

**Yüksek ve Düşük Basınç Gaz Deşarjların Yerel Olmayan
Plazmalarının 2D Kinetik Sayısal Kodların Geliştirilmesi ve
Yeni Plazma Teknolojilerinde Uygulanması**

Proje No: 210T072

Doç.Dr. İsmail RAFATOV

Doç.Dr. Burak YEDİERLER

AĞUSTOS 2013
ANKARA

ÖNSÖZ

Projede yerel olmayan (non-local) gaz deşarj plazmaların modellenmesi için iki boyutlu kinetik sayısal yöntem ve kodların geliştirilme ve uygulanması ele alınmıştır.

Bu proje TÜBİTAK ile RFBR (Russian Federation for Basic Research) tarafından desteklenen ortak araştırma projesi olup, süresi (01.07.2011 – 01.07.2013) iki yıldır.

Projenin Türk tarafındaki iki araştırmacı, ODTÜ Fizik Bölümü elemanlarıdır.

İÇİNDEKİLER

ŞEKİL LİSTESİ	v
TABLO LİSTESİ	xi
ÖZET	xii
ABSTRACT	xiii
GİRİŞ	1
I ANALİTİK İYONLAŞMA TERİMİNİ İÇEREN HİBRİT MODEL	4
1 Model	4
1.1 Temel Denklemler	4
1.2 Taşıma Katsayıları	5
1.3 Kaynak (Source) Terimleri	7
1.3.1 Yerel Olmayan Kaynak Terimi.	8
1.4 Sınır Şartları	9
2 Nümerik Modelin Doğrulanması ve Sonuçları	10
II PARÇACIK YÖNTEMİNE DAYANAN HİBRİT MODEL	14
1 Yöntem	14
1.1 Modelin Akışkan Kısmı	14
1.2 Akışkan Denklemlerin Diskritizasyonu	15
1.2.1 Bir Boyutta (1D) Diskritizasyon	15
1.2.2 İki Boyutta (2D) Diskritizasyon	17
1.2.3 Grid Noktası Aralığının (uzaklıklarının) Çözümlerin Yakınsamasına Etkisi	18
1.2.4 Zaman Adımlarının Hesaplanması ve Sınırları	19
1.3 Modelin Monte Carlo Çarpışma (MCC) Kısmı	20
1.4 Simülasyon Akış Şeması	23
1.5 Plazma Parametreleri ve Geometri	23
1.6 Sınır Şartları	24
2 Nümerik Analiz ve Sonuçlar	26
2.1 Elektron Pulsu Deneyleri (Swarm Experiment)	26
2.2 Bir Boyutlu (1D) Akışkan ve Hibrit Modellerin Sonuçları	28
2.3 Bir Boyutlu (1D) Önceki Sonuçlarla Karşılaştırma	30
2.4 İki Boyutlu (2D) Akışkan Modelin Sonuçları	31
2.5 İki Boyutlu (2D) Hibrit Modelin Sonuçları	33
2.6 İki Boyutlu (2D) MCC Simülasyon Sonuçları	35
2.7 1D ile 2D Sonuçların Karşılaştırması	37

III PARTICLE IN CELL/MONTE CARLO COLLISION (PIC/MCC) MODELİ	39
1 PIC/MCC Yöntemi	40
1.1 PIC/MCC'nin Akış Şeması	40
1.2 Paralel PIC/MCC Algoritması	44
1.3 Kullanılan İşlemci Sayısının Hesaplama Verimliliğine Etkisi	47
1.4 Subcycling	48
2 Paralel PIC/MCC kodunun Doğrulanması ve Örnek Analizler	49
2.1 Helyum Gazı İçin Yazılan Kodun Doğrulanması	49
2.2 Argon Gazı İçin Yazılan Kodun Doğrulanması	50
2.1.1 α Gaz Deşarj Problemi	50
2.2.2 γ Gaz Deşarj Problemi	50
3 Yapılan Diğer PIC/MCC Analizlerden Bazıları	53
3.1 İkili Kararsız Akış Probleminin PIC/MCC ile Modellenmesi	53
3.2 RF Argon Gaz Deşarjı İçin Validasyon Problemi	54
3.3 Townsend Gaz Deşarj İçin İki ve Üç Boyutlu MCC Analizi	60
4 Parçacık Ağırlıklarının Sonuçlara Olan Etkisi	68
4.1 Kullanılan Süper Parçacık Sayısının Yoğunluklara Olan Etkisi	69
4.2 Kullanılan Süper Parçacık Sayısının Akım Değerlerine Olan Etkisi	69
4.3 Kullanılan Süper Parçacık Sayısının Elektrik Alan Değerine Etkisi	70
4.4 Kullanılan Süper Parçacık Sayısının Enerji Dağılımına Etkisi	70
5 Elektron Spektroskopi Yöntemleri ve PIC/MCC Uygulamaları	76
5.1 Teori ve Daha Önceki Çalışmalar	76
5.2 Quasineutral Bölgedeki Elektrik Alan Konfigürasyonun CES'ye Etkisi	80
5.3 PIC/MCC Algoritmasının CES Analizinde Kullanılması	85
SONUÇ	89
KAYNAKLAR	91

ŞEKİL LİSTESİ

- Şekil 1.1:** Modelde uygulanan elektron çarpışma çapraz kesitleri: (1) esnek, (2) direk iyonlaşma, (3) excitation, (4) excitation, (5) stepwise iyonlaşma. Eğri numaraları Tablo 1 deki süreçler numaralıyla uyumludur. 7
- Şekil 1.2:** 1.ci Koşullar Seti için MC hibrit yöntem (DERZSÍ, 2009) ile karşılaştırma ($p = 133$ Pa, $V = 250$ V, $L = 1$ cm, $\gamma = 0.06$). (a) elektron ile iyon yoğunlukların, (b) elektrik alanın, (c) iyonlaşma kaynak teriminin, ve (d) elektron sıcaklığının uzamsal dağılımları. 12
- Şekil 1.3:** 2.ci Koşullar Seti için MC hibrit yöntem (DERZSÍ, 2009) ile karşılaştırma ($p = 40$ Pa, $V = 441$ V, $L = 3$ cm, $\gamma = 0.033$). (a) elektron ile iyon yoğunlukların, (b) elektrik alanın, (c) iyonlaşma kaynak teriminin, ve (d) elektron sıcaklığının uzamsal dağılımları. 13
- Şekil 1.4:** Akım-gerilim eğrileri. $pL = 0.5$ cmTorr. Deneysel veriler (DONKO, 2006, ROZSA, 1995, STEFANOVIĆ, 1997). Geliştirilen “Hibrit I” model için farklı λ ve γ parametre değerleri kullanılmıştır. 13
- Şekil 1.5:** Elektron yoğunluğu n_e nın katot ’tan $x = 1.5$ cm mesafe uzaklığında ki değerinin uygulanan voltajdan bağımlılığı. $L = 3$ cm, $p = 40$ Pa, $\gamma = 0.033$. “Hibrit I” model sonuçlarıyla nümerik ve deneysel (DERZSÍ, 2009) sonuçların karşılaştırması. 13
- Şekil 2.1:** (a) Bir (1D) ve (b) iki (2D) boyutta grid noktası sayısına bağılı olarak nümerik çözümlerin (elektron parçacık yoğunluğunun maksimum değeri) yakınsaması. İki boyutta yatay eksenindeki sayılar $N \times N$ anlamında kullanılmıştır. 19
- Şekil 2.2:** Zaman ölçeklerinin elektron yoğunluğunun $n_e \cong 10^{16} m^{-3}$ civarında olduğu bir hesap için uzamsal dağılımları. 20
- Şekil 2.3:** Argon gazı için elastik, iyonlaşma, uyarma, ve toplam kesit alanları. 21
- Şekil 2.4:** Çarpışma yapan elektronların izotropik saçılma yaptıkları durumda çarpışma sonrası durumlarını gösteren özet şema. 22
- Şekil 2.5:** Simülasyon akış şeması. 23
- Şekil 2.6:** $E = 500$ Td, $p = 1$ Torr, $L = 1$ cm, $N_0 = 10000$, $\Delta t = 10^{-12}$ s parametreleri kullanılarak yapılmış elektron puls deneyi için yola bağılı elektron yoğunluk ve ortalama enerji dağılımları. 27
- Şekil 2.7:** $E = 5000$ Td, $p = 1$ Torr, $L = 1$ cm, $N_0 = 10000$, $\Delta t = 10^{-12}$ s parametreleri kullanılarak yapılmış elektron puls deneyi için yola bağılı elektron yoğunluk ve ortalama enerji dağılımları. 27
- Şekil 2.8:** $p=1$ Torr, $T_e=1$ eV, $\gamma=0.06$, $L=1$ cm, $V_a=250$ V koşulları için akışkan ve hibrit yaklaşımların karşılaştırılması. (a) elektron ile iyon yoğunlukların, (b) elektrik alanın, (c) iyonlaşma kaynak teriminin uzamsal dağılımları. 28

Şekil 2.9: $p=0.3$ Torr, $T_e=1eV$, $\gamma=0.033$, $L=3cm$, $V_a=441V$ koşulları için akışkan ve hibrit yaklaşımların karşılaştırılması. (a) elektron ile iyon yoğunlukların, (b) elektrik alanın, (c) iyonlaşma kaynak teriminin uzamsal dağılımları.	29
Şekil 2.10: $p=1$ Torr, $T_e=1eV$, $\gamma=0.06$, $L=1cm$, $V_a=250V$ parametreleri için geliştirdiğimiz hibrit modelin hesap sonuçlarının (DERZSI, 2009) sonuçlarıyla ile karşılaştırılması. (a) Elektron yoğunluğunun, (b) elektrik alanın, (c) iyonlaşma kaynak teriminin uzamsal dağılımları.	30
Şekil 2.11: : 2D akışkan model. Elektron ve iyon yoğunluğu dağılımları, (a) elektron ve (b) iyon normal gösterim, (c) elektron ve (d) iyon logaritmik gösterimdir. $p = 1$ Torr, $T_e = 1eV$, $\gamma = 0.06$, $L_x = 1cm$, $L_y = 1cm$, $V_a = 250V$	31
Şekil 2.12: 2D akışkan model. Potansiyel (a), eksen doğrultusundaki elektrik alan (b), çapraz doğrultudaki elektrik alan (c), iyonlaşma kaynağı (d). $p = 1$ Torr, $T_e = 1eV$, $\gamma = 0.06$, $L_x = 1cm$, $L_y = 1cm$, $V_a = 250V$	32
Şekil 2.13: 2D hibrit model. (a) Elektron yoğunluğu, (b) iyon yoğunluğu, (c) elektronlar için logaritmik gösterim, (d) iyonlar için logaritmik gösterim. $p = 1$ Torr, $T_e = 1eV$, $\gamma = 0.06$, $L_x = 1cm$, $L_y = 1cm$, $V_a = 250V$	33
Şekil 2.14: 2D hibrit model. (a) Elektrik potansiyel, (b) Elektrik alanın eksen ve (c) çapraz doğrultusundaki dağılımları. $p = 1$ Torr, $T_e = 1eV$, $\gamma = 0.06$, $L_x = 1cm$, $L_y = 1cm$, $V_a = 250V$	34
Şekil 2.15: 2D hibrit model. Yüksek enerjili elektronların ve iyonlaşma kaynağının plazma hacmi içerisindeki dağılımları. (a) Yüksek enerjili elektron yoğunluğu, (b) yüksek enerjili elektronların akı değerleri, (c) iyonlaşma kaynağının dağılımı, (d) düşük enerjili yavaş elektronlar için kaynak dağılımı. $p = 1$ Torr, $T_e = 1eV$, $\gamma = 0.06$, $L_x = 1cm$, $L_y = 1cm$, $V_a = 250V$ (Logaritmik gösterimdir).	35
Şekil 2.16: 2D hibrit model. (a) Toplam elektron akım değerleri ve akışı, (b) toplam iyon akım değerleri ve akışı, (c) toplam elektrik akım değerleri ve akışı, (d) vortex akımlara yakından bakış. $p = 1$ Torr, $T_e = 1eV$, $\gamma = 0.06$, $L_x = 1cm$, $L_y = 1cm$, $V_a = 250V$	36
Şekil 2.17: 1D ile 2D hibrit hesaplar için karşılaştırma (İki boyutlu geometride simetri eksenini üzerindeki değerler kullanılmıştır). (a) Yoğunluk değerleri, (b) iyonlaşma kaynağı, (c) elektrik potansiyel, (d) eksen doğrultusundaki elektrik alan. $p = 1$ Torr, $T_e = 1eV$, $\gamma = 0.06$, $L_x = 1cm$, $L_y = 1cm$, $V_a = 250V$	37
Şekil 3.1: Parçacıklara etki eden elektrik alanın hesaplanması (DONKO, 2010)	42
Şekil 3.2: T çeşit çarpışma yapma ihtimali olan parçacık j için çarpışma çeşidinin seçilmesi. $\sigma_r(\epsilon_j)$, t çeşidi çarpışma için çarpışma kesit alanını, ϵ_j ise enerjisini belirtmektedir.	43
Şekil 3.3: Standart 1D Grid Konfigürasyonu.	44
Şekil 3.4: Eulerian Paralel Mantığı.	45

Şekil 3.5: Toplam 4 kullanılan örnek paralel PIC/MCC analizindeki iyon yoğunlukları [$10^{18}m^{-3}$]: (a) İşlemci #1'deki iyon yoğunluğu (b) İşlemci #0'daki yani yöneticideki toplam iyon yoğunluğu.	46
Şekil 3.6: C Kadar işlemci kullanılan bir sistem için paralel PIC/MCC Algoritması. Siyah oklar işlemciler arası haberleşmeyi göstermektedir (CALL MPI_Reduce & CALL MPI_Bcast). İşlemci #0 ana işlemcidir ve gridlere düşen yük yoğunluklarının diğer işlemcilerden toplanmasından, elektrik alan proflinin çözülmesinden ve sonuçları diğer işlemcilere dağıtmaktan sorumludur. I) Başlangıç, II) Grid noktalarındaki yüklerin hesaplanması, III) Poisson denkleminin çözülmesi, IV) Elektrik alan hesabı, V) Grid noktalarındaki elektrik alan değerlerinin parçacıklara enterpolasyonu, VI) Lorentz denkleminin çözümü ve sınır etkileşimleri, VII) Çarpımlar.	47
Şekil 3.7: Farklı oranlarda paralelleştirilebilen programların teorik hızlanma grafiği (LANDAN, 2012). Farklı eğriler farklı işlemci sayısına karşılık gelmektedir.	48
Şekil 3.8: Şekillerdeki \square sembol kaynak (TURNER, 2013)'deki problem II'nin sonuçlarını, eğriler bizim elde ettiğimiz sonuçları göstermektedir. (a) İyon yoğunluk profili, (b) iyon yoğunluk profili merkez bölge detayı, (c) iyon ısınma oranı, (d) elektron ısınma oranı, (e) iyonizasyon kaynağı, (f) normalize edilmiş elektron enerji dağılım fonksiyonu $f(\epsilon)$	49
Şekil 3.9: $p = 80$ Pa, $V = 100$ V, $L = 1.5$ cm, $f=13.56$ MHz, $T = 350$ K, $\gamma = 0$ parametrelili RF argon α gaz deşarjı sonuç grafikleri. Problem parametreleri kaynak (SCHULZE, 2011)'den alınmıştır. (a) Elektron ısınma oranı [W], (b) Merkez bölgedeki elektrik alan [V/m], (c) Elektron yoğunluğu [$10^{15}m^{-3}$], (d) Elektrik alan genel [V/m].	51
Şekil 3.10: $p = 80$ Pa, $V = 200$ V, $L = 1.5$ cm, $f=13.56$ MHz, $T = 350$ K, $\gamma = 0.2$ parametrelili RF Argon γ Gaz Deşarjı Grafikleri. Problem parametreleri kaynak (SCHULZE, 2011)'den alınmıştır. (a) Elektron ısınma oranı [10^5W], (b) Merkez bölgedeki elektrik alan [V/m], (c) elektron yoğunluğu [$10^{15}m^{-3}$], (d) İyon yoğunluğu [$10^{15}m^{-3}$].	52
Şekil 3.11: $t= 0$ anındaki, birbirine zıt yönde hareket eden (ortalama -3 ve +3 birim hızlarda) iki elektron grubunun pozisyon-hız grafikleri.	53
Şekil 3.12: Zıt yönde hareket eden elektron iki elektron grubunun pozisyon-hız dağılımlarının zamanla değişimi (a) $t = 5$, (b) $t = 12.5$, (c) $t = 17.5$	54
Şekil 3.13: Şekillerdeki \square sembol kaynak (DONKO, 2012) sonuçlarını, eğriler kodumuzla elde ettiğimiz sonuçları göstermektedir. (a) İyon yoğunluk profili, (b) maksimum değere göre normalizasyonunu yaptığımız elektrotlardaki iyon enerjileri dağılım grafiği.	56
Şekil 3.14: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $We=Wi=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için; $\omega t/2\pi = 0$, $\omega t/2\pi = 0.25$, $\omega t/2\pi = 0.50$ ve $\omega t/2\pi = 0.75$ anlarındaki (a) iyon yoğunluk, ve (b) elektron yoğunluk grafikleri.	57
Şekil 3.15: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $We=Wi=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için; $\omega t/2\pi = 0$, $\omega t/2\pi = 0.25$, $\omega t/2\pi = 0.50$ ve $\omega t/2\pi = 0.75$	

anlarındaki (a) elektrik alan, ve (b) merkez bölgedeki detay elektrik alan grafikleri.	57
Şekil 3.16: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $We=Wi=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için (a) $\omega t/2\pi = 0$, (b) $\omega t/2\pi = 0.25$, (c) $\omega t/2\pi = 0.50$, (d) $\omega t/2\pi = 0.75$ anlarındaki elektron ve iyonların grid noktalarındaki ortalama enerji değerleri.	59
Şekil 3.17: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $We=Wi=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için $\omega t/2\pi = 0$ anındaki grid noktalarındaki ortalama elektron ve iyon enerji değerleri.	60
Şekil 3.18: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $We=Wi=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için merkez bölgedeki (a) elektron enerji dağılım fonksiyonu, (b) iyon enerji dağılım fonksiyonları.	61
Şekil 3.19: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $We=Wi=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için takip edilen #0 numaralı iyonun zaman adımına bağlı (a) grid pozisyonu, ve (b) hız grafikleri.	61
Şekil 3.20: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $We=Wi=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için elektrotlara çarpan iyonların enerji dağılımları.	62
Şekil 3.21: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $We=Wi=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için $\omega t/2\pi = 0$, $\omega t/2\pi = 0.25$, $\omega t/2\pi = 0.50$, $\omega t/2\pi = 0.75$ anlarındaki (a) iyon akım yoğunluğu, (b) elektron akım yoğunluğu, (c) displacement akım yoğunluğu ve (d) toplam akım yoğunluğu grafikleri.	63
Şekil 3.22: $L = 4$ cm, $p = 1$ Torr, $T = 300$ K, $E/n = 467.13 \times 10^{-21} V m^2$ argon gazı Townsend analizinden elde zamana göre değişen başlangıçta sayıları 100 olan elektronların çoğalma, drift ve difüzyon xy düzleminde gözlemlenen hareketleri.	64
Şekil 3.23: $L = 4$ cm, $p = 1$ Torr, $T = 300$ K, $E/n = 467.13 \times 10^{-21} V m^2$ argon gazı Townsend analizinden elde edilen sonuçlar. (a) Elektronların ağırlık merkezi x pozisyonunun zamana göre değişimi, (b) Analizden elde edilen difüzyon sabiti zaman göre değişimi, (c) Elektronların ağırlık merkezine göre ortalama yarıçaplarının zamana göre değişimi, (d) Analizden elde edilen mobility sabitinin zaman göre değişimi, (e) Elektronların ortalama enerjisinin zamana göre değişimi. Zaman yaklaşık olarak 48 ns olduğu durumda elektronlar anoda çarpmaya başlamıştır. Dikey çizgiler yaklaşık olarak elektronların gruplar halinde katoda çarpmaya başladığı anı göstermektedir.	65
Şekil 3.24: $L = 4$ cm, $p = 0.1$ Torr, $T = 300$ K, $E/n = 467.13 \times 10^{-21} V m^2$ argon gazı Townsend analizinden elde zamana göre değişen başlangıçta sayıları 100 olan elektronların zamana bağlı hareketleri.	67
Şekil 3.25: Bir hücre içerisinde kullanılan süper elektron sayısına bağlı elektron yoğunluk grafiği (KIM, 2005).	68
Şekil 3.26: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $We=Wi=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri ve 6 farklı süper parçacık ağırlığı için $\omega t/2\pi = 0$ anındaki (a)	

elektron yoğunluk profilleri, (b) iyon yoğunluk profilleri, (c) 1 RF çevrimindeki ortalama elektron yoğunluk profilleri, (d) grid başına ortalama düşen süper elektron sayısına göre maksimum elektron yoğunluk değerlerinin değişimi.	69
Şekil 3.27: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f = 13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma = 0.1$, $We = Wi = 1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için $\omega t / 2\pi = 0$ anındaki (a) 6 farklı süper parçacık ağırlığı için elektrik alan profilleri, (b) 6 farklı süper parçacık ağırlığı için merkez bölge detay elektrik alan profilleri, (c) 6 farklı süper parçacık ağırlığı için merkez bölge ortalama elektron enerji profilleri, (d) 6 farklı süper parçacık ağırlığı için merkez bölge ortalama iyon enerji profilleri, (e) 2 farklı süper parçacık ağırlığı için eedf profilleri, (f) 2 farklı süper parçacık ağırlığı için iedf profilleri.	71
Şekil 3.28: Parçacık ağırlıklarının iyon akım yoğunluklarına olan etkisi (a) Simulasyon # 1, (b) Simulasyon # 2, (c) Simulasyon # 3, (d) Simulasyon # 4, (e) Simulasyon # 5, (f) Simulasyon # 6. Not: (d)'deki legend tüm şekiller için geçerlidir.	72
Şekil 3.29: Parçacık ağırlıklarının elektron akım yoğunluklarına olan etkisi (a) Simulasyon # 1, (b) Simulasyon # 2, (c) Simulasyon # 3, (d) Simulasyon # 4, (e) Simulasyon # 5, (f) Simulasyon # 6. Not: (d)'deki legend tüm şekiller için geçerlidir.	73
Şekil 3.30: Parçacık ağırlıklarının displacement akım yoğunluklarına olan etkisi (a) Simulasyon # 1, (b) Simulasyon # 2, (c) Simulasyon # 3, (d) Simulasyon # 4, (e) Simulasyon # 5, (f) simulasyon # 6. Not: (d)'deki legend tüm şekiller için geçerlidir.	74
Şekil 3.31: Parçacık ağırlıklarının toplam akım yoğunluklarına olan etkisi (a) Simulasyon # 1, (b), Simulasyon # 2, (c) Simulasyon # 3, (d) Simulasyon # 4, (e) Simulasyon # 5, (f) Simulasyon # 6. Not: (d)'deki legend tüm şekiller için geçerlidir.	75
Şekil 3.32: Helyum atomu enerji seviyeleri (http://raptor.physics.wisc.edu/talk/helium_e.gif).	77
Şekil 3.33: Atom numaralarına göre iyonlaşma enerjilerinin değişimi (http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Ionization_energies.png).	78
Şekil 3.34: DC gaz deşarjları için örnek elektrik potansiyel ve elektrik alan grafikleri (BOGAERTS, 2002).	79
Şekil 3.35: a) Eedf'in wall probe tarafından ölçülen akım-potansiyel grafiği yardımı ile bulunması b) Torr, 4 mm DC He-Ar karışımının wall probe yardımıyla elde edilmiş eedf grafiği (DEMIDOV, 2010)..	80
Şekil 3.36: Örnek CES konfigürasyonu (CHIRTSOV, 2011)..	81
Şekil 3.37: Plazma içine bırakılan sabit enerjili (4.06 eV) elektronların zamana bağlı enerji ve hareketlerinin incelendiği testlerin elektrik alan girdileri (a) Test 1, hayali bir DC gaz deşarjının elektrik alan profili (b) Test 2, az parçacık ile yapılan bir DC PIC/MCC analizinden alınmış elektrik alan profili (c) Test 3, gürültüsü oldukça azaltılmış DC PIC/MCC analizinden alınmış elektrik alan profili (d) merkez bölgedeki Test 1, Test 2, ve Test 3 elektrik alan profilleri detayı.	82

Şekil 3.38: Test 1 için a) Seçilen Penning elektronun hareket sırasındaki enerji ve pozisyon grafikleri, b) Plazma elektrik potansiyel grafiği.	84
Şekil 3.39: Test 2 için a) Seçilen Penning elektronun hareket sırasındaki enerji ve pozisyon grafikleri, b) Plazma elektrik potansiyel grafiği.	84
Şekil 3.40: Test 3 için a) Seçilen Penning elektronun hareket sırasındaki enerji ve pozisyon grafikleri, b) Plazma elektrik potansiyel grafiği.	85
Şekil 3.41: Yaklaşık olarak 22,000 süper elektron ve 23,000 süper iyon ile yapılan DC He(%99)-Ar(%1) CES analizinin 91,000,000. zaman adımıdaki ($7.6714 \times 10^5 [s]$) sonuçlar: (a)Yüklü parçacık yoğunluklar (b) Elektrik alan (c) Elektron enerji dağılım fonksiyonları / Probe 0 220-230. grid noktaları arası, probe 1 240-260 grid noktaları arasına yerleştirilmiştir (d) Gridlerdeki ortalama yüklü parçacık enerjileri (e) He iyonları quasineutral bölge detayı (f) direct ve Penning iyonlaşma kaynakları.	87

TABLO LİSTESİ

Tablo 1.1: Argon plazması için uyguladığımız elementer reaksiyonlar listesi. Boltzmann denklemin çözümünden hesaplanan şiddet sabitleri “Boltzmann” olarak işaretlenmişlerdir.	6
Tablo 1.2: Sınır şartları.	9
Tablo 3.1: 1D RF Argon Gaz Deşarjı Simülasyon Parametreleri.	54
Tablo 3.2: Simülasyonlara parçacık ağırlıklarının etkisi. (a) Simülasyon sonundaki ($t = 7.37 \times 10^{-5}$ s) toplam süper elektron sayısı, ve (b) Grid başına düşenortalama süper elektron sayısı.	68
Tablo 3.3: Her bir test için (rastgele) seçilen Penning elektronların hareketleriyle ilgili bilgiler.	83
Tablo 3.4: 1D DC Helyum-Argon Karışımı Gaz Deşarjı Problem Parametreleri.	86
Tablo 3.5: 1D DC Helyum-Argon Karışımı Gaz Deşarjı Problemi, Çözüm Parametreleri.	88

ÖZET

Projede yerel olmayan (nonlocal) parıltılı gaz deşarj plazmaların nümerik arařtırılmaları için iki boyutlu kinetik model ve kodlar geliřtirilmiřtir. Bu dođrultuda, alıřmalarda üç farklı yaklařım ve yöntemler izlenmiřtir:

- Deşarj plazmasının yüksek enerjili elektronların iyonlařma süreçlerine katkıları sonucu olan yerel olmayan iyonlařma kaynađını analitik olarak tanımlayarak ve “geniřletilmiř” akıřkan plazma modeline monte ederek elde edilen hibrit modelin ve bunula iliřkin sayısal kodun geliřtirilmesi.
- Plazmanın düşük enerjili (yavař) elektronları ile iyonlarını akıřkan (fluid) yöntemiyle modelleyerek, yüksek enerjili (hızlı) elektronların dinamiđi için paracık (Particle-in-Cell, PIC) yöntemi ve arpıřmaları için stokastik Monte Carlo yöntemi kullanarak elde edilen hibrit nümerik model ve kodun geliřtirilmesi.
- Plazmada ki tüm yüklü paracıkların hareket ve arpıřmalarını ayrı ayrı ele alan paralel Particle-in-Cell/Monte Carlo Collision (PIC/MCC) nümerik kodun geliřtirilmesi.

Yukarıda sıralanan tüm nümerik model ve kodların literatürde mevcut olan sayısal ve deneysel verileri kullanarak dođrulanmaları yapılmıř, belli parameter rejimlerde DC ve RF gaz deşarj plazmaların analizleri için uygulanmıřtır.

Ayrıca, argon ile helyum gazların karıřımlarında, Plazma Elektron Spektroskopi (PLES ile CES) yönteminin kapasitesi ve uygulama alanının sınırlarının anlařılması için PIC/MCC analizi yapılmıřtır.

Anahtar Kelimeler: Plazma kinetiđi, gaz deşarj, kinetik model, hibrit model, nümerik hesaplama, simülasyon, plazma elektron spektroskopi.

ABSTRACT

We developed two-dimensional kinetic models and codes for numerical modeling of non-local plasma of glow discharges. In this project, the following approaches and methods are utilized:

- In the first hybrid method, effect of fast electrons in ionization processes in discharge plasma and hence in non-local ionization source is formulated analytically and integrated into the extended fluid model.
- According to the second hybrid method, slow electrons and ions in the plasma are described as fluid, while the dynamics of fast electrons is simulated by the particle method (Particle-in-Cell, PIC). Their collisions with neutral gas atoms are taken into account by Monte Carlo method.
- The third, purely kinetic approach is based on the parallel Particle-in-Cell/Monte Carlo Collision (PIC/MCC) method, where all the charge particle motions and collisions are traced separately.

All the models and program codes have been verified by the results of numerical investigations and measurements available in the literature. These codes are used to simulate DC and RF gas discharges under certain parameter regimes.

In order to determine the applicability and limitations of the electron spectroscopy method (PLES and CES), PIC/MCC analysis has been performed for the discharge plasma sustained in the mixture of argon and helium.

Keywords: Plasma kinetics, gas discharge, kinetic model, hybrid model, numerical modelling, simulation, plasma electron spectroscopy.

GİRİŞ

Işıltılı gaz deşarjları genel olarak asal veya moleküler gazlara DC veya AC potansiyel uygulanması sonucunda oluşan gaz plazması olarak tanımlanır (RAIZER, 1991, LIEBERMAN, 2005). Günümüzde floresan ışıklandırma (neon lambaları), plazma görüntüleme ekranları (plazma TV), mikro-elektronik, tıp, yüzey kaplama veya temizleme gibi birçok teknolojik uygulamada kullanılmaktadır. Bu fiziksel olay yaygın bir çeşitliliğe sahip olup uygulanan potansiyelin frekansına (DC, AC deşarjlar), deşarj olan gazın sıcaklığına (düşük veya yüksek sıcaklıklı deşarjlar), gazın basıncına (düşük veya yüksek basınçlı deşarjlar) veya gaz boşluğu ile elektrot arasında dielektrik katmanların kullanıldığında oluşan dielektrik bariyerli deşarjlar (DBD) gibi tanımlanıp plazma fiziği ve plazma kimyası bilimsel disiplinleri altında deneysel, teorik ve nümerik olarak araştırılmaktadır (KORTSHAGEN, 2002).

Doğada ve yapay olarak sıkça gözlenen gaz deşarjları içsel olarak lineer olmayan davranış karakteristikleri göstermekte olup iç yapıları temel olarak iyonlaşma sonucu oluşmuş elektronların, pozitif ve negatif iyonlar ile nötr gaz atom veya moleküllerinin dinamikleri üzerine kuruludur. Elektrot bölgelerindeki pozitif yük birikimleri ve bu bölgelerde buna bağlı olarak oluşan yüksek potansiyel fark ve elektrik alan değerleri, deşarj hacmi içerisinde oluşan değişik parlaklıktaki bölgeler, üzerlerine yüksek enerjili parçacıkların (iyonlar, nötr atomlar veya foto-elektrik) çarpmasıyla elektrotlardan elektron yayılması ve deşarj sürecini desteklemesi olgusu gibi örnekler bu lineer olmayan karakteristikler arasında sayılabilir. Ek olarak yüklü parçacık türlerinin (elektronlar ve iyonlar) yüksek şiddetli elektrik alanı barındıran bölgelerde yerel olarak dengeye gelememesiyle oluşan yerel olmayan (nonlocal) taşıma karakteristikleri gibi olgular bu fiziksel olayı karmaşık ve incelenmesi zor bir alan olarak ortaya çıkarmaktadır. Bunlara rağmen, belirli yaklaşımlar altında gaz deşarjları teorik ve nümerik olarak modellenilebilmekte ve genel davranış karakteristikleri ortaya çıkarılabilmektedir (RAIZER, 1991).

Gaz deşarj plazmalarının modelleme ve nümerik araştırmalarında en yoğun kullanılan yaklaşım akışkan (fluid) modelleridir. Akışkan yaklaşımında, plazma her noktada enerji dağılım fonksiyonun (edf) ilk momentlerinden elde edilen, yoğunluk, ortalama hız vektörünün üç bileşeni, ve ortalama kaotik hız veya enerji (sıcaklık) ile tanımlanır. Yani, yedi değişkene bağımlı bir enerji dağılım fonksiyonu yerine, her biri dört değişkenden (üç koordinat ile zaman) bağımlı olan beş tane fonksiyon ortaya çıkacaktır. Bu durumda, elektron sistemi bir tam gibi ele alınır ve ortalama parametreleriyle (yoğunluk, ortalama enerji, ve ortalama hız vektörü) açıklanır. Bu ortalama parametrelerin plazmayı doğru bir şekilde açıklayabilmeleri için, plazma özellikleri dağılım fonksiyonu şeklinden duyarsız olmalıdırlar veya dağılım fonksiyonu bir standart dağılımından (örneğin Maxwell dağılımından) çok az farklı olmalıdır (RAIZER, 1991).

Böylece, akışkan yaklaşımında tüm sistemi açıklayabilmek için, “ortalama parçacığın” davranışının bilinmesi yanı onun yukarıda sıralanan ortalama parametrelerinin bilinmesi yeterlidir. Bu durumda, her bir parçacığın sisteme katkısı eşit kabul edildiği için, difüzyon, elektrik iletkenliği, değişik plazma dalgaların yayılması gibi olayların etkin ve oldukça basit bir şekilde açıklanmaları sağlanır. Bu yüzden, akışkan yaklaşımın nümerik modelleri de hesaplama açısından diğer (parçacık veya kinetik) yöntemlere göre çok daha basit ve verimli sayılır.

Akışkan yaklaşımının değişik modifikasyonlarının gaz deşarjların hem bir hem iki boyutlu modellemesi için uygulanması konusunda gerçekten büyük bir deneyim kazanılmıştır (HAGELAAAR, 2005). Ayrıca, akışkan modellerine yeni süreç ve etkileri ekleyerek, bu yaklaşımın “doğruluğu” devamlı artırılmaktadır. Ancak gaz deşarjların akışkan modellerin iyileştirme ve düzeltilmesi genelde perspektifi olmayan bir yoldur. Bazen bu girişimler ile “doğruluğu tartışmalı” sonuçlara bile varılabilir.

Bunun nedeni, gaz deşarj plazması gibi yüksek derecede dengesiz ortamlarda akışkan modelin kaçınılmaz kısıtlamalarıdır.

Herhangi bir akışkan modelin gaz deşarjın modellemesi için kullanımını hakkında fiziksel açıdan ciddi itirazlar yaratılabilir. Elektron, bir gaz parçacığıyla esnek çarpışımında enerjisinin çok küçük kısmını ($2m_e/M \ll 1$) kaybettiği için, elektronların enerji gevşeme (relaxation) uzunluğu oldukça büyüktür, öyleki elektron “mean free path” mesafesi l ’nın 100 katından fazladır, $\lambda_e > 100l$. Bunun için, λ_e plazma boyutu L ’dan büyük olması, $\lambda_e > L$, ve böylece edf’nin yerel olmayan (nonlocal) rejimde biçimlenmesi durumlar, pL çarpımının $pL < 1-10$ cmTorr eşitsizliği geçerli olduğu durumlarda ortaya çıkar (p gaz basıncı, L plazma boyutu), gevşeme zamanı ise $t < 10^{(-3)}/p$ s. Bu demektir ki düşük basınçlarda ($p < 1$ Torr) tüm kullanılmakta olan plazma sistemleri yerel olmayan olurken, atmosferik basınçta ($p \sim 760$ Torr) yerel olmayan plazma sistemlerin boyutları $L \sim 0.1-0.2$ mm, yani son dönemlerde yoğun bir şekilde incelenen mikro deşarjlar bu türdendir (BECKER, 2006, BOEUF, 2003). Ancak, bu tür deşarjların plazmasının yerel olmama hususu genelde hesaba katılmamaktadır (KUDRYAVTSEV, 2008).

Bu durumda, plazma “ortalama parçacık” anlayışı çerçevesinde değil farklı bir “dilde” açıklanmalıdırlar. Çünkü, yerel olmayan (nonlocal) plazmada değişik elektron grupları çok farklı davranabilirler. Örneğin, akımları farklı (ters bile!) yönlerde olabilir, vs. (TSENDIN, 2010). Bu demektir ki plazma özellikleri dağılım fonksiyonun ortalama özellikleriyle açıklanamazlar, başka deyimle, bu koşullarda akışkan yaklaşımı değil onun yerine kinetik analiz yapılması gerekir (RAFATOV, 2012b). Bundan dolayı, hem fiziksel model hem de bunun gibi plazma sistemlerin modellemesi için geliştirilen nümerik kod ve algoritmalar, elektron edf’nun yerel olmadığını hesaba katmalıdırlar.

Bu projede temel bilimsel problem, yerel olmayan (“nonlocal”) gaz deşarj plazmalarının kinetik sayısal kodların geliştirilmesidir. Bu amaçla, aşağıda sıralanan yöntem ve yaklaşımları izlenerek çalışmalar yürütülmüştür:

- **Yerel olmayan analitik iyonlaşma terimini içeren hibrit yöntem ve nümeric model**’in geliştirilmesi: Bu yöntem, genişletilmiş akışkan plazma modelinin (“extended fluid model”) elektron balans ve elektron enerji balans denklemlerinde elektronların katılımıyla oluşan çarpışmaların doğurduğu iyonlaşma (electron-impact ionization) ve uyarım (excitation) kaynak terimlerini modifiye ederek, yerel olmayan kinetik etkisinin sağlanmasına dayanmaktadır.

- **Parçacık Yöntemine dayanan hibrit hodel**: Plazmanın yüksek enerjili “hızlı” elektronların dinamiğini PIC (“Particle in Cell”) yöntemiyle ayrı ayrı izleyen ve bunların katılımıyla oluşan çarpışmaları Monte Carlo hesaba katan, “yavaş” elektronlar ile geriye kalan parçacık türleri için akışkan yöntemini kullanan bir yaklaşımdır.

- **(Paralel) PIC/MCC model**: Bu model “Particle in Cell & Monte Carlo Collision” yöntemine dayanan plazmayı oluşturduğu yüklü parçacık türlerinin kinetik Boltzmann denklemlerin istatistiksel yolu ile çözümlenmesini sağlayan tam kinetik nümerik modelidir.

Bu yöntemler için, fortran, matlab, ve COMSOL Multiphysics yazılımlarını kullanarak, iki boyutlu nümerik model ve kodlar geliştirilmiş, doğrulanmıştır, ve belli deşarj (DC ve RF) plazmaları için uygulanıp nümerik analizler yapılmıştır.

Yukarıda sıralanan üç yaklaşımla ilgili detaylı bilgi, aşağıda gelen üç bölümde ayrı ayrı ele alınmıştır.

Yerel olmayan plazmanın temel teorik araştırmaların pratik gelişimi, edf’nin yerel olmayan özelliklerine dayanan yerel olmayan plazma teknolojileridir (NLP-technology) (DEMIDOV, 2005). Bu teknolojilerin bir örneği, Plazma Elektron Spektroskopisidir (PLES ile CES). Yerel olmayan Penning

elektronlarının plazma ortamında kaydolmasına dayanan PLES yöntemi, kromatografyada veya daha genel ihtiyaçlar için karışımlar analizi için yeni detektör türünün geliştirmesi için kullanılabilir (CHIRTSOV, 2011, KUDRYAVTSEV, 2012). Bu doğrultuda, projede argon ile helyumun karışımlarında, Plazma Elektron Spektroskopisi (PLES ile CES) yönteminin kapasitesi ve uygulama alanı sınırlarının anlaşılması için PIC/MCC analizi yapılmıştır.

Kısım I

ANALİTİK İYONLAŞMA TERİMİNİ İÇEREN HİBRİT MODEL

Bu bölümde geliştirilen hibrit modelin temel mantığı şu şekilde açıklanabilir. Akışkan modeller, genel olarak deşarj plazmalarının davranış ve özelliklerini modelleyebilmelerine ve nümerik hesap açısından verimli (“computationally efficient”) oldukları için hızlı bir şekilde sonuç verebilmelerine karşın, düşük basınçlı deşarjlarda ve özellikle deşarjın katot bölgesinde güvenilir sonuçlar üretememektedirler (KOLOBOV, 1992, RAFATOV, 20012a). Bu durumlarda kinetik (parçacık) yöntemlere ihtiyaç duyulmaktadır. Ancak, parçacık modelleri (örneğin, Particle-in-Cell, PIC) daha geniş bir parametre aralığında gerçeğe yakın sonuçlar üretilmelerine karşın her parçacığın ayrı ayrı ele alınmasını gerektirdiğinden hesaplama zamanı açısından verimsizdir (DONKO, 2006, 2011). Bunun için hibrit modeller yoğun ilgi kazanmıştır. Hibrit modeller bütün parçacıkları değil sadece yüksek enerjili elektronları (“fast electrons”) parçacık yöntemiyle geriye kalan ağır parçacık türlerini (ions, metastable parçacıklar, vs.) ve düşük enerjili elektronları (“slow electrons”) akışkan gibi modelleyen bir yöntem olduğu için akışkan modellerin hız ve verimliliği ile parçacık modellerin kesinliğini birleştiren bir yapıya sahiptir (DONKO, 2006, DERZSİ, 2009). Bu yöntemle nümerik sürecin her zaman adımında akışkan modelden elde edilen elektrik alan profilini kullanarak stokastik Monte-Carlo (MC) çarpışma metoduyla yüksek enerjili elektronlar simüle edilmekte ve bu hesaplardan elde edilen iyonlaşma kaynak terimleri (“source terms”) akışkan modeldeki düşük enerjili elektronlar ve iyonların süreklilik denklemlerinde kullanılmaktadır. Bu hızlı elektron grubunun modele katkısı yalnız kaynak terimlerinin yani iyonlaşma gibi süreçlerin şiddetlerinin uzamsal dağılımlarının belirlenmesi ile sınırlı olduğu anlamına gelmektedir. Bu bölümde, kaynak terimlerin bulunması için hesapları çok zorlaştıran MC simülasyonu yerine yerel olmayan bir analitik yaklaşım uygulanmıştır (KOLOBOV, 1992, PERES, 1992, KUDRYAVTSEV, 2008, RAFATOV, 20012b).

1 MODEL

1.1 Temel Denklemler

İncelediğimiz fiziksel olayın davranışlarını modelleyen diferansiyel denklem sistemleri genel olarak plazmayı oluşturan parçacık türlerinin (elektron, iyon, nötr metastable atomlar) kinetik Boltzmann denklemlerinin ilk üç integral momentlerin alınmasının sonuçları olan süreklilik, momentum, ve enerji denklemleri ile elektrik potansiyel için Poisson denklemini içermektedir. Her bir parçacık türü için süreklilik denklemleri

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_i = S_i, \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e = S_e, \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_m}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_m = S_m. \quad (3)$$

şeklinde yazılırlar. Elektrostatik alan Poisson denkleminin çözümünden bulunur

$$-\varepsilon_0 \nabla^2 \varphi = e(n_i - n_e), \quad \mathbf{E} = -\nabla \varphi \quad (4)$$

Yukarıdaki denklemlerde e , i , ve m indisleri sırasıyla elektronları, pozitif iyonları, ve metastabil atomları temsil etmektedirler. n parçacık yoğunluğunu, S parçacık oluşum şiddetini, e elementer yükü, ε_0 dielektrik sabitini, \mathbf{E} ile φ elektrik alan ile elektrostatik potansiyeli ve $\mathbf{\Gamma}$ parçacık akım yoğunluğunu ifade etmektedir,

$$\mathbf{\Gamma}_k = \text{sgn}(q_k) n_k \mu_k \mathbf{E} - D_k \nabla n_k. \quad (5)$$

Burada $q_e = -e$, $q_i = e$, $q_m = 0$, μ ile D de sırasıyla mobilite ve difüzyon katsayılarıdır.

Denklem (5), gaz deşarj plazmasının akışkan modelinin momentum denkleminde elde edilir (“drift-difüzyon yaklaşımı”), k 'ci parçacık türün toplam akım yoğunluğunun “drift” ve “difüzyon” olmak üzere iki bileşene ayrılmış halde verilmiştir. (1)-(5) denklemlerinde parçacık taşıma katsayıları (μ ile D) ve parçacık balans (1)-(3) denklemlerin sağ taraflarında kaynak terimleri tanımlanmış olduğu halde, sistem (1)-(5) *Basit akışkan modeli* gibi anlaşılır (Örn., RAFATOV, 2007, 2012a). Bu durumda, parçacıkların mobilite μ ile difüzyon D katsayıları ve parçacık oluşum şiddeti S genel olarak indirgenmiş elektrik alanın yerel değerinin (E/p veya E/n_0 , p ile n_0 çevre gaz basıncı ile yoğunluğudur) fonksiyonları veya sabit olarak (genelde μ_e ile D_e) tanımlanırlar. Bu nedenle, bu yaklaşıma “Yerel Alan Yaklaşımı” (YAY) adı verilir. Ayrıca, her tür parçacık için Einstein eşitliğinin, $D/\mu = k_B T/e$, geçerli olduğu kabul edilir. Burada k_B Boltzmann katsayısı, T parçacık türünün kinetik sıcaklığıdır.

Denklem (1)-(5) ile verilen basit akışkan modeline elektronların yerel olmayan taşınımının entegrasyonu, elektron enerji denge denkleminin eklenmesi ile sağlanır.

$$\frac{\partial n_\varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_\varepsilon = S_\varepsilon \quad (6)$$

Burada $n_\varepsilon = n_e \bar{\varepsilon}$ elektron enerji yoğunluğu ve $\bar{\varepsilon} = 3/2 k_B T_e$, ortalama elektron enerjisidir. Elektron enerji akım yoğunluğu, sırasıyla D_ε ile μ_ε elektron enerjinin difüzyonu ile mobilitesi olmak üzere,

$$\mathbf{\Gamma}_\varepsilon = -D_\varepsilon \nabla n_\varepsilon - \mu_\varepsilon \mathbf{E} n_\varepsilon \quad (7)$$

olarak tanımlanır.

1.2 Taşıma Katsayıları

Ağır parçacıkların (iyon, metastable atom) enerji dağılımlarının Maxwellian olduğu bilinmektedir. Buna göre, bu parçacıkların mobilite ile difüzyon katsayıları (ortam gaz basıncıyla orantılı) sabit kabul

edilebilir. Ayrıca, iyon mobilite ile difüzyon katsayıları, Einstein denklemiyle açıklanır. Bu durumda, $D_i/\mu_i = k_B T_i/e$ yazılabilir. Modelde iyon sıcaklığı ortam gaz sıcaklığına eşit olarak alınmıştır, $T_i = T_g$.

Tablo 1: Argon plazması için uyguladığımız elementer reaksiyonlar listesi. Boltzmann denklemin çözümünden hesaplanan şiddet sabitleri “Boltzmann” olarak işaretlenmişlerdir.

İndis	Reaksiyon	Açıklama	ΔE (eV)	Şiddet Sabiti
1	$e + Ar \rightarrow e + Ar$	Esnek çarpışma	0	Boltzmann
2	$e + Ar \rightarrow 2e + Ar^+$	Direk iyonlaşma	15.824	Boltzmann
3	$e + Ar \leftrightarrow e + Ar^*$	Excitation	11.424	Boltzmann
4	$e + Ar \leftrightarrow e + Ar$	Excitation	13.1	Boltzmann
5	$e + Ar^* \rightarrow 2e + Ar^+$	Stepwise iyonlaşma	4.3997	Boltzmann
6	$2Ar^* \rightarrow e + Ar^+ + Ar$	Penning iyonlaşma	-	$6.2 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
7	$Ar^* \rightarrow h\nu + Ar$	Radyasyon	-	$1.0 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$

Denklem (5)’deki enerji taşıma katsayıları için $\mu_\varepsilon = (5/3)\mu_e$, $D_\varepsilon = (5/3)D_e$ yaklaşımı kabul edilir. (Bu yaklaşım, EEDF ‘nın Maxwell dağılımına uygun olduğu halde kesin eşitliğe dönüşür (örneğin, HAGELAAR, 2005)). Bu durumda, elektron enerji akım yoğunluğu (5)’in, geleneksel akışkanlar mekaniğinde olduğu gibi, elektron ısı iletkenliği terimini içerecek şekilde yazılması mümkündür (ARSLANBEKOV, 2003, HAGELAAR, 2005),

$$\Gamma_\varepsilon = \frac{5}{2} k_B T_e \Gamma_e - \lambda_e \nabla k_B T_e.$$

Burada $\lambda_e = \frac{5}{2} n_e D_e$ elektron ısı iletkenlik katsayısıdır.

Elektron dinamiği için kinetik yaklaşım kullanılır. Elektron mobilite μ_e ile difüzyon D_e , yerel EEDF $f_0(\varepsilon)$ ile gereken esnek çarpışma kesitini (örneğin, argon gazı için Şekil 1 de 1. No’lu $\sigma_1(\varepsilon)$ eğrisi) kullanarak,

$$\mu_e = -\frac{1}{n_e} \frac{e}{m_e} \int_0^\infty D_r \sqrt{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} f_0(\varepsilon) d\varepsilon,$$

$$D_e = -\frac{1}{n_e} \int_0^\infty D_r \sqrt{\varepsilon} f_0(\varepsilon) d\varepsilon.$$

hesaplanır.

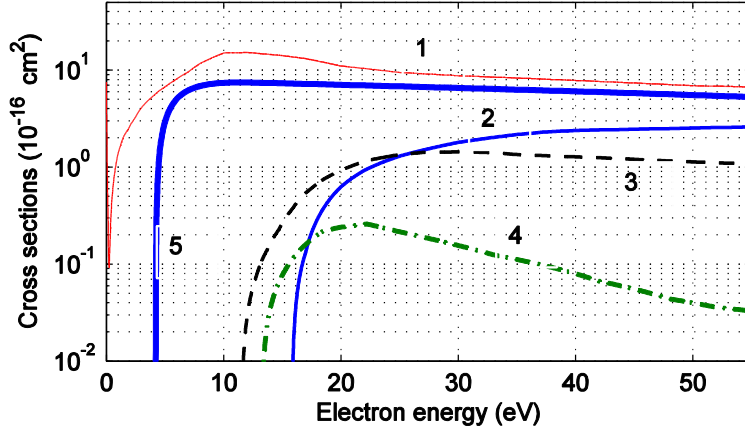
Burada, $\varepsilon = mv^2/2e$ elektron kinetik enerjisi (eV), $D_r = 2\varepsilon/3m_e v_{ea}$ uzam difüzyon katsayısıdır. $f_0(\varepsilon)$ yerel elektron kinetik Boltzmann denklemin çözümünden elektron yoğunluğu n_e aşağıda ki normalleştirme koşulu kullanılarak bulunur,

$$n_e = \int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} f_0(\varepsilon) d\varepsilon.$$

1.3 Kaynak (Source) Terimleri

Parçacık türlerinin (1)-(3) süreklilik denklemlerin sağ taraflarında bulunan kaynak (source) terimleri S oluşun plazma-kimyasal reaksiyonlarla belirlenirler,

$$S = \sum_i R_i - \sum_j R'_j.$$



Şekil 1: Modelde uygulanan elektron çarpışma çapraz kesitleri: (1) esnek, (2) direk iyonlaşma, (3) excitation, (4) excitation, (5) stepwise iyonlaşma. Eğri numaraları Tablo 1 deki süreçler numaralıyla uyumludur.

Burada R_i ile R'_j reaksiyon şiddetleridir. Elektron ve iyon dengeleri modelde direk, stepwise, ve Penning iyonlaşma süreçleriyle sağlanır,

$$S_i = S_e = R_2 + R_5 + R_6.$$

(Elektron ile iyon oluşum şiddetlerin eşitliği $S_i = S_e$ parçacık korunum prensibinden yazılır) Burada R_2 , R_5 , ile R_6 sırasıyla direkt, stepwise, ve Penning iyonlaşma reaksiyon şiddetleridir (indisler Tablo 1'de ki süreçlerin sıralamasıyla uyumludur).

Uyarılmış atomlar dengelenmesi excitation, stepwise, Penning iyonlaşma ve radyasyon süreçleriyle sağlanır,

$$S_m = R_3 - R_5 - 2R_6 - R_7$$

“Gelişmiş akışkan” modellerinde reaksiyon şiddetleri, reaksiyona katılan bileşen yoğunluklarına doğru orantılıdır. Örneğin, (RAFATOV, 2012a) da n_0 ortam nötr atom yoğunluğu olmak üzere

$$R_2 = K_2 n_0 n_e, R_3 = K_3 n_0 n_e, R_5 = K_5 n_m n_e, R_6 = K_6 n_m^2, R_7 = K_7 n_m.$$

Reaksiyon sabiti K ilgili bileşenin enerji dağılımıyla belirlenir. Elektronların katkısıyla gerçekleşen reaksiyonlarda (Tablo 1’de ki 1-5 No’lu süreçler), bu sabitler gereken kesitleri ve yerel Boltzmann kinetik denkleminin çözümünden bulunan EEDF kullanarak hesaplanırlar (R türden reaksiyonun çarpışma kesiti σ_R ‘ın enerji ε bağımlılığı Şekil 1’de gösterilmiştir),

$$K_R = \int_0^{\infty} \sigma_R(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} f_0(\varepsilon) d\varepsilon.$$

Elektron enerji denklemin kaynak terimine ‘ye gelince,

$$S_{\varepsilon} = J_{elastic} + J_{inelastic} + J_{heat}.$$

Sağ taraftaki ilk terim, ν_{ea} elektron-atom esnek çarpışma frekansı, m parçacık kütlesi, ve ortam gaz sıcaklığı $T_g = 300$ K olmak üzere,

$$J_{elastic} = -\frac{3 m_e}{2 m_i} \nu_{ea} n_e k_B (T_e - T_g)$$

olarak hesaplanır ve esnek çarpışmalarda elektron enerji kaybını belirtir. İkinci terim ise,

$$J_{inelastic} = -\sum_j \Delta E_j R_j$$

elektron enerjisinin esnek olmayan çarpışmalardaki kaybını (veya artmasını) belirtir. Burada ΔE_j ile R_j j türü esnek olmayan çarpışma sonucu enerjinin kaybı (veya artması) ile reaksiyon şiddetidir (Bknz. Tablo 1).

$$J_{heat} = -e \Gamma_e \cdot \mathbf{E}$$

elektronların elektrik alanda Joule ısınmasını veya soğumasını ifade eder.

Böylece elde edilen sistem “genişletilmiş akışkan model” olarak bilinir (DERZSİ, 2009, RAFATOV, 2012a).

1.3.1 Yerel Olmayan Kaynak Terimi. Yukarıda tanımlanan model “genişletilmiş akışkan” modelini oluşturur. Geliştirdiğimiz hibrit modele hızlı elektronların etkisinin katılabilmesi için, yerel olmayan iyonlaşma kaynağı aşağıda verildiği şekilde tanımlanmıştır.

$$S_{fast} = \begin{cases} \Gamma_e(0) \alpha e^{\alpha x} & \text{eğer } x < d \\ \Gamma_e(0) \alpha e^{(\alpha d - (x-d))/\lambda} & \text{eğer } x \geq d \end{cases} \quad (8)$$

Burada $x = d$ plazma ile katot tabakası arasında ki sınır noktası $n_e(x) = 0.5 n_i(x)$ denklemi ile bulunur. α Townsend iyonlaşma katsayısıdır (PHELPS, 1999).

$$\alpha(\tilde{E}/n_0)/n_0 = 1.1 \times 10^{-18} \exp[-72/(\tilde{E}/n_0)] + 5.5 \times 10^{-17} \exp[-187/(\tilde{E}/n_0)] \\ + 3.2 \times 10^{-16} \exp[-700/(\tilde{E}/n_0)] - 1.5 \times 10^{-16} \exp[-10000/(\tilde{E}/n_0)],$$

$\tilde{E} = \varphi(d)/d$ katot tabakasında ki ortalama elektrik alan değeridir, \tilde{E}/n_0 Td birimiyle (1 Td = 10^{-17} V cm²), $\alpha(\tilde{E}/n_0)/n_0$ ise cm² ile ifade edilir, λ

$$\lambda = \frac{\varphi(d)/(pB) - d}{\alpha d} \quad (9)$$

olarak ifade edilen düşüş katsayısıdır (KUDRYAVTSEV, 2008), argon gazı için $B = 180$ V/(cm · Torr). Hesaplamalarda direkt iyonlaşma ile uyarım şiddetleri R_2 yerine S_{fast} , R_3 yerine $0.5S_{fast}$ alınmıştır. Ayrıca, “genişletilmiş akışkan” model (RAFATOV, 2012a)’dan farklı olarak katot bölgesinde yukarıda tanımlanan $\mathbf{J}_{heat} = -e\mathbf{\Gamma}_e \cdot \mathbf{E}$ yerine elektron ısınması için

$$\mathbf{J}_{heat} = \frac{1}{2} \Delta E_3 S_{fast} \frac{k_{ee} n_e}{k_{ee} n_e + k_{ea} n_0 p} \quad (10)$$

eşitliği kullanılmıştır (KUDRYAVTSEV, 2008).

1.4 Sınır Şartları

Hesaplamalarda kullandığımız sınır şartları Tablo 2 gösterilmektedir.

Tablo 2: Sınır şartları.

	Anot	Katot
n_e	$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}_e = \frac{1}{4} v_e n_e$	$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}_e = \frac{1}{4} v_e n_e - \gamma \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}_i$
n_i	$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}_i = \alpha n_i \mu_i (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E}) + \frac{1}{4} v_i n_i$	$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}_i = \alpha n_i \mu_i (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E}) + \frac{1}{4} v_i n_i$
n_m	$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}_m = \frac{1}{4} v_m n_m$	$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}_m = \frac{1}{4} v_m n_m$
n_ε	$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}_\varepsilon = \frac{1}{3} v_\varepsilon n_\varepsilon$	$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}_\varepsilon = \frac{1}{3} v_\varepsilon n_\varepsilon$
φ	U_d	0

Burada,

\hat{n} sınıra doğru dik birim vektörüdür.
 $\Gamma_e, \Gamma_i, \Gamma_m, \Gamma_\varepsilon$ 2.1 de tanımlanan toplam (drift artı difüzyon) akım yoğunluklarıdır
 v_e, v_i, v_m $T_e, T_i,$ ve T_g elektron, iyon, ve gaz sıcaklıkları olmak üzere termal hız büyüklükleridir. Yani,

$$v_e = \sqrt{8k_B T_e / \pi m_e}, v_i = \sqrt{8k_B T_i / \pi m_i}, v_m = \sqrt{8k_B T_g / \pi m_i},$$

Gaz sıcaklığı hesapta $k_B T_g = 0.0258$ (eV) olarak alınmıştır.

Burada, γ ikincil elektron emisyon katsayısıdır.

α sabitinin alacağı değerler 0 veya 1, $(\hat{n} \cdot \mathbf{E})'$ skalar çarpımının pozitif veya negatif olduğuna göre değişmektedir.

Sonuç olarak, incelenen glow deşarjın matematiksel modeli, 1.1-1.4 de açıklandığı gibi tanımlanır ve (1)-(7) diferansiyel denklemlerini içerir. Bu denklemler yukarıdaki tabloda verilen sınır şartlara uygun olarak çözümlenir.

2 NÜMERİK MODELİN DOĞRULANMASI VE SONUÇLARI

Modelleme ve nümerik hesaplamalar için COMSOL Multiphysics™ sonlu eleman paketi, fortran 90, ve matlab yazılımları kullanılmıştır. Fiziksel süreçlerin modellenmesi için COMSOL paketi uygun, yüksek verimli ve tanınan bir programlama ortamıdır. Ayarlanabilir kalıplar kullanılarak, birbiriyle bağımlı fiziksel alanların her türlü kombinasyonu modellenebilir. Sonlu eleman yöntemiyle lineer olmayan kısmi türevli diferansiyel denklem sistemleri bir, iki, ve üç boyutta çözülebilir. Örneğin, bilinen çoğu olay ve süreçleri (ısı ve elektrik taşınması, esneklik teorisi, difüzyon, dalgalar yayılımı, sıvıların akımı, vs.) için tanımlı diferansiyel denklemler kullanılabilir. Ayrıca, COMSOL paketi oldukça karmaşık problemleri programlayıp hesabını yapabilecek değişik çözümleyicileri (solver) içerir. Paketin basit ara yüzü ve yapısı kullanım kolaylığı ve esnekliğini sağlamaktadır.

Bölüm 1.3'de tanımlanan yerel olmayan iyonlaşma terimini

- (i) yalnız elektron ve pozitif iyon türlerini içeren “basit” akışkan
- (ii) “genişletilmiş” akışkan

plazma modellerine eklenerek hibrit model elde edilmiştir. Modelin denenmesi ve performansının doğrulanması ile ilgili bilgiler ve gözlemlenen sonuçlar aşağıda verilmektedir.

■ Geliştirilen hibrit model MC simülasyonu içeren hibrit yöntemlerine yakın sonuçlar verebilmektedir. Aynı zamanda, bu yöntem MC simülasyonu içeren modellerden sayısal zaman açısından çok daha verimlidir. Örnek olarak, p basınç, U_d uygulanan voltaj, L elektrotlar arası mesafe, γ ise ikincil elektronların emisyon katsayısı olmak üzere, iki farklı koşul setler

Set 1: argon, $p = 133$ Pa, $U_d = 250$ V, $L = 1$ cm, $\gamma = 0.06$,

Set 2: argon, $p = 40$ Pa, $U_d = 441$ V, $L = 3$ cm, $\gamma = 0.033$

için yapılan hesap sonuçlarının MC hibrit model (DERZSİ, 2009) ile karşılaştırması Şekil 1 ve 2 de gösterilmiştir. Bu şekillerde (a) elektron ve iyon yoğunlukları n_e ile n_i (DERZSİ, 2009)'te yalnız elektron yoğunluğu n_e gösterilmiştir), (b) elektrik alan dağılımı E , (c) iyonlaşma kaynağının (ionization source function) profili, (d) elektron sıcaklığı profili T_e .

■ “Hibrit I” model “geliştirilmiş akışkan” modelden çok daha iyi performans sağlamaktadır. Örneğin, Şekil 2 ve 3’den anlaşıldığı gibi, geliştirilen model ile bulunan yüklü parçacık yoğunluğu (Şek. 2(a), 3(a)) ve elektrik alanın (Şek. 2(b), 3(b)) değer ve şekilleri MC hibrit yöntemin sağladığı çözümlere daha yakındır. Ayrıca, akışkan modelin verdiği parçacık yoğunluğunun değeri MC ile “Hibrit I” yöntemlerinin sonuçlarından yüzlerce kat farklı olduğu gözlemlenebilir (Şek. 2(a), 3 (a)).

■ Geliştirilen hibrit model elektron sıcaklığı değerini doğru verebilmektedir. “Genişletilmiş” akışkan yöntemi ise deneylerde gözlemlenen (0.1-1 eV civarında olan) değerlerinden (RAFATOV, 2012b) de açıklandığı üzere katlarca daha yüksek sonuç vermektedir (Şek. 2(d), 3(d)).

■ İncelenen kısa deşarj koşulları için yerel olmayan iyonlaşma şiddeti S_{fast} diğer iyonlaşma (step wise ionization, Penning ionization) kaynaklarından daha üstün olduğu için “basit” ve “genişletilmiş” akışkan modellere S_{fast} ’nın entegre edilmesiyle elde edilen hibrit model versiyonların sonuçları biri birine oldukça yakın (Şek. 2 (a, b, c)’de olduğu gibi).

■ Glow deşarj modellerinde her zaman gözlemlendiği gibi, ikincil elektronların emisyon katsayısı γ bir belirsizlik kaynağıdır. Örneğin, Şekil 2

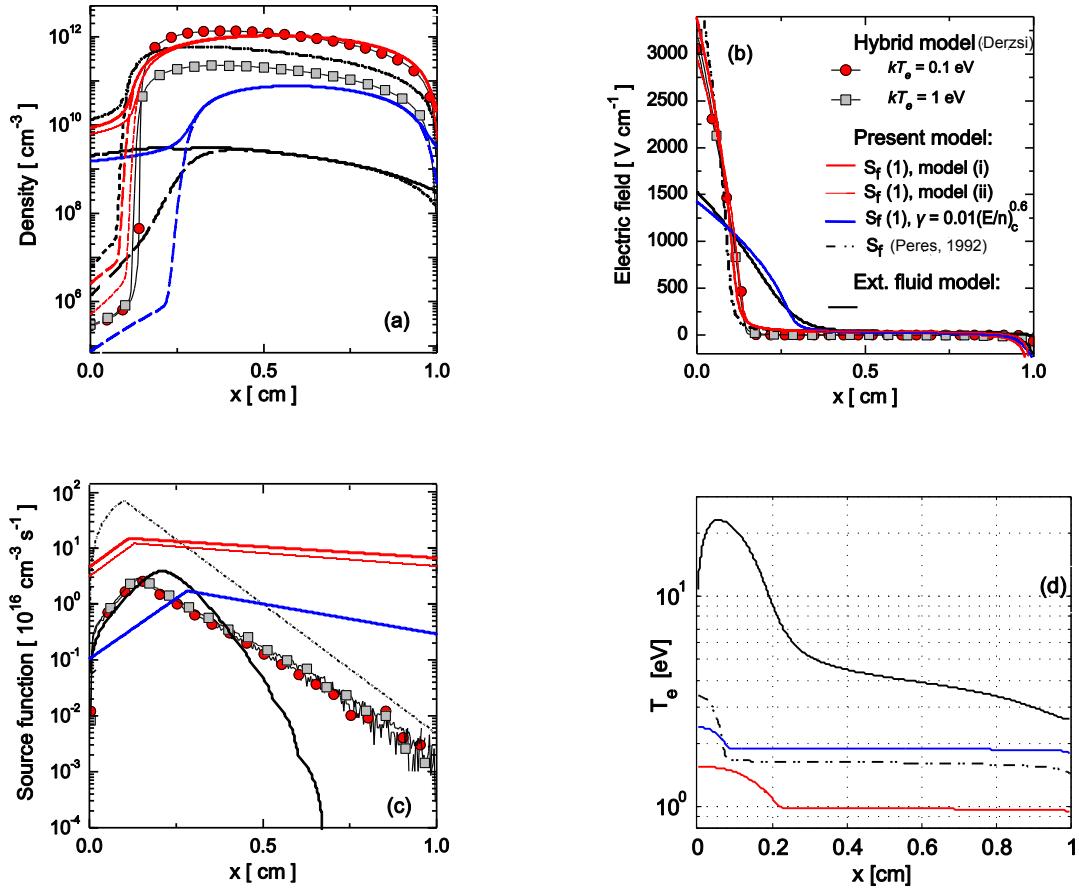
$$\gamma = 0.01(E/n)_c^{0.6} \quad (11)$$

katsayısı için de hesap sonucunu içermektedir ve fark ortadadır (indirgenmiş elektrik alan E/n katot üzerinde hesaplanmıştır ve kTd birimi kullanılmıştır, 1 kTd = 10^{-20} Vcm² (PHELPS, 1999). Set 2 için, $\gamma = 0.033$ ile (3)’e göre hesaplanan γ biri birine yakın oldukları için sonuçlar arasında ki fark çok azdır.

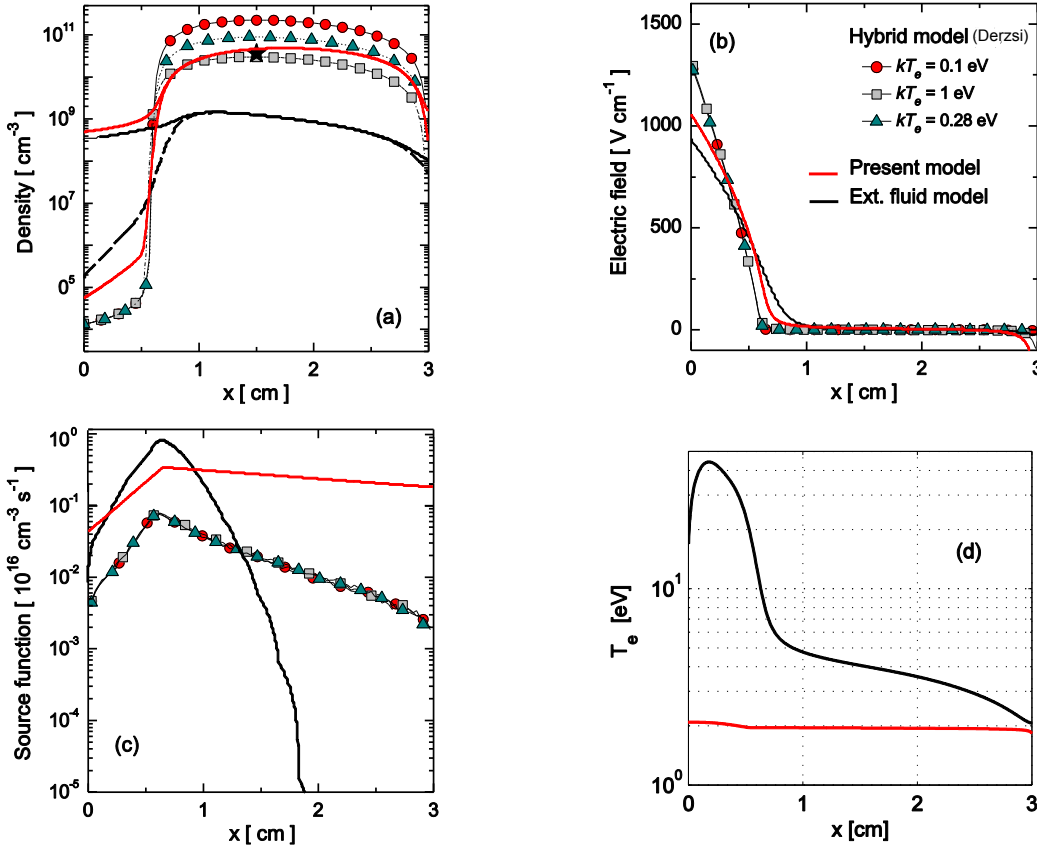
■ Geliştirilen hibrit model akışkan modellere göre deneysel verilere daha yakın sonuç sağlamaktadır. Deşarjın akım-gerilim özelliklerinin karşılaştırması Şekil 4’te verilmektedir. Burada $pL = 0.5$ cmTorr durumu için analitik model (KUDRYAVTSEV, 2008) sonucu, deneysel ölçümler (DONKO, 2006, ROZSA, 1995, STEFANOVİC, 1997), ve geliştirilen hibrit model sonuçları sergilenmiştir. γ tahmini olarak yaklaşım (11) ve bu değer’in yarısı alınmıştır. λ parametresi için denklem (9) ile $\lambda = 0.1$ cm kullanılmıştır.

Şekil 5 elektron yoğunluğu n_e ’nin $x = 1.5$ cm noktada ki değerinin deşarj voltajının fonksiyonu olarak hem deneysel (DERZSİ, 2009) hem nümerik hesaplama (RAFATOV, 2012b) sonuçlarını içermektedir. Anlaşıldığı gibi, hibrit model sonucu n_e “basit” ve “genişletilmiş” akışkan modellerden deneysel ve MC simülasyon (DERZSİ, 2009) sonuçlara çok daha yakındır.

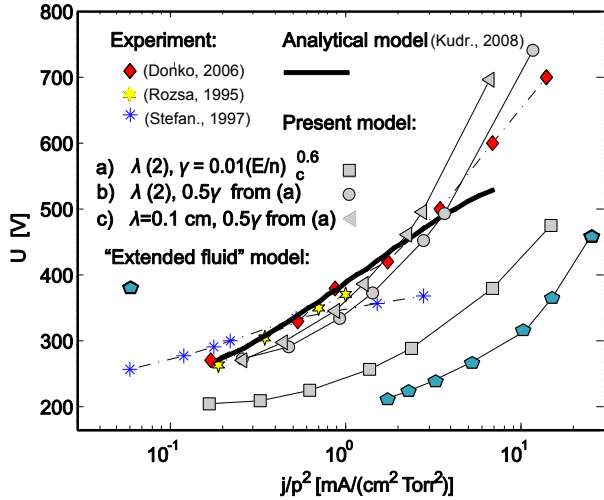
■ Plazma ile katot tabakasının sınırın konumunun tanımlanması için aldığımız faktör 0.5 yerine 0.4-0.9 arasından bir sayı alınmasının hibrit modelin nümerik sonuçlarına etkisi azdır (RAFATOV, 2012b) da açıklanmıştır neden). Modelin kesin sonuç verebilmesi iyonlaşma şiddeti (9) formülünde kullandığımız (hızlı elektronların “mean free path” mesafesiyle ilgili olan) düşüş katsayısı λ nın doğru tahmin edilmesine bağlıdır.



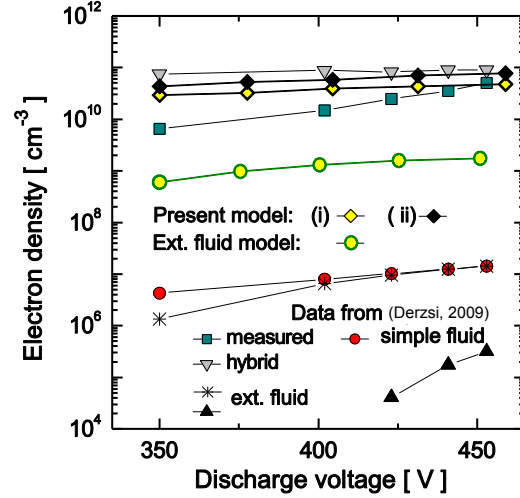
Şekil 2: 1.ci Koşullar Seti için MC hibrit yöntem (DERZSİ, 2009) ile karşılaştırma ($p = 133$ Pa, $V = 250$ V, $L = 1$ cm, $\gamma = 0.06$). (a) elektron ile iyon yoğunlukların, (b) elektrik alanın, (c) iyonlaşma kaynak teriminin, ve (d) elektron sıcaklığının uzamsal dağılımları.



Şekil 3: 2.ci Koşullar Seti için MC hibrit yöntem (DERZSİ, 2009) ile karşılaştırma ($p = 40$ Pa, $V = 441$ V, $L = 3$ cm, $\gamma = 0.033$). (a) elektron ile iyon yoğunlukların, (b) elektrik alanın, (c) iyonlaşma kaynak teriminin, ve (d) elektron sıcaklığının uzamsal dağılımları.



Şekil 4: Akım-gerilim eğrileri. $pL = 0.5$ cmTorr. Deneysel veriler (DONKO, 2006, ROZSA, 1995, STEFANOVIĆ, 1997). Geliştirilen “Hibrit I” model için farklı λ ve γ parametre değerleri kullanılmıştır.



Şekil 5: Elektron yoğunluğu n_e nin katot 'tan $x = 1.5$ cm mesafe uzaklığında ki değerinin uygulanan voltajdan bağımlılığı. $L = 3$ cm, $p = 40$ Pa, $\gamma = 0.033$. “Hibrit I” model sonuçlarıyla nümerik ve deneysel (DERZSİ, 2009) sonuçların karşılaştırması.

Kısım II

PARÇACIK YÖNTEMINE DAYANAN HİBRİT MODEL

Akışkan modelin plazmaların yerel olmayan özelliklerinin açıklanmasındaki yetersizliği, hibrit ve tam kinetik yaklaşımları gerekli kılmaktadır. Basit veya geliştirilmiş akışkan modellerin bir sonraki adımı hibrit modellerdir. Bu yaklaşım plazma içinde yerel olmayan özellikler gösteren elektronların ya tamamen yada kısmen Monte-Carlo Çarpışmalar (MCC) yöntemiyle kinetik olarak modellenmesine dayanmaktadır (SURENDRA, 1990, DONKO 2006, DERZSI 2009). Bu çalışmada üzerinde yoğunlaştığımız metot sadece yüksek enerjili elektronların kinetik olarak modellenip, geriye kalan düşük enerjili elektronların ve iyonların hareketleri için yine süreklilik denklemlerini kullanmaktır. Kinetik olarak modellenen yüksek enerjili elektronların deşarj hacmi içerisindeki elektron yoğunluğuna katkısı yok denebilecek kadar azdır ve bu elektronlar genellikle yoğun voltaj düşüşünün görüldüğü dolayısıyla elektrik alan şiddetinin yüksek olduğu katot bölgesinden gelmektedir (SURENDRA, 1990). Bu elektronların belirleyici etkisi düşük enerjili elektronların ve iyonların süreklilik denklemlerinde nötr atomların elektron darbeleriyle iyonlaşması için kullanılan kaynak terimlerindeki katsayılar üzerinedir. Ayrıntılı bilgi aşağıda ki bölümde verilmiştir.

1 YÖNTEM

1.1 Modelin Akışkan Kısmı

Akışkan (fluid) yaklaşımında, plazmayı oluşturan elektron, iyon ve nötr gaz atomları gibi parçacık türlerinin her biri ayrı ayrı akışkanlar olarak ele alınıp, akışkan dinamiğinin süreklilik eşitlikleri yardımıyla modellenirler (bu eşitlikler parçacık türlerinin kinetik Boltzmann denklemlerinin ilk integral momentlerin alınmasıyla elde edilir) (LIEBERMAN 2005). Böylece, yavaş (slow) elektron ve pozitif iyonların yoğunlukları aşağıda ki denklemlerden bulunur,

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e = S_e, \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_i = S_i. \quad (2)$$

Bunlara ek olarak elektrik alan şiddeti için Poisson eşitliği çözülmektedir,

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

$$\rho = e(n_i - n_e) \quad (4)$$

Burada $n_{e,i}$ elektron ve iyon yoğunluklarını, $\Gamma_{e,i}$ elektron ve iyon akı yoğunluklarını, $S_{e,i}$ iyonlaşma kaynak terimlerini, φ potansiyeli, ρ toplam yük yoğunluğunu ifade etmektedir. Akı terimleri drift-difüzyon yaklaşımını kullanarak momentum eşitliklerinden şu şekilde yazılabilir (HAGELAAR, 2005),

$$\Gamma_e = -D_e \nabla n_e - \mu_e n_e \mathbf{E}, \quad (4)$$

$$\Gamma_i = -D_i \nabla n_i + \mu_i n_i \mathbf{E}. \quad (5)$$

Burada $D_{e,i}$ difüzyon katsayılarını, $\mu_{e,i}$ mobilite katsayılarını ve $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$ elektrik alan vektörünü ifade etmektedir. Basit akışkan yaklaşımda iyonlaşma kaynak terimleri Townsend iyonlaşma katsayısı kullanılarak akıyla orantılı olarak şu şekilde yazılır (RAFATOV 2007),

$$S_{e,i} = \alpha(E/N) |\Gamma_e|. \quad (6)$$

Burada $\alpha(E/N)$ indirgenmiş elektrik alana bağlı Townsend iyonlaşma katsayısı, E elektrik alan şiddeti, N ise nötr gaz atom/molekül yoğunluğunu ifade etmektedir. Bu denklemlerin nümerik çözümleri kaynak terimlerinin dağılımına yüksek derecede duyarlıdır. Bizim modelimizde kullanacağımız kaynak terimleri yüksek enerjili elektronların MCC metoduyla simüle edilmesiyle elde edilecektir.

$$S_{e,i} = S_{e,i}^{MCC}. \quad (7)$$

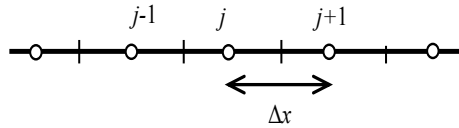
Detaylı bilgi MCC simülasyonun anlatıldığı bölümde verilmiştir.

1.2 Akışkan Denklemlerin Diskritizasyonu

1.2.1 Bir Boyutta (1D) Diskritizasyon

Akışkan simülasyon için Bölüm 1.1’de ifade edilen denklem sistemleri kontrol hacim tekniği (Control Volume Method) kullanılarak diskritize edilmiş, oluşan denklem sistemleri exponansiyel metod kullanılarak çözülmüştür (PATANKAR, 1980). Bu metod Scharfetter-Gummel yöntemi olarak da bilinir. Bu metotta öncelikle süreklilik differansiyel denklemlerin kontrol hacmi sınırları içerisinde integralleri alınarak elde edilen diskritize hali bir boyutta (1D) şu şekilde yazılır,

$$\frac{n_j^{k+1} - n_j^k}{\Delta t} \Delta x + \Gamma_{j+1/2}^{k+1} - \Gamma_{j-1/2}^{k+1} = S_j^k \Delta x. \quad (8)$$



Burada k zaman adımını, j grid noktalarını sembolize etmektedir. Akım yoğunluğu Γ 'nın yaklaşık ifadesini elde etmek için, bu denklemdeki akı teriminin iki grid noktası arasında kararlı duruma erişildiği varsayılarak ve basit yaklaşımda kaynak terimleri ihmal edilerek süreklilik denklemleri tekrar yazılır,

$$\nabla \cdot (-D \nabla n + \mu \mathbf{E} n) = 0. \quad (9)$$

Bir boyutta hesaplar için bu denklem sınır şartlarıyla birlikte şu şekilde ifade edilerek,

$$\frac{d}{dx} \left(-D \frac{dn}{dx} + \mu E n \right) = 0, \quad (10)$$

$$n(0) = n_j, \quad n(\Delta x) = n_{j+1},$$

ve grid noktalarındaki (sınır şartları) yoğunluk değerlerine bağlı olarak çözülebilir. Öyle ki katsayılar grid noktalarının ortasındaki değerlere sabitlenerek ve denklemin analitik çözümlerinden faydalanarak akı terimleri

$$\Gamma_{j+1/2}^{k+1} = \mu_{j+1/2} E_{j+1/2} \frac{n_j^{k+1} - n_{j+1}^{k+1} e^{-P_{j+1/2}}}{1 - e^{-P_{j+1/2}}} \quad (11)$$

şeklinde yazılabilmektedir. Burada P konveksiyon-difüzyon dengesini belirleyen Peclet sayısıdır. Kullanılan katsayılar için çözüm yapılan bölgenin orta noktasındaki değerler kullanılır,

$$P_{j+1/2} = \left(\frac{\mu_{j+1/2} E_{j+1/2}}{D_{j+1/2}} \right) \Delta x, \quad (12)$$

$$E_{j+1/2} = -\frac{\varphi_{j+1} - \varphi_j}{\Delta x}. \quad (13)$$

Elde edilen akılar elektron ve iyonlar için işaret değişiklikleri dışında aynı şekilde ifade edilmektedir. Hesaplanan sonuçlarda kullanılan mobilite katsayıları elektronlar için $\mu_{j+1/2} = -\mu_{e,j+1/2}$ ve iyonlar için ise $\mu_{j+1/2} = \mu_{i,j+1/2}$ şeklinde kullanılır.

Scharfetter-Gummel yöntemi kaynak teriminin ihmal edilmediği durumda modifiye edilerekde kullanılabilir. Bu modifikasyon kaynak terimini geleneksel yöntemde olduğu gibi ihmal etmemektedir. Kaynak teriminin denklem (6)'deki gibi ifade edildiği durumda, α Townsend iyonlaşma katsayısı olmak üzere, akı ifadeleri daha genel olarak,

$$\Gamma_{j+1/2} = (-\alpha D + \mu E) \left(\frac{n_j - n_{j+1} e^{-P}}{e^{-\alpha \Delta x} - e^{-P}} \right) e^{\frac{\alpha \Delta x}{2}}, \quad (14)$$

şeklinde yazılabilir. Kaynak teriminin ihmal edildiği limit durumunda ($\alpha=0$) bu yaklaşım geleneksel Scharfetter-Gummel akım ifadesini (denklem (11)) vermektedir. Bu şekilde hesaplanan akım değeri özellikle iyonlaşma katsayı değerinin yüksek olduğu bölgelerde daha kesin sonuç sağlamaktadır fakat bizim modelimizde (hibrit model) kaynak terimi doğrudan MCC simülasyondan elde edildiği ve bu katsayıya bağlı olmadığı için elektron ve iyonlar için akı terimi basit Scharfetter-Gummel yaklaşımıyla elde edilmiştir.

Poisson denkleminin diskritizasyonu yine kontrol hacim tekniği kullanılarak integral alınıp düzenlendiğinde şu şekilde ifade edilebilir,

$$\frac{\varphi_{j+1} - 2\varphi_j + \varphi_{j-1}}{(\Delta x)^2} = -\frac{e(n_{i,j} - n_{e,j})}{\epsilon_0}. \quad (15)$$

Bir boyutta bütün diskritizasyon işlemleri (süreklilik denklemleri ve Poisson) sonuç olarak şu şekilde dönüştürülebilir,

$$b_j^k n_j^{k+1} = a_j^k n_{j-1}^{k+1} + c_j^k n_{j+1}^{k+1} + S_j^k. \quad (16)$$

Oluşan bu sistemler TDMA (“Three Diagonal Matrix Algorithm”) yöntemleri kullanılarak zamana göre ilerlemeli olarak çözülmektedir (PATANKAR, 1980).

1.2.2 İki Boyutta (2D) Diskritizasyon

Kontrol hacim tekniği süreklilik denklemleri için iki boyutta ikili integral alınarak uygulanır ve elde edilen sonu aşağıdaki denklem (17) gibi yazılabilir. Burada i, j grid noktalarını sembolize etmektedir.

$$\frac{n_{i,j}^{k+1} - n_{i,j}^k}{\Delta t} \Delta x \Delta y + (\Gamma_{i,j+1/2}^{k+1} - \Gamma_{i,j-1/2}^{k+1}) \Delta y + (\Gamma_{i+1/2,j}^{k+1} - \Gamma_{i-1/2,j}^{k+1}) \Delta x = S_{i,j}^k \Delta x \Delta y. \quad (17)$$

İki boyutlu geometride (2D) akı Γ terimlerin yaklaşık ifadelerini elde etmek için, yukarıdaki denklem (17) en basit yaklaşımda grid çizgileri doğrultuya dikey akı değerlerinin sabit oldukları varsayılarak iki tane bir boyutlu denkleme dönüştürülür ve aynen bir boyutta olduğu gibi çözülür,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(-D \frac{\partial n}{\partial x} + \mu E_x n \right) = 0, \quad (18)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(-D \frac{\partial n}{\partial y} + \mu E_y n \right) = 0, \quad (19)$$

$$n(0,0) = n_{i,j}, \quad n(\Delta x, 0) = n_{i,j+1}, \quad n(0, \Delta y) = n_{i+1,j}.$$

Burada E_x, E_y x ve y doğrultusundaki elektrik alan şiddetleridir. Elde edilen akı değerleri iki doğrultu için ayrı ayrı şu şekillerde yazılabilir.

$$\Gamma_{i,j+1/2}^{k+1} = \mu_{i,j+1/2} E_{i,j+1/2} \frac{n_{i,j}^{k+1} - n_{i,j+1}^{k+1} e^{-P_{i,j+1/2}}}{1 - e^{-P_{i,j+1/2}}}, \quad (20)$$

$$\Gamma_{i+1/2,j}^{k+1} = \mu_{i+1/2,j} E_{i+1/2,j} \frac{n_{i,j}^{k+1} - n_{i+1,j}^{k+1} e^{-P_{i+1/2,j}}}{1 - e^{-P_{i+1/2,j}}}, \quad (21)$$

Burada Peclet sayıları her doğrultu için yine yukarıdakine benzer şekilde,

$$P_{i,j+1/2} = \left(\frac{\mu_{i,j+1/2} E_{i,j+1/2}}{D_{i,j+1/2}} \right) \Delta x, \quad (22)$$

$$E_{i,j+1/2} = -\frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j}}{\Delta x}, \quad (23)$$

ve

$$P_{i+1/2,j} = \left(\frac{\mu_{i+1/2,j} E_{i+1/2,j}}{D_{i+1/2,j}} \right) \Delta y, \quad (24)$$

$$E_{i+1/2,j} = -\frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j}}{\Delta y}, \quad (25)$$

şeklinde ifade edilir.

İki boyutta (2D) süreklilik eşitlikleri için diskritize denklem sistemi denklem (26) şeklinde ifade edilir. Burada çözüm yaparken fazladan gelen katkılar kaynak terimi içinde değerlendirilerek eksen doğrultusundaki her çizgi üzerinde bir boyutlu TDMA çözümleri yapılarak sonuca ulaşılır.

$$b_{i,j}^k n_{i,j}^{k+1} = a_{i,j}^k n_{i,j-1}^{k+1} + c_{i,j}^k n_{i,j+1}^{k+1} + \underbrace{d_{i,j}^k n_{i-1,j}^k + e_{i,j}^k n_{i+1,j}^k}_{\tilde{S}_{i,j}^k} + S_{i,j}^k \quad (26)$$

Bir boyuttan farklı olarak her bir boyutlu çizgi üzerinde çözüm yapılırken komşu grid noktalarından gelen katkılar kaynak terimi içinde değerlendirilmektedir. Burada eğer zamana göre değişim hızlı ise bu katkılar yeni hesaplanan değerler kullanılarak içinde bulunulan zaman adımı içinde de bir iterasyon yaptırılabilir.

Poisson eşitliği için yapılan diskritizasyon işlemi iki boyutta daha karmaşık bir hal almakta ve sonuç şu şekilde yazılmaktadır,

$$\frac{\varphi_{i,j+1} - 2\varphi_{i,j} + \varphi_{i,j-1}}{(\Delta x)^2} + \frac{\varphi_{i+1,j} - 2\varphi_{i,j} + \varphi_{i-1,j}}{(\Delta y)^2} = -\frac{\rho_{i,j}}{\varepsilon_0}, \quad (27)$$

$\rho = e(n_i - n_e)$ yük yoğunluğudur. Görüldüğü gibi potansiyel değerleri bir boyutlu bir çizgi üzerinde olmadığı için klasik bir boyutlu TDMA tekniği uygulanamamakta ve modifiye edilmesi gerekmektedir. Bu sebeple ayrıntıları referansta anlatılan iki boyutta TDMA sistemi geliştirilmiştir (JARDIN, 2010). Bu teknikte TDMA sisteminin katsayıları ve hesaplanacak değerleri denklem (15)'de olduğu gibi skalar sayılar değil boyutlarının eksene dik doğrultudaki grid sayısının (N_y) tarafından belirlenen matrislerdir. Diskritize edilmiş Poisson denklemi tekrar düzenlenirse şu sonuca ulaşılabilir,

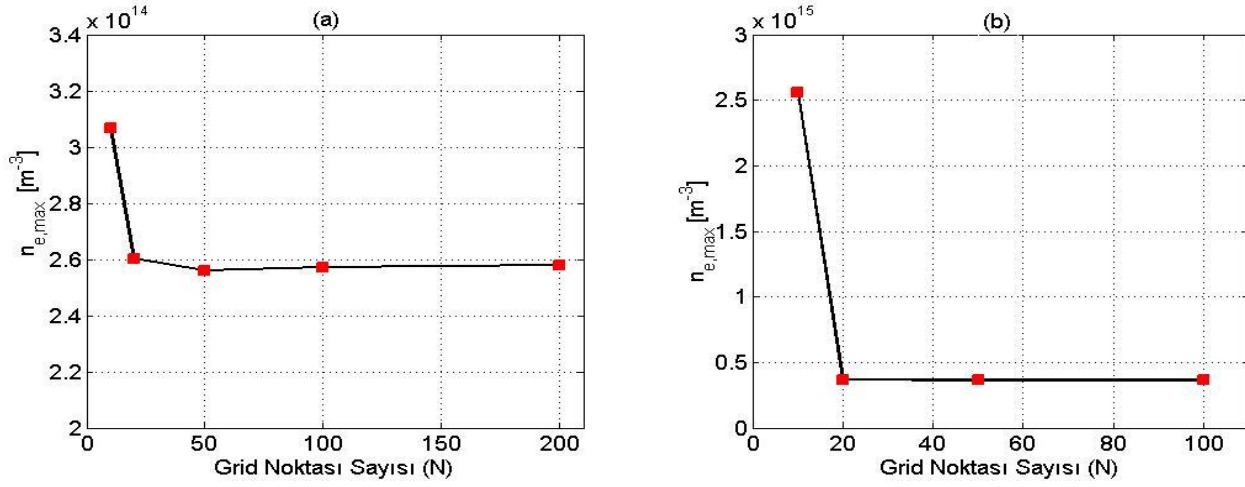
$$\mathbf{B}_j^k \boldsymbol{\varphi}_j^{k+1} = \mathbf{A}_j^k \boldsymbol{\varphi}_{j-1}^{k+1} + \mathbf{C}_j^k \boldsymbol{\varphi}_{j+1}^{k+1} + \mathbf{S}_j^k. \quad (28)$$

Burada \mathbf{A} , \mathbf{B} ve \mathbf{C} $N_y \times N_y$ boyutlarında matrisler ve $\boldsymbol{\varphi}$ ve \mathbf{S} ise $N_y \times 1$ şeklinde kolon matrislerdir. Klasik TDMA sistemindeki skalar sayıları bölme işlemi burada $N_y \times N_y$ boyutlarındaki matrislerin ters matrisleriyle çarpma işlemi haline gelmektedir. Değişken katsayılı iki boyutlu TDMA sistemlerde bunu nümerik hesap sırasında her zaman adımında yapmak hesaba çok fazla yük getirmektedir. Fakat Poisson eşitliği için püf nokta bu katsayı matrislerinin sabit olmasıdır ve ters matrislerinin hesap başlamadan önce bir kere bulunup kaydedilmesi yeterlidir. Kaydedilen bu ters matris hesap sırasında her zaman adımı için sabit olarak kullanılabilir. Bu tekniğin süreklilik denklemleri için kullanılamaması bu katsayı matrislerinin değişken olmasından kaynaklanmaktadır.

1.2.3 Grid Noktası Aralığının (uzaklıklarının) Çözümlerin Yakınsamasına Etkisi

Hesaplarımızda kolaylık olması açısından düzgün aralıklı kafesleme (grid noktaları) kullanılmıştır. Kullanılan grid noktaları aralığının değerlerinin çözümlere etkisi değişik grid noktası sayılarıyla bütün parçacık çeşitleri (elektron ve iyonlar) akışkan olarak ele alınıp ön hesaplar yapılarak değerlendirilmiştir. Aşağıda Şekil 1'de sonuçlar değişik grid noktası sayılarında bir ve iki boyutlu hesaplar için elektron parçacık yoğunluğunun maksimum değerinin değişimi sergilenmiştir. Grafiklerinde gösterdiği gibi bir

boyutlu hesaplar için grid noktası sayısı $N \geq 100$ yeterince uygundur. İki boyutta ise boyu ve eni birbirine eşit olan dikdörtgen geometri içerisinde her iki doğrultuda eşit sayıda grid noktası sayısı kullanarak yapılan hesaplar $N_x \times N_y \geq 50 \times 50$ grid sayısının uygun olduğunu göstermektedir.



Şekil 1: (a) Bir (1D) ve (b) iki (2D) boyutta grid noktası sayısına bağlı olarak nümerik çözümlerin (elektron parçacık yoğunluğunun maksimum değeri) yakınsaması. İki boyutta yatay eksenindeki sayılar $N \times N$ anlamında kullanılmıştır.

1.2.4 Zaman Adımlarının Hesaplanması ve Sınırları

Yukarıdaki süreklilik denklemleri zamana bağımlılığı açısından örtülü şema (implicit scheme) kullanarak diskritize edilmesine rağmen Poisson denklemi geçerli olan zamandaki parçacık yoğunlukları kullanılarak çözüldüğü için tam olarak örtülü şema sayılamaz. Örtülü şema tekniğinin lineer durumlarda zaman adımı değerine herhangi bir sınır koymadığı çeşitli kaynaklarda ifade edilmesine rağmen lineer olmayan (nonlinear) durumlarda zaman adımı değerleri çeşitli etkiler tarafından sınırlandırılabilir (PATANKAR, 1980, JARDIN, 2010). Bu etkiler arasında çözümün doğruluğu, katsayıların veya kaynak terimlerinin örtülü (implicit) olamaması ve özellikle denklem sisteminde içsel olarak var olan veya nümerik olarak ortaya çıkabilecek kararsız titreşimlerin sınırlayıcı zaman ölçekleri (time scales) ($\tau \cong 1 \text{ ns}$) sayılabilir. Kullanılan zaman adımı değerinin bu ölçeklerin en küçük değerinden bir kaç kat küçük olup bu çözümleyebilmesi gerekir. Nümerik plazma simülasyonları için bu sınırlar en düşük zaman ölçeklerine sahip olan elektron plazma dalga periyodu (τ_{pe}), dielektrik boşalma (DB) zaman sabiti (τ_{DB}) veya örtülü olmayan (explicit) denklemler için CFL şartı (τ_{CFL}) gibi zaman ölçekleri tarafından belirlenir (LYMBEROPOULOS, 1995),

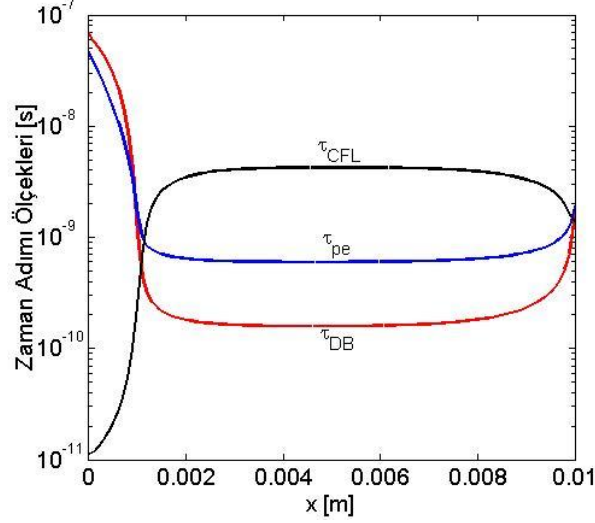
$$\tau_{DB} = \frac{\epsilon_0}{e\mu_e n_e + e\mu_i n_i}, \quad (29)$$

$$\tau_{pe} = 2\pi \sqrt{\frac{m_e \epsilon_0}{n_e e^2}}, \quad (30)$$

$$\tau_{CFL} = \frac{\Delta x}{v_{max}}. \quad (31)$$

Aşağıdaki grafikte zaman adımı değeri için yukarıda sayılan ölçeklerin plazma hacmi içerisindeki

dağılımları bir boyutta $N = 100$ grid noktası sayısı ve $n_{e,max} = 3.44 \times 10^{16} m^{-3}$ değerleri için verilmiştir. Bu değerler parçacık yoğunluk değerleri arttıkça hızla $\tau \sim 10^{-11} s$ değerlerine kadar düşebilmektedir. DB zaman sabiti özellikle yüksek parçacık yoğunluklu plazmalarda elektron plazma periyodundan daha küçüktür ve genel olarak zaman adımı değeri için maksimum değer olarak kullanılabilir.



Şekil 2: Zaman ölçeklerinin elektron yoğunluğunun $n_e \cong 10^{16} m^{-3}$ civarında olduğu bir hesap için uzamsal dağılımları.

1.3 Modelin Monte-Carlo Çarpışma (MCC) Kısmı

Monte-Carlo yöntemi hızlı (fast) elektronların ayrı ayrı ele alınarak içinde buldukları hacim içerisinde hızları \mathbf{v}_i ve konumları \mathbf{r}_i olmak üzere, genel dinamik denklemlerine göre hareket ettirilerek,

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \quad (32)$$

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{a}_{\text{eff}}, \quad (33)$$

her zaman adımı için hızları ve konumları hesaplanıp,

$$\mathbf{r}_i^{m+1} = \mathbf{r}_i^m + \mathbf{v}_i^m \Delta\tau + \frac{1}{2} \mathbf{a}_{\text{eff},i}^m \Delta\tau^2, \quad (34)$$

$$\mathbf{v}_i^{m+1} = \mathbf{v}_i^m + \mathbf{a}_{\text{eff},i}^m \Delta\tau \quad (35)$$

ifadeleriyle takip edilerek ve nötr gaz parçacıklarıyla çarpışmaları stokastik olarak hesaba katarak modellenmesine dayanmaktadır. Burada \mathbf{r}_i , \mathbf{v}_i , ve \mathbf{E}_i i 'inci elektronun konumu, hızı ve etkilendiği elektrik alan değeri, $\Delta\tau$ zaman adımı değeri ve m ise zaman adımını sembolize etmektedir. \mathbf{a}_{eff} ifadesiyle sembolize edilen etkin ivme doğrudan kuvvetin kütleyle bölümü ile değil, kuvvetin uzamsal değişimide dikkate alınarak tekrar yazılması gerekir. Çünkü elektronun hissettiği kuvvetin yolu üzerinde çok hızlı değişmesi sonuçları ciddi bir şekilde etkileyebilecek düzeyde enerji korunumu sorunlarına

sebepler olabilmektedir. Bu etkin ivme bir boyutlu harekette elektrik alanın lineer olarak değiştiği varsayılarak şu şekilde ifade edilebilir (SURENDRA, 1990),

$$a_{\text{eff}} = -\frac{e}{m_e} \left(E + \frac{1}{2} v \Delta \tau \frac{dE}{dx} \right). \quad (36)$$

Burada e elektron yükü, m_e elektron kütlesi, E elektrik alan şiddeti ve v o andaki hızdır. Hareket ivmesi bu şekilde belirlenmeyen elektronlar potansiyel farkı 250 V ve kalınlığı $d = 1 \sim 2 \text{ mm}$ olan bir katot bölgesinde hiç çarpışma yapmadıkları durumda hatalı bir şekilde fazladan $\Delta \epsilon \sim 15 - 20 \text{ eV}$ 'luk bir enerji kazanabilmektedirler. Bu durumun üstesinden gelebilmek için bazı kaynaklarda parçacık türlerinin hareketi atlamalı (leap-frog) şema kullanılarak gerçekleştirilebilmektedir (BIRDSALL, 2005). Ek olarak burada önemli olan ikinci parametre zaman adımı büyüklüğünün değeridir. Bununla ilgili sınırlamalar yine elektronlar için genel olarak (DONKO, 2011),

- 1) zaman adımı büyüklüğünün plazma zaman ölçeklerini çözümleyebilmesi gerekir, $\Delta \tau < \tau_{pe}, \tau_{DB}$,
- 2) elektronların ikici bir çarpışma yapma olasılıkları yeterince küçük olmalıdır, $P_c \ll 1$,
- 3) elde edilen sonuçlarda gürültünün az olması için elektronların bir zaman adımında bir grid noktası aralık değerinden daha fazla yol almaması gerekir (Courant şartı), $\Delta \tau < \Delta x / v_{\text{max}}$.

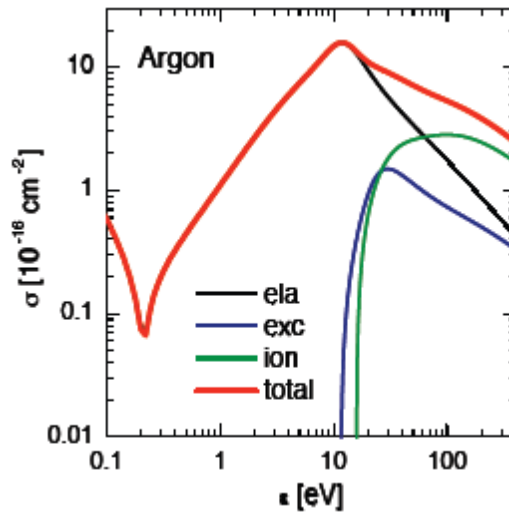
N gaz atomlarının yoğunluğu, $\sigma_{\text{top}}(v)$ toplam çarpışma kesit alanı ve v bağıl hızı olmak üzere, $\Delta \tau$ zaman aralığında elektronların çarpışma olasılıkları aşağıdaki eşitlik ile ifade edilmektedir,

$$P_c = 1 - e^{-N \sigma_{\text{top}}(v) v \Delta \tau}. \quad (37)$$

Elektron ve yavaş nötr atom çarpışmaları dikkate alındığında bu bağıl hız yaklaşık olarak elektron hızına denk düşmektedir. Belirli bir elektron topluluğu için bu olasılık gaz atomlarının hız dağılımı üzerinden ortalama alınarak hesaplanır ve şu şekilde ifade edilir,

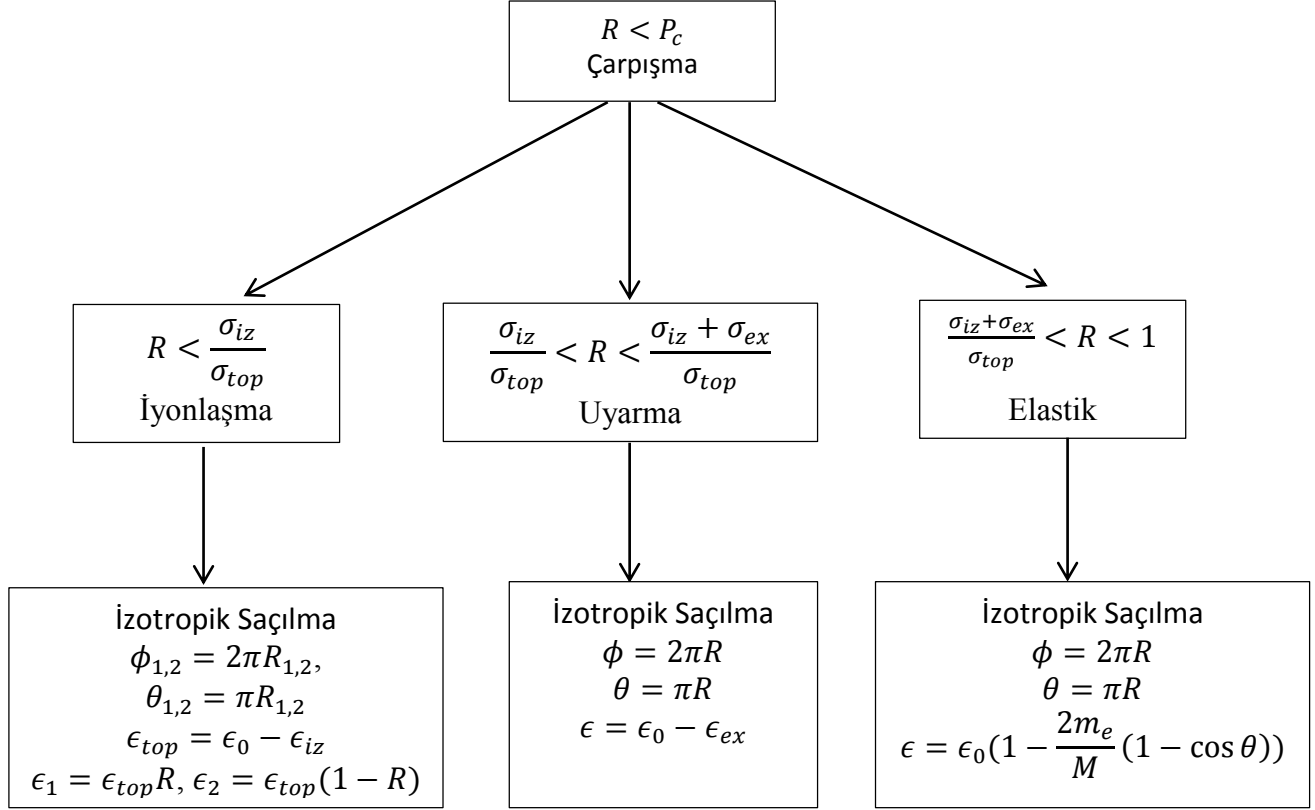
$$P_c = 1 - e^{-N \langle \sigma_{\text{top}}(v) v \rangle \Delta \tau}, \quad (38)$$

$$\sigma_{\text{top}} = \sigma_{\text{elastik}} + \sigma_{\text{iyonizasyon}} + \sigma_{\text{uyarma}}. \quad (39)$$



Şekil 3: Argon gazı için elastik, iyonlaşma, uyarma, ve toplam kesit alanları (Electron Scattering Database, www.lxcat.laplace.univ-tlse.fr).

(Argon gazı için elastik, iyonlaşma ve uyarma çarpışmaları için çarpışma kesit alanları aşağıda Şekil 3’de verilmiştir.) Bu olasılık bize çarpışma yapacak elektron sayısını verir. Herhangi bir elektron için çarpışma yapma kriteri ve hangi çarpışmayı yapıp nasıl bir açıyla saçıldığı $R = 0 \sim 1$ aralığında düzgün dağılımlı rastgele sayılarla belirlenir. Bu süreç aşağıdaki şemada (Şekil 4) özetle gösterilmiştir.



Şekil 4: Çarpışma yapan elektronların izotropik saçılma yaptıkları durumda çarpışma sonrası durumlarını gösteren özet şema.

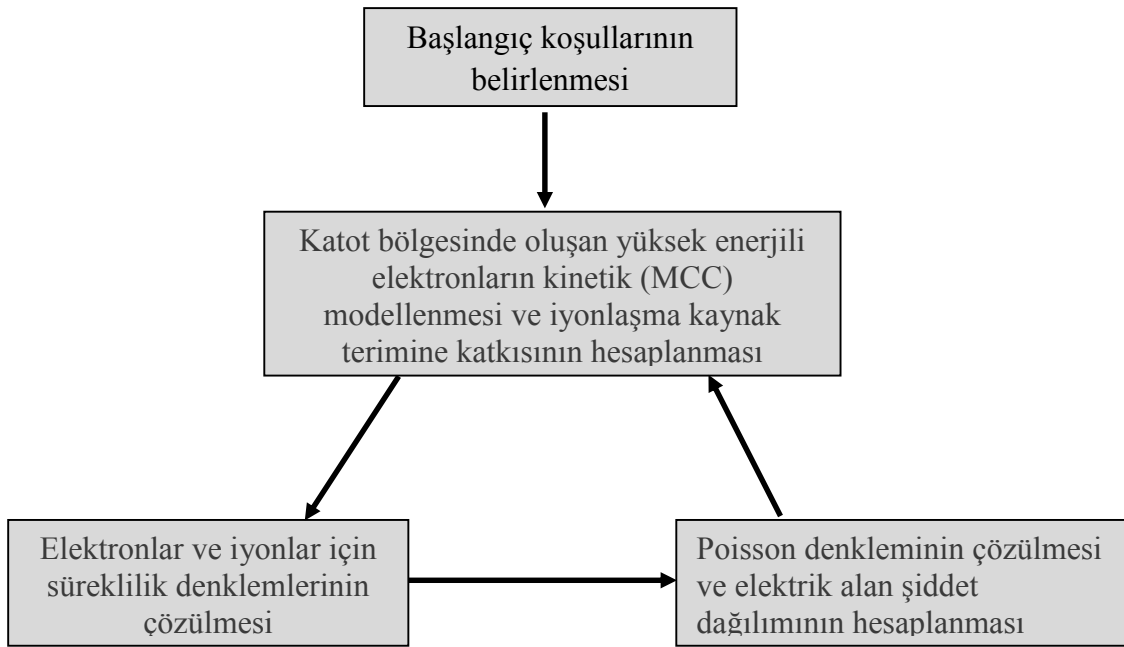
Tanımlanmış elektron popülasyonu içinden rastgele seçilen elektronlar, yaptıkları çarpışmaların çeşidine göre belirli dağılımlarla saçılırlar ve bir sonraki durumları (yönleri, enerjileri ve hızları) belirlenir. Kalanlar ise yollarına hareket denklemlerine göre devam ederler. Hızlı elektronların hepsi yavaş elektronlara dönüştükten sonra veya hacmi terkettikten sonra bu kayıtlar grid noktalarına lineer interpolasyon yapılarak dağıtılır. Oluşan dağılım katottan çıkan gerçek elektron sayısı kullanılarak ağırlıklandırıldığında

$$S_{i,e} = \frac{J}{(1+1/\gamma)\Delta x} \frac{N_{i,e}}{N_0}. \quad (17)$$

ifadesi iyonlar ve yavaş elektronlar için kaynak teriminin dağılımını verir. Burada $S_{i,e}$ iyonlar ve yavaş elektronlar için kaynak terimleri, J elektrik akım yoğunluğu, γ ikincil elektron katsayısı, Δx grid noktaları arasındaki uzaklık, $N_{i,e}$ iyonlaşma ve yavaş(slow) elektrona dönüşme olaylarının interpolasyon sonucu oluşan dağılımları, N_0 katottan çıkan elektron sayısıdır (SURENDRA, 1990, DERZSI, 2009, DONKO, 2011).

1.4 Simülasyon Akış Şeması

Hibrit model akışkan ve MCC simülasyonların ardı ardına çalıştırılması ve elektrik alan yoluyla etkileşmesi üzerine kuruludur. Bizim üzerinde yoğunlaştığımız yöntemde, yüksek enerjili elektronların kinetik olarak modellenip, geriye kalan düşük enerjili elektronların ve iyonların hareketleri için yine süreklilik denklemlerini kullanmaktır. Kinetik olarak modellenen yüksek enerjili elektronların deşarj hacmi içerisindeki elektron yoğunluğuna katkısı yok denebilecek kadar azdır ve bu elektronlar genellikle yoğun voltaj düşüşünün görüldüğü dolayısıyla elektrik alan şiddetinin yüksek olduğu katot bölgesinden gelmektedir. Bu elektronların belirleyici katkısı düşük enerjili elektronların ve iyonların süreklilik denklemlerinde kaynak terimlerinin içindeki nötr atomların elektron darbeleriyle iyonlaştırılması için kullanılan katsayılar üzerindedir. Hesaplama süreci aşağıdaki şemada gösterildiği şekliyle işlemektedir. Simülasyonlar için Matlab paket programı kullanılarak geliştirilen kodların çalıştırılmasıyla elde edilmiştir.



Şekil 5: Simülasyon akış şeması.

1.5 Plazma Parametreleri ve Geometri

Hesaplamalar argon plazması için aşağıdaki parametreler kullanılarak yapılmıştır. Karşılaştırma yapabilmek amacıyla şu kaynaklardaki değerler seçilmiştir (DONKO, 2006, DERZSI, 2009, DONKO, 2011).

Bir boyutlu (1D) hesaplar için;

	<i>Basınç</i> p	<i>Elektrotlar arası mesafe, L</i>	<i>Voltaj,</i> V_a	<i>İkincil elektron katsayısı, γ</i>
1-	1 Torr	1 cm	250 V	0.06
2-	0.3 Torr	3 cm	441 V	0.033

İki boyutlu (2D) hesaplar için;

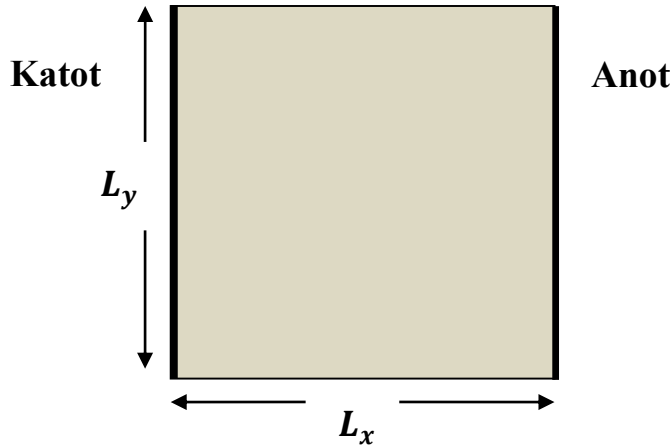
3-	1 Torr	$L_x = 1$ cm $L_y = 1$ cm	250 V	0.06
----	--------	------------------------------	-------	------

Elektron sıcaklığı T_e , iyon sıcaklığı T_i , gaz sıcaklığı T_g , elektron ve iyon mobilitesi μ_e ile μ_i , ve difüzyon katsayıları D_e ile D_i için aşağıdaki değerler ve bağlantılar kullanılmıştır (SURENDRA, 1990, DONKO, 2006):

$$T_g = 0.0258 \text{ eV} \quad \mu_e = 3 \times 10^1 \text{ m}^2\text{s}^{-1}\text{V} \quad D_e = \mu_e T_e$$

$$T_e = 1 \text{ eV} \quad \mu_i = \mu_{i0}/(1 + K_0(E/N))^{0.5} \quad D_i = \mu_i T_i$$

$$T_i = T_g \quad (K_0 = 7.36 \times 10^{18} \text{ 1/Vm}^2, \mu_{i0} = 0.142 \text{ m}^2\text{s}^{-1}\text{V})$$



Hesapların yapıldığı geometri bir boyutta belirli bir uzunluğu olan ve uçları katot ve anot elektrotlarına karşılık gelen düz bir çizgi, iki boyutta ise ek olarak üzerlerinde yük birikimi oluşan yalıtkan yan duvarların olduğu kartezyen dikdörtgen geometri olarak tasarlanmıştır. İki durumdada simülasyon hacimleri düzgün aralıklı grid kullanılarak diskritize edilmiştir.

1.6 Sınır Şartları

Hesaplamalarda potansiyel için Dirichlet sınır şartları ve süreklilik eşitlikleri için akı sınır şartları kullanılmıştır (HAGELAAR, 2000, RAFATOV, 2012a). Bir boyutta kullanılan sınır şartları aşağıda (Tablo 1, 2) verilmiştir. Burada \hat{n} yüzeyden dışarı doğru birim vektör, $v_{e,i} = \sqrt{8eT_{e,i}/\pi m_{e,i}}$ ve \mathbf{E} elektrik alan vektörüdür. $\alpha_{e,i}$ elektron ve iyonlar için yüzeye doğrultulmuş akıları ifade etmek için

kullanılan katsayılar olmak üzere şu şekilde tanımlanır,

$$\alpha_e = \begin{cases} 0 & \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E} > 0 \\ 1 & \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E} < 0 \end{cases} \quad \text{ve} \quad \alpha_i = \begin{cases} 1 & \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E} > 0 \\ 0 & \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E} < 0 \end{cases}$$

1D	Katot	Anot
<i>Elektron</i> (n_e)	$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}_e = \frac{1}{4} n_e v_e - \gamma \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}_i $	$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}_e = \frac{1}{4} n_e v_e - \alpha_e \mu_e n_e (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})$
<i>İyon</i> (n_i)	$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}_i = \frac{1}{4} n_i v_i + \alpha_i \mu_i n_i (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})$	$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}_i = \frac{1}{4} n_i v_i + \alpha_i \mu_i n_i (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})$
<i>Potansiyel</i> (φ)	0	V_a

İki boyutlu hesaplarda bu sınır şartlarına ek olarak yalıtkan yan duvarlar üzerinde her bir değişken için sınır şartları eklenmiştir. Bu sınırdaki parçacık türleri için yine akı sınır şartları kullanılmış, yüzeyin mükemmel emici olduğu varsayılarak yalıtkan yüzey üzerine düşen yüklü parçacıkların bu yüzey üzerinde depolandığı veya zıt yüklü parçacıklar tarafından nötralize edildiği kabul edilmiştir. Oluşan yük birikintisi yüzeye dik elektrik alanın tayininde kullanılmıştır. Bu süreç şu şekilde ifade edilebilir,

$$\frac{d\sigma}{dt} = e(\mathbf{\Gamma}_i - \mathbf{\Gamma}_e) \cdot \hat{\mathbf{n}}.$$

Burada σ yüzey yük yoğunluğu, e elektriksel birim yük, $\mathbf{\Gamma}_{i,e}$ iyon ve elektron akıları, $\hat{\mathbf{n}}$ yüzey normali ve $\mathbf{E} = (E_x, E_y)$ elektrik alan vektörüdür.

İki boyutlu hesaplar için;

2D	Katot ($\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}$)	Anot ($\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}$)	Yan Duvarlar ($\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}$)
<i>Elektron</i> (n_e)	$\frac{1}{4} n_e v_e - \gamma \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Gamma}_i $	$\frac{1}{4} n_e v_e - \alpha_e \mu_e n_e (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})$	$\frac{1}{4} n_e v_e - \alpha_e \mu_e n_e (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})$
<i>İyon</i> (n_i)	$\frac{1}{4} n_i v_i + \alpha_i \mu_i n_i (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})$	$\frac{1}{4} n_i v_i + \alpha_i \mu_i n_i (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})$	$\frac{1}{4} n_i v_i + \alpha_i \mu_i n_i (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})$
<i>Potansiyel</i> (φ)	0	V_a	$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E} = -\frac{\sigma}{\epsilon_0}$

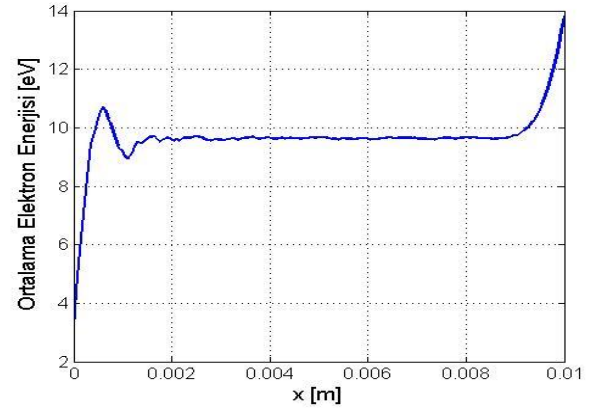
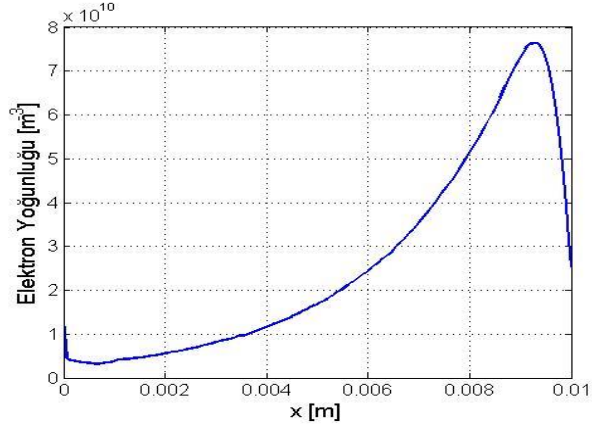
2 NÜMERİK ANALİZ VE SONUÇLAR

2.1 Elektron Pulsu Deneyleri (Swarm Experiment)

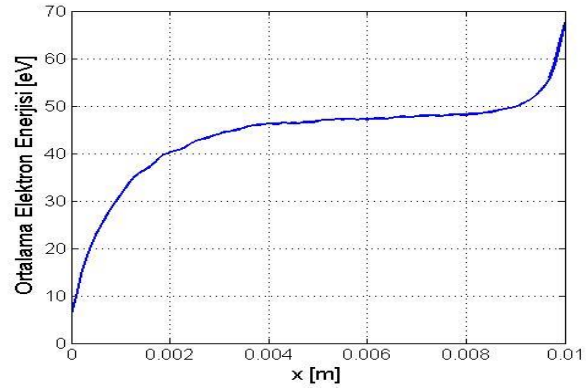
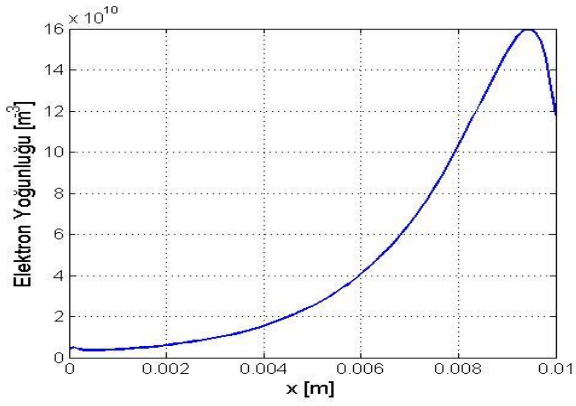
Aşağıda elektrik alan altında elektron pulsu deneyleri sergilenmiştir. Bu nümerik deneyler genel olarak elektrik alan altında iyonlaşma yoluyla çoğalarak ilerleyen elektronların elektrik alan şiddetini etkilemediği Townsend deşarjları için nümerik olarak yapılabilmektedir (DONKO, 2011). Bu deneylerde genel olarak elektrik alan değerinin gaz parçacık yoğunluğuna bölünmesiyle bulunan indirgenmiş elektrik alan değeri kullanılır. Bu değer gaz yoğunluğu ile çarpılarak elektrik alan değerinin gerçek değeri bulunabilir. Dönüşümü şu şekilde ifade edilir,

$$1 \text{ Td} = 10^{21} \text{ Vm}^2$$

Nümerik olarak yapılan bu deneyler yoluyla elektron çarpışma kesit alanları bilinen herhangi tür bir gaz için mobilite, difüzyon gibi yerel elektron taşıma katsayıları yüksek doğrulukla hesaplanabilir. Elektronların içinde hareket ettikleri elektrik alan değeri için dengeye gelmiş ortalama enerjileri veya çarpışma (elastik, iyonlaşma, uyarma) frekansları bulunabilmektedir. İlk deney $E = 500 \text{ Td}$ için yapılmış olup elektronların $x = 0.004 \text{ m}$ konumunda dengeye geldikleri görülebilmektedir. Elektronların hacmi terkettiği $x = 0.01 \text{ m}$ konumuna yaklaşık olarak görülen değişim elektrotların etkisi olarak tanımlanmaktadır. Kullanılan parametreler grafiklerin altlarında verilmiştir.



Şekil 6: $E = 500 \text{ Td}$, $p = 1 \text{ Torr}$, $L = 1 \text{ cm}$, $N_0 = 10000$, $\Delta t = 10^{-12} \text{ s}$ parametreleri kullanılarak yapılmış elektron puls deneyi için yola bağlı elektron yoğunluk ve ortalama enerji dağılımları.

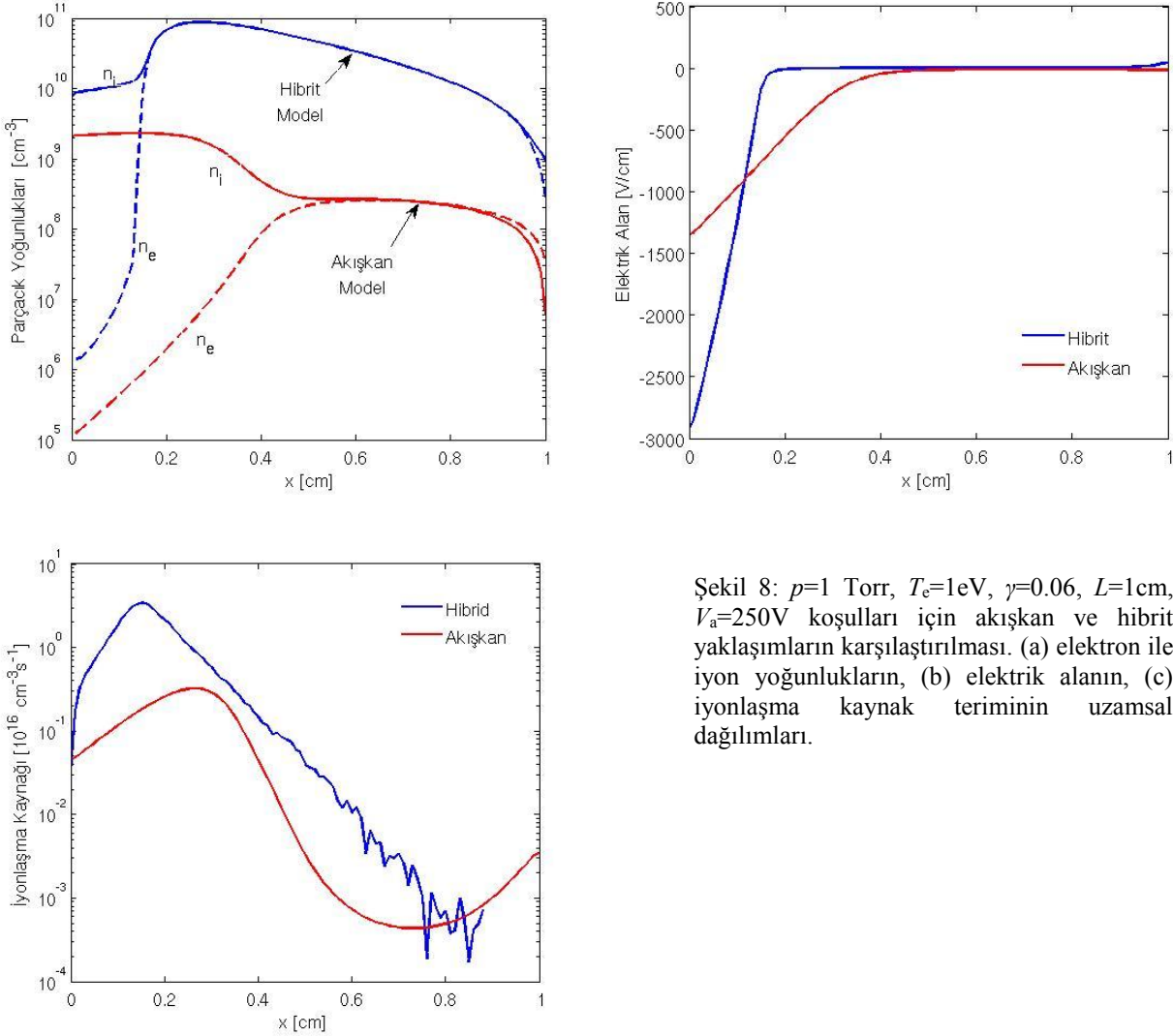


Şekil 7: $E = 5000 \text{ Td}$, $p = 1 \text{ Torr}$, $L = 1 \text{ cm}$, $N_0 = 10000$, $\Delta t = 10^{-12} \text{ s}$ parametreleri kullanılarak yapılmış elektron puls deneyi için yola bağlı elektron yoğunluk ve ortalama enerji dağılımları.

2.2 Bir Boyutlu (1D) Akışkan ve Hibrit Modellerin Sonuçları

$p=1$ Torr

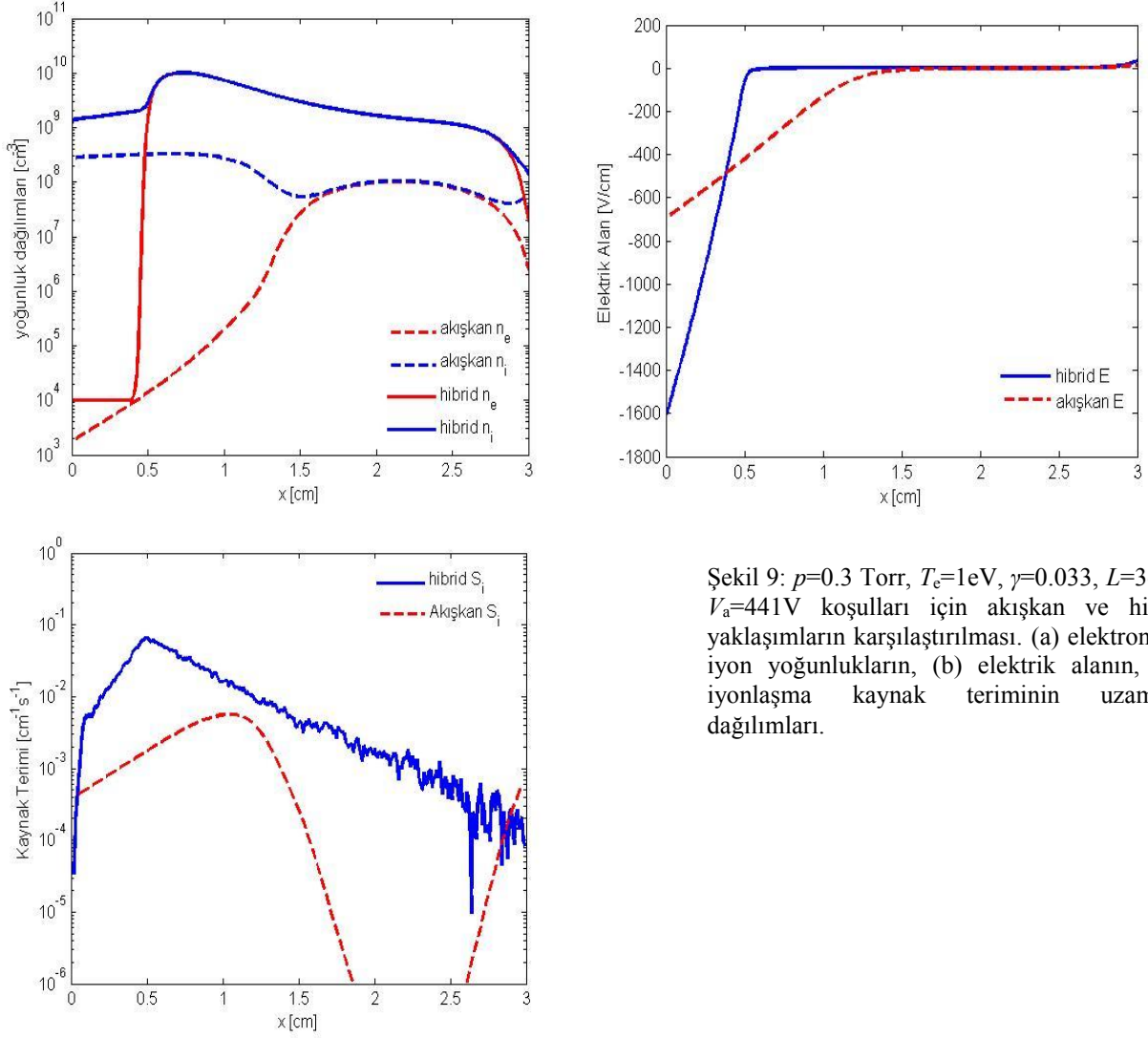
Aşağıda yapılan akışkan ve hibrit hesapların görsel sonuçları sergilenmiştir. Şekil 5’de görüldüğü gibi basınç $p=1$ Torr iken akışkan ve hibrit yaklaşımların sonuçları oldukça farklılık göstermektedir. Yoğunluk değerleri yaklaşık olarak 100 kat farklıdır ve katot bölgesindeki daralma hibrit yaklaşımda açıkça ortaya çıkmaktadır. Elektrik alan değerleri yine katot bölgesinde birkaç kat farklılık göstermektedir. Sonuçlar arasındaki farklılık kaynak terimleri için yine çok belirgindir. İyonlaşmanın katot bölgesindeki yoğunlaşması hibrit yaklaşımda daha da belirgindir. Yine iyonlaşmanın deşarj hacminin geri kalan bölgesinde gösterdiği eksponensiyel davranış şekli akışkan yaklaşımdan belirgin bir şekilde farklılık göstermektedir. İki yaklaşım arasındaki oluşan sonuç farklılıkları yoğunluk ve iyonlaşma terimleri merteye bazında yaklaşık olarak aynı oranda farklılaşmaktadır.



Şekil 8: $p=1$ Torr, $T_e=1\text{eV}$, $\gamma=0.06$, $L=1\text{cm}$, $V_a=250\text{V}$ koşulları için akışkan ve hibrit yaklaşımların karşılaştırılması. (a) elektron ile iyon yoğunlukların, (b) elektrik alanın, (c) iyonlaşma kaynağının uzamsal dağılımları.

$p=0.3$ Torr

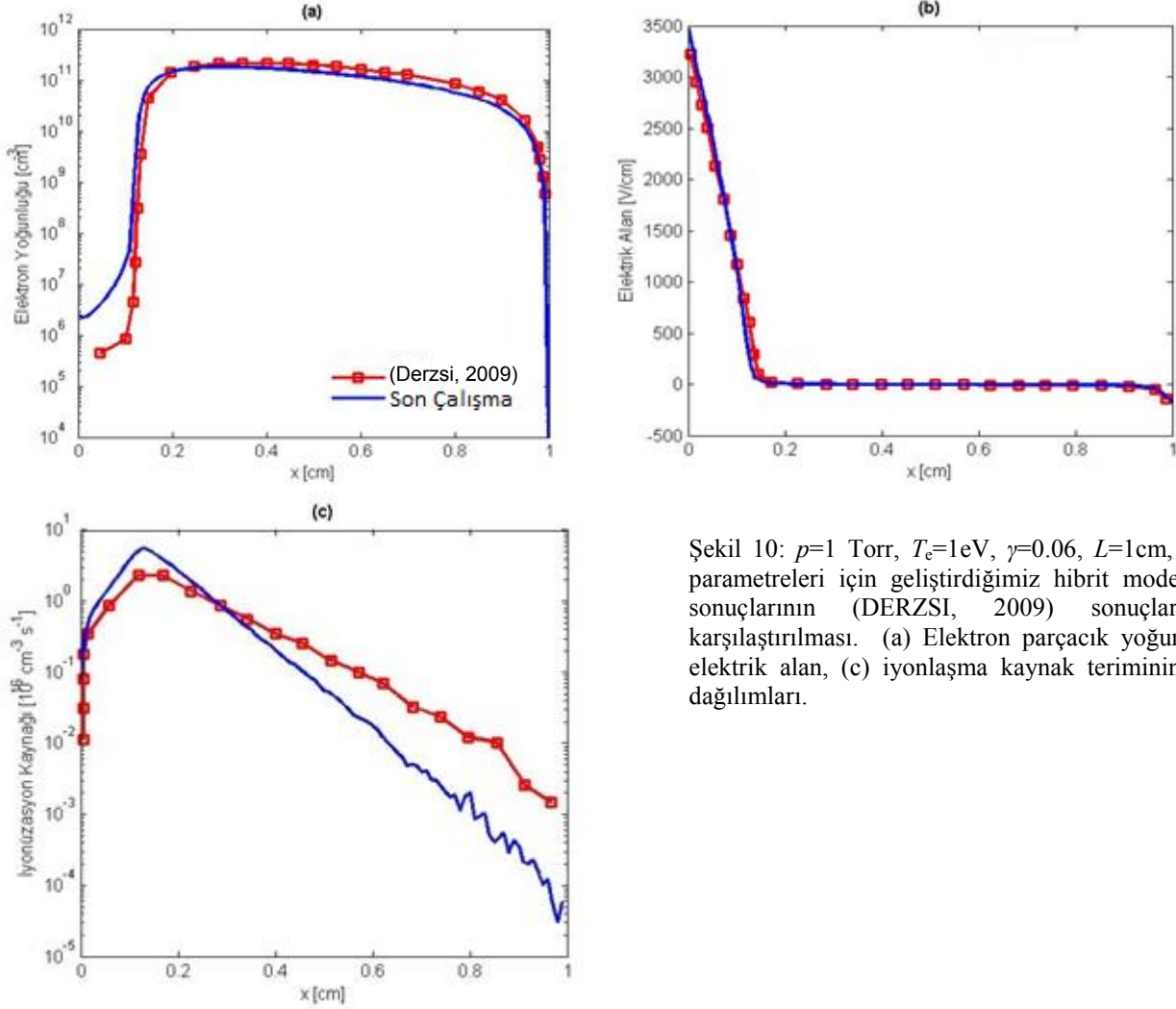
Aşağıda Şekil 6'da $p = 0.3$ Torr için sonuçlar sergilenmiştir. Hesaplarda sınır şartlarının etkisinin görülebilmesi için parçacık türleri için akı sınır şartları kullanılmıştır. Basınç düştüğünde iyonlaşma kaynak değerleri beklendiği gibi düşüş göstermiş ve yoğunluk değerleri de paralel bir şekilde düşüş göstermiştir.



Şekil 9: $p=0.3$ Torr, $T_e=1\text{eV}$, $\gamma=0.033$, $L=3\text{cm}$, $V_a=441\text{V}$ koşulları için akışkan ve hibrit yaklaşımların karşılaştırılması. (a) elektron ile iyon yoğunlukların, (b) elektrik alanın, (c) iyonlaşma kaynak teriminin uzamsal dağılımları.

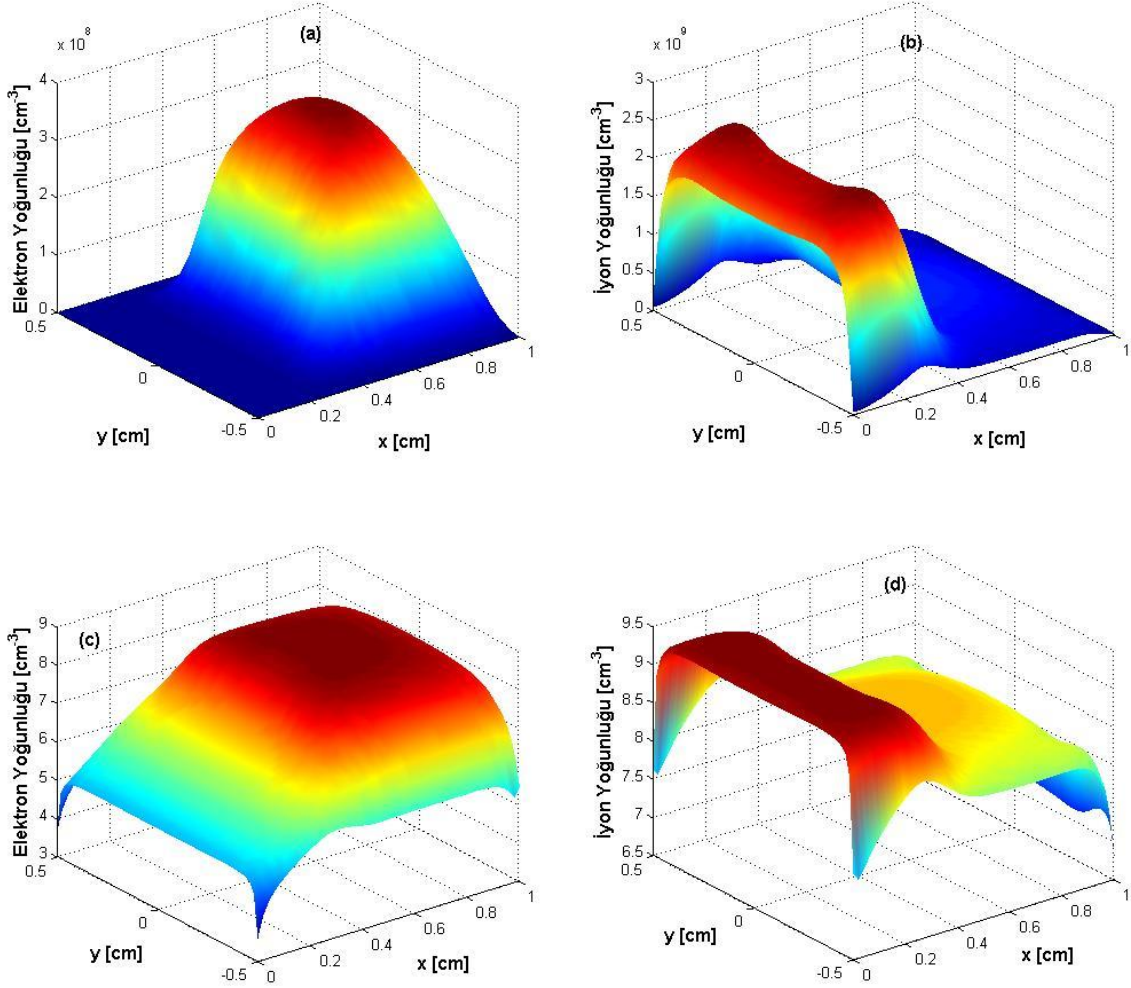
2.3 Bir Boyutlu (1D) Önceki Sonuçlarla Karşılaştırma ($p=1$ Torr)

Aşağıdaki Şekil 7’de, hibrit yaklaşımla aynı plazma parametreleri kullanılarak alınmış diğer sonuçlarla karşılaştırma yapılmıştır (DONKO, 2006, DERZSI, 2009). Sonuçların genel olarak uyumlu olduğu söylenebilir. Yoğunluk, elektrik alan ve iyonlaşmanın merkeze düzeyinde birbiriyle uygunluğu görülmüştür. Burada karşılaştırma yapabilmek için bizim kullandığımız akı sınır şartları Dirichlet sınır şartlarıyla değiştirilmiştir. İyonlaşma terimlerinin görece farklılığı MC simülasyonda kullanılan yavaş elektronlara dönüşme şartları veya kullanılan zaman adımları gibi parametre farklılıklarından kaynaklanmaktadır.



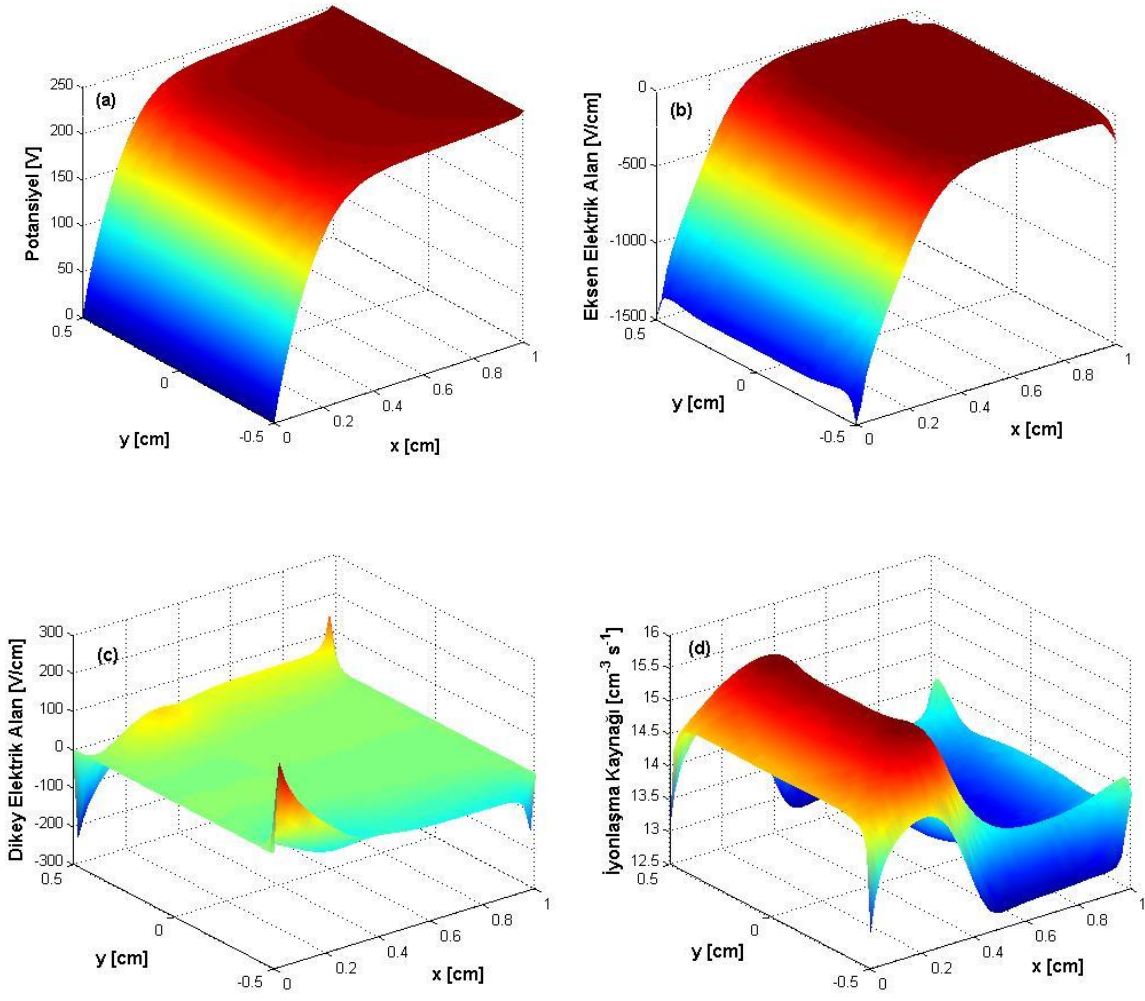
Şekil 10: $p=1$ Torr, $T_e=1\text{eV}$, $\gamma=0.06$, $L=1\text{cm}$, $V_a=250\text{V}$ parametreleri için geliştirdiğimiz hibrit modelin hesap sonuçlarının (DERZSI, 2009) sonuçlarıyla karşılaştırılması. (a) Elektron parçacık yoğunluğu, (b) elektrik alan, (c) iyonlaşma kaynak teriminin uzamsal dağılımları.

2.4 İki Boyutlu (2D) Akışkan Modelin Sonuçları



Şekil 11: 2D akışkan model. Elektron ve iyon yoğunluğu dağılımları, (a) elektron ve (b) iyon normal gösterim, (c) elektronve (d) iyon logaritmik gösterimdir. $p = 1 \text{ Torr}$, $T_e = 1 \text{ eV}$, $\gamma = 0.06$, $L_x = 1 \text{ cm}$, $L_y = 1 \text{ cm}$, $V_a = 250 \text{ V}$.

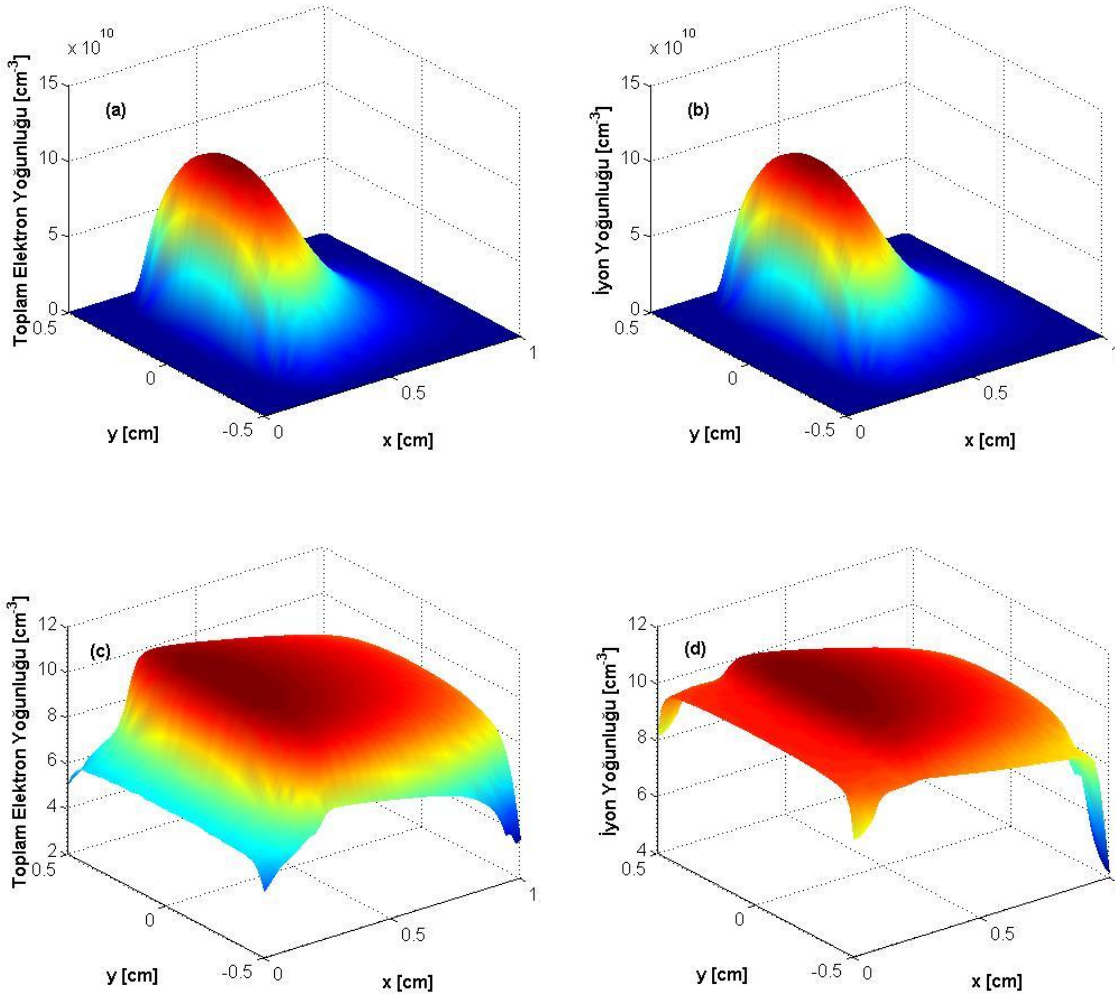
Yukarıda iki boyutlu kartezyen geometride yapılmış hesaplarda elektron ve iyon yoğunluk değerlerinin dağılımı verilmiştir. Yan duvarlar üzerinde koyulmuş sınır şartlarının etkisi açıkça görülmektedir. Anot bölgesinde parçacıklar daha çok merkez eksen üzerinde yoğunlaşıp akımın bu eksen üzerinden akmasını sağlamaktadır.



Şekil 12.: 2D akışkan model. Potansiyel (a), eksen doğrultusundaki elektrik alan (b), çapraz doğrultudaki elektrik alan (c), iyonlaşma kaynağı (d). $p = 1 \text{ Torr}$, $T_e = 1 \text{ eV}$, $\gamma = 0.06$, $L_x = 1 \text{ cm}$, $L_y = 1 \text{ cm}$, $V_a = 250 \text{ V}$.

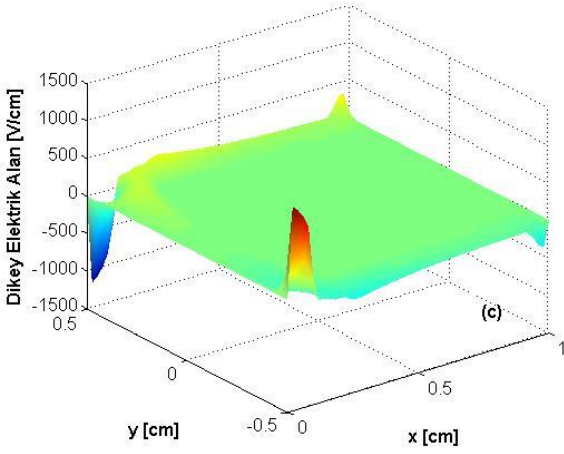
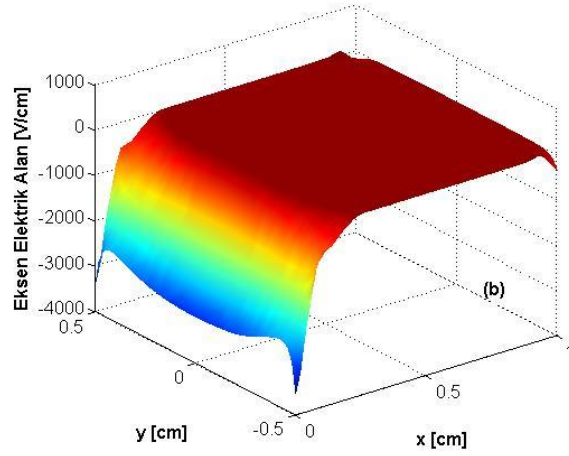
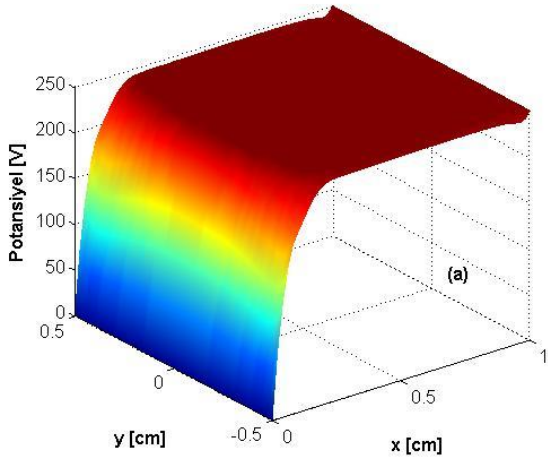
Yukarıda kartezyen geometride akışkan yaklaşımla yapılmış hesaplarda potansiyel, elektrik alan ve iyonlaşma kaynağı değerlerinin dağılımı verilmiştir. Yine yan duvarlar üzerinde koyulmuş sınır şartlarının etkisi açıkça görülmektedir.

2.5 İki Boyutlu (2D) Hibrit Modelin Sonuçları



Şekil 13: 2D hibrit model. (a) Elektron yoğunluğu, (b) iyon yoğunluğu, (c) elektronlar için logaritmik gösterim, (d) iyonlar için logaritmik gösterim. $p = 1 \text{ Torr}$, $T_e = 1 \text{ eV}$, $\gamma = 0.06$, $L_x = 1 \text{ cm}$, $L_y = 1 \text{ cm}$, $V_a = 250 \text{ V}$.

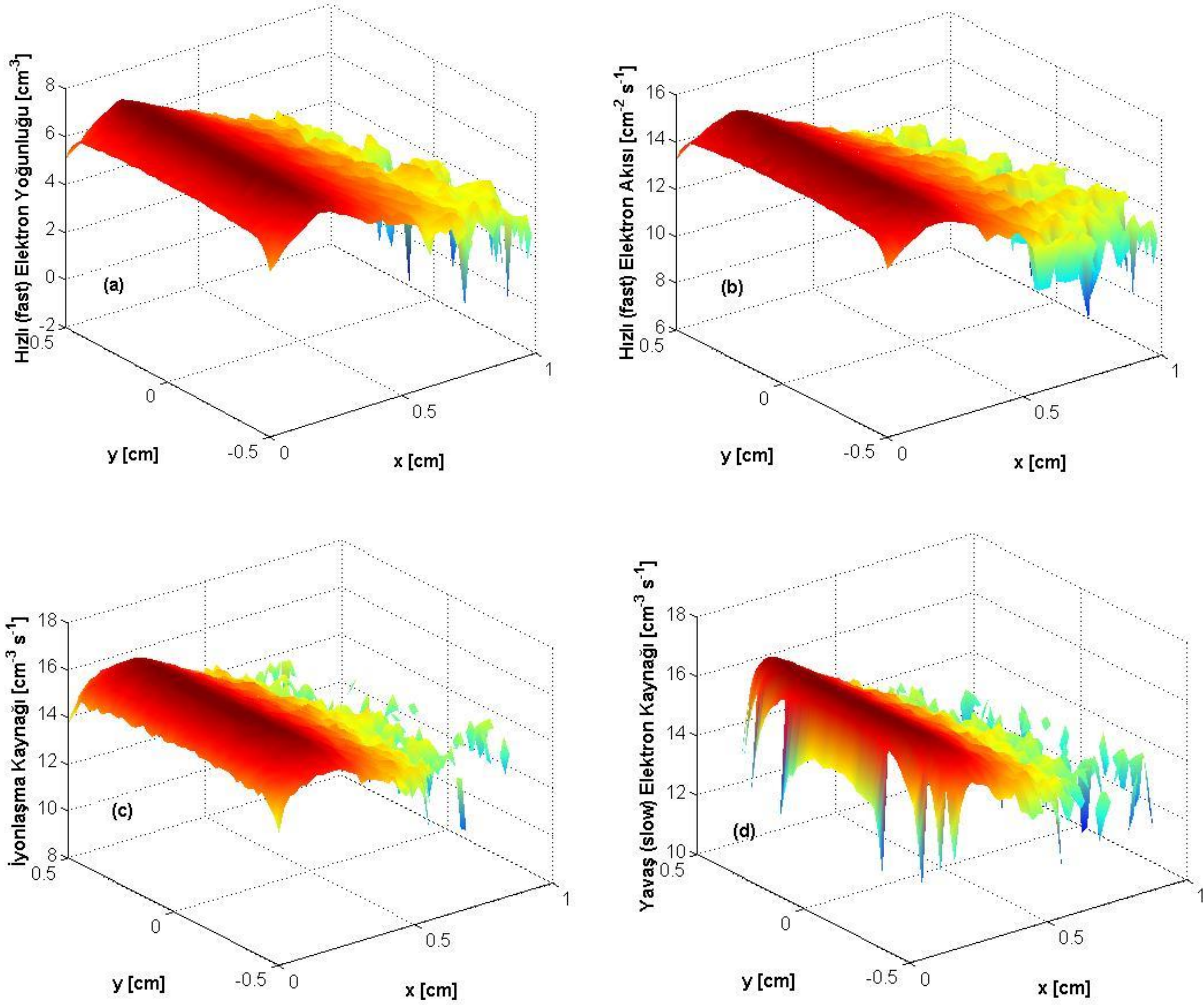
Yukarıda kartezyen geometride hibrit yaklaşımla yapılmış hesaplarda elektron ve iyon yoğunluk değerlerinin dağılımı verilmiştir. Bir boyutlu hesaplarda olduğu gibi yoğunluk değerleri yaklaşık olarak 100 kat artmaktadır. Bu durum genel olarak hibrit hesaplarda iyonlaşma kaynağının yerel olmayan karakteristiğinin bir sonucudur. Katot bölgesine yüksek enerjilere ulaşan elektronlar plazmanın geri kalan bölgelerinde bir süre daha iyonlaşma olaylarına devam etmektedirler.



Şekil 14: 2D hibrit model. (a) Elektrik potansiyel, (b) Elektrik alanın eksen ve (c) çapraz doğrultusundaki dağılımları. $p = 1 \text{ Torr}$, $T_e = 1 \text{ eV}$, $\gamma = 0.06$, $L_x = 1 \text{ cm}$, $L_y = 1 \text{ cm}$, $V_a = 250 \text{ V}$.

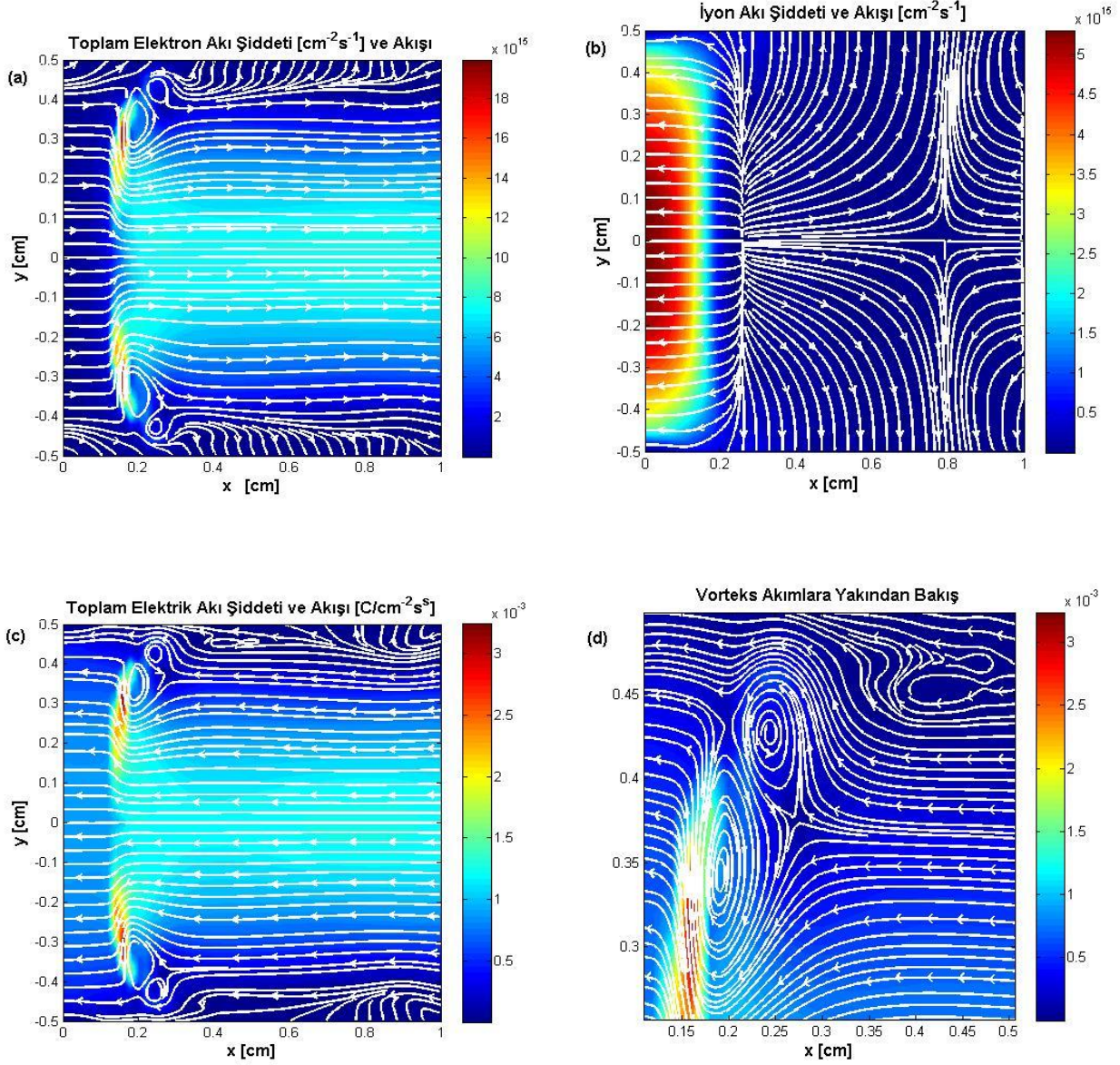
Şekil 14’da potansiyel ve eksen doğrultusundaki elektrik alan değerlerinin dağılımları sergilenmiştir. Bu değerle bir boyutla karşılaştırıldığında birbirine benzer sonuçlar vermekte beraber, radyal doğrultuda ilerlenip yalıtkan yan duvarlara yaklaşıldığında katot bölgesi kalınlığında hafif bir artış gözlenmektedir. Bu durum yan duvarlar üzerindeki sınır şartlarıyla alakalıdır.

2.6 İki Boyutlu (2D) MCC Simulasyon Sonuçları



Şekil 15: 2D hibrit model. Yüksek enerjili elektronların ve iyonlaşma kaynağının plazma hacmi içindeki dağılımları. (a) Yüksek enerjili elektron yoğunluğu, (b) yüksek enerjili elektronların akı değerleri, (c) iyonlaşma kaynağının dağılımı, (d) düşük enerjili yavaş elektronlar için kaynak dağılımı. $p = 1 \text{ Torr}$, $T_e = 1 \text{ eV}$, $\gamma = 0.06$, $L_x = 1 \text{ cm}$, $L_y = 1 \text{ cm}$, $V_a = 250 \text{ V}$ (Logaritmik gösterimdir)

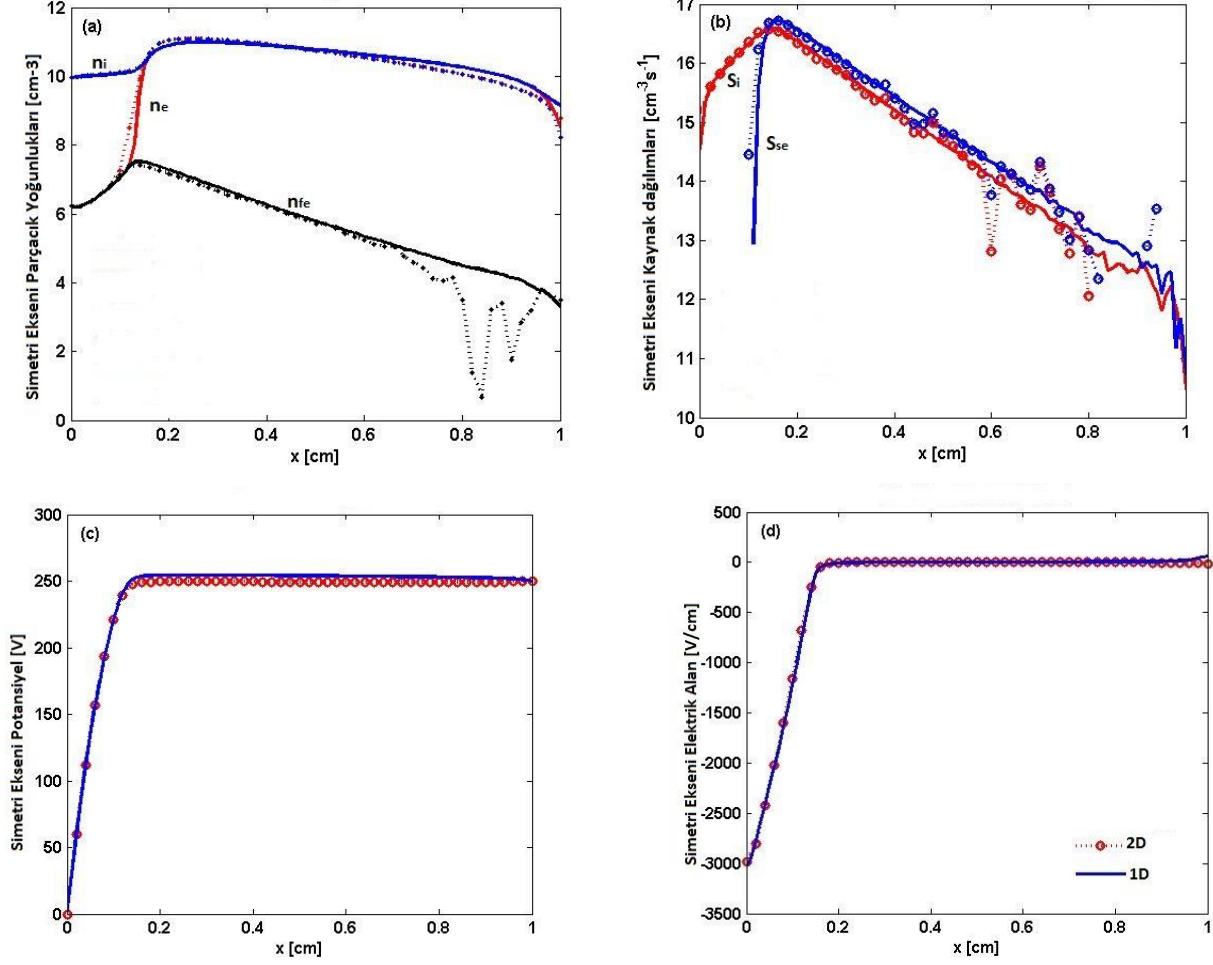
Şekil 16 ve Şekil 17’de MC simülasyon sonuçlarından bir örnek gösterilmiştir. Akışkan model içerisinde kullanılan yüksek enerjili elektron yoğunluğu ve kaynak terimleri bir boyutlu sonuçlarla uyumlu değerler aralığındadır. Dağılımların eksponensiyel değişimleri iki boyutlu geometride açıkça görülmektedir.



Şekil 16: 2D hibrit model. (a) toplam elektron akım değerleri ve akışı, (b) toplam iyon akım değerleri ve akışı, (c) toplam elektrik akım değerleri ve akışı, (d) vorteks akımlara yakından bakış. $p = 1 \text{ Torr}$, $T_e = 1 \text{ eV}$, $\gamma = 0.06$, $L_x =$

Yukarıdaki Şekil 17’de elektron ve iyonların ayrı ayrı ve toplam olmak üzere akıma katkıları ve akış şemaları gösterilmiştir. İyonların akışı elektrik alanın değişimine paralel bir şekilde değişim göstermektedir. Elektronlar için ise yan duvarlara yakın bölgelerde vorteks akımlar olarak tarif edilen akım oluşumları gözlenmiştir. Bu akışların ortaya çıkması beklenen bir durum olmamakla beraber, daha önce ICP türü deşarjlar için belirli şartlar altında oluşabileceği gösterilmiştir (BOGDANOV, 2011).

2.7 1D ile 2D Sonuçların Karşılaştırması



Şekil 17: 1D ile 2D hibrit hesaplar için karşılaştırma (İki boyutlu geometride simetri ekseni üzerindeki değerler kullanılmıştır). (a) Yoğunluk değerleri, (b) iyonlaşma ve yavaş elektron kaynağı, (c) elektrik potansiyel, (d) eksen doğrultusundaki elektrik alan. $p = 1 \text{ Torr}$, $T_e = 1\text{eV}$, $\gamma = 0.06$, $L_x = 1\text{cm}$, $L_y = 1\text{cm}$, $V_a = 250\text{V}$.

Yukarıdaki Şekil 18’te bir ve iki boyutlu hibrid hesaplar için karşılaştırmalar yapılmıştır. İki boyutlu hesaplarda sadece simetri ekseni üzerindeki değerler kullanılmıştır. Değerle birbirlerine oldukça yakındır. Dağılımların bir ve iki boyutta birbirine bu kadar yakın olması ancak parametre aralığının Voltaj-akım eğrisinin abnormal kısmına denk gelmesiyle mümkün olduğu daha önceki çalışmalardan bilinmektedir (RAFATOV, 2012a).

Sonuç olarak,

- Bir ve iki boyutlu hibrit nümerik model düşük ve orta basınçlı argon gazı içerisinde başarılı bir şekilde geliştirilmiştir.
- Sonuçlar önceki sonuçlarla karşılaştırılıp doğrulamaları yapılmıştır.
- Hibrit yaklaşımların elektronların deşarj hacmi içerisindeki yerel olmayan karakteristiklerini başarılı bir şekilde modelleyebildikleri görülmektedir.
- Akışkan modelle yapılan karşılaştırmalar iyonlaşma kaynağının bir kaç daha yüksek değerli ve buna bağlı olarak elektron ve iyonların parçacık yoğunluklarının ciddi bir şekilde daha yüksek değerlere çıkabildikleri görülebilmektedir.
- İki boyutlu hesaplarda yan duvarların deşarj oluşumuna kısmi etkisi oluşan pozitif yük bölgeleri (sheath) şeklinde olarak ortaya çıkmıştır.
- Akışkan modelden farklı olarak vorteks akım formasyonları gözlenmiştir. Doğru akım deşarjlarda bu oluşumların daha önce rastlanılmamıştır.
- Çalışmamızın bunda sonraki aşamalarında geliştirilen modelin teknolojik ve deneysel uygulamalarına ağırlık verilecek.

Kısım III

PARTICLE IN CELL/MONTE CARLO COLLISION (PIC/MCC) MODELİ

Daha yukarıda bahsettiğimiz gibi, gaz deşarj plazmalarını incelemek için temel olarak üç yöntem kullanılmaktadır: akışkan (fluid, continuum), kinetik (parçacık) ve hibrid modeller (DONKÓ, 2006). Birinci yöntemde elektron ve diğer yüklü parçacıklar için momentum ve continuum denklemleri (genellikle drift-diffusion yaklaşımı kullanılarak) Maxwell denklemleriyle beraber sınır şartları da göz önüne alınarak çözülürler. Source (kaynak), difüzyon ve mobility terimleri elektrik alanın yerel değerleri kullanılarak bulunurlar. Bu yaklaşıma "local field approximation" (LFA), yani yerel yaklaşım da denilmektedir (RAFATOV, 2012a). Continuum modelleri diğer yöntemlerle karşılaştırıldığında oldukça hızlı sonuçlar verebilmektedirler ancak her zaman doğru sonuçlar alınamayabilir. Çünkü yerel olmayan bazı plazmalar için parçacıklar yeterince çarpışma yapacak zaman bulamadıklarından dolayı Maxwellian dağılım gösteremeyebilirler. Bu plazmalarda farklı enerji gruplarında parçacıklar oluşabilir ve dolayısıyla yerel termodinamik denge sağlanamaz. Aynı zamanda termodinamik denge olmazsa drift-diffusion yaklaşımı da geçerli olmaz. Bu nedenlerden dolayı böyle plazmalar için kinetik yaklaşım (Boltzmann denkleminin direk çözümü) bir zarurettir (TSENDIN, 2010).

Yukarıda bahsedilen yerel olmayan plazmaları doğru bir şekilde kullanabilmek için Lorentz denkleminin çözüldüğü parçacık analizleri de yapılabilir, çünkü Boltzmann ve Lorentz denklemlerinin oluşturulmasında direkt olarak Newton'un ikinci hareket yasası kullanıldığı için parçacıklar için doğru enerji dağılım fonksiyonları elde edilebilir. Hibrid modeller ise yukarıda anlatılan iki modelin bir kombinasyonudur. Yavaş elektronlar ve iyonlar akışkan yöntemiyle, hızlı elektronlar ise parçacık yöntemi ile modellenirler. Hızlı elektronların modellenmesiyle kaynak terimi bulunup akışkan denklemlerine dahil edilir. Bu yöntem continuum yöntemlerindeki daha hızlı çözüm, ve parçacık yöntemlerinin daha güvenilir olan yerel olmayan kaynak terimlerinin avantajını kullanır. Ancak bu yöntemde yavaş elektronların iyonlaşmaya olan etkisi göz ardı edilmektedir.

Raporun bu kısmında genel olarak çeşitli programlama dillerinde yazdığımız (Matlab, C ve en son olarak da Fortran) paralel PIC/MCC kodunun geliştirme ve uygulamalarıyla ilgili bilgiler verilmektedir. İlk bölümde standart ve paralel PIC/MCC algoritması hakkında bilgiler verilmiş, bölüm 2'de ise kodun helyum ve argon gazları için validasyonu yapılmıştır. Bölüm 3'de ise yaptığımız diğer analizlerden birisinin sonucu detaylı bir biçimde incelenmiş ve elde edilen sonuçlar tartışılmıştır. Bölüm 4'de genel olarak göz ardı edilen PIC/MCC analizlerinde kullanılan parçacık sayılarının (weighting) sonuçlara olan etkileri gözlemlenmiş ve optimum kaç parçacık kullanılması gerektiğinin yanıtı aranmıştır. Bölüm 6'da plasma electron spectroscopy (PLES) ve collisional electron spectroscopy (CES) yöntemiyle ilgili bilgi verilmiş, helyum-argon gaz karışımı için örnek CES analizi yapılmıştır.

1 PIC/MCC Yöntemi

1.1 PIC/MCC'nin Akış Şeması

PIC metodu uzun yıllardan beri kullanılan (ilk kez 1950 John Downson tarafından) oldukça efektif bir yöntemdir. Son zamanlarda da MCC metoduyla beraber kullanılmasıyla son derece güçlü bir hale gelmiştir. En temelden başlarsak bu metodda akışkan (fluid) modelden farklı olarak süper-parçacık (super-particle) adı verilen yüklü parçacıklar kullanılmaktadır. Her bir süper-parçacık belli sayıda yükü temsil etmektedir (W). Örneğin ağırlık oranının $W = 2 \times 10^8$ olduğu bir PIC modelde her bir süper-iyon, 2×10^8 iyon karşılık gelmektedir. Yani bunları birbiriyle hiç etkileşimi olmayan ama beraber hareket eden parçacık grubu/bulutunu olarak düşünebiliriz.

Bu metodun bir diğer noktası da, genelde tek boyutlu bir PIC simülasyonu sırasında ortamda $10^5 - 10^6$ civarı süper-iyon ve süper-elektron kullanılmaktadır. Tüm bu yüklü parçacıkların birbirleri ile etkileşimi her zaman adımında yaklaşık olarak $10^{10} - 10^{12}$ işleme yol açacaktır. Tabii olarak bu kadar hesabın yapılması oldukça zaman alacaktır. Bu yüzden PIC yönteminde nümerik grid sistemi kullanılır: tüm ortamda bulunan yükler kendilerine en yakın grid noktalarına taşınmakta ve grid üzerlerindeki yük yoğunlukları hesaplanmaktadır. Daha sonra ilgili Maxwell denklemleri grid noktalarında çözülerek, manyetik ve elektrik alan konfigürasyonları elde edilir. Böylelikle N^2 olacak olan işlem sayısı, $N \log(N)$ civarına düşecek, dolayısıyla çok daha az işlem yaparak program daha verimli çalışacaktır (SENGİL, 2010). PIC/MCC yöntemi daha önceden çeşitli kaynaklarda anlatılmıştır (BIRDSALL, 1991; VAHEDI, 1995; DONKÓ, 2011). Eğer yöntemi kısaca özetlersek:

I Başlangıç Şartlarının Girilmesi: Her simülasyon metodunda olduğu gibi ilk koşulların düzgün bir biçimde koda girilmesi hem zamandan tasarruf sağlamakta hem de iraksama (divergence) riskini azaltmaktadır.

Daha doğru sonuçlar alabilmek için grid nokta sayısının artırılması CFD gibi bir çok nümerik yöntemlerde başvurulan bir yöntemdir. PIC yönteminde genel yaklaşım grid mesafesinin (Δx) Debye length'e (λ_D) yakın değerlerde seçilmesidir

$$\lambda_D \approx \Delta x. \quad (1)$$

Aynı zamanda grid noktaları arasında yeterince süper parçacık bulunmaması yeterli örnekleme olmamasına ve hatalı sonuçlar elde edilmesine neden olabilir. Bu konuyla ilgili detaylı bilgi Bölüm 4'de verilecektir.

Yukarıdaki parametreler seçildikten sonra yüklü parçacıklar grid noktaları arası alana istenilen şekilde yerleştirilirler. Uniform rastgele dağılım genelde kullanılan ilk yük dağılımıdır. Aynı zamanda yerleştirilen yüklü parçacıkların hızları da atanmalıdır. Başlangıç için hız bileşenleri Kartezyen koordinat sistemine Maxwellian olarak atanabilir:

$$v_s = \sqrt{-\ln(R_1) \times 2kT/m} \times \sin(2\pi R_2). \quad (2)$$

Burada v_s Kartezyen koordinat sistemindeki üç hız bileşeninden (v_x , v_y , and v_z) her hangi birisi olabilir (ROSS, 2010). Denklemdaki k , T , m sırasıyla Boltzmann sabiti, sıcaklık, ve seçilen parçacık türünün ağırlığıdır. R_1 ve R_2 değişkenleri ise $[0,1]$ arası üniform olarak dağıtılmış rastgele sayılardır.

II Grid noktalarına düşen yüklerin hesaplanması: İlk adımdan sonra parçacıkların konumları bilindiği için, grid noktalarına düşen yükler uygun weighting schemes yardımıyla bulunabilir. Kodlarımızda birinci dereceden weighting schemes kullandık (BIRDSALL, 1991). Bu yöntem yardımıyla p tipi N tane süper parçacığın gridlerdeki ağırlıkları

$$n_{pk} = W_p \sum_{j=1}^N \frac{(\Delta X_{k+1})_j}{(\Delta x)^2}, \quad n_{p_{k+1}} = W_p \sum_{j=1}^N \frac{(\Delta X_k)_j}{(\Delta x)^2}, \quad (3)$$

denklemleri ile bulunabilir. W_p seçilen parçacık türünün ağırlığını, ΔX_{k+1} ve ΔX_k seçilen j parçacığı ile k ve $k + 1$ grid noktaları arasındaki mesafeyi, n_{pk} ve $n_{p_{k+1}}$ sembolleri ise iki komşu grid noktası k ve $k + 1$ üzerine düşen yük yoğunluklarını belirtmektedir.

III Poisson's denkleminin çözülmesi: İçinde M çeşit yüklü plazma parçacığının olduğu elektro-statik bir sistemi için Poisson's denklemi

$$\nabla^2 V = -\frac{1}{\epsilon_0} \sum_{p=1}^M n_p q_p, \quad (4)$$

şeklinde yazılabilir. Burada ϵ_0 yalıtkanlık sabiti, q_p ise p türü parçacıkların yüküdür. Yukarıda belirtilen denklemi kodlarımızda sonlu fark yöntemiyle sınır şartlarını da katarak TDMA algoritmasıyla çözmekteyiz. Sınırlar için elektrik potansiyel sınır şartları şu şekillerde olabilir:

- Sabit potansiyel (DC plazmadaki elektrotlar ve de Kapasitif RF plazmadaki topraklanmış elektrot)
- Zamana bağlı değişen potansiyel (Kapasitif RF plazmalardaki değişken voltajlı elektrot)
- Periyodik

Bunlara ek olarak dış devre (external circuit) de modele katılabilir.

IV Elektrik alan profilinin hesaplanması: Grid noktalarındaki elektrik potansiyel değerleri hesaplandıktan sonra elektrik alan (E) değerleri

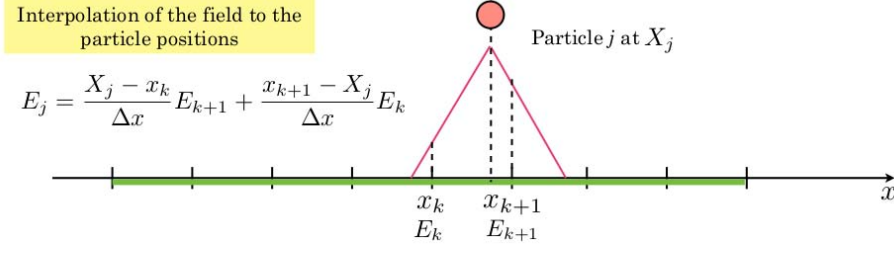
$$\mathbf{E} = -\nabla V, \quad (5)$$

denkleminin uygun nümerik bir yöntemler çözülmesiyle (örneğin sonlu fark yöntemi) bulunur. Yazdığımız paralel Fortran kodlarında dördüncü mertebeden sonlu fark yöntemini kullandık. Şekil 1'de iki grid noktası arasında bulunan bir parçacığa etki eden elektrik alan değerinin lineer enterpolasyon ile hesaplanması gösterilmiştir.

V Elektrik alan değerlerinin yüklü parçacıklara enterpolasyonu: Grid noktalarındaki elektrik alan değerlerinin yüklü parçacıklara enterpolasyonu yapılır. Kodlarımızda birinci mertebeden enterpolasyon kullandık.

VI Lorentz denkleminin çözülmesi ve parçacıkların sınırlar ile etkileşimi: Elektro-statik Lorentz denklemi (6) çözümlenerek yüklü parçacıkların yeni hız ve pozisyonları elde edilir.

$$m_j \frac{d\mathbf{v}_j}{dt} = \mathbf{E}_j q_j \quad (6)$$



Şekil 1: Parçacıklara etki eden elektrik alanın hesaplanması (DONKÓ, 2010).

E_j , q_j , m_j , ve v_j sırasıyla; j parçacığına etki eden elektrik alan vektörü, parçacığın yükü, kütlesi ve de hız vektörüdür. Denklemin çözümü için explicit velocity-verlet algoritmasını kullandık. Yüklü parçacıklardan bir kısmı yeni pozisyonlarına ulaştıktan (hareket ettikten) sonra sınırlara çarpacaklar, eğer yansıma yapmıyorlarsa yok olacaklardır. Eğer ikincil elektronlar oluşuyorsa da sisteme katılacaklardır. Yansıma ve ikincil elektronların oluşup oluşmadığı Monte Carlo algoritması yardımıyla bulunur. Etkileşim sabiti (CI) ile üniform rastgele sayı R_3 birbirleri ile karşılaştırıldığında

$$\text{"Etkileşim vardır"} \quad R_3 \leq CI, \quad (7)$$

etkileşim olup olmadığına karar verilir. CI sabiti enerjiye bağlı olmayan yansıma, ikincil elektron sabiti vs. olabilir.

VII Çarpışmalar: Düşük basınç, düşük sıcaklık gaz deşarj plazmalarda yüklü parçacıkların sayı olarak nötral arka plan gazına oranları en az 3-4 mertebe daha düşüktür. Yüklü parçacıkların birbirleri arasındaki etkileşimler, nötral-yüklü parçacık arasındaki etkileşimlere göre incelediğimiz gazlar için daha düşük oranda oldukları için, modellerimizde sadece elektron-nötral ve iyon-nötral çarpışmalarını kullandık. Metastable'lar sistemde yeterince inelastik çarpışma varsa modele katılabilirler. Bölüm 6'daki problemlerde metastable'ların da etkisi göz önüne alınmıştır. İyon-nötral arası çarpışmalar sert küre (hard sphere) modeli ile modellenmiş olup, seçilen gaz için uygun isotropic ve backward (geriye) çarpışma kesit alanları kullanılmıştır. Elektronlar çarpışmalarındaysa çarpışan nötral parçacıklar hızsız olarak alınmış, elastik uyarma (excitation) ve iyonlaşma (ionization) çarpışmaları modellenmiştir. Seçilen j süper parçacığı için çarpışma ihtimali (P_j):

$$P_j = 1 - e^{-\nu_j \Delta t} \quad (8)$$

olarak yazılabilir. Burada ν_j , j parçacığı için çarpışma frekansı, Δt ise simülasyon zaman adımı boyutudur. Ancak denklem 8'e göre tüm süper parçacıklar için her zaman adımında çarpışma ihtimalinin hesaplanması oldukça zaman alıcı bir işlemdir. Tüm parçacıklara tek tek bakmak yerine null collision metodu ile belirli sayıda rastgele seçilmiş parçacıkların çarpışma olasılığını kontrol edebiliriz (VERBONCOEUR, 2005). Bu algoritma işlem süresi açısından oldukça büyük kazançlar sağlar. Yöntemim uygulaması oldukça kolaydır. Öncelikle enerji-kesit alan grafiklerinden çarpışma frekansını maksimum yapan enerji değeri ve buna karşılık gelen çarpışma frekansı (ν_{max}) bulunur,

$$\nu_{max} = \max(nv\sigma_t). \quad (9)$$

Denklemdaki σ_t sembolü toplam çarpışma kesit alanı, n ise nötral arka plan gaz yoğunluğunu ifade etmektedir. Bir an için elimizdeki tüm süper-parçacıkların bu enerjide olduğunu düşünürsek, maksimum çarpışma olasılığı ($P_{coll_{max}}$)

$$P_{coll_{max}} = 1 - e^{-\nu_{max} \Delta t} \quad (10)$$

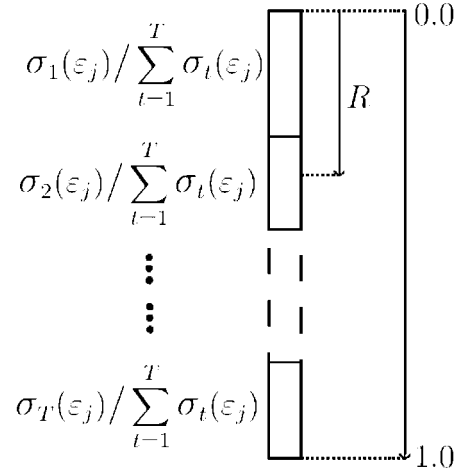
olarak bulunabilir. Bir zaman adımında en fazla olabilecek (maksimum) toplam çarpışma sayısı (N_c) da

$$N_c = N P_{coll_{max}}, \quad (11)$$

olur. Burada N toplam parçacık sayısıdır. Çarpışma yapması için elimizde bulunan süper-parçacıklar arasından enerji değerlerine bakmaksızın N_c kadar rastgele parçacık seçilir. Fakat bu seçilen parçacıkların tamamı çarpışma yapamayacaktır. Bu seçilen parçacıkların da çarpışma yapıp yapamayacakları

$$\text{"Çarpışma var"} \quad R_4 \leq P_{coll}/P_{coll_{max}} \quad (12)$$

karşılaştırmasına bakılarak anlaşılır. Hangi parçacıkların çarpışma yapıp yapmadığı belirlendikten sonra çarpışma yapan parçacıkları ne çeşit çarpışma yaptıkları Şekil 2'deki mantığa göre seçilir. R $[0,1]$ aralığında seçilen rastgele bir sayıdır. Özellikle belirtmekte de fayda vardır; iyon-nötral çarpışmaları için kullanılan kesit alanlar kütle merkezi kinetik enerjisine göre hesaplanmıştır (center of mass energy) (VAHEDI, 1995). Çarpışma yapılan parçacıklara yeni hız vektörleri atanır ve simülasyon adımları tekrar madde I'e dönerek tekrarlanır.



Şekil 2: T çeşit çarpışma yapma ihtimali olan parçacık j için çarpışma çeşidinin seçilmesi. $\sigma_t(\epsilon_j)$, t çeşidi çarpışma için çarpışma kesit alanını, ϵ_j ise enerjisini belirtmektedir.

Yukarıda belirtilen adımlara ek olarak, kodun düzgün çalışabilmesi için kod yazılırken aşağıdaki kurallara uyulmalıdır (DONKÓ, 2011).

- (i) Grid noktaları arası mesafe Debye uzunluğu mertebesinde olmalıdır
- (ii) Courant koşulu sağlanmalıdır. Yani zaman adımı Δt kadar sürede her hangi bir elektron bir grid mesafesinden fazla hareket edemez.

$$\Delta t < \Delta x / v_{max} \quad (13)$$

- (iii) Grid noktaları arasında yeteri kadar parçacık olmalı

$$1 \ll N \quad (14)$$

(iv) Seçilen zaman adımı için çarpışma olasılığı yeterince küçük olmalıdır

$$P_{coll} = 1 - \exp(-\nu_{max}\Delta t) \ll 1 \quad (15)$$

1.2 Paralel PIC/MCC Algoritması

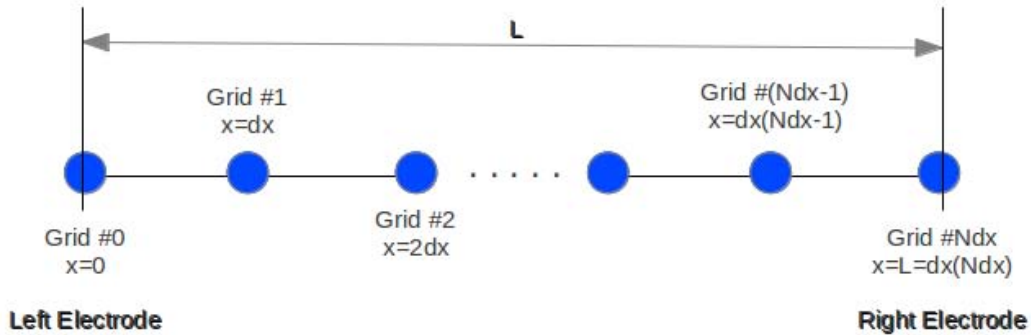
Bir işlemci ya da çekirdeğin saniyede yapabileceği iş sayısı sınırlıdır. Bu yüzden her işlemciye düşen yükü azaltıp, işlem hızını arttırabilmek için kodumuzu paralel bir hale getirdik. Şekil 3’de her zamanki kullandığımız grid sistemimiz görülmektedir. Elektrodlar arası mesafe Ndx tane eşit parçaya bölünmüştür. Hangi paralelleştirme yöntemi kullanılırsa kullanılsın, ayrıklaştırmayı (discretization) bu şekilde yapmaktayız. PIC/MCC yönteminde paralelleştirme 2 şekilde uygulanabilir:

1. Eulerian Yöntem: Her İşlemci Sadece Belli Bir Bölgeden Sorumlu Olursa

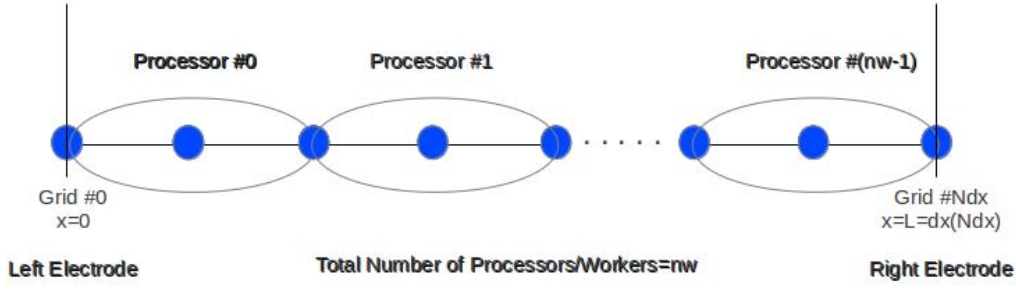
Bu yöntem daha önce (KAWAMURA, 2000) ve diğer bir çok araştırmacı tarafından da kullanılmıştır. Şekil 4’de şu an bahsedilen yönteme göre işlemcilere atanan gridler görülmektedir. Bu yönteme göre her işlemci sadece kendisine atanan bölgelerden ve o bölgelerdeki parçacıklardan sorumludur. Tabii olarak zaman içinde parçacıkların hareket etmesiyle parçacıklar buldukları bölgeleri, dolayısıyla ait oldukları işlemcileri değiştirebilirler.

Bu yaklaşım başta avantajlı gözükmekte, fakat çeşitli sorunlara neden olabilmektedir.

- Baştaki ve sondaki grid noktalarını kapsayan işlemciler diğer işlemcilere ek olarak yansıma, ikincil elektronlar ve de sınır dışına çıkan parçacıklarla ilgilenmektedirler. Dolayısıyla işlemciler arasında bir farklılaşma oluşmakta, bu da kodlamayı biraz daha zorlaştırmaktadır.
- Yüklü parçacıklar hareketli olduklarından sürekli aynı bölgelerde yani aynı işlemcinin sınırları içinde kalmayabilirler. Simülasyonun her zaman adımında işlemciler arası parçacık geçişi olabilmektedir. Böyle bir durumda, parçacıkların önceden buldukları işlemciden silinip yeni işlemciye yazılmaları gerekmektedir. Bunun için işlemciler birbirleri ile haberleşmek zorundadır. Ek bir haberleşme ortaya çıkmakta, ve bir tane işlemci de düzenleme ve dağıtımla uğraşmalıdır.
- Her işlemci belli bölgeyle uğraştığı için Poisson’s denkleminin çözülmesi bu yöntem uygulanırsa kısadır diyebiliriz. Ancak tek boyutta (1D) Poisson denklemini çözmek programımızda



Şekil 3: Standart 1D Grid Konfigürasyonu.



Şekil 4: Eulerian Paralleleştirme Mantiğı.

%1'den daha az vakit almaktadır. Bu paralelleştirme yöntemi Poisson denklemi açısından pek bir avantaj sağlamamaktadır. Üstelik meydana gelebilecek ekstra işlemciler arası haberleşmeden dolayı da işlerin yavaşlama ihtimali vardır.

- (d) Yaşanan diğer bir sıkıntı da, eğer her bir işlemci eş uzunluktaki bölgelerden sorumlu olursa; sheat bölgelerinden sorumlu olan işlemcilere quasineutral bölgeden sorumlu olanlara oranla çok daha az parçacık düşecektir. Bu durumda işlemcilere arası yük dağılımı farklılaşacak ve program verimli bir şekilde çalışmayacaktır.

2. Her Bir İşlemci Tüm Bölgelerden Ama Sadece Belli Sayıda Parçacıktan Sorumlu Olursa

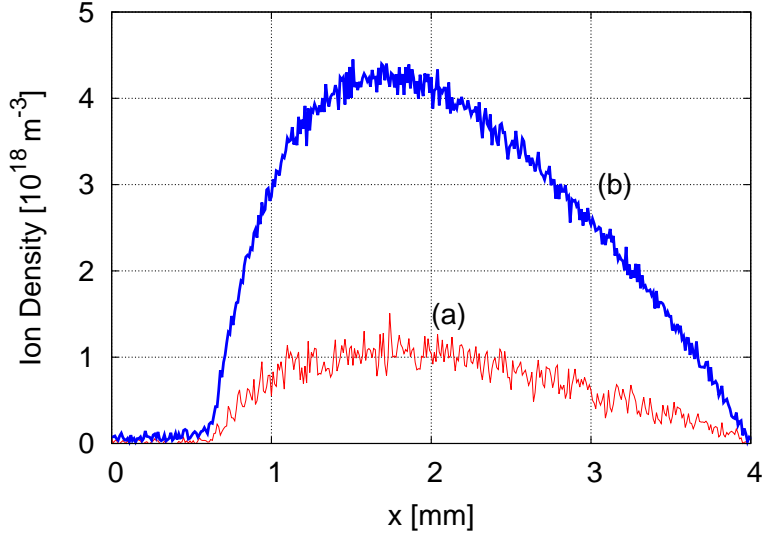
Bu yöntemde her işlemci elektrodlar arası bütün alandan sorumludur, ancak her bir çekirdeğe ulaştığında eşit sayıda parçacık düşer. İşlemciler her zaman adımında sadece iki kere haberleşirler. Bu haberleşme haricinde tamamen birbirlerinden bağımsız (haberleşmeye gerek duymadan) iş yaparlar.

İşlemciler gridlere düşen yük yoğunluklarını hesapladıktan sonra elektrik alanın hesaplanması için önceden belirlenmiş bir işlemciye (programımızda bu işlemci # 0'dır) yerel yük yoğunluk değerlerini yollarlar. İşlemci # 0 yük değerlerini toplar ve ardından gridlerdeki Poisson denklemini çözerek elektrik potansiyeli ardından elektrik alan değerlerini hesaplar, en sonunda da diğer işlemcilere kullanmaları için elektrik alan array'lerini yayımlar (MPI_Broadcast). Bu kısımlar hariç tüm işlemciler birbirlerinden bağımsız olarak hareket ederler. Sadece bu iki noktada topluca haberleşirler. Şekil 5'de 4 çekirdek kullanılan bir PIC/MCC probleminde örnek işlemciye düşen yük ve ana işlemci tarafından yükler toplandıktan sonraki değer gösterilmiştir. Aynı şekilden görülebileceği gibi gürtü toplam yoğunluk grafiğinde azalmıştır, çünkü bu grafik daha fazla parçacığın pozisyon bilgisi kullanılarak elde edilmiştir.

- (a) Bu yöntemde farklı işlemlerle uğraşan işlemciler yoktur, sadece bir işlemci Poisson's denklemini çözmek için özelleştirilmiştir. Her işlemci neredeyse aynı işleri yapar. İşlemci # 0 çözümle uğraşırken diğer işlemciler kısa bir süre bekleme yapmaktadır, ancak bu süre fazla bir zaman kaybına yol açmamaktadır. Diğer yöntemdeki bir çok defa haberleşmeye karşın sadece iki noktada haberleşme yapılmaktadır.
- (b) Her işlemci eşit sayıda parçacıkla başlar ve birbirine yakın sayıda parçacıkla simülasyonu tamamlar. Çekirdeklerin işlem yükü eşdeğerdir denilebilir.

Paralel PIC/MCC kodlarımız 2 numaralı paralelleştirme yöntemine göre yazılmıştır.

Çok fazla değişiklik yapmadan tek bir işlemci için hazırlanmış parçacık kodu paralel hale getirilebilir. Her

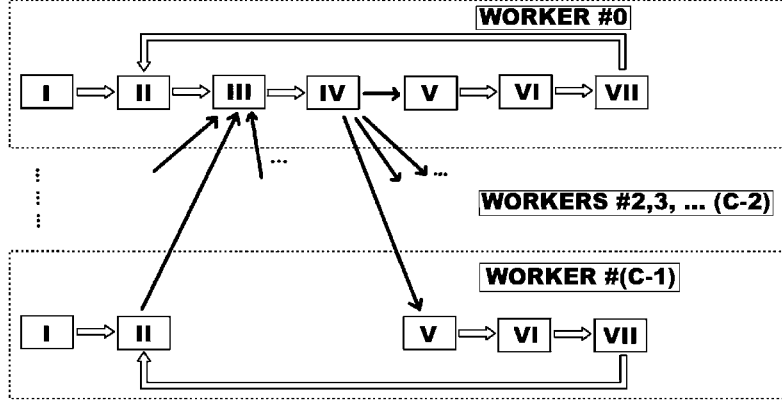


Şekil 5: Toplam 4 kullanılan örnek paralel PIC/MCC analizindeki iyon yoğunlukları [$10^{18} m^{-3}$]: (a) Sadece İşlemci #1'deki iyon yoğunluğu (b) İşlemci #0'daki yani yöneticide kayıtlı toplam iyon yoğunluğu.

işlemci için grid noktalarındaki yük yoğunlukları bulunduktan sonra, işlemciler bu bilgileri daha önceden belirlenmiş yönetici işlemciye (kodlarımızda yönetici işlemci #0 olarak atanmıştır) gönderirler. Yönetici işlemci bu gelen değerleri toplayarak genel yük dağılım profilini çıkartır ve Poisson's denklemini çözer,

$$\nabla^2 V = -\frac{1}{\epsilon_0} \sum_{c=0}^{C-1} \left(\sum_{p=1}^M n_p q_p \right). \quad (16)$$

C analizde kullanılan toplam işlemci sayısına karşılık gelmektedir. Yönetici aynı zamanda grid noktalarındaki elektrik alan değerleri de hesaplayıp diğer işlemcilere gönderir (CALL MPI_Bcast). Kullandığımız paralel PIC/MCC algoritması şekil 6'de gösterilmiştir.



Şekil 6: C kadar işlemci kullanılan bir sistem için paralel PIC/MCC Algoritması. Siyah oklar işlemciler arası haberleşmeyi göstermektedir (CALL MPI_Reduce & CALL MPI_Bcast). İşlemci #0 ana işlemcidir ve gridlere düşen yük yoğunluklarının diğer işlemcilerden toplanmasından, elektrik alan profilinin çözülmesinden ve sonuçları diğer işlemcilere dağıtmaktan sorumludur. I) Başlangıç, II) Grid noktalarındaki yüklerin hesaplanması, III) Poisson denkleminin çözülmesi, IV) Elektrik alan hesabı, V) Grid noktalarındaki elektrik alan değerlerinin parçacıklara enterpolasyonu, VI) Lorentz denkleminin çözümü ve sınır etkileşimleri, VII) Çarpışmalar.

1.3 Kullanılan İşlemci Sayısının Hesaplama Verimliliğine Etkisi

Büyük bir kantinde, oldukça hızlı çalışan bir kaç tane bağımsız yemek gişesinin olduğunu düşünelim. Ancak tüm kantinde sadece bir hesap ödeme noktası olduğunu söylersek orada bir yığılma olacağını kestirmek güç olmaz. Yemeğini alan kişilerin tamamının o bölgede bekleme yapacağı dolayısıyla yemek yemeden önce geçen sürenin çok fazla değişmeyeceğini söyleyebiliriz. Yani böyle bir durumda işleri hızlandırmak için açılan yemek gişelerinin çok fazla bir işlevleri olmadığını söyleyebiliriz. Hesap ödeme noktalarının kantin için paralelleştirilmemiş en yavaş kısımları olduğunu söyleyebiliriz (bottle-neck durumu). Paralel programlamadaki hızlanmanın mantığı da buna benzerdir. Siz istediğini kadar sisteme işlemci ekleyin, eğer kodunuzu belli bölgeleri paralel hale geçiremiyorsa paralelleştirmeden bir verim alamazsınız (LANDAN, 2012).

Elimizde nn tane işlemci bulunan bir sistemin olduğunu düşünelim. Programın pp 'lik bir oranda paralel hale getirilip işlemcilere dağıtılabiliyorsa, $(1-pp)$ 'lik kısmı dağıtılamaz. Tüm işlemin tek çekirdekte 1 birim zamanda tamamlandığını düşünürsek, paralel kod işlemciler arası haberleşme süreleri dikkate alınmazsa, nn işlemci ile aynı iş;

$$(1 - pp) + \frac{pp}{nn}$$

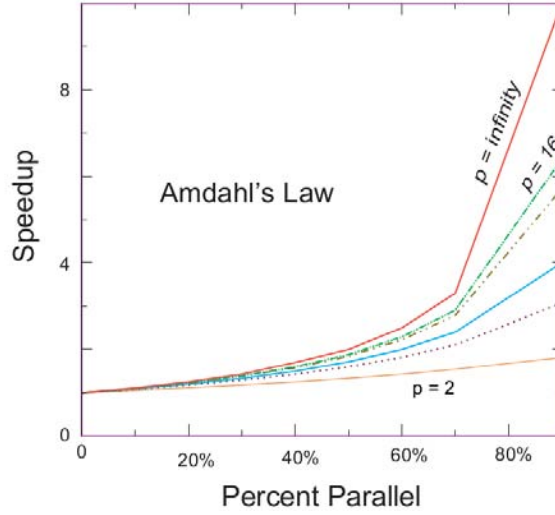
sürede bitirilecektir. Eğer elimizdeki işlemci sayısı sonsuza giderse;

$$\lim_{nn \rightarrow \infty} \left((1 - pp) + \frac{pp}{nn} \right) = (1 - pp)$$

Yani bir programda eğer paralelleştirilemeyen kısımlar varsa, hızlanma da limitlidir. Örneğin %80'i paralel hale getirebilen bir program en fazla 5 kata kadar hızlandırılabilir. Gerçekten paralelleştirmeden verim almak istiyorsak programın %90 üzerindeki kısmı paralel hale getirilebilmelidir.

Şekil 7 belli oranlarda paralel hale getirilebilen bir programın kullanılan işlemci sayısına göre teorik hızlanma grafiği verilmiştir. Grafik her ne kadar teorik de olsa bize genel bir fikir vermektedir. Çünkü haberleşme, senkronizasyon zaman alır; ayrıca işlem yükünü her zaman tam olarak eşit bir şekilde işlemcilerle aktaramayız (LANDAN, 2012).

Paralel kodlarımızı yazarken algoritmayı olabildiğince paralel hale getirmeye çalıştık. Şekil 6'den de anlaşılacağı gibi algoritmamızın sadece (III) ve (IV) numaralı kısımları paralel değildir. Neyseki analizlerimiz tek boyutlu olduğu için bu bölgelerdeki işlem tüm sürenin yaklaşık %1 gibi bir kısmını almaktadır. Dolayısıyla algoritmamız ve kodlarımız paralelleştirme için son derece uygundur.



Şekil 7: Farklı oranlarda paralelleştirilebilen programların teorik hızlanma grafiği (LANDAN, 2012). Farklı eğriler farklı işlemci sayısına karşılık gelmektedir.

1.4 Subcycling

Parçacık kodlarını paralel hale getirilmesine ek olarak yavaş elektron ve iyon için subcycling yapılarak simülasyonların daha hızlı çözülmesi sağlanabilir (KAWAMURA, 2000). Elektronların bir kısmı (yavaş elektronlar) ve iyonlar için hesaplar her zaman adımında değil de sırasıyla S_{se} ve S_i zaman adımlarında bir yapılabilirler. Bu yaklaşım hesap zamanını ciddi oranda kısaltabilir. Ancak subcycling yapılan parçacıklar için Courant koşulu ve adım başına yapılan çarpışma sayısı kontrol edilmelidir. Yavaş elektron ve iyonlar için subcycling zamanı sırasındaki çarpışma olasılıkları

$$P_{se} = 1 - \exp(-\nu_{e_{max}}(S_{se}\Delta t)) \ll 1, \quad (17)$$

$$P_i = 1 - \exp(-\nu_{i_{max}}(S_i\Delta t)) \ll 1, \quad (18)$$

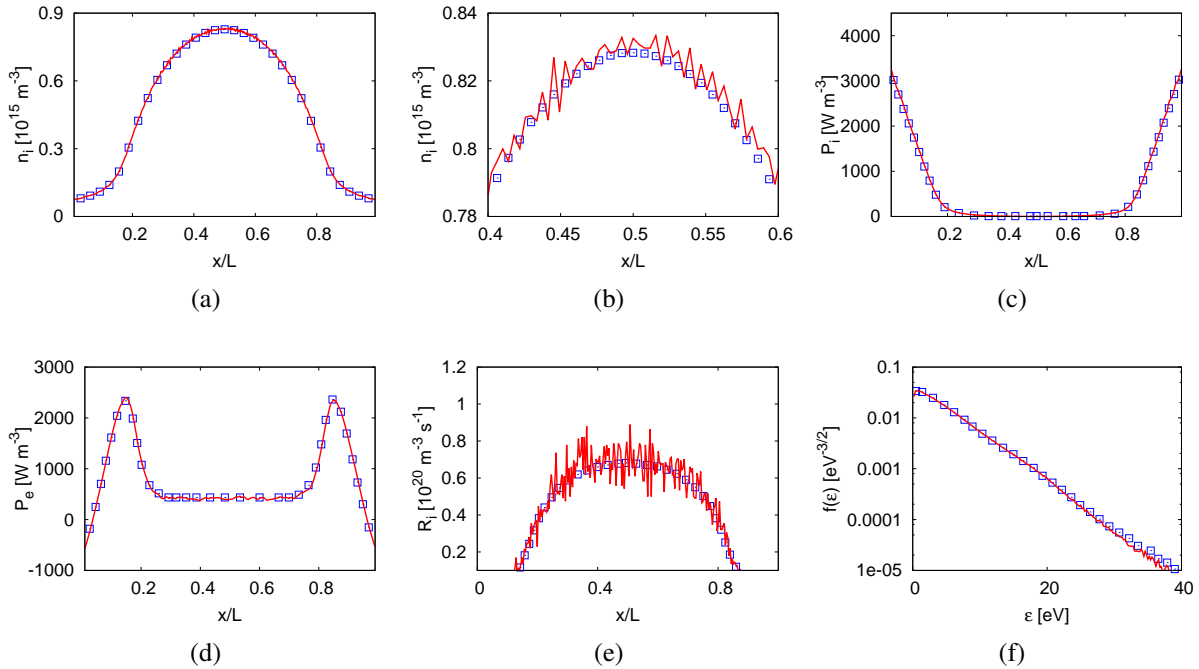
simülasyona başlarken kontrol edilmelidirler. Eğer yukarıdaki durum sağlanmıyorsa bazı çarpışmalar ihmal edilmiş demektir (VERBONCOEUR, 2005). Bir diğer dikkat edilmesi gereken nokta da, eğer elektronlar için subcycling yapılıyorsa sheet bölgelerindeki elektronlar çok kısa sürelerde yüksek hızlara ulaşabilecekleri için subcycling algoritmasına dahil edilmeyip, hızlı elektronmuş gibi her adımda işlem yapılmalıdır.

2 PARALEL PIC/MCC KODUNUN DOĞRULANMASI VE ÖRNEK ANALİZLER

Bu bölümde paralel helyum ve argon PIC/MCC kodlarımız için yapılan validasyon çalışmalarının sonuçlardan bahsedilecektir. Örnek detaylı argon gaz deşarjı incelemesi bir sonraki bölümde yapılmıştır. Bu bölüm sadece validasyon amaçlıdır.

2.1 Helyum Gazı İçin Yazılan Kodun Doğrulanması

Helyum gazı için yazdığımız paralel 1d3v PIC/MCC kodunu referans (TURNER, 2013)'deki problem II ile doğruladık. Seçilen problemde $32.1 \times 10^{20} [m^{-3}]$ yoğunluk ve $300 K$ sıcaklıktaki helyum gazına $250 V$ genliğinde $13.56 MHz$ frekansta elektrodlardan elektrik potansiyel uygulanmıştır. Elektrodlar arasındaki mesafe $6.7 cm$ alınmıştır (Problem parametreleriyle ilgili daha fazla bilgi aynı kaynaktan bulunabilir). Fortran 90 kodumuz $i7$ işlemcili bir bilgisayarda paralel olarak çalıştırıldı. Karşılaştırmalı sonuçlar Şekil 8'de görülebilir. Elde ettiğimiz iyon yoğunlukları referansta bulunan değerlerle karşılaştırıldığında maksimum relative hata oranı (ε_{rel}) 0.0165 çıkmaktadır. Bu değer iki farklı kodun birbirine oldukça uyumlu olduğunu göstermektedir. Makaledeki yazarların da belirttiği gibi bu analizler sadece validasyon amacıyla uygulanmıştır. Parçacık ağırlığı, elektromanyetik ve de çok boyutlu etkiler araştırılmamıştır (TURNER, 2013).



Şekil 8: Şekillerdeki \square sembol kaynak (TURNER, 2013)'deki problem II'nin sonuçlarını, sürekli eğriler ise çalışmalarımızda elde ettiğimiz sonuçları göstermektedir. (a) İyon yoğunluk profili, (b) iyon yoğunluk profili merkez bölge detayı, (c) iyon ısınma oranı, (d) elektron ısınma oranı, (e) iyonizasyon kaynağı, (f) normalize edilmiş elektron enerji dağılım fonksiyonu $f(\varepsilon)$.

2.2 Argon Gazı İçin Yazılan Kodun Doğrulanması

Kapasitif RF gaz deşarj plazmaları iyonlaşmalarına göre incelenirlerse iki grup altında toplanabilirler.

1. α modu: Bu modda elektronlar sheath ve quasi-neutral bölgelerin birleşimi olan bölgelerde elektrik alanın değişimiyle hızlanarak iyonlaşmaya neden olurlar.
2. γ modu: Bu modda ise oluşan ikincil elektronlar sheath bölgelerindeki yüksek elektrik alan değerlerinde hızlanarak iyonizasyona sebep olurlar.

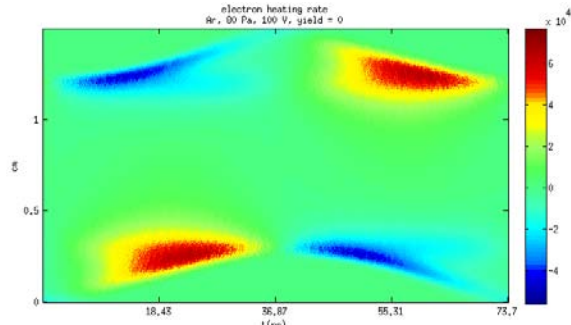
α ve γ türü iki kapasitif gaz deşarjı kaynak (SCHULZE, 2011)'de ele alınmıştır. Makaledeki saf argon gazının α ve γ modlarındaki iki simülasyonu ile kendi kodumuzdan elde ettiğimiz sonuçlar karşılaştırılmıştır. Bahsi geçen çalışmada ve bizim kodumuzda da benzer şekilde tüm elektron çarpışmaları için izotropik dağılım, iyonlaşma sonrası eşit elektron dağılımı varsayımları kullanılmıştır. Aynı zamanda makaledekiyle aynı elektron iyon çarpışma kesit alanları kullanılmıştır. Her ne kadar benzer yaklaşımlar kullanıldıysa da, makalede kullanılan grid ve parçacık sayıları belirtilmemiştir. Bunlara karşın, yaptığımız analizler ile makaledeki analizler %80-%90 yakınlıkta benzer sonuçlar vermiştir. Daha niceliksel bir karşılaştırma makaledeki sonuçlar pozisyon zaman grafiğinde verildiği için mümkün olmamıştır.

2.2.1 α Gaz Deşarj Problemi

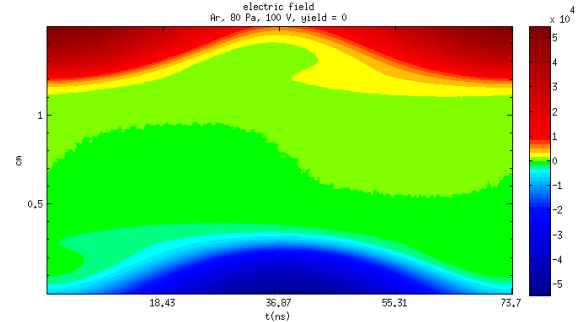
İlk problemde saf α radyo-frekans (RF) argon gaz deşarj problemi incelenmiştir. Problemde ikincil elektronları etkisi göz önüne alınmamıştır. Problem parametreleri aşağıdaki gibidir: 80 Pa, 100 V, 1.5 cm, 13.56 MHz, 350 K, $\gamma = 0$. Zaman ve pozisyona bağlı elektron yoğunluğu, elektrik alan, elektron ısınma oranı Şekil 9 a,b,c'de verilmiştir. Şekil 9-d'de ise elektrik alan grafiği daha farklı bir renk haritası ile gösterilmiş, sadece quasi-neutral bölgede değil tüm deşarj hakkında bilgi vermektedir.

2.2.2 γ Gaz Deşarj Problemi

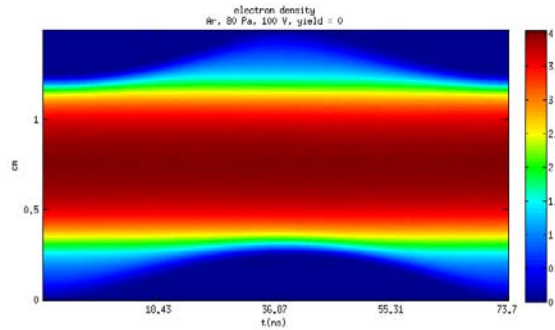
Problem için parametreler aşağıdaki gibidir: 80 Pa, 200 V, 1.5 cm, 13.56 MHz, 350 K, $\gamma = 0.2$. Pozisyon ve zamana bağlı elektron yoğunluğu, elektrik alan ve elektron ısınma oran grafikleri Şekil 10'da makale ile karşılaştırmak için verilmiştir. Dikkat edilirse sonuçlar beklenildiği gibi $1/(13.56 \text{ MHz}) = 73.7 \times 10^{-9}$ saniyelik bir peryotta tekrar etmediktedirler.



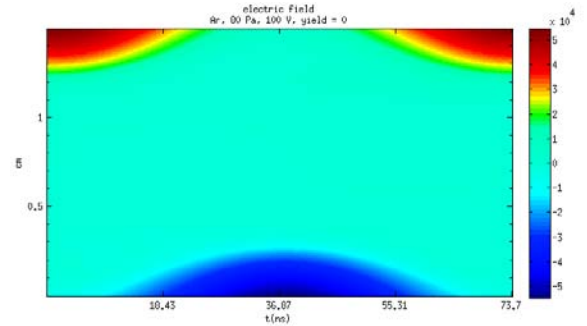
(a)



(b)

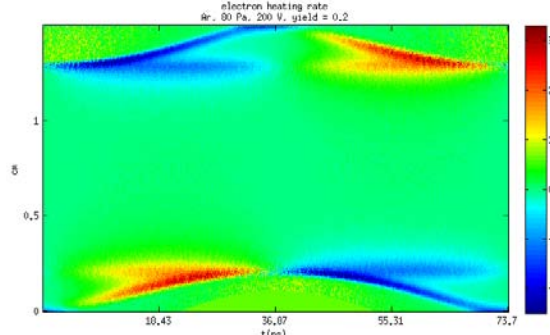


(c)

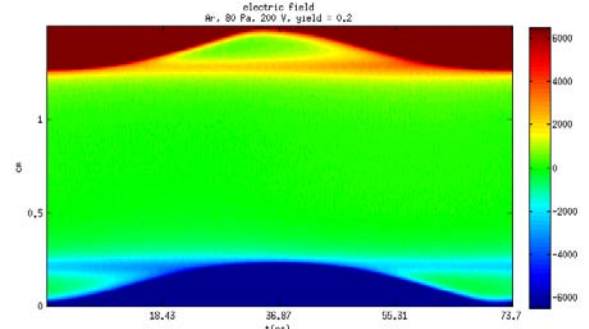


(d)

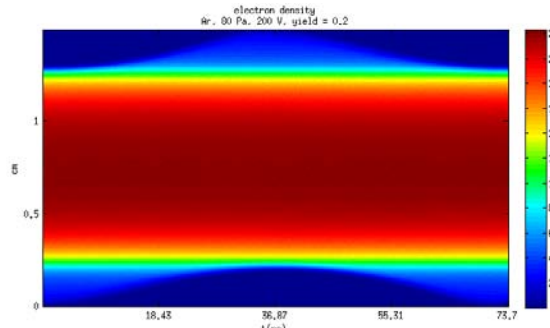
Şekil 9: $p = 80$ Pa, $V = 100$ V, $L = 1.5$ cm, $f=13.56$ MHz, $T = 350$ K, $\gamma = 0$ parametrelili RF argon α gaz deşarjı sonuç grafikleri. Problem parametreleri kaynak (SCHULZE, 2011)'den alınmıştır. (a) Elektron ısınma oranı [W], (b) Merkez bölgedeki elektrik alan [V/m], (c) Elektron yoğunluğu [$10^{15}m^{-3}$], (d) Elektrik alan genel [V/m].



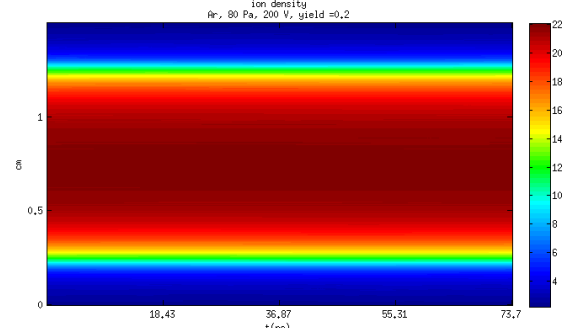
(a)



(b)



(c)



(d)

Şekil 10: $p = 80$ Pa, $V = 200$ V, $L = 1.5$ cm, $f=13.56$ MHz, $T = 350$ K, $\gamma = 0.2$ parametrelı RF Argon γ Gaz Deşarjı Grafikleri. Problem parametreleri kaynak (SCHULZE, 2011)'den alınmıřtır. (a) Elektron ısınma oranı [$10^5 W$], (b) Merkez bölgedeki elektrik alan [V/m], (c) Elektron yoğunluđu [$10^{15} m^{-3}$], (d) İyon yoğunluđu [$10^{15} m^{-3}$].

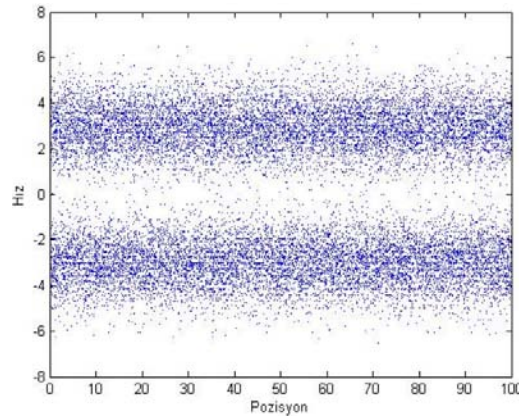
3 YAPILAN DİĞER PIC/MCC ANALİZLERİNDEN BAZILARI

3.1 İkili Kararsız Akış Probleminin PIC/MCC ile Modellenmesi

Bu kod 210T072 proje çalışmaları sırasında yazdığımız ilk temel PIC kodudur ve Matlab programında yazılmıştır. Tek boyutlu ve tek hız bileşenine sahip (1d1v), tam olarak iyonlaşmış, periyodik sınır şartlı, mıknatıslanmamış (unmagnetized) ikili elektron akışının zamana bağlı hareketi incelenmiştir. Problemin C kodu ile bir uygulaması kaynak (FITZPATRICK, 2011)'de bulunmaktadır. PIC kodlarıyla tecrübe edinebilmek için bu kod Matlab programında yeniden yazılmış, Poisson's denklemini çözmek için programın kendi kütüphanesi içinde bulunan Fast Fourier Transform fonksiyonu kullanılmış ve elektronları hareket ettirebilmek için implicit metod yerine explicit bir metod olan leap-frog algoritması kullanılmıştır. Kodu bu şekilde yazarken stabilite şartları da gözden geçirilmiştir. Sonuçta sitede bulunan kodla benzer sonuçları aldığımız, ancak yöntem yönünde farklı olan bir kod ortaya çıkmıştır. Kod temel bir kod olduğu için daha önce anlatılan algoritmaya ek olarak ayrıyeten bazı varsayımlar yapılmıştır:

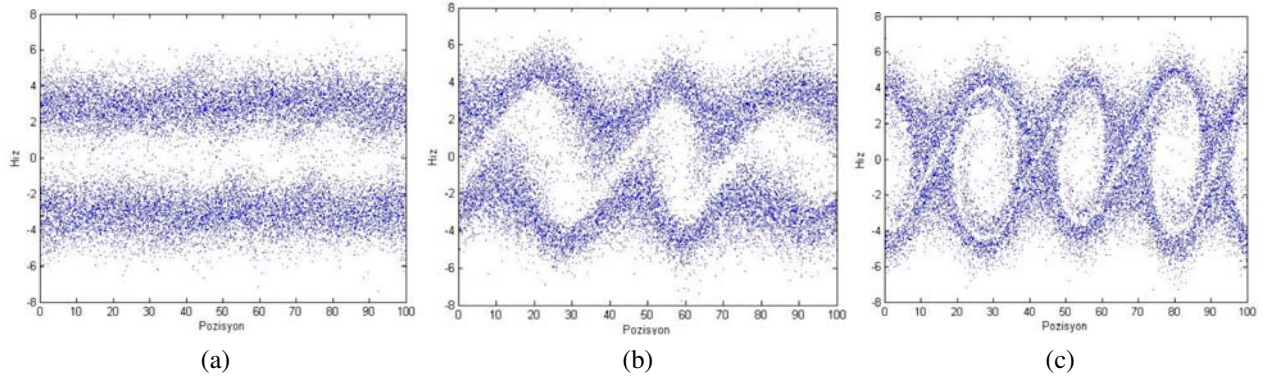
- Öncelikle iyonlar sabit arka planda hareket etmiyor olduğu,
- Dışarıdan sisteme herhangi bir elektromanyetik kuvvetin gelmediği,
- Elektronların ilk hız dağılımının Maxwellian olduğu düşünülmüştür,
- Boyutsuz birimler (non-dimensional) units kullanılmıştır.

Analizlerde 20000 toplam elektron (N), elektrodlar arası mesafe (L) 100 birim, toplam 1000 grid (J), zaman adımı boyutu (dt) 0.001 alınmıştır. Şekil 11'de analizin başında elektronlar için pozisyon hız grafiği verilmiştir. En başta ($t = 0$) net bir şekilde birbirine zıt yönde hareket eden iki elektron grubu görülmekte-



Şekil 11: $t=0$ anındaki, birbirlerine zıt yönde hareket eden (ortalama -3 ve +3 birim hızlarda) iki elektron grubunun pozisyon-hız grafikleri.

dir. İlerleyen zamanlardaki elektron pozisyon-hız grafikleri şekilde 12'de görülmektedir. Beklenildiği gibi zaman geçtikçe bu görüntü kaybolmakta, ikili akış bazı noktalarda birbirlerini yavaşlamakta, bazı noktalarda ise hızlanmaktadır. Diğer bir deyişle birbirine zıt yönde hareket eden elektron ışınları birbirlerini bozmaktadırlar. Bu durum gerçekten de parçacık hızlandırıcılarda karşılaşılan bir sorundur (FITZPATRICK, 2011).



Şekil 12: Zıt yönde hareket eden elektron iki elektron grubunun pozisyon-hız dağılımlarının zamanla değişimi (a) $t = 5$, (b) $t = 12.5$, (c) $t = 17.5$.

3.2 RF Argon Gaz Deşarjı İçin Validasyon Problemi

Bu bölümde yaptığımız diğer bir validasyon çalışmasının sonuçları verilmiş ve analiz oldukça detaylı bir şekilde yorumlanmıştır. Bu problem için kullandığımız problem parametreleri, parçacık ağırlıklarının sonuçlara etkisinin incelendiği bölümde de kullanılacaktır. Problem parametreleri Dr. Donko (DONKÓ, 2012) tarafından tarafımıza bildirilmiş, aynı parametre ve çözüm yöntemiyle iki farklı kodda simülasyonlar yapılmıştır. Problem parametreleri Tablo 1’de verilmiştir.

Tablo 1: 1D RF Argon Gaz Deşarjı Simülasyon Parametreleri

Problem Parametresi	Sembol	Değer
Gaz Basıncı	P	10 [Pa]
Gaz Sıcaklığı	T	350 [K]
Elektrod Potansiyeli	V	250 [Volt]
RF Frekansı	f	13.56 [MHz]
Elektrod Mesafesi	L	2.5 [cm]
İkincil Elektron Sabiti	γ	0.1
Elektron Yansıma Sabiti	R	0.2

Yukarıda belirtilen problemdeki parametrelere ek olarak, problemi çözerken:

1. Grid sayısını kaç aldığımız,
2. Her bir süper elektron ve iyonun kaç tane gerçek, parçacığı temsil ettiği (weighting / ağırlık), dolayısıyla simülasyonda kaç tane parçacık kullandığımız,
3. Kısa mesafe Coulomb kuvvetinin parçacıklar arası etkileşime ve metastable atomların iyonlaşmaya etkisinin incelenip incelenmediği,
4. Süper elektron ve iyonlar için hangi çarpışma çeşitlerini göz önüne aldığımız,
5. Hangi çarpışma kesit alan değerlerini kullandığımız,
6. Çarpışmalar sonrası enerji ve hız dağılımları için hangi yöntemin seçildiği,

sorularının yanıtları sonuçlar açısından oldukça önemlidir. Problemi çözerken kullanılacak olan yöntemler en az problem parametreleri kadar analizden alacağımız sonuçlara direkt etki etmektedir. Bu yüzden Dr. Zoltan Donkó'nun (DONKÓ, 2012) kodunda kullandığı koşullarına olabildiğince benzer bir şekilde kendi kodumuza uyguladık. **Çözüm Parametrelerimiz**

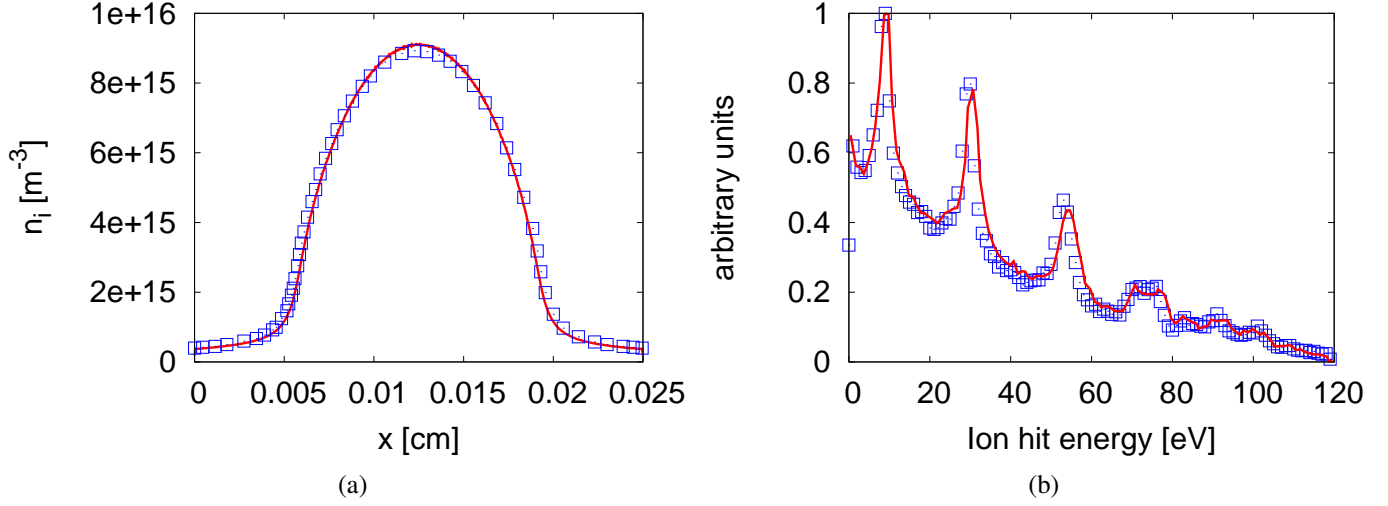
1. Grid sayısı (Ndx), 600
2. Parçacık Ağırlıkları (Weighting), $W_e = W_i = 1.5 \times 10^8$
3. Kısa mesafe Coulomb kuvveti ve metastable atomların etkisi hesaba katılmamıştır
4. Elektronlar için elastic, uyarma (excitation), iyonizasyon (ionization) çarpışmaları; iyonlar için de elastik (elastic) ve şarj değişimi (backward/charge exchange) çarpışmaları dikkate alınmıştır (PHELPS, 1999).
5. İyonlar için, elektronlar için çarpışma kesit alanı değerleri kullanılmıştır.
6. Elektronlar için tüm çarpışmalar izotropik alınmış, iyonizasyona yol açan çarpışmalarda ise oluşan elektron ile çarpan elektron kalan enerjisi eşit olarak %50 – %50 paylaşmışlardır (PHELPS, 1994).

Grafik 13'de yaklaşık olarak 300,000 süper elektron ve iyon kullanarak elde ettiğimiz sonuçlar ile Donkó'nun elde ettiği sonuçların karşılaştırması verilmiştir. İyon yoğunlukları karşılaştırıldığında maksimum relative hata oranı

$$\varepsilon_{rel} = \frac{\max|n_{i_{ref}} - n_i|}{\max|n_{i_{ref}}|} \quad (19)$$

olarak hesaplanmıştır. Bu doğrulamadan sonra sıradaki bölümlerde detaylı incelemelere geçebiliriz.

Sonuçları incelemeye başlamadan önce incelediğimiz RF plazma deşarjı için elde ettiğimiz sonuçların $1/f$ süreli periyodik olduğunu belirtmekte fayda vardır. Bir çok sonuç 1 RF periyodunun 4 farklı zaman noktasında ($\omega = 2\pi f$ olarak alınmıştır; $\omega t/2\pi = 0$, $\omega t/2\pi = 0.25$, $\omega t/2\pi = 0.50$, $\omega t/2\pi = 0.75$) incelenmiştir.



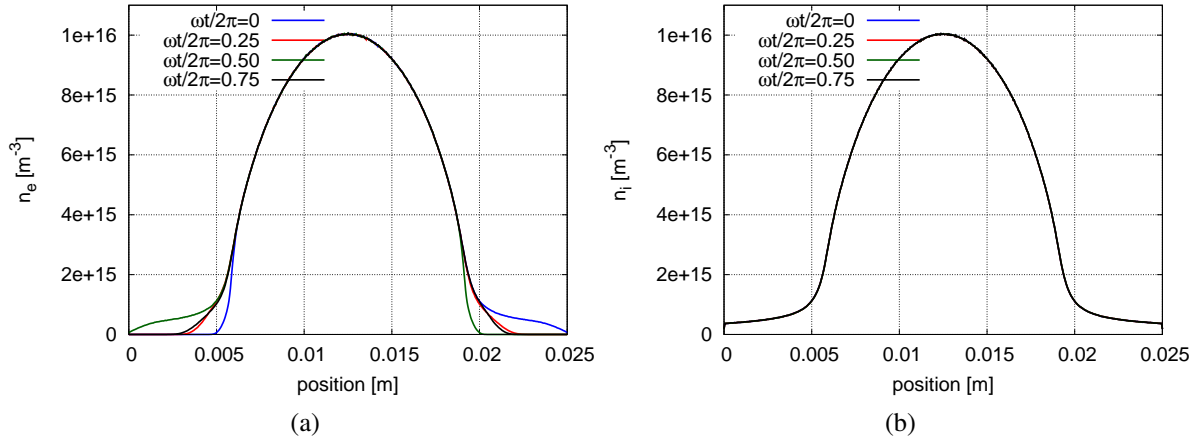
Şekil 13: Şekillerdeki \square sembol kaynak (DONKÓ, 2012) sonuçlarını, eğriler kodumuzla elde ettiğimiz sonuçları göstermektedir. (a) İyon yoğunluk profili, (b) maksimum değere göre normalizasyonunu yaptığımız elektrotlardaki iyon enerjileri dağılım grafiği.

Sonuçların kullanılan parçacık ağırlıklarına göre değişimini incelemek için 6 farklı parçacık ağırlığı kullanılarak toplamda 6 farklı analiz yaptık. Parçacık ağırlıklarının sonuçlara olan etkisi ile ilgili detayları sonraki bölümde vereceğiz. Bu Bölümde tablo 1’de parametreleri verilen problem için en fazla sayıda parçacık kullandığımız yani 760,000 süper iyon, 730,000 süper elektron ($W_e = W_e = 1.5 \times 10^8$) ile yaptığımız analiz sonuçlarımızı veriyoruz.

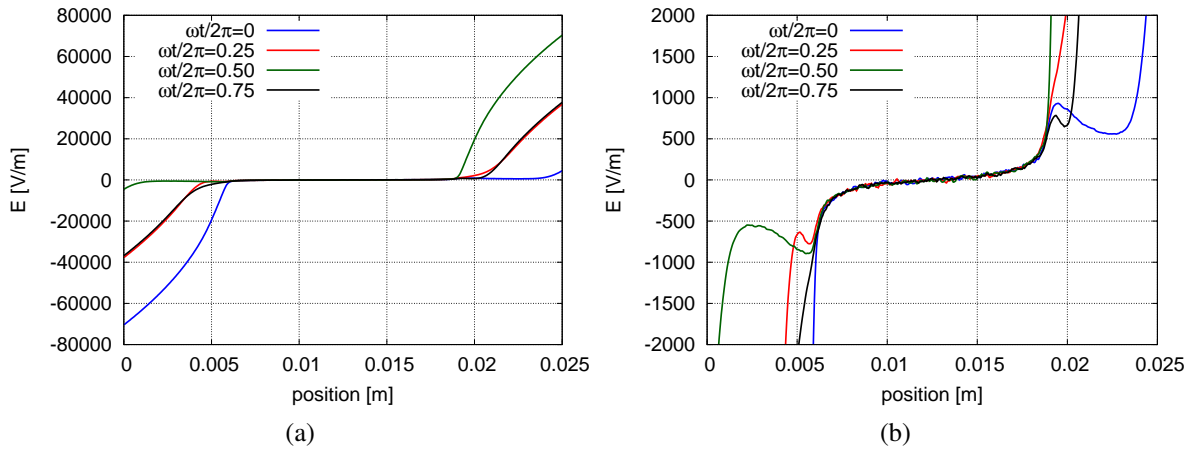
Şekil 14’de zaman ve pozisyona bağlı olarak iyon ve elektron yoğunlukları görülmektedir. Elektron yoğunlukları zamana göre quasineutral bölgede sabit ama sheath bölgelerinde değişmektedir. İyon yoğunluklarının ise zamana göre neredeyse sabit olduğu görülmektedir. İyonlar için bu durum; iyonların elektronlara göre çok daha ağır olmaları, dolayısıyla çok daha hareketsiz olmalarına bağlanabilir. Ayrıca iki grafiği karşılaştırdığımızda sağ ve sol elektrotlara (sınırlara) yakın her zaman iki tane sheath bölgesinin oluştuğu, bu bölgelerde her zaman belli miktar iyonun bulunduğu; ancak elektrotlardaki o anki elektrik potansiyele göre sheath bölgelerdeki elektron yoğunluğunu dolayısıyla da elektrik alanın değiştiği gözlemlenmiştir.

Diğer bir dikkat edilmesi gereken nokta ise $\omega t/2\pi = 0$ ve $\omega t/2\pi = 0.50$; $\omega t/2\pi = 0.25$ ve $\omega t/2\pi = 0.75$ anlarındaki yoğunluk profillerinin birbirinin simetriği olduğudur. Bu simetrinin geçerliliği sadece yoğunluk grafiklerinde değil elektrik alan E (Şekil 15), pozisyona bağlı ortalama iyon ve elektron enerji grafikleri (Şekil 16) ve akım grafiklerinde de (Şekil 21) net bir şekilde görülebilir. Buradan sonuçlar arasında π rad simetrik faz farkı olduğu çıkarımı yapılabilir.

Şekil 15’deki elektrik alan grafiğinde orta yani quasineutral bölgelerdeki elektrik alan değeri beklenildiği gibi sıfır değerine yakın, sheath bölgelerinde ise elektronların hareketine bağlı olarak değişmektedir. Fakat sol ve sağ sheath-quasineutral sınır bölgelerindeki elektrik alana detaylı bir şekilde baktığımızda beklemediğimiz bir sonuçla karşılaşmaktayız (Şekil 15-b). $x=0.005\text{m}$ ve $x=0.020\text{m}$ ’ye yakın iki bölgede elektrik alan yerel bir maksimumlar yapmıştır. Diğer bir deyişle bu noktalarda elektrik potansiyelin ikinci türevi 0’dır ($\nabla^2 V = 0$). Bu durumla daha önce Surrendra’nın helyum gazı için yaptığı RF PIC/MCC ana-



Şekil 14: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $W_e=W_i=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için; $\omega t/2\pi = 0$, $\omega t/2\pi = 0.25$, $\omega t/2\pi = 0.50$ ve $\omega t/2\pi = 0.75$ anlarındaki (a) iyon yoğunluk, ve (b) elektron yoğunluk grafikleri.



Şekil 15: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $W_e=W_i=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için; $\omega t/2\pi = 0$, $\omega t/2\pi = 0.25$, $\omega t/2\pi = 0.50$ ve $\omega t/2\pi = 0.75$ anlarındaki (a) elektrik alan, ve (b) merkez bölgedeki detay elektrik alan grafikleri.

lizinde (SURENDRA, 1991) ve Sato et al.'ın deneysel çalışmalarında da (SATO, 1990) karşılaşılmıştır. Bu beklenmeyen durum 2 şekilde açıklanmaktadır (SURENDRA, 1991):

1. Eğer elektronların isothermal ve Maxwellian dağılım gösterdikleri durumda $\nabla^2(\log(n_e)) = 0$ olduğu bölgelerde $\nabla^2 V = 0$ olmalıdır.
2. Akım sürekliliğini sağlamak için $\nabla(E) = 0$ olduğu durumlarda elektrik alan kendisini ayarlamalıdır.

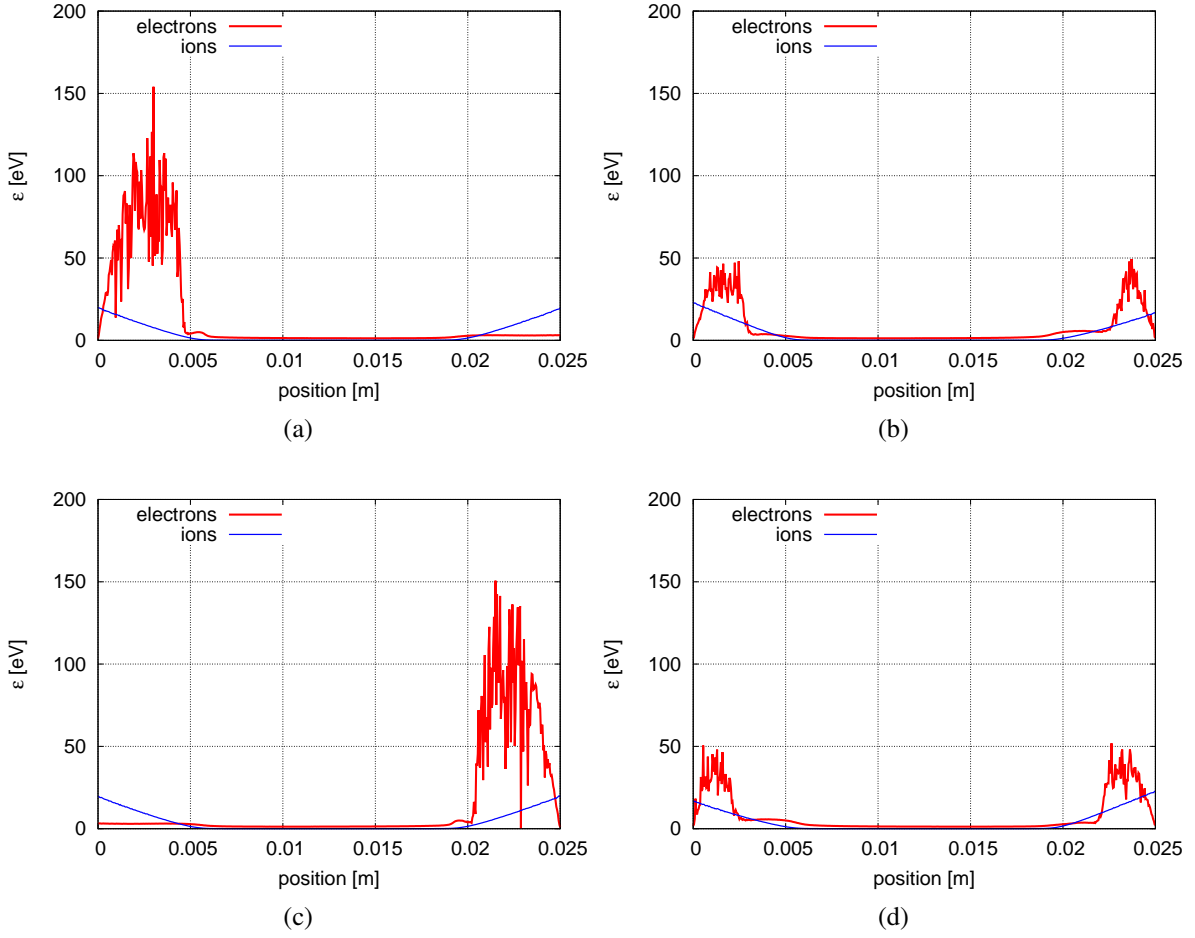
Şekil 16'de iyonlar ve elektronlar için çeşitli zamanlardaki yerel ortalama parçacık enerjileri görülmektedir. Önce elektronları ortalama enerjilerine göre incelersek, elektrodlardan sheath bölgelerine doğru artan bir enerji profili göze çarpmaktadır. Bunun nedeni iyonların elektrodla çarpmasıyla açığa çıkan ikincil elektronların sheath bölgesindeki yüksek elektrik alan yardımıyla hızlanmalarıdır. Bu bahsettiğimiz yüksek enerjili ikincil elektronlar aynı zamanda gaz deşarjının sürekliliğini sağlayan iyonlaşmanın da en önemli sebeplerinden birisidir. İyonların enerjisi ise beklenildiği gibi her durumda sheath bölgesinden elektrodla doğru giderek artmaktadır. Sheath bölgesindeki iyonlar er ya da geç o bölgenin elektroduna çarpmakta ve belli bir olasılıkla da ikincil elektronları oluşturmaktadırlar.

Şekil 17'da quasineutral bölgedeki enerji değerlerinin daha rahat anlaşılabilmesi için logscale kullandık. İyonların ve elektronların en düşük enerjiye sahip oldukları yer beklenildiği gibi her durumda quasineutral bölgenin içidir. Bu bölgede ortalama elektron enerjisi 1.3 eV, ortalama iyon enerjisi de 0.03 eV civarındadır. İyonlar için 0.03 eV yaklaşık olarak 350K'e karşılık gelmektedir ki, bu da ortam sıcaklığına tekabül eder. Yani quasineutral bölgedeki iyonların sıcaklığı beklenildiği gibi nötral Argon atomlarına eşdir.

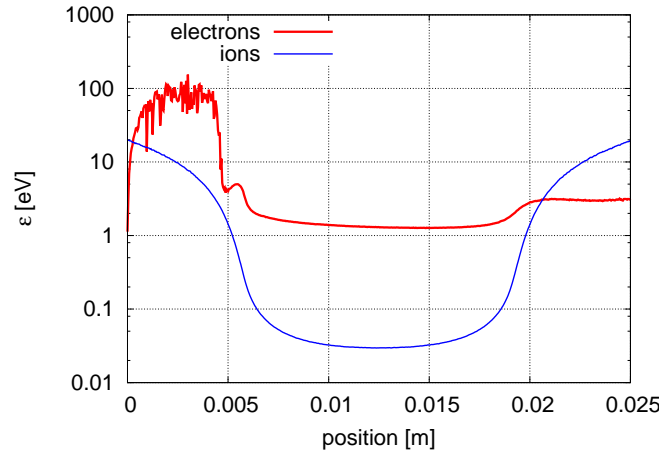
Bu problemde olduğu gibi, genelde düşük yoğunluklu plazmalarda mean free path yeterince kısa olmadığı için, parçacıklar yeterince çarpışma yapamazlar, Maxwellian dağılımlarla karşılaşmak güçtür. Dolayısıyla bir gaz deşarjını sadece parçacıkların ortalama enerjilerine bakarak analiz etmek çok bir anlam ifade etmeyebilir. Bu yüzden deşarjın orta bölgesi olan $x = 0.010 - 0.015$ m arasındaki elektron ve iyon enerji dağılım fonksiyonlarını inceledik. Beklediğimiz gibi iyon enerji dağılımı Maxwelliandır, ancak benzer şeyler elektronlar için söylenememektedir. Özellikle yüksek enerjili kuyruk kısmı yeterli sayıda ikincil elektron akımının olduğunu göstermektedir.

Parçacık düzeyinde neler olup bittiğini daha iyi anlayabilmek için bir tane süper iyon seçtik ve hareketini belli bir süre inceledik. Şekil 19'da iyonun hareketi belli bir süre incelenmiştir. Görüleceği üzere parçacık 4,000,000. zaman adımında 181# numaralı gride bulanmakta, ve 5,058,000. zaman adımında 0# gride yani sol elektroda çarpıp simülasyondan çıkmaktadır. Bu süre zarfında iyon çeşitli çarpışmalar yaşamıştır. Şekil 19-b'deki hız grafiğinde görülen süreksizliklerin nedeni iyonun yaptığı izotropik ve geriye doğru çarpışmalardır. Her ne kadar iyon yaptığı çarpışmalardan dolayı yönünü değiştirse bile sheath bölgesindeki elektrik alanın yönü her zaman elektroda doğru olduğu (bakınız şekil 15) için iyon elektroda çarpmaktan kurtulamamıştır.

Daha önce de belirttiğimiz gibi RF plazmaların yüzey modifikasyonu gibi önemli endüstriyel uygulamaları vardır. Bu uygulamalarda en önemli parametrelerden birisi de iyonların ne kadarlık bir enerji ile hedef malzemeye çarptığıdır. Şekil 20'de analizden elde ettiğimiz sonuçlar görülmektedir. Şekil 19'dan da hatırlanabileceği üzere iyon ve nötral parçacıklar arasında olan yük değişim çarpışmalarında iyon neredeyse tüm hızını dolayısıyla enerjisini kaybediyordu. İyonların mean free path mesafesi sheath mesafesine kıyasla yeterince küçük olmadığı için iyonlar yeterince çarpışma yapamamakta, ve elektrodlarda



Şekil 16: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $W_e=W_i=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için (a) $\omega t/2\pi = 0$, (b) $\omega t/2\pi = 0.25$, (c) $\omega t/2\pi = 0.50$, (d) $\omega t/2\pi = 0.75$ anlarındaki elektron ve iyonların grid noktalarındaki ortalama enerji değerleri.



Şekil 17: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $W_e=W_i=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için $\omega t/2\pi = 0$ anındaki grid noktalarındaki ortalama elektron ve iyon enerji değerleri.

iyonlar için Maxwellian olmayan bir enerji dağılım fonksiyonuyla karşılaşmaktayız (DONKÓ, 2010).

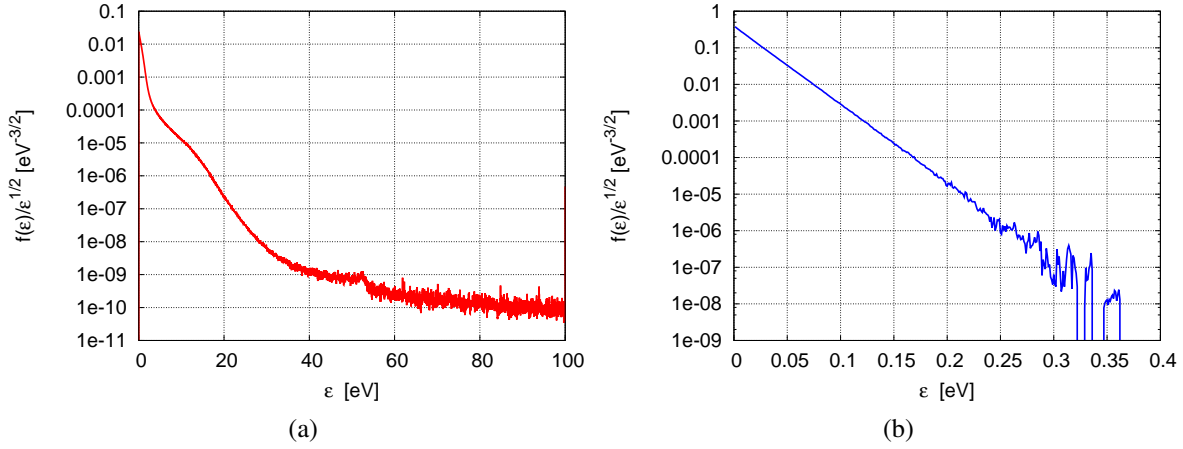
Şekil 21'deki akım yoğunluğu grafiklerini incelersek öncelikle gözümüze çarpan şey toplam akım yoğunluğu değerinin pozisyona göre neredeyse sabit, ama zamana göre değişken olduğudur. Ayrıyeten quasineutral bölgedeki akımın görüldüğü gibi ağırlıklı olarak elektronların oluşturmaktadır. Elektrik alan grafiği Şekil 15'dan da anlaşılabilceği gibi sheath bölgesinde ise akımın displacement current tarafından oluşturulduğu görülmektedir. İyonlar tarafından oluşturulan akım ise diğer akımlara göre oldukça zayıf kalmıştır.

3.3 Townsend Gaz Deşarj İçin İki ve Üç Boyutlu MCC Analizi

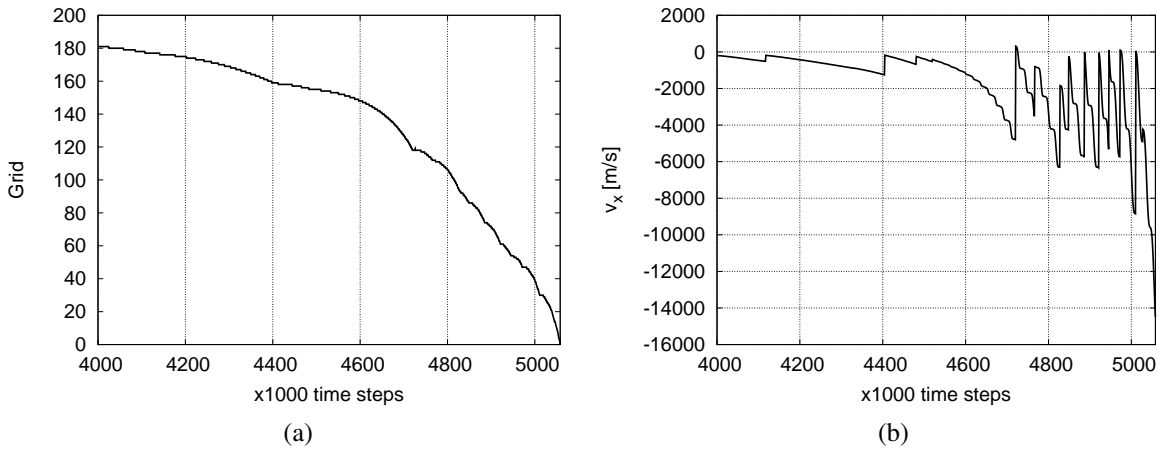
Townsend deşarjı, iki paralel yüklü elektrod arasındaki serbest elektrodların elektrik alandan dolayı hızlanarak çığ (avalanche) biçiminde iyonlaşmaya neden oldukları bir gaz deşarj türüdür. Merkez bölgede quasineutral bir alan oluşturulamadığı için olaylar çok kısa sürede cerayan eder, deşarj boyunca elektrik alan sabittir diyebiliriz. Bu deşarj türünün modellenmesi yüklü parçacıkların hareketlerini anlamak açısından çok önemlidir. Ayrıyeten bu analizler ile yerel yaklaşımlarda kullanılan difüzyon ve mobility parametreleri hesaplanabilir. Sabit bir E/n değeri için örnek hesap bu bölümde yapılmıştır.

Bu çalışmamızda çoklu boyutlarda elektronların hareketlerini daha detaylı anlayabilmek için Townsend gaz deşarjındaki elektronların hareketini ve oluşumunu 3d3v (3 boyutlu pozisyon ve hız vektörünün de takip edildiği model) MCC analizi ile modelledik. Bu çalışmamızın bir benzeri daha önce Z. Donko tarafından yapılmış (DONKÓ, 2011), ve yapılan simülasyonun 2D animasyonu araştırmacının kişisel web-sitesinde bulunmaktadır.

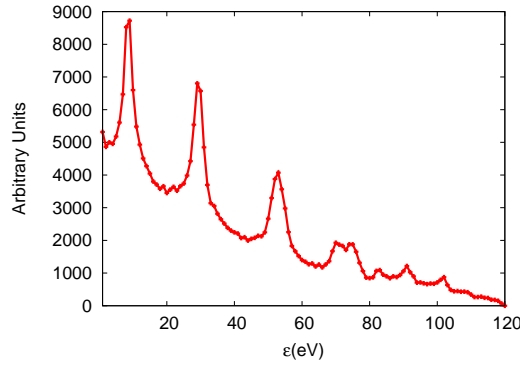
Analizimizde; 1 Torr basınçta, 300 K sıcaklıktaki argon gazına aralarındaki mesafe 4 cm olan iki elektrod ile 600 V potansiyel fark uygulanmıştır. Bu sistem için $E/n = 467.13 \times 10^{-21}$ V m²'dir. Simülasyon başlangıcında katot bölgesinden 1 eV enerjili 100 adet elektron yollanmıştır. Elektronların zamana bağlı hareketleri şekil 22'den incelenebilir. Elektronlar zamanla elektronlar sabit elektrik alan nedeniyle hızlanmış ve iyonizasyona sebebiyet vermişlerdir. Daha ilk bakışta Townsend gaz deşarjındaki elektron swarm için



Şekil 18: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $W_e=W_i=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için merkez bölgedeki (a) elektron enerji dağılım fonksiyonu, (b) iyon enerji dağılım fonksiyonları.



Şekil 19: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $W_e=W_i=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için takip edilen #0 numaralı iyonun zaman adımına bağlı (a) grid pozisyonu, ve (b) hız grafikleri.



Şekil 20: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $W_e=W_i=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için elektrodalara çarpan iyonların enerji dağılımları.

- İyonlaşma
- Drift (elektronlar için elektrik alana yönde hareket)
- Difüzyon

gözlemlenmiştir. İyonların hızlanması sadece iyonlaşmaya neden olmamakta aynı zamanda elastik ve uyarma çarpışmaları da yapmaktadırlar. Yani elektronlar sabit elektrik alandan dolayı enerji kazanmakta, fakat çarpışmalar yüzünden hem enerji kaybetmekte hem de hareket yönleri değişmektedir. Gerçekten de grafik 23-a'dan da görülebileceği gibi elektronların kütle merkezinin hızı sabit bir değer etrafında dalgalanmaktadır (elektronlar elektrodalara çarpıp yok olmaya başlayıncaya kadar). Aynen serbest düşüş hareketi yapan cisimlerin limit hızının olması gibi, sabit elektrik alanda hareket eden yüklü parçacık gruplarının da bir limit hızının olduğu görülmektedir.

Akışkan modellerindeki elektronlar için drift-diffusion yaklaşımını hatırlarsak

$$\Gamma_e = -n_e \mu_e E - \nabla(n_e D_e), \quad (20)$$

Γ_e elektronların flux yoğunluğu, μ_e elektron mobility sabiti, $\mu_e E = v_e$ terimleri elektronların hızı, D_e difüzyon sabiti olarak tanımlandı. Grafik 23-a'daki grafikten elektronların ağırlık merkezinin hızını bulup elektrik alan değerine bölersek sistemdeki elektronların mobility sabitini bulabiliriz. Şekil 23-c'de elektronları ağırlık merkezlerine göre ortalama yarıçaplarının karesini ($\langle R^2 \rangle$) zamana bağlı olarak çizdirdik. Kaynak (HUNTER, 1977)'ye göre D_e değeri

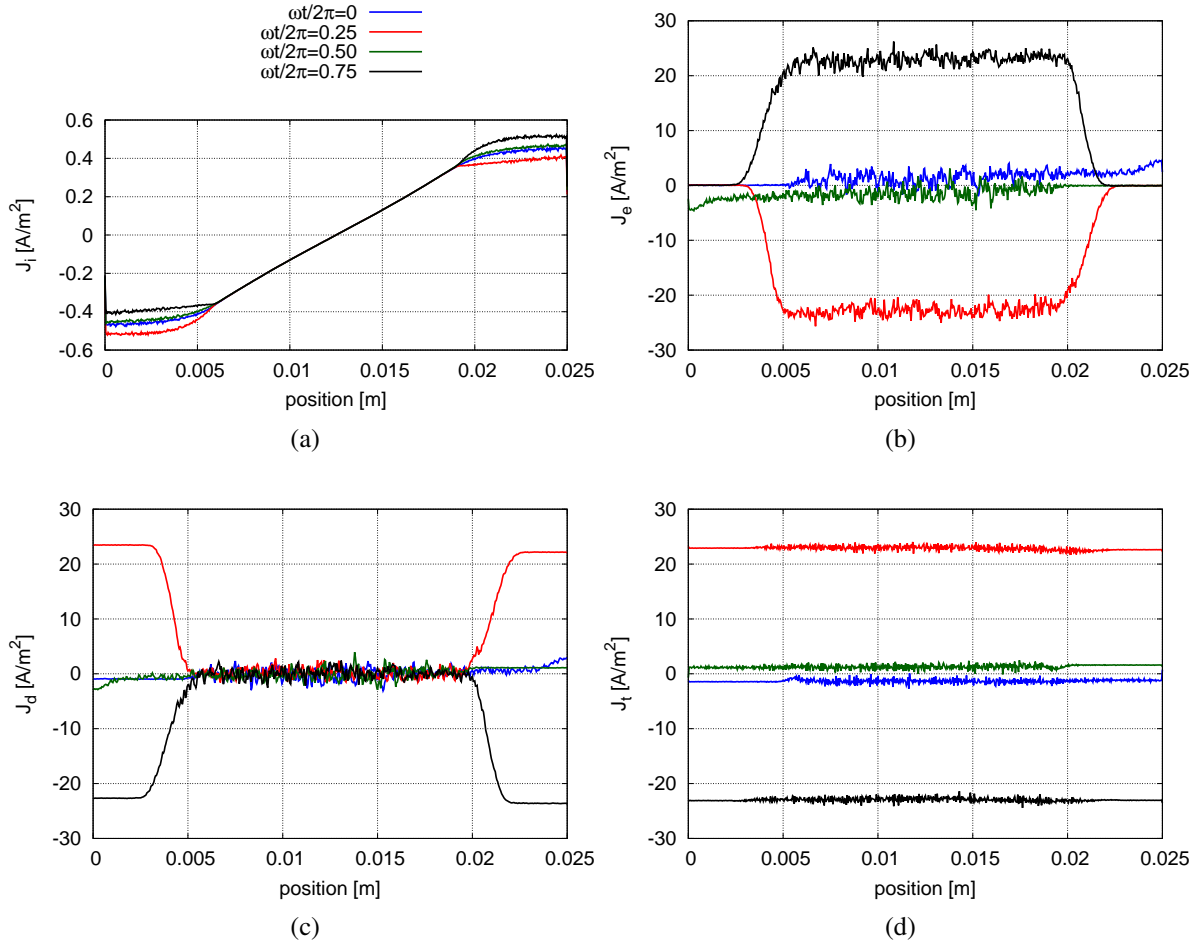
$$D_e = \frac{1}{4} \frac{d \langle R^2 \rangle}{dt} \quad (21)$$

ile bulunabilir. Gerçektende de D_e değeri sabit bir değer etrafında dalgalanmaktadır (elektronlar elektrodalara çarpıp yok oluncaya kadar).

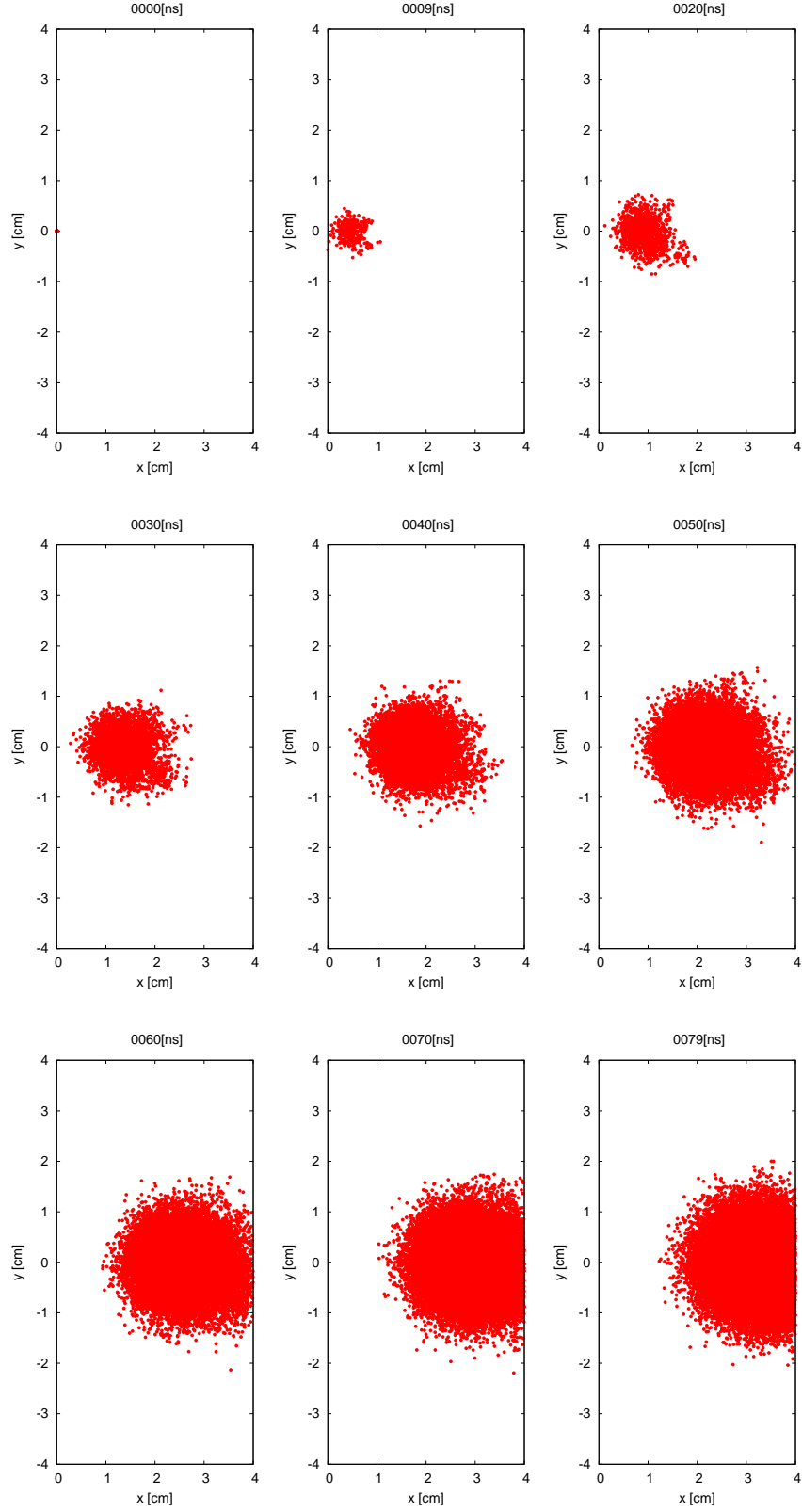
Elektronların ortalama enerjilerinin zamana bağlı değişimi de şekil 23-e'da görülebilir. Einstein bağıntısı (Einstein's relation)

$$D_e = \mu_e T_g \quad (22)$$

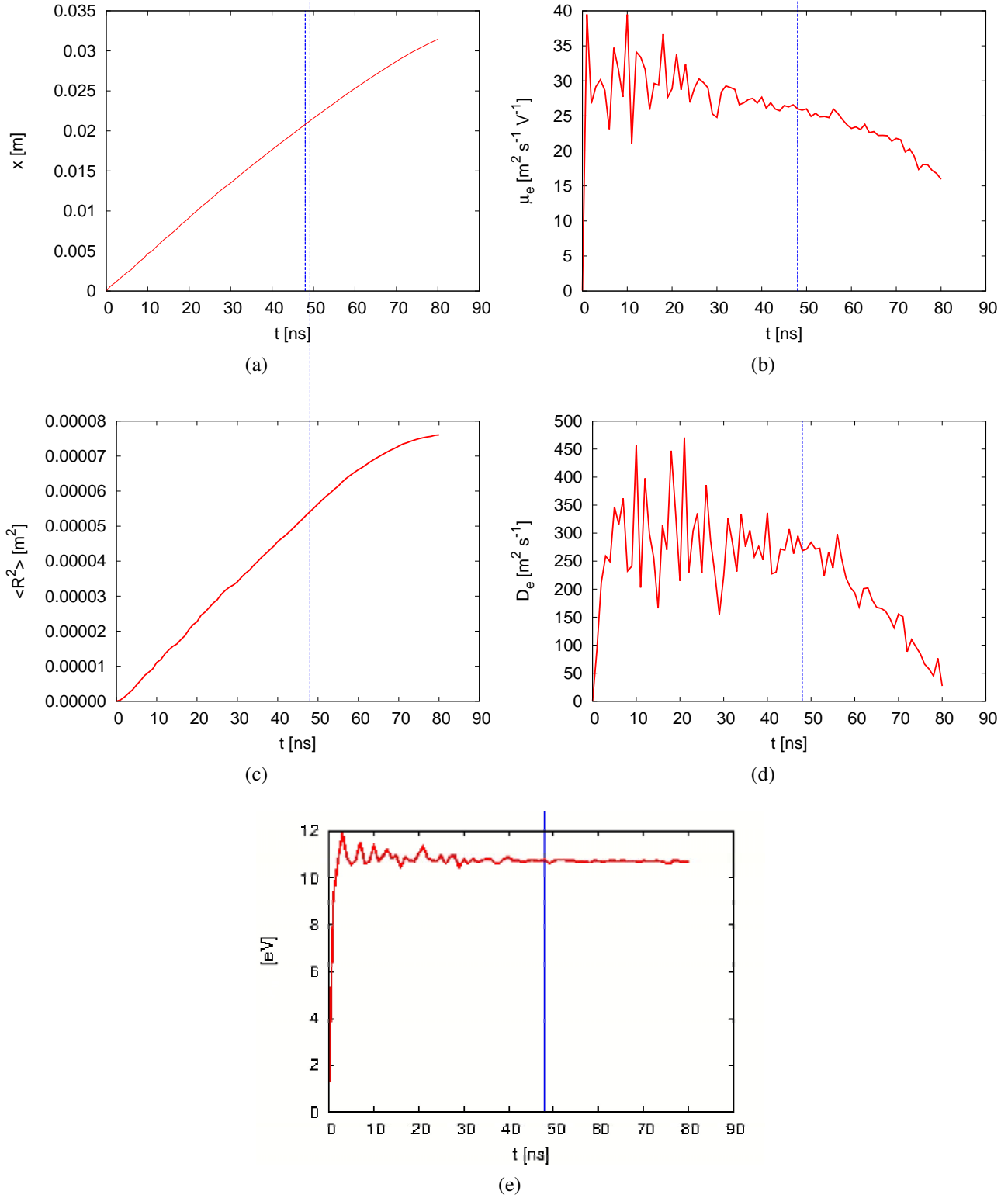
yaklaşık olarak doğrulanmaktadır. T_g eV cinsinden elektronların sıcaklığıdır. Diğer bir ilgi çekici nokta ise elektron swarmında D_e ve ν_e değerlerini elde edebilmek için belli bir süre geçmesi ya da belli bir



Şekil 21: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $W_e=W_i=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için $\omega t/2\pi = 0, \omega t/2\pi = 0.25, \omega t/2\pi = 0.50, \omega t/2\pi = 0.75$ anlarındaki (a) iyon akım yoğunluğu, (b) elektron akım yoğunluğu, (c) displacement akım yoğunluğu ve (d) toplam akım yoğunluğu grafikleri.



Şekil 22: $L = 4$ cm, $p = 1$ Torr, $T = 300$ K, $E/n = 467.13 \times 10^{-21} V m^2$ argon gazı Townsend analizinden elde zamana göre değişen başlangıçta sayıları 100 olan elektronların çoğalma, drift ve difüzyon xy düzleminde gözlemlenen hareketleri.



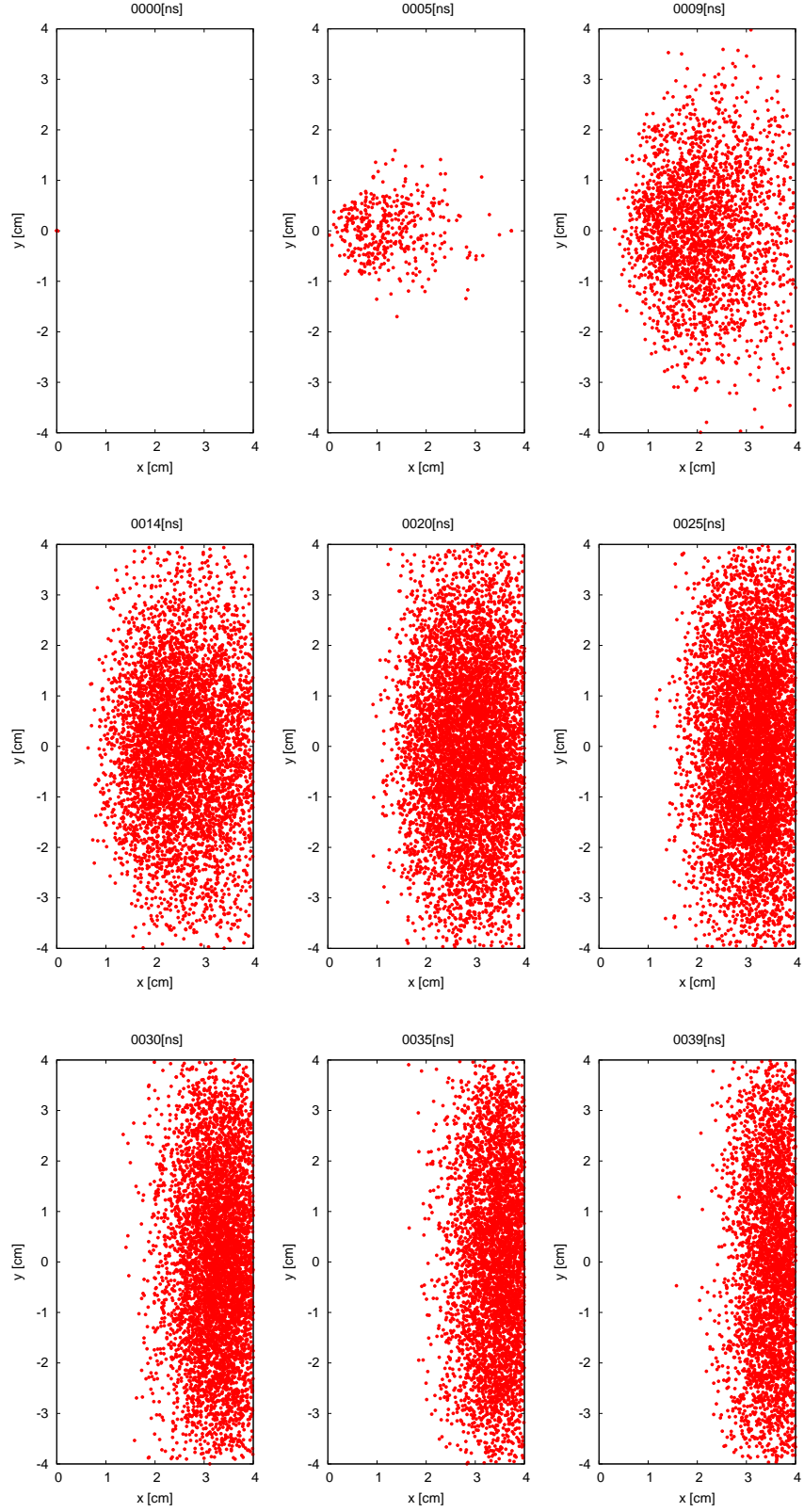
Şekil 23: $L = 4$ cm, $p = 1$ Torr, $T = 300$ K, $E/n = 467.13 \times 10^{-21} \text{Vm}^2$ argon gazı Townsend analizinden elde edilen sonuçlar. Grafikler 1 ns çözünürlüktedir. (a) Elektronların ağırlık merkezi x pozisyonunun zamana göre değişimi, (b) Analizden elde edilen difüzyon sabiti zaman göre değişimi, (c) Elektronların ağırlık merkezine göre ortalama yarıçaplarının zamana göre değişimi, (d) Analizden elde edilen mobility sabitinin zaman göre değişimi, (e) Elektronların ortalama enerjisinin zamana göre değişimi. Zaman yaklaşık olarak 48 ns olduğu durumda elektronlar anoda çarpmaya başlamıştır. Dikey çizgiler yaklaşık olarak elektronların gruplar halinde katoda çarpmaya başladığı anı göstermektedir.

mesafe gerektiğidir. Yani burada bulduğumuz parametreleri drift-diffusion yaklaşımında kullanabilmek için elektrik alan değerinin deşarjda çok hızlı deęişmemesi gerekmektedir. Bu çalışma ile

$$\lambda \frac{dE}{dx} \ll E, \quad (23)$$

(DONKÓ, 2006) gerekliliğinin akışkan yöntemleri açısından ne kadar önemli olduđu tekrar ortaya çıkmıştır.

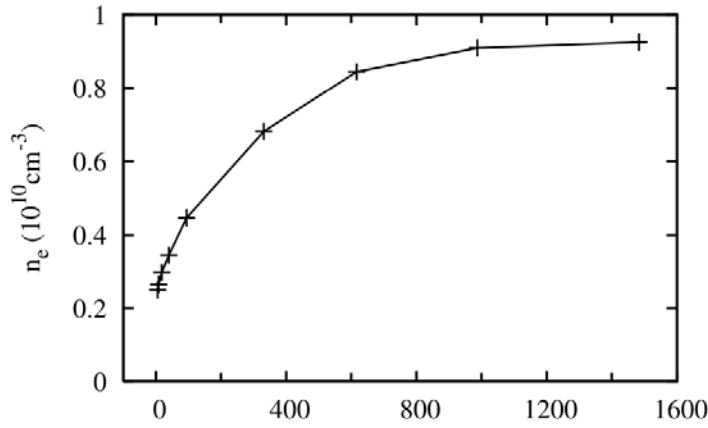
Şekil 22 ve 23'deki sonuçlar 1 Torr gaz basıncında yapılan analiz içindi. Eğer diđer parametreleri sabit tutup aynı simülasyonu 0.1 Torr için yapınca şekil 24'daki sonuçları elde ettik. Bu durumda basınç azaldığından dolayı parçacıkları mean free pathi artmış, plazma boyutları da yetersiz kaldığı için elektronların grup halindeki hareketleri bozulmuştur.



Şekil 24: $L = 4$ cm, $p = 0.1$ Torr, $T = 300$ K, $E/n = 467.13 \times 10^{-21} Vm^2$ argon gazı Townsend analizinden elde zamana göre değişen başlangıçta sayıları 100 olan elektronların zamana bağlı hareketleri.

4 PARÇACIK AĞIRLIKLARININ SONUÇLARA OLAN ETKİSİ

PIC/MCC simülasyonlarında genel kabüllerden birisi de istatistiksel olarak doğru sonuçlar alabilmek için grid başına en az 100 parçacık düşmesidir. Bir çok araştırmada da sadece 100 rakamının üstüne çıkmanın stokastik hatalı engellemek için yeterli olduğu düşünülmüştür (WANG, 2011; TURNER, 2006; VAHEDI, 1993). Fakat işin detayına inip, kullanılan parçacık sayısının göre simülasyon sonuçlarının nasıl değiştirdiğiyle ilgili fazla bir araştırmaya rastlayamadık. Donko (DONKÓ, 2006) DC PIC/MCC analizleri için kullanılan parçacık sayısına göre yüklü parçacık yoğunluklarını ve elektron enerji dağılım fonksiyonunu incelemiş ve DC için PIC/MCC modelini çok başarılı olamayacağı kanaatine varmıştır. RF PIC/MCC modelleri içinse kullanılan parçacık sayısının analiz sonuçlarını nasıl etkilediğine Kim (KIM, 2005) kısaca değinmiştir. Şekil 25’de



Şekil 25: Bir hücre içerisinde kullanılan süper elektron sayısına bağlı elektron yoğunluk grafiği (KIM, 2005)

1D RF PIC/MCC analizimizdeki kullandığımız parçacık sayısı ile oynayarak benzer ama çok daha detaylı bir çalışma yaptık. Problem olarak gene Tablo 1’deki değişkenleri kullandık ve sadece analizde kullanılan süper parçacık sayısını değişken tuttuk. Tablo 2’de her bir analizimizde kullanılan parçacık sayıları ve sonuçlara etkileri görülmektedir.

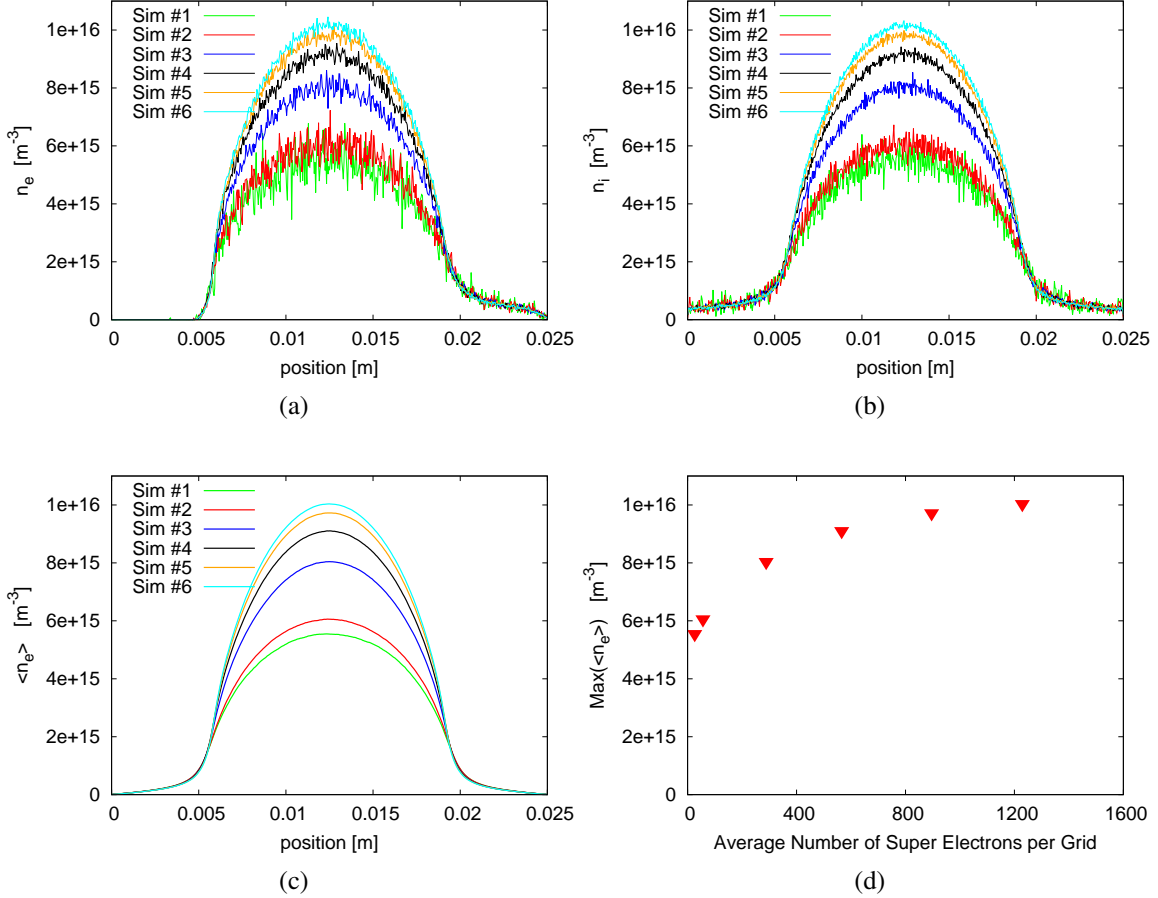
Tablo 2: Simülasyonlara parçacık ağırlıklarının etkisi

(a) Simülasyon sonundaki ($t \cong 7.37 \times 10^{-5} s$) toplam süper elektron sayısı, ve (b) Grid başına düşen ortalama süper elektron sayısı

Simülasyon No	Parçacık Ağırlığı (W)	(a)	(b)
1	41.7×10^8	15746	26.24
2	20.8×10^8	33822	56.37
3	5.2×10^8	173054	288.42
4	3.0×10^8	339532	565.89
4	2.0×10^8	537500	895.83
6	1.5×10^8	737316	1228.86

4.1 Kullanılan Süper Parçacık Sayısının Yoğunluklara Olan Etkisi

Öncelikli amacımız Şekil 25’ü doğrulamaktı. Gerçekten de analizde kullandığımız parçacık sayısını artırdığımızda yoğunluk değerlerinin de arttığını gördük (Şekil 26-a,b,c). Bu profillerdeki en yüksek yoğunluk değerlerini alıp grid başına düşen parçacık sayısına bağlı olarak 26-d’de çizdirdik. Şekilde parçacık sayısı arttıkça analizin bir yakınsamaya gittiği aşıkardır. Yoğunluk profillerindeki incelenmesi gereken diğer bir nokta da iyonlardaki gürültünün elektronlara göre daha az olduğu ve parçacık sayısı arttıkça gürültü oranının gözle görülür bir biçimde düştüğüdür.



Şekil 26: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f=13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma=0.1$, $W_e=W_i=1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri ve 6 farklı süper parçacık ağırlığı için $\omega t/2\pi = 0$ anındaki (a) elektron yoğunluk profilleri, (b) iyon yoğunluk profilleri, (c) 1 RF çevrimindeki ortalama elektron yoğunluk profilleri, (d) grid başına ortalama düşen süper elektron sayısına göre maksimum elektron yoğunluk değerlerinin değişimi.

4.2 Kullanılan Süper Parçacık Sayısının Akım Değerlerine Olan Etkisi

Şekil 29,28,30,31’de görüleceği üzere simülasyonumuzdaki kullandığımız parçacık sayısı ile oynamanın akım değerlerine çok fazla bir etkisi yoktur. Ancak daha fazla parçacık kullanmanın gürültüyü azalttığı

aşıkardır.

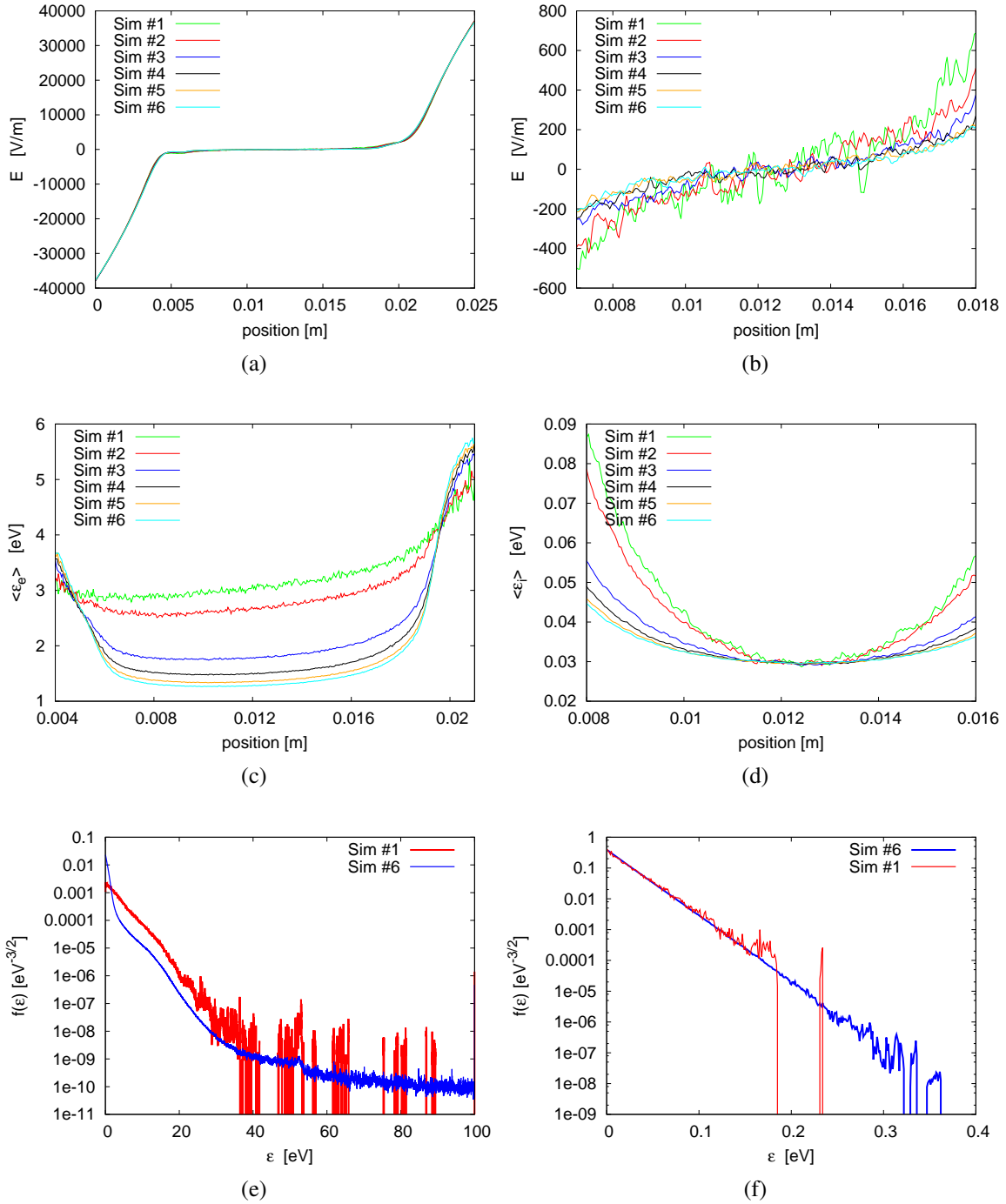
4.3 Kullanılan Süper Parçacık Sayısının Elektrik Alan Değerlerine Etkisi

İlk bakışta süper parçacık ağırlıklarının elektrik alan profiline çok fazla etki etmedikleri gözükmemektedir (Şekil 27-a). Ancak quasineutral bölgedeki elektrik alanın gürültüsü ve mutlak değeri kullanılan parçacık sayısı arttıkça azalmaktadır (Şekil 27-b). Bu durumun parçacıkların ortalama enerji değerlerini etkilediğini düşünüyoruz.

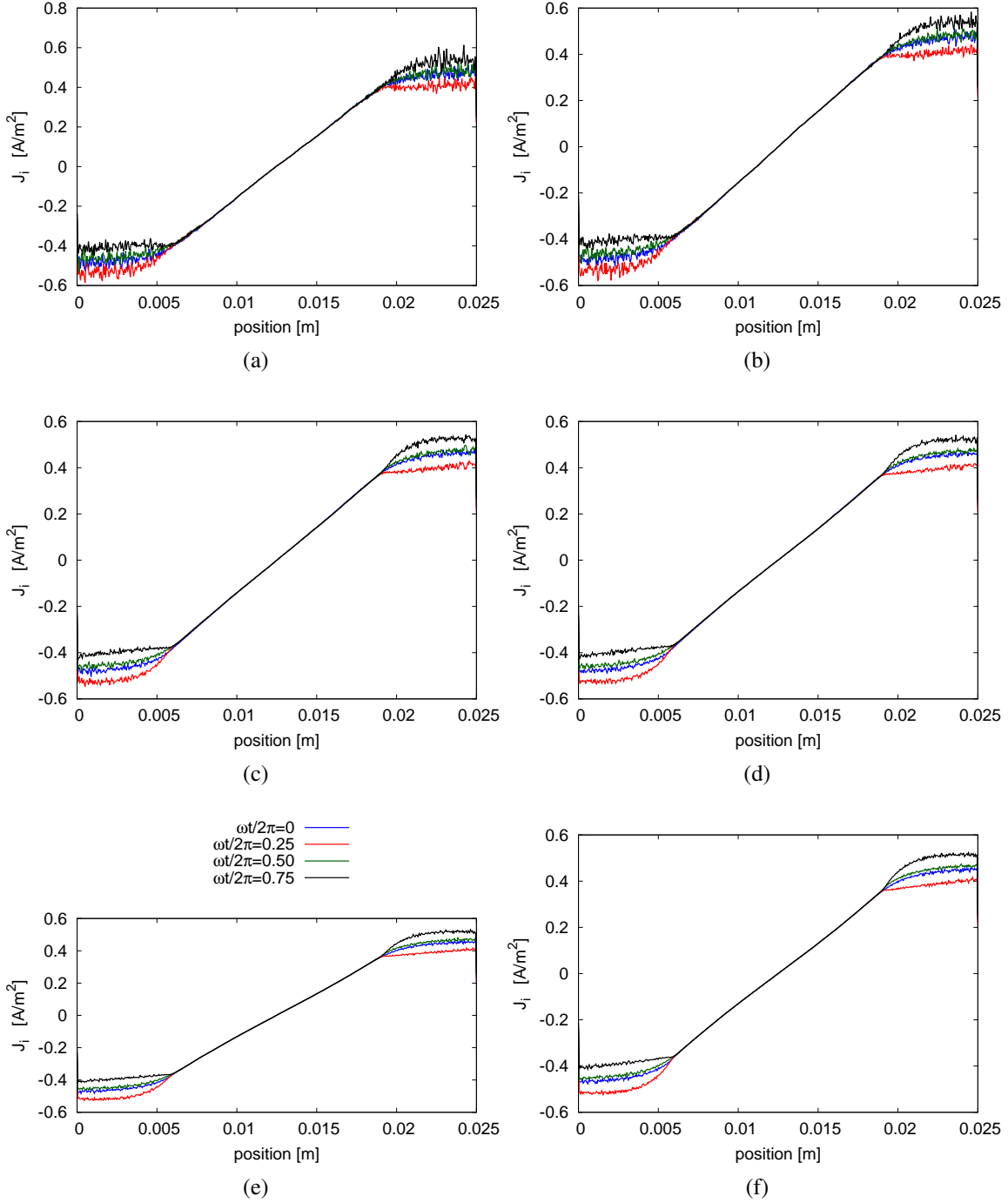
4.4 Kullanılan Süper Parçacık Sayısının Enerji Dağılımına Etkisi

Şekil 27-c ve d'de $\omega t/2\pi = 0$ anındaki pozisyona göre ortalama iyon ve elektron enerji dağılım grafikleri görülmektedir. Sonuçlar arasında ciddi farklar vardır. Kullanılan parçacık sayısı arttıkça grid noktalarındaki ortalama enerjiler de düşmektedir. En önemli nokta ise parçacık sayısı arttıkça iyonların merkez bölgedeki ortalama enerjisi beklediğimiz gibi gazın sıcaklığına daha da yaklaşmaktadır.

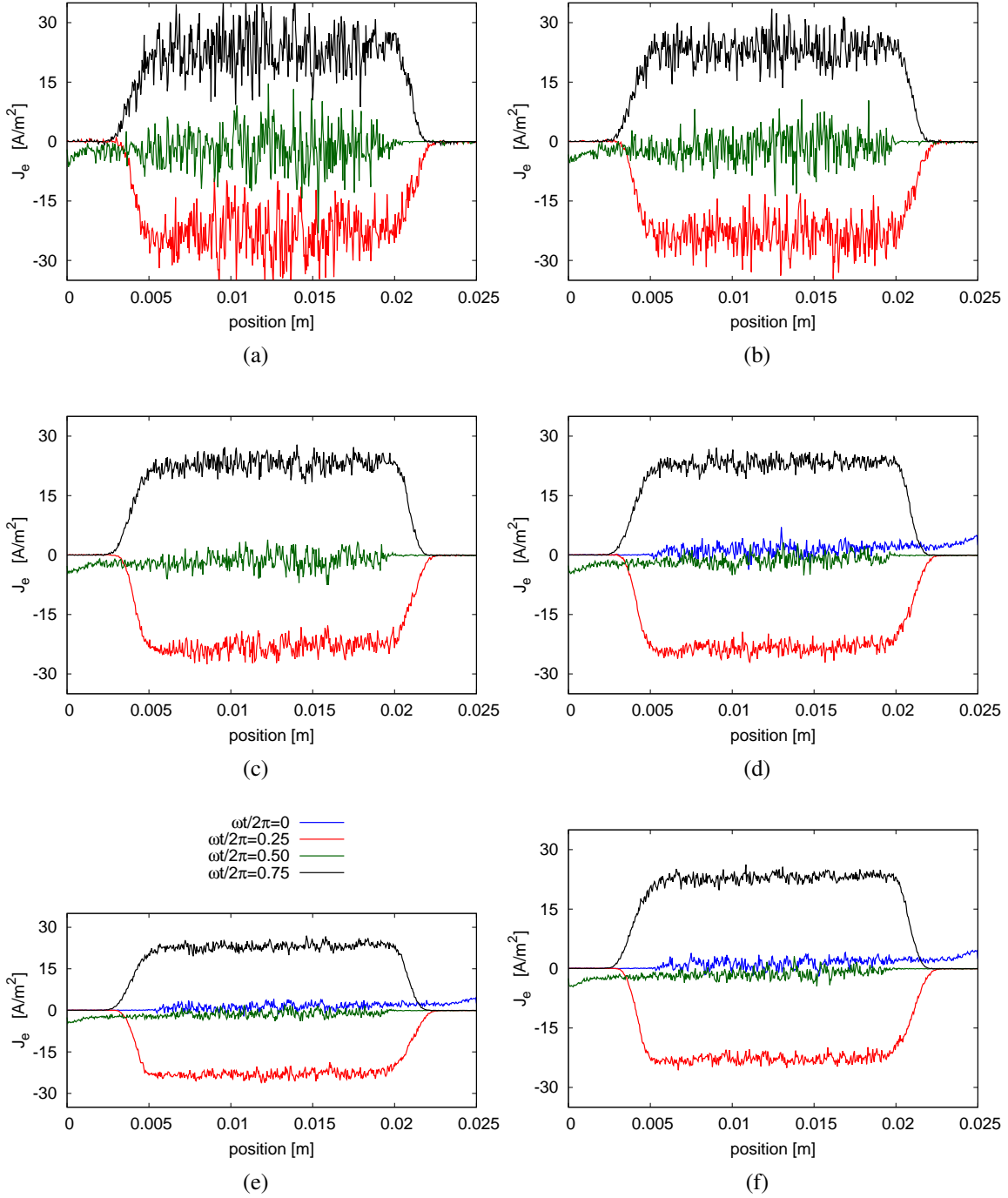
Kullanılan parçacık sayısına göre merkez bölgedeki iyon ve elektron enerji dağılım fonksiyonlarını da inceledik (Şekil 27-e ve f). Süper elektronlar için ağırlık (weighting) arttıkça daha Maxwellian ve daha yüksek enerjili bir profille karşılaşmaktayız. Bunun nedeni merkezdeki elektrik alandaki dalgalanma ve yüksek weighting'lerdeki elektrik alan mutlak değerinin daha yüksek olması olabilir. Bu yüzden quasineutral bölge içindeki elektronlar daha yüksek hızlara sahip olurlar ve nötral atomlarla daha çok çarpışma yaptıkları için de Maxwellian dağılım profiline yaklaşırlar. İyonların ise neredeyse her weighting değerinde Maxwellian bir profil çizdiği görülmektedir.



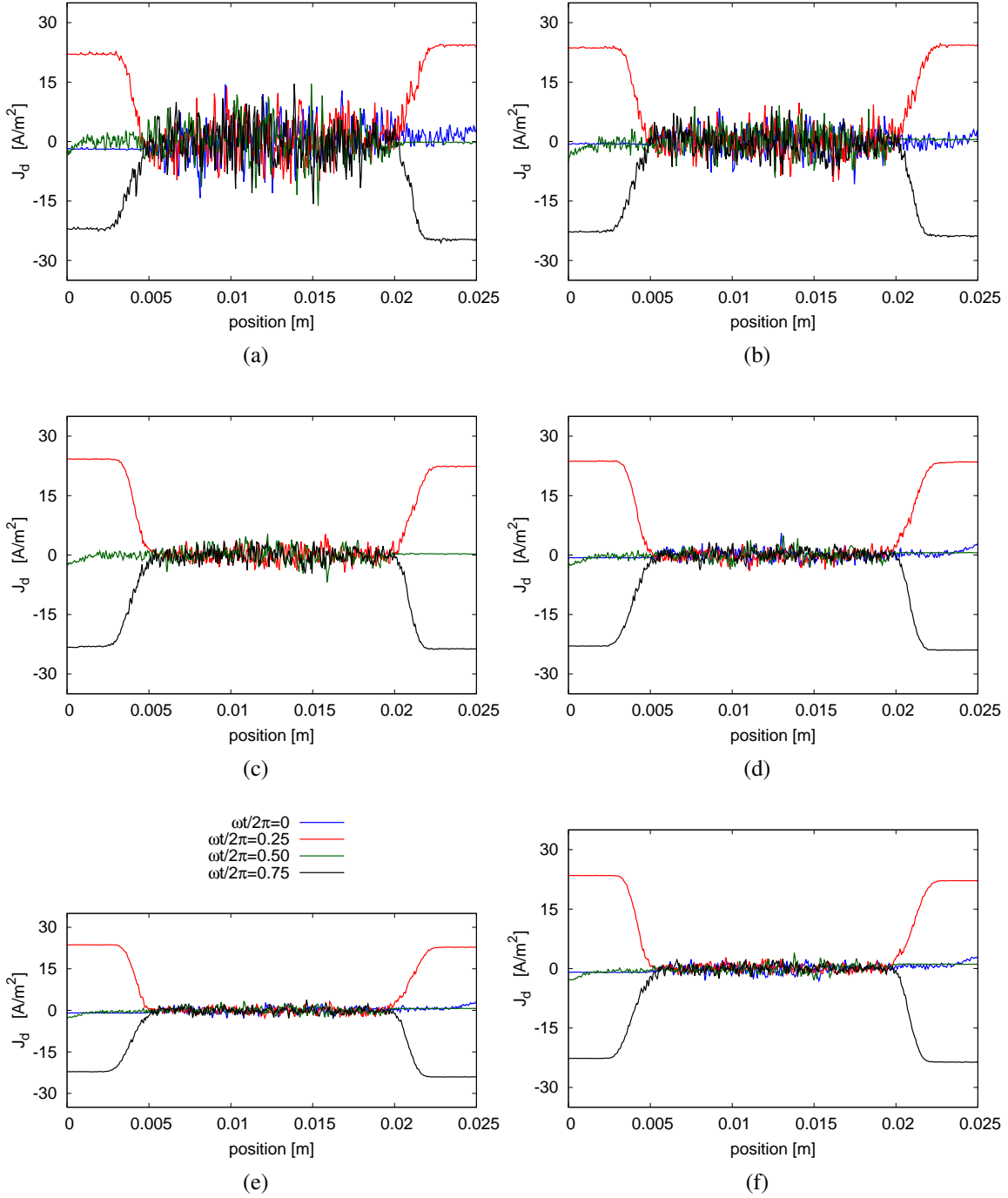
Şekil 27: $p = 10$ Pa, $T = 350$ K, $V = 250$ V, $f = 13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $\gamma = 0.1$, $W_e = W_i = 1.5 \times 10^8$ problem ve çözüm parametreleri için $\omega t / 2\pi = 0$ anındaki (a) 6 farklı süper parçacık ağırlığı için elektrik alan profilleri, (b) 6 farklı süper parçacık ağırlığı için merkez bölge detay elektrik alan profilleri, (c) 6 farklı süper parçacık ağırlığı için merkez bölge ortalama elektron enerji profilleri, (d) 6 farklı süper parçacık ağırlığı için merkez bölge ortalama iyon enerji profilleri, (e) 2 farklı süper parçacık ağırlığı için eedf profilleri, (f) 2 farklı süper parçacık ağırlığı için iedf profilleri.



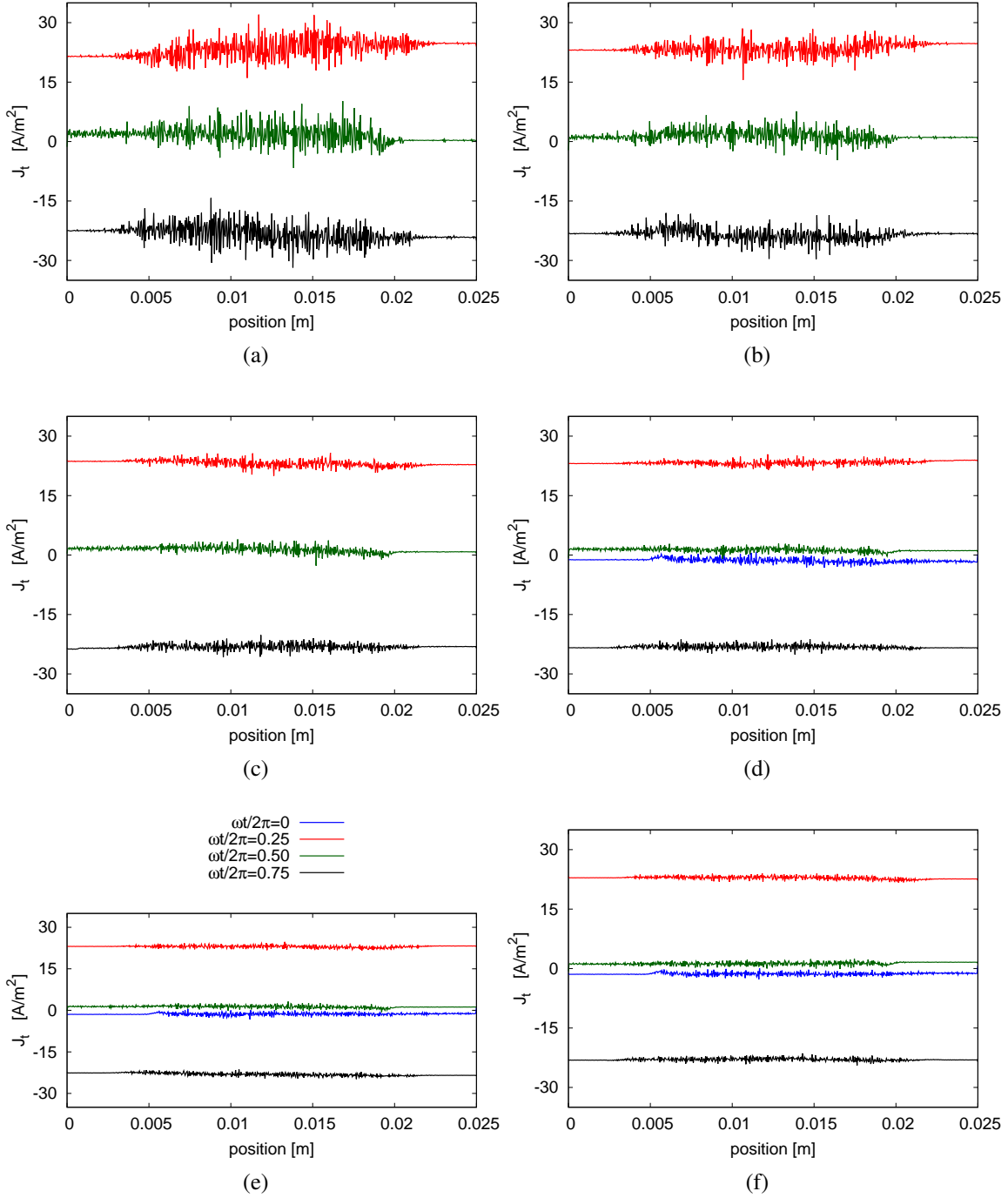
Şekil 28: Parçacık ağırlıklarının iyon akım yoğunluklarına olan etkisi (a) Simulasyon # 1, (b) Simulasyon # 2, (c) Simulasyon # 3, (d) Simulasyon # 4, (e) Simulasyon # 5, (f) Simulasyon # 6. Not: (d)'deki legend tüm şekiller için geçerlidir.



Şekil 29: Parçacık ağırlıklarının elektron akım yoğunluklarına olan etkisi (a) Simulasyon # 1, (b) Simulasyon # 2, (c) Simulasyon # 3, (d) Simulasyon # 4, (e) Simulasyon # 5, (f) Simulasyon # 6. Not: (d)'deki legend tüm şekiller için geçerlidir.



Şekil 30: Parçacık ağırlıklarının displacement akım yoğunluklarına olan etkisi (a) Simulasyon # 1, (b) Simulasyon # 2, (c) Simulasyon # 3, (d) Simulasyon # 4, (e) Simulasyon # 5, (f) Simulasyon # 6. Not: (d)'deki legend tüm şekiller için geçerlidir.



Şekil 31: Parçacık ağırlıklarının toplam akım yoğunluklarına olan etkisi (a) Simulasyon # 1, (b) Simulasyon # 2, (c) Simulasyon # 3, (d) Simulasyon # 4, (e) Simulasyon # 5, (f) Simulasyon # 6. Not: (d)'deki legend tüm şekiller için geçerlidir.

5 ELEKTRON SPECTROSCOPY YÖNTEMLERİ ve PIC/MCC UYGULAMALARI

Plasma electron spectroscopy (PLES) ve collisional electron spectroscopy (CES) yöntemleri gaz analizi için kullanılan iki yöntemdir. Bu metodlarla ilgili detaylar ve teori bölüm 5.1’de verilmiştir. Bu kısımdaki amacımız CES yöntemini PIC/MCC ile modelleyebilmektir.

Daha önceki çalışmalarımızda da belirttiğimiz gibi PIC/MCC analizlerinde kullanılan parçacık sayısı radyo-frekans (RF) plazmalarında alınan sonuçları, özellikle de electron enerji dağılım fonksiyon grafiğini ve quasineutral bölgedeki elektrik alan değerlerini etkiliyordu. Bölüm 5.2’de ise CES uygulaması yapılan bir plazmadaki quasineutral bölgedeki elektrik alan veya elektrik potansiyel konfigürasyonun neden çok önemli olduğu, ve parçacık sayısının CES analizleri sırasında nelere dikkat edilmesi gerektiğini Penning elektronlar için özel hazırlanan bir PIC/MCC analizi yardımıyla araştırdık.

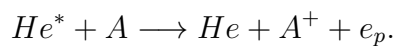
Yukarıda belirtilen elektronlar için hazırlanmış kinetik koda ek olarak, DC helyum-argon gaz karışımlarının collisional electron spectroscopy ile analizi için bir de PIC/MCC parçacık modeli hazırlanmıştır. Modelle ilgili detaylar 5.3’de belirtilmiş, gene aynı bölümde bahsi geçen plazma paralel işlemcilerde çalıştırılıp sonuçlar irdelenmiştir.

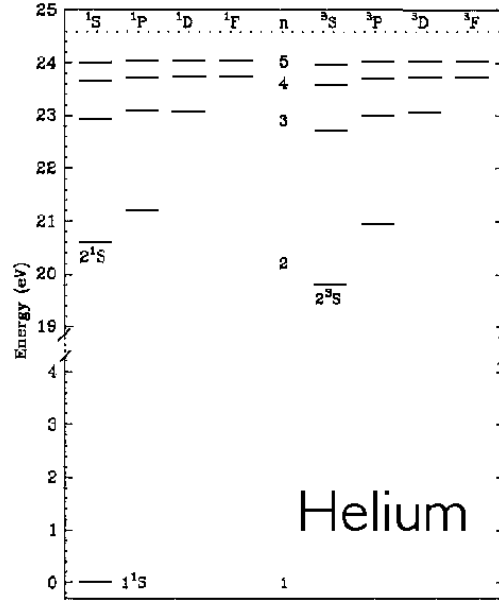
5.1 Teori ve Daha Önceki Çalışmalar

Bir gazın bileşimini öğrenebilmek için kullanılan mevcut yöntemler chromatography, mass spectroscopy, geleneksel electron spectroscopy vs. olarak sıralanabilir. Bu yöntemler için kullanılan cihazlar genelde büyük ve kompleks yapılara sahip, aynı zamanda derin vakumlara gereksinim duyarlan pahalı cihazlardır. Bu metodlara ek olarak, plazma electron spectroscopy (PLES) metodu penning ionization sonucu ortaya çıkan elektronların electron enerji dağılım fonksiyonlarının (eedf) incelenerek, helyum gazının içindeki yabancı maddelerin bulunmasını sağlar (CHIRTSOV, 2011).

PLES yönteminin daha yüksek basınçlarda uygulanabilir bir çeşidi olan Collisional electron spectroscopy (CES) ise uygun koşullar altındaki "after glow discharge" veya "short DC negative glow discharge" plazmalarda uygulanabilmektedir. Yerel olmayan (nonlocal) eedf profilinden helium gazı içindeki yabancı molekül ve de atomlar bulunabilmektedir.

Helyum gazını uyarılma enerjisi (excitation) diğer atom ya da moleküllerle karşılaştırıldığında oldukça yüksektir. Şekil 32’de helyum gazının çeşitli uyarılma enerjileri, şekil 33’de ise çeşitli atomların iyonlaşma enerjileri verilmiştir. Dikkat edilirse helyum gazının uyarılma enerjileri neon hariç tüm atomların iyonlaşma enerjilerinden yüksektir. Yani uyarılmış bir helyum atomu ground state her hangi bir atoma (neon hariç) çarptığında o atomu iyonlaştırabilir. Bu reaksiyona Penning ionization denilmektedir. Örnek bir Penning ionization reaksiyonunu aşağıdaki gibi gösterebiliriz,





Şekil 32: Helyum atomu enerji seviyeleri

(http://raptor.physics.wisc.edu/talk/helium_e.gif).

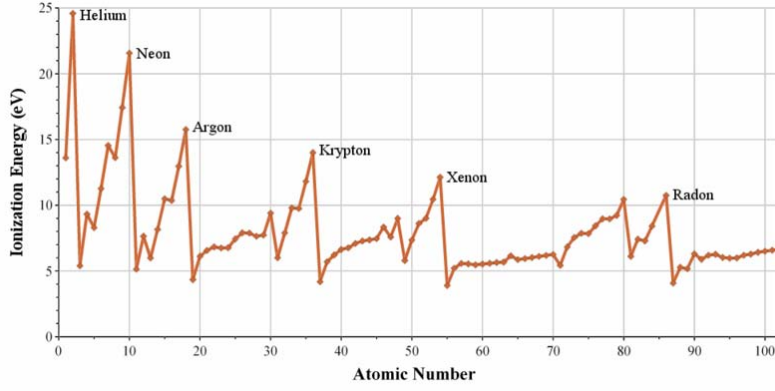
He^* uyarılmış helyum atomu, A temel enerji seviyesindeki hedef atomu, A^+ iyonlaşmış A atomuna, e_p ise belirli enerjideki elektrona karşılık gelmektedirler. e_p elektronunun enerji değeri her bir reaksiyon için sabittir, değişmez:

$$e_p = \text{Uyarılmış helyum atomunun enerjisi} - A \text{ atomunun iyonlaşma enerjisi.}$$

Ortaya çıkan penning elektronlar enerjilerini kaybetmezlerse; plazmada o enerjiye karşılık gelen eedf çevresinde bir tepe gözlemlenebilir. Bu ölçülen e_p değeri hedef atom ya da moleküle, dolayısıyla reaksiyona göre farklılık gösterir. Yani bu değer reaksiyonun parmak izidir. Buraya kadarki anlatılan teori CES ve PLES için ortaktır. PLES yöntemi bu uygulama için düşük basınçlı ortamlara ihtiyaç duyar, çünkü amaç ortaya çıkan belli enerjideki elektronların elastik ve de inelastik çarpışmalarla enerjileri kaybetmesi, dolayısıyla direkt olarak gözlemlenebilmeleridir.

CES yönteminde PLES'e göre daha yüksek basınçlarda plazma oluşturulmaktadır. Ortaya çıkan elektronların çok fazla çarpışma yapması engellenirse CES yöntemi yüksek basınçlarda uygulanabilir. Ancak bu tekniğin uygulanabilmesi için plazma çeşitli özelliklere sahip olmalıdır. Bu özellikleri kısaca özetlersek:

- Yüksek metastable yoğunluğu ya da üretimi
- Yüksek Penning ionization üretimi
- Quasineutral bölgesi için düşük elektron sıcaklığı, dolayısıyla düşük elektrik alan değeri
- Kısa boyutlar



Şekil 33: Atom numaralarına göre iyonlaşma enerjilerinin değişimi

(http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Ionization_energies.png).

- Düşük çalışma voltajı
- Nispeten yüksek basınç değerleri

Quasineutral bölgede oluşan Penning electronlar nötral arka plan gazıyla yaptıkları her elastik çarpışmada enerjilerinin oldukça küçük bir kısmını kaybetmektedirler. Bu oran elastik çarpışmada kinetik enerji ve momentumun korunmaları ilkesinden bulunabilir (DONKÓ, 2010),

$$\delta = 2(1 - \cos(\chi)) \frac{m_e}{M}. \quad (24)$$

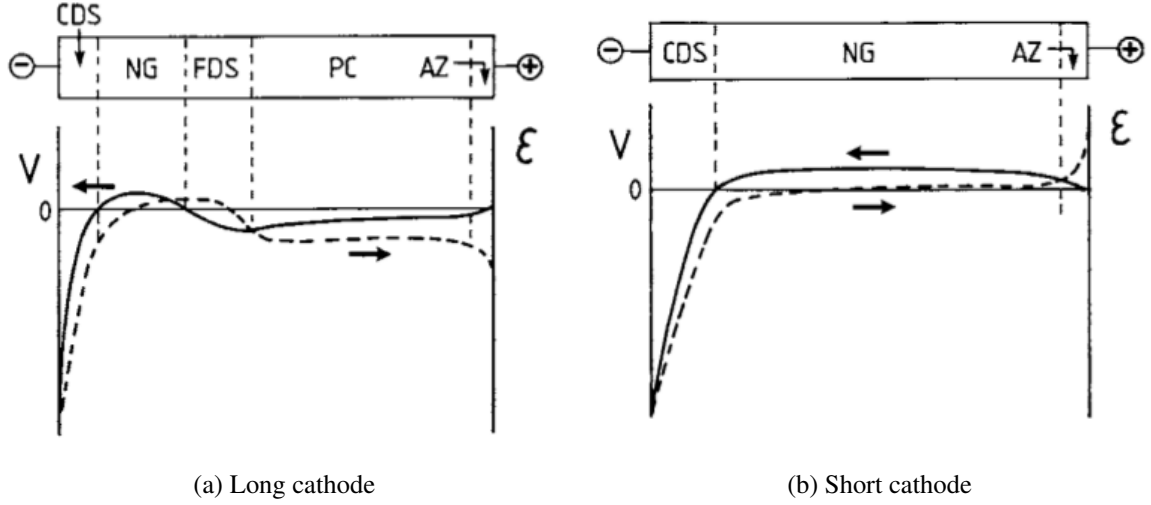
Burada χ çarpışma sonrası saçılma açısı (rad), m_e elektronun, M ise helyum atomunun kütesidir. Elektronlar her nötral helyum atomuyla çarpışma yaptıklarında, enerjilerinin yaklaşık $2 \times (9.109 \times 10^{-31}) / (6.67 \times 10^{-27}) \approx 1.37 \times 10^{-4}$ oranında kaybederler. Penning ionization sonucu belli enerjide ortaya çıkan elektronların enerjilerinin kaybetmeleri, daha doğrusu Maxwellian bir dağılım almaları için geçecek süre (relaxation time) şu şekilde yazılabilir,

$$\tau_e = \frac{1}{\delta\nu}.$$

Formülde; τ electron energy relaxation time, ν ise elastik elektron-atom çarpışma frekansıdır. Relaxation süresinde elektronlar λ_e (energy relaxation length) kadar mesafe kat ederler. λ_e kritik bir değerdir. Eğer plazmanın boyutları bu değere yaklaşırsa, ya da daha yüksekse, penning ionization sonucu ortaya çıkmış elektronlar elektrodalara giderken enerjilerini kaybedecekler dolayısıyla eedf'da gözlemlenemeyeceklerdir. Eğer;

$$L \times p \simeq 3 - 5 \text{ [Torr} \cdot \text{cm]}$$

olarak seçilirse (burada L elektrodlar arası mesafe, p ise basınçtır), elektronlar enerjilerini kaybetmek için (yeterince çarpışma yapamayacaklarından) yeterli süre bulamayacaklardır. Gaz deşarjı non-local yani yerel olmayan rejimde oluşacaktır (KUDRYAVTSEV, 2012).



Şekil 34: DC gaz deşarjları için örnek elektrik potansiyel ve elektrik alan grafikleri (BOGAERTS, 2002).

Tüm bunlara ek olarak Penning elektronlarının nasıl bir elektrik potansiyel konfigürasyonunda olduğu da önemlidir. Non-local bir plazmada bulunan bir elektronun toplam enerjisi kinetik ve potansiyel enerjisinin toplamına eşittir:

$$\text{T.E.} = \frac{1}{2}m_e v^2 + e\phi_e$$

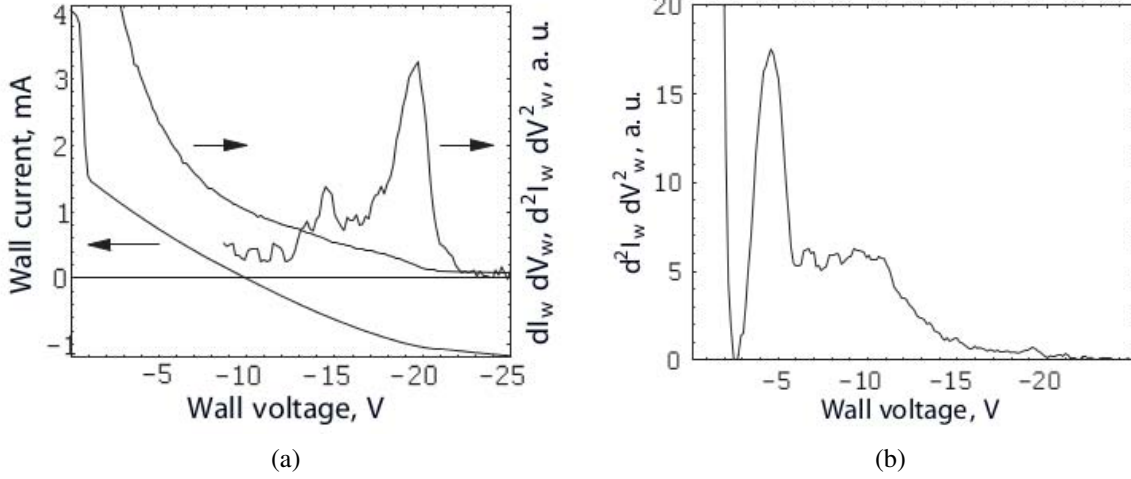
Eedf'de tepe noktası olarak görmek istediğimiz Penning elektronlarının toplam enerjisini koruyabilmeleri için şu şartlar sağlanmalıdır:

1. İnelastik çarpışma (iyonizasyon ya da uyarılma) yapmamalıdır.
2. Çok fazla elastik çarpışma da yapmamalıdır yani non-locality bozulmamalıdır.
3. Elektrodlar ile incelediğimiz elektron grubu arasındaki potansiyel fark düşük olmalıdır.
4. Penning ionization sonucu ortaya çıkan elektronların birbirleri arasındaki potansiyel fark da düşük olmalıdır.

1 ve 2 numaralı maddelerin doğruluğu açık ve nettir. Madde 3 sağlanmazsa parçacıkların üzerine kinetik enerjilerini de değiştirecek ciddi bir elektrik alan etki ediyor demektir. Bu da elektronları enerjilerini bozar. Madde 4'ün sağlanmadığı durumda ise farklı noktalarda oluşmuş Penning elektronlarının farklı potansiyel enerjileri olduğu için farklı noktalarda farklı eedf ölçüm sonuçları alınabilir.

Şekil 34'de iki farklı DC plazma türü için elektrik potansiyel grafikleri verilmiştir. Bu plazmaların quasi-neutral bölgelerini CES analizleri için uygunluklarına göre incelersek:

- a) Uzun elektrod mesafesine (long cathode discharge) sahip bir gaz deşarj plazması için de merkez bölgedeki elektrik potansiyel değişkendir. Madde 3 sağlanmamaktadır. Dolayısıyla böyle bir plazma da uygun değildir.



Şekil 35: a) Eedf'in wall probe tarafından ölçülen akım-potansiyel grafiği yardımı ile bulunması b) Torr, 4 mm DC He-Ar karışımının wall probe yardımıyla elde edilmiş eedf grafiği (DEMIDOV, 2010).

b) Short cathode (kısa katot) konfigürasyonlu bir DC gaz deşarı için quasineutral bölge ile elektrod arası potansiyel fark düşükse, böyle bir konfigürasyon CES için uygun olabilir.

CES yöntemine göre düşük elektron enerjili short cathode DC gaz deşarjlarında, plazmanın hangi noktasında elektronların enerji dağılım fonksiyonları ölçülürse ölçülsün aynı sonucun elde edileceği belirtilmekte ve tüm plazma hacmi hakkında bilgi alınabileceği belirtilmiştir (KUDRYAVTSEV, 2012).

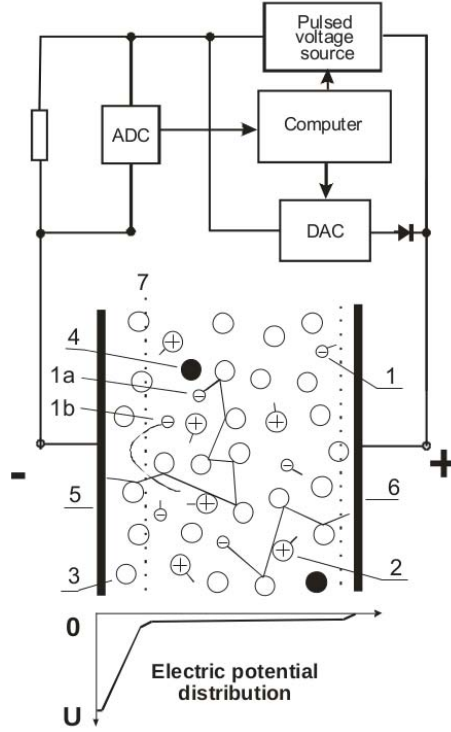
Bugüne kadar yapılmış olan CES deneylerine değinirsek, öncelikle ölçümlerin nasıl yapıldığı hakkında bilgi vermemiz gerekmektedir. Plazmaya bırakılan bir probe'un elektrik akım - potansiyel grafiğinin ikinci türevi alınır, eedfle orantılı bir grafik elde edilebilir (DEMIDOV, 2010). Şekil 35 a'da bu bağıntı grafiksel olarak örneklenmiştir. Yani bu yöntemi kullanarak plazmaların eedfleri ölçülebilir ve CES yöntemi deneysel olarak doğrulanabilir. Gerçekten de yapılan deneysel çalışmalarda ortaya çıkan dominant reaksiyonların elektronlarının enerjileri eedf üzerinde görülmektedir. Şekil 35-b'de helyum-argon karışımı gaz deşarj plazmasının duvar tipi probe kullanılarak ölçülen elektron enerji dağılım fonksiyonu görülmektedir. 4 [eV] çevresindeki tepe noktası



reaksiyonundan kaynaklanmaktadır. Böyle bir eedf'e bakarak helyum plazması içinde argon gazı olduğu söyleyebiliriz. Konu ile oldukça faydalı olan kaynakta (KUDRYAVTSEV, 2012), dairesel bir probe kullanılarak bir çok gaz karışımı için eedf ölçülmüş ve eedflere bakarak teori deneysel olarak doğrulanmıştır.

5.2 Quasineutral Bölgedeki Elektrik Alan Konfigürasyonun CES'ye Etkisi

Şekil 36'de örnek bir CES dedektörü, ve oluşturulan plazmadaki tahmini elektrik alan grafiği görülmektedir. Plazmayı şekilde gösterilen 3 nolu helyum atomları (ya da uyarılma ve iyonlaşma enerjisi yüksek

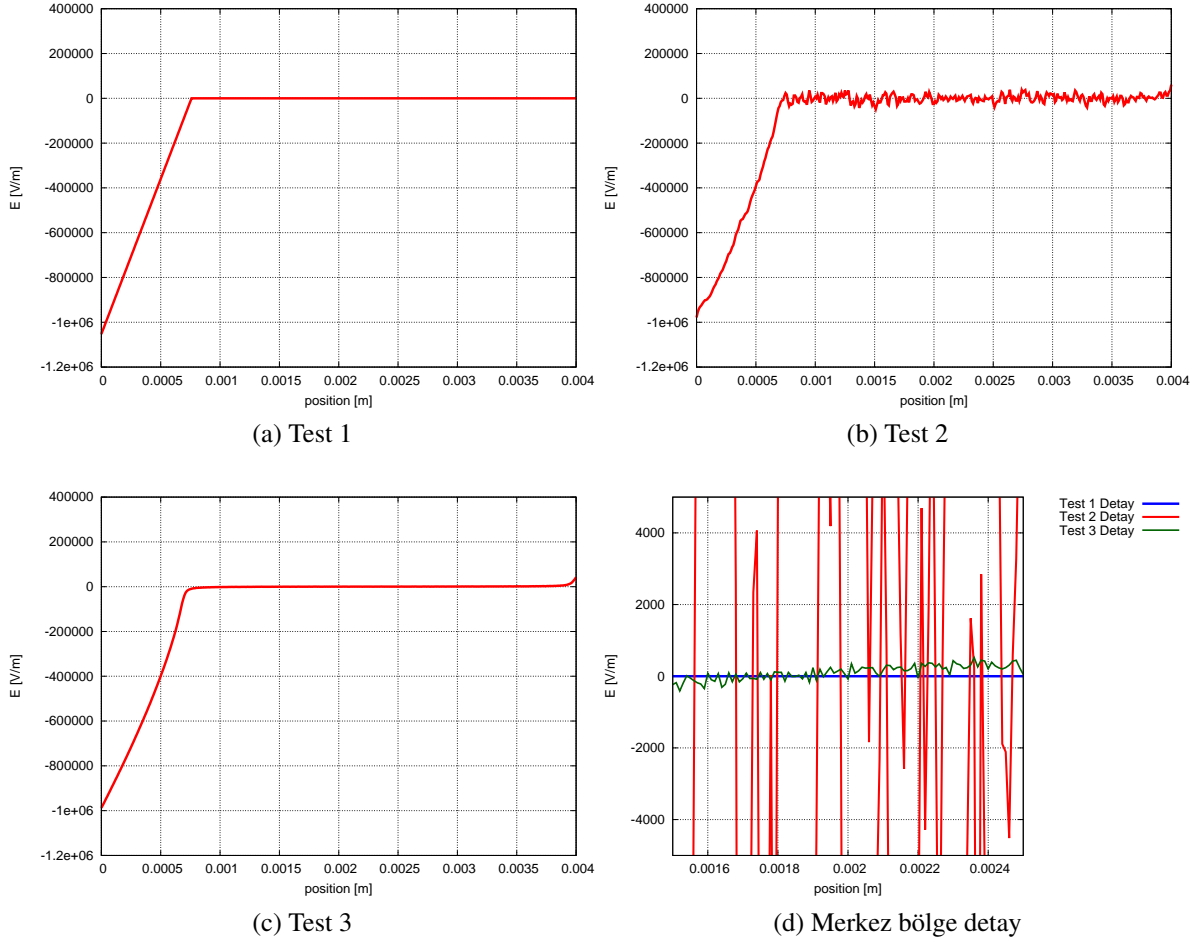


Şekil 36: Örnek CES konfigürasyonu (CHIRTSOV, 2011).

olan bir soy gaz) ve 4 nolu düşük miktarda yabancı (impurity) atomlar oluşturmaktadır. Quasineutral yani elektrik alanın sıfır kabul edildiği bölgede Penning ionization sonucu ortaya çıkacak elektronlar (1, 1a, 1b) elektrodlar arasında elastik çarpışmalar yaşayacak; 1 nolu elektron ve benzerleri quasineutral bölgede hapis olacak, 1a ve 1b ve benzeri elektronlar ise pozitif elektroda ulaşmaya çalışacaklar ve bu sırada sheet bölgesindeki ters yöndeki elektrik alan yüzünden kinetik enerjilerini kaybedecekler, büyük ihtimalle de tekrar quasineutral bölge içine itileceklerdir. Sheet bölgesine gidip gelme sırasında toplam enerji değişmediği için geri dönen elektronların enerjisinden de Penning ionization sonucu ortaya çıkıp çıkmadıkları anlaşılabilir (CHIRTSOV, 2011).

Şekil 36 yardımıyla anlattığımız yaklaşımın doğruluğunu sabit elektrik alan profillerinde (input) penning ionization sonucu oluşan elektronların nasıl hareket ettiği, enerjilerinin çarpışmalar ve hareketleri sonucu nasıl değiştirdiğini kinetik PIC/MCC metoduyla araştırdık. Yaptığımız analizlerden üç tanesinin elektrik alan konfigürasyonları aşağıda verilmiştir:

- Test 1 için yukarıdaki örnekte olduğu gibi, son derece ideal, quasineutral bölgede elektrik alanın olmadığı bir hayali bir elektrik alan profili kullandık. Bknz. şekil 37a.
- Test 2’de DC He-Ar gaz karışım için yaptığımız CES analizinin (daha sonra detaylarını vereceğimiz) 90,000,000’inci zaman adımındaki (16.9×10^{-6} s) elektrik alan profilini aldık. Bu analizde 60,000 süper iyon ve elektron kullanmıştık. Yeterli işlemci-bilgisayar gücümüz olduğu için çok fazla kullanamadığımızdan merkez bölgedeki elektrik alan profilinde oldukça yüksek gürültü görülmektedir. Bknz. şekil 37b.



Şekil 37: Plazma içine bırakılan sabit enerjili (4.06 eV) elektronların zamana bağlı enerji ve hareketlerinin incelendiği testlerin elektrik alan girdileri (a) Test 1, hayali bir DC gaz deşarjının elektrik alan profili (b) Test 2, az parçacık ile yapılan bir DC PIC/MCC analizinden alınmış elektrik alan profili (c) Test 3, gürültüsü oldukça azaltılmış DC PIC/MCC analizinden alınmış elektrik alan profili (d) merkez bölgedeki Test 1, Test 2, ve Test 3 elektrik alan profilleri detayı.

c) Test 3’de ise Test 2’deki analizin 88,000,000 - 90,000,000 zaman adımları arasındaki ortalama elektrik alan profilini kullandık. Bknz. şekil 37c.

Daha sonra her bir elektrik alan profili için ayrı ayrı, gaz deşarjında en yüksek sayıda penning elektronun oluşabileceği bölgeye (cathode sheet bölgesinin sınırına) belli sayıda Penning reaksiyonu sonucu oluştuğunu düşündüğümüz belli enerjideki elektronları yerleştirdik. Helyum metastable (2^3S_1) ve argon atomu arasında gerçekleşen reaksiyon için



4.06 [eV] enerjiyi incelediğimiz elektronların enerjisi olarak atadık. Input elektrik alan değerlerini kullanarak (Test 1, Test 2, Test 3); $p = 16.96$ [Torr], $L = 0.4$ [cm], $T = 400$ [K] ve zaman adımlarını $10^{-12}s$

olarak, bu elektronları 80,000 zaman adımı ($t = 8 \times 10^{-8} s$) boyunca hareket ettirdik. Tüm elektronların hareketleri boyunca maruz kaldığı ortalama elastik ve inelastik çarpışma sayısını, kat ettikleri mesafeyi kaydedip, ortalama mean free path ve mean flight time'ları hesapladık (Bakınız Tablo 3). Bununla beraber her test için seçilen rastgele bir penning elektronun pozisyon ve kinetik enerjilerini kaydettik.

Test 1 için rastgele seçilen 4.06 [eV] başlangıç enerjili elektronun zamana bağlı pozisyon ve kinetik enerji bilgisi Şekil 38'de görülmektedir. Dikkat edilirse bazı zaman adımlarında (elektronun sheet bölgesine girdiği durumlarda) elektron kinetik enerjisinde ciddi düşüşler yaşanmasına karşın, elektronun tekrar quasineutral bölgeye girmesiyle depolanan potansiyel enerji tekrar kinetik enerjiye dönmüş ve kinetik enerji toparlanmıştır. Elektron sadece elastik çarpışmalardan dolayı toplam enerjisini kaybetmiştir. Bu durumu basit bir hesapla da gösterebiliriz: Daha önce de belirttiğimiz gibi elektronlar her bir elastik çarpışma sonrası formül (24)'deki gibi enerji kayıplarına uğrarlar. Eğer her çarpışma için ortalama saçılma açısı $\pi/2$ olarak alınsaydı, takip ettiğimiz elektron çarpışma başına

$$2 \left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{2}\right)\right) \frac{9.11 \times 10^{31}}{6.67 \times 10^{-27}} \cong 0.00028,$$

oranında enerji kaybedecekti. Tablo 3'den elektronumuzun 11020 çarpışma yaptığı görülmektedir. Eğer kayıp sadece elastik çarpışmadan dolayı olursa elektronun son enerjisi:

$$4.06 \times (1 - 0.00028)^{11020} \cong 0.185[eV],$$

olarak beklenmelidir. Gerçekten de elektronun son enerjisi beklenene yakın bir biçimde yaklaşık 0.2 olarak [eV] ölçülmüştür. Özetle kaynak (CHIRTSOV, 2011)'de belirtildiği gibi ideal quasineutral bölge konfigürasyonunda (elektrik alanın bu bölgede sıfır olduğunu var sayarsak) elastik çarpışmalar hariç elektronların kinetik enerjisine etki eden bir durum yoktur. Elektron sadece enerji kaybetmektedir. Özetle kapsamlı bir PIC/MCC analizinde eedf için Penning enerjisi bölgesinde ani bir düşüş beklenmektedir.

Test No	n_c	$\Sigma\lambda$	λ	$\Sigma\tau$	τ	L/λ
1	11020	0.406	3.686×10^{-5}	8.00×10^{-7}	7.259×10^{-11}	108.5
2	14976	0.541	3.614×10^{-5}	8.00×10^{-7}	5.342×10^{-11}	110.67
3	11638	0.434	3.732×10^{-5}	8.00×10^{-7}	6.874×10^{-11}	107.16

Tablo 3: Her bir test için (rastgele) seçilen Penning electronların hareketleriyle ilgili bilgiler

n_c : Elastik Çarpışma Sayısı

$\Sigma\lambda$: Elektronun kat ettiği toplam mesafe [m]

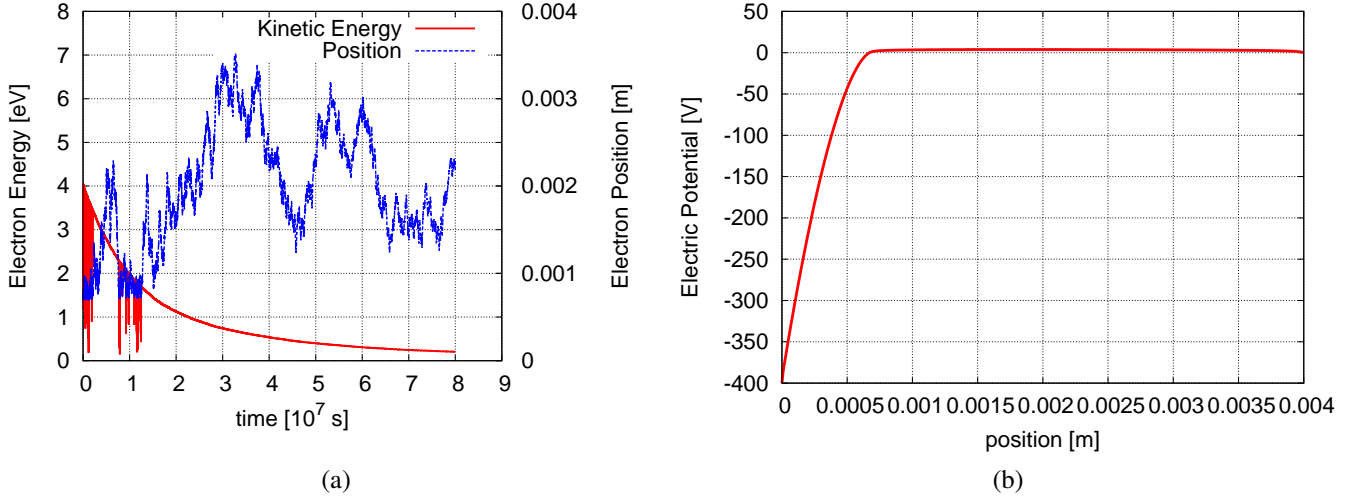
λ : Elektronun ortalama mean free path mesafesi [m]

$\Sigma\tau$: Elektronun toplam harekette kaldığı süre [s]

τ : Elektronun ortalama free flight süresi [s]

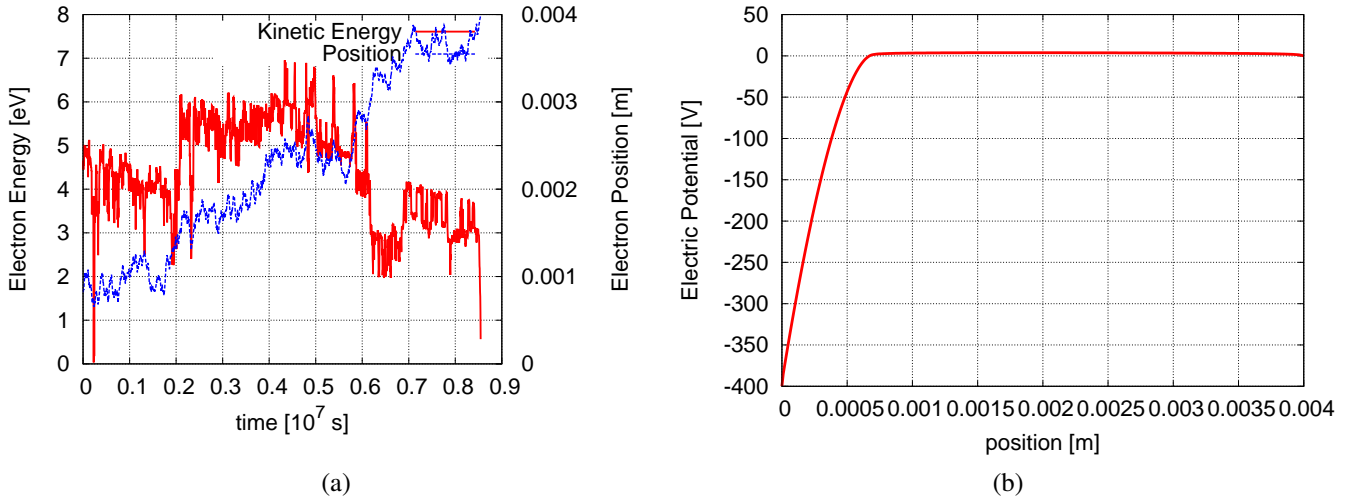
L/λ : Elektrodlar arası mesafenin mean free path'e olan oranı

Ancak sonraki örnekte elektrik alandaki gürültüden dolayı (Test 2) elektronun kinetik enerjisinde sonuca etki edebilecek bir dalgalanma gözlemlenmiştir. Daha önce de belirtildiği bu örnekteki elektrik alan değeri yaklaşık 45000 parçacıkla PIC/MCC analizini yaptığımız DC He-Ar gaz deşarj simülasyonundan



Şekil 38: Test 1 için a) Seçilen Penning elektronun hareket sırasındaki enerji ve pozisyon grafikleri, b) Plazma elektrik potansiyel grafiği.

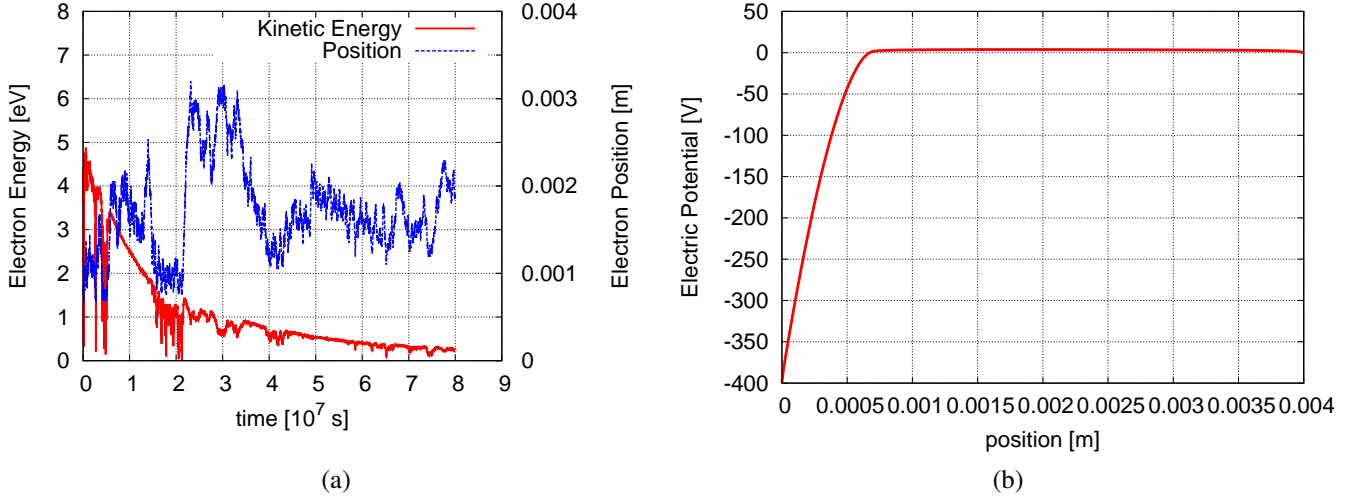
alınmıştır. Dalgalı bir elektrik alan konfigürasyonundan penning elektronları takip edebilmek, dolayısıyla sağlıklı bir eedf fonksiyonu çıkarmak oldukça zor görünmektedir.



Şekil 39: Test 2 için a) Seçilen Penning elektronun hareket sırasındaki enerji ve pozisyon grafikleri, b) Plazma elektrik potansiyel grafiği.

Test 3'de ise, test 2'yle karşılaştırıldığında çok daha az gürültüye sahip bir elektrik alan profili kullanılmıştır. Her ne kadar electronun enerjisinde gürültüden dolayı zaman zaman 0.5-1 [eV] arası artışlar olsa da sonuçlar 2. örneğe göre nispeten daha ümit vericidir.

Birinci analize göre oluşan penning electronların enerjileri 4.06-0 [eV], 2. analiz için 7.0 (en az)-0 [eV], 3. analiz içinse gene 4.8-0 [eV] arası ölçülebilir. PIC/MCC ile yapacağımız CES simülasyonunda 1 ve 3.



Şekil 40: Test 3 için a) Seçilen Penning elektronun hareket sırasındaki enerji ve pozisyon grafikleri, b) Plazma elektrik potansiyel grafiği

örneklerde olduğu gibi elektrik alan konfigürasyonlarıyla (gürültüsü düşük ya da sıfır değerli) karşılaşırsak eedf'de 4.06 eV etrafında ani bir düşüş beklenir. Dolayısıyla CES'yi PIC/MCC ile doğrulanabilir. RF plazmaların PIC/MCC ile değerlendirildiğimizde ne kadar çok parçacık kullanırsak merkez bölgedeki elektrik alandaki dalgalanmanın azaldığını görmüştük. Aynı durum DC gaz deşarjları için de geçerlidir. Çok fazla parçacığın kullanılmadığı (kullanılmadığı) analizlerde (yani ikinci örnekte olduğu gibi) çok gürültülü bir elektrik alan konfigürasyonu ile karşılaşmaktayız, ve eedfden Penning electronları seçebilmemiz çok zor gözükmektedir. Konuyla ilgili açıklama ve yapılabilecekler bir sonraki bölümde verilmiştir.

5.3 PIC/MCC Algoritmasının CES Analizinde Kullanılması

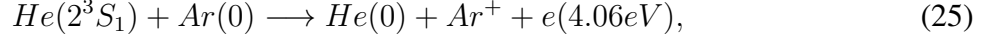
Kaynak (KUDRYAVTSEV, 2012)'de helyum-argon gaz karışımı ile yapılan deneysel çalışmada eedf'de 4.06 ve 4.85 [eV] noktalarında yerel yükselteler elde edilmiştir. Bu bilgiler ışığında



reaksiyonları deşarjın orta noktası için oldukça dominant'tır diyebiliriz. Ayrıca deneyde argon yoğunluğu (%1) helyum yoğunluğuna göre çok düşük olduğu için PIC/MCC modelimizin uygulanabilir olması için çeşitli varsayımlarda bulduk:

- Elektronların sadece helyum gazı ile yaptığı elastik ve inelastik çarpışmaları (elastik, excitation, ionization) modelimize kattık. Excitation seviyesi olarak sadece 2^3S_1 'i modelimize kattık. 2^1S_1 'i ihmal ettiğimiz için 2^3S_1 kesit alanının iki katını aldık. Böylelikle tek bir metastable türünü takip ettik.

- Yukarıda da belirttiğimiz gibi metastable türü olarak 2^3S_1 'i aldık. Metastable'ın yapabileceği iki çarpışma türünü modelimize kattık:



$Q(2^3S_1) = 17.5 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ Reaksiyon (26) için ise kaynak (WANG, 2005) Tablo 1'deki rateler kullanılmıştır. Bunlara ek olarak metastable atomlar drift-diffusion modeli ile modellenmiş, sınır bölgelerindeki metastable akış değeri:

$$\Gamma_m = \frac{1}{4} n_m v_{th}^m,$$

olarak alınmıştır. Burada n_m metastable yoğunluğu, v_{th}^m thermal hızıdır. Sınır bölgelerinde akışlar yüzeye dik ve diğer elektrod yönündedirler. Gene aynı kaynaktaki diffüzyon parametresi hesaplanırken:

$$D_m = (420/p_{[Torr]}) \times (Tg_{[eV]}/0.025)^{1.5} [cm^2 s^{-1}],$$

formülü kullanılmıştır. $p_{[Torr]}$ Torr cinsinden gaz basıncı, $Tg_{[eV]}$ elektron volt cinsinden gazın sıcaklığıdır.

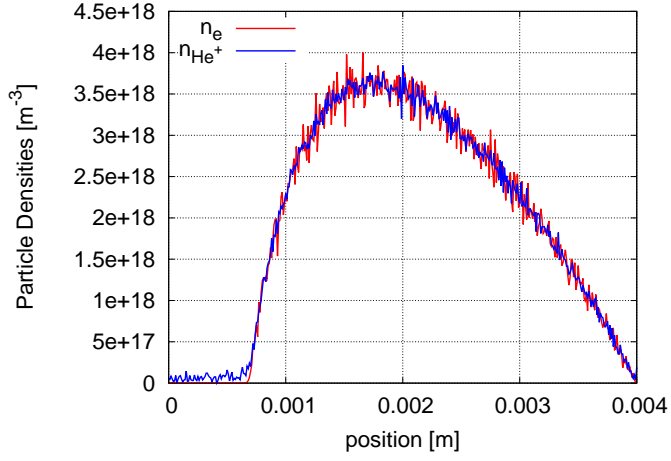
- Bu koda iyonlara ek olarak, elektronlar da subcycling'e tabi tutulmuşlardır. Tabi subcycling değeri seçilirken Courant condition'ın çiğnenmemesine ve de her adımda parçacıkların %10'undan daha azının çarpışma yapmasına özen gösterilmiştir (DONKÓ, 2011).

Yapılan örnek CES analizinin parametreleri Tablo 5'de verilmiştir.

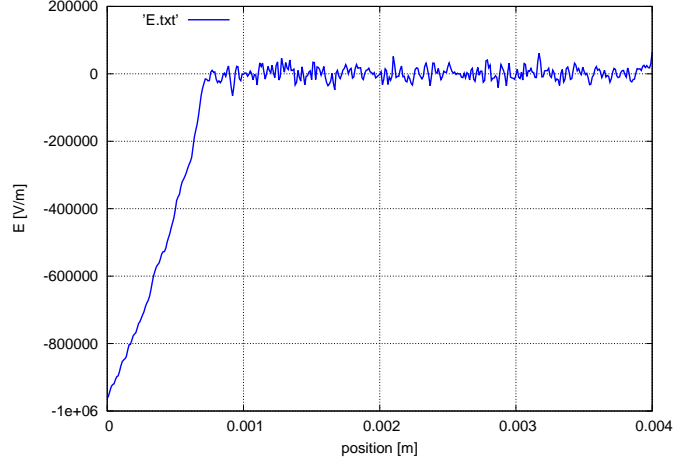
Problem Parametresi	Sembol	Değer
Gas Çeşidi	He-Ar	Helyum(%99)-Argon(%1)
Gaz Basıncı	P	2261 [Pa]
Gaz Sıcaklığı	T	400 [K]
Elektrode Potansiyeli	V	400 [Volt]
Elektrod Mesafesi	L	4 [mm]
İkincil Elektron Sabiti	γ	0.15
Elektron Yansıma Sabiti	r	0.2

Tablo 4: 1D DC Helyum-Argon Karışımı Gaz Deşarjı Problem Parametreleri.

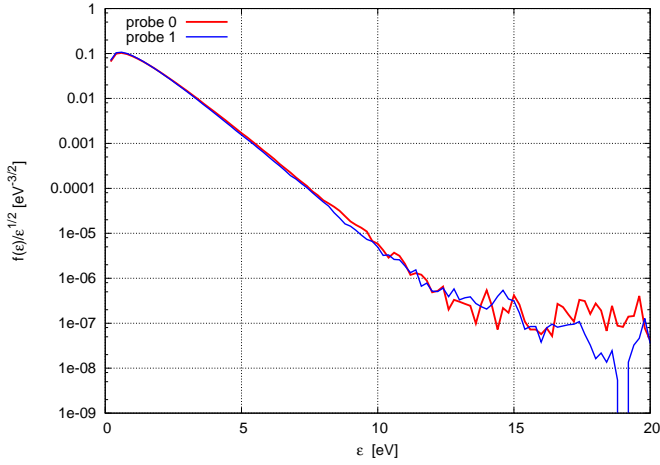
Grafik 41'de yaklaşık olarak 28,000'er elektron ve helyum iyonu kullandığımız PIC/MCC analizinden elde edilen sonuçlar görülmektedir.



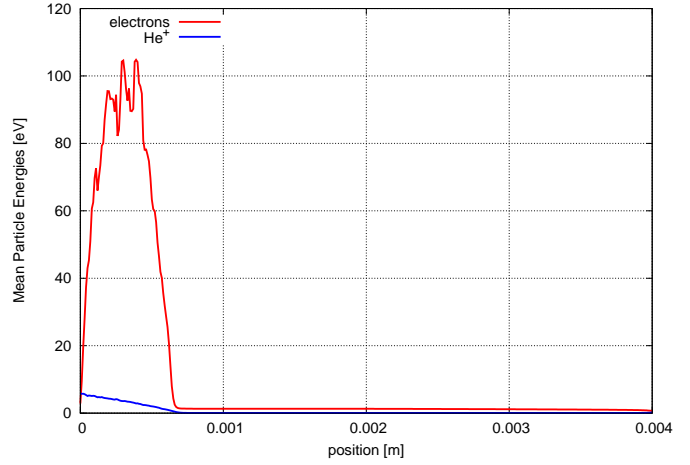
(a)



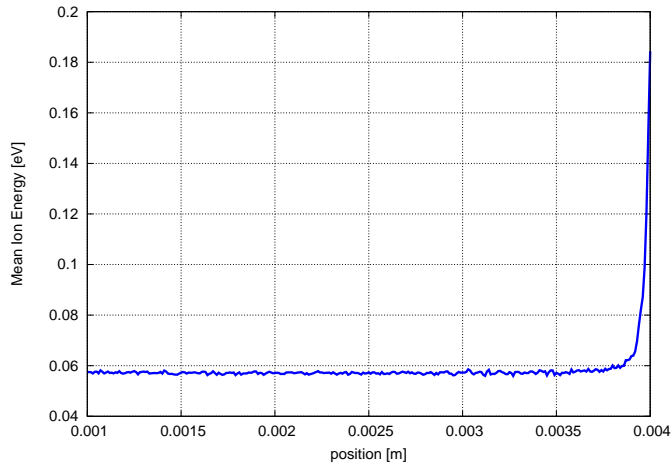
(b)



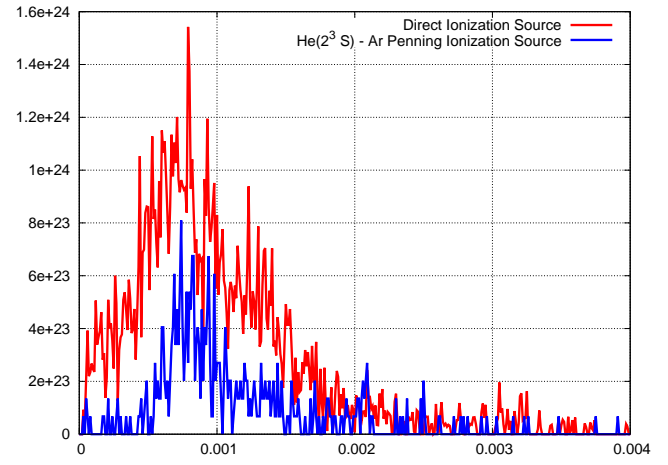
(c)



(d)



(e)



(f)

Şekil 41: Yaklaşık olarak 22,000 süper elektron ve 23,000 süper iyon ile yapılan DC He(%99)-Ar(%1) CES analizinin 91,000,000. zaman adımındaki ($7.6714 \times 10^5 [s]$) sonuçlar: (a)Yüklü parçacık yoğunluklar (b) Elektrik alan (c) Elektron enerji dağılım fonksiyonları / Probe 0 220-230. grid noktaları arası, probe 1 240-260 grid noktaları arasına yerleştirilmiştir (d) Gridlerdeki ortalama yüklü parçacık enerjileri (e) He iyonları quasineutral bölge detayı (f) Direct ve Penning iyonlaşma kaynakları.

Çözüm Parametresi	Sembol	Değer
Kullanılan Grid Sayısı	N	401
Kullanılan Süper Parçacık Sayısı	NSP	21,874 e^- ve 23,430 He^+
Başlangıçtaki Yüklü Parçacık Yoğunlukları	n_i ve n_e	$10^{15} [m^{-3}]$
Iyon Subcycling Parametresi	isc	6
Yavaş Elektron Subcycling Parametresi	esc	3
Süper Parçacık Ağırlıkları	$W_i = W_e$	3.4133×10^{11}

Tablo 5: 1D DC Helyum-Argon Karışımı Gaz Deşarjı Problemi, Çözüm Parametreleri.

Sonuç olarak, CES analizlerinin PIC/MCC parçacık yöntemi ile modellenebilmesi için öncelikle quasineutral bölgedeki elektrik alan değerlerinin gürültüden arındırılmış olması gerekmektedir. Arındırma işlemi iki şekilde yapılabilir:

- a) Çok fazla parçacık kullanarak, yani diğer bir deyişle süper parçacıkların weightinglerini düşük tutarak veya
- b) Özel bir algoritma geliştirerek elektrik alandaki gürültü değerlerini düşürmek

Bu düzenlemelere göre tekrar analiz yapılırsa daha uygun sonuçlar alınması beklenmektedir. Bunlara ek olarak koda 2. boyut da eklenebilir.

SONUÇ

Projede yerel olmayan (nonlocal) parıltılı gaz deşarj plazmalar için iki boyutlu (2D) kinetik model ve kodlar geliştirilmiştir.

Bu doğrultuda, çalışmalarda aşağıdaki üç farklı yaklaşım ve yöntem izlenmiştir:

▪ **Yerel olmayan analitik iyonlaşma terimini içeren hibrit nümeric model.** Bu yöntemde, deşarj plazmasının yüksek enerjili (hızlı) elektronların iyonlaşma süreçlerine katkıları sonucu oluşan yerel olmayan iyonlaşma kaynağını analitik olarak tanımlanıp “genişletilmiş” akışkan plazma modeline entegre edilir.

▪ **Parçacık ve Monte Carlo yöntemine dayanan hibrit model.** Plazmanın yüksek enerjili (hızlı) elektronların hareketleri PIC (“Particle in Cell”) yöntemiyle ayrı ayrı izlenip bunların çarpışmaları Monte Carlo yöntemi ile hesaba katılır, düşük enerjili (yavaş) elektronlar ile geriye kalan parçacık türleri için akışkan yaklaşımı kullanılır.

▪ **Paralel PIC/MCC model.** Bu model “Particle in Cell & Monte Carlo Collision” yöntemine dayanan plazmayı oluşturduğu tüm yüklü parçacık türlerinin kinetik Boltzmann denklemlerin istatistiksel yolu ile çözümlenmesini sağlayan kinetik modelidir.

1. Yukarıda sıralanan tüm nümerik model ve kodların literatürde mevcut sayısal ve deneysel veriler kullanılarak doğrulanmaları yapılmıştır.
2. Geliştirilen kodlar kullanılarak, değişik gaz ve karışımlarda çeşitli parametre (basınç, boyut, uygulanan potansiyel, frekans, vs.) rejimlerinde doğru akım (DC) ve kapasitif radyofrekans (RF) gaz deşarj plazmaların özelliklerinin analizleri yapılmıştır.
3. Argon ile helyum gaz karışımlarında, Plazma Elektron Spektroskopisi (PLES ile CES) yönteminin kapasitesi ve uygulama alanının sınırlarının anlaşılması için PIC/MCC analizi yapılmıştır.

Proje çalışmaları sırasında geliştirilen program kodlar için Comsol Multiphysics, matlab ve fortran 90 hesaplama paketi ve yazılımları kullanılmıştır.

Yukarıda sıralanan yöntemlerden hesaplama yükü açısından bilgisayar sistemini en fazla zorlayan yöntem PIC/MCC modelidir. Bunun için, yukarıda da belirttiğimiz gibi, bu kod paralel olarak tasarlanmıştır. Hesaplamalar için ODTÜ’nün **CENG HPC SYSTEM** kümesi (<http://www.ceng.metu.edu.tr/hpc/index>) kullanılmıştır. Ancak daha fazla sayıda parçacıkla hesap yapılabilmesi (özellikle PLES ve CES analizlerinde) ve tam üç boyutlu (3d3v) hesaplamaların mümkün olabilmesi için, paralel kodun optimizasyona ihtiyacı vardır.

Yapılan çalışmalar sonrasında seri tasarlanmış olan yukarıda ki sıralamadan Monte Carlo yöntemine dayanan hibrit kodun verimliliğini artırılması için, paralel hale dönüştürülmesi gerektiği anlaşılmıştır.

Nümerik kodlar üzerinde ki optimizasyon ve paralelleştirme çalışmaları yeni başlayan ve burada ki araştırmanın devamı olan ve ayrıca devam etmekte olan diğ er TÜBİTAK (212T164) projesinde ele alınmış olup aktif bir şekilde devam etmektedir.

Kaynaklar

- R. ARSLANBEKOV and V. Kolobov. Two-dimensional simulations of the transition from townsend to glow discharge and subnormal oscillations. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 36:2986, 2003.
- K.H. BECKER, K.H. Schoenbach, and J.G. Eden. Microplasmas and applications. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 39:55, 2006.
- C.K. BIRDSALL. Particle-in-Cell charged-particle simulations, plus Monte Carlo collisions with neutral atoms, PIC-MCC. *IEEE Trans. Plasma Sci.*, 19:65, 1991.
- C.K. BIRDSALL and A.B. Langdon. *Plasma Physics via Computer Simulation*. Taylor & Francis, New York, 2005.
- J.P. BOEUF. Plasma display panels: physics, recent developments and key issues. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 36:53, 2003.
- A. BOGAERTS, E. Neyts, R. Gijbels, and J. Mullen. Gas discharge plasmas and their applications. *Plasma Sources Sci. Technol.*, B57:609, 2002.
- E.A. BOGDANOV, A.S. Chirtsov, and A.A. Kudryavtsev. Fundamental nonambipolarity of electron fluxes in 2d plasmas. *Phys. Rev. Lett.*, 106:195001, 2011.
- A. CHIRTSOV, A. Kudryavtsev, A. Mustafaev, and A. Tsyganov. Micro-plasma detector based on collisional electron spectroscopy (ces) method for gas mixtures diagnostics. *30th ICPIG, Belfast, Northern Ireland, UK*, 7, 2011.
- V.I. DEMIDOV, C.A. DeJoseph, and A.A. Kudryavtsev. Role of nonlocal ionization in formation of the short glow discharge. *Phys. Rev. Lett.*, 95:215002, 2005.
- V.I. DEMIDOV, S.F. Adams, J. Blessington, M.E. Koepke, and J.M. Williamson. Short dc discharge with wall probe as a gas analytical detector. *Contrib. Plasma Phys.*, 50:808, 2010.
- A. DERZSI, A. Hartmann, I. Korolov, J. Karacsony, G. Bano, and Z. Donko. On the accuracy and limitations of fluid models of the cathode region of dc glow discharges. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 42:225204, 2009.
- Z. DONKÓ. Particle simulation methods for studies of low-pressure plasma sources ii. Bochum University Presentation, 2010.
- Z. DONKÓ. Particle simulation methods for studies of low-pressure plasma sources. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 20:024001, 2011.
- Z. DONKÓ. Private communication. Private mail communication between E Erden & Z Donkó, 2012.
- Z. DONKÓ, P. Hartmann, and K. Kutasi. On the reliability of low-pressure dc glow discharge modelling. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 15:178, 2006.
- R. FITZPATRICK. An example 1D PIC code. <http://farside.ph.utexas.edu/teaching/plasma/380.pdf>, 2011. [Online; accessed 11-November-2011].
- A. FRIEDMAN and L. Kennedy. *Plasma Physics and Engineering*, pages 204–505. Taylor and Francis, New York, 2004.

- 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 Sci. Technol.*, 14:722, 2005.
- G.J.M. HAGELAAR, F.J. Hoog, and G.M.W. Kroesen. Boundary conditions in fluid models of gas discharges. *Phys. Rev. E*, 62:1452, 2000.
- S.R. HUNTER. Monte Carlo simulation of electron swarms in hydrogen gas. *Aust. J. Phys.*, 30:83, 1977.
- S. JARDIN. *Computational Methods in Plasma Physics*, pages 56–57. Taylor & Francis, London and New York, 2010.
- E. KAWAMURA, C.K. Birdsall, and V. Vahedi. Physical and numerical methods of speeding up particle codes and paralleling as applied to RF discharges. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 9:413, 2000.
- H.C. KIM, F. Iza, S.S. Yang, M. Radmilović-Radjenović, and J.K. Lee. Particle and fluid simulations of low-temperature plasma discharges: benchmarks and kinetic effects. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 38:283, 2005.
- V.I. KOLOBOV and L.D. Tsendin. Analytic model of short gas discharge in light gases. *Phys. Rev. A*, 46:7837, 1992.
- U. KORTSHAGEN and L. D. Tsendin, editors. *Electron Kinetics, Applications of Glow Discharges*, volume Vol. 367 of *NATO ASI Series*. Kluwer Academic, New York, 2002.
- A. KUDRYAVTSEV. Registration of gas impurities in nonlocal plasma of helium microdischarge by an additional electrode - sensor. *Journal of Instrumentation*, 7:07002, 2012.
- A.A. KUDRYAVTSEV, A.V. Morin, and L.D. Tsendin. Role of nonlocal ionization in formation of the short glow discharge. *Tech. Phys.*, 53:1029, 2008.
- R.H. LANDAN. A beginner’s guide to high-performance computing. http://www.shodor.org/media/content//petascale/materials/UPModules/beginnersGuideHPC/moduleDocument_pdf.pdf, 2012. [Online; accessed 18-December-2012].
- M.A. LIEBERMAN and A.J. Lichtenberg. *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing*, pages 14–80. John Wiley & Sons, New Jersey, 2005.
- F. LEWELLYN-JONES. *The glow discharge: and an introduction to plasma physics*, pages 1–23. John Wiley & Sons, New York, 1966.
- D.P. LYMBEROPOULOS and D.J. Economou. Two-dimensional self-consistent radio frequency plasma simulations relevant to the gaseous electronics conference rf reference cell. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 100:473, 1995.
- S.V. PATANKAR. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. McGraw–Hill, New York, 1980.
- I. PERES, N. Ouadoudi, L.C. Pitchford, and J.P. Boeuf. Analytical formulation of ionization source term for discharge models in argon, helium, nitrogen, and silane. *J. Appl. Phys.*, 72:4533, 1992.
- A.V. PHELPS. The application of scattering cross sections to ion flux models in discharge sheaths. *Journal of Applied Physics*, 76:747, 1994.

- A.V. PHELPS and Z.Lj. Petrovic. Cold-cathode discharges and breakdown in argon: surface and gas phase production of secondary electrons. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 8:21, 1999.
- I. RAFATOV and D. Akbar S. Bilikmen. Modelling of non-uniform dc driven glow discharge in argon gas. *Phys. Lett. A*, 367:114, 2007.
- I. RAFATOV, E.A. Bogdanov, and A.A. Kudryavtsev. On the accuracy and reliability of different fluid models of the direct current glow discharge. *Phy. Plasmas*, 19:033502, 2012a.
- I. RAFATOV, E.A. Bogdanov, and A.A. Kudryavtsev. Account of nonlocal ionization by fast electrons in the fluid models of a dc glow discharge. *Phy. Plasmas*, 19:093503, 2012b.
- Yu.P. RAIZER. *Gas Discharge Physics*. Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- S. ROSS. *A First Course in Probability*. New Jersey: Pearson, 2010.
- K. ROZSA, A. Gallagher, and Z. Donkó. Excitation of ar lines in the cathode region of a glow discharge. *Phys. Rev. E*, 52:913, 1995.
- A.H. SATO and M.A. Lieberman. Electron beam probe measurements of electric fields in rf discharges. *J. Appl. Phys.*, 68, 1990.
- J. SCHULZE, A. Derzsi, K. Dittmann, T. Hemke, J. Meichsner, and Z. Donkó. Ionization by drift and ambipolar electric fields in electronegative capacitive radio frequency plasmas. *Phys. Rev. Lett.*, 107: 275001, 2011.
- N. SENGİL. *Computer simulations using particles course notes*. Department of Aerospace Engineering METU, 2010.
- I. STEFANOVIC and Z.Lj. Petrovic. Volt ampere characteristics of low current dc discharges in ar, h2, ch4 and sf6. *Japan. J. Appl. Phys.*, 36:4728, 1997.
- M. SURENDRA. Ph D. dissertation, University of California Berkeley. ProQuest Dissertations and Theses; 1991; ProQuest Dissertations & Theses (PQDT), 1991.
- M. SURENDRA, D.B. Graves, and G.M. Jellum. Self-consistent model of a direct-current glow discharge: Treatment of fast electrons. *Phys. Rev. A*, 41:1112, 1990.
- L.D. TSENDIN. Nonlocal electron kinetics in gas-discharge plasma. *Phys. Usp.*, 53:133, 2010.
- M.M. TURNER. Kinetic properties of particle-in-cell simulations compromised by Monte Carlo collisions. *Phys. Plasmas*, 13:033506, 2006.
- M.M. TURNER, A. Derzsi, Z. Donkó, D. Eremin, and S.J. Kelly. Simulation benchmarks for low-pressure plasmas: Capacitive discharges. *Phys. Plasmas*, 20:013507, 2013.
- V. VAHEDI and M. Surendra. A monte carlo collision model for the particle-in-cell method: applications to argon and oxygen discharges. *Comp. Phys. Comm.*, 87:179, 1995.
- V. VAHEDI, G. DiPeso, C.K. Birdsall, M.A. Lieberman, and T.D. Rognlien. Capacitive rf discharges modelled by particle-in-cell Monte Carlo simulation. i: analysis of numerical techniques. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 2:261, 1993.

- J.P. VERBONCOEUR. Particle simulation of plasmas: review and advances. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 47:A231, 2005.
- H. WANG, W. Jiang, and Y. Wang. Implicit and electrostatic particle-in-cell/monte carlo model in two-dimensional and axisymmetric geometry: I. analysis of numerical techniques. *Plasma Sources Sci. Technol.*, 19:045023, 2011.
- Q. WANG. Simulation of direct current microplasma discharge in helium atmospheric pressure. *Journal of Applied Physics*, 100:023301, 2005.

TÜBİTAK
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU

Proje No: 210T072
Proje Başlığı: Yüksek ve Düşük Basınç Gaz Deşarjların Yerel Olmayan Plazmalarının 2D Kinetik Sayısal Kodların Geliştirilmesi ve Yeni Plazma Teknolojilerinde Uygulanması
Proje Yürütücüsü ve Araştırmacılar: Doç. Dr. İsmail Rafatov (Yürütücü) Doç. Dr. Burak Yedierler (Araştırmacı)
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi: Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Üniversiteler Mahallesi, Dumlupınar Bulvarı No:1 06800 Çankaya Ankara
Destekleyen Kuruluş(ların) Adı ve Adresi:
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri: 01.07.2011- 01.07.2013
Öz (en çok 70 kelime) <p>Projede yerel olmayan parıtlı gaz deşarj plazmaları için iki boyutlu sayısal kinetik model ve kodlar geliştirilmiş ve doğrulanmıştır. Geliştirilen kodlar ile çeşitli gaz ve parametre rejimlerinde DC ve RF deşarj plazmaların analizleri yapılmıştır. Argon ile helyum karışımlarında, plazma elektron spektroskopisi yönteminin uygulanabilirliği ve limitlerinin anlaşılması için PIC/MCC analizi yapılmıştır.</p>
Anahtar Kelimeler: Plazma, gaz deşarj, kinetik model, nümerik hesaplama, simülasyon, plazma elektron spektroskopisi.
Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu mu? Evet <input type="checkbox"/> Gerekli Değil <input checked="" type="checkbox"/> Fikri Ürün Bildirim Formu'nun tesliminden sonra 3 ay içerisinde patent başvurusu yapılmalıdır.
Projeden Yapılan Yayınlar: I (Makale) <ol style="list-style-type: none">1. I. Rafatov, E. A. Bogdanov, A. A. Kudryavtsev, Account of nonlocal ionization by fast electrons in the fluid models of a direct current glow discharge, Physics of Plasmas, 19, 093503 (2012) (makale, 8 sayfa)2. I. Rafatov, E. A. Bogdanov, A. A. Kudryavtsev, On the accuracy and reliability of different fluid models of the direct current glow discharge, Physics of Plasmas, 19, 033502 (2012) (makale, 12 sayfa)3. E. Erden, I. Rafatov, Particle in Cell/Monte Carlo Collision method for simulation of RF glow discharges: Effect of süper particle weighting, Contributions to Plasma Physics, 2013 (Hakem değerlendirmesinde)4. E. Eylenceoğlu, Burak Yedierler, İ. Rafatov, Two-dimensional hybrid Monte Carlo – fluid model for dc glow discharge simulations, Journal of Physics D: Applied Physics, 2013 (Hakem değerlendirmesinde) II (Bilimsel toplantılarda sunulan bildiri kitabında basılan makale) <ol style="list-style-type: none">1. I. R. Rafatov, E. A. Bogdanov, A. A. Kudryavtsev, Fluid model of dc glow discharge with nonlocal ionization source term, Journal of Physics: Conference Series, 406 (2012) 012032 (12th High-Tech Plasma Processes Conference (HTPP-12) Bologna, Italy, 24-29 June, 2012) (10 sayfa)

2. Ismail Rafatov, E. A. Bogdanov, A. A. Kudryavtsev, On the numerical modelling of a dc driven glow discharge plasma, **XXXth International Conference on Phenomena in Ionized Gases (ICPIG)** (Northern Ireland, UK, , Belfast, August, 2011) (4 sayfa)

http://mpserver.pst.qub.ac.uk/sites/icpig2011/435_B5_Rafatov.pdf

3. I. Rafatov, E. A. Bogdanov, A. A. Kudryavtsev, Hybrid modelling of a dc glow discharge with account of nonlocal ionization by fast electrons, Contributed Papers, Volume I, Minsk, National Academy of Sciences, Belarus, 2012, p. 14-17 (**VII International Conference Plasma Physics and Plasma Technology (PPPT-7)**) Minsk, Belarus, September 17 – 21, 2012) (4 sayfa)

4. I. Rafatov, B. Yedierler, E. A. Bogdanov, A. A. Kudryavtsev, E. Eylenceoglu, E. Erden, Extended fluid model accounting for non-local ionization source term for full-scale simulation of gas discharges, **X International Workshop “Thermochemical processes in plasma aerodynamics”** St.Petersburg, Russia July 2-6, 2012 (X International Workshop “Thermochemical processes in plasma aerodynamics” St.Petersburg, Russia July 2-6, 2012) (6 sayfa)

<http://en.hypersonics.ru/workshop2012/materials-of-workshop>

III. (Bilimsel toplantılarda sunulan bildiri kitabında basılan bildiriler (özet))

1. E. Erden, I. Rafatov, PIC/MCC method for numerical simulation of RF glow discharges. Effect of super particle weighting and parallelization, **4rd Workshop on Radiofrequency discharges**, 29-31 Mayıs, 3013, La Presqu’ile de Giens, Fransa, Bildiri kitabı, p. 18.

2. Eylenceoğlu, I. Rafatov, 1D and 2D hybrid models for dc glow discharge plasma simulations, **The XLI theoretical and practical conference, The week of science and academic research at SPBSPU**, December 3-8, 2012, Bildiri kitabı, Cilt X, p. 7-8.

3. E. Eylenceoğlu, İ. Rafatov, Hybrid model for the direct current glow discharge plasma simulations in argon gas, **Türk Fizik Derneği 29. Uluslararası Fizik Kongresi**, 5-8 Eylül, 2012, Bodrum, Bildiri kitabı, p. 59.

4. E. Erden, İ. Rafatov Particle in cell/Monte Carlo collision (PIC/MCC) model for the DC & RF glow discharge simulations: Validation, computational efficiency, and effect of parallelization, **Türk Fizik Derneği 29. Uluslararası Fizik Kongresi**, 5-8 Eylül, 2012, Bodrum, Bidiri kitabı, p. 387.

5. E. Eylenceoğlu, İ.R. Rafatov, Işıltılı Deşarjların Akışkan ve Hibrit Yöntemlerle Modellenmesi ve Karşılaştırılması, **İzmir Genç Fizikçiler Kongresi**, 13-15 Haziran, 2012, İzmir.

6. E. Erden, İ. Rafatov, DC Helyum Işıltılı Deşarjının Kinetik Particle-in-Cell / Monte Carlo Çarpışma Yöntemleriyle Modellenmesi, **İzmir Genç Fizikçiler Kongresi**, 13-15 Haziran, 2012, İzmir.

7. İsmail Rafatov, Burak Yedierler, E.A. Bogdanov, A.A. Kudryavtsev, Comparison of properties of “similar” low and high pressure glow discharges, **Türk Fizik Derneği 28. Uluslararası Fizik Kongresi** , Bodrum, Eylül, 2011.

Ekte Bulunan “ARDEB Başarı Öyküsü Formu”, “Kazanımlar” Bölümünde Belirtilen Kriterlere Göre Proje Çıktılarınızın Başarı Öyküsü Niteliği Taşındığını Düşünüyorsanız “ARDEB Başarı Öyküsü Formu”nu doldurunuz.