

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ
ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ ΣΤΗΝ ΑΕΡΙΑ ΦΑΣΗ
ΠΛΑΣΜΑΤΟΣ ΟΞΥΓΟΝΟΥ ΜΕ ΣΥΝΕΧΗ ΜΟΝΤΕΛΑ
ΜΗΔΕΝΙΚΗΣ ΔΙΑΣΤΑΣΗΣ

Παρασκευή Γκέκα

Μεταπτυχιακή Εργασία

Επιβλέπων Καθηγητής: Ευάγγελος Γογγολίδης, ΕΚΕΦΕ Δημόχριτος

Αθήνα, Οκτώβριος 2006

Copyright 2006

by

Gkeká Paraskevi

Στους γονείς μου,

το Θωμά και τον Πάνο.

Περιεχόμενα

Σχήματα	v
Πίνακες	vii
1 Εισαγωγή	5
1.1 Ψυχρό Πλάσμα	7
1.2 Παράμετροι Συγκρούσεων	8
1.3 Παράμετροι Πλάσματος	10
1.3.1 Θερμοκρασία Πλάσματος	10
1.3.2 Μήκος Debye	12
1.3.3 Οριακή Στοιβάδα	13
1.3.4 Συχνότητα Πλάσματος	14
1.4 Διάχυση και Ευκινησία των Φορτισμένων Σωματιδίων στο Πλάσμα	14
1.5 Χημεία Πλάσματος	16
1.5.1 Αντιδράσεις των Ηλεκτρονίων με Βαρέα Σωματίδια	16
1.5.2 Συγκρούσεις μεταξύ βαρέων σωματιδίων	20
1.6 Γενικός Προσομοιωτής Πλάσματος	22
1.7 Σκοπός της εργασίας	25
2 Βιβλιογραφική Έρευνα	27
2.1 Προσομοίωση Πλάσματος	27
2.2 Μοντέλα Μηδενικής Διάστασης	28
3 Μοντέλο Μηδενικής Διάστασης	30
3.1 Περιγραφή του μοντέλου	30
3.1.1 Γεωμετρία Αντιδραστήρα	31
3.1.2 Ισοζύγια μάζας και ενέργειας	32
3.2 Γενικές Εξισώσεις	33
4 Μοντέλο Μηδενικής Διάστασης σε Πλάσμα Οξυγόνου	40
4.1 Εισαγωγή	40
4.2 Το Δίκτυο Αντιδράσεων	41
4.3 Περιγραφή του μοντέλου	42
4.4 Αδιαστατοποίηση των εξισώσεων του μοντέλου	45

5 Η μέθοδος Newton	51
5.1 Γενική Περιγραφή	51
5.2 Σύγκλιση	54
6 Επαλήθευση του κώδικα με χρήση αποτελεσμάτων από τη βιβλιογραφία	56
7 Εφαρμογή	69
7.1 Επίδραση του μαγνητικού πεδίου	69
7.1.1 Επίδραση του μαγνητικού πεδίου των μόνιμων μαγνητών στο κάτω τμήμα του αντιδραστήρα	69
7.1.2 Επίδραση του μαγνητικού πεδίου στο άνω τμήμα του αντιδραστήρα	74
7.2 Επίδραση Παραμέτρων	77
7.3 Σύγκριση με πειραματικά δεδομένα	80
7.3.1 Ακτινομετρικός λόγος	80
7.3.2 Συγκρίσεις για σταθερή ισχύ	81
7.3.3 Συγκρίσεις για σταθερή πίεση	82
7.4 Άλλα αποτελέσματα	83
A Κώδικας	86
B Διαστάσεις και μονάδες	117
C Φυσικές σταθερές (SI)	118
Βιβλιογραφία	119

Σχήματα

1.1	Schematic of a parallel-plate plasma reactor([2])	6
1.2	Παραδείγματα πλάσματος. (a) Το πλάσμα στη γέννηση των αστεριών ([65]). (b) Θυρίδα από αντιδραστήρα πλάσματος όπου φαίνεται το φως που εκπέμπει το αέριο στον αντιδραστήρα (www.plasmas.org/photo.htm). (c) Το μεγαλύ- τερό μέρος του ήλιου είναι πλάσμα ([65]). (d) Ο αντιδραστήρας πλάσματος επαγωγικής σύζευξης (Inductively Coupled Plasma Reactor) του εργαστηρίου Πλάσματος Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.	7
1.3	Βασικές παράμετροι συγκρούσεων.	9
1.4	Οριακή Στοιβάδα ([65]).	13
1.5	Η διάχυση είναι μία διαδικασία τυχαίου περιπάτου ([65]).	15
1.6	Σημαντικές αντιδράσεις των ηλεκτρονίων με άλλα είδη.	17
1.7	Διάσπαση ([65]).	18
1.8	Προσάρτηση ηλεκτρονίου ([65]).	19
1.9	Επανασύνδεση θετικού-αρνητικού ιόντος ([65]).	22
3.1	Αντιδραστήρας	31
3.2	Schematic for determining multipole fields in rectangular geometry.	32
5.1	Σχετικό σφάλμα σε διαδοχικές προσεγγίσεις των συναρτήσεων.	54
5.2	Condition number vs iterations.	55
6.1	A schematic of the planar inductive discharge. ([11])	56
6.2	(a) Schematic of reactor geometry used in the model, (b) density profiles for an electropositive discharge, (c) density profiles for an electronegative discharge. ([8])	57
6.3	Θερμοκρασία των ηλεκτρονίων σε σχέση με την πίεση για $P_{abs} = 1000W$, $Q=35\text{ sccm}$, $\gamma_{rec}=0.0$	59
6.4	Συνολική πυκνότητα των θετικών ιόντων n_+ σε σχέση με την πίεση.	59
6.5	Ο λόγος n_-/n_e για διάφορα γ_{rec}	60
6.6	Η πυκνότητα n_{O^+} για διάφορα γ_{rec}	60
6.7	Θερμοκρασία ηλεκτρονίων σε σχέση με την πίεση για $P_{abs} = 500 W$, $Q=5\text{sccm}$, $\gamma_{rec} = 2 \times 10^{-4}$	61
6.8	Η πυκνότητα των ηλεκτρονίων για διαφορετική ισχύ και διαφορετική πίεση. . .	62
6.9	Η πυκνότητα του O^+ για διαφορετική ισχύ και διαφορετική πίεση.	63

6.10 Η πυκνότητα του O_2^+ για διαφορετική ισχύ και διαφορετική πίεση.	64
6.11 Η πυκνότητα του O^- για διαφορετική ισχύ και διαφορετική πίεση.	65
6.12 Η πυκνότητα του ατομικού οξυγόνου για διαφορετική ισχύ και διαφορετική πίεση.	66
6.13 Η πυκνότητα του μοριακού οξυγόνου για διαφορετική ισχύ και διαφορετική πίεση.	67
6.14 Η πυκνότητα του μετασταθιούς ατομικού οξυγόνου O(1D) για διαφορετική ισχύ και διαφορετική πίεση.	68
 7.1 Ο συντελεστής f_{loss} σε σχέση με την πίεση ($Q=100 \text{ sccm}$, $P = 1800 \text{ Watt}$, $T = 600 \text{ K}$)	71
7.2 Ροή ιόντων σε σχέση με την ισχύ ($Q=100 \text{ sccm}$, $p = 1.35 \text{ Pa}$, $\gamma_{rec} = 1e-1$, $T = 400 \text{ K}$).	72
7.3 Η ροή ιόντων σε σχέση με την ισχύ ($Q=100 \text{ sccm}$, $p = 1.35 \text{ Pa}$, $\gamma_{rec} = 1e-1$, $T = 400 \text{ K}$).	72
7.4 Ροή ιόντων σε σχέση με την πίεση ($Q=100 \text{ sccm}$, $P_{abs} = 1800 \text{ W}$, $\gamma_{rec} = 0.1$, $T = 400 \text{ K}$).	73
7.5 Ροή ιόντων σε σχέση με την πίεση ($Q=100 \text{ sccm}$, $P_{abs} = 1800 \text{ W}$, $\gamma_{rec} = 0.1$, $T = 400 \text{ K}$).	73
7.6 Θερμοκρασία των ηλεκτρονίων: (a) ως προς την πίεση, (b) ως προς την ισχύ ($p = 1.35 \text{ Pa}$, $\gamma_{rec} = 0.1$, $T = 400 \text{ K}$).	74
7.7 Επίδραση του μαγνητικού πεδίου που δημιουργείται από το πηνίο στον άνω όγκο του αντιδραστήρα. Στο σχήμα φαίνεται η ροή ιόντων j_+ ως προς την πίεση για διάφορες τιμές του B	75
7.8 Επίδραση του μαγνητικού πεδίου που δημιουργείται από το πηνίο στον άνω όγκο του αντιδραστήρα. Στο σχήμα φαίνεται η ροή ιόντων j_+ ως προς την πίεση για διάφορες τιμές του B	76
7.9 Επίδραση του μαγνητικού πεδίου στο h_{R1}	76
7.10 Ροή ιόντων ως προς την πίεση για διάφορες τιμές του γ_{rec}	78
7.11 Ροή ιόντων ως προς την πίεση και σε σχέση με το T_g	79
7.12 Πυκνότητα ηλεκτρονίων ως προς την πίεση.	79
7.13 Πυκνότητα ατομικού οξυγόνου και ακτινομετρικός λόγος ($p = 1.33 \text{ Pa}$).	80
7.14 Πυκνότητας ατομικού οξυγόνου και ακτινομετρικός λόγος ($P_{abs} = 1000 \text{ Watt}$).	81
7.15 Ροή ιόντων σε σχέση με την πίεση.	82
7.16 Ροή ιόντων σε σχέση με την ισχύ.	82
7.17 Κλάσμα διάσπασης σε σχέση με την πίεση ($P_{abs} = 2000 \text{ W}$, $T = 400 \text{ K}$).	83
7.18 Κλάσμα διάσπασης σε σχέση με την ισχύ ($p = 5 \text{ Pa}$, $T = 400 \text{ K}$).	83
7.19 Ο λόγος n_-/n_e σε σχέση με την πίεση για $P_{abs} = 2000 \text{ W}$, $T = 400 \text{ K}$	84
7.20 Ο λόγος n_-/n_e σε σχέση με την ισχύ για $p = 5 \text{ Pa}$, $T = 400 \text{ K}$	84

Πίνακες

1.1	Τυπικές παράμετροι πλάσματος ([2]).	8
4.1	Δίκτυο Αντιδράσεων ([7] εκτός από τα K_5 και K_6 που είναι από [3]).	41
4.2	Rate coefficients for excitation of the atomic oxygen ([3]).	41
4.3	Αντιδράσεις στα τοιχώματα.	42
4.4	Rate coefficients for excitation of the oxygen molecule ([11]).	42
6.1	Oxygen Reaction Set 1 ([3])	58
7.1	Παράμετροι εισόδου για τη μελέτη επίδρασης του μαγνητικού πεδίου στο θάλαμο του αντιδραστήρα.	71
7.2	Παράμετροι εισόδου για τη μελέτη επίδρασης κάποιων βασικών παραμέτρων σε πλάσμα οξυγόνου.	75
7.3	Παράμετροι εισόδου για τη μελέτη επίδρασης κάποιων βασικών παραμέτρων σε πλάσμα οξυγόνου.	77
7.4	Παράμετροι εισόδου για σύγκριση με πειραματικά δεδομένα.	80
B.1	Διαστάσεις και μονάδες φυσικών ποσοτήτων.	117
C.1	Φυσικές σταθερές (SI).	118

Ευχαριστίες

Η εργασία αυτή είναι αποτέλεσμα συνεργασίας πολλών ατόμων και το γεγονός αυτό από μόνο του θεωρώ ότι την καθιστά σημαντική. Μέσα στην καθημερινότητα του «εγώ» και της αποξένωσης, υπήρξαν άνθρωποι που με ευχαρίστηση και κατανόηση με βοήθησαν να φέρω σε πέρας μία εργασία τελείως διαφορετική απ' ότι έχω κάνει μέχρι τώρα στα φοιτητικά μου χρόνια.

Αρχικά, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή μου κύριο Ευάγγελο Γογγολίδη για τις πολύτιμες συμβουλές και τη συμπαράστασή του καθ' όλη τη διάρκεια εκπόνησης της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας. Τον ευχαριστώ για την υπομονή του στο να με βοηθήσει να καταλάβω τις δύσκολες έννοιες που εμπεριέχονται στο γενικό όρο «Φύσική Πλάσματος». Τον ευχαριστώ επίσης που μου έδωσε τη δυνατότητα να συνεργαστούμε και πίστεψε ότι θα τα καταφέρω παρόλο που το θέμα της παρούσας εργασίας ήταν ιδιαίτερα απαιτητικό για έναν απόφοιτο μιας σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών.

Ακόμα, θα ήθελα να αναφέρω ότι η προσπάθεια αυτή χρηματοδοτήθηκε από το πρόγραμμα NanoPlasma της Ευρωπαϊκής Ένωσης με αριθμό συμβολαίου 016424. Ο τίτλος του προγράμματος είναι **«Plasma etching for desired nano-feature shape and nano-texture: an advanced reactor and simulation software for feedback-loop plasma control»**. Ευχαριστώ και πάλι τον κύριο Γογγολίδη που μπόρεσε να στηρίξει και οικονομικά αυτή την προσπάθεια.

Δε θα μπορούσα να μην αναφέρω τη μεγάλη βοήθεια του Δρ. Γιώργου Κόκκορη. Τον ευχαριστώ για τη βοήθειά του και για τη ψυχολογική υποστήριξη που μου παρείχε στο δύσκολο αυτό δρόμο μέχρι σήμερα. Τον ευχαριστώ ειλικρινά που ήταν πάντα εκεί για να του θέσω οποιοδήποτε ερώτημα ή να του πώ οτιδήποτε με προβλημάτισε. Κυρίως όμως τον ευχαριστώ γιατί με έκανε να συνειδητοποιήσω ότι με υπομονή και επιμονή όλα τα προβλήματα λύνονται, πεποίθηση την οποία είχα και πριν αλλά δυστυχώς μόνο για προβλήματα που είχαν να κάνουν με Μαθηματικά...

Ευχαριστώ επίσης τον υποψήφιο διδάκτορα Νίκο Βούρδα για την παροχή πειραματικών δεδομένων.

Τέλος, δε θα μπορούσα να ξεχάσω την αμέριστη συμπαράσταση της οικογένειας μου που όλον αυτό τον καιρό με στήριξε και με βοήθησε να αντιμετωπίσω οποιοδήποτε πρόβλημα είχα. Μαμά, μπαμπά, Βάγια, Θωμά, Πάνο σας ευχαριστώ για όλα.

Περίληψη

Ένα σημαντικό στάδιο στην κατασκευή δομών μικροηλεκτρονικής και μικρο-ηλεκτρομηχανικών συστημάτων (Micro-Electro-Mechanical Systems, MEMS) είναι η εγχάραξη, η οποία χρησιμοποιείται για τη μεταφορά σχήματος σε ένα υπόστρωμα ή σε ένα υμένιο (film).

Η επιλογή του κατάλληλου μίγματος αερίων είναι ιδιαίτερης σημασίας στην επίτευξη του επιθυμητού προφίλ εγχάραξης. Επιλέγοντας την αναλογία του μίγματος μπορούμε να ελέγξουμε διάφορα χαρακτηριστικά του συστήματός μας, όπως για παράδειγμα το λόγο F/C σε ένα πλάσμα με αέρια της μορφής $C_x F_y$, δηλαδή να ελέγξουμε το βαθμό πολυμερισμού σε σχέση με την εγχάραξη.

Επίσης, επιλέγοντας την κατάλληλη χημεία για την επεξεργασία ενός συγκεκριμένου υμείου ή υποστρώματος μπορούμε να γνωρίζουμε ποιά είδη σχηματίζονται. Τα αντιδρώντα είδη που φθάνουν στην επιφάνεια του υποστρώματος αντιδρούν σχηματίζοντας προϊόντα εγχάραξης, και τα προϊόντα αυτά πρέπει να είναι πιθανά ώστε να διευκολύνουν τη διεργασία.

Εφόσον η νέα γενιά αντιδραστήρων λειτουργεί υπό υψηλές πυκνότητες ιόντων και χαμηλή πίεση, είναι πολύ σημαντικό να υπάρχει όσο το δυνατόν καλύτερη κατανόηση τόσο της φυσικής όσο και της χημείας της αέριας φάσης. Η κατανόηση της χημείας του πλάσματος μας επιτρέπει την πρόβλεψη του βαθμού διάσπασης και ιονισμού (degree of dissociation and ionization) του αερίου που βάζουμε στην είσοδο καθώς και τη σύσταση της αέριας φάσης.

Η παραγωγή αντιδρώντων ειδών λαμβάνει χώρα μέσω συγκρούσεων ανάμεσα σε ηλεκτρόνια και ουδέτερα είδη. Ηλεκτρόνια με ενέργεια που να ξεπερνάει το όριο διάσπασης ή ιονισμού (dissociation or ionization threshold) είναι δυνατό να «σπάσουν» το αέριο εισόδου και να παράγουν ουδέτερα και φορτισμένα είδη.

Ο σκοπός της εργασίας είναι η ανάπτυξη ενός μοντέλου μηδενικής διάστασης (global model) για πλάσμα O_2 σε αντιδραστήρα ICP (Inductively coupled plasma reactor) που να αποτελεί τμήμα μιας ολοκληρωμένης προσομοίωσης εγχάραξης. Η προσομοίωση αυτή αφορά

στη σύνδεση της αέριας φάσης στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα πλάσματος με την τοπογραφία της εγχαρασσόμενης δομής με την εισαγωγή ελέγχου στη διαδικασία ώστε να επιτευχθεί το επιθυμητό αποτέλεσμα.

Οι διαφορές του μοντέλου από τα υπάρχοντα στη βιβλιογραφία είναι συνοπτικά:

- Ενημερωμένο δίκτυο αντιδράσεων. Μετά από εκτενή βιβλιογραφική έρευνα και εκτίμηση των διάφορων παραμέτρων καταλήξαμε σε ένα δίκτυο αντιδράσεων το οποίο περιλαμβάνει τις σημαντικότερες αντιδράσεις που λαμβάνουν χώρα σε ένα πλάσμα οξυγόνου στο εύρος των συνθηκών που δουλεύουμε.
- Το μοντέλο αφορά σε αντιδραστήρα πλάσματος δύο κυλίνδρων σε αντίθεση με τα διαθέσιμα μοντέλα.
- Λαμβάνει υπόψη την επίδραση των μαγνητών στα τοιχώματα του αντιδραστήρα πλάσματος (cusp). Οι μαγνήτες αυτοί δημιουργούν ένα ισχυρό μαγνητικό πεδίο γύρω από το θάλαμο περιορίζοντας τις απώλειες στα τοιχώματα (confinement) και αυξάνοντας την πυκνότητα του πλάσματος.
- Λαμβάνει υπόψη την επίδραση του μαγνητικού πεδίου που εφαρμόζεται στον άνω κύλινδρο του αντιδραστήρα πλάσματος από το πηνίο που υπάρχει γύρω από αυτόν.

Τα κύρια σημεία της εργασίας συνοψίζονται στα εξής με τη σειρά που παρουσιάζονται στην εργασία:

1. Διατυπώνονται οι εξισώσεις που περιγράφουν την αέρια φάση ενός πλάσματος οξυγόνου. Οι εξισώσεις αυτές είναι τα ισοζύγια μάζας των ειδών που θεωρούμε στο μοντέλο μας, το ισοζύγιο ενέργειας, η εξισωση ουδετερότητας του πλάσματος και η καταστατική εξισωση των ιδανικών αερίων.
2. Γίνεται αδιαστατοποίηση των εξισώσεων και κατάστρωση του τελικού προς επίλυση συστήματος.
3. Επιλύεται το σύστημα με τη μέθοδο Newton και παραθέτονται σχήματα και παρατηρήσεις που παρουσιάζουν τα προβλήματα που προέκυψαν κατά τη διάρκεια της επίλυσης.
4. Γίνεται σύγκριση με προηγούμενες δουλειές για την επαλήθευση του μοντέλου.
5. Συγχρίνονται αποτελέσματα του μοντέλου με πειραματικά δεδομένα.

Summary

One important stage in the fabrication of microelectronics devices and microelectromechanical systems (MEMS) is etching, which is used to transfer patterns onto a substrate or film.

Selection of the proper gas mixture is crucial in achieving the desired etch profile. By choosing the proportion of a gas mixture one can control different parameters of the system, such as the F/C ratio in a plasma composed by gases of various types of C_xF_y , hence control the degree of polymerization versus etching.

Moreover, by selecting the appropriate gas chemistry for processing a particular film or substrate one can know which products are created. Reactive species that arrive at the substrate surface will react to form etch products, and these products must be volatile to make an etch process feasible.

Since the new generation of reactors operate under high ion density and low pressure, it is very important to have a good understanding of both the discharge physics and gas phase chemistry. An understanding of plasma chemistry allows us to predict the degree of dissociation and ionization of the feed gas and the gas phase composition.

The generation of reactive species takes place through electron-neutral collisions. Energetic electrons with sufficient energy to overcome the dissociation or ionization threshold energy can fragment the feed gas and generate reactive radicals and ions.

The goal of this work is the development of a global model for inductively coupled oxygen discharge plasma that is part of an integrated simulation for plasma etching. This simulation links the bulk plasma gas phase with the profile of the etched structure with the use of a feedback control loop in order to achieve the desired nano-feature shape and nano-texture.

The differences between this model and the previously done from the bibliography

are:

- An up-to-date reaction set. After an in-depth literature search and much consideration about the different parameters included in the gas phase we ended up with a reaction set that includes the most important reactions that take place in an oxygen plasma.
- The model has to do with a reactor that is consisted by two cylinders whereas previous works assume a reactor with one cylinder.
- The model includes the effect of the magnetic cusp.
- It also includes the effect of the magnetic field created by the antenna at the upper cylinder of the reactor.

The main points of this work are summarized below (in the order that appear in the text):

1. The equations that describe the gas phase of an oxygen plasma are formulated. These equations are the mass balances, the energy balance and the ideal gas law.
2. Normalization of the equations and formulation of the final system.
3. The system is solved with the Newton method. Figures and comments that show and explain difficulties in the convergence of the method are presented.
4. Comparison with previously done works on plasma oxygen in order to examine the validity of the model.
5. Comparison with experimental data.

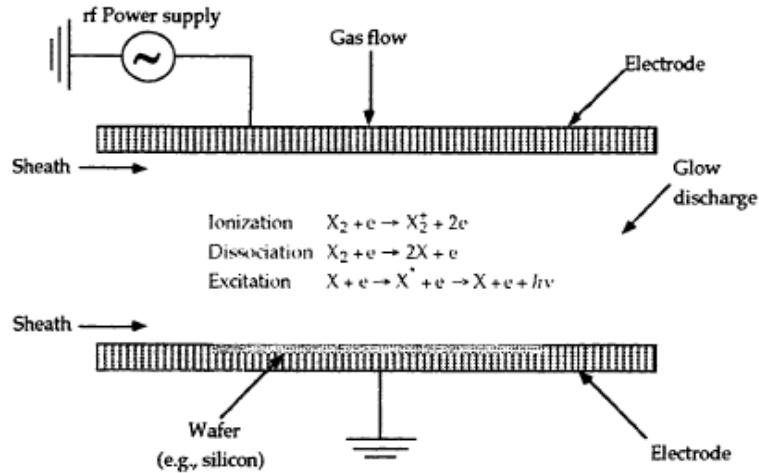
Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Στα μέσα του 19ου αιώνα ο Τσέχος φυσιολόγος Jan Evangelista Purkinje εισήγαγε τη χρήση της ελληνικής λέξης πλάσμα για να περιγράψει το καθαρό ρευστό που παραμένει μετά την αφαίρεση όλων των αιμοσφαιρίων του αίματος. Μισό αιώνα αργότερα, ο Αμερικανός επιστήμονας Irving Langmuir πρότεινε το 1922 ότι τα ηλεκτρόνια, τα ιόντα και τα ουδέτερα είδη σε ένα ιονισμένο αέριο μπορούν με ένα ισοδύναμο τρόπο να θεωρηθούν ως ένα μοριακό υλικό μέσα σε ένα είδος ρευστού μέσου. Το μέσο αυτό το ονόμασε πλάσμα. Ωστόσο, προέκυψε ότι σε αντίθεση με το αίμα το οποίο είναι πράγματι ένα ρευστό μέσο που μεταφέρει μοριακό υλικό, δεν υπάρχει στην πραγματικότητα ρευστό μέσο που να μεταφέρει ηλεκτρόνια, ιόντα και ουδέτερα είδη σε ένα ιονισμένο αέριο. Από τότε, οι επιστήμονες που μελετούσαν το πλάσμα έπρεπε να εξηγούν σε φίλους και γνωστούς ότι δε μελετούσαν το αίμα! Ωστόσο, το πλάσμα μπορεί να πάρει το σχήμα το δοχείου που το περιέχει (π.χ. στις λάμπες νέου) ακριβώς όπως και το αίμα παίρνει το σχήμα της αρτηρίας που το περιέχει.

Οι διεργασίες πλάσματος χρησιμοποιούνται ευρύτατα για την κατασκευή δομών και διατάξεων μικροηλεκτρονικής, οπτοηλεκτρονικής, καθώς και μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων (Microelectromechanical Systems, MEMS). Χρησιμοποιούνται επίσης και για την τροποποίηση επιφανειών με στόχο να αποκτήσουν συγκεκριμένες ιδιότητες (π.χ. δημιουργία υδρόφοιβων επιφανειών). Η εγχάραξη με πλάσμα είναι ο κύριος εκπρόσωπος των διεργασιών πλάσματος. Σε αυτές ανήκουν επίσης η χημική απόθεση από ατμό (Plasma enhanced chemical vapor deposition) καθώς και PIII (Plasma-immersion ion implantation).

Η Χημεία του Πλάσματος λαμβάνει χώρα σε συνθήκες μη ισορροπίας, και οι αντιδράσεις μπορεί να συμβούν ενώ το αέριο παραμένει σε σχετικά χαμηλές θερμοκρασίες. Στη βάση των αναφερόμενων τεχνολογιών είναι το ψυχρό πλάσμα. Τα φαινόμενα που συμβαίνουν σε



Σχήμα 1.1: Schematic of a parallel-plate plasma reactor([2])

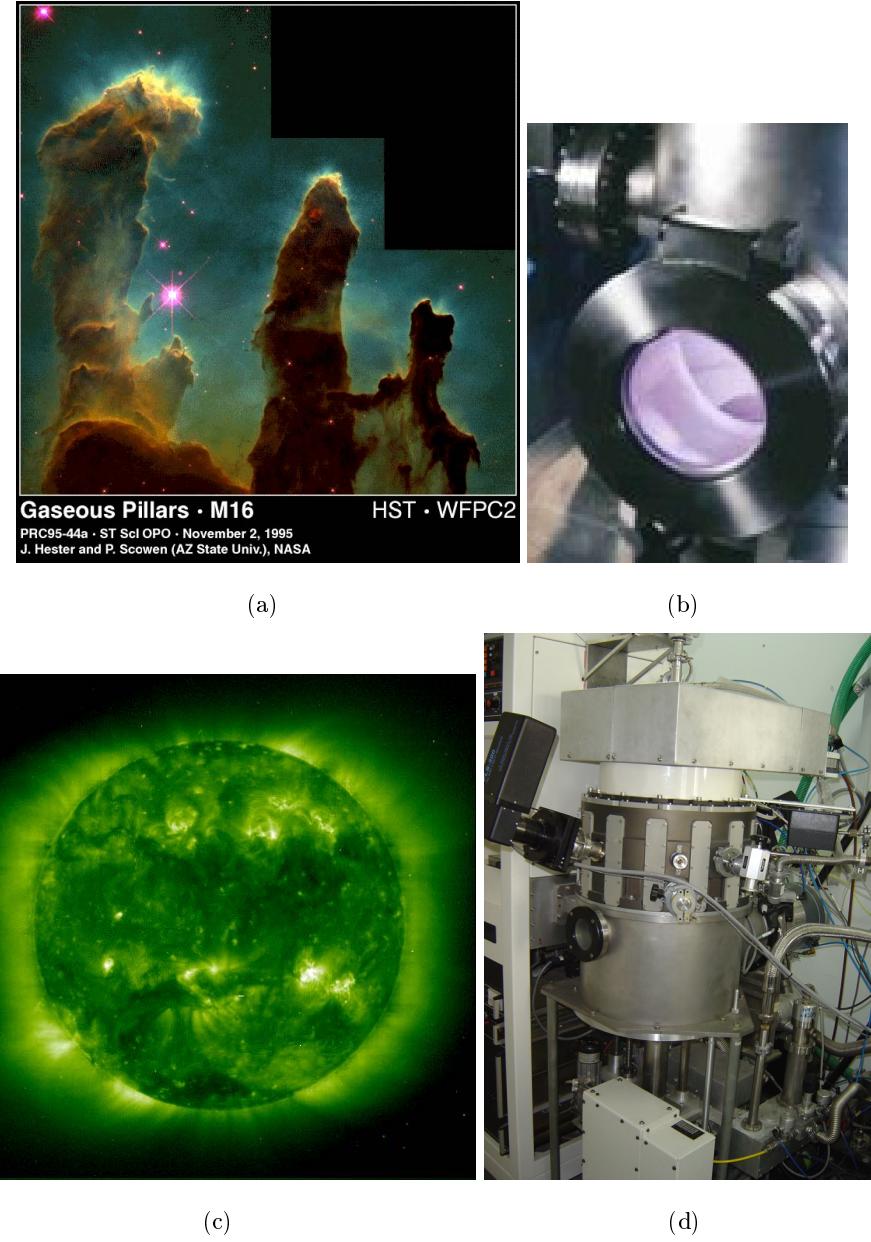
ένα ψυχρό πλάσμα είναι πολύ σύνθετα και όχι πλήρως καταννοητά. Ωστόσο, είναι πιθανό με την παρούσα γνώση φυσικής και χημείας πλάσματος να ρυθμίσουμε και να ελέγξουμε τη σύνθεση των αέριων μιγμάτων και τις παραμέτρους εκκένωσης ώστε να πετύχουμε τα επιθυμητά αποτελέσματα όσον αφορούν στις διεργασίες και στις ιδιότητες των υλικών.

Ορισμός 1 Το πλάσμα είναι ένα ασθενώς ιονισμένο αέριο, που περιέχει φορτισμένα σωματίδια (θετικά και αρνητικά ιόντα και ηλεκτρόνια) και ουδέτερα μόρια, είναι οιονεί ουδέτερο ηλεκτρικά¹ και εμφανίζει συλλογική συμπεριφορά² ([64]).

Ωστόσο, δεν είναι απαραίτητο όλα τα άτομα να είναι ιονισμένα: στα κρύα πλάσματα που χρησιμοποιούνται στις διεργασίες πλάσματος μόλις το 0.001 – 1% είναι ιονισμένο, με το υπόλοιπο αέριο να παραμένει ως ουδέτερα άτομα ή μόρια. Σε υψηλότερες θερμοκρασίες το πλάσμα γίνεται πλήρως ιονισμένο.

¹Με τον όρο «οιονεί ουδέτερο ηλεκτρικά» εννοούμε ένα μέσο τόσο ουδέτερο, ώστε να μπορεί να θεωρήσει κανείς ότι $n_+ \approx n_- \approx n$ (όπου n_+ η πυκνότητα των θετικά φορτισμένων σωματιδίων του πλάσματος και n_- η πυκνότητα των αρνητικά φορτισμένων), αλλά ταυτόχρονα όχι τελείως ουδέτερο.

²Με τον όρο «συλλογική συμπεριφορά» εννοούμε ότι η κίνηση των σωματιδίων του πλάσματος δεν εξαρτώνται μόνο από τις τοπικές συνθήκες σε μια γειτονιά γύρω απ' αυτά αλλά και από τις συνθήκες που επικρατούν σε πιο απομακρυσμένες περιοχές.



Σχήμα 1.2: Παραδείγματα πλάσματος. (a) Το πλάσμα στη γέννηση των αστεριών ([65]). (b) Θυρίδα από αντιδραστήρα πλάσματος όπου φαίνεται το φως που εκπέμπει το αέριο στον αντιδραστήρα (www.plasmas.org/photo.htm). (c) Το μεγαλύτερο μέρος του ήλιου είναι πλάσμα ([65]). (d) Ο αντιδραστήρας πλάσματος επαγωγικής σύζευξης (Inductively Coupled Plasma Reactor) του εργαστηρίου Πλάσματος Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.

1.1 Ψυχρό Πλάσμα

Ηλεκτρική εκκένωση πλάσματος επιτυγχάνεται χρησιμοποιώντας την ενέργεια από εξωτερική πηγή ενέργειας (dc, RF, or microwave)[63]. Αυτή η ενέργεια κερδίζεται από τα

Πυκνότητα ηλεκτρονίων και ιόντων	$10^9 - 10^{12} \text{ cm}^{-3}$
Βαθμός ιονισμού	$10^{-6} - 10^{-1}$
Μέση ενέργεια ηλεκτρονίων	$0.1 - 10 \text{ eV}$
Ενέργεια ιόντων	$0.03 - 0.15 \text{ eV}$
Ενέργεια ουδετέρων	$0.03 - 0.05 \text{ eV}$
Πίεση	$10^{-4} - 10 \text{ Torr}$
Συχνότητα(rf discharges)	$50 \text{ kHz} - 2.45 \text{ GHz}$

Πίνακας 1.1: Τυπικές παράμετροι πλάσματος ([2]).

ηλεκτρόνια τα οποία, παρά το μεγάλο αριθμό ελαστικών συγκρούσεων με το αέριο, δεν έχουν σημαντικές απώλειες της ενέργειάς τους λόγω της μικρής τους μάζας. Συνεπώς, τα ηλεκτρόνια αποκτούν πολύ υψηλή θερμοκρασία ενώ το αέριο και τα ιόντα είναι σχετικά κρύα. Στην πραγματικότητα, υπάρχουν περιπτώσεις όπου $T_e \sim 10^4 - 10^5 \text{ K}$ (1-10 eV), ενώ η T_g μπορεί να είναι ίση με τη θερμοκρασία δωματίου. Σε εκκενώσεις χαμηλής πίεσης, δεν επιτυγχάνεται θερμοδυναμική ισορροπία μεταξύ των ηλεκτρονίων και των βαρέων σωματιδίων. Αυτές οι εκκενώσεις, οι οποίες είναι μόνο μερικώς ιονισμένες ονομάζονται ψυχρά πλάσματα.

1.2 Παράμετροι Συγκρούσεων

Η συμπεριφορά ενός ουδέτερου αερίου περιγράφεται από την κινητική θεωρία των αερίων. Σε ένα συνηθισμένο ουδέτερο αέριο καμία δύναμη δε δρα μεταξύ των μορίων του αερίου, και τα σωματίδια μετακινούνται σε ευθείες γραμμές, με μία κατανομή ταχυτήτων. Η κίνηση των μορίων ελέγχεται από τις μεταξύ τους συγκρόύσεις αλλά και με τις συγκρούσεις τους με τα τοιχώματα του δοχείου που τα περιέχει ώστε τελικά να ακολουθούν τυχαία κίνηση Brown.

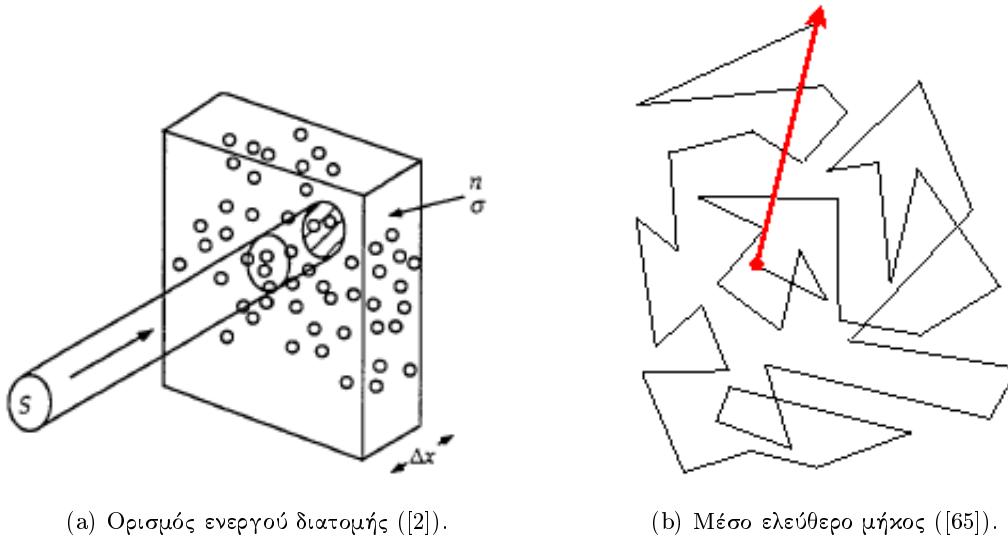
Υποθέτοντας ότι τα σωματίδια του αερίου είναι συμπαγείς σφαίρες ακτίνας r και πυκνότητας n , προκύπτουν οι ακόλουθοι ορισμοί,

Ορισμός 2 Ενεργός διατομή (*cross section*) σ μια σύγκρουσης ορίζεται ως η πιθανότητα αυτής της σύγκρουσης να συμβεί και στην περίπτωσή μας δίνεται από τη σχέση

$$\sigma = \pi r^2. \quad (1.2.1)$$

Ορισμός 3 Μέσο ελεύθερο μήκος (*mean free path*) λονομάζουμε τη μέση απόσταση την οποία διασχίζει ένα σωματίδιο πριν μετάσχει σε μία συγκρουση και ορίζεται ως

$$\lambda = \frac{1}{\sigma n_g}. \quad (1.2.2)$$



Σχήμα 1.3: Βασικές παράμετροι συγκρούσεων.

Ορισμός 4 Η συχνότητα συγκρουσης ν είναι ο μέσος αριθμός συγκρούσεων ανά δευτερόλεπτο που έχει ένα τυχαίο σωματίδιο με ένα συγκεκριμένο πληθυσμό σωματιδίων και ορίζεται ως

$$\nu = \frac{\bar{u}}{\lambda}, \quad (1.2.3)$$

και

Ορισμός 5 ο μέσος χρόνος τ μεταξύ δύο συγκρούσεων δίνεται από τη σχέση

$$\tau = \frac{1}{\nu} = \frac{\lambda}{\bar{u}}, \quad (1.2.4)$$

όπου \bar{u} είναι η μέση ταχύτητα των μορίων στο αέριο και η οποία προσδιορίζεται από τη θερμοκρασία του T

$$\bar{u} = \sqrt{\frac{kT}{M}} \quad (1.2.5)$$

όπου M είναι η μάζα του μορίου και k είναι η σταθερά Boltzman.

Επιπλέον,

Ορισμός 6 ρυθμός αντίδρασης(*rate constant*) K είναι η συχνότητα συγκρούσεων ανά μονάδα πυκνότητας και δίνεται από τη σχέση,

$$K = \sigma v = \int_0^\infty \sqrt{\frac{2E}{m}} \sigma(E) f(E) dE. \quad (1.2.6)$$

1.3 Παράμετροι Πλάσματος

Το πλάσμα χαρακτηρίζεται από τις ακόλουθες βασικές παραμέτρους:

- Την πυκνότητα των ουδετέρων ειδών, n_n ,
- τις πυκνότητες των ηλεκτρονίων και των αρνητικών και θετικών ιόντων, n_e , n_{i-} and n_{i+} , και
- τις κατανομές ενέργειας των ουδετέρων ειδών, $f_n(W)$, των ιόντων, $f_i(W)$ και των ηλεκτρονίων, $f_e(W)$.

1.3.1 Θερμοκρασία Πλάσματος

Μία από τις φυσικές παραμέτρους που χαρακτηρίζουν την κατάσταση ενός αερίου σε θερμοδυναμική ισορροπία είναι η θερμοκρασία του. Ένα πλάσμα περιέχει ένα πλήθος σωματιδίων με διαφορετικά ηλεκτρικά φορτία και μάζες. Μπορούμε να υποθέσουμε ότι το πλάσμα αποτελείται από δύο συστήματα: το πρώτο αποτελείται μόνο από ηλεκτρόνια και το δεύτερο από τα βαρέα είδη.

Τα ηλεκτρόνια κερδίζουν ενέργεια από το ηλεκτρικό πεδίο και χάνουν μέρος της μεταφέροντάς στις στα βαρέα σωματίδια μέσω ελαστικών και μη-ελαστικών συγκρούσεων. Από την άλλη, τα βαρέα είδη χάνουν ενέργεια μέσω συγκρούσεων ή με μεταφορά θερμότητας στα τοιχώματα του αντιδραστήρα.

Καθένα από τα είδη χαρακτηρίζεται από μία μέση θερμοκρασία. Ορίζουμε, λοιπόν, τη θερμοκρασία των ιόντων T_i και τη θερμοκρασία των ηλεκτρονίων T_e . Στην περίπτωση που

έχουμε magnetized plasma τα ιόντα και τα ηλεκτρόνια έχουν δύο διαφορετικές θερμοκρασίες, μία που να αντιστοιχεί στην κίνηση των φορτισμένων σωματιδίων παράλληλα στο μαγνητικό πεδίο, $T_{||}$, και μία που να αντιστοιχεί στην κίνησή τους κάθετα σ' αυτό, T_{\perp} . Επίσης, ορίζουμε τη θερμοκρασία του αερίου T_g , που είναι ουσιαστικά η θερμοκρασία των ουδετέρων.

Ορισμός 7 Συνάρτηση κατανομής ταχύτητας $f(v)$ ενός συστήματος σωματιδίων ορίζεται ως η πυκνότητα των σωματιδίων στο χώρο των ταχυτήτων ([64]) και δίνεται από τη σχέση

$$n = 4\pi \int_0^\infty f(v) v^2 dv, \quad (1.3.1)$$

όπου v είναι η ταχύτητα και n είναι η πυκνότητα των σωματιδίων στο χώρο.

Διακρίνουμε τις ακόλουθες περιπτώσεις.

1. **Η συνάρτηση κατανομής ταχύτητας είναι Maxwell-Boltzmann.** Η περίπτωση αυτή ισχύει όταν

- η κατανομή ταχύτητας των ηλεκτρονίων είναι ισοτροπική,
- η επίδραση των μη-ελαστικών συγκρούσεων δρα μόνο ως διαταραχή (perturbation) της κατανομής και
- η επίδραση των ηλεκτρικών πεδίων είναι αμελητέα.

Τότε,

$$f(v) = n_e \left(\frac{m_e}{2\pi k T_e} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m_e v^2}{2k T_e} \right) \quad (1.3.2)$$

Ορισμός 8 Η συνάρτηση κατανομής ενέργειας των ηλεκτρονίων $f(W)$ δίνεται από τη σχέση

$$g(W) = \frac{4\pi}{m_e} v f(v). \quad (1.3.3)$$

Συνεπώς, η Maxwellian συνάρτηση κατανομής ενέργειας των ηλεκτρονίων είναι

$$g(W) = 2.07 W_{av}^{-3/2} W^{1/2} \exp \left(-\frac{3W}{2W_{av}} \right), \quad (1.3.4)$$

όπου W_{av} είναι η μέση ενέργεια των ηλεκτρονίων,

$$W_{av} = \frac{3}{2}kT_e. \quad (1.3.5)$$

2. Η συνάρτηση κατανομής ταχύτητας είναι Druyvesteyn. Η περίπτωση αυτή ισχύει όταν:

- το ηλεκτρικό πεδίο είναι αρκετά μικρό ώστε οι μη-ελαστικές συγκρούσεις να μπορούν να αγνοηθούν και αρκετά μεγάλο ώστε να ικανοποιεί τη σχέση $T_e >> T_i$,
- το ηλεκτρικό πεδίο είναι συχνότητας ω πολύ μικρότερης από τη συχνότητα των συγκρούσεων v , και
- η συχνότητα των συγκρούσεων είναι ανεξάρτητη της ενέργειας των ηλεκτρονίων.

Υπό τις παραπάνω προϋποθέσεις έχουμε,

$$f(W) = 1.04W_{av}^{-3/2}W^{1/2}exp\left(-\frac{0.55W^2}{W_{av}^2}\right), \quad (1.3.6)$$

1.3.2 Μήκος Debye

Το μήκος *Debye* είναι άλλη μία σημαντική παράμετρος του πλάσματος. Κατά τη δημιουργία τυχόν ηλεκτρικού πεδίου στο πλάσμα, τα φορτισμένα σωματίδια που υπάρχουν σ' αυτό, και κατά κύριο λόγο τα ελαφρύτερα και πιο ευκίνητα ηλεκτρόνια, αποκρίνονται ώστε να μειωθεί η επίδραση του πεδίου. Αυτή η απόκριση των φορτισμένων σωματιδίων με σκοπό τη μείωση της απίδρασης των τοπικών ηλεκτρικών πεδίων ονομάζεται θωράκιση *Debye* (Debye shielding) και είναι υπεύθυνη για το φαινόμενο της ουδετερότητας του πλάσματος.

Ορισμός 9 Το μήκος *Debye* λ_D είναι η χαρακτηριστική κλίμακα μήκους στην οποία τα ηλεκτρικά πεδία στο πλάσμα φθίνουν. Η πτώση του ηλεκτρικού πεδίου οφείλεται στη θωράκιση *Debye* που αναφέρθηκε παραπάνω. Έχουμε,

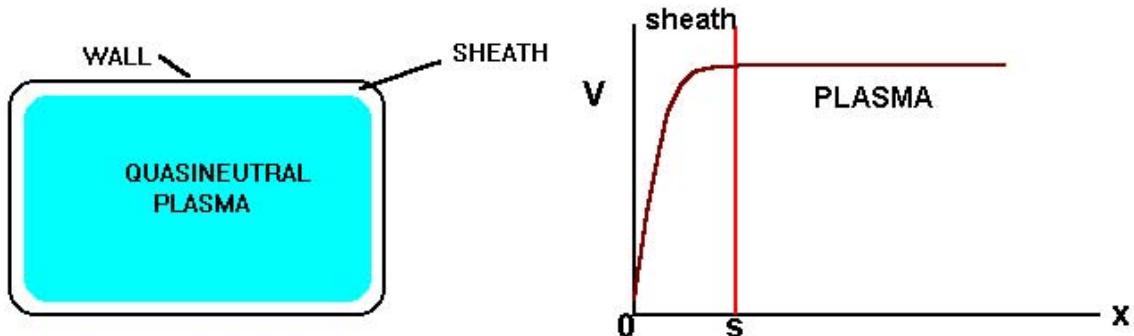
$$\lambda_D = \left(\frac{\epsilon_0 k T_e}{n_e q_e^2}\right)^{1/2}, \quad (1.3.7)$$

όπου ϵ_0 είναι the διηλεκτρική σταθερά του κενού και q_e είναι το φορτίο των ηλεκτρονίου.

Στην περίπτωση που έχουμε περισσότερα ηλεκτρόνια, η θωράκιση είναι πιο αποτελεσματική, και το λ_D είναι μικρότερο. Όταν τα ηλεκτρόνια γίνουν πιο θερμά μπορούν να δραπετεύσουν από το πεδίο κάνοντας το φαινόμενο της θωράκισης Debye λιγότερο αποτελεσματικό και το λ_D μεγαλύτερο ([66]). Όταν εισάγουμε τις τιμές του ϵ_0 και του q_e και για $kT_e = 4 \text{ eV}$ και $n_e = 10^{17} \text{ m}^{-3}$ το λ_D είναι της τάξης 50 μm .

1.3.3 Οριακή Στοιβάδα

Μία ακόμα σημαντική διαδικασία στο πλάσμα είναι το τι συμβαίνει στην επιφάνεια του δοχείου που περιέχει το πλάσμα. Τα ιόντα και τα ηλεκτρόνια που φθάνουν στην επιφάνεια επανασυνδέονται και έτσι οι ροές χάνονται από το πλάσμα. Τα ηλεκτρόνια φθάνουν στην επιφάνεια με πολύ μεγαλύτερες ταχύτητες και αφήνουν το πλάσμα με θετικό φορτίο στην περιοχή κοντά στην επιφάνεια. Ένα ηλεκτρικό πεδίο επιβραδύνει τα ηλεκτρόνια και επιταχύνει τα ιόντα κοντά στην επιφάνεια έτσι ώστε τα καθαρό ρεύμα να ισούται με μηδέν. Συνεπώς, η επιφάνεια αποκτά αρνητικό δυναμικό.



Σχήμα 1.4: Οριακή Στοιβάδα ([65]).

Το πλάσμα έχει θετικό δυναμικό σε σχέση με την επιφάνεια που το περιέχει. Εξαιτίας της θωράκισης Debye, η διαφορά δυναμικού που αναπτύσσεται μεταξύ της επιφάνειας και του κυρίως όγκου του πλάσματος περιορίζεται σε ένα στρώμα πάχους μερικών μηκών Debye. Το στρώμα αυτό το οποίο είναι θετικά φορτισμένο ονομάζεται οριακή στοιβάδα ή φράκτης ηλεκτρονίων (plasma sheath).

1.3.4 Συχνότητα Πλάσματος

Παρόλο που το πλάσμα στον κυρίως όγκο του είναι ουδέτερο, τοπικές διαταραχές από την ουδετερότητα μπορούν να συμβούν σε όγκους μικρότερους από τη σφαίρα Debye. Αυτές οι διαταραχές θα οδηγήσουν σε ηλεκτρικές δυνάμεις και τα ηλεκτρόνια, εξαιτίας της μάζας τους, θα αντιδράσουν σ' αυτές πιο γρήγορα από τα ιόντα. Αυτή η αντίδραση γίνεται μέσω ταλαντώσεων.

Ορισμός 10 Η συχνότητα των ταλαντώσεων αυτών ονομάζεται συχνότητα πλάσματος ή *Lam-tuir* ω_p και ορίζεται ως

$$\omega_p = \left(\frac{n_e q_e^2}{m_e \epsilon_0} \right)^{1/2} = 18.000 \pi n_e^{1/2} \text{ Hz} \quad (1.3.8)$$

όπου η n_e είναι σε cm^{-3} .

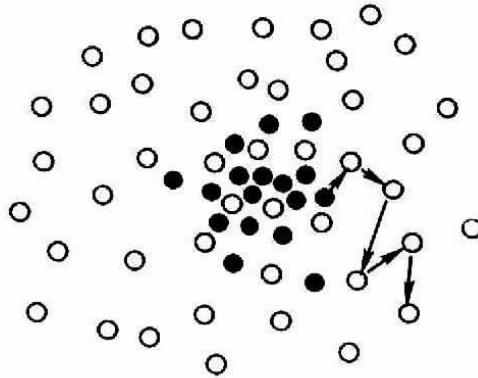
1.4 Διάχυση και Ευκινησία των Φορτισμένων Σωματιδίων στο Πλάσμα

Σαν συνέπεια της ανομοιογένειας του πλάσματος, οφείλουμε να λάβουμε υπόψη μία κλίση της πυκνότητας (density gradient) και μία μη ομοιόμορφη κατανομή των ιόντων και των ηλεκτρονίων σε ένα πυκνό περιβάλλον με ουδέτερα είδη. Εξαιτίας των κλίσεων των συγκεντρώσεων (concentration gradients), τα σωματίδια του πλάσματος θα τείνουν να κινηθούν λόγω διάχυσης προς τις περιοχές με μικρότερη πυκνότητα. Τα φορτισμένα είδη διαχέονται εκτελώντας τυχαίο περίπατο (Σχ. 1.5) και συγκρούονται συχνά με ουδέτερα σωματίδια, προσδίδοντας ηλεκτρική αγωγιμότητα στο πλάσμα.

Σε πολύ μικρές πυκνότητες όπου το μήκος Debye είναι της ίδιας τάξης με το μέγεθος της διάχυσης ή τη διάσταση του συστήματος, τα ηλεκτρόνια διαχέονται ανεξάρτητα και οι ροές τους ελέγχονται από τους συντελεστές διάχυσης D_e and D_i , αντίστοιχα. Αυτό δεν ισχύει όταν οι πυκνότητες των φορτισμένων ειδών είναι της τάξης $n_e \approx n_i \geq 10^8 \text{ cm}^{-3}$.

Ορισμός 11 Η ταχύτητα ολίσθησης v των φορτισμένων σωματιδίων σε ένα ηλεκτρικό πεδίο είναι η μέση κίνηση των σωματιδίων, στην οποία έχουμε υπέρθεση με μια τυχαία κίνηση ([66]), και είναι ανάλογη της έντασης του πεδίου E ,

$$v = \mu E. \quad (1.4.1)$$



Σχήμα 1.5: Η διάχυση είναι μία διαδικασία τυχαίου περιπάτου ([65]).

Ορισμός 12 *Eukinησία (mobility)* μενός φορτισμένου σωματιδίου είναι η ταχύτητα διάχυσής του σε ένα μοναδιαίο ηλεκτρικό πέδιο και συσχετίζεται με το συντελεστή ολίσθησης βάσει της σχέσης *Einstein*

$$\mu = \frac{|q|D}{kT}, \quad (1.4.2)$$

όπου q είναι το ηλεκτρικό φορτίο του σωματιδίου.

Ορισμός 13 Η συνολική ροή φορτισμένων σωματιδίων λόγω διάχυσης και λόγω ολίσθησης σε πεδίο E είναι

$$j_x = -D \frac{\partial n}{\partial x} \pm nv = -D \frac{\partial n}{\partial x} \pm n\mu E \quad (1.4.3)$$

όπου $\tau o +$ αντιστοιχεί στα θετικά ιόντα και $\tau o -$ στα αρνητικά, με $n_+ \approx n_- = n$.

Αν εξισώσουμε $j_{+x} = j_{-x} \equiv -D_a \frac{\partial n}{\partial x}$ και ορίσουμε ένα κοινό συντελεστή διάχυσης, ο οποίος θα περιλαμβάνει και την ολίσθηση, τότε προκύπτει η έννοια του αμφιπολικού συντελεστή διάχυσης:

Ορισμός 14 Ο συντελεστής αμφιπολικής διάχυσης(*ambipolar diffusion*) D_a είναι ένα μέτρο της συνδυασμένης διάχυσης και ολίσθησης των αντίθετα φορτισμένων σωματιδίων μέσα στο πλάσμα και υπολογίζεται βάσει της σχέσης

$$D_a = \frac{\mu_i D_e + \mu_e D_i}{\mu_i + \mu_e}. \quad (1.4.4)$$

Παρατηρώτας ότι $\mu_e \gg \mu_i$ σε ένα ασθενώς ιονισμένο πλάσμα, η (1.4.4) γίνεται

$$D_a \approx D_i + \frac{\mu_i}{\mu_e} D_e \quad (1.4.5)$$

και χρησιμοποιώντας τη σχέση Einstein, έχουμε

$$D_a \approx D_i \left(1 + \frac{T_e}{T_i} \right). \quad (1.4.6)$$

Από την (1.4.6) παρατηρούμε ότι $D_a >> D_i$, αφού στη διάχυση προστίθεται και η ολίσθηση, ενώ $D_a \ll D_e$, αφού από τη διάχυση αφαιρείται η ολίσθηση.

1.5 Χημεία Πλάσματος

Οι χημικές διεργασίες που μπορούν να λάβουν χώρα σε ένα πλάσμα είναι ιδιαίτερα πολύπλοκες. Τα θερμά ηλεκτρόνια του πλάσματος είναι υπεύθυνα για την ασυνήθιστη χημεία η οποία ακόμα δεν είναι πλήρως κατανοητή.

1.5.1 Αντιδράσεις των Ηλεκτρονίων με Βαρέα Σωματίδια

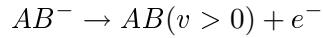
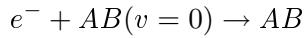
Τα ηλεκτρόνια στο πλάσμα κερδίζουν ενέργεια από το εξωτερικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο και τη μεταφέρουν στο αέριο για να διεγείρουν και να συντηρήσουν το πλάσμα. Η μεγαλύτερη μεταφορά ενέργειας από τα ηλεκτρόνια στα βαριά σωματίδια γίνεται μέσω μη ελαστικών συγκρούσεων ([64]).

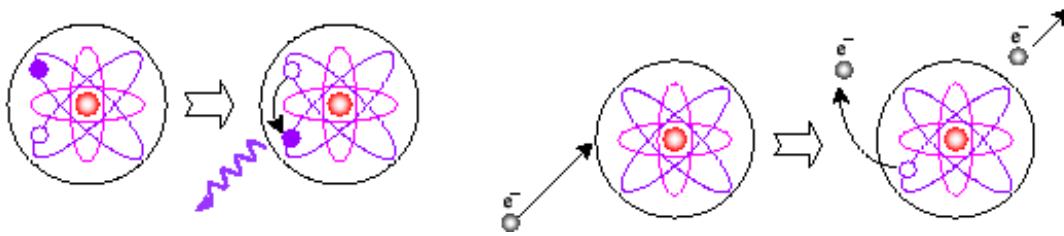
1. Αντιδράσεις Διέγερσης (Excitation):

Η σύγκρουση ηλεκτρονίων αρκετής ενέργειας με βαριά σωματίδια οδηγεί στην παραγωγή διηγερμένων ατόμων και μορίων. Υπάρχουν διάφορες αντιδράσεις διέγερσης βαρέων σωματιδίων:

- **Δονητική και Περιστροφική Διέγερση:**

Ηλεκτρόνια με αρκετή ενέργεια μπορούν να διεγείρουν μόρια σε υψηλότερα ενεργειακά επίπεδα (vibrational and rotational).





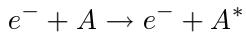
(a) Αποδιέγερση ([65]).

(b) Ιονισμός ([65]).

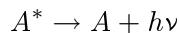
Σχήμα 1.6: Σημαντικές αντιδράσεις των ηλεκτρονίων με άλλα είδη.

- **Ηλεκτρονική Διέγερση(Electronic Excitation):**

Τα ηλεκτρόνια που έχουν ξεπεράσει την απαραίτητη κατώτατη ενέργεια(threshold energy) μπορούν να διεγείρουν ένα μόριο από ένα χαμηλό ενεργειακό επίπεδο σε ένα υψηλότερο.

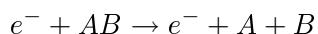


2. **Αποδιέγερση(De-excitation):**



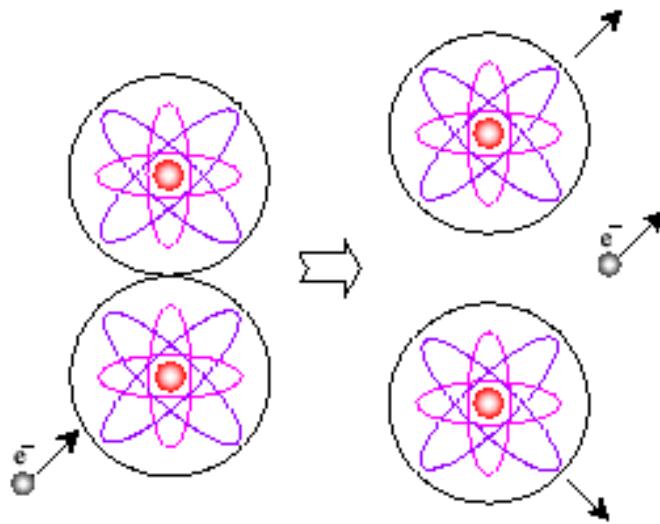
3. **Διάσπαση(Dissociation):**

Μία ανελαστική σύγκρουση ενός ηλεκτρονίου με ένα μόριο μπορεί να προκαλέσει τη διάσπασή του σε δραστικές χημικές ρίζες,



4. **Ιονισμός(Ionization):**

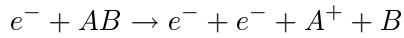
Τα ηλεκτρόνια που έχουν ξεπεράσει την οριακή ενέργεια ιονισμού μπορούν να αφαιρέσουν ένα ηλεκτρόνιο από ένα άτομο και να παράγουν ένα επιπλέον ηλεκτρόνιο και ένα ιόν. Αυτό το επιπλέον ηλεκτρόνιο μπορεί να επιταχυνθεί για να κερδίσει αρκετή ενέργεια ώστε να ιονίσει ένα άλλο άτομο. Αυτή η διαδικασία οδηγεί σε μια συνεχή παραγωγή ιονισμένων ειδών και έτσι το πλάσμα συντηρείται. Ο ιονισμός γενικά έχει τα υψηλότερα ενεργειακά φράγματα(threshold energies).



Σχήμα 1.7: Διάσπαση ([65]).

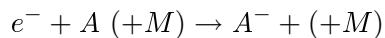


- **Dissociative ionization**

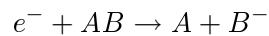


5. Προσάρτηση ηλεκτρονίου(Attachment):

Ένα ηλεκτρόνιο είναι δυνατό να προσαρτηθεί σε ένα ηλεκτραρνητικό άτομο για να δημιουργήσει ένα αρνητικό ιόν. Σύνθετα μόρια αερίων όπως το SF_6 μπορούν επίσης να υποστούν dissociative attachment και να σχηματίσουν αρνητικά ιόντα SF_5^- . Η αντίδραση αυτή σε αντίθεση με τον ιονισμό οδηγεί σε απώλεια ηλεκτρονίων.

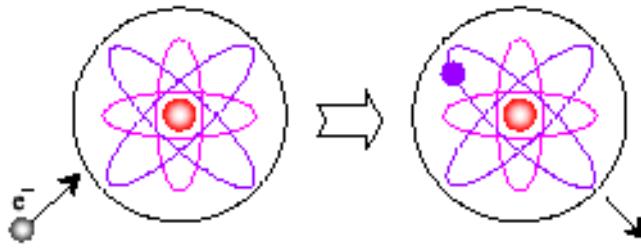


- **Dissociative Attachment**

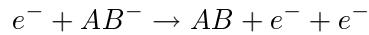


6. Απόσπαση(Detachment):

Η σύγκρουση ηλεκτρονίου-αρνητικού ιόντος είναι δυνατόν να οδηγήσει σε απόσπαση ενός ηλεκτρονίου για το σχηματισμό ενός ουδετέρου και ενός ακόμα ηλεκτρονίου.

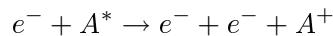


Σχήμα 1.8: Προσάρτηση ηλεκτρονίου ([65]).



7. Ιονισμός του μετασταθούς:

Ηλεκτρόνια με αρκετή ενέργεια μπορούν επίσης να αφαιρέσουν ένα ηλεκτρόνιο από ένα μετασταθές άτομο και να παράγουν ένα επιπλέον ηλεκτρόνιο και ένα ιόν. Εφ'όσον το μετασταθές άτομο είναι ήδη διηγερμένο, απαιτείται λιγότερη ενέργεια για να ιονιστεί.

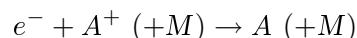


8. Επανασύνδεση(Recombination):

Τα φορτισμένα σωματίδια χάνονται από το πλάσμα με επανασύνδεση σωματιδίων αντίθετων ηλεκτρινών φορτίων.

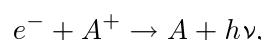
- **Επανασύνδεση ηλεκτρονίου-ιόντος**(Electron-ion recombination):

Για την επανασύνδεση ηλεκτρονίου-ιόντος, είναι απαραίτητη η παρουσία ενός τρίτου είδους ώστε να διατηρείται η ενέργεια και η ορμή.



- **Επανασύνδεση ηλεκτρονίου-ιόντος με έκλυση ακτινοβολίας**(Radiative recombination):

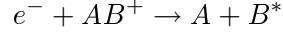
Επανασυνδέσεις που συμβαίνουν μεταξύ ηλεκτρονίων και ατομικών ιόντων συνοδεύονται από εκπομπή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας.



όπου $h =$ σταθερά Planck.

- **Επανασύνδεση ηλεκτρονίου-σύνθετου ιόντος**(Dissociative recombination):

Η απελευθέρωση ενέργειας κατά τη διάρκεια των αντιδράσεων επανασύνδεσης ηλεκτρονίων με μοριακά ιόντα μπορεί να προκαλέσει τη διάσπαση του μορίου.

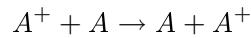


1.5.2 Συγκρούσεις μεταξύ βαρέων σωματιδίων

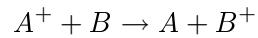
Στην ενότητα αυτή θα αναφερθούμε στις πιο σημαντικές από τις αντιδράσεις μεταξύ ιόντων, ιόντος-ουδετέρου και μεταξύ ουδετέρων.

1. **Ανταλλαγή φορτίου με συντονισμό και χωρίς συντονισμό**(Resonant and non-resonant charge transfer):

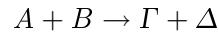
Η ανταλλαγή φορτίου με συντονισμό είναι σημαντική αντίδραση καθώς παράγει γρήγορα ουδέτερα και αργά ιόντα, που καθορίζουν τη συνολική συμπεριφορά του πλάσματος και τις αντιδράσεις με τα τοιχώματα του αντιδραστήρα.



Η ανταλλαγή φορτίου χωρίς συντονισμό λαμβάνει χώρα ανάμεσα σε διαφορετικά άτομα ή μόρια ή μεταξύ ενός ατόμου και ενός μορίου.

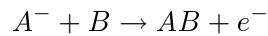


2. **Επανασύνδεση ουδετέρων**(Recombination neutral-neutral):



3. **Απόσπαση με επανασύνδεση**(Associative detachment):

Η αντίδραση απόσπασης πραγματοποιείται με τη σύγκρουση ενός ουδέτερου χημικού είδους με το κυρίαρχο αρνητικό ίον.



4. **Ιονισμός μετασταθούς-ουδετέρου**(Metastable-neutral ionization):

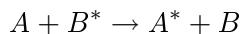
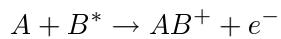
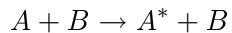
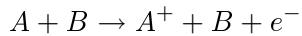
Ένα μετασταθές άτομο μπορεί να συγκρουστεί με ένα ουδέτερο και να το ιονίσει αν η

ενέργεια ιονισμού του ουδετέρου (B) είναι μικρότερη από την ενέργεια διέγερσης του μετασταθούς (A^*).



Η αντίδραση αυτή ονομάζεται επίσης ιονισμός Penning(Penning Ionization process).

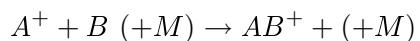
5. Ανταλλαγή Διέγερσης(Transfer of excitation):



6. Αντιδράσεις τριών σωμάτων(Three-body processes):

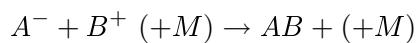
Οι αντιδράσεις τριών σωμάτων είναι σημαντικές διαδικασίες χαθώς διατηρούν την ενέργεια και την ορμή και συντελούν στην πολυπλοκότητα των αντιδράσεων που λαμβάνουν χώρα στην αέρια φάση του πλάσματος.

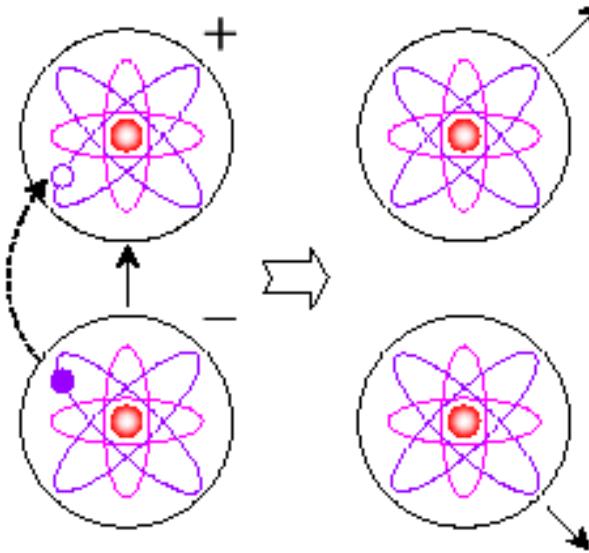
(a) Αντίδραση σύνδεσης ουδετέρου-θετικού ιόντος(Association):



(b) Επανασύνδεση θετικού-αρνητικού ιόντος(Recombination):

Η αντίδραση επανασύνδεσης μεταξύ ιόντων είναι ένα είδος ανταλλαγής φορτίου και μπορεί να αποτελέσει κυρίαρχο μηχανισμό για την απώλεια αρνητικών ιόντων σε ένα ηλεκτραρνητικό πλάσμα χαμηλής πίεσης.





Σχήμα 1.9: Επανασύνδεση θετικού-αρνητικού ιόντος ([65]).

1.6 Γενικός Προσομοιωτής Πλάσματος

Στην ενότητα αυτή, θα περιγραφούν τα βασικά μέρη ενός προσομοιωτή πλάσματος. Το πλήρες μοντέλο περιλαμβάνει εξισώσεις που περιγράφουν ηλεκτρομαγνητικά φαινόμενα, μεταφορά μάζας, ορμής και ενέργειας καθώς επίσης και τις αντιδράσεις της αέριας φάσης και τις αντιδράσεις με τα τοιχώματα.

Οι εξισώσεις ρευστών για ένα πλάσμα προκύπτουν από την εξίσωση Boltzmann για καθένα από τα είδη, προσδιορίζοντας τη συνάρτηση κατανομής της ταχύτητας και παίρνοντας τις ροπές της από την εξίσωση Boltzmann. Έτσι, προκύπτουν οι εξισώσης διατήρησης μάζας, ορμής και ενέργειας για κάθε είδος. Οι όροι των συγκριόσεων συνήθως μοντελοποιούνται θεωρώντας Maxwellian συνάρτηση κατανομής της ταχύτητας. Οι εξισώσεις Maxwell επιλύονται για τον προσδιορισμό των ηλεκτρικών και μαγνητικών πεδίων που παράγονται από τα φορτισμένα σωματίδια και την κίνησή τους. Το πλάσμα συνήθως αντιμετωπίζεται ως ηλεκτροστατικό και το ηλεκτρικό πεδίο προκύπτει απ' τη σχέση $\vec{E} = -\nabla\Phi$.

Στη συνέχεια θα αναφέρουμε τις πιο βασικές εξισώσεις οι οποίες συνθέτουν έναν προσομοιωτή

1. Ηλεκτρομαγνητικές Εξισώσεις

Αναφέρουμε αρχικά τις εξισώσεις Maxwell.

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (1.6.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -\epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{J}, \quad (1.6.2)$$

$$\epsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} = \rho \quad (1.6.3)$$

και

$$\mu_0 \nabla \cdot \mathbf{H} = 0, \quad (1.6.4)$$

όπου $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ και $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ είναι τα διανύσματα του ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου αντίστοιχα και $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} H/m$ και $\epsilon_0 \approx 8.854 \times 10^{-12} F/m$ είναι η μαγνητική διαπερατότητα (permeability) και η διηλεκτρική σταθερά του κενού (permittivity) αντίστοιχα. Επίσης, $\rho(\mathbf{r}, t)$ είναι η πυκνότητα του φορτίου (charge density) και $J(\mathbf{r}, t)$ είναι η πυκνότητα του ρεύματος (current density) και συνδέονται με εξίσωση συνέχειας φορτίου (charge continuity equation):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (1.6.5)$$

2. Εξισώσεις Συνέχειας και Διατήρησης της Ενέργειας για τα ηλεκτρόνια (Electron Continuity and Electron Energy Balance)

Χρησιμοποιώντας την προσέγγιση διάχυσης-ολίσθησης (drift-diffusion approximation) για τα ηλεκτρόνια[67], η εξίσωση διατήρησης της ορμής γίνεται

$$\vec{\Gamma}_e = - \underbrace{\frac{1}{m_e \nu_{ev}} \nabla n_e k T_e}_{\text{diffusion flux}} - \underbrace{\frac{en_e}{m_e \nu_{ev}} \vec{E}}_{\text{drift flux}}, \quad (1.6.6)$$

όπου $\Gamma_e = n_e v_e$ είναι η ροή των ηλεκτρονίων, k είναι η σταθερά Boltzmann. Αντικαθιστώντας τώρα την (1.6.6) στην εξίσωση διατήρησης μάζας για τα ηλεκτρόνια παίρνουμε

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{\Gamma}_e + R_e, \quad (1.6.7)$$

όπου R_e είναι η πηγή για δημιουργία ή απώλεια των ηλεκτρονίων.

Η εξίσωση διατήρησης ενέργειας των ηλεκτρονίων δίνεται από τη σχέση

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n_e k T_e \right) = -\nabla \cdot \vec{Q}_e - e \vec{E} \cdot \vec{\Gamma}_e + P_{abs} + E_e, \quad (1.6.8)$$

όπου \vec{Q}_e είναι η ροή ενέργειας λόγω συναγωγής και θερμικής αγωγιμότητας και E_e είναι η μεταφορά ενέργειας από/προς τα ηλεκτρόνια λόγω συγκρούσεων με τα άλλα είδη.

3. Εξισώσεις Συνέχειας και Διατήρησης της Ορμής για τα ιόντα (Ion Mass Balance and Ion Momentum Balance)

Η εξίσωση συνέχειας για τα ιόντα είναι

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = -\nabla \cdot (n_i \vec{v}_i) + R_i, \quad (1.6.9)$$

όπου v_i είναι η ταχύτητα των ιόντων και R_i είναι ο όρος παραγωγής-κατανάλωσης των ιόντων ανά μονάδα όγκου στην αέρια φάση. Η εξίσωση διατήρησης της ορμής γράφεται ([4])

$$\frac{\partial n_i m_i \vec{v}_i}{\partial t} = -\nabla \cdot (n_i m_i \vec{v}_i \vec{v}_i) - \nabla p_i + Z_i e n_i \vec{E} - \vec{M}_i, \quad (1.6.10)$$

όπου m_i είναι η μάζα των ιόντων, p_i είναι η πίεση των ιόντων και M_i είναι ο όρος μεταφοράς ορμής λόγω συγκρόσεων (collisional momentum transfer term).

4. Εξισώσεις Συνέχειας των ουδετέρων ειδών

Το ισοζύγιο μάζας για το i_{th} ουδέτερο είδος είναι

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot D_{ij} \vec{\nabla} n_i + R_i. \quad (1.6.11)$$

Θα μελετήσουμε πιο αναλυτικά την κατάστρωση των εξισώσεων αυτών σε επόμενο κεφάλαιο.

1.7 Σκοπός της εργασίας

Η δύσκαμπτη (stiff) φύση των εξισώσεων των ηλεκτρονίων καθιστούν απαιτητική ακόμα και μία μονοδιάστατη προσομοίωση. Η χωρική και χρονική μεταβολή του n_e και του $n_e T_e$ εξαρτάται από τις ακριβείς συνθήκες του προβλήματος, αλλά οι πυκνότητες των ηλεκτρονίων στα ακρα (sheaths) είναι δυνατό να αλλάζουν πολλές τάξεις μεγέθους κατά τη διάρκεια μιας radio-frequency period ([36]). Εξάλλου, εκτός από δύσκολη επίλυση, τα μοντέλα αυτά είναι και αρκετά χρονοβόρα. Η απλοποίησή τους και η αναγωγή τους σε πιο απλά και «εύκολα» μοντέλα, όπως είναι τα μοντέλα μηδενικής διάστασης, συνεισφέρουν σε μια πολύ πιο γρήγορη επίλυση του προβλήματος της αέριας φάσης. Τα μοντέλα μηδενικής διάστασης χρησιμοποιούν μέσες τιμές των συγκεντρώσεων και άλλων παραμέτρων και στα αγγλικά περιγράφονται με τον όρο global models.

Με ένα global model η εύρεση των πυκνοτήτων των ειδών και της ενέργειας των ηλεκτρονίων είναι δυνατό να επιτευχθεί σε λίγα μόλις δευτερόλεπτα, ιδιαίτερα όταν έχουμε καλές αρχικές συνθήκες. Με τον τρόπο αυτό τα μοντέλα μηδενικής διάστασης αποτελούν ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο το οποίο θα λειτουργεί είτε αυτόνομα είτε σαν μέρος ενός πλήρους προσομοιωτή πλάσματος, ο οποίος θα συμπεριλαμβάνει και μελέτη της εγχάραξης (etching) ή της εναπόθεσης (deposition).

Σκοπός της εργασίας είναι η ανάπτυξη ενός μοντέλου μηδενικής διάστασης (global model) για πλάσμα O_2 σε αντιδραστήρα ICP (Inductively coupled plasma reactor). Οι διαφορές του από τα υπάρχοντα στη βιβλιογραφία είναι συνοπτικά:

1. Ενημερωμένο δίκτυο αντιδράσεων. Μετά από εκτενή βιβλιογραφική έρευνα και εκτίμηση των διάφορων παραμέτρων καταλήξαμε σε ένα δίκτυο αντιδράσεων το οποίο περιλαμβάνει τις σημαντικότερες αντιδράσεις που λαμβάνουν χώρα σε ένα πλάσμα οξυγόνου στο εύρος των συνθηκών που δουλεύουμε. Οι ρυθμοί των αντιδράσεων που χρησιμοποιούμε έχουν ληφθεί από τη βιβλιογραφία ([11], [8]).
2. Το μοντέλο αφορά σε αντιδραστήρα πλάσματος δύο κυλίνδρων σε αντίθεση με τα διαθέσιμα μοντέλα. Ο αντιδραστήρας φαίνεται στο σχήμα (3.1).
3. Λαμβάνει υπόψη την επίδραση των μαγνητών στα τοιχώματα του αντιδραστήρα πλάσματος (cusp). Οι μαγνήτες αυτοί δημιουργούν ένα ισχυρό μαγνητικό πεδίο γύρω από το θάλαμο περιορίζοντας τις απώλειες στα τοιχώματα (confinement) και αυξάνοντας την πυκνότητα του πλάσματος.

4. Λαμβάνει υπόψη την επίδραση του μαγνητικού πεδίου που εφαρμόζεται στον άνω κύλινδρο του αντιδραστήρα πλάσματος από το πηνίο που υπάρχει γύρω από αυτόν.

Ως συνέχεια της παρούσας εργασίας θα μπορούσε να είναι μια προσπάθεια γενίκευσης του μοντέλου και για άλλες χημείες με ένα κώδικα ο οποίος θα είναι φιλικός στο χρήστη και θα δέχεται σαν σταθερές εισόδου το δίκτυο αντιδράσεων για οποιοδήποτε αέριο ή μίγμα αερίων, τη γεωμετρία του αντιδραστήρα, την ισχύ, την πίεση και την ένταση των μαγνητικών πεδίων καθώς επίσης και διαφορετικούς ρυθμούς αντιδράσεων. Επίσης, για την αποφυγή προβλημάτων σύγκλισης θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί μια διαφορετική μέθοδος επίλυσης γραμμικών συστημάτων, όπως η Broyden, η οποία θα συγκλίνει ολικά (globally convergent method).

Κεφάλαιο 2

Βιβλιογραφική Έρευνα

2.1 Προσομοίωση Πλάσματος

Η μοντελοποίηση και η προσομοίωση της φυσικοχημικής συμπεριφοράς του πλάσματος αποτελεί τις τελευταίες δεκαετίες ένα σημαντικό εργαλείο για την κατανόηση σύνθετων χωροχρονικών φαινομένων που συμβαίνουν σ' αυτό και για το σχεδιασμό νέων τύπων αντιδραστήρα ή τη βελτίωση των ήδη υπαρχόντων. Κατα τις δεκαετίες του '80 και του '90 υπήρξε ιδιαίτερο ενδιαφέρον στην προσομοίωση διεργασιών πλάσματος ([29]). Τα μοντέλα διεργασιών πλάσματος επικεντρώνονται είτε στη μεταφορά και τις αντιδράσεις των ειδών ([34]) είτε στη φυσική του πλάσματος (glow discharge physics) ([39], [40], [37], [41], [42], [43], [33], [38], [47], [48], [23], [24], [44], [45], [49], [50]).

Στην πρώτη κατηγορία μοντέλων, το πλάσμα λαμβάνεται ως πηγή αντιδρώντων ειδών. Η μεταφορά των φορτισμένων σωματιδίων δε λαμβάνεται υπόψη. Τα μοντέλα που επικεντρώνονται στη χημεία του πλάσματος μπορούν να χειριστούν εύκολα σύνθετες χημείες ουδετέρων ειδών και πολύπλοκες πολυδιάστατες γεομετρίες. Ωστόσο, η πυκνότητα και η ενέργεια των ηλεκτρονίων που παίζουν πολύ σημαντικό ρόλο στους ρυθμούς παραγωγής των ειδών, όπως και στις ροές των ειδών στα τοιχώματα πρέπει να υπολογιστούν.

Στα μοντέλα φυσικής του πλάσματος, οι πυκνότητες των φορτισμένων σωματιδίων και η ενέργεια των ηλεκτρονίων υπολογίζονται ως συνάρτηση του χρόνου στην περίοδο του εφαρμοζόμενου πεδίου και του χώρου του αντιδραστήρα. Με τα μοντέλα αυτά υπολογίζονται επίσης ποσότητες όπως οι ρυθμοί ιονισμού και διέγερσης και τα ρεύματα των ιόντων και των ηλεκτρονίων.

Τα μοντέλα φυσικής του πλάσματος είναι υπολογιστικά πολύ «ακριβά». Για το λόγο

αυτό έχουν γίνει προσπάθειες για βελτίωση των αλγορίθμων που υπάρχουν με σκοπό των υπολογισμό μεγάλων παραγώγων και τη σύγκλιση σε λύση σε όσο το δυνατόν λιγότερο χρόνο ([52], [44], [45], [53], [49]). Υπάρχουν μοντέλα μίας διάστασης ([39], [32], [43], [38], [23], [24], [47], [?], [48], [53], [44], [45], [49]) τα οποία ωστόσο στην πλειοψηφία τους δεν λαμβάνουν υπόψη τη χημεία των ουδετέρων. Συνεπή μοντέλα πλάσματος που να περιλαμβάνουν και τη φυσική αλλά και τη χημεία του πλάσματος στη μία διάσταση είναι ([54], [55], [60]) και στις δύο διαστάσεις ([50], [51], [59]). Πρόσφατα, έχουν γίνει προσπάθειες για μοντέλα τριών διαστάσεων ([26], [27], [30], [28], [31]).

2.2 Μοντέλα Μηδενικής Διάστασης

Η ανάγκη για γρήγορα και πλήρη μοντέλα, τα οποία θα συμπεριλάμβαναν τη χημεία και τη φυσική του πλάσματος, τη γεωμετρία του εκάστοτε αντιδραστήρα και θα υπολόγιζαν τις πυκνότητες των ειδών και την ενέργεια των ηλεκτρονίων, οδήγησε πολλούς ερευνητές στην προσπάθεια απλοποίησης των προηγούμενων μοντέλων.

Ένα είδος μοντέλων μηδενικής διάστασης, είναι αυτά στα οποία όλες οι ποσότητες υποθέτουμε ότι είναι ομοιόμορφες σε έναν κυλινδρικό αντιδραστήρα. Η ροή των θετικών ιόντων υπολογίζεται χρησιμοποιώντας τους παράγοντες της ροής που προσδιορίστηκαν χωριστά σε ένα 1-D κυλινδρικό πλάσμα με ένα μόνο θετικό ιόν ([35],[67]). Αυτή η μέθοδος εφαρμόστηκε σε ασθενώς ηλεκτραρνητικά αέρια, όπως χαμηλής πίεσης, υψηλής πυκνότητας O_2 και μίγμα O_2/Ar ([9],[8]), μίγμα CF_4/Ar ([16]), και σε πολύ ηλεκτραρνητικά αέρια όπως Cl_2 ([18]). Μοντέλα με βηματική ισχύ(pulsed-power models) έχουν αναπτυχθεί για το Cl_2 ([63],[21]), το SF_6 ([22]) και το O_2 ([25]). Στο [9] θεωρήθηκε ότι το αέριο δεν είναι αρκετά ηλεκτραρνητικό και χρησιμοποιήθηκαν οι σχέσεις των Bohm ταχυτήτων για ηλεκτροθετικά αέριο για τον υπολογισμό των ροών στα τοιχώματα. Στα [8] και [18] καθώς και στα μοντέλα με βηματική ισχύ χρησιμοποιήθηκαν heuristic εκφράσεις για τον υπολογισμό των ροών. Ένα διαφορετικό είδος global μοντέλων χρησιμοποιήθηκε για πολύ ηλεκτραρνητικά αέρια όπως το Cl_2 ([10]).

Πρόσφατα, πιο ρεαλιστικά μοντέλα έχουν κατασκευαστεί για χαμηλή ηλεκτραρνητικότητα ([13], [14],[17], [15]). Τα μοντέλα αυτά θεωρούν ότι το πλάσμα αποτελείται από έναν ηλεκτραρνητικό πυρήνα ο οποίος περιβάλλεται από ένα ηλεκτροθετικό στρώμα. Ωστόσο, εκτός από την ηλεκτραρνητικότητα ενός αερίου σημαντικό ρόλο παίζει και η επίδραση του μαγνητικού πεδίου στις ροές και τις απώλειες των φορτισμένων ειδών στα τοιχώματα του

αντιδραστήρα. Μέχρι σήμερα δεν υπάρχει κάποιο μοντέλο το οποίο να εμπεριέχει πληροφορίες για την επίδραση αυτή.

Στα επόμενα κεφάλαια, θα παρουσιάσουμε ένα μηδενικής διάστασης μοντέλο σε στάσιμη κατάσταση στο οποίο λαμβάνουμε υπόψην την ηλεκτραρνητικότητα του αερίου αλλά και τη επίδραση του μαγνητικού πεδίου στο θάλαμο του αντιδραστήρα καθώς και το μαγνητικό πεδίο λόγω του πηνίου στο άνω τμήμα του (σχ. 3.1).

Κεφάλαιο 3

Μοντέλο Μηδενικής Διάστασης

Στο κεφάλαιο αυτό θα αναφερθούμε στη χημεία του πλάσματος και στην κατάστρωση ισοζυγίων που θα αφορούν στην αέρια φάση. Θα καταστρωθεί ένα πλήρες μηδενικής διάστασης μοντέλο για τον προσδιορισμό των πυκνοτήτων των ειδών ενός πλάσματος καθώς επίσης και της θερμοκρασίας των ηλεκτρονίων. Για την επίλυση αυτού του μοντέλου θεωρούμε ως σταθερές εισόδου την πίεση του αερίου, την ισχύ, τη γεωμετρία του αντιδραστήρα. Το μοντέλο στην πιο πλήρη του μορφή δέχεται ως σταθερά εισόδου και την ένταση των μαγνητικών πεδίων του αντιδραστήρα.

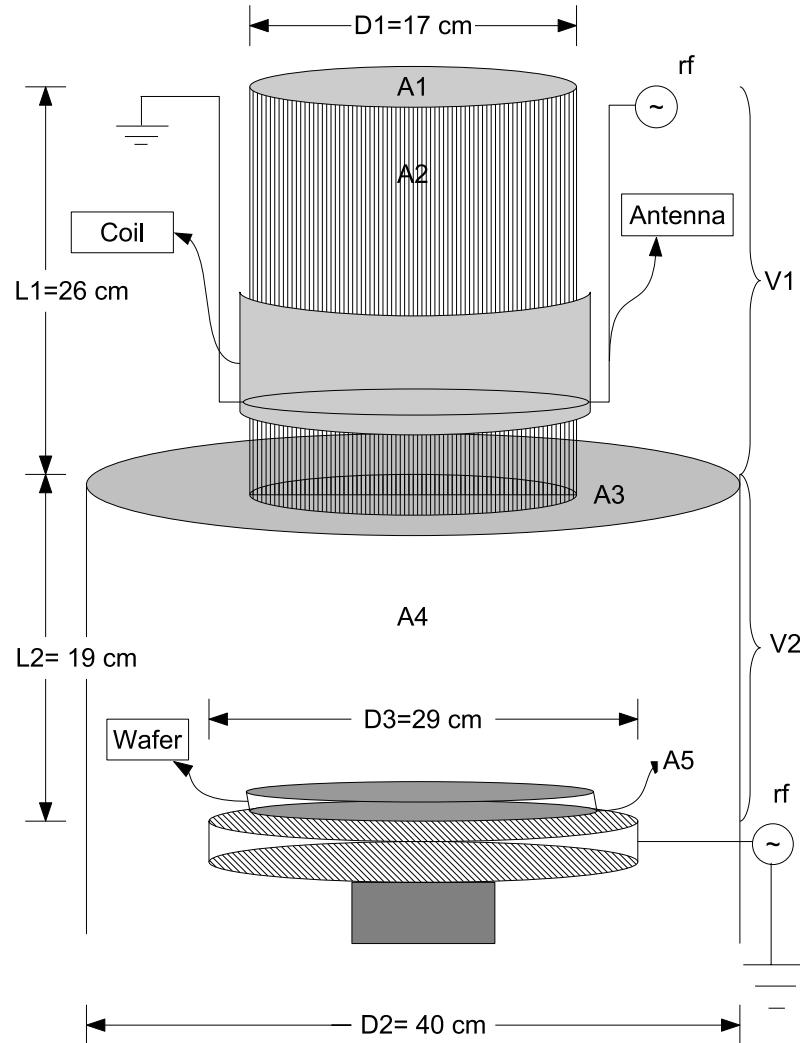
3.1 Περιγραφή του μοντέλου

Αρχικά κάνουμε κάποιες υποθέσεις:

- η γεωμετρία του αντιδραστήρα φαίνεται στο σχήμα (3.1),
- το σύστημα βρίσκεται σε στάσιμη κατάσταση,
- η κατανομή ενέργειας των ηλεκτρονίων είναι Maxwellian,
- τα αρνητικά ιόντα δεν πλησιάζουν στο οριακό στρώμα,
- η διαφοροποίηση των πυκνοτήτων των θετικών ιόντων μεταξύ του κύριου όγκου του πλάσματος (bulk) και της οριακής στοιβάδας βασίζεται στην προσέγγιση των Lee και Lieberman [8] και
- η θερμοκρασία του αερίου παραμένει σταθερή ενώ των ιόντων μεταβάλλεται με την πίεση.

3.1.1 Γεωμετρία Αντιδραστήρα

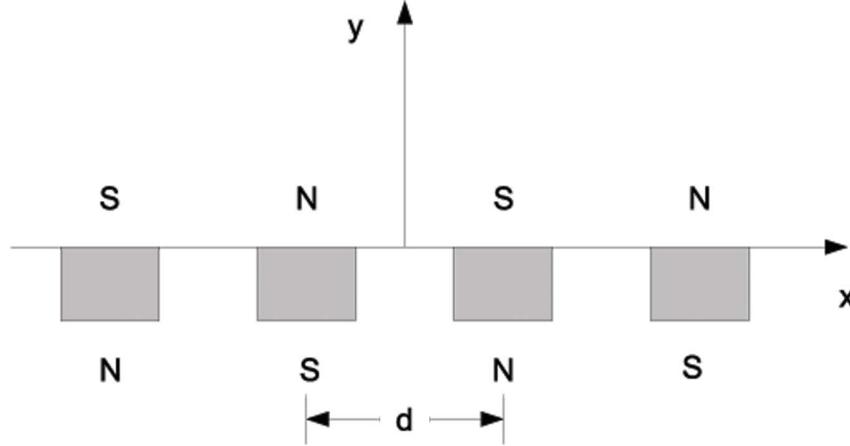
Ο αντιδραστήρας για τον οποίο θα κατασκευάσουμε το μοντέλο φαίνεται στο σχήμα (3.1). Οι διαστάσεις του φαίνονται πάνω στο σχήμα ενώ για τις επιφάνειες A_1 , A_2 , A_3 , A_4 και A_5 έχουμε, $A_1 = \pi R_1^2$, $A_2 = 2\pi R_1 L_1$, $A_3 = \pi R_2^2 - \pi R_1^2$, $A_4 = 2\pi R_2 L_2$, $A_5 = \pi R_3^2$, όπου R_1 , R_2 , R_3 είναι οι ακτίνες που αντιστοιχούν στις διαμέτρους D_1 , D_2 , D_3 που φαίνονται στο σχήμα.



Σχήμα 3.1: Αντιδραστήρας

Αντίστοιχα, χωρίζουμε τον αντιδραστήρα σε δύο κυλίνδρους που αντιστοιχούν σε δύο διαφορετικούς κύριους όγκους V_1 και V_2 , με $V_1 = \pi R_1^2 L_1$ και $V_2 = \pi R_2^2 L_2$.

Στον πάνω όγκο V_1 το πλάσμα γεννάται επαγωγικά από μία κεραία (antenna), ενώ ένα dc μαγνητικό πεδίο από ένα πηνίο (coil) συγκρατεί τα ηλεκτρόνια και αυξάνει την πυκνότητα του πλάσματος. Ομοίως στον όγκο V_2 ένα dc πεδίο από μαγνήτες (cusp field) συγκρατεί τα ηλεκτρόνια (3.2).



Σχήμα 3.2: Schematic for determining multipole fields in rectangular geometry.

3.1.2 Ισοζύγια μάζας και ενέργειας

Στην ενότητα αυτή, θα αναφερθούμε στις πιο σημαντικές διαδικασίες που συντελούν στην παραγωγή και κατανάλωση των ειδών που υπάρχουν στην αέρια φάση.

Για τα ουδέτερα λαμβάνουμε υπόψην τις ακόλουθες διαδικασίες:

- Παραγωγή:
 - από αντιδράσεις ηλεκτρονίων μες ουδέτερα (π.χ. από διάσπαση),
 - από αντιδράσεις επανασύνδεσης μεταξύ θετικού και αρνητικού ιόντος και,
 - από αντιδράσεις των θετικών ιόντων στα τοιχώματα του αντιδραστήρα
- Απώλειες:
 - από αντιδράσεις ιονισμού,

- από αντιδράσεις προσάρτησης,
- από αντιδράσεις διάσπασης και
- στην αντλία.

Για τα φορτισμένα σωματίδια έχουμε,

- Παραγωγή:
 - από αντιδράσεις ηλεκτρονίων με ουδέτερα,
 - από αντιδράσεις ιόντων με ουδέτερα και
 - από αντιδράσεις μεταξύ ιόντων

- Απώλειες:
 - στα τοιχώματα (για τα θετικά ιόντα),
 - λόγω αντιδράσεων επανασύνδεσης και
 - στην αντλία.

Τέλος, για τα ηλεκτρόνια έχουμε:

- Παραγωγή:
 - από αντιδράσεις ιονισμού και
 - από αντιδράσεις απόσπασης
- Απώλειες:
 - στα τοιχώματα,
 - λόγω αντιδράσεων προσάρτησης και
 - στην αντλία.

3.2 Γενικές Εξισώσεις

Για να κατασκευάσουμε ένα γενικό global μοντέλο, θα αρχίσουμε από την περίπτωση που στο πλάσμα έχουμε ένα μονοατομικό αέριο, ένα θετικό ιόν και ένα αρνητικό ιόν.

Τότε, λαμβάνοντας υπόψην τις διαδικασίες παραγωγής και απώλλειας που αναφέραμε στην προηγούμενη ενότητα, έχουμε:

$$\begin{aligned}\frac{dn_e}{dt} &= k_{iz}n_g n_e + k_{det}n_- n_e - k_{att}n_g n_e - \Gamma_+ \frac{A}{V} - \frac{S_p}{V} n_e, \\ \frac{dn_-}{dt} &= k_{att}n_g n_e - k_{rec}n_- n_+ - k_{det}n_- n_e - \frac{S_p}{V} n_-, \\ \frac{dn_+}{dt} &= k_{iz}n_g n_e - k_{rec}n_- n_+ - \Gamma_+ \frac{A}{V} - \frac{S_p}{V} n_+, \\ \frac{dn_g}{dt} &= Source + k_{rec}n_+ n_- - k_{iz}n_g n_e - k_{att}n_g n_e - k_{diss}n_g n_e + \Gamma_+ \frac{A}{V} - \frac{S_p}{V} n_g.\end{aligned}$$

Το ισοζύγιο ενέργειας είναι,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{3}{2} n_e T_e \right) = P_{abs} - P_{ev} - P_{iw} - P_{ew}, \quad (3.2.1)$$

όπου P_{abs} είναι η ισχύς που απορροφάται από το σύστημα, P_{ev} είναι η απώλλεια ενέργειας των ηλεκτρονίων λόγω των συγχρούσεων με τα ουδέτερα είδη, P_{iw} είναι η ενέργεια που χάνεται στα τοιχώματα του αντιδραστήρα για το θετικό ίόν και P_{ew} είναι η ενέργεια που χάνεται στα τοιχώματα του αντιδραστήρα για τα ηλεκτρόνια.

Πιο αναλυτικά,

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \left(\frac{3}{2} n_e T_e \right) &= P_{abs} - \left(k_{iz} \epsilon_{iz} + k_{diss} \epsilon_{diss} + \sum_i k_{exc} \epsilon_{exc} + \frac{3m}{M} k_{elas} T_e \right) n_g n_e \\ &\quad - u_B \epsilon_{iw} n_s A - u_B \epsilon_{ew} n_{es} A,\end{aligned} \quad (3.2.2)$$

όπου n_s είναι η πυκνότητα του ιόντος στην άκρη του οριακού στρώματος, A είναι η επιφάνεια των τοιχωμάτων του αντιδραστήρα, ϵ_{iw} είναι η κινητική ενέργεια για κάθε ίόν που χάνεται στα τοιχώματα, ϵ_{ew} είναι η κινητική ενέργεια για κάθε ηλεκτρόνιο που χάνεται στα τοιχώματα.

Ο λόγος της πυκνότητας στην άκρη του οριακού στρώματος n_{is} προς τη μέση πυκνότητα στον κύριο όγκο του πλάσματος n_i δίνεται σύμφωνα με τους Lee et al. ([3]) από τις σχέσεις

$$h_L = \frac{n_{is}}{n_i} \Big|_{axial} = \frac{1 + \frac{3\alpha_{avg}}{\gamma}}{1 + \alpha_{avg}} \frac{0.86}{\left(3 + \frac{L}{2\lambda} + \left(\frac{0.86Lu_B}{\pi D_\alpha}\right)^2\right)^{1/2}}, \quad (3.2.3)$$

και

$$h_R = \frac{n_{is}}{n_i} \Big|_{radial} = \frac{1 + \frac{3\alpha_{avg}}{\gamma}}{1 + \alpha_{avg}} \frac{0.8}{\left(4 + \frac{R}{\lambda} + \left(\frac{0.8Ru_B}{2.405(J_1(2.405))D_\alpha}\right)^2\right)^{1/2}} \quad (3.2.4)$$

όπου $\alpha_{avg} = n_-/n_e$ είναι ο λόγος της πυκνότητας του αρνητικού ιόντος προς την πυκνότητα των ηλεκτρονίων, $\gamma = T_e/T_i$, λ είναι το μέσο ελεύθερο μήκος ιόντος-ουδετέρου, D_α είναι ο συντελεστής αμφιπολικής διάχυσης, J_1 είναι η συνάρτηση Bessel πρώτης τάξης και u_B είναι η ταχύτητα Bohm για το αντίστοιχο ιόν που δίνεται από τη σχέση

$$u_B = \sqrt{\frac{KT_e}{M}}. \quad (3.2.5)$$

Θα ορίσουμε, λοιπόν, διαφορετικά h_L και h_R για τις επιφάνειες του αντιδραστήρα μας (σχ. 3.1).

$$\begin{aligned} h_{L_1} &= \frac{1 + (3\alpha)/\gamma}{1 + \alpha} \frac{0.86}{\left(3 + \frac{L_1}{2\lambda} + \left(\frac{0.86L_1u_B}{\pi D_\alpha}\right)^2\right)^{1/2}} \\ h_{R_1} &= \frac{1 + (3\alpha)/\gamma}{1 + \alpha} \frac{0.8}{\left(4 + \frac{R_1}{\lambda} + \left(\frac{0.8Ru_B}{2.405(J_1(2.405))D_\alpha}\right)^2\right)^{1/2}} \\ h_{L_2} &= \frac{1 + (3\alpha)/\gamma}{1 + \alpha} \frac{0.86}{\left(3 + \frac{L_2}{2\lambda} + \left(\frac{0.86L_2u_B}{\pi D_\alpha}\right)^2\right)^{1/2}} \\ h_{R_2} &= \frac{1 + (3\alpha)/\gamma}{1 + \alpha} \frac{0.8}{\left(4 + \frac{R_2}{\lambda} + \left(\frac{0.8Ru_B}{2.405(J_1(2.405))D_\alpha}\right)^2\right)^{1/2}} \\ h_{R_3} &= \frac{1 + (3\alpha)/\gamma}{1 + \alpha} \frac{0.8}{\left(4 + \frac{R_3}{\lambda} + \left(\frac{0.8Ru_B}{2.405(J_1(2.405))D_\alpha}\right)^2\right)^{1/2}} \end{aligned}$$

Ορίζουμε τώρα

$$\frac{1}{d_{eff}} = \frac{h_{R_1}A_2}{V_t} + \frac{h_{L_1}A_1}{V_t} + \frac{h_{R_2}A_4}{V_t} + \frac{h_{L_2}A_3}{V_t} + \frac{h_{L_2}A_5}{V_t}.$$

όπου τα A_i είναι όπως τα ορίσαμε στην προηγούμενη ενότητα και $V_t = V_1 + V_2$. Προκύπτει, λοιπόν,

$$K_{L_w} = \frac{u_B}{d_{eff}}, \quad (3.2.6)$$

όπου με K_{L_w} συμβολίζουμε τις απώλειες στα τοιχώματα.

Στην περίπτωση που λάβουμε υπόψην και το μαγνητικό πεδίο στον ογκό V_1 έχουμε αντί για h_{R_1} το $h_{R_{1\perp}}$ που ορίζεται ως

$$h_{R_{1\perp}} = \frac{1 + (3\alpha)/\gamma}{1 + \alpha} \frac{0.8}{\left(4 + \frac{R_1}{\lambda} + \left(\frac{0.8R_1u_B}{2.405(J_1(2.405))D_{\alpha\perp}}\right)^2\right)^{1/2}}, \quad (3.2.7)$$

όπου

$$D_{\perp\alpha} = \frac{\mu_{\perp i}D_{\perp e} + \mu_{\perp e}D_{\perp i}}{\mu_{\perp i} + \mu_{\perp e}} \quad (3.2.8)$$

με

$$D_{\perp i} = \frac{D_i}{1 + (\omega_i/\nu_i)^2}, \quad (\text{perpendicular ion diffusion}) \quad (3.2.9)$$

$$D_{\perp e} = \frac{D_e}{1 + (\omega_e/\nu)^2}, \quad (\text{perpendicular electron diffusion}) \quad (3.2.10)$$

$$\mu_{\perp i} = \frac{\mu_i}{1 + (\omega_i/\nu_i)^2}, \quad (\text{perpendicular ion mobility}) \quad (3.2.11)$$

και

$$\mu_{\perp e} = \frac{\mu_e}{1 + (\omega_e/\nu)^2}, \quad (\text{perpendicular electron mobility}) \quad (3.2.12)$$

Ακόμα, θεωρώντας σημαντική την επίδραση του μαγνητικού πεδίου που δημιουργείται από τους μαγνήτες γύρω από το θάλαμο (chamber) του αντιδραστήρα, ορίζουμε για τον κάτω όγκο V_2 του αντιδραστήρα

$$f_{loss} = \frac{Nw}{2\pi R_2} \quad (3.2.13)$$

όπου

$$w = \frac{2}{\pi} \sqrt{r_{ce} r_{ci}} \cdot \frac{d}{\sqrt{\lambda_e \lambda_i}} \quad (3.2.14)$$

είναι το effective leak width και

$$r_{ce} \approx \frac{3.37\sqrt{E_e}}{B_0} \quad (3.2.15)$$

$$r_{ci} \approx \frac{1.44\sqrt{E_i m_g}}{B_0} \quad (3.2.16)$$

είναι η γυροσκοπική ακτίνα των ηλεκτρονίων (electron gyroradii) και των ιόντων (ion gyroradii) αντίστοιχα σε cm ([67]), B_0 είναι το μαγνητικό πεδίο που δημιουργείται από τους μαγνήτες και m_g είναι η μάζα του ιόντος σε amu (atomic mass units). Τα E_e και E_i δίνονται αντίστοιχα από τις σχέσεις

$$E_e = \frac{3}{2}T_e \quad \text{και} \quad E_i = \frac{3}{2}T_i \quad (3.2.17)$$

όπου τα T_e και T_i είναι σε Volt. Έχουμε λοιπόν

$$\frac{1}{d_{eff}} = \frac{h_{R_1} A_2}{V_t} + \frac{h_{L_1} A_1}{V_t} + f_{loss} \cdot \frac{h_{R_2} A_4}{V_t} + \frac{h_{L_2} A_3}{V_t} + \frac{h_{L_2} A_5}{V_t}. \quad (3.2.18)$$

Τα ισοζύγια τώρα γίνονται

$$\begin{aligned}
\frac{dn_e}{dt} &= k_{iz}n_g n_e + k_{det}n_- n_e - k_{att}n_g n_e - K_{L_w}n_+ - \frac{S_p}{V_t}n_e, \\
\frac{dn_-}{dt} &= k_{att}n_g n_e - k_{rec}n_- n_+ - k_{det}n_- n_e - \frac{S_p}{V_t}n_-, \\
\frac{dn_+}{dt} &= k_{iz}n_g n_e - k_{rec}n_- n_+ - K_{L_w}n_+ - \frac{S_p}{V_t}n_+, \\
\frac{dn_g}{dt} &= Source + k_{rec}n_+ n_- - k_{iz}n_g n_e - k_{att}n_g n_e - k_{diss}n_g n_e + K_{L_w}n_+ - \frac{S_p}{V_t}n_g,
\end{aligned}$$

ενώ το ισοζύγιο της ενέργειας είναι όπως πριν.

Στην περίπτωση που το αέριο μας δεν είναι μονοατομικό και θέλουμε το μοντέλο μας να περιλαμβάνει περισσότερα από ένα θετικά ιόντα και ουδέτερα στοιχεία, τα ισοζύγια γίνονται

$$\begin{aligned}
\frac{dn_e}{dt} &= \sum_i^N k_{iz_i}n_{g_i}n_e + k_{det}n_- n_e - k_{att}n_{g_i}n_e - \sum_i^N K_{L_{wi}}n_{+i} - \frac{S_p}{V_t}n_e, \\
\frac{dn_-}{dt} &= k_{att}n_{g_i}n_e - \sum_i^N k_{rec_i}n_- n_{+i} - k_{det}n_- n_e - \frac{S_p}{V_t}n_-, \\
\frac{dn_{+i}}{dt} &= k_{iz}n_{g_i}n_e - k_{rec_i}n_- n_{+i} - \sum_i^N K_{L_{wi}}n_{+i} - \frac{S_p}{V_t}n_{+i}, \\
\frac{dn_{g_i}}{dt} &= Source_i - k_{iz_i}n_{g_i}n_e - k_{att}n_{g_i}n_e - k_{diss_i}n_{g_i}n_e + k_{rec_i}n_{+i}n_- \\
&\quad + \sum_i^N K_{L_{wi}}n_{+i} \pm \gamma_{rec} \frac{v_{th}A}{4V} n_{g_j} - \frac{S_p}{V_t}n_{g_i}, \quad i \neq j
\end{aligned}$$

και για το ισοζύγιο ενέργειας

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{3}{2}n_e T_e \right) = P_{abs} - P_{ev} - \sum_{i=1}^r P_{iw,i} - P_{ew}, \tag{3.2.19}$$

όπου P_{abs} είναι η ισχύς που απορροφάται από το σύστημα, P_{ev} είναι η απώλεια ενέργειας των ηλεκτρονίων λόγω των συγκρούσεων με τα ουδέτερα είδη, $P_{iw,i}$ είναι η ενέργεια που χάνεται στα τοιχώματα του αντιδραστήρα για το $i^{\text{στο}}$ θετικό ιόν, r είναι ο αριθμός των θετικών ιόντων που παράγονται στο σύστημα και P_{ew} είναι η ενέργεια που χάνεται στα τοιχώματα του αντιδραστήρα για τα ηλεκτρόνια [3]. Αναλυτικά,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{3}{2} n_e T_e \right) &= P_{abs} - \left(k_{iz} \epsilon_{iz} + k_{diss} \epsilon_{diss} + \sum_i^N k_{exc} \epsilon_{exc} + \sum_i^N \frac{3m}{M_i} k_{elas} T_e \right) n_g n_e \\ &- \sum_{i=1}^i (u_B \epsilon_{iw} n_s A)_r - \epsilon_{ew} n_{es} u_B E. \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

Υποθέτοντας τώρα ότι το σύστημά μας φτάνει σε στάσιμη κατάσταση έχουμε τελικά

$$\sum_i^N k_{iz} n_{g_i} n_e + k_{det} n_- n_e - k_{att} n_{g_i} n_e - \sum_i^N K_{L_{wi}} n_{+i} - \frac{S_p}{V_t} n_e = 0, \quad (3.2.21)$$

$$k_{att} n_{g_i} n_e - \sum_i^N k_{rec_i} n_- n_{+i} - k_{det} n_- n_e - \frac{S_p}{V_t} n_- = 0, \quad (3.2.22)$$

$$k_{iz} n_{g_i} n_e - k_{rec_i} n_- n_{+i} - \sum_i^N K_{L_{wi}} n_{+i} - \frac{S_p}{V_t} n_{+i} = 0, \quad (3.2.23)$$

$$\begin{aligned} Source_i - k_{iz} n_{g_i} n_e - k_{att} n_{g_i} n_e - k_{diss} n_{g_i} n_e + k_{rec_i} n_{+i} n_- + \sum_i^N K_{L_{wi}} n_{+i} \\ \pm \gamma_{rec} \frac{v_{th} A}{4V} n_{g_j} - \frac{S_p}{V_t} n_{g_i} = 0, \quad i \neq j \end{aligned} \quad (3.2.24)$$

και

$$\begin{aligned} P_{abs} - \left(k_{iz} \epsilon_{iz} + k_{diss} \epsilon_{diss} + \sum_i^N k_{exc} \epsilon_{exc} + \sum_i^N \frac{3m}{M_i} k_{elas} T_e \right) n_g n_e - \sum_{i=1}^i (u_B \epsilon_{iw} n_s A)_r \\ - \epsilon_{ew} n_{es} u_B E = 0. \end{aligned} \quad (3.2.25)$$

Στο επόμενο κεφάλαιο θα εφαρμόσουμε το μοντέλο που αναπτύξαμε σε ένα πλάσμα οξυγόνου.

Κεφάλαιο 4

Μοντέλο Μηδενικής Διάστασης σε Πλάσμα Οξυγόνου

4.1 Εισαγωγή

Ηλεκτραρνητικά πλάσματα οξυγόνου χρησιμοποιήθηκαν στην κατεργασία υλικών από την προηγούμενη δεκαετία για την απομάκρυνση πολυμερικών υμενίων. Μπορούν ακόμα να χρησιμοποιηθούν για την οξείδωση και την εναπόθεση λεπτών υμενίων οξειδίων. Πρόσφατα, με την εφαρμογή του TEOS/ O_2 πλάσματος στην υποβοηθούμενη από πλάσμα χημική εναπόθεση ατμών (plasma enhanced chemical vapour deposition (PECVD)), το πλάσμα οξυγόνου εμφανίζεται ως ο κυρίαρχος παράγοντας για καλής ποιότητας διεργασίες εναπόθεσης υμενίων.

Η παρουσία αρνητικών ιόντων στο πλάσμα οξυγόνου κάνει πολύπλοκα τα φαινόμενα και η ανάλυση ενός μοντέλου που να τα περιγράψει γίνεται δύσκολη. Στο κεφάλαιο αυτό θα εφαρμόσουμε το γενικό μοντέλο που αναπτύχθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο σε ένα πλάσμα οξυγόνου, θεωρώντας ως κυρίαρχα είδη ένα αρνητικό ίον, δύο θετικά ιόντα, ένα μετασταθές, δύο ουδέτερα και τα ηλεκτρόνια. Ο αντιδραστήρας που θα χρησιμοποιήσουμε είναι αυτός που περιγράφαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο.

4.2 Το Δίκτυο Αντιδράσεων

Θεωρούμε τα ηλεκτρόνια, το μοριακό οξυγόνο O_2 , το ατομικό οξυγόνο $O(3P)$, το μετασταθές ατομικό οξυγόνο $O(1D)$, τα θετικά ιόντα O_2^+ και O^+ και το αρνητικό ιόν O^- . Οι αντιδράσεις και οι ρυθμοί αντιδράσεων που θα χρησιμοποιήσουμε στο μοντέλο φαίνονται στον πίνακα 4.1. Οι ρυθμοί των αντιδράσεων έχουν ληφθεί από τη βιβλιογραφία ([7], [3]) και είναι υπολογισμένοι υποθέτοντας Maxwellian κατανομή.

Επίσης, λαμβάνουμε υπόψη τις αντιδράσεις στα τοιχώματα του αντιδραστήρα που φαίνονται στον πίνακα 4.3.

Reaction	Rate Coefficients [m^3/s]
$O_2 + e \longrightarrow O_2^+ + 2e$	$K_1 = 2.34 \times 10^{-15} T_e^{1.03} \exp(-12.29/T_e)$
$O_2 + e \longrightarrow O(3P) + O(1D) + e$	$K_2 = 3.49 \times 10^{-14} \exp(-5.92/T_e)$
$O_2 + e \longrightarrow O^- + O(3P)$	$K_3 = 1.07 \times 10^{-15} T_e^{1.39} \exp(-6.26/T_e)$
$O(3P) + e \longrightarrow O^+ + 2e$	$K_4 = 9.0 \times 10^{-15} T_e^{0.7} \exp(-13.6/T_e)$
$O_2^+ + O^- \longrightarrow O_2 + O(3P)$	$K_5 = 2.6 \times 10^{-13}$
$O^- + O^+ \longrightarrow 2O(3P)$	$K_6 = 4.0 \times 10^{-13}$
$O^- + e \longrightarrow O(3P) + 2e$	$K_7 = 5.47 \times 10^{-14} T_e^{0.324} \exp(-2.98/T_e)$
$O_2 + e \longrightarrow 2O(3P) + e$	$K_8 = 6.86 \times 10^{-15} \exp(-6.29/T_e)$
$O(3P) + e \longrightarrow O(1D) + e$	$K_9 = 4.47 \times 10^{-15} \exp(-2.36/T_e)$
$O_2 + O(1D) \longrightarrow O_2 + O(3P)$	$K_{10} = 2.56 \times 10^{-17} \exp(67/T_g)$
$O(1D) + O(3P) \longrightarrow O(3P) + O(3P)$	$K_{11} = 8.0 \times 10^{-18}$
$O(1D) + e \longrightarrow O^+ + 2e$	$K_{12} = 9.0 \times 10^{-15} T_e^{0.7} \exp(-11.6/T_e)$

Πίνακας 4.1: Δίκτυο Αντιδράσεων ([7] εκτός από τα K_5 και K_6 που είναι από [3]).

Reaction	E_{th} [V]	Rate Coefficients [m^3/s]
Non-Rydberg States		
$e + O(3P) \longrightarrow O(1D) + e$	1.96	$K_{1D} = 4.54 \times 10^{-15} \exp(-2.36/T_e)$
$e + O(3P) \longrightarrow O(1S) + e$	4.18	$K_{1S} = 7.86 \times 10^{-16} \exp(-4.489/T_e)$
$e + O(3P) \longrightarrow O(3P^0) + e$	15.65	$K_{3P^0} = 2.53 \times 10^{-15} \exp(-17.34/T_e)$
Rydberg States		
$e + O(3P) \longrightarrow O(5S^0) + e$	9.14	$K_{5S} = 9.67 \times 10^{-16} \exp(-9.97/T_e)$
$e + O(3P) \longrightarrow O(3S^0) + e$	9.51	$K_{3S} = 3.89 \times 10^{-15} \exp(-9.75/T_e)$
$e + O(3P) \longrightarrow O^{h*} + e$	12.0	$K_{h*} = 4.31 \times 10^{-14} \exp(-18.59/T_e)$

Πίνακας 4.2: Rate coefficients for excitation of the atomic oxygen ([3]).

Reaction		
$O(1D)$	$\xrightarrow{(wall)}$	$O(3P)$
$O^+(g)$	$\xrightarrow{(wall)}$	$O(3P)(g)$
$O_2^+(g)$	$\xrightarrow{(wall)}$	$O_2(g)$
$O(3P)(g)$	$\xrightarrow{(wall)}$	$\frac{1}{2}O_2(g)$

Πίνακας 4.3: Αντιδράσεις στα τοιχώματα.

Reaction	E_{th} [V]	Rate Coefficients [m^3/s]
$e + O_2(r = 0) \longrightarrow O_2(r > 0) + e$	0.02	$K_{rot} = 1.87 \times 10^{-17} \exp(-2.9055/T_e)$
$e + O_2(v = 0) \longrightarrow O_2(v = 1) + e$	0.19	$K_{v=1} = 2.8 \times 10^{-15} \exp(-3.72/T_e)$
$e + O_2(v = 0) \longrightarrow O_2(v = 2) + e$	0.38	$K_{v=2} = 1.28 \times 10^{-15} \exp(-3.67/T_e)$
$e + O_2(X^3\Sigma_g^-) \longrightarrow O_2(\alpha^1\Delta_g) + e$	0.977	$K_{\alpha^1\Delta_g} = 1.37 \times 10^{-15} \exp(-2.14/T_e)$
$e + O_2(X^3\Sigma_g^-) \longrightarrow O_2(b^1\Sigma_g^+) + e$	1.627	$K_{b^1\Sigma_g^+} = 3.24 \times 10^{-16} \exp(-2.218/T_e)$
$e + O_2(X^3\Sigma_g^-) \longrightarrow O_2(ex1) + e$	4.5	$K_{ex1} = 1.13 \times 10^{-15} \exp(-3.94/T_e)$
$e + O_2(X^3\Sigma_g^-) \longrightarrow O_2(1dis) + e$	6.0	$K_{1dis} = 6.86 \times 10^{-15} \exp(-6.29/T_e)$
$e + O_2(X^3\Sigma_g^-) \longrightarrow O_2(2dis) + e$	8.4	$K_{2dis} = 3.49 \times 10^{-14} \exp(-5.92/T_e)$
$e + O_2(X^3\Sigma_g^-) \longrightarrow O_2(3dis) + e$	9.97	$K_{3dis} = 1.44 \times 10^{-16} \exp(-17.25/T_e)$
$e + O_2(X^3\Sigma_g^-) \longrightarrow O_2(ex2) + e$	14.7	$K_{ex2} = 1.13 \times 10^{-15} \exp(-18.35/T_e)$

Πίνακας 4.4: Rate coefficients for excitation of the oxygen molecule ([11]).

4.3 Περιγραφή του μοντέλου

Στην ενότητα αυτή θα καταστρώσουμε και θα αναπτύξουμε τις εξισώσεις που περιγράφουν την αέρια φάση σε ένα πλάσμα οξυγόνου με σκοπό τη δημιουργία ενός self-consistent συστήματος από το οποίο θα προκύψουν οι πυκνότητες των ειδών και η θερμοκρασία των ηλεκτρονίων. Εφαρμόζοντας τις εξισώσεις που προέκυψαν στο προηγούμενο κεφάλαιο για το συγκεκριμένο δίκτυο αντιδράσεων παίρνουμε:

$$\begin{aligned}
\frac{dn_e}{dt} &= k_1 n_{O_2} n_e + k_7 n_{O^-} n_e + k_4 n_O n_e + k_{12} n_{O(1D)} n_e - k_3 n_{O_2} n_e - K_{O_L^+} n_{O^+} \\
&\quad - K_{O_{2L}^+} n_{O_2^+} - \frac{S_p}{V_t} n_e, \\
\frac{dn_{O_2^+}}{dt} &= k_1 n_{O_2} n_e - k_5 n_{O_2^+} n_{O^-} - K_{O_{2L}^+} n_{O_2^+} - \frac{S_p}{V_t} n_{O_2^+}, \\
\frac{dn_{O^-}}{dt} &= k_3 n_{O_2} n_e - k_5 n_{O^-} n_{O_2^+} - k_7 n_{O^-} n_e - k_6 n_{O^-} n_{O^+} - \frac{S_p}{V_t} n_{O^-}, \\
\frac{dn_{O^+}}{dt} &= k_5 n_O n_e - k_6 n_{O^-} n_{O^+} + k_{12} n_{O(1D)} n_e - K_{O_L^+} n_{O^+} - \frac{S_p}{V_t} n_{O^+}, \\
\frac{dn_{O_2}}{dt} &= \frac{Q_{fs}}{V k T_0} + k_5 n_{O_2^+} n_{O^-} - (k_1 + k_2 + k_3 + k_8) n_{O_2} n_e + K_{O_{2L}^+} n_{O_2^+} \\
&\quad + \frac{1}{2} K_{O_L} n_O - \frac{S_p}{V_t} n_{O_2}, \\
\frac{dn_O}{dt} &= (k_2 + k_3 + 2k_8) n_{O_2} n_e + k_5 n_{O_2^+} n_{O^-} + 2k_6 n_{O^-} n_{O^+} + k_7 n_{O^-} n_e \\
&\quad + k_{10} n_{O_2} n_{O(1D)} + k_{11} n_O n_{O(1D)} + K_{O_L^+} n_{O^+} + K_{O(1D)_L} n_{O(1D)} \\
&\quad - k_4 n_O n_e - K_{O_L} n_O - \frac{S_p}{V_t} n_O, \\
\frac{dn_{O(1D)}}{dt} &= k_2 n_{O_2} n_e + k_9 n_O n_e - k_{10} n_{O_2} n_{O(1D)} - k_{11} n_O n_{O(1D)} - k_{12} n_{O(1D)} n_e \\
&\quad - K_{O(1D)_L} n_{O(1D)} - \frac{S_p}{V_t} n_{O(1D)},
\end{aligned}$$

όπου οι ρυθμοί απωλειών στα τοιχώματα για τα ουδέτερα και τα φορτισμένα σωματίδια δίνονται από τις σχέσεις

$$K_{O_L^+} = \frac{u_{BO^+}}{d_{eff}}, \quad K_{O_{2L}^+} = \frac{u_{BO_2^+}}{d_{eff}}, \quad K_{O_L} = \frac{1}{4} \gamma_{rec} v_{th} \frac{A}{V_t} \quad \text{και} \quad K_{O(1D)_L} = \frac{1}{4} v_{th} \frac{A}{V_t},$$

και το d_{eff} ¹ δίνεται από τη σχέση (3.2.18), γ_{rec} είναι ο ρυθμός επανασύνδεσης του ατομικού οξυγόνου στην επιφάνεια και v_{th} είναι η θερμική ταχύτητα του ουδετέρου ατόμου

$$v_{th} = \sqrt{\frac{kT}{m}}. \quad (4.3.1)$$

u_{BO^+} και $u_{BO_2^+}$ είναι οι ταχύτητες Bohm του μοριακού και του ατομικού οξυγόνου,

$$u_B = \sqrt{\frac{eT_e}{M}}. \quad (4.3.2)$$

¹Για την προσθήκη της επίδρασης του μαγνητικού πεδίου που δημιουργείται από την κεραία αρκεί να κινηθούμε όπως στο προηγούμενο κεφάλαιο, δηλαδή θα αντικαταστήσουμε το h_{R_1} με το $h_{R_{1\perp}}$.

Λαμβάνουμε ακόμα υπόψη το ισοζύγιο ενέργειας:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{3}{2} n_e T_e \right) &= \frac{P_{abs}}{V_t} - (k_1 \epsilon_1 + k_2 \epsilon_2 + k_3 \epsilon_3 + k_8 \epsilon_8) n_{O_2} n_e - (k_4 \epsilon_4 + k_9 \epsilon_9) n_O n_e \\ &- k_{12} \epsilon_{12} n_{O(1D)} n_e - Exc_1 n_O n_e - Exc_2 n_{O_2} n_e \\ &- 3K_{elas_1} n_O n_e m_e \frac{T_e}{m_O} - 3K_{elas_2} n_{O_2} n_e m_e \frac{T_e}{m_{O_2}} \\ &- O_{Loss}^+ (\epsilon_e + \epsilon_i) n_{O^+} - O_{2 Loss}^+ (\epsilon_e + \epsilon_i) n_{O_2^+}, \end{aligned}$$

$\mu\varepsilon$

$$Exc_i = \sum_{j=1}^M k_{exc_j} \epsilon_j, \quad (4.3.3)$$

όπου $i = 1, 2$ για το ατομικό και το μοριακό οξυγόνο αντίστοιχα. Ακόμα, η κινητική ενέργεια των ιόντων για κάθε ιόν που χάνεται στα τοιχώματα και η κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων για κάθε ηλεκτρόνιο που χάνεται στα τοιχώματα είναι αντίστοιχα

$$\epsilon_{iw} = 6T_e, \quad \epsilon_{ew} = 2T_e. \quad (4.3.4)$$

Τέλος, ο νόμος ιδανικών αερίων για το σύστημά μας είναι

$$p = (n_O + n_{O_2} + n_{O(1D)}) kT. \quad (4.3.5)$$

Υποθέτοντας ότι το σύστημά μας έχει φθάσει σε στάσιμη κατάσταση, το σύστημά μας μετατρέπεται σε ένα σύστημα μη γραμμικών αλγεβρικών εξισώσεων. Επιπλέον, για να απλοποιήσουμε ακόμα περισσότερο το σύστημα αντικαθιστούμε το ισοζύγιο μάζας των ηλεκτρονίων με την εξίσωσης ουδετερότητας (equation of quasineutrality) του πλάσματος.

Έτσι προκύπτουν οι ακόλουθες εξισώσεις

$$[e]: n_e + n_{O^-} - n_{O_2^+} - n_{O^+} = 0, \quad (4.3.6)$$

$$[O_2^+]: k_1 n_{O_2} n_e - k_5 n_{O_2^+} n_{O^-} - O_{2 Loss}^+ n_{O_2^+} - \frac{S_p}{V} n_{O_2^+} = 0, \quad (4.3.7)$$

$$[O^-]: k_3 n_{O_2} n_e - k_5 n_{O^-} n_{O_2^+} - k_7 n_{O^-} n_e - k_6 n_{O^-} n_{O^+} - \frac{S_p}{V} n_{O^-} = 0, \quad (4.3.8)$$

$$[O^+] : k_5 n_O n_e - k_6 n_{O^-} n_{O^+} - O_{Loss}^+ n_{O^+} - \frac{S_p}{V} n_{O^+} = 0, \quad (4.3.9)$$

$$\begin{aligned} [O_2] : & \frac{Q_{fs}}{V k T_0} + k_5 n_{O_2^+} n_{O^-} - (k_1 + k_2 + k_3 + k_8) n_{O_2} n_e + O_2^+ n_{O_2^+} \\ & + \frac{1}{2} O_{Loss} n_O - \frac{S_p}{V} n_{O_2} = 0, \end{aligned} \quad (4.3.10)$$

$$\begin{aligned} [O] : & (k_2 + k_3 + 2k_8) n_{O_2} n_e + k_5 n_{O_2^+} n_{O^-} + 2k_6 n_{O^-} n_{O^+} + k_7 n_{O^-} n_e \\ & + k_{10} n_{O_2} n_{O(1D)} + k_{11} n_{O} n_{O(1D)} + O_{Loss}^+ n_{O^+} + O(1D)_{Loss} n_{O(1D)} \\ & - k_4 n_O n_e - O_{Loss} n_O - \frac{S_p}{V} n_O = 0 \end{aligned} \quad (4.3.11)$$

$$\begin{aligned} [O(1D)] : & k_2 n_{O_2} n_e + k_9 n_O n_e - k_{10} n_{O_2} n_{O(1D)} - k_{11} n_O n_{O(1D)} - k_{12} n_{O(1D)} n_e \\ & - O(1D)_{Loss} n_{O(1D)} - \frac{S_p}{V} n_{O(1D)} = 0, \end{aligned} \quad (4.3.12)$$

$$\begin{aligned} [Energy Balance] : & \frac{P_{abs}}{V} - (k_1 \epsilon_1 + k_2 \epsilon_2 + k_3 \epsilon_3 + k_8 \epsilon_8) n_{O_2} n_e - (k_4 \epsilon_4 + k_9 \epsilon_9) n_O n_e \\ & - k_{12} \epsilon_{12} n_{O(1D)} n_e - Exc_1 n_O n_e - Exc_2 n_{O_2} n_e - 3K_{elas_1} n_O n_e m_e \frac{T_e}{m_O} \\ & - 3K_{elas_2} n_{O_2} n_e m_e \frac{T_e}{m_O} - K_{O_L^+} (\epsilon_e + \epsilon_i) n_{O^+} - K_{O_{2L}^+} (\epsilon_e + \epsilon_i) n_{O_2^+} = 0, \end{aligned} \quad (4.3.13)$$

$$[Ideal Gas Law] : p - (n_O + n_{O_2} + n_{O(1D)}) k T = 0. \quad (4.3.14)$$

4.4 Αδιαστατοποίηση των εξισώσεων του μοντέλου

Οι τεχνική της κανονικοποίησης παίζει σημαντικό ρόλο στη θεμελίωση και τις εφαρμογές των μαθηματικών μοντέλων. Σε κάθε περιοχή των εφαρμογών, μια καλή αντίληψη του σχετικού μεγέθους των διαφόρων φυσικών παραμέτρων, καθώς και η αναγνώριση πιθανών σχέσεων που υπάρχουν μεταξύ τους, σχεδόν πάντα μας οδηγούν στην καλύτερη κατανόηση του προβλήματος και, πολλές φορές, μπορούν να μας υποδείξουν και τρόπους προσέγγισης των λύσεων ή και ακριβούς επίλυσης του προβλήματος.

Επιλέγουμε αρχικά κάποια χαρακτηριστικά μεγέθη αναφοράς τα οποία θα τα συμβολίζουμε ως τα μεγέθη με το σύμβολο της περισπωμένης (\sim). Θα έχουμε λοιπόν τα παρακάτω αδιάστατα, κανονικοποιημένα μεγέθη,

$$\hat{k} = \frac{k}{\tilde{k}}, \quad \hat{n}_c = \frac{n_c}{\tilde{n}_c}, \quad \hat{n}_n = \frac{n_n}{\tilde{n}_n}, \quad \hat{l} = \frac{l}{\tilde{l}}, \quad \hat{A} = \frac{A}{\tilde{A}}, \quad \hat{V} = \frac{V}{\tilde{V}}, \quad \hat{u} = \frac{u}{\tilde{u}}, \quad \hat{S}_p = \frac{S_p}{\tilde{S}_p}, \quad \hat{Q} = \frac{Q}{\tilde{Q}},$$

όπου με n_n και n_c συμβολίζουμε τις πυκνότητες των ουδετέρων και των φορτισμένων σωματιδίων αντίστοιχα.

Μπορούμε τώρα να αντικαταστήσουμε κάθε ανηγμένο μέγεθος με το γινόμενο του αδιάστατου επί το αντίστοιχο χαρακτηριστικό μέγεθος. Προκύπτουν, λοιπόν, οι παρακάτω εξισώσεις

$$\left(\tilde{k}\tilde{n}_n\tilde{n}_c\right)\hat{k}_1\hat{n}_{O_2}\hat{n}_e - \left(\tilde{k}\tilde{n}_c\tilde{n}_c\right)\hat{k}_5\hat{n}_{O_2^+}\hat{n}_{O^-} - \left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{l}}\tilde{n}_c\right)\frac{\hat{u}_{BO_2^+}}{\hat{d}_{eff}}\hat{n}_{O_2^+} - \left(\frac{\tilde{S}_p}{\tilde{V}}\tilde{n}_c\right)\frac{\hat{S}_p}{\hat{V}}\hat{n}_{O_2^+} = 0,$$

$$\left(\tilde{k}\tilde{n}_n\tilde{n}_c\right)\hat{k}_3\hat{n}_{O_2}\hat{n}_e - \left(\tilde{k}\tilde{n}_c\tilde{n}_c\right)\left\{\hat{k}_5\hat{n}_{O_2^+}\hat{n}_{O^-} + \hat{k}_7\hat{n}_{O^-}\hat{n}_e + \hat{k}_6\hat{n}_{O^-}\hat{n}_{O^+}\right\} - \left(\frac{\tilde{S}_p}{\tilde{V}}\tilde{n}_c\right)\frac{\hat{S}_p}{\hat{V}}\hat{n}_{O^-} = 0,$$

$$\left(\tilde{k}\tilde{n}_n\tilde{n}_c\right)\hat{k}_5\hat{n}_O\hat{n}_e - \left(\tilde{k}\tilde{n}_c\tilde{n}_c\right)\hat{k}_6\hat{n}_{O^-}\hat{n}_{O^+} - \left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{l}}\tilde{n}_c\right)\frac{\hat{u}_{BO^+}}{\hat{d}_{eff}}\hat{n}_{O^+} - \left(\frac{\tilde{S}_p}{\tilde{V}}\tilde{n}_c\right)\frac{\hat{S}_p}{\hat{V}}\hat{n}_{O^+} = 0,$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\tilde{Q}}{\tilde{V}}\right)\frac{\hat{Q}_{fs}}{\hat{V}KT_0} + \left(\tilde{k}\tilde{n}_c\tilde{n}_c\right)\hat{k}_5\hat{n}_{O_2^+}\hat{n}_{O^-} - \left(\tilde{k}\tilde{n}_n\tilde{n}_c\right)(\hat{k}_1 + \hat{k}_2 + \hat{k}_3 + \hat{k}_8)\hat{n}_{O_2}\hat{n}_e \\ & + \left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{l}}\tilde{n}_c\right)\left\{\frac{\hat{u}_{BO_2^+}}{\hat{d}_{eff}}\hat{n}_{O_2^+} + \frac{\hat{u}_{BO^+}}{\hat{d}_{eff}}\hat{n}_{O^+}\right\} + \frac{1}{8}\gamma_{rec}\left(\frac{\tilde{u}\tilde{A}}{\tilde{V}}\tilde{n}_n\right)\frac{u_{th}A}{V}\hat{n}_O - \left(\frac{\tilde{S}_p}{\tilde{V}}\tilde{n}_n\right)\frac{\hat{S}_p}{\hat{V}}\hat{n}_{O_2} = 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left(\tilde{k}\tilde{n}_c\tilde{n}_c\right)\left\{\hat{k}_5\hat{n}_{O^-}\hat{n}_{O^+} + \hat{k}_7\hat{n}_{O^-}\hat{n}_e\right\} + \left(\tilde{k}\tilde{n}_n\tilde{n}_n\right)\left\{\hat{k}_{10}\hat{n}_{O_2}\hat{n}_{O(1D)} + \hat{k}_{11}\hat{n}_O\hat{n}_{O(1D)}\right\} \\ & + \left(\tilde{k}\tilde{n}_n\tilde{n}_c\right)(\hat{k}_2 + \hat{k}_3 + 2\hat{k}_8)\hat{n}_{O_2}\hat{n}_e + \left(\frac{\tilde{u}\tilde{A}}{\tilde{V}}\tilde{n}_n\right)\frac{\hat{u}_{th}}{4}\frac{\hat{A}}{\hat{V}}\hat{n}_{O(1D)} + \left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{l}}\tilde{n}_c\right)\frac{\hat{u}_{BO^+}}{\hat{d}_{eff}}\hat{n}_{O^+} \\ & - \left(\tilde{k}\tilde{n}_n\tilde{n}_c\right)(\hat{k}_4 + \hat{k}_9)\hat{n}_O\hat{n}_e - \frac{1}{4}\gamma_{rec}\left(\tilde{u}\frac{\tilde{A}}{\tilde{V}}\tilde{n}_n\right)\hat{u}_{th}\frac{\hat{A}}{\hat{V}}\hat{n}_O - \left(\frac{\tilde{S}_p}{\tilde{V}}\tilde{n}_n\right)\frac{\hat{S}_p}{\hat{V}}\hat{n}_O = 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left(\tilde{k}\tilde{n}_n\tilde{n}_c \right) \left\{ \hat{k}_2\hat{n}_{O_2}\hat{n}_e + \hat{k}_9\hat{n}_O\hat{n}_e \right\} - \left(\tilde{k}\tilde{n}_n\tilde{n}_n \right) \left\{ \hat{k}_{10}\hat{n}_{O_2}\hat{n}_{O(1D)} + \hat{k}_{11}\hat{n}_O\hat{n}_{O(1D)} \right\} \\ & - \left(\tilde{k}\tilde{n}_n\tilde{n}_c \right) \hat{k}_{13}\hat{n}_{O(1D)}\hat{n}_e - \frac{1}{4} \left(\frac{\tilde{u}\tilde{A}}{\tilde{V}}\tilde{n}_n \right) \frac{\hat{u}_{th}\hat{A}}{\hat{V}}\hat{n}_{O(1D)} - \left(\frac{\tilde{S}_p}{\tilde{V}}\tilde{n}_n \right) \frac{\hat{S}_p}{\hat{V}}\hat{n}_{O(1D)} = 0, \end{aligned}$$

Για να φέρουμε τις εξισώσεις σε πιο καλή μορφή, διαιρούμε κάθε όρο με $\tilde{k}\tilde{n}_n\tilde{n}_c$, οπότε προκύπτουν οι εξισώσεις

$$\begin{aligned} & \hat{k}_1\hat{n}_{O_2}\hat{n}_e - \left(\frac{\tilde{n}_c}{\tilde{n}_n} \right) \hat{k}_5\hat{n}_{O_2^+}\hat{n}_{O^-} - \left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{l}\tilde{k}\tilde{n}_n} \right) \frac{\hat{u}_{BO_2^+}}{\hat{d}_{eff}}\hat{n}_{O_2^+} - \left(\frac{\tilde{S}_p}{\tilde{V}\tilde{k}\tilde{n}_n} \right) \frac{\hat{S}_p}{\hat{V}}\hat{n}_{O_2^+} = 0, \\ & \hat{k}_3\hat{n}_{O_2}\hat{n}_e - \left(\frac{\tilde{n}_c}{\tilde{n}_n} \right) \hat{k}_5\hat{n}_{O_2^+}\hat{n}_{O^-} - \left(\frac{\tilde{n}_c}{\tilde{n}_n} \right) \hat{k}_7\hat{n}_O\hat{n}_e - \left(\frac{\tilde{n}_c}{\tilde{n}_n} \right) \hat{k}_6\hat{n}_O\hat{n}_{O^+} = 0, \\ & \hat{k}_5\hat{n}_O\hat{n}_e - \left(\frac{\tilde{n}_c}{\tilde{n}_n} \right) \hat{k}_6\hat{n}_{O^-}\hat{n}_{O^+} - \left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{l}\tilde{k}\tilde{n}_n} \right) \frac{\hat{u}_{BO^+}}{\hat{d}_{eff}}\hat{n}_{O^+} - \left(\frac{\tilde{S}_p}{\tilde{V}\tilde{k}\tilde{n}_n} \right) \frac{\hat{S}_p}{\hat{V}}\hat{n}_{O^+} = 0, \\ & \left(\frac{\tilde{Q}}{\tilde{V}\tilde{k}\tilde{n}_c\tilde{n}_n} \right) \frac{\hat{Q}_{fs}}{\hat{V}KT_0} + \left(\frac{\tilde{n}_c}{\tilde{n}_n} \right) \hat{k}_5\hat{n}_{O_2^+}\hat{n}_{O^-} - (\hat{k}_1 + \hat{k}_2 + \hat{k}_3 + \hat{k}_8)\hat{n}_{O_2}\hat{n}_e \\ & + \left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{l}\tilde{k}\tilde{n}_n} \right) \left\{ \frac{\hat{u}_{BO_2^+}}{\hat{d}_{eff}}\hat{n}_{O_2^+} + \frac{\hat{u}_{BO^+}}{\hat{d}_{eff}}\hat{n}_{O^+} \right\} + \frac{1}{8}\gamma_{rec} \left(\frac{\tilde{u}\tilde{A}}{\tilde{V}\tilde{k}\tilde{n}_c} \right) \frac{u_{th}A}{\hat{V}}\hat{n}_O - \left(\frac{\tilde{S}_p}{\tilde{V}\tilde{k}\tilde{n}_c} \right) \frac{\hat{S}_p}{\hat{V}}\hat{n}_{O_2} = 0, \\ & \left(\frac{\tilde{n}_c}{\tilde{n}_n} \right) \left\{ \hat{k}_5\hat{n}_{O^-}\hat{n}_{O_2^+} + \hat{k}_7\hat{n}_{O^-}\hat{n}_e \right\} + \left(\frac{\tilde{n}_n}{\tilde{n}_c} \right) \left\{ \hat{k}_{10}\hat{n}_{O_2}\hat{n}_{O(1D)} + \hat{k}_{11}\hat{n}_O\hat{n}_{O(1D)} \right\} \\ & + (\hat{k}_2 + \hat{k}_3 + 2\hat{k}_8)\hat{n}_{O_2}\hat{n}_e + \left(\frac{\tilde{u}\tilde{A}}{\tilde{V}\tilde{k}\tilde{n}_c} \right) \left\{ \frac{\hat{u}_{th}}{4}\frac{\hat{A}}{\hat{V}}\hat{n}_{O(1D)} + \gamma_{rec} \frac{\hat{u}_{th}}{4}\frac{\hat{A}}{\hat{V}}\hat{n}_O \right\} + \left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{l}\tilde{k}\tilde{n}_n} \right) \frac{\hat{u}_{BO^+}}{\hat{d}_{eff}}\hat{n}_{O^+} \\ & - (\hat{k}_4 + \hat{k}_9)\hat{n}_O\hat{n}_e - \left(\frac{\tilde{S}_p}{\tilde{V}\tilde{k}\tilde{n}_c} \right) \frac{\hat{S}_p}{\hat{V}}\hat{n}_O = 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \hat{k}_2\hat{n}_{O_2}\hat{n}_e + \hat{k}_9\hat{n}_O\hat{n}_e - \left(\frac{\tilde{n}_n}{\tilde{n}_c} \right) \hat{k}_{10}\hat{n}_{O_2}\hat{n}_{O(1D)} - \left(\frac{\tilde{n}_n}{\tilde{n}_c} \right) \hat{k}_{11}\hat{n}_O\hat{n}_{O(1D)} - \hat{k}_{13}\hat{n}_{O(1D)}\hat{n}_e \\ & - \frac{1}{4} \left(\frac{\tilde{u}\tilde{A}}{\tilde{V}\tilde{k}\tilde{n}_c} \right) \frac{\hat{u}_{th}\hat{A}}{\hat{V}}\hat{n}_{O(1D)} - \left(\frac{\tilde{S}_p}{\tilde{V}\tilde{k}\tilde{n}_c} \right) \frac{\hat{S}_p}{\hat{V}}\hat{n}_{O(1D)} = 0, \end{aligned}$$

Για το ισοζύγιο ενέργειας ορίζουμε επιπλέον τις ακόλουθες αδιάστατες ποσότητες,

$$\hat{P} = \frac{P}{\tilde{P}}, \quad \kappa\alpha\iota \quad \hat{\epsilon} = \frac{\epsilon}{\tilde{\epsilon}},$$

οπότε προκύπτει,

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\tilde{P}}{\tilde{V}} \right) \frac{\hat{P}_{abs}}{\hat{V}} - \left(\tilde{k} \tilde{\epsilon} \tilde{n}_n \tilde{n}_c \right) \left(\hat{k}_1 \hat{\epsilon}_1 + \hat{k}_2 \hat{\epsilon}_2 + \hat{k}_3 \hat{\epsilon}_3 + \hat{k}_8 \hat{\epsilon}_8 \right) \hat{n}_{O_2} \hat{n}_e - \left(\tilde{k} \tilde{\epsilon} \tilde{n}_n \tilde{n}_c \right) \hat{k}_{13} \hat{\epsilon}_{13} \hat{n}_{O(1D)} \hat{n}_e \\
& - \left(\tilde{k} \tilde{\epsilon} \tilde{n}_n \tilde{n}_c \right) \left(\hat{k}_4 \hat{\epsilon}_4 + \hat{k}_9 \hat{\epsilon}_9 \right) \hat{n}_O \hat{n}_e - \left(\tilde{k} \tilde{\epsilon} \tilde{n}_n \tilde{n}_c \right) \left\{ \hat{E}_{xc1} \hat{n}_O \hat{n}_e + \hat{E}_{xc2} \hat{n}_{O_2} \hat{n}_e \right\} \\
& - 3 \left(\tilde{k} \tilde{\epsilon} \tilde{n}_n \tilde{n}_c \right) \left\{ \hat{k}_{elas1} \hat{n}_O \hat{n}_e \hat{m}_e \frac{\hat{T}_e}{\hat{m}_O} + \hat{k}_{elas2} \hat{n}_{O_2} \hat{n}_e \hat{m}_e \frac{\hat{T}_e}{\hat{m}_O} \right\} \\
& - \left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{l}} \tilde{\epsilon} \tilde{n}_c \right) \left\{ \frac{\hat{u}_{BO^+}}{\hat{d}_{eff}} (\hat{\epsilon}_e + \hat{\epsilon}_i) \hat{n}_{O^+} + \frac{\hat{u}_{BO_2^+}}{\hat{d}_{eff}} (\hat{\epsilon}_e + \hat{\epsilon}_i) \hat{n}_{O_2^+} \right\} = 0,
\end{aligned}$$

Διαιρούμε τώρα κάθε όρο με $\left(\tilde{k} \tilde{\epsilon} \tilde{n}_n \tilde{n}_c \right)$ οπότε παίρνουμε

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\tilde{P}}{\tilde{V} \tilde{k} \tilde{\epsilon} \tilde{n}_n \tilde{n}_c} \right) \frac{\hat{P}_{abs}}{\hat{V}} - \left(\hat{k}_1 \hat{\epsilon}_1 + \hat{k}_2 \hat{\epsilon}_2 + \hat{k}_3 \hat{\epsilon}_3 + \hat{k}_8 \hat{\epsilon}_8 \right) \hat{n}_{O_2} \hat{n}_e - \hat{k}_{13} \hat{\epsilon}_{13} \hat{n}_{O(1D)} \hat{n}_e \\
& - \left(\hat{k}_4 \hat{\epsilon}_4 + \hat{k}_9 \hat{\epsilon}_9 \right) \hat{n}_O \hat{n}_e - \hat{E}_{xc1} \hat{n}_O \hat{n}_e - \hat{E}_{xc2} \hat{n}_{O_2} \hat{n}_e - 3 \hat{k}_{elas1} \hat{n}_O \hat{n}_e \hat{m}_e \frac{\hat{T}_e}{\hat{m}_O} \\
& - 3 \hat{k}_{elas2} \hat{n}_{O_2} \hat{n}_e \hat{m}_e \frac{\hat{T}_e}{\hat{m}_O} - \left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{k} \tilde{l} \tilde{n}_n} \right) \left\{ \frac{\hat{u}_{BO^+}}{\hat{d}_{eff}} (\hat{\epsilon}_e + \hat{\epsilon}_i) \hat{n}_{O^+} + \frac{\hat{u}_{BO_2^+}}{\hat{d}_{eff}} (\hat{\epsilon}_e + \hat{\epsilon}_i) \hat{n}_{O_2^+} \right\} = 0,
\end{aligned}$$

Προσθέτουμε τώρα την εξίσωση ουδετερότητας του πλάσματος

$$\hat{n}_e + \hat{n}_{O^-} - \hat{n}_{O_2^+} - \hat{n}_{O^+} = 0,$$

και το νόμο ιδανικών αερίων

$$\tilde{p} \hat{p} - \tilde{n}_n (\hat{n}_O + \hat{n}_{O_2} + \hat{n}_{O(1D)}) K T = 0 \Rightarrow \hat{p} - \left(\frac{\tilde{n}_n}{\tilde{p}} \right) (\hat{n}_O + \hat{n}_{O_2} + \hat{n}_{O(1D)}) K T = 0.$$

Ορίζουμε τώρα τις ακόλουθες αδιάστατες ομάδες,

$$\begin{aligned}
 C_1 &= \frac{\tilde{n}_c}{\tilde{n}_n}, \quad \mu\varepsilon [C_1] = \frac{[L]^{-3}}{[L]^{-3}} = 1 \\
 C_2 &= \frac{\tilde{u}}{\tilde{l}\tilde{k}\tilde{n}_n}, \quad \mu\varepsilon [C_2] = \frac{[L]\cdot[T]^{-1}}{[L]\cdot[L]^3\cdot[T]^{-1}\cdot[L]^{-3}} = 1 \\
 C_3 &= \frac{\tilde{S}_p}{\tilde{V}\tilde{k}\tilde{n}_n}, \quad \mu\varepsilon [C_3] = \frac{[L]^3\cdot[T]^{-1}}{[L]^3\cdot[L]^3\cdot[T]^{-1}\cdot[L]^{-3}} = 1 \\
 C_4 &= \frac{\tilde{Q}}{\tilde{V}\tilde{k}\tilde{n}_n\tilde{n}_cKT_0}, \quad \mu\varepsilon [C_4] = \frac{[M]\cdot[L]^2\cdot[T]^{-3}}{[L]^3\cdot[L]^3\cdot[T]^{-1}\cdot[L]^{-3}\cdot[L]^{-3}\cdot[M]\cdot[L]^2\cdot[T]^{-2}} = 1 \\
 C_5 &= \frac{\tilde{u}\tilde{A}}{\tilde{V}\tilde{k}\tilde{n}_c}, \quad \mu\varepsilon [C_5] = \frac{[L]\cdot[T]^{-1}\cdot[L]^2}{[L]^3\cdot[L]^3\cdot[T]^{-1}\cdot[L]^{-3}} = 1 \\
 C_6 &= \frac{\tilde{S}_p}{\tilde{V}\tilde{k}\tilde{n}_c}, \quad \mu\varepsilon [C_6] = \frac{[L]^3\cdot[T]^{-1}}{[L]^3\cdot[L]^3\cdot[T]^{-1}\cdot[L]^{-3}} = 1 \\
 C_7 &= \frac{\tilde{n}_n}{\tilde{n}_c}, \quad \mu\varepsilon [C_7] = \frac{[L]^{-3}}{[L]^{-3}} = 1 \\
 C_8 &= \frac{\tilde{P}}{\tilde{V}\tilde{k}\tilde{\epsilon}\tilde{n}_n\tilde{n}_c}, \quad \mu\varepsilon [C_8] = \frac{[M]\cdot[L]^2\cdot[T]^{-3}}{[L]^3\cdot[L]^3\cdot[T]^{-1}\cdot[M]\cdot[L]^2\cdot[T]^{-2}\cdot[L]^{-3}\cdot[L]^{-3}} = 1
 \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας έχουμε,

$$\hat{n}_e + \hat{n}_{O^-} - \hat{n}_{O_2^+} - \hat{n}_{O^+} = 0, \quad (4.4.1)$$

$$\hat{k}_1\hat{n}_{O_2}\hat{n}_e - C_1\hat{k}_5\hat{n}_{O_2^+}\hat{n}_{O^-} - C_2\frac{\hat{u}_{BO_2^+}}{\hat{d}_{eff}}\hat{n}_{O_2^+} - C_3\frac{\hat{S}_p}{\hat{V}}\hat{n}_{O_2^+} = 0, \quad (4.4.2)$$

$$\hat{k}_3\hat{n}_{O_2}\hat{n}_e - C_1\hat{k}_5\hat{n}_{O_2^+}\hat{n}_{O^-} - C_1\hat{k}_7\hat{n}_{O^-}\hat{n}_e - C_1\hat{k}_6\hat{n}_{O^-}\hat{n}_{O^+} = 0, \quad (4.4.3)$$

$$\hat{k}_5\hat{n}_O\hat{n}_e - C_1\hat{k}_6\hat{n}_{O^-}\hat{n}_{O^+} - C_2\frac{\hat{u}_{BO^+}}{\hat{d}_{eff}}\hat{n}_{O^+} - C_3\frac{\hat{S}_p}{\hat{V}}\hat{n}_{O^+} = 0, \quad (4.4.4)$$

$$\begin{aligned}
 &C_4\frac{\hat{Q}_{fs}}{\hat{V}KT_0} + C_1\hat{k}_5\hat{n}_{O_2^+}\hat{n}_{O^-} - (\hat{k}_1 + \hat{k}_2 + \hat{k}_3 + \hat{k}_8)\hat{n}_{O_2}\hat{n}_e + C_2\frac{\hat{u}_{BO_2^+}}{\hat{d}_{eff}}\hat{n}_{O_2^+} \\
 &+ C_2\frac{\hat{u}_{BO^+}}{\hat{d}_{eff}}\hat{n}_{O^+} + \frac{1}{8}\gamma_{rec}C_5\frac{u_{th}A}{V}\hat{n}_O - C_6\frac{\hat{S}_p}{\hat{V}}\hat{n}_{O_2} = 0,
 \end{aligned} \quad (4.4.5)$$

$$\begin{aligned}
& \left(\hat{k}_2 + \hat{k}_3 + 2\hat{k}_8 \right) \hat{n}_{O_2} \hat{n}_e + C_1 \hat{k}_5 \hat{n}_{O^-} \hat{n}_{O_2^+} + C_1 \hat{k}_7 \hat{n}_{O^-} \hat{n}_e + C_7 \hat{k}_{10} \hat{n}_{O_2} \hat{n}_{O(1D)} \\
& + C_7 \hat{k}_{11} \hat{n}_O \hat{n}_{O(1D)} + C_5 \frac{\hat{u}_{th}}{4} \frac{\hat{A}}{\hat{V}} \hat{n}_{O(1D)} + C_2 \frac{\hat{u}_{BO^+}}{\hat{d}_{eff}} \hat{n}_{O^+} - (\hat{k}_4 + \hat{k}_9) \hat{n}_O \hat{n}_e \\
& - \frac{1}{4} \gamma_{rec} C_5 \hat{u}_{th} \frac{\hat{A}}{\hat{V}} \hat{n}_O - C_6 \frac{\hat{S}_p}{\hat{V}} \hat{n}_{O(1D)} = 0,
\end{aligned} \tag{4.4.6}$$

$$\begin{aligned}
& C_8 \frac{\hat{P}_{abs}}{\hat{V}} - \left(\hat{k}_1 \hat{\epsilon}_1 + \hat{k}_2 \hat{\epsilon}_2 + \hat{k}_3 \hat{\epsilon}_3 + \hat{k}_8 \hat{\epsilon}_8 \right) \hat{n}_{O_2} \hat{n}_e - \hat{k}_{13} \hat{\epsilon}_{13} \hat{n}_{O(1D)} \hat{n}_e - \hat{k}_4 \hat{\epsilon}_4 \hat{n}_O \hat{n}_e \\
& + \hat{k}_9 \hat{\epsilon}_9 \hat{n}_O \hat{n}_e - \hat{E}_{xc1} \hat{n}_O \hat{n}_e - \hat{E}_{xc2} \hat{n}_{O_2} \hat{n}_e - 3 \hat{k}_{elas1} \hat{n}_O \hat{n}_e \hat{m}_e \frac{\hat{T}_e}{\hat{m}_O} - 3 \hat{k}_{elas2} \hat{n}_{O_2} \hat{n}_e \hat{m}_e \frac{\hat{T}_e}{\hat{m}_{O_2}} \\
& - C_2 \frac{\hat{u}_{BO^+}}{\hat{d}_{eff}} (\hat{\epsilon}_e + \hat{\epsilon}_i) \hat{n}_{O^+} - C_2 \frac{\hat{u}_{BO_2^+}}{\hat{d}_{eff}} (\hat{\epsilon}_e + \hat{\epsilon}_i) \hat{n}_{O_2^+} = 0,
\end{aligned} \tag{4.4.7}$$

$$\hat{p} - \left(\frac{\tilde{n}_n}{\tilde{p}} \right) (\hat{n}_O + \hat{n}_{O_2} + \hat{n}_{O(1D)}) KT = 0. \tag{4.4.8}$$

Κεφάλαιο 5

Η μέθοδος Newton

5.1 Γενική Περιγραφή

Έχουμε το ακόλουθο σύστημα μη γραμμικών εξισώσεων

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0,$$

όπου $i = 1, 2, \dots, N$, x_i είναι οι άγνωστες μεταβλητές και $x_1 = X_1$, $x_2 = X_2, \dots$, $x_N = X_N$ η λύση. Οι εξισώσεις γράφονται συνήθως σε διανυσματική μορφή. Οι άγνωστες μεταβλητές γράφονται ως $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)^T$ και οι εξισώσεις ως $\vec{f} = (f_1, f_2, \dots, f_N)^T$. Το προς επίλυση σύστημα λοιπόν γράφεται $\vec{f}(\vec{x}) = 0$, με λύση $\vec{X} = (X_1, X_2, \dots, X_N)$.

Η μέθοδος Newton είναι μια επαναληπτική μέθοδος. Η επίλυση ξεκινά από μια αρχική προσέγγιση της λύσης και χρησιμοποιεί μια επαναληπτική συνάρτηση για την εύρεσή της. Η επαναληπτική συνάρτηση είναι η αρχική διανυσματική εξίσωση αναδιατυπωμένη στη μορφή $\vec{x} = \vec{g}(\vec{x})$. Για τη λύση της αρχικής συνάρτησης έχουμε

$$\vec{X} = \vec{g}(\vec{X}). \quad (5.1.1)$$

Έτσι η λύση της αρχικής εξίσωσης είναι ένα σταθερό σημείο της επαναληπτικής συνάρτησης. Προσδιορίζουμε λοιπόν μία αρχική προσέγγιση $\vec{x}^{(0)}$ της λύσης και υπολογίζουμε μία ακολουθία αριθμών $\vec{x}^{(k+1)} = \vec{g}(\vec{x}^{(k)})$. Όταν η ακολουθία αυτή συγκλίνει σε ένα σταθερό σημείο, το σημείο αυτό θα είναι λύση και της εξίσωσης $\vec{f}(\vec{x}) = 0$.

Η επαναληπτική συνάρτηση προσδιορίζεται αντικαθιστώντας τη διανυσματική συνάρτηση $\vec{f}(\vec{x})$ με το αντίστοιχο ανάπτυγμα Taylor στο σημείο $\vec{x}^{(k)}$. Παίρνουμε λοιπόν τη

γραμμική εξίσωση

$$\vec{f}(\vec{x}^{(k)}) + F(\vec{x}^{(k)}) (\vec{x} - \vec{x}^{(k)}) = 0 \Rightarrow \vec{x} = \vec{x}^{(k)} - F^{-1}(\vec{x}^{(k)}) \vec{f}(\vec{x}^{(k)})$$

όπου F είναι ο Ιακωβιανός πίνακας της διανυσματικής συνάρτησης \vec{f} , με $F_{i,j} \equiv \frac{\partial f_i}{\partial x_j}$.

Παρατηρώντας ότι το αριστερό μέλος της εξίσωσης είναι το $\vec{x}^{(k+1)}$ και ότι το δεξιό μέλος είναι η επαναληπτική συνάρτηση $\vec{g}(\vec{x}^{(k)})$ παίρνουμε

$$\vec{g}(\vec{x}) = \vec{x} - F^{-1}(\vec{x}) \vec{f}(\vec{x}). \quad (5.1.2)$$

Για να αποδείξουμε ότι η λύση της $\vec{g}(\vec{x})$ είναι και λύση της $\vec{f}(\vec{x}) = 0$, αρχεί να δείξουμε ότι

$$\vec{x} = \vec{g}(\vec{x}) \Rightarrow \vec{f}(\vec{x}) = 0.$$

Αντικαθιστώντας στην (5.1.2) έχουμε

$$\vec{g}(\vec{x}) = \vec{x} = \vec{x} - F^{-1}(\vec{x}) \vec{f}(\vec{x}) \Rightarrow F^{-1}(\vec{x}) \vec{f}(\vec{x}) = 0. \quad (5.1.3)$$

Συνεπώς, το σταθερό σημείο της $\vec{g}(\vec{x})$ είναι λύση της $\vec{f}(\vec{x})$ δεδομένου ότι $F^{-1}(\vec{x}) \neq 0$.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 1 *H MEΘΟΔΟΣ NEWTON*

Έστω $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, συνεχώς διαφορίσιμη και $x_0 \in \mathbb{R}^n$: σε κάθε επανάληψη k , να λυθεί

$$J(x_k)s_k = -F(x_k),$$

$$x_{k+1} = x_k + s_k$$

Για να προσδιορίσουμε το ρυθμό σύγκλισης του παραπάνω αλγορίθμου, θα λάβουμε υπόψη το σφάλμα σε κάθε βήμα. Η λύση \vec{X} αφαιρείται κι από τα δύο μέλη της επαναληπτικής μεθόδου,

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{g}(\vec{x}^{(k)})$$

και το σφάλμα για κάθε τιμή είναι

$$\vec{e}^{(k+1)} = \vec{g}(\vec{x}^{(k)}) - \vec{X}.$$

Υποθέτοντας ότι η τρέχουσα προσέγγιση $\vec{x}^{(k)}$ είναι κοντά στην πραγματική λύση, μπορούμε να ανπτύξουμε σε σειρα Taylor την $g(\vec{x}^{(k)})$ γύρω απ' το σημείο \vec{X} . Θεωρώντας ότι το σφάλμα της μεταβλητής x_i είναι

$$\vec{e}_i^{(k+1)} = \vec{g}_i \left(\vec{x}^{(k)} \right) - \vec{X}_i$$

και παίρνοντας το ανάπτυγμα Taylor, έχουμε

$$\begin{aligned} \vec{e}_i^{(k+1)} &= \left[g_i \left(\vec{X} \right) + \sum_j \left(x_j^{(k)} - X_j \right) \frac{\partial g_i}{\partial x_j} \Big|_{\vec{X}} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_j \sum_l \left(x_j^{(k)} - X_j \right) \left(x_l^{(k)} - X_l \right) \frac{\partial}{\partial x_l} \frac{\partial g_i}{\partial x_j} \Big|_{\vec{X}} + \dots \right] - \vec{X}. \end{aligned} \quad (5.1.4)$$

Από την (5.1.1) και ορίζοντας την Ιακωβιανή του $\vec{g}(\vec{x})$ ως $J_{i,j} \equiv \frac{\partial g_i}{\partial x_j}$, η (5.1) γίνεται

$$\vec{e}_i^{(k+1)} = \sum_j e_j^{(k)} J_{i,j} \left(\vec{X} \right) + \frac{1}{2} \sum_j \sum_l e_j^{(k)} e_l^{(k)} \frac{\partial J_{i,j}}{\partial x_l} \Big|_{\vec{X}} + \dots \quad (5.1.5)$$

Αν $J \left(\vec{X} \right) = 0$, τότε ο ρυθμός σύγκλισης γίνεται τετραγωνικός. Η επαναληπτική συνάρτηση που θεωρήσαμε οδηγεί σε αυτή τη σύγκλιση.

Για να δείξουμε ότι ο Ιακωβιανός πίνακας μηδενίζεται στο σημείο $\vec{x} = \vec{X}$, θεωρούμε τη μερική παράγωγο ως προς x_j του i^{th} στοιχείου της εξίσωσης (5.1.2), οπότε προκύπτει

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_i}{\partial x_j} &= \frac{\partial x_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(F^{-1}(\vec{x}) \vec{f}(\vec{x}) \right)_i \Rightarrow J_{i,j} = \frac{\partial x_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_k F_{i,k}^{-1} f_k \right) \\ &\Rightarrow J_{i,j} = \frac{\partial x_i}{\partial x_j} - \sum_k \frac{\partial F_{i,k}^{-1}}{\partial x_j} f_k - \sum_k F_{i,k}^{-1} \frac{\partial f_k}{\partial x_j} = \delta_{i,j} - \sum_k \frac{\partial F_{i,k}^{-1}}{\partial x_j} f_k - \sum_k F_{i,k}^{-1} F_{k,j} \\ &\Rightarrow J_{i,j} = \delta_{i,j} - \sum_k \frac{\partial F_{i,k}^{-1}}{\partial x_j} f_k - \delta_{i,j} = - \sum_k \frac{\partial F_{i,k}^{-1}}{\partial x_j} f_k \end{aligned}$$

Υπολογίζοντας την τιμή της συνάρτησης στο $\vec{x} = \vec{X}$ έχουμε $J_{i,j}(\vec{X}) = 0$, αφού $f_k(\vec{X}) = 0$. Συνεπώς, η Ιακωβιανή της επαναληπτικής συνάρτησης μηδενίζεται στο $\vec{x} = \vec{X}$ και η σύγκλιση είναι τετραγωνική. Το παραπάνω συμπέρασμα ισχύει εφόσον υπάρχει η $F^{-1}(\vec{X})$. Σε αντίθετη περίπτωση η σύγκλιση είναι γραμμική.

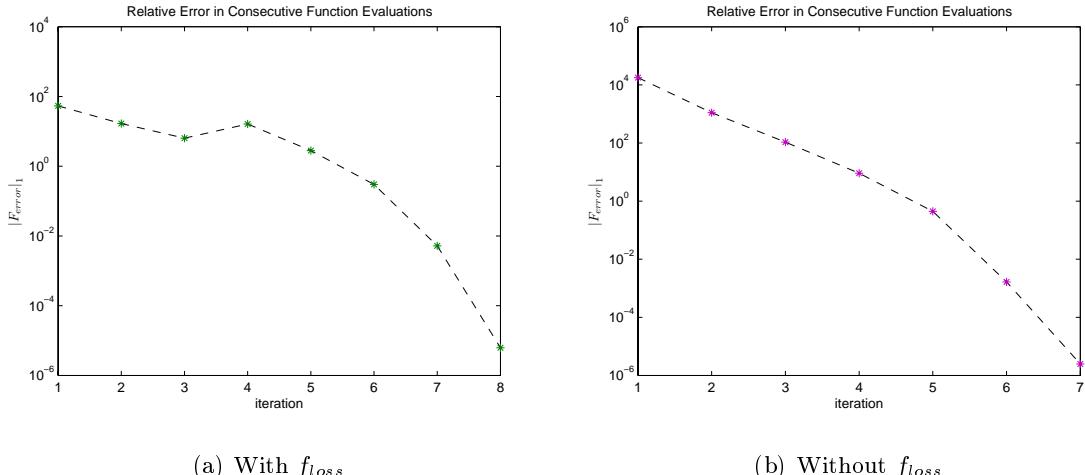
Στην παρούσα εργασία, η μέθοδος Newton χρησιμοποιείται για την επίλυση του συστήματος που μελετήσαμε στο κεφάλαιο 4. Από τη μορφή των επιμέρους εξισώσεων του συστήματος παρατηρούμε ότι είναι απαραίτητο οι μερικές τους παράγωγοι να υπολογιστούν αριθμητικά,

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j} = \frac{f_i(x_1, x_2, \dots, x_j + \epsilon_j, \dots, x_N) - f_i(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_N)}{\epsilon_j}, \quad (5.1.6)$$

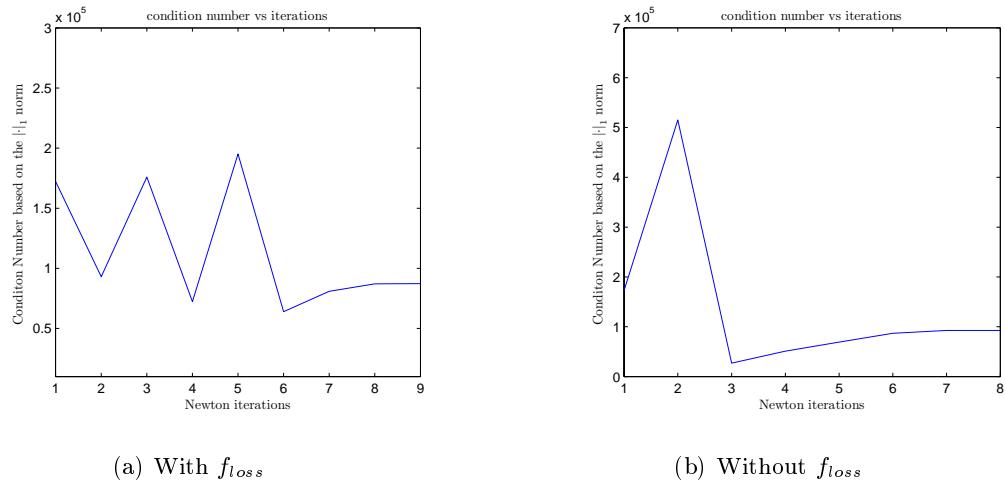
όπου ϵ_j είναι αρκετά μικροί αριθμοί. Τα f_i δίνονται από τις σχέσεις (4.4.1)-(4.4.8) και τα x_i αντιστοιχούν στις συγκεντρώσεις, τη θερμοκρασία των ηλεκτρονίων και την ογκομετρική παροχή στην έξοδο. Η αρχική προσέγγιση προσδιορίζεται από πειραματικά δεδομένα ή προηγούμενους υπολογισμούς.

5.2 Σύγκλιση

Όπως αναφέραμε και στην προηγούμενη ενότητα, εφόσον υπάρχει η $F^{-1}(\vec{X})$, η σύγκλιση της μεθόδου Newton είναι τετραγωνική. Αυτό συμβαίνει και στο πρόβλημά μας όπως φαίνεται και στα ακόλουθα σχήματα.



Σχήμα 5.1: Σχετικό σφάλμα σε διαδοχικές προσεγγίσεις των συναρτήσεων.



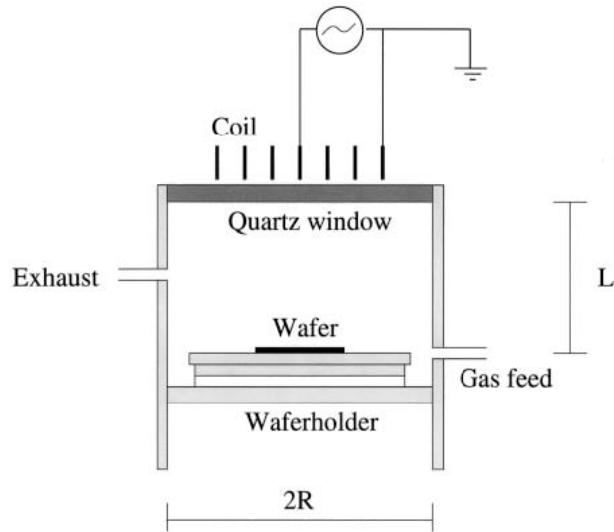
$\Sigma\chi\nu\alpha$ 5.2: Condition number vs iterations.

Κεφάλαιο 6

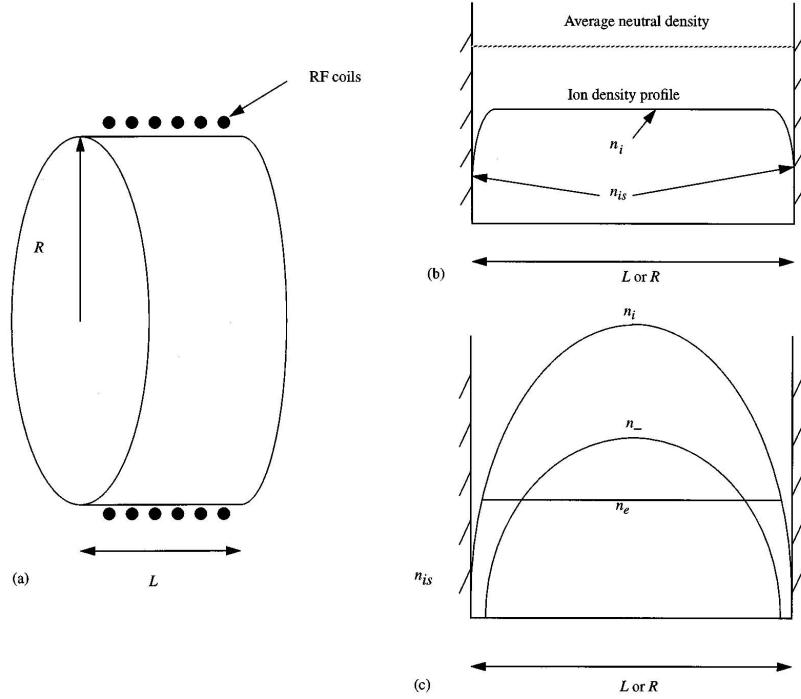
Επαλήθευση του κώδικα με χρήση αποτελεσμάτων από τη βιβλιογραφία

Στην ακόλουθη ενότητα, παραθέτουμε συγκριτικά σχήματα με προηγούμενες δουλειές σε πλάσμα οξυγόνου. Συγκεκριμένα, έχει γίνει σύγκριση με τα αποτελέσματα των Lee et al. ([8]) και των Gudmundsson et al. ([11]).

Ο αντιδραστήρας που λάβαμε υπόψη φαίνεται στο σχήμα (6.1). Πιο συγκεκριμένα, η γεωμετρία βασίζεται σε ένα αντιδραστήρα TCP, με $L = 7.5 \text{ cm}$ και $R = 15.25 \text{ cm}$ (Fig. 6.2(a)).



Σχήμα 6.1: A schematic of the planar inductive discharge. ([11])



Σχήμα 6.2: (a) Schematic of reactor geometry used in the model, (b) density profiles for an electropositive discharge, (c) density profiles for an electronegative discharge. ([8])

Για την κατάστρωση του μοντέλου οι Lee et al. έκαναν τις ακόλουθες υποθέσεις.

1. Όλες οι πυκνότητες n είναι volume averaged,

$$n = \frac{1}{\pi R^2 L} 2\pi \int_0^R r dr \int_0^L n(r, z) dz. \quad (6.0.1)$$

2. Για μία ηλεκτροθετική εκκένωση η πυκνότητα του θετικού ιόντος έχει το προφίλ που φαίνεται στο σχήμα (6.2(b)).
3. Για μια ηλεκτραρνητική εκκένωση, η πυκνότητα των ηλεκτρονίων θεωρείται ομοιόμορφη στον κύριο όγκο του πλάσματος. Η πυκνότητα του αρνητικού ιόντος θεωρείται παραβολική, πέφτωντας στο μηδέν στα άκρα. Η πυκνότητα του θετικού ιόντος ισούται με το άθροισμα των αρνητικά φορτισμένων σωματιδίων και είναι ίση με την πυκνότητα των ηλεκτρονίων στα άκρα.
4. Οι διαδικασίες απώλλειας ενέργειας στις οποίες ένα ιόν διασπάται για να σχηματίσει ένα άλλο και οι απώλλειες των συγκρούσεων των ηλεκτρονίων με τα θετικά ή αρνητικά ιόντα θεωρούνται αμελητέες (βλ. [8]).

5. Δε λαμβάνεται υπόψη η διάσπαση των μοριακών ιόντων.
6. Παράγεται μόνο ένα είδος αρνητικού ιόντος.
7. Οι παράγοντες h_L και h_R είναι ανεξάρτητοι του τύπου του ιόντος.
8. Η θερμοκρασία των ιόντων δίνεται από τη σχέση

$$T_i = 0.474/p + 0.0258,$$

όπου η πίεση p είναι εκφρασμένη σε mTorr.

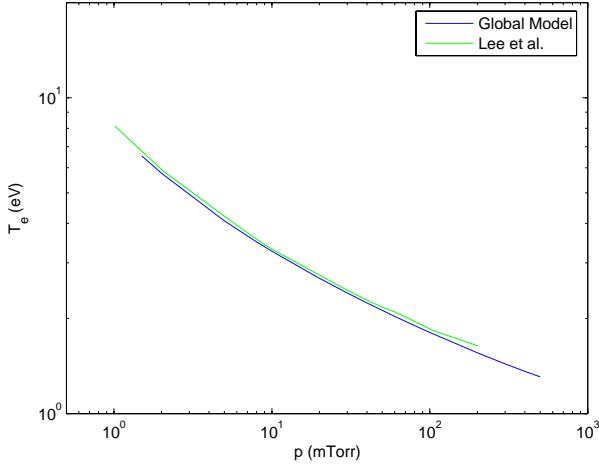
9. Η θερμοκρασία του αερίου είναι 600 K .

Το δίκτυο αντιδράσεων που χρησιμοποιήθηκε για την κατάστρωση του μοντέλου φαίνεται στον πίνακα (6.1).

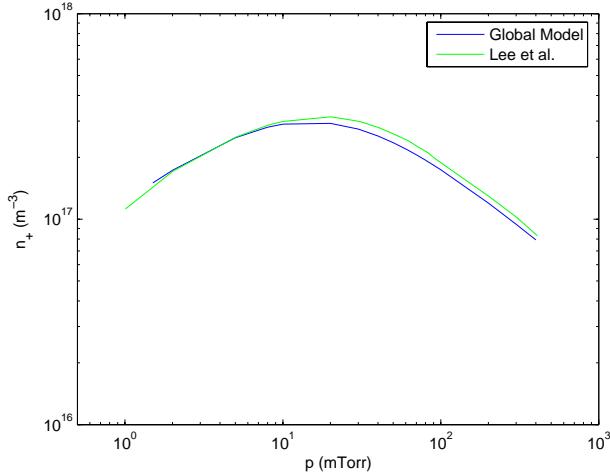
Reaction	Rate Coefficients
$O_2 + e \longrightarrow O_2^+ + 2e$	$K_1 = 9.0 \times 10^{-16} T_e^2 \exp(-12.6/T_e)$
$O_2 + e \longrightarrow O(3P) + O(1D) + e$	$K_2 = 5.0 \times 10^{-14} \exp(-8.4/T_e)$
$O_2 + e \longrightarrow O^- + O(3P)$	$K_3 = 4.6 \times 10^{-17} \exp(2.91/T_e - 12.6/T_e^2 + 6.92/T_e^3)$
$O(3P) + e \longrightarrow O^+ + 2e$	$K_4 = 9.0 \times 10^{-15} T_e^{0.7} \exp(-13.6/T_e)$
$O_2^+ + O^- \longrightarrow O_2 + O(3P)$	$K_5 = 1.4 \times 10^{-13}$
$O^- + O^+ \longrightarrow 2O(3P)$	$K_6 = 2.7 \times 10^{-13}$
$O^- + e \longrightarrow O(3P) + 2e$	$K_7 = 1.73 \times 10^{-13} \exp(-5.67/T_e + 7.3/T_e^2 - 3.48/T_e^3)$
$O_2 + e \longrightarrow 2O(3P) + e$	$K_8 = 4.23 \times 10^{-15} \exp(-5.56/T_e)$
$O_2 + e \longrightarrow O^- + O(3P)$	$K_9 = 4.47 \times 10^{-15} \exp(-2.286/T_e)$
$O_2 + O(1D) \longrightarrow O_2 + O(3P)$	$K_{10} = 4.1 \times 10^{-17}$
$O(1D) + O(3P) \longrightarrow O(3P) + O(3P)$	$K_{11} = 8.1 \times 10^{-18}$
$O(1D) + e \longrightarrow O^+ + 2e$	$K_{12} = 9.0 \times 10^{-15} T_e^{0.7} \exp(-11.6/T_e)$

Πίνακας 6.1: Oxygen Reaction Set 1 ([3])

Στο σχήμα 6.3 παρατηρούμε ότι ο κώδικας μας δίνει αποτελέσματα που ταυτίζονται με αυτά των Lee et al. Επίσης, στο σχήμα 6.4 βλέπουμε ότι κι εμείς προβλέπουμε ένα μέγιστο στην πυκνότητα των θετικών ιόντων κοντά στα 12 mTorr.



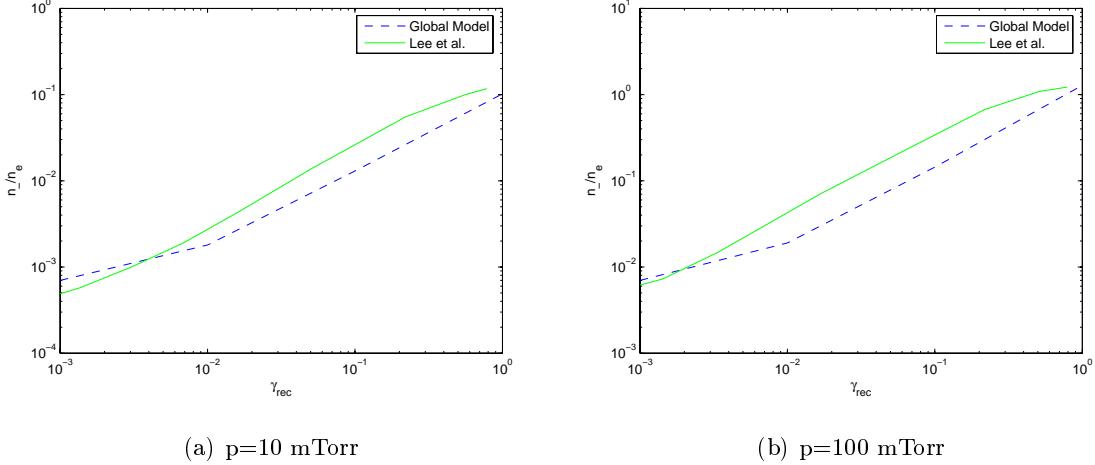
Σχήμα 6.3: Θερμοκρασία των ηλεκτρονίων σε σχέση με την πίεση για $P_{abs} = 1000W$, $Q=35$ sccm, $\gamma_{rec}=0.0$



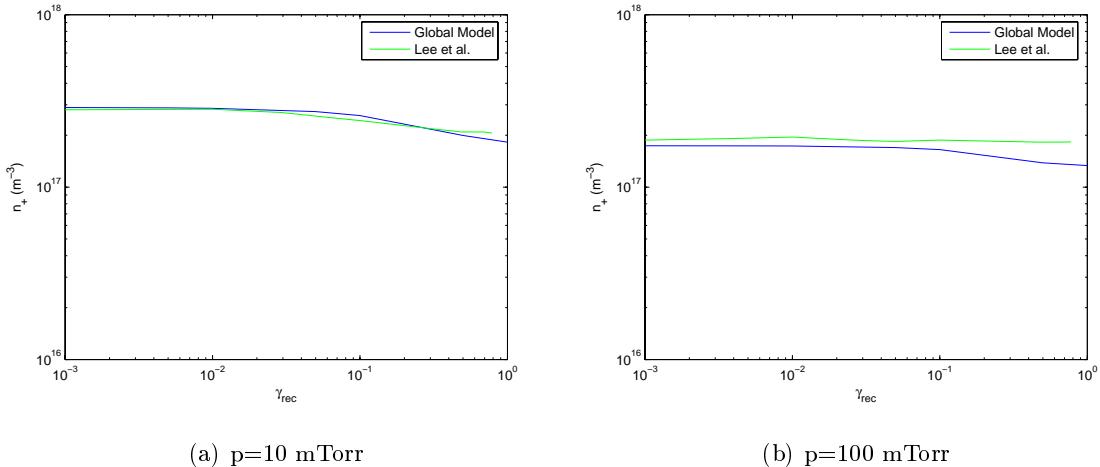
Σχήμα 6.4: Συνολική πυκνότητα των θετικών ιόντων n_+ σε σχέση με την πίεση.

Στο σχήμα 6.5 παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα του μοντέλου παρουσιάζουν διαφορές σε σχέση με τα αποτελέσματα των Lee et. al. Αυτό είναι πιθανό να συμβαίνει λόγω της θεώρησης που έχουμε κάνει στο μοντέλο ότι η πίεση παραμένει σταθερή. Τα αποτελέσματα του άρθρου δεν είναι σαφές αν έχουν υπολογιστεί βάσει αυτής της θεώρησης ή η συγκεκριμένη ομάδα θεωρεί ότι η πίεση στον αντιδραστήρα αυξάνεται. Το δεύτερο είναι αρκετά πιθανό αφού στο συγκεκριμένο άρθρο ([8]) προβλέπεται ιδιαίτερα μεγάλο κλάσμα διάσπασης (fractional

dissociation) που θα οδηγούσε σε αύξηση της πίεσης.



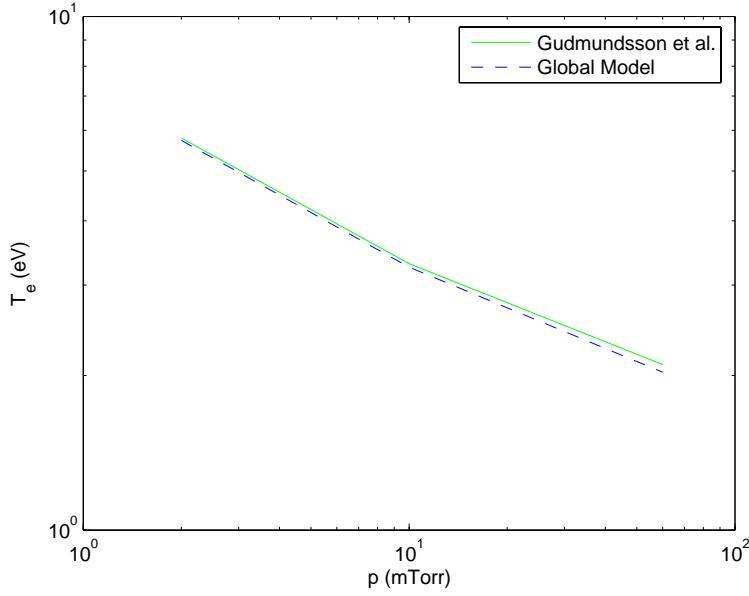
$\Sigma\chi_6.5$: Ο λόγος n_-/n_e για διάφορα γ_{rec} .



$\Sigma\chi_6.6$: Η πυκνότητα n_{O+} για διάφορα γ_{rec} .

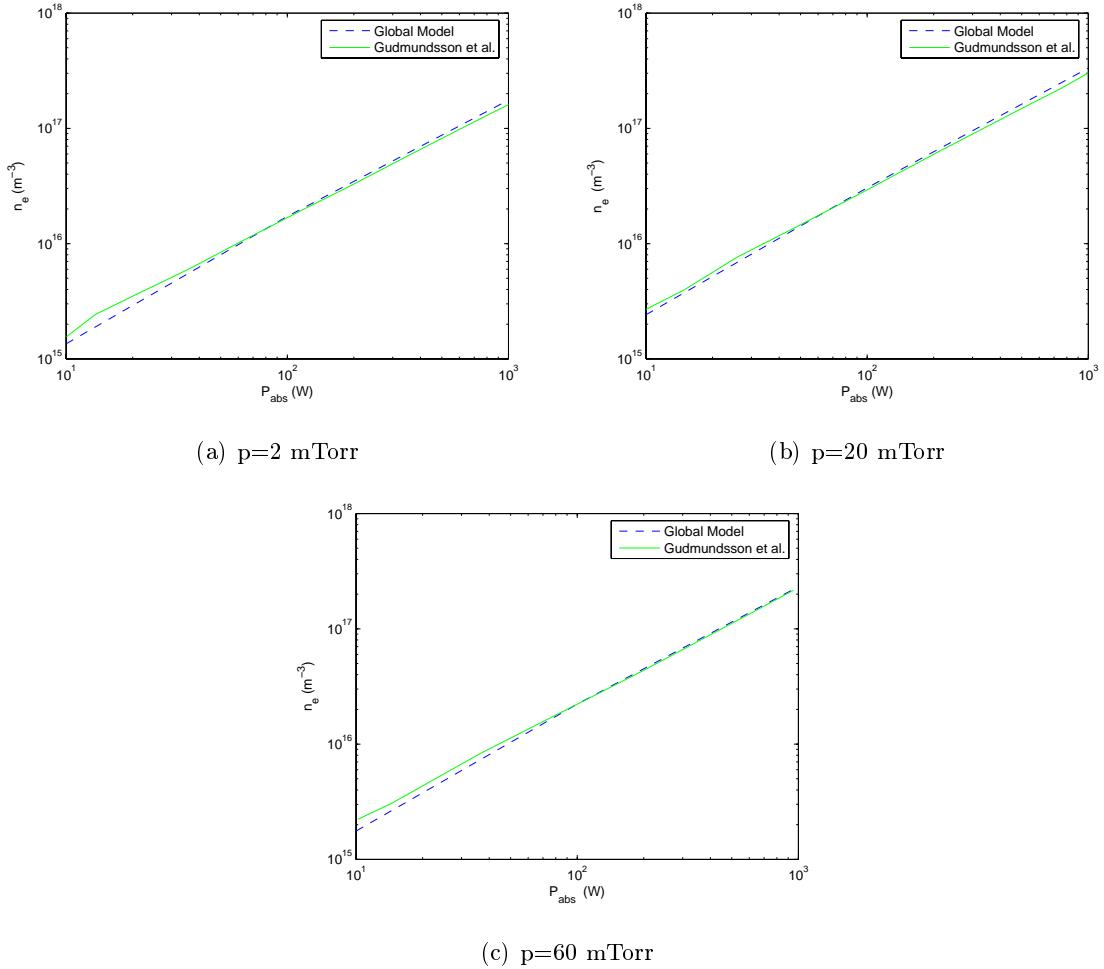
Από το σχήμα 6.6 βλέπουμε ότι το μοντέλο μας δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα σε σχέση με το [8].

Τα σχήματα που ακολουθούν είναι συγκρίσεις με τα αποτελέσματα των Gudmundsson et al., 1998. Το δίκτυο που χρησιμοποιήθηκε είναι ίδιο με πριν (πίνακας 6.1). Για τις συγκρίσεις αυτές πήραμε $\gamma_{rec} = 2 \times 10^{-4}$ και $Q=5\text{sccm}$.

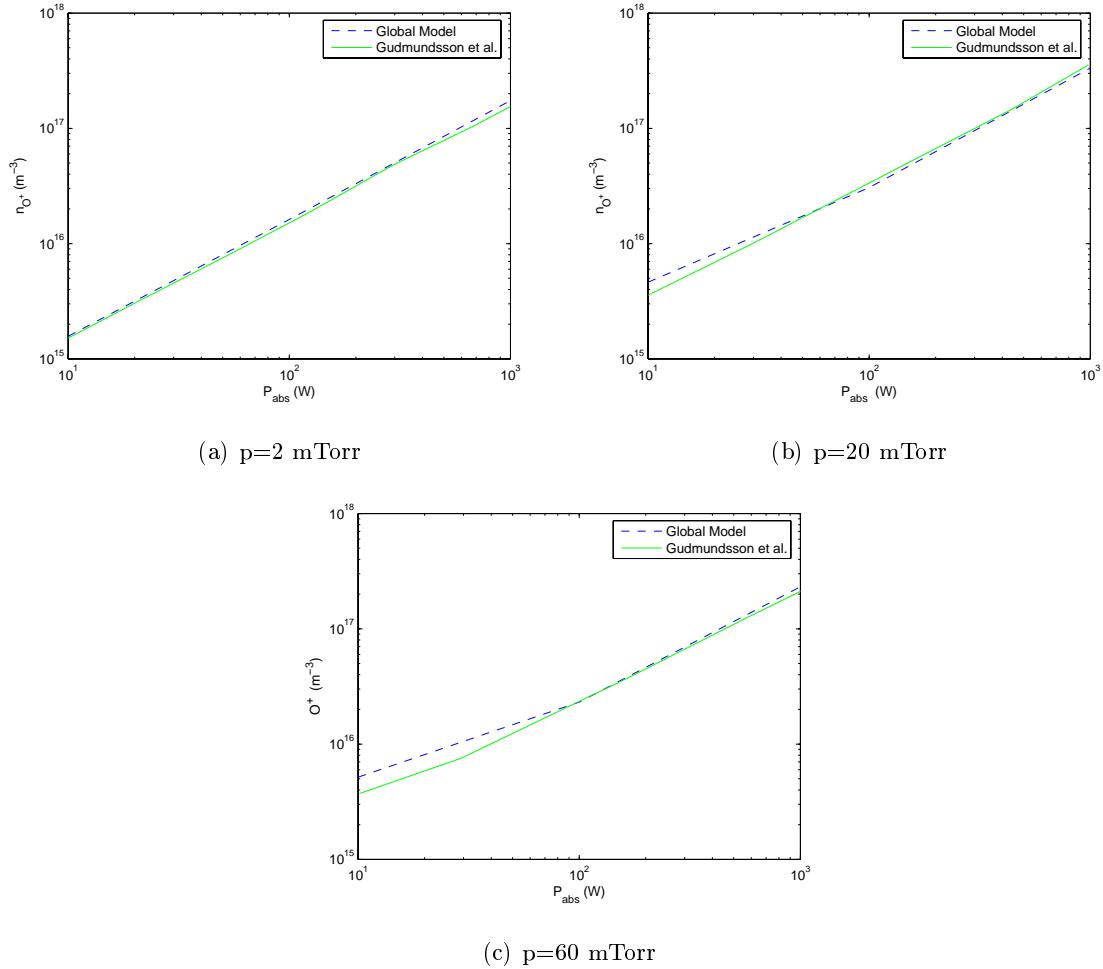


Σχήμα 6.7: Θερμοκρασία ηλεκτρονίων σε σχέση με την πίεση για $P_{abs} = 500 \text{ W}$, $Q=5\text{sccm}$, $\gamma_{rec} = 2 \times 10^{-4}$.

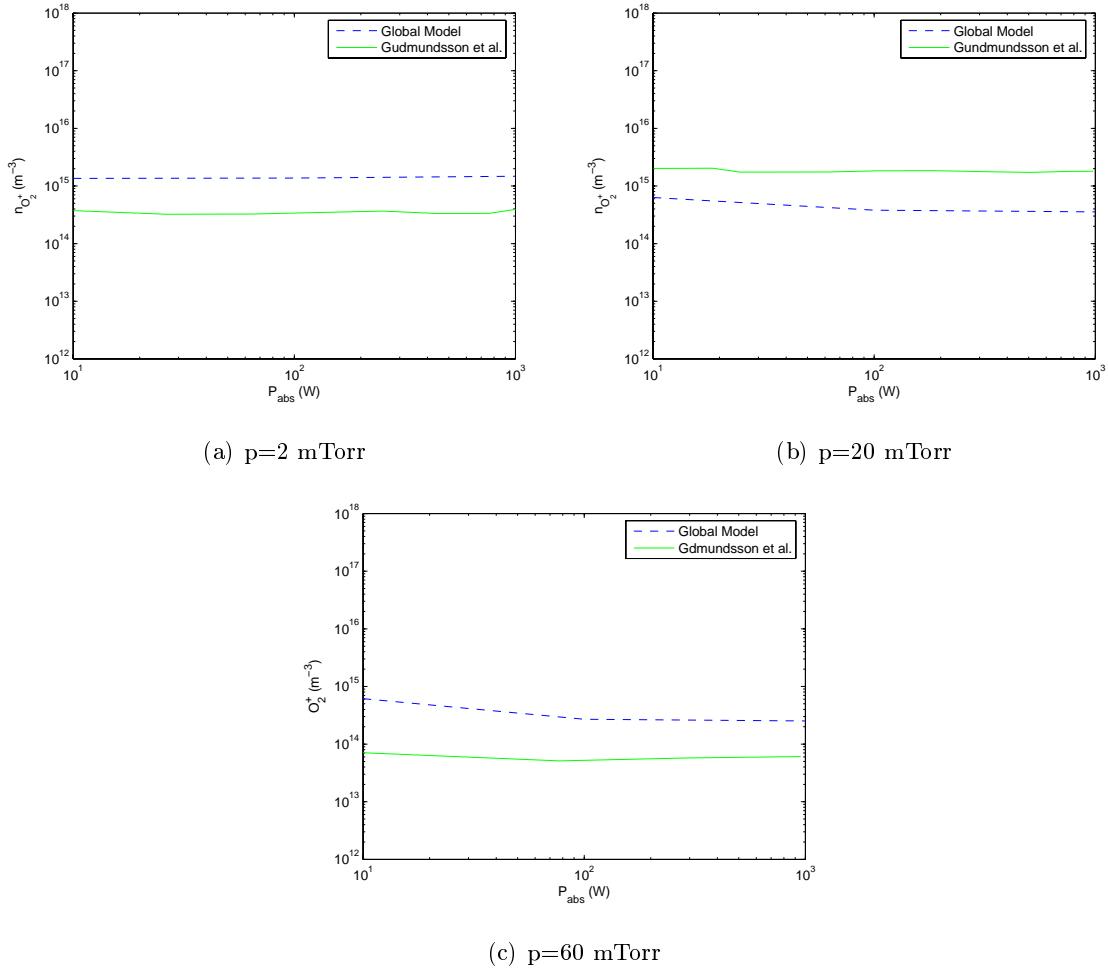
Η σύγκριση με τα αποτελέσματα των Gudmundsson et al. είναι πολύ καλή, όπως φαίνεται και στα σχήματα (6.7), (6.8), (6.9), (6.12) και (6.14). Ωστόσο, παρατηρούμε μια μικρή διαφοροποίηση στις πυκνότητες του μοριακού οξυγόνου, του μοριακού ιόντος καθώς και του αρνητικού ιόντος (σχήματα (6.13), (6.10), (6.11)). Η διαφοροποίηση αυτή πιθανόν και πάλι να οφείλεται στο ότι δε γνωρίζουμε ποια θεώρηση έχει κάνει η ομάδα των Gudmundsson et al. σχετικά με την πίεση και τη ρύθμιση της βαλβίδας.



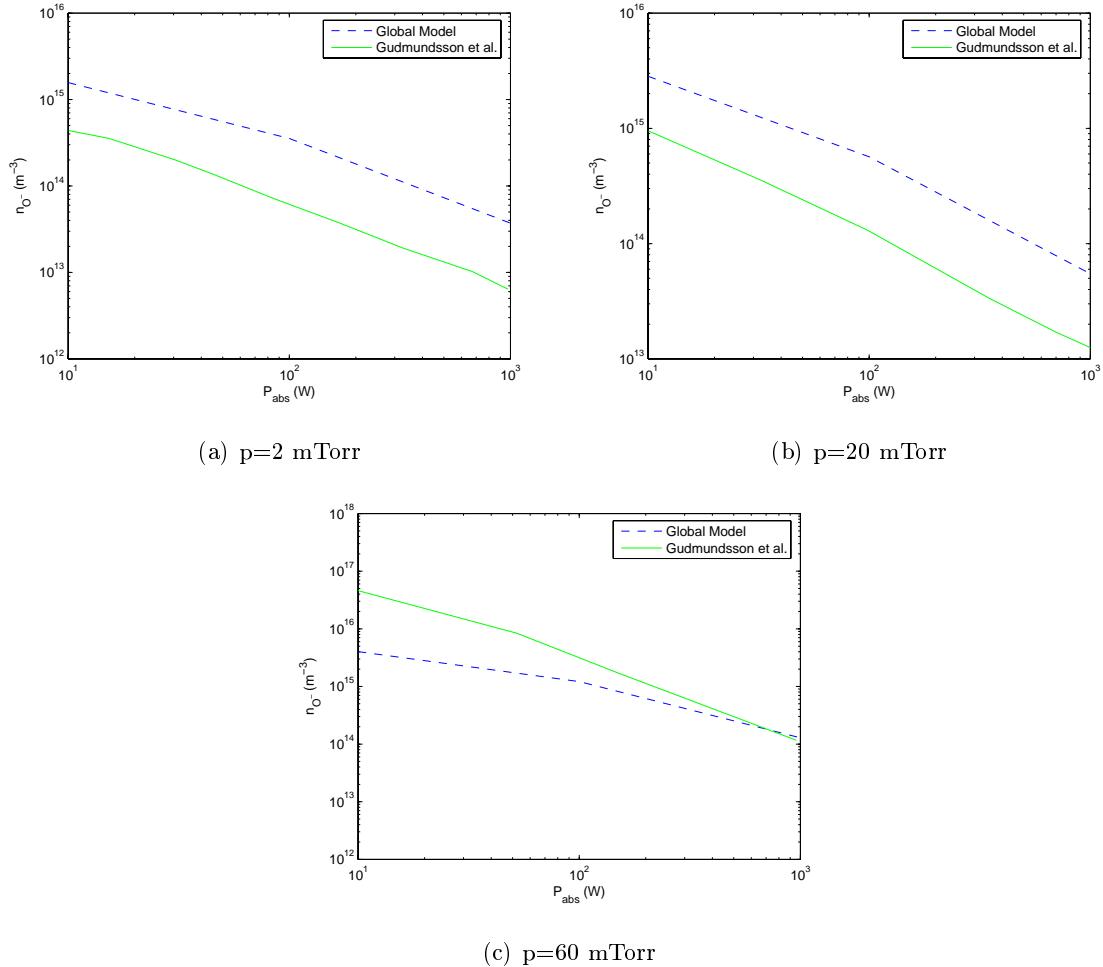
Σχήμα 6.8: Η πυκνότητα των ηλεκτρονίων για διαφορετική ισχύ και διαφορετική πίεση.



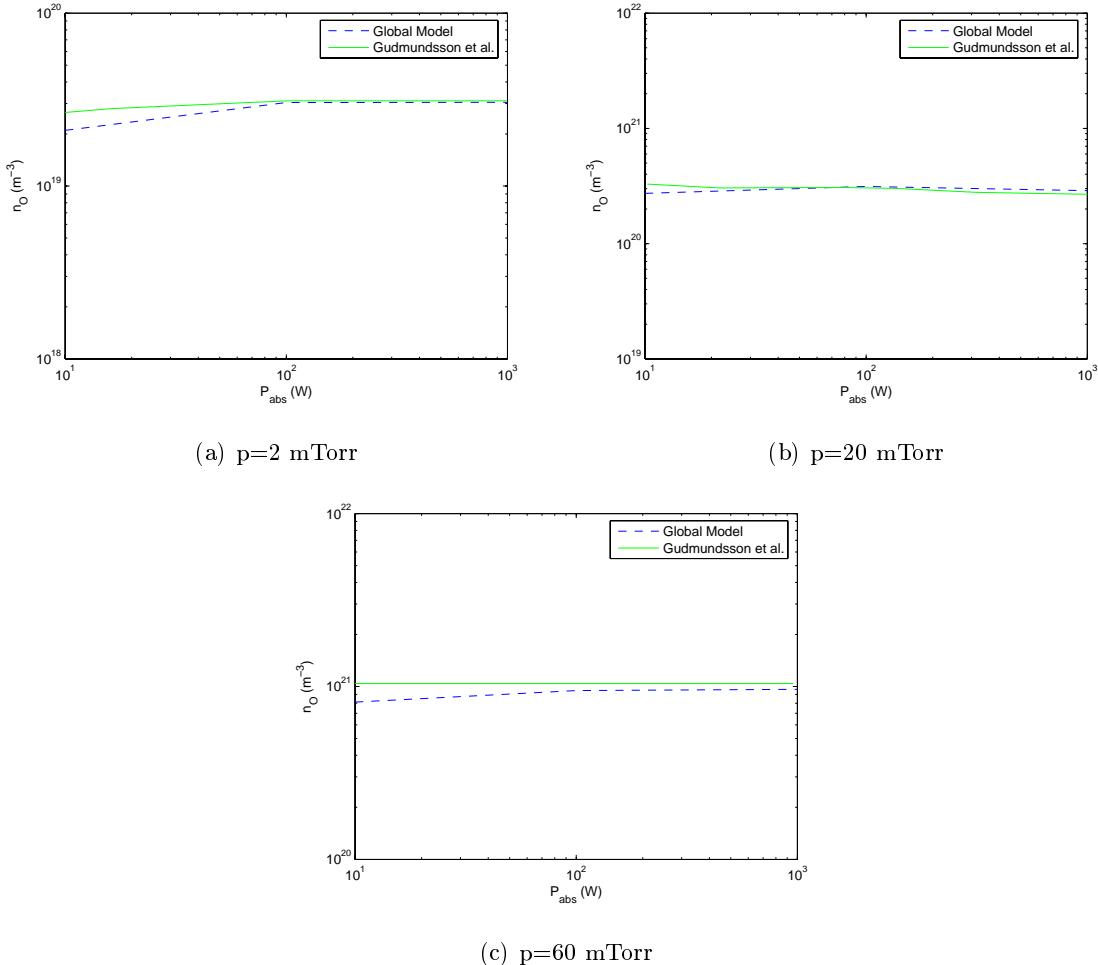
Σχήμα 6.9: Η πυκνότητα του O^+ για διαφορετική ισχύ και διαφορετική πίεση.



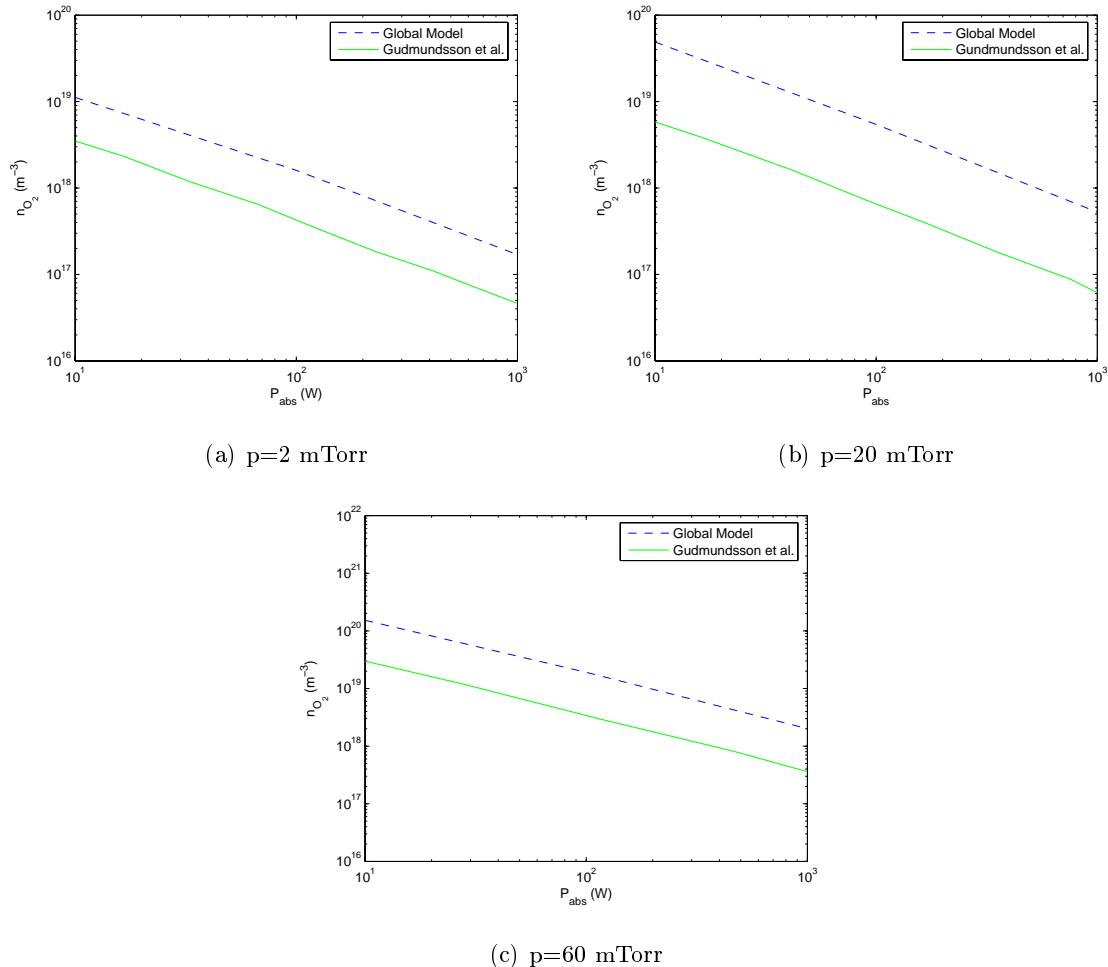
Σχήμα 6.10: Η πυκνότητα του O_2^+ για διαφορετική ισχύ και διαφορετική πίεση.



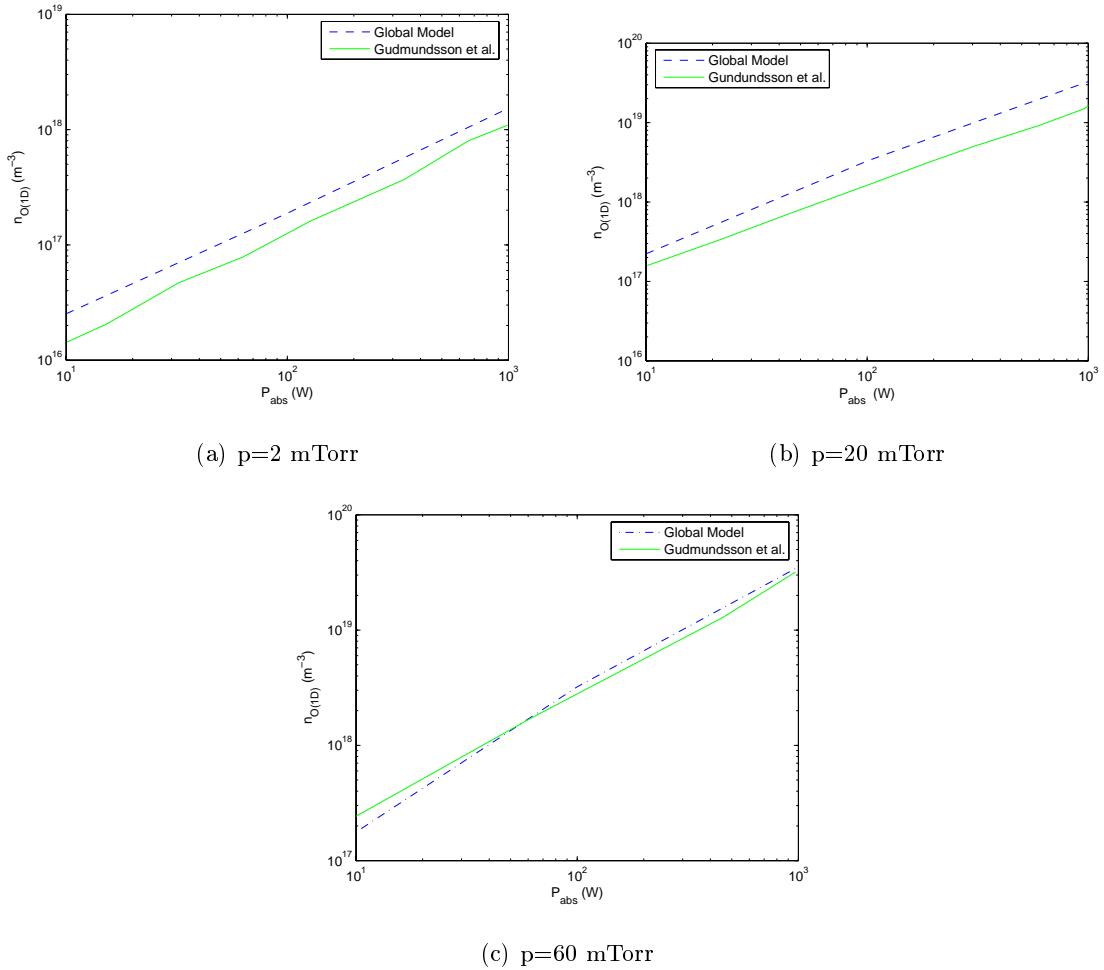
Σχήμα 6.11: Η πυκνότητα του O^- για διαφορετική ισχύ και διαφορετική πίεση.



Σχήμα 6.12: Η πυκνότητα του ατομικού οξυγόνου για διαφορετική ισχύ και διαφορετική πίεση.



Σχήμα 6.13: Η πυκνότητα του μοριακού οξυγόνου για διαφορετική ισχύ και διαφορετική πίεση.



Σχήμα 6.14: Η πυκνότητα του μετασταθούς ατομικού οξυγόνου $O(1D)$ για διαφορετική ισχύ και διαφορετική πίεση.

Κεφάλαιο 7

Εφαρμογή

Στο κεφάλαιο αυτό θα παρουσιάσουμε κάποια αποτελέσματα εφαρμογής του κώδικα στον αντιδραστήρα δύο θαλάμων (σχ.(3.1)). Στην πρώτη ενότητα, θα εξετάσουμε την επίδραση της προσθήκης μαγνητικού πεδίου στο θάλαμο του αντιδραστήρα. Στη συνέχεια, θα μελετήσουμε την επίδραση παραμέτρων που δεν είναι γνωστές με ακρίβεια στα αποτελέσματα. Τέλος, θα παρουσιάσουμε συγκρίσεις με πειραματικά δεδομένα σε πλάσμα O_2 στον αντιδραστήρα ICP του Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής.

7.1 Επίδραση του μαγνητικού πεδίου

Στην ενότητα αυτή θα μελετήσουμε την επίδραση των δύο μαγνητικών πεδίων που δημιουργούνται, από το πηνίο στο άνω τμήμα και από του μαγνήτες στο κάτω τμήμα του αντιδραστήρα αντίστοιχα.

7.1.1 Επίδραση του μαγνητικού πεδίου των μόνιμων μαγνητών στο κάτω τμήμα του αντιδραστήρα

Στην ενότητα αυτή θα μελετήσουμε την επίδραση του μαγνητικού στο θάλαμο του αντιδραστήρα (όγκος V_2 , σχ. (3.1)). Όπως αναφέραμε και στο κεφάλαιο 3, για το γενικό μοντέλο, γύρω από το θάλαμο του αντιδραστήρα υπάρχουν 14 μαγνήτες. Οι μαγνήτες αυτοί δημιουργούν ένα ισχυρό μαγνητικό πεδίο κοντά στα τοιχώματα του αντιδραστήρα, εμποδίζοντας τις απώλειες στα τοιχώματα και οδηγώντας σε αύξηση της πυκνότητας του πλάσματος.

Για να ενσωματώσουμε την επίδραση αυτή στο μοντέλο μας θεωρήσαμε ένα συντελεστή ([67]), ο οποίος παίρνει τιμές ≤ 1 , και δίνεται από τη σχέση

$$f_{loss} = \frac{Nw}{2\pi R_2} \quad (7.1.1)$$

όπου

$$w = \frac{2}{\pi} \sqrt{r_{ce} r_{ci}} \cdot \frac{d}{\sqrt{\lambda_e \lambda_i}} \quad (7.1.2)$$

είναι το effective leak width και

$$r_{ce} \approx \frac{3.37\sqrt{E_e}}{B_0} \quad \text{και} \quad r_{ci} \approx \frac{1.44\sqrt{E_i m_g}}{B_0} \quad (\text{cm})$$

είναι η γυροσκοπική ακτίνα των ηλεκτρονίων και των ιόντων αντίστοιχα και B_0 είναι το μαγνητικό πεδίο που δημιουργείται από τους μαγνήτες, m_g είναι η μάζα του ιόντος σε amu (atomic mass units) και τα E_e και E_i δίνονται από τις σχέσεις

$$E_e = \frac{3}{2}T_e \quad \text{και} \quad E_i = \frac{3}{2}T_i$$

όπου τα T_e και T_i είναι σε Volt.

Πολλαπλασιάζοντας τις ροές στα τοιχώματα με το συντελεστή f_{loss} παίρνουμε τελικά

$$\Gamma_{wall} = f_{loss} n u_B \quad (7.1.3)$$

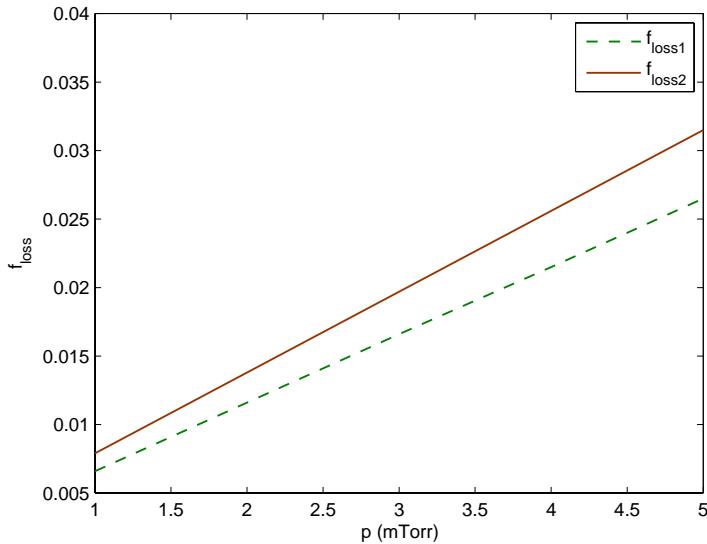
όπου παρατηρούμε ότι οι απώλειες στα τοιχώματα θα είναι μικρότερες καθώς έχουν πολλαπλασιαστεί με όρο μικρότερο της μονάδας.

Οι παραπάνω συλλογισμοί και παρατηρήσεις φαίνονται και στα σχήματα που ακολουθούν. Οι παράμετροι εισόδου που χρησιμοποιήσαμε φαίνονται στον πίνακα (7.1).

Στο σχήμα (7.1) παρατηρούμε ότι ο συντελεστής f_{loss} αυξάνεται γραμμικά σε σχέση με την πίεση. Το f_{loss1} του σχήματος αντιστοιχεί στο O^+ και το f_{loss2} στο O_2^+ . Παρατηρούμε λοιπόν από το σχήμα πως ο συντελεστής f_{loss2} είναι συνεχώς μεγαλύτερος από το f_{loss1} . Αυτό έχει σαν συνέπεια να έχουμε μεγαλύτερη απώλεια O^+ στα τοιχώματα σε σχέση με το O_2^+ .

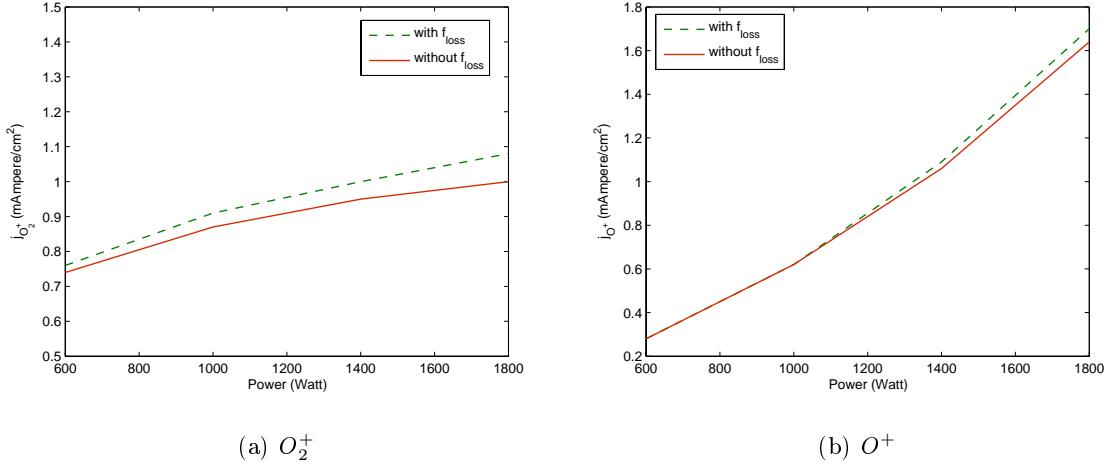
P_{abs}	1800 Watt
p	1.35 Pa
Q	100 sccm
T_g	400 K
γ_{rec}	0.1
B_0	875 Gauss
B	0 Gauss

Πίνακας 7.1: Παράμετροι εισόδου για τη μελέτη επίδρασης του μαγνητικού πεδίου στο θάλαμο του αντιδραστήρα.

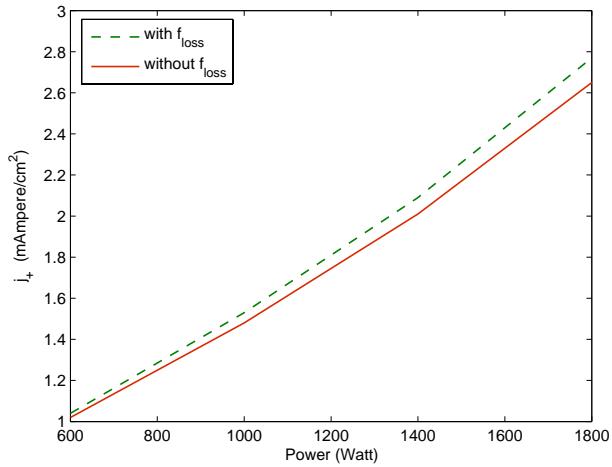


Σχήμα 7.1: Ο συντελεστής f_{loss} σε σχέση με την πίεση ($Q=100$ sccm, $P = 1800$ Watt, $T = 600$ K)

Στα σχήματα (7.2) και (7.3) παρατηρούμε ότι η προσθήκη του f_{loss} οδηγεί σε πολύ μικρή αύξηση του ρεύματος ως προς την ισχύ σε σχέση με το μοντέλο χωρίς τους μαγνήτες.

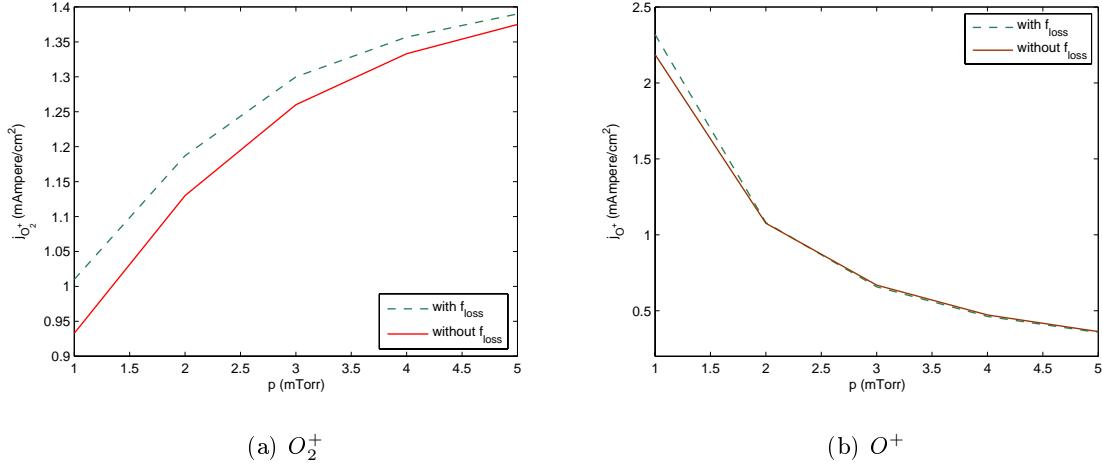


Σχήμα 7.2: Ροή ιόντων σε σχέση με την ισχύ ($Q=100$ sccm, $p = 1.35$ Pa, $\gamma_{rec} = 1e-1$, $T = 400$ K).

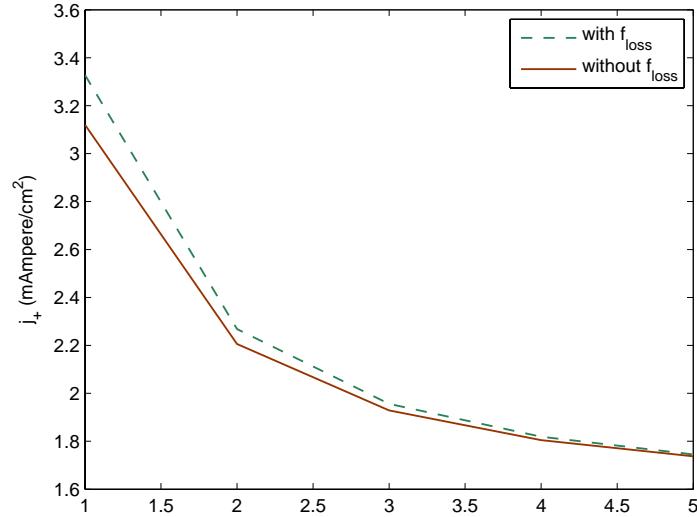


Σχήμα 7.3: Η ροή ιόντων σε σχέση με την ισχύ ($Q=100$ sccm, $p = 1.35$ Pa, $\gamma_{rec} = 1e-1$, $T = 400$ K).

Επίσης, από τα σχήματα (7.4) και (7.5) βλέπουμε ότι το f_{loss} προκαλεί αύξηση του ρεύματος ως προς την πίεση σε σχέση με το μοντέλο χωρίς μαγνήτες. Το γεγονός αυτό οφείλεται στο ότι, ο συντελεστής f_{loss} περιορίζοντας τις απώλειες στα τοιχώματα αυξάνει την πυκνότητα του ρεύματος και κατά συνέπεια τη ροή ιόντων.

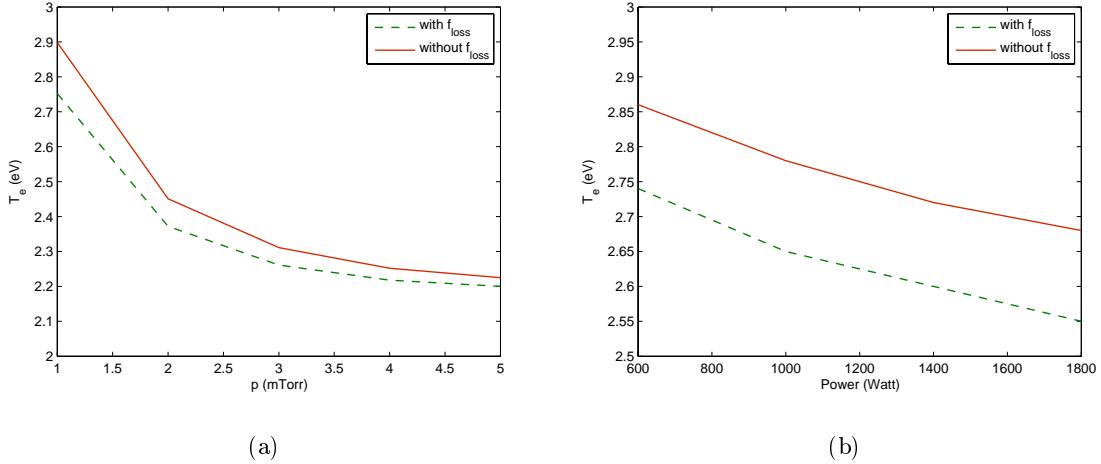


Σχήμα 7.4: Ροή ιόντων σε σχέση με την πίεση ($Q=100\text{sccm}$, $P_{abs} = 1800W$, $\gamma_{rec} = 0.1$, $T = 400K$).



Σχήμα 7.5: Ροή ιόντων σε σχέση με την πίεση ($Q=100\text{sccm}$, $P_{abs} = 1800W$, $\gamma_{rec} = 0.1$, $T = 400K$).

Η θερμοκρασία των ηλεκτρονίων μειώνεται και ως προς την πίεση αλλά και ως προς την ισχύ λόγω του μαγνητικού πεδίου (σχ. 7.6).



Σχήμα 7.6: Θερμοκρασία των ηλεκτρονίων: (a) ως προς την πίεση, (b) ως προς την ισχύ ($p = 1.35 \text{ Pa}$, $\gamma_{rec} = 0.1$, $T = 400K$).

7.1.2 Επίδραση του μαγνητικού πεδίου στο άνω τμήμα του αντιδραστήρα

Στην ενότητα αυτή θα δείξουμε την επίδραση του μαγνητικού πεδίου που δημιουργείται από το πηνίο στον άνω κύλινδρο του αντιδραστήρα. Για να λάβουμε υπόψη την επίδραση αυτή αντικαθιστούμε το h_{R_1} με το $h_{R_{1\perp}}$ που ορίζεται ως

$$h_{R_{1\perp}} = \frac{1 + (3\alpha)/\gamma}{1 + \alpha} \frac{0.8}{\left(4 + \frac{R_1}{\lambda} + \left(\frac{0.8R_1 u_B}{2.405(J_1(2.405))D_{\alpha\perp}}\right)^2\right)^{1/2}}, \quad (7.1.4)$$

όπου

$$D_{\perp\alpha} = \frac{\mu_{\perp i} D_{\perp e} + \mu_{\perp e} D_{\perp i}}{\mu_{\perp i} + \mu_{\perp e}} \quad (7.1.5)$$

με

$$D_{\perp i} = \frac{D_i}{1 + (\omega_i/\nu_i)^2}, \quad (\text{perpendicular ion diffusion}) \quad (7.1.6)$$

$$D_{\perp e} = \frac{D_e}{1 + (\omega_e/\nu)^2}, \quad (\text{perpendicular electron diffusion}) \quad (7.1.7)$$

$$\mu_{\perp i} = \frac{\mu_i}{1 + (\omega_i/\nu_i)^2}, \quad (\text{perpendicular ion mobility}) \quad (7.1.8)$$

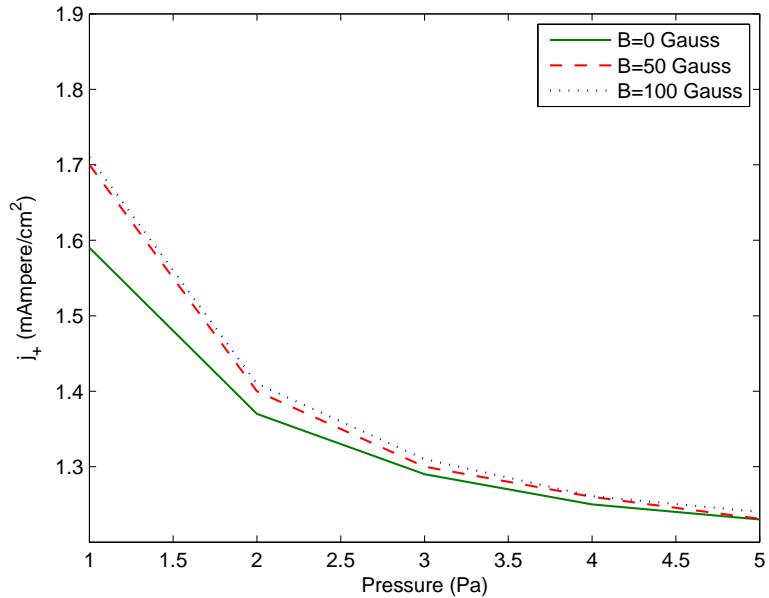
και

$$\mu_{\perp e} = \frac{\mu_e}{1 + (\omega_e/\nu)^2}, \quad (\text{perpendicular electron mobility}) \quad (7.1.9)$$

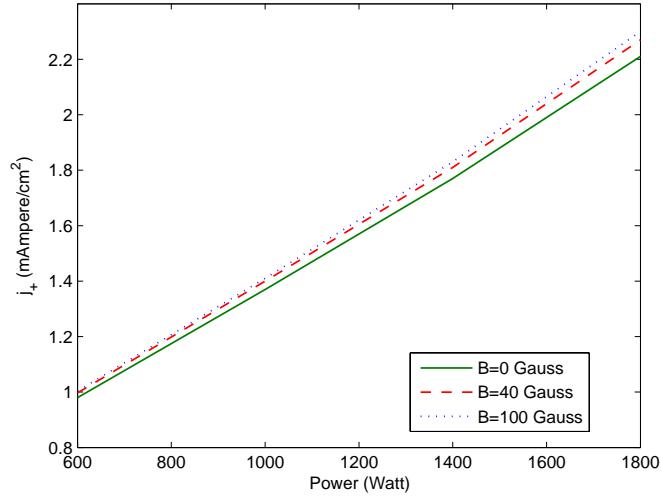
Όπως δείξαμε στην προηγούμενη ενότητα ο συντελεστής f_{loss} αυξάνεται με την πίεση. Συνεπώς για να διατηρήσουμε την επίδραση του cusp σταθερή, ώστε να φανεί η επίδραση του πηνίου, θεωρήσαμε ότι δεν υπάρχει μαγνητικό πεδίο στον κάτω όγκο του αντιδραστήρα. Οι παράμετροι εισόδου που χρησιμοποιήσαμε φαίνονται στον πίνακα (7.3).

P_{abs}	1000 Watt
p	2.0 Pa
Q	100 sccm
T_g	400 K
γ_{rec}	0.1
B_0	0 Gauss

Πίνακας 7.2: Παράμετροι εισόδου για τη μελέτη επίδρασης κάποιων βασικών παραμέτρων σε πλάσμα οξυγόνου.

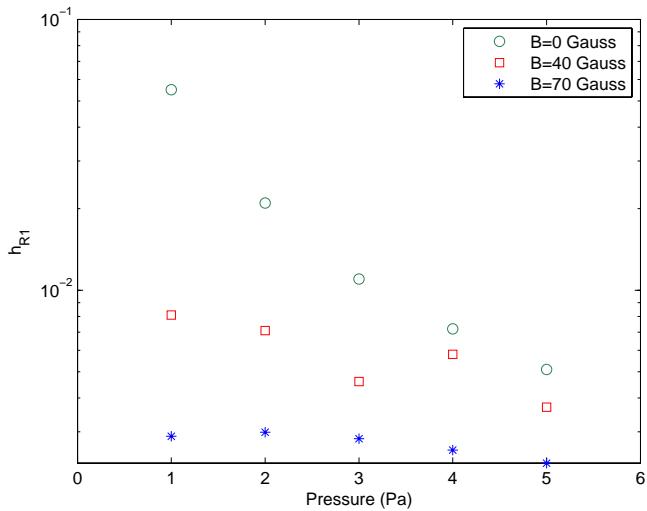


Σχήμα 7.7: Επίδραση του μαγνητικού πεδίου που δημιουργείται από το πηνίο στον άνω όγκο του αντιδραστήρα. Στο σχήμα φαίνεται η ροή ιόντων j_+ ως προς την πίεση για διάφορες τιμές του B .



Σχήμα 7.8: Επίδραση του μαγνητικού πεδίου που δημιουργείται από το πηνίο στον άνω όγκο του αντιδραστήρα. Στο σχήμα φαίνεται η ροή ιόντων j_+ ως προς την πίεση για διάφορες τιμές του B .

Από τα σχήματα (7.7) και (7.8) βλέπουμε ότι το μαγνητικό πεδίο που δημιουργείται στον πάνω όγκο του αντιδραστήρα έχει μικρή επίδραση στη ροή ιόντων του πλάσματος. Παρατηρούμε ωστόσο πως για μικρές πιέσεις η επίδραση αυτή ενισχύεται. Για να καταλάβουμε το μηχανισμό αυτό αρκεί να μελετήσουμε την επίδραση του μαγνητικού πεδίου B στο h_{R1} .



Σχήμα 7.9: Επίδραση του μαγνητικού πεδίου στο h_{R1} .

Στο σχήμα (7.9) παρατηρούμε ότι το $hR1$ μειώνεται αισθητά με την προσθήκη της επίδρασης του μαγνητικού λόγω του πηνίου. Επίσης, βλέπουμε πως η μεγαλύτερη μείωση συμβαίνει για τις χαμηλότερες πιέσεις. Το γεγονός αυτό εξηγεί και τη διαπίστωση που κάναμε πριν σχετικά με το σχήμα (7.7), ότι δηλαδή ιδιαίτερα για μικρές πιέσεις η επίδραση του μαγνητικού πεδίου είναι σημαντική.

7.2 Επίδραση Παραμέτρων

Στην ενότητα αυτή θα εξετάσουμε την επίδραση δύο βασικών παραμέτρων της αέριας φάσης του πλάσματος οξυγόνου στα αποτελέσματα του μοντέλου.

Η πρώτη από αυτές τις παραμέτρους είναι ο συντελεστής επανασύνδεσης γ_{rec} (recombination coefficient). Για το συντελεστή αυτό υπάρχουν πολλές αναφορές στη βιβλιογραφία ([8], [11], [19], [58]). Ωστόσο, ειδικά στην περίπτωση του οξυγόνου, δεν έχει γίνει αποδεκτή μία τιμή καθώς υπάρχουν διαφορετικές προτάσεις από τις διάφορες ομάδες. Εξάλλου, ο συντελεστής αυτός εξαρτάται σε κάποιο βαθμό και από τον τύπο του αντιδραστήρα που θεωρούμε. Για το λόγο αυτό, η επιλογή του γ_{rec} γίνεται συνήθως βάσει της καλύτερης προσέγγισης στα πειραματικά δεδομένα.

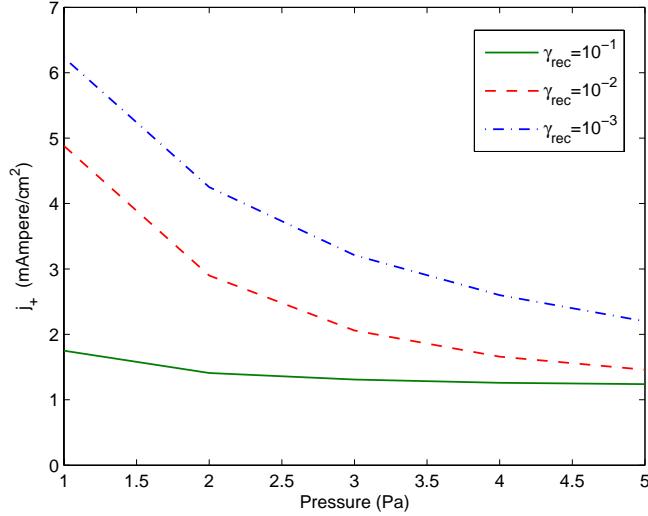
Οι παράμετροι εισόδου που χρησιμοποιήσαμε φαίνονται στον πίνακα (7.3).

P_{abs}	1000 Watt
p	1.35 Pa
Q	100 sccm
T_g	400 K
γ_{rec}	0.1
B_0	875 Gauss
B	20 Gauss

Πίνακας 7.3: Παράμετροι εισόδου για τη μελέτη επίδρασης κάποιων βασικών παραμέτρων σε πλάσμα οξυγόνου.

Επιλέξαμε κάποιες χαρακτηριστικές τιμές για το γ_{rec} για να δούμε πως επιδρά στο μοντέλο (10^{-1} , 10^{-2} και 10^{-3}). Τα τρεξίματα έγιναν με $Q = 100 \text{ sccm}$, $P_{abs} = 1000 \text{ Watt}$, $B = 20 \text{ Gauss}$, $B_0 = 875 \text{ Gauss}$ και $T_g = 400 \text{ K}$.

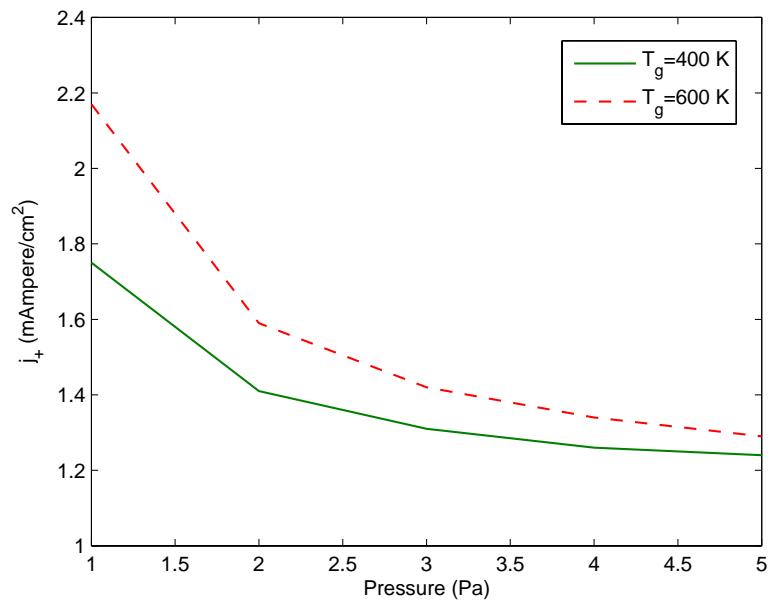
Από το σχήμα (7.10) παρατηρούμε ότι αυξανόμενου του γ_{rec} έχουμε μείωση της ροής ιόντων. Επίσης, βλέπουμε πως για μικρά γ_{rec} η μείωση της ταχύτητας έχει μεγαλύτερη επίδραση απ' ότι για $\gamma_{rec} = 0.1$.



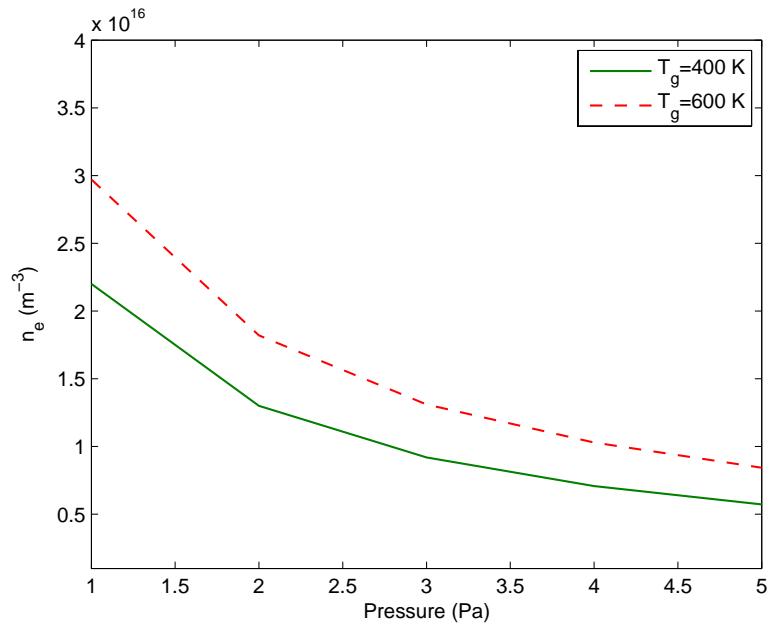
Σχήμα 7.10: Ροή ιόντων ως προς την πίεση για διάφορες τιμές του γ_{rec} .

Μία ακόμη σημαντική παράμετρος στο μοντέλο μας είναι η θερμοκρασία του αερίου T_g . Όπως και για το συντελεστή επανασύνδεσης, έτσι και για τη θερμοκρασία του αερίου δεν είμαστε απόλυτα βέβαιοι για την τιμή που πρέπει να βάλουμε σαν είσοδο. Έχουμε επιλέξει δύο χαρακτηριστικές τιμές που χρησιμοποιούνται και στη βιβλιογραφία $T_g = 400\text{ K}$ ([11]) και $T_g = 600\text{ K}$ ([8]). Τα τρεξίματα έγιναν με $Q = 100\text{ sccm}$, $P_{abs} = 1000\text{ Watt}$, $B = 20\text{ Gauss}$, $B_0 = 875\text{ Gauss}$ και $\gamma_{rec} = 0.1$.

Από τα σχήματα (7.11) και (7.12) παρατηρούμε ότι αύξηση στη θερμοκρασία του αερίου προκαλεί σημαντική αύξηση στη ροή ιόντων και στην πυκνότητα των ηλεκτρονίων. Συνεπώς, η επιλογή του T_g επιδέχεται περαιτέρω προσοχής και μελέτης καθώς αφενός δεν γνωρίζουμε την τιμή του και αφετέρου η επίδρασή του είναι σημαντική. Αξίζει επίσης να παρατηρήσουμε ότι στη βιβλιογραφία, όσον αφορά στα global models, το T_g παίρνει τιμές από 300K μέχρι και 600K.



Σχήμα 7.11: Ροή ιόντων ως προς την πίεση και σε σχέση με το T_g .



Σχήμα 7.12: Πυκνότητα ηλεκτρονίων ως προς την πίεση.

7.3 Σύγκριση με πειραματικά δεδομένα

Στην ενότητα αυτή θα παρουσιάσουμε κάποιες συγκρίσεις με πειραματικά δεδομένα. Οι μετρήσεις έγιναν στο Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής του Δημοκρίτου από τον υποψήφιο διδάκτορα Νίκο Βούρδα.

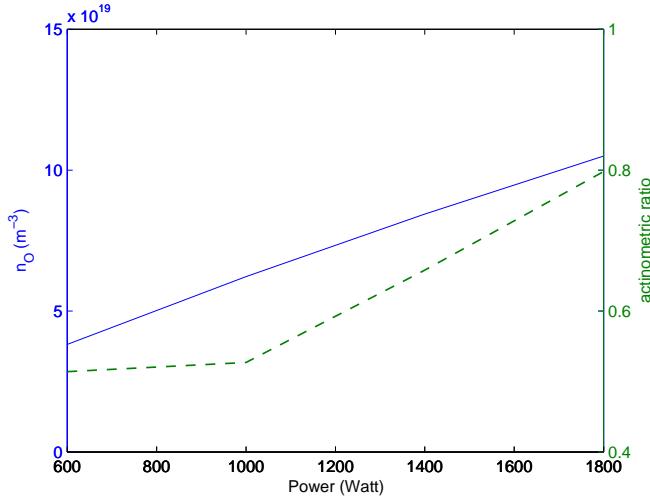
Οι παράμετροι εισόδου που χρησιμοποιήσαμε στην ενότητα αυτή φαίνονται στον πίνακα (7.4).

P_{abs}	1000 Watt
p	1.35 Pa
Q	100 sccm
T_g	400 K
γ_{rec}	0.1
B_0	875 Gauss
B	20 Gauss

Πίνακας 7.4: Παράμετροι εισόδου για σύγκριση με πειραματικά δεδομένα.

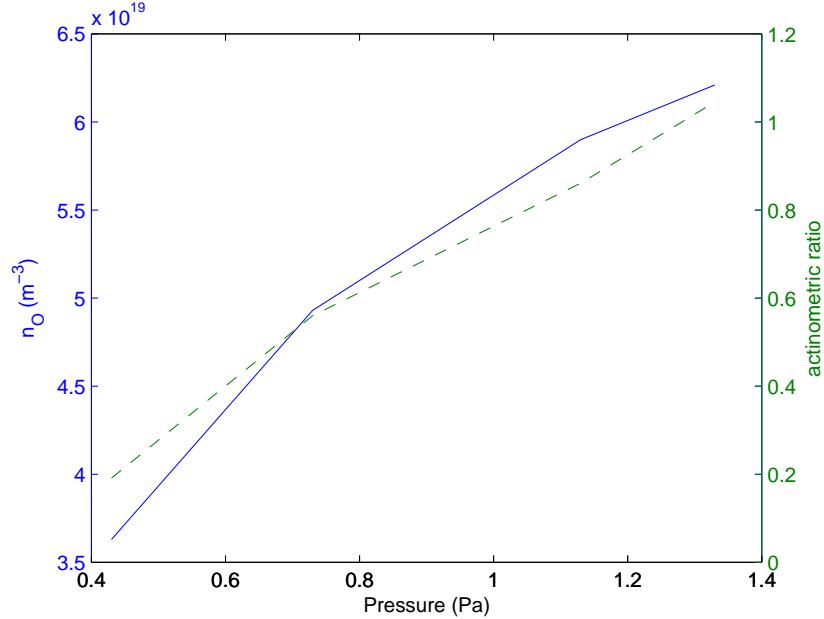
7.3.1 Ακτινομετρικός λόγος

Ένα από τα πειραματικά δεδομένα με τα οποία μπορούμε να κάνουμε συγκρίσεις είναι ο ακτινομετρικός λόγος(actinometric) που μετράται με τη μέθοδο της ακτινομετρίας. Ο λόγος αυτός αποτελεί ένδειξη της πυκνότητας του ατομικού οξυγόνου.



Σχήμα 7.13: Πυκνότητα ατομικού οξυγόνου και ακτινομετρικός λόγος($p = 1.33 \text{ Pa}$).

Από τα σχήματα (7.13) και (7.14) παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα του μοντέλου είναι σε αρκετά καλή συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα. Οι μικρές αποκλίσεις που βλέπουμε οφείλονται πιθανόν είτε σε κάποιο σφάλμα κατά τη μέτρηση του λόγου είτε στις παραμέτρους που ορίζουμε αυθαίρετα (γ_{rec} , T_g). Τα τρεξίματα έγιναν με $Q = 100 \text{ sccm}$, $T_g = 400 \text{ K}$ και $\gamma_{rec} = 0.1$.

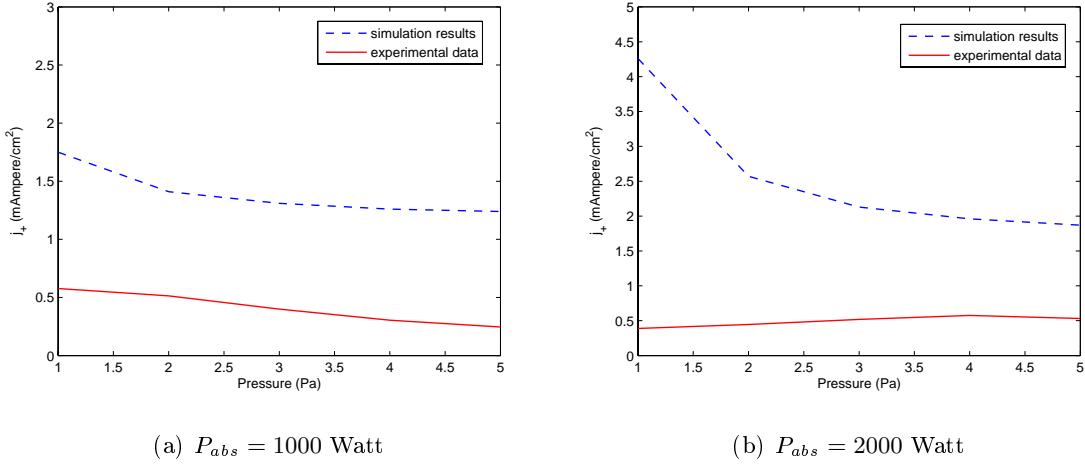


Σχήμα 7.14: Πυκνότητας ατομικού οξυγόνου και ακτινομετρικός λόγος ($P_{abs} = 1000 \text{ Watt}$).

7.3.2 Συγκρίσεις για σταθερή ισχύ

Στην ενότητα αυτή θα συγκρίνουμε τις τιμές της ροής των ιόντων από τα πειραματικά δεδομένα και από τα αποτελέσματα του μοντέλου για σταθερή ισχύ.

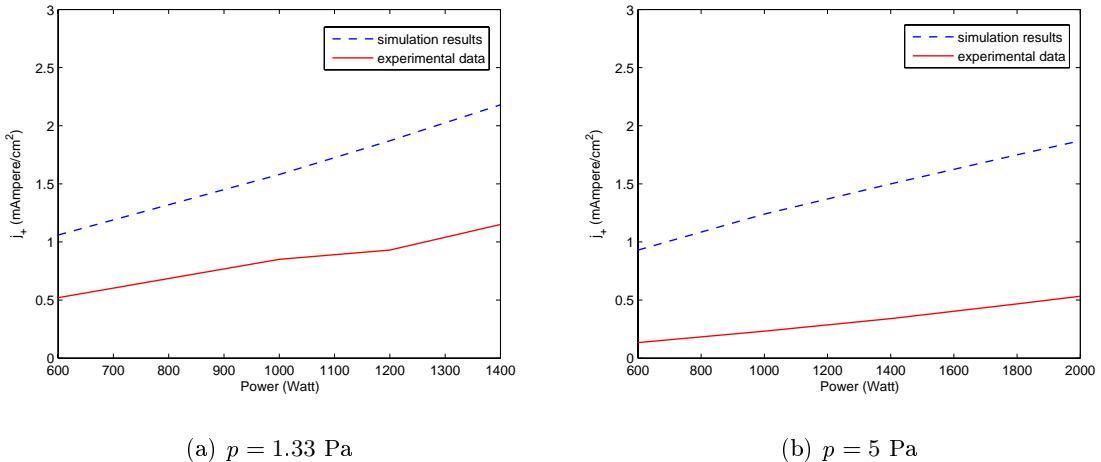
Στα σχήματα 7.15 παρατηρούμε ότι η προσομοίωση δίνει υπερεκτιμημένα αποτελέσματα για τη ροή των ιόντων ενώ για χαμηλές πιέσεις έχουμε σημαντική απόκλιση. Ωστόσο για πιέσεις πάνω από 2.5 Pa βλέπουμε πως τα αποτέσματα των πειραμάτων και του μοντέλου παρουσιάζουν την ίδια συμπεριφορά.

(a) $P_{abs} = 1000$ Watt(b) $P_{abs} = 2000$ Watt

Σχήμα 7.15: Ροή ιόντων σε σχέση με την πίεση.

7.3.3 Συγκρίσεις για σταθερή πίεση

Στην ενότητα αυτή θα συγκρίνουμε τις τιμές της ροής των ιόντων από τα πειραματικά δεδομένα και από τα αποτελέσματα του μοντέλου για σταθερή πίεση.

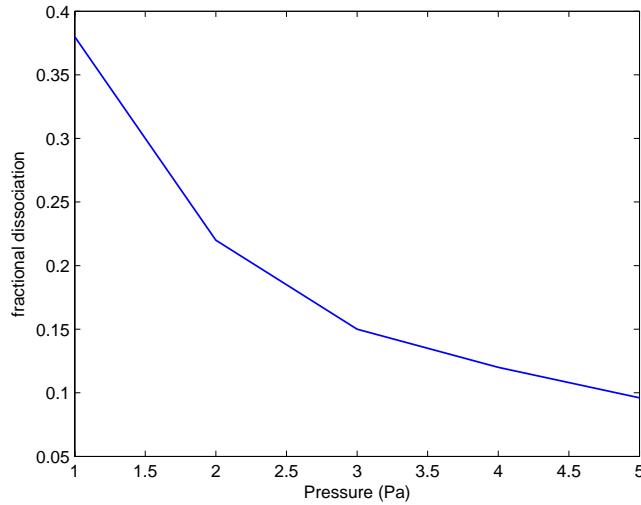
(a) $p = 1.33$ Pa(b) $p = 5$ Pa

Σχήμα 7.16: Ροή ιόντων σε σχέση με την ισχύ.

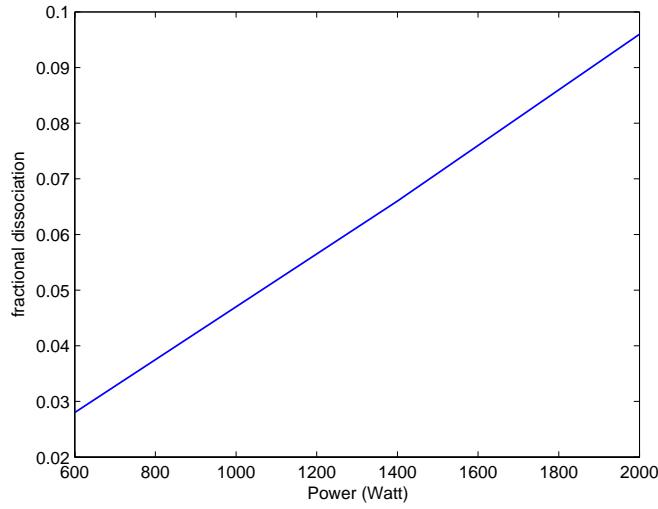
Στα σχήματα 7.16 παρουσιάζονται αποτελέσματα για σταθερή πίεση 5 Pa και 1.33 Pa αντίστοιχα. Από τα σχήματα παρατηρούμε ότι το μοντέλο δίνει και πάλι υπερεκτιμημένα αποτελέσματα. Ωστόσο η προσομοίωση και τα πειράματα εμφανίζουν την ίδια αυξητική τάση στα j_+ .

7.4 Άλλα αποτελέσματα

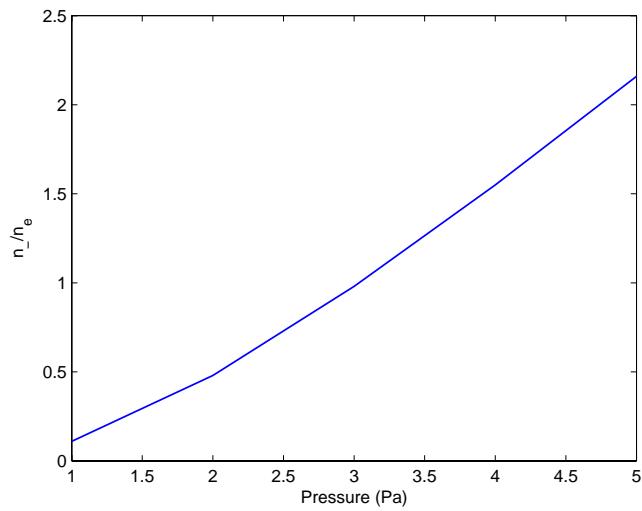
Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε κάποια αποτελέσματα σχετικά με το κλάσμα διάσπασης (fractional dissociation) και την ηλεκτραρνητικότητα του πλάσματος οξυγόνου. Τα «τρεξίματα» έγιναν με τις παραμέτρους εισόδου του πίνακα (7.4).



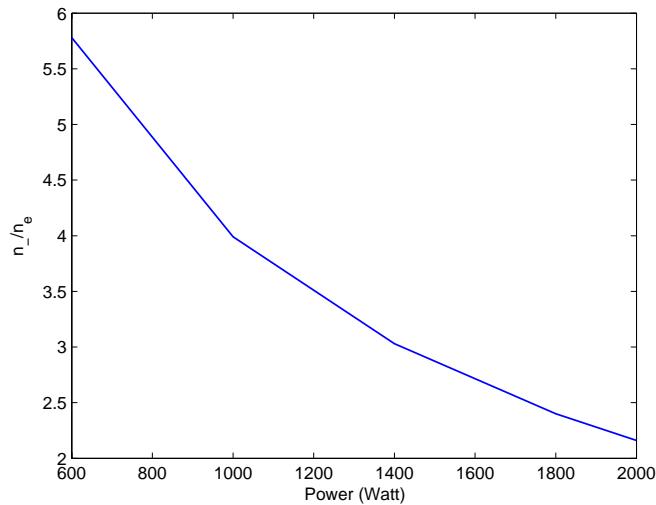
Σχήμα 7.17: Κλάσμα διάσπασης σε σχέση με την πίεση ($P_{abs} = 2000 \text{ W}$, $T = 400 \text{ K}$).



Σχήμα 7.18: Κλάσμα διάσπασης σε σχέση με την ισχύ ($p = 5 \text{ Pa}$, $T = 400 \text{ K}$)



Σχήμα 7.19: Ο λόγος n_-/n_e σε σχέση με την πίεση για $P_{abs} = 2000 \text{ W}$, $T = 400 \text{ K}$



Σχήμα 7.20: Ο λόγος n_-/n_e σε σχέση με την ισχύ για $p = 5 \text{ Pa}$, $T = 400 \text{ K}$

Συμπεράσματα

Η εργασία αυτή αποτελεί μια προσπάθεια δημιουργίας ενός γρήγορου μηδενικής διάστασης μοντέλου το οποίο να δίνει αξιόπιστα αποτελέσματα. Η προσθήκη της επίδρασης των μαγνητικών πεδίων τόσο στον άνω κύλινδρο του αντιδραστήρα λόγω του πηνίου όσο και στον κάτω κύλινδρο λόγω των μαγνητών που υπάρχουν γύρω από αυτόν αποτελούν τη βασική καινοτομία του. Επίσης, το ενημερωμένο δίκτυο αντιδράσεων αποτελεί ένα από τα σημαντικά προτερήματά του σε σχέση με προγενέστερα μοντέλα.

Επίσης, το γεγονός ότι ο κώδικας παρέχει αποτελέσματα με ελάχιστες επαναλήψεις και σε λίγα μόλις δευτερόλεπτα για ένα μεγάλο εύρος αρχικών συνθηκών (πίεσης, ισχύς) καθιστά το παρόν μοντέλο σημαντικό «εργαλείο» για έναν ολοκληρωμένο προσομοιωτή διεργασιών πλάσματος.

Οστοσο, το θέμα των μηδενικής διάστασης μοντέλων επιδέχεται περαιτέρω έρευνα. Μία δυνατότητα για μελλοντική έρευνα θα ήταν η προσαρμογή του κώδικα ώστε να δέχεται διαφορετικά αέρια ή μίγμα αερίων. Ο κώδικας αυτός θα μπορούσε επίσης να είναι φιλικός προς το χρήστη, δηλαδή να υπάρχει η δυνατότητα οι παράμετροι εισόδου να παρέχονται από τον χρήστη μέσω ενός Διαδραστικού Περιβάλλοντος Χρήστη (GUI). Επίσης, θα μπορούσε να υπάρχει η δυνατότητα επιλογής διαφορετικής κατανομής ενέργειας για τον υπολογισμό των σταθερών ρυθμού των αντιδράσεων, για παράδειγμα να μπορεί ο χρήστης να έχει επιλογή ανάμεσα σε ρυθμούς υπολογισμένους με κατανομή Maxwell ή με κατανομή Druyvensteyn.

Τέλος, για την τελειοποίηση του κώδικα θα μπορούσαμε να εφαρμόσουμε μία ολικά συγκλίνουσα μέθοδο, όπως για παράδειγμα τη μέθοδο Broyden, για την επίλυση του προβλήματος προς αποφυγή πιθανών προβλημάτων σύγκλισης.

Παράρτημα Α

Κώδικας

File name: define.h

In this header file, there are definitions for some parameters of the problem such as temperatures, diffusion coefficients etc.

```
#include "K.h"
//=====
//ion temperature in eV
#define Ti      ( 0.448/preactor + 0.052 )
//the ratio n_{-}/n_{e}
#define a      ( x[6] / x[1] )
//the ratio T_{e}/T_{i}
#define g      ( ( x[8]*T_ec/eV_J ) / Ti )
//mean free path for electrons
#define lambda_e ( v_e/freq )
//mean free path for ion neutral collisions
#define lambda   ( 1.0/( (x[2]+x[4]+x[5])*n_n*sigma ) )
//collision frequency for ions
#define freqi   ( v_th / lambda )
//=====
//ion diffusion
#define Di      ( K*Ti*11604.5 / (M_02*freqi) )
//electron diffusion
#define De      ( K*x[8]*eV_K / (m_e*freq) )
//electron mobility
#define mu_e    ( q_e/(m_e*freq) )
//ion mobility
#define mu_i    ( q_e/(M_02*freqi) )
//gyration frequency-electron
#define omega_e ( 2*pi*2.8*1e+6*B )//( q_e*B/m_e )
```

```

//gyration frequency-ion
#define omega_i    ( 2*pi*1.52*1e+3*B/m02 )// ( q_e*B/m0 )
//perpendicular ion diffusion
#define Dip        ( Di / ( 1 + (omega_i/freqi)*(omega_i/freqi) ) )
//perpendicular electron diffusion
#define Dep        ( De / ( 1 + (omega_e/freq)*(omega_e/freq) ) )
//perpendicular electron mobility
#define mu_ep      ( mu_e / ( 1 + (omega_e/freq)*(omega_e/freq) ) )
//perpendicular ion mobility
#define mu_ip      ( mu_i / ( 1 + (omega_i/freqi)*(omega_i/freqi) ) )
//perpendicular ambipolar diffusion
#define Dap        ( (mu_ip*Dep + mu_ep*Dip) / ( mu_ip + mu_ep ) )
//=====================================================================
//ambipolar diffusion coefficient
#define Da         ( (mu_i*De + mu_e*Di) / ( mu_i + mu_e ) )//( (1.0+g)*Di )
#define Lambda1    ( sqrt(1.0 /((pi/L1)*(pi/L1) + (2.405/R1)*(2.405/R1)) ) )
#define Lambda2    ( sqrt(1.0 /((pi/L2)*(pi/L2) + (2.405/R2)*(2.405/R2)) ) )
//diffusion coefficient estimated using the Chapman-Enskog equation
#define D1         ( v_th*lambda/3 )
//D21 and D22 are the Knusden free-diffusion coefficient for V1 and V2
#define D21        ( v_th*Lambda1/3 )
#define D22        ( v_th*Lambda2/3 )
//refers to volume V1
#define Deff1      ( 1.0 / (1.0/D1 + 1.0/D21) )
//refers to volume V2
#define Deff2      ( 1.0 / (1.0/D1 + 1.0/D22) )
//thermal velocity for 0_2
#define v_th       ( sqrt( 8*K*Ti*eV_K /(pi*M_02) ) )
//electron thermal velocity
#define v_e        ( sqrt( 8*K*(x[8]*T_ec/eV_J)*eV_K/(pi*m_e) ) )
//=====================================================================
//=====================================================================Magnetized Plasma=====
//electron energy in Volts
#define Ee         ( 3.0/2.0 * (x[8]*T_ec/eV_J) )
//ion energy in Volts
#define Ei         ( 3.0/2.0 * Ti )
//electron gyroradii in m
#define r_ce      ( (3.37*sqrt(Ee))/Bo/100.0 )
//0+ gyroradii in m
#define r_ci1     ( (1.44*sqrt(Ei*m0))/Bo )
//02+ gyroradii in m
#define r_ci2     ( (1.44*sqrt(Ei*m02))/Bo )
//effective leak width for 0+
#define w1        ( (2.0/pi)*sqrt(r_ce*r_ci1)*d/sqrt(lambda_e*lambda) )

```

```

//effective leak width for O2+
#define w2      ( (2.0/pi)*sqrt(r_ce*r_ci2)*d/sqrt(lambda_e*lambda)   )
//refers to O+
#define floss1  ( (N*w1) / (2*pi*R2) )
//refers to O2+
#define floss2  ( (N*w2) / (2*pi*R2) )
//=====================================================================
//=====================================================================hL=hR=for=atomic=oxygen=====
//hL1
#define hL11    ( ( 1.0 + 3.0*a/g ) / ( 1.0 + a ) * 0.86
/  sqrt( 3.0 + L1/(2.0 * lambda) + pow( ((0.86*L1*Ub0*u_c) / (pi*Da)) , 2))
//hR1
#define hR11    ( ( 1.0 + 3.0*a/g ) / ( 1.0 + a ) * 0.8
/  sqrt( 4.0 + R1/lambda + pow( ((0.8*R1*Ub0*u_c) / (2.405*J1*Da)) , 2) )
//hL2
#define hL21    ( ( 1.0 + 3.0*a/g ) / ( 1.0 + a ) * 0.86
/  sqrt( 3.0 + L2/(2.0 * lambda) + pow( ((0.86*L2*Ub0*u_c) / (pi*Da)) , 2))
//hR2
#define hR21    ( ( 1.0 + 3.0*a/g ) / ( 1.0 + a ) * 0.8
/  sqrt( 4.0 + R2/lambda + pow( ((0.8*R2*Ub0*u_c) / (2.405*J1*Da)) , 2))
//hR3
#define hR31    ( ( 1.0 + 3.0*a/g ) / ( 1.0 + a ) * 0.8
/  sqrt( 4.0 + R3/lambda + pow( ((0.8*R3*Ub0*u_c) / (2.405*J1*Da)) , 2))
//=====================================================================
//=====================================================================hL=hR=for=molecular=oxygen=====
//hL1
#define hL12    ( ( 1.0 + 3.0*a/g ) / ( 1.0 + a ) * 0.86
/  sqrt( 3.0 + L1/(2.0 * lambda) + pow( ((0.86*L1*Ub02*u_c)/(pi*Da)) , 2) )
//hR1
#define hR12    ( ( 1.0 + 3.0*a/g ) / ( 1.0 + a ) * 0.8
/  sqrt( 4.0 + R1/lambda + pow( ((0.8*R1*Ub02*u_c) / (2.405*J1*Da)) , 2) )
hL2
#define hL22    ( ( 1.0 + 3.0*a/g ) / ( 1.0 + a ) * 0.86
/  sqrt( 3.0 + L2/(2.0 * lambda) + pow( ((0.86*L2*Ub02*u_c)/(pi*Da)) , 2) )
//hR2
#define hR22    ( ( 1.0 + 3.0*a/g ) / ( 1.0 + a ) * 0.8
/  sqrt( 4.0 + R2/lambda + pow( ((0.8*R2*Ub02*u_c) / (2.405*J1*Da)) , 2) )
//hR3
#define hR32    ( ( 1.0 + 3.0*a/g ) / ( 1.0 + a ) * 0.8
/  sqrt( 4.0 + R3/lambda + pow( ((0.8*R3*Ub02*u_c) / (2.405*J1*Da)) , 2) )
//=====================================================================hRp=====
//hR1p for atomic oxygen
//#define hR11p   ( ( 1.0 + 3.0*a/g ) / ( 1.0 + a ) * 0.8
/  sqrt( 4.0 + R1/lambda + pow( ((0.8*R1*Ub0*u_c) / (2.405*J1*Dap)) , 2)))

```

```

//hR1p for molecular oxygen
//#define hR12p  ( ( 1.0 + 3.0*a/g ) / ( 1.0 + a ) * 0.8
/  sqrt( 4.0 + R1/lambda + pow( ((0.8*R1*Ub02*u_c) / (2.405*J1*Dap)), 2))
//=====deff=for=atomic=and=molecular=oxygen=respectively=====//
#define deff1 ( hR11*A2/V1+ hL11*A1/V1+ hR21*A4/V2+ hL21*A3/V2+ hL21*A5/V2)
#define deff2 ( hR12*A2/V1+ hL12*A1/V1+ hR22*A4/V2+ hL22*A3/V2+ hL22*A5/V2)
//=====
//Bohm velocity for O_2
#define Ub02  ( sqrt( x[8]*T_ec / M_O2)/u_c )
//Bohm velocity for O
#define Ub0  ( sqrt( x[8]*T_ec / M_O)/u_c )
//wall loss for O apart from the loss that depends on the magnetic cusp
#define Loss1  ( Ub0*(deff1 - hR21*A4/V2) )
//wall loss for O depending on the cusp
#define Loss11 ( floss1*Ub0*(hR21*A4/V2) )
//wall loss for O_2 apart from the loss that depends on the magnetic cusp
#define Loss2  ( Ub02*(deff2 - hR22*A4/V2) )
//wall loss for O_2 depending on the cusp
#define Loss22 ( floss2*Ub02*(hR22*A4/V2) )
#define freq1  ( (K4 + K9)*x[4]*n_n*k_c )
#define freq2  ( (K1 + K2 + K3 + K8)*x[2]*n_n*k_c )
#define freq3  ( K7*x[6]*n_c*k_c )
#define freq4  ( K13*x[5]*n_n*k_c )
#define freq5  ( (K_ex1 + K_ex2 + K_ex3 + K_ex4 + K_ex5 + K_ex6 + K_ex7
           + K_ex8 + K_ex9 + K_ex10)*x[2]*n_n*k_c)
#define freq6  ((K_exc1+ K_exc2+ K_exc3+ K_exc4+ K_exc5+ K_exc6)*x[4]*n_n*k_c)
#define freq7  ( (K_elas2*x[2] + K_elas1*x[4])*n_n*k_c )
#define freq  ( freq1 + freq2 + freq3 + freq4 + freq5 + freq6 + freq7 )
//=====
//ion and electron energy loss to the wall in Joule
//=====
#define e_ew  (2.0 * (x[8]*T_ec))
#define e_iw  (6.0 * (x[8]*T_ec))
//=====
#define E_e  (e_ew/T_ec)
#define E_i  (e_iw/T_ec)
//=====
#define exc02 (K_ex1*E_ex1 + K_ex2*E_ex2 + K_ex3*E_ex3 + K_ex4*E_ex4
           + K_ex5*E_ex5 + K_ex6*E_ex6 + K_ex7*E_ex7 + K_ex8*E_ex8
           + K_ex9*E_ex9 + K_ex10*E_ex10)
#define exc0 (K_exc1*E_exc1 + K_exc2*E_exc2 + K_exc3*E_exc3 + K_exc4*E_exc4
           + K_exc5*E_exc5 + K_exc6*E_exc6 )

```

File name: E.h

Normalization of the threshold energies of the reactions.

```
//=====
//=====
float E1 = e1/T_ec;
float E2 = e2/T_ec;
float E3 = e3/T_ec;
float E4 = e4/T_ec;
float E7 = e7/T_ec;
float E8 = e8/T_ec;
float E9 = e9/T_ec;
float E13 = e13/T_ec;
//=====
//threshold energies for excitation of O molecule
//=====
float E_ex1 = e_ex1/T_ec;
float E_ex2 = e_ex2/T_ec;
float E_ex3 = e_ex3/T_ec;
float E_ex4 = e_ex4/T_ec;
float E_ex5 = e_ex5/T_ec;
float E_ex6 = e_ex6/T_ec;
float E_ex7 = e_ex7/T_ec;
float E_ex8 = e_ex7/T_ec;
float E_ex9 = e_ex7/T_ec;
float E_ex10 = e_ex7/T_ec;
//=====
//threshold energies for excitation of O atom
//=====
float E_exc1 = e_exc1/T_ec;
float E_exc2 = e_exc2/T_ec;
float E_exc3 = e_exc3/T_ec;
float E_exc4 = e_exc4/T_ec;
float E_exc5 = e_exc5/T_ec;
float E_exc6 = e_exc6/T_ec;
```

File name: in.h

Globalization of the parameters.

```
extern float eV_J ;
extern float pi ;
extern float m_e ;
extern float q_e ;
extern float K ;
```



```
extern float e2 ;
extern float e3 ;
extern float e4 ;
extern float e7 ;
extern float e8 ;
extern float e9 ;
extern float e13 ;
//=====================================================================
//threshold energies for excitation of O atom
//=====================================================================
extern float e_exc1 ;
extern float e_exc2 ;
extern float e_exc3 ;
extern float e_exc4 ;
extern float e_exc5 ;
extern float e_exc6 ;
extern float e_exc7 ;
//=====================================================================
//threshold energies for excitation of O molecule
//=====================================================================
extern float e_ex1 ;
extern float e_ex2 ;
extern float e_ex3 ;
extern float e_ex4 ;
extern float e_ex5 ;
extern float e_ex6 ;
extern float e_ex7 ;
extern float e_ex8 ;
extern float e_ex9 ;
extern float e_ex10 ;
//=====================================================================
//characteristic values
//=====================================================================
extern float n_n ;
extern float n_c ;
extern float l_c ;
extern float A_c ;
extern float V_c ;
extern float k_c ;
extern float T_ec ;
extern float u_c ;
extern float P_c ;
extern float p_c ;
extern float Q_c ;
```

```
extern float Sp_c;
```

File name: input.h

This file contains the input parameters of the problem; physical parameters, inputs, threshold energies, characteristic values.

```
//=====================================================================
// constants
float Torr_Pascal = 133.32;           //Torr->Pascal factor
float eV_J = 1.6022*1e-19 ;           //J->eV factor
float eV_K = 11604.5;                 //eV->K factor )
float pi = 3.14159265358979323846;   //pi
float m_e = 9.1095e-31;               /*electron mass(kg)*/
float q_e = 1.6022e-19;                /*C*/
float K = 1.3807e-23;                 //J/K
float T_o = 298.15;                   /*standard temperature 25C*/
float sigma = 5.0e-19;                //m^2 Gud et al.-Plasma Sources-1999
float amu = 1.660e-27;                //atomic mass unit
//=====================================================================
// physical parameters
float M_O2 = 32.0*amu;                /*kg*/
float M_O = 16.0*amu;                  /*kg*/
float mO2 = 32.0;                     //molecular weight of O2
float mO = 16.0;                      //molecular weight of O
//=====================================================================
// variables-inputs
float Bo = 875.0;                    // magnetic field in Gauss-confinement
float B = 0.0;                       // magnetic field in Gauss-upper part
float N = 14.0;                      //# of cusps-magnets
float p =5.0; //0.010*Torr_Pascal    //pressure in Pa
float preactor = p*1000/Torr_Pascal; //pressure in mTorr
float R1 = 0.085;                     /*m*/
float L1 = 0.26;                      /*m*/
float R2 = 0.20;                      /*m*/
float L2 = 0.19;                      /*m*/
float R3 = 0.145;                     /*m*/
float P_abs = 1000.0;                 /*Watt*/
float g_rec = 1.0e-1;                 /*Kelvin*/
float T = 600.0;                      /*Kelvin*/
float Q = 100.0*1.6876e-3;            ///*Pascal*m^3/sec*/
float J1 = 0.5191;                   //Bessel
//=====================================================================
float d = (2*pi*R2)/N;   //distance between 2 successive magnets
```

```

float A1 = pi*R1*R1;
float A2 = 2*pi*R1*L1;
float A3 = pi*(R2*R2 - R1*R1);
float A4 = 2*pi*R2*L2;
float A5 = pi*R3*R3;
float A = A1 + A2 + A3 + A4 + A5; // m^2
float V1 = pi*R1*R1*L1;
float V2 = pi*R2*R2*L2;
float V = V1 + V2; // m^3
//float v_th = sqrt( 8*K*Ti/(pi*M_0) ); /*(kT/m)^{1/2}*/
//=====
//threshold energies in Joule
//=====
float e1 = 12.29*eV_J ;
float e2 = 8.4*eV_J;
float e3 = 6.26*eV_J;
float e4 = 13.61*eV_J;
float e7 = 2.98*eV_J;
float e8 = 6.0*eV_J;
float e9 = 1.96*eV_J;
float e13 = 11.61*eV_J;
//=====
//threshold energies for excitation of O atom
//=====
float e_exc1 = 1.96*eV_J;
float e_exc2 = 4.18*eV_J;
float e_exc3 = 15.65*eV_J;
float e_exc4 = 9.14*eV_J;
float e_exc5 = 9.51*eV_J;
float e_exc6 = 12.00*eV_J;
//=====
//threshold energies for excitation of O molecule
//=====
float e_ex1 = 0.02*eV_J;
float e_ex2 = 0.19*eV_J;
float e_ex3 = 0.38*eV_J;
float e_ex4 = 0.977*eV_J;
float e_ex5 = 1.627*eV_J;
float e_ex6 = 4.5*eV_J;
float e_ex7 = 6.0*eV_J;
float e_ex8 = 8.4*eV_J;
float e_ex9 = 9.97*eV_J;
float e_ex10 = 14.7*eV_J;
//=====

```

```
//characteristic values
//=====
float n_n = 1.0e+19;      //1/m^3 -> characteristic density for neutral species
float n_c = 1.0e+15;      //1/m^3 -> characteristic density for charged species
float l_c = (L1+L2)/2;    // m -> characteristic length
float A_c = pi*R3*R3;    // m^2 -> characteristic area
float V_c = l_c*A_c;     // m -> characteristic length
float k_c = 2.165e-13;    //m^3/s -> normalizing rate coefficient
float T_ec = 5.0*eV_J;   //J = kg*m^2/s^2-> characteristic energy
float u_c = 4253.3;       //m/s -> characteristic velocity
float P_c = 1000.0;       // Watt=kg*m^2/s^3 -> characteristic power
float Q_c = 35.0*1.6876e-3; // kg*m^2/s^3 -> characteristic flow rate
float p_c = 0.010*133.32; // Pa -> characteristic pressure
float Sp_c = 1.0;         // m^3/s -> pumping rate of neutral species
```

File name: K.h

Definitions of the rate coefficients.

```
//=====
//=====
#define K1  ( (1.0/k_c)*2.34e-15*pow( ( x[8]*T_ec / eV_J ),1.03 )
           *exp( -12.29 / ( x[8]*T_ec / eV_J ) ) )
//=====
#define K2  ( (1.0/k_c)*3.49e-14*exp( -5.92 / ( x[8]*T_ec / eV_J ) ) )
//=====
#define K3  ( (1.0/k_c)*1.07e-15*pow( x[8]*T_ec / eV_J , -1.39 )
           *exp( -6.26 / ( x[8]*T_ec / eV_J ) ) )
//=====
#define K4  ( (1.0/k_c)*9.0e-15*pow( x[8]*T_ec / eV_J , 0.7 )
           *exp(-13.6/( x[8]*T_ec / eV_J )) )
//=====
#define K5  ( (1.0/k_c)*1.4e-13 )
//=====
#define K6  ( (1.0/k_c)*2.7e-13 )
//=====
#define K7  ( (1.0/k_c)*5.47e-14*pow( ( x[8]*T_ec / eV_J ), 0.324 )
           *exp(-2.98/( x[8]*T_ec / eV_J ) ) )
//=====
#define K8  ( (1.0/k_c)*6.86e-15*exp(-6.29/( x[8]*T_ec / eV_J )) )
//=====
#define K9  ( (1.0/k_c)*4.54e-15*exp(-2.36/( x[8]*T_ec / eV_J ) ) )
//=====
#define K10 ( (1.0/k_c)*4.1e-17 )
```

```

//=====
#define K11 ( (1.0/k_c)*8.0e-18 )
//=====
#define K12 ( (1.0/u_c)*(v_th/4)*(A_c/V_c) )
//=====
#define K13 ( (1.0/k_c)*9.0e-15*pow( x[8]*T_ec/eV_J , 0.7)
           *exp( -11.6 / (x[8]*T_ec/eV_J) ) )
//=====
#define K16 ( (1.0/u_c)*g_rec*(v_th/4)*(A_c/V_c) )

//=====
//Rate coefficients for excitation of the oxygen atom
//=====
#define K_exc1 ( (1/k_c)*4.54e-15*exp( - 2.36 / (x[8]*T_ec / eV_J)) )
#define K_exc2 ( (1/k_c)*7.86e-16*exp( - 4.489 / (x[8]*T_ec / eV_J)) )
#define K_exc3 ( (1/k_c)*2.53e-15*exp( - 17.34 / (x[8]*T_ec / eV_J)) )
#define K_exc4 ( (1/k_c)*9.67e-16*exp( - 9.97 / (x[8]*T_ec / eV_J)) )
#define K_exc5 ( (1/k_c)*3.89e-15*exp( - 9.75 / (x[8]*T_ec / eV_J)) )
#define K_exc6 ( (1/k_c)*4.31e-14*exp( - 18.59 / (x[8]*T_ec / eV_J)) )
//=====
//Rate coefficients for excitation of the oxygen molecule
//=====
#define K_ex1 ( (1/k_c)*1.87e-17*exp( - 2.9055 / (x[8]*T_ec / eV_J) ) )
#define K_ex2 ( (1/k_c)*2.8e-15*exp( - 3.72 / (x[8]*T_ec / eV_J) ) )
#define K_ex3 ( (1/k_c)*1.28e-15*exp( - 3.67 / (x[8]*T_ec / eV_J) ) )
#define K_ex4 ( (1/k_c)*1.37e-15*exp( - 2.14 / (x[8]*T_ec / eV_J) ) )
#define K_ex5 ( (1/k_c)*3.24e-16*exp( - 2.218 / (x[8]*T_ec / eV_J) ) )
#define K_ex6 ( (1/k_c)*1.13e-15*exp( - 3.94 / (x[8]*T_ec / eV_J) ) )
#define K_ex7 ( (1/k_c)*6.86e-15*exp( - 6.29 / (x[8]*T_ec / eV_J) ) )
#define K_ex8 ( (1/k_c)*3.49e-14*exp( - 5.92 / (x[8]*T_ec / eV_J) ) )
#define K_ex9 ( (1/k_c)*1.44e-16*exp( - 17.25 / (x[8]*T_ec / eV_J) ) )
#define K_ex10 ( (1/k_c)*1.13e-15*exp( - 18.35 / (x[8]*T_ec / eV_J) ) )
//=====
#define K_elas1 ( (1/k_c)*exp(-30.9463 + 0.9484*log(x[8]*T_ec / eV_J)
- 0.14158*pow(log(x[8]*T_ec / eV_J),2)-0.0154*pow(log(x[8]*T_ec/eV_J),3)))
#define K_elas2 ( (1/k_c)*exp(-30.7683 + 0.3531*log(x[8]*T_ec / eV_J)
+ 0.2068*pow(log(x[8]*T_ec / eV_J),2) - 0.0406*pow(log(x[8]*T_ec / eV_J),3)))

```

File name: nrutil.h

Taken from Numecal Recipies in C ([69])

```
#ifndef _NR_UTILS_H_
#define _NR_UTILS_H_
```

```

static float sqrarg;
#define SQR(a) ((sqrarg=(a)) == 0.0 ? 0.0 : sqrarg*sqrarg)

static double dsqrarg;
#define DSQR(a) ((dsqrarg=(a)) == 0.0 ? 0.0 : dsqrarg*dsqrarg)

static double dmaxarg1,dmaxarg2;
#define DMAX(a,b) (dmaxarg1=(a),dmaxarg2=(b),(dmaxarg1) > (dmaxarg2) ?\
(dmaxarg1) : (dmaxarg2))

static double dminarg1,dminarg2;
#define DMIN(a,b) (dminarg1=(a),dminarg2=(b),(dminarg1) < (dminarg2) ?\
(dminarg1) : (dminarg2))

static float maxarg1,maxarg2;
#define FMAX(a,b) (maxarg1=(a),maxarg2=(b),(maxarg1) > (maxarg2) ?\
(maxarg1) : (maxarg2))

static float minarg1,minarg2;
#define FMIN(a,b) (minarg1=(a),minarg2=(b),(minarg1) < (minarg2) ?\
(minarg1) : (minarg2))

static long lmaxarg1,lmaxarg2;
#define LMAX(a,b) (lmaxarg1=(a),lmaxarg2=(b),(lmaxarg1) > (lmaxarg2) ?\
(lmaxarg1) : (lmaxarg2))

static long lminarg1,lminarg2;
#define LMIN(a,b) (lminarg1=(a),lminarg2=(b),(lminarg1) < (lminarg2) ?\
(lminarg1) : (lminarg2))

static int imaxarg1,imaxarg2;
#define IMAX(a,b) (imaxarg1=(a),imaxarg2=(b),(imaxarg1) > (imaxarg2) ?\
(imaxarg1) : (imaxarg2))

static int iminarg1,iminarg2;
#define IMIN(a,b) (iminarg1=(a),iminarg2=(b),(iminarg1) < (iminarg2) ?\
(iminarg1) : (iminarg2))

#define SIGN(a,b) ((b) >= 0.0 ? fabs(a) : -fabs(a))

#if defined(__STDC__) || defined(ANSI) || defined(NRANSI) /* ANSI */

void nrerror(char error_text[]);
float *vector(long nl, long nh);

```

```

int *ivektor(long nl, long nh);
unsigned char *cvvector(long nl, long nh);
unsigned long *lvector(long nl, long nh);
double *dvector(long nl, long nh);
float **matrix(long nrl, long nrh, long ncl, long nch);
double **dmatrix(long nrl, long nrh, long ncl, long nch);
int **imatrix(long nrl, long nrh, long ncl, long nch);
float **submatrix(float **a, long oldrl, long oldrh, long oldcl, long oldch,
long newrl, long newcl);
float **convert_matrix(float *a, long nrl, long nrh, long ncl, long nch);
float ***f3tensor(long nrl, long nrh, long ncl, long nch, long ndl, long ndh);
void free_vector(float *v, long nl, long nh);
void free_ivektor(int *v, long nl, long nh);
void free_cvvector(unsigned char *v, long nl, long nh);
void free_lvector(unsigned long *v, long nl, long nh);
void free_dvector(double *v, long nl, long nh);
void free_matrix(float **m, long nrl, long nrh, long ncl, long nch);
void free_dmatrix(double **m, long nrl, long nrh, long ncl, long nch);
void free_imatrix(int **m, long nrl, long nrh, long ncl, long nch);
void free_submatrix(float **b, long nrl, long nrh, long ncl, long nch);
void free_convert_matrix(float **b, long nrl, long nrh, long ncl, long nch);
void free_f3tensor(float ***t, long nrl, long nrh, long ncl, long nch,
long ndl, long ndh);

#else /* ANSI */
/* traditional - K&R */

void nrerror();
float *vector();
float **matrix();
float **submatrix();
float **convert_matrix();
float ***f3tensor();
double *dvector();
double **dmatrix();
int *ivektor();
int **imatrix();
unsigned char *cvvector();
unsigned long *lvector();
void free_vector();
void free_dvector();
void free_ivektor();
void free_cvvector();
void free_lvector();

```

```

void free_matrix();
void free_submatrix();
void free_convert_matrix();
void free_dmatrix();
void free_imatrix();
void free_f3tensor();

#endif /* ANSI */

#endif /* _NR_UTILS_H_ */

```

File name: equation.h

Species mass balances.

```

f[2] = C6*Q_h/V_h + C3*K5*x[6]*x[3] - (K1 + K2 + K3 + K8)*x[2]*x[1]
      + C2*(Loss2 + Loss22)*x[3] + 0.5*C7*K16*x[4] - C8*x[2]*x[9]/V_h;
// f[2] kai x[2] antistoixoun sto stoixeio: 02

f[3] = K1*x[1]*x[2] - C3*K5*x[6]*x[3] - C2*(Loss2 + Loss22)*x[3]
      - C4*x[3]*x[9]/V_h;
// f[3] kai x[3] antistoixoun sto stoixeio: 02+

f[4] = (K2 + K3 + 2*K8)*x[1]*x[2] + C3*K5*x[6]*x[3] + 2*C3*K6*x[6]*x[7]
      + C3*K7*x[1]*x[6] + C5*K10*x[5]*x[2] + C5*K11*x[5]*x[4] + C7*K12*x[5]
      + C2*(Loss1+Loss11)*x[7] - (K4 + K9)*x[4]*x[1] - C7*K16*x[4]
      - C8*x[4]*x[9]/V_h;
// f[4] kai x[4] antistoixoun sto stoixeio: 0

f[5] = K2*x[1]*x[2] + K9*x[1]*x[4] - C5*K10*x[2]*x[5] - K13*x[1]*x[5]
      - C5*K11*x[5]*x[4] - C7*K12*x[5] - C8*x[5]*x[9]/V_h;
// f[5] kai x[5] antistoixoun sto stoixeio: 0(1D)

f[6] = K3*x[1]*x[2] - C3*K5*x[6]*x[3] - C3*K6*x[6]*x[7] - C3*K7*x[6]*x[1]
      - C4*x[6]*x[9]/V_h;
// f[6] kai x[6] antistoixoun sto stoixeio: 0-

f[7] = K4*x[1]*x[4] + K13*x[1]*x[5] - C3*K6*x[6]*x[7]
      - C2*(Loss1 + Loss11)*x[7] - C4*x[7]*x[9]/V_h;
// f[7] kai x[7] antistoixoun sto stoixeio: 0+

```

File name: fdjac.cpp

Taken from Numecal Recipies in C ([69])

```
#include <math.h>
#include "nrutil.h"
#include <stdio.h>
#define EPS 1.0e-4

void fdjac(int n, float x[], float fvec[], float **df, void (*vecfunc)
           (int, float [], float [])) {
{
int i,j;
float h,temp,*f;

f=vector(1,n);
for (j=1;j<=n;j++)
{
temp = x[ j ];
h = EPS*fabs(temp);
if ( h == 0.0 )
    h = EPS;
x[ j ] = temp + h ;
h = x[ j ] - temp;
(*vecfunc)(n,x,f);
x[ j ] = temp;

for (i=1;i<=n;i++)
{
    df[i][j]=(f[i]-fvec[i])/h;
}
}
free_vector(f,1,n);
}
```

File name: lubksb.cpp

Taken from Numecal Recipies in C ([69]).

```
void lubksb(float **a, int n, int *indx, float b[])
{
int i,ii=0,ip,j;
float sum;

for (i=1;i<=n;i++) {
ip=indx[i];
```

```

sum=b[ip];
b[ip]=b[i];
if (ii)
for (j=ii;j<=i-1;j++) sum -= a[i][j]*b[j];
else if (sum) ii=i;
b[i]=sum;
}
for (i=n;i>=1;i--) {
sum=b[i];
for (j=i+1;j<=n;j++) sum -= a[i][j]*b[j];
b[i]=sum/a[i][i];
}
}

```

File name: ludkmp.cpp

Taken from Numecal Recipies in C ([69]).

```

#include <math.h>
#define NRANSI
#include "nrutil.h"
#define TINY 1.0e-20;

void ludcmp(float **a, int n, int *indx, float *d)
// Given a matrix a[1..n][1..n], this routine replaces it by the LU
//decomposition of a rowwise permutation of itself. a and n are input.
//a is output, arranged as in equation (2.3.14) above; indx[1..n] is
//an output vector that records the row permutation ejected by the partial
// pivoting; d is output as -1 depending on whether the number of row
//interchanges was even or odd, respectively. This routine is used in
//combination with lubksb to solve linear equations or invert a matrix.
{
int i,imax,j,k;
float big,dum,sum,temp;
float *vv; // vv stores the implicit scaling of each row.

vv=vector(1,n);
*d=1.0; // No row interchanges yet
for (i=1;i<=n;i++)
{ // Loop over rows to get the implicit scaling information
big=0.0;
for (j=1;j<=n;j++)
if ( ( temp = fabs( a[ i ][ j ] ) ) > big )
big=temp;
if (big == 0.0)

```

```

        nrerror("Singular matrix in routine ludcmp");
vv[i]=1.0/big;                                // save the scaling
}
for (j=1;j<=n;j++)
{
    sum=a[i][j];                            // This is the loop over columns of Crout's method.
for (i=1;i<j;i++)
{
    sum -= a[i][k]*a[k][j];
a[i][j]=sum;
}
big=0.0;
for (i=j;i<=n;i++)
{
sum=a[i][j];
for (k=1;k<j;k++)
sum -= a[i][k]*a[k][j];
a[i][j]=sum;
if ( (dum=vv[i]*fabs(sum)) >= big)
{
big=dum;
imax=i;
}
}
if (j != imax)
{
for (k=1;k<=n;k++)
{
dum=a[imax][k];
a[imax][k]=a[j][k];
a[j][k]=dum;
}
*d = -(*d);
vv[imax]=vv[j];
}
indx[j]=imax;
if (a[j][j] == 0.0)
    a[j][j] = TINY;
if (j != n)
{
dum=1.0/(a[j][j]);
for (i=j+1;i<=n;i++)
    a[i][j] *= dum;
}

```

```

        }
    }
free_vector(vv,1,n);
}
#undef TINY
#undef NRANSI

```

File name: mnewt.cpp

Takes the initial guess, makes ntrial Newton-Raphson steps to improve the root, stops if the root converges in either summed absolute variable increments tolx or summed absolute function values tolf.

```

// mnewt.c
#include <math.h>
#include <iostream>
#include "nrutil.h"

using namespace std;

#define FREERETURN {free_matrix(fjac,1,n,1,n);free_vector(fvec,1,n);\n
free_vector(p,1,n);free_ivector(indx,1,n);return;}

void mnewt(int ntrial, float x[], int n , float tolx, float tolf)
// Given an initial guess x[1..n] for a root in n dimensions, take
//ntrial Newton-Raphson steps to improve the root. Stop if the root
// converges in either summed absolute variable increments tolx or
//summed absolute function values tolf.
{
void lubksb( float **a , int n, int *index, float b[] );
void ludcmp(float **a, int n, int *indx, float *d);
    void usrfun( float *x ,int n , float *fvec , float **fjac);
    int k,i,*indx;
    float errx,errf,d,*fvec,**fjac,*p;
    indx=ivector(1,n);
    p=vector(1,n);
    fvec=vector(1,n);
    fjac=matrix(1,n,1,n);
    for ( k = 1 ; k <= ntrial ; k++ )
    {
cout << "calling usrfun" << endl;
    usrfun( x , n , fvec , fjac );
    // User function supplies function values at x in
//=====
    cout << "iter = " << k << endl;
}

```

```

        for ( i = 1 ; i <= n ; i++)
            cout << i << "\t" << x[ i ] << "\t" << fvec[ i ] << endl;
//        for ( i = 1 ; i <= n ; i++)
//            for ( int j = 1 ; j <= n ; j++ )
//                cout << i << "\t" << j << "\t" << fjac[ i ][ j ] << endl;

//=====
errf=0.0;                                // fvec and Jacobian matrix in fjac.
for ( i = 1 ; i <= n ; i++ )
    errf += fabs( fvec[ i ] ); //Check function convergence.
if (errf <= tol)
    FREERETURN
for ( i = 1 ; i <= n ; i++ )
{
    p[ i ] = -fvec[ i ]; //Right-hand side of linear equations.
//cout << i << "\t" << p[ i ] << endl;
}
cout << "calling ludcmp" << endl;
ludcmp( fjac , n , indx , &d );
//Solve linear equations using LU decomposition.

//=====
//for ( i = 1 ; i <= n ; i++)
//    for ( int j = 1 ; j <= n ; j++ )
//        cout << i << "\t" << j << "\t" << fjac[ i ][ j ] << endl;
//=====

cout << "calling lubksb" << endl;
lubksb( fjac , n , indx ,p );
errx=0.0; //Check root convergence.

//=====
// correction of x[ i ] if negative
//=====
float small = 0.00001; // it is used below
//=====

cout << "updating solution" << endl;
float x0[9];
for ( i = 1 ; i <= n ; i++ )
    { // Update solution.
        x0[i] = x[i];
        errx += fabs( p[ i ] );
        x[ i ] += p[ i ];
    }
//=====

// correction of x[ i ] if negative

```

```

//=====
    while( ( x[ i ] <= 0.0e0 ) )
    {
        p[ i ] = small*p[ i ];
        x[ i ] = x0[i]+p[ i ];
    }
//=====
}
//=====
if( x[ 8 ] >= 5.0e0 )
    x[ 8 ] = 5.0;
if( x[ 8 ] <= 0.1 )
    x[ 8 ] = 0.1;
//=====
if (errx <= tolx)
    FREERETURN
}
FREERETURN
}

```

File name: nrutil.cpp

Taken from Numecal Recipies in C ([69]).

```

//nrutil.cpp

#include <stdio.h>
#include <stddef.h>
#include <stdlib.h>
#define NR_END 1
#define FREE_ARG char*

void nrerror(char error_text[])
/* Numerical Recipes standard error handler */
{
    fprintf(stderr,"Numerical Recipes run-time error...\n");
    fprintf(stderr,"%s\n",error_text);
    fprintf(stderr,"...now exiting to system...\n");
    exit(1);
}

float *vector(long nl, long nh)
/* allocate a float vector with subscript range v[nl..nh] */
{
    float *v;

```

```
v=(float *)malloc((size_t) ((nh-nl+1+NR_END)*sizeof(float)));
if (!v) nrerror("allocation failure in vector()");
return v-nl+NR_END;
}

int *ivector(long nl, long nh)
/* allocate an int vector with subscript range v[nl..nh] */
{
int *v;

v=(int *)malloc((size_t) ((nh-nl+1+NR_END)*sizeof(int)));
if (!v) nrerror("allocation failure in ivecotor()");
return v-nl+NR_END;
}

unsigned char *cvector(long nl, long nh)
/* allocate an unsigned char vector with subscript range v[nl..nh] */
{
unsigned char *v;

v=(unsigned char *)malloc((size_t) ((nh-nl+1+NR_END)*sizeof(unsigned char)));
if (!v) nrerror("allocation failure in cvector()");
return v-nl+NR_END;
}

unsigned long *lvector(long nl, long nh)
/* allocate an unsigned long vector with subscript range v[nl..nh] */
{
unsigned long *v;

v=(unsigned long *)malloc((size_t) ((nh-nl+1+NR_END)*sizeof(long)));
if (!v) nrerror("allocation failure in lvector()");
return v-nl+NR_END;
}

double *dvector(long nl, long nh)
/* allocate a double vector with subscript range v[nl..nh] */
{
double *v;

v=(double *)malloc((size_t) ((nh-nl+1+NR_END)*sizeof(double)));
if (!v) nrerror("allocation failure in dvector()");
return v-nl+NR_END;
```

```

}

float **matrix(long nrl, long nrh, long ncl, long nch)
/* allocate a float matrix with subscript range m[nrl..nrh] [ncl..nch] */
{
long i, nrow=nrh-nrl+1,ncol=nch-ncl+1;
float **m;

/* allocate pointers to rows */
m=(float **) malloc((size_t)((nrow+NR_END)*sizeof(float)));
if (!m) nrerror("allocation failure 1 in matrix()");
m += NR_END;
m -= nrl;

/* allocate rows and set pointers to them */
m[nrl]=(float *) malloc((size_t)((nrow*ncol+NR_END)*sizeof(float)));
if (!m[nrl]) nrerror("allocation failure 2 in matrix()");
m[nrl] += NR_END;
m[nrl] -= ncl;

for(i=nrl+1;i<=nrh;i++) m[i]=m[i-1]+ncol;

/* return pointer to array of pointers to rows */
return m;
}

double **dmatrix(long nrl, long nrh, long ncl, long nch)
/* allocate a double matrix with subscript range m[nrl..nrh] [ncl..nch] */
{
long i, nrow=nrh-nrl+1,ncol=nch-ncl+1;
double **m;

/* allocate pointers to rows */
m=(double **) malloc((size_t)((nrow+NR_END)*sizeof(double)));
if (!m) nrerror("allocation failure 1 in matrix()");
m += NR_END;
m -= nrl;

/* allocate rows and set pointers to them */
m[nrl]=(double *) malloc((size_t)((nrow*ncol+NR_END)*sizeof(double)));
if (!m[nrl]) nrerror("allocation failure 2 in matrix()");
m[nrl] += NR_END;
m[nrl] -= ncl;
}

```

```

for(i=nrl+1;i<=nrh;i++) m[i]=m[i-1]+ncol;

/* return pointer to array of pointers to rows */
return m;
}

int **imatrix(long nrl, long nrh, long ncl, long nch)
/* allocate a int matrix with subscript range m[nrl..nrh] [ncl..nch] */
{
long i, nrow=nrh-nrl+1,ncol=nch-ncl+1;
int **m;

/* allocate pointers to rows */
m=(int **) malloc((size_t)((nrow+NR_END)*sizeof(int*)));
if (!m) nrerror("allocation failure 1 in matrix()");
m += NR_END;
m -= nrl;

/* allocate rows and set pointers to them */
m[nrl]=(int *) malloc((size_t)((nrow*ncol+NR_END)*sizeof(int)));
if (!m[nrl]) nrerror("allocation failure 2 in matrix()");
m[nrl] += NR_END;
m[nrl] -= ncl;

for(i=nrl+1;i<=nrh;i++) m[i]=m[i-1]+ncol;

/* return pointer to array of pointers to rows */
return m;
}

float **submatrix(float **a, long oldrl, long oldrh, long oldcl, long oldch,
long newrl, long newcl)
/* point a submatrix [newrl..] [newcl..] to a[oldrl..oldrh] [oldcl..oldch] */
{
long i,j,nrow=oldrh-oldrl+1,ncol=oldcl-newcl;
float **m;

/* allocate array of pointers to rows */
m=(float **) malloc((size_t) ((nrow+NR_END)*sizeof(float*)));
if (!m) nrerror("allocation failure in submatrix()");
m += NR_END;
m -= newrl;

```

```

/* set pointers to rows */
for(i=oldrl,j=newrl;i<=oldrh;i++,j++) m[j]=a[i]+ncol;

/* return pointer to array of pointers to rows */
return m;
}

float **convert_matrix(float *a, long nrl, long nrh, long ncl, long nch)
/* allocate a float matrix m[nrl..nrh][ncl..nch] that points to the matrix
declared in the standard C manner as a[nrow][ncol], where nrow=nrh-nrl+1
and ncol=nch-ncl+1. The routine should be called with the address
&a[0][0] as the first argument. */
{
long i,j,nrow=nrh-nrl+1,ncol=nch-ncl+1;
float **m;

/* allocate pointers to rows */
m=(float **) malloc((size_t) ((nrow+NR_END)*sizeof(float*)));
if (!m) nrerror("allocation failure in convert_matrix()");
m += NR_END;
m -= nrl;

/* set pointers to rows */
m[nrl]=a-ncl;
for(i=1,j=nrl+1;i<nrow;i++,j++) m[j]=m[j-1]+ncol;
/* return pointer to array of pointers to rows */
return m;
}

float ***f3tensor(long nrl, long nrh, long ncl, long nch, long ndl, long ndh)
/* allocate a float 3tensor with range t[nrl..nrh][ncl..nch][ndl..ndh] */
{
long i,j,nrow=nrh-nrl+1,ncol=nch-ncl+1,ndep=ndh-ndl+1;
float ***t;

/* allocate pointers to pointers to rows */
t=(float ***) malloc((size_t)((nrow+NR_END)*sizeof(float**)));
if (!t) nrerror("allocation failure 1 in f3tensor()");
t += NR_END;
t -= nrl;

/* allocate pointers to rows and set pointers to them */
t[nrl]=(float **) malloc((size_t)((nrow*ncol+NR_END)*sizeof(float*)));
if (!t[nrl]) nrerror("allocation failure 2 in f3tensor()");

```

```

t[nrl] += NR_END;
t[nrl] -= ncl;

/* allocate rows and set pointers to them */
t[nrl][ncl]=(float *) malloc((size_t)((nrow*ncol*ndep+NR_END)*sizeof(float)));
if (!t[nrl][ncl]) nrerror("allocation failure 3 in f3tensor()");
t[nrl][ncl] += NR_END;
t[nrl][ncl] -= ndl;

for(j=ncl+1;j<=nch;j++) t[nrl][j]=t[nrl][j-1]+ndep;
for(i=nrl+1;i<=nrh;i++) {
t[i]=t[i-1]+ncol;
t[i][ncl]=t[i-1][ncl]+ncol*ndep;
for(j=ncl+1;j<=nch;j++) t[i][j]=t[i][j-1]+ndep;
}

/* return pointer to array of pointers to rows */
return t;
}

void free_vector(float *v, long nl, long nh)
/* free a float vector allocated with vector() */
{
free((FREE_ARG) (v+nl-NR_END));
}

void free_ivector(int *v, long nl, long nh)
/* free an int vector allocated with ivector() */
{
free((FREE_ARG) (v+nl-NR_END));
}

void free_cvector(unsigned char *v, long nl, long nh)
/* free an unsigned char vector allocated with cvector() */
{
free((FREE_ARG) (v+nl-NR_END));
}

void free_lvector(unsigned long *v, long nl, long nh)
/* free an unsigned long vector allocated with lvector() */
{
free((FREE_ARG) (v+nl-NR_END));
}

```

```

void free_dvector(double *v, long nl, long nh)
/* free a double vector allocated with dvector() */
{
free((FREE_ARG) (v+nl-NR_END));
}

void free_matrix(float **m, long nrl, long nrh, long ncl, long nch)
/* free a float matrix allocated by matrix() */
{
free((FREE_ARG) (m[nrl]+ncl-NR_END));
free((FREE_ARG) (m+nrh-NR_END));
}

void free_dmatrix(double **m, long nrl, long nrh, long ncl, long nch)
/* free a double matrix allocated by dmatrix() */
{
free((FREE_ARG) (m[nrl]+ncl-NR_END));
free((FREE_ARG) (m+nrh-NR_END));
}

void free_imatrix(int **m, long nrl, long nrh, long ncl, long nch)
/* free an int matrix allocated by imatrix() */
{
free((FREE_ARG) (m[nrl]+ncl-NR_END));
free((FREE_ARG) (m+nrh-NR_END));
}

void free_submatrix(float **b, long nrl, long nrh, long ncl, long nch)
/* free a submatrix allocated by submatrix() */
{
free((FREE_ARG) (b+nrl-NR_END));
}

void free_convert_matrix(float **b, long nrl, long nrh, long ncl, long nch)
/* free a matrix allocated by convert_matrix() */
{
free((FREE_ARG) (b+nrh-NR_END));
}

void free_f3tensor(float ***t, long nrl, long nrh, long ncl, long nch,
long ndl, long ndh)
/* free a float f3tensor allocated by f3tensor() */
{
free((FREE_ARG) (t[nrl][ncl]+ndl-NR_END));
}

```

```

free((FREE_ARG) (t[nrl]+ncl-NR_END));
free((FREE_ARG) (t+nrl-NR_END));
}

```

File name: system.cpp

Construction of the system.

```

//system.cpp
#include <stdio.h>
#include <iostream>
#include <math.h>
#include "nrutil.h"
#include "in.h"
#include "defin.h"

using namespace std;

//=====
//Ci
//=====

const float C2 = ( u_c / ( l_c*k_c*n_n ) );
const float C3 = ( n_c/n_n );
const float C4 = ( Sp_c/( V_c*n_n*k_c ) );
const float C5 = ( n_n/n_c );
const float C6 = ( Q_c/(V_c*k_c*n_n*n_c*T_o*K) );
const float C7 = ( u_c*A_c/(V_c*k_c*n_c) );
const float C8 = ( Sp_c/ ( V_c*n_c*k_c ) );
const float C9 = ( P_c / (V_c*k_c*T_ec*n_n*n_c) );
//=====

#include "K.h"
#include "E.h"

//=====
//normalized quantities
//=====

float p_h=p/p_c;
float V_h = V/V_c;
float A_h = A/A_c;
//float u_th = v_th/u_c;
float P_h = P_abs/P_c;
float Q_h = Q/Q_c;
float T_h=T;
//=====

```

```

void funcv( int n , float x[] , float f[] )
{
//charge neutrality equation
f[ 1 ] = x[1] + x[6] - x[3] - x[7];

#include "equation.h"

//power balance
f[ 8 ] = C9*P_h/V_h - ( K1*E1 + K2*E2 + K3*E3 + K8*E8 )*x[1]*x[2]
- exc0*x[4]*x[1] - exc02*x[2]*x[1] - ( K4*E4 + K9*E9 )*x[1]*x[4]
- K13*E13*x[5]*x[1] - 3*K_elas1*x[4]*x[1]*m_e*x[8]/M_0
- 3*K_elas2*x[2]*x[1]*m_e*x[8]/M_02 - C2*Loss1*( E_e + E_i )*x[7]
- C2*Loss2*( E_e + E_i )*x[3];

//pressure= nKT
f[ 9 ] = p_h -(n_n/p_c)*(x[2]+x[4]+x[5])*K*T;

}

```

File name: usrfun.cpp

Taken from Numecal Recipies in C ([69]).

```

// usrfun.cpp

#include <math.h>
#include "nrutil.h"

#define FREERETURN {free_matrix(fjac,1,n,1,n);free_vector(fvec,1,n);\n
free_vector(p,1,n);free_ivector(indx,1,n);return;}
void usrfun( float *x ,int n , float *fvec , float **fjac)
{
    void funcv( int n , float x[] , float f[] );
    void fdjac( int n, float x[], float fvec[], float **df, void (*funcv)
                (int, float [], float []));

    funcv( n , x , fvec );
    fdjac( n , x , fvec , fjac , funcv );
}

```

File name: xnewt.cpp

In this file user gives the initial guesses and defines the output files.

```
//xnewt.cpp
```

```

/* Driver for routine new */

#include <stdio.h>
#include <iostream>
#include <fstream>
#include <math.h>
#include "nrutil.h"
#include "input.h"
#include "defin.h"
#define N 9

using namespace std;

void mnewt(int ntrial, float x[], int n , float tolx, float tolf);
void funcv( int n , float x[] , float f[] );

int main(void)
{
    int i,check;
    float *x,*f, pres,*n,*c,sum=0;

    x=vector(1,N);
    f=vector(1,N);

    // xinit to store the initial estimation
    float *xinit;
    xinit=vector(1,N);

    //initial guesses
    x[1]=xinit[1]= 2.31;      // electrons
    x[2]=xinit[2]= 0.48;      // O2 molecules
    x[3]=xinit[3]= 0.059;     // O2+ ions
    x[4]=xinit[4]= 14.88;     // O atoms
    x[5]=xinit[5]= 0.721;     // O(1D) metastable
    x[6]=xinit[6]= 0.201;     // O- ions
    x[7]=xinit[7]= 2.455;     // O+ ions
    x[8]=xinit[8]= 0.9247;    // electron energy
    x[9]=xinit[9]= 0.4944;    // Sp pumping rate

    const float tolx = 1.0e-6;
    const float tolf = 1.0e-5;

```

```

cout << "calling Newton" << endl;
mnewt( 20000 , x , N , tolx , tolf );
funcv( N , x , f );

//=====output=====
ofstream outfile("input-1.dat");
outfile << "Bo" << "\t" << Bo << endl;
outfile << "B" << "\t" << B << endl;
outfile << "p" << "\t" << p << endl;
outfile << "P_abs" << "\t" << P_abs << endl;
outfile << "g_rec" << "\t" << g_rec << endl;
outfile << "T" << "\t" << T << endl;
outfile << "Ti" << "\t" << Ti << endl;
outfile << "Q" << "\t" << Q << endl;
outfile.close();

ofstream outfile1("out1-1.dat");
outfile1 << "a" << "\t" << a << endl;
outfile1 << "g" << "\t" << g << endl << endl;
outfile1 << "r_ce" << "\t" << r_ce << endl ;
outfile1 << "r_ci1" << "\t" << r_ci1 << endl;
outfile1 << "r_ci2" << "\t" << r_ci2 << endl << endl;
outfile1 << "lambda" << "\t" << lambda << endl;
outfile1 << "lambda_e" << "\t" << lambda_e << endl << endl;
outfile1 << "floss1" << "\t" << floss1 << endl;
outfile1 << "floss2" << "\t" << floss2 << endl << endl;
outfile1 << "w1" << "\t" << w1 << endl;
outfile1 << "w2" << "\t" << w2 << endl << endl;
outfile1 << "freq7" << "\t" << freq7 << endl;
outfile1 << "freq" << "\t" << freq << endl << endl;
outfile1 << "v_e" << "\t" << v_e << endl;
outfile1 << "v_th" << "\t" << v_th << endl << endl;
outfile1 << "fractional dissociation" << "\t" <<
( (Q/(T_o*K) - x[9]*x[2]*Sp_c*n_n) ) / ( Q/(T_o*K) ) << endl << endl;
outfile1 << "Ub02" << "\t" << Ub02*u_c << endl;
outfile1 << "Ub0" << "\t" << Ub0*u_c << endl << endl;
outfile1 << "IonFlux02+" << "\t" << Ub02*u_c*x[3]*n_c << endl;
outfile1 << "IonFlux0+" << "\t" << Ub0*u_c*x[7]*n_c << endl << endl;
outfile1 << "IonCurrent02+" << "\t" << Ub02*u_c*x[3]*n_c*q_e << endl;
outfile1 << "IonCurrent0+" << "\t" << Ub0*u_c*x[7]*n_c*q_e << endl;
outfile1 << "IonCurrent+" << "\t" << Ub0*u_c*x[7]*n_c*q_e
+ Ub02*u_c*x[3]*n_c*q_e << endl << endl;
outfile1.close();

```

```

ofstream outfile2("out2-1.dat");
outfile2 << "[e]" << "\t" << x[1]*n_c << endl ;
outfile2 << "[02+]" << "\t" << x[3]*n_c << endl;
outfile2 << "[0-]" << "\t" << x[6]*n_c << endl;
outfile2 << "[0+]" << "\t" << x[7]*n_c << endl << endl;
outfile2 << "[02]" << "\t" << x[2]*n_n << endl;
outfile2 << "[0]" << "\t" << x[4]*n_n << endl;
outfile2 << "[0(1D)]" << "\t" << x[5]*n_n << endl << endl;
outfile2 << "Te" << "\t" << x[8]*T_ec/eV_J << endl;
outfile2 << "Sp" << "\t" << x[9]*Sp_c << endl << endl;
outfile2.close();

ofstream outfile3("out3-1.dat");
outfile3 << "Di" << "\t" << Di << endl ;
outfile3 << "Dip" << "\t" << Dip << endl << endl;
outfile3 << "De" << "\t" << De << endl;
outfile3 << "Dep" << "\t" << Dep << endl << endl;
outfile3 << "mu_e" << "\t" << mu_e << endl;
outfile3 << "mu_ep" << "\t" << mu_ep << endl << endl;
outfile3 << "mu_i" << "\t" << mu_i << endl;
outfile3 << "mu_ip" << "\t" << mu_ip << endl << endl;
outfile3 << "omega_e" << "\t" << omega_e << endl;
outfile3 << "omega_i" << "\t" << omega_i << endl << endl;
outfile3 << "Dap" << "\t" << Dap << endl;
outfile3 << "Da" << "\t" << Da << endl << endl;
outfile3 << "omega_e/freq" << "\t" << omega_e/freq << endl;
outfile3 << "omega_i/freqi" << "\t" << omega_i/freqi << endl << endl;
outfile3 << "hR11" << "\t" << hR11 << endl;
outfile3 << "hR11p" << "\t" << hR11p << endl << endl;
outfile3 << "hR12" << "\t" << hR12 << endl;
outfile3 << "hR12p" << "\t" << hR12p << endl << endl;
outfile3.close();

free_vector(f,1,N);
free_vector(x,1,N);

cout << "Press an integer to finish." << endl;
int dummy;
cin >> dummy;

return 0;
}

```

Παράρτημα Β

Διαστάσεις και μονάδες

Φυσική Ποσότητα	Συμβολισμός	Διαστάσεις	Μονάδες στο SI
Φορτίο	q	q	coulomb
Ροή ιόντων	j	$q/(l^2 t)$	$ampere/m^2$
Πυκνότητα	ρ	m/l^3	kg/m^3
Ηλεκτρικό πεδίο	\mathbf{E}	$ml/(t^2 q)$	$volt/m$
Ενέργεια	E	ml^2/t^2	joule
Συχνότητα	ν	$1/t$	hertz
Μήκος	l	l	meter(m)
Μάζα	m	m	kilogram(kg)
Μαγνητική διαπερατότητα	μ	ml/q^2	henry/m
Διηλεκτρική σταθερά	ϵ	$t^2 q^2/(ml^3)$	farad/m
Ισχύς	P	ml^2/t^3	watt
Πίεση	p	m/lt^2	pascal

Πίνακας B.1: Διαστάσεις και μονάδες φυσικών ποσοτήτων.

Παράρτημα C

Φυσικές σταθερές (SI)

Φυσική Ποσότητα	Συμβολισμός	Τιμή	Μονάδες στο SI
Σταθερά Boltzman	k	1.3807×10^{-23}	JK^{-1}
Σταθερά Planck	h	6.6261×10^{-34}	Js
Στοιχειώδες φορτίο	q_e	1.6022×10^{-19}	C
Μάζα ηλεκτρονίου	m_e	9.1094×10^{-31}	kg
Μάζα πρωτονίου	m_p	1.6726×10^{-27}	kg
Μαγνητική διαπερατότητα του κενού	μ_0	$4\pi \times 10^{-7}$	Hm^{-1}
Διηλεκτρική σταθερά του κενού	ϵ_0	8.8542×10^{-12}	Fm^{-1}
Συχνότητα που αντιστοιχεί στο 1 eV	$\nu_0 = e/h$	2.4189×10^{14}	Hz
Ενέργεια που αντιστοιχεί στο 1 eV	$h\nu_0$	1.6022×10^{-19}	J
Ενέργεια που αντιστοιχεί στο 1 Kelvin	k/e	8.6174×10^{-5}	eV
Θερμοκρασία που αντιστοιχεί στο 1 eV	e/k	1.1604×10^4	K
Αριθμός Avogadro	N_A	6.0221×10^{23}	mol^{-1}
Atomic mass unit (amu)	m_u	1.6605×10^{-27}	kg
Θερμοκρασία δωματίου	T_0	273.15	K

Πίνακας C.1: Φυσικές σταθερές (SI).

Βιβλιογραφία

- [1] Lee Chris, *Plasma Chemistry in High Density Glow Discharges Used in Materials Processing*, University of California, Berkeley, 1995.
- [2] Lymeropoulos P. Dimitris, *Multidimensional Modeling and Simulation of Plasma Processing Reactors*, University of Houston, 1995.
- [3] Kouznetsov Igor German, *Modeling Electronegative Discharges*, University of California, Berkeley, 1997.
- [4] Kiehlbauch W. Mark, *Innovative Techniques in Plasma Modeling*, University of California, Berkeley, 2001.
- [5] Taylor J. Kurt, *Control of Radical and Ion Density in Oxygen Discharges Using Noble Gas*, University of California, San Diego, 2005.
- [6] Kim Sungjin, *An Improved Global Model for Electronegative Discharge and Ignition Conditions for Peripheral Plasma Connected to a Capacitive Discharge*, University of California, Berkeley, 2006.
- [7] Jon Tomas Gudmundsson, *A critical review of the reaction set for a low pressure oxygen processing discharge*, University of Iceland, 2004.
- [8] C. Lee and M. A. Lieberman, *Global model of Ar, O₂, Cl₂ and Ar/O₂ high-density plasma discharges*, J. Vac. Sci. Technol. A, 13(2), 1995.
- [9] C. Lee, D. B. Graves, M. A. Lieberman and D. W. Hess, *Global Model of Plasma Chemistry in a High Density Oxygen Discharge*, J. Vac. Sci. Technol. A, 141, 1994.

- [10] Y. T. Lee, M. A. Lieberman, A. J. Lichtenberg, F. Bose, H. Baltes and R. Patrick, *Global Model for High Pressure Electronegative Radio-Frequency Discharges*, Journal of Vacuum Science and Technology A, 15, 1997.
- [11] J. T. Gudmundsson and M. A. Lieberman, *Model and measurements for a planar inductive oxygen discharge*, Plasma Sources Sci. Technol., 7, 1998.
- [12] J. T. Gudmundsson, Takashi Kimura and M. A. Lieberman, *Experimental studies of O₂/Ar plasma in a planar inductive discharge*, Plasma Sources Sci. Technol., 8, 1999.
- [13] J. T. Gudmundsson, A. M. Marakhtanov, K. K. Patel, V. P. Gopinath and M. A. Lieberman, *On the plasma parameters of a planar inductive oxygen discharge*, J. Phys. D: Appl. Phys., 33, 2000.
- [14] J. T. Gudmundsson, I. G. Kouznetsov, K. K. Patel and M. A. Lieberman, *Electronegativity of Low Pressure High Density Oxygen Discharges*, J. Phys. D: Appl. Phys., 34, 2001.
- [15] I. G. Kouznetsov, A. J. Lichtenberg and M. A. Lieberman, *Modeling Electronegative Discharges at Low Pressure*, Plasma Sources Sci. Technol., 5, 1996.
- [16] T. Kimura and K. Ohe, *Probe measurements and global model of inductively coupled Ar/CF₄ discharges*, Plasma Sources Sci. Technol., 8, 1999.
- [17] T. Kimura, A. J. Lichtenberg and M. A. Lieberman, *Modeling Two Dimensional Electronegative Discharges*, Plasma Sources Sci. Technol., 10, 2001.
- [18] E. Meeks and J. W. Shon, *Modeling of Plasma-Etch Process Using Well Stirred Reactor Approximations and Including Complex Gas-Phase and Surface Reactions*, IEEE Trans. Plasma Sci., 23, 1995.
- [19] Mark W. Kiehlbauch and David B. Graves, *Inductively coupled plasmas in oxygen: Modelling and experiment*, J. Vac. Sci. Technol. A, 21(3), 2003.
- [20] M. Meyyappan, *Analysis of pulse-time modulated high density discharges*, J. Vac. Sci. Technol. A, 14, 1996.
- [21] S. Ashida and M. A. Lieberman, *Spatially Averaged Model of Time Modulated High Density Chlorine Plasmas*, Jpn. J. Appl. Phys., 36, 1997.

- [22] M. Meyyappan, *Modeling of a Pulse-Power SF₆ Plasma*, Jpn. J. Appl. Phys. Pt. I, 36, 1997.
- [23] Meyyappan M. and Govindan T. R., *Modeling of electronegative radiofrequency discharges*, IEEE Trans. Plasma Sci., 19, 1991.
- [24] Meyyappan M. and Govindan T. R., *Modeling of magnetron etching discharges*, J. Vac. Sci. Technol. A, 10, 1992.
- [25] S. Panda, D. J. Economou and M. Meyyappan, *Effect of Metastable Oxygen Molecules in High-Density Power Modulated Oxygen Discharges*, J. Appl. Phys., 87, 2000.
- [26] M. J. Kushner, W. Z. Collision and M. J. Grapperhaus, *A three-dimensional model for inductively coupled plasma etching reactors: Azimuthal symmetry, coil properties, and comparison to experiments*, J. Appl. Phys., 80, 1996.
- [27] M. J. Kushner, *Consequences of asymmetric pumping in low pressure plasma processing reactors: A three-dimensional modeling study*, J. Appl. Phys., 82, 1997.
- [28] H. H. Hwang, E. R. Keiter, and M. J. Kushner, *Consequences of three-dimensional physical and electromagnetic structures on dust particle trapping in high plasma density material processing discharges*, J. Vac. Sci. Technol. A, 16, 1998.
- [29] Kline E.L. and Kushner M. J., *Computer simulation of materials processing plasma discharges*, Solid State Mat. Sci., 16, 1989.
- [30] D. J. Economou, T. L. Panagopoulos and M. Meyyappan, *Examining Scale-up and Computer Simulation in Tool Design for 300-mm wafer Processing*, Micro, 16, 1998.
- [31] T. L. Panagopoulos, D. Kim, V. Midha and D. J. Economou, *Three-Dimensional Simulation of Inductively Coupled Plasma*, J. Appl. Phys., 91, 2002.
- [32] D. J. Economou, S. Park, *Analysis of low pressure rf glow discharges using a continuum model*, J. Appl. Phys., 68, 1990a.
- [33] D. J. Economou, S. Park, *Parametric study of a radio-frequency glow discharge using a continuum model*, J. Appl. Phys., 68, 1990c.
- [34] D. J. Economou, S. Park, *Numerical simulation of single-wafer isothermal plasma etching reactor*, J. Electrochem. Soc., 137, 1990b.

- [35] V. A. Godyak, *Soviet radio frequency discharge research*, Delphic Associates, Falls Church, 1986.
- [36] E. P. Hammond, K. Mahesh and P. Moin, *A Numerical Method to Simulate Radio-Frequency Plasma Discharges*, Journal of Computational Physics, 2002.
- [37] J. P. Boeuf, *Numerical model of rf glow discharges*, Phys. Rev. A, 36, 1987.
- [38] Boeuf J. P. and Pitchford L. C., *Pseudospark discharges via computer simulation*, IEEE Trans. Plasma Sci., 19, 1991.
- [39] Graves D. B. and Jensen K. F., *A continuum model of dc and rf discharges*, IEEE Trans. Plasma. Sci., PS-14, 1986.
- [40] D. B. Graves, *Fluid model simulations of a 13.56 MHz rf discharge: Time and space dependence of rates of electron impact excitation*, J. Appl. Phys., 62, 1987.
- [41] Barnes S. M., Colter J. T. , and Elta E. M., *Large-signal time-domain modeling of low-pressure rf glow discharges*, J. Appl. Phys., 61, 1987
- [42] Barnes S. M., Colter J. T. , and Elta E. M., *A staggered-mesh finite-difference numerical method for solving the transport equations in low-pressure rf glow discharges*, J. Comp. Phys., 77, 1988.
- [43] Gogolides E. , Nicolai J. P. and Sawin H. H., *Comparison of experimental measurements and model predictions for radio-frequency Ar and SF₆*, J. Vac. Sci. Technol. A, 7, 1989.
- [44] Gogolides E. and Sawin H. H., *Continuum modeling of radio-frequency glow discharges I. Theory and results for electropositive and electronegative gases*, J. Appl. Phys., 72, 1992a.
- [45] Gogolides E. and Sawin H. H., *Continuum modeling of radio-frequency glow discharges II. Parametric studies and sensitivity analysis*, J. Appl. Phys., 72, 1992b.
- [46] Gogolides E. , Stathakopoulos M. and Boudouvis A., *Modeling of radio-frequency plasmas in tetrafluoromethane (CF₄): The gas phase physics and the role of negative ion detachment*, J. Phys. D: Appl. Phys., 27, 1994.
- [47] Mark P. and Muller K. G., *Spatiotemporal evolution of a low-pressure glow discharge*, J. Appl. Phys., 70, 1991.

- [48] Sato N. and Tagashira H., *A hybrid Monte Carlo/fluid model of rf plasmas in a SiH₄/H₂ mixture*, IEEE Trans. Plasma Sci., PS-19, 1991.
- [49] Lymeropoulos D. P. and Economou D. J., *Fluid simulations of glow discharges: Effect of metastable atom in argon*, J. Appl. Phys., 73, 1993a.
- [50] Lymeropoulos D. P. and Economou D. J., *Fluid simulations of glow discharges: Two-dimensional argon discharge including metastables*, Appl. Phys. Lett., 63, 1993b.
- [51] Lymeropoulos D. P. and Economou D. J., *Two-dimensional simulation of polysilicon etching with chlorine in a high density plasma reactor*, IEEE Trans. Plasma Sci., 1995b.
- [52] Feoktistov V. A. , Popov A. M. , Popovicheva O. B. , Rakhimov A. T. , Rakhimova T. V. and Volkova E. A., *RF discharges modeling considering time dependence and spatial nonlocality of the electron energy spectrum*, IEEE Trans. Plasma Sci., 19, 1991.
- [53] Sommerer T. J. and Kushner M. J., *Monte Carlo-fluid model of chlorine atom production in Cl₂, HCl and CCl₄ radio-frequency discharges for plasma etching*, J. Vac. Sci. Technol. B, 10, 1992.
- [54] Sommerer T. J. and Kushner M. J., *Numerical investigation of the kinetics and chemistry of rf glow discharge plasmas sustained in He, N₂, O₂, He/N₂/O₂, He/CF₄/O₂ and SiH₄/NH₃ using a Monte Carlo-fluid model*, J. Appl. Phys., 71, 1991.
- [55] Mantzaris N. , Gogolides E. and Boudouvis A., *Radio-frequency plasmas in CF₄: Self-consistent modeling of the plasma physics and chemistry*, J. Appl. Phys., 77(12), 1995.
- [56] Mantzaris N. , Gogolides E. and Boudouvis A., *A comparative study of CH₄ and CF₄ rf discharges using a consistent plasma physics and chemistry simulation*, Plasma Chemistry and Plasma Processing, 16, 1996.
- [57] J. P. Booth, O. Joubert, J. Pelletier and N. Sadeghi *Oxygen atom actinometry reinvestigated: Comparison with absolute measurements by resonance absorption at 130 nm*, J. Appl. Phys., 69(2), 1991.
- [58] Chung T. H., Yoon H. J. and Seo D. C., *Global model and scaling laws for inductively coupled oxygen discharge plasma*, J. Appl. Phys., 86, 7, 1999.

- [59] Ramamurthi B. and Economou D., *Two-dimensional pulsed-plasma simulation of a chlorine discharge*, Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 20(2), 2002.
- [60] Midha V. and Economou D., *Spatio-temporal evolution of pulsed chlorine discharge*, Plasma Sources Sci. Technol., 9, 256-269, 2000.
- [61] Kaganovich I. D., Ramamurthi B. N. and Economou D., *Spatiotemporal dynamics of charged species in the afterglow of plasmas containing negative ions*, Phys. Rev. E 64, 2001.
- [62] Manabu Edamura, Eric C. Benck, and Yicheng Wang, *Time-resolved measurements of the E-to-H mode transition in electronegative pulse-modulated inductively coupled plasmas*, Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 24(6), 2006.
- [63] M. Meyyappan, *Computational Modeling in Semiconductor Processing*, Artech House, 1995.
- [64] Alfred Grill, *Cold Plasma in Materials Fabrication*, IEEE PRESS, 1994.
- [65] Francis F. Chen and Jane P. Chang, *Lecture Notes on PRINCIPLES OF PLASMA PROCESSING*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2003.
- [66] W. N. G. Hitchon, *Plasma Processes for Semiconductor Fabrication*, Cambridge University Press, 1999.
- [67] M. A. Lieberman and A. J. Lichtenberg, *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing*, 2nd ed., John Wiley & Sons, Inc., New York, 2005.
- [68] Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., and Flannery B. P., *Numerical recipes in C. The art of scientific computing*, 2nd edition, Cambridge University Press, 1997.
- [69] J. E. Dennis, Jr. and Robert B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, siam, 1996.