

HORVÁTH BENEDEK

ELTE TTK, FIZIKA BSC

FIZIKUS SZAKIRÁNY

SZAKDOLGOZAT

Rádiófrekvenciás gerjesztésű gázkisülések numerikus szimulációja

Témavezető:

Dr. Derzsi Aranka
MTA Wigner SZFI
Komplex Folyadékok Osztály

Egyetemi konzulens:

Dr. Horváth Ákos
ELTE TTK
Atomfizikai Tanszék

2017. május

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés: gázkisülések és alapvető sajátosságaik	2
1.1. Alacsony nyomású gázkisülések	2
1.2. Kapacitív csatolású rádiófrekvenciás gázkisülések	5
2. Motiváció, célkitűzések	9
3. A "Particle-in-Cell/Monte Carlo Collisions" (PIC/MCC) szimulációs módszer	10
4. Új modell a felületi folyamatok vizsgálatára	15
4.1. A modell ismertetése	15
4.2. Paraméterbeállítások SiO ₂ elektródákra	18
4.3. A felületi folyamatok szimulációs algoritmus	21
5. Szimulációs eredmények	24
5.1. Plazmajellemzők az alacsony nyomású tartományban	25
5.2. A valódi másodlagos elektronok hatása a plazmajellemzőkre	31
6. Összefoglalás, kitekintés	35
7. Köszönetnyilvánítás	36

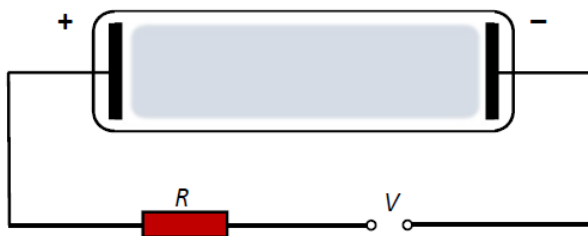
1. Bevezetés: gázkisülések és alapvető sajátosságaik

A plazmafizika történetileg az egyik legkésőbb kialakult területe a fizikának, amely komplexitása révén csak a XX. században vált önálló tudományággá. A plazmafizikán belül igen kiterjedt területet alkot az alacsony hőmérsékletű plazmák vizsgálata, amelyek jelentőségéhez számos ipari-technológiai alkalmazás hozzájárul: felületek biokompatibilissá tétele, plazmaalapú ionmarás a mikroelektronikában, rétegek leválasztása napelemek gyártásánál. A termikus (magas hőmérsékletű) plazmákkal ellentétben ezeket a plazmákat főként elektron-atom ütközési folyamatok hozzák létre és tartják fenn, miközben a gáz lényegében szobahőmérsékletű marad.

Dolgozatomban az alacsony hőmérsékletű plazmák egy speciális típusának, a kapacitív csatolású rádiófrekvenciás gázkisüléseknek a modellezésével és szimulációjával foglalkozom. Az első fejezetben áttekintem az önfenntartó gázkisülés kialakulásának feltételeit az egyenfeszültségű eseten keresztül, majd bemutatom a kapacitív csatolású rádiófrekvenciás kisülések működési mechanizmusát. A második fejezetben megfogalmazom az elektron-elektroda kölcsönhatás modellezésére vonatkozó célkitűzéseimet. A harmadik fejezetben részletesen ismertetem az alkalmazott szimulációs eljárást, a negyedik fejezetben pedig annak felületi folyamatokra vonatkozó félempirikus kiegészítését. Végül, az ötödik fejezetben részletesen ismertetem a számolási eredményeimet.

1.1. Alacsony nyomású gázkisülések

A gázkisülések kialakulásának és működési jellemzőinek áttekintésére a legegyszerűbb esetet, az egyenfeszültségű kisülést vesszük alapul: a feszültségforrásra egy ellenálláson keresztül kapcsoljuk rá a kisülési cellát, ami egy alacsony nyomású (0,1–10000 Pa) gázt tartalmazó cső két végén elektródákkal (lásd: 1. ábra).



1. ábra. Egyenfeszültségű (DC) gázkisülés áramkörének vázlata.

A gáz sokféle anyagi minőségű lehet; legegyszerűbben a nemesgázokban lejátszódó kisülések modellezhetők, ahol a töltött részecskék túlnyomó többsége egyszeres pozitív töltésű ion és elektron. Jelen munkámban argon gázban kialakuló kisüléseket vizsgálok. A gázkisülések kialakulásának alapvető mechanizmusa a gáz átütése. Az átütés létrejöttének alapfeltétele a töltött részecskék jelenléte a kisülési térben, amelyet alapvetően semleges gáz tölt ki. Az elsődleges töltött részecskék megjelenését biztosíthatja a (kozmosz eredetű) háttérsugárzás, mesterséges röntgenforrás vagy a katód fűtése. Az elektronok és az ionok a feszültség hatására az elektródák felé gyorsulnak, és útjuk során a háttérgáz atomjaival ütköznek. Ilyenkor rugalmas ütközés, gerjesztés vagy ionizáció játszódik le. Az átütés szempontjából ez utóbbi folyamat kulcsjelentőségű: növeli a töltött részecskék számát a kisülési térben. Az egyre több, elektromos térben gyorsuló töltött részecske hatására egyre gyakoribb ütközések, egyre intenzívebb ionizáció játszódik le: ezt a töltéssokszorozódási folyamatot nevezzük elektronlavinának. Ilyen elven működnek a részecske- és magfizikában széles körben alkalmazott gáztöltésű detektorok, ahol a detektálandó részecske megjelenése hozza létre a kezdeti töltést, a beütésenként újra és újra felépülő és részecske-utánpótlás híján lecsengő elektronlavina pedig mérhető impulzust eredményez az áramkörben.

A gáz átütésének legegyszerűbb leírását a Townsend-elmélet adja. Ennek alapfeltevése, hogy (jó közelítéssel) csak elektronok és egyszeres pozitív töltésű ionok vannak jelen a gáztérben – ahogy az a fenti esetben is fennáll –, illetve, hogy a sokszorozódó töltött részecskék nem torzítják jelentősen a külső feszültség által keltett – egyenfeszültség esetén konstans és homogén – elektromos teret. A geometriailag legegyszerűbb, síkpárhuzamos elektródaelrendezés esetén az elektronok fluxusa a katódtól mért távolság függvényében exponenciálisan növekszik:

$$\Gamma_e(x) = \Gamma_e(0)e^{\alpha x}, \quad (1)$$

ahol $x = 0$ a katód helye, α pedig a gázra jellemző, úgynevezett Townsend-féle ionizációs együttható, a hosszegységre jutó relatív fluxusváltozás, vagyis a hosszegység alatt keltett, egy elektronra jutó elektron-ion párok száma:

$$\alpha(x) = \frac{1}{\Gamma_e(x)} \frac{d\Gamma_e(x)}{dx}, \quad (2)$$

ami a kisülési térben állandó. Az elektródák távolságát L -vel jelölve, az anódra érkező elektronfluxus:

$$\Gamma_e(L) = \Gamma_e(0)e^{\alpha L}. \quad (3)$$

Egy elektronlavina kialakulása során képződött ionok közül $e^{\alpha L} - 1$ ion visszajut a katódra [1], így ott az ionfluxus:

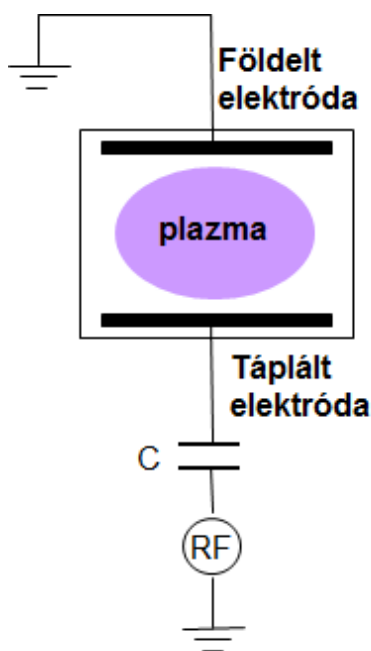
$$\Gamma_i(0) = -\Gamma_e(0)[e^{\alpha L} - 1]. \quad (4)$$

Az önfenntartó, állandósult állapotú gázkisülés akkor alakul ki, ha a katódnak ütköző ionok elegendő elektront váltanak ki onnan, biztosítva ezzel a töltött részecskék utánpótlását a kisülési térben. Egzaktul megfogalmazva:

$$-\gamma\Gamma_i(0) = \Gamma_e(0), \quad (5)$$

ahol γ az ion-indukált elektronkiváltási együttható, ami megadja annak a valószínűségét, hogy egy beérkező ion elektront vált ki a katódból. A fenti feltétel teljesülésével a katódból kilépő elektronfluxus, és azon keresztül minden más, a gázkisülést jellemző mennyiség időben állandó. A töltéshordozók áramlása pedig vezetővé teszi a plazmát, azon – jellemzően gyenge, μA -es értékű – egyenáram folyik. Az átütési feszültséget meghaladva a kisülésben tértöltések halmozódnak fel, az elektromos tér torzul, és széles paramétertartományban állandósult állapot alakulhat ki a belső vagy az áramköri visszacsatolási mechanizmusok miatt.

Az állandósult állapotú kisülésben folyamatos ionizáció megy végbe. Természetesen nem ez az egyetlen folyamat, ami a részecskék ütközése révén bekövetkezik. A kisülés viselkedése szempontjából nemesgázoknál meghatározó még az atom és elektron közti rugalmas ütközés, illetve a gerjesztés, ami általában fotonkibocsátást eredményez – ez utóbbinak köszönhető, hogy a plazma világít (ködfénykisülés). Az atomok és elektronok ütközése mellett gyakoriak az atomok és ionok közti ütközések: itt a rugalmas szórás mellett nagy feszültségnél szintén jelentős lehet az ionizáció. Molekuláris gázoknál általában ezeken kívül egyéb, bonyolultabb folyamatokat is figyelembe kell venni. Az egyes folyamatok hatáskeresztmetszetei energiafüggők, az irodalomban fellelhetők rájuk részletes adatok. A folyamatok hatáskeresztmetszeteinek viszonyai együttesen határozzák meg a végbemenő ionizációk gyakoriságát, így végeredményben az egész kisülés működését.



2. ábra. Kapacitív csatolású rádiófrekvenciás gázkisülés áramkörének sematikus rajza.

1.2. Kapacitív csatolású rádiófrekvenciás gázkisülések

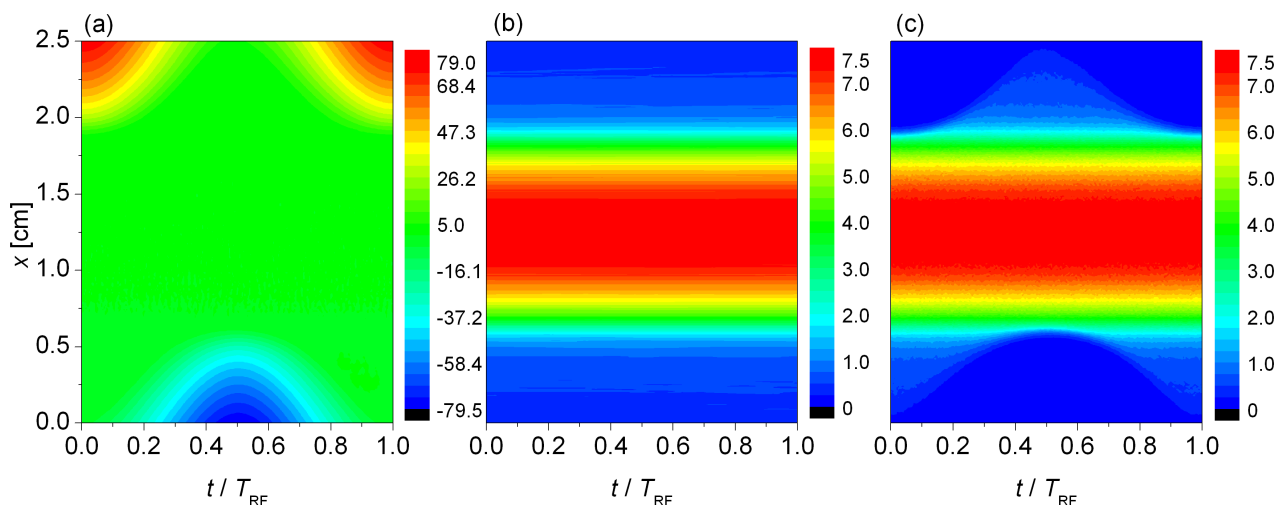
Gázkisülések kialakítására nemcsak az imént áttekintett egyenfeszültségű táplálás mellett van lehetőség: a gyakorlati alkalmazások szempontjából is igen jelentős a rádiófrekvenciás (RF, 1–100 MHz) váltakozó (többnyire szinuszos) feszültséggel táplált kisülések vizsgálata, melyek különleges, az egyenfeszültségű esetben meg nem jelenő jellemzőkkel bírnak. Kapacitív rádiófrekvenciás gázkisüléseket tipikusan két vákuumkamrába helyezett síkpárhuzamos elektróda között hozunk létre, vagyis az elrendezés egy kondenzátorra emlékeztet (lásd: 2. ábra). Ebben az összeállításban az egyik elektróda földelt, a másik RF feszültséggel táplált. A generátor és a táplált elektróda egy kondenzátoron keresztül van összekötve. A csatoló kondenzátorra azért van szükség, mert bizonyos paraméterek mellett a gázkisülés a két elektróda közti egyenfeszültségű (DC) komponens kialakulása mellett stabilizálódik, amit a kondenzátor egyenlít ki, azaz, a rádiófrekvenciával táplált teljes áramkörben továbbra sem jelenik meg DC komponens. A plazmában az áram jó közelítéssel az elektródákra merőlegesen folyik, amennyiben az elektródák átmérője jóval nagyobb azok távolságánál.

A kapacitív csatolású, rádiófrekvenciás gerjesztésű gázkisülések működési mechanizmusa elsősorban abban tér el az egyenfeszültségűekétől, hogy a részecskék utánpótlásához, a plazma

önfenntartásához nincs feltétlen szükség az elektródákból kilépő elektronokra. Ebből következik egy gyakorlati szempontból kulcsfontosságú sajátosságuk: szigetelő elektródák között is létrehozhatók. Jelen munkám lényegi részében szilícium-dioxid (SiO_2) elektródák között lejáruló kisüléseket modellezek. A szigetelő elektródák gyakorlati jelentősége abban áll, hogy az elektródákra érkező ionok fluxusának és energiájának megfelelő szabályozásával a kisülés az elektródák felületkezelési eljárásaként alkalmazható. SiO_2 esetében a számítástechnikai ipar komoly igényt jelent az ilyen irányú kutatásokra.

A tipikus (nagyságrendileg 10 MHz) gerjesztési frekvenciák mellett az elektronok követik a gerjesztő feszültség változását, az ionok viszont nagyságrendekkel nagyobb tömegük miatt annak időátlaga szerint mozognak. Ennek következtében az ionsűrűség-profil időben stacionárius, az elektródák közelében pedig félperiódusonként elektronokkal telített, illetve kiürített réteg jelenik meg, a kettő egymáshoz képest egy időben ellentétes oldalon (lásd: 3. ábra). Az elektronsűrűség és az elektromos térerősség az elektródák közelében követi a tápfeszültség frekvenciáját. Az elektronok és az ionok számsűrűsége a plazma közepén maximális, az elektródák felé mindkét irányban folyamatosan csökken. A középső tartomány kvázisemleges plazmát alkot, benne a pozitív és negatív töltéshordozók sűrűsége gyakorlatilag egyenlő, azaz itt az elektronok sűrűsége sem változik időben. Az elektródák szimmetrikus elrendezése esetén a töltéshordozók sűrűsége a középső térrészben szimmetrikus, a cella közepétől a széle felé haladva enyhén csökkenő, majd a határrétegnél hirtelen leeső. Az ionsűrűség a két elektróda közelében is szimmetrikus egymással, míg az elektronsűrűség leesésének helye, ahogy arról fentebb is szó volt, a periódusidőnek megfelelően változik.

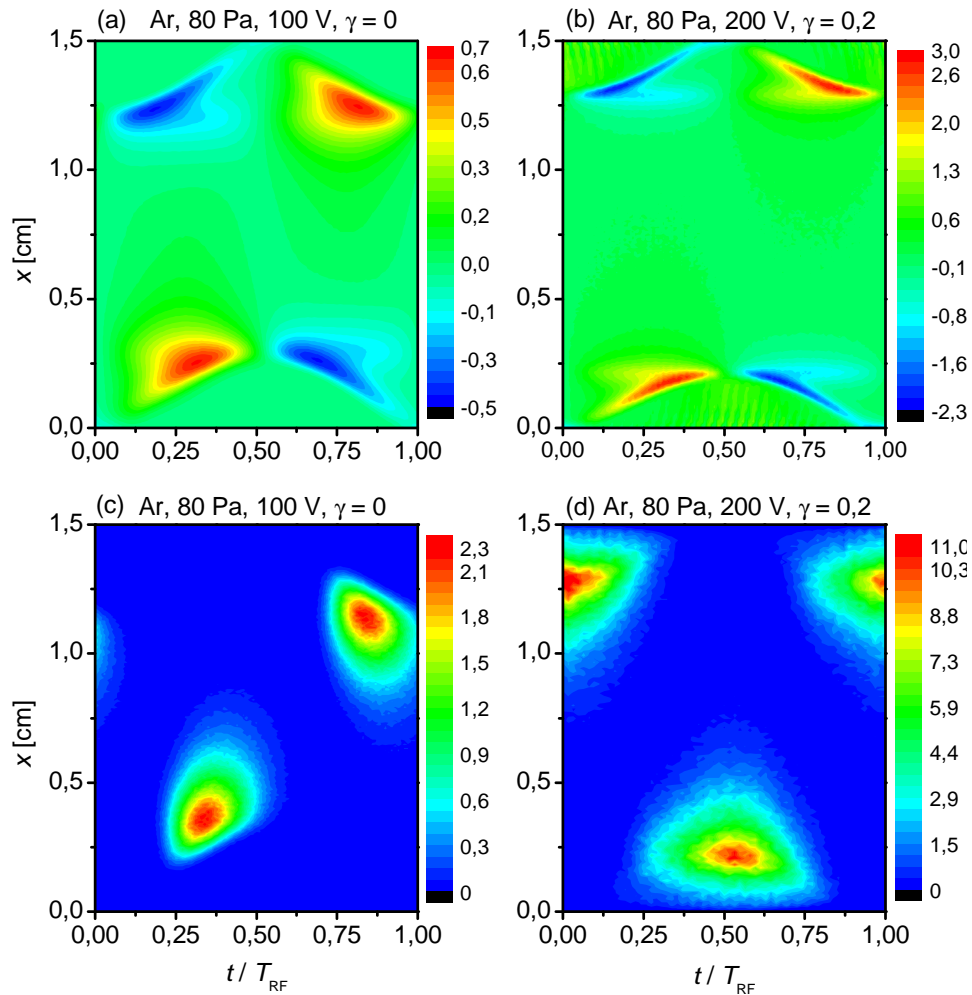
A gáztér tehát három jól elkülönülő tartományra oszlik: a két tértöltött határréteget a túlnyomórészt angol nyelvű szakirodalom *plasma sheath*-nek, a középső kvázisemleges térrészt *bulk*nak nevezi. A határrétegek hossza a periódusidőnek megfelelően változik, szélső helyzetben az egyik oldalt maximális, másik oldalt minimális. A plazmát a határréteg léte és változása teszi önfenntartóvá: az elektronok a határréteggel mint kemény fallal ütköznek [2]. Mivel a határréteg a gerjesztés frekvenciájával mozog, sebessége lehet azonos vagy ellentétes irányú az elektronéval, így az elektron energiát nyer vagy veszít az ütközés során. Azonban a visszahúzó határréteggel ütköző lelassuló elektront az ellentétes félperiódusban az erős elektromos tér újra gyorsítja – ekkor ott jön létre a kiürített réteg – így tehát a határrétegek mozgásának és az ütközések hatásának következtében az elektronok időátlagban energiát nyernek a rádiófrekvenciás táplálásnak köszönhetően. A nagy energiájú elektronok utánpótlása biztosítja az újabb és újabb ionizációt, vagyis a töltéshordozók utánpótlását. A rádiófrekvenciás gázkisülés



3. ábra. Az E [kV/m] elektromos térerősség (a), az n_i [$10^{15}/\text{m}^3$] ionsűrűség (b) és az n_e [$10^{15}/\text{m}^3$] elektronsűrűség (c) tér- és időbeli eloszlása. A vízszintes skála egy rádiófrekvenciás periódus (T_{RF}) időtartamának felel meg. A függőleges skálán $x = 0$ cm a táplált, $x = 2,5$ cm a földelt elektróda pozíciója. Kisülési paraméterek: $f = 13,56$ MHz; $L = 2,5$ cm; $p = 10$ Pa; $U = 300$ V.

tehát az elektródák felületéből kilépő elektronok nélkül is önfenntartóvá válhat, nem úgy, mint az egyenfeszültségű kisülés.

Az imént leírt energiabetáplálási mechanizmust α -módnak nevezzük, mivel a tértöltött réteg határán gyorsuló elektronok intenzív ionizációt keltenek, ami a Townsend-féle α ionizációs együtthatóval áll kapcsolatban. Emellett megjelenhet, illetve ennél intenzívebbé válhat a γ -módnak nevezett energiabetáplálás: itt a kisülés fenntartásában nagy jelentősége van az elektródáknak ütköző ionok és adott esetben elektronok által keltett másodlagos elektronoknak. Ezeket az elektronokat γ elektronoknak is szokás nevezni, a γ -val jelölt – fentebb is használt – felületi elektronkiváltási együttható után. A kétféle energiafelvételi mechanizmus működését a 4. ábra segítségével [3] ismertetjük és szemléltetjük. A γ -mód lényege minden esetben, hogy az elektródákból kilépő elektronokat a határréteg kiterjedésével azonos félperiódusban kialakuló nagy elektromos tér erőteljesen gyorsítja. A felgyorsult másodlagos elektronok a kiterjedt határrétegben intenzíven ionizálnak. Az ilyen módon végbemenő energiabetáplálást nevezzük γ -módnak, ami hatékony felületi folyamatok esetén meghatározóvá válik a kisülés tulajdonságai szempontjából.



4. ábra. A plazma által felvett P [10^5 Wm^{-3}] teljesítménysűrűség (a, b) és az S [$10^{21} \text{ m}^{-3}\text{s}^{-1}$] ionizációs ráta (c, d) tér- és időbeli eloszlása α (a, c), illetve γ (b, d) módban működő kisülésekre [3]. Kisülési paraméterek: $f = 13,56 \text{ MHz}$; $L = 1,5 \text{ cm}$; a többi paramétert az egyes panelek mutatják.

A fentiekben több különböző plazmajellemzőről szót ejtettünk (elektromos térerősség, ion-sűrűség, elektronsűrűség, az ionizáció gyakorisága, az ún. ionizációs forrásfüggvény és az elektronok energiafelvétele). Megjegyzendő, hogy mindezek kialakulásának lényegi mozgatórugója a kisülést meghajtó váltakozó feszültség és az azáltal a részecskeáramra szabott feltétel: a váltakozó feszültségű táplálás következtében egyenáram nem folyhat a rendszerben, a soros kapcsolás miatt pedig önmagában a plazmán sem. A rádiófrekvenciás periódusra (T_{RF}) vett időátlagban zérus áram kétféle töltéshordozó mozgása mellett úgy jöhet létre, ha mindkét elektródára azonos mennyiségű pozitív és negatív töltéshordozó érkezik, azaz az elektron- illetve ionfluxus időátlagban mindkét elektródán egyenlő:

$$\langle \Gamma_i \rangle_{T_{\text{RF}}} = \langle \Gamma_e \rangle_{T_{\text{RF}}}. \quad (6)$$

Az áramkörben folyó egyenáramok hiánya okozza, hogy szigetelő elektródákkal is működhet a kisülés, hiszen vezető elektródák között sem folyhat áram a plazmán keresztül.

2. Motiváció, célkitűzések

A rádiófrekvenciás gázkisülések numerikus szimulációjában lényeges kérdés a felületi folyamatok modellezése. A szimulációk összetett volta, nagy számításigénye miatt ennek részletes kidolgozása sokszor háttérbe szorul, sok esetben pedig az adott – a plazma töltött részecskéinek az elektródákkal való ütközésekor végbemenő – felületi folyamatokra vonatkozó mérési eredmények hiánya gátolja a pontos leírás megvalósítását a szimulációban.

Az elektron–elektróda kölcsönhatás kapcsán gyakori közelítés, hogy az elektródákra érkező elektronok kivétel nélkül elnyelődnek, illetve ennél valamivel árnyaltabb megközelítés a konstans – energia- és szögfüggetlen, azaz a kisülés paramétereire kevésbé érzékeny – rugalmas reflexiós együttható feltételezése, például $\delta_e = 0, 2$ értékkel [4]. Részletes vizsgálatok kimutatták, hogy a rugalmas együttható különböző, 0 és 1 közötti értékeire a minden más paraméterben megegyező szimulációk jelentősen eltérő eredményeket produkálnak: az átlagos plazmasűrűség akár kettes faktorról változhat, valamint megváltozik a tértöltött réteg kiterjedése, a térerősség nagysága, az ionizációs dinamika, illetve az elektródákra érkező ionok fluxusa és átlagenergiája [5]. Ebből is látszik, hogy a szimulációkban fontos a felületi folyamatok pontos, minél realiztikusabb leírása, hiszen azok nagy mértékben befolyásolhatják a kisülés működését és a plazmajellemzőket.

Valójában mind az elektronok, mind az ionok összetett módon hatnak kölcsön az elektródákkal: az energiájuk és a beesési szögük lényegi tényező lehet, és az elektróda anyagi minősége,

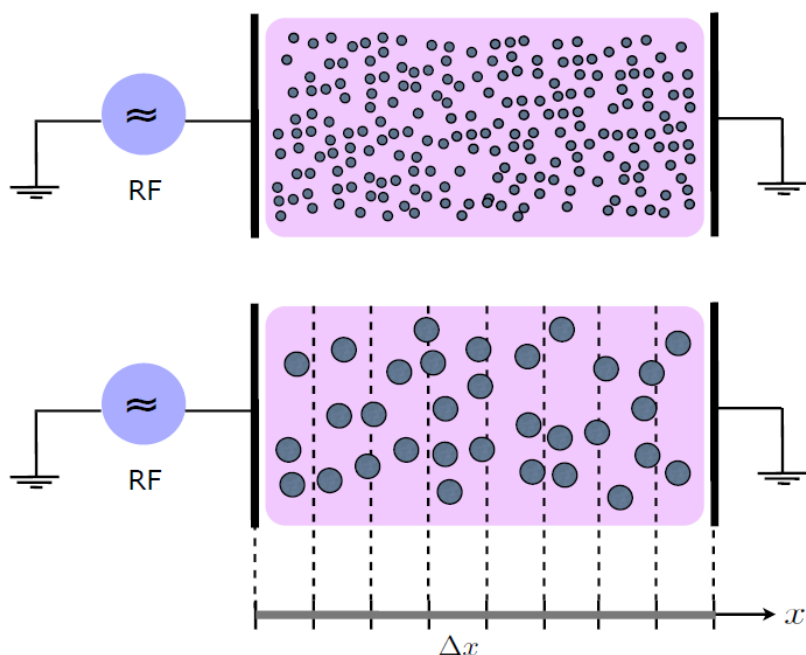
felszínének tulajdonságai – mint például a simaság és a kémiai tisztaság – is nagyban meghatározzák a valóságban végbemenő folyamatokat. Az elektronok esetében a visszaverődés és az elnyelődés mellett a kisülés viselkedésére jelentős hatással bír az elektronkiváltás: ahogy az ionok, úgy a megfelelő energiával érkező elektronok is kiválthatnak az elektródák felületéről elektronokat. Céлом az elektronok által kiváltott másodlagos elektronok kisülésre gyakorolt hatásának vizsgálata szimulációs módszerekkel. Ehhez egy empirikus energiafüggő modellt veszek alapul, amit egy szimulációs kódba implementálok.

3. A "Particle-in-Cell/Monte Carlo Collisions" (PIC/MCC) szimulációs módszer

A plazmák leírásának – a különféle közelítésekkel élő elméleti modellek mellett – egyik széles körben elterjedt megközelítése a kinetikus elmélettel ekvivalens részecskealapú numerikus (Monte Carlo) szimuláció. Ennek során egyenként követjük a részecskék (részecskecsoportok) mozgását mozgásegyenleteik numerikus integrálásával. Ez igen nagy számításigényű művelet, így a módszer lehetőségei a számítástechnikai fejlődéssel együtt folyamatosan bővülnek. Az eljárás csupán néhány évtizedes múltra tekint vissza; manapság leginkább a párhuzamosítás elterjedése és fejlődése jelent benne nagy előrelépést.

A rádiófrekvenciás gázkisülések numerikus szimulációjához a területen széles körben elterjedt "Particle-in-Cell/Monte Carlo Collisions" (PIC/MCC) módszert használom [6]. A PIC-szimuláció két legfontosabb alapjellemezője, hogy több részecskét együtt kezel, így a jelen lévő (számon tartott) részecskék számának csak a töredéke az önállóan mozgó részecske, amelyekre külön-külön kell időlépésenként integrálni a mozgásegyenletet, valamint, hogy az elektrosztatikus kölcsönhatást átlagtérelmélet alapján közelíti. Ezt egészíti ki a Monte Carlo eljárás, ami a részecskék közti ütközési folyamatokat valószínűségi alapon, véletlen számok előállítására alapján modellezi. Jelen esetben a PIC/MCC modell koordinátatérben egydimenziós – a két elektródára merőlegesen mért pozíciót (x) tartjuk számon, ami sík és párhuzamos elektródák esetén elegendő –, sebességtérben háromdimenziós.

A PIC-módszer egyik lényegi technikai egyszerűsítése a bizonyos számú részecskék koordinátáinak együtt történő kezelése. Az ebben a munkában ismertetett szimulációk esetében 10^4 – 10^7 között változik a részecskék súlytényezője. A kisülések szimulációja jellemzően mintegy 100 000 különbözőképp mozgó részecskére – ezeket hívjuk szuperrészecskéknek, hiszen



5. ábra. A szuperrészecskék és a rács bevezetése.

a súlynak megfelelő számú valódi részecskét reprezentálnak – működik hatékonyan, e fölött a futási idő túlságosan megnövekszik. Ezzel az egyszerűsítéssel továbbra is hatékonyan nyomon követhető a kisülések működése. A szuperrészecskék praktikus okokból csak egy típusú részecskét – jelen esetben elektronokat vagy Ar^+ ionokat – reprezentálnak.

A töltött részecskék közti elektrosztatikus kölcsönhatás számolásához bevezetünk egy rácsot: a helykoordináták szerint felosztjuk a kisülési teret bizonyos számú cellára (a későbbiekben ismertetett szimulációk esetében ez a szám 500–1200 közötti). A szuperrészecskék és a rács bevezetését egy sematikus rajzon szemléltetjük (5. ábra). A szuperrészecskék töltését hozzárendeljük a hozzájuk legközelebb lévő két rácsponthoz, az egyes rácspontoktól való távolságukkal fordított arányban. A töltéssűrűség így kizárólag a rácspontokba koncentrálódik. Az elektromos potenciál rácspontokban érvényes értékét a Poisson-egyenlet numerikus megoldásával számoljuk ki, ami a ponttöltések és az egydimenziós rács révén igen egyszerű. Határfeltételként figyelembe kell vennünk az elektródákra kapcsolt feszültséget: a földelt elektróda potenciálja zérus, a meghajtotté a generátor szinuszos váltakozó feszültsége. A potenciálból egyszerű numerikus deriválással kiszámolható a rácspontokban felvett térerősség, a rácspontok közötti pontokban – a részecskék valódi helyén – pedig lineáris interpolációval adjuk meg a

térerősséget. Ebből adódik az egyes részecskékre ható elektrosztatikus erő, aminek ismeretében külön-külön megoldjuk azok mozgásegyenleteit. A mozgásegyenletek numerikus integrálása az úgynevezett leapfrog-séma szerint történik: a diszkrét időlépés nagysága azonos a részecskék koordinátájára, sebességére és a térerősségre, azonban a sebességet az időlépés felével eltolva értékeljük ki a másik két mennyiséghez képest. Az egyenletek:

$$v\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = v\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{q}{m}E(x(t))\Delta t, \quad (7)$$

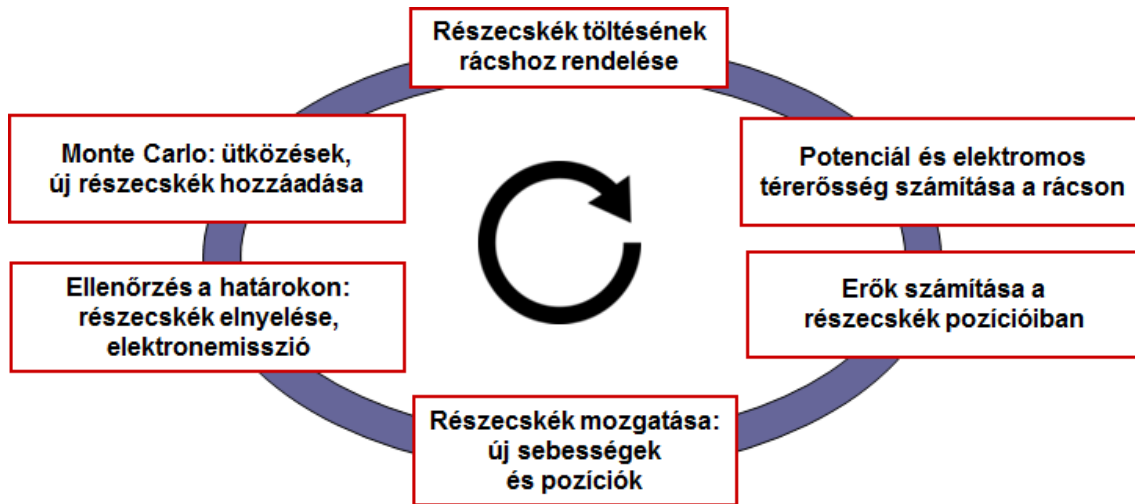
$$x(t + \Delta t) = x(t) + \bar{v}(t)\Delta t,$$

ahol q és m a szuperrészecske töltése és tömege, $E(x(t))$ a részecske helyén felvett térerősség, Δt az időlépés hossza, ami a rádiófrekvenciás periódus töredéke, $\bar{v}(t)$ pedig a $\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right)$ és $\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)$ időpillanatban számolt sebességek átlaga.

Az ütközések Monte Carlo szimulációja elméleti és megvalósítási síkon egyaránt igen összetett [7], és a mozgásegyenletek megoldása mellett a számítási műveletek meghatározó részét teszi ki. Az elektronok több nagyságrenddel kisebb tömegük miatt sokkal gyorsabban mozognak a háttérgázhoz képest – sok esetben el is hanyagolható az atomok mozgása. Egy adott időpillanathoz képest eltelt diszkrét Δt időlépés után egy adott részecske atommal való ütközésének valószínűsége a következő:

$$P_c(\Delta t) = 1 - \exp[-n_0\sigma(g)g\Delta t] = 1 - \exp[-\nu(g)\Delta t], \quad (8)$$

ahol n_0 a háttérgáz részecskeszám-sűrűsége, σ a teljes – minden lehetséges folyamatot tartalmazó – ütközési hatáskeresztmetszet, ami függ a vizsgált részecske potenciális ütközőpartneréhez képesti g relatív sebességétől, ν pedig az ezek szorzatából adódó ütközési frekvencia. A szimulációban az időlépést úgy kell megválasztani, hogy az alatt a részecskék sebessége jó közelítéssel állandó legyen, és elhanyagolható legyen a többszörös ütközések valószínűsége. A potenciális ütközőpartnert véletlenszerűen választjuk minden részecskére, minden időlépésben. Az ütközés bekövetkezését a fenti valószínűség egy 0 és 1 közötti egyenletes eloszlású véletlen számmal (R_{01}) történő összehasonlításával döntjük el ($R_{01} < P_c$ esetén következik be az ütközés). Az ütközés típusát a különböző folyamatok hatáskeresztmetszeteinek arányában határozzuk meg, egy további véletlen szám segítségével. Ütközés bekövetkeztekor megváltozik a részecskék sebességvektora: ilyenkor a tömegközépponti koordinátarendszerbe áttérve, az adott típusú ütközésnek megfelelő energia- és szögeloszlás szerint transzformáljuk a sebességeket. A



6. ábra. A PIC-MCC szimuláció egy ciklusának folyamatábrája.

fentihez képest nagy jelentőségű számolástechnikai egyszerűsítés az úgynevezett null-ütközés módszer: amennyiben az ütközési frekvencia állandó – sebességfüggetlen –, az egy időlépés alatt bekövetkező ütközés valószínűsége minden részecskére megegyezik. Ez azt jelenti, hogy N részecskeszám esetén $N \cdot P_c$ számú ütközés történik egy időlépés alatt, ahol tehát P_c állandó. Egy adott időlépésben véletlenszerűen választjuk ki a megfelelő számú ütköző részecskét, azaz nem szükséges kiszámolni minden egyes részecske ütközési valószínűségét a fentebbi sebességfüggő képlet szerint, amivel jelentős gépidő takarítható meg. Állandó ütközési frekvenciát egyszerűen definiálhatunk: vesszük az összes folyamat teljes vizsgált energiatartományban (sebességtartományban) felvett értékeinek maximumát (ν'). A figyelembe vett folyamatok mellett definiálunk egy olyan folyamatot, aminek az ütközési frekvenciája minden energiaértékre pont akkora, hogy kiegészítse a teljes ütközési frekvenciát ν' -re. Az ütközések típusának kiválasztásakor a valódi folyamatok mellett a null-ütközést is figyelembe vesszük lehetőségként, a hatáskeresztmetszétének megfelelő valószínűséggel. Amennyiben ez a folyamat "következik be", nem módosítjuk a részecske hely- és sebességkoordinátáit.

Összefoglalva, a PIC/MCC szimuláció egy ciklusa (egy Δt időlépés) tehát a következő műveletekből áll (6. ábra, [8, 9, 10, 11]):

1. A szuperrészecskék töltését hozzárendeljük a rácspontokhoz.
2. A Poisson egyenlet megoldásával kiszámítjuk a potenciált és a térerősséget a rácspontokban.

Reakcióegyenlet	Jelentése	Hatáskeresztmetszeti adatok
1 $e^- + \text{Ar} \rightarrow e^- + \text{Ar}$	elektron rugalmas szóródása atomon	[12]
2 $e^- + \text{Ar} \rightarrow e^- + \text{Ar}^*$	elektron általi atomi gerjesztés	[12]
3 $e^- + \text{Ar} \rightarrow 2e^- + \text{Ar}^+$	elektron általi ionizáció	[12]
4 $\text{Ar}^+ + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar}$	izotrop rugalmas szórás	[13]
5 $\text{Ar}^+ + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar}$	rugalmas visszaszórás	[13]
6 $\text{Ar}^+ + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar}^*$	ion általi atomi gerjesztés ¹	[12, 14]
7 $\text{Ar}^+ + \text{Ar} \rightarrow 2\text{Ar}^+ + e^-$	ion általi ionizáció	[12, 14]

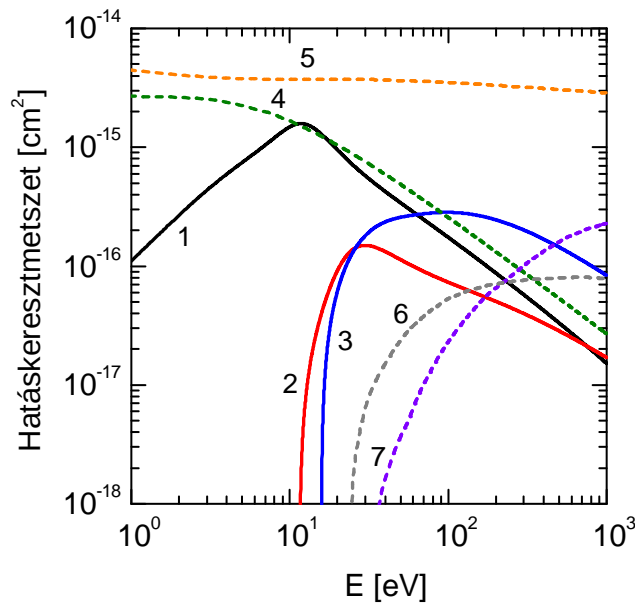
¹ Valójában három különböző folyamatról van szó, különböző hatáskeresztmetszetekkel, azonban ezeket együtt tüntetjük fel itt és a 7. ábrán is: az Ar atom UV-vonala, valamint a 488 nm és 811 nm hullámhosszú vonalak.

1. táblázat. *A szimuláció során figyelembe vett ütközési folyamatok.*

- Kiszámítjuk a térerősséget és az erőt a részecskék pozícióiban (lineáris interpoláció).
- A mozgásegyenletek integrálásával kiszámítjuk a részecskék új koordinátáját és sebességét.
- A kisülési tér határfelületére érkező részecskék kezelését az elektródákon végbemenő felületi folyamatoknak megfelelően végezzük el: különböző valószínűséggel történhet elnyelődés, visszaverődés és másodlagos elektronemisszió (oldalsó falakat az egydimenziós modellben természetesen nem veszünk figyelembe).
- Az ütközéseket Monte Carlo módszerrel szimuláljuk: az ütközés típusának megfelelően megváltoztatjuk az ütközőpartnerek sebességvektorát, illetve koordinátákat adunk az újonnan keletkezett részecskéknek.

Lényeges, hogy a szimulációs ciklus időlépése töredéke legyen a rádiófrekvenciás ciklus periódusidejének, hiszen másképp nem tudnánk megfigyelni a váltakozó feszültség által meghatározott mechanizmusokat.

A későbbiekben ismertetésre kerülő szimulációk esetén az 1. táblázatban látható folyamatokat vesszük figyelembe a plazmát alkotó részecskék között, melyek hatáskeresztmetszetei a 7. ábrán láthatók.



7. ábra. Az ütközési folyamatok hatáskeresztmetszetei az energia függvényében.

4. Új modell a felületi folyamatok vizsgálatára

4.1. A modell ismertetése

Az elektronok és az elektróda kölcsönhatásának PIC-szimulációval történő leírásában a Sydorenko által kidolgozott gondolatmenetet követjük [15]. Az elsődleges – elektródára érkező – elektronfluxusra bevezetjük a Γ_1 , a másodlagos – az elsődleges hatására az elektródából kiinduló – fluxusra a Γ_2 jelölést. Ezek aránya a teljes másodlagos emissziós együttható (σ_t), amely rugalmas és rugalmatlan visszaverődésből, illetve valódi másodlagoselektron-kibocsátásból tevődik össze [16, 17]:

$$\frac{\Gamma_2}{\Gamma_1} = \sigma_t = \delta_e + \delta_i + \delta_v, \quad (9)$$

ahol δ_e a rugalmas visszaverődési együttható, δ_i a rugalmatlan visszaverődés, δ_v pedig a valódi másodlagos elektronok kibocsátásának együtthatója. A δ együtthatók külön-külön az adott folyamatból származó, elektródáról induló másodlagos fluxus elsődlegeshez viszonyított arányát adják meg, ami az elemi folyamatok szintjén valószínűségként értelmezhető: Monte Carlo szimulációban véletlen szám generálásával döntünk az adott folyamat bekövetkeztéről. A teljes másodlagos elektronfluxus numerikus számolására Vaughan vezetett be elsőként empirikus

formulát, ami az adott felületre beeső elektronnyaláb által keltett másodlagos elektronnyaláb fluxusát adja meg a beeső nyalábéhoz képest [18, 19]:

$$\sigma_V = \sigma_{max}[we^{1-w}]^k, \quad (10)$$

ahol

$$w(\varepsilon, \theta) = \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon_{max}(\theta) - \varepsilon_0},$$

$$\varepsilon_{max}(\theta) = \varepsilon_{max,0} \left(1 + \frac{k_s}{2\pi} \theta^2 \right),$$

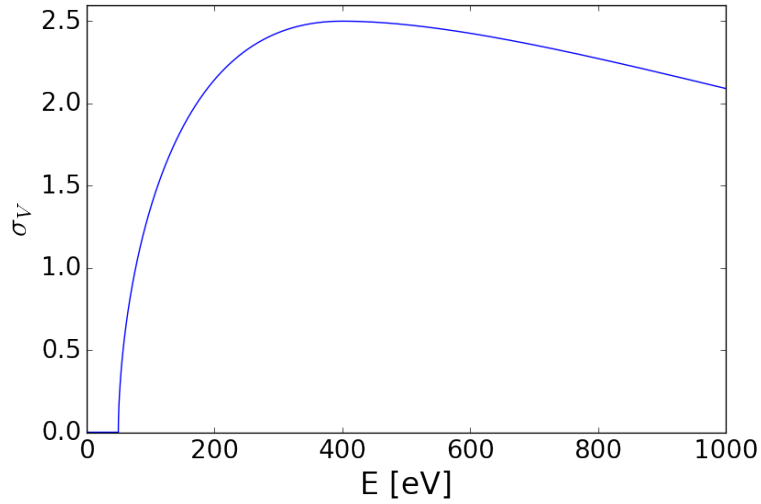
$$\sigma_{max}(\theta) = \sigma_{max,0} \left(1 + \frac{k_s}{2\pi} \theta^2 \right),$$

$$k = \begin{cases} 0,56 & w < 1, \\ 0,25 & w \geq 1. \end{cases}$$

A fentiekben ε és θ a beérkező elektronok energiája és beesési szöge, a merőleges beesést véve $\theta = 0$ -nak. A többi paraméter adott felületre beeső elektronnyaláb esetén állandó. ε_0 az elektronemissziós küszöbenergia, az ennél kisebb energiájú nyaláb elnyelődik, $\varepsilon_{max,0}$ és $\sigma_{max,0}$ pedig a másodlagos emisszióknak az adott felületre tapasztalható maximális értékéhez tartozó elektronenergia és maga a maximális relatív emisszió, amit előzetes mérési vagy elméleti számolási adatokból ismerünk. k_s a felület simaságát jellemző tényező: durva felületre az értéke 0 – ami szögfüggetlen másodlagos fluxust eredményez –, ideálisan sima felületre 2. A függvényalakot egy adott paraméterbeállításra a 8. ábrán láthatjuk. Sydorenko ezt az összefüggést azzal egészíti ki a PIC-szimulációkban való alkalmazáshoz, hogy a fent említett három folyamatra bontja a Vaughan-féle együtthatót, és alacsony energiákra bevezet egy korrekciót, ami energiafüggő módon veszi figyelembe az ebben a tartományban igen jelentős rugalmas visszaverődést, így a fenti ε_0 energiaküszöb alatt sem tűnik el a másodlagos emisszió. A rugalmas visszaverődés energiafüggése Sydorenko szerint:

$$\delta_e(\varepsilon, \theta) = r_e \sigma_V + \delta_{e,max} \begin{cases} w_1 e^{1-w_1} & \varepsilon_{e,0} < \varepsilon < \varepsilon_{e,max}, \\ [1 + w_2] e^{-w_2} & \varepsilon_{e,max} < \varepsilon, \end{cases} \quad (11)$$

ahol



8. ábra. A Vaughan-féle emissziós együttható a merőlegesen beeső ($\theta = 0$) elektron energiájának függvényében. Paraméterek: $\varepsilon_0 = 50$ eV; $\varepsilon_{max,0} = 400$ eV; $\sigma_{max,0} = 2,5$; $k_s = 1$.

$$w_1(\varepsilon) = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{e,0}}{\varepsilon_{e,max} - \varepsilon_{e,0}},$$

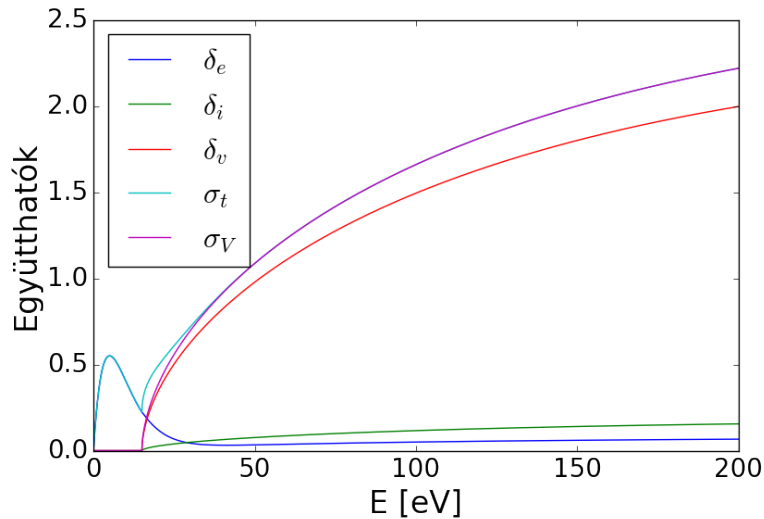
$$w_2(\varepsilon) = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{e,max}}{\Delta_e}.$$

A paraméterek: $\varepsilon_{e,0}$ a rugalmas visszaverődés küszöbenergiája – ez vehető 0-nak is –, $\varepsilon_{e,max}$ az energia, ahol a legintenzívebb a rugalmas visszaverődés, $\delta_{e,max}$ az ehhez tartozó maximális visszaverődési együttható, Δ_e a korrekciós tag nagy energián történő exponenciális lecsengését határozza meg, r_e pedig megadja, hogy nagy energián a teljes másodlagos elektronnyaláb mekkora része származik rugalmas visszaverődésből – a rugalmas együttható ennek megfelelő konstans értékhez tart. A rugalmatlan visszaverődés teljes másodlagos nyalábhoz képesti aránya energiafüggetlen [17]:

$$\delta_i(\varepsilon, \theta) = r_i \sigma_V, \quad (12)$$

ahol r_i egy konstans arányszám. A valódi másodlagoselektron-kiváltás együtthatója ezek után egyszerűen úgy adódik, hogy a Vaughan-féle teljes másodlagos emissziós együtthatóból kivonjuk a rugalmas és rugalmatlan visszaverődés arányának megfelelő tagot:

$$\delta_v(\varepsilon, \theta) = (1 - r_e - r_i) \sigma_V. \quad (13)$$



9. ábra. Az egyes folyamatok együtthatói, az ezek összegeként előálló teljes másodlagos emissziós együttható és a Vaughan-féle együttható SiO_2 felületre, melynek paraméterei: $\varepsilon_0 = 15$ eV; $\varepsilon_{max,0} = 400$ eV; $\sigma_{max,0} = 2, 5$; $k_s = 1$; $\varepsilon_{e,0} = 0$ eV; $\varepsilon_{e,max} = 5$ eV; $\delta_{e,max} = 0, 55$; $\Delta_e = 5$ eV.

A korrigált teljes másodlagos emissziós együttható:

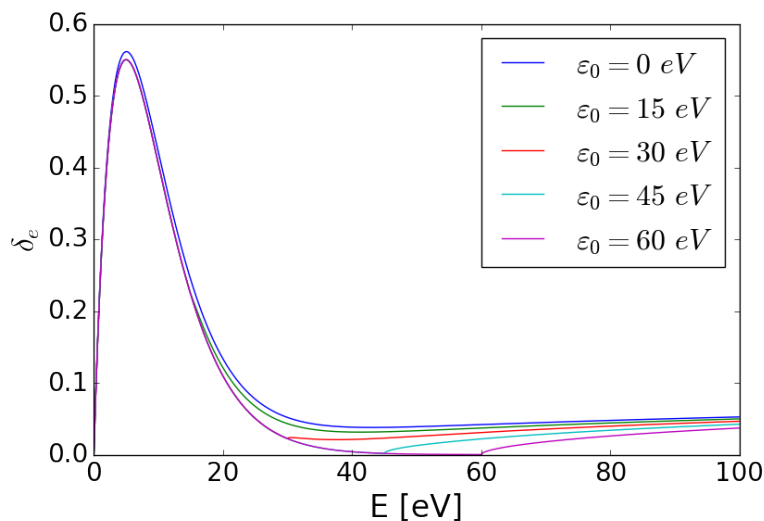
$$\sigma_t = \delta_e + \delta_i + \delta_v, \quad (14)$$

ami nagy energiákon megegyezik a Vaughan-féle σ_V együtthatóval, míg kis energián megjelenik benne a rugalmas visszaverődésből adódó többlet. A Vaughan-féle és a Sydorenko-féle másodlagos emissziós együtthatót, valamint külön-külön a rugalmas és rugalmatlan visszaverődés illetve a valódi másodlagos elektronkibocsátás ilyen módon definiált energiafüggő együtthatóit a szilícium-dioxid következőkben részletesen megindokolt paraméterkombinációjára a 9. ábrán tüntettem fel.

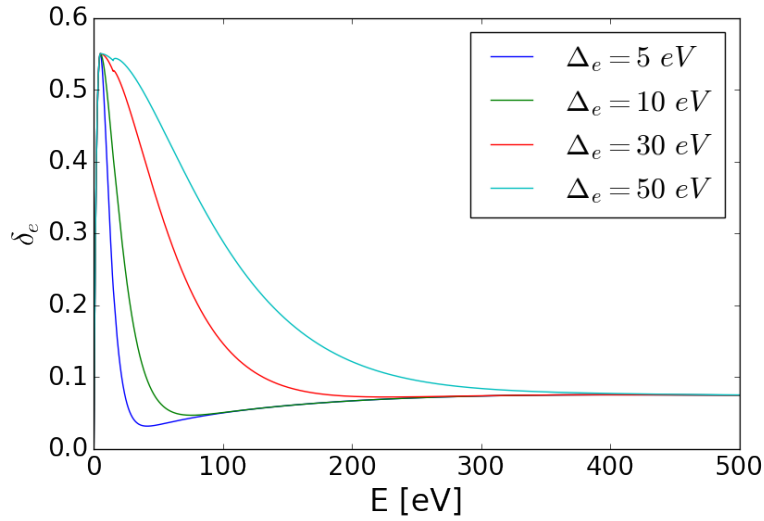
4.2. Paraméterbeállítások SiO_2 elektródákra

Az imént ismertetett modellt szilícium-dioxid (SiO_2) elektródák közt létrehozott, igen alacsony nyomású (0,5 Pa) gázkiszülésekben az elektronok és a felület között lejárló kölcsönhatások leírására alkalmazom. Különböző anyagú felületek másodlagos emissziós görbéjének maximumhelyére és maximumára található adatok az irodalomban [16]. Szilícium-dioxidra 400 eV-nál tapasztalható maximális emisszió, aminek értéke 2,1–2,9 között változik a mérési adatokban.

Ezek alapján a szimulációkban az $\varepsilon_{max,0} = 400$ eV, illetve a $\sigma_{max,0} = 2,5$ értékeket állítottam be. A rugalmas visszaverődés $\varepsilon_{e,0}$ küszöbenergiáját zérusnak veszem: indokolatlan lenne azt feltételezni, hogy a kis energiájú elektronok egyáltalán nem verődnek vissza, az alsó limit nélküli görbe pedig alakilag jól egyezik egyes fénoxidok és sók elektronemissziós együtthatóira vonatkozó mérési adatokkal [20]. Szükség van még a Δ_e exponenciális kontrollparaméter, a Vaughan-féle ε_0 küszöbenergia, a rugalmas visszaverődés maximumhelye és értéke, illetve a felület simaságát jellemző paraméter beállítására. Szilícium-dioxidra vonatkozó pontos adatok híján abból indultam ki, hogy dielektrikum felületek rugalmas visszaverési maximuma általában 5–10 eV között van, és 0,5-es arányú a maximális visszaverődés [21]. A szilícium-dioxid rugalmas visszaverődési csúcsának helyét $\varepsilon_{e,max} = 5$ eV-nak, a maximális visszaverődést $\delta_{e,max} = 0,55$ -nek vettem. A felületet geometriáját jellemző paraméter Vaughan modelljében 0 – 2 közötti értékeket vehet fel, a durvától a tökéletesen sima felszín felé haladva. Mivel általánosságban vizsgálom a SiO₂ elektródák között létrehozott kisüléseket, a köztes $k_s = 1$ értékre állítom be a paramétert, eltekintve a modellnek ettől a szabadsági fokától.



10. ábra. A rugalmas visszaverődés együtthatója a merőlegesen beeső ($\theta = 0$) elektron energiájának függvényében az ε_0 emissziós küszöbenergia különböző értékeire. Paraméterek: $\varepsilon_{max,0} = 400$ eV, $\sigma_{max,0} = 2,5$; $k_s = 1$, $\varepsilon_{e,0} = 0$ eV, $\varepsilon_{e,max} = 5$ eV, $\delta_{e,max} = 0,55$, $\Delta_e = 5$ eV.



11. ábra. A rugalmas visszaverődés együtthatója a merőlegesen beeső ($\theta = 0$) elektron energiájának függvényében Δ_e paraméter különböző értékeire. Paraméterek: $\varepsilon_{max,0} = 400$ eV, $\sigma_{max,0} = 2,5$; $k_s = 1$, $\varepsilon_{e,0} = 0$ eV, $\varepsilon_{e,max} = 5$ eV, $\delta_{e,max} = 0,55$, $\varepsilon_0 = 15$ eV.

A Vaughan-féle küszöbenergiát, azaz a felületből történő elektronkiváltás és a rugalmatlan visszaverődés küszöbenergiáját úgy állítom be, hogy ezáltal az ettől a paramétertől szintén függő rugalmas reflexió függvényében ne legyen jelentős törés: ez a fennmaradó Δ_e szabad paraméter különböző értékeinél egyaránt $\varepsilon_0 = 15$ eV környékén teljesül, ezt az értéket választom. A kontrollparamétert úgy állítom be, hogy a rugalmas visszaverődés együtthatója hamar lecsengjen: Seiler cikke [16] alapján a rugalmas visszaverődési csúcs félértékszélessége még a szélsőséges esetnek számító igen sima felszínű tiszta fémekre sem haladja meg a 12 eV-ot. A kontrollparamétert $\Delta_e = 5$ eV-nak választva az 5 eV-nál feltételezett rugalmas reflexió csúcs 20 eV környékén cseng le teljesen, ez tehát megfelelő választás. A paraméterek hatását a rugalmas visszaverődés energiafüggésére a 10. és a 11. ábrákon illusztrálom. A rugalmas és rugalmatlan visszaverődésből származó elektronok aránya a teljes másodlagos nyalábhoz képest: $r_e = 0,03$ és $r_i = 0,07$ [17]. A SiO₂ energiafüggő másodlagos emissziós együtthatóit már fentebb, a 9. ábrán feltüntettem, a paramétereket pedig táblázatos formában is közlöm (2. táblázat).

Paraméter	Jelentése	Értéke (SiO ₂)	Forrás
1	ε_0	a Vaughan-féle másodlagos emisszió küszöbenergiája	15 eV
2	$\varepsilon_{max,0}$	a másodlagos emissziós görbe maximumhelye	400 eV [16]
3	$\sigma_{max,0}$	a maximális másodlagos emisszió	2,5 [16]
4	k_s	a felszín simaságát jellemző paraméter	1
5	$\varepsilon_{e,0}$	a rugalmas visszaverődés küszöbenergiája	0 eV [20]
6	$\varepsilon_{e,max}$	a rugalmas visszaverődés maximumhelye	5 eV [21]
7	$\gamma_{e,max}$	a maximális rugalmas visszaverődés	0,55 [21]
8	Δ_e	a rugalmas visszaverődés lecsengésének paramétere	5 eV [20]
9	r_e	a rugalmatlanul visszaverődött elektronok részaránya	0,07 [17]
10	r_i	a rugalmasan visszaverődött elektronok részaránya	0,03 [17]

2. táblázat. *A másodlagos elektronemisszió modelljének bemeneti paramétereit SiO₂ elektródákra.*

4.3. A felületi folyamatok szimulációs algoritmus

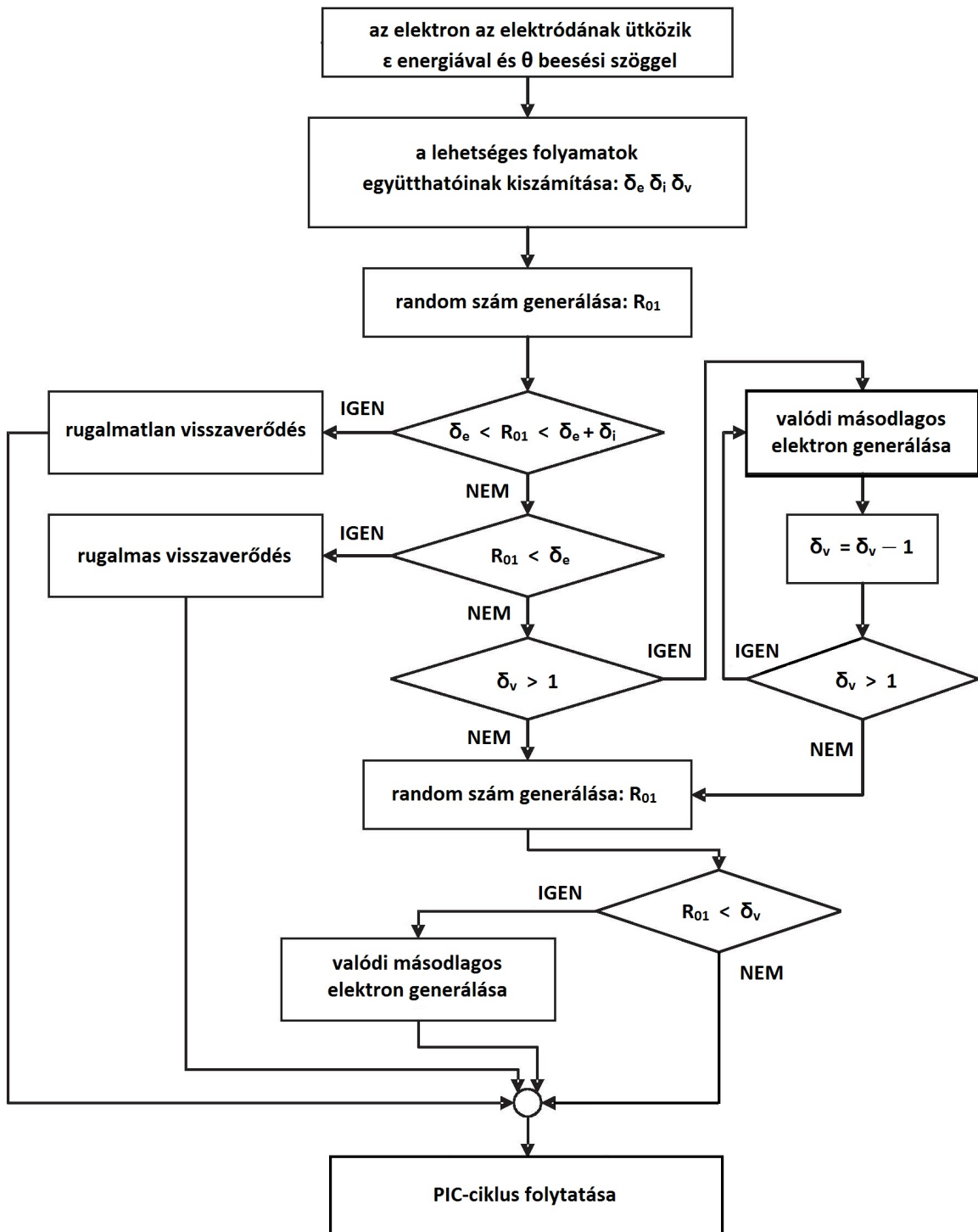
Az elektródák és a vele ütköző elektronok kölcsönhatásának szimulációja külön egységet képez a PIC/MCC ciklusban, ennek a részfolyamatnak az implementációjával kell tehát kiegészíteni a programkódot. Sydorenko ismertetett erre egy lehetséges megoldást, amit a szimulációkban felhasználtam [15]. Az algoritmus folyamatábrája a 12. ábrán látható. A lényegi lépések:

1. Az elektródának ütköző részecske energiájának és beesési szögének ismeretében kiszámolható (vagy előre kiszámolt adatsorból megkereshető) a rugalmas és rugalmatlan visszaverődés és a valódi elektronemisszió együtthatójának értékét, ami egyetlen elektron esetében az egyes folyamatok bekövetkezési valószínűségét jelenti.
2. Elsőként a visszaverődés végbemeneteléről kell dönteni, hiszen ha egy elektron visszaverődik az elektródáról – akár rugalmasan, akár rugalmatlanul –, nem válthat ki másodlagos elektront a felületről – egy ilyen folyamat az energiamegmaradás törvényébe ütközne. A rugalmatlan és rugalmas visszaverődés bekövetkeztéről egy 0 és 1 közötti véletlen szám generálásával döntünk. A lényeg, hogy amennyiben az adott folyamat együtthatójának megfelelő hosszúságú intervallumba esik a véletlen szám, akkor "lejátsszuk" az adott folyamatot. Az, hogy melyik típusú visszaverődésről döntünk előbb, nem lényeges, csak az a fontos, hogy ezt az egész szimuláció során ugyanúgy tegyünk.
3. Amennyiben nem verődik vissza az elektron, kiválthat másodlagos elektront. Ha a valódi másodlagos elektronemisszió együtthatója nagyobb, mint egy, akkor a beeső elektron az

együtthatható egész részének megfelelő számú elektront biztosan kivált az elektróda felületéről. A törtrész a még egy elektron kiváltásának valószínűségét jelenti, aminek bekövetkeztéről ismét véletlen számmal döntünk, ami természetesen különbözik a visszaverődés vizsgálatakor generált számtól.

Ezekkel a lépésekkel az elektronnyalábok kísérleti vizsgálatából levezetett modellnek megfelelő elektronemissziót kapunk, részecskealapú megközelítéssel. A numerikus szimuláció viszont rendelkezik azzal az előnnyel, hogy egyszerűen szétválaszthatók benne a különböző mechanizmusból származó másodlagos elektronok, így hordozhat többletinformációt a kísérlethez képest.

További lényeges pontja a modellnek a másodlagos elektronok energia- és szögeloszlása. Az egyes visszaverődő részecskék energiája és szöge újabb véletlen számok generálásával határozható meg: a lényegi kérdés, hogy milyen eloszlásból vesszük a véletlen számot. Rugalmas reflexió esetén ez egyszerű: a sebesség változatlan, a szög pedig a Snellius-Descartes törvénynek megfelelően változik, így ez az egyetlen folyamat, amiben nincs véletlen tényező. A rugalmatlan reflexió szögeloszlását izotropnak vesszük, az energia pedig szintén egyenletes eloszlású a beeső elektron energiája és zérus között [15]. Disszipációs folyamat lévén, ez megalapozott megközelítés. A felületről újonnan kiváltott másodlagos elektronok energiája összetettebb kérdés. Mérési adatok és félempirikus modellek alapján a másodlagos elektronnyaláb energiája mintegy 100 eV felett független a beeső elektron energiájától [16]. Így ebben a tartományban feltételezhetjük, hogy Maxwell-Boltzmann eloszlást követnek a kilépő elektronok [15]. A hőmérséklet az egész kisülésre jellemző elektronhőmérséklet, amit az általunk végzett szimulációkban mindig 10 eV-nak választunk [9]. A 100 eV alatti energiatartományban ez a feltételezés okozhatna problémát, hiszen a nagy számban beérkező kis energiájú elektronok – a 10 eV-hoz tartozó Maxwell-Boltzmann eloszlás csúcsa 5 eV közelében található – jelentős számban indukálnának a sajátjukénál nagyobb energiával kilépő az elektronokat – a Maxwell-Boltzmann csúcs lassú lecsengése miatt. Azzal az elnagyolt közelítéssel élünk, hogy a 100 eV-nál kisebb energiával beeső elektron 0 és 5 eV között egyenletes energiaeloszlással válthat ki valódi másodlagos elektront. Erre az előbbieken kívül az ad alapot, hogy a jelen esetben részleteiben nem vizsgált – konstans γ együtthatóval közelített – ion-elektróda kölcsönhatás során keletkező másodlagos elektronok energiáját szintén 0 és 5 eV közötti egyenletes eloszlásból vesszük. Az elektródából kilépő elektronok szögeloszlását minden esetben izotropnak feltételezzük.



12. ábra. Az elektronok elektródával való kölcsönhatásának simulációs algoritmus [15].

5. Szimulációs eredmények

Az argon gázban, szilícium-dioxid elektródák között kialakuló rádiófrekvenciás gázkisülésekben az elektronok által keltett másodlagos elektronnyaláb hatását a plazma jellemzőire rendkívül alacsony, a plazma alapú porlasztásos rétegleválasztás körülményeire jellemző 0,5 Pa nyomáson vizsgálom PIC/MCC szimulációkkal. Alacsony nyomáson a háttérgáz kis sűrűsége miatt az elektróda felületéről kilépő és a tértöltött rétegben felgyorsuló elektronok jelentős része ütközés nélkül jut át a középső kvázisemleges rétegen, és nagy energiával éri el a szemközti elektródát, így nagy számban zajlanak le az elnyelődéstől különböző folyamatok. A gerjesztő RF feszültség frekvenciája 13,56 MHz. A feszültséget 250 V és 2000 V között változtatom, azaz többnyire nagy feszültségeket alkalmazok. Ilyenkor a gáz melegedésével is számolni kell, ezért a háttérgáz hőmérsékletét 400 K-re állítom be, ami rögzített bemeneti paramétere a szimulációnak.

Vizsgálataim során széles paramétertartományban hasonlítom össze a kisülések jellemzőit: minden esetben végzek szimulációt az elektron-elektroda kölcsönhatás Vaughan–Sydorenko-féle modelljével, illetve a szimulációs gyakorlatban széles körben elterjedt konstans $\delta_e = 0,2$ rugalmas visszaverődési együtthatót implementálva [4], az egyéb folyamatokat elhanyagolva. E két megközelítésen kívül olyan szimulációkat is végeztem, ahol Sydorenko megfontolásai alapján, energiafüggő módon vettem figyelembe a rugalmas visszaverődést, a többi folyamatot viszont "kikapcsoltam" a szimulációkban, azaz nem léptek ki az elektródákból valódi másodlagos elektronok, és rugalmatlan visszaverődés sem történt. Ennek célja az volt, hogy lássuk, mennyiben változnak a plazmajellemzők önmagában attól, hogy energiafüggő, realiztikusabb módon vesszük figyelembe a rugalmas visszaverődést a konstans 20 %-os reflexióhoz képest.

A különböző modellekkel kapott szimulációs eredmények áttekintéséhez bevezetek egy jelölési rendszert:

A modell – a konstans $\delta_e = 0,2$ reflexióval számoló modell,

B modell – a Vaughan–Sydorenko-féle modell csak rugalmas visszaverődést feltételezve,

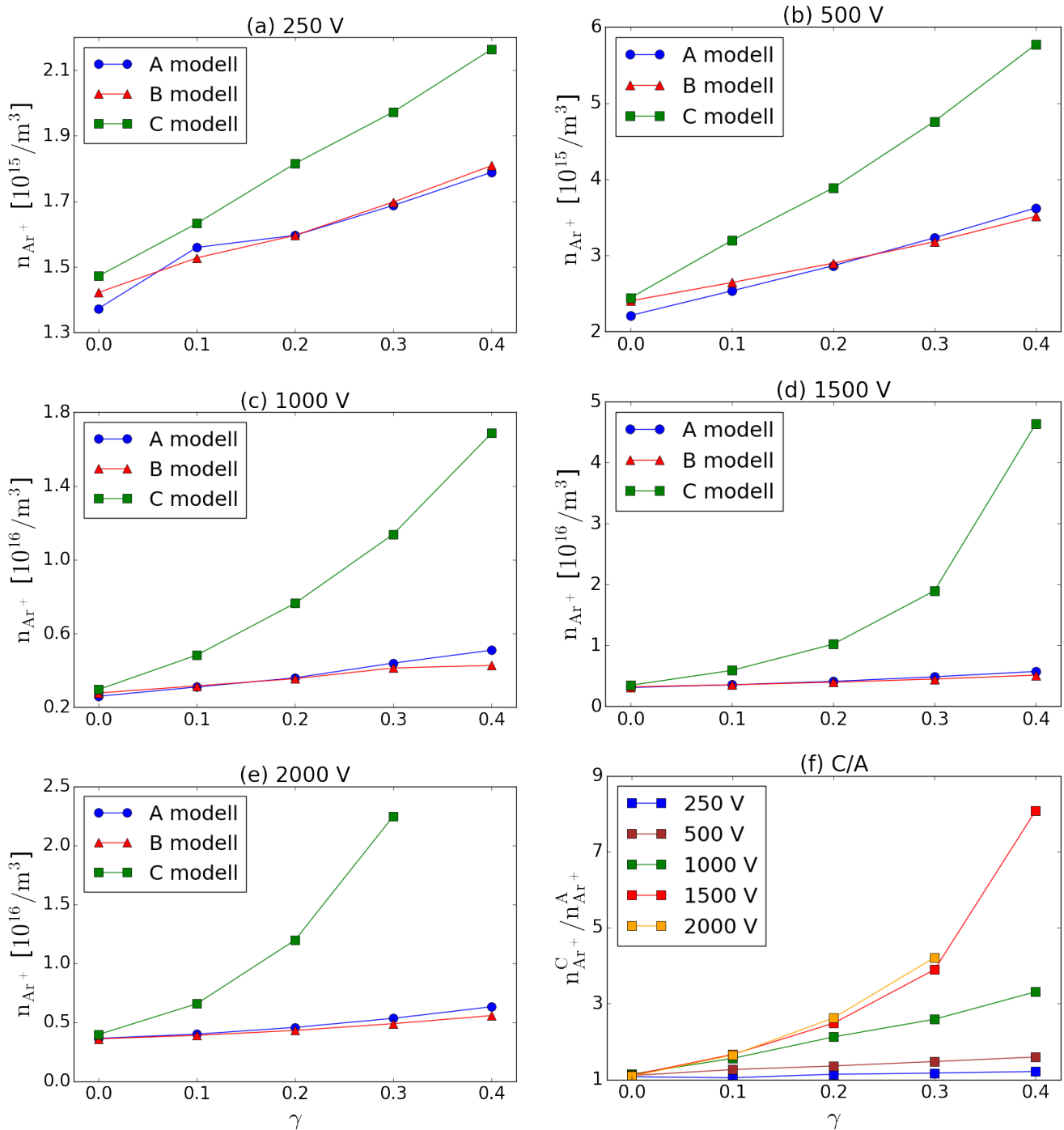
C modell – a Vaughan–Sydorenko-féle teljes modell rugalmas visszaverődéssel, rugalmatlan visszaverődéssel és valódi másodlagoselektron-kiváltással.

5.1. Plazmajellemzők az alacsony nyomású tartományban

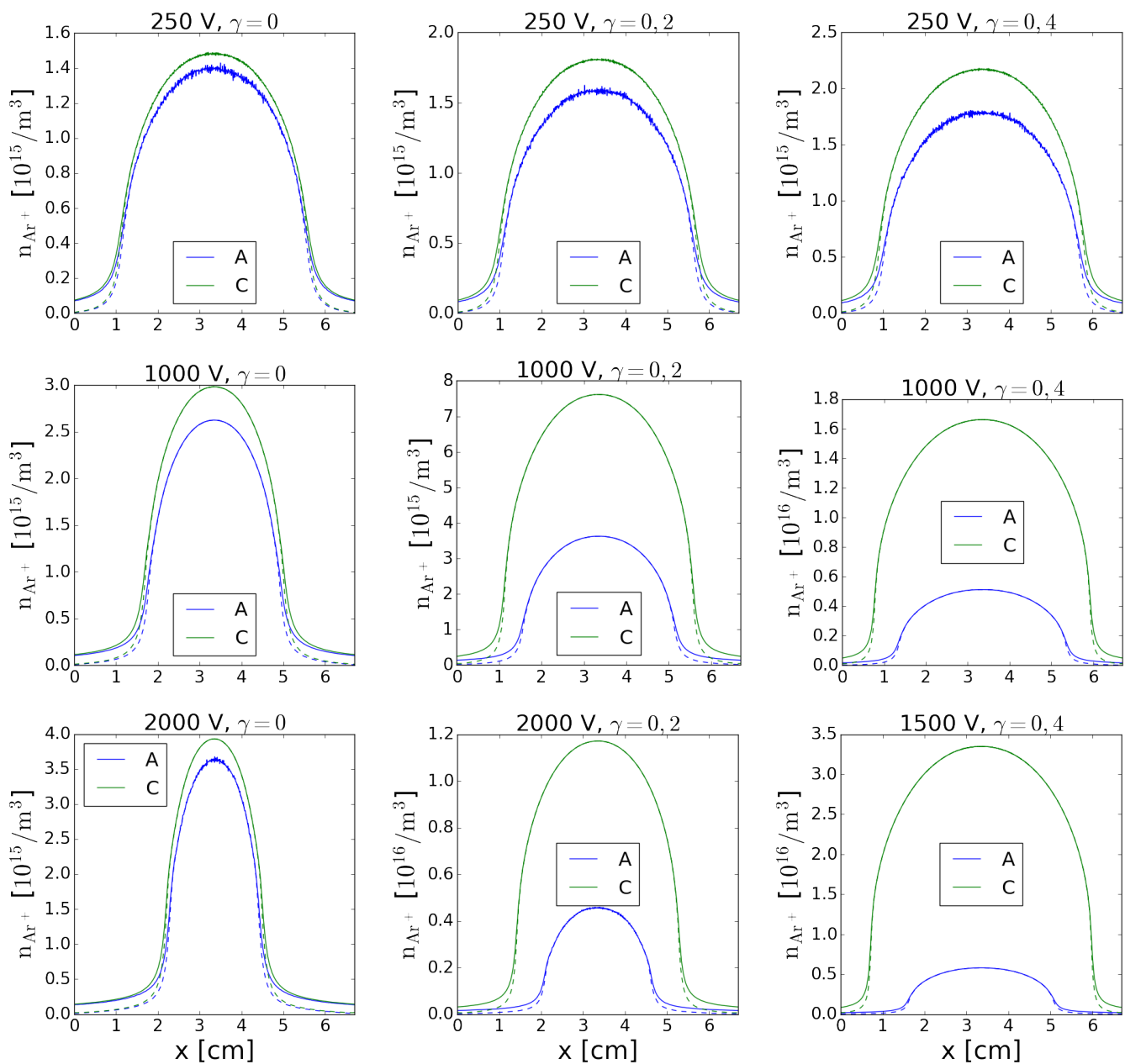
A 13. ábra az A, B, és C modellel kapott ionsűrűségek értékeit mutatja az elektródák közötti térrész közepén (ezek az RF periódusra időben átlagolt hely szerinti ionsűrűség-eloszlások maximumai) az ionindukált elektronkiváltás γ együtthatójának függvényében, 250–2000 V feszültségtartományban. Az elektronsűrűség a kvázisemleges térrészben lényegében azonos az ionsűrűséggel, ezért ennek ábrázolásától eltekintettem. Az ionsűrűség a töltött részecskék keletkezésének gyakoriságáról hordoz információt, legyen az akár ionizáció, akár felületi kiváltás következménye (a két folyamat természetesen erősen összefügg egymással).

A rögzített 0,5 Pa nyomáson mind a feszültség, mind a γ paraméter értékének növelése a plazmasűrűség növekedését eredményezi mindhárom modell (A–C) esetén. Szembetűnő, hogy csak rugalmas visszaverődéssel számolva (A és B modell) nincs jelentős eltérés a konstans (A) és az energiafüggő (B) modell eredményei között. A két modelltől kapott maximális ionsűrűségek közötti különbség legfeljebb 20 %. Ezzel szemben a teljes energiafüggő (C) modell alkalmazása jelentősen befolyásolja a számolt plazmajellemzőket. Minden vizsgált esetben a C modell eredményezi a legnagyobb plazmasűrűséget. Mind a feszültség, mind az ionindukált elektronkiváltási együttható emelése növeli az energiafüggő (C) és a konstans reflexió (A) modell által eredményezett sűrűségértékek közötti különbséget (lásd: 13. ábra, (a)–(f)). Az eltérést a 13. ábra (f) paneljén összefoglalva is illusztrálok: itt a két sűrűség hányadosát ábrázolom. Amikor teljesen elhanyagoljuk az ionok általi elektronkiváltást ($\gamma = 0$), igen kis eltéréseket kapunk, a feszültség értékétől függetlenül. A γ paraméter értékének növelésével, nagy feszültségamplitúdókra az eltérés egyre hangsúlyosabbá válik. Míg 250 V és 500 V esetén $\gamma = 0,4$ -re 25 % és 75 % körül van a plazmasűrűség növekedése, addig 1500 V esetén csaknem 8-szorosára növekszik a sűrűség az elektron-elektróda kölcsönhatás energiafüggő figyelembevételével a C modellben, az A modellhez képest. 2000 V feszültségamplitúdóra legfeljebb $\gamma = 0,3$ ionindukált elektronkiváltási együtthatóval tudtam számolni (itt a plazmasűrűség a C modellben több, mint 4-szerese az A modellben kapott értéknek), a γ paraméter nagyobb értékeire nem érhető el a kisülés állandósult állapotának kialakulása a szimulációkban.

Ezek az eredmények megmutatják, hogy az ionok által kiváltott elektronoknak (γ elektronok) nem csak nagy nyomáson (ahol az elektródából kilépő másodlagos elektronok hatékonyan sokszorozódnak), hanem alacsony nyomások tartományában is jelentős hatásuk lehet a kisülés jellemzőire: a γ elektronok nélkül az elektronok általi valódi másodlagos δ elektronok kiváltása is kevésbé intenzív.



13. ábra. Az elektron-elektroda kölcsönhatást különbözőképpen leíró A, B, és C modellek alkalmazásával kapott maximális ionsűrűségek a γ ionindukált elektronkiváltási együttható függvényében, különböző feszültségekre. A: $\delta_e = 0,2$ konstans rugalmas visszaverődés, B: csak energiafüggő rugalmas visszaverődés, C: teljes energiafüggő modell. Kisülési paraméterek: $p = 0,5$ Pa, $L = 6,7$ cm, $f = 13,56$ MHz.



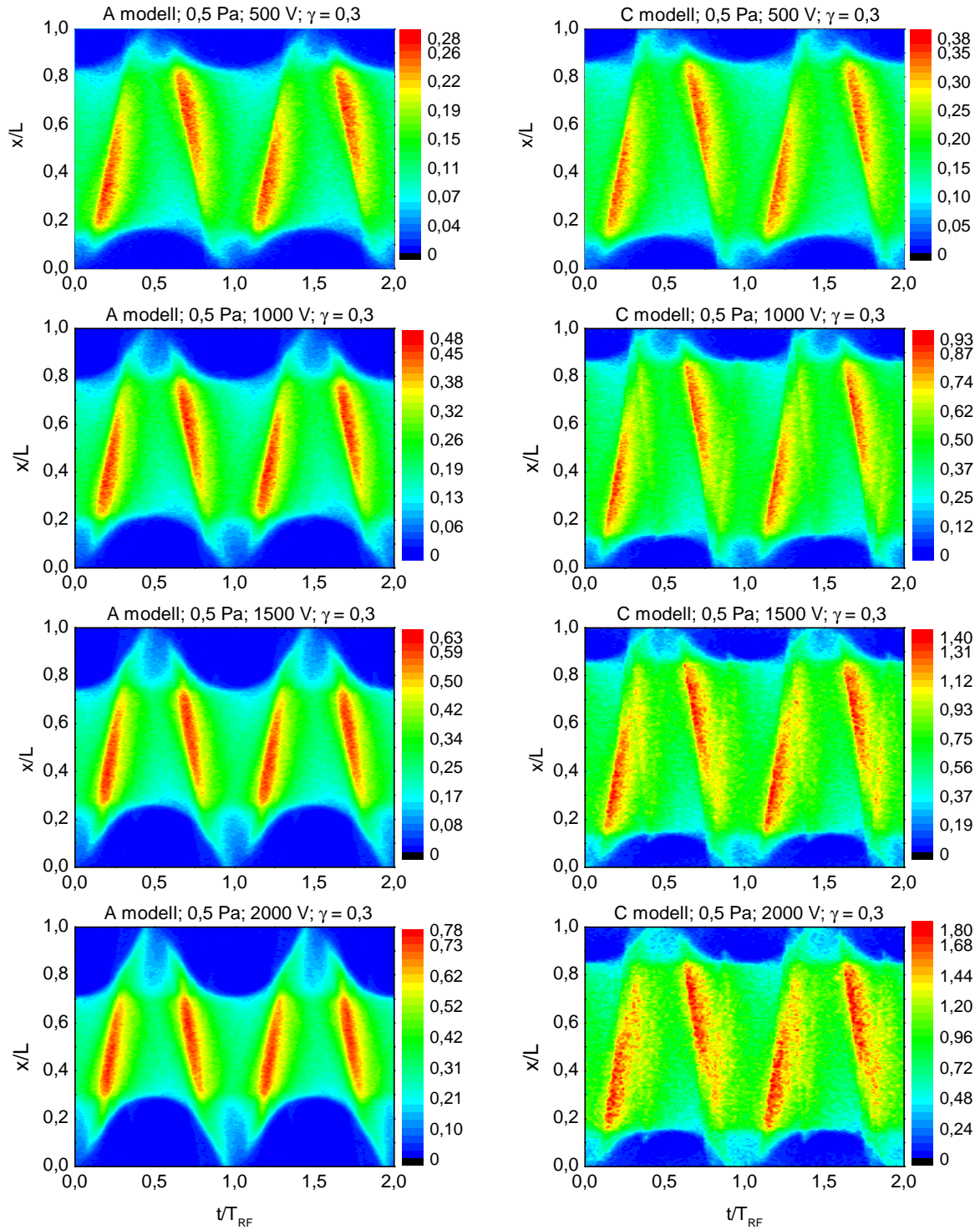
14. ábra. Az időátlagolt ion- (folytonos vonal) és elektronsűrűség-profil (szaggatott vonal) változása az A és B modellek alapján a γ ion-indukált elektronkiváltási együttható és a feszültség különböző értékeire. A: $\delta_e = 0,2$ konstans rugalmas visszaverődés; C: teljes energiafüggő modell. Kiszülési paraméterek: $p = 0,5$ Pa, $L = 6,7$ cm, $f = 13,56$ MHz. $x = 0$ cm a táplált, $x = 6,7$ cm a földelt elektróda pozíciója.

A 14. ábra az A és C modellel kapott időátlagolt ion- és elektronsűrűség-profilokat mutatja az ionindukált elektronkiváltás γ együtthatójának 0–0,4, illetve a feszültségamplitúdó 250–2000 V közötti értékeire. A feszültség növelése (rögzített nyomáson, a γ paraméter állandó értéke mellett) mindkét modellben a határréteg kiszélesedését eredményezi, a γ együttható növelése pedig (rögzített nyomáson, a feszültségamplitúdó azonos értéke mellett) ebben a paramétertartományban a határréteg szélességének csökkenéséhez vezet. Az előző ábrán is látott tendencián túl megfigyelhetjük, hogy ionindukált elektronkiváltás nélkül ($\gamma = 0$), illetve kis feszültség esetén az ionsűrűségnek nem csak az értéke, hanem az időátlagolt térbeli eloszlása sem változik jelentősen az energiatfüggő (C) modell bevezetésével. Nagyobb feszültségamplitúdó-értékekre és jelentős ionok általi elektronkiváltást feltételezve jól látható a tértöltött határrétegek szélességének csökkenése az elektronok által keltett másodlagos elektronok megjelenésével összefüggésben (C modell az A-hoz képest). A legszélsőségesebb esetben ($\gamma = 0,4$, 1500 V feszültségamplitúdó) a tértöltött réteg hossza közel felére csökken.

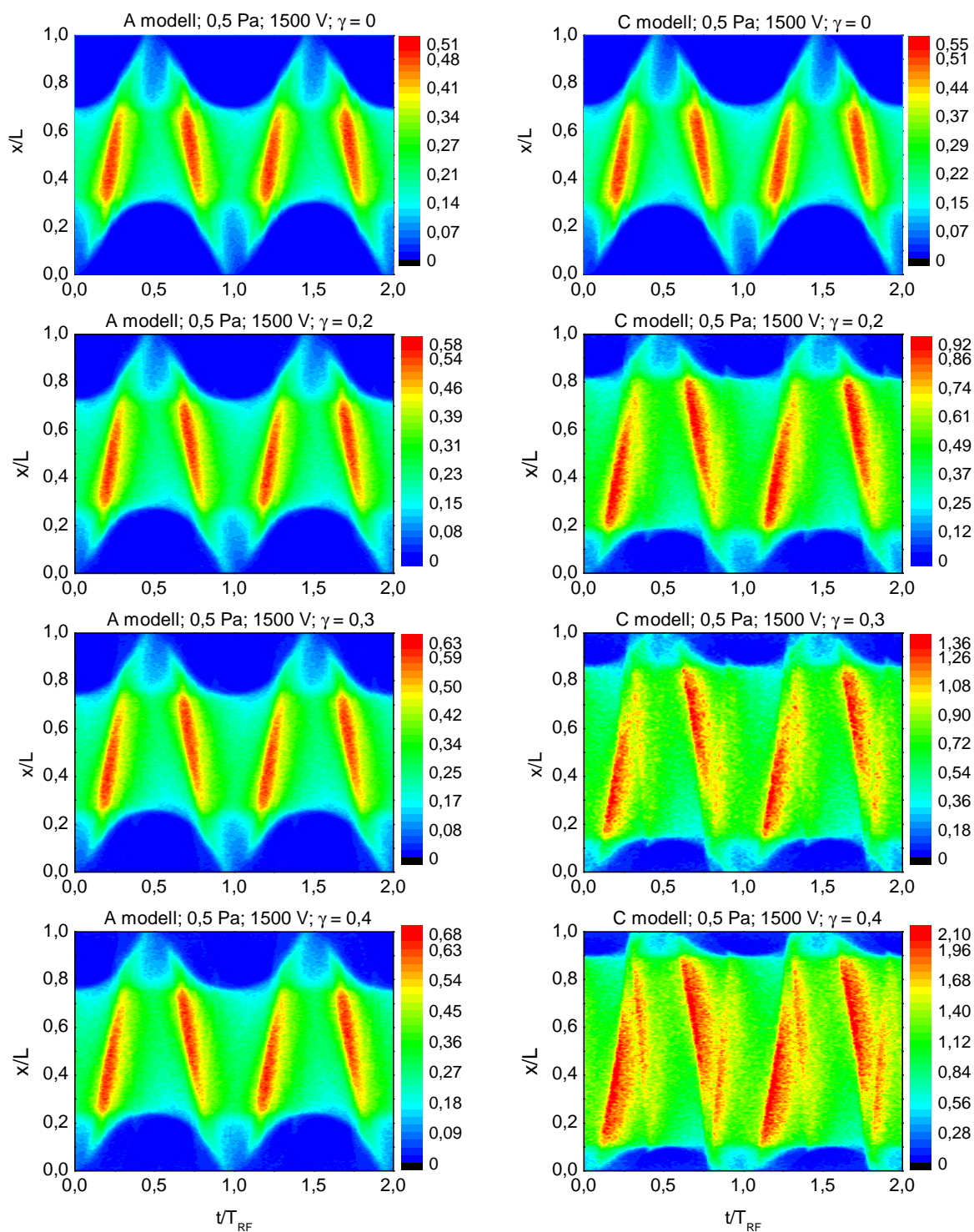
Az ionizáció tér- és időbeli eloszlása szemléletes képet ad a gáztérben végbemenő folyamatokról. A 15. ábra $\gamma = 0,3$ ionindukált elektronkiváltási együttható mellett mutatja a feszültségamplitúdó változtatásának hatását az ionizációs dinamikára az A és C modell alkalmazása esetén, míg a 16. ábrán 1500 V feszültségamplitúdó esetén láthatjuk a γ ionindukált másodlagos elektronemisszió változtatásának hatását.

A 15. és 16. ábrákon láthatjuk, hogy nagyobb feszültségértékekre, illetve nagyobb ionindukált elektronkiváltást feltételezve az ionizáció gyakorisága és maximuma megnő. Minden paraméterbeállításra és mindkét modell eredményeire általánosan igaz, hogy az ionizációs dinamika követi az RF periódus mintázatát, ami arról árulkodik, hogy az ionizációban az elektronok dominálnak. Továbbá, az alacsony nyomásnak köszönhetően a felgyorsult elektronnyaláb hosszú hatótávolságban, a kvázisemleges térrész teljes hosszában képes intenzív ionizációt kelteni, hiszen a háttérgáz kis sűrűsége miatt nagy a töltéshordozók szabad úthossza.

Vizsgáljuk meg először részletesen a konstans elektronreflexióval számoló, az elektronok általi elektronkiváltást elhanyagoló A modellel kapott eredményeket (15. és 16. ábrák bal oldali oszlopai)! Az ionizációs dinamikát illetően a kisülés α módban működik: a kiterjedő tértöltött réteg határán gyorsított elektronok elegendő energiát nyernek az atomok ionizálásához. Az intenzív ionizációs tartomány időben folyamatosan terjed a nyaláb haladási irányában, a szemközti elektróda felé, hiszen nagy az elektronok szabad úthossza. Adott $\gamma = 0,3$ értékre, a 15. ábra bal oldali oszlopában ugyanúgy nyomon követhető a feszültség növekedésének a tértöltött réteg szélesedését eredményező hatása, mint a sűrűségprofilok áttekintésénél (14. ábra). Ami-



15. ábra. Az S [$10^{21} \text{ m}^{-3}\text{s}^{-1}$] idő- és hosszegységre jutó ionizáció térbeli és időbeli eloszlása közötti eltérés változása az A (balra) és C (jobbra) modellre, a feszültség változtatásával. Az elektródatávolság: $L = 6,7 \text{ cm}$, $f = 13,56 \text{ MHz}$, a többi paramétert lásd az ábrákon.



16. ábra. Az S [$10^{21} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$] idő- és hosszegységre jutó ionizáció térbeli és időbeli eloszlása közötti eltérés változása az A (balra) és C (jobbra) modellre, az ionindukált elektronkiváltási együttható változtatásával. Paraméterek: $L = 6,7 \text{ cm}$, $f = 13,56 \text{ MHz}$, a többi paramétert lásd az ábrákon.

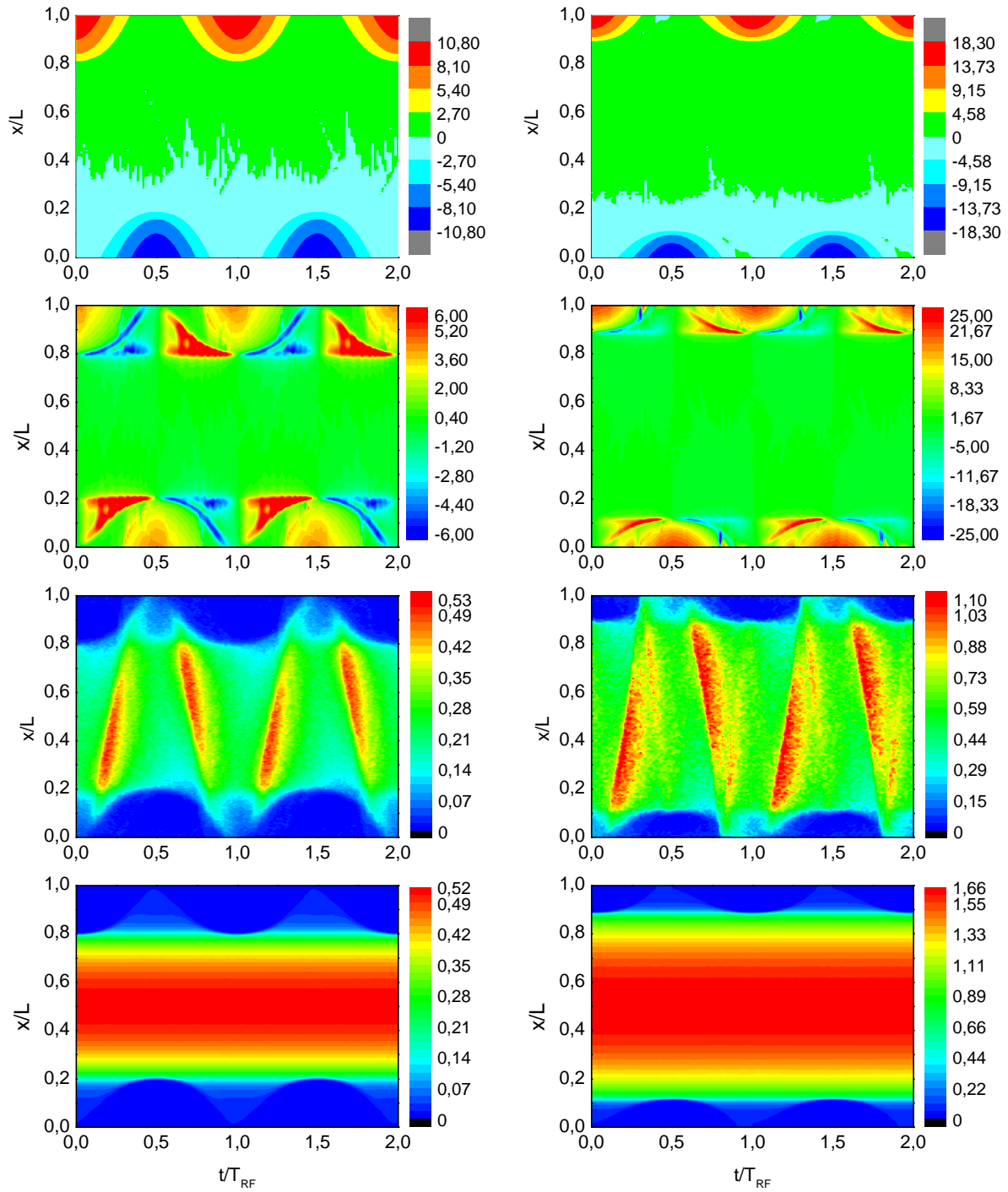
kor széles a határréteg, a viszonylag vékony kvázisemleges régió belül (térben) egyenletes az ionizáció eloszlása, hiszen a gyors nyaláb ekkora úton nem veszít jelentősen a fluxusából. Kisebb feszültségekre a szélesebb középső rétegben egyre jelentősebb utat tesz meg a nyaláb: egyre jobban látszik az ionizáció, azaz közvetve a nyaláb fluxusának csökkenése. Adott feszültségen (itt: 1500 V, 16. ábra, bal oldali oszlop) az ionindukált elektronkiváltás növekedésével egyre inkább aszimmetrikussá válik az ionizációs maximum térbeli eloszlása, azaz ilyenkor a kvázisemleges rétegen áthaladva fokozatosan csökken az intenzíven ionizáló nyaláb fluxusa. Ez is a határréteg szélességének tudható be: a tértöltött réteg szélessége nagyobb elektronkiváltás esetén csökken, ahogy azt már a sűrűségprofilok összehasonlításánál (14. ábra) is megfigyelhettük.

Az elektron-elektroda kölcsönhatás energiafüggő modellezésével (C modell) jelentős eltérés figyelhető meg az ionizációs dinamikában az A modellhez képest, ami a feszültségamplitúdóval és a γ ionindukált elektronkiváltási együtthatóval egyaránt növekszik. Az egyik elektróda felől induló, α módban intenzíven ionizáló elektronnyalábnak a másik elektródát elérő része által keltett másodlagos elektronnyaláb is erősen ionizál. Ennek az ionizációnak az intenzitása jóval kisebb ugyan az elsődleges nyalábénál, az ionizáció teljes tér- és időbeli eloszlásában viszont egyértelműen kiemelkedő érték. Nagy feszültségamplitúdó, illetve a γ paraméter nagy értékei mellett további, kevésbé intenzív ionizációs nyalábok is megfigyelhetők. Ezen folyamatok megértése végett a következőkben egy kisülési esetet részletesen elemzünk.

5.2. A valódi másodlagos elektronok hatása a plazmajellemzőkre

Miután széles paramétertartományban összehasonlítottam az A és C modellel kapott szimulációs eredményeket (plazmasűrűség, időátlagolt töltéeloszlások, ionizációs ráta tér- és időbeli eloszlása), egy konkrét esetet kiválasztva a két modellből kapott további plazmajellemzőket mutatok be, melyek segítenek megérteni a valódi másodlagos elektronok hatását a kisülés jellemzőire [22]. A kiválasztott esetben $\gamma = 0,4$ az ionindukált elektronkiváltási együttható, és 1000 V a feszültségamplitúdó. Ebben az esetben a C modellben 4-szer nagyobb a plazmasűrűség az A modellhez viszonyítva (lásd: 14. ábra). A 17. ábrán látható az A (bal oldali oszlop) és C (jobb oldali oszlop) modellből származó térerősség, az elektronok általi teljesítményabszorpció, az ionizációs ráta, valamint az elektronsűrűség tér- és időbeli eloszlása.

A C modell esetén az elektródák közelében a tértöltött réteg minimális kiterjedésekor tér-visszafordulás (előjelváltás) figyelhető meg. A tér olyan irányúvá válik, ami az elektróda felé vonzza az elektronokat, hiszen az ilyenkor legintenzívebb beesés miatt nagy számban kelet-



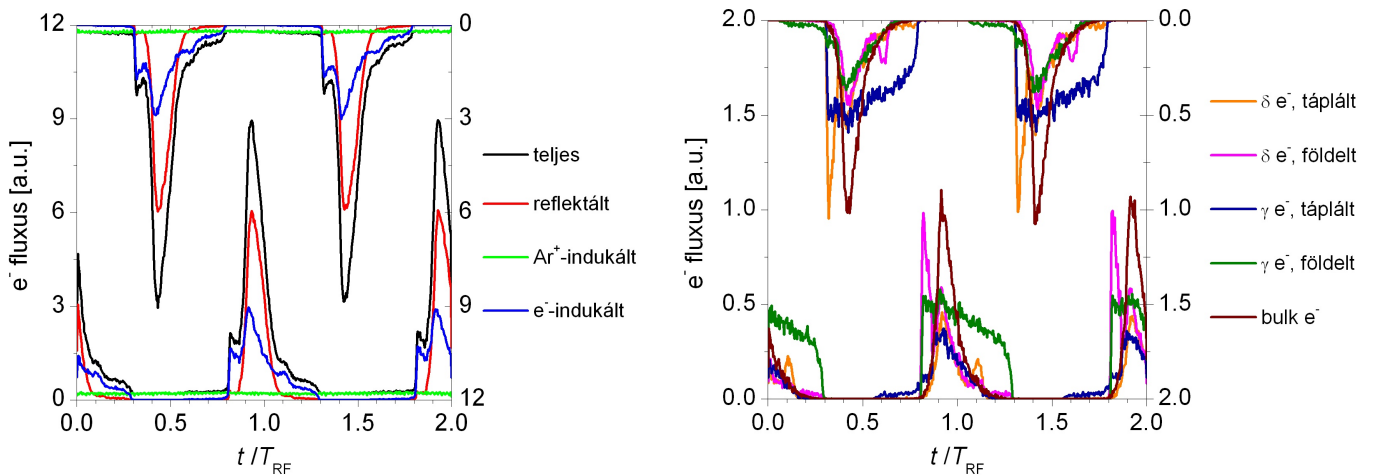
17. ábra. Az E [10^4 Vm^{-1}] elektromos térerősség, az elektronok által felvett P [10^4 Wm^{-3}] teljesítménysűrűség, az S [$10^{21} \text{ m}^{-3}\text{s}^{-1}$] idő- és hosszegységre jutó ionizáció és az n_e [$10^{16}/\text{m}^3$] elektronsűrűség térbeli és időbeli eloszlása az A (balra) és C (jobbra) modellre [22]. Kísülési paraméterek: $\gamma = 0,4$; $p = 0,5 \text{ Pa}$; $U = 1000 \text{ V}$; $f = 13,56 \text{ MHz}$; $L = 6,7 \text{ cm}$.

keznek valódi másodlagos elektronok, egy beeső elektron pedig akár több valódi másodlagos elektront is kiválthat. Az így létrejövő, az elektróda szempontjából negatív eredő fluxust az elektronokat vonzó tér ellensúlyozni hívatott.

Az abszorbeált teljesítménysűrűség eloszlásában az A modell esetére (bal oldalt) jól kivehető a tértöltött réteg kiterjedésekor – az elektronok elektródától távolodó irányba gyorsítása révén – bekövetkező energiefelvétel – pozitív érték –, és az ennél átlagban láthatóan alacsonyabb energialeadás, ami az elektronoknak a határréteg visszahúzódásakor bekövetkező energiavesztesége. Emellett az elektródák közelében is jelentős energiefelvétel zajlik le, amikor a másodlagos elektronokat a nagy elektromos tér a kvázisemleges réteg felé gyorsítja. A tértöltött rétegben nem látható jelentős ionizáció a háttérgáz alacsony nyomása miatt.

Az energiafüggő C modellben az előbb említett folyamatok mellett a határréteg teljes visszahúzódását kevéssel megelőzően is megfigyelhetünk energiefelvételt és -leadást, valamint ehhez kapcsolódó ionizációt a tértöltött rétegben. Az egyik elektródánál a tértöltött réteg határán nagy energiára gyorsított elektronok egy része eléri a másik elektródát még a tértöltött réteg teljes visszahúzódását megelőzően. Az ennél az elektródánál visszaverődött elektronokat, illetve a beeső elektronok által keltett valódi másodlagos elektronokat gyorsítja az elektromos tér a tértöltött rétegben. Az ezen elektronok által keltett ionizáció eredményezi az ionizációs ráta tér- és időbeli eloszlásában jól kivehető kevésbé intenzív ionizációs mintázatot. A 17. ábra utolsó sorában látható elektronsűrűség jól mutatja a tértöltött határréteg szélességének időbeli változását, illetve a valódi másodlagos elektronok hatását a tértöltött réteg hosszára (a C modellben kisebb a határréteg szélessége az A-hoz képest), amit már a sűrűségprofiloknál (14. ábra) is megfigyelhattünk.

Mivel az elektronok elektródákkal való kölcsönhatásának energiafüggő modelljében (C) a másodlagos elektronnyaláb több folyamat eredményeként keletkezik, és a fentiekben is látszott ennek meghatározó szerepe a kisülési jellemzőkre, érdemes megvizsgálni külön-külön a két elektródáról induló, különböző folyamatokból származó elektronfluxus változását a rádiófrekvenciás periódus alatt. A 18. ábra bal oldalán a teljes emittált elektronfluxust reflexiós, ionindukált (γ elektronok keletkezése) és elektronindukált (δ elektronok keletkezése) komponensre bontom. A szemléletesség érdekében egymással szemben mutatom a két különböző elektródáról induló nyalábokat. Látható, hogy az ionindukált elektronok stacionárius, alacsony fluxusjárulékot adnak – lévén, hogy az elektródákra stacionárius ionfluxus érkezik –, a többi komponens viszont, mivel elektronok váltják ki, a tértöltött réteg visszahúzó állapotában válik jelentőssé. Szembetűnő, hogy a visszaverődő és valódi másodlagos elektronok jóval nagyobb számban in-



18. ábra. Az elektródákról induló (másodlagos) elektronfluxus változása két RF ciklus alatt, önkényes egységekben. Alul a táplált, felül a földelt elektródáról induló nyaláb komponenseinek fluxusát szemléltetjük. A bal oldali függőleges tengely az alsó, a jobb oldali a felső vízszintes tengelyhez tartozik. A bal oldali panelen a teljes nyalábot bontjuk összetevőire, a jobb oldalin az elektronindukált valódi másodlagos nyalábot. Ez utóbbi felbontás a másodlagos elektront keltő elsődleges (beeső) elektron típusa és keletkezési helye szerint történik [22].

dulnak ki az elektródákból, mint az ionindukáltak, azaz a γ elektronok kis hányadát képezik a kisülésben lévő töltéshordozóknak. Megfigyelhető továbbá, hogy a valódi másodlagos elektronok kibocsátási csúcsa "elkentebb" a reflexióénál. Az ábra szimmetrikus, a két elektródából kilépő fluxus komponensenként egyezik, fél periódussal eltolva.

A 18. ábra jobb oldalán külön vizsgáljuk az elektronok által keltett valódi másodlagos nyalábot. A szerint különítünk el komponenseket, hogy a kilépő elektront milyen típusú elektron váltotta ki: δ , γ vagy a kvázisemleges rétegből származó – ionizációval járó ütközés során keletkezett – (bulk) elektron. A δ és γ elektronokat elkülönítjük aszerint is, hogy melyik elektródán keletkeztek. Azok a γ elektronok tudják a leghosszabb időtartamban megközelíteni az elektródát, és tudnak másodlagos elektront kelteni onnan, amelyek a kisülési téren túlnyomórészt egyszer repültek keresztül. Az azonos elektródán keletkezett γ elektronok csak a határréteg minimális szélességének idejében érik el az elektródát, és váltanak ki onnan elektront. Hasonlóan viszonyul egymáshoz a szemközti és az azonos elektródáról induló δ elektronok csúcsa: utóbbi elkentebb és alacsonyabb, mint a gáztéren egyszer áthaladóké. A legnagyobb a kvázisemle-

ges rétegből származó elektronok által keltett δ másodlagos nyaláb fluxusa, hiszen ezekből az elektronokból jóval több van a gáztérben, mint az elektródákból kiváltottakból.

A δ elektronok által keltett elektronoknak különleges jelentősége van a kisülés szempontjából. Ennek a nyalábnak a fluxusa nagyobb a γ elektronok által indukált nyalábénál, a határozott csúcsa pedig valamivel előbb jelentkezik, mint a minimális határréteghossz, és ezt a szemközti elektródáról induló valódi másodlagos δ elektronok idézik elő. Mivel a határréteg ezen részlegesen visszahúzó állapotában az ilyen típusú δ elektronok keltik a legnagyobb kimenő elektronfluxust az elektródán, a szemközti elektródán keletkezett valódi másodlagos elektronoknak kiemelt szerepük van az ionizációs dinamikában tapasztalható másodlagos, intenzíven ionizáló nyaláb kialakulásában. A valódi másodlagos elektronok tehát kellőképpen nagy feszültség és ionindukált elektronkiváltás mellett nagy számban gyorsulnak fel nagy energiára, keltenek jelentős ionizációt a kvázisemleges térrészben, és indukálnak további másodlagos elektronokat.

6. Összefoglalás, kitekintés

Dolgozatom célja az alacsony nyomású rádiófrekvenciás gázkisülésekben fellépő elektron-elektroda felületi folyamatok hatásának vizsgálata volt. Erre a célra a gázkisülések modellezésére jól bevált "Particle-in-Cell/Monte Carlo Collisions" numerikus eljárást használtam, nagy hangsúlyt fektetve az elektron-elektroda felületi folyamatok realiztikus leírására. A különböző felületek elektronokkal történő bombázása során keletkező másodlagos nyaláb fluxusának kísérletileg tapasztalt energiafüggő voltából indultam ki: a mérési eredményeken alapuló, Vaughan és Sydorenko által kidolgozott félempirikus modellt implementáltam a Monte Carlo módszerekre jellemző valószínűségi szemlélettel. A félempirikus modell paramétereit részben irodalmi adatokból, részben próbaszámítások és fizikai megfontolások alapján állítottam be úgy, hogy a modell minél jobban leírja a SiO_2 elektródák viselkedését.

Az elektron-elektroda kölcsönhatás realiztikus leírása jelentős eltéréseket adott a széles paramétertartományban végzett szimulációk eredményeiben a folyamatot nagyvonalú egyszerűsítéssel közelítő, széles körben alkalmazott modellhez képest [22]. Az eltérés a nagy feszültségtartományban és intenzív ionok általi elektronkiváltást feltételezve jelentős igazán. Szimulációkkal megmutattam, hogy ilyen körülmények között az elektródáknak ütköző elektronok által – az elektródákból a realiztikus modellnek megfelelő energiafüggő módon – kiváltott valódi másodlagos elektronok nagy mértékben befolyásolják a gázkisülés működését.

Az új modell SiO_2 elektródákra történő alkalmazása rávilágított az elektronindukált másodlagos elektronok jelentős szerepére bizonyos kisülési feltételek mellett, azonban az is látszik, hogy számos nyitott kérdés maradt. Meg kell említeni, hogy az új modell több bemeneti paraméterére nem álltak rendelkezésre pontos adatok. A paraméterek pontosabb beállításához érdemes lenne laboratóriumi méréseket végezni. Ezen kívül hasznos és érdekes lenne kísérletileg tanulmányozni a dolgozatban szimulált gázkisüléseket, és összevetni a mérési eredményeket a számolási eredményekkel. Felmerülhet továbbá ugyanennek a modellnek más fajta kisülésekben való alkalmazása, például nagyobb nyomás esetén, másféle gázban, más anyagú elektródákkal. Ezekben túlmenően a kisülésre, és azon belül az elektronok általi másodlagoselektron-kiváltásra is láthatóan igen jelentős hatással bíró ionok általi elektronkiváltás realiztikus modellezése különböző anyagi minőségű gázok és elektródák esetén szintén várat magára.

7. Köszönetnyilvánítás

Szeretném megemlíteni azon személyek nevét, akik nélkül ez a dolgozat ilyen formában nem készülhetett volna el. Elsőként témavezetőmnek, Derzsi Arankának tartozom köszönettel a rengeteg útmutatásért, ötletért, végtelen türelméért és segítőkészségéért; azért, hogy mindig lehetett tőle kérdezni, és folyamatosan figyelemmel kísérte a munkámat. Köszönet illeti Donkó Zoltánt, akitől először tanultam plazmafizikát, aki lehetőséget adott számomra csatlakozni a Wigner SZFI Elektromos Gázkisülések Kutatócsoportjához, és javaslataival hozzájárult a dolgozat minőségéhez. Köszönöm a kutatócsoport vezetőjének, Kutasi Kingának is a kutatómunkában való részvétel lehetőségét és a dolgozattal kapcsolatos meglátásait. Hálás vagyok Julian Schulzenak a dolgozatom témájához adott inspirációért. Köszönöm továbbá Hartmann Péternek a plazma számítógépklaszter megtervezését és karbantartását, amelyen a szimulációkat futtattam, illetve Horváth Ákosnak, hogy vállalta az egyetemi konzulens szerepét.

Hivatkozások

- [1] Donkó Z: Alacsony nyomású gázkisülések és erősen csatolt plazmák számítógépes modellezése, MTA Doktori értekezés (MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet – Budapest, 2004) 9. o.
- [2] Lieberman M A and Lichtenberg A J: Principles of Plasma Discharges and Materials Processing (Wiley-Interscience, New York, 2005)
- [3] Schulze J, Derzsi A, Dittmann K, Hemke T, Meichsne and Donkó Z 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 275001
- [4] Kollath R: Encyclopedia of Physics Vol. XXI, ed. Flügge S (Berlin, Springer, 1956), 264. o.
- [5] Korolov I, Derzsi A, Donkó Z, Schüngel E, Schulze J 2016 *Plasma Sources Sci. Technol.* **25** 015024
- [6] Birdsall C K 1991 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **19** 65
- [7] Donkó Z 2011 *Plasma Sources Sci. Technol.* **20** 24001
- [8] Donkó Z, Schulze J, Czarnetzki U, Derzsi A, Hartmann P, Korolov I, Schuengel E 2012 *Plasma Phys. Control. Fusion* **54** 124003
- [9] Verboncoeur J P 2005 *Plasma Phys. Control. Fusion* **47** A231
- [10] Matyash K, Schneider R, Taccogna F, Hatayama A, Longo S, Capitelli M, Tskhakaya D and Bronold F X 2007 *Contrib. Plasma Phys.* **47** 595
- [11] Tskhakaya D, Matyash K, Schneider R and Taccogna F 2007 *Contrib. Plasma Phys.* **47** 563
- [12] Phelps A V http://jilawww.colorado.edu/~avp/collision_data/ unpublished
- [13] Phelps A V 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 747
- [14] Phelps A V 1991 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **20** 557
- [15] D. Sydorenko: Particle-in-Cell Simulations of Electron Dynamics in Low Pressure Discharges with Magnetic Fields, PhD thesis (University of Saskatchewan, Saskatoon, Canada, 2006)

- [16] H. Seiler 1983 *J. Appl. Phys.* **54** R1–R18
- [17] Gopinath V P, Verboncoeur J P, Birdsall C K 1998 *Phys. Plasmas* **5** 1535
- [18] Vaughan J R M 1989 *IEEE Transactions on Electron Devices* **36** 1963
- [19] Vaughan J R M 1993 *IEEE Transactions on Electron Devices* **40** 830
- [20] Bronshtein I M, Fraiman B S: Secondary Electron Emission (Moscow, Russia: Atomizdat, 1969)
- [21] Barral S, Makowski K, Peradzynsky Z 2003 *Phys. Plasmas* **10** 4137
- [22] Horváth B, Korolov I, Donkó Z, Schulze J, Derzsi A: Improved model for electron-surface interactions in PIC/MCC simulations of capacitively coupled plasmas, Poster (6th Workshop on Radio Frequency Discharges, 21-23 May 2017, Presqu'île de Giens, France)