (plošná nebo válcově symetrická), ale rychlosti ve 3d
- Elektrostatická i elektromagnetická varianta
- Real-time grafický výstup

Praktická ukázka řešení úloh v programu XOOPIC

- Svazek elektronů (pohyb v magnetickém poli)
- Ambipolární difuze ve válcové geometrii
- DC doutnavý výboj
- RF doutnavý výboj