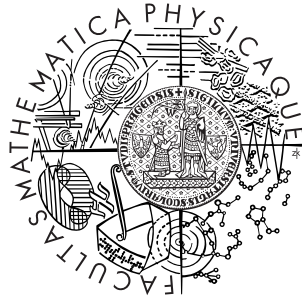


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

DIPLOMOVÁ PRÁCE



Tryskové plazmatické systémy - experiment a model

Peter Rubovič

Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Vedoucí diplomové práce: doc. Mgr. Pavel Kudrna, Dr.

Studijní program: Fyzika, fyzika povrchů a ionizovaných prostředí

2010

Ďakujem školiteľovi, doc. Mgr. Pavlovi Kudrnovi, Dr., za vedenie pri vypracovávaní tejto práce a Mgr. Janovi Klusoňovi za pomoc pri meraní a spracovávaní experimentálnych dát. Katedre fyziky povrchov a plazmy ďakujem za možnosť používať program FlexPDE.

Prohlašuji, že jsem svou diplomovou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce.

V Praze dne

Peter Rubovič

Obsah

1	Úvod	7
2	Ciele práce	8
3	Teória	9
3.1	Plazmatická tryska	9
3.1.1	Jednosmerne budený výboj s dutou katódou	10
3.1.2	Rádiofrekvenčne budený výboj s dutou katódou	12
3.1.3	Použitie pre PVD	14
3.1.4	Optická diagnostika tryskového výboja	15
3.2	Prúdenie tekutín	16
3.2.1	Rýchlosť zvuku	17
3.2.2	Rázová vlna	18
3.2.3	Viskozita	20
3.2.4	Voľba rovníc	21
3.3	Model prúdenia	22
3.3.1	Mriežka	22
3.3.2	Metódy diskretizácie	23
4	Model	25
4.1	Rovnice	25
4.2	Okrajové podmienky	26
4.3	Parametre	28
4.3.1	Teplotná závislosť	29
4.4	Program	31
4.5	Referenčný výpočet	31
4.6	Rázová vlna	33
5	Experiment	36
5.1	Aparatúra	36
5.2	Experimentálne určenie rýchlosti	36
5.3	Porovnanie výsledkov	37

Název práce: Tryskové plazmatické systémy - experiment a model

Autor: Peter Rubovič

Katedra (ústav): Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Vedoucí diplomové práce: doc. Mgr. Pavel Kudrna, Dr.

e-mail vedoucího: Pavel.Kudrna@mff.cuni.cz

Abstrakt: V predloženej práci skúmame prúdenie pracovného plynu systémom s plazmatickou tryskou. V práci je popísaný základný princíp výboja v dutej katóde a jeho technologické využitie, najmä pre potreby nanášania tenkých vrstiev. Jedným z dôležitých parametrov pri nanášaní je rýchlosť, s akou sa pohybuje pracovný plyn a s ním rozprášený materiál terča smerom k substrátu. Kvôli presnosti a reprodukovateľnosti experimentov je nutné poznať vzťahy medzi prúdením pracovného plynu a vonkajšími parametrami experimentu, ako je napríklad prúd pracovného plynu a tlak v komore. Pre tieto účely boli spravené merania rýchlosti iónov pomocou Langmuirovej elektrostatickej sondy pri pulznom pracovnom režime trysky. Namerané údaje sú porovnané s počítačovým modelom, ktorý bol vyvinutý v rámci tejto práce. Tento model popisuje prúdenie pracovného plynu numerickým riešením Navier-Stokesovej rovnice pre stlačiteľné newtonovské tekutiny. Model je porovnaný s publikovanými výsledkami popisujúcimi prúdenie v dutej katóde, pričom je preukázateľná zhoda výsledkov. Výstup modelu ale dáva rozdielne výsledky v porovnaní s nameranými údajmi, ktoré pochádzajú z oblasti mimo katódu. Súčasťou popisu modelu je diskusia závislosti prúdenia na teplote.

Klíčová slova: plazmatická tryska, dutá katóda, prúdenie plynu, počítačový model

Title: Plasma-jet systems - experiment and model
Author: Peter Rubovič
Department: Department of Surface and Plasma Science
Supervisor: doc. Mgr. Pavel Kudrna, Dr.
Supervisor's e-mail address: Pavel.Kudrna@mff.cuni.cz

Abstract: In the present work we study the flow of working gas through a plasma-jet system. In this work we describe the basic principle of hollow cathode discharge and its use for technological applications, mainly for thin layers coating. One of the important parameters during the deposition is the speed of the working gas flow and with it the sputtered target material towards the substrate. Because of the reproducibility and precision of the experiments it is important to know the relation between the working gas flow and external parameters of the experiment, e.g. flow of the gas and the pressure in the chamber. This is the reason why measurements of ions velocity using Langmuire electrostatic probe and pulse regime of plasma-jet were done. Measured data are compared with a computer model, which was developed in this work. This model describes the flow of the working gas by solving Navier-Stokes equation for compressible Newtonian fluids. The results of this model are compared with results from the paper describing the flow through the hollow cathode. It shows good agreement inside the cathode. The model is giving different results when comparing to measured data which are from the area outside the cathode. Part of the model description is a discussion of the temperature dependence of the flow.

Keywords: plasma-jet, hollow cathode, gas flow, computer model

Kapitola 1

Úvod

Nízkotepelná plazma ponúka širokú škálu priemyselneých aplikácií. Hlavná výhoda v porovnaní s ostatnými skupenstvami spočíva v schopnosti plazmy produkovať energeticky aktívne častice, ktoré môžu spôsobiť fyzikálne zmeny alebo chemické reakcie inými spôsobmi iba ťažko dosiahnuteľné. Často sa nízkotepelná plazma používa na úpravu povrchov, ktorá sa kvôli nesporným technologickým a ekonomickým výhodám v posledných rokoch používa čoraz častejšie. Úpravou povrchu sa napríklad rozumie nanášanie rôznych tenkých vrstiev na rozmanité substráty.

V 80. rokoch 20. storočia bola vyvinutá plazmatická tryska s dutou katódou, vid. [1] a [2], ktorá umožňuje efektívne nanášať tenké vrstvy a má mnohé výhodné vlastnosti, medzi ktoré patrí nízka teplota substrátu počas nanášania, možnosť lokálneho nanášania, či možnosť nanášania vo vnútri dutín. Bola využitá napríklad na nanášanie vrstiev TiN [3], ZnO [4], LiCoO_x [5] a mnohých iných, ktoré sú uvedené napríklad v [6].

Pre lepšiu kontrolu a reprodukovateľnosť výsledkov je potrebné študovať vzťah medzi vonkajšími parametrami experimentu, parametrami plazmy a parametrami nanášanej vrstvy. Medzi takéto vzťahy patrí tiež závislosť priestorového rozloženia rýchlosti a tlaku prúdiaceho plynu v aparátúre s plazmatickou tryskou na toku plynu privádzaného do nej a tlaku v komore.

Kapitola 2

Ciele práce

Ciele tejto práce sú:

- Štúdium literatúry týkajúcej sa plazmatickej trysky a prúdenia tekutín.
- Zoznámenie sa s experimentálnou aparátúrou plazmatickej trysky.
- Zostrojenie počítačového modelu prúdenia pracovného plynu plazmatickou tryskou s dutou katódou.
- Nameranie rýchlosti iónov v aparátúre a následné porovnanie s namodelovanými údajmi.

Je potrebné zostrojiť počítačový model prúdenia pracovného plynu aparátúrou plazmatickej trysky, ktorého vstupné údaje by boli prietok plynu vstupujúceho do nej a tlak v komore aparátúry, výsledkom by bol priebeh rýchlosti a tlaku v aparátúre.

Ďalej je potrebné premerať rýchlosti iónov na ose aparátúry v pulznom režime pomocou Langmuirovej sondy a porovnať ho s údajmi získanými z počítačového modelu. Je predpokladané, že ióny sú nesené prúdom častíc pracovného plynu [6].

Kapitola 3

Teória

3.1 Plazmatická tryska

Pre plazmatické nanášanie tenkých vrstiev je potrebné použiť účinný zdroj plazmy s dostatočne vysokou koncentráciou. V súčasnosti sa v priemysle používa mnoho druhov zdrojov nízkoteplotnej plazmy. V počiatkoch nízkoteplotnej plazmatickej chémie sa často ako zdroj plazmy používal obyčajný tlecí výboj, ktorý je popísaný napríklad v [7]. Metódy nanášania tenkých vrstiev delíme na dve základné, a to na metódy fyzikálne a chemické:

- Fyzikálna metóda, anglicky *Plasma Vapour Deposition* (PVD): Tenké vrstvy sú nanášané v dôsledku rozprašovania materiálu katódy, ktorá je bombardovaná iónmi z výboja.
- Chemická metóda, anglicky *Plasma Enhanced Chemical Vapour Deposition*, (PECVD): Pracovný plyn predstavuje chemicky reaktívnu zmes, čoho sa dosiahne pridaním pár vhodného prekursoru do výboja. Jej jednotlivé zložky v objeme aj pri dopade na povrch substrátu reagujú a vytvárajú tak tenkú vrstvu.

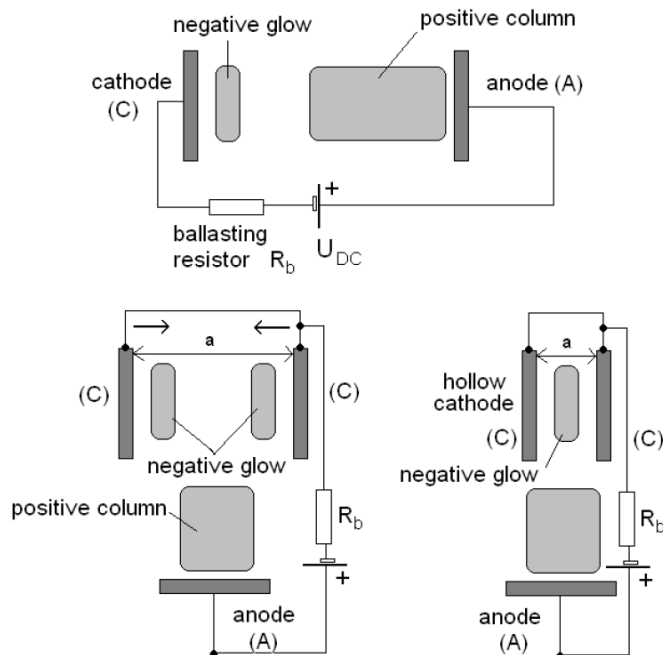
Dôvod, prečo sa nezostalo iba pri používaní tlecieho výboja bola relatívne nízka elektrónová a iónová hustota, a teda nízka rýchlosť nanášania hlavne pri metóde PVD. Z tohoto dôvodu bolo vyvinutých množstvo zdrojov s vyššou hustotou plazmy. Jednou z možností, ako toho dosiahnuť, je použitie výboja s dutou katódou, ktorá zároveň slúži ako tryska.

V aparátúre plazmatickej trysky, ktorá je na pracovisku KFPP k dispozícii môže byť výboj budený 3 rôznymi priebehmi napätia: striedavý rádiofrekvenčný (RF), kontinuálny jednosmerný (DC) a pulzný jednosmerný. Pokiaľ je dodávaný výkon zo zdroja nízky (pre RF približne do 20 W), prebieha v reaktore výboj medzi dutou katódou a elektródou, na ktorej je položený substrát. Akonáhle ale dodávaný výkon prekročí túto hranicu, dôjde k zapáleniu intenzívneho výboja

vo vnútri dutej katódy. Fyzikálnu podstatu tohoto javu si vysvetlíme v nasledujúcich častiach.

3.1.1 Jednosmerne budený výboj s dutou katódou

Už v 20. rokoch 20. storočia sa vedelo, že jednoduchý spôsob, ako zvýšiť hustotu plazmy v jednosmernom (DC) tlecom výboji je usporiadanie s dutou elektródou. V hornej časti obrázku 3.1 môžeme vidieť klasický tleci výboj medzi dvomi rovnobežnými elektródami v normálnom móde.



Obrázok 3.1: Schémy tlecieho výboja s rovinnými elektródami a výboja s dutou katódou [6].

Hodnota prúdovej hustoty j_0 je v tomto usporiadaní závislá na tlaku plynu p , jeho druhu a materiálu katódy. Výraz určujúci prúdovú hustotu je, vid'. [8]:

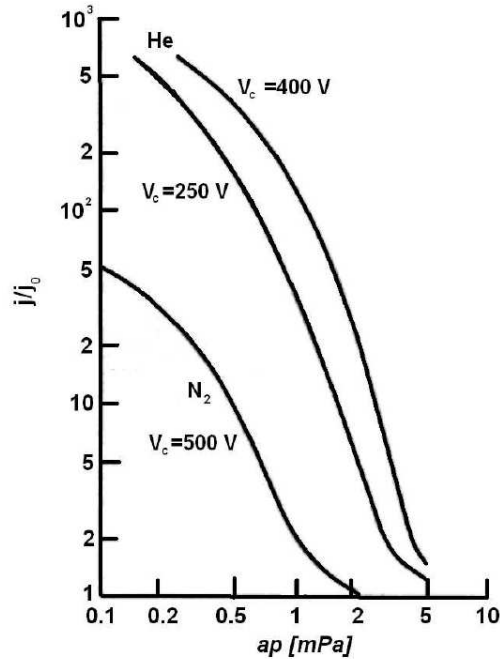
$$j_0 = \frac{4\varepsilon_0\mu V_{cn}^2 (1 + \gamma)}{d_n^3}, \quad (3.1)$$

kde ε_0 je permitivita vákua, μ pohyblivosť iónov, V_{cn} hodnota spádu napätia na katóde, γ koeficient sekundárnej emisie iónov a d_n dĺžka spádu napätia na katóde. Hodnoty koeficientov V_{cn} a pd_n sa dajú nájsť napríklad v [7] v závislosti na druhu plynu a materiálu katódy. Obvykle je ale hodnota j_0 nedostatočná pre technologické aplikácie, akou je napríklad naprašovanie. Ak ďalej zvyšujeme

prúd pretekajúci výbojkou, prúdová hustota j_0 zostáva rovnaká. To znamená, že pre nižšie výbojové prúdy je iba časť povrchu katódy aktívna a pokrytá katódovým bodom s aktívnym výbojom. Keď sa celkový prúd zvýši, j_0 zostáva rovnaké, ale zväčší sa aktívna časť povrchu katódy. Ak prúd ešte ďalej zvyšujeme, normálny tlecí výboj prejde do anomálneho, ktorý je sprevádzaný zvýšením prúdovej hustoty a katódového napätia. Princíp rozprašovania spočíva v tom, že ióny urýchlené katódovým spádom dopadajú na povrch katódy a uvoľňujú jej atómy. Tieto atómy difundujú k substrátu, kde môžu vytvoriť tenkú vrstvu. Pre dostatočne rýchle naprašovanie je ale potrebný vysoký prúd na katóde, ktorý je spojený s vysokým napätím V_c na nej (rádovo niekoľko kV). Pre takéto napätia ale efekt rozprašovania katódy už nie je efektívny a ďalšie zvyšovanie napätia na katóde by mohlo viesť k vzniku oblúkového výboja, čo je vysoko nežiaduce.

Pri použití výboja s dutou katódou je možné dosiahnuť omnoho vyššie prúdové hustoty pri relatívne nízkom V_c . Základný princíp je znázornený v dolnej časti obr. 3.1. Predstavme si dva systémy s normálnym tlecím výbojom s dvomi elektricky spojenými, rovnobežne orientovanými katódami v takej vzdialenosti, že sa ich záporné svetlá neprekrývajú. Máme teda dva tlecie výboje, ktorých prúdová hustota j_0 je daná výrazom 3.1. Akonáhle zmenšíme vzdialenosť a oboch katód, obe záporné svetlá sa začnú prekrývať a prúdová hustota výboja j začne stúpať napriek tomu, že hodnota napätia na katóde V_c je konštantná. Výsledok tohoto experimentu je znázornený na obrázku 3.2, ktorý je prebraný z [9]. Znáznorňuje závislosť prúdovej hustoty výboja j normalizovanej na j_0 na vzdialenosti oboch katód, ktorá je vynásobená tlakom vo výbojke. Každá krivka je pri konštantnej hodnote V_c . Horné dve krivky boli namerané v hélíu, dolná v dusíku. Nespornou výhodou použitia dutej katódy tiež je, že sa pri rovnakej prúdovej hustote zahrieva omnoho menej, ako to je v prípade anomálneho tlecieho výboja.

Fyzikálny princíp efektu dutej katódy si popíšeme s pomocou obrázku 3.3. Elektróny emitované z povrchu katódy sú urýchlené katódovým spádom V_c . Niektoré z nich sú súčasťou elektrónovej lavíny, tak ako ju poznáme z teórie tlecieho výboja, no niekoľko percent v oblasti katódového spádu nevykoná žiadnu zrážku. Tieto elektróny získajú celú energiu katódového spádu, typicky niekoľko sto voltov. Tieto rýchle elektróny sa pohybujú cez oblasť záporného svetla a sú odrazené z náprotivného katódového spádu. Takto sa vytvárajú oscilujúce elektrónové lúče vo vnútri katódy a zväčšujú stupeň ionizácie v oblasti záporného svetla a oboch katódových spádov. Týmto elektrónom sa zvykne hovoriť kyvadlové elektróny, alebo anglicky *pendulum electrons*. Tieto elektróny sú kľúčové pre efekt dutej katódy. Ďalší jav, ktorý zväčšuje ionizáciu v dutej katóde je spojený s vyššou pravdepodobnosťou, že povrch katódy bude zasiahnutý iónmi, metastabilmi a fotónmi zo záporného svetla. To je v dôsledku veľkého uhlu (obr. 3.3), ktorý určuje pravdepodobnosť, že zasiahnu katódu a spôsobia sekun-

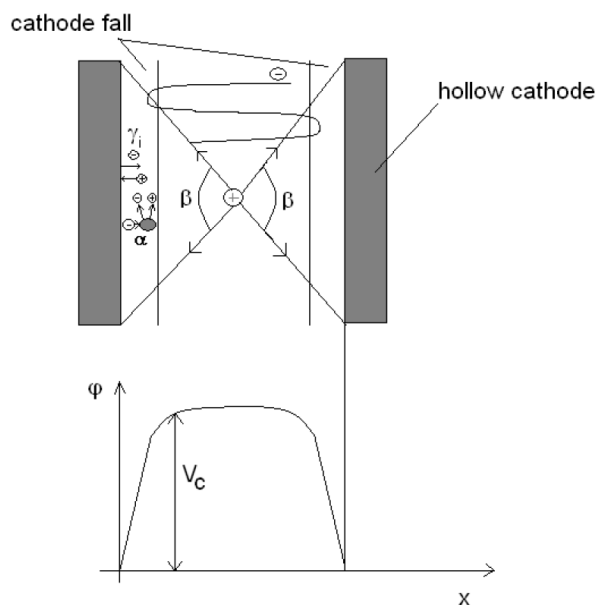


Obrázok 3.2: Závislosť prúdovej hustoty vo výboji s dutou katódou na vzdialenosti a rovnobežne orientovaných katód vynásobenej tlakom p [9].

dárnu elektrónovú emisiu. Tento uhol je výrazne väčší, než je obvyklé v prípade tlecieho výboja s rovnobežnými elektródami. Vďaka vysokej hustote plazmy vnútri dutej katódy môže byť rýchlosť rozprašovania materiálu katódy veľmi vysoká, čo sa využíva k nanášaniu tenkých vrstiev. Okrem usporiadania s rovnobežnými elektródami sa používa mnoho ďalších, a to najmä usporiadanie s valcovou katódou.

3.1.2 Rádiofrekvenčne budený výboj s dutou katódou

Výboje budené jednosmerným prúdom majú tú nevýhodu, že pri nich nemôžu byť použité elektródy z dielektrického materiálu, ktorý teda ani nemôže byť nanášaný. Preto bol v minulosti vyvinutý rádiofrekvenčne budený kapacitný výboj. Podrobný popis tohoto výboja je možné nájsť v [7]. Odlišnosť usporiadania s paralelnými elektródami oproti výboju s DC budením je v tom, že elektródy sú asymetrické, teda elektróda pripojená k RF zdroju má omnoho menší povrch než zemnená elektróda. Zdroj je väčšinou naladený na priemyselnú frekvenciu 13.56 MHz, resp. 27.12 MHz. Keďže pohyblivosť elektrónov je rádovo vyššia než pohyblivosť iónov, tieto najprv dopadnú na elektródy a pozdĺž oboch elektród sa vytvára nábojová vrstva. V nej je koncentrácia iónov n_i vyššia ako koncentrácia elektrónov n_e . Kvôli tomuto kladnému náboju je v týchto vrstvách

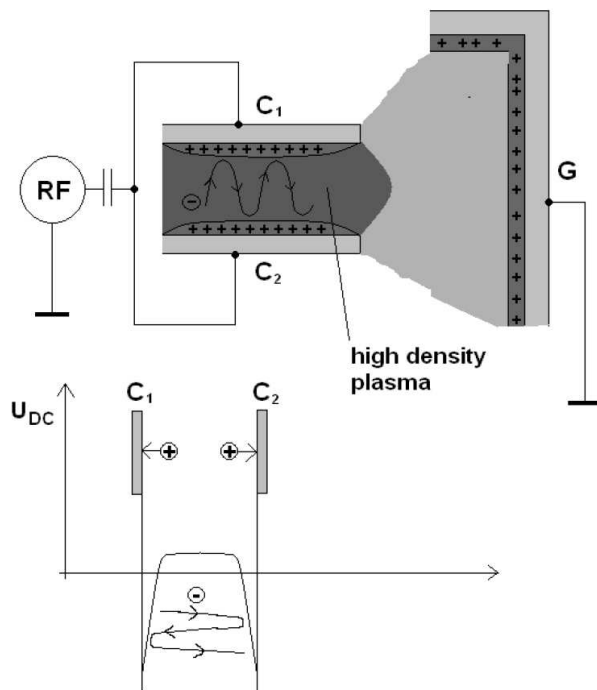


Obrázok 3.3: Schéma procesov v dutej katóde [6].

potenciál plazmy vždy kladný vzhľadom k potenciálu elektród. RF napätie je rozložené na nábojovej štruktúre podľa impedancií jednotlivých častí a na týchto vrstvách sa vytvára vysoké záporné indukované predpätie. Kladne nabité ióny sú urýchľované smerom k elektróde pripojenej k zdroju, čo umožňuje jej rozprašovanie. Výhodou tejto techniky je možnosť pokrytia elektród relatívne hrubou vrstvou dielektrického materiálu.

Aj keď je hustota plazmy zvyčajne vyššia v RF kapacitatívnom výboji ako v DC tlecom výboji, bolo vyvinutých mnoho spôsobov, ako dosiahnuť ešte väčšiu naprašovaciu rýchlosť. Jedným z možných spôsobov je použitie RF výboja s dutou katódou.

Schéma takého systému je znázornená na obrázku 3.4. Dve elektricky spojené elektródy sú pripojené k RF zdroju a umiestnené vo veľkej kovovej komore s uzemnenými stenami. Podobne, ako v prípade vyššie opísaného rovinného RF výboja, plocha pripojených elektród je omnoho menšia ako plocha uzemnenej komory, ktorá funguje ako druhá elektróda. Obdobným mechanizmom sa vytvára záporné predpätie na vrstvách elektród C_1 a C_2 pripojených k zdroju. Situácia je tu podobná, ako v prípade DC výboja s dutou katódou. Pripojené elektródy sa nazývajú rádiokvénčná dutá katóda, aj keď nimi tečie výsledný nulový jednosmerný prúd. Ióny sú urýchľované predpätím na vrstvách na C_1 alebo C_2 a spôsobujú sekundárnu emisiu elektrónov. Tie sú urýchlené predpätím a medzi C_1 a C_2 sa vytvárajú vysokoenergetické lúče elektrónov vďaka zrkadlovému potenciálu. Tieto kyvadlové elektróny zvyšujú ionizáciu v priestore



Obrázok 3.4: Schéma RF výboja s dutou katódou [6].

medzi C_1 a C_2 . RF výboj s dutou katódou má obdobné vlastnosti ako DC výboj s dutou katódou (nižšie napätia), ale umožňuje použiť dutú katódu s vrstvou dielektrika.

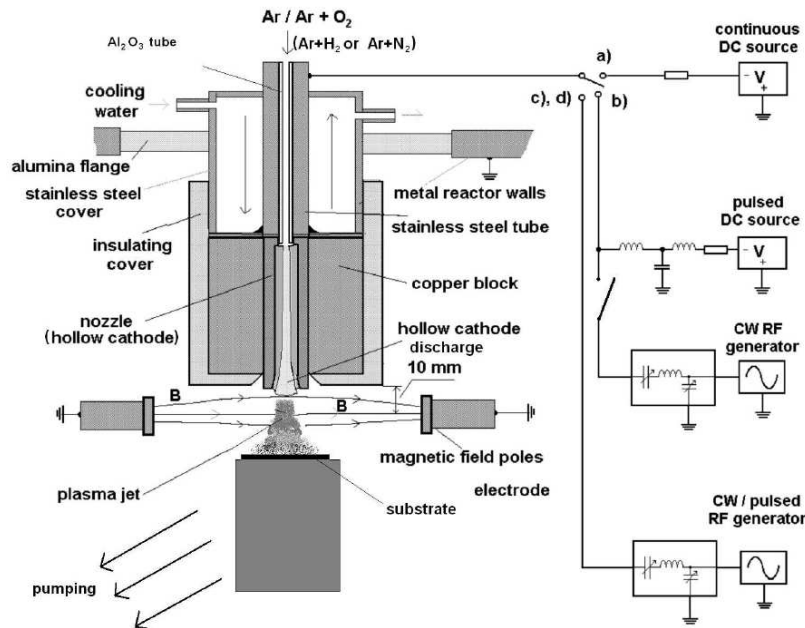
3.1.3 Použitie pre PVD

V tejto časti si popíšeme systémy s dutou katódou, ktoré sú spojené s tokom plazmy. Prvý tryskový systém s RF dutou katódou bol vyvinutý v roku 1987 L. Bárdošom [1], [2]. Odvtedy bolo publikovaných mnoho článkov popisujúcich rôzne modifikácie tohoto systému a bolo dosiahnutých mnoho experimentálnych výsledkov. Plazmový tryskový systém môže byť využitý pre rôzne druhy nanášania tenkých vrstiev a plazmové leptanie.

Pôvodná RF plazmová tryska bola vyvinutá pre rýchle PECVD vrstiev a-Si:H, viď. [1] a PVD rôznych tenkých vrstiev. Dosiahlo sa takisto rýchleho ($1 \mu\text{m} \cdot \text{min}^{-1}$) nanášania TiN rozprašovaním titánovej trysky, viď. [3], boli tiež nanesené napríklad Ge_3N_4 [10], CN_x [11] a Cu_3N [12]. Takisto boli študované DC systémy s použitím magnetického poľa a v poslednej dobe sa študujú systémy s pulzným budením, kedy sa kombinuje vysoká prúdová hustota spôsobená jednosmerným pulzom a RF excitácia, ktorá je dôležitá pre stabilitu pracovného režimu. DC, DC pulzná a RF plazmatická tryska s dutou katódou je veľmi vhodný nástroj pre naprašovanie rôznych oxidov ako TiO_x a ZnO [4].

DC naprašovací systém bol úspešne použitý na nanášanie Si:H vrstiev pre elektroniku [13].

Schéma tryskového systému je ukázaná na obrázku 3.5. Vákuová komora z nerezovej oceli je čerpaná turbomolekulárnou pumpou s čerpacou rýchlosťou niekoľko stoviek $l \cdot s^{-1}$. Pracovný plyn (hlavne Ar, He a N) vstupuje do napájacej trubičky pripojenej k tryske, ktorá je chladená a izolovaná od uzemnenej komory. Typické toky pracovných plynov, ktoré sa používajú sú 30–150 sccm. Tryska môže byť pripojená k DC alebo RF napájaciemu zdroju. Pri používaní v DC režime sa zvyknú používať magnety, ktoré slúžia ako uzemnená anóda. Materiál trysky je rozprašovaný iónmi z plazmy a rozprášené častice sú nesené prúdom pracovného plynu k substrátu [6]. Vnútorň priemer trysky je zvyčajne 3-6 mm, vonkajší 6-10 mm. Typická vzdialenosť od ústia trysky k substrátu je približne 50 mm. Typické tlaky v komore, ktoré sa používajú, sú v rozsahu 0.1 až 100 Pa.



Obrázok 3.5: DC, pulzný DC, RF a RF modulovaný plazmatický tryskový systém [6].

3.1.4 Optická diagnostika tryskového výboja

Pre systémy s plazmatickou tryskou sa používajú hlavne dve diagnostické metódy – sondová a optická. V tejto časti sa budeme venovať optickej diagnostike tryskového výboja a jej vzťahu k prúdeniu pracovného plynu v tryske.

Podľa článku [14] bolo overené, že chemická aktivita priamo súvisí s intenzitou procesov prebiehajúcich v plazme. Tými sa rozumie hlavne excitácia a ionizácia molekúl pracovného plynu. Mieru týchto procesov je možné určiť štúdiom intenzity emitovaného svetla. Excitácia častíc pracovného plynu môže prebehnúť napríklad v dôsledku samotného výboja. Koncentrácia častíc emitujúcich svetlo n_{em} je potom úmerná koncentrácii častíc neutrálneho plynu n a koncentrácii elektrónov s dostatočnou energiou k excitácii neutrálnej častice n_{e_1}

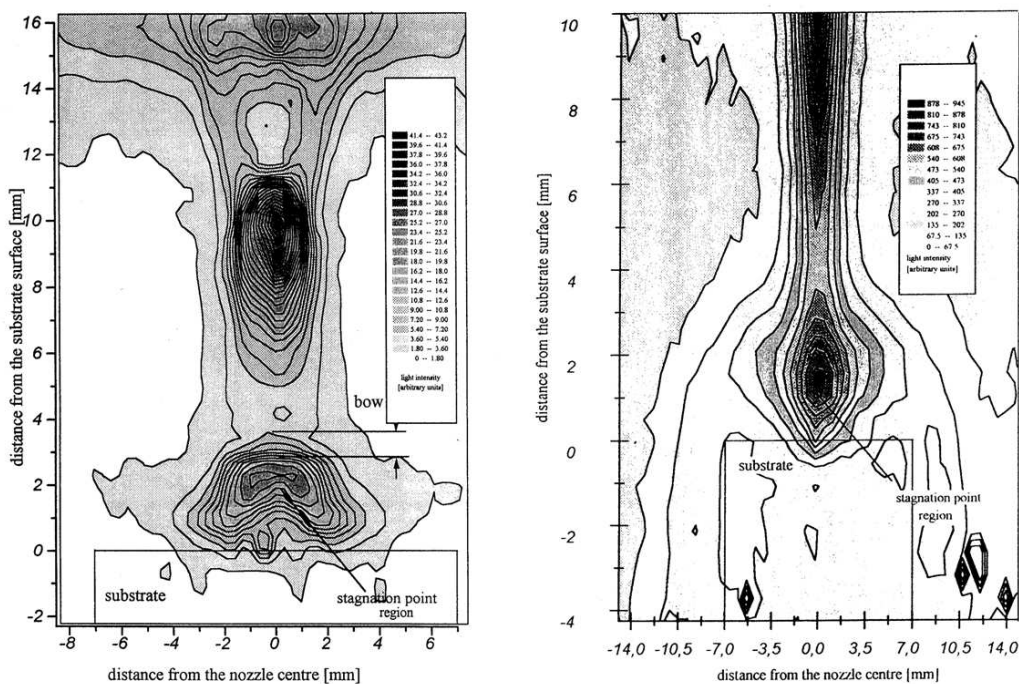
$$n_{em} = konst. \cdot n \cdot n_{e_1} . \quad (3.2)$$

Štúdiom intenzity procesov v plazme tryskového výboja [14] sa ukázalo, že sa dosahuje kvalitatívne rozdielnych výsledkov pri prúdení, ktoré dosahuje nadzvukové, resp. podzvukové rýchlosti. Pracovný plyn bol v tomto prípade N_2 . Tryska bola snímaná CCD kamerou cez interferenčný filter s $\lambda = 400$ nm, ktorá odpovedá napríklad 2. pozitívnemu systému molekuly N_2 . Grafický výstup z tohoto experimentu pre oba prípady je znázornený na obrázku 3.6. V jeho ľavej časti sa vyskytuje nadzvukové prúdenie a s ním súvisiaca rázová vlna, ktorá sa utvára pred substrátom. Dochádza k prudkému poklesu rýchlosti z nadzvukovej na podzvukovú, a teda prudkému nárastu tlaku, s čím je spojená vyššia intenzita procesov v plazme. Bod, v ktorom je intenzita procesov najvyššia, sa nazýva statický bod (*stagnation point*). Experiment bol robený s tryskou o priemeru 4 mm, tok pracovného plynu pre nadzvukový prípad bol 900 sccm, pre podzvukový 400 sccm. Podrobná optická diagnostika tryskového výboja bola spravená v [15]. Predmetom pozorovania bolo chovanie tryskového výboja v závislosti na toku pracovného plynu do aparatury. Pracovný plyn bol excitovaný RF výbojom, ktorý bol monitorovaný CCD kamerou a ďalej softwarovo spracovaný.

3.2 Prúdenie tekutín

K tomu, aby sme mohli teoreticky popísať prúdenie v tryskovom systéme, si musíme definovať základné pojmy mechaniky kontinua a uviesť vzťahy, s ktorými táto oblasť fyziky narába.

Najprv je potrebné zadefinovať samotný pojem kontinua. Môžeme sa naň pozerať ako na spojité látkové prostredie, ktoré je zobrazené ako sústava hmotných bodov, ktoré husto vyplňujú priestor a pohybujú sa v ňom, takže ľubovoľná vybraná oblasť kontinua obecnne mení svoj tvar aj objem, z čoho vyplýva, že kontinuum má nekonečný počet stupňov voľnosti. Z tohoto tiež plynie, že kontinuum nemôžeme popisovať ako skupinu hmotných bodov, každý s vlastnou pohybovou rovnicou. Namiesto toho je jeho popis vyjadrený parciálnymi diferenciálnymi rovnicami, ktoré obsahujú derivácie podľa priestorových, ako aj časových premenných. Tieto rovnice vyjadrujú zákony zachovania hmotnosti, hybnosti, momentu hybnosti a energie. Pre úplný popis kontinua ešte musíme použiť termodynamické vzťahy. V praxi nepotrebujeme vždy úplný popis systému, ale často



Obrázok 3.6: Svetelná intenzita pre nadzvukový (vľavo) a podzvukový (vpravo) tok pracovného plynu [14].

si vystačíme s pohybovými rovnicami, rovnicou kontinuity a dopĺňujúcou stavovou rovnicou.

Aby sme predstavu kontinua a jeho elastických vlastností viac kvantifikovali, použijeme úvahu uvedenú v [16]. Nebudeme uvažovať popis berúci v úvahu skutočné mikroskopické zloženie telesa, ale často používaný pojem fyzikálne nekonečne malých elementov. Rozumieme nimi súbor mikročastíc, ktorých počet ΔN je dostatočne veľký ($\Delta N \gg 1$), no zároveň je veľmi malý v porovnaní s počtom N molekúl makroskopickej časti daného telesa ($\Delta N \ll N$). Tieto fyzikálne nekonečne malé častice musia zabrať nekonečne malý objem ΔV , teda objem, ktorý je dostatočne veľký na to, aby obsahoval väčší počet molekúl, no dostatočne malý, aby sa na jeho rozmeroch ešte neprejavovala závislosť makroskopických parametrov telesa na jeho polohe.

Pre vhodnú voľbu použitých rovníc je nutné uviesť niektoré pojmy, na základe ktorých budeme schopný popísať vlastnosti prúdenia v tryske.

3.2.1 Rýchlosť zvuku

Až Pierre-Simon Laplace ukázal, že šírenie zvuku je adiabatické, čím vyvrátil predstavu Isaaca Newtona, ktorý ho považoval za izotermické. Nemôžeme teda

použiť stavovú rovnicu ideálneho plynu

$$p = \frac{\rho k_B T}{m_{\text{mol}}}, \quad (3.3)$$

kde ρ je hustota, m_{mol} hmotnosť molekuly, n koncentrácia, k_B Boltzmannova konštanta a T teplota, ale izentropickú stavovú rovnicu

$$p = \frac{\rho^\gamma k_B T}{m_{\text{mol}}}, \quad (3.4)$$

kde γ je Poissonova konštanta, ktorá sa zavádza ako pomer izobarického a izochorického merného tepla:

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v}. \quad (3.5)$$

Pre úplnosť uvedme, že

$$m_{\text{mol}} = \frac{M}{N_A}, \quad (3.6)$$

kde M je molárna hmotnosť a N_A Avogadrova konštanta.

Pre samotnú rýchlosť šírenia zvuku platí rovnica [17]

$$v_s = \sqrt{\frac{1}{\beta_s \rho}}, \quad (3.7)$$

kde β_s je izentropický koeficient stlačiteľnosti

$$\beta_s = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_s \quad (3.8)$$

Skombinovaním rovníc 3.3, 3.4, 3.7, 3.8 dostávame výraz pre rýchlosť zvuku

$$v_s = \sqrt{\frac{\gamma k_B T}{m_{\text{mol}}}}. \quad (3.9)$$

Hodnota koeficientu γ pre jednoatomárne plyny, ako napríklad argón, je $\gamma = \frac{5}{3}$.

V súvislosti s hodnotou rýchlosti zvuku sa zavádza bezrozmerná fyzikálna veličina, ktorá sa nazýva Machovo číslo a je daná ako pomer aktuálnej rýchlosti prúdenia k rýchlosti zvuku:

$$M = \frac{v}{v_s}. \quad (3.10)$$

3.2.2 Rázová vlna

Dôležitý fenomén súvisiaci s hodnotou rýchlosti zvuku je jav rázovej vlny (anglicky *bow shock*), ktorý si popíšeme na nasledujúcich riadkoch. Nebudeme sa

venovať exaktnému odvodeniu všetkých vzťahov, popíšeme si iba niekoľko dôležitých záverov, ku ktorým možno v súvislosti s týmto javom dôjsť. Podrobný popis rázovej vlny je možné nájsť napríklad v [16] alebo [17].

Predpokladajme, že sa v kontinuu vytvorí plocha, na ktorej sa niektoré fyzikálne veličiny menia skokom. Uvažujme o elemente tejto plochy a zvolíme vzťažný systém, v ktorom sa tento element nebude pohybovať v normálovom smere a zavedme osu x v smere tejto normály. Kontinuum môže plochu nespojitosti pretekať, pričom zmeny veličín pri prechode cez ňu sú viazané všeobecne platnými fyzikálnymi zákonmi, teda zákonom zachovania hmotnosti, energie a hybnosti. Vo zvyšku tohoto odstavca používame konvenciu, kde index 1 sa vzťahuje k oblasti pred plochou nespojitosti a index 2 za ňou (uvažujeme vzhľadom k smeru prúdenia). Je výhodné zaviesť fyzikálnu veličinu špecifický objem, ktorú definujeme nasledovne:

$$V = \frac{1}{\rho}. \quad (3.11)$$

Vyvedené závery sa vzťahujú pre reálne možné situácie, a to že plyn, ktorý prejde plochou nespojitosti je hustším, teda

$$V_1 > V_2 \quad (3.12)$$

a je v ňom väčší tlak

$$p_2 > p_1. \quad (3.13)$$

S uvážením empirických poznatkov o adiabatickej stlačiteľnosti látok je možné odvodiť, že okrem 3.12 a 3.13 musia platiť nerovnosti

$$v_1 > v_{s_1} \quad (3.14)$$

$$v_2 < v_{s_2} \quad (3.15)$$

a

$$v_1 > v_2, \quad (3.16)$$

kde v_{s_1} a v_{s_2} sú hodnoty rýchlosti zvuku na oboch stranách plochy nespojitosti. Z týchto nerovností vidíme, že voči plynu v oblasti 1, ktorý ešte neprešiel rázovou vlnou, sa plocha nespojitosti pohybuje nadzvukovou rýchlosťou.

Pre rázové vlny v ideálnych plynch platia pre hodnoty redukovaných objemov a teplôt na oboch stranách plochy nespojitosti tieto rovnice:

$$\frac{V_2}{V_1} = \frac{(\gamma + 1)p_1 + (\gamma - 1)p_2}{(\gamma - 1)p_1 + (\gamma + 1)p_2} \quad (3.17)$$

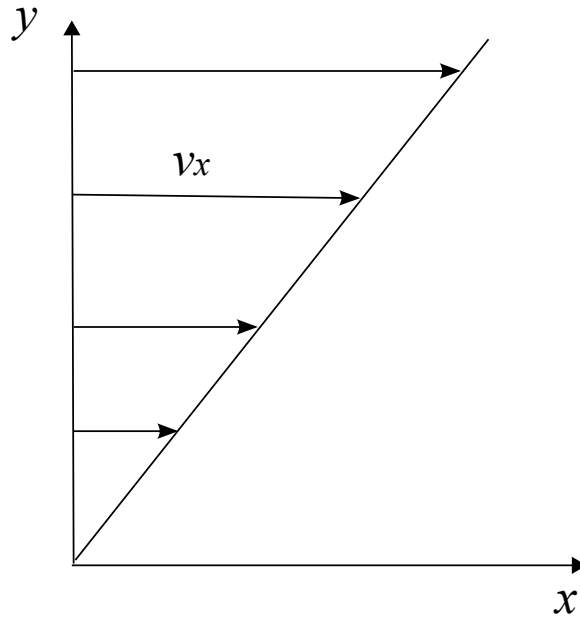
a

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{p_2}{p_1} \left[\frac{(\gamma + 1)p_1 + (\gamma - 1)p_2}{(\gamma - 1)p_1 + (\gamma + 1)p_2} \right]. \quad (3.18)$$

Pomer rýchlostí v_1 a v_2 je rovnaký ako pomer špecifických objemov 3.17.

3.2.3 Viskozita

Viskozitu si môžeme schematicky zaviesť pomocou obrázku 3.7.



Obrázok 3.7: Tok so šmykovým napätím.

Predstavme si rovinný tok tekutiny kolmý k ose y , ktorý sa rovnomerne a „vrstvene“ pohybuje pozdĺž osy x , teda existuje rovnomerný gradient rýchlosti $\partial v_x / \partial y$. Za týchto podmienok vzniká šmykové napätie o veľkosti

$$s_{xy} = \eta \frac{\partial v_x}{\partial y}, \quad (3.19)$$

kde η je koeficient viskozity, tiež nazývaný dynamická viskozita. Ďalej predpokladajme, že sa tekutina pohybuje aj pozdĺž osy y a existuje gradient $\partial v_y / \partial x$. Obdobne vzniká šmykové napätie

$$s_{yx} = \eta \frac{\partial v_y}{\partial x} \quad (3.20)$$

s koeficientom η , rovnakým ako v 3.19. Z izotropicity tekutiny plynie, že s_{xy} a s_{yx} by sa mali rovnať, čo ale neplynie z 3.19 a 3.20. Preto musíme previesť symetrizáciu výrazu:

$$s \quad (= s_{xy} = s_{yx}) = \eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right). \quad (3.21)$$

Jednotkou dynamickej viskozity je $\text{Pa} \cdot \text{s}$, možno sa stretnúť tiež s jednotkou poise (P), pričom $1\text{P} = 0.1\text{Pa} \cdot \text{s}$.

Často sa namiesto dynamickej viskozity používa kinematická viskozita ν definovaná ako:

$$\nu = \frac{\eta}{\rho}. \quad (3.22)$$

Hodnota viskozity nie je závislá na tlaku, jej teplotnú závislosť pre ideálny plyn popisuje empiricky Sutherlandov vzorec, viď. [18]:

$$\eta = \eta_0 \frac{T_0 + T_S}{T + T_S} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2}, \quad (3.23)$$

kde η je hodnota viskozity pri teplote T , η_0 je tabelovaná hodnota viskozity pri teplote T_0 a T_S je Sutherlandova teplota, vzťahujúca sa k určitému plynu.

V súvislosti s viskozitou sa zavádza ďalšia dôležitá bezrozmerná fyzikálna veličina, ktorá sa nazýva Reynoldsovo číslo. Je definované ako

$$Re = \frac{v L \rho}{\eta} \quad (3.24)$$

alebo tiež ekvivalentne

$$Re = \frac{v L}{\nu}, \quad (3.25)$$

kde v značí rýchlosť prúdenia a L jeho charakteristický rozmer (napríklad priemer valca). Najdôležitejšia informácia, ktorú nám Reynoldsovo číslo dáva je, či prúdenie je laminárne alebo turbulentné. Ukazuje sa, že prúdenie vo valcovitej trubici je laminárne pre $Re < 2200$, no pri potlačení niektorých nestabilití si môže udržať túto povahu aj pri väčších hodnotách Re . Reynoldsovo číslo spadá do kategórie tzv. podobnostných parametrov a pre prúdenia s jeho rovnakou hodnotou dávajú Navier-Stokesove rovnice (viď. 3.26) rovnaké výsledky.

3.2.4 Voľba rovníc

Voľba pohybovej rovnice tekutiny závisí od vlastností prúdenia – teda od toho, či sa prejavuje stlačiteľnosť tekutiny, jej viskozita, či je prúdenie laminárne alebo turbulentné. Na posúdenie týchto vlastností môžeme použiť nasledovné kritériá, ktoré povedú k použitiu správnej rovnice. Číselné hodnoty sú odhadnuté z približných parametrov prúdenia v aparátúre.

1. Prúdenie je laminárne. Pre laminárne prúdenie vo valci je potrebná hodnota $Re < 2200$. Odhad je $Re < 100$.
2. Nie je možné zanedbať stlačiteľnosť tekutiny. Zanedbať by šla pre hodnoty $M > 1$, no maximálne hodnoty Machovho čísla môžu byť až $M \sim 2$.
3. Nie je možné zanedbať šmykové napätie ($Re > 1$).

Na základe týchto kritérií je potrebné použiť ako pohybovú rovnicu Navier-Stokesovu rovnicu pre stlačiteľné newtonovské (teda také, kde je relácia 3.21 lineárna) tekutiny (viď. [19]):

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{1}{3} \eta \nabla \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{f}, \quad (3.26)$$

kde \mathbf{f} sú objemové sily.

Ďalej je potrebné použiť rovnicu kontinuity v tvare

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \quad (3.27)$$

a stavovú rovnicu ideálneho plynu 3.3. Týchto 5 rovníc (rovnicu 3.26 je vektorová) doplnených o okrajové podmienky nám udáva hodnoty rýchlostí a tlakov (resp. hustôt) prúdenia s definovanou (konštantnou) teplotou.

3.3 Model prúdenia

Jedným zo spôsobov, ako modelovať fluidne dynamické problémy je použiť počítačov. Tento prístup, ktorý sa neustále vyvíja od ich počiatku, teda prakticky od 50. rokov 20. storočia, sa nazýva anglicky *computational fluid dynamics*, často je možné stretávať sa so skratkou CFD. V podstate sa jedná o približné riešenia analyticky často neriešiteľných rovníc – zväčša parciálnych diferenciálnych alebo integro-diferenciálnych rovníc. Pre dosiahnutie približného riešenia numericky musíme použiť diskretizáciu problému, ktorá aproximuje diferenciálne rovnice sústavou algebraických rovníc, ktoré už môžeme numericky pomerne jednoducho vyriešiť. Aproximácie sa vzťahujú na malé oblasti (domény) v čase a/alebo priestore. Presnosť týchto približných riešení závisí hlavne na kvalite metód diskretizácie, a preto si opíšeme najčastejšie používané metódy. Nasledujúce časti sú voľne spracované podľa [20] a [21].

3.3.1 Mriežka

Ako sme už spomenuli, aproximácie sa vzťahujú na malé oblasti, ktorými rozdelíme celý priestor problému. Miesta, kde sú naše premenné počítané (teda výpočetné uzly) sú dané numerickou mriežkou. Tá delí oblasť, na ktorej problém počítame, na konečný počet podoblastí. Existuje niekoľko spôsobov delenia, my si uvedieme dva základné.

- Štruktúrovaná mriežka: Pozostáva zo skupín mriežových čiar, ktoré majú tú vlastnosť, že čiary patriace do jednej skupiny, napríklad horizontálne,

sa nekrižia s čiarami patriacimi do ostatných skupín, teda v dvoch rozmeroch vertikálne, sa každá križuje iba jeden krát. To umožňuje jednoznačné označenie každého bodu mriežky (resp. objemu) dvomi (v 2D) alebo tromi (v 3D) indexami. Táto štruktúra je najjednoduchšia, keďže je logickým ekvivalentom kartézskej mriežky. Jej veľkou výhodou je jasné určenie počtu susedov každého bodu. Nevýhodou štruktúrovanej mriežky je možnosť použitia iba v jednoduchých geometriách a nemožnosť zmeny hustoty mriežových bodov v závislosti na požadovanej presnosti výpočtu v konkrétnej oblasti.

- Neštruktúrovaná mriežka: Pre zložité geometrie je vhodný tento druh mriežky, ktorý môže vyplniť ľubovoľnú oblasť riešenia. Elementy mriežky resp. objemu môžu mať ľubovoľný tvar a neexistuje ani obmedzenie na počet susedných uzlov. V praxi sa v 2D používajú mriežky tvorené trojuholníkmi alebo štvoruholníkmi a v 3D mriežky tvorené štvorstenmi alebo šesťstenmi. Neštruktúrované mriežky sú tvorené algoritmami a podľa požiadaviek môžu byť ortogonálne, je možná kontrola jej hustoty a môže byť jednoducho lokálne pozmenená. Výhoda flexibility je vyvážená nevýhodou nepravidelnosti štruktúry dát. Polohy uzlov a spojení so susedmi musí byť konkrétne špecifikovaná a algebraické rovnice už nie sú reprezentované regulárnymi, diagonálnymi maticami ako v prípade štruktúrovaných mriežok, z čoho plynie pomalšia vypočtová rýchlosť programov využívajúcich neštruktúrovanú mriežku.

3.3.2 Metódy diskretizácie

- Metóda konečných diferencií: Táto metóda, anglicky *finite difference method*, je najstarším spôsobom numerického riešenia parciálnych diferenciálnych rovníc, jej vznik je spojený s L. Eulerom a datuje sa do 18. storočia. Je najjednoduchším spôsobom riešenia pre jednoduché geometrie. Jej základom sú zákony zachovania v diferenciálnej forme. V každom mriežovom bode je diferenciálna rovnica nahradená (resp. členy obsahujúce parciálnu deriváciu) polynómom získaným z Taylorovho rozvoja. Výsledkom je jedna algebraická rovnica pre uzol, kde hodnota premennej a počet susedných uzlov vystupujú ako neznáme. Táto metóda môže byť použitá na ľubovoľný typ mriežky, ale spravidla sa používa štruktúrovaná mriežka. Nevýhodami tejto metódy je obmedzenie na jednoduché geometrie a zachovanie fyzikálnych veličín nie je dané zo samotnej povahy metódy.
- Metóda konečných objemov: Anglicky *finite volume method*, má za základ zákony zachovania v integrálnej forme. Oblasť riešenia je rozdelená na konečný počet súvislých kontrolných objemov (*control volume*), v strede

každého z nich sa nachádza výpočetný uzol. Výpočet hodnôt premených na povrchu kontrolných objemov je spravený pomocou interpolácie, povrchové a objemové integrály sú počítané kvadratúrnymi vzorcami. Ako výsledok dostávame algebraickú rovnicu pre každý kontrolný objem, kde vystupujú hodnoty susedných uzlov. Túto metódu je možné použiť na ľubovoľný typ mriežky a nie je vzťahovaná na žiadnu súradnú sústavu. Veľkou výhodou je zachovanie veličín plynúce z princípu metódy, za predpokladu, že povrchové integrály reprezentujúce konvektívne a difúzne toky majú rovnaké ohraničenie ako kontrolné objemy. Nevýhodou metódy konečných objemov v porovnaní s metódou konečných diferencií je ťažkosť zostavenia metód vyššieho ako druhého stupňa v 3D. To priamo súvisí s tromi stupňami aproximácie, ktoré metóda konečných objemov pracuje – interpolácia, diferenciácia a integrácia. Výhodou je jednoduchosť pochopenia, programovania a súvis s jej fyzikálnou povahou.

- Metóda konečných prvkov: Anglicky *finite element method*, je v mnohých rysoch podobná metóde konečných objemov. Oblasť riešenia je rozdelená na sústavu konkrétnych objemov (konečných prvkov), ktoré sú vo všeobecnosti neštruktúrované. Ako sme už spomenuli v pokadpitole 3.3.1, v 2D sú to najčastejšie trojuholníky alebo štvoruholníky a v 3D štvorsteny, prípadne šesťsteny. Čím sa ale odlišuje je to, že než je každá z rovníc preintegrovaná cez celú oblasť, je vynásobená váhovou funkciou. V najjednoduchšom prípade metódy konečných prvkov je riešenie aproximované funkciou lineárneho tvaru v každom prvku tak, že zaručuje spojitosť riešenia naprieč hranicami prvkov. Takáto funkcia môže byť skonštruovaná napríklad z hodnôt v rohoch prvku. Váhová funkcia má zväčša ten istý tvar. Táto aproximácia potom vystupuje vo váhovom integrále zákona zachovania. Počítané rovnice sú odvodené z požiadavku na nulovú deriváciu integrálu vzhľadom ku každému uzlu. To súvisí s výberom najlepšieho riešenia v rámci dovolených funkcií. Výsledkom je sústava nelineárnych algebraických rovníc. Dôležitou výhodou metódy konečných prvkov je možnosť použitia v ľubovoľnej geometrii, možnosť mriežky prispôbiť ju, prípadne prvky rozdeliť. Jej hlavným nedostatkom je použitie neštruktúrovanej mriežky, a teda, že matice linearizovaných funkcií nie sú tak dobre štruktúrované ako tie, ktoré sa vyskytujú pri štruktúrovaných mriežkach, čo vedie k zložitosti účinných výpočetných metód.

Kapitola 4

Model

Cieľom tohoto počítačového modelu je zistiť vlastnosti prúdenia pracovného plynu aparátúrou s plazmovou tryskou. K tomuto účelu je potrebné použiť rovnice spomenuté v časti 3.2, a to konkrétne rovnice 3.26, 3.27 a 3.3 doplnené o patričné okrajové podmienky, ktorým sa ešte budeme venovať.

Fyzikálne konštanty, ktoré budú použité:

- Boltzmannova konštanta: $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$
- Avogadrova konštanta: $N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
- molárna hmotnosť Ar: $M_{Ar} = 39.95 \cdot 10^{-3} \text{ kg.mol}^{-1}$
- dynamická viskozita Ar pri $T = 300 \text{ K}$: $\eta_{300K} = 2.29 \cdot 10^{-5} \text{ Pa.s}$ [22]
- dynamická viskozita Ar pri $T = 273.11 \text{ K}$: $\eta_0 = 2.125 \cdot 10^{-5} \text{ Pa.s}$ [22]
- Sutherlandova teplota pre Ar: $T_S = 144.4 \text{ K}$ [23]

4.1 Rovnice

Keďže celá aparátúra s tryskovým systémom, a teda aj jej model, je valcovo symetrický, je vhodné model počítať s použitím valcových súradníc. Namiesto súradníc x, y a z použijeme teda súradnice r, ϕ a z . Vďaka symetrii problému ale môžeme členy obsahujúce deriváciu podľa ϕ položiť nulové

$$\frac{\partial}{\partial \phi} = 0, \quad (4.1)$$

rovnako ako aj zložky vektoru rýchlosti v tomto smere

$$v_\phi = 0. \quad (4.2)$$

Ďalšie zjednodušenie dosiahneme tým, že hľadáme stacionárne riešenie rovníc, takže môžeme položiť rovné nule aj všetky derivácia podľa časovej premennej t :

$$\frac{\partial}{\partial t} = 0. \quad (4.3)$$

Z dôvodov numerickej stability modelu je odporúčané v [24] pozmeniť stacionárny prípad rovnice kontinuity 3.27 nasledovne:

$$\Delta \rho = \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}). \quad (4.4)$$

Konečná podoba použitých rovníc je: Navier-Stokesova rovnica:

$$\rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) v_r = -\frac{\partial p}{\partial r} + \eta \left(\Delta v_r - \frac{v_r}{r^2} \right) + \frac{1}{3} \eta \left[-\frac{1}{r^2} \frac{\partial (r v_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 (r v_r)}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial r \partial z} \right] \quad (4.5)$$

$$\rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) v_z = -\frac{\partial p}{\partial z} + \eta \Delta v_z + \frac{1}{3} \eta \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2 (r v_r)}{\partial z \partial r} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right], \quad (4.6)$$

kde $(\mathbf{v} \cdot \nabla) f = v_r \frac{\partial f}{\partial r} + v_z \frac{\partial f}{\partial z}$.

Stavová rovnica 3.3 je bezo zmeny a pozmenená rovnica kontinuity 4.4 vyzerá v cylindrických súradniciach takto:

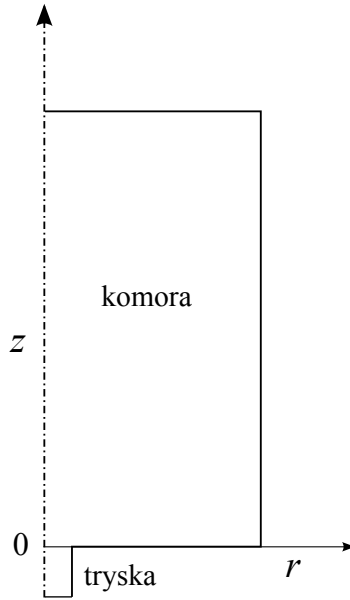
$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \rho}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial (r \rho v_r)}{\partial r} + \frac{\partial (\rho v_z)}{\partial z}. \quad (4.7)$$

4.2 Okrajové podmienky

Ako sme už spomenuli, k riešeniu problému nestačí mať samotné rovnice, no musíme ich doplniť o patričné okrajové a počiatkové podmienky. Počiatkové podmienky nehrajú úlohu v našom probléme, pretože k ustáleniu riešenia dochádza pomerne rýchlo, nezávisle od týchto podmienok.

Oblasť, na ktorej úlohu riešime nemusí byť celá komora aparatury. Vzhľadom k povahe prúdenia stačí oblasť vymedzená vnútro trysky a naväzujúca oblasť v komore za tryskou o rozmeroch niekoľkých centimetrov. Rozmery trysky sú zvolené podľa rozmerov aparatury, prierez 4 mm a dĺžka 30 mm, rozmery komory sme zvolili s priemerom 20 cm a dĺžkou 20cm. Vzhľadom k osovej symetrii diskutovanej vyššie stačí zvoliť oblasť polovičnú, t.j. veľkosti polomeru namiesto priemeru. V celom modele sú súradnice zvolené tak, že osa systému je priamka $r = 0$, pre trysku platí $z < 0$, jej ústie je umiestnené v $z = 0$. Schéma pracovnej oblasti je pre názornosť zobrazené na obrázku 4.1.

Okrajové podmienky delíme vo všeobecnosti na dva druhy - Dirichletovu podmienku a Neumannovu podmienku.



Obrázok 4.1: Hrubý priblíženie zvolenej pracovnej oblasti.

- Dirichletova okrajová podmienka fixuje riešenie rovnice pre danú premennú na vopred určenú hodnotu. Tá môže byť určená číselne, funkciou, atď. V zhode s použitým programom budeme podmienku pre premennú x značiť ako $\text{value}(x)$.
- Neumannova okrajová podmienka určuje tok povrchom (hranicou, na ktorú je aplikovaná). Pre premennú x ju budeme značiť ako $\text{natural}(x)$.

V rovniciach modelu prúdenia sa vyskytujú 4 nezávislé premenné - vektor rýchlosti \mathbf{v} a hustota ρ , vďaka podmienke 4.2 sa počet premenných redukuje na 3. Ďalšou premennou, ktorá vystupuje v Navier-Stokesovej rovnici (3.26) je tlak, no ten je zviazaný s hustotou pomocou stavovej rovnice ideálneho plynu 3.3. V modeli nakoniec vystupujú 3 nezávislé premenné: v_r, v_ϕ, ρ . Pokiaľ sú okrajové podmienky dané pre stenu komory, resp. podložku, tak sú nasledovné:

- Pre zložku rýchlosti paralelnú so stenou v_i platí: $\text{natural}(v_i) = 0$.
- Pre zložku rýchlosti kolmú k stene v_j platí: $\text{value}(v_j) = 0$.
- Hustota ρ : $\text{natural}(\rho) = 0$.

Okrajové podmienky na vstupnom, resp. výstupnom otvore sú dané ako:

- Obe zložky rýchlosti v_i : $\text{natural}(v_i) = 0$.
- Podmienka pre hustotu ρ , ak hustota na vstupnom, resp. výstupnom otvore je ρ_0 : $\text{value}(\rho) = \rho_0$.

V prípade, že poznáme rýchlosť prúdenia na vstupe v_{z0} a tlak, resp. hustotu ρ_0 na výstupe, tak sú podmienky obdobné, ako v predchádzajúcom prípade, no s nasledovnými rozdielmi:

- Podmienka pre hustotu na vstupnom otvore: $\text{natural}(\rho) = 0$.
- Podmienka pre zložku rýchlosti v_z na vstupnom otvore: $\text{value}(v_z) = v_{z0}$.

Nakoniec okrajové podmienky pre osu symetrie:

- Podmienka pre zložku rýchlosti paralelnú s osou: $\text{natural}(v_z) = 0$.
- Podmienka pre zložku rýchlosti kolmú k ose: $\text{value}(v_r) = 0$.
- Podmienka pre hustotu: $\text{natural}(\rho) = 0$.

4.3 Parametre

Parametre, ktoré treba do modelu dodať, sú nasledovné:

- Molárna hmotnosť plynu (Ar) M_{Ar} .
- Jeho dynamická viskozita η .
- Teplota T (v Kelvinoch).
- Hustota na vstupnom otvore ρ_{in} .
- Hustota na výstupnom otvore ρ_{out} .

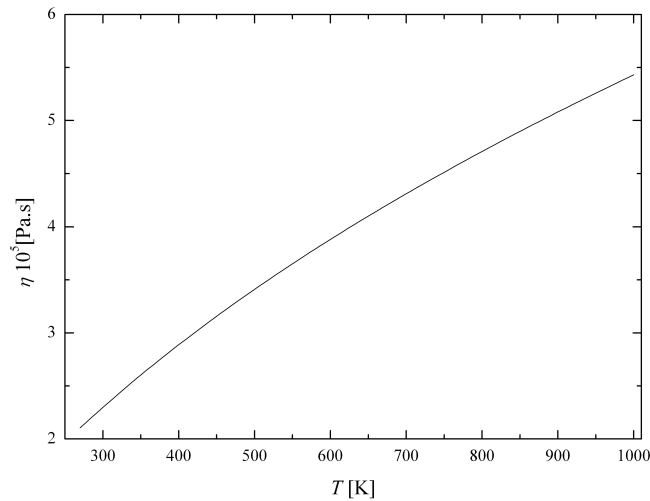
Údaje, ktoré sú k nám dispozícii pri meraní, sú obvykle tlak v komore p_{out} a tok pracovného plynu Q , ktorý je zavedený ako

$$Q = \int_S p \cdot v_z dS \quad (4.8)$$

kde S je ľubovoľná plocha kolmá k v_z . Obvykle používaná jednotka pre tok plynu v technických aplikáciách je štandardný centimeter kubický za minútu, skratka scm. Hodnoty hustôt dostaneme z tlakov použitím stavovej rovnice 3.3. Hodnotu hustoty z toku Q je vzhľadom k profilu rýchlosti a tlaku možné analyticky získať len veľmi obtiažne a je jednoduchšie iteratívne nastavovať hodnotu hustoty na vstupnom otvore, až kým sa nedostane požadovaná hodnota toku, ktorý sa spočíta numerickou integráciou podľa 4.8.

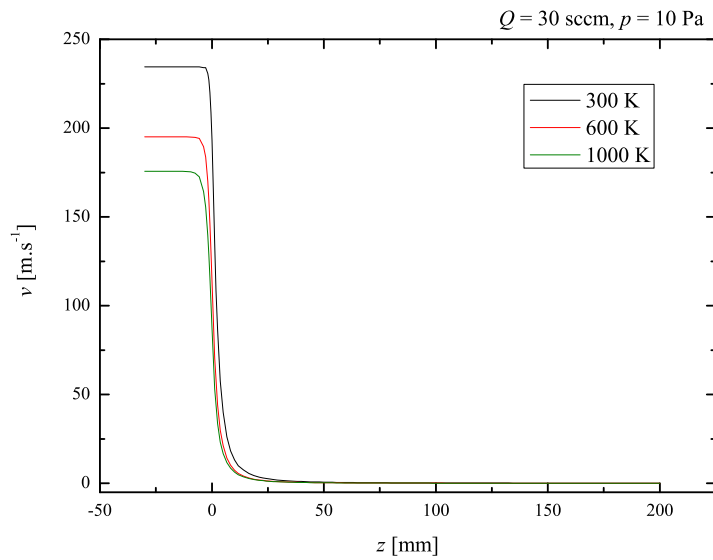
4.3.1 Teplotná závislosť

V súčasnom modeli teplota vystupuje ako parameter, ktorý je konštantný pre pracovnú oblasť. V skutočnosti tomu ale nie je tak, pretože v oblasti trysky, kde sa vyskytuje aktívny výboj, dochádza k ohrievaniu. Merať ale teplotu plynu v tejto oblasti nie je jednoduché. Podľa [6] je rozsah teplôt 300 K – 1000 K. Teplota vystupuje priamo v stavovej rovnici 3.3, no je na nej závislá aj hodnota dynamickej viskozity η , približný priebeh tejto závislosti vyjadruje Sutherlandov vzťah 3.23. Grafické znázornenie Sutherlandovho vzťahu pre Ar je na obrázku 4.2. Ako sa rôzne hodnoty teploty prejavujú vo výpočte je možné vidieť na nasledujúcich obrázkoch, ktoré znázorňujú priebeh zložky rýchlosti v_z na ose aparatury pri teplotách 300, 600 a 1000 K. Výsledky sú znázornené v obr. 4.3 a 4.4.

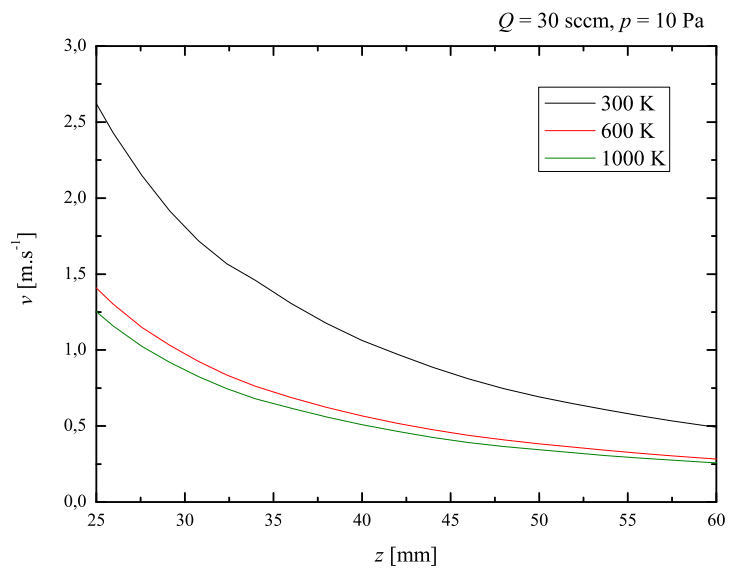


Obrázok 4.2: Sutherlandov vzťah pre Ar.

Z obrázkov 4.3 a 4.4 možno usúdiť, že hodnota dynamickej viskozity rastúcej s teplotou spolu so stavovou rovnicou 3.3 sa prejavuje klesajúcimi hodnotami rýchlosti prúdenia.



Obrázok 4.3: Model priebehu v_z na ose aparatúry pri rôznych teplotách.



Obrázok 4.4: Detail modelu priebehu v_z pri rôznych teplotách v oblasti, kde prebieha meranie.

4.4 Program

Na prevedenie výpočtu bol použitý program FlexPDE, verzia 6.12. Program na výpočet používa metódu konečných prvkov a neštruktúrovanú mriežku. Jedná sa o čisto výpočetný program, a teda neobsahuje väzbu na žiaden fyzikálny alebo technický problém a je potrebné mu rovnice spolu s ich okrajovými podmienkami dodať. Presnosť výpočtu je možné riadiť zadaním maximálnej možnej relatívnej chyby na hraniciach prvkov.

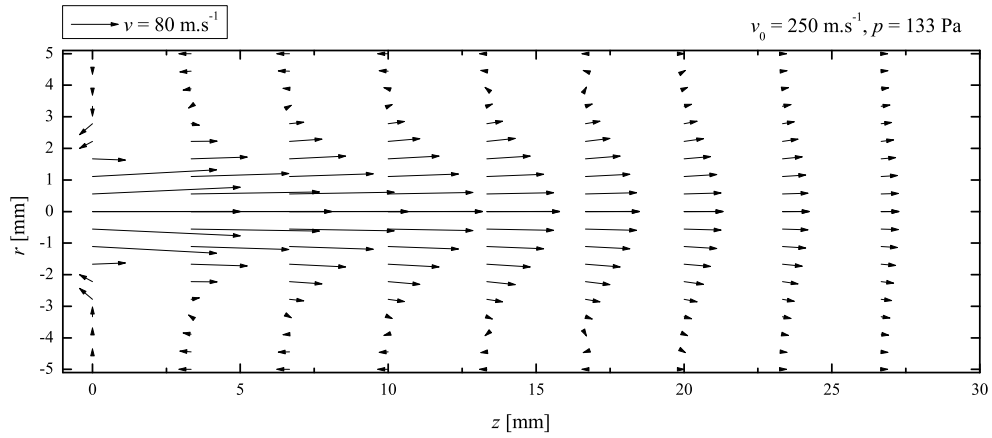
Výhodou programu je možnosť využitia funkcie STAGES, ktorá umožňuje beh výpočtu rozdeliť do niekoľkých štádií, a tým sa vyhnúť nestabilite výpočtu, resp. dlhým výpočtovým časom. Tieto štádiá môžu byť dané napríklad rôznymi hodnotami parametrov výpočtu, pričom ďalšie štádium používa ako počiatočné hodnoty výsledok predchádzajúceho štádia. V modeli prúdenia v tryskovej aparátúre je použité rozdelenie do štádií formou postupného zvyšovania hustoty, teda násobkami stavovej rovnice 3.3, kde je násobená koeficientami 0, 0.5 a 1.

4.5 Referenčný výpočet

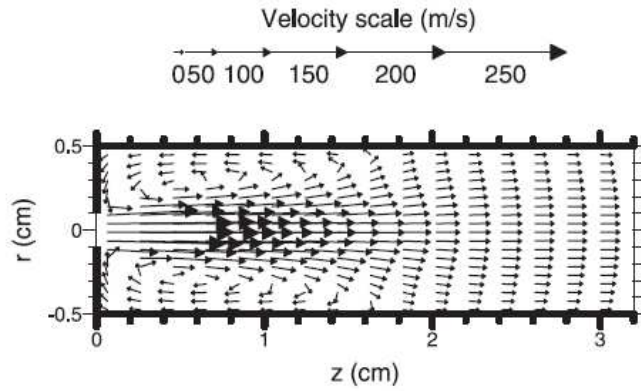
Výpočet, ktorý by overil, či model v tejto práci dáva reálne výsledky sme sa rozhodli porovnať s výpočtom uverejneným v [25]. Jedná sa o výpočet prúdenia v samotnej dutej katóde, ktorá má dĺžku 30 mm a šírku 10 mm, plyn do nej vstupuje otvorom o šírke 2 mm. Známe sú tlak na výstupe $p = 133$ Pa a rýchlosť na vstupnom otvore, ktorá vystupuje ako parameter. Výpočet v [25] bol spravený v programovom prostredí FLUENT, ktoré slúži na komplexné modelovanie fyzikálneho (resp. technického) problému, výpočet v ňom teda zahŕňa viac faktorov, ako v jednoduchom modeli prezentovanom v tejto práci. Vlastné porovnanie je urobené v tabuľke 4.5, na ktorej je zhrnutie hodnôt rýchlosti prúdenia na ose katódy v mieste výstupného otvoru, ako pre model zahrnutý v tejto práci, tak aj pre model uvedený v [25]. Zobrazenie vektorového poľa rýchlosti vo vnútri trysky je v obrázkoch 4.5 a 4.6, priestorové rozloženie tlaku je v obrázkoch 4.7 a 4.8.

Tabuľka 4.1: Porovnanie namodelovanej rýchlosti na ose katódy v_z a rýchlosti v_{z_0} prevzatej z [25] v závislosti na počiatočnej rýchlosti v_0 pri tlaku $p = 130$ Pa.

v_0 [$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$]	v_{z_0} [$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$]	v_z [$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$]
50	2.7	4
100	5.0	8
150	10	13
200	14	17
250	23	21

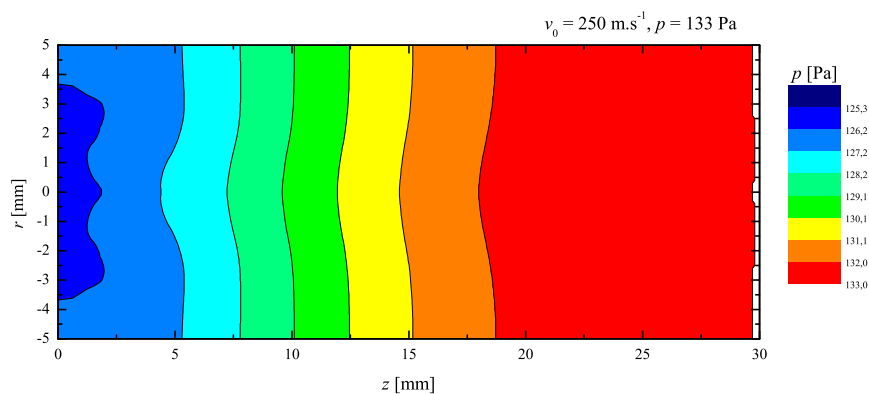


Obrázok 4.5: Model rozloženia rýchlostí v dutej katóde pri počiatocnej rýchlosti v_0 a tlaku p .

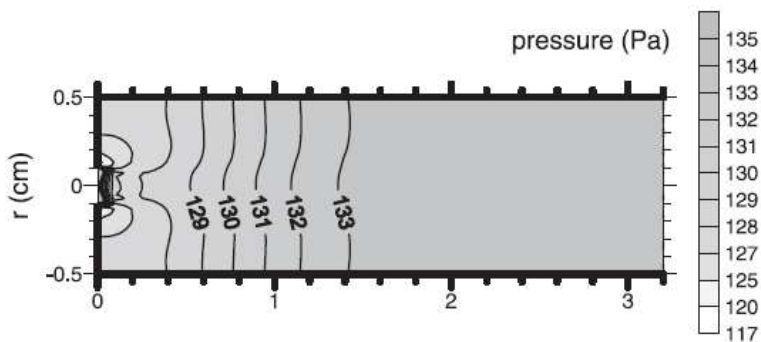


Obrázok 4.6: Referenčný model rozloženia rýchlostí prevzatý z [25].

Z uvedených porovnaní možno vidieť, že tento jednoduchý model dáva výsledky v približnej zhode s modelom v programe FLUENT, ktorý pokladáme za referenčný.



Obrázok 4.7: Rozloženie tlakov v dutej katóde namodelované pri počiatkovej rýchlosti v_0 a tlaku p .



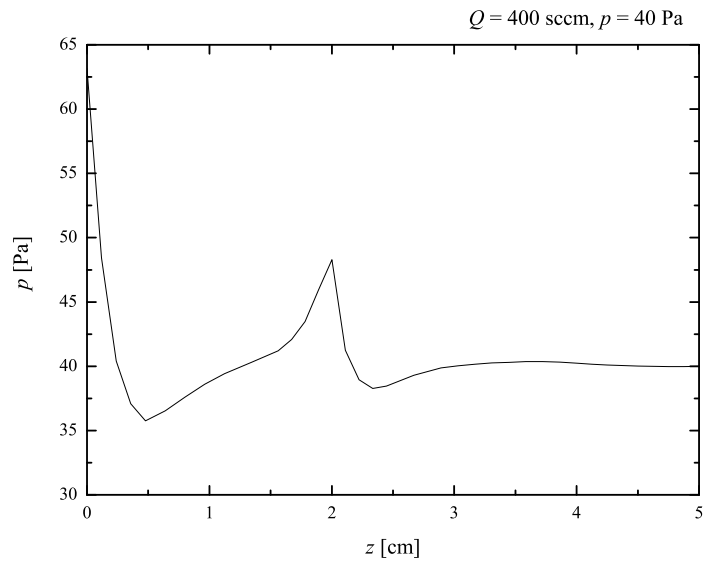
Obrázok 4.8: Referenčný model rozloženia tlakov prevzatý z [25].

4.6 Rázová vlna

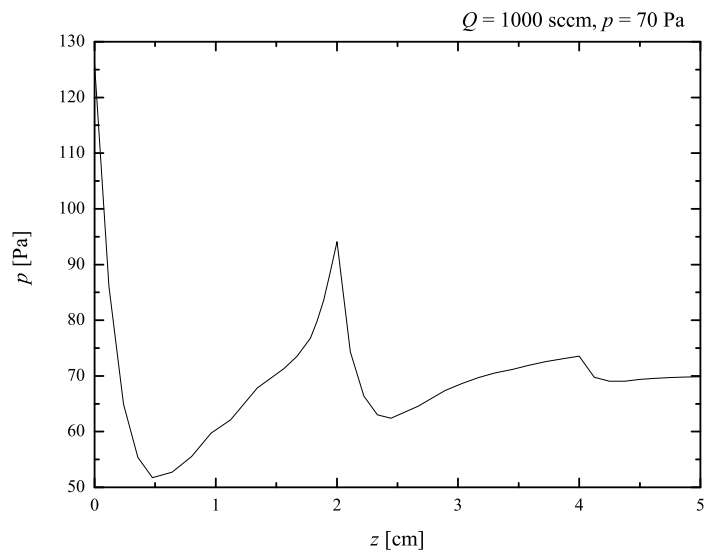
V podkapitole 3.2.2 je diskutovaný jav rázovej vlny, ktorý úzko súvisí s nadzvukovým prúdením. V zjednodušenej forme ho možno charakterizovať tak, že ak nadzvukovému prúdeniu príde do cesty prekážka, stane sa podzvukovým za okamžitého zvýšenia tlaku a teploty. Takouto prekážkou môže byť napr.

substrát. Keďže hustota plazmy je pre nanášanie tenkých vrstiev dôležitým parametrom, tento jav je možné využiť.

V článkoch [14] a [15] sú diskutované tieto javy zo skôr kvalitatívneho hľadiska. Obsah prvého z článkov sme načrtli v časti 3.1.4, kde sú diskutované prípady pri tokoch 400 a 900 sccm. V článku sa nespomína tlak, pri ktorom experimenty prebiehali. Spomenutý experiment, kedy prekážka bola vo vzdialenosti 2 cm od ústia trysky sme skúsili modelovať. Výstupom modelu je v tomto prípade priebeh tlaku na ose aparatury od ústia trysky po oblasť za prekážkou, kde vidno prudké zvýšenie tlaku v mieste prekážky. Spočítaný výsledok ale nie je presný, pretože neberie v úvahu adiabatické vlastnosti prúdenia, teda sa naň nemôžu vzťahovať závery vyvedené v časti 3.2.2. Môže slúžiť iba ako priblíženie. Modelovaný priebeh tlaku pre tok 400 sccm a tlak 40 Pa je na obrázku 4.9, pre tok 1000 sccm a tlak 70 Pa na obrázku 4.10. V druhom prípade vidíme, že nárast tlaku je omnoho výraznejší, než v prvom prípade.



Obrázok 4.9: Modelovaný priebeh tlaku na ose aparátúry s prekážkou v mieste $z = 2 \text{ cm}$ pri toku 400 sccm a tlaku 40 Pa .



Obrázok 4.10: Modelovaný priebeh tlaku na ose aparátúry s prekážkou v mieste $z = 2 \text{ cm}$ pri toku 1000 sccm a tlaku 70 Pa .

Kapitola 5

Experiment

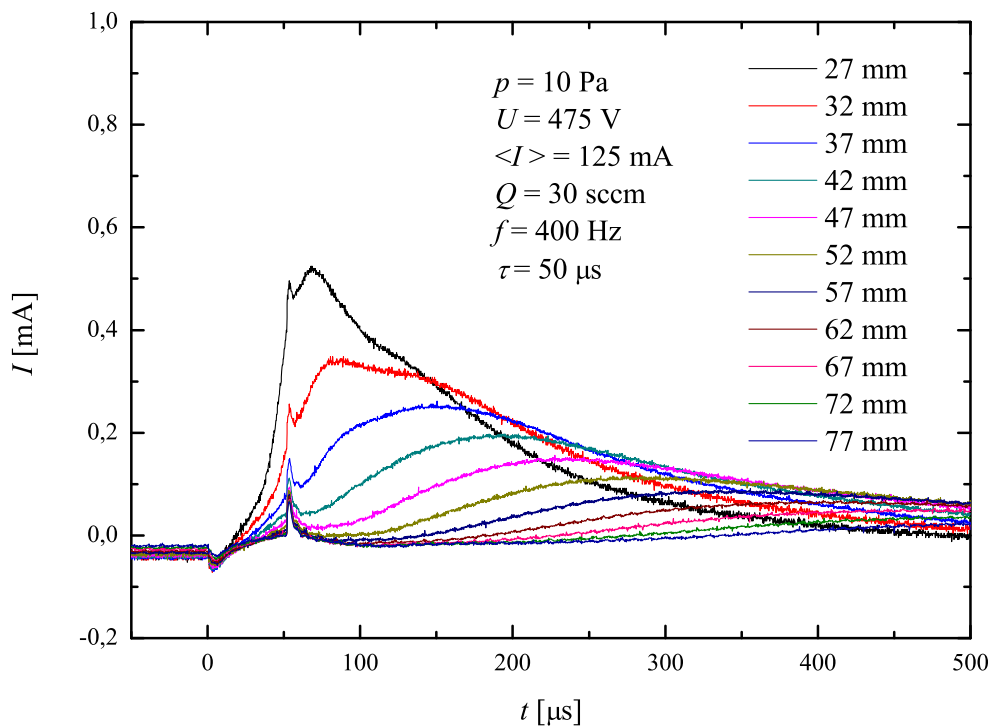
5.1 Aparatúra

Aparatúra s plazmatickou tryskou je konštruovaná na prevádzku pri nízkych tlakoch, čím sa zaručuje vysoká čistota aparatury a presne definované podmienky nanášania. Komora je kontinuálne čerpaná turbomolekulárnou vývevou, ktorá je schopná zaručiť prevádzkové tlaky v rozsahu jednotiek až stoviek Pa pri toku pracovného plynu až 100 sccm. Tryska s dutou katódou je umiestnená na pohyblivom nadstavci, takže vzdialenosť medzi jej ústím a substrátom sa dá regulovať v rozsahu viac ako 4 cm. Vnútorne rozmery trysky (katódy) sú priemer 4 mm a dĺžka 3 cm. Zhotovená je z titánu a pracovným plynom pri všetkých meraniach v tejto práci bol argón.

5.2 Experimentálne určenie rýchlosti

Cieľom tohoto experimentu je stanovenie rýchlosti prúdenia iónov za predpokladu, že tie sú unášané neutrálnym pracovným plynom. K tomuto účelu použijeme samotnú trysku v pulznom režime a Langmuirovu sondu. Sonda je na ose aparatury, jej vzdialenosť od ústia trysky je možné meniť posuvom trysky. K detekovaniu iónov je na ňu privedené napätie $U = -80\text{ V}$. Behom krátkeho pulzu privedeného na katódu dôjde k zapáleniu výboja a plazma je unášaná pracovným plynom smerom k substrátu, kde je umiestnená sonda. Časový priebeh iónového prúdu nameraného sondou je možno vidieť na obrázku 5.1.

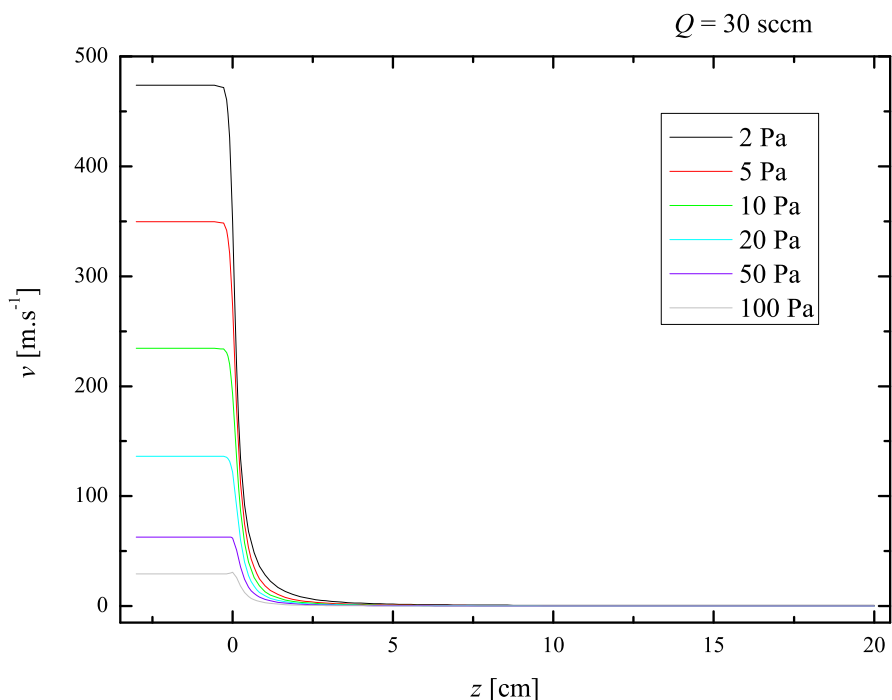
Spracovanie takto nameraných dát bolo rozdelené nasledovne. Namerané krivky boli zhladené. Potom sa získalo ich maximum. Z maxím boli stanovené časy, za ktoré ióny urazili vzdialenosť ústie katódy – sonda a bol vynesovaný graf závislosti vzdialeností na časoch. Táto závislosť bola preložená kvadratickou funkciou, ktorej derivovaním sa získala rýchlostná závislosť.



Obrázok 5.1: Časový priebeh iónového signálu nameraného Langmuirovou sondou na ose aparatury pri toku $Q = 30 \text{ sccm}$ a rôznych vzdialenostiach trysky od sondy.

5.3 Porovnanie výsledkov

Nasleduje porovnanie nameraných dát a modelovaných dát pre hodnoty tokov pracovného plynu $Q = 30 \text{ sccm}$ a $Q = 100 \text{ sccm}$ a niekoľko rôznych hodnôt tlakov v komore v rozsahu 2–10 Pa. Na obrázkoch 5.2 a 5.5 sú výsledky modelu rýchlostí prúdenia pracovného plynu na ose aparatury v rozsahu celej počítanej pracovnej oblasti. Na obrázkoch 5.3 a 5.6 je detail oblasti, v ktorej bolo spravené meranie znázornené na obrázkoch 5.4 a 5.7. Pre názornosť je na obrázku 5.8 znázornený priebeh tlaku na ose aparatury pre tok $Q = 30 \text{ sccm}$ a ten istý rozsah tlakov.

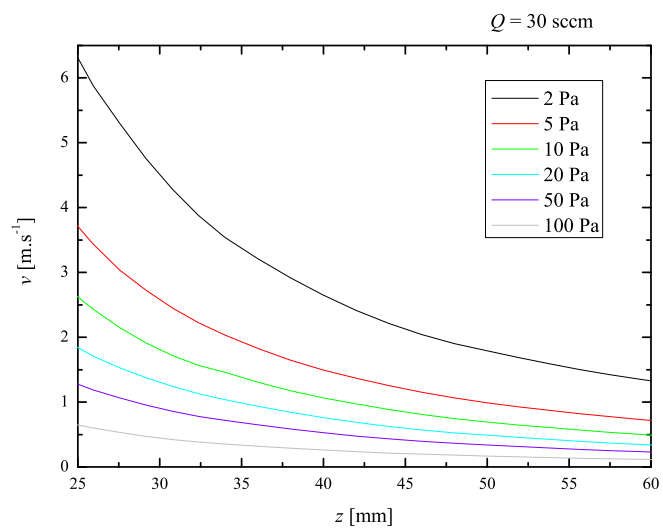


Obrázok 5.2: Model rýchlosti prúdenia pracovného plynu osou aparátúry pri toku $Q = 30 \text{ sccm}$ a rôznych tlakoch.

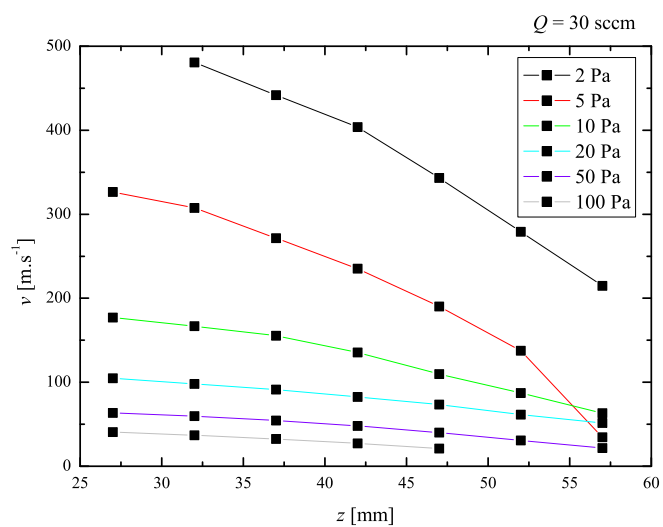
Z vyššie uvedených obrázkov je zrejmé, že výsledky experimentu a modelu nie sú v úplnej zhode. Pri toku $Q = 30 \text{ sccm}$ je zachovaná úmera dávajúca do súvislosti tlak v komore a rýchlosť prúdenia, pričom zo vzťahu 4.8 je zrejmé, že pri konštantnom toku je pri vyšších tlakoch rýchlosť nižšia. Pri hodnote toku $Q = 100 \text{ sccm}$ táto úmera pri modeli platí iba v priestore samotnej trysky, v komore je úmera opačná. To pravdepodobne súvisí s numerickou nepresnosťou modelu, keďže porovnávané tlaky sa líšia omnoho menej, ako v prípade toku pracovného plynu $Q = 30 \text{ sccm}$. Úlohy takisto môže hrať nelinearita Navier-Stokesových rovníc 3.26.

Objasnenie podstaty šírenia iónov v aparátúre s plazmatickou tryskou by mohlo viac ozrejmiť podrobné meranie priebehu elektrického potenciálu na ose aparátúry. K tomu, aby ióny dosiahli rýchlostí známych z experimentu je potrebná intenzita vhodne orientovaného elektrického poľa rádovo jednotky $\text{V}\cdot\text{cm}^{-1}$.

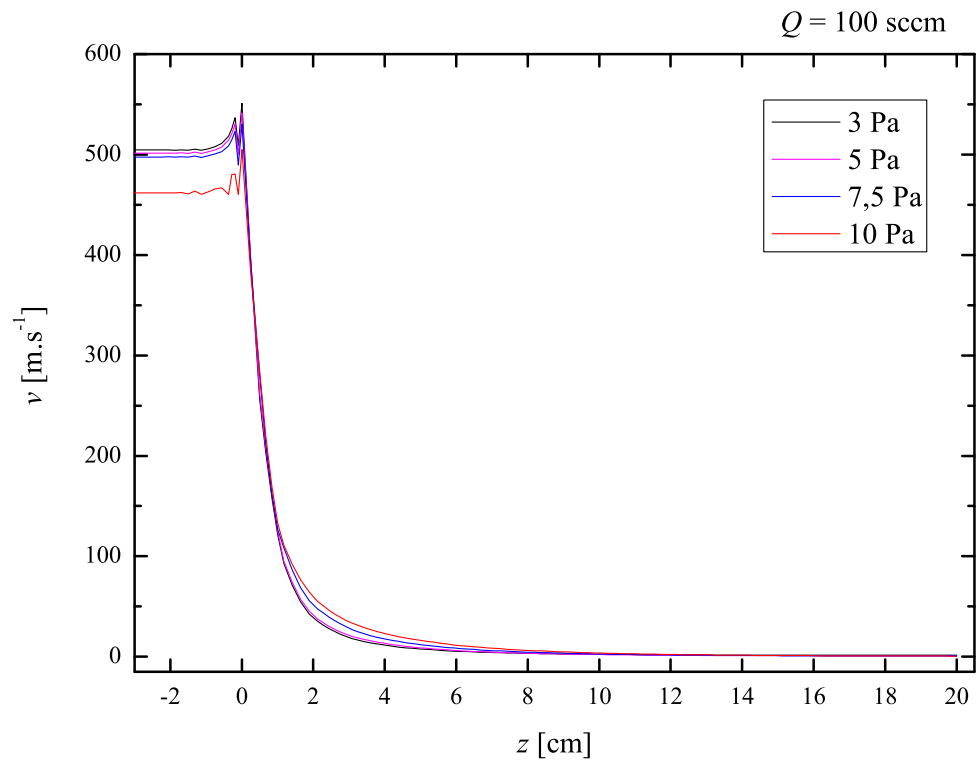
Z namodelovaných priestorových priebehov rýchlosti a tlaku v komore je vidno, že na krátkej vzdialenosti rýchlo relaxujú k ustáleným hodnotám v komore, a teda modelovaná oblasť komory je dostatočne veľká.



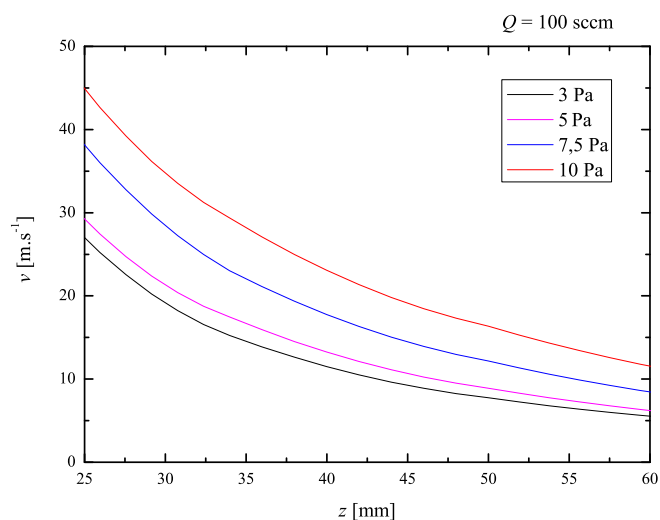
Obrázok 5.3: Model rýchlosti prúdenia pracovného plynu osou aparátúry pri toku $Q = 30$ sccm a rôznych tlakoch v rozsahu, kde prebiehalo meranie.



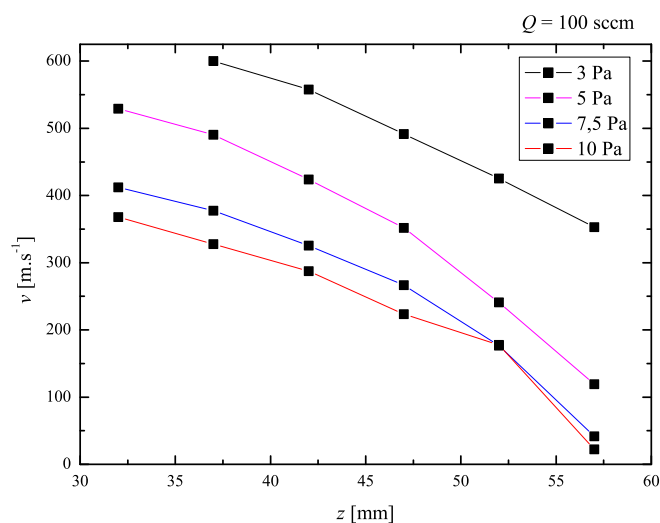
Obrázok 5.4: Namerané rýchlosti iónov na ose aparátúry pri toku $Q = 30$ sccm a rôznych tlakoch v komore. Napätie na zdroji $U = 500$ V, stredná hodnota prúdu $\langle I \rangle = 75$ mA, frekvencia pulzov $f = 400$ Hz, dĺžka pulzu $\tau = 25$ μ s.



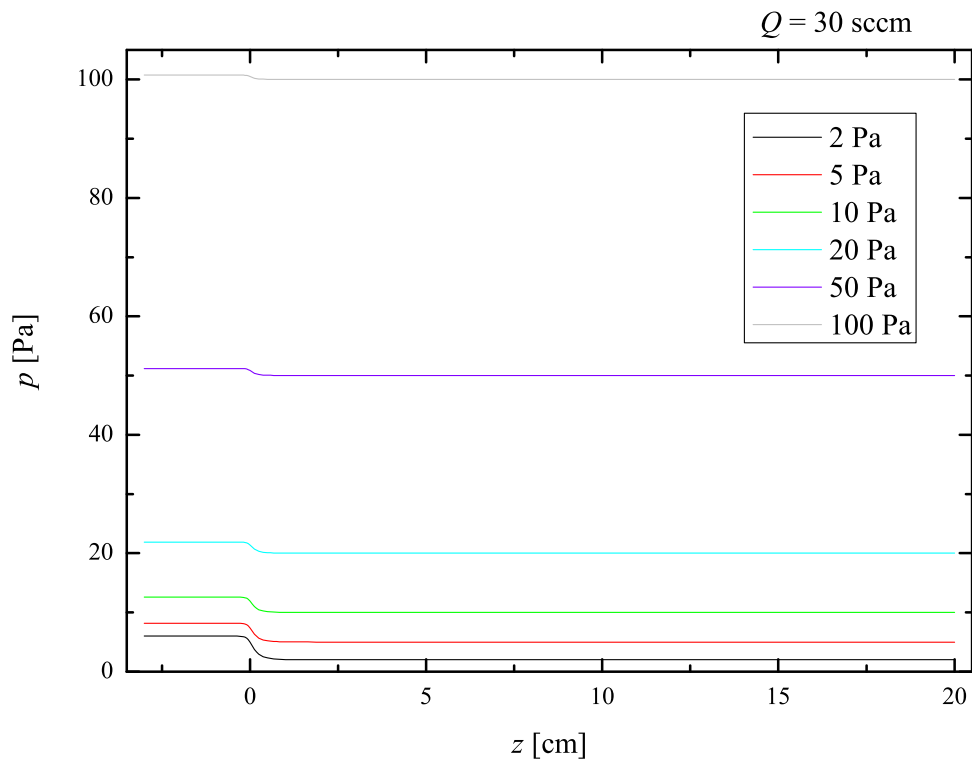
Obrázok 5.5: Model rýchlosti prúdenia pracovného plynu osou aparátúry pri toku $Q = 100 \text{ sccm}$ a rôznych tlakoch.



Obrázok 5.6: Model rýchlosti prúdenia pracovného plynu osou aparátúry pri toku $Q = 30$ sccm a rôznych tlakoch v rozsahu, kde prebiehalo meranie.



Obrázok 5.7: Namerané rýchlosti iónov na ose aparátúry pri toku $Q = 100$ sccm a rôznych tlakoch v komore. Napätie na zdroji $U = 500$ V, stredná hodnota prúdu $\langle I \rangle = 75$ mA, frekvencia pulzov $f = 400$ Hz, dĺžka pulzu $\tau = 25$ μ s.



Obrázok 5.8: Model priebehu tlaku na ose aparátúry pri toku $Q = 30$ sccm a rôznych tlakoch.

Kapitola 6

Záver

V rámci diplomovej práce som sa zoznámil s aparatórou plazmatickej trysky a jej princípom. Takisto som sa zoznámil so základmi mechaniky tekutín, konkrétne s prúdením stlačiteľných newtonovských tekutín a so základmi numerického riešenia parciálnych diferenciálnych rovníc. Podieľal som sa na meraní rýchlostí iónov v tejto aparátúre. Princíp merania a jeho výsledky sú uvedené v kapitole 5.

Vyvinul som zjednodušený počítačový model prúdenia pracovného plynu aparatórou plazmatickej trysky na základe počítania Navier-Stokesových rovníc pre stlačiteľné newtonovské tekutiny. Tento model je bližšie popísaný v kapitole 4. Zjednodušenie spočíva v predpoklade konštantnej teploty v celej aparátúre. Vplyv tohoto predpokladu je diskutovaný v časti 4.3.1. Funkčnosť modelu je overená v podkapitole 4.5, kde je porovnávaný s výsledkami získanými v článku [25], kde je modelované prúdenie vnútri dutej katódy. Porovnanie je možné nájsť v tabuľke 4.5 a na obrázkoch 4.5 až 4.8. Medzi porovnávanými modelmi je dosiahnuté zhodných výsledkov.

V podkapitole 5.3 je spravené porovnanie nameraných výsledkov hodnôt rýchlostí iónov na ose aparatóry s namodelovanými údajmi rýchlosti prúdenia pracovného plynu. Tieto výsledky sú znázornené na obrázkoch 5.2 až 5.7. Je zrejmé, že nedochádza k zhode experimentu a modelu, čo môže byť spôsobené jednak nedostatkom modelu, keďže sa už nejedná iba o prúdenie vnútri dutej katódy, kde je funkčnosť overená, ale mimo ňu, prípadne môže hrať rolu drift iónov. K tomuto účelu je ale potrebné poznať hodnoty intenzity elektrického poľa na ose aparatóry.

Z výsledkov tejto práce sa pripravuje vystúpenie na konferencii.

Literatúra

- [1] Bárdoš, L.; Dušek, V. (1988): High rate jet plasma-assisted chemical vapour deposition. *Thin Solid Films* **158**, 265-270.
- [2] Bárdoš, L.; Dušek, V., Vaněček, M. (1987): New way for high-rate a-Si deposition. *Journal of Non-Crystalline Solids* **97-98**, 281-284.
- [3] Bárdoš, L.; Berg, S.; Baránková, H. (1993): Radio-frequency plasma-jet applied to coating of internal walls of narrow tubes. *Journal of Vacuum Science and Technology A* **11**, 1486-1490.
- [4] Čada, M.; Hubička, Z.; Adámek, P.; Ptáček, P.; Šíchová, H.; Šícha, M.; Jastrabík, M. (2003): Investigation of RF and DC plasma jet system during deposition of highly oriented ZnO films. *Surface and Coatings Technology* **174**, 627-631.
- [5] Hubička, Z.; Čada, M.; Jakubec, I.; Bludská, J.; Málková, Z.; Trunda, B.; Ptáček, P.; Přidal, J.; Jastrabík, L. (2003): Investigation of the RF plasma jet system for deposition of LiCoO_x thin films. *Surface and Coatings Technology* **174**, 632-637.
- [6] Hippler, R.; Kersten, H.; Schimdt, M.; Schoenbach, K. H. (Eds.) (2007): Low Temperature Plasmas – Fundamentals, Technologies, and Techniques, Volume 1. WILEY-VCH Verlag, Berlin.
- [7] Raizer, Y. P. (1991): Gas Discharge Physics. Springer, Berlin.
- [8] Liberman, L. A.; Lichtenberg, A. J. (1994): Principles of Plasma Discharges and Materials Processing. Wiley, New York.
- [9] Little, P. F.; von Engel, A. (1954): The hollow-cathode effect and the theory of glow discharges. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A* **224**, 209-227.
- [10] Soukup, L.; Peřina, V.; Jastrabík, L.; Šícha, M.; Pokorný, P.; Soukup, R. J.; Novák, M.; Zemek, J. (1996): Germanium nitride layers prepared by supersonic r.f. plasma jet. *Surface and Coatings Technology* **78**, 280-283.

- [11] Hubička, Z.; Šícha, M.; Pajasová, L.; Soukup, L.; Jastrabík, L.; Chvostová, D.; Wagner, T. (2001): CN_x coatings deposited by pulsed RF supersonic plasma jet: hardness, nitrogenation and optical properties. *Surface and Coatings Technology* **142-144**, 681-687.
- [12] Fendrych, F.; Soukup, L.; Jastrabík, L.; Šícha, M.; Hubička, Z.; Chvostová, D.; Tarasenko, A.; Studnička, V.; Wagner, T. (1999): Cu_3N films prepared by the low-pressure r.f. supersonic plasma jet reactor: Structure and optical properties. *Diamond and Related Materials* **8**, 1715-1719.
- [13] Pribil, G.; Hubička, Z.; Soukup, R. J.; Ianno, N. J. (2001): Deposition of electronic quality amorphous silicon, $a - \text{Si:H}$, thin films by a hollow cathode plasma-jet reactive sputtering system. *Journal of Vacuum Science & Technology A* **19**, 1571-1576.
- [14] Šícha, M.; Hubička, Z.; Tichý, M.; Novák, M.; Soukup, L.; Jastrabík, L.; Behnke, J. F.; Kapička, V.; Kapoun, K.; Šerý, M. (1996): The interaction of the Supersonic Plasma-Jet with the Substrate in the RF Plasma-Chemical Reactor. *Contributions to Plasma Physics* **36**, 605-611.
- [15] Tichý, M.; Šícha, M.; Bárdoš, L.; Soukup, L.; Jastrabík, L.; Kapoun, K.; Touš, J.; Mazanec, B.; Soukup, R. J. (1994): A Study of the Gas Flow in the RF Low-Pressure Supersonic Jet Plasma Chemical System. *Contributions to Plasma Physics* **34**, 765-772.
- [16] Horský, J.; Novotný, J.; Štefaník, M. (2001): *Mechanika ve fyzice*. Academia, Praha.
- [17] Faber, T. E. (1995): *Fluid Dynamics for Physicists*. Cambridge University Press, Cambridge.
- [18] Sutherland, W. (1893): The viscosity of gases and molecular force. *Philosophical Magazine, Series 5* **36**, 507-531.
- [19] Landau, L. D.; Lifshitz, E. M. (1987): *Fluid Mechanics*. Pergamon Press, Oxford.
- [20] Chung, T. J. (2002): *Computational Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, Cambridge.
- [21] Ferziger, J. H.; Perić, M. (2002): *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, Berlin.
- [22] Lide, D. R.; Frederikse, H. P. R. (Eds.) (1994): *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. CRC Press, London.

- [23] Crane Company (2009): Flow of Fluids. Crane Co., Stamford.
- [24] FlexPDE: User's Guide, www.pdesolutions.com.
- [25] Bogaerts, A.; Okhrimovskyy, A.; Baguer, N.; Gijbels, R. (2005): Hollow cathode discharges with gas flow: numerical modelling for the effect on the sputtered atoms and the deposition flux. *Plasma Sources Science and Technology* **14**, 191-200.