

UNIVERZITET U BEOGRADU
FIZIČKI FAKULTET

Miloš S. Skočić

**PROUČAVANJE EVOLUCIJE
PLAZME NASTALE
LASERSKOM ABLACIJOM**

doktorska disertacija

Beograd, 2016

UNIVERSITY OF BELGRADE
FACULTY OF PHYSICS

Miloš S. Skočić

**THE STUDY OF LASER
INDUCED PLASMA
EVOLUTION**

Doctoral Dissertation

Beograd, 2016

Mentor:

Prof. dr Srdjan Bukvić, redovni profesor, Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu

Članovi komisije:

Prof. dr Srdjan Bukvić, redovni profesor, Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu

Prof. dr Djordje Spasojević, vanredni profesor, Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu

Dr Marija Radmilović-Radjenović, naučni savetnik Instituta za fiziku

Datum odbrane:

Ova doktorska disertacija uradjena je u Laboratoriji za fiziku jonizovanih gasova Fizičkog fakulteta Univerziteta u Beogradu. Pre svega, želim da se zahvalim svom mentoru prof. dr Srdjanu Bukviću na velikoj pomoći, produktivnim diskusijama i njegovoj spremnosti da u svakom trenutku izađe u susret pri rešavanju najrazličitijih problema. Takodje, želim da se zahvalim prof. dr Stevanu Djenižeu, doc. dr Zoranu Nikoliću i dr Milošu Burgeru na uloženom trudu i doprinosu ovom radu.

Miloš Skočić

PROUČAVANJE EVOLUCIJE PLAZME NASTALE LASERSKOM ABLACIJOM

Rezime

U okviru ove teze razvili smo jednostavan model koji opisuje ekspanziju laserski indukovane plazme. Model se zasniva na pretpostavci da je proces ekspanzije dominantno određen kinematikom teških čestica. Elektronska koncentracija i elektronska temperatura su uključeni u model pod pretpostavkom lokalne termodinamičke ravnoteže. Oslanjajući se na ove pretpostavke razvijena je jednostavna, a pritom efikasna, Monte Karlo simulacija.

Utvrđeno je da je karakteristično vreme ekspanzije laserski proizvedene plazme proporcionalno linearnoj dimenziji početne zapremine. Za dovoljno veliku početnu zapreminu, plazma ostaje u lokalnoj termodinamičkoj ravnoteži na mikrosekundnoj skali u zavisnosti od početne elektronske temperature.

Rezultati simulacije upoređeni su sa spektroskopskim merenjima laserski proizvedene plazme bakra na niskom pritisku okružujućeg gasa (vodonika na pritisku od 200 Pa). Pokazano je da dijagnostika bazirana na spektralnim linijama vodonika nije odgovarajuća za dijagnostiku središnjeg dela plazme. Demonstrirali smo neophodnost radijalno razloženih spektroskopskih merenja kao ključni korak za korektnu dijagnostiku i razumevanje laserski proizvedene plazme.

Diskutovani su najvažniji procesi vezani za hladjenje plazme. Zaključeno je da je glavni uzrok hladjenja plazme posledica razletanja teških čestica, a ne gubitak energije elektrona na zračenje. Takođe, pokazano je da elektronska temperatura ne prati temperaturu teških čestica zbog velike razlike u masi čestica (mali transfer energije u elastičnim sudarima) i brze ekspanzije plazme.

Razmatrane su granice važenja hidrodinamičkog modela na niskom pritisku okolnog gasa i potrebe za čestičnim modelima laserski proizvedene plazme. Pokazano je da za odabrane početne uslove hidrodinamički pristup ima zadovoljavajuću tačnost samo u centralnom regionu plazme.

Pokazano je da čestice mete (atomi i joni metala od koga je sačinjena meta) i čestice okolnog gasa imaju suštinski različitu raspodelu. Koncentracija čestica mete ima izrazit maksimum u središtu plazme, dok koncentracija čestica okolnog gasa ima maksimum na periferiji plazme, odnosno na samoj granici bakar/vodonik plazme.

Rešeni su određeni tehnički problemi vezani za Monte Karlo simulaciju. Razvijena je rekurzivna adaptivna mreža pogodna za primenu u Monte Karlo simulacijama.

Izložen je jednostavan i numerički efikasan metod za proveru i korekciju samoapsorpcije spektra snimljenog u "image" modu CCD kamere. Predloženi metod zahteva dva spektra - prvi F_1 , snimljen na standardni način, drugi spektar, F_2 , snimljen sa zadnjim ogledalom. Korigovani spektar, bez samoapsorpcije, je dat jednostavnom relacijom $F_0 = \frac{2F_1}{1 + \frac{F_2 - F_1}{GF_1}}$. Nije neophodna simetrizacija ili numerička procedura za izgladjivanje snimljenih spektara F_1 i F_2 pre određivanja korigovanog spektra F_0 . Problem sa šumom, vezan za inverzni Abelov transform, je detaljno diskutovan.

Ključne reči: Laserski proizvedena plazma, LIBS, Monte Karlo simulacije, LTE, spektroskopija plazme, radijalno razložena spektroskopija, inverzna Abelova transformacija, samoapsorpcija

Naučna oblast: Fizika

Uža naučna oblast: Fizika jonizovanog gasa i plazme

UDK broj:

THE STUDY OF LASER INDUCED PLASMA EVOLUTION

Abstract:

Within this thesis we have developed a simple model that describes the expansion of laser induced plasma. The model is based on the assumption that the expansion is predominantly determined by the kinematics of the heavy particle. Electron concentration and electron temperature are included in the model assuming local thermodynamic equilibrium. Relying on these assumptions, simple yet efficient Monte-Carlo simulation is developed.

We found that characteristic expansion time of the LIP is proportional to the linear dimension of the initial volume heated up by the laser. For sufficiently large initial volume copper plasma remains in LTE on the microsecond scale depending on the initial electron temperature.

The presented simulation results are compared with spectroscopic measurements of laser induced copper plasma at low pressure of the surrounding gas (hydrogen at a pressure of 200 Pa). It is shown that the diagnosis based on the spectral lines of hydrogen is not appropriate for the diagnosis of the central region of the plasma plume. We have demonstrated the necessity of radially resolved spectroscopic measurements as a key step for correct diagnostics and understanding of laser induced plasma.

The most important processes related to the cooling of plasma plume are discussed. It was concluded that the plasma plume cooling is result of the heavy particles expansion, rather than losing energy due to radiation. It was also shown that the electron temperature does not follows the temperature of the heavy particles due to large differences in the weight of the particles (small energy transfer in elastic

collisions) and the rapid expansion of plasma.

Validity of the hydrodynamic model at low pressure of the surrounding gas and the need for particle models of laser produced plasma is discussed. It is shown that for selected initial conditions hydrodynamic approach has satisfying accuracy only in the central region of the plasma.

It is shown that the ablated particles and the surrounding gas particles have a substantially different distributions. The concentration of the ablated particles has a pronounced maximum in the center of the plasma, while the concentration of the surrounding gas particles has a peak at the periphery of the plasma, or on the border of copper/hydrogen plasma.

Certain technical problems with the Monte-Carlo simulation are successfully resolved. Recursive adaptive mesh suitable for use in Monte-Carlo simulations is developed.

Simple and numerically efficient method for detection and correcting of the self-absorption spectra recorded in the image mode of a CCD camera is presented. The proposed method requires two spectrum - first F_1 recorded in common way, and second, F_2 recorded with a back mirror. The corrected spectrum F_0 , free of self-absorption, is given by the following simple expression $F_0 = \frac{2F_1}{1 + \frac{F_2 - F_1}{GF_1}}$. It is not necessary to symetrize or to smooth recorded spectra F_1 and F_2 before determination of the corrected spectrum F_0 . Problem with noise, associated to the inverse Abel transform is discussed in detail.

Key words: Laser induced plasma, LIBS, Monte-Carlo simulations, LTE, plasma spectroscopy, radially resolved spectroscopy, inverse Abel transformation, self-absorption

Scientific field: Physics

Research area: Physics of ionized gasses and plasma

UDC number:

Sadržaj

1	Uvod	1
1.1	Laserski proizvedena plazma	1
1.2	Osnovne karakteristike plazme dobijene osvetljavanjem metalne mete nanosekundnim laserom na niskom pri- tisku okružujućeg gasa	2
1.3	Tehnike za karakterizaciju plazme	5
1.4	Problemi vezani za analitičko opisivanje plazme	7
1.5	Modeliranje laserski proizvedene plazme	7
1.6	Motivacija	9
2	Eksperimentalna tehnika	12
2.1	Atmoska emisiona spektroskopija	12
2.2	Termodinamička ravnoteža plazme	13
2.2.1	Termodinamička ravnoteža kod laserski proizvedene plazme . .	17
2.3	Populacija pobudjenih nivoa u atomu, LTE, koliziono radijativni model	19
2.4	Problemi vezani za nehomogenost plazme	21

2.4.1	Radijalno razložena merenja - Inverzna Abelova transformacija	23
2.4.2	Samoapsorpcija	24
2.5	Spektroskopska dijagnostika laserski proizvedene plazme	26
2.5.1	Odredjivanje elektronske temperature	26
2.5.2	Saha-Bolcman plot	27
2.5.3	Širenje spektralnih linija i odredjivanje elektronske koncentracije	29
2.6	Postavka eksperimenta	31
3	Čestični model laserski proizvedene plazme	34
3.1	Pregled modela koji se koriste za opisivanje evolucije laserski proizvedene plazme	34
3.2	Čestična (Monte Karlo) simulacija evolucije plazme	36
3.3	Metoda direktne Monte Karlo simulacije	37
3.3.1	Kretanje čestica	38
3.3.2	Kompjuterske čestice, otežinjene čestice	38
3.3.3	Metode za pravljenje mreže ćelija i indeksiranje čestica	41
3.4	Interakcija između čestica	44
3.4.1	Interakcija između neutralnih čestica	47
3.4.2	Interakcija između naelektrisanih čestica	51
3.4.3	Odredjivanje stepena jonizacije, elektronske temperature i koncentracije	57
3.5	Zračenje plazme	58

3.6	Veličine dobijene iz modela, mikroskopske i makroskopske veličine, poredjenje sa eksperimentom	59
3.7	Algoritam	61
4	Rezultati	63
4.1	Rezultati simulacije za ekspanziju plazme u atmosferu vodonika na niskom pritisku	63
4.1.1	Početni uslovi	63
4.1.2	Usmereno kretanje teških čestica	64
4.1.3	Raspodela teških čestica	64
4.1.4	Raspodele duž z ose vezane za elektrone i teške čestice	66
4.2	Efekti hlađenja plazme	68
4.2.1	Hlađenje usled zračenja i ekspanzije plazme	68
4.2.2	Efekti početne zapremine plazme na ekspanziju i hlađenje plazme	70
4.3	Ekspanzija plazme i postojanje lokalne termodinamičke ravnoteže . . .	71
4.4	Intenzitet spektralnih linija bakra	73
4.5	Intenzitet spektralnih linija vodonika	74
4.6	Radijalni profili spektralnih linija u simulaciji i eksperimentu	76
4.7	Diskusija	77
4.7.1	Početni uslovi	77
4.7.2	LTE	79

5 Zaključak	80
A Inverzna Abelova transformacija, radijalno razložena merenja	83
A.1 Primer radijalno razloženih merenja	85
B Provera i korekcija spektralnih linija na efekat samoapsorpcije	89
B.1 Samoapsorpcija plazme	89
B.1.1 Primer korekcije linije na samoapsorpciju	94
C Granice važenja hidrodinamičkog modela	98
D Brzina ekspanzije, stepen jonizacije, LTE i početni uslovi	100

Poglavlje 1

Uvod

1.1 Laserski proizvedena plazma

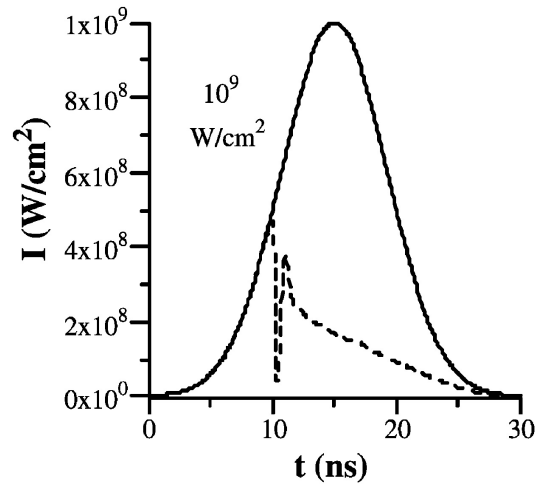
Laserski proizvedena plazma nastaje kada se gas ili površina metala osvetle impulsnim laserom velikog intenziteta. Tokom interakcije lasera sa površinom mete formira se plazma od materijala od kojeg je napravljena meta, dok određena količina materijala bude raspršena u vidu klastera različite veličine. Ovi efekti su našli mnoge primene u raznim oblastima nauke, kao što su obrada materijala, izgradnja tankih filmova, formiranje nano zrna, proizvodnja poluprovodnika, *kreiranje izvora plazme*, kvalitativne i kvantitativne analize uzoraka (Jagdish & Thakur, 2007)(Eason, 2007)(Becker *et al.*, 1998). Formiranje plazme, transport čestica, efekti koje ekspanzija čestica ima na termodinamičku ravnotežu i spektar ovako dobijene plazme su i dalje nedovoljno istraženi (Jagdish & Thakur, 2007)(Cristoforetti *et al.*, 2010). Emisiona spektroskopija se koristi za analizu elemenata mete i može se koristiti za dobijanje parametara plazme kao što su elektronska temperatura, elektronska koncentracija i koncentracija atoma i jona. U emisionom spektru plazme dobijene osvetljavanjem metalnih površina dominiraju linije materijala od kog je načinjena meta. Ova osobina svrstava laserski proizvedenu plazmu u izuzetno interesantne spektroskopske izvore sa velikim potencijalom u oblasti proučavanja oblika spektralnih linija (Skočić *et al.*, 2013)(Burger *et al.*, 2014b)(Burger *et al.*, 2014a).

Procesi vezani za kreiranje plazme u gasu i na površini metala su u potpunosti različiti. Kako je predmet ove teze kreiranje plazme interakcijom lasera sa površinom metala, ograničićemo se samo na taj slučaj. Brojna istraživanja ukazuju da je interakcija elektromagnetnog zračenja sa površinom mete vrlo komplikovana i zavisi od intenziteta i trajanja laserskog impulsa (Ready, 1971). Tipičan (pojednostavljen) scenario za nanosekundne lasere uključuje zagrevanje metalne površine i ablaciju (isparavanje) metala u početnoj fazi, a zatim apsorpciju laserskog zračenja u plazmi praćenu naglim rastom temperature uz intenzivnu ekspanziju (Jeong *et al.*, 1988)(Watanabe & Iguchi, 1999).

1.2 Osnovne karakteristike plazme dobijene osvetljavanjem metalne mete nanosekundnim laserom na niskom pritisku okružujućeg gasa

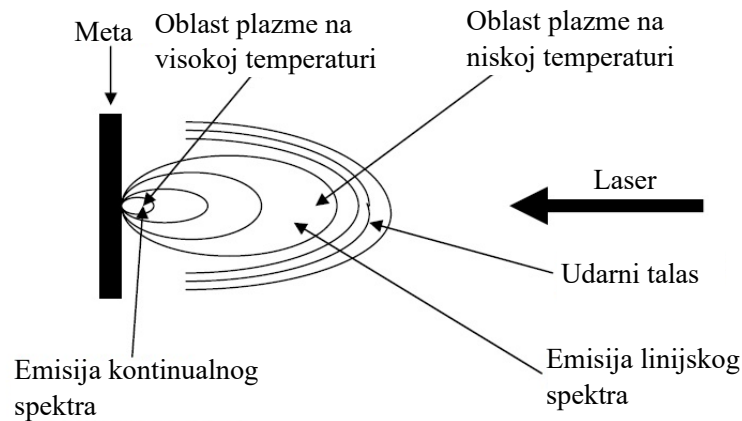
Kada nanosekundnim impulsnim laserom snage $10^5 - 10^{10}$ W/cm² osvetlimo površinu metalne mete, deo energije se reflektuje, a deo apsorbuju elektroni u meti. Elektroni interaguju sa kristalnom rešetkom u metalu i predaju joj apsorbovanu energiju. Obzirom da je vreme relaksacije energije kod metala reda 10^{-13} s, a da je laserski impuls reda nanosekunde može se smatrati da je energija direktno predata metalnoj rešetci. Pod ovom pretpostavkom apsorpcija zračenja i prenos toplote se može na jednostavan način opisati termalnim provodjenjem (Bogaerts *et al.*, 2003).

Nakon nekog vremena, tipično nekoliko nanosekundi, meta se zagreje i počne da isparava. Tipične vrednosti temperature na površini metala su oko 6000 K. Na toj temperaturi, ispareni gas je jonizovan i slobodni elektroni intenzivno apsorbuju lasersko zračenje (slika 1.1). Usled apsorpcije zračenja dolazi do zagrevanja elektrona do temperature od oko 40000 K. Teorijska istraživanja ukazuju da se plazma, zbog velike elektronske koncentracije i temperature, posle svega 5 ns nalazi u termodinamičkoj ravnoteži (Amoruso, 1999).



Slika 1.1: Primer apsorpcije laserskog zračenja u isparenom materijalu. Isprekidanom linijom je dat intenzitet koji stiže do mete, a punom linijom inicijalni intenzitet lasera. Slika je preuzeta iz (Bogaerts *et al.*, 2003).

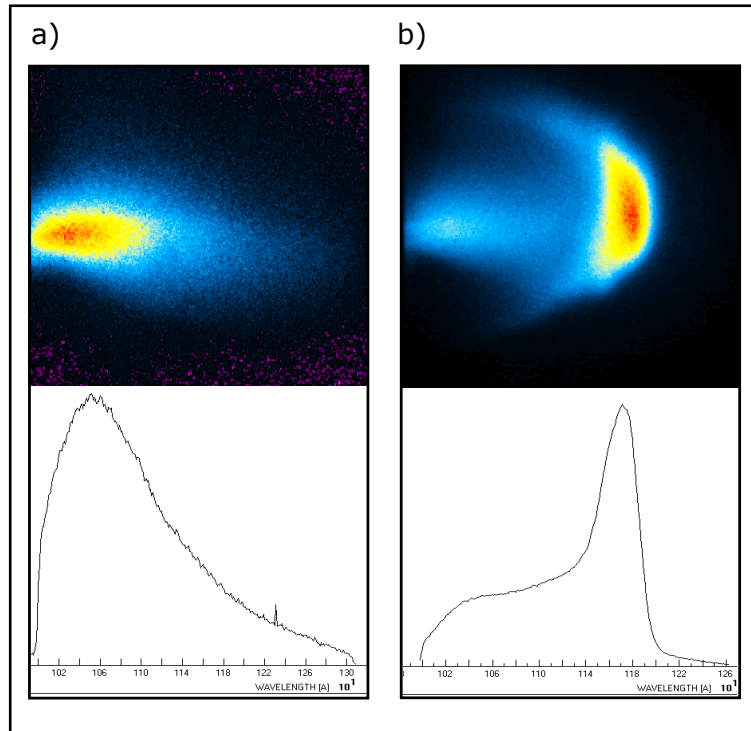
Usled zagrevanja dolazi do intenzivne ekspanzije plazme i formiranja velikih gradijenata koncentracije i temperature (slika 1.2). Tipične vrednosti elektronske koncentracije približno 100 ns nakon laserskog impulsa su reda 10^{24} m^{-3} . U istom vremenskom trenutku elektronska temperatura je oko 20000 K. Izrazita nehomogenost laserski indukovane plazme, veliki gradijenti elektronske i jonske temperature i odgovarajućih koncentracija, s jedne strane otežavaju spektroskopsku dijagnostiku, a s druge strane pružaju dragocen uvid u značaj pojedinih procesa u različitim fazama evolucije plazme.



Slika 1.2: Šematski prikaz laserski proizvedene plazme. U plazmi postoji nekoliko oblasti sa različitom temperaturom i koncentracijom. Koncentracija i temperatura opadaju sa udaljavanjem od mete. Slika je preuzeta iz (Jagdish & Thakur, 2007).

Ove vrednosti elektronske koncentracije i temperature su dovoljno visoke da kri-
terijum za lokalnu termodinamičku ravnotežu, Mekverterov kriterijum (McWhirter,

1965), uglavnom bude ispunjen za neutralne atome metala u toku celog vremena života, ali ne i za viša jonizovana stanja i atome okružujućeg gasa. Medjutim, treba imati u vidu da se laserski proizvedena plazma brzo širi i da nije dovoljno zadovoljiti Mekverterov kriterijum da bi bili sigurni da se plazma nalazi u lokalnoj termodinamičkoj ravnoteži. Problemi vezani za evoluciju plazme i postojanje termodinamičke ravnoteže će biti kasnije diskutovani. Način na koji se odvija ekspanzija



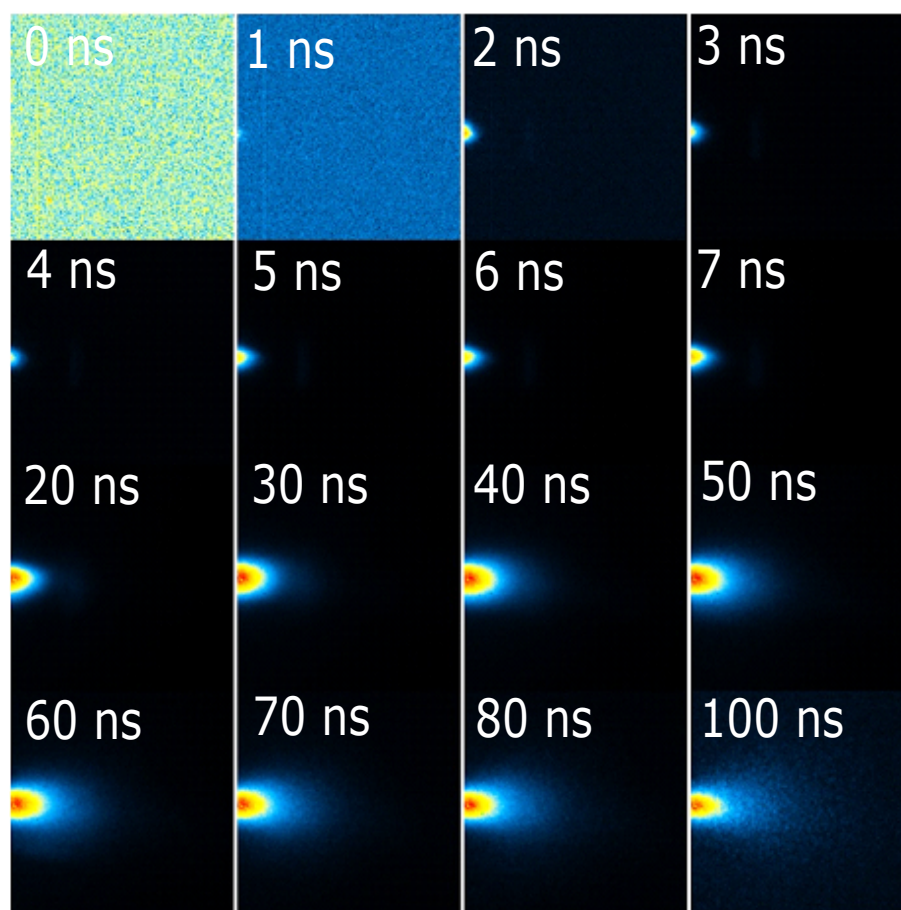
Slika 1.3: Ekspanzija plazme dobijene osvetljavanjem aluminijuma za različite pritiske okolnog gasa, slika pod a) (levo) ekspanzija u vakuum, slika pod b) (desno) ekspanzija u argon na 3 mbar-a. Gornje slike su fotografije plazme načinjene u nultom redu spektrogra. Bojom je ilustrovan relativni intenzitet svetla, skala boja ide od plave do crvene (plavom je označen najmanji, a crvenom najveći intenzitet). Donje slike predstavljaju integralne raspodele svetljenja dobijene sabiranjem intenziteta sa fotografija po visini.

laserski proizvedene plazme zavisi od vrste i pritiska gasa u kome se nalazi meta. Najjednostavnija za analizu je ekspanzija plazme kada se meta nalazi u komori sa vrlo niskim pritiskom, pa se može govoriti o ekspanziji u "vakuum" (slika 1.3 a). Kada je pritisak okolnog gasa veći od nekoliko stotina Pa, pritisak i vrsta gasa primetno utiču na ekspanziju plazme i ne mogu se zanemariti (slika 1.3 b) (Farid *et al.*, 2014). Vreme života plazme najviše zavisi od vrste i pritiska okružujućeg gasa. Za pritisak okružujućeg gasa od nekoliko stotina Pa vreme života plazme je na mikrosekundnoj skali, dok se za pritiske blizu atmosferskom vreme trajanja, vreme života, plazme produžuje na nekoliko stotina mikrosekundi.

1.3 Tehnike za karakterizaciju plazme

Ispitivanja laserski proizvedene plazme se najčešće zasnivaju na proučavanju optičkih i spektroskopskih karakteristika plazme. Metodama masene spektrometrije može se utvrditi veličina formiranih klastera izbačenog materijala (Choia *et al.*, 1999). Merenjima vremena preleta se mogu odrediti brzine čestica.

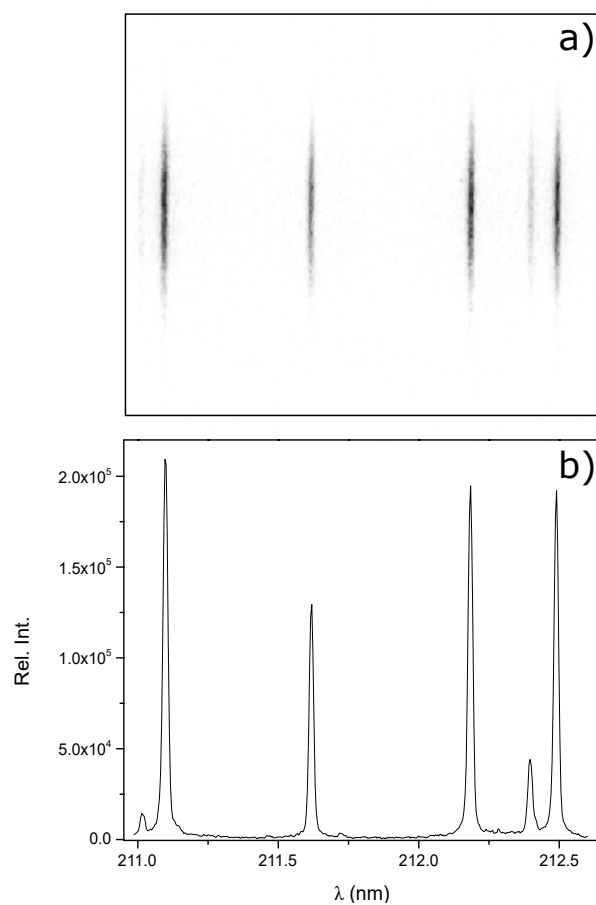
Sa razvojem brzih kamera pojavila se tehnika fotografisanja plazme sa veoma kratkim vremenom ekspozicije, reda nanosekunde. Ova tehnika može da pruži informaciju o brzini i obliku plazme u raznim vremenskim trenucima. Primer ovakvog merenja za metu od bakra pri ekspanziji u vakuum je dat na slici 1.4.



Slika 1.4: Fotografije laserski proizvedene plazme u različitim vremenskim trenucima od laserskog impulsa.

Najčešće korišćen metod za ispitivanje laserski proizvedene plazme zasniva se na spektroskopskim istraživanjima. Razvoj detekcione tehnike, brzih ICCD kamera pre svega, veoma je doprineo pojednostavljenju merenja i količini informacija koje

se mogu dobiti iz spektroskopskih merenja. Primer prostorno razloženog spektroskopskog merenja je dat na slici 1.5. Uz određene numeričke procedure, pre svega inverznu Abelovu transformaciju, mogu se primeniti standardne dijagnostičke tehnike. Uzimajući u obzir Bolcmanovu raspodelu može se odrediti ekscitaciona elektronska temperatura (Bolcman-plot, *eng* "Boltzmann-plot"). Iz Štarkove širine spektralne linije se može odrediti elektronska koncentracija. Zbog izrazite nehomogenosti plazme, veoma je važno da merenja budu prostorno razložena, odnosno da se vrše u takozvanom *eng.* "image" modu¹, slika 1.5 a).



Slika 1.5: Primer spektroskopskog merenja. Linije bakra na oko 212 nm snimljene a) u "image" modu, b) u integralnom (FVB) modu.

¹Spektar snimljen u "image" modu predstavlja dvodimenzioni spektar snimljen na matričnom CCD-u. Na apscisi se nalaze vrednosti talasnih dužina, na ordinati položaji odakle zračenje dolazi (visina), a intenzitet je dat u vidu zatamljenosti svakog piksela (kao na fotografskoj ploči). Sumiranjem svih intenziteta po visini dobija se integralni spektar (FVB mod).

1.4 Problemi vezani za analitičko opisivanje plazme

Opisivanje evolucije laserski proizvedene plazme je značajno za analitičke svrhe, razne primene ovakvog izvora plazme (pravljenje tankih filmova, nano zrna, kvalitativnu i kvantitativnu analizu, ...) i spektroskopiju laserski proizvedene plazme. Model koji opisuje evoluciju zahteva poznavanje populacije različitih atomskih i jonskih elektronskih nivoa, kao i poznavanje raspodele slobodnih elektrona po brzinama. U opštem slučaju, modeliranje plazme se vrši kroz kinematički opis plazme, u kome se uzimaju u obzir svi procesi koji se dešavaju u plazmi, sudarna jonizacija, fotojonizacija, zračenje, tročestična rekombinacija, sudarna ekscitacija i deekscitacija, spontana deekscitacija, fotojonizacija i zakočno zračenje. Poteškoće kod ovakvog pristupa, kod plazmi koje su prostorno i vremenski nehomogene, kao što je slučaj kod laserski proizvedene plazme, čine termodinamički pristup daleko atraktivniji. Kod termodinamičkog pristupa, poznavanje nekoliko parametara, kao što su elektronska (ekscitaciona/jonizaciona) temperatura i koncentracija, omogućava da se sistem, koji je u lokalnoj termodinamičkoj ravnoteži (*eng.* "Local thermodynamic equilibrium" LTE), opiše kroz Bolcmanovu, Maksvelovu distribuciju i jednačinu Saha (Cristoforetti *et al.*, 2010).

Kako je laserski proizvedena plazma brzo ekspandujuća plazma, i njeni parametri se brzo menjaju u vremenu, postavlja se pitanje da li je Mekverterov kriterijum dovoljan uslov za postojanje LTE. Pored brze ekspanzije plazme, izrazita prostorna nehomogenost takodje može da utiče na uslove za LTE. Postojanje LTE kod laserski proizvedene plazme je jedno od važnijih pitanja vezanih za fiziku laserski proizvedene plazme (Cristoforetti *et al.*, 2010) i detaljnije će biti diskutovan kasnije.

1.5 Modeliranje laserski proizvedene plazme

Postoje tri osnovna pristupa modeliranju fizike laserski proizvedene plazme (Eliezer, 2002): Hidrodinamički pristup, kinematički pristup i čestični pristup odnosno čestične

simulacije. Kod hidrodinamičkog modela rešavaju se jednačine održanja mase, impulsa i energije uz pretpostavku postojanja LTE. Kinematički pristup modeliranju je najopštiji ali praktično rešavanje Boltzmanove ili Fokker-Planckove jednačine može da predstavlja težak zadatak. Najveći broj istraživača koristi hidrodinamički pristup pri modeliranju laserski proizvedene plazme (Bogaerts *et al.*, 2003), (Shabanov & Gornushkin, 2014), (Rezaei & Tavassoli, 2012). Iako granice važenja modela nisu striktno definisane, uzima se da je hidrodinamički pristup validan kada je Knudsenov broj (K_n) manji od 0.01 (Bird, 1994). Knudsenov broj je bezdimenziona veličina definisana kao $K_n = \lambda/L$, gde je λ srednji slobodni put, a L karakteristična dužina sistema. Karakteristična dužina sistema može da predstavlja fizičke granice sistema kao što je npr. veličina komore, prepreke itd. ili meru veličine gradijenta nekog od parametara plazme $L = y/|\partial y/\partial x|$, y može da predstavlja temperaturu, koncentraciju čestica itd, a x predstavlja prostornu koordinatu. U početnom trenutku laserski proizvedena plazma je gusta, sa malim gradijentima koncentracije i može se smatrati da je hidrodinamički pristup validan. Međutim, kada plazma počne da se širi, na obodima plazme K_n će postati uporediv sa graničnom vrednosti i čestične karakteristike plazme se više ne mogu zanemarivati. Nakon nekog vremena τ u većem delu plazme hidrodinamički pristup će postati neadekvatan. Generalno, hidrodinamički pristup modeliranju se najčešće koristi u slučaju kada se plazma širi u visok pritisak okolnog gasa, kada je ekspanzija znatno usporena. Moguće alternative hidrodinamičkom pristupu su čestični modeli (Garrelie *et al.*, 1998), (Garrelie & Catherinot, 1999) ili kombinacije hidrodinamičkog i čestičnog pristupa (Itina *et al.*, 2002). Čestične simulacije se zasnivaju na opisivanju i praćenju kretanja pojedinačnih čestica plazme i moguće ih je primeniti u bilo kom stadijumu evolucije, ali su u početnoj fazi izuzetno neefikasne zbog velikog broja čestica koje su potrebne da bi se sistem pravilno opisao.

1.6 Motivacija

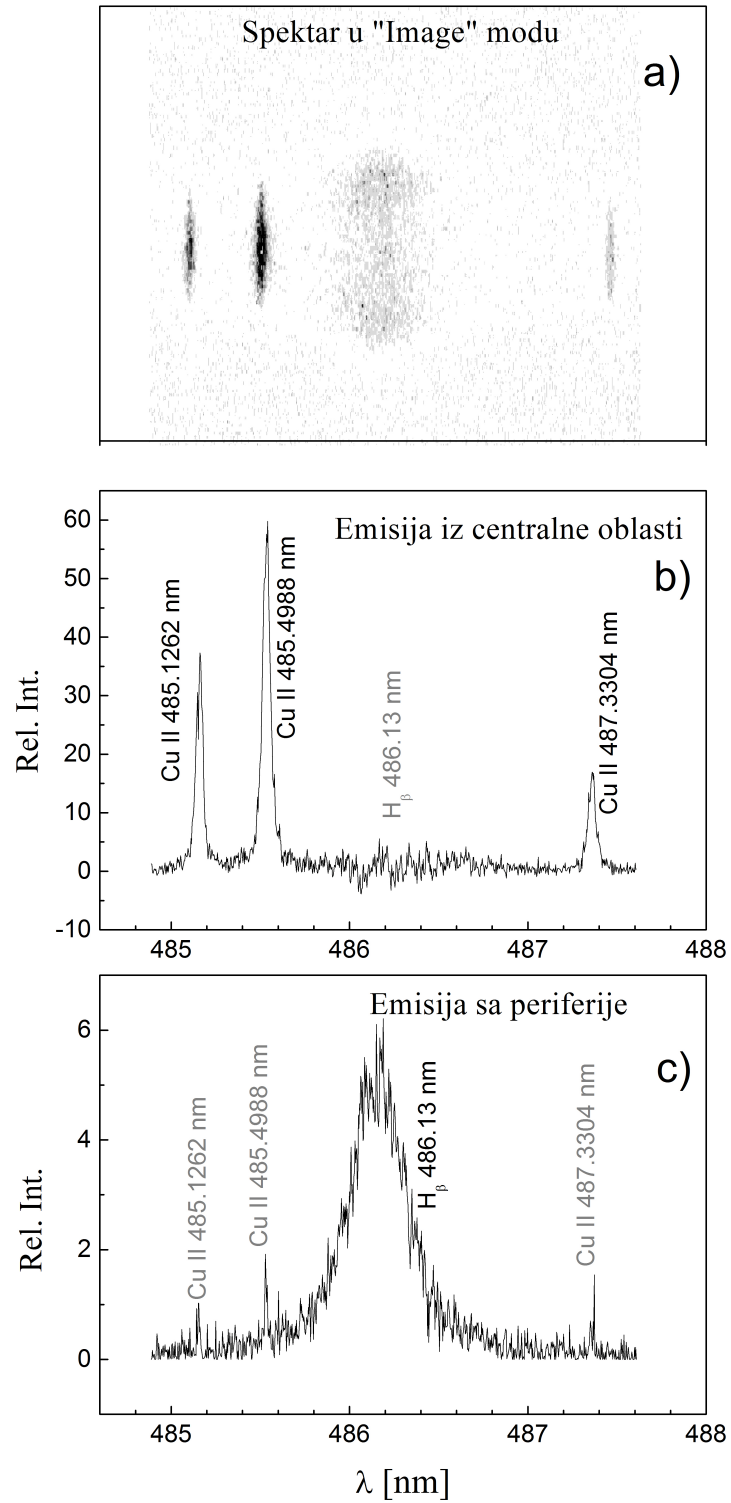
Najjednostavniji način da se procene elektronska koncentracija, elektronska temperatura, količina emitovane energije itd., je oslanjanje na spektroskopske tehnike. Postojanje lokalne termodinamičke ravnoteže je česta pretpostavka za veliki broj spektroskopskih dijagnostičkih metoda (Griem, 1974). Zbog velikih gradijenata koncentracije i temperature kao i zbog brze ekspanzije, laserski proizvedena plazma može da odstupa od termodinamičke ravnoteže (Cristoforetti *et al.*, 2010) i ukoliko je Mekverterov kriterijum zadovoljen. Gradijenti koncentracije su veoma veliki, i vrednosti koncentracije se mogu menjati za nekoliko redova veličine od centra do periferije plazme. Uzimajući u obzir da je zapremina plazme svega nekoliko kubnih milimetara gradijenti predstavljaju velike poteškoće i u samom merenju. Pri posmatranju plazme sa strane, radijalna raspodela intenziteta se dobija inverznom Abelovom transformacijom direktnih spektroskopskih merenja. Jedan od problema koji se susreću kod inverzne Abelove transformacije spektra laserski proizvedene plazme je činjenica da laserski proizvedena plazma nema jasnu granicu, već intenzitet svetljenja asimptotski teži nuli sa udaljavanjem od ose, pa većina standardnih algoritama za inverzni Abelov transform nije primenljiva.

Ukoliko efekti samoapsorpcije nisu zanemarivi, nije moguće direktno iz spektroskopskih merenja izračunati radijalnu raspodelu zračenja. Pre primene metoda za inverznu Abelovu transformaciju potrebno je izvršiti proveru i korekciju linija na samoapsorpciju. Problem kod provere linija na samoapsorpciju potiče iz već pomenute nehomogenosti plazme. Proučavanje samoapsorpcije zračenja, koja suštinski utiče na oblik radijalne emisivnosti, takodje je jedan od zadataka koji su uključeni u ovu tezu.

Sistematsko merenje ekspanzije laserski proizvedene plazme pokazuje da emisije zračenja iz materijala od kojeg je načinjena meta i zračenje okružujućeg gasa imaju različitu radijalnu raspodelu (slika 1.6). Ovakva karakteristika laserski proizvedene plazme zavisi od metala od kojeg je načinjena meta kao i od vrste i pritiska okružujućeg gasa. Razlog za ovakvo ponašanje plazme može biti zbog velikih

gradijenata elektronske koncentracije i temperature kako duž radijusa tako i duž ose pražnjenja. Različita raspodela atoma metala i gasa takodje može biti razlog pomenutog zapažanja. Generalno, ovakvo ponašanje je posledica brze ekspanzije teških čestica u okolni gas pa bi jednostavni model i odgovarajuća čestična Monte Karlo simulacija koja je razvijena u toku rada na ovoj tezi trebala da pruži detaljnije informacije i pravilno opiše ekspanziju plazme.

Rezultati dobijeni na osnovu razvijene Monte Karlo simulacije treba da omoguće razumevanje doprinosa kinematičkih fenomena, transfer kinetičke energije čestica u unutrašnju energiju sistema i obrnuto, uticaj brze ekspanzije plazme na lokalnu termodinamičku ravnotežu, različite radijalne raspodele atoma gasa i metala od kojeg je napravljena meta, uloge zračenja u procesu relaksacije plazme i značaj koji na evoluciju imaju pritisak i vrsta okružujućeg gasa.



Slika 1.6: Panel a: Neobradjena slika spektra na 486 nm. Primenjena je negativna siva skala - tamni pikseli imaju veći intenzitet. Panel b: Spektar emisije iz centralnog dela plazme dobijen inverznom Abelovom transformacijom, Cu II linije su intenzivne dok je H_β utopljena u šum. Panel c: Emisija sa periferije plazme, Cu II linije su jedva vidljive, dok je H_β intenzivna.

Poglavlje 2

Eksperimentalna tehnika

2.1 Atmoska emisiona spektroskopija

Svetlost emitovana iz plazme kada se razloži po talasnim dužinama, sastoji se od kontinuuma, diskretnih linija i molekulskih traka. Spektralne linije se mogu okarakterisati sa talasnom dužinom, intenzitetom i oblikom ili profilom. Ove osobine zavise od strukture atoma i od okoline iz koje atomi emituju zračenje. Atomska emisiona spektroskopija se može koristiti da se utvrdi identitet, struktura i okruženje atoma analizom njihovog zračenja. Analizom izmerenih talasnih dužina spektralnih linija možemo doneti zaključke o vrednostima energetskih nivoa atoma što obezbeđuje eksperimentalni osnov za proučavanje strukture atoma. Ukoliko poznajemo karakteristične linije koje emituju atomi određenog elementa onda prisustvo linija u spektru utvrđuje prisustvo tog elementa u izvoru zračenja. Merenje intenziteta spektralnih linija pruža informaciju o koncentraciji emitera, atoma i jona u posmatranom izvoru zračenja. Fizički parametri izvora zračenja, kao što su temperatura i pritisak, utiču na intenzitet kao i na oblik spektralnih linija i mogu se odrediti analizom oblika spektralnih linija (Jagdish & Thakur, 2007).

Intenzitet spektralne linije zavisi od verovatnoće za spontanu deekscitaciju, koja je karakteristika atoma, i karakteristika sredine u kojoj se nalazi emiter. Kada je

sredina koja emituje zračenje takva da fotoni proizvedeni spontanom deekscitacijom nemaju značajnu verovatnoću da budu ponovo apsorbovani, sredina se naziva optički tankom.

Spektralne linije čiji je donji nivo osnovno stanje atoma nazivaju se rezonantne linije. Fotoni emitovani u takvim prelazima imaju veoma veliku verovatnoću ponovne apsorpcije pre napuštanja plazme i ova pojava se naziva samoapsorpcija. Samoapsorpcija teži da proširi profil spektralne linije, a u ekstremnim slučajevima vrh linije može biti ravan. Ako je ekscitaciona temperatura manja u spoljašnjim regionima pražnjenja, prolazak svetlosti iz centralnog regiona, ne samo da proširuje profil, već takodje pokazuje pad intenziteta na samom centru profila linije. Ovaj fenomen se naziva *eng.* "self reversal" i takve linije ostavljaju pogrešan utisak dubleta (Jagdish & Thakur, 2007).

2.2 Termodinamička ravnoteža plazme

Kada se plazma nalazi u termodinamičkoj ravnoteži, *eng.* "Thermodynamic Equilibrium" (TE), ceo sistem, koji se sastoji od elektrona, jona i zračenja, može se u potpunosti opisati zakonima statističke fizike, gde su ravnotežne raspodele okarakterisane istom temperaturom (T). TE možemo posmatrati kao skup odgovarajućih balansa koji su u ravnoteži (van der Mullen, 1990). Ovi balansi se sastoje od direktnih i odgovarajućih povratnih procesa. Četiri tipa su relevantna i utiču na raspodelu atoma po nivoima:

- Razmena kinetičke energije (ΔE) za čestice X i Y , odnosno Maksvelov balans.

$$\begin{aligned} X + Y &\leftrightarrow^M X + Y \\ E_x + E_y &= (E_x + \Delta E) + (E_y - \Delta E) \end{aligned} \tag{2.1}$$

- Balans ekscitacija/deekscitacija, odnosno Bolcmanov balans.

$$X + A_i + E_{ik} \leftrightarrow^B X + A_k \quad (2.2)$$

deekcitacija $\longleftrightarrow$ ekcitacija

Sa A_i je označen atom u stanju i , a sa A_k atom u stanju k . Sa E_{ik} je označeno povećanje potencijalne energije.

- Saha balans jonizacija i rekombinacija.

$$X + A_j + E_j \leftrightarrow^S X + A_j^+ + e^- \quad (2.3)$$

rekombinacija $\longleftrightarrow$ jonizacija

- Plankov balans koji opisuje interakciju materije i zračenja.

$$A_k \leftrightarrow^P A_i + h\nu$$

$$\text{apsorpcija} \longleftrightarrow \text{spontana emisija} \quad (2.4)$$

$$A_k + h\nu \rightarrow^P A_i + 2h\nu$$

$\rightarrow$ stimulisana emisija

Kao posledica ovih balansa, raspodela elektrona po energijama je data Maksvelovom raspodelom i definisana je temperaturom sistema, populacija pobudjenih nivoa u atomu, odnosno jonu prati Bolcmanovu raspodelu, populacija različitih jonizovanih stanja opisana je Saha jednačinom, a energija fotona je opisana Plankovim zakonom zračenja na temperaturi T . Detaljna izvodjenja ovih raspodela iz navedenih procesa se mogu naći u (van der Mullen, 1990), (Drawin, 1983).

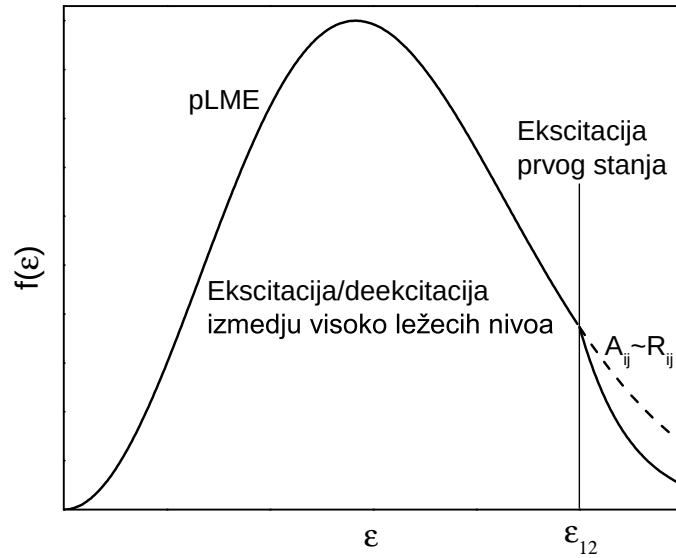
U TE svaki proces je izbalansiran njegovim inverznim procesom, što je poznato kao princip detaljnog balansa. U slučaju kada su neki balansi narušeni javlja se odstupanje od TE i uspostavlja se drugačija ravnoteža. Kod laserski proizvedene plazme, kao i kod većine laboratorijskih plazmi, temperatura zračenja je drugačija od temperature ostalih činioca plazme zato što radijativna ravnoteža zahteva da plazma ima veliku optičku debljinu na svim talasnim dužinama (apsolutno crno telo). Kako to nije slučaj kod laboratorijskih plazmi, i zračenje napušta zapreminu plazme,

raspodela fotona po energijama se razlikuje od Plankove raspodele. Ovaj efekat utiče na raspodele vezane za elektrone, atome i jone. Međutim, ako je izračena energija mala u odnosu na energiju uključenu u druge procese opis plazme preko Saha-Bolcmanove i Maksvelove raspodele je i dalje korektan. Ovakva ravnoteža naziva se lokalna termodinamička ravnoteža, *eng* "Local Thermodynamic Equilibrium" (LTE). U ovom slučaju $T_{exc} = T_e = T_h \neq T_\nu$ gde je T_{exc} temperatura koja je okarakterisana raspodelom pobudjenih stanja u atomu i naziva se ekscitaciona temperatura, T_e i T_h su temperature elektrona i teških čestica, a T_ν je temperatura koja opisuje raspodelu fotona po energijama (van der Mullen, 1990), (Drawin, 1983).

Dalje odstupanje od TE dešava se kada su različite čestice podvrgnute različitim silama. Na primer, u mnogim laboratorijskim plazmama elektroni se ubrzavaju pod uticajem električnog polja, a joni se hlade u sudarima sa zidovima cevi. Kod laserski proizvedene plazme atomi i joni se hlade intenzivnom ekspanzijom, tj. pretvaranjem energije haotičnog kretanja u usmereno kretanje, dok se elektroni hlade zračenjem i sudarima sa teškim česticama. Kako je prenos energije u sudarima elektrona i jona sporiji nego prenos energije u sudarima između istih čestica, elektroni i teške čestice su okarakterisane drugačijim temperaturama ($T_e \neq T_h$). U ovakvim dvotemperaturnim ($2T$) plazmama, raspodela pobudjenih stanja u atomima je rezultat "takmičenja" između elektronskih i atomskih pobudjenja. Kod laserski proizvedenih plazmi, kod kojih je stepen jonizacije dovoljno visok, raspodela pobudjenih stanja atoma je dominantno određena elektronskom temperaturom. Mala razlika između elektronske i ekscitacione temperature je posledica razlike u temperaturi elektrona i teških čestica. Ovakve plazme, kod kojih su procesi ekscitacija i deekscitacija (i drugi) dominantno izazvani sudarima sa elektronima nazivaju se *eng.* "Electron Excitation Kinetic" (EEK) plazme (van der Mullen, 1990), (Cristoforetti *et al.*, 2010), (Drawin, 1983).

Kod EEK plazmi, kod kojih su gradijenti i vremenske varijacije male, LTE se uspostavlja kada su prelazi između nivoa (ekscitacije i deekscitacije) dominantno izazvani u neelastičnim sudarima sa elektronima, a ne radijativnim procesima. Koeficijent brzine procesa za sudarnu ekscitaciju i deekscitaciju je obrnuto srazmeran

razlici energija izmedju nivoa ΔE_{nm} . Kako se ΔE_{nm} smanjuje sa porastom nivoa, ekscitacije i deekscitacije u sudarnim procesima postaju efikasnije na višim nivoima. Sa druge strane, verovatnoća za spontanu deekscitaciju A_{nm} raste sa ΔE_{nm} , tako da je radijativna deekscitacija najizraženija kod prvog pobudjenog stanja. Jasno je da je za fiksnu elektronsku koncentraciju, uslov za LTE lakše zadovoljen za viša pobudjena stanja. Ako postoji nivo k za koji su koeficijent brzine procesa i verovatnoća za spontanu deekscitaciju isti, onda se plazma nalazi u stanju parcijalne lokalne termodinamičke ravnoteže, eng "Partial Local Thermodynamic Equilibrium" (pLTE). Nivoi iznad nivoa k se nalaze u ravnoteži sa slobodnim elektronima, dok se nivoi ispod k ne nalaze (Cristoforetti *et al.*, 2010)(van der Mullen, 1990). U ovom slučaju, raspodela atoma po pobudjenim stanjima se deli na dva dela: gornji deo ($n > k$), koji je lako termalizovan i prati Bolcmanovu raspodelu po stanjima na temperaturi T_{exc} i povezana je sa populacijom jona jednačinom Saha i donji deo ($n < k$) koji ne prati Saha-Bolcmanovu raspodelu.



Slika 2.1: Primer razdvajanja Maksvelove raspodele elektrona po energijama. Elektroni sa energijom manjom od energije ekscitacije prvog stanja ϵ_{12} i dalje imaju Maksvelovu raspodelu (tačnije parcijalnu lokalnu Maksvelovu raspodelu *pLME* i u ravnoteži su sa nivoima iznad prvog pobudjenog nivoa. Elektroni sa većom energijom ne prate Maksvelovu raspodelu zbog zračenja koje napušta plazmu. Slika je preuzeta i modifikovana iz (van der Mullen, 1990).

Primeru radi, uzmimo da je verovatnoća za spontanu emisiju sa prvog pobudjenog na osnovno stanje ($k = 2$) uporediva sa koeficijentom brzine procesa za deekscitaciju ($A_{21} \approx R_{21}$). Deo izračene energije napustiće sistem i to će uticati na Maksvelovu raspodelu elektrona po energijama (slika 2.1). Izračena energija je veća od energije ekscitacije prvog nivoa (ε_{12}) i uticaće samo na rep Maksvelove raspodele. Elektroni sa energijom manjom od ε_{12} prate Maksvelovu raspodelu i oni definišu raspodelu atoma po nivoima za sve nivoe iznad $k = 2$. Drugim rečima, plazma se nalazi u pLTE za nivoe iznad $k = 2$. Prvi pobudjeni nivo se populiše elektronskim udarima sa repa raspodele i njegova koncentracija ne prati Bolcmanovu raspodelu.

U slučaju kada ne postoje prostorni gradijenti i vremenske varijacije uslov za postojanje LTE je zadovoljen ako je broj sudarnih deekscitacija za red veličine veći od broja radijativnih deekscitacija (jednačina 2.5), što se obično naziva Mekverterov kriterijum (McWhirter, 1965).

$$n_k R_{kj} > 10 n_k A_{kj} \quad (2.5)$$

Sa n_k je označena koncentracija stanja k , sa R_{kj} koeficijent brzine procesa za sudarnu deekscitaciju sa nivoa k na nivo j , a sa A_{kj} verovatnoća za spontanu deekscitaciju sa nivoa k na nivo j . Koristeći semiklasične formule za preseke za neelastične sudare, Mekverterov kriterijum može se predstaviti relacijom (Cristoforetti *et al.*, 2010):

$$n_e(\text{cm}^{-3}) > 1.6 \cdot 10^{12} T^{1/2} (\Delta E_{nm})^3, \quad (2.6)$$

gde su T i ΔE_{nm} dati u K i eV, respektivno.

2.2.1 Termodinamička ravnoteža kod laserski proizvedene plazme

Kod laserski proizvedene plazme postoje izraziti gradijenti koncentracije. Takođe, zbog brze ekspanzije parametri plazme se menjaju u toku vremena. Ova činjenica

zahteva dodatne uslove za postojanje LTE. Sem Mekverterovog kriterijuma koji mora da bude ispunjen da bi plazma bila u LTE, vremenske i prostorne varijacije moraju biti male u odnosu na vreme koje je potrebno da se uspostavi Bolcmanova ravnoteža.

Usled brze ekspanzije, odnosno brze promene parametara, može se dogoditi slučaj da populacija nivoa u atomima ne prati promenu elektronske temperature. To je posledica toga što populacija nivoa u atomima ne prati trenutno promene temperature, već je potrebno određeno vreme za koje sistem stigne da reaguje na promenu. Takvo vreme se naziva vreme relaksacije (τ_{rel}) sistema i definisano je najsporijim procesom. Kao što je već napomenuto, koeficijenti brzine procesa zavise od razlike energije izmedju stanja, odnosno rastu sa porastom nivoa k srazmerno sa k^4 . Sa druge strane, verovatnoće za spontanu deekscitaciju opadaju sa porastom nivoa srazmerno sa k^{-5} , tj. rastu kako se približavamo prvom nivou (van der Mullen, 1990). Tako da je nivo koji najsporije dolazi u ravnotežu upravo prvi pobudjeni nivo, za koji je energetska razlika najveća.

Za procenu vremena relaksacije sa osnovnog na prvo pobudjeno stanje koristili smo aproksimaciju koja je preporučena u radu (Cristoforetti *et al.*, 2010):

$$\tau_{rel} = \frac{1}{n_e R_{12}} = \frac{6.3 \cdot 10^4}{n_e f_{12} \langle \bar{g} \rangle} \Delta E_{21} \sqrt{k T_e} e^{\Delta E_{21}/k T_e}. \quad (2.7)$$

f_{12} je snaga oscilatora datog prelaza, a $\langle \bar{g} \rangle$ efektivni Gauntov faktor.

Daleko teži zadatak je definisati brzinu promene parametara plazme. Autori rada (Cristoforetti *et al.*, 2010) su predložili da se može smatrati da je plazma u LTE, odnosno da su vremenske varijacije parametara male ako je ispunjen uslov:

$$\frac{T(t + \tau_{rel}) - T(t)}{T(t)} \ll 1; \frac{n_e(t + \tau_{rel}) - n_e(t)}{n_e(t)} \ll 1, \quad (2.8)$$

dok za prostorne varijacije na položaju x treba da bude zadovoljen uslov:

$$\frac{T(x + \lambda) - T(x)}{T(x)} \ll 1; \frac{n_e(x + \lambda) - n_e(x)}{n_e(x)} \ll 1, \quad (2.9)$$

gde $\lambda = (D\tau_{rel})^{1/2}$ predstavlja karakterističnu dužinu vezanu za difuziju atoma/jona za vreme relaksacije τ_{rel} , a D koeficijent difuzije. Izračunavanje koeficijenata difuzije kod laserski proizvedene plazme nije nimalo jednostavan zadatak i zahteva poznavanje velikog broja preseka i apsolutnih vrednosti koncentracija neutralnih atoma i jona.

Ovako definisane kriterijume eksperimentalno je izuzetno teško odrediti. U rezultatima koji su prezentovani u ovoj tezi koristili smo nešto drugačiji pristup. Vreme ekspanzije plazme definisano je vremenom promene najbržeg procesa, tj. promenom ukupne koncentracije teških čestica ($\tau_{exp} = n/|dn/dt|$).

2.3 Populacija pobudjenih nivoa u atomu, LTE, koliziono radijativni model

U slučaju plazme koja se nalazi u stanju termodinamičke ravnoteže ili lokalne termodinamičke ravnoteže, populacija atoma i jona u pobudjenim stanjima je definisana Bolcmanovom raspodelom. Kod EEK plazmi, poznavajući temperaturu elektrona, jednostavno je izračunati populaciju određenog nivoa primenjujući jednačinu:

$$\frac{n_i}{n_0} = \frac{g_i}{g_0} e^{-E_i/kT_e}. \quad (2.10)$$

Sa indeksom i je označeno pobudjeno stanje u atomu, a sa indeksom 0 osnovno stanje. n_i , n_0 predstavljaju koncentraciju atoma ili jona u datom stanju, g_i , g_0 statističku težinu nivoa. E_i je energija i -tog nivoa u odnosu na osnovno stanje. T_e predstavlja elektronsku ekscitacionu temperaturu, a k Bolcmanovu konstantu.

Medjutim, ukoliko plazma nije u LTE, neki nivoi neće pratiti Bolcmanovu raspodelu. Odstupanje od Bolcmanove raspodele, najpre se javlja na nižim nivoima kod kojih je razlika u energijama najveća. U ovakvim slučajevima, za određivanje populacije nivoa može se primeniti koliziono radijativni (*eng* "Collisional radiative" CR) model. Kod CR modela populacija nivoa je određena samo kolizionim i radija-

tivnim procesima, pretpostavljajući da je sistem kvazistacionaran. CR model se ne može primeniti za određivanje koncentracije osnovnog stanja i koncentracije jona, već oni moraju biti ulazni parametri. Pod ovim pretpostavkama CR model se svodi na rešavanje sistema linearnih jednačina.

U opštem slučaju sistem se može opisati jednačinom kontinuiteta (van der Mullen, 1990):

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla n_i v_i = P(i) - D(i), \quad (2.11)$$

gde je n_i koncentracija atoma u stanju i , v_i brzina. $P(i)$ i $D(i)$ su termovi koji su vezani za populisanje i depopulisanje atoma u stanju i . Prvi i drugi član sa leve strane jednačine predstavljaju vremensku i prostornu relaksaciju. Član $P(i)$ uzima u obzir procese sudarne ekscitacije, tročestične rekombinacije na stanje i , kaskadne spontane i stimulisane deekscitacije sa viših stanja, apsorpcije i radijativne rekombinacije.

$$P(i) = \sum_{j \neq i} n_e n_j R_{ij} + n_e n^j R_i^r + \sum_{j > i} n_j (A_{ij} + B_{ij} \rho_\nu) + \sum_{j < i} n_j B_{ij} \rho_\nu + n_e n^j (\alpha_i + \beta_i \rho_\nu). \quad (2.12)$$

n_e i n^j su koncentracije elektrona i jona, respektivno. R_{ij} je koeficijent brzine procesa za sudarnu ekscitaciju sa stanja j na stanje i , a R_i^r koeficijent za tročestičnu rekombinaciju na stanje i . A_{ij} i B_{ij} su Ajnštajnovi koeficijenti za spontanu i indukovanu emisiju. ρ_ν je gustina zračenja. α_i i β_i su koeficijenti vezani za spontanu i stimulanu radijativnu rekombinaciju. Član $D(i)$ uzima u obzir procese sudarne deekscitacije, sudarne jonizacije, foto ekscitacije i spontane i stimulisane emisije.

$$D(i) = n_e n_i \sum_{j \neq i} R_{ji} + n_e n_i R_i^j + n_i \sum_{j > i} B_{ij} \rho_\nu + n_i \sum_{j < i} (A_{ij} + B_{ij} \rho_\nu) + n_i (B_i^j \rho_\nu). \quad (2.13)$$

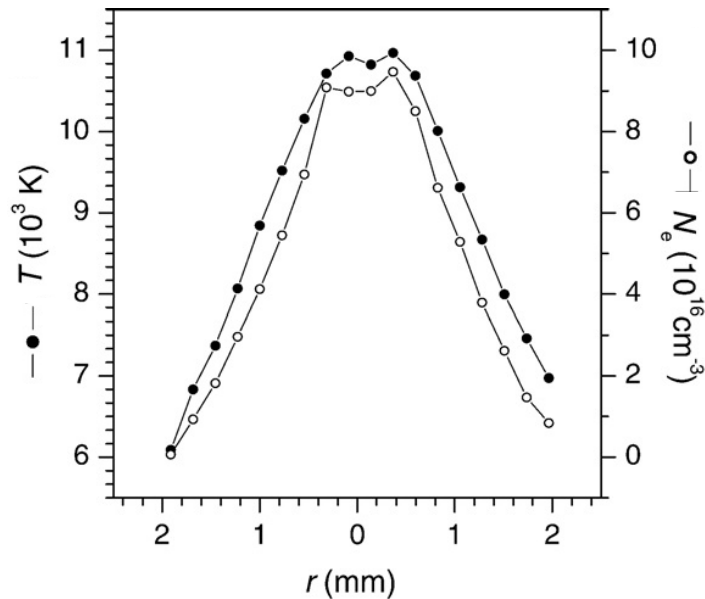
R_i^j je koeficijent brzine procesa za sudarnu jonizaciju, a sa B_i^j stimulanu jonizaciju.

Praktično rešavanje ovih jednačina zahteva određena uprošćenja. Stimulisana emisija se za veliki broj prelaza može zanemariti, a treba je uključiti samo kod rezonantnih prelaza. Za pobudjena stanja može se smatrati da je $\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla n_i v_i = 0$. Sa

druge strane, za koncentraciju osnovnog n_1 i jonizovanog n^j se ne može zanemariti kretanje čestica. U našem slučaju, n_1 i n^j se dobijaju rešavanjem čestične Monte Karlo simulacije (poglavlje 3). Kod EEK plazmi se mogu zanemariti neelastični sudari teških čestica. Najvažnije uprošćenje je vezano za broj nivoa koji se uzimaju u obzir. Detaljnija diskusija o CR modelu i procedurama vezanim za poslednji nivo koji se uzima u obzir može se naći u radu (van der Mullen, 1990).

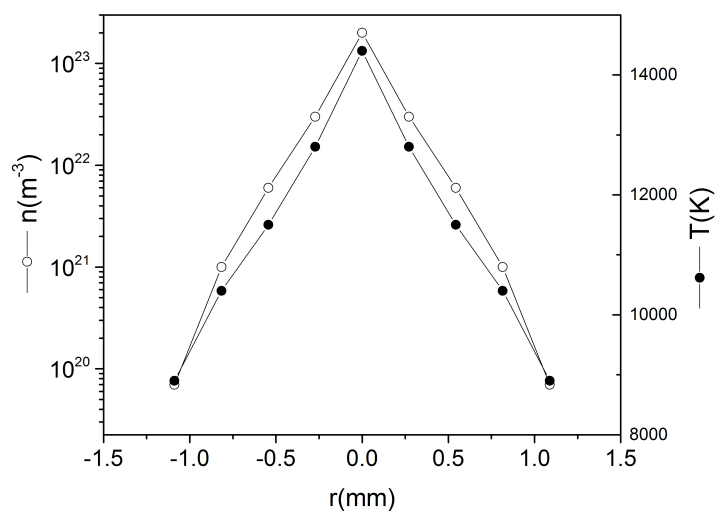
2.4 Problemi vezani za nehomogenost plazme

Obzirom na pretpostavku da je meta homogena i činjenicu da je raspodela intenziteta laserskog zračenja duž radijusa snopa gausovska (nulti mod), očekuje se da plazma proizvedena laserom ima osnu simetriju. Elektronska temperatura i koncentracija imaju maksimum u blizini ose i opadaju duž radijusa pražnjenja. Primer radijalne promene parametara kod ekspanzije plazme u vazduh na atmosferskom pritisku je dat na slici 2.2. Vidi se da elektronska temperatura i koncentracija brzo opadaju duž radijusa. Na samo 2 mm od ose pražnjenja elektronska temperatura je približno dva puta manja, a elektronska koncentracija gotovo za red veličine manja nego u centru plazme.



Slika 2.2: Radijalne raspodele elektronske temperature i koncentracije na rastojanju $z = 1.75$ mm od uzorka. Merenja su izvršena u vazduhu na atmosferskom pritisku. Slika je preuzeta iz (Aguilera & Aragón, 2007).

Kod ekspanzije plazme u "vakuum" ili nizak pritisak okolnog gasa, reda nekoliko desetina Pa, nehomogenost je daleko izraženija i koncentracija može da opadne za nekoliko redova veličine (slika 2.3). U slučaju snimanja profila linija sa strane (*eng.* "side-on") ove prostorne nehomogenosti iziskuju potrebu za radijalno razloženim merenjima. Kod integralnih side-on merenja javlja se efekat da različita jonizaciona stanja (atomi i joni) imaju različite temperature (Aguilera & Aragón, 2007). Ovo je posledica činjenice da različiti emiteri imaju različitu prostornu raspodelu i zrače dominantno iz različitih oblasti. Različita prostorna raspodela emitira se ne odnosi samo na atome mete, već je daleko izraženija kod atoma okolnog gasa. Primećeno je da linije atoma okolnog gasa (pogotovo na niskom pritisku) isključivo svetle na obodu plazme.



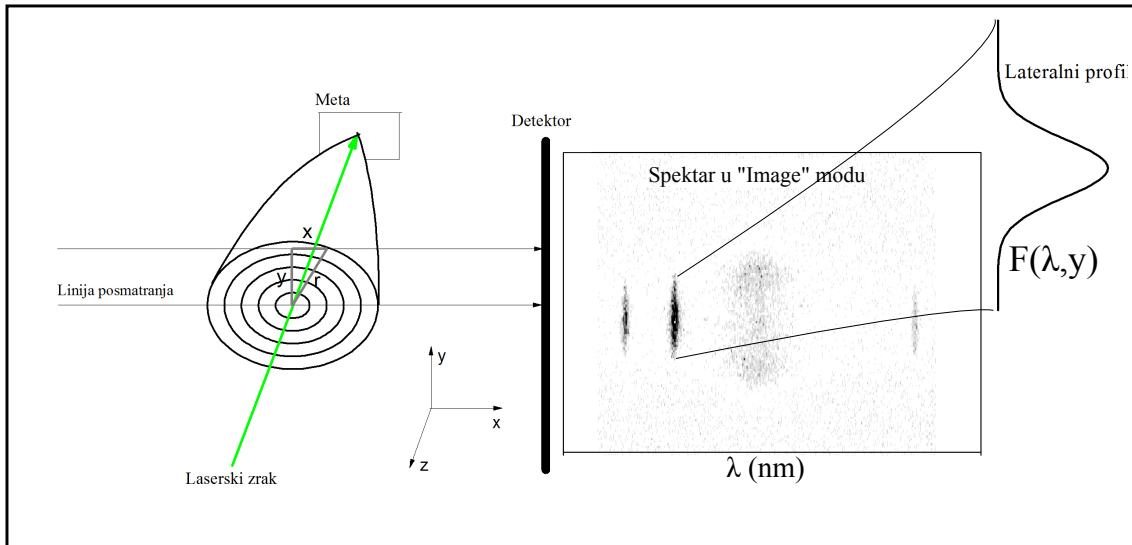
Slika 2.3: Radijalne raspodele elektronske temperature i koncentracije na rastojanju $z = 1$ mm od uzorka. Merenja su izvršena u zaostaloj atmosferi vazduha na pritisku $P \approx 20$ Pa u 170 ns posle laserskog impulsa.

Pored prostornih nehomogenosti, parametri se jako brzo menjaju u vremenu. Vremenska promena parametara veoma zavisi od vrste i radnog pritiska okolnog gasa. U zavisnosti od eksperimentalnih uslova potrebno je da vremenska rezolucija bude takva da se unutar vremenskog prozora u kome se snima parametri ne menjaju previše (za lake gasove na niskom pritisku $\Delta t \sim 10$ ns).

2.4.1 Radijalno razložena merenja - Inverzna Abelova transformacija

Kod prostorno razloženih side-on merenja intenzitet svetla koji dolazi do detektora je emitovan iz različitih regiona plazme duž linije posmatranja. U slučaju da je detektor matrični CCD, moguće je istovremeno meriti emisiju duž svih linija posmatranja na različitim visinama y . Tako snimljen profil formira sliku, odnosno spektar u takozvanom "image" modu (videti sliku 2.4). Ovakav spektar se sastoji iz lateralnih profila $F(\lambda, y)$ na svakoj talasnoj dužini λ (jednačina 2.14). Skica je prikazana na slici 2.4.

$$F(\lambda, y) = 2 \int_{r=y}^{r=\infty} \frac{\epsilon(\lambda, r) r dr}{\sqrt{r^2 - y^2}} = \int_{x=-\infty}^{x=\infty} \epsilon(\lambda, r) dx \quad (2.14)$$



Slika 2.4: Koncentrični krugovi oponašaju emisionu funkciju $\epsilon(\lambda, r)$. Svaka tačka, $F(\lambda, y)$, lateralnog profila odgovara integralnoj vrednosti emisije duž linije posmatranja na određenoj visini y . Pretpostavlja se da se detektor nalazi na velikom rastojanju od plazme, gde je vrednost emisije nula. Deliće plazme debljine dx na poziciji (x, y) doprinosi lateralnom profilu kao $dF(\lambda, y) = \epsilon(\lambda, r) dx$ ako je plazma optički tanka.

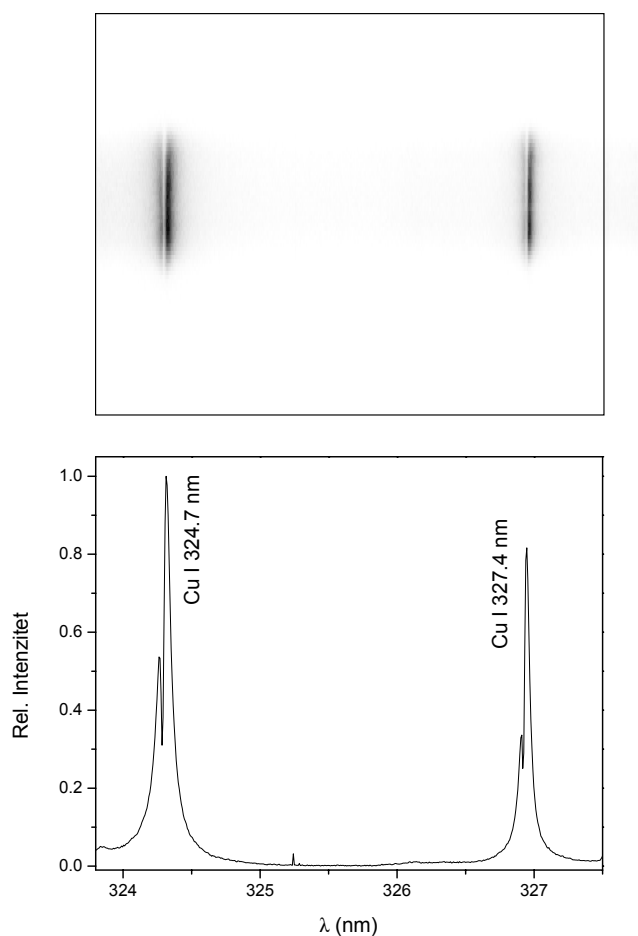
Primenom inverznog Abelovog transformata (jednačina 2.15) na izmereni lateralni profil $F(\lambda, y)$ može se izračunati emisiona funkcija $\epsilon(\lambda, r)$ plazme

$$\epsilon(\lambda, r) = -\frac{1}{\pi} \int_{r=y}^{r=\infty} \frac{dF(\lambda, y)}{dy} \frac{dy}{\sqrt{y^2 - r^2}}. \quad (2.15)$$

Na prvi pogled deluje da je jednostavno automatizovati proces i numerički rešiti jednačinu 2.15 za svako λ . Medjutim, u praksi, mora da se prevaziđe veliki broj problema da bi se dobila valjana vrednost $\epsilon(\lambda, r)$. Najveći problem koji se javlja je loš odnos signal/šum funkcije $F(\lambda, y)$. U slučaju laserski proizvedene plazme velika poteškoća nastaje zbog kratkog vremena života plazme i brze vremenske promene parametara. Granice pražnjenja je teško odrediti iz razloga što optička emisija linija na periferiji plazme postepeno opada i prilazi vrednostima koje je teško razlikovati od šuma. Iz ovog razloga nije moguća primena algoritama koji kao ulazni parametar imaju granicu plazme. Kao primer takvog algoritma navodimo (Nestor & Olsen, 1960) kod koga se uzima da je intenzitet na granici plazme jednak nuli, zatim se skida sloj po sloj krećući se od granice plazme ka središtu. Da bismo prevazišli ove probleme primenili smo nešto drugačiji algoritam koji su predložili (Ignjatović & Mihajlov, 2002), a svodi se na fitovanje lateralnog profila sumom Gausovih funkcija. Metoda je prikazana u dodatku A. U predhodnom odeljku (2.4) je napomenuto da različiti emiteri imaju različite radijalne raspodele svetljenja. Inverznim Abelovim transformom lateralnog profila se mogu dobiti upravo funkcije raspodele svetljenja $\epsilon(\lambda, r)$ za različite emitere. Treba istaći da je funkcija $\epsilon(\lambda, r)$ nezavisna od postojanja lokalne termodinamičke ravnoteže.

2.4.2 Samoapsorpcija

Samoapsorpcija je pojava apsorpcije linijskog zračenja u atomima ili jonima od kojih i potiče linijsko zračenje. Efekat samoapsorpcije je najizraženiji na centru spektralne linije, dok su krila obično slabo zahvaćena ovim efektom. Zbog izrazite nehomogenosti laserski proizvedene plazme, zračenje na svom putu, od emitera do detektora, prolazi kroz različite oblasti plazme. Samoapsorpcija je najizraženija kod rezonantnih nivoa. Ukoliko zračenje koje potiče iz toplije centralne oblasti plazme prolazi kroz hladniju okolnu oblast može doći do izrazite apsorpcije na centru spektralne linije (*eng.* "self-reversal"). Primer takvog efekta samoapsorpcije kod rezonantnih linija bakra Cu I 324.7 nm i Cu I 327.4 nm je prikazan na slici 2.5.



Slika 2.5: Primer samoapsorpcije na rezonantnim linijama bakra Cu I 324.7 nm i Cu I 327.4 nm. Gornja slika je spektar u "image" modu, dok je donji dat u integralnom FVB modu.

Najveća poteškoća kod detekcije i korekcije linija na samoapsorpciju, kod laserski proizvedene plazme, je u tome što apsorpcioni koeficijent $k(r, \lambda)$ nije konstantan duž radijusa plazme. Metoda za detekciju i korekciju spektralnih linija na efekte samoapsorpcije kod laserski proizvedene plazme je prikazana u dodatku B.

2.5 Spektroskopska dijagnostika laserski proizvedene plazme

2.5.1 Odredjivanje elektronske temperature

Odredjivanje elektronske temperature u plazmi se može izvršiti upoređivanjem relativnih intenziteta linija iz istog jonizacionog stanja, odnosno takozvanom Bolcman-plot metodom (*eng.* Boltzmann plot). Metoda se zasniva na pretpostavci da se plazma nalazi u LTE i da raspodela nivoa u atomima/jonima prati Bolcmanovu raspodelu (jednačina 2.10).

Uzimajući u obzir da se relativni intenzitet spektralne linije koja nastaje prelazom sa nivoa i na nivo j može izraziti kao $I_{ij} = hcn_i A_{ij}/\lambda_{ij}$ (h je Plankova konstanta, c brzina svetlosti, a λ_{ij} talasna dužina spektralne linije) lako se, koristeći jednačinu 2.10, dobija:

$$\frac{I_{ij}\lambda_{ij}}{A_{ij}g_i} = \frac{hcn_0}{g_0} e^{-E_i/kT_e}. \quad (2.16)$$

Kada se jednačina 2.16 linearizuje dobija se:

$$\ln \left(\frac{I_{ij}\lambda_{ij}}{A_{ij}g_i} \right) = -\frac{E_i}{kT_e} + \ln \left(\frac{hcn_0}{g_0} \right) \quad (2.17)$$

Dakle, ako raspodela nivoa u atomima prati Bolcmanovu raspodelu, zavisnost $\ln(I_{ij}\lambda_{ij}/A_{ij}g_i)$ od energije E_i će biti linearna, a iz koeficijenta pravca se može odrediti elektronska temperatura. Apsolutne vrednosti $\ln \left(\frac{I_{ij}\lambda_{ij}}{A_{ij}g_i} \right)$ i $\ln \left(\frac{hcn_0}{g_0} \right)$ su relevantne samo u slučaju ako postoji apsolutna kalibracija optičko detekcionog sistema po intenzitetu. Ako se plazma nalazi u stanju parcijalne lokalne termodinamičke ravnoteže neki nivoi neće biti u ravnoteži i na ovaj način određena ekscitaciona temperatura T_{exc} neće biti jednaka elektronskoj temperaturi T_e (Griem, 1974).

2.5.2 Saha-Bolcman plot

Saha-Bolcman plot je metoda kod koje se na osnovu intenziteta spektralnih linija koje potiču iz različitih jonizacionih stanja može odrediti elektronska temperatura (Yalcin *et al.*, 1999). Kod ove metode temperatura se određuje iz nagiba linearnog fita Saha-Bolcman plota, koji je dobijen na osnovu linija iz različitih jonizacionih stanja (na sličan način kako je dobijen Bolcman-plot iz jednog jonizacionog stanja).

Kao što je već rečeno, na osnovu intenziteta spektralnih linija koje potiču iz istog jonizacionog stanja može se odrediti elektronska temperatura plazme Bolcman-plot metodom. Posmatrajmo dva prelaza 1 i 2 iz uzastopnih jonizacionih stanja k i $k+1$. Za ova dva prelaza jednačina 2.16 se može napisati kao:

- za k -to jonizaciono stanje

$$\frac{I_1 \lambda_1}{A_1 g_1} = \frac{h c n_0^k}{g_0^k} e^{-E_1/kT_e}, \quad (2.18)$$

- odnosno za prelaz iz $k+1$ jonizacionog stanja

$$\frac{I_2 \lambda_2}{A_2 g_2} = \frac{h c n_0^{k+1}}{g_0^{k+1}} e^{-E_2/kT_e}. \quad (2.19)$$

I_1 i I_2 predstavljaju prelaze iz jonizacionih stanja k i $k+1$, λ_1 i λ_2 talasne dužine odgovarajućih prelaza, g_1 , g_2 , E_1 i E_2 statističke težine i energije gornjih nivoa. n_0^k i n_0^{k+1} su koncentracije, a g_0^k i g_0^{k+1} statističke težine osnovnog stanja datih jonizacionih stanja k i $k+1$. Očigledno je da Bolcman-plot dobijen na osnovu intenziteta spektralnih linija koje potiču iz različitih jonizacionih stanja neće biti na istoj pravoj jer odsečak na ordinati nije isti. Odsečak $\ln(hcn_0/g_0)$ zavisi od koncentracije emitera u datom jonizacionom stanju. Odnos koncentracija dva uzastopna stanja je dat jednačinom Saha (jednačina 2.20).

$$\frac{n_0^{k+1} n_e}{n_0^k} = \frac{2g_0^{k+1}}{g_0^k} \left(\frac{2\pi m_e T_e}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\chi/kT_e}, \quad (2.20)$$

gde je sa n_e označena elektronska koncentracija, sa m_e masa elektrona, a sa χ energija jonizacije. Iz jednačine 2.20 se lako može izraziti odnos n_0^{k+1}/g_0^{k+1} . Zamenom n_0^{k+1}/g_0^{k+1} u jednačinu 2.19 dobija se:

$$\frac{I_2\lambda_2}{A_2g_2} = \frac{2hcn_0^k}{g_0^k} \left(\frac{2\pi m_e T_e}{h^2} \right)^{3/2} \frac{1}{n_e} e^{-(\chi+E_2)/kT_e} \quad (2.21)$$

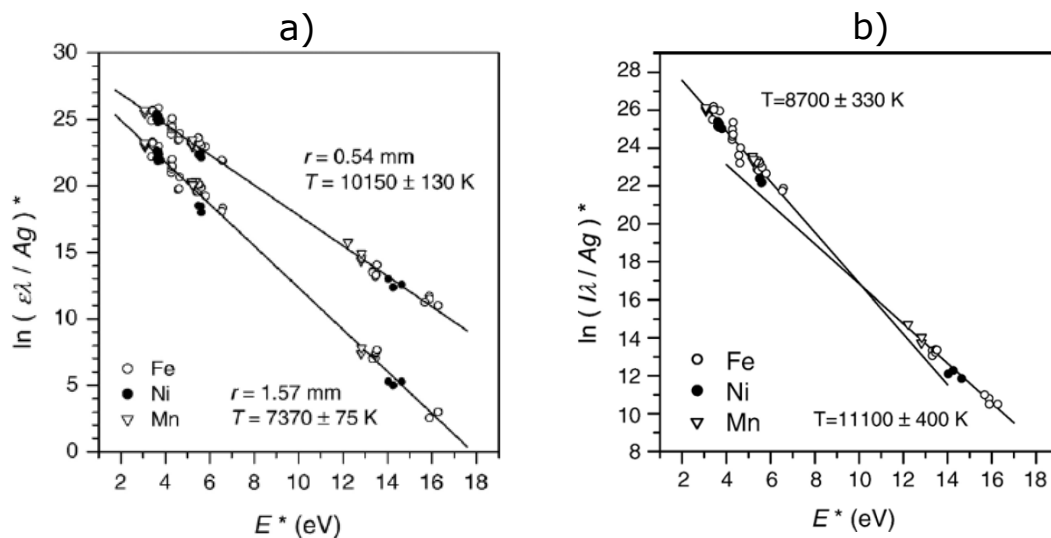
posle linearizacije i sredjivanja, dobija se:

$$\ln \left(\frac{I_2\lambda_2}{A_2g_2} \right) - \ln \left(2 \left(\frac{2\pi m_e}{h^2} \right)^{3/2} \frac{T_e^{3/2}}{n_e} \right) = -\frac{\chi + E_2}{kT_e} + \ln \left(\frac{hcn_0^k}{g_0^k} \right) \quad (2.22)$$

Ovo znači da za linije koje dolaze iz višeg jonizacionog stanja jednačina 2.17 mora da se modifikuje i da se za vrednost na ordinati umesto $\ln \left(\frac{I_{ij}\lambda_{ij}}{A_{ij}g_i} \right)$ uzima $\ln \left(\frac{I_{ij}\lambda_{ij}}{A_{ij}g_i} \right) - \ln \left(2 \left(\frac{2\pi m_e}{h^2} \right)^{3/2} \frac{T_e^{3/2}}{n_e} \right)$. Za vrednost energije gornjeg stanja E_i uzima se u obzir i energija jonizacije $E_i + \chi$.

Potrebno je istaći da određivanje elektronske koncentracije n_e iz Saha-Bolcman fita nije najoptimalniji metod jer parametri fita slabo zavise od n_e što za posledicu ima veliku grešku pri određivanju n_e .

Primer Saha-Bolcman plota je dat na slici 2.6. Sa slike 2.6 a) se vidi da tačke iz oba jonizaciona stanja, za spektralne linije koje potiču sa istog radijusa, leže na pravoj. Primetna razlika u elektronskoj temperaturi za merenja intenziteta spektralnih linija sa dva različita radijusa je dobar pokazatelj nehomogenosti plazme. Primer sa slike 2.6 b) (integralna side-on merenja) pokazuje neophodnost za radijalno razloženim merenjima. Ukoliko je merenje integralno, svo svetlo, emitovano iz različitih oblasti plazme, dolazi do detektora. Sa slike 2.6 se može zaključiti da tačke koje potiču od linija neutralnih atoma i one koje potiču od linija jona ne leže na istoj pravoj, odnosno, vidi se da joni imaju veću temperaturu on neutralnih atoma. Ovakav efekat je posledica toga što emisija jonskih linija dolazi dominantno iz centralne oblasti plazme, dok maksimum emisije neutralnih atoma dolazi iz oblasti plazme koja je udaljena od ose plazme.



Slika 2.6: Saha-Bolcman plot dobijen na osnovu intenziteta spektralnih linija više elemenata. Sa oznakama $\circ$, $\bullet$ i ∇ su označeni prelazi vezani za atome i jone Fe, Ni i Mn. Tačke sa energijama manjim od 8 eV predstavljaju prelaze u neutralnim atomima, dok tačke sa energijama većim od 11 eV predstavljaju prelaze u jonima odgovarajućih elemenata. Na slici pod a) je prikazan Saha-Bolcman plot na dve radijalne pozicije $r = 0.54$ mm i $r = 1.57$ mm. Vrednosti intenziteta spektralnih linija na datim radijalnim pozicijama su dobijeni primenom inverznog Abelovog transformata. Na slici pod b) je dat Saha-Bolcman plot dobijen analizom prostorno usrednjenih spektralnih linija. Slika je preuzeta iz (Aguilera & Aragón, 2007)

2.5.3 Širenje spektralnih linija i određivanje elektronske koncentracije

Proučavanje oblika spektralnih linija plazme je od izuzetne važnosti zato što profili linija sadrže informaciju o emiteru i plazmi u njegovoj okolini. Postoje različiti tipovi širenja spektralnih linija:

- Prirodno širenje koje nastaje kao posledica konačnog vremena života pobuđenog stanja.
- Doplerovo širenje nastaje zbog termalnog kretanja emitera i srazmerno je ko-renu temperature, tako da se može koristiti za određivanje temperature emit-
era (atoma, jona...). Doplerovo širenje je dominantno u plazmama sa niskom elektronskom koncentracijom i visokom temperaturom teških čestica.
- Van der Valsovo širenje nastaje kao posledica kratkodometne van der Valsove interakcije i primetna je samo na visokim pritiscima.
- Štarkovo širenje nastaje usled interakcije emitera sa električnim poljem okolnih

elektrona i jona i sadrži informaciju o koncentraciji prostornog naelektrisanja.

Detaljna teorija o mehanizmima širenja linija se može naći u (Griem, 1974).

Najčešće korišćena spektroskopska tehnika za određivanje koncentracije elektrona u plazmi je merenje Štarkovog širenja spektralnih linija. Štarkovo širenje primetno je na elektronskim koncentracijama iznad 10^{21} m^{-3} što odgovara tipičnim vrednostima elektronskih koncentracija laserski proizvedene plazme. Ovo se naročito odnosi na ranu fazu ekspanzije laserski proizvedene plazme kada su elektronske koncentracije veoma visoke, reda 10^{24} m^{-3} .

Kod linija vodonika (i vodoniku sličnih jona) prisutan je linearni Štarkov efekat što je glavni razlog zašto su spektralne linije vodonika najpoželjnije za dijagnostiku plazme. Kod linearnog Štarkovog efekta, veza između elektronske koncentracije i širine linije je data relacijom (2.23)(Griem, 1974):

$$n_e = C(n_e, T_e) \Delta \lambda_{FWHM}^{3/2}, \quad (2.23)$$

gde je $\lambda_{FWHM}^{3/2}$ širina profila na polovini visine, a C funkcija koja slabo zavisi od koncentracije i temperature i može se smatrati konstantom. Najčešće korišćena dijagnostička linija je β linija vodonikove Balmerove serije (H_β). H_β se najčešće koristi iz više razloga. Prvo, intenzitet linije i širina su dovoljno veliki što omogućava precizno određivanje širine linije. Drugo, greška određivanja koncentracije je oko 5%. Treće, i najvažnije, šansa da je linija samoapsorbovana je izuzetno mala. Kao što je istaknuto u dodatku B.1 efekti samoapsorpcije dovode do dodatnog širenja linije što bi se odrazilo u pogrešnom određivanju elektronske koncentracije. H_α je pogodna za dijagnostiku u slučaju kada elektronske koncentracije nisu suviše velike ($< 10^{23} \text{ m}^{-3}$), jer je linija podležna samoapsorpciji.

Kod nevodoničkih linija dominantan je kvadratičan Štarkov efekat i veza između širine linije i koncentracije je data relacijom (2.24)(Griem, 1974), (Konjević, 1999):

$$\lambda_{FWHM} \approx 2 \left(1 + 1.75 \cdot 10^{-4} n_e^{1/4} \alpha (1 - 0.068 n_e D^{1/6} T^{-1/2}) \right) \cdot 10^{-16} w n_e, \quad (2.24)$$

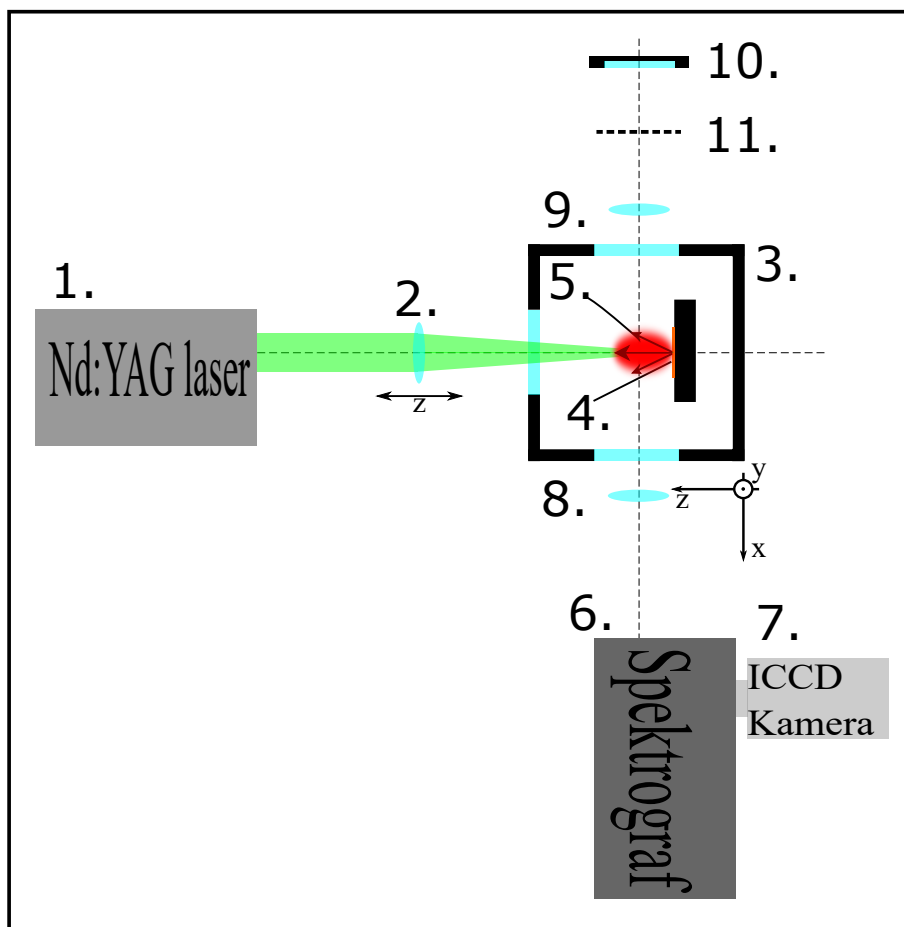
gde je w parametar širenja usled sudara sa elektronima na koncentraciji $n_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, a α parametar širenja jona (parametri w i α se mogu naći u (Griem, 1974)). Kako je drugi deo u jednačini 2.24 uglavnom dosta manji nego prvi, jednačina se može redukovati na (Griem, 1974), (Konjević, 1999):

$$\lambda_{FWHM} \approx 2 \cdot 10^{-16} w n_e \quad (2.25)$$

2.6 Postavka eksperimenta

Kao što je već rečeno, laserski proizvedena plazma se dobija fokusiranjem lasera velike snage na uzorak metala. Za osvetljavanje mete koristi se Nd:YAG laser (EK-SPLA NL 311) (1) na talasnoj dužini od 532 nm (drugi harmonik) sa impulsom trajanja 5 ns (slika 2.7). Energija laserskog impulsa kojom je osvetjavana meta je 35 mJ. Sočivo (2) se koristi za fokusiranje laserskog zraka na metu od bakra (4). Sočivo je postavljeno na mirkometerski pomerač kojim se fino može podešavati fokus laserskog zraka. Uzorak metala (bakra) postavlja se u komoru (3) u kojoj je moguće podesiti željeni pritisak radnog gasa. Posle svakog laserskog impulsa, na meti ostane mikronsko oštećenje. Da bi izbegli višestruko osvetljavanje već oštećene mete, komora je postavljena na x-y-z pomerač, koji u kombinaciji sa dva koračna motora čini potpuno automatizovan sistem koji obezbeđuje čistu metu nakon svakog pucanja. Reproducibilnost kašnjenja laserskog zračenja u odnosu na okidački signal je oko 5 ns. Zbog brze ekspanzije plazme, lokalni parametri plazme se veoma brzo menjaju. Da bi merenje bilo ograničeno na plazmu čiji se parametri ne menjaju mnogo u toku jednog snimka, potrebno je da vreme ekspozicije bude što kraće, između 10-50 ns. Da bi poboljšali odnos signal/šum i povećali reproducibilnost, merenja su usrednjena nekoliko desetina puta.

Kod proučavanja efekata koji su vezani za brzu evoluciju plazme od izuzetne važnosti je prostorno i vremenski razložiti merenja. Potreba za prostornim razlaganjem potiče od izrazite prostorne nehomogenosti parametara plazme. Sa druge strane, neki efekti laserski proizvedene plazme se mogu odrediti integralnim čeonim merenjima (npr.



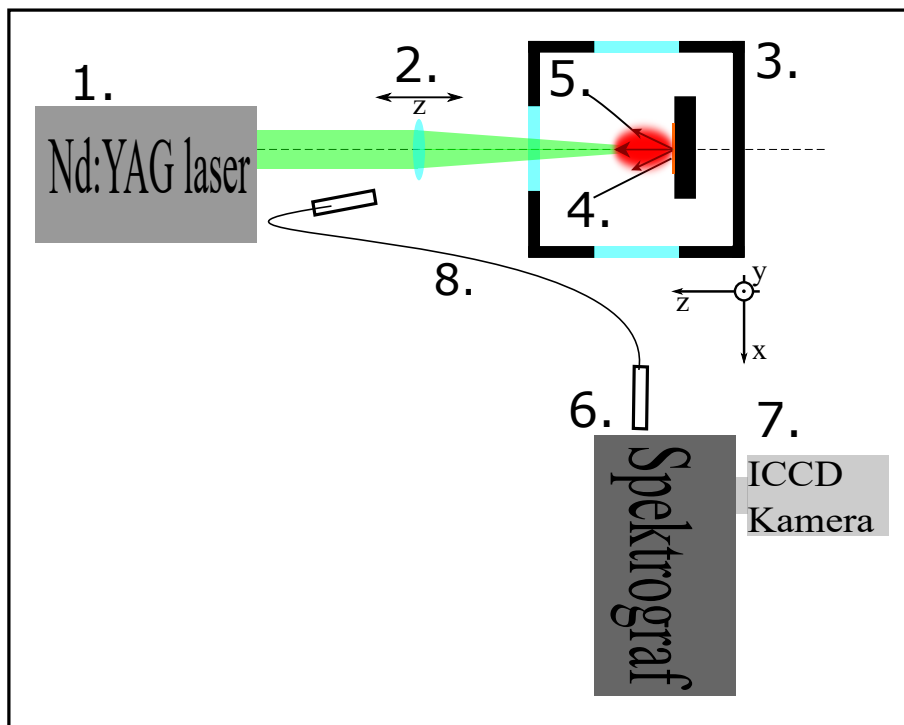
Slika 2.7: Eksperimentalna postavka za merenja sa strane. 1) Nd:YAG laser, 2) sočivo za fokusiranje laserskog snopa, 3) komora za kontrolisanje eksperimentalnih uslova, 4) meta, 5) laserski proizvedena plazma, 6) ulazni slit spektrografa, 7) ICCD kamera, 8) sočivo za fokusiranje lika na slit spektrografa, 9) sočivo za fokusiranje lika na ogledalo, 10) ogledalo, 11) prekidač.

vremenska promena srednje elektronske koncentracije i temperature plazme).

Postavka za merenja plazme sa strane (side-on) je data na slici 2.7. Sočivo (8) služi za projektovanje lika plazme (5) na ulazni slit spektrografa (6). U okviru ovog eksperimenta koristili smo spektrograf McPherson model 209 (1.33m fokalne dužine) sa difrakcionom rešetkom od 2400 zareza po milimetru (recipročne linearne disperzije 0.28 nm mm^{-1} u prvom redu). Kao detektor koristili smo Andor iStar CCD kameru (7), sa pikselom veličine $13.5 \mu\text{m}$ (2048x512 piksela). Takodje, kamera ima mogućnost podešavanja kašnjenja snimanja u odnosu na okidački signal kako bi se omogućilo snimanje plazme u različitim trenucima. Rezolucija optičko detekcionog sistema (spektrografa i kamere) je 8.7 pm na talasnoj dužini od 265 nm . Elementi (9) sočivo, (10) ogledalo i (11) prekidač se koriste za proveru efekata samoapsorpcije

(dodatak B.1). Relativna radiometrijska kalibracija optičko detekcionog sistema je uradjena korišćenjem deuterijumske lampe (StellarNet SL3-CAL) za deo spektra od 200 do 400 nm i tungsten NIST F-000 lampe za vidljivi deo spektra.

Eksperimentalna postavka za čeona merenja plazme je prikazana na slici 2.8. Ovakva postavka se razlikuje od postavke za side-on merenje samo u tome što se za prikupljanje svetla koristi optički kabl umesto sistema sočiva. Kod ovakve postavke moguće je samo vremensko razlaganje merenja. Poenta ovakve eksperimentalne postavke je u tome što se mogu snimiti srednje vrednosti intenziteta linija koje dolaze iz skoro cele zapremine plazme i može se dobiti njihova vremenska evolucija.



Slika 2.8: Eksperimentalna postavka za čeona merenja. 1) Nd:YAG laser, 2) sočivo za fokusiranje laserskog snopa, 3) komora za kontrolisanje eksperimentalnih uslova, 4) meta, 5) laserski proizvedena plazma, 6) ulazni slit spektrografa, 7) ICCD kamera, 8) optički kabl.

Poglavlje 3

Čestični model laserski proizvedene plazme

3.1 Pregled modela koji se koriste za opisivanje evolucije laserski proizvedene plazme

Kako je laserski proizvedena plazma u početnom trenutku veoma gusta, veliki broj istraživača za opisivanje ekspanzije plazme, koristi hidrodinamički pristup (Bogaerts *et al.*, 2003), (Rezaei & Tavassoli, 2012), (Shabanov & Gornushkin, 2014). Neki autori opisuju procese počevši od ablacije materijala, preko formiranja plazme do ekspanzije plazme (Bogaerts *et al.*, 2003), a neki polaze od odgovarajućih početnih uslova i odatle prate razvoj plazme. Tri najvažnije celine koje se izdvajaju u modelima posvećenim proučavanju laserski proizvedene plazme su:

- zagrevanje, topljenje i isparavanje materijala mete,
- formiranje plazme i apsorpcija laserskog zračenja u isparenom materijalu,
- evolucija isparenog materijala.

Veliki broj modela za opisivanje interakcije lasera sa metom se bazira na termalnim procesima: zagrevanju, topljenju i isparavanju mete. Oni opisuju ovakvu interakciju na makroskopskoj skali, npr. jednačinom provodjenja toplote (Bogaerts *et al.*, 2003):

$$\frac{\partial T(z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{k}{C_p \rho} \frac{\partial T(z, t)}{\partial z} \right) + \frac{\alpha}{C_p \rho} I(z, t). \quad (3.1)$$

$T(z, t)$ je temperatura materijala mete na udaljenosti z od površine mete u trenutku t . Dok su k , C_p , ρ i α su termalna provodljivost, toplotni kapacitet, gustina i apsorpcioni koeficijent materijala, respektivno. Za veliku većinu metala u velikom rasponu temperatura može se zanemariti zavisnost ovih parametara od temperature. $I(z, t)$ predstavlja intenzitet lasera u funkciji vremena i položaja u materijalu ($I(z, t) = I_0(t)e^{-\alpha z}(1 - R)$, gde je $I_0(t)$ intenzitet lasera na površini mete, a R koeficijent refleksije površine).

Pretpostavka da se interakcija laser-meta može opisati na ovaj način je opravdana za nanosekundne laserske impulse, naročito za metale (Bogaerts *et al.*, 2003). Kod metala, svetlost apsorbuju elektroni. Kada elektron apsorbuje foton, on se ekscituje na više energetske stanje. Ekscitovani elektroni interaguju sa fononima iz rešetke i prenose apsorbovanu energiju na rešetku. Kako je za metale vreme relaksacije reda 10^{-13} s, može se smatrati da se apsorbovana energija trenutno pretvara u toplotu za nanosekundne laserske impulse. Za ps i fs lasere ne može se smatrati da se energija trenutno pretvara u toplotu i potrebno je uvesti dvotemperaturni model, koji opisuje elektronsku temperaturu i temperaturu rešetke.

Poznavajući karakteristike materijala (gustinu, temperaturu topljenja i isparavanja...) i lasera kojim se indukuje plazma, na osnovu jednačine 3.1 može se proceniti pritisak i temperatura pare metala na površini mete. Ovi parametri se mogu koristiti kao ulazni parametri za dalje mehanizme za opisivanje laserski proizvedene plazme.

Kod laserski proizvedene plazme granice važenja hidrodinamičkog modela su određene odnosnom veličine gradijenta parametara i srednjim slobodnim putem teških čestica; ovaj odnos se naziva Knudsenov broj. Kada srednji slobodni put (λ) postane uporediv (ili čak veći) sa karakterističnom dužinom sistema (L), fluidni pristup nije

adekvatan i tada se mora uzeti u obzir čestična priroda plazme. Knudsenov broj (K_n) je dat jednačinom:

$$K_n = \frac{\lambda}{n/|dn/dx|}, \quad (3.2)$$

gde je n bilo koja makroskopska veličina (gustina, temperatura, pritisak ili brzina). Efekti narušavanja fluidnog modela su приметni kada je $K_n \approx 0.1$, pa čak i manji. Kako ne postoje fiksne granice, uzima se da je fluidni model validan za vrednosti $K_n < 0.01$. Sa druge strane za velike vrednosti K_n ($K_n > 10$) sistem se može posmatrati bez sudara. Za sisteme sa K_n između ove dve vrednosti uzima se da su u prelaznom režimu, gde ni kontinualna ni bezkoliziona čestična aproksimacija ne važe. U prelaznom režimu, linearni transporti mase, difuzije, brzine i termalne provodljivosti u parcijalnim diferencijalnim jednačinama ne važe kada su srednji slobodni putevi uporedivi sa L (ili veličinom gradijenta) (Bird, 2013).

U toku razvoja laserski proizvedene plazme dolazi do velike varijacije K_n (Itina *et al.*, 2002). Iz ovog razloga, evolucija plazme se može u svakom vremenskom trenutku opisati čestičnim modelom (Garrelie *et al.*, 1998)(Garrelie & Catherinot, 1999). Čestični modeli su izuzetno neefikasni u samom početku evolucije zbog velikog broja čestica. Iz tog razloga neki autori koriste kombinaciju hidrodinamičkog i čestičnog pristupa (Itina *et al.*, 2002).

3.2 Čestična (Monte Karlo) simulacija evolucije plazme

U okviru čestičnog modela teške čestice (atomi i joni) i elektroni se posmatraju na drugačiji način. Svaka teška čestica je predstavljena svojom masom, pozicijom i vektorom brzine u datom trenutku. Kretanje i elastični sudari teških čestica se prate detaljno, dok je kretanje elektrona u potpunosti zanemareno. Slobodni elektroni su predstavljeni samo koncentracijom i temperaturom. Koncentracije teških čestica su povezane sa elektronskom koncentracijom i temperaturom putem jednačine Saha, pretpostavljajući LTE. Na ovaj način svi neelastični sudari su za-

menjeni sa jednačinom Saha. Elastični sudari teških čestica sa elektronima su zasebno uključeni u simulaciju.

Dakle, ekspanzija plazme je dominantno određena kinematikom teških čestica koja je slabo osetljiva na detalje vezane sa stanje plazme, npr. da li je plazma u LTE ili nije. Na ovaj način neke važne karakteristike, kao što je karakteristično vreme ekspanzije, ne zavise od unutrašnjeg stanja plazme, dok su parametri plazme (elektronska temperatura, elektronska koncentracija, stepen jonizacije, populacija eksitovanih stanja) procenjeni pretpostavljajući da je plazma u LTE.

Pod pretpostavkom da je meta homogena i da je raspodela intenziteta laserskog zraka duž radijusa Gausijan (nulti mod), može se očekivati da laserski proizvedena plazma ima aksijalnu simetriju. Dakle, kretanje teških čestica i odgovarajuće interakcije se mogu razmatrati u okviru 2D aksijalno simetričnog modela. Glavna prednost simulacije bazirane na ovakvom modelu je što zahteva daleko manje kompjuterskih resursa i daleko kraće vreme izvršenja programa. Zbog velike varijacije Knudsenovog broja u toku ekspanzije, odlučili smo se za čestični pristup pri opisivanju ekspanzije plazme. Za opisivanje kinematike koristili smo metodu direktne Monte Karlo simulacije (DSMC) (*eng.* "Direct Simulation Monte Carlo") (Bird, 2013), (Bird, 1994).

3.3 Metoda direktne Monte Karlo simulacije

Osnovna ideja DSMC metode je da se kretanje čestica simulira u veoma kratkim vremenskim intervalima (Δt). Za tako definisano Δt samo čestice koje su jako blizu, odnosno čestice koje se nalaze unutar neke male zapremine V , mogu da se sudare (interaguju). Da bi znali koje čestice mogu međusobno da interaguju, potrebno je da prostor bude podeljen u mrežu ćelija. Uobičajno je da se uzima takav vremenski korak da je linearna dimenzija ove zapremine definisana srednjim slobodnim putem teških čestica (λ). Kod laserski proizvedene plazme, gradijenti su veliki i potrebno je primeniti drugačiji (strožiji) uslov za određivanje ove zapremine V . Uslov za

odredjivanje zapremine V je definisan tako da promene koncentracije i temperature budu mali.

3.3.1 Kretanje čestica

Kretanje i -te čestice u opštem slučaju se opisuje Njutnovom jednačinom kretanja:

$$m_i \frac{d^2 \vec{v}_i}{dt^2} = \vec{F}_{ei} + \sum_j \vec{F}_{ij}, i = 1, \dots, N. \quad (3.3)$$

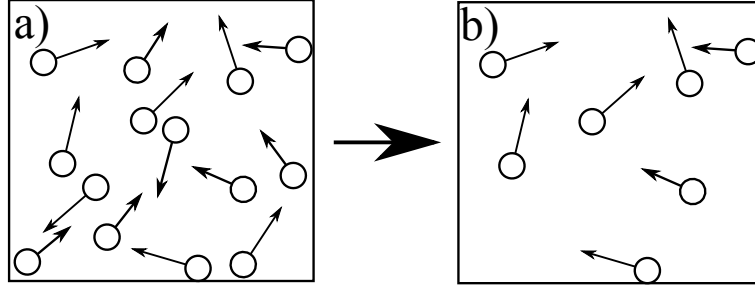
$\sum_j F_{ij}$ predstavlja silu kojom okolne čestice deluju na i -tu česticu, F_{ei} spoljašnju silu koja deluje na i -tu česticu, m_i masu čestice i , a v_i brzinu. Kod DSMC metode medjučestična interakcija se zanemaruje i izvršava se stohastički nakon pomeranja čestica. Kod laserski proizvedene plazme, nakon laserskog impulsa, nema spoljašnjih sila, tako da je jednačina kretanja 3.3 znatno pojednostavljena:

$$m_i \frac{d^2 \vec{v}_i}{dt^2} = 0, i = 1, \dots, N. \quad (3.4)$$

Ovo znači da se čestice kreću slobodno, a da se sudari uključuju u simulaciju nakon pomeranja čestica. Čestica se sa trenutne pozicije $\vec{r}_i(t)$ na novu poziciju pomera tako što se izračuna $\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t)\Delta t$. Nakon toga, odgovarajuća procedura za interakciju sa okolnim česticama se primenjuje.

3.3.2 Kompjuterske čestice, otežinjene čestice

Očigledno je da u simulacijama ne može da se opisuje kretanje svake čestice, već jedna čestica u simulaciji predstavlja veliki broj realnih čestica. Čestice u simulaciji nazivaju se kompjuterske čestice i svaka kompjuterska čestica predstavlja w čestica pravog gasa, te se w naziva težina kompjuterske čestice, slika 3.1. Postoji nekoliko načina se sa realnih čestica predje na kompjuterske. Raniji DSMC algoritmi su povećavali prečnik i masu da bi se održao srednji slobodni put i gustina. Noviji



Slika 3.1: Prelaz sa realnog broja čestica panel a) na kompjuterske čestice panel b) sa otežinjenjem $w = 2$.

algoritmi uzimaju da je frekvencija sudara povećana za w , a kod usrednjavanja se uzima da jedna kompjuterska čestica predstavlja w realnih čestica (Bird, 2013). Frekvencija sudara je definisana kao:

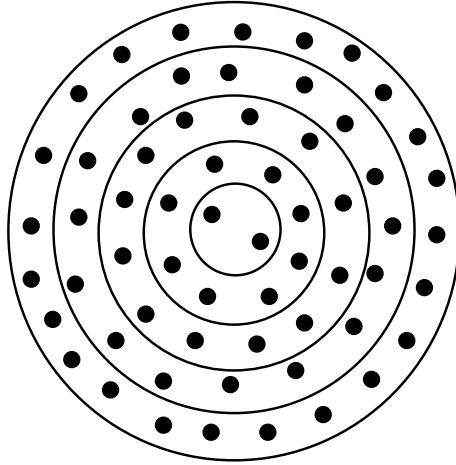
$$\nu = n\sigma\langle v_r \rangle, \quad (3.5)$$

gde je n koncentracija čestica, σ efektivni presek za sudar, a $\langle v_r \rangle$ srednja relativna brzina.

Posmatrajmo dve grupe čestica, prvu sa koncentracijom n_1 i efektivnim presekom σ_1 i drugu sa koncentracijom n_2 i efektivnim presekom σ_2 . Ako je $n_1\sigma_1 = n_2\sigma_2$, onda je frekvencija sudara ista u oba slučaja. Ako su i drugi uslovi jednaki ($\langle v_{r1} \rangle = \langle v_{r2} \rangle$), onda su ova dva slučaja ekvivalentna. Da bi sistem kompjuterskih čestica bio uporediv sa pravim česticama, presek za sudare kompjuterskih čestica mora biti $\sigma_{sim} = w\sigma$.

Radijalno otežinjenje

Najveći problem kod aksijalno simetričnih čestičnih modela je mali broj čestica u ćelijama bliskim osi pri homogenoj raspodeli čestica. Sa slike 3.2 se vidi da ćelija najbliža osi sadrži 2 čestice, dok najudaljenija ćelija sadrži 23 čestice. U realnim simulacijama broj čestica je reda 10^7 i odnos broja čestica u perifernim ćelijama u odnosu na broj čestica u ćelijama blizu ose je daleko veći. Ovaj problem se rešava uvođenjem radijalnog otežinjenja čestica, tako da čestice koje su dalje od ose predstavljaju veći broj čestica nego one bliže osi. Ovaj metod služi da izjednači



Slika 3.2: 2D aksijalno simetrična mreža ćelija. Čestice (crne tačke) su homogeno rasporedjene u ćelije oblika prstena.

broj čestica po ćelijama.

Kako se čestice kreću moraju i da menjaju radijalno otežinjenje. Posledica promenljivog radijalnog otežinjenja je da se uvodi verovatnoća da se čestice u toku kretanja brišu ili dupliraju u svakom koraku u zavisnosti da li se približavaju ili udaljavaju od ose.

Radijalno otežinjenje može da se uvede ili po položaju ćelije u kojoj su čestice ili po položaju čestica. Prvi slučaj dovodi do greške kada se čestice kreću duž ose i prelaze u ćeliju sa drugačijim otežinjenjem, te je teško održati "glatke" gradijente duž ose. Drugi slučaj zahteva kompleksan i neefikasan kod za procesiranje sudara zbog toga što čestice u ćeliji imaju različito otežinjenje. Međutim, pokazano je da je razlika zanemarljiva ako uzmemo srednje vrednosti otežinjenja u ćeliji, tako da srednja vrednost otežinjenja ulazi u račun broja sudara (NTC šema) (Bird, 1994). Da bi se izbeglo deljenje sa nulom, uvodi se neki referentni radijus (r_{ref}) ispod koga čestice imaju isto otežinjenje (npr. uzimamo da je to jedinica). Radijalno otežinjenje w_{r_i} čestice i je $w_{r_i} = r_i/r_{ref}$. Da bi se očuvao zakon o održanju mase, čestice koje se udaljavaju od ose, odnosno čestice kojima se povećava radijalno otežinjenje, brišu se sa odgovarajućom verovatnoćom. Sa druge strane, čestice koje se kreću ka osi dupliraju se sa određenom verovatnoćom. Iz zakona održanja mase jednostavno je odrediti kolike su verovatnoće za brisanje, odnosno za dupliranje čestice. Brisanje čestica je jednostavan zadatak, samo je potrebno izbaciti čestice iz neke liste koja prati indekse čestica. Međutim, kopiranje čestica može da bude problematičan

zadatak. Ukoliko posle dupliranja čestice odmah ubacimo njenu kopiju na isto mesto može se javiti slučaj da upravo te dve čestice interaguju. Ovakav slučaj dovodi do deljenja sa nulom iz razloga što je rastojanje između čestica $\Delta r = 0$. Ovaj problem se prevazilazi tako što se kopije čestica ubacuju sa nekim "zakašnjenjem" (Bird, 1994). Ukoliko kopija čestice bude ubačena posle npr. 10 vremenskih koraka čestice neće imati ni isti položaj ni istu brzinu, a ni isto radijalno otežinjene.

3.3.3 Metode za pravljenje mreže ćelija i indeksiranje čestica

Kod DSMC metode mogu da se sudare (interaguju) samo čestice koje se nalaze unutar srednjeg slobodnog puta. Ovakav koncept iziskuje potrebu za indeksiranjem čestica koje se nalaze unutar srednjeg slobodnog puta. Drugim rečima, prostor mora da bude podeljen u mrežu ćelija. Veličina ćelije je određena vrednošću lokalnog srednjeg slobodnog puta, ili nekim njegovim delom. Uobičajno, uzima se da je polovina srednjeg slobodnog puta dovoljno dobra aproksimacija da bi se održala razumna brzina simulacije i preciznost. Strožiji uslov je da veličina ćelije bude određena tako da promene koncentracije i temperature budu zanemarivi. Mreža treba da prati lokalne promene gustine. Pored toga, mreža treba da bude vremenski efikasna, odnosno da (kompjutersko) vreme koje se troši na održavanje mreže bude malo u odnosu na vreme potrebno za ostale programske korake. Takve mreže nije jednostavno implementirati za proizvoljne gradijente i koncentracije čestica.

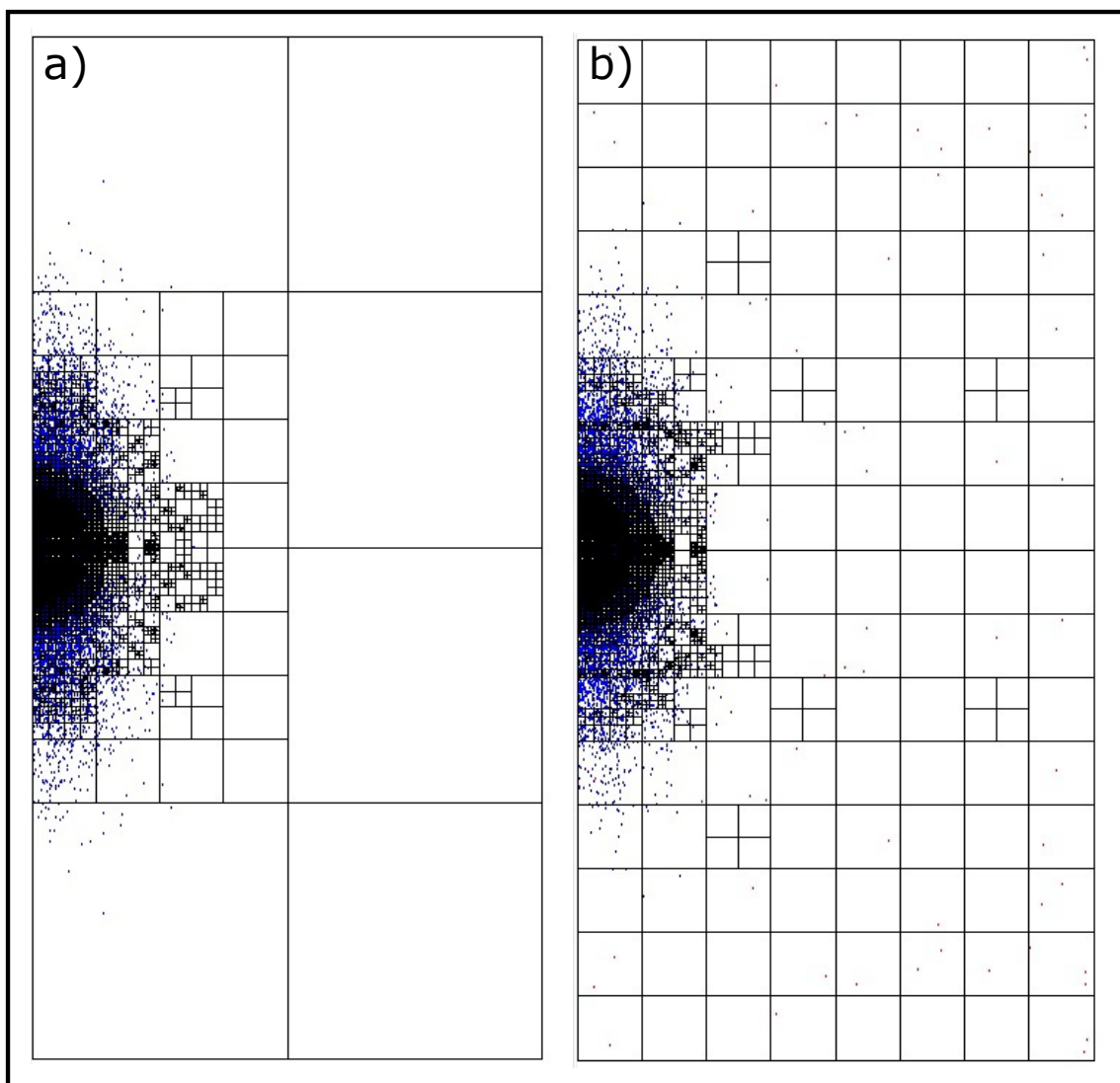
Ukoliko u simulaciji postoje vremenske promene gustine, temperature ili nekih drugih parametara mrežu je potrebno adaptirati tako da odgovara novoj situaciji. Tehnike za adaptaciju mreža se dele na: ponovno kreiranje mreže (*eng.* re-meshing), pomeranje mreže i profinjavanje mreže (Wu *et al.*). Ponovno kreiranje mreže se sastoji od pravljenja mreže i kako se čestice pomeraju mreža se iznova kreira koristeći nove vrednosti lokalnih parametara. Nova mreža može da ima više ili manje ćelija u zavisnosti od nove situacije. Ideja za drugu tehniku je da mreža "prati" kretanje čestica. Kod ove tehnike broj ćelija ostaje konstantan i samo se ćelije pomeraju tako da isprate tok kretanja. Kod treće tehnike, ćelije se dodaju ili brišu na već postojećoj

mreži. Ova metoda je generalno bolja od prve dve metode u smislu povećanja brzine simulacije (Wu *et al.*).

U okviru ove teze koristili smo rekursivni algoritam koji može da konstruiše mrežu za proizvoljne gradijente koncentracije i koji koristi tehniku za profinjenje mreže da bi pravilno ispratio gradijente koncentracije i temperature. Primeri ovakih mreža za sistem čestica nastalih laserskom ablacijom su dati na slici 3.3.

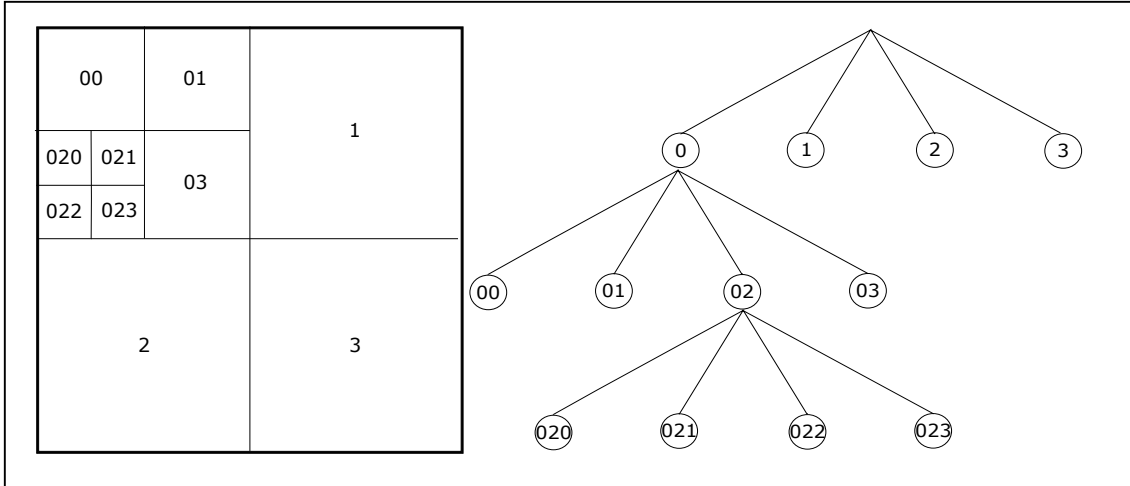
Svaka ćelija mreže mora da sadrži informacije o zapremini, koncentraciji, česticama koje se nalaze u njoj, kao i druge bitne informacije. Dobar način za indeksiranje čestica u nestrukturiranim mrežama je da se koristi metoda stabla. U slučaju jednodimenzionalnih mreža koristi se binarno stablo, kod dvodimenzionalnih kvadratno stablo, itd. Kako je pretpostavka da je laserski proizvedena plazma aksijalno simetrična, mreža koja je implementirana je dvodimenzionalna i ovde ćemo se ograničiti na takvu mrežu koja koristi kvadratno stablo za indeksiranje čestica.

Veoma pojednostavljeni primer kako se vrši indeksiranje u kvadratnom stablu je prikazan na slici 3.4. Mreža sa slike 3.4 je napravljena na sledeći način: za svaku ćeliju se proverava da li je zadovoljen odgovarajući kriterijum za pravljenje ćelije, ukoliko nije, prostor se deli na četiri dela. U ovom slučaju prostor je prvobitno podeljen na četiri jednaka dela sa indeksima "0", "1", "2" i "3". Ćelije sa indeksima "1", "2" i "3" zadovoljavaju kriterijum i rekursivni algoritam tu staje i kreira ćeliju. Ćelija sa indeksom "0" se dodatno deli istim postupkom sve do trećeg nivoa (ćelije sa indeksima "020", "021", "022" i "023"). Profinjavanje mreže se jednostavno može uraditi primenjujući isti rekursivni algoritam na ćeliju koju je potrebno dodatno podeliti. Degradacija mreže je takodje jednostavan zadatak i potrebno je samo spojiti četiri ćelije koje su na nižem nivou u jednu ćeliju na višem nivou prenoseći sve podatke iz četiri manje ćelije u tu veću ćeliju. Primera radi, ukoliko bi hteli da "ogrubimo" ćeliju sa indeksom "0" sa slike 3.4 potrebno je da izbrišemo četiri ćelije sa indeksima "020", "021", "022" i "023" i sve podatke prenesemo u ćeliju sa indeksom "02". Ovakav postupak je vremenski izuzetno efikasan iz razloga što "čvor" "02" već sadrži pokazivače na ćelije "020", "021", "022" i "023", odnosno



Slika 3.3: Primer rekurzivne mreže. Na slici pod a) je dat izgled rekurzivne mreže u slučaju kada se čestice šire kroz vakuum, a na slici pod b) u slučaju kada se čestice šire kroz gas na niskom pritisku. Plave tačke predstavljaju čestice nastale laserskom ablacijom. Na slici pod b) prisutne su i čestice okolnog gasa (crne tačke). Treba napomenuti da su koncentracije koje su korišćene za pravljenje ove slike znatno niže nego koncentracije u realnoj ablaciji.

ne moramo da pretražujemo strukturu svaki put kada hoćemo da ogrubimo mrežu na nekom delu prostora. Vremenski najzahtevniji zadatak je praćenje čestica koje prelaze u druge ćelije. Kada čestica napusti ćeliju potrebno je pratiti je do nove ćelije. Najjednostavniji način je svaki put kada čestica napusti ćeliju iznova pretraživati celo stablo.



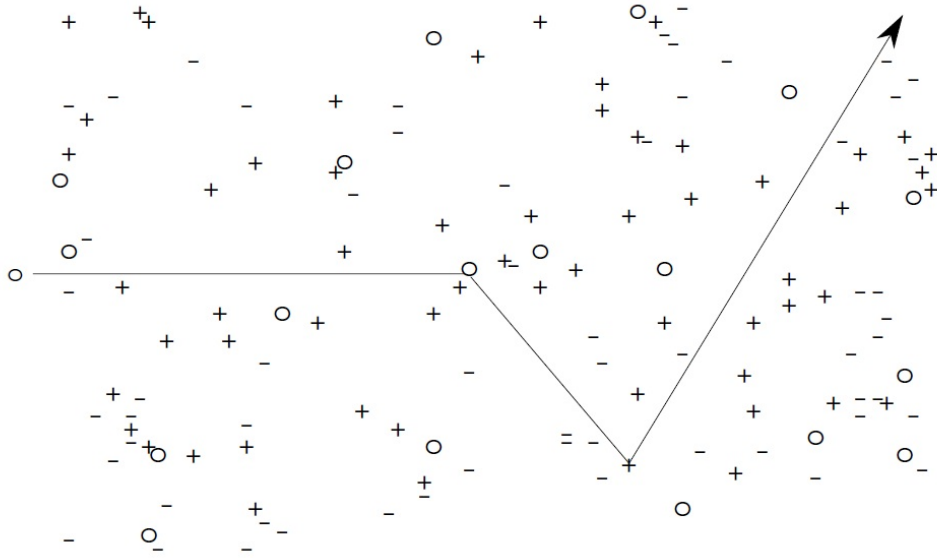
Slika 3.4: Primer strukture stabla na jednostavnoj mreži. Na levoj strani slike je data mreža ćelija, a na desnoj odgovarajuća struktura stabla koja služi za indeksiranje ovih ćelija.

3.4 Interakcija između čestica

Plazma se sastoji od elektrona, jona i neutralnih atoma. Interakcija između neutralnih atoma se suštinski razlikuje od interakcije između naelektrisanih čestica. Posmatrajmo kretanje neutralne čestice kroz delimično jonizovan gas (slika 3.5). Neutralna čestica se između binarnih sudara sa drugim neutralnim česticama kreće pravolinijski. Sudar će se dogoditi kada se čestice dovoljno približe jedna drugoj, na rastojanje reda radijusa atoma. Uobičajno, ishod ovakvog sudara je izotropno elastično rasejanje neutralnih čestica. Srednje rastojanje koje čestica predje između dva sudara naziva se srednji slobodni put čestica.

Medjutim, naelektrisana čestica koja se kreće kroz naelektrisan gas istovremeno "oseća" slabo Kulonovo polje svih čestica koje se nalaze na udaljenosti manjoj od Debajevog radijusa (λ_D). Ukupna Kulonova sila koja deluje na česticu se ogleda u skretanju čestice dok se kreće kroz jonizovan gas. Najbliže čestice najviše utiču na ugao skretanja čestice koju pratimo (slika 3.6). Kako je Kulonov potencijal u jonizovanom gasu ekraniran na rastojanjima većim od Debajevog radijusa, samo čestice koje su na rastojanjima manjim od λ_D utiču na kretanje čestice koju posmatramo.

Zbog velike razlike u brzini između elektrona i jona, smatraćemo da su joni nepomični (Lorencov model). Lorencov model je najjednostavniji način posmatranja Kulonovih



Slika 3.5: Putanja neutralne čestice u delimično jonizavonom gasu. Sa znakom "o" su obeležene neutralne čestice, sa "+" pozitivno naelektrisani joni, a sa "-" elektroni. Slika je preuzeta iz (Callen, 2006).

sudara (Callen, 2006). Posmatramo elektron sa brzinom $\vec{v}$ koji se kreće kroz delimično jonizovan gas. Takodje, smatra se da je razlika u brzini nakon bilo kog Kulonovog sudara $\Delta\vec{v}$ mala u odnosu na $\vec{v}$. Sila ($\vec{F}$) električnog polja ($\vec{E}$) koje "vidi" ovaj elektron na poziciji $\vec{r}$ u odnosu na jon je:

$$\vec{F} = -e\vec{E} = -\frac{z_i e^2 \vec{r}}{4\pi\epsilon_0 r^3}, \quad (3.6)$$

gde je $z_i e$ naelektrisanje jona, e elementarno naelektrisanje.

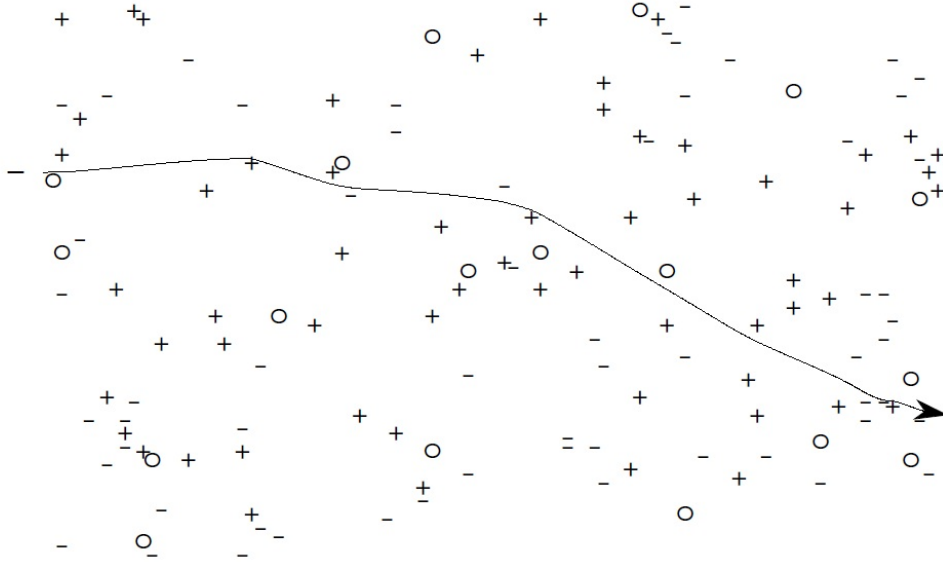
Jedan Kulonov sudar uzrokuje promenu impulsa:

$$m_e \Delta\vec{v} = - \int_{-\infty}^{\infty} e\vec{E} dt = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{z_i e^2 \vec{r}}{4\pi\epsilon_0 r^3} dt \quad (3.7)$$

Odavde se može izraziti promena brzine elektrona duž pravca (z) kretanja kao:

$$\Delta v_z = -\frac{2z_i^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 m_e^2 b^2 v^3}, \quad (3.8)$$

gde je b parametar sudara. Pod pretpostavkom da je sudar sa svakim jonom slučajan možemo sabrati efekte svih pojedinačnih Kulonovih sudara nezavisno. Za koncen-



Slika 3.6: Putanja naelektrisane čestice u delimilno jonizovanom gasu. Čestica se kontinualno rasejava pod malim uglom. Pri prolasku blizu druge naelektrisane čestice dolazi do rasejanja pod velikim uglom. Koliziorna dužina naelektrisanih čestica u plazmi je definisana kao srednje rastojanje koje čestica predje dok se ne raseje pod uglom $\geq 90^\circ$. Slika je preuzeta iz (Callen, 2006).

traciju jona n_i srednja sila u pravcu kretanja čestice je:

$$\langle F_z \rangle = -\frac{4\pi n_i z_i^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 m_e v^3} \int_{b_{min}}^{b_{max}} db/b \quad (3.9)$$

Očigledno je da je maksimalan parametar sudara ograničen Debajevim radijusom, tj. $b_{max} = \lambda_D$. b_{min} se može proceniti kao rastojanje na kome je ugao rasejanja 90° . Tako procenjeni minimalni parametar sudara je $b_{min} = z_i/(12\pi n_e \lambda_D)$. Za veće uglove, kvantnomehanički efekti postaju važni i tada je b određeno de Brojjevom talasnom dužinom (Callen, 2006). U tom slučaju $b_{min} = h/(4\pi m_e v_{Te})$, gde je h Plankova konstanta, a v_{Te} termalna brzina elektrona. Integral $\int_{b_{min}}^{b_{max}} db/b$ se naziva Kulonov logaritam ($\ln\Lambda$) i predstavlja kumulativni efekat svih Kulonovih sudara unutar Debajevog radijusa.

Frekvencija sudara se može odrediti ukoliko posmatramo ukupnu silu koja deluje na elektron:

$$m_e \frac{dv_z}{dt} = -\left(\frac{4\pi n_i z_i^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 m_e^2 v^3} \ln\Lambda \right) m_e v_z = -\nu m_e v_z, \quad (3.10)$$

gde ν predstavlja frekvenciju Kulonovih sudara u Lorencovom modelu i iznosi:

$$\nu = \frac{4\pi n_i z_i^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 m_e^2 v^3} \ln\Lambda \quad (3.11)$$

Efekat sudara pod velikim uglom rasejanja se može proceniti uzimajući da je presek za takav sudar $\sigma_h = \pi b_{min}^2$. Frekvencija ovakvih sudara je $\nu_h = 2\pi n_i v b_{min}^2$. Frekvencija ν_h je manja od frekvencije sudara pod malim uglom rasejanja za faktor $1/2\ln\Lambda \ll 1$. Dakle, sudari pod malim uglom rasejanja se češće dešavaju i imaju daleko važniju ulogu u opisivanju Kulonovih sudara u plazmi (Callen, 2006).

U slučaju kada se ne može zanemariti kretanje okolnih čestica i kada je prenos energija sa elektrona na jone izuzetno važan proces frekvencija *elektron - jon* sudara je data:

$$\nu_{ei} = \frac{4\sqrt{2\pi}}{3} \frac{n_i \ln\Lambda}{\sqrt{m_e} (kT_e)^{3/2}} \left(\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \quad (3.12)$$

Detaljno razmatranje Kulonovih sudara u slučaju kada se ne može zanemariti kretanje teških čestica dato je u (Spitzer, 1967).

3.4.1 Interakcija izmedju neutralnih čestica

Da bi uračunali efekat sudara, kao što je već rečeno, zapremina je podeljena na mrežu ćelija u kojima su rasporedjene čestice. Broj sudara u datom vremenskom intervalu u datoj ćeliji je dat jednačinom

$$M_{coll} = \Delta t R(N, V, d, \langle v_r \rangle, \dots), \quad (3.13)$$

gde je Δt vremenski korak, N broj čestica u ćeliji, V zapremina ćelije, d prečnik čestice, a $\langle v_r \rangle$ srednja relativna brzina čestica. Frekvencija sudara R zavisi od odabranog modela za sudare i za model krutih sfera R iznosi:

$$R(N, V, d, \langle v_r \rangle) = (N(N-1)\pi d^2 \langle v_r \rangle) / 2V \quad (3.14)$$

Jednačinu 3.14 je jednostavno implementirati, ali problem nastaje u broju operacija koje su potrebne da bi se izračunala srednja relativna brzina čestica. Za izračunavanje $\langle v_r \rangle$ (u jednoj ćeliji) potreban broj operacija je reda N^2 . Najčešće se koristi NTC (Bird, 2013) metod pri izboru sudarnih parova. Suština metode je da ne računamo srednju relativnu brzinu svih sudarnih parova u ćeliji, već se uzima maksimalna brzina za datu ćeliju. Potrebno je da se ova maksimalna brzina pamti za svaku ćeliju i da se modifikuje ukoliko se pojavi slučajno izabrani sudarni par sa većom brzinom. Prvo se računa maksimalan broj sudara kao: $M_{coll} = \Delta t R(N, V, d, \langle v_{max} \rangle, \dots)$ (gde je $\langle v_{max} \rangle \geq \langle v_r \rangle$), da bi se zatim neki odbacili. Sudari se prihvataju sa verovatnoćom:

$$P(v_i, v_j) \leq \frac{R(N, V, d, |v_i - v_j|)}{R(N, V, d, v_{max})}, \quad (3.15)$$

dok se ostali odbacuju. Ovakav pristup dramatično smanjuje vreme izvršenja ovog dela simulacije tako što se broj operacija smanjuje sa N^2 na reda $N/2$. $N/2$ je maksimalan broj sudara jer je vremenski korak izabran tako da bude manji od srednjeg vremena preleta čestica.

Brzine čestica posle sudara moraju da zadovoljavaju zakone održanja. Takodje, smatraćemo da je rasejanje nakon sudara izotropno. Posmatrajmo dve čestice sa brzinama $\vec{v}_1$ i $\vec{v}_2$, sa masama m_1 i m_2 . Iz zakona održanja se jednostavno mogu izračunati brzine čestica posle sudara 3.16.

$$\begin{aligned} \vec{u}_1 &= \vec{v}_{cm} + m_2 / (m_1 + m_2) v_r \vec{n} \\ \vec{u}_2 &= \vec{v}_{cm} - m_1 / (m_1 + m_2) v_r \vec{n} \end{aligned} \quad (3.16)$$

$\vec{v}_{cm}$ je brzina centra mase čestica, a v_r je intenzitet relativne brzine čestica. Vektor $\vec{n}$ definiše ugao rasejanja, i njegove komponente u Dekartovom koordinatnom sistemu su date kao:

$$\begin{aligned} n_x &= \sin\theta \cos\varphi \\ n_y &= \sin\theta \sin\varphi \\ n_z &= \cos\theta \end{aligned} \quad (3.17)$$

Odgovarajući uglovi rasejanja u sfernim koordinatama θ i φ su slučajno odabrani

tako da je rasejanje izotropno. Ugao $\varphi = 2\pi R_1$, $\cos\theta = 2R_2 - 1$, a $\sin\theta = \sqrt{1 - (2R_2 - 1)^2}$, gde su R_1 i R_2 slučajno izabrani brojevi izmedju 0 i 1.

Sudari čestica u slučaju različitog otežinjenja čestica

Već je napomenuto da kompjuterske čestice predstavljaju veći broj realnih čestica, odnosno kaže se da imaju neko otežinjenje w . U nekim slučajevima, radi smanjenja kompjuterskih resursa i smanjenja vremena izvršenja simulacije, neke vrste čestica mogu da se prate sa manje detalja u odnosu na ostale. U slučaju laserski proizvedene plazme čestice okolnog gasa mogu da imaju veće otežinjenje od čestica materijala nastalog procesom laserske ablacije. Odnosno, jedna kompjuterska čestica okolnog gasa predstavlja veći broj realnih čestica nego što je slučaj kod čestica materijala mete. Kada različite vrste čestice imaju različita otežinjenja moraju se uvesti neke izmene u standardnom algoritmu za sudare. Najčešće korišćene metode su nekonzervativna metoda koju je predložio G. A. Bird (Bird, 1994) i konzervativna metoda za sudare čestica koju je predložio i I. D. Boyd (Boyd, 1996).

- Nekonzervativna šema otežinjenja čestica

Kod ovakvog pristupa, česticama vrste i je dodeljeno otežinjenje w_i , a česticama vrste j otežinjenje w_j . Takodje, obično se uzima da sve čestice jedne vrste imaju isto otežinjenje. Ovakav pristup zahteva promenu u standardnom NTC algoritmu. Broj sudara u ćeliji postaje:

$$M_{ij} = \Delta t(w_i N_i N_j \pi d^2 \langle v_r \rangle) / 2V = c w_i N_i N_j \quad (3.18)$$

Ako je $w_i > w_j$, to znači da u datoj ćeliji treba čestice vrste i dodatno da podelimo da bi imale otežinjenje w_j . Kada iz broja kompjuterskih čestica (N_c) vrste i izračunamo broj realnih čestica (N_r), pa potom primenimo isti algoritam za kreiranje kompjuterskih čestica drugačijeg otežinjenja, dobijamo $N_r = w_i N_i$, a $N_c = N_r / w_j$, odnosno $N_c = w_i N_i / w_j$. Kada to ubacimo u jednačinu 3.18 i kada uzmemo da je sada otežinjenje w_j (pošto je sve normirano

na ovo otežinjenje) dobijamo

$$M_{ij} = cw_j N_c N_j = cw_j w_i N_i / w_j N_i = cw_i N_i N_j. \quad (3.19)$$

Ako je $w_i < w_j$, sada treba čestice vrste j dodatno podeliti. Istim postupkom dobijamo

$$\begin{aligned} N_r &= w_j N_j, \\ N_c &= w_j N_j / w_i. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Kada to ubacimo u jednačinu za broj sudara, sa otežinjenjem w_i (pošto je sve normirano na ovo otežinjenje) dobijamo

$$M_{ij} = cw_i N_i N_c = cw_i N_i w_j N_j / w_i = cw_j N_i N_j \quad (3.21)$$

Kako se sve normira na manje otežinjenje, čestice sa manjim otežinjenjem se svaki put sudaraju, a čestice sa većim otežinjenjem se sudaraju sa verovatnoćom $P = w_j / w_i$. To znači da se u sudaru ne moraju menjati brzine obe čestice po jednačinama 3.16, već se menjaju sa verovatnoćom P . Posledica ovakve šeme je da se energija i moment ne održavaju tačno u svakom sudaru.

- Konzervativna šema otežinjenja čestica

Uzmimo da ukupna x komponenta impulsa dve čestice sa različitim otežinjenjima pre sudara iznosi

$$p_x = w_1 m_1 v_1 + w_2 m_2 v_2 = w_1 (m_1 v_1 + \phi m_2 v_2), \quad (3.22)$$

gde je $\phi = w_2 / w_1$, $w_1 > w_2$. Prvi korak je podela prve čestice (sa većim w) na čestice sa otežinjenjem w_2 i $(w_1 - w_2)$. Izraz za x komponentu impulsa postaje,

$$p_x = w_1 ((1 - \phi) m_1 v_1 + \phi (m_1 v_1 + m_2 v_2)) \quad (3.23)$$

Dalje, sprovodi se sudar izmedju dve čestice sa istim otežinjenjem na stan-

dardni način. Posle sudara izraz za x komponentu impulsa postaje,

$$p_x = w_1((1 - \phi)m_1v_1 + \phi(m_1u_1 + m_2u_2)) \quad (3.24)$$

Finalni korak je spajanje dve čestice koje su podeljene u prvom koraku, tako da je

$$p_x = w_1m_1u'_1 + w_2m_2u_2 \quad (3.25)$$

gde je

$$u'_1 = (1 - \phi)m_1v_1 + \phi m_1u_1 \quad (3.26)$$

Kada se ovakva šema primeni u sva tri pravca održava se impuls, ali ne održava se energija. Ukupna energija pre sudara je

$$E = \frac{w_1m_1}{2}(v_{1x}^2 + v_{1y}^2 + v_{1z}^2) + \frac{w_2m_2}{2}(v_{2x}^2 + v_{2y}^2 + v_{2z}^2) \quad (3.27)$$

Nakon podele, sudara i spajanja, energija je

$$E' = \frac{w_1m_1}{2}(u_{1x}'^2 + u_{1y}'^2 + u_{1z}'^2) + \frac{w_2m_2}{2}(u_{2x}^2 + u_{2y}^2 + u_{2z}^2) \quad (3.28)$$

tj.,

$$E - E' = \frac{w_1m_1}{2}\phi(1 - \phi)((v_{1x}^2 - u_{1x}'^2) + (v_{1y}^2 - u_{1y}'^2) + (v_{1z}^2 - u_{1z}'^2)) \quad (3.29)$$

U šemi sa održavanjem impulsa energija se konstantno gubi zato što je $\Delta E > 0$. Ovaj problem se prevazilazi tako što se ova razlika u energiji dodaje sistemu u sledećem sudaru. Najbolje je energiju dodavati česticama koje imaju maksimalno otežinjenje. Moguće je napisati i šemu koja održava energiju, ali na taj način impuls ne bi bio održan i morao bi naknadno da se dodaje.

3.4.2 Interakcija između naelektrisanih čestica

- Interakcija između teških naelektrisanih čestica

Interakcija izmedju teških naelektrisanih čestica se izračunava po metodi koju je predložio Nanbu (Nanbu, 1997), (Nanbu & Yonemura, 1998). Spicer (Spitzer, 1967) je istakao da se Kulonovi sudari u plazmi mogu posmatrati kao sukcesivni binarni sudari. Da bi prevazišao problem vezan za mali ugao rasejanja pojedinačnih Kulonovih sudara i mali vremenski korak neophodan da se uspešno isprate svi detalji vezani za Kulonovo rasejanje, Nanbu je predložio statistički pristup sličan Monte Karlo simulaciji, kod koga se određeni broj sudara pod malim uglom rasejanja može zameniti sa jednim sudarom sa velikim (kumulativnim) uglom rasejanja. U odnosu na vreme izvršenja simulacije ovaj metod ima velike prednosti u odnosu na model koji su predložili Takizuka i Abe (Takizuka & Abe, 1977) koji uzima u obzir svaki sudar pojedinačno.

Ovde će ukratko biti prikazana metoda koju je predložio Nanbu, detaljno izvođenje se može naći u (Nanbu, 1997). Neka je $\vec{v}_{r0}$ prvobitna relativna brzina čestica i i j ($\vec{v}_{r0} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$), $\vec{v}_{r1}$ prva, $\vec{v}_{r2}$ druga, ..., i $\vec{v}_{rN}$ N -ta brzina posle sudara, $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N$ uglovi rasejanja, a $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_N$ kumulativni uglovi rasejanja posle svakog sudara.

Relativna brzina $\vec{v}_{r1}$ posle prvog rasejanja pod uglom θ_1 postaje $\vec{v}'_{r1}$. Kako razmatramo elastični sudar $v_{r1} = v'_{r1}$. Nakon prvog rasejanja, može se očekivati da neće ponovo interagovati iste čestice. Relativna brzina novog para čestica koje interaguju je v_{r2} , a pošto se ne sudaraju iste čestice $v_{r2} \neq v'_{r1}$. Posle drugog sudara i rasejanja pod uglom θ_2 , brzina $\vec{v}_{r2}$ postaje $\vec{v}'_{r2}$. Isto kao pre $v_{r2} = v'_{r2}$, ali $v_{r2} \neq v_{r1}$. Ovakva procedura može da se nastavi do N -tog sudara, ali kako nas ne zanima promena v'_{r1} u v_{r2} već kumulativni efekat na ugao rasejanja možemo smatrati da je $v_{r1} = v_{rN}$ (kao da interaguju iste dve čestice). I ukoliko se zanemari ova promena intenziteta relativne brzine, imamo:

$$\langle \sin^2 \frac{\chi_N}{2} \rangle = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^N \langle \theta_k^2 \rangle. \quad (3.30)$$

Kako je svaki ugao rasejanja, $\theta_1, \theta_2, \dots$, slučajan i pokorava se istom zakonu

verovatnoće, $\langle \theta_1^2 \rangle = \langle \theta_2^2 \rangle = \dots = \langle \theta_k^2 \rangle$, jednačina 3.30 se može napisati kao:

$$\langle \sin^2 \frac{\chi_N}{2} \rangle = \frac{1}{4} \langle \theta_1^2 \rangle N. \quad (3.31)$$

U daljem razmatranju $\frac{1}{2} \langle \theta_1^2 \rangle N$ će biti zamenjeno sa oznakom s . Član sa desne strane jednačine 3.31 se može aproksimativno izraziti funkcijom $\frac{1}{2}(1 - e^s)$. Odavde se dobija funkcija gustine verovatnoće kumulativnog ugla rasejanja:

$$F(\chi_N) = 2\pi \sin \chi_N \frac{A}{4\pi \sinh A} e^{A \cos \chi_N}, \quad (3.32)$$

gde je A konstanta i može se izračunati iz:

$$\coth A - A^{-1} = e^{-s}. \quad (3.33)$$

Kumulativni ugao rasejanja se može izračunati iz $F(\chi_N)$,

$$\cos(\chi_N) = A^{-1} \ln(e^{-A} + 2R \sinh A), \quad (3.34)$$

gde je R slučajni broj izmedju 0 i 1. Parametar s (znajući da se ugao rasejanja θ_k može odrediti iz $\text{tg} \frac{\theta_k}{2} = |q_i q_j| / (4\pi \epsilon_0 \mu_{ij} v^2 b)$) se može izračunati iz:

$$s = \frac{\ln \Lambda}{4\pi} \left(\frac{q_i q_j}{\epsilon_0 \mu_{ij}} \right)^2 n_j v^{-3} \Delta t, \quad (3.35)$$

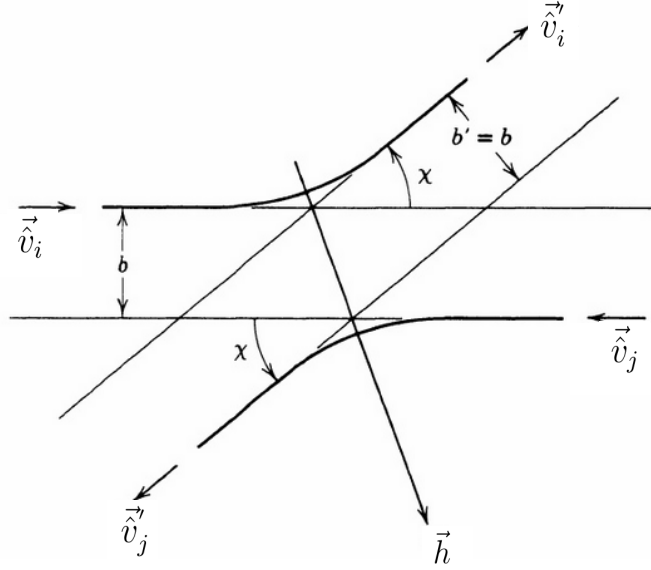
gde su q_i i q_j naelektrisanja čestica koje se sudaraju, $\mu_{ij} = m_i m_j / (m_i + m_j)$, a Δt vremenski korak u simulaciji. Kada odredimo s (pa iz jednačine 3.33 odredimo A) rešavanjem jednačine 3.34 možemo odrediti kumulativni ugao rasejanja, a samim tim i brzine čestica posle sudara.

Posmatrajmo sudar dve čestice sa brzinama pre sudara v_i i v_j (slika 3.7).

Brzine čestica u sistemu centra mase su ($\vec{v}_i$ i $\vec{v}_j$):

$$\begin{aligned} \vec{v}_i &= \vec{v}_i - \vec{v} = \frac{m_j}{m_i + m_j} \vec{v}_r, \\ \vec{v}_j &= \vec{v}_j - \vec{v} = -\frac{m_i}{m_i + m_j} \vec{v}_r. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Sa $\vec{v}$ je označena brzina centra mase, a sa m_i i m_j mase čestica. Razlika brzina



Slika 3.7: Sudar dve čestice u sistemu centra mase. Brzine čestica (u sistemu centra mase) pre sudara su označene sa $\vec{v}_i$ i $\vec{v}_j$, a posle sudara sa $\vec{v}_i'$ i $\vec{v}_j'$. Sa b i b' je označen parametar sudara pre i posle sudara. Jedinični vektor $\vec{h}$ se nalazi na liniji simetrije putanja čestica. χ predstavlja kumulativni ugao rasejanja $\chi_N = \chi$ (u daljim izvodjenjima index N je izostavljen). Slika je preuzeta od (Vincenti & Kruger, 1965).

pre i posle sudara mogu se napisati u funkciji vektora $\vec{h}$ (Vincenti & Kruger, 1965):

$$\begin{aligned} \vec{v}_i' - \vec{v}_i &= \vec{v}_i' - \vec{v}_i = -2(\vec{v}_i \vec{h}) \vec{h} = -\frac{2m_j}{m_i + m_j} (\vec{v}_r \vec{h}) \vec{h}, \\ \vec{v}_j' - \vec{v}_j &= \vec{v}_j' - \vec{v}_j = -2(\vec{v}_j \vec{h}) \vec{h} = \frac{2m_i}{m_i + m_j} (\vec{v}_r \vec{h}) \vec{h} \end{aligned} \quad (3.37)$$

Vektor $\vec{h}$ se može razložiti na dva vektora, prvi $\vec{h}_{\parallel}$ koji je paralelan sa $\vec{v}_r$ i drugi $\vec{h}_{\perp}$ normalan na $\vec{v}_r$. Skalarni proizvod $\vec{v}_r \vec{h}$ se može napisati kao:

$$\vec{v}_r \vec{h} = \vec{v}_r \vec{h}_{\parallel} = v_r \sin \frac{\chi}{2}. \quad (3.38)$$

Dakle, paralelna komponenta vektora $\vec{h}$ iznosi:

$$\vec{h}_{\parallel} = \frac{\vec{v}_r}{v_r} \sin \frac{\chi}{2}, \quad (3.39)$$

a $(\vec{v}_r \vec{h}) \vec{h}$ iznosi:

$$(\vec{v}_r \vec{h}) \vec{h} = \vec{v}_r \sin \frac{\chi}{2} \left(\frac{\vec{v}_r}{v_r} \sin \frac{\chi}{2} + \vec{h}_{\perp} \right). \quad (3.40)$$

Koristeći jednačine 3.37 i 3.40 dobijaju se izrazi za brzine čestica posle sudara:

$$\begin{aligned}\vec{v}'_i &= \vec{v}_i - \frac{m_j}{m_j + m_i} \left(\vec{v}_r(1 - \cos\chi) + 2v_r\vec{h}_\perp\sin\frac{\chi}{2} \right), \\ \vec{v}'_j &= \vec{v}_j + \frac{m_i}{m_j + m_i} \left(\vec{v}_r(1 - \cos\chi) + 2v_r\vec{h}_\perp\sin\frac{\chi}{2} \right).\end{aligned}\quad (3.41)$$

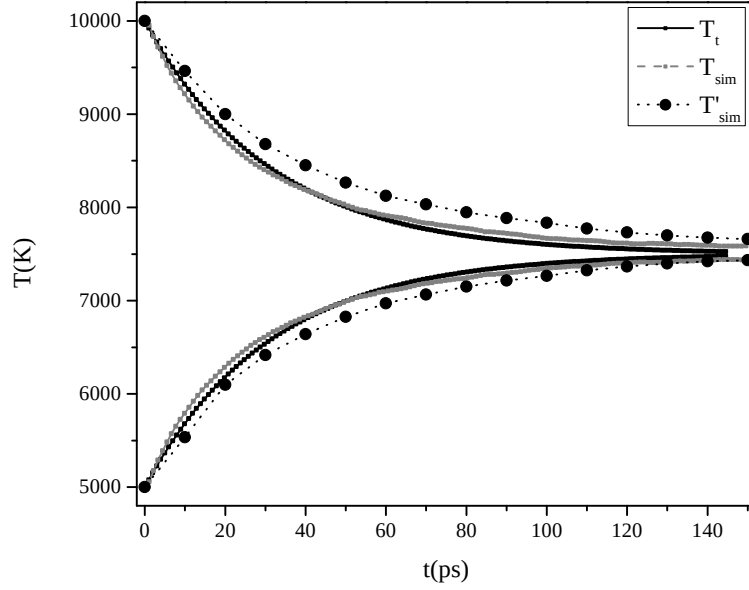
Komponente vektora $\vec{h}_\perp$ u Dekartovom koordinatnom sistemu date kao (Jeans, 1921):

$$\begin{aligned}h_x &= \cos\frac{\chi}{2}(1 - v_{rx}^2/v_r^2)^{1/2}\cos\varepsilon, \\ h_y &= \cos\frac{\chi}{2}(v_{ry}v_{rx}\cos\varepsilon + v_rv_{rz}\sin\varepsilon)/(1 - v_{rx}^2/v_r^2)^{1/2}, \\ h_z &= \cos\frac{\chi}{2}(v_{rz}v_{rx}\cos\varepsilon - v_rv_{ry}\sin\varepsilon)/(1 - v_{rx}^2/v_r^2)^{1/2},\end{aligned}\quad (3.42)$$

gde je ε slučajno izabran ugao ($\varepsilon = 2\pi R$).

Očigledno je da parametar s (jednačina 3.35), pored osnovnih parametara plazme, zavisi i od izbora vremenskog koraka Δt . Ukoliko uzmemo Δt dovoljno veliko, tako da je $s > 6$, rasejanje je skoro izotropno i može se smatrati da se sistem relaksira posle samo jednog sudara. Efekat različite vrednosti Δt je najlakše pokazati na primeru relaksacije temperature u plazmi. Posmatrajmo sistem koja se sastoji od dve grupe čestica na različitim temperaturama ($T_1 \neq T_2$), slika 3.8. Zbog jednostavnosti uzećemo da su mase čestica ove dve vrste iste ($m_1 = m_2 = m$). U početnom trenutku čestice obe vrste imaju brzine zadate iz Maksvelove raspodele na temperaturama T_1 , odnosno T_2 . Vremenski korak za prvu simulaciju je daleko manji od vremena relaksacije $\Delta t_1 \ll \tau$ i daje vrednost parametra $s \approx 0.07$. Vremenski korak kod druge simulacije je približno jednak vremenu relaksacije $\Delta t_2 \approx \tau$ i daje vrednost parametra $s \approx 6$. Sa slike 3.8 se vidi da krive koje opisuju relaksaciju temperatura iz simulacija T_{sim} i T'_{sim} približno prate teorijski predviđenu krivu T_t bez obzira na veliku razliku u parametru s , odnosno na veliku razliku u broju kumulativnih sudara. Ukoliko bi dalje povećavali Δt do relaksacije bi došlo nakon samo jednog vremenskog koraka i može se zaključiti da vremenski korak može da se bira proizvoljno (Nanbu, 1997).

Treba napomenuti da bez obzira što čestice različite vrste (na primer čestice



Slika 3.8: Simulacija relaksacije temperature za dve grupe čestica na različitim početnim temperaturama ($T_1 = 5000$, $T_2 = 10000$). Čestice mase $m_i = amu$ se nalaze u zatvorenom cilindru na koncentraciji $n_i \approx 1 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$ i u simulaciji su predstavljene sa $2 \cdot 10^5$ kompjuterskih čestica. Sa punom linijom (T_t) je obeleženo analitičko rešenje jednačine relaksacije $\Delta T = T_2 - T_1 = \Delta T_0 e^{-\frac{8}{5\sqrt{2}\pi} \frac{t}{\tau}}$ (Nanbu, 1997)(Spitzer, 1967). ΔT_0 je razlika u temperaturi u početnom trenutku i iznosi 5000 K. τ je vreme relaksacije za *jon-jon* sudare ($\tau = \frac{(4\pi\epsilon_0)^2}{n_i z^2 e^4} \frac{m_i^2 (3kT/m_i)^{3/2}}{8\pi \ln \Lambda}$ (Callen, 2006)) i iznosi $\approx 2 \cdot 10^{-11}$ s. Znajući da je $T_1 + T_2 = 2T = 15000$ K, gde je T temperatura sistema nakon relaksacije, lako se mogu dobiti donja kriva T_1 i gornja kriva T_2 . Sa isprekidanom linijom (T_{sim}) je obeležen rezultat simulacije za vremenski korak $\Delta t_1 = 10^{-13}$ s, a sa tačkama (T'_{sim}) rezultat simulacije za $\Delta t_2 = 10^{-11}$ s.

okolnog gasa i čestice mete) u modelu za opisivanje laserski proizvedene plazme mogu imati različito otežinjene (odjeljak 3.3.2) može se iskoristiti Nanbuov metod za sudare naelektrisanih čestica sa malom izmenom (Nanbu & Yone-mura, 1998).

• Interakcija između teških čestica i elektrona

Iako su detalji vezani za kretanje elektrona izostavljeni, elastični sudari elektrona sa teškim česticama i odgovarajući transfer energije su izuzetno važni procesi. Transfer energije u *elektron-atom* i *elektron-jon* sudaru je izračunat na osnovu jednačina (3.43-3.44) (Itina *et al.*, 2002).

$$\Delta E_{ea} = \frac{2m_e}{m_a} \frac{3k}{2} (T_e - T_a) n_e \nu_{ea} V \Delta t \quad (3.43)$$

$$\Delta E_{ei} = \frac{2m_e}{m_i} \frac{3k}{2} (T_e - T_i) n_e \nu_{ei} V \Delta t \quad (3.44)$$

gde je n_e koncentracija elektrona, V zapremina ćelije, k Bolcmanova konstanta. m_e , m_a , m_i i T_e , T_a , T_i su masa i temperatura elektrona, atoma i jona, respektivno. Frekvencije elastičnih sudara ν_{ea} (*Elektron-atom*) i ν_{ei} (*elektron-jon*) su izračunate na osnovu jednačina (3.45) i (3.46).

$$\nu_{ea} = \frac{1}{2} \langle v_r \rangle \sigma_{ea} n_a \quad (3.45)$$

$$\nu_{ei} = \frac{4\sqrt{2\pi}}{3} \frac{n_i \ln \Lambda}{\sqrt{m_e} (kT_e)^{3/2}} \left(\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \quad (3.46)$$

gde je $\langle v_r \rangle$ srednja relativna brzina, σ_{ea} efektivni presek za elektron-atom sudar, n_a i n_i koncentracije atoma i jona, $\ln \Lambda$ Kulonov logaritam, e elementarno naelektrisanje, ϵ_0 permeabilnost vakuma, a z naelektrisanje jona.

3.4.3 Odredjivanje stepena jonizacije, elektronske temperature i koncentracije

Pretpostavljajući postojanje lokalne termodinamičke ravnoteže, temperatura i koncentracija elektrona u plazmi može se izračunati iz jednačine Saha (van der Mullen, 1990). Zbog jednostavnosti, u razmatranje su uključena samo prva tri jonizaciona stanja: osnovno stanje, jednom i dva puta jonizovani atomi. Parametri plazme se mogu dobiti rešavanjem sistema jednačina 3.47-3.51.

$$\frac{n_e n_{i1}}{n_0} = \frac{2g_{i1}}{g_0} \left(\frac{2\pi m_e k T_e}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\chi_1/kT_e} \quad (3.47)$$

$$\frac{n_e n_{i2}}{n_{i1}} = \frac{2g_{i2}}{g_{i1}} \left(\frac{2\pi m_e k T_e}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\chi_2/kT_e} \quad (3.48)$$

$$n_0 + n_{i1} + n_{i2} = n_{tot} \quad (3.49)$$

$$n_{i1} + 2n_{i2} = n_e \quad (3.50)$$

$$\varepsilon = \frac{3}{2}n_e k T_e + \chi_1 n_{i1} + (\chi_1 + \chi_2) n_{i2} \quad (3.51)$$

Gde su g_0 , g_{i1} i g_{i2} statističke težine osnovnog stanja neutralnih, jednom i dvaput jonizovanih atoma, respektivno. n_0 , n_{i1} , n_{i2} su koncentracije neutralnih, jednom i dvaput jonizovanih atoma. k je Bolcmanova konstanta, h je Plankova konstanta, a m_e je masa elektrona. χ_1 i χ_2 predstavljaju jonizacione energije jednom i dva puta jonizovanih atoma. Jednačine (3.47) i (3.48) predstavljaju Saha ravnotežu izmedju dva uzastopna jonizaciona stanja, jednačine (3.49) i (3.50) potiču od zakona održanja mase i naelektrisanja, dok jednačina (3.51) predstavlja gustinu energije. n_{tot} je gustina svih teških čestica, ε je gustina energija dostupna za proces jonizacije. Pretpostavljajući da su n_{tot} i ε poznate veličine, moguće je odrediti T_e , n_e , n_0 , n_{i1} , n_{i2} . Ukoliko je prisutan okolni gas, sistem jednačina (3.47-3.51) je potrebno proširiti sa dve dodatne jednačine; jednu za Saha ravnotežu izmedju dva uzastopna jonizaciona stanja i jednu za održanje mase atoma okolnog gasa. Takodje, potrebno je i modifikovati jednačinu vezanu za održanje naelektrisanja tako da uključuje i jone okolnog gasa. U simulaciji ovaj sistem se rešava numerički za svaku ćeliju u svakom vremenskom koraku.

3.5 Zračenje plazme

Ne uzimajući samoapsorpciju u obzir, ukupna količina izračene energije iz plazme se može podeliti na gubitak energije u vidu kontinualnog i linijskog zračenja. Linijsko zračenje se može uključiti u model ako poznajemo populacije gornjih nivoa i odgovarajuće verovatnoće prelaza. Po LTE modelu količina izračene energije u vidu

kontinualnog spektra je daleko veća nego energija emitovana u formi linijskog spektra. Iz tog razloga, u simulaciji, zračenje linijskog spektra je zanemareno. Totalni gubitak energije po jedinici zapremine i jedinici vremena na svim talasnim dužinama zbog zakóčnog zračenja može se izraziti kao (Rezaei & Tavassoli, 2012):

$$p_{tot} = \frac{\sum_i n_i z_i^2 n_e e^6}{24\pi^2 \epsilon_0^3 c^3 m_e \hbar} \sqrt{\frac{kT_e}{m_e}} \quad (3.52)$$

gde je sa n_i označena koncentracija različitih jonizacionih stanja, n_e koncentracija elektrona, m_e masa elektrona. c je brzina svetlosti, k Bolcmanova konstanta, e elementarno naelektrisanje, $\hbar$ je Plankova konstanta podeljena sa 2π , ϵ_0 je permeabilnost vakuumu, z_i je naelektrisanje atoma, a T_e je elektronska temperatura.

3.6 Veličine dobijene iz modela, mikroskopske i makroskopske veličine, poredjenje sa eksperimentom

Eksperimentalno izmerene radijalne raspodele intenziteta linija (radijalni profil linije) ($I_{ij}^e(t, z, r)$) je moguće uporediti sa radijalnim raspodelama linija dobijenim iz simulacije ($I_{ij}^s(t, z, r)$). Pretpostavljajući LTE, intenzitet linije je dat jednačinom:

$$I_{ij}(t, z, r) = hc \frac{A_{ij} g_i}{\lambda_{ij} g_0} n_0(t, z, r) e^{-E_i/kT_e(t, z, r)}, \quad (3.53)$$

gde je h Plankova konstanta, c brzina svetlosti, A_{ij} verovatnoća prelaza sa stanja i na stanje j , E_i energija stanja i u odnosu na osnovno stanje, k Bolcmanova konstanta, a T_e elektronska temperatura. g_i i g_0 predstavljaju statističke težine nivoa i i osnovnog stanja, respektivno. $n_0(t, z, r)$ je koncentracija emitera, i za razliku od elektronske temperature nije direktni rezultat simulacije već je potrebno dodatno usrednjavanje mikroskopskih veličina.

Razvijeni čestični Monte Karlo model prati mikroskopske veličine, odnosno pozicije

i brzine svih teških čestica. Da bi dobili makroskopske veličine (koncentracija, prostorna raspodela emitera, temperatura, usmerena komponenta brzine) potrebno je usrednjavati mikroskopske veličine u prostornim ćelijama određene zapremine V i u određenim vremenskim intervalima τ . Kako su elektroni u simulaciji predstavljeni na drugačiji način, podrazumevajući elektroneutralnost, elektronska koncentracija i temperatura su direktni rezultat simulacije i nije potrebno dodatno usrednjavanje. Potrebno je istaći da ćelije za uzorkovanje mikroskopskih veličina ne moraju biti iste kao ćelije za računanje sudara. U simulaciji za uzorkovanje mikroskopskih veličina korišćena je homogena mreža ćelija. Vremenski interval za usrednjavanje je odabran tako da se poklapa sa realnim vremenom za usrednjavanje u eksperimentu (~ 10 ns).

Prostornu raspodelu emitera vrste s dobijamo sabiranjem svih kompjuterskih čestica koje se nalaze u ćeliji za uzorkovanje, uzimajući u obzir njihove radijalne težine $w_{ki}^s(r)$:

$$n^s(t, z, r) = \frac{1}{\tau} \sum_i^{N_t} \Delta t_i \left(\frac{1}{V} \sum_k^{N_p} w_{ki}^s(r) \right). \quad (3.54)$$

Oznaka N_p predstavlja ukupan broj kompjuterskih čestica koje se nalaze u ćeliji zapremine V , a $w_{ki}^s(r)$ predstavlja ukupan broj realnih čestica koji je predstavljen jednom kompjuterskom česticom u datom trenutku. Vremenski korak Δt nije konstantan, već zavisi od trenutnih vrednosti u simulaciji. N_t predstavlja ukupan broj vremenskih koraka takav da je $\sum_i^{N_t} \Delta t_i = \tau$.

Treba napomenuti da eksperimentalni izmereni radijalni profil linije ne zavisi od toga da li se plazma nalazi u lokalnoj termodinamičkoj ravnoteži. Međutim, intenzitet linije izračunat na osnovu jednačine 4.2 se oslanja na postojanje Bolcmanove ravnoteže i kao takav zavisi od toga da li se plazma nalazi u LTE. U okviru simulacije, ukoliko nije ispunjen uslov za LTE, da bi izračunali koncentraciju atoma na gornjem (pobudjenom) stanju primenjujemo jednostavan koliziono-radijativni model (CR model) (van der Mullen, 1990).

Brzina ekspanzije plazme zavisi od usmerene brzine kretanja čestica. Usmerenu komponentu brzine dobijamo sabiranjem svih vektora brzina kompjuterskih čestica u zapremini V , jednačina 3.55.

$$\vec{v}^s(t, z, r) = \frac{1}{\tau} \sum_i^{N_t} \Delta t_i \left(\sum_k^{N_p} \vec{v}_{ki}^s \right). \quad (3.55)$$

Hladjenje elektrona u *elektron-jon*, *elektron-atom* sudarima veoma zavisi od temperature teških čestica. Uzimajući da je energija haotičnog kretanja $\frac{3}{2}kT$ može se napisati da je

$$T^s(t, z, r) = \overline{m}^s(t, z, r) \frac{1}{3k\tau} \sum_i^{N_t} \Delta t_i \left(\sum_k^{N_p} (\vec{v}_{ki}^s)^2 \right). \quad (3.56)$$

Ukoliko postoji usmereno kretanje čestica 3.56 nije primenljiva. Usmerenu komponentu je potrebno ukloniti iz jednačine 3.56.

$$T^s(t, z, r) = \overline{m}^s(t, z, r) \frac{1}{3k\tau} \sum_i^{N_t} \Delta t_i \left(\sum_k^{N_p} (\vec{v}_{ki}^s)^2 - \frac{1}{N_p} \left(\sum_k^{N_p} \vec{v}_{ki}^s \right)^2 \right). \quad (3.57)$$

$\overline{m}^s(t, z, r)$ predstavlja srednju masu date vrste čestica s . Razlika u masi čestica iste vrste se pojavljuje upravo zbog razlike u otežinjenu čestica. Ukoliko su promene radijusa unutar ćelije zanemarive usrednjavanje mase se može zanemariti, u suprotnom, izuzetno je važno uzeti srednju vrednost mase.

3.7 Algoritam

Kada se mreža ćelija napravi prvi put, na samom početku simulacije, n_0 , n_{i1} , n_{i2} , n_e i T_e se izračunavaju za svaku ćeliju poznavajući ε i totalnu koncentraciju teških čestica n_{tot} unutar ćelije. Inicijalno, ε je gustina energije koja je dostavljena od strane lasera datoj ćeliji. Ova energija je raspodeljena elektronima i teškim česticama u vidu termalne energije haotičnog kretanja i potencijalne energije jona:

$\varepsilon = \frac{3}{2}(n_e k T_e + n_{tot} k T_e) + \chi_1 n_{i1} + (\chi_1 + \chi_2) n_{i2}$. U početnom trenutku temperatura elektrona i teških čestica je ista, i pretpostavljeno je da je raspodela čestica po brzinama Maksvelova. Dalje, odgovarajuća procedura za sve neelastične interakcije se primenjuje što rezultira novom brzinom čestica $v_i(t)$. Zatim, u svakoj ćeliji elektronska temperatura T_e se umanjuje za iznos izračene energije, jednačina 3.52. Na kraju, svaka teška čestica se pomera na novu poziciju $r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t)\Delta t$.

Zatim, mreža ćelija se adaptira na novu raspodelu čestica. Vrednost $n_{tot} = n_0 + n_{i1} + n_{i2}$ se jednostavno izračunava kao suma svih teških čestica koje se nalaze unutar ćelije. Ukupna raspoloživa energija unutar ćelije, koja je dostupna za proces jonizacije, se računa kao $\varepsilon = \frac{3}{2}n_e k T_e + \chi_1 n_{i1} + (\chi_1 + \chi_2) n_{i2}$ gde su n_{i1} i n_{i2} jednom i dva puta jonizovani atomi unutar nove ćelije. Pretpostavljajući elektroneutralnost svih ćelija i poznavajući kinematičke detalje vezane za kretanje jona možemo proceniti T_e u datoj ćeliji oslanjajući se na elektronsku temperaturu procenjenu u predhodnom vremenskom koraku. Poznavajući vrednosti za n_{tot} i ε može se rešiti sistem jednačina (3.47-3.51) i dobiti nove vrednosti n_0 , n_{i1} , n_{i2} , n_e i T_e .

Poglavlje 4

Rezultati

4.1 Rezultati simulacije za ekspanziju plazme u atmosferu vodonika na niskom pritisku

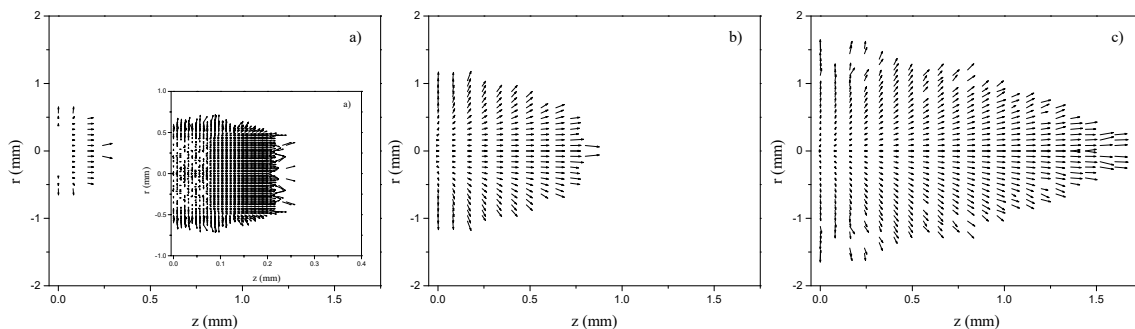
4.1.1 Početni uslovi

Spektroskopska istraživanja pokazuju da je spektar laserski proizvedene plazme, neposredno nakon laserskog impulsa, kontinualan bez spektralnih linija. Ovakva karakteristika upućuje da je optička debljina plazme velika i da se nalazi u stanju bliskom termodinamičkoj ravnoteži. Nakon približno 100 ns nakon laserskog impulsa spektralne linije su primetne i mogu pružiti grubu procenu elektronske temperature i koncentracije. Naša merenja upućuju da je srednja elektronska temperatura u ovom trenutku oko $T_e \sim 20000$ K, a elektronska koncentracija $N_e \sim 10^{24} \text{ m}^{-3}$ za metu od bakra, na pritisku okolnog gasa ispod 1000-1500 Pa, energiji laserskog zračenja $\sim 30\text{-}40$ mJ i radijusu laserskog spota od približno 0.5 mm. Dakle, oko 100 ns ranije, u $t = 0$ s, mi pretpostavljamo da je plazma u termodinamičkoj ravnoteži sa $T = 40000$ K, $N_e = 1 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$. U početnom trenutku čestice nastale laserskom ablacijom su smeštene u cilindar radijusa 0.5 mm i visine 0.25 mm, odnosno zapremine $V = 0.1 \text{ mm}^3$. Čestice su homogeno rasporedjene u zapremini V , sa brzinama izabranim iz

Maksvelove raspodele na temperaturi T . Pritisak vodonika izabran je da odgovara eksperimentalnim uslovima, odnosno 200 Pa.

4.1.2 Usmereno kretanje teških čestica

U početnom trenutku, brzine teških čestica izabrane su tako da je raspodela po uglovima izotropna, a da raspodela po intenzitetu odgovara Maksvelovoj raspodeli na temperaturi $T = 40000$ K. Nakon kratkog vremenskog intervala vektori brzine dobijaju usmerenu komponentu ka periferiji plazme. U ranoj fazi ekspanzije plazme samo čestice sa periferije imaju usmerenu komponentu brzine, dok čestice koje se nalaze u centru plazme imaju približno izotropnu raspodelu brzina po pravcima (slika 4.1 a)). Nakon ~ 100 ns sve čestice imaju usmerenu komponentu ka periferiji plazme, slika 4.1 b), a intenziteti brzina približno linearno rastu sa udaljavanjem od mete. Na slici 4.1 c) su prikazani vektori brzina 200 ns nakon laserskog impulsa.

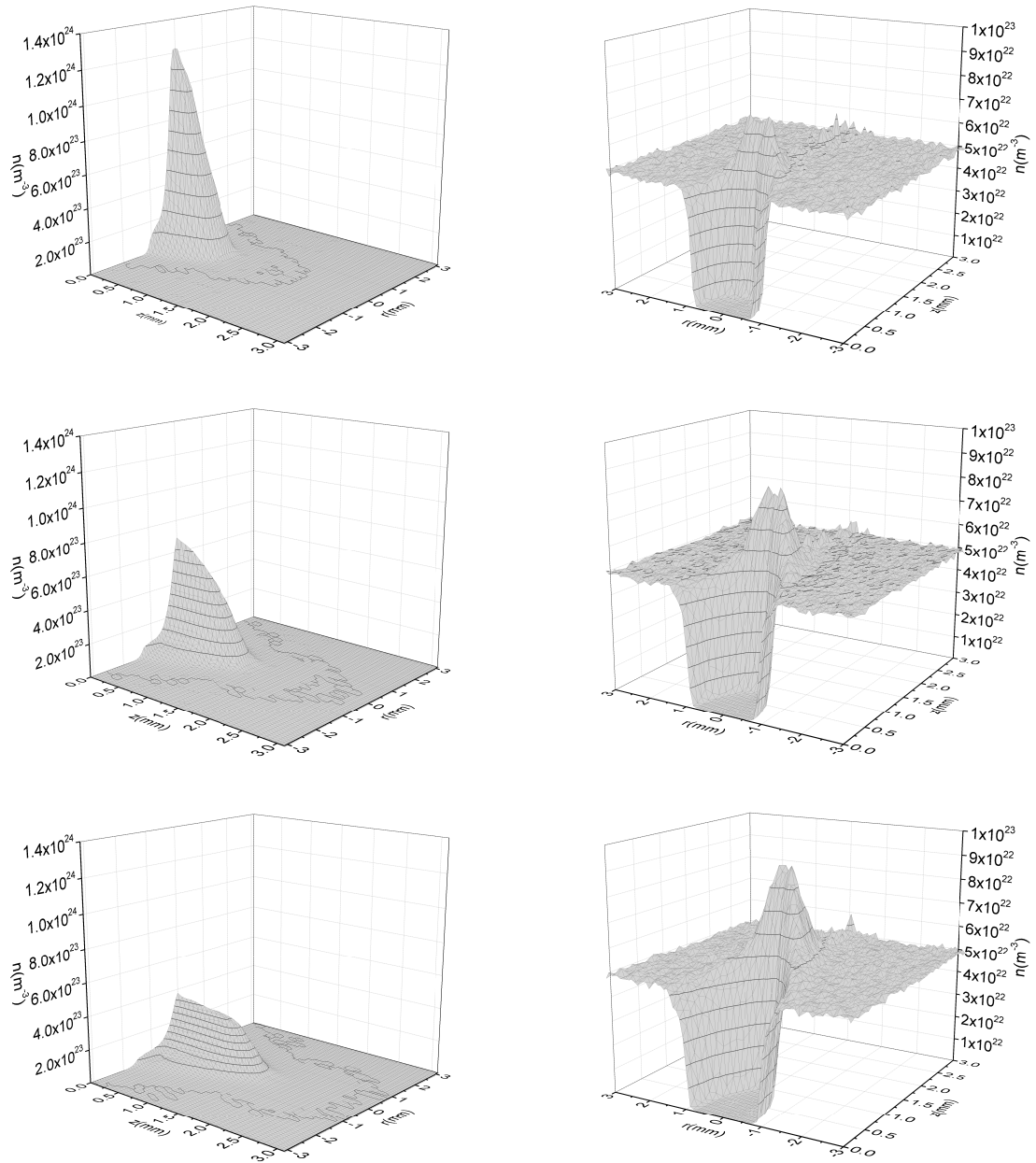


Slika 4.1: Polje brzina čestica bakra dobijeno iz simulacije u tri različita vremenska trenutka. Pod a) brzine čestica u 15 ns. U dodatku na slici je dato polje brzina sa većom gustinom ćelija za uzorkovanje (ćelija u kojima se vrši usrednjavanje). Na slici pod b) i pod c) su dati vektori brzina čestica u 100 i 200 ns nakon laserskog impulsa.

4.1.3 Raspodela teških čestica

U ovom delu, predstavljeni su rezultati vezani za kinematiku teških čestica. Na slici 4.2 je data evolucija prostornih raspodela bakra i vodonika. Sa slika se može zaključiti da je maksimum koncentracije bakra uvek u središtu plazme i postepeno opada ka periferiji. Raspodela čestica vodonika je suštinski drugačija, unutar plazme metala koncentracija je bar jedan red veličine manja u odnosu na koncentraciju

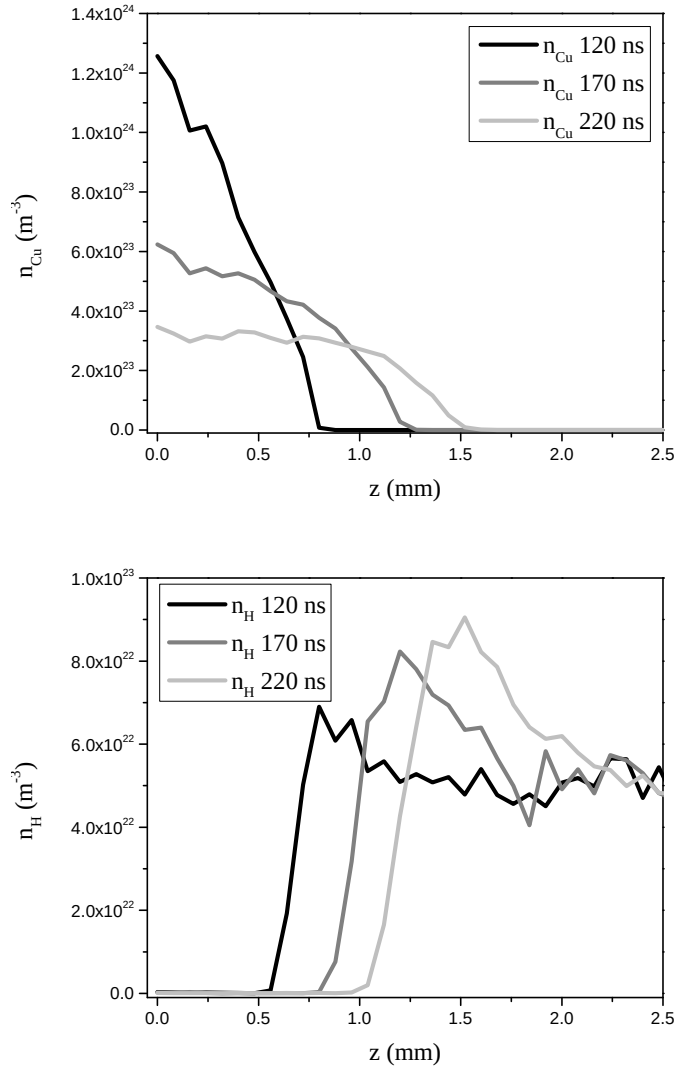
vodonika u komori sa izraženim maksimumom na ivicama plazme metala. Ova karakteristika se slaže sa kvalitativnom idejom o procesima koji se događaju na granici plazme.



Slika 4.2: Izračunate koncentracije bakra (leva strana) i vodonika (desna strana) u 120 ns (gornji panel), 170 ns (srednji panel) i 220 ns (donji panel) nakon laserskog impulsa.

4.1.4 Raspodele duž z ose vezane za elektrone i teške čestice

Na slici 4.3 su prikazani rezultati simulacije za koncentracije bakra, gornja slika, i vodonika, donja slika, duž z ose ($r = 0$) u tri različita vremenska trenutka. Iz

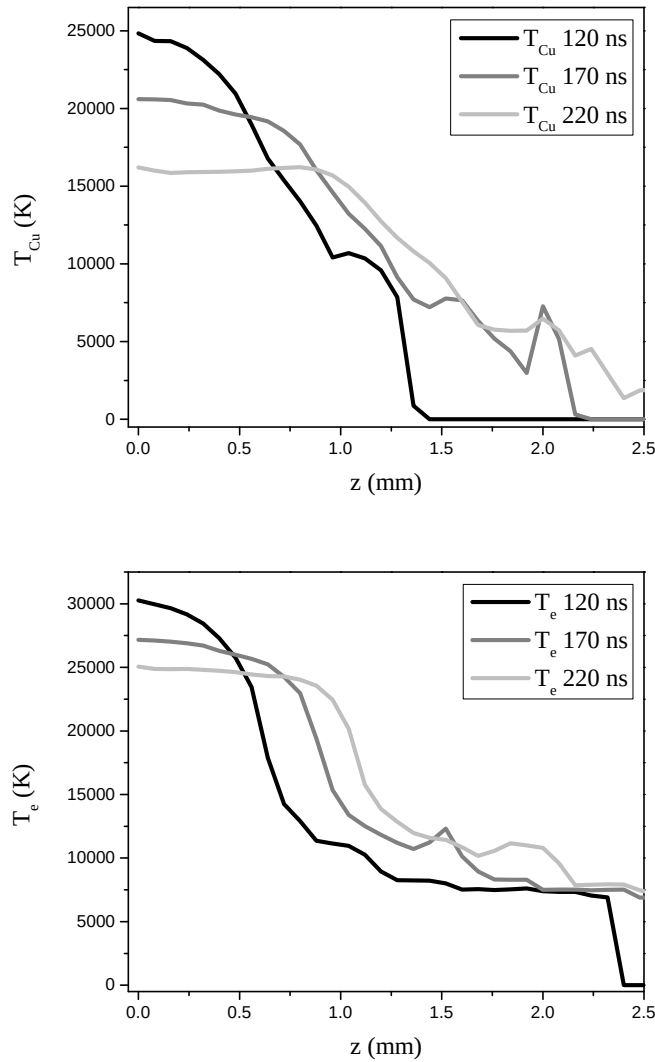


Slika 4.3: Izračunate koncentracije duž ose ($r = 0$) za bakar (gornja slika) i vodonik (donja slika). Crnom linijom su dati rezultati u 120 ns, tamno sivom u 170 ns, a svetlo sivom u 220 ns nakon laserskog impulsa.

rezultata se može zaključiti da čestice bakra istiskuju vodonik ka periferiji plazme i da je mešanje čestica bakra i vodonika prisutno samo u tankoj graničnoj oblasti gde je koncentracija bakra izuzetno niska.

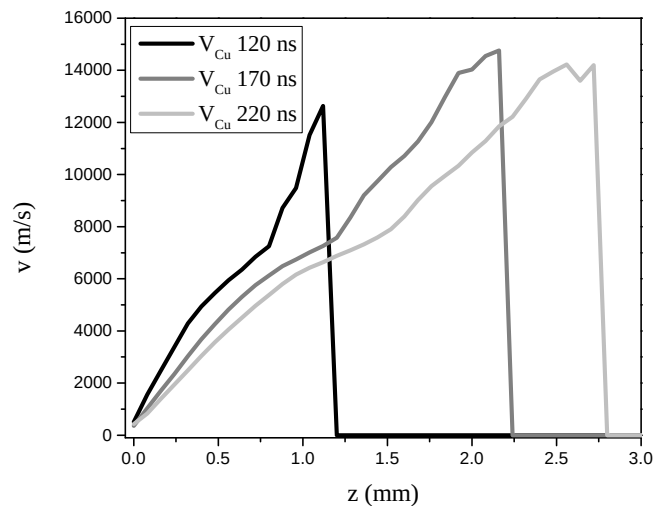
Profili temperature elektrona i teških čestica duž ose su dati na slici 4.4. Upore-

djujući temperature teških čestica (gornja slika) i elektrona (donja slika), u istom vremenskom trenutku, može se zaključiti da su temperature elektrona veće od temperature teških čestica. Razlika u temperaturama potiče od različitog načina hlađenja teških čestica i elektrona. Teške čestice se hlade usled razletanja, odnosno konverzije haotične komponente u usmerenu komponentu brzine, dok se elektroni dominantno hlade u sudarima sa teškim česticama. Takodje, primetno je da se temperaturna razlika sa vremenom povećava. Ovo je posledica opadanja ukupne koncentracije teških čestica i elektrona, a samim tim i smanjenja frekvencije *elektron-jon* (jednačina 3.46) i *elektron-atom* (jednačina 3.45) sudara.



Slika 4.4: Izračunate temperature duž ose za čestice bakra (gornja slika) i elektrona (donja slika). Crnom linijom su dati rezultati u 120 ns, tamno sivom u 170 ns, a svetlo sivom u 220 ns nakon laserskog impulsa.

Brzine usmerenog kretanja teških čestica u tri različita vremenska trenutka su date na slici 4.5. Brzine čestica, u svakom vremenskom trenutku, duž ose približno linearno rastu sa udaljavanjem od ose i ovakav rezultat je u saglasnosti sa rezultatima prikazanim u (Bogaerts *et al.*, 2003).



Slika 4.5: Brzine duž ose za čestice bakra. Crnom linijom su dati rezultati u 120 ns, tamno sivom u 170 ns, a svetlo sivom u 220 ns nakon laserskog impulsa.

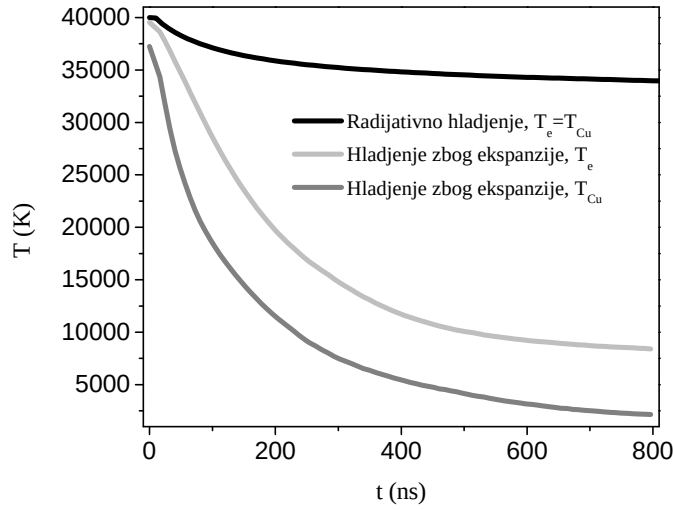
Da bi smanjili šum, rezultati su usrednjeni u vremenskom intervalu od 10 ns i zapremini cilindra sa spoljašnjim radijusom od 0.08 mm. Takodje, primetno je povećanje šuma na većim rastojanjima od mete. Ovakav efekat je posledica daleko manjeg broja čestica koje se nalaze daleko od mete u odnosu na one u blizini mete.

4.2 Efekti hladenja plazme

4.2.1 Hladjenje usled zračenja i ekspanzije plazme

Laserski proizvedena plazma se hladi usled radijativnih gubitaka energije i usled ekspanzije čestica u okolni gas. Pretpostavimo da je jedini način hladenja plazme zbog radijativnih gubitaka, odnosno da se plazma ne širi. U svakom vremenskom koraku temperatura elektrona je smanjena za količinu izračene energije, jednačina 3.52.

Transfer energije u elastičnim sudarima elektrona sa teškim česticama obezbeđuje hladjenje atoma i jona. Kako je brzina radijativnog hladjenja manja nego transfer energije izmedju elektrona i teških čestica obe komponente imaju iste temperature $T_e = T_h$. Sa druge strane, ukoliko u razmatranje uključimo i efektne širenja plazme primetićemo da ekspanzija plazme dovodi do smanjenja temperature teških čestica. Rezultati simulacije za ova dva slučaja su dati na slici 4.6. Iz rezultata se može



Slika 4.6: Rezultati simulacije za početnu koncentraciju $n = 5 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$ i temperaturu $T = 40000 \text{ K}$ bakra. Početna zapremina V_0 je cilindar sa radijusom 0.5 mm i visinom od 0.125 mm ($V_0 \approx 0.1 \text{ mm}^3$). Crna linija: Hladjenje homogene Cu plazme samo usled radijativne emisije. Elektronska temperatura T_e je jednaka temperaturi teških čestica T_h . Brzina hladjenja je relativno spora, nakon 800 ns temperatura opadne za $\sim 10\%$. Siva linija: Hladjenje Cu laserski proizvedene plazme usled ekspanzije u komori ispunjenoj vodonikom na 200 Pa. Transfer energije izmedju elektrona i teških čestica ne uspeva da održi temperature teških čestica i elektrona na istoj vrednosti. Obe vrednosti su usrednjene na celokupnu zapreminu plazme.

zaključiti da se plazma dominantno hladi usled širenja, a ne usled radijativnih gubitaka. Ovo je očekivan rezultat obzirom da je glavna osobina plazmi koje se nalaze u stanju lokalne termodinamičke ravnoteže mali radijativni gubitak. Drugi razlog za ovakav rezultat je i veoma kratko vreme života plazme $t \sim 800 \text{ ns}$. Usled brze ekspanzije teške čestice se intenzivno hlade, odnosno dolazi do pretvaranja haotične komponente u usmerenu komponentu brzine. Zbog velike razlike u masi prenos energije u elastičnim *elektron-jon* i *elektron-atom* sudarima je mali pa teške čestice i elektroni nemaju istu temperaturu (siva i svetlo siva linija sa slike 4.6). Nakon približno 800 ns temperatura opadne za $\sim 10\%$ u slučaju kada su uključeni samo radijativni gubici i $\sim 80\%$ za slučaj kada je u simulaciju uključena i ekspanzija

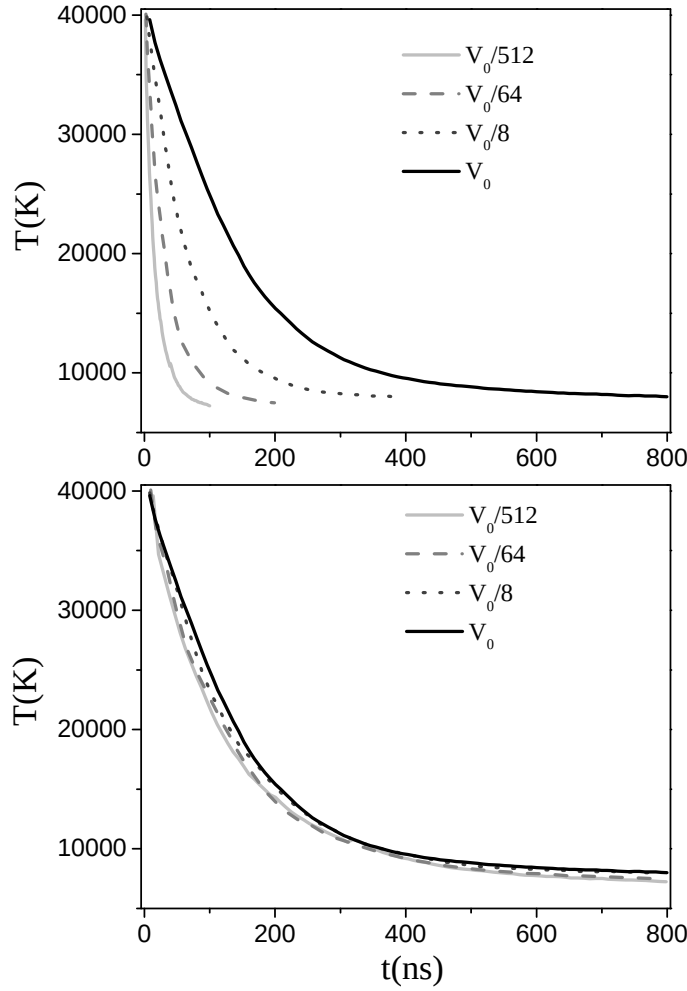
čestica.

Treba napomenuti da je hlađenje usled radijativnih gubitaka u plazmi koja se širi daleko manje nego u slučaju kada je plazma statična (crna linija sa slike 4.6). Razlog je u tome što gubitak energije na zračenje zavisi od elektronske temperature i koncentracije, jednačina 3.52, koja u plazmi koja se širi veoma brzo opada.

Očigledno je da brzina ekspanzije zavisi od izbora početnih uslova. Efekti vezani za izbor veličine početne zapremine, početnu temperaturu, koncentraciju i brzine čestica će biti kasnije diskutovani.

4.2.2 Efekti početne zapremine plazme na ekspanziju i hlađenje plazme

U ovom delu su date srednje vrednosti elektronske temperature u toku ekspanzije za različite veličine početne zapremine plazme (gornji deo slike 4.7). Iz rezultata se može zaključiti da je karakteristično vreme hlađenja plazme proporcionalno linearnoj dimenziji početne zapremine. Ovakav rezultat se može očekivati jer se gubitak čestica odvija kroz spoljašnju površinu plazme, a ona je proporcionalna sa l^2 dok se čestice nalaze u zapremini proporcionalnoj sa l^3 . Sa l je označena karakteristična linearna dimenzija plazme. Da bi pojasnili ovo razmatranje, vremenska skala svake simulacije je skalirana sa l_0/l_i , gde je l_0 linearna dimenzija najveće zapremine. Poklapanje grafika na donjem delu slike 4.7 pokazuju da mehanizam ekspanzije ostaje isti za veliki raspon početnih zapremina. Ovakvo ponašanje se zapaža u ranoj fazi ekspanzije plazme i kada je pritisak okružujućeg gasa relativno nizak.

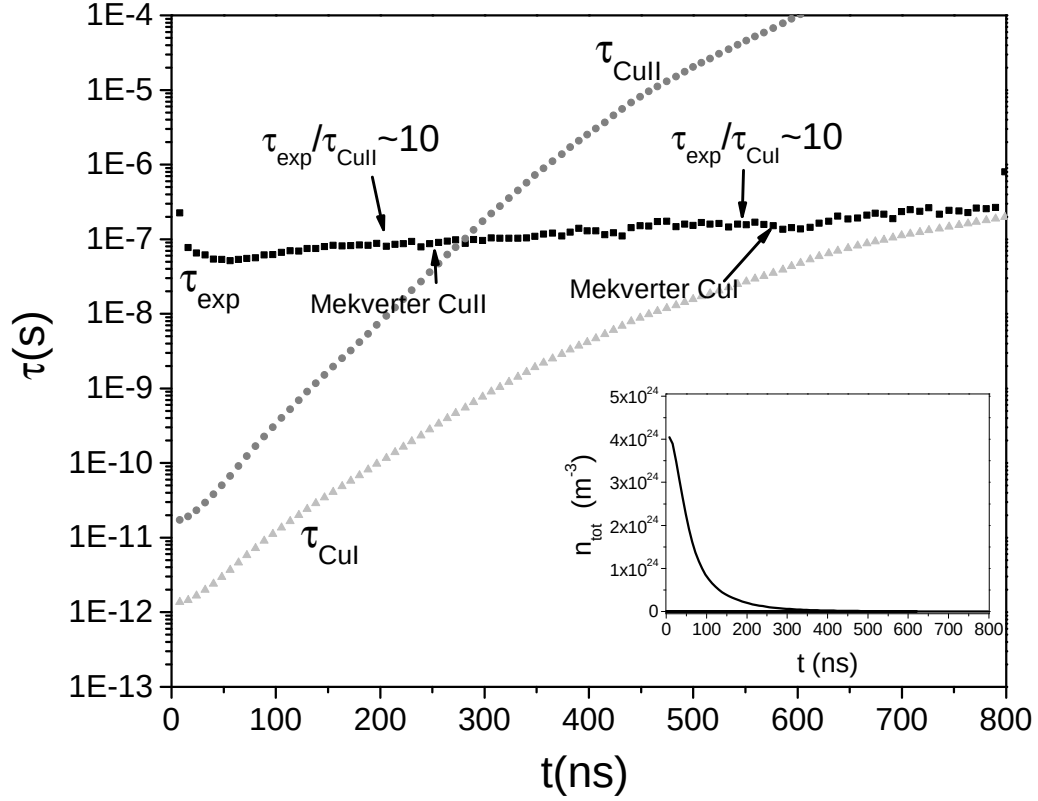


Slika 4.7: Gornja slika: Srednja temperatura elektrona u toku ekspanzije plazme za različite početne zapremine. Zapremina V_0 je cilindar radijusa 0.5 mm i visine 0.125 mm. Za svaku sledeću zapreminu radijus i visina cilindra su podeljeni sa 2. Početna koncentracija elektrona je $1 \cdot 10^{23} \text{m}^{-3}$, a temperatura $T_e=40000$ K. Okružujući gas je vodonik na pritisku 200 Pa. Donja slika: Vremenska osa inicijalne zapremine V_0 je nepromenjena. Za zapreminu $V_0/8$ vremenska osa je pomnožena sa 2, za $V_0/64$ sa 4, a za $V_0/512$ sa 8.

4.3 Ekspanzija plazme i postojanje lokalne termodinamičke ravnoteže

Da bi se laboratorijska plazma održala u lokalnoj termodinamičkoj ravnoteži elektronska koncentracija i temperatura moraju da budu dovoljno visoke da obezbede prevlast elektronskih sudara u odnosu na radijativne procese. Kao što je naglašeno u (Cristoforetti *et al.*, 2010) intenzivna ekspanzija laserski proizvedene plazme može da dovede do odstupanja od LTE čak i u slučaju kada je Mekverterov kriterijum zado-

voljen. Do ovakvog efekta dolazi kada je karakteristično vreme ekspanzije plazme uporedivo ili manje nego vreme potrebno da se ostvari LTE kroz elektronske sudare. Oslanjajući na razvijeni model možemo da procenimo karakteristično vreme ekspanzije laserski proizvedene plazme za tipične početne uslove koje se slaže sa našim eksperimentalno odredjenim vrednostima. Na slici 4.8 (umetak) prikazana



Slika 4.8: Osnovni grafik: Crna linija τ_{exp} , je karakteristično vreme ekspanzije u prvih 800 ns dobijene iz simulacije. τ_{CuII} (sive tačke) je relaksaciono vreme za Cu II, τ_{CuI} (svetlo sive tačke) za Cu I. Relaksaciona vremena su procenjena koristeći jednačinu 2.7. Naznačeni su trenuci kada karakteristično vreme ekspanzije prevladjuje u odnosu na elektronske ekscitacije za Cu II ($\tau_{\text{exp}}/\tau_{\text{CuII}} \sim 10$) i Cu I ($\tau_{\text{exp}}/\tau_{\text{CuI}} \sim 10$). Umetak: Opadanje koncentracije teških čestica, $\tau_{\text{exp}} \sim \frac{n(t)}{|dn(t)/dt|}$.

je *srednja* koncentracija teških čestica u toku ekspanzije plazme. Karakteristično vreme ekspanzije, $\tau_{\text{exp}} \sim \frac{n}{|dn/dt|} \sim 10^{-7}$ s, je skoro konstantno što ukazuje da koncentracija čestica opada eksponencijalno. Kao procena relaksacionog vremena plazme, τ_{rlx} , uzeto je vreme najsporijeg procesa ($\tau_{\text{rlx}} \approx \frac{1}{n_e \langle \sigma_{12} v \rangle}$), jednačina 2.7.

Poredeći τ_{exp} i τ_{rlx} može se zaključiti da raspodela atoma po nivoima kod jona bakra ostaje u LTE u prvih ~ 200 ns, dok kod neutralnih atoma sistem ostaje u LTE u toku prvih ~ 600 ns. To znači da pre ~ 200 ns možemo proceniti populacije ekscitovanih stanja u oba jonizovana stanja, Cu I i Cu II, oslanjajući se na Bolemanovu raspodelu.

Nakon ~ 200 ns samo Cu I atomi prate Bolcmanovu raspodelu, dok nakon ~ 600 ns elektronska koncentracija nije dovoljno visoka da održi Cu plazmu u LTE.

Na slici 4.8 obeleženi su trenuci kada bi laserski proizvedena plazma izašla iz LTE po Mekverterovom kriterijumu, približno 50 ns kasnije nego zbog ekspanzije kod Cu II i približno 30 ns kasnije za Cu I. Nakon ~ 600 ns plazma nije u LTE, medjutim, gruba procena stepena jonizacije je i dalje dostupna iz simulacije.

Na granici plazme, odredjena količina vodonika je prisutna u bakarnoj plazmi. Energija prvog pobudjenog stanja u vodoniku je 10.2 eV, skoro tri puta više nego odgovarajuća vrednost kod Cu I. Kao posledica vodonik odstupa od LTE daleko brže i ne može se proceniti populacija pobudjenih stanja u vodoniku primenjujući Bolcmanovu raspodelu. Ovde smo pretpostavili da ako su Cu I atomi u LTE imamo pristojnu procenu elektronske temperature i koncentracije, dominantno odredjene sudarima elektrona sa atomima Cu I. Pod ovom pretpostavkom jednostavni koliziono radijativni model može da posluži za odredjivanje populacije ekscitovanih stanja u vodoniku.

4.4 Intenzitet spektralnih linija bakra

$T_e(t, z, r)$ i $n_e(t, z, r)$ su dobijeni rešavanjem sistema jednačina 3.47-3.51 u svakoj ćeliji (na poziciji z, r) u svakom vremenskom koraku simulacije (t), slika 4.9. Pretpostavljajući LTE, relativna populacija ekscitovanih stanja je procenjena oslanjajući se na Bolcmanovu raspodelu za poznatu $T_e(t, z, r)$:

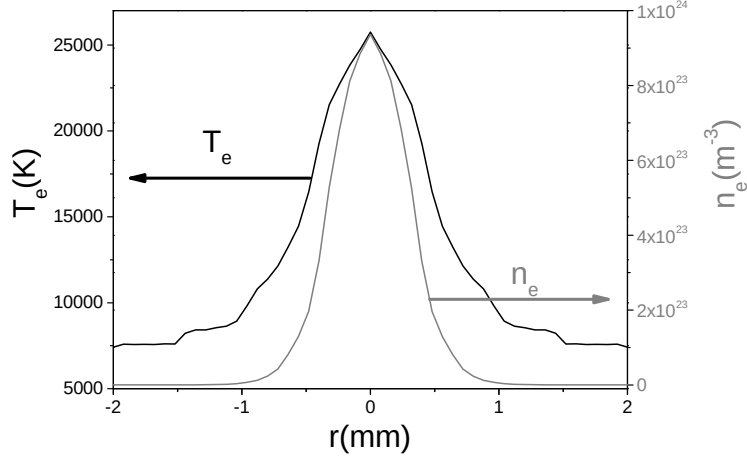
$$n_i(t, z, r) = n_0(t, z, r)(g_i/g_0)e^{-E_i/kT_e(t, z, r)}, \quad (4.1)$$

gde su $n_0(t, z, r)$ i $n_i(t, z, r)$ koncentracije osnovnog i pobudjenog stanja i u trenutku t , na poziciji (z, r) . g_0 i g_i su statističke težine, E_i je energija potrebna za ekscitaciju stanja i , a k je Bolcmanova konstanta. Relativni intenzitet $I_{ij}(t, z, r)$ spektralne

linije zbog radijativnog prelaza sa stanja i na stanje j je:

$$I_{ij}(t, z, r) = h\nu A_{ij} n_0(t, z, r) (g_i/g_0) e^{-E_i/kT_e(t, z, r)}, \quad (4.2)$$

gde je A_{ij} verovatnoća prelaza.



Slika 4.9: Radijalni profili elektronske temperature (crna linija) i elektronske koncentracije (siva linija) dobijeni iz simulacije na $z = 0.5$ mm od mete u $t = 120$ ns nakon laserskog impulsa.

4.5 Intenzitet spektralnih linija vodonika

Već je napomenuto da atomi vodonika brzo izlaze iz LTE zbog velike energije ekscitacije prvog pobudjenog stanja, tj. populacija pobudjenih nivoa se ne može odrediti oslanjajući se na Bolcmanovu raspodelu atoma po nivoima. Da bi prevazišli ovaj problem, primenili smo jednostavan koliziono radijativni model (van der Mullen, 1990), (Chung *et al.*, 2005), baziran na poznatim vrednostima $T_e(t, z, r)$, $n_e(t, z, r)$ i koncentracijama čestica u osnovnom i jonizovanom stanju. U okviru modela uzeti su u obzir osnovno stanje i samo prva tri pobudjena stanja. Povećanje populacije stanja i je rezultat sledećih procesa: ekscitacija zbog sudara sa elektronima sa svih stanja ispod i uključujući i osnovno stanje, deekscitacija sa svih stanja iznad i usled sudara sa elektronima i radijativne deekscitacije sa viših stanja i tročestična rekombinacija. Depopulacija stanja i je izazvana sledećim procesima: ekscitacijama i deekscitacijama elektronskim sudarima na viša i niža stanja, radijativnim prelazima

na niža stanja i elektronskim sudarnim jonizacijama. Rešavajući odgovarajući kvazi stacionarni model $\partial n_i / \partial t + \nabla n_i v_i = 0$ (sistem jednačina 4.3-4.5) možemo proceniti koncentraciju $n_i(t, z, r)$ za izabrano pobudjeno stanje u atomu vodonika. Intenzitet spektralne linije se računa kao $I_{ij}(t, z, r) = h\nu A_{ij} n_i(t, z, r)$.

$$-(R_2^j + R_{21} + R_{23} + R_{24} + A_{21}) n_2 + (R_{32} + A_{32}) n_3 + (R_{42} + A_{42}) n_4 + R_{12} n_1 + R_2^r n_j = 0 \quad (4.3)$$

$$R_{23} n_2 - (R_3^j + R_{31} + R_{32} + R_{34} + A_{31} + A_{32}) n_3 + (R_{43} + A_{43}) n_4 + R_{13} n_1 + R_3^r n_j = 0 \quad (4.4)$$

$$R_{24} n_2 + R_{34} n_3 - (R_4^j + R_{41} + R_{42} + R_{43} + A_{41} + A_{42} + A_{43}) n_4 + R_{14} n_1 + R_4^r n_j = 0 \quad (4.5)$$

n_1, n_2, n_3 i n_4 predstavljaju koncentracije atoma vodonika u osnovnom, prvom, drugom i trećem pobudjenom stanju, respektivno. n_j je koncentracija jona. Koeficijent R_{ij} za sudarnu ekscitaciju sa stanja i na stanje j je definisan kao:

$$R_{ij} = n_e \int_{E_{ij}}^{\infty} v \sigma(E) f_e(E) dE. \quad (4.6)$$

n_e je koncentracija elektrona, v je brzina elektrona, $f_e(E)$ raspodela elektrona po energijama, a $\sigma(E)$ je presek za ekscitaciju atoma vodonika elektronskim sudarom. Pretpostavljajući da elektroni imaju Maksvelovu raspodelu po brzinama, R_{ij} se može izraziti kao (Chung *et al.*, 2005):

$$R_{ij} = n_e \frac{\hat{g}(E_{ij}/(kT_e)) e^{-E_{ij}/(kT_e)}}{E_{ij} \sqrt{kT_e}} f_{ij} 1.578 \cdot 10^{-5} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}. \quad (4.7)$$

$\hat{g}$ je srednji Gauntov faktor, f_{ij} snaga oscilatora, a T_e elektronska temperatura. Za Maksvelovu raspodelu elektrona po brzinama koeficijent za sudarnu deekscitaciju R_{ji} je povezan sa koeficijentom za sudarnu ekscitaciju $n_i^* R_{ij} = n_j^* R_{ji}$, gde su n_i^* i n_j^* koncentracije nivoa u termalnoj ravnoteži. Koeficijent za sudarnu jonizaciju R_i^j sa

nivoa i je izračunat koristeći (Chung *et al.*, 2005):

$$R_i^j = 2.97 \cdot 10^{-6} n_e \frac{\xi}{\chi_i \sqrt{kT_e}} E_1(\chi_i/(kT_e)) \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}. \quad (4.8)$$

ξ predstavlja broj elektrona u spoljašnjoj ljusci atoma koji se jonizuje, χ_i energiju jonizacije sa stanja i , a E_1 eksponencijalni integral prve vrste¹. Koeficijent za tročestičnu rekombinaciju se po principu detaljnog balansa može izračunati iz koeficijenta za sudarnu jonizaciju (Chung *et al.*, 2005):

$$R_i^r = 1.66 \cdot 10^{-22} n_e \frac{g_i}{g_{i+1}} \frac{e^{\chi_i/(kT_e)}}{(kT_e)^{3/2}} R_i^j. \quad (4.9)$$

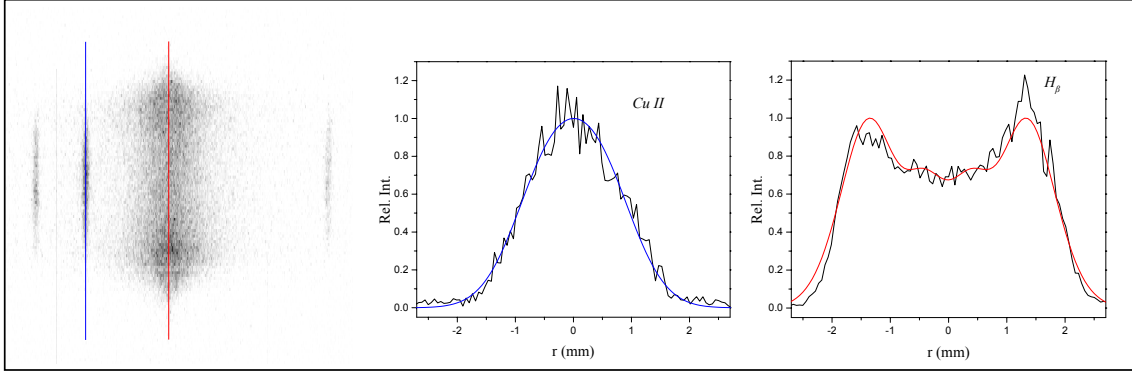
g_i i g_{i+1} predstavljaju statističke težine odgovarajućih nivoa. Vrednosti za verovatnoće prelaza A_{ij} su preuzete iz NIST-ove baze spektralnih linija (NIST, 2015).

4.6 Radijalni profili spektralnih linija u simulaciji i eksperimentu

Za merenje radijalnih profila spektralnih linija bakra i vodonika korišćena je eksperimentalna postavka sa slike 2.7. Spektar na poziciji 486 nm u 120 ns od laserskog impulsa je prikazan na slici 4.10. Eksperimentalni lateralni profili i fit sume Gausovih funkcija prikazan je na istoj slici (srednji panel Cu II linija i desni panel H_β linija). Plavom linijom na levom panelu je obeležena pozicija na kojoj je određen lateralni profil, a na srednjem panelu je dat najbolji fit sume Gausovih funkcija. Crvenom linijom su obeleženi položaj i najbolji fit vezani za H_β liniju. Radijalni profili spektralne linije jona bakra Cu II 485.5 nm i linije vodonika H_β dobijeni su primenom opisane numeričke procedure za inverznu Abelovu transformaciju.

Na slici 4.11 su dati relativni intenziteti za Cu II 485.5 nm i H_β spektralne linije na rastojanju $z = 0.5$ mm od mete u tri vremenska trenutka nakon laserskog impulsa. Na desnoj strani slike su iste linije eksperimentalno dobijene, a na levoj linije

¹Eksponencijalni integral prve vrste se standardno definiše kao $E_1(x) = \int_1^\infty \frac{e^{-xt}}{t} dt, x > 0$.



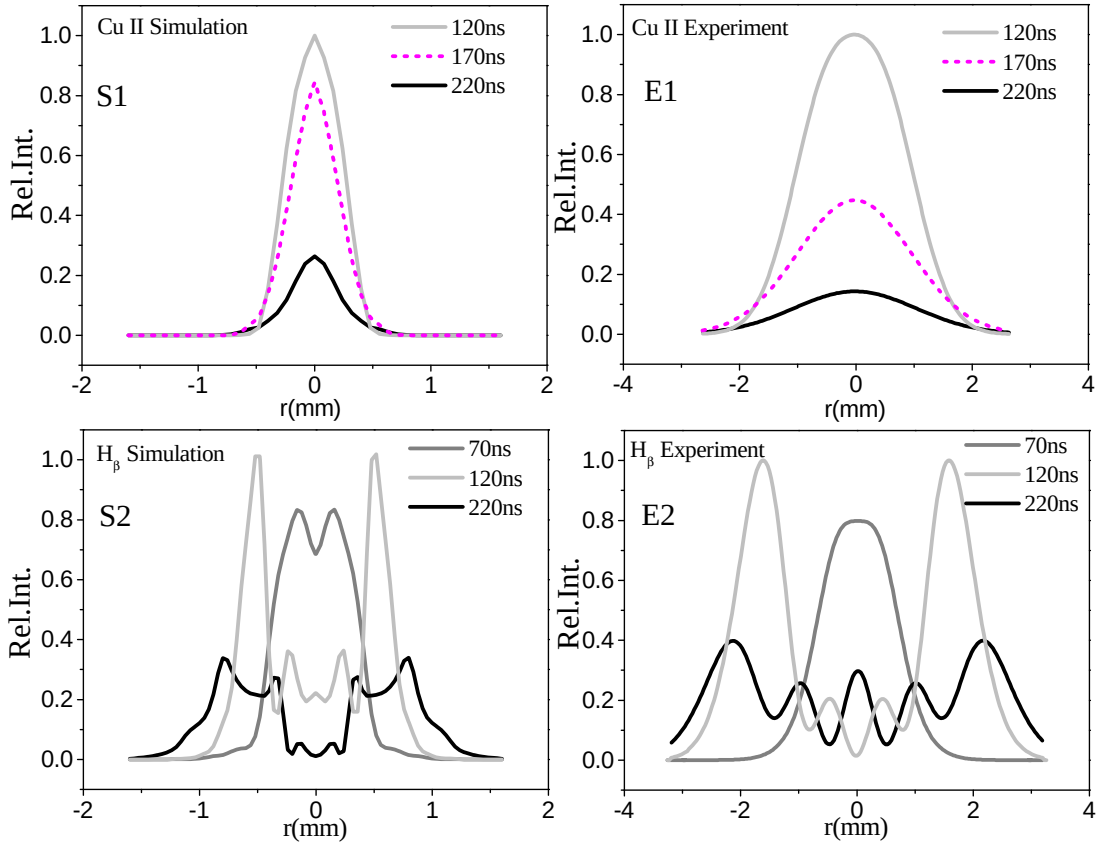
Slika 4.10: Spektar laserski proizvedene plazme u 120 ns nakon laserskog impulsa na 0.5 mm od mete. Levi panel: spektar u "image" modu na poziciji 486 nm. Plavom linijom je obeležen položaj Cu II 485.5 nm spektralne linije, dok je crvenom linijom obeležen položaj linije vodonika H_β . Srednji panel: lateralni profil (crna linija) i najbolji fit sume Gausovih funkcija (plava linija) za Cu II liniju. Desni panel: lateralni profil (crna linija) i najbolji fit sume Gausovih funkcija (crvena linija) za H_β liniju.

dobijene iz simulacije. Eksperimentalni podaci pokazuju da Cu II linije imaju maksimum intenziteta u središtu plazme, dok H_β ima maksimum u graničnoj oblasti. Po predloženoj simulaciji, ovakva osobina je zbog različite prostorne raspodele atoma bakra i vodonika. U centru plazme gustina bakra je maksimalna, a zbog visoke elektronske temperature i koncentracije za očekivati je da Cu II atomi imaju maksimum u centru. Sa druge strane, gustina vodonika je maksimalna na periferiji, slika 4.2, što za rezultat ima povećanje intenziteta H_β na granici bakar-vodonik iako je elektronska temperatura i koncentracija manja nego u središtu.

4.7 Diskusija

4.7.1 Početni uslovi

Analizom radijalnih profila sa slike 4.11 može se zaključiti da je ekspanzija u eksperimentu ~ 2 puta brža nego ekspanzija u simulaciji. Prema izabranim početnim uslovima, u nultom trenutku smatra se da je plazma homogena u celoj zapremini sa izotropnom raspodelom brzina teških čestica. Brzina ekspanzije zavisi od početne temperature i *anizotropije* u raspodeli čestica po brzinama. Povećanje početne temperature za rezultat ima bržu ekspanziju plazme, i rezultate simulacije približava eksperimentalnim rezultatima. Početna anizotropija u raspodeli



Slika 4.11: Radijalni profili iz eksperimenta i modela, snimljeni na 0.5 mm od površine mete. Spektar je snimljen u 70, 120, 170 i 220 ns nakon laserskog impulsa, sa vremenom ekspozicije od 20 ns u eksperimentu. Eksperimentalni radijalni profili su procenjeni koristeći Abelov inverzni transform na izmereni lateralni profil. Paneli S1 i E1: radijalni profili iz simulacije i eksperimenta za spektralnu liniju Cu II 485.5 nm. U 70 ns Cu II linija je ispod limita detekcije za $z = 0.5$ mm. Paneli S2 i E2: Radijalni profili H_{β} dobijeni iz simulacije i eksperimenta. Profil snimljen u 170 ns je preskočen. Oblici i relativni intenziteti radijalnih profila su u oba slučaja u razumnom slaganju. Međutim, brzina ekspanzije je približno dva puta sporija u modelu za početne vrednosti simulacije: $T = 40000$ K, $N_e = 1 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$, $V_0 = 0.1 \text{ mm}^{-3}$.

teških čestica po brzinama takodje smanjuje neslaganje simulacije sa eksperimentom, međutim, ovakav pristup menja evoluciju plazme na veoma kompleksan način, uključujući formiranje udarnog talasa. Trenutno naša eksperimentalna spektroskopska saznanja ne mogu da podrže ni jednu od pomenutih korekcija.

Interakcija teških čestica sa površinom metala je uključena tako da nakon sudara čestice sa površinom metala samo normalna komponenta brzine menja znak. Razmena energije u toku ove interakcije nije uključena u model, a može da utiče na brzinu ekspanzije.

4.7.2 LTE

Prema našoj analizi, za dovoljno veliku vrednost početne zapremine plazme ekspanzija nije toliko brza i obezbeđuje uslove za LTE na mikrosekundnoj skali. U ovom slučaju odstupanje od LTE je uglavnom zbog narušenja Mekverterovog kriterijuma, a ne usled veoma brze ekspanzije. Međutim, za male vrednosti početne zapremine postojanje LTE je ograničeno na nekoliko stotina nanosekundi usled brze ekspanzije.

U simulaciji postojanje LTE u toku prvih ~ 200 ns kod Cu II i ~ 600 ns kod Cu I je rezultat koji zavisi od izbora početnih uslova. Vreme relaksacije, jednačina 2.7, veoma tople i veoma guste Cu plazme ($T_e \sim 40000$ K, $N_e \sim 1 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$) je veoma kratko ($\tau \lesssim 10^{-10}$ s) i plazma veoma brzo relaksira u stanje blisko termodinamičkoj ravnoteži.

U predhodnoj analizi plazma je okarakterisana srednjim vrednostima elektronske koncentracije i temperature i koncentracije teških čestica. Na ovaj način gradijenti, koji postoje u realnosti, ispoljavaju se kroz veoma brzo smanjenje elektronske gustine. Rezultat ovog pojednostavljenja je da centar plazme ostaje duže u LTE nego što je naznačeno na slici 4.8, sa druge strane granična oblast napušta LTE nešto ranije.

Dijagnostička tehnika bazirana na emisiji okružujućeg vodonika zahteva posebnu pažnju. U skladu sa predstavljenim modelom spektralne linije vodonika dolaze iz granične oblasti plazme, dakle, one nisu odgovarajuće za dijagnostiku centralne oblasti plazme. Moguće narušenje LTE za niskoležeća stanja vodonika je takodje poteškoća u dijagnostici koja se bazira na linijama vodonika.

Poglavlje 5

Zaključak

U okviru ove teze razmatrana je evolucije laserski proizvedene plazme u atmosferi vodonika na niskom pritisku. Razmatran je uticaj brze ekspanzije plazme na postojanje lokalne termodinamičke ravnoteže, oblik radijalnih profila spektralnih linija i prostorne raspodele koncentracije i temperature teških čestica i elektrona. U tu svrhu razvijen je jednostavan model koji opisuje ekspanziju laserski indukovane plazme. Zbog velike razlike u masi teških čestica i elektrona model se zasniva na pretpostavci da teške čestice određuju proces ekspanzije i kolektivno kretanje centra mase plazme. U modelu, kretanje teških čestica je detaljno praćeno, dok se za elektrone smatra da prate jone u toku kretanja, pretpostavljajući kvazi neutralnost plazme. Elektronska koncentracija i elektronska temperatura su uključeni u model pod pretpostavkom lokalne termodinamičke ravnoteže. Oslanjajući se na ove dve pretpostavke razvijena je jednostavna, a pritom efikasna, Monte Karlo simulacija.

Rezultati simulacije su testirani upoređivanjem sa spektroskopskim merenjima radijalnih profila spektralnih linija jona bakra i vodonika na niskom pritisku (200 Pa). Relativne vrednosti radijalnih profila dobijenih iz simulacije pokazuju veoma dobro slaganje sa eksperimentalno određenim profilima. Međutim, procenjeno je da je brzina širenja plazme oko 2 puta sporija u simulaciji nego u eksperimentu. Ovakvo neslaganje je najverovatnije posledica odabranih početnih uslova.

Za izabrane početne uslove (izotropna raspodela čestica po brzinama) simulacija pokazuje da je bakarna plazma u lokalnoj termodinamičkoj ravnoteži do približno 600 ns nakon laserskog impulsa i da se napuštanje ravnoteže usled brze ekspanzije dešava neznatno pre narušenja Mekverterovog kriterijuma, približno 50 ns ranije.

Karakteristično vreme ekspanzije laserski proizvedene plazme proporcionalno je linearnoj dimenziji početne zapremine. Za dovoljno veliku početnu zapreminu plazma će duže ostati u LTE. Pored toga, mogućnost skaliranja zapremine nam omogućava da plazme koje postoje u laboratorijskim uslovima, radijusa ~ 0.5 mm, možemo u simulaciji da opišemo daleko manjom plazmom. Ovakav rezultat nam omogućava da znatno smanjimo kompjuterske resurse i vreme izvršenja simulacije.

Hladjenje plazme je u najvećoj meri vezano za ekspanziju plazme. U toku ekspanzije veoma brzo se smanjuje temperatura teških čestica. Elektronska temperatura se smanjuje usled razmene energije kroz elastične sudare sa teškim česticama. Kako je prenos energije u *elektron-jon* i *elektron-atom* sudarima veoma mali elektronska temperatura ne uspeva da prati temperaturu teških čestica. U početnoj fazi razvoja plazme, zbog velike frekvencije sudara, temperatura elektrona i teških čestica su približno iste. Međutim, razlika postaje izraženija u kasnijim vremenskim trenucima kada su koncentracije čestica niske i frekvencija sudara relativno mala.

Linije vodonika se veoma često koriste za dijagnostiku plazme. Uobičajna procedura je da se komora ispuni vodonikom koji bi mogao da posluži za dijagnostiku plazme. Međutim, pokazali smo da dijagnostika bazirana na spektralnim linijama koje potiču od okružujućeg gasa nije odgovarajuća za dijagnostiku centra plazme. U simulaciji i eksperimentu određeno je da čestice mete i čestice okolnog gasa imaju suštinski različitu raspodelu, i da vodonik koji bi poslužio za dijagnostiku plazme dominantno svetli na periferiji plazme, dok je intenzitet linija vodonika u samom središtu na nivou šuma.

Diskutovane su granice važenja hidrodinamičkog modela za opisivanje laserski proizvedene plazme na niskom pritisku lakog okolnog gasa. Za granicu važenja hidrodinamičkog modela je uzeta vrednost Knudsenovog broja od 0.01. Određeno je

da je za izotropnu raspodelu čestica po brzinama u početnom trenutku samo centar plazme u hidrodinamičkom režimu, dok je periferija daleko od takvog slučaja i čestični efekti se ne mogu zanemariti.

Rešeni su određeni tehnički aspekti Monte Karlo simulacije. Razvijena je rekurzivna adaptivna mreža pogodna za primenu u Monte Karlo simulacijama kod kojih koncentracije čestica variraju za nekoliko redova veličine. Efikasno je rešen problem indeksiranja ćelija i čestica u razvijenoj adaptivnoj mreži.

Spektar laserski proizvedene plazme snimljen u FVB modu ne pruža dovoljno informacija neophodnih za korektnu dijagnostiku i razumevanje fizike laserski proizvedene plazme. Na osnovu ovih činjenica neophodan korak u proučavanju laserski proizvedene plazme je inverzna Abelova transformacija. Kako se laserski proizvedena plazma širi u okolni gas ne postoje jasne granice plazme i ne mogu se koristiti standardni algoritmi za inverznu Abelovu transformaciju. Diskutovana je upotreba metode koja se zasniva na fitovanju sume Gausovih funkcija na lateralni profil. Problem sa šumom, vezan za inverzni Abelov transform, je detaljno diskutovan.

Neophodan korak pre primene procedure za inverznu Abelovu transformaciju je provera linija na samoapsorpciju. Razvijeni metod za korekciju linija na samoapsorpciju je primenljiv samo za male vrednosti apsorpcije. Medjutim, veoma je važna i provera linija na efekte samoapsorpcije koja je moguća za proizvoljne vrednosti apsorpcije. Zbog načina na koji opada lateralni profil linija standardne procedure za inverznu Abelovu transformaciju nisu primenljive u slučaju laserski proizvedene plazme, već je potrebno primeniti metode koje ne uzimaju u obzir granicu svetljenja plazme.

Prilog A

Inverzna Abelova transformacija, radijalno razložena merenja

U ovom delu će biti ukratko predstavljena metoda za inverznu Abelovu transformaciju koja se zasniva na fitovanju lateralnog profila sumom Gausovih funkcija koju su predložili Ignjatović i Mihajlov (Ignjatović & Mihajlov, 2002). Pretpostavimo da emisiona funkcija ϵ ima oblik Gausove funkcije $\epsilon(r) = be^{-\alpha^2 r^2}$ (u ovom delu zavisnost emisije funkcije i lateralnog profila od talasne dužine će biti izostavljeno). Lateralni profil, dobijen Abelovom transformacijom (jednačina 2.14) emisije funkcije oblika $\epsilon(r) = be^{-\alpha^2 r^2}$ postaje:

$$F(y) = b \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 r^2} dx = b \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 (x^2 + y^2)} dx = be^{-\alpha^2 y^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx = b \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} e^{-\alpha^2 y^2}. \quad (\text{A.1})$$

Dakle, Gausova funkcija se transformiše u Gausovu funkciju iste širine, ali drugačijeg intenziteta $a = b\sqrt{\pi}/\alpha$. Sa druge strane, pretpostavimo da se lateralni profil može aproksimativno predstaviti sumom Gausovih funkcija:

$$F(y) = a_0 + a_1 e^{-\alpha^2 (y-c)^2} \left[1 + \sum_{i=2}^n a_i e^{-(i-1)\beta^2 (y-c)^2} \right]. \quad (\text{A.2})$$

Koeficijent a_0 odgovara vrednosti bazne linije lateralnog profila, c je centar simetrije profila, dok koeficijenti a_i predstavljaju amplitude odgovarajućih Gausijana. Koeficijent α definiše asimptotsko ponašanje $F(y)$, dok $(i-1)\beta^2$ definiše širinu Gausijana u sumi. Inverzni transform ovako definisanog lateralnog profila je:

$$\epsilon(r) = b_1 e^{-\alpha^2(r)^2} \left[1 + \sum_{i=2}^n b_i e^{-(i-1)\beta^2(r)^2} \right], \quad (\text{A.3})$$

gde $b_1 = a_1 \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}$, a $b_i = a_i \sqrt{\frac{\alpha^2 + (i-1)\beta^2}{\alpha^2}}$.

Ako uzmemo jednačinu A.2 kao modelnu funkciju izmerenog lateralnog profila, koeficijenti $a_i (i = 0, 1, 2, \dots, n)$, α , β i c se mogu dobiti jednostavnom fit procedurom. Kako je emisiona funkcija $\epsilon(r)$ analitički rešena (jednačina A.3), potrebno je samo izračunati koeficijente b_i . Na ovaj način problem inverznog Abelovog transformata se svodi na standardne procedure za fitovanje.

Pitanje vezano za broj Gausijana, n , u jednačini A.2 je povezano sa prostornom raspodelom emitera. Takodje, zavisi i od kvaliteta podataka, tj. količine šuma. Sa povećanjem broja n oblik lateralnog profila je bolje reprodukovano, sa druge strane veliki šum prekriva detalje u obliku i veliko n postaje beskorisno. Sa $n = 2$ mogu se obradivati šumni podaci sa maksimumom van centra. Korišćenje većeg n je opravdano ako se očekuje neki kompleksniji oblik lateralnog profila, na primer sa više lokalnih maksimuma.

Nakon inverzne Abelove transformacija za sve izmerene talasne dužine λ , može se izračunati profil spektralne linije oslanjajući se na emisionu funkciju $\epsilon(r)$.

Šum koji je prisutan u izmerenim lateralnim profilima preslikava se u grešku parametara linija. Spektar snimljen u "image" modu (lateralni profil u funkciji talasne dužine $F(\lambda, y)$) pruža uvid u prostornu raspodelu emitera, međjutim neizbežna posledica je povećanje šuma u odnosu na spektar snimljen na standardni način (kao na linijskom CCD-u). Drugi izvor šuma je nesavršena simetrija snimljenih lateralnih profila. Uobičajna procedura u takvim situacijama je primena odgovarajućeg algoritma za glačanje funkcije, takozvane *eng* "smooth" procedure, i simetrizaciju profila

(Cvejić *et al.*, 2013). Ovakva pristup znatno pojednostavljuje numeričku proceduru za inverznu Abelovu transformaciju, međutim može da utiče na profile spektralnih linija i podcenjuje greške parametara.

Funkcija data jednačinom A.2 je simetrična reprezentacija celog izmerenog lateralnog profila. Najbolji parametri fita ove funkcije obezbeđuju najbolje slaganje funkcije i celog lateralnog profila. Na ovaj način moguća asimetrija u eksperimentalnim podacima se ogleda u parametrima fita i odgovarajućim greškama. Dakle, pomenute procedure za glačanje i simetrizaciju nisu neophodne. Konačni rezultat je rasipanje u inverznim profilima i proporcionalno je šumu i drugim nesavršenostima grubih podataka.

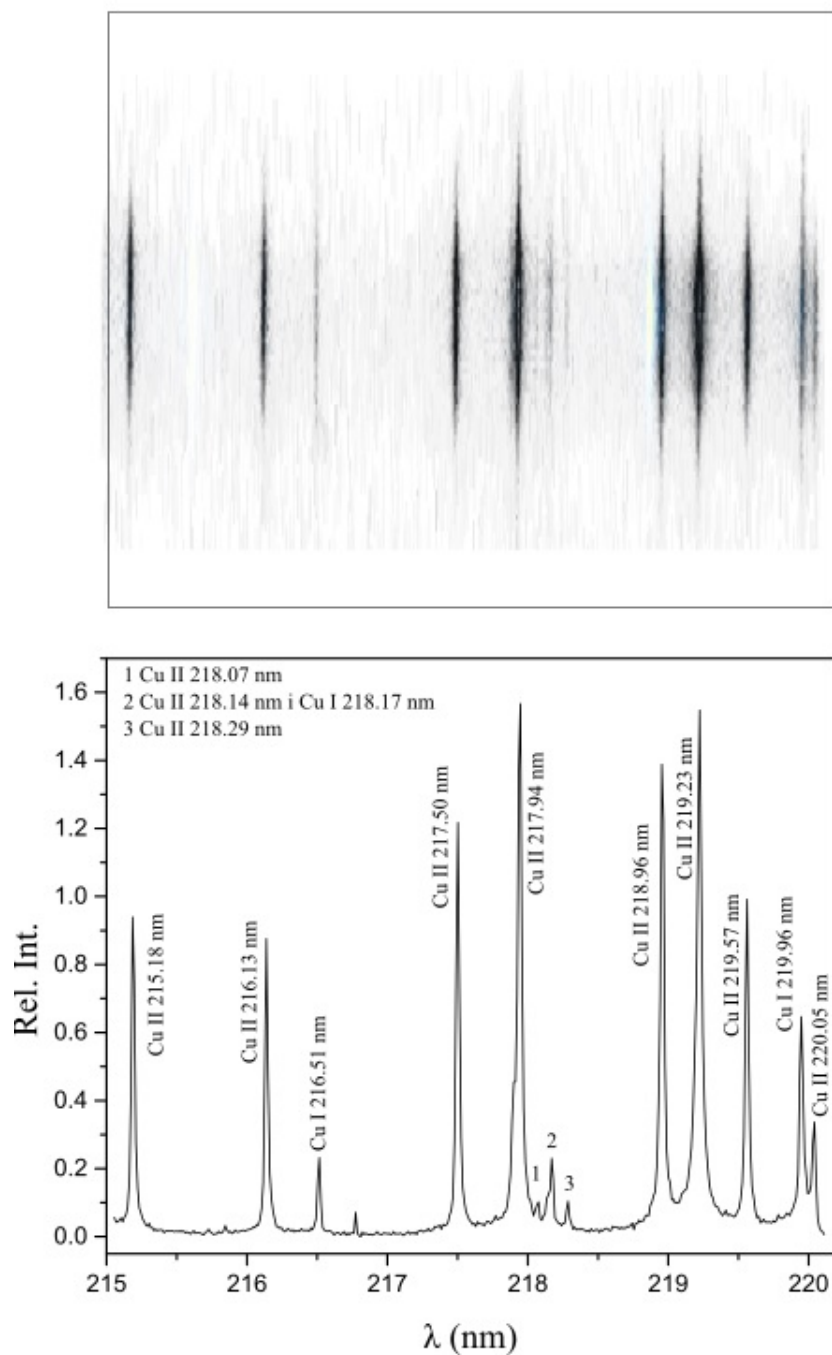
Specifičan način da se redukuje šum posle inverzne Abelove transformacije je da se umesto emisije sa određenog radijusa koristi emisija iz prstena debljine Δr . Na taj način intenzitet linije je definisan kao

$$L_{r_0, \Delta r}(\lambda) = \frac{\int_{r_0}^{r_0 + \Delta r} \epsilon(\lambda, r) 2r\pi dr}{\pi [(r_0 + \Delta r)^2 - r_0^2]}. \quad (\text{A.4})$$

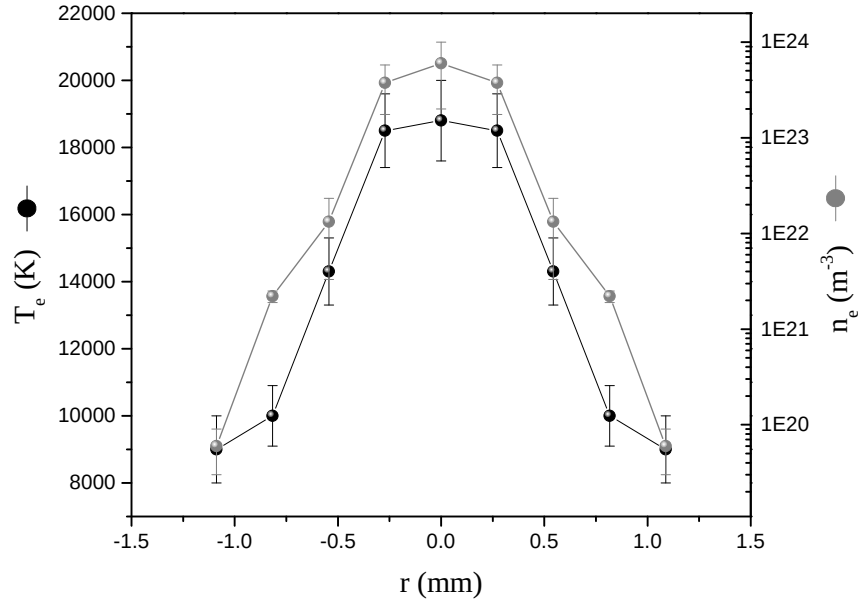
Intenzitet linije je proporcionalan ukupnoj emisiji prstena sa unutrašnjim poluprečnikom r_0 i spoljašnjim prečnikom $r_0 + \Delta r$, normiranim na površinu prstena. Na ovaj način promene koje postoje na emisioj funkciji u rasponu $r_0, r_0 + \Delta r$ su usrednjene, što za posledicu ima znatno umanjeње šuma.

A.1 Primer radijalno razloženih merenja

Spektar 11 linija jona bakra i 3 linije neutralnog bakra na udaljenosti 0.5 mm od mete u 120 ns nakon laserskog impulsa je dat na slici A.1. Radijalne raspodele elektronske temperature i koncentracije su date na slici A.2. Vrednosti elektronske temperature sa slike A.2 su dobijene Saha-Bolcman plotom na osnovu radijalno razloženih relativnih intenziteta 13 Cu I i 10 Cu II spektralnih linija. Primer Saha-Bolcman plotu za vrednosti relativnih intenziteta na osi ($r = 0$ mm) je prikazan

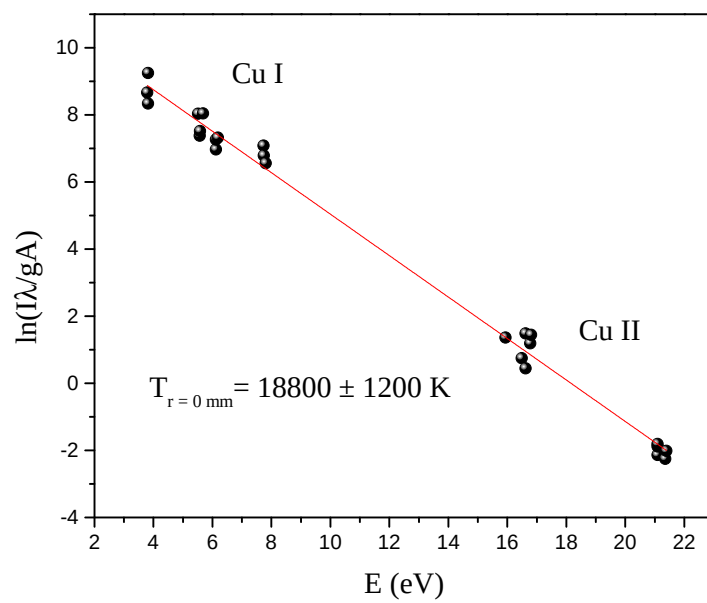


Slika A.1: Tipičan spektar linija bakra 120 ns nakon laserskog impulsa. Spektar je snimljen na udaljenosti od mete od 0.5 mm. Pritisak zaostale atmosfere vazduha je 27 Pa. Na gornjem panelu je dat spektar u "image" modu, dok je na donjem dat isti spektar u FVB modu. Na spektru je indentifikovano 11 spektralnih linija Cu II i 3 linije Cu I.



Slika A.2: Radijalne raspodele elektronske temperature (crne tačke) i koncentracije (sive tačke) dobijen Saha-Bolcman plot metodom. Vrednosti za verovatnoće prelaza, statističke težine nivoa i odgovarajuće energije prelaza su preuzete iz NIST-ove (NIST, 2015) i Kurucz-ove (KURUCZ, 1995) baze podataka.

na slici A.3. Elektronska koncentracija n_e , prikazana na slici A.2, se takodje, dobija iz Saha-Bolcman plota, medjutim, kao što je već napomenuto, parametri fita slabo zavise od n_e što za posledicu ima veliku grešku pri odredjivanju elektronske koncentracije.



Slika A.3: Saha-Boltzman plot dobijen iz 10 spektralnih linija Cu II i 13 linija Cu I duž ose ($r = 0 \text{ mm}$). Odredjeno je da je temperatura $18800 \pm 1200 \text{ K}$.

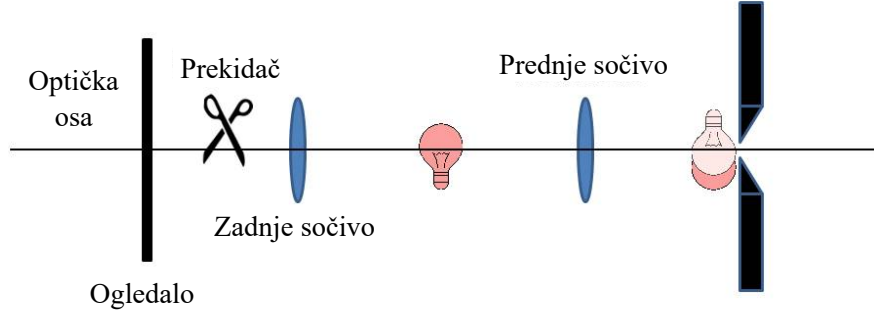
Prilog B

Provera i korekcija spektralnih linija na efekat samoapsorpcije

B.1 Samoapsorpcija plazme

Opisana procedura za inverznu Abelovu transformaciju (odjeljak 2.4.1), tj. primena jednačine 2.15, ima smisao samo u slučaju kada je plazma optički tanka i kada je prisustvo samoapsorpcije na lateralnom profilu zanemarivo. Iz tog razloga je izuzetno važno pre primene odgovarajućeg algoritma za inverznu Abelovu transformaciju proveriti lateralne profile, odnosno spektralne linije, na prisustvo samoapsorpcije.

Pristup koji je korišćen se bazira na upotrebi zadnjeg ogledala (Moon *et al.*, 2009) (Konjević, 1999). Metod se zasniva na snimanju dve slike, $F_2(\lambda, y)$ sa postavljenim zadnjim ogledalom i $F_1(\lambda, y)$ bez ogledala. Metod zadnjeg ogledala je u stvari sistem ravnog ogledala i konkavnog sočiva, koji su pozicionirani tako da proizvedu savršeno preklapanje plazme sa reflektovanom slikom plazme (slika B.1). Na ovaj način reflektovana svetlost je usmerena ponovo ka plazmi i pruža nam mogućnost da procenimo količinu samoapsorpcije.



Slika B.1: Optička postavka obezbeđuje savršeno preklapanje plazme sa reflektovanom slikom plazme. Sijalica imitira oblak laserski proizvedene plazme.

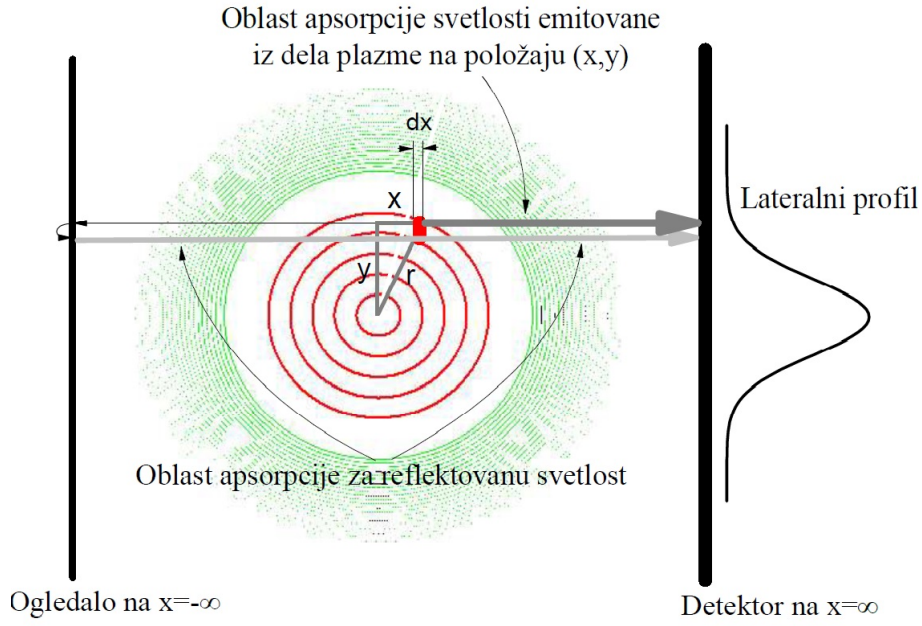
Obzirom na aksijalnu simetriju plazme, pretpostavljeno je da je i koeficijent apsorpcije aksijalno simetričan i da zavisi samo od radijusa i talasne dužine ($k(\lambda, r)$). Količina svetla koja dolazi iz dela plazme debljine dx i nalazi se na liniji posmatranja y na poziciji x (slika B.2) je:

$$dF_1(\lambda, r) = \epsilon(\lambda, r) dx e^{-\int_x^\infty k(\lambda, r) dx'}. \quad (\text{B.1})$$

Član $e^{-\int_x^\infty k(\lambda, r) dx'}$ predstavlja meru apsorpcije svetlosti koju je emitovao deo plazme sa pozicije (x, y) prolazeći kroz apsorber $k(\lambda, r)$ sve do detektora na poziciji $(x \rightarrow \infty, y)$. Radi lakše upotrebe člana $e^{-\int_x^\infty k(\lambda, r) dx'}$ uvedene su dve pomoćne funkcije $urf(\lambda, x, y) = \int_0^x k(\lambda, r) dx'$ i $urfc(\lambda, x, y) = \int_x^\infty k(\lambda, r) dx'$. Funkcija urf određuje optičku debljinu merenu od 0 do x , dok $urfc$ određuje optičku debljinu od x do beskonačnosti. Tokovi funkcija urf i $urfc$ su dati na slici B.3. Uvodeći ove pomoćne funkcije može se napisati

$$e^{-\int_x^\infty k(\lambda, r) dx'} = e^{-urfc(\lambda, x, y)}. \quad (\text{B.2})$$

Pretpostavimo da funkcija $k(\lambda, r)$ opada brže od $1/r$, onda postoji rešenje integrala



Slika B.2: Zbog jednostavnosti zona plazme koja emituje (crvena boja) i zona koja apsorbira zračenje (zelena boja) su odvojene. Sa tamno sivom bojom označena je oblast apsorpcije direktno emitovanog zračenja iz dela plazme na (x, y) . Odgovarajuća optička debljina je $\int_x^\infty k(\lambda, r)dx$. Svetlo sivom bojom je označena apsorpcija reflektovanog zračenja, odgovarajuće optičke debljine $\int_{-\infty}^\infty k(\lambda, r)dx$.

$\int_0^\infty k(\lambda, r)dx$ i njegova vrednost C zavisi samo od y , odnosno

$$urf(\lambda, \infty, y) = \int_0^\infty k(\lambda, r)dx = C(y). \quad (B.3)$$

Takodje,

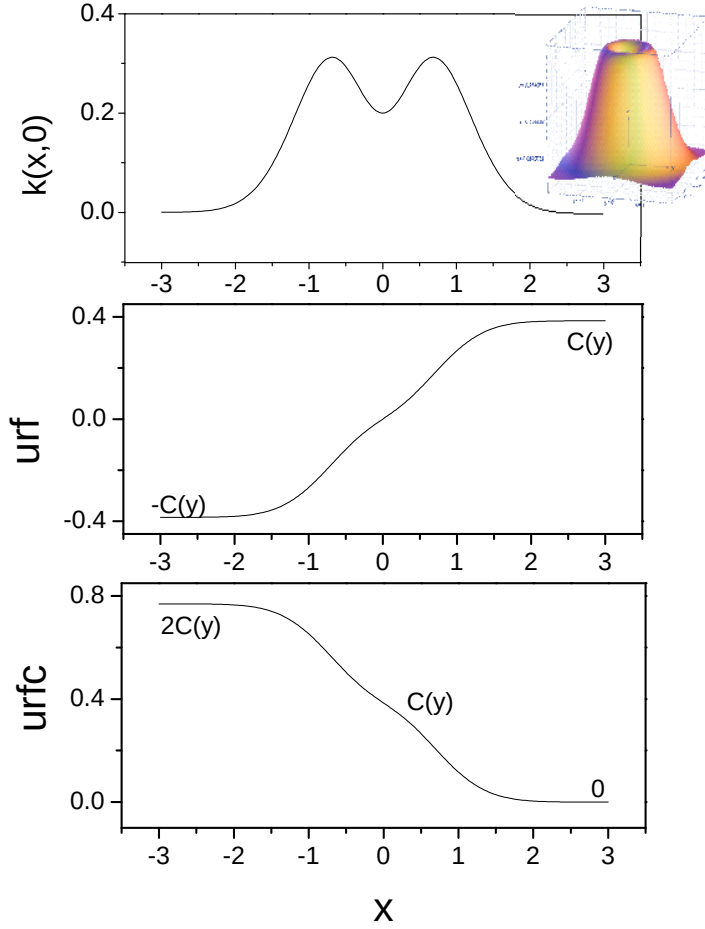
$$urf(\lambda, -x, y) = \int_0^{-x} k(\lambda, r)dx' = - \int_0^x k(\lambda, r)dx' = -urf(\lambda, x, y) \quad (B.4)$$

dakle, funkcija $urf(\lambda, x, y)$ je neparna. Funkcija $urfc$ može se izraziti preko urf funkcije kao

$$urfc(\lambda, x, y) = C(\lambda, y) - urf(\lambda, x, y). \quad (B.5)$$

Očigledno je da funkcija $urfc$ nije ni parna ni neparna, i ima sledeće karakteristike:

$$\begin{aligned} urfc(\lambda, x \rightarrow \infty, y) &= 0 \\ urfc(\lambda, x = 0, y) &= C(\lambda, y) \\ urfc(\lambda, x \rightarrow -\infty, y) &= 2C(\lambda, y) \end{aligned} \quad (B.6)$$



Slika B.3: Tok funkcija $urf(\lambda, x, y)$ i $urfc(\lambda, x, y)$ za zadatu osnosimetričnu raspodelu funkcije $k(x, y)$.

Maksimalna vrednost funkcije $urfc$ je $2C(\lambda, y)$, gde konstanta $C(\lambda, y) = \int_0^\infty k(\lambda, r)dx$ zavisi samo od visine y i specifične forme $k(\lambda, r)$. Ako je $C(\lambda, y) \ll 1$, slučaj kada je korekcija na samoapsorpciju moguća, izraz B.1 postaje:

$$dF_1(\lambda, y) \approx \epsilon(\lambda, r)dx (1 - urfc(\lambda, r)) = \epsilon(\lambda, r)dx (1 - (C(\lambda, y) - urf(\lambda, r))) \quad (B.7)$$

Totalni intenzitet duž linije posmatranja, na visini y je

$$F_1(\lambda, y) = \int_{-\infty}^{\infty} dF_1(\lambda, y) = (1 - C(\lambda, y)) \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon(\lambda, r)dx + \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon(\lambda, r)urf(\lambda, r)dx. \quad (B.8)$$

Poslednji integral $\int_{-\infty}^{\infty} \epsilon(\lambda, r)urf(\lambda, r)dx \equiv 0$ iz razloga što je proizvod parne funkcije ϵ i neparne funkcije urf je neparna funkcija. Gornji izraz se može zapisati u obliku:

$$F_1(\lambda, y) = F_0(\lambda, y)(1 - C(\lambda, y)). \quad (\text{B.9})$$

gde je F_1 izmereni intenzitet usrednjen po liniji posmatranja bez zadnjeg ogledala, dok je $F_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon(\lambda, r) dx$ intenzitet koji bi izmerili u slučaju zanemarive samoapsorpcije.

Kada se ogledalo postavi na mesto, deo zračenja se vraća kroz plazmu. Zbog samoapsorpcije samo transmitovani deo ovog reflektovanog zračenja dolazi do detektora:

$$F_2(\lambda, y) = F_1(\lambda, y) + G \cdot F_1(\lambda, y) \cdot T(\lambda, y). \quad (\text{B.10})$$

Vrednost $G < 1$ karakteriše reflektovani deo svetla, uzimajući u obzir koeficijent refleksije ogledala, transmisiju sočiva, prostorni ugao itd, dok je $T(\lambda, y) = e^{-\int_{-\infty}^{\infty} k(\lambda, r) dx}$ koeficijent transmisije. Za mali koeficijent apsorpcije transmisija se može izraziti kao

$$T(\lambda, y) \approx 1 - \int_{-\infty}^{\infty} k(\lambda, r) dx = 1 - \text{urfc}(x \rightarrow \infty, y) = 1 - 2C(\lambda, y). \quad (\text{B.11})$$

Dakle, za izmereni lateralni profil F_2 , snimljen sa zadnjim ogledalom, može da se napiše

$$F_2(\lambda, y) = F_1(\lambda, y) + G \cdot F_1(\lambda, y) \cdot (1 - 2C(\lambda, y)). \quad (\text{B.12})$$

Koristeći jednačine B.9 i B.12 može da se izračuna lateralni profil F_0 koji bi dolazio detektora u slučaju da nema samoapsorpcije:

$$F_0(\lambda, y) = \frac{2F_1(\lambda, y)}{1 + \frac{F_2(\lambda, y) - F_1(\lambda, y)}{GF_1(\lambda, y)}}. \quad (\text{B.13})$$

Član $(F_2(\lambda, y) - F_1(\lambda, y))/(GF_1(\lambda, y))$ predstavlja transmisiju (jednačina B.10). Za optički tanku plazmu, $T = 1$, i korigovani lateralni profil F_0 je jednak profilu F_1 , snimljenim bez ogledala. Ako postoji samoapsorpcija, intenzitet korigovanog lateralnog profila biće veći iz razloga što je $T < 1$.

Jednačina B.13 važi za svaku snimljenu talasnu dužinu. Treba naglasiti da se pre

primene jednačine B.13 treba ukloniti bazna linija sa snimaka F_1 i F_2 . Pogodna metoda za uklanjanje bazne linije je predstavljen u (Bukvić & Spasojević, 2005).

Pre primene B.13 potrebno je odrediti konstantu G , efektivni deo koji se reflektuje od zadnjeg ogledala. Ova veličina se uobičajno određuje sa krila linija, gde je apsorpcija zanemarljiva, kao odnos $G = \frac{F_2 - F_1}{F_1}$. Određjivanje G iz kontinuuma je takodje pogodno iz razloga što kontinuum nije samoapsorbovan u standardnim eksperimentima.

Veoma je važno proceniti količinu samoapsorpcije pre primene jednačine B.13, jer je korekcija smisljena samo ako je optička debljina $C(\lambda, y) \ll 1$. Jednostavan metod je da se izračuna apsorpcija,

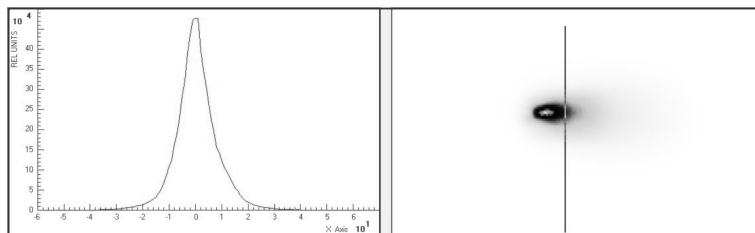
$$A(\lambda, y) = 1 - T(\lambda, y) = 1 - \frac{F_2(\lambda, y) - F_1(\lambda, y)}{GF_1(\lambda, y)}, \quad (\text{B.14})$$

za lateralni profil na mestu gde linija dostiže maksimum. Ako je plazma optički tanka, vrednost apsorpcije treba da bude konstantna duž lateralnog profila i blizu nuli. Loša procena konstante G dovodi do konstante apsorpcije duž lateralnog profila, ali sa vrednostima koje su udaljene od nule. Jasan maksimum apsorpcionog koeficijenta označava prisustvo samoapsorpcije i ukoliko je manji od 0.5 može se primeniti opisana procedura (jednačina B.13).

B.1.1 Primer korekcije linije na samoapsorpciju

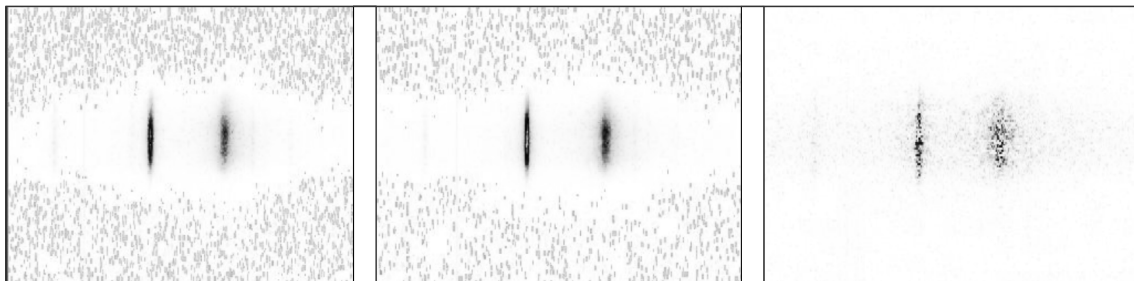
Na slici B.4 prikazana je slika plazme snimljena u nultom redu spektrografa. Na levoj slici prikazan je lateralni profil na poziciji naznačenoj na desnoj slici. Primetna je određena asimetrija u lateralnom profilu i posledica je fluktuacija koje se javljaju u obliku plazme. Nesavršenost u poravnjavanju optičkog sistema takodje može da doprinese asimetriji lateralnog profila. Sve slike su snimljene u smanjenoj rezoluciji sa 128 tačaka u vertikalnom pravcu, zbog boljeg odnosa signal/šum.

Na slici B.5 prikazan je spektar linija bakra na 240 nm snimljen bez zadnjeg ogledala



Slika B.4: Fotografija plazme snimljena u $0.5 \mu\text{s}$ nakon laserskog impulsa, na rastojanju 1 mm od mete. Pritisak vazduha u komori je bio 7000 Pa.

(levi panel) i sa ogledalom (srednji panel). Na trećem panelu je prikazana razlika ove dve slike, oduzimanjem prve od druge slike. Treća slika ilustruje efekat zadnjeg ogledala.

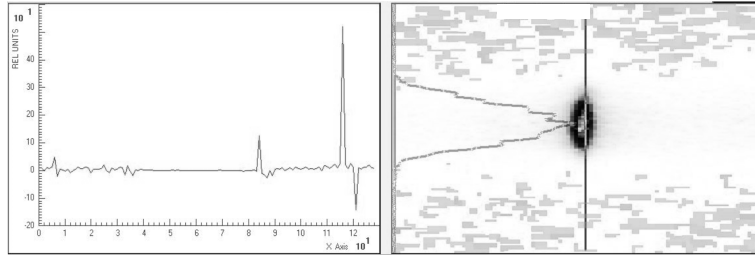


Slika B.5: Spektar bakra na 240 nm, snimljena bez ogledala (levi panel), sa ogledalom (srednji panel). U oba slučaja pozadina je uklonjena primenjujući numeričku proceduru objašnjenu u (Bukvić & Spasojević, 2005). Svetlo siva boja koja se pojavljuje na periferiji slika ukazuje na tačke sa negativnim vrednostima koje su nastale usled uklanjanja pozadine. Poslednja slika, skroz desno, dobijena je oduzimanjem prve slike od druge.

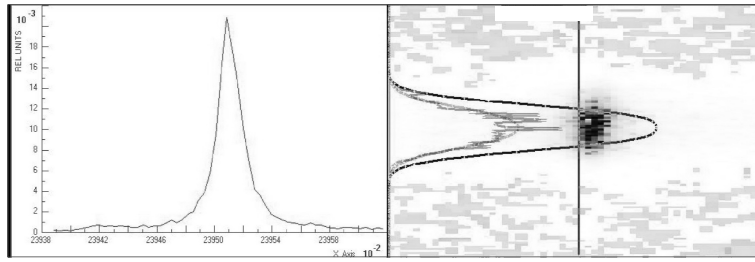
Levi panel sa slike B.6 prikazuje apsorpcioni profil duž y ose procenjene na poziciji naznačenoj na spektralnoj liniji sa desnog panela. Može se primetiti da je apsorpcija skoro konstantna, sa vrednosti veoma blizu nuli duž celog intervala. Oslanjajući se na ovu činjenicu može se primeniti procedura za korekciju samoapsorpcije. Korigovana slika, dobijena primenjujući jednačinu B.13 je data na slici B.7, desni panel.

Po našoj analizi može se primeniti inverzni Abelov transform na lateralni profil korigovanog spektra. Spektralna linija na levom panelu odgovara emisiji iz centralnog regiona plazme, sa unutrašnjim radijusom $\approx 0.26 \text{ mm}$ i spoljašnjim $\approx 0.52 \text{ mm}$.

Na integralnom spektru (FVB) je ilustrovano kako predložena korekcija utiče na profile spektralnih linija. Na ovaj način izbegnut je uticaj inverzne Abelove transformacije, a sa druge strane jednostavno je uporediti profile i intenzitete spektralnih

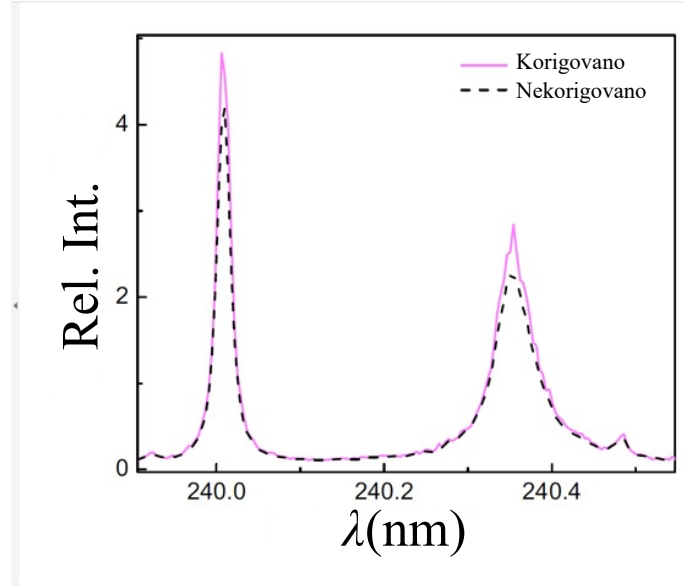


Slika B.6: Apsorpcija duž lateralnog profila procenjena na poziciji naznačenoj na slici. Konstanta G , koja kvantifikuje količinu svetla koja se reflektuje od zadnjeg ogledala, procenjena je na $G = 0.15$. Fitovanjem horizontalne linije srednja vrednost apsorpcije je procenjena na 0.021 ± 0.11



Slika B.7: Spektar korigovan po jednačini B.13. Plavom linijom označen je lateralni profil, sa purpurnom je označen profil najboljeg fita, funkcije sa tri Gausijana. Sa žutom je prikazan inverzni Abelov profil. Na levom panelu prikazana je spektralna linija Cu II 240.01 nm, nakon što je primenjena procedura za inverzni Abelov transform. Profil linije, $L_{r_0=5, R=5}(\lambda)$ odgovara integralnoj emisiji sa prstena unutrašnjeg radijusa 0.26 mm i spoljašnjeg radijusa 0,52 mm.

linija pre i posle korekcije. Na slici B.8 su dati FVB spektri (240.01 nm and 240.33 nm Cu II spektralnih linija) pre i posle korekcije. Mala razlika je izazvana usled prisustva samoapsorpcije, u proseku 0.02 i generalno manjom od 0.11. Tabela B.1 prikazuje vrednosti širine i visine ovih linija nakon korekcije. Može se zaključiti da je za Cu II 240.01 nm liniju samoapsorpcija zanemarljiva, dok je za Cu II 240.33 nm širina linije manja za $\sim 5\%$ nakon korekcije. Više izražena samoapsorpcija kod linije 240.33 nm može se povezati sa značajno većom verovatnoćom prelaza $A_{240.33} = 1 \cdot 10^8$ 1/s u odnosu na $A_{240.01} = 0.078 \cdot 10^8$ 1/s (Kono & Hattori, 1982).



Slika B.8: Spektar Cu II linija na 240.01 nm i 240.33 nm u FVB modu. Sa crnom linijom prikazani su nekorigovani profili, dok je korigovani spektar prikazan purpurnom bojom. Odredjena količina jedva primetne samoapsorpcije je korigovana primenjujući jednačinu B.13.

Table B.1: FWHM and visine linija su procenjene fitovanjem profila na Lorencov profil.

	Cu II 240.01 nm	
	FWHM (pm)	Visina (relativne jedinice)
Nekorigovano	18.55 ± 0.26	4.31 ± 0.04
Korigovano	18.50 ± 0.50	4.99 ± 0.08
	Cu II 240.33 nm	
	FWHM (pm)	Visina (relativne jedinice)
Nekorigovano	54.32 ± 0.7	2.190 ± 0.016
Korigovano	51.72 ± 1.1	2.559 ± 0.030

Prilog C

Granice važenja hidrodinamičkog modela

Granica važenja hidrodinamičkog modela definisana je odnosom srednjeg slobodnog puta (ili kolizionom dužinom) λ , i dužinom gradijenta L , $K_n = \lambda/L$. Kao rezultat opisane simulacije se mogu dobiti oblasti u kojima je hidrodinamički pristup opravdan i one u kojima nije. Za procenu dužine gradijenta je uzeta veličina koja se najbrže menja, tj. ukupna koncentracija teških čestica i definisana je kao:

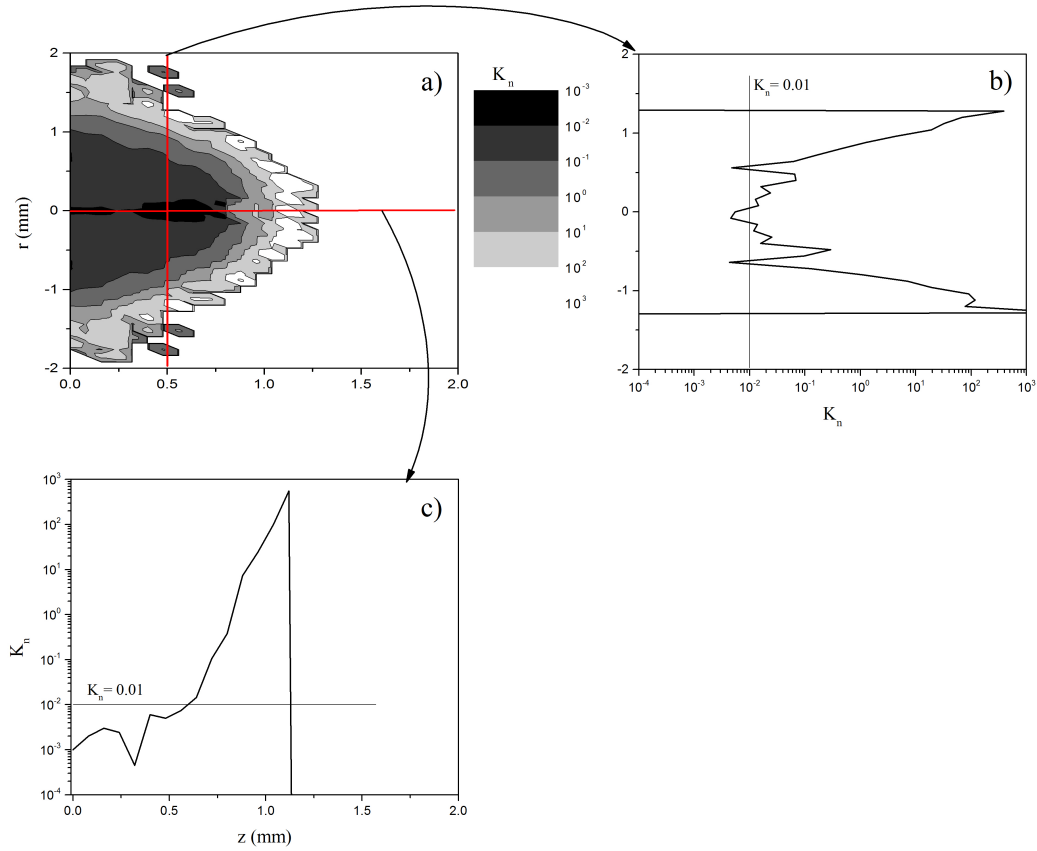
$$L = \left| \frac{n}{\partial n / \partial r} \right|. \quad (\text{C.1})$$

Kao što je napomenuto čestični efekti su приметni već na $K_n \approx 0.01$, u daljim razmatranjima podrazumevaćemo da hidrodinamički model ima zadovoljavajuću tačnost za $K_n < 0.01$. Srednji slobodni put naelektrisanih čestica u plazmi je definisan kao $\lambda = \langle v \rangle / \nu_{ii}$, gde je $\langle v \rangle$ srednja brzina čestica, a ν_{ii} frekvencija *jon-jon* sudara. Ovakva definicija za λ , koja uzima u obzir teške čestice umesto elektrona, je odabrana zato što kretanje teških čestica definiše gradijente koncentracije. Frekvencija *jon-jon* sudara je data jednačinom (Callen, 2006):

$$\nu_{ii} = \frac{4\pi}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{nz^4e^4}{m^2 \langle v \rangle^3} \ln\Lambda, \quad (\text{C.2})$$

gde je n koncentracija, a m masa jona. $\ln\Lambda$ je Kulonov logaritam, a e elementarno naelektrisanje.

Na slici C.1 su date vrednosti Knudsenovog broja 120 ns nakon laserskog impulsa. Na panelima b) i c) su naznačene granične vrednosti za K_n . Sa slike C.1 se može zaključiti da je samo središte plazme u hidrodinamičkom režimu ($K_n < 0.01$), dok vrednosti K_n na periferiji prelaze vrednost 10. Ovakav rezultat na periferiji se može i očekivati jer je masa vodonika daleko manja od mase bakra i čestice bakra se nesmetano šire u okolni prostor.

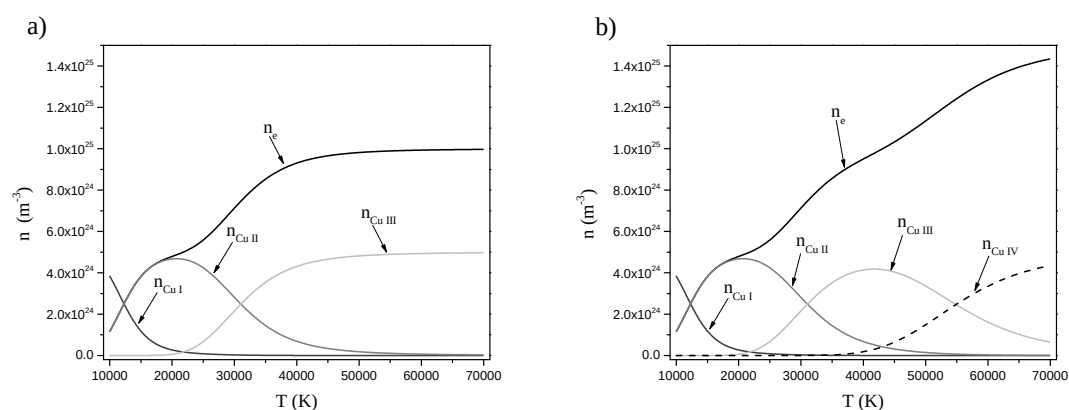


Slika C.1: Vrednost Knudsenovog broja K_n u 120 ns nakon laserskog impulsa za metu od bakra i pritisak vodonika od 200 Pa. Panel a) vrednosti $K_n(z, r)$ u celoj zapremini plazme. Vrednosti $K_n(z, r)$ su predstavljeni u crno-beloj skali. Skala boja je logaritamska i ide od crne (najniža vrednost) do bele (najviša vrednost). Panel b) Vrednost $K_n(z = 0.5 \text{ mm}, r)$ duž radijusa na položaju 0.5 mm od mete. Položaj je naznačen vertikalnom linijom na panelu a). Panel c) Vrednost $K_n(z, r = 0 \text{ mm})$ duž ose $r = 0$ mm. Položaj ose je naznačen na panelu a) horizontalnom linijom.

Prilog D

Brzina ekspanzije, stepen jonizacije, LTE i početni uslovi

U dosadašnjem razmatranju prikazani su rezultati simulacije koji uključuju samo prva tri jonizaciona stanja. Ovo uprošćenje je opravdano ukoliko početna temperatura nije suviše visoka. Na slici D.1 su prikazane koncentracije različitih jonizacionih stanja za raspon temperatura od 10000 K do 70000 K i ukupnu koncentraciju bakra od $5 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$. Na osnovu rezultata sa slike D.1 se može zaključiti da je

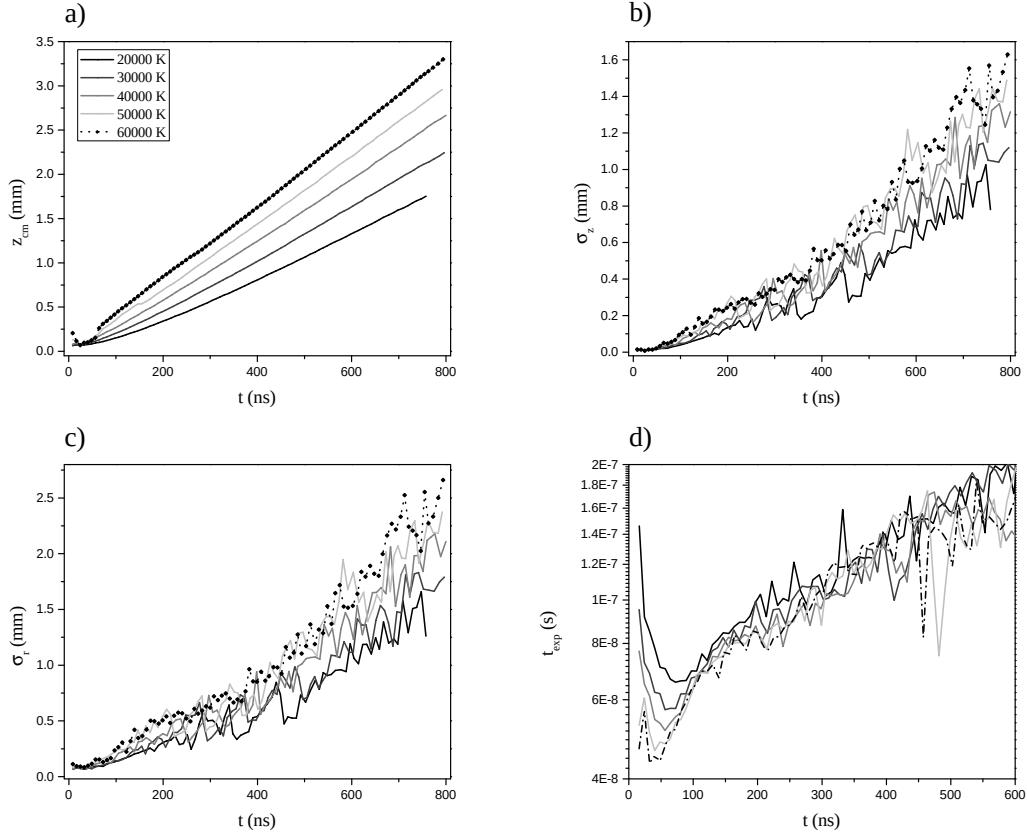


Slika D.1: Koncentracije različitih jonizacionih stanja čestica bakra za različite temperature i ukupnu koncentraciju bakra od $5 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$. Slika a) stepen jonizacije kada su uključena prva tri jonizaciona stanja. Slika b) stepen jonizacije kada su uključena prva četiri jonizaciona stanja. Na slikama su naznačene koncentracije odgovarajućih jonizacionih stanja i elektronska koncentracija.

razlika u stepenu jonizacije, koncentracijama različitih stanja i elektronskoj koncen-

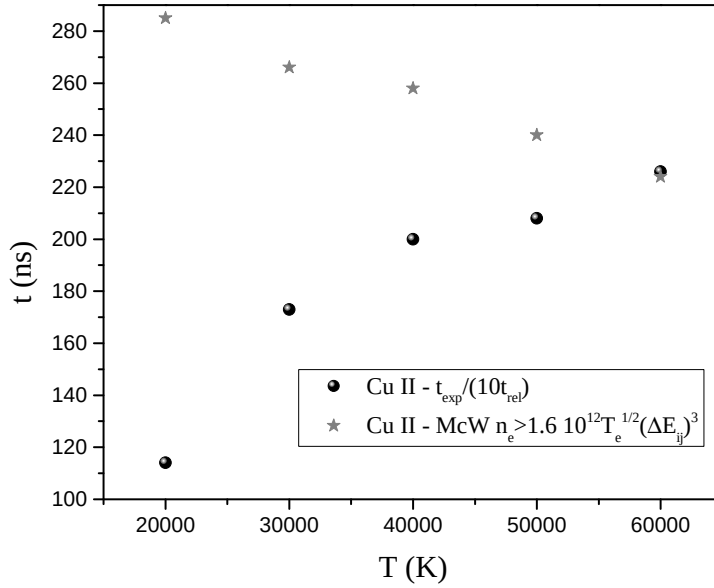
traciji, kada su uključena prva tri i prva četiri jonizaciona stanja zanemarljiva na temperaturama ispod 40000 K.

U daljim razmatranjima jonizaciono stanje Cu IV će biti uzeto u obzir samo u simulacijama sa početnom temperaturom većom od 40000 K. Na slici D.2 su prikazani



Slika D.2: Rezultati koji opisuju različito ponašanje plazme u zavisnosti od izbora početne temperature (legenda boja je data na slici a)). Slika a) položaji centra mase plazme, slika b) mera rasipanja čestica izračunata na osi plazme, slika c) mera rasipanja čestica izračunata po radijusu plazme i slika d) vreme ekspanzije plazme $t_{exp} \approx n/|\partial n/\partial t|$. Rezultati su dobijeni iz simulacije za ukupnu koncentraciju bakra od $n = 5 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$, inicijalnu zapreminu $V = 0.1 \text{ mm}^3$ i pritisak okolnog gasa, vodonika, od 200 Pa.

rezultati simulacija za pet različitih početnih temperatura plazme za koncentraciju bakra $5 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$, inicijalnu zapreminu $V = 0.1 \text{ mm}^3$ i pritisak vodonika od 200 Pa. Sa slike pod a) se može zaključiti da se položaji centra mase plazme nakon $\sim 60 \text{ ns}$ praktično ravnomerno udaljava od mete. Kako u simulaciji nema spoljašnjih sila, ovakvo ponašanje je i očekivano. Standardne devijacije sa slike pod b) i c) karakterišu meru razletanja plazme. Odnos standardnih devijacija duž radijusa i duž ose od ~ 2 je posledica postojanja mete, zida, na $z = 0 \text{ mm}$. Sa povećanjem početne temperature ukupna energija sistema je veća pa je za očekivati da brzina



Slika D.3: Vremena napuštanja LTE usled Mekverterovog kriterijuma (★) i usled ekspanzije plazme (●) za različite početne temperature plazme.

kretanja centra mase, brzina razletanja čestica i vreme ekspanzije budu veći za veću početnu temperaturu, što pokazuju rezultati sa slike D.2.

U odeljku 4.3 razmatran je slučaj odstupanja od LTE usled ekspanzije plazme i usled narušenja Mekverterovog kriterijuma. Polazeći od istih pretpostavki za vreme relaksacije, na slici D.3 su prikazana vremena u kojima sistem napušta LTE usled ekspanzije plazme i usled narušenja Mekverterovog kriterijuma za različite početne temperature plazme. Na slici D.2 d) su prikazana vremena relaksacija plazme za različite početne temperature plazme. Na osnovu rezultata sa slike D.3 može se zaključiti da je razlika između ova dva kriterijuma za napuštanje LTE veća za niže početne temperature, dok je za dovoljno visoku početnu temperaturu zanemariva. Treba imati u vidu da ovakav rezultat može da zavisi od orijentacije vektora brzina čestica u početnom trenutku (u simulaciji je pretpostavljeno da je raspodela izotropna).

Literatura

- AGUILERA, J. & ARAGÓN, C. (2007). Multi-element saha–boltzmann and boltzmann plots in laser-induced plasmas. *Spectrochimica Acta Part B* .
- AMORUSO, S. (1999). Modeling of uv pulsed-laser ablation of metallic targets. *Appl. Phys. A* .
- BECKER, M. F., BROCK, J. R., CA, H., HENNEKE, D. E., KETO, J. W., LEE, J., NICHOLS, W. T. & GLICKSMAN, H. D. (1998). Metal nanoparticles generated by laser ablation. *Nanostructured Mater.* .
- BIRD, G. A. (1994). Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. *Clarendon Press* .
- BIRD, G. A. (2013). The dsmc method .
- BOGAERTS, A., CHEN, Z., GIJBELS, R. & VERTES, A. (2003). Laser ablation for analytical sampling: what can we learn from modeling? *Spectrochimica Acta Part B* .
- BOYD, I. D. (1996). Conservative species weighting scheme for the direct simulation monte carlo method. *Journal Of Thermophysucs and Heat* .
- BUKVIĆ, S. & SPASOJEVIĆ, D. (2005). An alternative approach to spectrum base line estimation. *Spectrochim. Acta Part B* .
- BURGER, M., SKOČIĆ, M., LJUBISAVLJEVIĆ, M., NIKOLIĆ, Z. & DJENIŽE, S. (2014a). Spectroscopic study of the laser-induced indium plasma. *Eur. Phys. J. D* .

- BURGER, M., SKOČIĆ, M., NIKOLIĆ, Z., BUKVIĆ, S. & DJENIŽE, S. (2014b). Broadening of the resonance cu i lines in the laser-induced copper spectrum. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* .
- CALLEN, J. (2006). Fundamentals of plasma physics .
- CHOIA, Y.-K., IMB, H.-S. & JUNG, K.-W. (1999). Laser ablation of graphite at 355 nm: cluster formation and plume propagation. *International Journal of Mass Spectrometry* .
- CHUNG, H., CHEN, M., MORGAN, W., RALCHENKO, Y. & LEE, R. (2005). Flychk: Generalized population kinetics and spectral model for rapid spectroscopic analysis for all elements. *High Energy Density Physics* .
- CRISTOFORETTI, G., GIACOMO, A. D., DELL'AGLIO, M., LEGNAIOLI, S., TOGNONI, E., PALLESCHI, V. & OMENETTO, N. (2010). Local thermodynamic equilibrium in laser-induced breakdown spectroscopy: beyond the mcwhirter criterion. *Spectrochim. Acta Part B* .
- CVEJIĆ, M., GAVRILOVIĆ, M., JOVIĆEVIĆ, S. & KONJEVIĆ, N. (2013). Stark broadening of mg i and mg ii spectral lines and debye shielding effect in laser induced plasma. *Spectrochim. Acta Part B* .
- DRAWIN, H. W. (1983). Spectroscopic plasma diagnostics. *Springer US* .
- EASON, R. (2007). Pulsed laser deposition of thin films: Applications-led growth of functional materials. *John Wiley & Sons* .
- ELIEZER, S. (2002). The interaction of high-power lasers with plasmas. *Institute of Physics Publishing Bristol and Philadelphia* .
- FARID, N., HARILAL, S. S., DING, H. & HASSANEIN, A. (2014). Emission features and expansion dynamics of nanosecond laser ablation plumes at different ambient pressures. *J. Appl. Phys.* .

- GARRELIE, F., AUBRETON, J. & CATHERINOT, A. (1998). Monte carlo simulation of the laser-induced plasma plume expansion under vacuum: Comparison with experiments. *J. Appl. Phys.* .
- GARRELIE, F. & CATHERINOT, A. (1999). Monte carlo simulation of the laser-induced plasma-plume expansion under vacuum and with a background gas. *Appl. Surf. Sci.* .
- GRIEM, H. R. (1974). Spectral line broadening by plasmas. *Acad. Press, New York* .
- IGNJATOVIĆ, L. & MIHAJLOV, A. (2002). The realization of abel's inversion in the case of discharge with undetermined radius. *JQSRT* .
- ITINA, T., HERMANN, J., DELAPORTE, P. & SENTIS, M. (2002). Laser-generated plasma plume expansion: Combined continuous-microscopic modeling. *Phys. Rev. E* .
- JAGDISH, P. & THAKUR, S. N. (2007). Laser-induced breakdown spectroscopy. *Elsevier* .
- JEANS, J. H. (1921). The dynamical theory of gases. *Cambridge University Press* .
- JEONG, S. H., GREIF, R. & RUSSO, R. E. (1988). Numerical modeling of pulsed laser evaporation of aluminum targets. *Appl. Surf. Sci.* .
- KONJEVIĆ, N. (1999). Plasma broadening and shifting of non-hydrogenic spectral lines: present status and applications. *Phys. Rep.* .
- KONO, A. & HATTORI, S. (1982). Lifetimes and transition probabilities in cu ii. *J. Opt. Soc. Am.* .
- KURUCZ (1995). Atomic spektral line database .
- MCWHIRTER (1965). Plasma diagnostic techniques. *Academic Press, New York* .

- MOON, H.-Y., HERRERA, K., OMENETTO, N., SMITH, B. & WINEFORDNER, J. (2009). On the usefulness of a duplicating mirror to evaluate self-absorption effects in laser induced breakdown spectroscopy. *Spectrochim. Acta Part B* .
- NANBU, K. (1997). Theory of cumulative small-angle collisions in plasmas. *Phys. Rev. E* .
- NANBU, K. & YONEMURA, S. (1998). Weighted particles in coulomb collision simulations based on the theory of a cumulative scattering angle. *J. Comput. Phys.* .
- NESTOR, H. & OLSEN, H. (1960). Numerical methods for reducing line and surface probe data. *SIAM Rev.* .
- NIST (2015). Nist atomic spectra database .
- READY, J. F. (1971). Effects of high power laser radiation. *Acad. Press* .
- REZAEI, F. & TAVASSOLI, S. H. (2012). Numerical and experimental investigation of laser induced plasma spectrum of aluminum in the presence of a noble gas. *Spectrochim. Acta Part B* .
- SHABANOV, S. V. & GORNUSHKIN, I. B. (2014). Two-dimensional axisymmetric models of laser induced plasmas relevant to laser induced breakdown spectroscopy. *Spectrochim. Acta Part B At. Spectrosc.* .
- SKOČIĆ, M., BURGER, M., NIKOLIĆ, Z., BUKVIĆ, S. & ZE, S. D. (2013). Stark broadening in the laser-induced cu i and cu ii spectra. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* .
- SPITZER, L. (1967). Physics of fully ionized gases. *Interscience, New York* .
- TAKIZUKA, T. & ABE, H. (1977). A binary collision model for plasma simulation with a particle code. *J. Comput. Phys.* .
- VAN DER MULLEN, J. (1990). Excitation equilibria in plasmas; a classification. *Phys. Rep.* .

- VINCENTI, W. G. & KRUGER, C. H. (1965). Introduction to physical gas dynamics. *John Wiley & Sons* .
- WATANABE, K. & IGUCHI, T. (1999). Modeling of vaporization processes of resonant laser ablation. *Appl. Phys. A Mater. Sci. Process.* .
- WU, J. S., TSENG, K. C. & KUO, C. H. (). Application of local mesh refinement in the dsmc method. In: *Rarefied Gas Dynamics: 22nd International Symposium*.
- YALCIN, S., CROSLLEY, D. R., SMITH, G. P. & FARIS, G. P. (1999). Influence of ambient conditions on the laser air spark. *Appl. Phys B* .