

MÔ PHỎNG VÀ TÍNH TOÁN MỘT SỐ CÁC THÔNG SỐ CỦA PLASMA PHÓNG ĐIỆN KHÍ AR BẰNG PHẦN MỀM MATLAB

Trần Thị Thu Nhi, Lê Văn Hiếu

Trường Đại học Khoa học Tự nhiên – ĐHQG-HCM

(Bài nhận ngày 27 tháng 9 năm 2004, hoàn chỉnh sửa chữa ngày 30 tháng 11 năm 2004)

TÓM TẮT: Trong bài báo này chúng tôi bước đầu thực hiện mô phỏng các quá trình tương tác của các hạt mang điện và trung hòa trong môi trường plasma phóng điện khí của khí Ar. Bài toán được giải với các sự thay đổi các thông số ngoài phụ thuộc như: Áp suất khí Ar, thế phóng điện, bán kính ống phóng điện... Từ đó tính được một số các thông số có liên quan đến các quá trình trên như góc tán xạ, năng lượng của điện tử, nồng độ điện tử, năng lượng tổng cộng của hệ...

Các mô phỏng và tính toán trên được thực hiện nhờ một số phương pháp mô phỏng như: phương pháp bước nhảy, phương pháp Monte – Carlo và được lập trình bằng phần mềm Matlab.

I. Phương pháp mô phỏng trong Plasma phóng điện khí Ar.

I.1. Sơ lược về các phương pháp mô phỏng Plasma:[7]

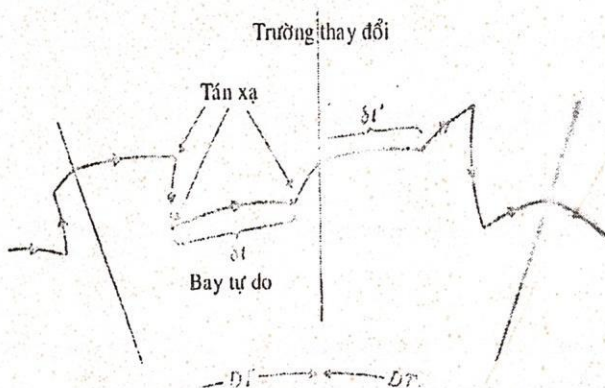
Để mô phỏng Plasma, đặc biệt trong trường hợp khí ion hoá một phần, người ta sử dụng lưới không gian để tính toán trường điện từ, dùng phương pháp mẫu hạt trong ô để tính toán va chạm Monte- Carlo (MCC).

Việc thêm các va chạm Monte-Carlo vào PIC thường được sử dụng với các bước thời gian đều dựa trên tiết diện ngang toàn phần thực nghiệm và tiết diện vi phân giải tích xấp xỉ để tính đến vận tốc và phương của điện tử sau khi va chạm với các nguyên tử trung hòa. Kỹ thuật mô phỏng bằng máy tính các mẫu Plasma với các va chạm Monte-Carlo sẽ giúp ta xác định được các quá trình xảy ra trong plasma từ thực nghiệm máy tính. Kỹ thuật này khá hiệu quả và rất có triển vọng trong nghiên cứu Plasma.

Bản chất đặc biệt của lĩnh vực mô phỏng hệ nhiều hạt mang điện là vẫn sử dụng các nguyên lý cơ bản, nghĩa là việc sử dụng cơ học cổ điển để giải phương trình chuyển động $f = ma = q(E + v \times B)$ và sử dụng phương trình Maxwell để tìm các trường (E,B) phát sinh bởi mật độ hạt.

I.2. Mô phỏng chuyển động của hạt trong trường hợp một chiều: [6]

Các mã Particle-in-cell (PIC) theo nguyên tắc di chuyển tất cả các hạt cùng một lúc sử dụng một bước thời gian.



Hình 1: Quá trình chuyển động của điện tử trong điện trường thay đổi.

Hình 1 thể hiện quỹ đạo điện tử tiêu biểu đối với tỷ lệ tán xạ cao, cho thấy “đường bay” tự do trên mỗi bước thời gian điều chỉnh trường. Khi có sự thay đổi đột ngột trong quỹ đạo chuyển động của điện tử, lúc này điện tử xem như bị tán xạ.

Theo công trình nghiên cứu của Boswell, Morley, Surrenda và các tác giả khác, họ đưa vào các va chạm electron với hạt trung hòa (tán xạ đàn hồi, kích thích, ion hóa), cũng như liên kết electron và ion cho các hạt nhỏ (bán kính $< \lambda_D$).

Phương pháp này chỉ sử dụng bước thời gian Δt của lời giải trường PIC và lời giải phương trình chuyển động sau đó cho va chạm một số lượng hạt khả dĩ trong khoảng Δt này một cách riêng biệt mà chỉ thay đổi vectơ vận tốc của chúng.

I.3. Dùng phương pháp xác suất va chạm Monte-Carlo để tính toán các thông số va chạm trong Plasma phóng điện khí AR.

Các quá trình xảy ra trong Plasma phóng điện khí Ar bao gồm các quá trình va chạm của hạt chuyển động được gia tốc bởi điện trường với nguyên tử, phân tử khí Ar.

Nhìn chung có 2 quá trình va chạm cơ bản:

1. Va chạm giữa electron và nguyên tử trung hòa:

Giả thiết vận tốc của electron lớn hơn nhiều so với vận tốc của nguyên tử trung hòa.

Điện tử có khối lượng m , mang điện tích q được gia tốc bởi điện trường sẽ chuyển động với vận tốc v .

Từ phương trình chuyển động của hạt :

$$m \cdot \frac{dv}{dt} = F ; \quad \frac{dx}{dt} = v \tag{1}$$

Áp dụng phương pháp bước nhảy để tính toán tọa độ x thay đổi theo thời gian. Khi đó vận tốc điện tử sẽ được tính lại sau mỗi bước. Lúc này ta đã có được năng lượng của hạt. Việc thêm vào các va chạm dựa vào các thông số: vận tốc hạt chuyển động, số nguyên tử, phân tử trung hòa có trong ống phóng điện cho biết tần số va chạm [6]:

$$v_{total} = n_{gas} \delta_{total} (E) V \tag{2}$$

Trong đó:

v_{total} : tần số va chạm

δ_{total} : tiết diện va chạm tổng cộng của hệ

n_{gas} : nồng độ của khí đang xét.

Xác suất va chạm giữa hạt mang điện và nguyên tử là:

$$P = 1 - \exp[-n_{gas} \delta_{total} (E) V]. \tag{3}$$

Số ngẫu nhiên R được đưa vào để kiểm tra có va chạm xảy ra hay không.

Nếu $P > R$ thì va chạm sẽ xảy ra.

Nếu va chạm giữa điện tử và nguyên tử trung hòa là va chạm đàn hồi thì điện tử chỉ tán xạ góc mà năng lượng được bảo toàn.

Nếu va chạm giữa điện tử là va chạm ion hoá thì năng lượng điện tử thay đổi và tán xạ góc. Lúc này, ion được sinh ra với vận tốc khác vận tốc ban đầu.

2. Va chạm giữa ion-nguyên tử trung hòa:

Khi quá trình ion hoá xảy ra, ion va chạm với nguyên tử trung hòa sẽ có năng lượng tán xạ và bị góc tán xạ góc.

Việc tính toán các góc tán xạ được tính bằng phương pháp giải phương trình ngẫu nhiên.

II. Sơ đồ khối tổng quát:

Để mô phỏng các quá trình trong Plasma phóng điện khí, chúng tôi tính toán bằng sơ đồ khối như hình 2:

Tính toán các kết quả:

➤ Nếu va chạm là đàn hồi giữa điện tử và nguyên tử trung hòa thì điện tử chỉ tán xạ góc mà không có sự mất mát năng lượng vì nguyên tử được xem như có khối lượng quá lớn.[4]

➤ Nếu va chạm kích thích giữa điện tử-nguyên tử trung hòa [6]:

$$E_{tán xạ} = E_{tới} - E_{kích thích} \tag{4}$$

Đối với khí Ar: $E_{kích thích}$ là 11.55eV

➤ Nếu là va chạm ion hoá điện tử-nguyên tử

$$E \text{ tán xạ} + E \text{ được tạo ra} = E \text{ tới} - E \text{ ion hoá} \quad (5)$$

$$\text{Với: } E \text{ tán xạ} = B \times [R3 \tan^{-1}(\frac{E_{toi} - E_{ionhoá}}{2B})] \quad (6)$$

R3 là số ngẫu nhiên trong khoảng [0,1]

Đối với khí Ar: $B = 10eV$

Năng lượng của điện tử được tạo ra:

$$E \text{ tạo ra} = E \text{ tới} - E \text{ ion hoá} - E \text{ tán xạ} \quad (7)$$

Giả sử trước khi va chạm điện tử có vận tốc là v_{inc} , góc tới là ϕ , lúc tán xạ hạt sẽ có vận tốc là v_{scat} , góc tán xạ là χ

a. Va chạm giữa điện tử và hạt trung hòa Ar:

Góc tán xạ χ được tính bằng cách giải phương trình ngẫu nhiên [4]

$$R = \frac{2\pi}{\sigma(E)} \int_0^\chi \sigma(E, \chi') \sin \chi' d\chi' \quad (8)$$

$$\cos \chi = \frac{2 + E - 2(1 + E)^{R4}}{E}$$

Nếu E lớn thì điện tử tán xạ về phía trước:

$$\cos \chi \rightarrow 1, \chi \rightarrow 0$$

Nếu E nhỏ $\cos \chi \rightarrow -1, 0 < \chi < \pi \rightarrow \phi = 2\pi R4$

b. Va chạm giữa ion-nguyên tử trung hòa:

Năng lượng tán xạ ion được cho bởi công thức:

$$E_{scat} = (1 - \alpha_L) E_{inc} \quad (9)$$

α_L : hàm đặc trưng cho năng lượng mất đi:

$$\alpha_L = \frac{2m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} (1 - \cos \phi) \quad (10)$$

m_1, m_2 : khối lượng của ion và nguyên tử trung

hòa

ϕ : góc tán xạ trong hệ khối tâm.

Với $m_1 = m_2$: $\phi = 2\chi$.

Trong hệ phòng thí nghiệm:

$$\cos \phi = 1 - 2R \quad (11)$$

Với R là một số ngẫu nhiên trong khoảng [0,1].

$$\phi = 2\chi \rightarrow \cos \phi = \sqrt{1 - 2R} \quad (12)$$

Góc tán xạ được tính bằng công thức:

$$\cos \chi = \frac{2 + E - 2(1 + E)^{R4}}{E} \quad (13)$$

Trong đó E là E tán xạ, R4 là một số ngẫu nhiên.

Cùng với quá trình ion hoá là sự sản sinh ra ion, lúc này ion cũng chịu tác động của điện trường

* Đối với tán xạ đàn hồi: [7]

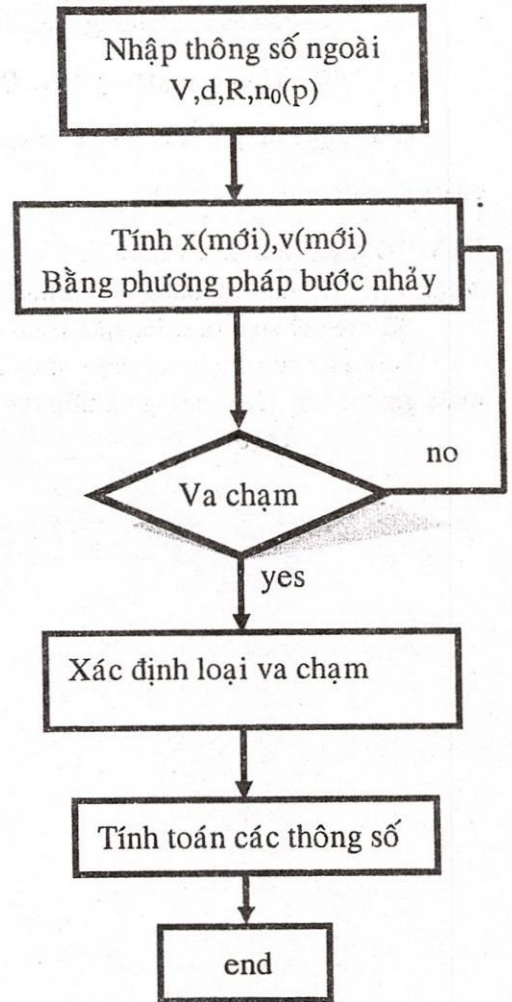
$$E \text{ tán xạ} = E \text{ tới} \cdot \cos^2 \chi$$

$$\cos^2 \chi = 1 - \sin^2 \chi$$

$$\cos \phi = \cos 2\chi = 1 - 2R5$$

$$2\chi = \phi$$

$$\cos \chi = \sqrt{1 - R5}$$



Hình 2 : Sơ đồ khối tổng quát để tính toán các thông số plasma

* Đối với va chạm trao đổi điện tích:

Ion tới nhanh lấy một điện tử từ nguyên tử khí chậm trở thành nguyên tử nhanh và để lại phía sau một ion tán xạ chậm.

Các hạt trao đổi động lượng tới. Ion chậm được tán xạ một cách đẳng hướng.

III. Kết quả:

Chúng tôi thử chạy chương trình ở điều kiện làm việc như sau:

- Điện thế vào khoảng vài trăm Volt
- Nồng độ hạt khí Ar khoảng 10^{10} hạt/cm³ (tương đương áp suất khí khoảng 200mtorr)
- Chiều dài ống phóng điện cỡ 10 ÷ 20 cm
- Bán kính ống phóng điện :0.05 ÷ 0.5 cm

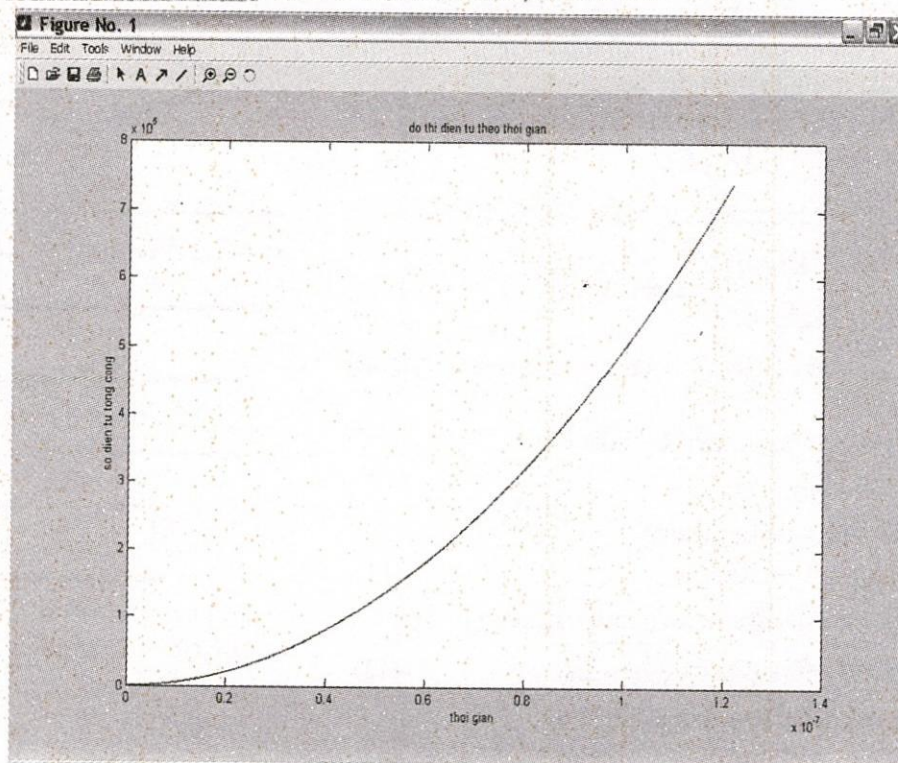
Thu được kết quả sau: Tỷ lệ va chạm bằng 0.0047 nghĩa là gần 5 hạt bị tán xạ trên 1000 hạt. Kết quả này phù hợp tài liệu[4];

III.1. Số điện tử sinh ra theo thời gian:

Nhận xét: Từ hình 3, chúng tôi có nhận xét như sau:

Số điện tử sinh ra trong quá trình va chạm tăng khi thời gian tăng.

Kết quả trên cho thấy điện tử được sinh ra trong quá trình va chạm có vai trò như điện tử sơ cấp được gia tốc bởi điện trường và tiếp tục va chạm với các phân tử khí.

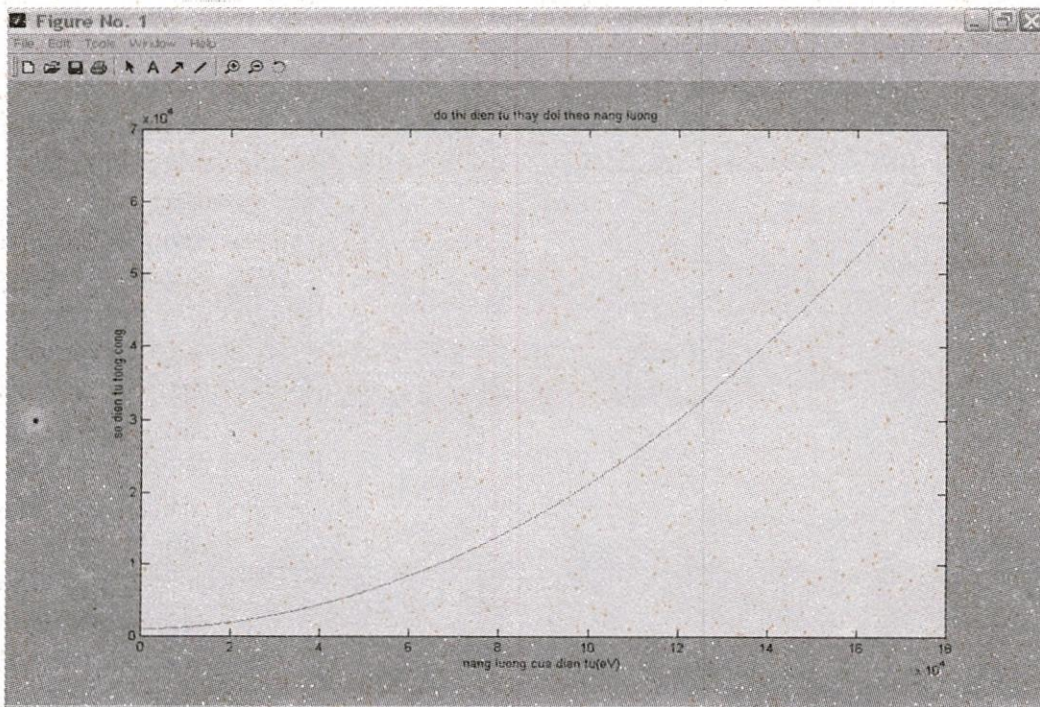


Hình 3: Số điện tử sinh ra theo thời gian

III.2. Điện tử tổng cộng theo năng lượng:

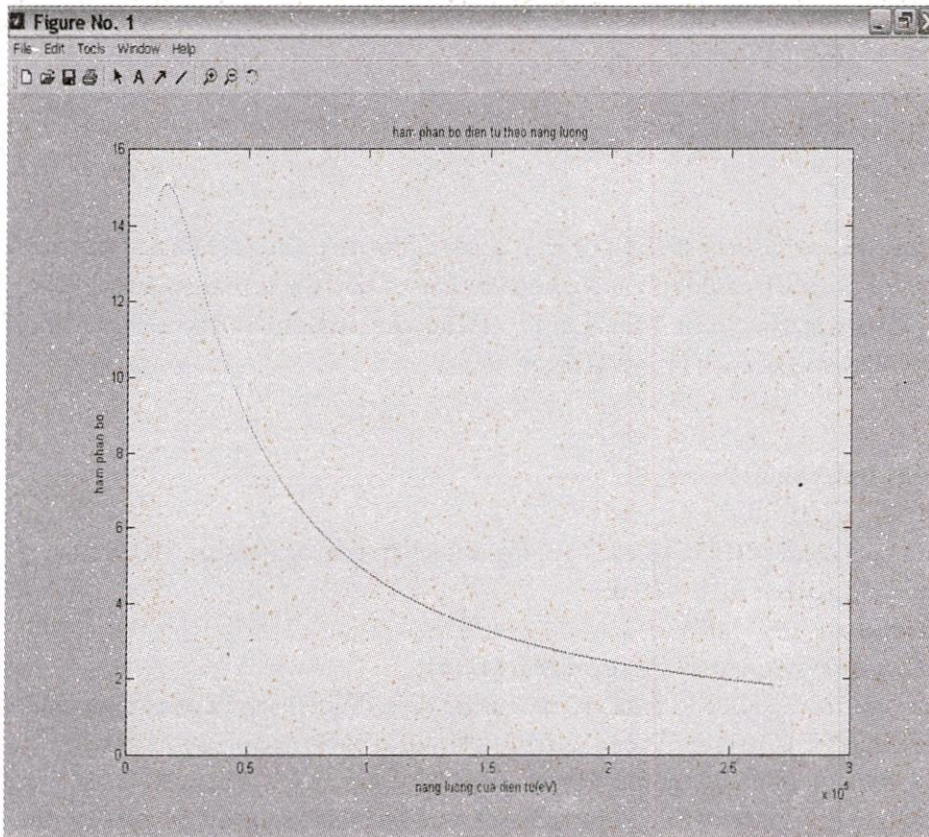
Sự biến thiên của số điện tử tổng cộng theo năng lượng được biểu diễn như hình 4.

Nhận xét: Số điện tử sinh ra trong quá trình va chạm tăng khi năng lượng của hệ tăng.



Hình 4 : điện tử sinh ra theo năng lượng

I.3. Hàm phân bố điện tử:



Nhận xét:

Hàm phân bố mà chương trình tính toán được phù hợp với kết quả của công trình [6]. Hàm phân bố electron theo năng lượng ở áp suất thấp không có dạng Maxwell. Trong plasma phóng điện khí, các loại hạt khác nhau có nhiệt độ khác nhau hay trung bình động năng của chúng khác nhau. Do đó, phân bố của hạt khác hàm Maxwell. Điều này đúng với tài liệu[3].

Hình 5 :hàm phân bố điện tử theo năng lượng.

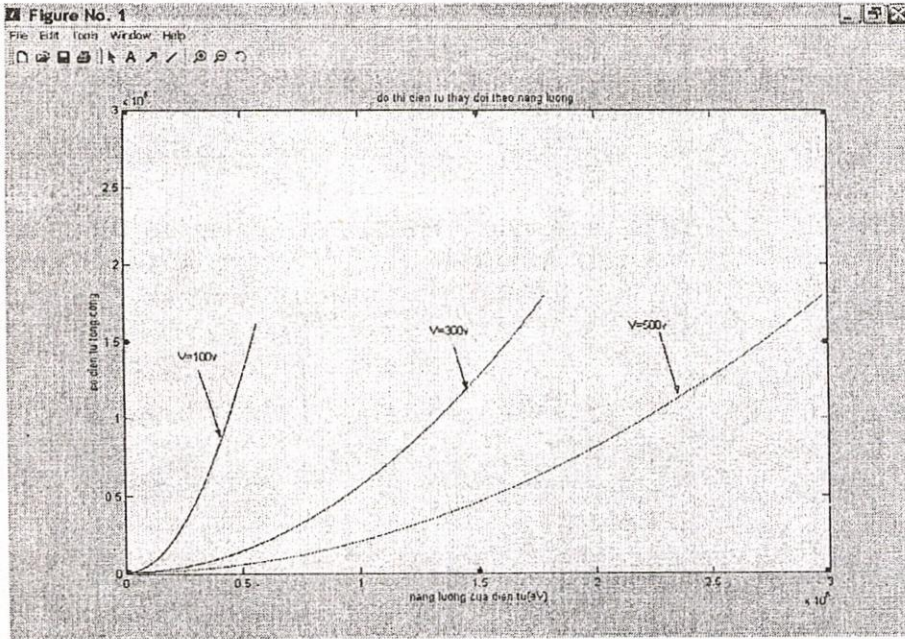
III.4. Khảo sát các trưng điện động của Plasma phóng điện khí khi thay đổi các thông số ngoài:

III.4.1. Khảo sát điện tử theo năng lượng với thông số V(Volt) thay đổi:

Chúng tôi lần lượt thay đổi các giá trị điện thế nhập vào trong cùng một điều kiện:

- Chiều dài ống phóng điện : 10 cm
- Số điện tử phát xạ: 1000 điện tử
- Bán kính ống phóng điện : 0.5cm
- Điện thế thay đổi: 100V-500V

Thu được kết quả như hình sau:



Nhận xét:

Từ hình 6, chúng tôi nhận thấy rằng khi cấp vào điện thế càng lớn thì nồng độ điện tử càng lớn và năng lượng của hệ càng tăng nhanh. Kết quả này khá tin cậy vì theo tài liệu [3] cho thấy rằng năng lượng trung bình của điện tử sẽ lớn khi điện trường cung cấp có giá trị lớn.

Hình 6 :Điện tử thay đổi theo năng lượng với các giá trị điện thế khác nhau

III.4.2. Khảo sát điện tử theo năng lượng với số điện tử phát xạ khác nhau:

Chúng tôi lần lượt thay đổi các giá trị điện tử phát xạ khác nhau trong cùng một điều kiện:

- Chiều dài ống phóng điện : 10 cm
- Bán kính ống phóng điện : 0.5cm
- Điện thế thay đổi: 500V
- Số điện tử phát xạ: 100-10000 điện tử

Thu được kết quả như hình 7:

Nhận xét:

Từ hình 7, chúng tôi nhận thấy rằng khi số điện tử phát xạ càng lớn thì nồng độ điện tử càng lớn và năng lượng của hệ càng tăng nhanh. Tuy nhiên khi số điện tử phát xạ quá lớn thì dạng đồ thị không còn phù hợp nữa. Điều này đã được giải thích ở tài liệu [7] là do chưa tính toán đến các quá trình khác trong Plasma phóng điện khí như khuếch tán và tái hợp.

IV. Kết luận

Với điều kiện sử dụng cho mô hình:

- Điện thế: khoảng vài trăm Volt
- Nồng độ hạt khí Ar khoảng 10^{14} hạt/cm³ (tương đương áp suất khí khoảng 200mtorr)
- Chiều dài ống phóng điện cỡ 10 ÷ 20 cm
- Bán kính ống phóng điện : 0.05 ÷ 0.5 cm

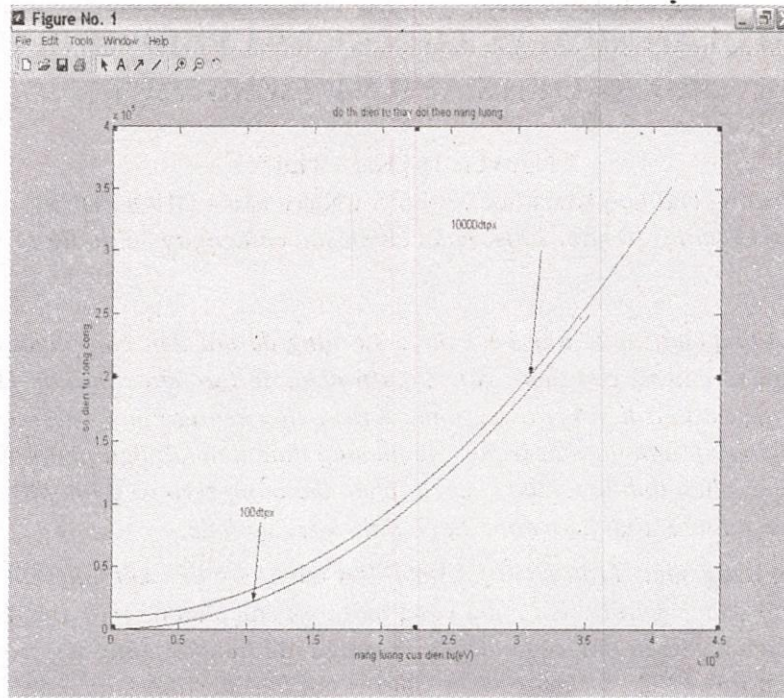
Đã cho ra một số kết quả phù hợp với các tài liệu khác[4],[6].

Chúng tôi đã thực hiện việc tính toán các thông số đặc trưng điện động trong Plasma phóng điện khí Ar khi áp suất khí hiếm khoảng 200mTorr. Việc lập trình tính toán bằng ngôn ngữ Matlab 5.0 và thu được một số kết quả phù hợp với các phương pháp khác.

Kết quả tính toán n_e từ các điều kiện thí nghiệm nêu trên và khảo sát sự thay đổi của nó theo các thông số ngoài cho thấy nồng độ điện tử có giá trị $\sim 10^{17}$ cm⁻³.

Các kết quả nhận được cho phép mở ra triển vọng áp dụng phương pháp mô phỏng như là một phương pháp khả thi và nhanh chóng để tìm hiểu về Plasma phóng điện khí, đặc biệt đối với các nguồn sáng phóng điện khí có áp suất thấp..

Từ các kết quả nhận được chúng tôi rút ra các dạng biến đổi của các đặc trưng điện động Plasma theo các thông số ngoài, là cơ sở cho việc nghiên cứu các loại nguồn sáng phóng điện khí khi tính đến các quá trình khác và điều kiện biên của lời giải.



Hình 7 :Điện tử thay đổi theo năng lượng với các giá trị điện tử khác nhau

SIMULATING AND CALCULATING SOME PARAMETERS OF AR GAS DISCHARGE PLASMA BY MATLAB SOFTWARE

Tran Thi Thu Nhi, Le Van Hieu

University of Natural Science – VNU-HCM

ABSTRACT: This article simulated the interaction process of electrons and neutral atoms in Ar gas discharge Plasma. Problems were solved when we changed some various conditions such as: the pressure of Ar, the potential, the radius of discharged tube... From that some of parameters related to this process (the scattering angle, the electron energy...) were calculated.

These simulations and calculations were based on " Monte – Carlo method" and programmed by Matlab software.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Nguyễn Ngọc Đạt, *Plasma – Trạng thái thứ tư của vật chất*, Nhà xuất bản trẻ, 1999.
- [2]. Bùi Đức Long, *Luận văn tốt nghiệp Đại học*, khoá 2001.
- [3]. Nguyễn Hữu Chí, *Vật Lý Plasma*, Tủ sách Đại học Tổng hợp Tp. HCM, 1995.
- [4]. Kenichi Nanbu & Members, *Probability Theory of Electron – Molecule, Ion – Molecule, Molecule – Molecule, and Coulomb Collisions for Partical Modeling of Materials Processing Plasma and Gases*, IEEE , 2000.
- [5]. Võ Văn Hoàng, *Mô phỏng trong vật lý*, Nhà xuất bản Đại học Quốc gia Tp. HCM, 2004.
- [6]. C.K.Birdsall, *Particle - in - Cell Charged – Particle Simulations Plus MonteCarlo Collision with Neutral Atoms*, PIC-MSS, 1995.
- [7]. Joden Fancies, *Ionization phenomena in gases*, LonDon Butter Worths Scientific Publications 1960.
- [8]. Trần Thị Thu Nhi, *Luận Văn Thạc sĩ, Chính xác hóa hàm phân bố electron theo năng lượng và các đặc trưng điện động trong Plasma phóng điện khí của hỗn hợp (Khí Hiếm + Thủy Ngân) khi áp suất nâng cao*, năm 2003.