MASARYKOVA UNIVERZITA
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA
ÚSTAV FYZIKÁLNÍ ELEKTRONIKY

Diplomová práce

BRNO 2018 MARTIN KUBEČKA

MASARYKOVA UNIVERZITA
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA
ÚSTAV FYZIKÁLNÍ ELEKTRONIKY

Modelování procesů při výkonové modulaci plazmové trysky

Diplomová práce

Martin Kubečka

Vedoucí práce: prof. Mgr. Vít Kudrle, Ph.D. **Brno 2018**

Bibliografický záznam

Autor	Martin Kubečka Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita Ústav fyzikální elektroniky
Název práce	Modelování procesů při výkonové modulaci plazmové trysky
Studijní program	Fyzika
Studijní obor	Fyzika plazmatu
Vedoucí práce	prof. Mgr. Vít Kudrle, Ph.D.
Akademický rok	2017/2018
Počet stran	50+IX
Klíčová slova	plazma, mikrovlnný výboj, surfatron simulace, modelování plazmatu, Comsol Multiphysics 5.2

Bibliographic entry

Author	Martin Kubečka Faculty of Science, Masaryk University Department of physical electronics
Title of Thesis	Modelling of processes during power modulation of plasma jet
Degree Programme	Physics
Field of Study	Plasma physics
Supervisor	prof. Mgr. Vít Kudrle, Ph.D.
Academic Year	2017/2018
Number of Pages	50+IX
Keywords	plasma, microwave discharge, surfatron simulations, plasma modelling, Comsol Multiphysics 5.2

ABSTRAKT

Tato diplomová práce se zabývá teoretickým popisem a studiem mikrovlnného plazmatu udržovaného pomocí povrchové vlny s použitím numerického modelu, který byl v rámci této práce vyvinut. Jedná se o self-konzistentní nelineární model, který propojuje elektromagnetické pole, proudění plynu, přenos tepla a transportní rovnice popisující dvouteplotní plazma. Výsledky modelu byly porovnány s některými dostupnými experimentálními daty.

ABSTRACT

This diploma thesis addresses theoretical description and study of the microwave plasma sustained by a surface wave. Numerical model was developed within the work on this thesis as well. This self-consistent nonlinear model contains electromagnetic field, fluid flow, heat transfer and transport equations describing two-temperature plasma. The results of this model were compared with some available experimental data.

MASARYKOVA UNIVERZITA
Přírodovědecká fakulta

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

Akademický rok: 2017/2018

Ústav: Ústav fyzikální elektroniky

Student: Bc. Martin Kubečka

Program: Fyzika

Obor: Fyzika plazmatu

Ředitel *Ústavu fyzikální elektroniky* PřF MU Vám ve smyslu Studijního a zkušebního řádu MU určuje diplomovou práci s názvem:

Název práce: Modelování procesů při výkonové modulaci plazmové trysky

Název práce anglicky: Modelling of processes during power modulation of plasma jet

Oficiální zadání:
Vytvořte v COMSOLu numerický model mikrovlnného výboje za atmosférického tlaku s uvážením časově proměnného budícího výkonu. Model by měl selfkonzistentně zahrnovat elektromagnetické pole, proudění plynu, přenos tepla a vybrané elementární kinetické procesy v argonovém plazmatu. Geometrie problému i pracovní podmínky budou podobné jako u reálného zařízení, využívaného v laboratoři.

Literatura:
HEALD, M. A. a C. B. WHARTON. *Plasma diagnostics with microwaves*. New York: John Wiley & sons, 1965. xvii, 452.

LIEBERMAN, M. A. a Allan J. LICHTENBERG. *Principles of plasma discharges and materials processing*. 2nd ed. Hoboken, N.J.: John Wiley & Sons, 2005. xxxv, 757. ISBN 0471720011.

Jazyk závěrečné práce: čeština

Vedoucí práce: prof. Mgr. Vít Kudrle, Ph.D.

Datum zadání práce: 27. 10. 2017

V Brně dne: 7. 11. 2017

Souhlasím se zadáním (podpis, datum):

.....	.....	.....
Bc. Martin Kubečka	prof. Mgr. Vít Kudrle, Ph.D.	prof. RNDr. Mirko Černák, CSc.
student	**vedoucí práce**	**ředitel Ústavu fyzikální elektroniky**

PODĚKOVÁNÍ

V první řadě bych chtěl vyjádřit svůj veliký obdiv s naprosto neuvěřitelnou trpělivostí a odvahou mého vedoucího prof. Mgr. Víta Kudrleho, Ph.D., který mi dal možnost se bez mých jakýchkoliv předcházejících zkušeností s numerickými simulacemi pustit do tohoto oboru.

Jmenovitě bych pak rád poděkoval zejména paní Ireně Mitášové ze studijního oddělení, která i v temných časech mého studia nade mnou vždy držela svá ochranná křídla. V neposlední řadě bych velice rád poděkoval své rodině a přátelům, kteří kolem mě vytváří natolik kreativní a plodné prostředí, jež mohlo dát za vznik této práci.

PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že jsem svoji diplomovou práci vypracoval samostatně s využitím informačních zdrojů, které jsou v práci citovány.

Brno 16. května 2018

. . . . . .

Martin Kubečka

OBSAH

1 Obecný úvod **1**
1.1 Úvod a motivace . . . 1
1.2 Přehled kapitol . . . 1
1.3 Mikrovlnně indukované plazma . . . 2
1.4 Metody simulace plazmatu . . . 3

2 Geometrie modelu **4**
2.1 Geometrie . . . 4
2.2 2D adaptace geometrie . . . 5

3 Fyzikální modelování **7**
3.1 Elektromagnetické pole - Maxwellovy rovnice . . . 7
3.1.1 Komplexní vodivost a relativní permitivita plazmatu . . . 7
3.1.2 Povrchové vlny . . . 9
3.1.3 Elektromagnetické pole - Okrajové podmínky . . . 10
3.2 Rovnice fluidního popisu plazmatu . . . 10
3.2.1 Od kinetické teorie k fluidní aproximaci . . . 10
3.2.2 Drift difúzní teorie . . . 11
3.2.3 Drift difúzní rovnice - Okrajové podmínky . . . 14
3.2.4 Transportní rovnice těžkých částic . . . 14
3.3 Přenos tepla . . . 16
3.3.1 Přenos tepla - Okrajové podmínky . . . 18
3.4 Proudění plynu . . . 18
3.4.1 Proudění plynu - Okrajové podmínky . . . 19
3.5 Self-konzistence modelu . . . 20
3.6 Plazmochemické reakce v argonu . . . 22

4 Metoda výpočtu **24**
4.1 Metoda konečných prvků . . . 24
4.2 Stabilizace silně nelineárních modelů . . . 26
4.3 Výkonová modulace . . . 29

5 Výsledky **30**
5.1 Ustálený stav . . . 30
5.2 Modulační frekvence: Sinus 900 Hz . . . 33
5.2.1 Vývoj teploty během jedné periody . . . 33
5.2.2 Proudění plynu ve výboji s modulovaným výkonem . . . 35
5.3 Hustoty částic argonového plazmatu s modulovaným výkonem . . . 36
5.3.1 Hustota argonových neutrálů . . . 37
5.3.2 Excitované stavy argonových atomů a molekul . . . 38
5.3.3 Ionizované stavy argonových atomů a molekul . . . 40
5.3.4 Hustota elektronů . . . 40

5.3.5 Porovnání hodnot ustálené simulace a výkonové modulace 40

6 Závěr a diskuze **47**

Literatura **48**

KAPITOLA

OBECNÝ ÚVOD 1

1.1 Úvod a motivace

Tato práce prezentuje numerický model mikrovlnného výboje za vyšších tlaků (blízké atmosférickému) s uvážením časově proměnného budícího výkonu. Cílem této práce nebylo jen vytvořit model mikrovlnné plazmové trysky za požadovaných podmínek a částečné porovnání výsledků s teoretickými či experimentálními hodnotami, které publikovaly různé vědecké skupiny, ale zároveň se jedná o stručný vhled do problematiky numerických simulací a částečný návod na řešení nelineárních a multi-fyzikálních plazmových modelů.

Mikrovlnně indukované plazma (MIP) se v posledních padesáti letech stalo předmětem mnoha teoretických a experimentálních studií. Tyto práce měly za úkol přispět větší či menší měrou k pochopení procesů a chování mikrovlnného plazmatu s následnou možností aplikace těchto znalostí v technologickém odvětví. Mikrovlnné plazma je předmětem tohoto zájmu především díky schopnosti produkovat velké hustoty nabitých a excitovaných částic. Oproti experimentálním studiím [1] existuje s ohledem na znalosti autorovy problematiky jen pár 2D numerických modelů, které by popisovaly self-konzistentní model mikrovlnně indukovaného plazmatu za tlaků blízko atmosférickému [2–4]. Modely popisující výkonovou modulaci pak často bývají pro kapacitně vázané výboje [5,6]. Jedním z hlavních důvodů poměrně malého počtu numerických simulací zabývajících se touto problematikou je fakt, že se jedná o popis self-konzistentního plazmatu zahrnujícím popis šíření elektromagnetického pole, řešení transportních rovnic, proudění a přenosu tepla, čímž se jedná o velice nelineární model.

2D osově-symetrický model mikrovlnné trysky prezentovaný v této práci byl počítán pomocí simulačního programu Comsol Multiphysics [7], který využívá metodu konečných prvků a BOLSIG+ [8]. Výsledky byly zpracovány pomocí programu Comsol, open-source programu ParaView. [9] a skriptů napsaných v Pythonu pomocí knihoven numPy, sciPy a matplotlib.

1.2 Přehled kapitol

Struktura textu této práce je sestavena tak, aby přímo korespondovala s posloupností kroků, které jsou potřeba k sestavení numerického modelu mikrovlnné plazmové trysky. Obecný úvod má za úkol stručně seznámit čtenáře s problematikou mikrovlnného plazmatu a numerických simulací, kterými se tato práce věnuje.

Dále následuje trojice kapitol zabývající se zde prezentovaným numerickým modelem: Geometrie, Fyzikální modelování a Metoda výpočtu. První z této trojice kapitol popisuje geometrii mikrovlnné plazmové trysky - surfatronu, historii zařízení a 2D adaptaci geometrie. Následující kapitola Fyzikální modelování se zabývá relevantní fyzikou simulace mikrovlnného plazmatu, která zahrnuje popis elektromagnetického pole s ohledem

na povrchové vlny, transportní rovnice dvou teplotního modelu plazmatu, vybrané kinetické procesy argonového plazmatu za vyšších tlaků (atmosférický), rovnice proudění a přenosu tepla. Poslední kapitola z této trojice prezentuje metody výpočtu, stručný popis metody konečných prvků a techniky pro zlepšení konvergence nelineárních simulací v prostředí Comsol Multiphysics.

V kapitole 5 autor prezentuje výsledky numerických simulací a porovnává je s některými experimentálními daty. Následně text práce uzavírá kapitola Závěr a diskuze, která komentuje a zamýšlí se nad dosaženými výsledky numerického modelu mikrovlnné plazmové trysky.

1.3 Mikrovlnně indukované plazma

Plazma můžeme definovat jako více či méně ionizovaný plyn vykazující kolektivní chování. Obsahuje různě nabité částice, které kolem sebe vytvářejí vlastní efektivní prostorový náboj opačného znaménka. Díky dalším přítomným volným nosičům náboje budou Coulombovské interakce odstíněny od vzdálenosti zvané Debyeova délka [10]

$$\lambda_{\mathrm{D}} = \left(\frac{\varepsilon_0 k_{\mathrm{B}} T_{\mathrm{e}}}{n_{\mathrm{e}} e^2} \right)^{1/2} \tag{1.1}$$

kde ε_0 značí permitivitu vakua, k_{B} je Boltzmannová konstanta, e je elementární náboj a n_{e} a T_{e} značí elektronovou hustotu a teplou. Debyeova délka je důležitou určující veličinou pro definici plazmatu. Je potřeba aby rozměry plazmatu byly daleko větší než je právě Debyova délka a je nezbytné aby v tzv. Debyově kouli, která je úměrná $n_{\mathrm{e}}\lambda_{\mathrm{D}}^3$, byl dostatek elektronů. Plazma by také mělo být kvazineutrální, což znamená, že celkový náboj by měl být nulový. Tyto tři vlastnosti jsou často označovány jako první tři kritéria plazmatu [11, 12].

Pokud se v plazmatu objeví nějaké nestability a lokální rovnovážný stav se naruší, prostorový náboj částic způsobí přirozené oscilace, které se snaží rovnovážný stav navrátit. Tento kolektivní pohyb elektronů se nazývá plazmová frekvence, kterou lze vyjádřit jako

$$\omega_{\mathrm{pe}} = \left(\frac{n_{\mathrm{e}} e^2}{m_{\mathrm{e}} \varepsilon_0} \right)^{1/2} \tag{1.2}$$

kde m_{e} je hmotnost elektronů. Průměrný čas mezi srážkami elektronů s neutrály musí být však menší než přirozená frekvence plazmatu, aby se plazma nechovalo jako neutrální plyn řízen hydrodynamickými silami [11].

Mikrovlnně indukované plazma (MIP) je udržováno elektrony, které získávají svoji energii díky interakci s elektromagnetickým polem, které kmitá s frekvencemi v rozmezí desítek MHz až po stovky GHz [3]. Elektrony oscilují s frekvencí elektromagnetického pole a srazí-li se s těžší částicí, získají obě tyto částice energii.[1]

[1] Elektromagnetickému poli s frekvencí 2.45 GHz odpovídá změna polarity za zhruba 0.4 ns. Během takto krátké doby jsou na tyto změny schopny reagovat pouze elektrony, díky jejich malé hmotnosti, nicméně tímto způsobem nejsou schopny za jednu půlperiodu získat dostatečně velkou energii, kterou potřebují na excitaci či ionizaci ostatních částic. Díky elastickým srážkám se však dostávají mimo fázi elektromagnetického pole a tímto efektem získávají elektrony energii.

Všechny elektrony však nepřispívají k udržení plazmatu stejnou měrou, neboť některé z nich (zvláště ty z konce rozdělovací funkce rychlosti elektronů) můžou zejména za ionizaci či excitaci neutrálních částic plynu. Je na místě poznamenat, že rozdělovací funkce rychlosti elektronů není v případě laboratorního plazmatu obecně Maxwellovská [13].

1.4 Metody simulace plazmatu

Modelování plazmatu se v posledních dekádách stává velice důležitým a užitečným nástrojem pro pochopení některých fyzikálních dějů, stejně tak jako k diagnostice v případech, kdy je samotné experimentální měření velice náročné či drahé [14]. Stává se tak hlavně díky zvýšení výpočetního výkonu a zlepšení numerických technik potřebných k popisu komplexních dějů.

K simulovaní plazmatu se většinou využívá jeden ze tří hlavních přístupů a těmi jsou: **kinetický**, **fluidní** a **hybridní**.

Kinetický popis je založen typicky založen na popisu pohybu částic, ale může zahrnovat i řešení Boltzmanovy rovnice. Pro každý druh částic je pak potřeba vyřešit rozdělovací funkce rychlosti. Kinetický model je fyzikálně velice přesný, nicméně je velice náročný na výpočetní výkon a hodí se zejména v případech, kdy máme ve výpočetní doméně poměrně mnoho částic.

Druhým ze zmiňovaných přístupů je fluidní popis, který popisuje plazma pomocí statistických veličin, jako je hustota, střední hodnota rychlosti či střední hodnota energie tím, že předpokládáme konkrétní rozdělovací funkci a momenty této rozdělovací funkce. Jedním z výhod tohoto přístupu je možnost řešit problém pomocí metody konečných prvků.

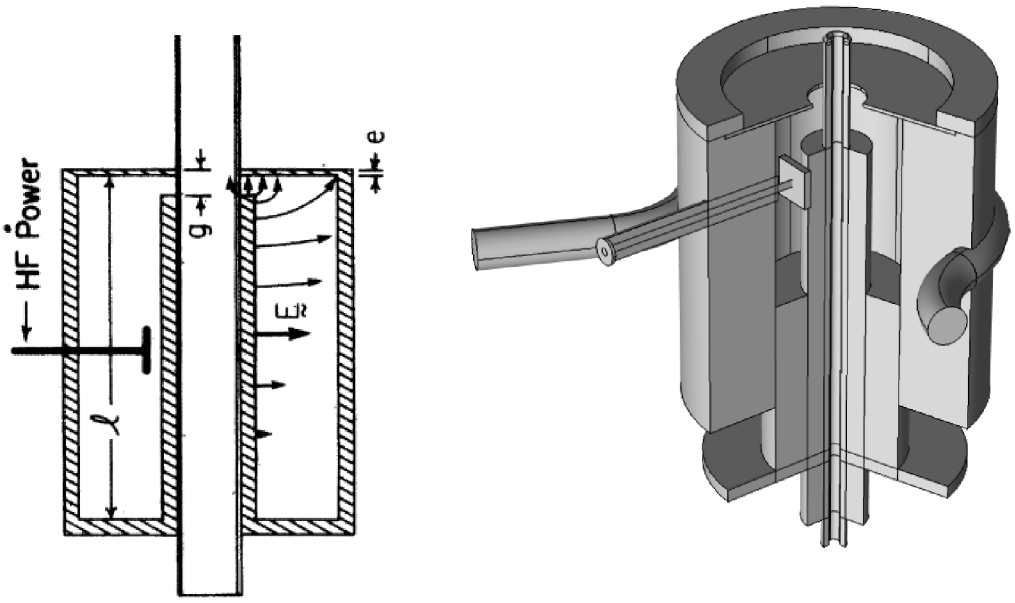
Posledním přístupem je pak hybridní neboli kineticko/fluidní popis. Ten se snaží využít výhody z obou dříve zmiňovaných přístupů a tak některé části řeší pomocí fluidního popisu a některé pomocí kinetického.

KAPITOLA

GEOMETRIE MODELU 2

2.1 Geometrie

Pojem mikrovlnná tryska zahrnuje širokou škálu geometricky či jinak odlišných zařízení, které však mají minimálně jeden společný prvek. Tím je budící elektromagnetické pole s frekvencí nacházející se v mikrovlnné oblasti[1]. V našem případě se zabýváme surfatronem [15, 16], což je jedno z prvních zařízení na generování mikrovlnného plazmatu udržovaného povrchovou vlnou, vyvinuté profesorem M. P. Moisanem v osmdesátých letech minulého století.



(a) (b)

Obrázek 2.1: (a) Schématický nákres surfatronu podle M. Moisana [16] a (b) 3D realistický model geometrie.

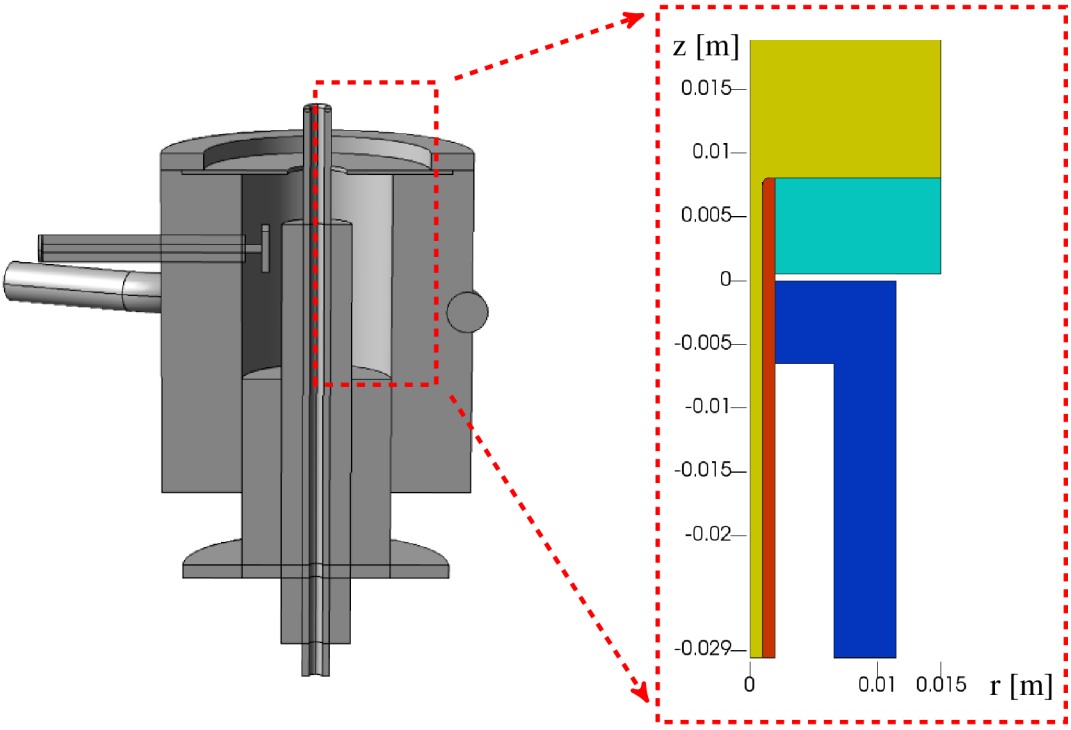
Surfatron se skládá z cylindrického rezonátoru, ve kterém se budí elektrické pole pomocí vysokofrekvenční antény a dielektrické trubičky, ve které proudí pracovní plyn. Na obrázku 2.1a je původní schématický návrh tohoto zařízení. Surfatron používaný v laboratořích[2] bývá součástí komplexnějšího uspořádání několika dalších přístrojů, které do něj dodávají výkon a ladí impedanci. Výkon, se kterým dokáže surfatron pracovat je omezen skutečností, že je vysokofrekvenční energie dodávaná do systému přes kapacitní vazbu tvořenou koaxiálním kabelem. Maximální výkon je tedy limitován vlastnostmi tohoto kabelu a pohybuje se okolo několika stovek wattů [15].

[1] Nejčastější typy přístrojů pracují s frekvencí 13.6 MHz a 2.45 GHz

[2] V laboratoři naší katedry se nachází komerčně dostupné zařízení s názvem SAIREM Surfatron 80.

2.2 2D adaptace geometrie

Modelování a simulace ve 3D bývají velice náročné na výpočetní výkon a ve většině případů se hledá vhodný kompromis, aby se dala výpočetní doména co nejvíce zjednodušit. Surfatron je cylindricky symetrické zařízení s jediným asymetrickým prvkem, a tím je anténa, která budí elektrické pole uvnitř rezonátoru. Abychom zachovali tvar elektrického pole a přitom se zbavili tohoto asymetrického prvku a mohli tak převést problém do 2D osově symetrické roviny 2.2b, můžeme mikrovlnný výkon dodávat do systému skrz spodní část "P" rezonanční komory stejně tak, jak to udělali autoři v článku [2].



(a) (b)

Obrázek 2.2: (a) Vertikální řez 3D modelem surfatronu a aproximace (b) 2D osově-symetrickou geometrií použitou při modelování v této práci.

Na obr. č. 2.2 je znázorněna transformace reálné geometrie na zjednodušený 2D osově symterický model 2.2b s barevně odlišenými doménami.

1 *Zlatožlutá* - barva označuje doménu v níž se počítal samotný mikrovlnný výboj. V této části se počítaly veškeré argonové srážkové procesy, proudění, přenos tepla a elektrické pole.

2 *Hnědočervená* - barva označuje křemennou trubičku ve které se simuloval přenos tepla a šíření elektromagnetického pole.

3 *Tmavě modrá* - doména označuje vnitřek cylindrického rezonátoru, ve kterém se simulovalo elektromagnetické pole.

4 *Tyrkysová* - barva označuje jedinou doménu, která nemá přímou reprezentaci ve skutečné geometrii. V reálném případě se v této části nachází proudící vzduch. Bez

této domény však docházelo u simulací k zapalování výboje na rozhraní mezi křemennou trubičkou a horní části rezonátoru, ke které v reálném případě nedochází. Během práce na tomto modelu se tato úprava ukázala jako poměrně důležitou součástí stabilizace celého modelu a k omezení nefyzikálního a nereálného chování modelu.

Mikrovlnný výboj hoří uvnitř skleněné trubičky s vnitřním poloměrem 1 cm a vnějším poloměrem 2 cm. Celková délka trubičky je 4 cm s přesahem 0.8 cm nad horní hranicí rezonátoru. Ve spodní části zlatožluté domény se nachází vtok, kterým do systému proudí pracovní plyn. V horní části téže domény se nachází odtok. Samotný rezonátor[3] se skládá ze dvou válců. Vnitřní válec má poloměr 0.66 cm a vnější 1.147 cm. Výška vnitřního rezonátoru je 2.96 cm. Vrchní část rezonátoru má tloušťku 0.056 cm.

[3]Tyto hodnoty jsou totožné jako u reálného zařízení nacházejícího se v laboratoři Ústavu Fyzikální Elektroniky na Masarykově Univerzitě.

KAPITOLA

FYZIKÁLNÍ MODELOVÁNÍ 3

V této kapitole se zabýváme fyzikou fluidního popisu mikrovlnného plazmatu udržovaného povrchovou vlnou. Nejprve jsou představeny rovnice popisující elektromagnetické pole. Na ty navazuje popis transportních rovnic doplněných o odvození Boltzmanovy kinetické rovnice (BKR), rovnice vedení tepla a proudění plynu. Na závěr této kapitoly je diskutována self-konzistence modelu a relevantní plazmochemické reakce v argonovém plazmatu.

3.1 Elektromagnetické pole - Maxwellovy rovnice

K popisu elektromagnetického pole je potřeba použít Maxwellovy rovnice, které mají v obecném případě následující tvar:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_\mathrm{c} \tag{3.1}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \tag{3.2}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \tag{3.3}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \tag{3.4}$$

kde $\mathbf{D}$ značí vektor elektrické indukce, $\mathbf{B}$ je vektor magnetické indukce, $\mathbf{E}$ a $\mathbf{H}$ jsou vektory intenzit elektrického a magnetické pole, ρ_c je hustota elektrického náboje a $\mathbf{J}$ značí hustotu elektrického proudu.

Intenzity elektrického a magnetického pole jsou propojeny s elektrickou a magnetickou indukcí pomocí následujících rovnic:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_\mathrm{r} \mathbf{E} \tag{3.5}$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mu_\mathrm{r} \mathbf{H} \tag{3.6}$$

kde ε_0 a μ_0 jsou permitivita a permeabilita vakua a ε_r a μ_r jsou relativní permitivita a permeabilita daného média. V případě lineárního nemagnetického média můžeme uvažovat, že hodnota relativní permitivity je zhruba $\mu_\mathrm{r} \approx 1$.

3.1.1 Komplexní vodivost a relativní permitivita plazmatu

Elektrická vodivost je určena především elektrony díky jejich mnohem větší pohyblivosti oproti iontům. Rovnice pro hybnost elektronů je pro homogenní plazma buzené časově proměnným elektrickým polem s malou amplitudou[1] jako:

$$m_\mathrm{e} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -e\mathbf{E} - m_\mathrm{e} \nu_\mathrm{m} \mathbf{u} \tag{3.7}$$

[1] Časově proměnné pole můžeme přepsat do fázorového tvaru jako $\mathbf{E}(t) = \boldsymbol{E}\cos(\omega t) = \Re\, \boldsymbol{E}\, \mathrm{e}^{(\mathrm{j}\omega t)}$, kde $\boldsymbol{E}$ je jeho amplituda. Také často označované jako harmonický tvar.

kde ν_m je srážková frekvence pro přenos hybnosti. Rychlost elektronů je propojena s proudovou hustotou $\boldsymbol{J} = -en\boldsymbol{u}$ a řešení je potřeba najít v harmonickém tvaru. Z rovnice (3.7) tedy dostaneme:

$$\boldsymbol{J} = \frac{e^2 n_\mathrm{e}}{m_\mathrm{e}(\nu_\mathrm{m} + \mathrm{j}\omega)}\boldsymbol{E} \tag{3.8}$$

Ze znalosti Ohmova zákona ve tvaru $\boldsymbol{J} = \sigma\boldsymbol{E}$ můžeme přepsat σ značící vodivost plazmatu jako:

$$\sigma = \frac{e^2 n_\mathrm{e}}{m_\mathrm{e}(\nu_\mathrm{m} + \mathrm{j}\omega)} \tag{3.9}$$

Na plazma můžeme nahlížet taky jako na dielektrikum s relativní permitivitou ε_r. Abychom získali tuto veličinu, je potřeba vyjádřit si rovnici (3.4) ve fázorovém tvaru:

$$\nabla \times \boldsymbol{H} = \sigma\boldsymbol{E} + \mathrm{j}\omega\boldsymbol{E} = (\sigma + \mathrm{j}\omega\varepsilon_0)\,\boldsymbol{E} = \mathrm{j}\omega\varepsilon_0\left(1 + \frac{\sigma}{\mathrm{j}\omega\varepsilon_0}\right) = \mathrm{j}\omega\varepsilon_0\hat{\varepsilon}_\mathrm{r}\boldsymbol{E} \tag{3.10}$$

V tomto případě pak uvažujeme, že celkový proud je roven posuvnému proudu $\mathrm{j}\omega\varepsilon\boldsymbol{E}$ kde $\hat{\varepsilon}_\mathrm{r}$ je komplexní relativní permitivita ve tvaru:

$$\varepsilon_\mathrm{r} = 1 + \frac{e^2 n_\mathrm{e}}{\mathrm{j}\omega\varepsilon_0 m_\mathrm{e}(\nu_\mathrm{m} + \mathrm{j}\omega)} = 1 - \frac{\omega_\mathrm{p}^2}{\omega(\omega - \mathrm{j}\nu_\mathrm{m})} \tag{3.11}$$

Relativní permitivita je přímo spjata s indexem lomu[2] $n^2 = \varepsilon_\mathrm{r}\mu_\mathrm{r}$ a v případě záporného indexu lomu by docházelo k odrazu elektromagnetické vlny od plazmatu. Jelikož je relativní permitivita přímo spojena s elektronovou hustotou plazmatu existuje její jistá hranice (zvaná cut-off frekvence) při které již elektromagnetické vlny nedokáží proniknout do plazmatu[3].

Vrať me se nyní ještě jednou k Maxwellovým rovnicím. Rovnici (3.3) v harmonickém tvaru dosaď me do rovnice(3.10). S využitím vzorce pro rychlost světla ve vakuu $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ a vlnového čísla $k_0 = \omega/c$ dostaneme:

$$\nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{E}) = k_0^2\varepsilon_\mathrm{r}\boldsymbol{E} \tag{3.12}$$

tuto rovnici upravíme ještě dosazením relativní permitivity:

$$\nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{E}) - k_0^2\left(1 - \mathrm{j}\frac{\sigma}{\varepsilon_0\omega}\right)\boldsymbol{E} \tag{3.13}$$

Tato rovnice je známa také jako Helmholtzova rovnice pro elektrické pole. Jak už bylo zmíněno dříve, za přenos energie mezi elektromagnetickým polem a plazmatem můžou elastické srážky elektronů s dalšími částicemi. Střední hustotu mikrovlnné energie popisuje vzorec:

$$Q_\mathrm{h} = \frac{1}{2}\Re\left(\boldsymbol{J}.\boldsymbol{E}^*\right) \tag{3.14}$$

[2] V obecném případě je potřeba uvažovat obě veličiny v komplexním vyjádření.
[3] Pro frekvenci 2.45 GHz je to zhruba $7.6\times10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$

kde $\boldsymbol{J}$ je celková hustota proudu a * označuje komplexně sdruženou veličinu. Celkový výkon absorbovaný v objemu V vypočteme tedy jako:

$$P_{\mathrm{abs}} = \frac{1}{2}\int_V Q_{\mathrm{h}}\,\mathrm{d}V \tag{3.15}$$

Elektrostatické pole se počítá podle vztahu:

$$\nabla\varepsilon_0\varepsilon_{\mathrm{r}}\boldsymbol{E} = \rho \tag{3.16}$$

kde s využitím identy pro gradient elektrického potenciálu V:

$$\boldsymbol{E} = -\nabla V \tag{3.17}$$

můžeme přepsat rovnici (3.16) do tvaru:

$$-\nabla\cdot\varepsilon_0\varepsilon_{\mathrm{r}}\nabla V = \rho \tag{3.18}$$

Hustota prostorového náboje ρ se počítá podle plazmochemie daného problému jako:

$$\rho = q\left(\sum_{k=1}^{Q} Z_{\mathrm{k}}n_{\mathrm{k}} - n_{\mathrm{e}}\right) \tag{3.19}$$

kde v plazmatu máme $k = 1,\ldots,Q$ typů částic, q je elementární náboj, Z_{k} označuje náboj k-tého typu částic a n_{e} je elektronová hustota.

3.1.2 Povrchové vlny

Povrchové vlny (*ang.* surface wave) jsou elektromagnetické vlny šířící se na rozhraní dielektrikum-plazma, které můžou při mikrovlnném výboji vznikat, jelikož povrchový mód je jeden z možných módů šíření výboje. V tomto typu výboje je to pak samotná vlna, která vytváří výboj. Ke vzniku povrchových vln je potřeba splnit dvě základní podmínky:

- elektronová hustota musí být větší než příslušná cut-off frekvence
- relativní permitivita dielektrika obklopujícího plazma musí být $\varepsilon_{\mathrm{g}} <\mid \varepsilon_{\mathrm{r}} \mid$

Pro zjednodušení nyní uvažujme nízkoteplotní bezsrážkové plazma, to můžeme popsat jako dielektrikum s permitivitou:

$$\varepsilon_{\mathrm{pl}} = 1 - \omega_{\mathrm{pl}}^2/\omega^2 \tag{3.20}$$

Podmínka pro šíření povrchových vln by v tomto případě byla tedy:

$$\omega \leq \omega_{\mathrm{pl}}/\left(1+\varepsilon_{\mathrm{g}}\right)^{1/2} \tag{3.21}$$

Budeme-li uvažovat případ, kdy je plazma udržované povrchovou vlnou uvnitř trubičky z dielektrika (např. křemenné sklo), bude se elektromagnetické pole skládat pouze se tří složek a to z axiální $\boldsymbol{E}_z$ a radiální $\boldsymbol{E}_r$ složky elektrického pole a azimutální složky magnetického pole $\boldsymbol{H}_\phi$ [3, 17].

3.1.3 Elektromagnetické pole - Okrajové podmínky

Okrajové podmínky pro elektromagnetické pole se skládají z perfektního elektrického vodiče (nulová tangenciální složka elektrického pole),

$$\mathbf{n} \times -\mathbf{E} = 0 \tag{3.22}$$

kterou uvažujeme na stěnách válcového rezonátoru. Na port se přivádí výkon, v našem případě 10 W, který je možno modulovat. Na zbylých okrajových částech je nastavena tzv. rozptylová okrajová podmínka (*ang.* scattering boundary condition), která je transparentní[4] vůči příchozímu elektrickému poli a je popsáno rovnicí:

$$\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{E}) - (jk + \frac{1}{2r})\mathbf{n} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{n}) - \frac{1}{2jk_0 + 1/r} \nabla \times [\mathbf{nn} \cdot (\nabla \times \mathbf{E})] = 0 \tag{3.23}$$

3.2 Rovnice fluidního popisu plazmatu

Fluidní aproximace popisuje plazma na základě makroskopických veličin, jako je hustota, střední hodnota rychlosti či střední hodnota energie tím, že předpokládáme konkrétní rozdělovací funkci a momenty této rozdělovací funkce.

3.2.1 Od kinetické teorie k fluidní aproximaci

Kinetický přístup často sleduje jednotlivé částice či skupiny částic, které se pohybují působením elektromagnetických a gravitačních sil a vzájemným působením. V každém časovém okamžiku je každá jednotlivá částice plazmatu určená polohovým vektorem $\mathbf{r}$ a vektorem rychlosti $\mathbf{v}$ ve fázovém prostoru. Máme-li systém obsahující N částic, bude tento systém reprezentován jedním bodem v $6N$-dimenzionálním prostoru s $3N$ souřadnicemi polohy a $3N$ souřadnicemi rychlosti. Tento systém se nazývá mikrostavem, který koresponduje se stavem celého systému.

Vezměme si nyní z fázového prostoru malý diferenciální objemový element jako $d^3r\,d^3v$. Počet bodů uvnitř objemového elementu je v obecném případě funkcí času. Vektory $\mathbf{r}$ a $\mathbf{v}$ jsou navzájem nezávislé, neboť reprezentují polohu jednotlivých objemových elementů ve fázovém prostoru.

Dalším nezbytným pojmem je rozdělovací funkce. Ta udává hustotu bodů reprezentujících částice α ve fázovém prostoru:

$$f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \frac{d^6 N_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{d^3r\, d^3v} \tag{3.24}$$

Hustotu částic α určíme pomocí rozdělovací funkce jako:

$$n_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{d^3r} \int_v d^6 N_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \int_v f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v \tag{3.25}$$

[4] Tato okrajová podmínka je perfektně transparentní jen vůči vlnám, které přichází k okraji v kolmém směru, není tedy zcela ideální, zamezuje však nefyzikálním odrazům od okrajů.

Další veličinou závislou pouze na polohovém vektoru $\mathbf{r}$ je driftová rychlost. Jelikož je to veličina, která v textu bude ještě mnohokrát vystupovat, je na místě si ji definovat. Driftová rychlost $\mathbf{u}_\alpha$ je definována jako:

$$\mathbf{u}_\alpha(\mathbf{r},t) = \frac{1}{n_\alpha(\mathbf{r},t)d^3r}\int_v \mathbf{v}d^6N_\alpha(\mathbf{r},\mathbf{v},t) = \frac{1}{n_\alpha(\mathbf{r},t)}\int_v \mathbf{v}f_\alpha(\mathbf{r},\mathbf{v},t)d^3v \tag{3.26}$$

Časový vývoj rozdělovací funkce v jedno-částicovém fázovém prostoru popisuje Boltzmannova kinetická rovnice (BKR). Jedná se o jednu z nejdůležitějších rovnic, které se využívají při modelování plazmatu. Na tomto místě není nutné ji odvozovat, neboť se tomuto tématu věnuje celá řada různých publikací. V bezsrážkovém případě vypadá BKR takto:

$$\frac{\partial f_\alpha(\mathbf{r},\mathbf{v},t)}{\partial t} + v\cdot\nabla f_\alpha(\mathbf{r},\mathbf{v},t) + a\cdot\nabla_v f_\alpha(\mathbf{r},\mathbf{v},t) = 0 \tag{3.27}$$

Dochází-li v plazmatu ke srážkám, mohou některé částice α opustit během času dt svůj původní objemový element $d^3r\,d^3v$. Úbytek či zisk částic α důsledkem srážek během časového intervalu dt je reprezentován srážkovým členem. Boltzmannova kinetická rovnice bude v takovém případě mít následující tvar:

$$\frac{\partial f_\alpha(\mathbf{r},\mathbf{v},t)}{\partial t} + v\cdot\nabla f_\alpha(\mathbf{r},\mathbf{v},t) + a\cdot\nabla_v f_\alpha(\mathbf{r},\mathbf{v},t) = \left(\frac{\partial f_\alpha(\mathbf{r},\mathbf{v},t)}{\partial t}\right)_{coll} \tag{3.28}$$

S využitím rovnice Lorentzovy síly a v případě, že je důležité jen elektrické pole, můžeme BKR přepsat do tvaru:

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + v\cdot\nabla f_\alpha + q\frac{\mathbf{E}}{m}\cdot\nabla_v f_\alpha = \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t}\right)_{coll} \tag{3.29}$$

Tato rovnice může být v principu vyřešena pokud známe elektrické pole $\mathbf{E}$.

V obecném případě je transport elektronů popsán pomocí Boltzmannovy kinetické rovnice. Vzhledem k tomu, že se jedná o komplikovanou integrodiferenciální rovnici, často se využívá aproximace transportní rovnicí vynásobenou váhovou funkcí a integrovanou přes rychlostní prostor. Tím ji redukujeme na tří-dimenzionální, časově závislý problém. Obecná transportní rovnice má tvar:

$$\frac{\partial}{\partial t}(n_\alpha\langle\chi\rangle_\alpha) + \nabla\cdot(n_\alpha\langle\chi\mathbf{v}\rangle_\alpha) - n_\alpha\langle\mathbf{a}\cdot\nabla_v\chi\rangle_\alpha = \int_v \chi\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t}\right)_{coll} d^3v \tag{3.30}$$

kde $\chi(\mathbf{v})$ je vlastnost částice plazmatu.

3.2.2 Drift difúzní teorie

Dosadíme-li za $\chi(\mathbf{v})$ 1, dostaneme nultý moment BKR neboli zákon zachování náboje. V případě, že budeme jako částice uvažovat elektrony, dostaneme:

$$\frac{\partial}{\partial t}n_\mathrm{e} + \nabla\cdot n_\mathrm{e}\langle\mathbf{u}_\mathrm{e}\rangle) = R_\mathrm{e} \tag{3.31}$$

na pravé straně vystupuje srážkový člen R_e, který odpovídá úbytku či zisku elektronů. $\langle \mathbf{u}_e \rangle$ značí průměrnou rychlost elektronů. Průměrná rychlost je vlastně součet dvou rychlostí ($\mathbf{u} = \mathbf{v} + \mathbf{w}$) kde $\mathbf{v}$ odpovídá přímé rychlosti částice a $\mathbf{w}$ je teplotní rychlost.[5]

První moment BKR získáme dosazením $m\mathbf{u}_e$ za $\chi(\mathbf{v})$:

$$\frac{\partial}{\partial t}(n_e m_e \langle \mathbf{u}_e \rangle) + \nabla \cdot (n_e m_e \langle \mathbf{u}_e \mathbf{u}_e \rangle) = q n_e \mathbf{E} - (\nabla \cdot \mathbb{P}_e) - n_e m_e \mathbf{u}_e \nu_m \tag{3.32}$$

Tato rovnice popisuje časovou změnu hybnosti, která je způsobená externími silami, tlakovými silami samotné kapaliny a silovým působení samotných interakcí, které v elementu kapaliny probíhají. [18,19] Veličina $\mathbb{P}_e$ značí tenzor tlaku. Pro Maxwell-Boltzmannovo[6] rozdělení platí, že síla na jednotkový objem, která je způsobená náhodným pohybem částic je dána gradientem skalárního tlaku. Tímto způsobem dostaneme stavovou rovnici:

$$\mathbf{p}_e = n_e k_B T_e \mathbf{I} = \mathbb{P}_e \tag{3.33}$$

kde $\mathbf{I}$ je matice identity, k_B je Boltzmannova konstanta a T_e je teplota elektronů.

Za předpokladu, že ionizační, záchytná i úhlová frekvence jsou menší než frekvence pro přenos hybnosti, můžeme první člen na levé straně zanedbat. Je-li driftová rychlost elektronů menší než tepelná rychlost, pak můžeme zanedbat i druhý člen. Pomocí těchto zjednodušujících předpokladů můžeme vyjádřit driftovou rychlost elektronů jako:

$$\mathbf{u}_e = -\frac{k_B}{m_e \nu_m} \nabla T_e - \frac{k_B T_e}{n_e m_e \nu_m} \nabla n_e + \frac{q}{m_e \nu_m} \mathbf{E} \tag{3.34}$$

Definujeme-li si tok elektronů jako:

$$\mathbf{\Gamma}_e = -(\mu_e \mathbf{E}) n_e - \nabla (D_e n_e) + \mathbf{u} n_e \tag{3.35}$$

kde první člen na pravé straně odpovídá driftu částic, druhý odpovídá difúzi a poslední je konvektivní člen, který uvažujeme, proudí-li plyn rychlostí $\mathbf{u}$. Dále v rovnici (3.35) vystupuje elektronová mobilita μ_e a elektronová difuzivita D_e definované jako: [20]

$$\mu_e = \frac{q}{m_e \nu_m}, \qquad D_e = \frac{k_B T_e}{m_e \nu_m} \tag{3.36}$$

Druhý moment BKR dostaneme dosazením $\frac{1}{2} m_e \mathbf{u}_e$ za $\chi(\mathbf{v})$. Matematickými úpravami druhého momentu BKR se dostaneme k rovnici popisující hustotu energie elektronů ve tvaru: [18]

$$\frac{\partial}{\partial t}(n_\varepsilon) + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_\varepsilon + \mathbf{E} \cdot \mathbf{\Gamma}_e = S_{en} - (\mathbf{u} \cdot \nabla) n_\varepsilon + (\mathbf{Q} + \mathbf{Q}_{gen})/q \tag{3.37}$$

[5] Průměrná hodnota teplotní složky rychlosti je $\langle \mathbf{w} \rangle = 0$. Přímá složka rychlosti $\langle \mathbf{u} \rangle = \langle \mathbf{v} \rangle = \mathbf{v}$ vzniká důsledkem působení elektrického pole a prostorových gradientů.

[6] Zde se jedná o jeho izotropní rozdělení rychlosti, také předpokládáme zanedbání viskózních členů - nediagonálních členů tenzoru.

V rovnici (3.37) vystupuje hustota energie elektronů n_ε, tok energie elektronů $\mathbf{\Gamma}_\varepsilon$, veličina popisující zisk či ztrátu energie díky srážkám S_{en}, externí zdroj tepla $\mathbf{Q}$ a obecný zdroj tepla $\mathbf{Q}_{\mathrm{gen}}$.

Podobně jako tok elektronů definujeme tok energie elektronů:

$$\mathbf{\Gamma}_\varepsilon = -(\mu_\varepsilon \mathbf{E})n_\varepsilon - \nabla(D_\varepsilon n_\varepsilon) + \mathbf{u}n_\varepsilon \tag{3.38}$$

V rovnici toku energie elektronů vystupují veličiny pro mobilitu elektronové energie μ_ε a difuzivitu elektronové energie, která je provázaná s difuzivitou elektronů vztahem $D_\varepsilon = \frac{5}{3}D_{\mathrm{e}}$.

Jednou z nejdůležitějších veličin při modelování plazmatu je střední velikost energie elektronů $\bar{\varepsilon}$, která je definována jako:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{n_\varepsilon}{n_{\mathrm{e}}}, \text{ kde } n_\varepsilon = \frac{3}{2}n_{\mathrm{e}}T_{\mathrm{e}} \tag{3.39}$$

Zde se objevuje teplota elektronů T_{e}. Při modelování plazmatu se často využívá tzv. více komponentního popisu, kdy každá část má vlastní teplotu, které nemusí být totožné. V našem případě se omezíme na popis dvou komponent a to elektronů majících teplotu T_{e} a teplotu těžkých částic T, která odpovídá teplotě plynu. Využíváme-li k popisu plazmatu Maxwll-Boltzmanovo rozdělení energie elektronů, můžeme vypočítat elektronovou teplotu ze vzorce (3.39).

Vrať me se zpět k pravé straně rovnice (3.31). Zde vystupuje člen R_{e} popisující přírůstek či úbytek elektronů a předpokládejme, že v plazmatu probíhá M reakcí, které přispívají k růstu či ztrátě hustoty elektronů:

$$R_{\mathrm{e}} = \sum_{j=1}^{M} x_{\mathrm{j}} k_{\mathrm{j}} N_{\mathrm{n}} n_{\mathrm{e}} \tag{3.40}$$

kde x_{j} značí molární frakci částice pro reakci j, k_{j} značí rychlostní koeficient reakce j a N_{n} je celková hustota neutrálních částic [20].

První člen na pravé straně rovnice (3.37) popisuje ztrátu energie elektronů díky neelastickým srážkám P jako:

$$S_{\mathrm{en}} = \sum_{j=1}^{P} x_{\mathrm{j}} k_{\mathrm{j}} N_{\mathrm{n}} n_{\mathrm{e}} \Delta\varepsilon_{\mathrm{j}} \tag{3.41}$$

kde $\Delta\varepsilon_{\mathrm{j}}$ odpovídá ztrátě energie reakcí j.

Drift difúzní teorie je aproximativní přístup, který lze použít jen za podmínek, kdy je tlak plynu přesahuje hodnotu $\sim 10^{-1}$ Pa a velikost redukovaného elektrického pole nepřesahuje hodnotu několika stovek Townsendů[7]. Dále je pak potřeba, aby hustota částic neutrálního plynu byla daleko větší než hustota nabitých částic, čili že se jedná o slabě ionizované plazma. Plazma by také mělo být srážkové, což znamená, že střední volná dráha mezi elektrony a neutrálním plynem musí být daleko menší než charakteristické rozměry systému [20].

[7]Townsend [Td] je fyzikální jednotka popisující velikost redukovaného elektrického pole $\boldsymbol{E}/N$, kde $\boldsymbol{E}$ je elektrické pole a N popisuje koncentraci neutrálních částic. 1 Td= 10^{-21}V·m^2

3.2.3 Drift difúzní rovnice - Okrajové podmínky

Okrajové podmínky v plazmatu popisují zejména tok elektronů $\mathbf{\Gamma}_\mathrm{e}$ a tok energie elektronů $\mathbf{\Gamma}_\varepsilon$. V případě kontaktu plazmatu se stěnou bude docházet k úbytku elektronů díky prostorovému toku a náhodnému pohybu elektronů v rámci střední volné dráhy směrem ke stěně. Přírůstek elektronů může nastat sekundární emisí díky nárazům kladných iontů na stěnu a díky termionické emisi. Rovnice pro normálovou složku toku elektronů bude tedy vypadat následovně:

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{\Gamma}_\mathrm{e} = \frac{1-r_\mathrm{e}}{1+r_\mathrm{e}}\left(\frac{1}{2}v_\mathrm{e,th}n_\mathrm{e} + n_\mathrm{e}(\mu_\mathrm{e}\cdot\mathbf{E})\cdot\mathbf{n}\right) - \left[\sum_\mathrm{i}\gamma_\mathrm{i}(\mathbf{\Gamma}_\mathrm{i}\cdot\mathbf{n}) + \mathbf{\Gamma}_\mathrm{t}\cdot\mathbf{n}\right] \tag{3.42}$$

pro normálovou složku toku energie elektronů pak:

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{\Gamma}_\varepsilon = \frac{1-r_\mathrm{e}}{1+r_\mathrm{e}}\left(\frac{5}{6}v_\mathrm{e,th}n_\varepsilon + n_\varepsilon(\mu_\varepsilon\cdot\mathbf{E})\cdot\mathbf{n}\right) - \left[\sum_\mathrm{i}\gamma_\mathrm{i}\bar{\epsilon}_\mathrm{i}(\mathbf{\Gamma}_\mathrm{i}\cdot\mathbf{n}) + \bar{\epsilon}_\mathrm{t}\mathbf{\Gamma}_\mathrm{t}\cdot\mathbf{n}\right] \tag{3.43}$$

kde r_e je koeficient odrazu, $v_\mathrm{e,th}$ je teplotní rychlost a $\mathbf{n}$ je vnější normála. γ_i, $\mathbf{\Gamma}_\mathrm{i}$ a ϵ_i jsou popořadě koeficient sekundární emise, tok iontů a střední energie emitovaného elektronu i-tým druhem kladného iontu. $\mathbf{\Gamma}_\mathrm{t}$, ϵ_t popisují teplotní emisní tok a střední energii teplotně emitovaného elektronu.

Teplotní rychlost elektronů je dána vztahem:

$$v_\mathrm{e,th} = \sqrt{\frac{8k_\mathrm{b}T_\mathrm{e}}{\pi m_\mathrm{e}}} \tag{3.44}$$

Dále pak na stěny nastavíme nulový potenciál:

$$V = 0 \tag{3.45}$$

Pro otevřené okrajové podmínky, čili vtok a odtok, bude normálová složka toku elektronů, toku energie elektronů a elektrické indukce rovna nule:

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{\Gamma}_\mathrm{e} = 0, \quad \mathbf{n}\cdot\mathbf{\Gamma}_\varepsilon = 0, \quad \mathbf{n}\cdot\mathbf{D} = 0 \tag{3.46}$$

3.2.4 Transportní rovnice těžkých částic

Jelikož v plazmatu existuje často více neutrálních či excitovaných druhů částic, potřebujeme k jejich popisu transportní rovnice pro každý druh. Existuje-li v plazmatu $k = 1,\ldots,Q$ typů částic bude pro k-té částice vypadat transportní rovnice: [20]

$$\rho\frac{\partial}{\partial t}(w_\mathrm{k}) + \rho(\mathbf{u}\cdot\nabla)w_\mathrm{k} = \nabla\cdot\mathbf{j}_\mathrm{k} + R_\mathrm{k} \tag{3.47}$$

kde w_k je hmotnostní zlomek k-tého druhu částic, ρ značí celkovou hustotu plazmatu, $\mathbf{u}$ je průměrná rychlost plynu, $\mathbf{j}_\mathrm{k}$ je difúzní tok a R_k je míra srážek k-tého druhu částic.

Vektor difúzního toku k-tého druhu částic je dán vztahem:

$$\mathbf{j}_\mathrm{k} = \rho w_\mathrm{k}\mathbf{V}_\mathrm{k} \tag{3.48}$$

kde $\mathbf{V}_\mathrm{k}$ je vícesložková difúzní rychlost. V obecném případě by se difúze vícesložkového systému počítala pomocí Maxwell-Stefanovy rovnice. Ta je ovšem výpočetně velice náročná a při modelování plazmatu se využívají zjednodušující aproximace. V našem případě využíváme tzv. průměrování směsi (eng. mixture average), kde je vícesložková difúzní rychlost vyjádřená jako:

$$\mathbf{V}_\mathrm{k} = D_\mathrm{k,m}\frac{\nabla w_\mathrm{k}}{w_\mathrm{k}} + D_\mathrm{k,m}\frac{\nabla M_\mathrm{n}}{M_\mathrm{n}} + D_\mathrm{k}^\mathrm{T}\frac{\nabla T}{T} - z_\mathrm{k}\mu_\mathrm{k,m}\mathbf{E} \tag{3.49}$$

veličina $D_\mathrm{k,m}$ popisuje difúzní koeficient průměrovaný přes směs, M_n je střední molární hmotnost směsi, D_k^T je tepelný difúzní koeficient druhu částic k, T je teplota plynu, z_k je náboj částic k, $\mu_\mathrm{k,m}$ je mobilita částic průměrovaná přes směs k a $\mathbf{E}$ je elektrické pole. Difúzní koeficient průměrovaný přes směs $D_\mathrm{k,m}$ je dán vzorcem:

$$D_\mathrm{k,m} = \frac{1 - w_\mathrm{k}}{\sum\limits_{j\neq k}^{Q} x_\mathrm{j}/D_\mathrm{kj}} \tag{3.50}$$

Střední molární hmotnost M_n a molární zlomek částic x_k vyjádříme vzorci:

$$\frac{1}{M_\mathrm{n}} = \sum_{\mathrm{k}=1}^{Q}\frac{w_\mathrm{k}}{M_\mathrm{k}}, \quad x_\mathrm{k} = \frac{w_\mathrm{k}}{M_\mathrm{k}}M_\mathrm{n} \tag{3.51}$$

veličina M_k popisuje molekulární hmotnost. Mobilita průměrovaná přes směs se počítá podle podle Einsteinova vztahu:

$$\mu_\mathrm{k,m} = \frac{qD_\mathrm{k,m}}{k_\mathrm{B}T} \tag{3.52}$$

V rovnici (3.50) se objevuje veličina D_kj popisující binární difúzní koeficient mezi částicemi k a j, která je popsána poměrně komplikovanou funkcí fyzikálních vlastností samotných částic. Tato veličina se počítá pomocí vzorce vycházejícího z kinetické teorie plynu: [20]

$$D_\mathrm{kj} = 2.66\cdot 10^{-2}\cdot\frac{\sqrt{T^3(M_\mathrm{k}+M_\mathrm{j})/(2\cdot 10^3 M_\mathrm{k}M_\mathrm{j})}}{p\sigma_\mathrm{k}\sigma_\mathrm{j}\Omega_\mathrm{D}} \tag{3.53}$$

kde σ značí charakteristickou délku Lennard-Jones/Stockmayerova potenciálu a Ω_D je srážkový integrál.

Mezi další zatím nezmíněné veličiny vystupující v rovnici (3.47) patří hustota plazmatu, která je dána rovnicí ideálního plynu a má tvar:

$$\rho = \frac{pM_\mathrm{n}}{RT} \tag{3.54}$$

kde R je univerzální plynová konstanta. Nachází-li se v systému velké teplotní gradienty můžeme teplotní rychlost zapsat ve tvaru:

$$\mathbf{v}^\mathrm{T} = D_\mathrm{k}^\mathrm{T}\nabla\ln T \tag{3.55}$$

Poslední člen vystupující na pravé straně rovnice (3.47) popisuje míru srážek částic k-tého druhu. Ten je dán stechiometrií systému a je popsán rovnicí:

$$R_{\mathrm{k}} = M_{\mathrm{n}} \sum_{j=1}^{N} \nu_{\mathrm{kj}} r_{\mathrm{j}} \tag{3.56}$$

kde ν_{kj} je stechiometrická matice a r_{j} rychlostní konstanta reakce j, která závisí na pořadí reakcí a molární koncentraci každého druhu částic [20].

Abychom mohli využít transportní rovnice pro těžké částice v tomto tvaru, musí plazma, které modelujeme splňovat několik podmínek. Je potřeba, aby difúzní rychlost byla mnohem menší než tepelná rychlost $\mathbf{V}_{\mathrm{k}} \ll v_{\mathrm{k}}$. Další předpoklad je, že veškeré těžké částice mají stejnou teplotu T. Abychom splnili první podmínku, je potřeba mít vyšší tlak. Druhá podmínka nám říká, že bychom neměli mít příliš vysokou hodnotu redukovaného elektrického pole. Jak je vidět, validita tohoto přístupu je stejná s podmínkami platnosti pro použití drift difúzní teorie, která byla zmíněna dříve.

3.3 Přenos tepla

Teplota neutrálního plynu, která se v našem případě shoduje s teplotou těžkých částic plazmatu se řeší pomocí následující rovnice: [21]

$$\rho C_{\mathrm{p}} \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_{\mathrm{p}} \mathbf{u} \cdot \nabla T - (\nabla \cdot \kappa \nabla T) = Q \tag{3.57}$$

kde C_{p} je specifická teplotní kapacita, ρ je hustota plynu, T je teplota plynu, κ je teplotní vodivost plynu a Q je zdroj tepla plynu (zahrnuje endotermické i exotermické reakce). První člen na levé straně odpovídá zvýšení vnitřní energie v jednotkovém objemu, druhý člen popisuje přírůstek vnitřní energie jednotkového objemu díky konvekci, třetí člen popisuje přírůstek vnitřní energie jednotkového objemu důsledkem tepelné vodivosti. Na pravé straně vystupuje zdroj tepla, který je způsoben srážkovými procesy v plynu.

Vzhledem k tomu, že plyn ve kterém počítáme rovnici pro přenos tepla je směsí více částic, je potřeba počítat s celkovou teplotní kapacitou C_{p}, která se počítá jako:

$$C_{\mathrm{p}} = \sum_{\mathrm{k}} w_{\mathrm{k}} \frac{C_{\mathrm{p,k}}}{M_{\mathrm{k}}} \tag{3.58}$$

kde $C_{\mathrm{p,k}}$ je teplotní kapacita jednotlivých druhů částic, w_{k} je hmotnostní zlomek k-tého druhu částic a M_{k} značí molekulární hmotnost. Teplotní kapacity jednotlivých druhů částic $C_{\mathrm{p,k}}$ stejně jako molární entalpie h_{k} a molární entropie s_{k} se počítají podle: [22]

$$C_{\mathrm{p,k}} = R_{\mathrm{g}}(a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4) \tag{3.59}$$

$$h_{\mathrm{k}} = R_{\mathrm{g}}(a_1 T + \frac{a_2}{2} T^2 + \frac{a_3}{3} T^3 + \frac{a_4}{4} T^4 + \frac{a_5}{5} T^5 + a_6) \tag{3.60}$$

$$s_{\mathrm{k}} = R_{\mathrm{g}}(a_1 \ln T + a_2 T + \frac{a_3}{2} T^2 + \frac{a_4}{3} T^3 + \frac{a_5}{4} T^4 + a_7) \tag{3.61}$$

v těchto vzorcích vystupuje jak teplota plynu T, tak i molární plynová konstanta R_{g}.

Stejně jako v případě teplotní kapacity je potřeba počítat i teplotní vodivost κ pro celou směs částic. Tu počítáme podle vzorce:

$$\kappa = \sum_{\mathrm{k}} x_{\mathrm{k}} \kappa_{\mathrm{k}} \tag{3.62}$$

kde x_{k} je molární zlomek a κ_{k} značí tepelnou vodivost k-tého druhu částic, která se vypočítá jako: [23]

$$\kappa_{\mathrm{k}} = \frac{\eta_{\mathrm{k}}}{M_{\mathrm{k}}} (1.15 C_{\mathrm{p,k}} + 0.88 R_{\mathrm{g}}) \tag{3.63}$$

kde η_{k}[8] značí dynamickou viskozitu. Rovnice pro výpočet této veličiny vychází z kinetické teorie pro plyn a je vyjádřená jako: [24]

$$\eta_{\mathrm{k}} = 2.669 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{T\,(M_{\mathrm{k}} \cdot 10^3)}}{\sigma_{\mathrm{k}}^2 \Omega_{\nu}} \tag{3.64}$$

kde σ_{k} je charakteristická potenciální délka a Ω_{ν} je srážkový integrál. Celková dynamická viskozita η se vypočítá podle:

$$\eta = \sum_{\mathrm{k}=1} \frac{x_{\mathrm{k}} \eta_{\mathrm{k}}}{\sum\limits_{\mathrm{l}=1} x_{\mathrm{k}} \phi_{\mathrm{kl}}} \tag{3.65}$$

kde ϕ_{kl} je semi-empirická veličina definovaná jako: [25]

$$\phi_{\mathrm{kl}} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_{\mathrm{k}}}{\eta_{\mathrm{l}}}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_{\mathrm{l}}}{M_{\mathrm{k}}}\right)^{\frac{1}{4}}\right]^2}{\left[8\left(1 + \frac{M_{\mathrm{k}}}{M_{\mathrm{l}}}\right)\right]^{\frac{1}{2}}} \tag{3.66}$$

Poslední dosud nedefinovanou veličinou z rovnice (3.39) je zdroj tepla Q vystupující na pravé straně. Ten popisuje celkový tepelný přírůstek důsledkem plazmo-chemických procesů:

$$Q = \sum_{\mathrm{j}} Q_{\mathrm{j}} \tag{3.67}$$

Jednotlivé reakce probíhající v plazmatu přispívají větší či menší měrou ke změně celkového tepelného zdroje. Jejich hodnota se pro jednotlivé reakce počítá jako:

$$Q_{\mathrm{j}} = -H_{\mathrm{j}} r_{\mathrm{j}} \tag{3.68}$$

zde vystupuje veličina H_{j} značící entalpii reakce j a r_{j} je rychlostní konstanta této reakce. Entalpie reakce se počítá jako:

$$H_{\mathrm{j}} = \sum_{\mathrm{k}} \nu_{\mathrm{kj}} h_{\mathrm{k}} \tag{3.69}$$

kde ν_{ij} je stechiometrická matice. Stejným způsobem jako entalpie reakce j se počítá i entropie.

[8] Často se v literatuře setkáme s viskozitou označovanou symbolem μ. V našem textu tímto řeckým písmenem však značíme mobilitu a aby nedocházelo k nepochopení, je na místě označovat dynamickou viskozitu jinak.

3.3.1 Přenos tepla - Okrajové podmínky

V praxi se chlazení surfatronu realizuje pomocí vodního chlazení a proudícího vzduchu, který se vpouští dovnitř rezonátoru. Tento proces korigování teploty jsme v našem modelu aproximovali nastavením teploty 300 K na rozhraní mezi skleněnou trubičkou a rezonátorem a na vrchní část rezonátoru. Na ostatní okrajové části geometrie jsme nastavili podmínku pro tok tepla:

$$-\mathbf{n}\cdot\mathbf{q} = 0 \tag{3.70}$$

3.4 Proudění plynu

Proudění plynu je popsáno Navier-Stokesovými rovnicemi, skládajících se z rovnice zachování hmotnosti a z rovnice zachování hybnosti.V obecném případě bude rovnice pro zachování hybnosti vypadat následovně:

$$\rho\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u}\cdot\nabla\mathbf{u}) = \nabla\cdot[-p\mathbf{I}+\boldsymbol{\tau}] + \mathbf{F} \tag{3.71}$$

v této rovnici vystupuje hustota ρ, rychlost proudění plynu $\mathbf{u}$, tlak p, tenzor viskózního napětí $\boldsymbol{\tau}$ a $\mathbf{F}$ značí vnější síly působící na plyn, často gravitace. Pro Newtonovské tekutiny, které mají lineární vztah mezi rychlostí deformace a napětím, bude tenzor viskózního napětí vypadat následovně:

$$\boldsymbol{\tau} = \eta(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T) - \frac{2}{3}\eta(\nabla\cdot\mathbf{u})\mathbf{I} \tag{3.72}$$

Dosadíme-li rovnici (3.72) do rovnice (3.71) dostaneme známější tvar rovnice kontinuity:

$$\rho\left(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u}\cdot\nabla\mathbf{u}\right) = -\nabla p + \nabla\cdot\left(\eta(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T) - \frac{2}{3}\eta(\nabla\cdot\mathbf{u})\mathbf{I}\right) + \mathbf{F} \tag{3.73}$$

Levá strana rovnice (3.73) označuje inerciální síly. První člen na pravé straně rovnice popisuje tlakové síly, druhý člen[9] označuje viskózní síly a poslední člen, jak už bylo uvedeno, značí vnější síly působící na plyn, například gravitace.

Rovnici (3.73) doplňuje ještě rovnice kontinuity ve tvaru:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\,\mathbf{u}) = 0 \tag{3.74}$$

Jednou z velmi důležitých veličin v rámci proudění plynu je Machovo číslo :

$$\mathrm{Ma} = \frac{|\mathbf{u}|}{a} \tag{3.75}$$

kde a je rychlost zvuku.

Velikost Machova čísla se při popisu proudění plynu využívá ke stanovení, zda-li se jedná o stlačitelné, slabě stlačitelné či nestlačitelné proudění. Je-li Machovo číslo velice malé,

[9] Druhým členem na pravé straně myslíme divergenci celé závorky čili $\nabla\cdot\left(\mu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T) - \frac{2}{3}\mu(\nabla\cdot\mathbf{u})\mathbf{I}\right)$

můžeme předpokládat, že se jedná **nestlačitelné proudění**. V takovém případě předpokládáme, že hustota plynu či kapaliny je konstantní a rovnice kontinuity se redukuje na $\rho\nabla\cdot\mathbf{u}=0$. Předpokládáme-li při modelování proudění plynu, že se jedná o nestlačitelné proudění, nemusí to přímo implikovat, že se jedná o nestlačitelnou kapalinu či plyn. V mnoha případech můžeme i stlačitelnou tekutinu aproximovat nestlačitelným prouděním, musí však být hustota tekutiny konstantní v rámci objemu tekutiny, které se pohybuje s rychlostí proudění. O **stlačitelném proudění** mluvíme, pokud dochází ke změnám hustoty tekutiny během proudění. Tomu odpovídá chování většiny plynů. Pro Machovo číslo menší než 0.3 můžeme do jisté míry pracovat s tímto typem proudění stejně, jako s nestlačitelným prouděním. **Slabě stlačitelné proudění** předpokládá, že hustota tekutiny nezávisí na tlaku, ale může být funkcí např. teploty.

Další důležitá veličina týkající se proudění tekutin je Reynoldsovo číslo:

$$\mathrm{Re}=\frac{\rho UL}{\mu} \tag{3.76}$$

kde U značí rychlost proudění a L reprezentativní délku systému. Reynoldsovo číslo udává poměr mezi inerciálními a viskózními silami. Velikost této veličiny rozhoduje o tom, zda-li se bude jednat o laminární či turbulentní proudění. Hraniční hodnota Reynoldsova čísla, kdy se z laminárního proudění stává turbulentní, bývá pro odlišná uspořádání systému a pro různé tekutiny jiná. Většinou se však hodnota této hranice pohybuje okolo 2000, kdy pro nižší hodnoty se bude jednat o laminární proudění a pro vyšší o turbulentní.

3.4.1 Proudění plynu - Okrajové podmínky

Proudění plynu pracuje se třemi různými okrajovými podmínkami a to vtokem, odtokem a stěnami. Okrajová podmínka pro vtok je dána:

$$-\int_{\delta\Omega}\frac{\rho}{\rho_{\mathrm{ST}}}(\mathbf{u}\cdot\mathbf{n})\,\mathrm{d}_{\mathrm{bc}}\,\mathrm{d}\Omega=Q_{\mathrm{sccm}},\quad \rho_{\mathrm{ST}}=\frac{M_{\mathrm{n}}}{V_{\mathrm{m}}} \tag{3.77}$$

kde ρ_{ST} je standardní hustota, V_{m} je standardní molární objem, d_{bc} je tloušťka trubice, kterou pouštíme do systému tekutinu, Q_{sccm} popisuje standardní průtok v sccm jednotkách (standardní kubický centimetr za minutu) a Ω je plocha vtoku. Vtokem vpouštíme do systému 100 sccm.

Okrajové podmínky pro **stěnu** jsou poměrně jednoduché v případě popisu laminárního proudění a nedochází-li ke skluzu tekutiny po povrchu stěny. V takovém případě platí následující podmínka:

$$\mathbf{u}=0 \tag{3.78}$$

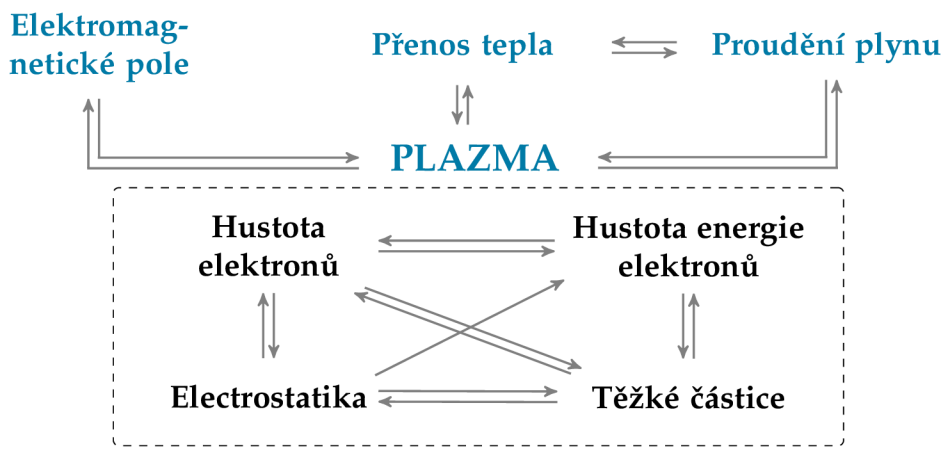
Poslední okrajovou podmínkou pro proudění plynu, kterou je potřeba zmínit je odtok. Tato okrajová podmínka se počítá pomocí:

$$\left[-p\mathbf{I}+\eta\left(\nabla\mathbf{u}+(\nabla\mathbf{u})^T\right)-\frac{2}{3}\eta(\nabla\cdot\mathbf{u})\mathbf{I}\right]\mathbf{n}=-p_0\mathbf{n} \tag{3.79}$$

tímto upřesníme normálové napětí, které můžeme v mnoha případech položit rovno tlaku $p=101\,32.5$ Pa a tangenciální komponenta napětí se položí rovna nule.

3.5 Self-konzistence modelu

Vytvořit self-konzistentní model mikrovlnné trysky je v mnoha ohledech poměrně komplikovaný problém. Popis tohoto typu vyžaduje propojení několika různých fyzikálních modulů, tak jak jej můžeme vidět na obr. č. 3.1, zahrnující proudění plynu, přenos tepla, provázanost budícího elektromagnetické pole spolu s plazmatem a plazmochemické reakce popisující argonové plazma za atmosférického tlaku. V případě fluidní aproximace musíme pro plazma řešit minimálně 4 parciální diferenciální rovnice.



Obrázek 3.1: Diagram znázorňující provázanost fyzikálních modulů v rámci sefl-konzistence modelu.

- Transportní rovnice pro hustotu elektronů:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_\mathrm{e} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_\mathrm{e} = R_\mathrm{e} - (\mathbf{u} \cdot \nabla) n_\mathrm{e} \tag{3.80}$$

- Transportní rovnice pro hustotu energie elektronů:

$$\frac{\partial}{\partial t}(n_\varepsilon) + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_\varepsilon + \mathbf{E} \cdot \mathbf{\Gamma}_\mathrm{e} = S_\mathrm{en} - (\mathbf{u} \cdot \nabla) n_\varepsilon + (\mathbf{Q} + \mathbf{Q}_\mathrm{gen})/q \tag{3.81}$$

- Transportní rovnice pro těžké částice (jednu pro každý druh):

$$\rho \frac{\partial}{\partial t}(w_\mathrm{k}) + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) w_\mathrm{k} = \nabla \cdot \mathbf{j}_\mathrm{k} + R_\mathrm{k} \tag{3.82}$$

- Poissonova rovnice pro elektrostatické pole:

$$\nabla \cdot (\varepsilon_0 \varepsilon_\mathrm{r} \boldsymbol{E}) = \rho_\mathrm{q} \tag{3.83}$$

Rovnice popisující plazma mají tři závislé proměnné a těmi jsou elektronová hustota n_e, střední velikost energie elektronů $\bar{\varepsilon}$ a elektrické pole $\boldsymbol{E}$. Uvažujeme-li v modelu i přenos tepla spolu s prouděním plynu, musíme řešit další 3 PDR.

- Rovnice pro přenos tepla:

$$\rho C_\mathrm{p} \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_\mathrm{p} \mathbf{u} \cdot \nabla T - (\nabla \cdot \kappa \nabla T) = Q \tag{3.84}$$

- Navier-Stokesova rovnice:

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}+\mathbf{u}\cdot\nabla\mathbf{u}\right)=-\nabla p+\nabla\cdot\left(\eta(\nabla\mathbf{u}+(\nabla\mathbf{u})^T)-\frac{2}{3}\eta(\nabla\cdot\mathbf{u})\mathbf{I}\right)+\mathbf{F} \tag{3.85}$$

- Rovnice kontinuity:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\,\mathbf{u})=0 \tag{3.86}$$

Rovnice popisující přenos tepla a proudění doplňují naše tři předcházející závislé proměnné o tlak p, rychlost proudění $\mathbf{u}$ a teplotu T. V rámci provázanosti pak máme na mysli těchto několik předpokladů:

(1) Elektromagnetické pole dodává energii elektronům, které nejsou ve fázi s oscilujícím mikrovlnným polem např. díky elastické srážce s neutrálem, tím že je urychluje ve směru právě působícího buzeného pole. Střední hustotu mikrovlnné energie absorbované plazmatem popisuje rovnice (3.14)

(2) Samotný výboj se formuje uvnitř skleněné trubičky, kde je-li elektronová hustota větší než příslušná cut-off frekvence pro danou frekvenci budícího pole, nebude elektromagnetické pole pronikat do plazmatu a bude se šířit po rozhraní plazma/dielektrikum.

(3) Nepočítáme rozdělovací funkci energie elektronů. Transportní rovnici pro energii elektronů řešíme, jako kdybychom měli Maxwellovu rozdělovací funkci. Elektronová teplota vystupuje v některých rychlostních koeficientech viz. 3.1.

(4) Difuzivitu a mobilitu elektronů a energie elektronů počítáme ze znalosti srážkových reakcí pro elektrony a počítáme podle vztahů (3.36).

(5) Předpokládá se, že těžké částice získávají a ztrácí svou energii jen díky srážkovým procesům a jejich teplota je v rovnováze ($T_\mathrm{i}\approx T\neq T_\mathrm{e}$).

(6) Lokální prostorová nerovnováha nábojů vytváří elektrické pole prostorového náboje, které se počítá pomocí Poissonovy rovnice.

(7) Lokální elektrické pole prostorového náboje způsobuje drift částic (elektronů a iontů) a v neposlední řadě i transport energie elektronů.

(8) Srážkové členy vystupující v rovnicích (3.72),(3.37) a (3.31) jsou přímo ovlivněny reakcemi, které v plazmatu probíhají, čímž propojují transportní rovnice pro těžké částice s rovnicí pro hustotu elektronů a hustotu energie elektronů. Některé rychlostní koeficienty jsou také přímo závislé na teplotě plynu T čím propojují tyto rovnice s rovnicí pro přenos tepla.

(9) Jelikož uvažujeme rovnici pro ideální plyn, je hustota plazmatu závislá na teplotě T a tlaku p.

(10) Jelikož uvažujeme neizotermální proudění plynu, hustota plynu ρ stejně jako viskozita η závisí na lokální teplotě T a složení plynu.

(11) Rychlost proudění plynu $\mathbf{u}$ určuje konvektivní členy toků v transportních rovnicích pro hustotu elektronů a hustotu energie elektronů.

3.6 Plazmochemické reakce v argonu

Nedílnou součástí modelu prezentovaného v této práci jsou i plazmochemické reakce, které určují srážkové členy vystupující v rovnicích (3.47),(3.37) a (3.35). Všechny objemové i povrchové reakce, které byly v tomto modelu použity jsou vypsány v tabulce 3.1. Excitovaný stav argonu Ar^* soustřeďuje více excitovaných stavů argonu Ar(4s) a Ar(4p). Sloučení těchto excitovaných stavů do jednoho je jistým zjednodušením, kterého se využívá při modelovaní argonového plazmatu, pokud se nepotřebujeme co nejpřesnější výsledky a stačí nám jen přibližný odhad chování plazmatu jako např. v [2]. Často se také excitované stavy argonu Ar(4s) a Ar(4p) berou zvlášť [3, 26, 27]. Dále v našem modelu uvažujeme dimer Ar_2^*, který soustřeďuje stavy $Ar_2(^1\Sigma_u^+)$ a $Ar_2(^3\Sigma_u^+)$, jelikož ten hraje poměrně významnou roli v případě modelování argonového plazmatu za atmosférického tlaku. Dvojnásobnou excitaci argonového dimeru v našem modelu neuvažujeme, neboť jeho vliv na chování a vývoj plazmatu je zanedbatelný [26]. Reakce 1 až 9 přispívají ke změně energie elektronů. Kladné hodnoty $\Delta\varepsilon$ mají za důsledek ztrátu energie elektronů (např. ionizace, excitace) a záporné hodnoty implikují zisk energie (např. super-elastická srážka či disociativní deexcitace).

Tabulka 3.1: Tabulka plazmochmických procesů zahrnutých v tomto modelu.

j	**Proces**	**Rychlostní koeficient** **		$\Delta\varepsilon$ (eV)	Ref.
		OBJEMOVÉ REAKCE			
1	$e + Ar \rightarrow e + Ar$	BOLSIG+		0	[8]
2	$e + Ar \rightarrow e + Ar^*$	BOLSIG+		11.5	[8]
3	$e + Ar^* \rightarrow e + Ar$	BOLSIG+		-11.5	[8]
4	$e + Ar \rightarrow 2e + Ar^+$	BOLSIG+		15.8	[8]
5	$e + Ar^* \rightarrow 2e + Ar^+$	BOLSIG+		4.24	[8]
6	$e + Ar_2^* \rightarrow 2e + Ar_2^+$	$k_6 = 5.4 \cdot 10^{10} \cdot T_e^{0.7}$	$m^3/(s \cdot mol)^{-1}$	3.55	[7]
7	$e + Ar_2^* \rightarrow e + 2Ar$	$k_7 = 6.022 \cdot 10^{11}$	$m^3/(s \cdot mol)^{-1}$	-10.95	[7]
8	$e + Ar_2^+ \rightarrow Ar^* + Ar$	$k_8 = 6.263 \cdot 10^{11} \cdot \left(\frac{0.026}{T_e}\right)^{0.67} \cdot \left(\frac{1-\exp(-418/T)}{1-0.31 \cdot \exp(-418/T)}\right)$	$m^3/(s \cdot mol)^{-1}$	-3	[7]
9	$e + Ar_2^+ \rightarrow e + Ar + Ar^+$	$k_9 = 6.685 \cdot 10^{11} \cdot \exp\left(\left(-2.94 + 3\left(\frac{T}{11600} - 0.026\right)\right)/T_e\right)$	$m^3/(s \cdot mol)^{-1}$	1.26	[7]
10	$Ar^* + Ar^* \rightarrow e + Ar + Ar^+$	$k_{10} = 9.785 \cdot 10^7 \cdot T^{0.5}$	$m^3/(s \cdot mol)^{-1}$	–	[7]
11	$Ar^* + Ar \rightarrow Ar + Ar$	$k_{11} = 1807$	$m^3/(s \cdot mol)^{-1}$	–	[7]
12	$Ar_2^* + Ar_2^* \rightarrow 2Ar + e + Ar_2^+$	$k_{12} = 9.785 \cdot 10^7 \cdot T^{0.5}$	$m^3/(s \cdot mol)^{-1}$	–	[7]
13	$2Ar + Ar^+ \rightarrow Ar + Ar_2^+$	$k_{13} = 2.72 \cdot 10^7 \cdot T^{-1}$	$m^6/(s \cdot mol^2)^{-1}$	–	[7]
14	$2Ar + Ar^* \rightarrow Ar_2^* + Ar$	$k_{14} = 1.197 \cdot 10^4$	$m^6/(s \cdot mol^2)^{-1}$	–	[7]
15	$Ar + Ar_2^+ \rightarrow 2Ar + Ar^+$	$k_{15} = 3.649 \cdot 10^{12} \cdot T^{-1} \exp\left(-\frac{1.238 \cdot 10^5}{RT}\right)$	$m^3/(s \cdot mol)^{-1}$	–	[7]
16	$Ar^* \rightarrow Ar$	$k_{16} = 3.145 \cdot 10^5$	s^{-1}	–	[7]
17	$Ar_2^* \rightarrow Ar + Ar$	$k_{17} = 6 \cdot 10^7$	s^{-1}	–	[7]
		POVRCHOVÉ REAKCE			
	$Ar^* \rightarrow Ar$			–	
	$Ar_2^* \rightarrow 2Ar$			–	
	$Ar^+ \rightarrow Ar$			–	
	$Ar_2^+ \rightarrow 2Ar$			–	

**Teplota elektronů T_e vystupující v rychlostních konstantách je uváděna v [K] stejně jako teplota neutrálního plynu T.

V rámci empiricky změřených rychlostních konstant k_j vystupuje však teplota jen jako bezrozměrná veličina.

KAPITOLA

METODA VÝPOČTU 4

Tato kapitola pojednává o metodách, kterými byl tento numerický model řešen a o nastavení vnitřních parametrů programu Comsol Multiphysics. Úvod této kapitoly je věnován stručnému seznámení s metodou konečných prvků (*ang.* Finite Element Method). Dále následuje popis stabilizačních mechanismů nelineárních plazmových modelů a výkonové modulace.

4.1 Metoda konečných prvků

K popisu mnoha prostorově či časově závislých fyzikálních dějů slouží často *parciální diferenciální rovnice* (PDR). Ty v mnoha případech nelze řešit pomocí analytických metod a je potřeba využít aproximací založených typicky na nějakém druhu diskretizace. Tyto diskretizační metody aproximují PDR s numerickými rovnicemi, které už lze řešit numerickými metodami. Cílem této sekce je stručné seznámení s metodou konečných prvků, kterou používá software COMSOL Multiphysics k řešení diferenciálních rovnic. K důkladnějšímu pochopení této problematiky slouží celá řada odborných článků a literatury např. [28–30]

Metoda konečných prvků je systematický způsob, jak převést funkce z nekonečně dimenzionálního prostoru funkcí na funkce v konečně dimenzionálním prostoru funkcí a nakonec na obyčejné vektory z vektorového prostoru, které lze řešit pomocí numerických metod. FEM se skládá z několika hlavních kroků a těmi jsou diskretizace výpočetní domény, výběr vhodné interpolační funkce, sestavení prvkových a globálních rovnic, sestavení okrajových podmínek a nakonec řešení těchto rovnic. [28].

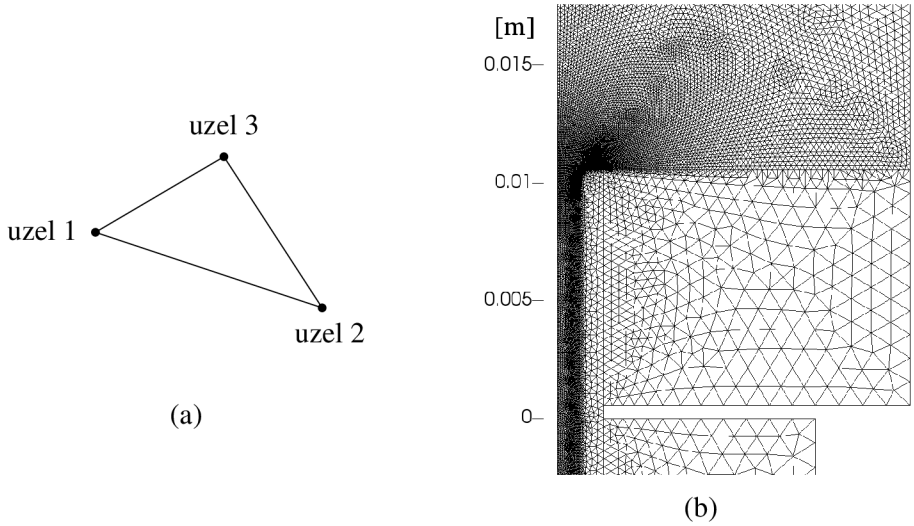
Uvažujme obecnou časově závislou diferenciální rovnici, která má být řešená na doméně Ω

$$A\left(u, \frac{\partial u}{\partial x_\mathrm{i}}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_\mathrm{i}^2}, \frac{\partial u}{\partial t}\right) = f(x_\mathrm{i}, t) \tag{4.1}$$

kde u je neznámá funkce, x_i je prostorová souřadnice a t je časová souřadnice.

Nejprve je potřeba rozdělit výpočetní doménu na konečný počet elementů, kterému se říká mesh. V případě jedno-dimenzionálního problému bude elementem interval. V případě dvourozměrného problému se doména nejčastěji rozděluje pomocí trojúhelníků obr. č. 4.1a, obdélníků či jiných tvarů. K diskretizaci trojrozměrných problémů se využívá čtyřstěnů, šestistěnů, krychlí a podobných geometrických objektů. Vraťme se opět k dvourozměrné doméně. V této práci se využívá trojúhelníkové sítě, která je oproti obdélníkové síti více flexibilní co se týče složitějších a nepravidelných geometrií [31]. Při rozdělování domény je potřeba, krom tvaru elementů, uvážit i jejich velikost čili jemnost sítě. Jemnější síť bude mnohem pravděpodobněji konvergovat ke správnému řešení, bude však mnohem náročnější na výpočetní výkon.

Dalším krokem je nalezení vhodné interpolační funkce, čili převedení diferenciální rov-



Obrázek 4.1: (a) Tvar trojúhelníkového elementu používaného k diskretizaci 2D geometrií a (b) ukázka jemnosti výpočetní sítě použité při modelování v této práci.

nice na algebraickou. V případě časově závislého problému bude závislá proměnná u vyjádřená jako

$$u(x_\mathrm{i},t) \approx u^\mathrm{e}(x_\mathrm{i},t) = \sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{N}} u_\mathrm{j}^\mathrm{e}(t)\psi_\mathrm{j}^\mathrm{e}(x_\mathrm{i}) \tag{4.2}$$

kde $\psi_\mathrm{j}^\mathrm{e}(x_\mathrm{i})$ je interpolační funkce závislá pouze na prostorových souřadnicích a $u_\mathrm{j}^\mathrm{e}(t)$ jsou uzlové body, které jsou závislé pouze na čase. Tato časově-prostorová konečně prvková formulace časově závislého problému zahrnuje dva kroky:

1 *Prostorovou aproximaci*, která s řešením rovnice u, kterou uvažujeme, zachází stejně jako v případě řešení pro ustálený stav s tím, že všechny časově závislé členy nechává zahrnuty ve formulaci. Pokud je řešení separovatelné podle proměnných $u(x,t) = T(t)X(x)$, nebo pokud separovatelné řešení není, ale uvažujeme dostatečně malý časový krok, můžeme rovnici (4.2) v tomto tvaru využít [28].

2 *Časovou aproximaci*, která uvažuje rozdělení obyčejné diferenciální rovnice na konečný počet časových derivací. Tyto časové kroky převedou systém obyčejných diferenciálních rovnic na soubor algebraických rovnic mezi u_j^e v čase $t_{\mathrm{s}+1} = (s+1)\Delta t$, kde Δt je časový krok a s je nezáporné celé číslo [28].

Touto dvouprvkovou aproximací získáme kontinuálním řešení prostorových souřadnic v diskrétních časových intervalech [28]

$$u(x_\mathrm{i},t_\mathrm{s}) \approx u^\mathrm{e}(x_\mathrm{i},t_\mathrm{s}) = \sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{N}} u_\mathrm{j}^\mathrm{e}(t_\mathrm{s})\psi_\mathrm{j}^\mathrm{e}(x_\mathrm{i}) \qquad (s = 0,1,\ldots.) \tag{4.3}$$

Dalším krokem je sestavení tzv. slabého tvaru (*eng.* weak form) řešené diferenciální rovnice, která převádí rovnici (4.1) na tvar

$$\int_\Omega w\left[A\left(u, \frac{\partial u}{\partial x_\mathrm{i}}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_\mathrm{i}^2}, \frac{\partial u}{\partial t}\right) - f(x_\mathrm{i},t)\right] d\Omega = 0 \tag{4.4}$$

kde w je libovolná hladká funkce, které se také říká testovací funkce. Rovnice (4.2) předpokládá, že ve vybraný časový okamžik $t > 0$ může být funkce u aproximována lineární

kombinací $\psi_{\mathrm{j}}^{\mathrm{e}}$ a $u_{\mathrm{j}}^{\mathrm{e}}(t)$, kde $u_{\mathrm{j}}^{\mathrm{e}}(t)$ je hodnota u v čase t v j-tém uzlovém bodě elementu Ω_{e}. Jedná se tedy o separaci prostorových a časových komponent, které nejsou v obecném případě platné. Pokud však bude časový krok dostatečně malý, jak už bylo zmíněno dříve, můžeme takto dostat poměrně přesné řešení i pro problémy, kde není možné separovat prostorové a časové proměnné [28]. Substitucí $w = \psi_{\mathrm{i}}(x_{\mathrm{i}})$ pro i-tou rovnici systému dostáváme tzv. Galerkinovu metodu. Nakonec dostaneme systém rovnic, které můžeme v maticovém tvaru zapsat jako

$$[K]\{u\} + [M]\{\dot{u}\} = \{F\} \tag{4.5}$$

kde $[K]$ je matice globálních koeficientů, $[M]$ je hmotnostní matice, $\{u\}$ je vektor koeficientů $u_{\mathrm{j}}^{\mathrm{e}}$ a $\{F\}$ tzv. zdrojový vektor [28]. K řešení časově závislých diferenciálních rovnic se v této práci využívá metody BDF (Backward Differentiation Formula) či Generalized alpha method.

Jedním z posledních kroků je nastavení okrajových podmínek. V případě časově závislého problému budeme potřebovat dvě okrajové podmínky a jednu počáteční podmínku

$$u|_{\partial\Omega} = u_{\mathrm{BC}} \tag{4.6}$$

což je tzv. Dirichletova okrajová podmínka, která udává konkrétní hodnotu na okraji výpočetní domény. Další okrajovou podmínkou je tzv. Neumannova okrajová podmínka, která udává hodnotu funkce u první derivace podle prostorové souřadnice

$$\frac{\partial u}{\partial x_{\mathrm{i}}}|_{\partial\Omega} = u_{\mathrm{BC}} \tag{4.7}$$

v poslední řadě je potřeba zadat počáteční podmínku

$$u(x_{\mathrm{i}}, t) = u_{\mathrm{t=0}} \tag{4.8}$$

Závěrečným krokem je samotné řešení těchto rovnic. Programy řešící parciální diferenciální rovnice v sobě mívají zabudované řešiče (*ang.* solvers), které hledají řešení pomocí různých metod. V naší práci využíváme tzv. přímých řešičů (zabudovaných v programu COMSOL multiphysics) PARDISO a MUMPS [13]. Tyto řešiče řeší systém lineárních rovnic přímo, což znamená že využívají eliminací aby získaly matici v trojúhelníkovém tvaru.

4.2 Stabilizace silně nelineárních modelů

Sestavení vhodných fyzikálních rovnic stejně jako sestrojení geometrie a výpočetní sítě daného problému je mnohdy ta poměrně lehčí část sestavení nelineárních numerických modelů. V následujícím textu je několik autorových postřehů s prací v programu Comsol Multiphysics ver. 5.2, které vedly k větší stabilitě a konvergenci simulace.

1. **Logaritmické vyjádření**

   Comsol nabízí možnost řešit některé proměnné v logaritmickém vyjádření. Tato reformulace zajistí, že hmotnostní zlomek jakéhokoliv druhu částic nebude nikdy

menší než nula. Zatímco bývá tato formulace mnohem stabilnější, přináší do modelu další nelinearitu a tím bývá výpočetní doba delší [20]. Dalším důvodem pro použití logaritmického vyjádření je fakt, že hustoty různých druhů částic stejně jako hustota energie elektronů se může měnit hned o několik řádů v poměrně krátké vzdálenosti [13].

2. **Stabilizační faktory**

V případě použití logaritmické formulace může dojít k problémům, pokud se hmotnostní zlomek některého druhu částic bude blížit k nule. V takovém případě Comsol nabízí možnost přidat člen k veličinám popisujících přírůstek či úbytek druhů částic.

$$R_{\mathrm{k,tot}} = R_{\mathrm{k}} + \exp(-\iota \ln(n_{\mathrm{k}})) \tag{4.9}$$

K problémům s řešením může dojít i v případě, že se k nulovým hodnotám bude blížit elektronová hustota či hustota energie elektronů. V tomto případě můžeme upravit člen přírůstku či úbytku elektronové hustoty R_{e} jako

$$R_{\mathrm{e}} = N_{\mathrm{A}} \exp(-\zeta \ln(n_{\mathrm{e}})) \tag{4.10}$$

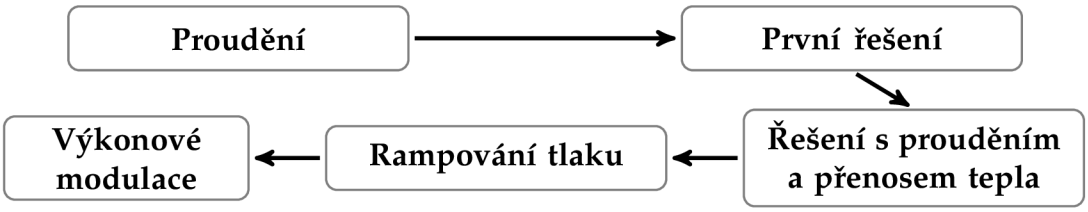
takto upravený výraz zajistí, že elektronová hustota nikdy neklesne ve výpočetní doméně k nule a v případě vyšších hodnot elektronové hustoty se tento stabilizační výraz bude zanedbatelně malý. Stejným způsobem se pak upraví člen pro hustou elektronové energie

$$R_{\varepsilon} = N_{\mathrm{A}} \exp(-\zeta \ln(n_{\varepsilon})) \tag{4.11}$$

Comsol automaticky používá hodnotu stabilizačních faktorů 1. Pro modelování v oblasti atmosférického tlaku může být výhodnější použít hodnotu 0.5.

3. **Několika krokový postup**

U silně nelineárních multifyzikálních problémů je vhodné, ne-li nezbytné, použít tzv. několika krokový postup, abychom dosáhli požadované konvergence a dostali relevantní výsledky. Takovýto postup rozděluje daný problém na několik segmentů, které řeší a spojuje dané fyzikální moduly postupně jak lze vidět na obr. č. 4.2.



Obrázek 4.2: Schéma několika krokového postupu.

Máme-li model obsahující proudění plynu, je výhodné si předpočítat rychlostní pole. Toto bývá většinou prvním krokem celého procesu. Obsahuje-li model vícero

fyzikálních modulů (proudění + přenos tepla + elektromagnetické pole + transportní rovnice) je pravděpodobné, že se nám nepodaří najít počáteční řešení numerické simulace. První řešení se tudíž hledá pro zjednodušený model, což je model, který řeší pouze rovnice elektromagnetického pole a transportní rovnice s předpočítaným rychlostním polem. Často je také potřeba hledat první řešení za zjednodušených podmínek, např. nižšího tlaku.

V dalším kroku se na předešlé výsledky rampuje neizotermální proudění. V případě, že simulace nekonverguje je potřeba rozdělit tento krok na dvě studie, přičemž první z nich prováže první řešení s prouděním a druhá pak s přenosem tepla.

Po tomto provázání veškerých modulů následuje rampování do cílových podmínek a finálním krokem je pak přidání výkonové modulace.

4. **Nastavení časového kroku**

   Plazmový výboj obsahuje mnoho různých dějů, které probíhají na různé časové škále, je tedy důležité jim uzpůsobit časový krok simulace. Změny elektromagnetického pole probíhají takřka okamžitě. Změny energie elektronů probíhají na časové škále menší než *ns*, transport elektronů v rámci *ns*, transport iontů v rozmezí μs, transport excitovaných částic v řádech desetin *ms* a proudění s přenosem tepla se mění v řádech *ms*. S ohledem na tyto děje je velice vhodné nastavovat časový krok simulace relativně malý, abychom podchytili změny probíhající ve výboji a zlepšili tím konvergenci simulace.

5. **Nastavení vnitřních parametrů časově závislého řešiče**[1]

   Jednou z úplně nejdůležitějších částí simulace silně nelineárních modelů je správné nastavení řešičů. V mnoha případech i s dobře nastavenou fyzikou a dostatečně jemnou výpočetní sítí nemusí model konvergovat. V následné části autor uvádí několik rad a postřehů, jak nastavit vnitřní parametry řešičů simulačního prostředí Comsol Multiphysics 5.2, které mohou zlepši konvergenci simulací.

   a) *Segregace kroků* (*ang.* Segregated steps)
      Nelineární multifyzkální problémy nebývá většinou výhodné řešit tzv. plně provázaným přístupem (*ang.* Fully coupled approach). takto bychom řešili totiž veškeré fyzikální moduly najednou bez možnosti jejich jednotlivého nastavení a navíc to bývá výpočetně mnohem náročnější než přístup segregace kroků. Oproti plně provázenému přístupu řeší segregovaný jednotlivé částí postupně dokud nedosáhne požadované konvergence u každé z nich. Je výhodné si v případě modelu obsahujícím proudění, elektromagnetické pole, plazma s přenosem tepla rozdělit do těchto tří skupin. U každé z nich pak

[1] Během práce na tomto modelu se autor setkal s různými problémy a chybami, které v sobě bohužel program Comsol Multiphysics 5.2 obsahuje. Jedním z nejvíce nepříjemných chyb, které tento program hlásil, byla chyba s názvem: *Undefined value found. -Detail: Undefined value found in the stiffness matrix.* Tato chybová hláška se objevovala v případech pokusu o spuštění simulace z předem napočítaných simulací. Jedná se však o chybu, kterou se opětovným spuštěním nebo smazáním dat z právě používané studie dá zbavit a simulace poté normálně běží. Také se občas stávalo, že některé už dříve spočítané studie konvergovaly za úplně totožných podmínek velmi špatně. Teto chyby se dá zbavit stejným postupem jako u předem zmíněné chyby.

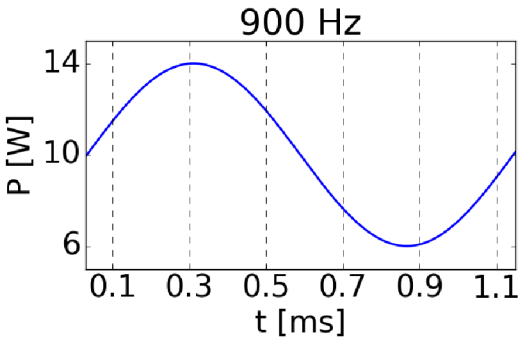
můžeme nastavit požadovanou míru tolerance pro konvergenci stejně jako druh řešiče pro optimalizaci simulace.

b) *Aktualizace jakobiánu*
Toto je jedna z možností, kterou lze nastavit v segregovaném kroku. Jedná se o častost přepočítání Jakobiánu pro Newtonovské iterace. Ze tří nabízených možností (*Minimal*, *On every iteration* a *Once per time step*) je nejvýhodnější z hlediska stability a konvergence využít možnosti přepočtu každou iteraci čili *On every iteration*.

c) *Technika ukončení* (*ang.* Termination technique)
Technikou ukončení určujeme jakým způsobem se budou ukončovat Newtonovské iterace. Comsol 5.2 nabízí několik možnosti ukončovacích technik. Nejčastěji se však využívá Tolerance (*ang.* Tolerance) - v této technice se nastavuje hodnota tolerance, které se program snaží dosáhnout a maximální počet Newtonových iterací, po kterých se proces ukončí i když nesplní požadované kritérium pro toleranci.

4.3 Výkonová modulace

Řízení reaktivních částic či toku tepla je vlastnost, která přináší celou řadu výhod při práci s plazmatem. Jednou z možností, jak této kontroly dosáhnout, je pomocí modulace výkonu. Výkonovou modulací myslíme periodickou změnu výkonu dodávaného do systému. Výkon, který přivádíme do systému přímo ovlivňuje energii elektronů → ta úzce souvisí s chemickými reakcemi v plazmatu → ty zase způsobují ohřívání neutrálního plynu. Těmito procesy se self-konzistentně prodlužuje plazmový sloupec. Jedná se však o nelineární proces. V průmyslu se nejčastěji využívá sinusové, obdélníkové či pilovité modulační obálky.



Obrázek 4.3

Obrázek 4.4: Sinusová modulace výkonu s frekvencí 900 Hz, střední hodnotou výkonu 10 W a amplitudou 4 W.

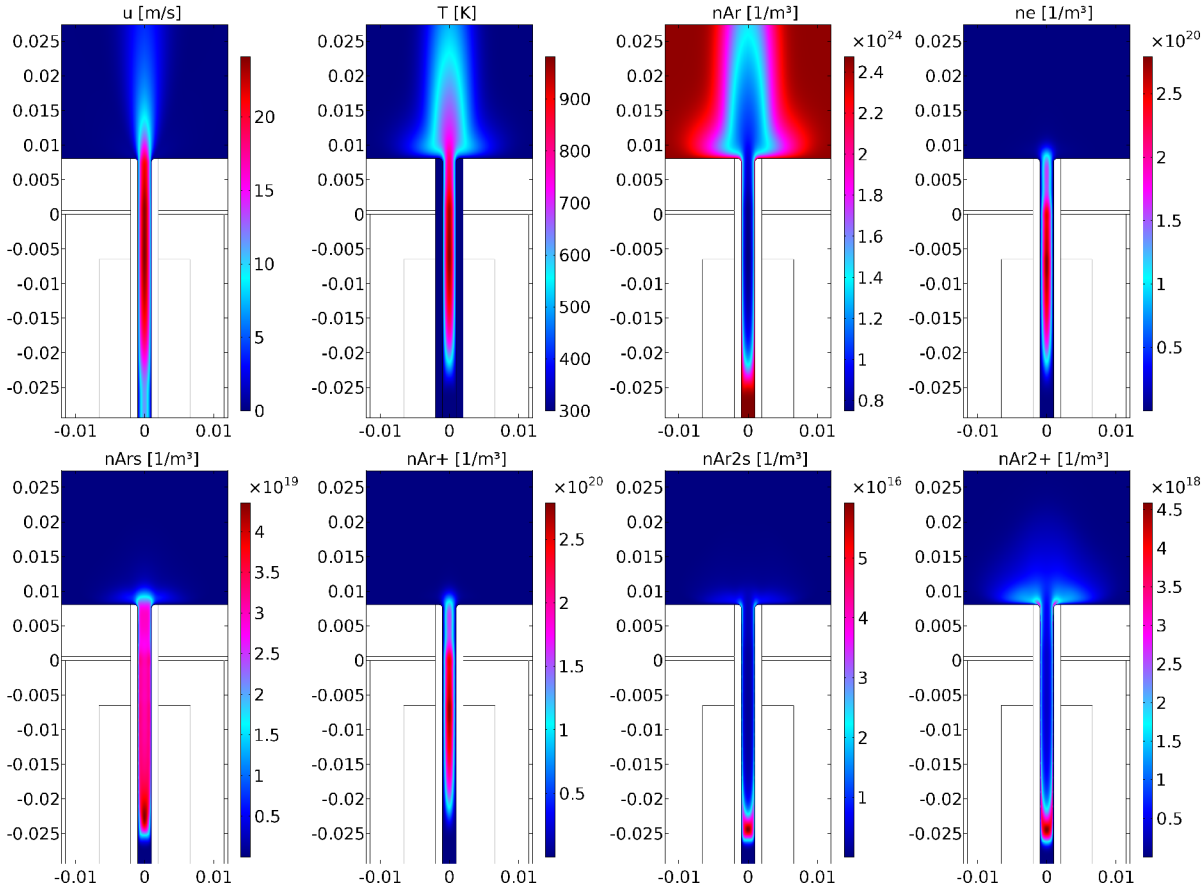
KAPITOLA

VÝSLEDKY SIMULACE 5

V této kapitole se prezentují výsledky simulací za ustáleného stavu a časového průběhu s výkonovou modulací sinusovým signálem o frekvenci 900 Hz. U každé z těchto simulací jsou prezentována data vybraných parametrů plazmatu. V případě simulace s modulovaným výkonem se diskutuje vývoj těchto parametrů v závislosti na čase a poloze ve výpočetní doméně.

5.1 Ustálený stav

Ustáleným stavem myslíme v tomto případě zrelaxovanou časovou simulaci mikrovlnného výboje bez jakýkoliv modulací, kterou jsme použili jako výchozí data set simulace s modulovaným výkonem. U simulace ustáleného stavu byla velikost výkonu dodávaného do systému 10 W, tlak 0.1 atm s průtokem 100 sccm. Na obr. č. 5.1 vidíme 2D

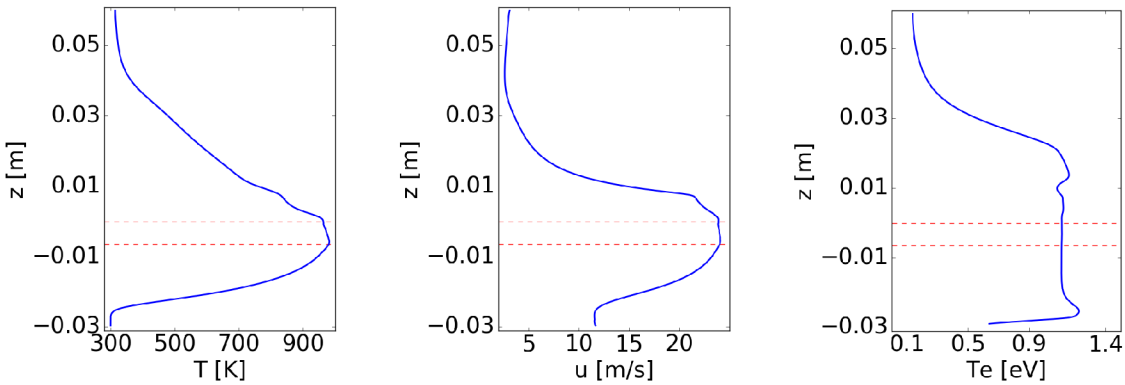


Obrázek 5.1: Grafy vybraných parametrů plazmatu. Horní řada zleva: rychlost proudění plynu (u), teplota (T), hustota argonový neutrálů (nAr) a hustota elektronů (ne). Dolní řada zleva: hustota excitovaných atomů argonu (nArs), hustota argonových iontů (nAr+), hustota excitovaných molekul argonu (nAr2s) a hustota ionizovaných argonových molekul (nAr2+).

grafy s teplotou, rychlostí proudění plynu a typickými veličinami pro argonové plazma jako je hustota argonového neutrálu (nAr), hustota elektronů (ne), hustota excitovaného

argonu (nArs), excitované molekuly argonu (nAr2s), hustotu argonového iontu (nAr+) a iontu argonové molekuly (nAr2+). Na obr. č. 5.2 a 5.3 jsou poté vyneseny axiální hodnoty těchto veličin. Teplota výboje roste z 300 K u vtoku plynu do mikrovlnné trysky k 950 K v oblasti plazmového sloupce. Tato maximální teplota výboje je nižší oproti jiným studiím [2] a experimentálně měřeným hodnotám [1] o víc než 1500 K. To je způsobeno zejména tím, že v našem případě se pohybujme v tlacích desetiny atmosféry a zároveň výkon přiváděný do systému je poměrně malý. Velikost výkonu byla záměrně zvolena tak, aby byla zhruba 10krát menší, než hodnota používaná v experimentech za atmosférického tlaku a zachoval se tak poměr výkonu ku tlaku. Teplota plynu strmě roste směrem od vtoku plynu až k místu, ve kterém se nachází excitační štěrbina mikrovlnného rezonátoru a poté pozvolněji klesá dále s osou z na obr. č. 5.2. Podobný průběh můžeme vidět i u rychlosti proudění plynu na obr. č. 5.2, kde se v místech s maximální teplotou nachází i maximální rychlost, která dosahuje velikosti až 24 m/s. Poslední z trojice těchto grafů pak vykresluje rozložení elektronové teploty, která v oblasti plazmového sloupce má hodnotu 1 eV se maximem 1.2 eV v jeho spodní části.

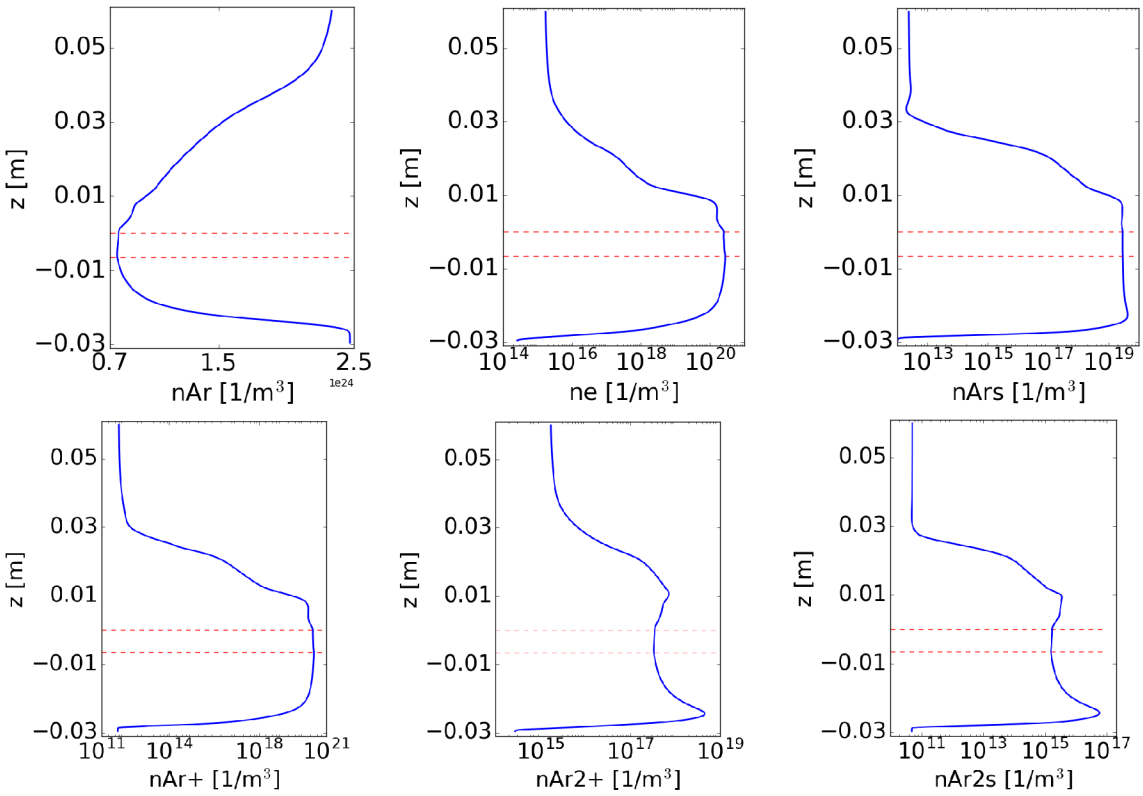
Prostorové rozložení hustoty různých druhů částic argonového výboje můžeme vidět na obr. č. 5.1 a jejich axiální rozložení na obr. č. 5.3. Axiální velikost hustoty argonových neutrálů poměrně dobře koresponduje s křivkou vývoje axiální velikosti teploty, což je způsobeno rozpínáním plynu při zvyšování teploty. Další úbytky hustoty argonového neutrálu jsou spojeny s růstem velikostí hustot ostatních druhů částic v argonovém plazmatu. Axiální velikost hustoty excitovaných argonových atomů prudce narůstá u vtoku plynu a téměř přes celou délku křemenné trubičky si drží poměrně konstantní velikost s maximem odpovídajícím hodnotám 5×10^{19} m^{-3}. Hodnoty hustot elektronů stejně jako argonového iontu mají podobný axiální profil, kdy svého maxima o velikosti 3×10^{20} m^{-3} dosahují v oblastí excitační štěrbiny mikrovlnného rezonátoru. Podobný axiální profil mají hustoty excitovaných a ionizovaných argonových molekul, které svého maxima v axiálním směru dosahují u vtoku ve spodní části plazmového sloupce, kde hustota argonového molekulárního iontu dosahuje velikosti 4.5×10^{18} m^{-3} a hustota excitovaných argonových molekul dosahuje maxima 3×10^{16} m^{-3}. Zajímavé je rozlo-



Obrázek 5.2: Zleva: Axiální hodnoty teploty, rychlosti proudění a teploty elektronů při ustáleném stavu. Červenou přerušovanou čárou je zvýrazněné umístění excitační štěrbiny mikrovlnného rezonátoru.

žení hustoty těchto částic ve výbojové trubici obr. č. 5.1. Z těchto grafů lze vidět, že hustoty excitovaných či ionizovaných argonových molekul se hlavně vyskytují na okraji

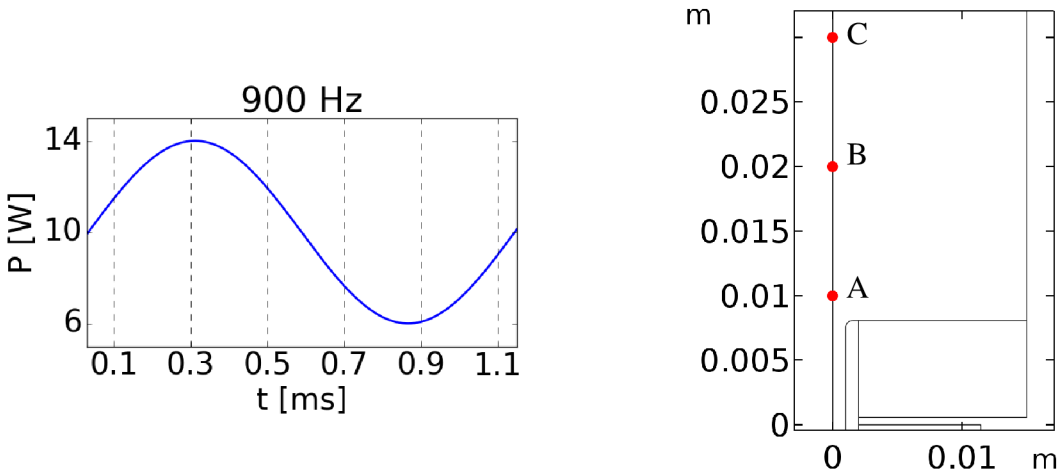
plazmatu blízko u stěn výbojové trubice a jak už bylo zmíněno, v jeho spodní části. Takovéto rozložení hustot těchto částic je způsobeno plazmochemickými reakcemi v argonovém plazmatu tab. č. 3.1. K vzniku molekulárního argonového iontu přispívá ionizace a disociace excitované argonové molekuly (reakce 6 a 12). Rozložení hustoty molekulárního argonového iontu je tedy podmíněno výskytem excitované argonové molekuly, jejíž tvorbu způsobuje trojná srážka dvou argonových neutrálů s excitovaným argonovým atomem (reakce 14).



Obrázek 5.3: Axiální hodnoty veličin při ustáleném stavu. Horní řada zleva: hustota argonových neutrálů, hustota elektronů, hustota částic excitovaného argonu. Dolní řada zleva: hustota argonového iontu, hustota argonového molekulárního iontu a hustota excitované argonové molekuly.

5.2 Modulační frekvence: Sinus 900 Hz

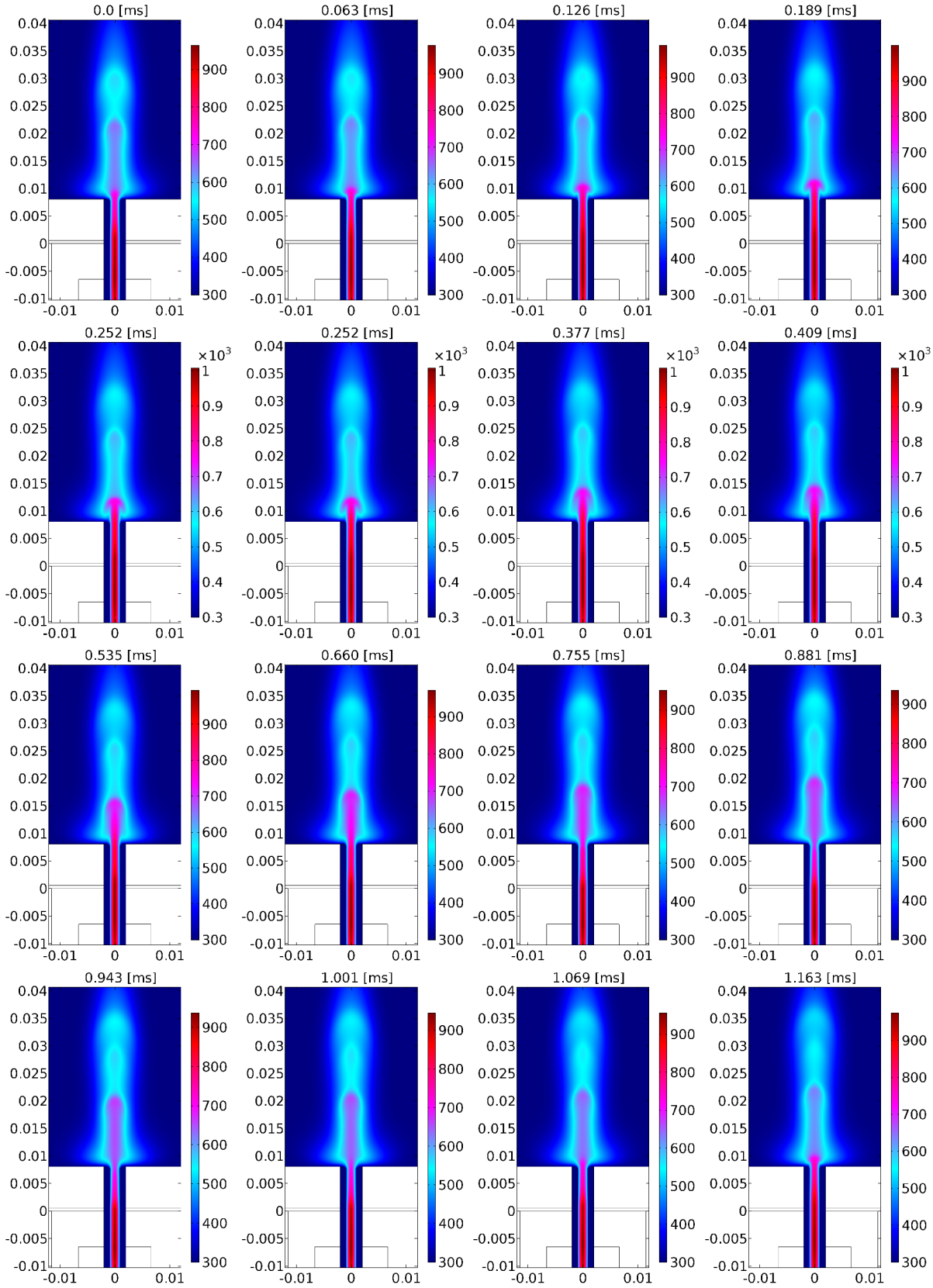
V této části se prezentují výsledky simulace s modulační frekvencí 900 Hz. Simulace probíhala za tlaku 0.1 atm, s průtokem plynu 100 sccm a s výkonovou modulací se střední hodnotou 10 W a amplitudou 4 W. Některé parametry plazmatu byly poté vyneseny do grafů v závislosti na čase jedné periody a poloze 5.4 na ose symetrie. Tyto body byly zvoleny ve vzdálenosti 1,2 a 4 cm od vrchní části mikrovlnného rezonátoru.



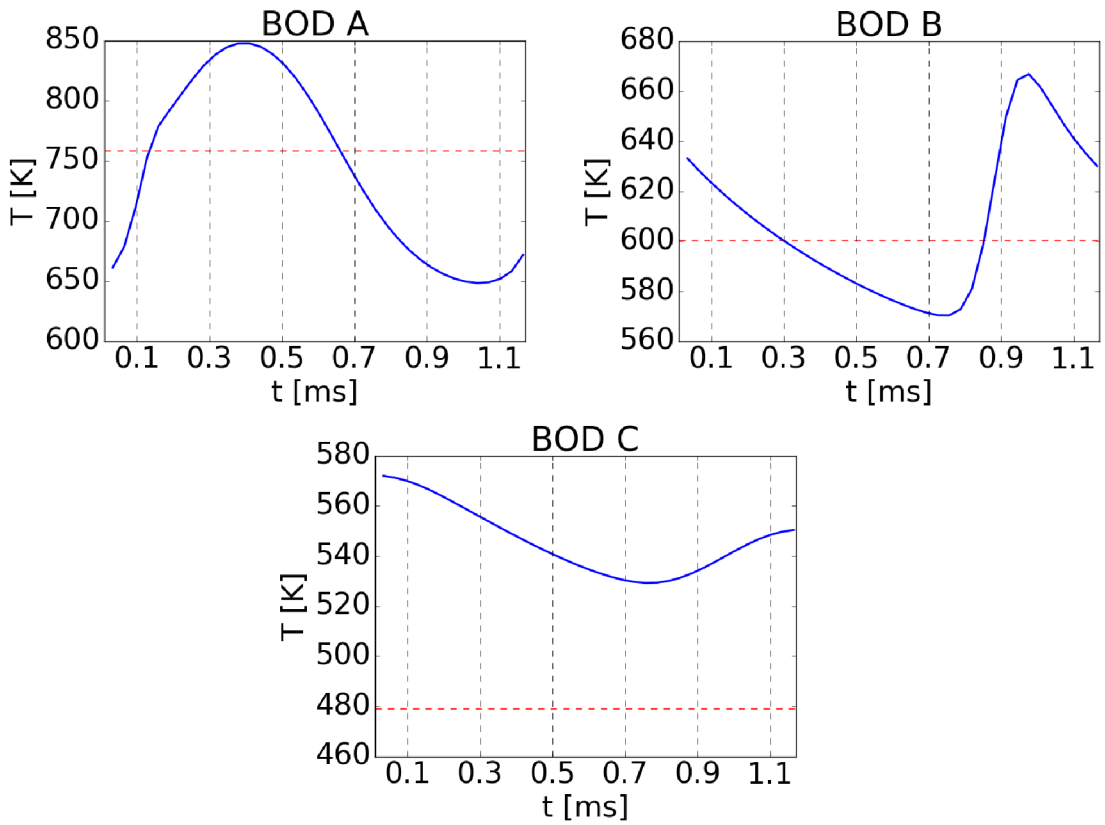
Obrázek 5.4: Sinusová modulace s periodou 900 Hz (vlevo) a vyznačené tři body, ve kterých jsme vyhodnocovali parametry plazmatu v závislosti na výkonové modulaci.

5.2.1 Vývoj teploty během jedné periody

Vývoj teploty neutrálního plynu během jedné periody výkonové modulace lze vidět na obr. č. 5.5. Maximum teploty během periody osciluje mezi hodnotami 1010 K a 950 K. Nejvyšší hodnoty teploty se pak nacházejí uvnitř plazmového sloupce v místech horní části rezonátoru. Během fáze zvyšování výkonu dochází k zahřívání plynu uvnitř výbojové trubičky. V čase 0.2 ms se začíná v oblasti ústí křemenné trubičky tvořit struktura, podobná tepelnému víru. Ta je unášena prouděním plynu dále do do domény, kde zpomaluje a pomalu splývá s teplotními artefakty po předchozí periodě. Tento průběh vývoje teploty lze přímo srovnat s experimentálními daty z článku [1], kdy k měření a zaznamenání průběhu změn teploty při výkonové modulaci používali schlierenovou fotografii. Jak lze porovnáním těchto dat vidět, průběh vývoje změn teploty v rámci jedné periody výkonové modulace poměrně dobře koresponduje s teplotními ději, které v tomto článku prezentují. Na obr. č. 5.6 vidíme vývoj teploty během jedné periody ve vybraných bodech na ose symetrie. V bodě A opisuje vývoj teploty s lehkým zpožděním vývoj výkonové modulace. V bodě B vidím poněkud jiný průběh. V této oblasti teplota pomalu klesá, až dokud sem nedorazí teplotní vír, díky kterému prudce vzroste teplota v tomto bodě. Následně pak dochází k pozvolnému ochlazování plynu díky konvekci. Teplota plynu v místě bodu C má poměrně monotonní vývoj, jehož velikost je ovlivněna teplotou plynu z předešlých period výkonové modulace. Oproti ustálenému stavu je však v tomto místě vyšší teplota, kterou způsobují právě teplotní víry pronikající do této oblasti.



Obrázek 5.5: Série grafů zachycující vývoj teploty během jedné periody výkonové modulace v oblasti ústí křemenné trubičky.



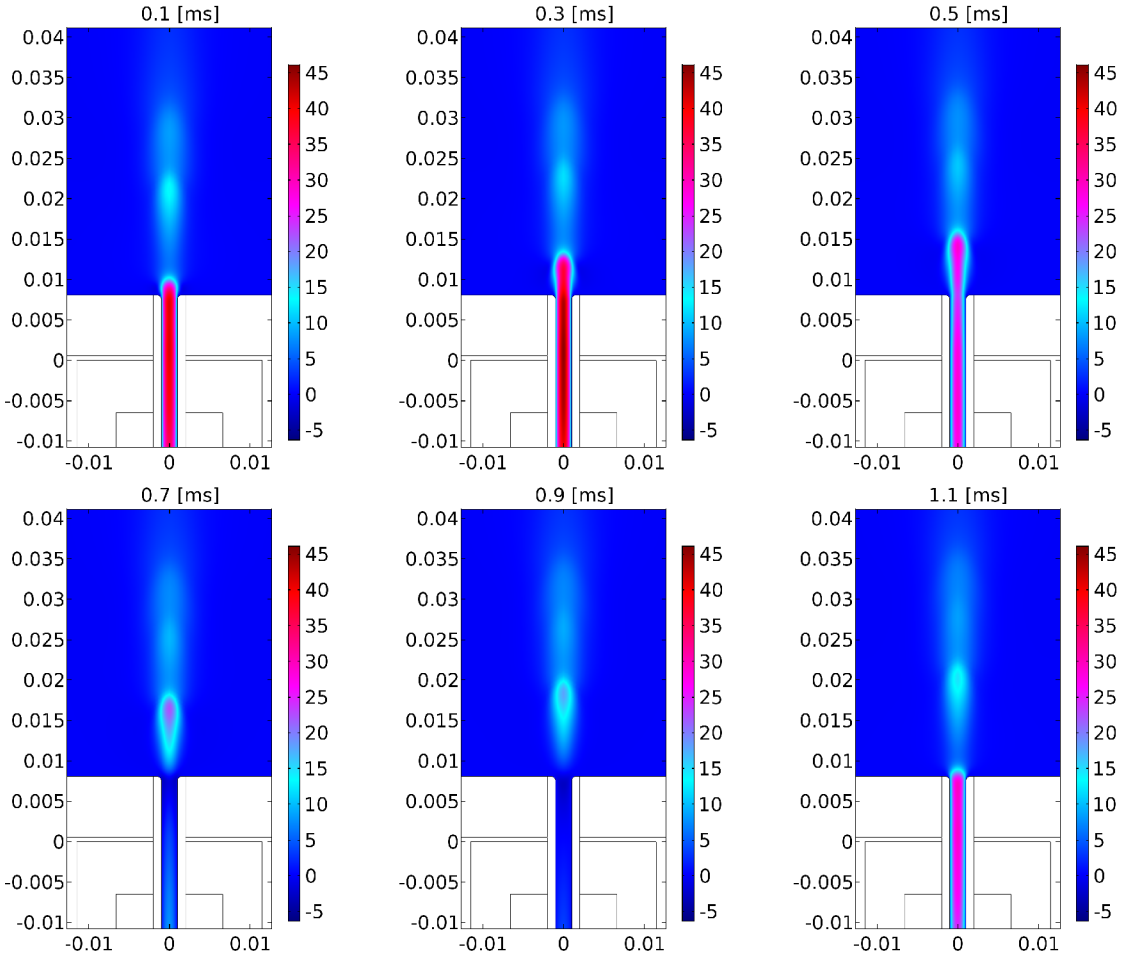
Obrázek 5.6: Grafy vývoje teploty ve vybraných bodech v závislosti na čase během jedné periody výkonové modulace. Červenou přerušovanou čarou je zde vyobrazena velikost teploty v těchto místech z ustálené simulace.

5.2.2 Proudění plynu ve výboji s modulovaným výkonem

Proudění plynu v průběhu jedné periody výkonové modulace můžeme vidět na obr. č. 5.7, na kterém je zobrazená z-složka rychlosti rovnoběžná s osou symetrie. Rychlost proudění se zvyšuje s růstem amplitudy výkonové modulace, zejména v oblasti vrchní části výbojové trubice, kde dosahuje velikosti 42 m/s. S postupným klesáním výkonu se odtrhává vrchní část expandujícího plynu od zbytku výboje a je unášena dále do domény. Rychlost této odtržené části pomalu klesá, díky chladnutí plynu a jeho rozpínání do okolního prostoru. Můžeme si také opět všimnout rychlostních artefaktů od předešlých výkonových pulzů ve vrchní části domény.

Na obr. č. 5.8 vidíme velikost z-složky rychlosti v místě ústí výbojové trubice ($z = 0.008$ m) během jedné periody modulace a rychlostní pole kolem tohoto bodu. Z těchto grafů vidíme, že zde dochází k nasávání okolního plynu zpět do výbojové trubičky zejména v momentě největšího poklesu výkonu přiváděného do systému. Toto zpětné nasávání může vysvětlovat jev, který byl pozorován v článcích [1,32], kdy spektroskopickými měřeními byla zjištěna přítomnost kyslíku během výkonové modulace uvnitř výbojové trubičky, kterou protékal argon. Z grafu rychlostního pole poté můžeme usuzovat, že dochází i k nasávání okolního plynu do teplotních vírů, jež může mít za následek růst koncentrace některých částic z okolního prostředí v tomto místě. Analýzou získaných dat můžeme stanovit rychlost teplotního víru na hodnotu zhruba 12 m/s. Je však potřeba si uvědo-

mit, že teplotní vír zpomaluje z místa svého vzniku směrem dále do výpočetní domény. Na obr. č. 5.9 můžeme vidět vývoj teploty spolu s normalizovaným rychlostním polem,

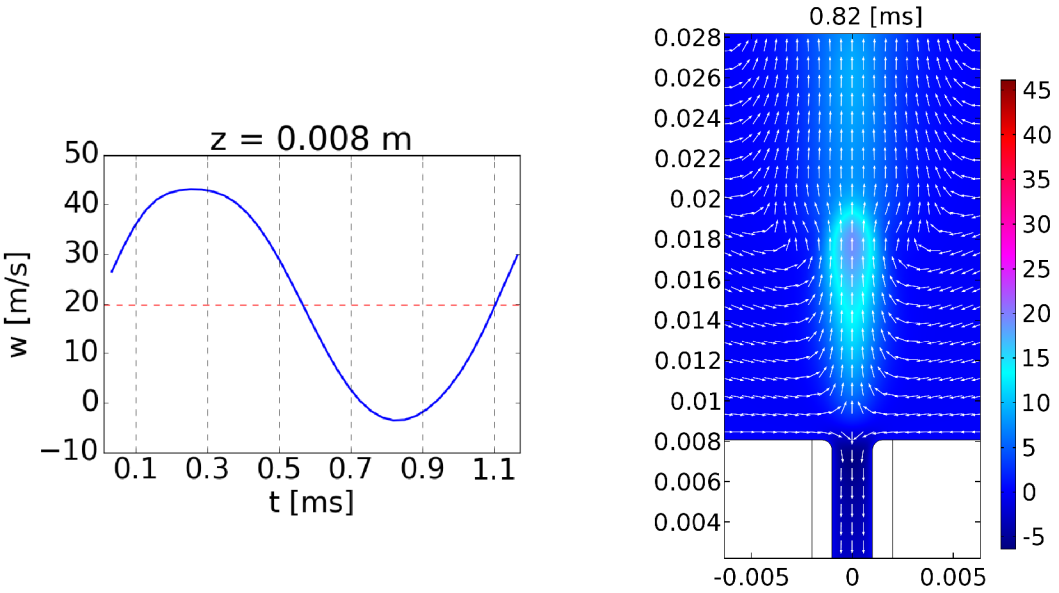


Obrázek 5.7: Série grafů zobrazujících velikost z-složky rychlosti v průběhu jedné periody výkonovém modulace v oblasti ústí křemenné trubičky.

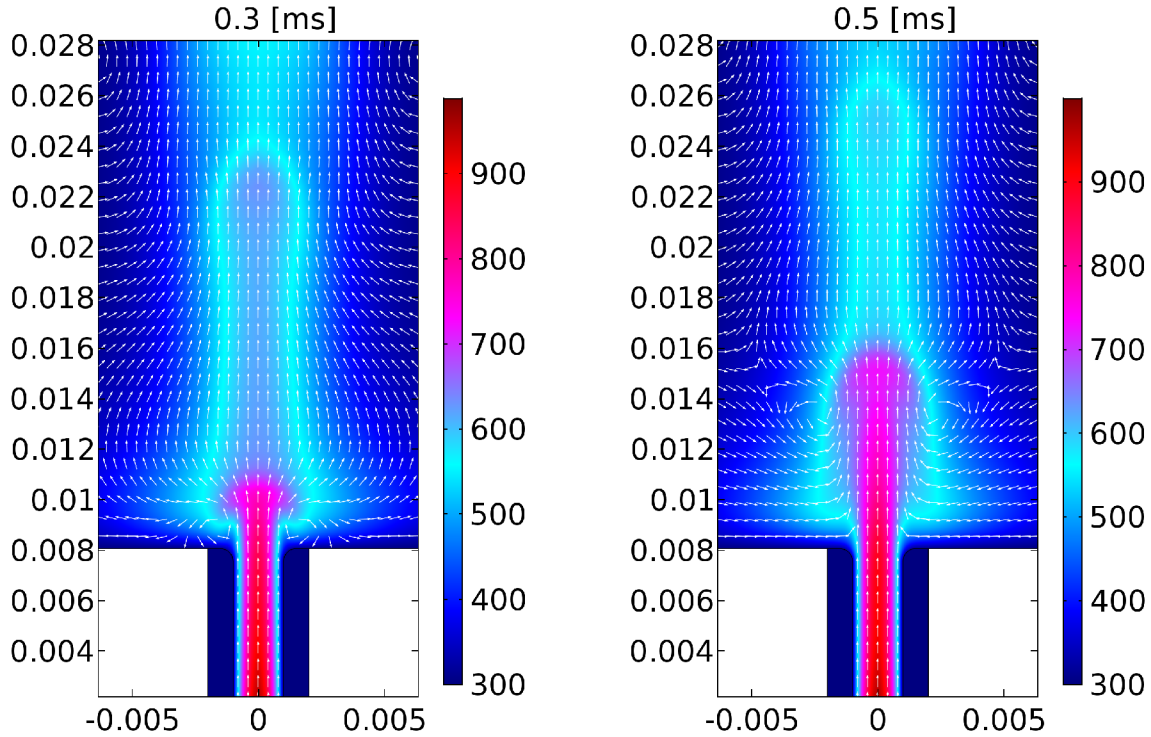
které znázorňují vírovou strukturu teplotní perturbace. Z těchto grafů je viditelné nasávání okolního vzduchu směrem do spodní částí vírové struktury. Pomocí tohoto mechanismu se mohou dostávat částice z oblasti hranice výboje do jeho středu, ke poté mohou reagovat za vzniku různých druhů částic a výrazně tak přispívat ke změnám vlastností výboje.

5.3 Hustoty částic argonového plazmatu s modulovaným výkonem

Výkonová modulace je poměrně dobrý způsob, jak řídit hustotu reaktivních částic v různých vzdálenostech od plazmové trysky. Tato část je zaměřená na diskuzi k datům získaných ze simulace a jejich případnou možnost interpretace pro reálné podmínky.



Obrázek 5.8: Vlevo: Graf vývoje z-složky rychlosti v bodě ústí výbojové trubičky v závislosti na čase jedné periody výkonové modulace, kde červenou přerušovanou čarou je zaznačena velikost rychlosti této komponenty v ustáleném stavu. Vpravo: Graf rychlostního pole v oblasti ústí křemenné trubičky v čase nejmenšího výkonu dodávaného do systému během jedné periody.

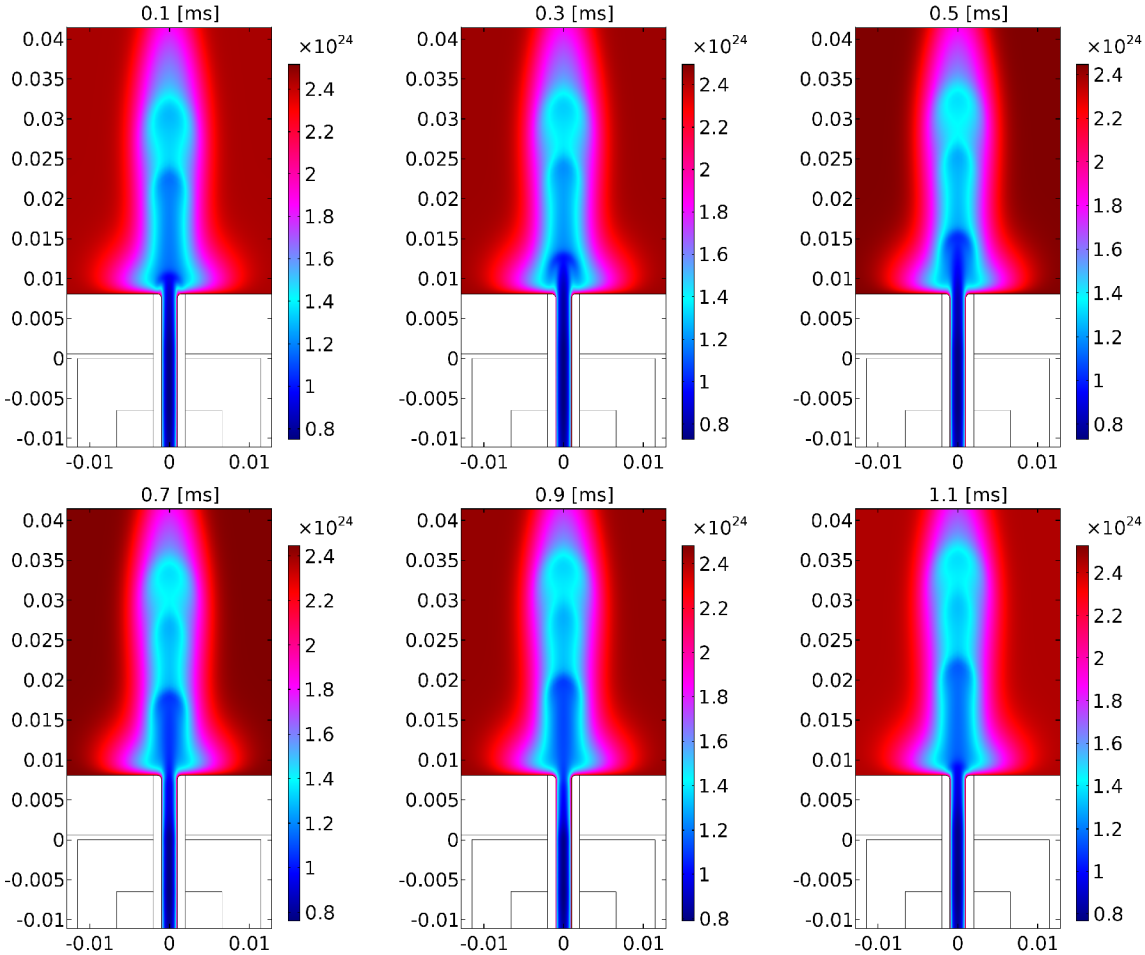


Obrázek 5.9: Grafy teploty s normalizovaným rychlostním polem v oblasti ústí výbojové trubičky v časech nárůstu výkonu v rámci periody výkonové modulace.

5.3.1 Hustota argonových neutrálů

Hustota neutrálních atomů argonu, jakožto základní druh částic argonového plazmatu vidíme na obr. č. 5.10 a 5.11. S rostoucí teplotou dochází k rozpínání neutrálního plynu a

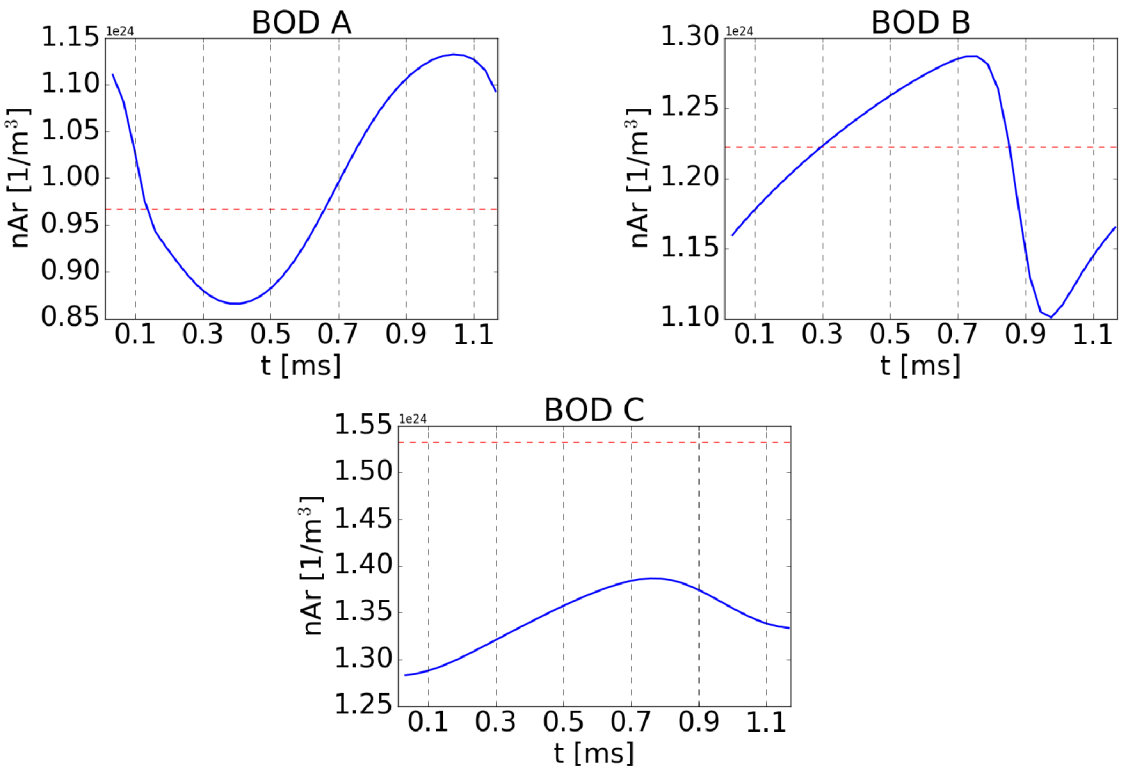
tudíž dochází ke klesání jeho hustoty v místech s vyšší teplotou. Grafy zobrazující rozložení hustoty a velikost hustoty ve vybraných bodech tedy korelují s grafy pro teplotu. V bodě A klesá hustota argonových neutrálů s rostoucí velikostí výkonu během periody výkonové modulace a dochází k růstu v časech, kdy výkon klesá. V bodě B pozorujeme postupný nárůst hustoty až do času, kdy zde přijde teplotní perturbace a prudce sníží hustotu. V bodě C je změna hustoty během jedné periody poměrně malá, má však menší velikost než v případě stavu bez výkonové modulace.



Obrázek 5.10: Série grafů znázorňující vývoj hustoty neutrálního argonu v průběhu jedné periody výkonové modulace v oblasti ústí křemenné trubičky.

5.3.2 Excitované stavy argonových atomů a molekul

Hustotu excitovaných argonových atomů a hustotu excitovaných argonových molekul můžeme vidět na obr. č. 5.12. Excitované atomy argonu se nacházejí zejména uvnitř plazmového sloupce a v oblasti ústí výbojové trubičky, kde lehce difundují do okolního prostoru. Je na místě připomenout, že tento model popisuje čistě argonové plazma za tlaku 0.1 atm. Za těchto podmínek je samotný plazmový sloupec, zvláště v místě kde vstupuje do volného prostoru, více difúzní, než za běžných podmínek, kdy jeho okolní prostředí je tvořeno vzduchem. V bodě A vidíme, že se zvyšujícím se výkonem roste i hustota excitovaných atomů argonu. Stejný průběh vidíme i v bodě B. V bodě C nao-



Obrázek 5.11: Grafy vývoje hustoty argonových neutrálů ve vybraných bodech v závislosti na čase během jedné periody výkonové modulace. Červenou přerušovanou čarou jsou zde označena hodnota velikosti této veličiny z ustálené simulace.

pak dochází k růstu koncentrace v čase, kdy je amplituda výkonové modulace těsně za svým minimem. Takovéto chování může být způsobeno disociativní rekombinací molekulárních iontů (reakce 8), která souvisí s vyšším výskytem elektronů 5.17 a argonových molekulární iontů 5.15 v tomto místě během této části periody.

V případě excitovaných argonových molekul je situace poněkud jiná. Z obr. č. 5.12 vidíme, že hustota částic je velká v oblasti mezi plazmovým sloupcem a stěnou výbojové trubice. V místě vyústění křemenné trubičky pak lehce difunduje do okolního prostoru s tendencí držet se na v oblasti mezi plazmovým sloupcem a dielektrikem. Jak už bylo uvedeno v předcházející kapitole, na vyústění křemenné trubičky přiléhá dielektrická doména se stejnými materiálovými vlastnostmi, která zamezovala zapalování výboje mezi horní částí rezonátoru a trubičkou. Bohužel díky ní jsou hodnoty a zvláště distribuce některých druhů částic poněkud zavádějící. Fyzikální mechanismy a trendy způsobené výkonovou modulací by měly být ale totožné. Excitované molekuly argonu během fáze poklesu výkonu ustupují směrem zpět do výbojové trubice a mají tendenci obepnout vrchol plazmového sloupce. S nárůstem výkonu pak rostou právě podél rozhraní plazma-dielektrikum. Časový vývoj hustoty tohoto typu částic znázorněný na obr. č. 5.13 popisuje v bodě A pokles s rostoucím výkonem. Ten je způsobený právě růstem plazmového sloupce a vytlačováním těchto molekul směrem k jeho okraji. V případě poklesu výkonu pak dochází k ustupování plazmového sloupce zpět do výbojové trubičky a k obepínání jeho špičky tímto druhem částic. V bodě B a C pozorujeme podobný průběh jako v případě excitovaných atomů argonu. Maximum průběhu v čase 0.9 ms je způsoben díky

trojným srážkám excitovaných a neutrálních atomů argonu. Nárůst koncentrace excitovaných atomů argonu má tedy v tomto místě za následek i nárůst excitovaných molekul argonu.

5.3.3 Ionizované stavy argonových atomů a molekul

Hustotu ionizovaných argonových atomů a molekul vidíme na obr. č. 5.14. V oblasti plazmového sloupce dominuje převaha atomárních iontů nad molekulárními. Molekulární ionty mají podobné rozložení jako excitované argonové molekuly a to v oblasti mezi dielektrikem a plazmatem. Podíváme-li se na vývoj hustoty molekulárních iontů, lze si všimnout jeho lemování okrajů výbojového kanálku při jeho růstu.

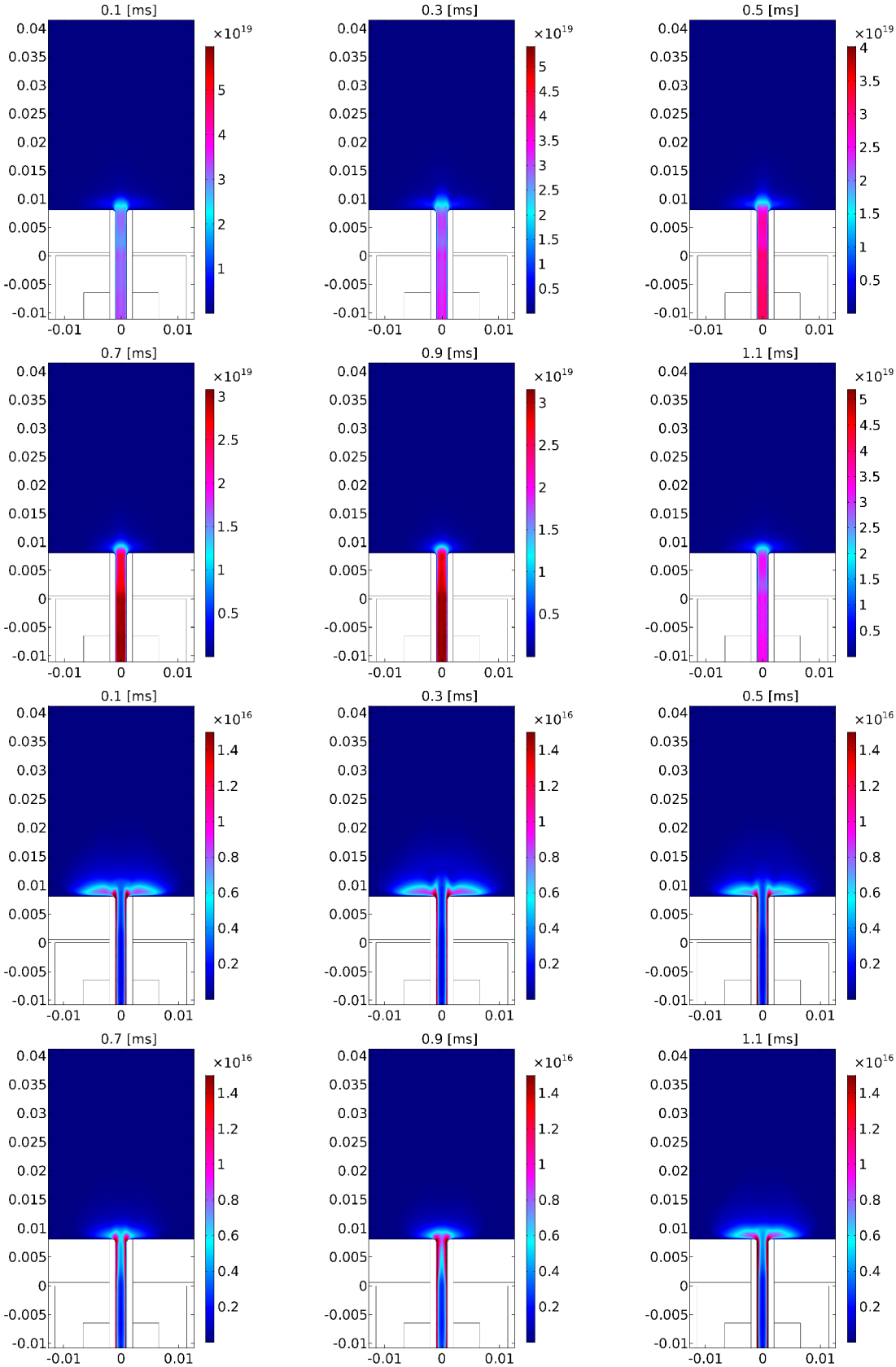
Při zvyšování výkonu roste výška plazmového sloupce, zvyšuje se teplota a zároveň roste i velikost hustoty atomárních iontů, jak lze vidět v bodě A obr. č. 5.15. V případě molekulárního iontu je klesající průběh způsoben vytlačováním rostoucího plazmového sloupce. V případě poklesu výkonu pak ustupující plazmový kanál obklopený molekulárními ionty dává za vznik růstu hodnot hustoty tohoto typu částic v tomto bodě. V bodě B je situace poněkud jiná. Jak atomární tak i molekulární iont zde mají rostoucí průběh podobný průběhu výkonové modulace. Na rozdíl od předchozího bodu, je zde dominantní molekulární iont oproti atomárnímu. To je způsobeno především tím, že rychlost trojných srážek neutrálních atomů s ionizovaným atom argonu způsobující vznik molekulárního iontu(reakce 13) převládá nad disociací ionizovaných molekul (reakce 9). V případě bodu C dominují molekulární ionty nad atomárními. Zatímco atomární argonové ionty klesají opět s poklesem výkonu dodávaného do systému, chování molekulárních iontů má přesně opačný charakter. V rámci zachování kvazineutrality je pak tento průběh totožný s elektronovou hustotou.

5.3.4 Hustota elektronů

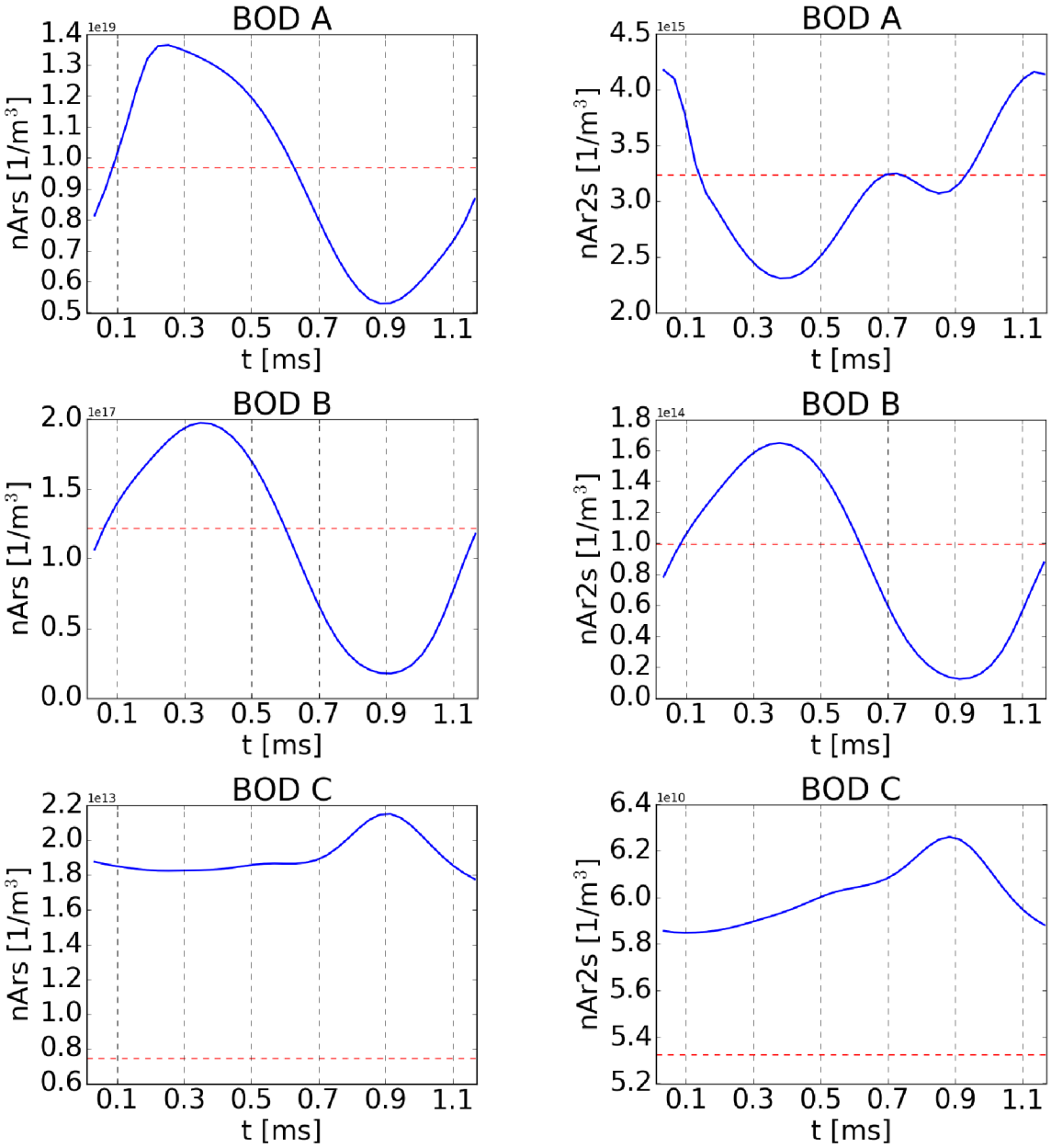
Hustotu elektronů v oblasti ústí výbojové trubičky vidíme na obr. č. 5.16. V případě zvyšování výkonu dochází k prodlužování výbojového kanálu a tudíž i k růstu elektronové hustoty. Plazmový sloupec je udržován pomocí povrchové vlny, která se šíří na rozhraní plazma-dielektrikum a nedokáže procházet skrze plazma s elektronovou hustotou větší než 7.6×10^{16} m^{-3}. Na obr. č. 5.17 vidíme vývoj elektronové hustoty v závislosti na poloze ve výpočetní doméně a času periody výkonové modulace. Zatímco v bodě A a B průběh křivky koresponduje s průběhem dodávaného výkonu, v bodě C pak můžeme vidět opačné tendence. Ty jsou způsobeny pomalým vyhasínám do doby, než do těchto míst opět dorazí další teplotní perturbace, která sebou přináší nové reaktivní částice jak z oblasti vnitřku plazmového sloupce, tak i z jeho okrajů.

5.3.5 Porovnání hodnot ustálené simulace a výkonové modulace

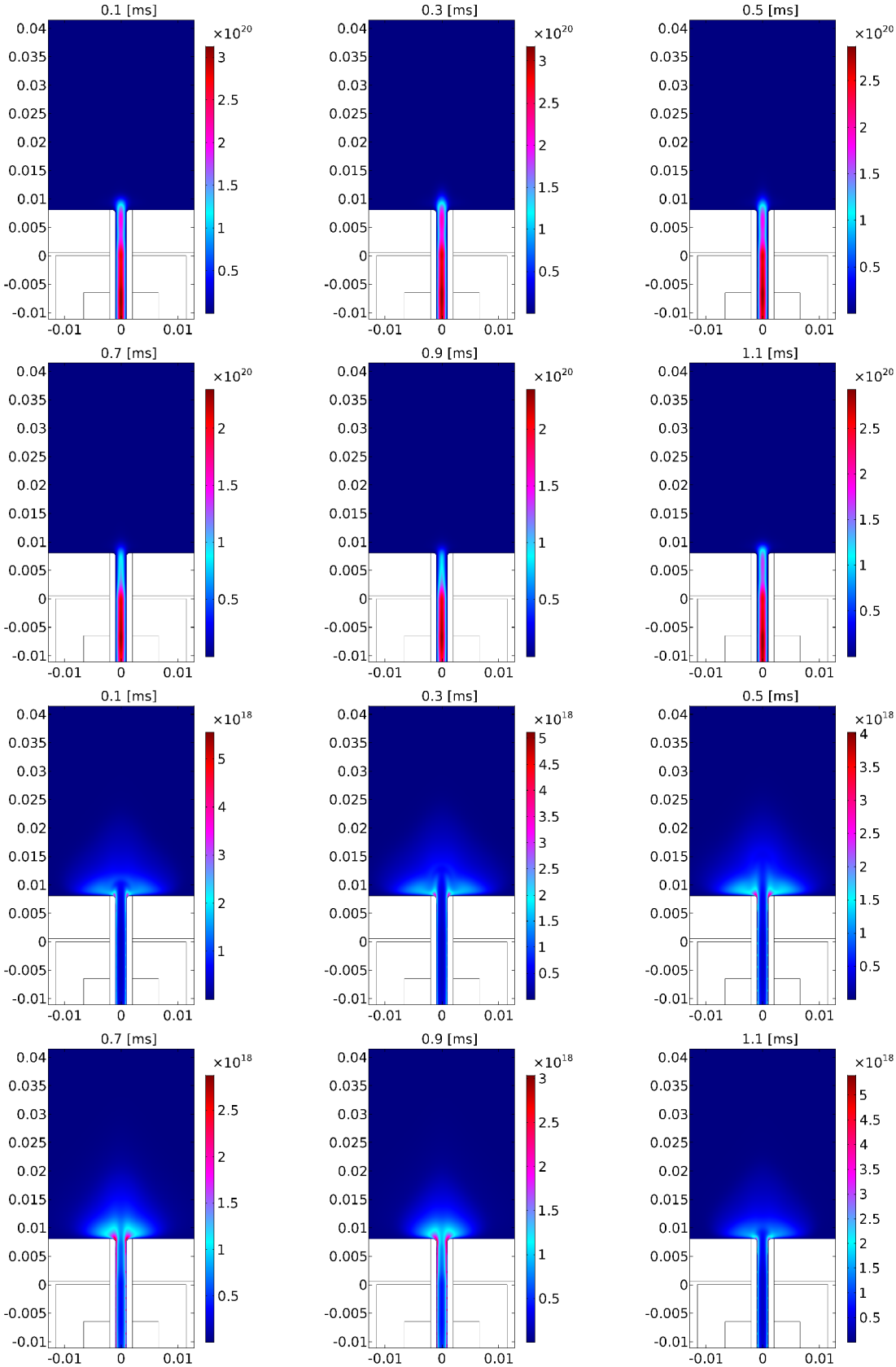
Z obr. č. 5.13,5.11, 5.15,5.17 si můžeme všimnout, že v bodě C máme daleko větší koncentrace téměř všech druhů částic argonového plazmatu oproti ustálené simulace bez výkonové modulace. Jedinou výjimkou je hustota neutrálních argonových atomů, které jsou v tomto místě v nižší koncentraci kvůli teplotnímu rozpínaní plynu. Výkonovou modulací můžeme tedy reaktivní částice dostat do větších vzdáleností než v normálním módu s konstantní hodnotou výkonu.



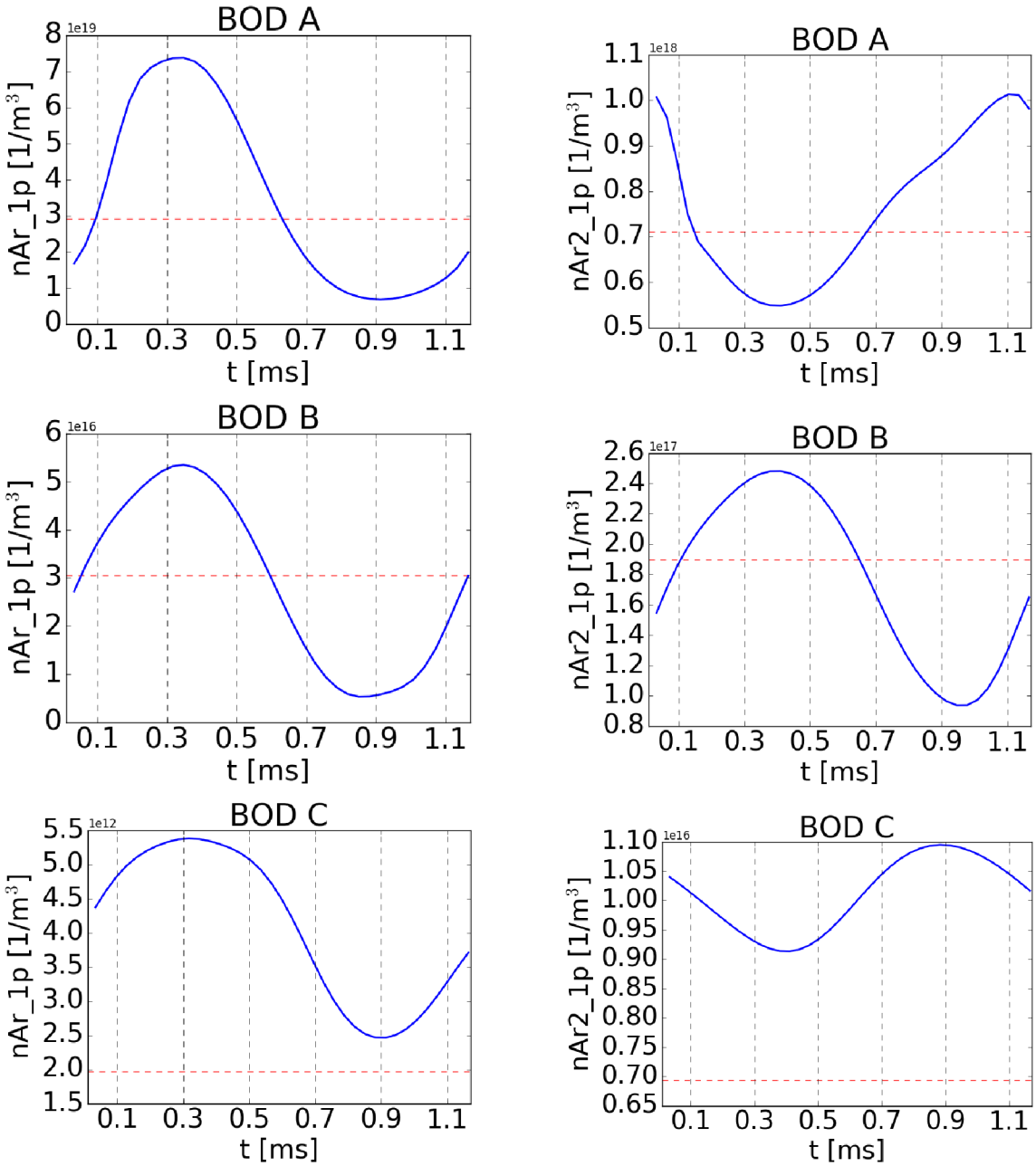
Obrázek 5.12: Série grafů hustoty excitovaných argonových atomů (horní dvě řady) a argonových molekul (spodní dvě řady) v průběhu jedné periody výkonové modulace.



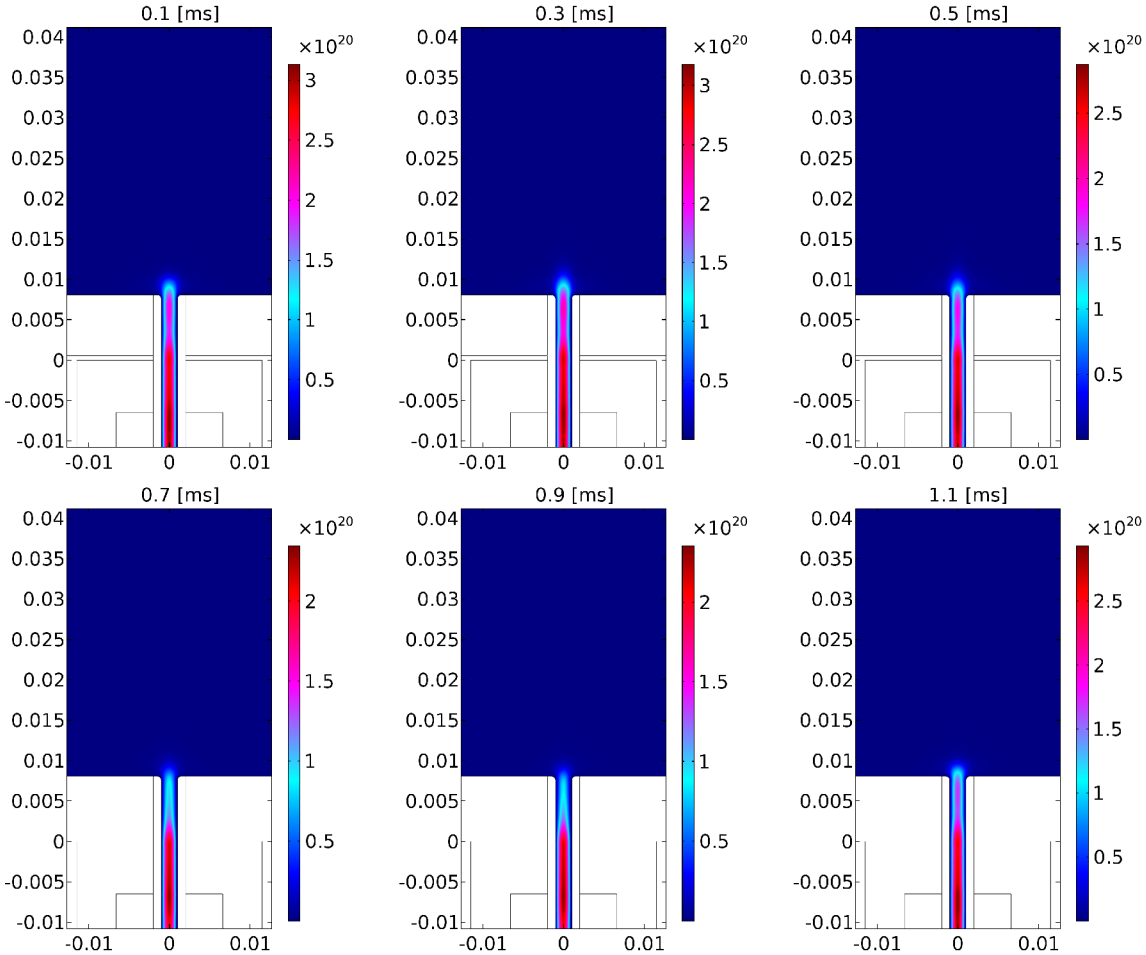
Obrázek 5.13: Grafy závislostí vývoje hustoty excitovaných argonových atomů (levý sloupec) a molekul (pravý sloupec) ve vybraných bodech v závislosti na čase jedné periody výkonové modulace. Červenou přerušovanou čarou jsou ze označeny hodnoty velikostí těchto veličin z ustálené simulace.



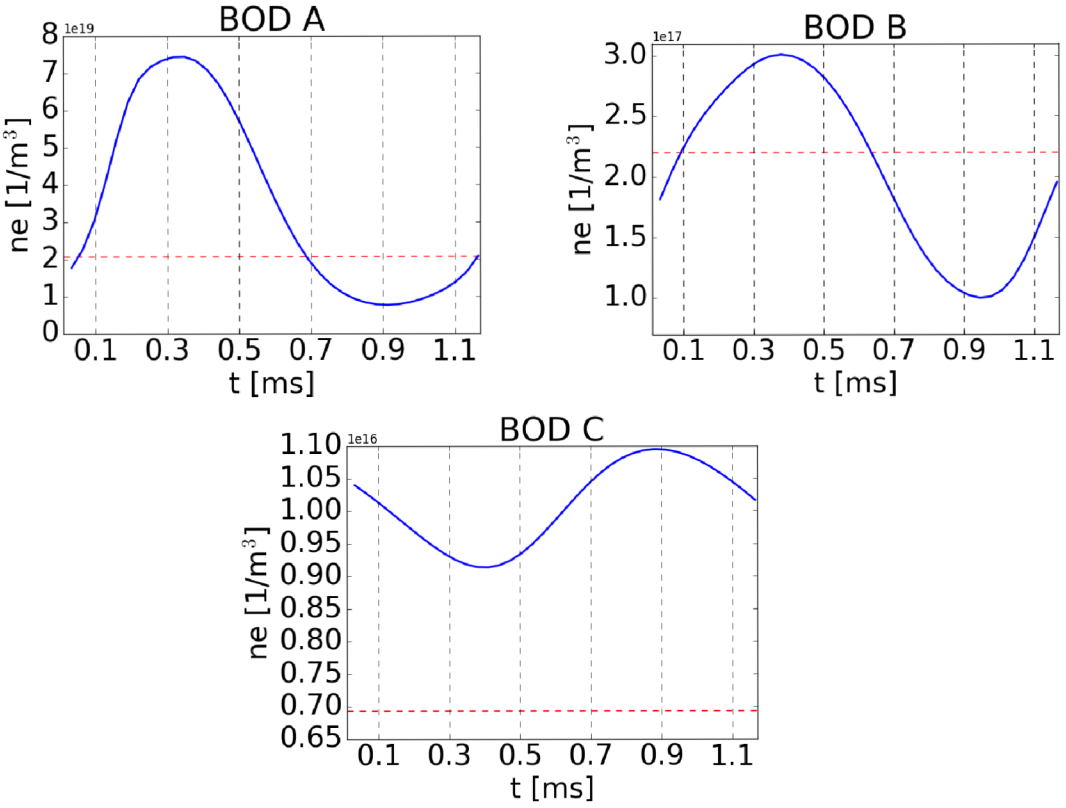
Obrázek 5.14: Série grafů hustoty ionizovaných argonových atomů (horní dvě řady) a argonových molekul (spodní dvě řady) v průběhu jedné periody výkonové modulace.



Obrázek 5.15: Grafy závislostí vývoje hustoty atomárního (levý sloupec) a molekulárního (pravý sloupec) argonu ve vybraných bodech v závislosti na čase jedné periody výkonové modulace. Červenou přerušovanou čarou jsou ze označeny hodnoty velikostí těchto veličin z ustálené simulace.



Obrázek 5.16: Grafy znázorňující vývoj elektronové hustoty během jedné periody výkonové modulace v oblasti ústí křemenné trubičky.



Obrázek 5.17: Grafy závislosti elektronové hustoty na čase během jedné periody výkonové modulace ve vybraných bodech. Červenou přerušovanou čarou je zde vyobrazena velikost teploty v těchto místech z ustálené simulace.

KAPITOLA

ZÁVĚR A DISKUZE 6

Hlavním cílem této diplomové práce bylo vytvoření numerického modelu mikrovlnného výboje za atmosférického tlaku v programu Comsol Multiphysics 5.2 s uvážením časově proměnného budícího výkonu. Prezentovaný self-konzistentní model zahrnuje elektromagnetické pole, proudění plynu, přenos tepla a vybrané elementární kinetické procesy v argonovém plazmatu za tlaku jedné desetiny atmosféry.

První kapitola je zaměřena na úvod do problematiky mikrovlnného výboje spolu modelováním plazmatu. Následující kapitoly jsou věnované sestavení geometre mikrovlnné plazmové trysky, kterou v našem případě byl surfatron, teorii popisující dvouteplotní model plazmatu, vybraným plazmochemickým procesům a samotné self-konzistenci modelu a v poslední řadě i metodě konečných prvků. Poslední ze zmíněných kapitol obsahuje autorovy rady pro zlepšení konvergence nelineárních plazmových modelů. Jedná se sice o poměrně stručnější část, ale vzhledem k tomu, že se jedná o autorovu prvotinu na poli numerických simulací, strávil autor jejich zjišťováním značnou část času a věří, že mohou pomoci ostatním zájemcům o numerické modelování plazmatu.

V kapitole věnující se výsledkům simulace jsou prezentována data základních parametrů mikrovlnného plazmatu v ustáleném stavu a v případě výkonové modulace. Jakožto modulační obálka byla vybrána funkce sinus s frekvencí 900 Hz. V případě srovnání experimentálních dat jiných vědeckých skupin s daty prezentované simulace lze vidět podobné trendy v chování plazmatu a proudění plynu.

Z dat pro vývoj teploty během jedné periody výkonové modulace lze pozorovat teplotní vír, který se tvoří nad ústím výbojové trubičky. Prudkým nárůstem teploty pak dochází k expanzi plynu a následným pronikáním této teplotní perturbace směrem do výpočetní domény. Takovéto chování koresponduje s experimentálními pozorováními. Dále získaná data ukázala, že v oblasti ústí výbojové trubičky by mělo docházet ke zpětnému nasávaní okolního plynu v čase periody, kdy výkon dodávaný do systému dosahuje svého minima. Tento trend opět koreluje se experimentálními pozorováními. V poslední řadě je věnována pozornost hustotám jednotlivých druhů částic v závislosti na poloze a čase jedné periody. Ze získaných dat lze vyčíst nárůst hodnot hustot téměř všech druhů částic argonového plazmatu, vyjma argonového neutrálu, ve vzdálenosti 3 cm od vrcholu mikrovlnného rezonátoru oproti hodnotám z ustáleného stavu.

Autor této práce doufá, že zde prezentovaný numerický model bude základem dalšího vývoje a studií, které pomohou badatelům proniknout blíže k poznání dějů obklopujících pulzní mikrovlnné plazma.

Literatura

[1] J Voráč, L Potočňáková, P Synek, J Hnilica, and V Kudrle. Gas mixing enhanced by power modulations in atmospheric pressure microwave plasma jet. *Plasma Sources Science and Technology*, 25(2):025018, 2016.

[2] M Baeva, A Bösel, J Ehlbeck, and D Loffhagen. Modeling of microwave-induced plasma in argon at atmospheric pressure. *Physical Review E*, 85(5):056404, 2012.

[3] M J Diaz. Modelling of microwave induced plasmas. 2011.

[4] Zhaoquan Chen, Zhixiang Yin, Minggong Chen, Lingli Hong, Guangqing Xia, Yelin Hu, Yourui Huang, Minghai Liu, and AA Kudryavtsev. Self-consistent fluid modeling and simulation on a pulsed microwave atmospheric-pressure argon plasma jet. *Journal of Applied Physics*, 116(15):153303, 2014.

[5] V Šamara, MD Bowden, and N St J Braithwaite. Effect of power modulation on properties of pulsed capacitively coupled radiofrequency discharges. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 43(12):124017, 2010.

[6] S Kelly and M M Turner. Generation of reactive species by an atmospheric pressure plasma jet. *Plasma Sources Science and Technology*, 23(6):065013, 2014.

[7] COMSOL Inc. Comsol 5.2.

[8] G J M Hagelaar and L C Pitchford. Solving the boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models. *Plasma Sources Science and Technology*, 14(4):722, 2005.

[9] Law Ch Ahrens J, Geveci B. Paraview: An end-user tool for large data visualization, visualization handbook, elsevier, 2005.

[10] H Gundel, E Hantzsche, and H Hess. Low temperature plasmas. *European Journal of Physics*, 12(1):39, 1991.

[11] José A Bittencourt. *Fundamentals of plasma physics*. Springer Science & Business Media, 2013.

[12] M A Heald and Ch B Wharton. Plasma diagnostics with microwaves. 1965.

[13] A. Obrusník. Simulace a diagnostika vysokofrekvenčních výbojů pro syntézu nanomateriálů [online]. Diplomová práce, Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Brno, 2014 [cit. 2017-02-16].

[14] J Van Dijk, GMW Kroesen, and A Bogaerts. Plasma modelling and numerical simulation. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 42(19):190301, 2009.

[15] M Moisan and Z Zakrzewski. Plasma sources based on the propagation of electromagnetic surface waves. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 24(7):1025, 1991.

[16] M Moisan, C Beaudry, and P Leprince. A small microwave plasma source for long column production without magnetic field. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 3(2):55–59, 1975.

[17] CM. Ferreira. Theory of a plasma column sustained by a surface wave. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 14(10):1811, 1981.

[18] M.A. Lieberman and A.J. Lichtenberg. *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing*. Wiley, 2005.

[19] RE Robson, Ronald Douglas White, and Z Lj Petrović. Colloquium: Physically based fluid modeling of collisionally dominated low-temperature plasmas. *Reviews of Modern Physics*, 77(4):1303, 2005.

[20] COMSOL Inc. Plasma module user's guide, version 5.3. www.comsol.com, 2017.

[21] R.B. Bird, W.E. Stewart, and E.N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. Wiley International edition. Wiley, 2007.

[22] Sa Gordon and B J McBride. Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks, and chapman-jouguet detonations. interim revision, march 1976. 1976.

[23] L I Stiel and G Thodos. The viscosity of polar substances in the dense gaseous and liquid regions. *AIChE Journal*, 10(2):275–277, 1964.

[24] R S Brokaw. Predicting transport properties of dilute gases. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 8(2):240–253, 1969.

[25] CR Wilke. A viscosity equation for gas mixtures. *The journal of chemical physics*, 18(4):517–519, 1950.

[26] J Gregório, P Leprince, C Boisse-Laporte, and LL Alves. Self-consistent modelling of atmospheric micro-plasmas produced by a microwave source. *Plasma Sources Science and Technology*, 21(1):015013, 2012.

[27] Alan R Hoskinson, José Gregório, Stephen Parsons, and Jeffrey Hopwood. Electron confinement and heating in microwave-sustained argon microplasmas. *Journal of Applied Physics*, 117(16):163301, 2015.

[28] J N Reddy. *An introduction to the finite element method*, volume 2. McGraw-Hill New York, 1993.

[29] Jian-Ming Jin. *The finite element method in electromagnetics*. John Wiley & Sons, 2015.

[30] A Obrusník. Simulace elektrického pole a proudění směsi plynů v mikrovlnném pochodňovém výboji [online], 2012 [cit. 2017-11-23].

[31] Singiresu S Rao. *The finite element method in engineering*. Elsevier, 2010.

[32] J Hnilica and V Kudrle. Time-resolved study of amplitude modulation effects in surface-wave atmospheric pressure argon plasma jet. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47(8):085204, 2014.