

Donkó, Zoltán, and Máté Vass. 2025. *Alacsony hőmérsékletű Plazmafizika*.

Budapest, Hungary: HUN-REN Wigner Research Centre for Physics.

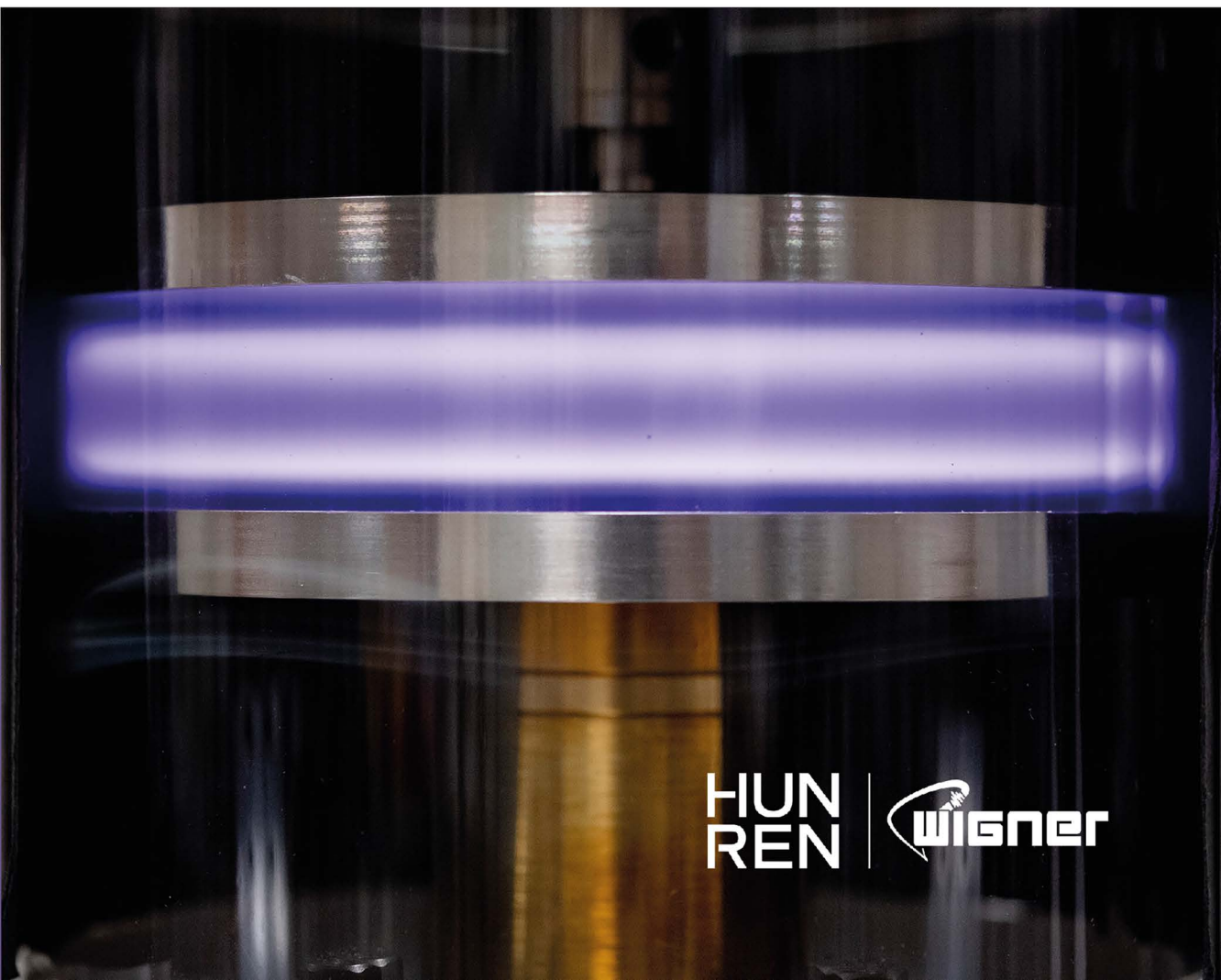
Series: Volume 2. All Colors of Physics: Sokszínű Fizika.

<https://doi.org/10.70487/978-615-6809-03-2>



DONKÓ ZOLTÁN, VASS MÁTÉ

ALACSONY HŐMÉRSÉKLETŰ PLAZMAFIZIKA



Donkó Zoltán, Vass Máté

ALACSONY HŐMÉRSÉKLETŰ PLAZMAFIZIKA

All Colors of Physics – Sokszínű fizika

Donkó Z; Vass M. Alacsony hőmérsékletű plazmafizika (2025). <https://doi.org/10.70487/978-615-6809-03-2>

Biró TS. Gintropy (2024). <https://doi.org/10.70487/978-615-6809-01-8>

Donkó Zoltán, Vass Máté

ALACSONY
HŐMÉRSÉKLETŰ
PLAZMAFIZIKA

HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont
Budapest, 2025



© HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont, 2025

© Donkó Zoltán, Vass Máté, 2025

All Colors of Physics – Sokszínű fizika

ISSN 3057-8477 (print)

ISSN 3057-9570 (online)

Sorozatszerkesztő, felelős szerkesztő:

Ván Péter

ISBN 978-615-6809-02-5 (print)

ISBN 978-615-6809-03-2 (e-könyv)

A borítón: Rádiófrekvenciás (BUD v.3) plazmaforrás a HUN-REN Wigner FK
Elektromos Gázkisülésfizikai Laboratóriumában (Fotó: Kovács Márton, 2021)

Technikai szerkesztők:

Fülöp Tamás, Kutnyánszky Anikó, Verle Ilona

Fedélterv:

Gulyás-Szabó Luca

Nyomdai munkák:

Kontraszt Plusz Kft., Pécs

Felelős vezető:

Barta Ákos

Felelős kiadó:

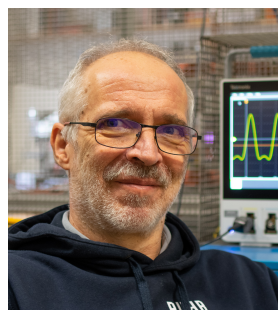
Lévai Péter József

HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont

1121 Budapest, Konkoly-Thege Miklós út 29-33.

A szerzőkről

Donkó Zoltán 1989-ben szerezte meg villamosmérnöki diplomáját a Budapesti Műszaki Egyetemen, majd az MTA Központi Fizikai Kutatóintézetében (KFKI) kezdett el dolgozni. Pályája elején gázlézerek kutatásával foglalkozott, majd érdeklődése a gázlézerek aktív közegeként használt alacsony hőmérsékletű plazmák irányába fordult. Az 1990-es évektől a számítástechnikai háttér folyamatos fejlődése és elnyert OTKA kutatási projektjei lehetőséget adtak a numerikus plazma-modellezési kutatások meghonosításához a munkahelyén. Számos olyan szimulációs kódot fejlesztett ki, amelyek lehetővé tették az alacsony hőmérsékletű plazmák elemi folyamatok szintjén való, kinetikus szintű leírását, valamint erősen csatolt plazmák transzportjelenségeinek és kollektív gerjesztéseinek analízisét. Munkáját 2005-ben az MTA doktora címmel, 2011-ben az MTA Fizikai Díjával, 2017-ben Akadémiai Díjjal ismerték el. Számos külföldi kutatóhellyel folytat együttműködést, ezek közül több egyetemen dolgozott vendégkutatóként (Boston College: Visiting scholar / Osaka University: Guest professor, Specially appointed professor / Ruhr University Bochum: Mercator fellow / Al-Farabi Kazakh National University, Alma-Ata: Visiting professor). Éveken át tanított hazai (BME, ELTE) és külföldi egyetemeken. Jelenleg a HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont kutatóprofesszora, munkája a numerikus plazmamodellek kísérleti validálására és prediktív jellegének erősítésére fókuszál.



Vass Máté 2017-ben szerzett Fizika BSc., 2019-ben pedig kutatófizikusi MSc. diplomát az Eötvös Loránd Tudományegyetemen. 2015-ben kapcsolódott be a Wigner Fizikai Kutatóközpont Elektromos Gázkisülések Csoportjának kutatómunkájába, ahol elektrontranszport-együtthatók kísérleti és szimulációs meghatározásával és kapacitívan csatolt oxigénplazmák modellezésével foglalkozott. Doktori értekezését, melynek témája a kapacitívan csatolt plazmák elektronfűtésének szimulációs vizsgálata, 2024-ben védte meg az Eötvös Loránd Tudományegyetemen, Donkó Zoltán témavezetésével. 2019-től a Bochumi Egyetem (Ruhr University Bochum) tudományos munkatársa, a HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpontban pedig tudományos segédmunkatárs. Jelenlegi témája az atmoszferikus nyomású plazmák kinetikus és folyadékalapú numerikus modellezése.



Édesapám emlékére. (Donkó Z.)
Szüleimnek. (Vass M.)

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
2. Fizikai alapismeretek	9
2.1. Elektrodinamikai alapok	9
2.2. Villamosságtani alapok	18
2.3. A statisztikus fizika elemei	29
3. Plazmafizikai alapfogalmak	37
3.1. A plazmák alapvető jellemzői	37
3.1.1. A Debye-árnyékolás	37
3.1.2. A plazmafrekvencia	44
3.2. A plazma mint dielektrikum	46
3.3. A plazma-fal határréteg	57
3.3.1. A Bohm-kritérium	60
3.3.2. A falpotenciál	62
3.4. Termikus és nemtermikus plazmák	63
3.4.1. Termikus ionizáció	63
3.4.2. Nemtermikus, alacsony hőmérsékletű plazmák – elektro- mos gázkisülések	68
4. Elemi folyamatok, ütközések és hatáskeresztmetszetek	71
4.1. Elemi folyamatok	71
4.1.1. Gázfázisú folyamatok	71
4.1.2. Felületi folyamatok	77
4.2. Bináris ütközések kinematikája	80
4.2.1. Impulzus- és energiaviszonyok bináris ütközésekben	83
4.3. Hatáskeresztmetszetek	87
4.3.1. A teljes hatáskeresztmetszet	87
4.3.2. A differenciális hatáskeresztmetszet	89
4.3.3. A momentum transzfer hatáskeresztmetszet	92
4.3.4. Hatáskeresztmetszetek kapcsolata a tömegközépponti és laboratóriumi rendszerekben	93
4.3.5. Hatáskeresztmetszetek különböző kölcsönhatási potenci- álok mellett	95

4.4.	A szórás kvantummechanikai leírása	102
4.4.1.	A Ramsauer–Townsend-minimum	109
4.4.2.	Példák hatáskeresztmetszetekre	110
5.	A kinetikus elmélet alapjai	113
5.1.	A sebességeloszlás-függvény és a kinetikus egyenlet	113
5.2.	A Boltzmann-egyenlet momentumai	121
5.2.1.	Részecskemérleg	122
5.2.2.	Impulzusmérleg	123
5.2.3.	Energiamérleg	125
5.3.	Diffúzió és mozgékonyosság	126
5.3.1.	Szabad diffúzió	127
5.3.2.	Ambipoláris diffúzió	128
5.4.	A Boltzmann-egyenlet kéttag-közelítéssel megoldása	129
5.4.1.	Az eloszlásfüggvény és a makroszkopikus jellemzők kapcsolata kéttag-közelítés esetén	133
5.4.2.	A sűrűséggradiens-közelítés alapjai	134
6.	Plazmahullámok	139
6.1.	Elektronoszillációk hideg plazmában	142
6.2.	Longitudinális elektrosztatikus hullámok meleg plazmában	143
6.3.	Ionakusztikus hullámok	145
6.4.	Elektromágneses hullámok terjedése hideg plazmában	147
7.	Részecsketranszport Monte-Carlo-szimulációja	149
7.1.	Véletlenszámok előállítása	150
7.1.1.	Véletlen irányú egységvektor előállítása	151
7.1.2.	Maxwell–Boltzmann-sebességeloszlás mintavételezése	153
7.2.	A részecsketranszport leírása	154
7.2.1.	A null-ütközés módszer	160
7.3.	Elektronlavinák és elektrontranszport homogén elektromos térben	162
8.	Egyenfeszültségű gázkisülések	169
8.1.	Az egyenfeszültségű gázkisülések működésének fizikai alapjai	169
8.1.1.	A gáz átütése	169
8.1.2.	Állandósult állapotú gázkisülések	174
8.1.3.	Feszültségvezérelt határrétegek	179
8.1.4.	A pozitív oszlop Schottky-féle modellje	182
8.2.	Üreges katódú gázkisülések	183
8.3.	Alacsony nyomású gázkisülések önkonzisztens leírása	184
8.3.1.	A katód térrész folyadékmodellje	185
8.3.2.	A katód térrész hibrid modellje	188
8.3.3.	Nagy elektródatávolságú gázkisülés kétdimenziós hibrid modellje	190

9. Rádiófrekvenciás plazmaforrások	193
9.1. Kapacitív és induktív táplálású plazmaforrások	193
9.2. Kapacitív csatolású plazmák	195
9.3. Rádiófrekvenciás gázkisülések numerikus leírása	197
9.4. Kapacitív csatolású RF gázkisülések fizikája	203
9.4.1. Energiabecsatolási mechanizmusok	206
9.5. Az RF gázkisülés térrészei	210
9.5.1. A határréteg jellemzői	210
9.5.2. A kvázisemleges térrész jellemzői	213
9.5.3. Az RF plazma impedanciája és elektromos helyettesítőképe	215
9.6. Az ionok jellemzőinek szabályozása kapacitív RF gázkisülésekben	218
9.6.1. Kétfrekvenciás gerjesztés	222
9.6.2. Elektromos aszimmetria effektus	225
9.7. Impedanciaillesztés	229
10. Plazmadiagnosztika	241
10.1. Elektromos szondák	241
10.1.1. A Langmuir-szondák elvi felépítése és alkalmazásának alapjai	241
10.1.2. A mérések elvi alapjai	242
10.2. Optikai spektroszkópia	249
10.2.1. A spektrumok eredete	249
10.2.2. A fénykibocsátás és fényelnyelés atomi folyamatai	282
10.2.3. A spektrumvonalak alakja, vonalkiszélesedési mechanizmusok	284
10.2.4. A spektrumvonalak intenzitása: Ütközési-sugárzási modellek	287
10.2.5. Spektroszkópiai berendezések és alapvető mérési módszerek	289
10.2.6. A lézeres plazmaspektroszkópia alapjai	302
11. Poros plazmák	305
11.1. A poros plazmák keletkezése és alapvető jellemzőik	305
11.2. A porrészecskék elektromos feltöltődése	306
11.3. A porrészecskékre ható erők	309
11.3.1. Egy izolált porrészecskére ható erők	309
11.3.2. A porrészecskék között ható erő	313
11.4. A porrészecskék rendszerének alapvető jellemzői	313
11.5. Poros plazma kísérleti berendezések	315
11.6. Sokrészecske-rendszerek molekuladinamikai szimulációja	319
11.6.1. A molekuladinamikai szimulációs módszer alapjai	319
11.6.2. Alapvető statikus jellemzők	324
11.6.3. Dinamikus jellemzők	328
11.6.4. Transzportparaméterek	332

12. Az alacsony hőmérsékletű plazmák alkalmazásai	337
12.1. Fényforrások	337
12.1.1. Fluoreszcens fényforrások	337
12.1.2. Spektrállámpák	339
12.1.3. Nagyintenzitású gázkisülési lámpák	340
12.1.4. Gázlézerek	341
12.2. Felületmódosítás alacsony nyomású plazmaforrásokkal	352
12.2.1. Plazmamarás	353
12.2.2. Gőzfázisú rétegleválasztás	356
12.2.3. Porlasztásos rétegleválasztás	356
12.3. Speciális plazmaforrások és alkalmazásaik	359
12.3.1. Plazmahajtóművek	359
12.3.2. Gázok konverziója szigetelt elektródájú gázkisülésekkel	361
12.3.3. Felületkezelés atmoszférikus nyomású plazma „jet” for- rásokkal	363
12.3.4. Analitikai kémiai alkalmazások	366
12.3.5. Plazmaimmerziós ionimplantáció	367
Irodalomjegyzék	371

Előszó

Az *alacsony hőmérsékletű plazmák* jellemzően elektromosan töltött és semleges részecskék ütközéseinek következtében előálló, gyengén ionizált, gázfázisú rendszerek („gázkisülések”), melyek akár szobahőmérsékleten is létrejöhetnek. Keletkezésükben termikus effektusok általában nem játszanak szerepet – innen ered az „alacsony hőmérsékletű” kategorizálás. Könyvünk tematikája felöleli a töltött részecskék (elektronok és ionok) elemi ütközési folyamatainak és transzportjának tárgyalását, a gázkisülések fizikai alapjelenségeinek jellemzését, a gázkisülések diagnosztikájának, modern modellezési módszereinek és egyes alkalmazásainak bemutatását, valamint bevezetést ad a poros plazmák fizikájába. A könyv tematikája ugyanakkor egy egyetemi szemeszter alatt lefedhető anyagot fog át, így semmiképpen nem lehet célja az alacsony hőmérsékletű plazmafizika minden releváns területének részletes bemutatása – ezért kénytelenek vagyunk az általunk legfontosabbnak ítélt részek ismertetésére hagyatkozni.

Az itt közreadott anyag összeállítását a BME-n és az ELTE-n akkreditált, és éveken keresztül oktatott „Alacsony hőmérsékletű plazmafizika” kurzus motiválta – ezen kurzus elindításáért Pokol Gergőt és Kiss Gábort (BME), Horváth Ákost, Csanád Mátét és Kürti Jenőt (ELTE), valamint Julian Schulze-t (Ruhr Universität Bochum) illeti köszönet. Hálásak vagyunk Karácsony Jánosnak (Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár) számos javítási javaslatáért, Donkó Istvánnának helyesírási tanácsaiért, valamint Derzsi Arankának, Thoman Valérnak, Dósa Melindának, Szűcs Bálintnak, Sebők Bélának és Réfy Dánielnek az anyaggal kapcsolatos megjegyzéseikért.

Köszönet illeti továbbá a kutatásokat finanszírozó szervezeteket, elsősorban az Országos Tudományos Kutatási Alapot (OTKA) és a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatalt (NKFIH), melyek számos projekttel segítették az alacsony hőmérsékletű plazmafizika területén folytatott kutatásainkat, valamint a Magyar Tudományos Akadémia (MTA) Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézetét, illetve a Wigner Fizikai Kutatóközpontot, melyek helyet, támogatást és jó légkört biztosítottak munkánkunk.

A szerzők

Budapest, 2025. február

1. fejezet

Bevezetés

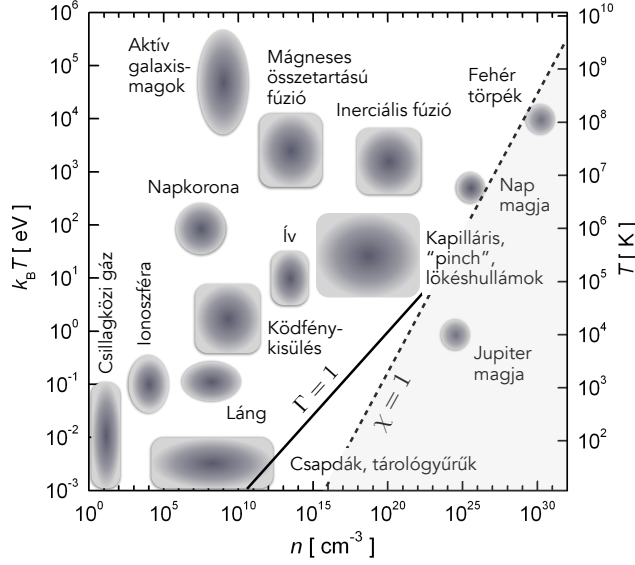
Plazma alatt általánosságban olyan közeget értünk, amelyben elektromosan töltött részecskék (általában elektronok és ionok) vannak jelen. Ugyan a plazmák egyes jellemzőiket tekintve közel állnak a gázokhoz, egyedi viselkedésük és tulajdonságaik (pl. elektromos vezetőképesség) alapján a plazmaállapotot az anyag *negyedik halmazállapotának* is nevezik, bár ez az elnevezés termodinamikai szempontból nem helytálló, ugyanis a (szigetelő) gáz- és a (vezető) plazmaállapotok között *nincs fázisátalakulás*.¹ Az ennek ellenére tradicionálisan még mindig használt „negyedik halmazállapot” megnevezés William Crookes nevéhez fűződik (1879), míg a „plazma” elnevezést Irving Langmuir használta először (1928).

Míg a közvetlen környezetünkben nagyrészt szilárd, folyadék, illetve semleges gázfázisú anyagok vannak jelen, az Univerzum *ismert* anyagának túlnyomó része (több mint 99%-a) plazmaállapotban van. A szigetelő állapotú gázok *magas hőmérséklet, sugárzás*, vagy megfelelően nagy energiájú részecskékkel történő *ütközések* hatására ionizálódhatnak, kerülhetnek plazmaállapotba. A természetben megtalálható plazmaállapotok a töltött részecskék sűrűségének² és a részecskék jellemző energiájának (hőmérsékletének) rendkívül széles skáláját fogják át, amint ezt az 1.1. ábra néhány példával érzékelteti.

Munkánkban alapvetően *makroszkopikusan semleges plazmákkal* foglalkozunk, ami m_e tömegű és $q_e = -e$ töltésű *elektronokból* (ahol e az elemi töltés) és m_i tömegű és $q_i = +Ze$ töltésű ionokból (ahol Z a töltésszám) áll [1, 2]. Az utóbbiakból egyszerre több fajta is előfordulhat, de most tekintsük azt az egyszerű és gyakori esetet, amikor csak egyetlen típusú és pozitív töltésű ion található a plazmában. Mindkét fajta részecskére definiálhatjuk az ú.n. *csatolási paramétert*, ami az adott típusú részecskék közötti kölcsönhatási (potenciális)

¹Nincs ugyanis a plazma termodinamikai potenciáljaiban semmilyen átmenet. Ha azonban a fázisátalakulást mint a vezetőképesség megjelenését definiáljuk, úgy több más fázis is létezik, nem csak négy.

²*Sűrűség* alatt – amennyiben az ettől való eltérést nem jelezzük – minden esetben *számsűrűséget* értünk.



1.1. ábra. Néhány fontos természetes és mesterséges plazmatípus. n a töltött részecskék sűrűsége, T a rendszerre jellemző hőmérséklet, $k_B T$ az ezzel ekvivalens energia (k_B a Boltzmann-állandó). Az energiát a plazmafizikában hagyományosan *elektronvolt* egységekben adjuk meg, $1 \text{ eV} \cong 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$. (Ez az érték megfelel az 1 V potenciálkülönbség által felgyorsított elektron energiájának.) A vastag fekete vonal az ionokra jellemző Γ *csatolási paraméter* egységnyi értékét mutatja, a szaggatott vonal pedig a klasszikus és a kvantumviselkedés közötti határt – az elektronok degenerációs paraméterének (χ) egységnyi értékét – jelzi.

energia és a részecskék termikus energiájának aránya, azaz

$$\Gamma = \frac{E_{\text{pot}}}{E_{\text{kin}}} = \frac{(Ze)^2}{4\pi\epsilon_0 a k_B T}, \quad (1.1)$$

ahol $a^3 = 3/(4\pi n)$ egy karakterisztikus távolság, amely az egy részecskéhez tartozó gömb sugarának (*Wigner-Seitz-sugár*) vehető. Itt k_B a Boltzmann-állandó, n a sűrűség és T a részecskékre jellemző hőmérséklet.

$\Gamma \ll 1$ esetén a töltött részecskék kölcsönhatásából származó (potenciális) energia elhanyagolható a termikus energiához képest, ilyenkor *ideális plazmáról* beszélünk. Ez esetben (pontosabban a $\Gamma \rightarrow 0$ határesetben) a plazma komponenseire használható az *ideális gáz* állapotegyenlete, pl. izotermikus rendszernél a nyomás (p) és a hőmérséklet közötti kapcsolat megegyezik az ideális gázéval:

$$p_e = n_e k_B T_e, \quad p_i = n_i k_B T_i. \quad (1.2)$$

Itt T_e és T_i az *elektronhőmérséklet* és az *ionhőmérséklet*. A későbbiekben látni fogjuk, hogyan változtatja meg a részecskék közötti Coulomb-kölcsönhatás a plazma nyomását.

Amennyiben a potenciális energia már nem elhanyagolható, a plazma *nem-ideális*, $\Gamma > 1$ esetében pedig *erősen csatolt plazmákról* beszélünk. Ezekben a rendszerekben az állapotegyenlet a töltött részecskék közötti kölcsönhatásokból származó járulékot is tartalmaz (ami az erősen csatolt esetben dominánsá válik). Mivel egy kvázisemleges plazmában az elektronhőmérséklet általában sokkal nagyobb, mint az ionhőmérséklet, a nagyobb sűrűségek irányába haladva (ami kisebb a -hoz vezet) először tipikusan az ionok rendszere válik nemideálissá. Ezért az 1.1. ábra a Γ paramétert az ionokra mutatja.

Kvantumeffektusok ugyanakkor, a nagyobb sűrűségek irányába haladva, tipikusan az elektronok esetében válhatnak fontossá, amikor a hullámfüggvény térbeli kiterjedését jellemző

$$\lambda_B = \frac{h}{mv_T} \quad (1.3)$$

de-Broglie-hullámhossz (ahol $v_T = (2k_B T/m)^{1/2}$ az átlagos termikus sebesség, valamint h a *Planck-állandó*) összemérhetővé válik az átlagos részecsketávolsággal. A

$$\chi = n\lambda_B^3 \quad (1.4)$$

degenerációs paraméter egynél nagyobb értéke mellett számolni kell a kvantumos viselkedéssel, míg $\chi < 1$ mellett a rendszer klasszikus megközelítéssel kezelhető. Az 1.1. ábra szaggatott vonala a $\chi = 1$ értéket jelzi. A továbbiakban csak klasszikus plazmákról lesz szó. Megemlítendő még, hogy nagy hőmérsékleten vagy nagy sűrűség esetén a *relativisztikus effektusokat* sem lehet figyelmen kívül hagyni, pl. asztrofizikai plazmák esetében. Az ezt leíró fizikai diszciplínák, mint pl. a véges hőmérsékletű kvantumtérelmélet, ugyancsak kívül esnek ezen könyv keretein [3].

A plazmák típusaira visszatérve, az 1.1. ábrán láthatjuk, hogy a legnagyobb hőmérsékletek és részecskesűrűségek az asztrofizikai objektumok (galaxismagok, illetve csillagok) belsejében találhatók. A Nap magjára például $T \sim 10^7$ K hőmérséklet és $n \sim 10^{26} \text{ cm}^{-3}$ sűrűség jellemző, a magtól távolodva pl. a napkoronában, ezek az értékek $T \sim 10^6$ K-re és $n \sim 10^8 \text{ cm}^{-3}$ -re csökkennek. A Napból származó és a bolygóközi teret betöltő napszél (a Föld környezetében) $T \sim 10^5$ K hőmérséklettel és $n \sim 10^3 \text{ cm}^{-3}$ sűrűséggel jellemezhető. A napszélből származó és a Föld mágneses pólusai körül az atmoszférába belépő részecskék hozzák létre a sarki fényt, amely igen alacsony hőmérsékletű és sűrűségű plazmából származik ($T \sim 10^2$ K, $n \sim 10^3 \text{ cm}^{-3}$). A csillagközi térben ennél nagyságrendekkel kisebb sűrűségű plazmák is előfordulnak.

A Természetben megtalálható plazmaállapotok mellett számos, *mesterséges úton előállítható* plazmatípus érdemel említést. A plazmák legtöbb laboratóriumi és ipari alkalmazásában egyrészt a fénykibocsátást, illetve a fényerősítés lehetőségét, másrészt a bennük keletkező „aktív” részecskéket (pl. gerjesztett atomokat, vagy molekulákat, ionokat, szabad gyököket), valamint az elérhető magas hőmérsékletet használják ki. A ködfénykisüléseket, amelyekre $n \sim 10^8$ – 10^{13} cm^{-3} nagyságrendbe eső sűrűségek és $T \sim 10^4$ K-nek megfelelő részecskeenergia jellemzőek, napjainkban széleskörűen alkalmazzák gázlámpákban, fénycsőekben és gázkisülési lámpákban, spektroszkópiai fényforrásokban, valamint

integrált áramkörök és napelemek gyártásának technológiai lépéseiben (réteg-leválasztás, illetve maratás), különböző anyagok felületi tulajdonságainak módosításánál (szuperkemény, vagy biokompatibilis felületek létrehozása) [4, 5]. Megjegyezzük, hogy ezek a rendszerek alacsony *ionizációs fokkal* jellemezhetők, azaz a töltött részecskék sűrűsége sokkal (nagyságrendekkel) kisebb a semleges atomok, vagy molekulák sűrűségénél.

A ködfénykisüléseknél nagyobb plazmasűrűségű ívkisüléseket intenzív fényforrásként és technológiai célokra (vágás, hegesztés) alkalmazzák, míg a még sűrűbb kapilláris gázkisülési plazmák pl. extrém ultraibolya tartományú (lágy röntgen) litográfiai fényforrások és lézerek alapjául szolgálnak. A mesterségesen létrehozott plazmák között a legnagyobb ($T \sim 10^7\text{--}10^8\text{ K}$) hőmérsékleteket a mágnesesen összetartott ($n \sim 10^{13}\text{ cm}^{-3}$) és inerciális (lézer-) fúziós célú plazmák ($n \sim 10^{20}\text{ cm}^{-3}$) képviselik.

A jelen munkában nemrelativisztikus, klasszikus plazmákkal foglalkozunk. A vizsgált rendszerek nagy többsége ideális plazmának tekinthető, kivételt a 11. fejezetben tárgyalt *poros plazmák* jelentenek, ahol az erős csatolás a jellemző ($\Gamma \gg 1$), az elektronok és az ionok mellett jelenlévő elektromosan töltött porrészecskék között.

Mint már említettük, a plazmák legtöbb típusában az elektronok és az ionok³ sűrűsége közel egyenlő, ezek makroszkopikusan „kvázisemleges” rendszerek, bennük a sűrűségeloszlások külső terek hatására, vagy határoló felületek jelenléte (*határrétegek* kialakulása) miatt módosulhatnak.

Az alacsony hőmérsékletű plazmák fizikájának megértéséhez több tudományterület többé-kevésbé mély ismerete szükséges. A plazmákban jelenlévő töltött részecskék egymással és a külső elektromos és mágneses terekkel való kölcsönhatását az elektrodinamika írja le. Az alapvető fontosságú transzportjelenségek megértéséhez szükség van a statisztikus fizika eszköztárára, itt ugyanis megjelennek a részecskék eloszlásfüggvényei és az ezzel kapcsolatos transzportegyenletek. A töltött részecskék transzportját nagyban befolyásolják a gáz atomjaival / molekuláival való ütközéseik, ezek leírása klasszikus szinten a kinematika alapján, mélyebb szinten a kvantummechanika segítségével adható meg. A plazmák fénykibocsátásáért felelős folyamatoknak, az optikai spektrumok eredetének megértése érdekében szintén a kvantummechanikához kell fordulnunk. A laboratóriumi plazmaforrások működtetéséhez és az elektromos plazmadiagnosztikához segítséget adnak a villamosságtannal és elektronikával kapcsolatos ismeretek. A plazmák modellezése elképzelhetetlen numerikus módszerek, ill. programozási ismeretek nélkül, a modellezés stochasztikus megközelítése a valószínűségszámítás elemeire is épít.

Itt az említett tudományterületekre vonatkozóan alapszintű ismereteket tételezünk fel, egyes területekre vonatkozóan azonban kiemelten fontosnak tartjuk az alapismeretek felelevenítését. Ezért a következő, 2. fejezetben rövid össze-

³Amennyiben ezt külön nem jelezzük, „ionok” alatt minden esetben *egyszeres töltésű pozitív ionokat* értünk, ugyanis alacsony hőmérsékletű plazmákban magasabb ionizált állapotok ritkán fordulnak elő, kivéve az ezek előállítására szolgáló speciális (pl. elektron-ciklotronrezonanciás) forrásokban.

foglalását adjuk azoknak a statisztikus fizikai és elektrodinamikai / villamos-ságtani ismereteknek, melyekre a későbbi részek támaszkodnak. Ezután (a 3. fejezetben) az ideális plazmák alapvető tulajdonságaival ismerkedünk: bevezetjük a jellemző hossz- és időskálákat, tárgyaljuk a plazmának a határoló felületekkel való kölcsönhatását és a Lorentz-modell bevezetésével a plazmák dielektromos viselkedését, valamint ennek következményeit. Kitérünk továbbá a plazmák keletkezéséért felelős fizikai folyamatokra, megkülönböztetve az alacsony és magas hőmérséklet esetét. A 4. fejezetben a plazmákban fontos szerepet játszó elemi ütközési folyamatokat mutatjuk be, valamint foglalkozunk a kétrészecske-ütközések kinematikájával, bevezetjük az ütközési folyamatokat jellemző különböző hatáskeresztmetszeteket és tárgyaljuk az elektron-atom és ion-atom ütközések fontos tulajdonságait a klasszikus fizika szintjén maradva. Rövid betekintést adunk a hatáskeresztmetszetek klasszikus és kvantummechanikára alapuló kiszámításába. Az ezt követő fejezet a részecskék transzportjának leírásával foglalkozik: az 5. fejezetben a kinetikus elmélet alapegyenleteinek, köztük a Boltzmann-egyenletnek a bevezetésével, az ebből származtatható momentumegyenletekkel, míg a 6. fejezetben ezek alkalmazásaként a plazmahullámok alapvető fizikájával foglalkozunk. A 7. fejezetben a transzport részecskealapú, Monte-Carlo-szimulációra alapuló módszerét ismertetjük. A következő nagyobb blokkban az egyenfeszültségű (8. fejezet) és a rádiófrekvenciás gerjesztésű (9. fejezet) plazmaforrások fizikájával foglalkozunk. Ennek során tárgyaljuk a gázkísülés kialakulását lehetővé tevő átütési folyamatokat, megismerkedünk ezen laboratóriumi plazmák térbeli szerkezetével, a rádiófrekvenciás plazmák időbeli dinamikájával, modellezésük, ill. numerikus leírásuk módszereivel. A plazmadiagnosztika módszerei közül az elektromos szondákkal és az optikai spektroszkópiával foglalkozunk (10. fejezet). Az utóbbi esetén részletesen tárgyaljuk az atomok/molekulák sugárzási spektrumának fizikai hátterét, illetve ismertetjük a gyakorlatban alkalmazott spektroszkópiai terminológiát is. Az „alapvető” töltött részecskék (elektronok és ionok) mellett mikroszkopikus részecskéket tartalmazó poros plazmákkal a 11. fejezetben ismerkedünk meg és végül a 12. fejezetben példákat mutatunk be az alacsony hőmérsékletű plazmák alkalmazásaira.

K.: Kiegészítő részek

A keretbe foglalt szövegrészek a téma mélyebb megalapozását / elmélyítését célzó kiegészítő ismeretek, ezeket a fejezetektől eltérő, „K” jelölésű sorszámozással látjuk el. Munkánk fő mondanivalói ezen részek nélkül is megérthetőek, de a részletek iránt komolyabban érdeklődő Olvasóknak ezen kiegészítő anyagokat is figyelmükbe ajánljuk.

2. fejezet

Fizikai alapismeretek

A következőkben – a teljesség igénye nélkül – összefoglaljuk azokat a legalapvetőbb fizikai ismereteket, amelyek a plazmákban végbemenő folyamatok megértéséhez elengedhetetlenek. A fejezetnek nem célja az adott fizikai diszciplínák mélyreható bemutatása, az itt leírtak sokkal inkább ismétlésként funkcionálnak. Elsőként az *elektrodinamika* és a *villamosságtan* alapjait tekintjük át, majd az alapvető *statisztikus fizikai* ismereteket elevenítjük fel. Ezen két terület kitüntetett voltát az indokolja, hogy a plazmák tipikusan nagyszámú töltött részecskét tartalmaznak. Ezek egyrészt kölcsönhatásba kerülnek külső elektromos és/vagy mágneses terekkel, illetve egymással. Ezek a kölcsönhatások gyakran kollektív jelenségekhez vezetnek, ugyanis a töltött részecskék jelenléte és mozgása maga is terek megjelenését eredményezi. A részecskesokaságok viselkedése a statisztikus fizika módszereivel közelíthető meg. Az itt leírtakat célirányosan a következő, az alapvető plazmafizikai ismeretekkel foglalkozó fejezet megalapozásának tekintjük, de az azt követő, az alacsony hőmérsékletű plazmafizika egyes részeit mélyebben tárgyaló fejezetekben is szükség lesz ezekre az ismeretekre.

2.1. Elektrodinamikai alapok

Mivel a plazmák legfontosabb „alkotói” az elektromosan töltött részecskék, ezért ezen rendszerek viselkedésének, pl. a töltött részecskék mozgásának, vagy a plazmákban terjedő elektromágneses hullámoknak a megértéséhez nélkülözhetetlen az *elektrodinamika* eszköztára [6–9].

Az elektrodinamika alapegyenletei a *Maxwell-egyenletek*, melyek általános

közegben (nem csak vákuumban) érvényes differenciális alakja

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (2.4)$$

Az egyenletek fenti alakja és az ú.n. integrális megfelelőjük között két alapvető tétel teremt kapcsolatot:

- a *Gauss–Osztrogradszkij-tétel (divergenciatétel)*, mely szerint egy tetszőleges A zárt felület által határolt V térfogatban definiált (nemszinguláris) $\mathbf{Y}$ vektormezőre fennáll, hogy divergenciájának térfogati integrálja megegyezik a vektormező A felületre vett felületi integráljával:

$$\oint_A \mathbf{Y} \cdot d\mathbf{A} = \int_V (\nabla \cdot \mathbf{Y}) dV, \quad (2.5)$$

és

- a *Stokes-tétel*, mely szerint egy tetszőleges (nemszinguláris) $\mathbf{Y}$ vektormező zárt G görbe menti vonalintegrálja megegyezik a vektormező rotációjának a görbe által határolt A felületre vett integrállal:

$$\oint_G \mathbf{Y} \cdot d\mathbf{s} = \int_A (\nabla \times \mathbf{Y}) \cdot d\mathbf{A}. \quad (2.6)$$

Visszatérve az elektrodinamika alapegyenleteire, a 2.1. összefüggés *Gauss-törvényként* ismert, a töltéssűrűség (ρ) és az elektromos eltolás ($\mathbf{D}$) között teremt kapcsolatot, kifejezve, hogy az elektromos tér forrásai az elektromos töltések. A 2.2. egyenlet – a *mágnesesség Gauss-törvénye* – a mágneses tér forrásmentességét fejezi ki ($\mathbf{B}$ a mágneses indukció), a klasszikus fizika szintjén kizárva a mágneses monopólusok létét. A *Faraday–Lenz-törvényként* ismert 2.3. egyenlet szerint a változó mágneses tér elektromos teret hoz létre ($\mathbf{E}$ az elektromostér-erősség), végül a 2.4. egyenlet az elektromos áram által létrehozott mágnesestér-erősséget ($\mathbf{H}$) adja meg (*Ampère-törvény*). Az egyenlet jobb oldalán a $\mathbf{j}$ *vezetésiáram-sűrűség* mellett megjelenő második tag, a $\partial \mathbf{D} / \partial t$ *eltolásiáram-sűrűség*. Az eltolási áram a vezetési áramhoz hasonlóan mágneses teret hoz létre, illetve nyitott áramkörökben (pl. egy kondenzátor elektródái között) biztosítja az áram folytonosságát és fontos szerepet játszik pl. rádiófrekvenciás plazmaforrásokban, illetve az elektromágneses hullámok terjedésében.

K. 1: Az eltolásiáram-sűrűség bevezetése

Az eltolásiáram-sűrűséghez az alábbi gondolatmenet alapján juthatunk el [10]. Valamely térfogatban a töltés időegység alatti megváltozása az azt határoló felületen (A) átfolyó áram következménye:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = - \oint \mathbf{j} \cdot d\mathbf{A} = \int \frac{\partial \rho}{\partial t} dV.$$

A Gauss–Osztrogradszkij-tétel szerint

$$\oint \mathbf{j} \cdot d\mathbf{A} = \int (\nabla \cdot \mathbf{j}) dV.$$

Ezen két egyenletből adódik a kontinuitási (töltésmegmaradási) egyenlet differenciális alakja:

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = - \frac{\partial \rho}{\partial t},$$

mely az áramsűrűség divergenciája és a töltéssűrűség időegység alatti megváltozása között teremt kapcsolatot. Az eltolásiáram-sűrűség *nélküli* Ampère-törvény, $\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j}$ alapján viszont az következik, hogy az áramsűrűség divergenciája mindig nulla, ugyanis $\nabla \cdot \mathbf{j} = \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{H}) = 0$, ami ellentmondásban van a kontinuitási egyenlettel. Maxwell (elméleti megfontolásaiban) a kontinuitási egyenlet érvényességéből indult ki, ami a $\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$ helyettesítéssel átírható a következő alakra:

$$\nabla \cdot \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{D}) = \nabla \cdot \mathbf{j} + \nabla \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right) = 0.$$

Ez abban az esetben válik konzisztenssé Ampère törvényével, ha annak jobb oldalát kiegészítjük a $\partial \mathbf{D} / \partial t$ taggal, ami nem más, mint eltolásiáram-sűrűség vagyis:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}.$$

Következő lépésként két további, az elektrodinamikában fontos szerepet játszó mennyiséggel kell megismerkednünk.

- Feltételezve, hogy nincs jelen időben változó mágneses tér, a harmadik Maxwell-egyenlet szerint $\nabla \times \mathbf{E} = 0$. A vektoranalízisből ismert, hogy amennyiben egy vektormező rotációja nulla, akkor (legalábbis Euklideszi-térben) előállítható egy skalártér gradienseként, vagyis esetünkben:

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi, \quad (2.7)$$

ahol ϕ az *elektrosztatikus (skalár) potenciál*. (Az egyenletben megjelenő negatív előjel egy konvenció.) Az elektromostér-erősség fenti összefüggéssel megadott alakját az első Maxwell-egyenletbe helyettesítve adódik a

Poisson-egyenlet:

$$\Delta\phi = -\frac{\rho}{\varepsilon}. \quad (2.8)$$

- A $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ Maxwell-egyenletből következik, hogy $\mathbf{B}$ előállítható egy vektormező rotációjaként, azaz

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathcal{A}. \quad (2.9)$$

Az így bevezetett $\mathcal{A}$ mennyiség a *mágneses vektorpotenciál*.

A Maxwell-egyenletek mellett alapvető fontosságúak az alábbi *anyagi egyenletek*:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \varepsilon_0 \chi_e \mathbf{E} = \varepsilon \mathbf{E}, \quad (2.10)$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{M} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \chi_m \mathbf{H} = \frac{1}{\mu} \mathbf{B}, \quad (2.11)$$

ahol $\mathbf{P}$ a *polarizáció*, $\chi_{e,m}$ az *elektromos/mágneses szuszceptibilitás*, ε a *permittivitás*, $\mathbf{M}$ a *mágnesezettség* és μ a *permeabilitás*.¹ Amennyiben vákuumban szeretnénk megoldani a Maxwell-egyenleteket, úgy $\mathbf{P} = \mathbf{M} = 0$. A fenti két egyenlet jobb oldalán feltételeztük, hogy az anyagunk izotróp (hiszen ε és μ skalármennyiségek), ami általános esetben (pl. kristályok esetén) nem lesz igaz, ekkor ugyanis a permeabilitás és a permittivitás *szimmetrikus tenzorok* lesznek. Hasonlóan feltételeztük azt is, hogy a polarizáció (mágnesezettség) *lineárisan* függ az elektromos (mágneses) térerősségtől. Ennek szintén nem kell feltétlenül igaznak lenni, lásd pl. az optikában a *Kerr-effektust* [9]. A továbbiakban itt viszont minden esetben a fenti feltételezésekkel fogunk élni (esetenként megengedve az együtthatók helytől és időtől való függését).²

Az elektromágneses tér *energiasűrűsége* (feltéve a lineáris anyagi összefüggéseket) az alábbi módon adható meg:

$$w = \frac{1}{2} \mathbf{D} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{2} \mathbf{H} \cdot \mathbf{B} = \frac{\varepsilon}{2} E^2 + \frac{1}{2\mu} B^2. \quad (2.12)$$

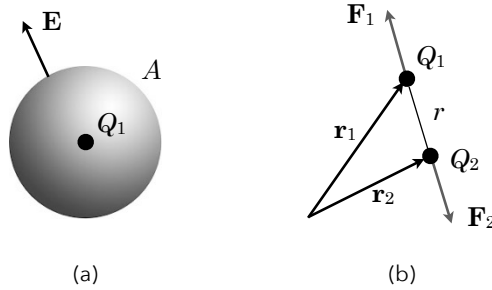
A tér energiájára a töltésmegmaradáshoz hasonló kontinuitási egyenlet vonatkozik [7]:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{S} = \mathbf{j}_c \cdot \mathbf{E}, \quad (2.13)$$

ahol $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ a *Poynting-vektor*, ami az elektromágneses energia áramlását jellemzi (dimenziója: (energia / térfogat) $\times$ sebesség, ebben hasonlóságot mutat a (töltés / térfogat) $\times$ sebesség dimenziójú vezetési áramsűrűséggel).

¹Vákuum esetében $\mu = \mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N/A}^2 \cong 1.257 \times 10^{-6} \text{ N/A}^2$, illetve $1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0} = c$ (ahol c a fénysebesség) alapján $\varepsilon = \varepsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ F/m}$. Konceptcionális szempontból fontos megjegyezni, hogy ezen értékek csak a „szerencsétlen” mértékegység-választás következményei. A valóságban (klasszikus elméletben) a vákuumnak nincs semmiféle permittivitása/permeabilitása.

²Megjegyezzük, hogy a lineáris összefüggés $\mathbf{D}$ és $\mathbf{E}$ között valójában a $\mathbf{D}(\mathbf{E})$ függvény $\mathbf{E}$ szerinti Taylor-sorának első tagja, ahol a magasabb rendű tagokat elhanyagolhatjuk, mivel a külső elektromos tér ($\mathbf{E}$) kisebb, mint a dielektrikum belsejében, annak molekulái között fellépő elektromos tér átlaga (amit $\mathbf{D}$ jellemez). Hasonlóan a $\mathbf{H} = \mathbf{B}/\mu$ összefüggés is helyénvaló, mindaddig, amíg a külső mágneses tér nem túl nagy vagy nem ferromágneses anyagot vizsgálunk [9].



2.1. ábra. A ponttöltés elektromos terének származtatása (a) és két ponttöltés között ható erő (b).

A plazmafizikában a töltött részecskéket gyakorlatilag mindig pontszerűnek tekintjük. Vizsgáljuk meg most ilyen részecskék egymás közti kölcsönhatását! A jelenségeket vákuumban vizsgáljuk ($\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E}$), ami egyszerűsítést jelent a plazmákhoz képest. A részecskék környezetében fellépő térerősség, potenciál és több részecske között ható erő az alábbi módon származtatható (lásd 2.1. ábra). Vegyünk egy Q_1 töltésű részecskét és írjunk köré egy r sugarú (A felületű, V térfogatú) gömböt! Az első Maxwell-egyenletből a Gauss–Ostrogradszkij-tétel felhasználásával:

$$\varepsilon_0 \oint_A \mathbf{E} \cdot d\mathbf{A} = \varepsilon_0 \int_V (\nabla \cdot \mathbf{E}) dV = \int_V \rho dV = Q_1 \quad (2.14)$$

adódik, vagyis:

$$4\pi r^2 \varepsilon_0 E = Q_1. \quad (2.15)$$

Ebből a skaláris, ill. vektoriális elektromostér-erősség a részecskétől r távolságra:

$$E = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Q_1}{r^2}, \quad \mathbf{E} = \frac{Q_1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^3}. \quad (2.16)$$

A pontszerű töltés által (vákuumban) létrehozott *Coulomb-potenciál* az $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ összefüggés alapján (felhasználva, hogy $\lim_{r \rightarrow \infty} \phi(r) = 0$):

$$\phi(r) = - \int_{\infty}^r E(r') dr' = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Q_1}{r}, \quad (2.17)$$

két ponttöltés között ható erő pedig $\mathbf{F} = Q \mathbf{E}$:

$$\mathbf{F}_1 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} Q_1 Q_2 \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3}, \quad \mathbf{F}_2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} Q_1 Q_2 \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3}. \quad (2.18)$$

A „ponttöltés” mint absztrakció bevezetése felveti azt a kérdést, hogy miként értelmezhetjük az ehhez kapcsolódó, véges töltéssel „kompatibilis” töltéssűrűséget? A Poisson-egyenlet – mint láttuk – a $\Delta\phi = -\rho/\varepsilon_0$ összefüggést fogalmazta

meg a töltéssűrűség és a potenciál között és a ponttöltés által létrehozott potenciálra azt kaptuk, hogy $\phi \sim 1/r$. A Laplace-operátor $\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r})$ gömbi koordinátás alakját véve (ami a gömbszimmetria miatt megtehető), $r \neq 0$ esetén $\Delta \frac{1}{r} = 0$ adódik, $r = 0$ esetén viszont divergencia lép fel. A probléma feloldását a *Dirac-delta* „függvény” bevezetése jelenti, amely valójában nem függvény, hanem ún. *disztribúció*, melyre igaz, hogy

$$\int \delta(\mathbf{r}) dV = 1, \quad (2.19)$$

és így az $\int \rho dV = Q$ összefüggést felhasználva kapjuk, hogy a ponttöltés „töltéssűrűsége”

$$\rho(\mathbf{r}) = Q\delta(\mathbf{r}). \quad (2.20)$$

Ezzel a Poisson-egyenlet:

$$\Delta\phi = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \Delta\left(\frac{1}{r}\right) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0} = -\frac{Q}{\epsilon_0}\delta(\mathbf{r}), \quad (2.21)$$

amiből

$$\Delta\left(\frac{1}{r}\right) = -4\pi\delta(\mathbf{r}) \quad (2.22)$$

adódik. Azt kaptuk tehát, hogy a potenciál (disztribúcióértelemben vett) Laplace-operátorát véve az eredmény a Dirac-deltával arányos. Másképp fogalmazva – ha már találkozott az Olvasó Green-függvényekkel más kontextusban – azt is mondhatjuk, hogy a Poisson-egyenlet Green-függvénye arányos $\frac{1}{r}$ -rel.

Tovább vizsgálva az elektromos ponttöltést, elmondható, hogy amennyiben mágneses tér is jelen van, úgy egy Q töltésű részecskére ható erőt a *Lorentz-egyenlet* adja meg:

$$\mathbf{F} = Q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (2.23)$$

A részecske pályája az

$$m \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = \mathbf{F}(t) \quad (2.24)$$

mozgásegyenlet megoldásával kapható meg. Az $\mathbf{E}$ és a $\mathbf{B}$ vektorok nagysága és/vagy iránya általános esetben időfüggő és/vagy helyfüggő lehet – az ilyen általános esetekben számos érdekes jelenség lép fel [11–13], melyek részleteibe itt nem bocsátkozunk, csak két egyszerű, analitikusan kezelhető esetet vizsgálunk. Megjegyezzük, hogy ezen példák során és a későbbiekben is mindenhol eltekintünk a gyorsuló töltött részecskék sugárzásából eredő elektromágneses terek figyelembevételétől, valamint relativisztikus effektusoktól.

Az első esetben feltételezzük, hogy nincs jelen mágneses tér. Ekkor

$$m \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = Q \mathbf{E}(\mathbf{r}, t). \quad (2.25)$$

Amennyiben az $\mathbf{E}$ térerősség homogén és időben állandó, a részecskére egy állandó (értékű és irányú) erő hat, ami állandó gyorsulást és lineárisan növekvő sebességet eredményez.

Kicsit bonyolultabb esetként vizsgáljuk még meg a periodikusan változó elektromos tér esetét! Legyen $\mathbf{E} = (E(t), 0, 0)$ és a $t = 0$ időpontban induljon a részecske a koordináta-rendszer középpontjából ($x = 0$) és nyugalomból ($v_x(0) = 0$). Ekkor a mozgásegyenlet

$$m (dv_x/dt) = QE_0 \cos \omega t, \quad (2.26)$$

ahol E_0 az elektromos-tér-erősség amplitúdója. Ennek megoldása a sebességre, illetve a pozícióra

$$v_x(t) = \frac{QE}{m\omega} \sin \omega t, \quad x(t) = \frac{QE}{m\omega^2} (1 - \cos \omega t). \quad (2.27)$$

Láthatóan a mozgást jellemző minden mennyiség periodikus, amit fontos megjegyeznünk az az, hogy a rezgőmozgás amplitúdója egyenesen arányos a részecskére ható erővel, valamint fordítottan arányos annak tömegével és a frekvencia négyzetével. Szintén fontos következtetés, hogy a részecske ilyen körülmények között időátlagban nem tud energiát nyerni az elektromos tértől.

A másik speciális vizsgált esetben feltételezzük, hogy csak mágneses tér van jelen, $\mathbf{B} =$ állandó és z irányú, vagyis $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Ez esetben a mozgásegyenlet:

$$m \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = Q\mathbf{v} \times \mathbf{B}, \quad (2.28)$$

azaz

$$m \begin{pmatrix} dv_x/dt \\ dv_y/dt \\ 0 \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} v_y B \\ -v_x B \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

Az egyenletrendszer egy lehetséges megoldási módja a következő: adjuk össze az első egyenletet a második i -szeresével, ekkor

$$m \frac{d}{dt} (v_x + iv_y) = -iQB(v_x + iv_y). \quad (2.30)$$

A fenti, elsőrendű közönséges differenciálegyenlet megoldása ($\xi = v_x + iv_y$ mellett)

$$\xi(t) = \xi_0 e^{-i\omega t}, \quad (2.31)$$

ahol ξ_0 -t a kezdőfeltételek határozzák meg, és

$$\omega = \omega_c = \frac{QB}{m} \quad (2.32)$$

az ún. *ciklotronfrekvencia*.³ Az elmozdulásokat egyszerű integrálással kapjuk:

$$\begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \\ z(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0 + \frac{1}{\omega_c} \sqrt{v_{x,0}^2 + v_{y,0}^2} \sin(\omega_c t + \alpha) \\ y_0 + \frac{1}{\omega_c} \sqrt{v_{x,0}^2 + v_{y,0}^2} \cos(\omega_c t + \alpha) \\ z_0 \end{pmatrix}, \quad (2.33)$$

³A valójában pontos *körfrekvencia* megnevezés helyett itt és a továbbiakban is a *frekvencia* szót használjuk, a tudományterület szokásainak megfelelően. Ilyen esetekben az „ ω ” jelölés egyértelműen azonosítja a szóban forgó fizikai mennyiséget.

ahol $\alpha = \arccos \frac{v_{x,0}}{\sqrt{v_{x,0}^2 + v_{y,0}^2}}$, a kezdeti fázis. Megoldásként tehát azt kapjuk, hogy a részecske körpályán mozog, ahol a centripetális erővel a Lorentz-erő tart egyensúlyt,

$$|Q|Bv = m \frac{v^2}{R_L}, \quad (2.34)$$

amiből a körpálya sugara, a *Larmor-sugár*:

$$R_L = \frac{mv}{|Q|B}, \quad (2.35)$$

ami a differenciálegyenlet megoldása alapján megegyezik $v/|\omega_c|$ -vel.

Megjegyezzük, hogy „általános esetben”, pl. időben és/vagy térben változó elektromos és/vagy mágneses tér jelenlétében, a részecskék trajektóriái általában csak a mozgásegyenlet *numerikus* integrálásával határozhatók meg. Az ezen esetekben alkalmazott elméleti módszerekről, mint amilyen pl. a Hamiltoni mechanika pszeudokanonikus transzformációs formalizmusa, lásd a [13] művet.

A Maxwell-egyenletekhez visszatérve, utolsóként tekintsük ezek *vákuumbeli hullámmegoldását*. A bonyolultabb, közegben terjedő elektromágneses hullámok leírását egy későbbi fejezetben mutatjuk be (6. fejezet), itt feltételezzük, hogy nincs dielektrikum a rendszerben, illetve hogy források (tehát töltések vagy áramok) sincsenek. Ekkor a Maxwell-egyenletek a következő alakot öltik:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (2.36)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.37)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.38)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}. \quad (2.39)$$

Vegyük a 2.38. összefüggés rotációját, és használjuk fel egy vektormező Laplace-operátorának definícióját, vagyis, hogy tetszőleges $\mathbf{Y}$ vektormezőre igaz, hogy $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{Y}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{Y}) - \Delta \mathbf{Y}$, továbbá használjuk fel a 2.39. egyenletet is:

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \Delta \mathbf{E} = 0 - \Delta \mathbf{E} \\ &= -\frac{\partial(\nabla \times \mathbf{B})}{\partial t} = -\varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Azt kaptuk tehát, hogy a forrásmentes, vákuumbeli elektromostér-erősség kielégíti az alábbi egyenletet:

$$\Delta \mathbf{E} = \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}, \quad (2.41)$$

amelyet *hullámegyenletnek* nevezünk. Dimenziós megfontolások alapján látszik, hogy az $\varepsilon_0 \mu_0$ szorzatnak inverz sebességnégyzet dimenziója van, így a $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$ egy sebességdimenziójú mennyiség. Mint nemsokára kiderül, ez az a sebesség, amivel az elektromágneses mező hullámai „mozognak”.

A fenti lineáris (ún. *hiperbolikus*) parciális differenciálegyenletet a *Fourier-módszerrel* oldjuk meg. Ehhez mind az elektromos, mind a mágnesestér-erősséget Fourier-kifejtéssel adjuk meg, vagyis

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \int \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (2.42)$$

A Fourier-transzformáció láthatóan nem más, mint egy függvény *síkhullámok* (folytonos) bázisán történő kifejtése.⁴ Helyettesítsük be a 2.41. egyenletbe az elektromostér-erősséget a Fourier-bázison kifejtve. Mivel az időbeli és térbeli deriváltak csak a síkhullámra tudnak hatni (hiszen csak ennek van tér- és idő-függése), így a Fourier-komponensekre egyszerű algebrai egyenletet kapunk. Kihasználva, hogy (i) $\nabla e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = i\mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ és $\Delta e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = -k^2 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$, valamint, hogy (ii) $\partial_t e^{-i\omega t} = -i\omega e^{-i\omega t}$ és $\partial_t^2 e^{-i\omega t} = -\omega^2 e^{-i\omega t}$, a hullámegyenletből az alábbi összefüggés adódik:

$$-k^2 = \frac{-\omega^2}{c^2} \Leftrightarrow \omega = c|\mathbf{k}|. \quad (2.43)$$

Az utóbbi formula biztosítja, hogy a relációnak az ω pozitivitásának eleget tevő „ágát” választjuk ki. Azt kaptuk tehát, hogy a hullámegyenletnek megoldása a síkhullám, ha annak frekvenciája és hullámszámvektora között az előbbi összefüggés áll fent.

A fenti és ehhez hasonló $\omega(k)$ összefüggéseket *diszperziós relációnak* nevezzük; ezek fontos szerepet fognak kapni plazmahullámok tárgyalásánál. Az elektromágneses hullámok vákuumbeli terjedését jellemző 2.43. reláció egészen egyszerű, lineáris kapcsolatot követel meg a hullámszámvektor hossza és a hullám frekvenciája között. Összességében tehát elmondható, hogy a hullámegyenlet megoldásai síkhullámok, amelyek eleget tesznek a fenti diszperziós relációnak.

Mivel a hullámegyenlet lineáris, így síkhullámok lineáris kombinációja (tehát az $\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)$ komplex számokkal súlyozott összege) is eleget fog tenni a hullámegyenletnek. Emiatt tehát az általános megoldás

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \int \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega_k) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_k t)} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad \omega_k = ck \quad (2.44)$$

alakú lesz (ahol a frekvencia k indexe a hullámszámtól való függésre emlékeztet).

Most, hogy elvben tudjuk az elektromostér-erősség megoldását, felmerül a kérdés, hogy meg kell-e oldanunk ugyanezt az egyenletet $\mathbf{B}$ -re is? A Maxwell-egyenletek „csatoltsága” miatt a válasz nemleges. Ennek belátásához Fourier-transzformáljuk $\mathbf{E}$ -t és $\mathbf{B}$ -t, írjuk be ezeket az alakokat a 2.36.-2.39. egyenletekbe, figyelembe véve, hogy a gradiensoperátorok csak a síkhullámokra tudnak hatni. Ekkor

⁴ Az $e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$ kifejezést síkhullámnak nevezzük, ugyanis az állandó fázisú felületek síkok. (A függvény valós/képzetes része egy egyszerű szögfüggvény ω (kör)frekvenciával és $\lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|}$ hullámhosszal.)

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = 0 \quad (2.45)$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{k}, \omega) = 0 \quad (2.46)$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = \omega \mathbf{B}(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.47)$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{B}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{\omega}{c^2} \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.48)$$

Ezekből az összefüggésekből az alábbi hasznos következtetéseket lehet levonni a Fourier-komponensekre (specifikusan, ha csak egy síkhullámunk van, akkor magára a hely- és időfüggő mennyiségekre; az utóbbi esetet *monokromatikus síkhullámnak* nevezzük): (i) Az első két egyenlet alapján $\mathbf{k}$ merőleges mind az elektromos, mind a mágneses térre. Mivel a hullámszámvektor a hullám haladási irányát meghatározza, így elmondhatjuk, hogy a (vákuumban terjedő) elektromágneses hullám *transzverzális*, azaz a haladási irányára merőleges síkban „rezeg”. (ii) Mivel $\mathbf{B} \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{B}) = 0$, így pl. 2.48. mindkét oldalát beszorozva $\mathbf{B}$ -vel kapjuk, hogy $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B} = 0$, azaz az elektromos és mágneses terek is merőlegesek egymásra. (iii) Mivel $\omega = ck$, így a 2.47. egyenletből következik, hogy $\mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\mathbf{k}}{k} \times \mathbf{E}$, így egy vákuumban mozgó elektromágneses hullámnak elég, ha az elektromos és mágneses teréből csak az egyiket adjuk meg: a másik a Maxwell-egyenletek alapján már egyértelműen meghatározott.

2.2. Villamosságtani alapok

Az alacsony hőmérsékletű laboratóriumi plazmaforrások túlnyomó többsége elektromos táplálással működik, ezek részét képezik egy *elektromos áramkörnek*, ami biztosítja a plazma keltéséhez és fenntartásához szükséges teljesítményt. A plazmák egyenfeszültségű táplálása esetén viszonylag egyszerűbb helyzetben vagyunk, bár stabilitási problémák itt is felmerülhetnek. Rádiófrekvenciás táplálás esetén a tápegység és a plazma illesztése már komoly körütekintést igényel. Ezen gyakorlati szempontokon túlmenően, a plazmák fizikáját gyakran célszerű az elektromos helyettesítő képük alapján is vizsgálni. Mindezek motivációként szolgálnak a villamosságtan alapjainak áttekintésére, amit természetesen a teljesség igénye nélkül tehetünk itt csak meg. Mielőtt azonban rátérnénk erre a területre, hasznosnak tartjuk megemlíteni, hogyan juthatunk el a 2.1 fejezetben érintett elektrodinamikától az elektromos áramkörökhöz és azok elemeihez.

Elméletben az elektrodinamika képes arra, hogy a klasszikusan leírható elektromágneses jelenségekkel kapcsolatos kérdésekre – amelyek közé tartoznak az áramkörök is – a Maxwell-egyenletek megoldásán keresztül teljes választ adjon. Ez azonban valós problémáknál nem egyszerű feladat, így a probléma jellegétől függően meg kell elégednünk különböző közelítésekkel. A Maxwell-egyenletek teljes megoldását legfőképp az nehezíti meg, hogy – mint azt már láttuk – az időben változó elektromos/mágneses tér mágneses/elektromos teret tud létrehozni. Ezért felmerül a kérdés, hogy milyen körülmények között hanyagolhatjuk el valamelyik tér időbeli változását, így leegyszerűsítve a probléma megoldását. Az alábbiakban részletesen kifejtett gondolatmenet arra vezet,

hogy amíg egy áramköri elem mérete lényegesen kisebb, mint a fénysebesség és az alkalmazott frekvencia által definiált hullámhossz, addig érvényes a kvázistacionárius közelítés és az elektromostér- vagy a mágnesestér-erősség időbeli deriváltja elhanyagolható [6, 7].

K. 2: A kvázistacionárius közelítés [7]

Attól függően, hogy a mágneses tér időderiváltját, vagy az eltolási áramot hanyagoljuk el, beszélhetünk kvázielektromos és kvázimágneses leírásról. A feltételezésünk az, hogy ezt *időben lassan változó* források esetén tehetjük meg. Nézzük meg, mit is jelent ez pontosabban: vegyünk először egy $\rho(\mathbf{r}, t)$ időfüggő töltéssűrűséget! Legyen ℓ az a távolság- és T az az időskála, ami alatt ezen töltéssűrűség amplitúdója észrevehetően változik! Az előbbi egy áramkörben az áramkörünk geometriai méretskálájának vehető, az utóbbi pedig – mivel előszeretettel alkalmazunk periodikusan változó forrásokat – adott ω körfrekvencia esetén arányos $\frac{1}{\omega}$ -val.

A kvázistacionárius (kvázielektromos) közelítés alkalmazhatóságát – ezen két skála ismeretében – dimenzióanalízis segítségével határozzuk meg, melynek során a releváns egyenletek pontos megoldása helyett nagyságrendbeli becsléssel dolgozunk [14]. A térbeli és időbeli deriváltakra a $\nabla \sim 1/\ell$ és a $\partial/\partial t \sim 1/T \sim \omega$ közelítéseket használjuk. Az itt és a következőkben használt „ $\sim$ ” azt jelzi, hogy az összefüggés dimenzióanalízis (azaz mértékegység tekintetében) és nagyságrendileg helyes. A becslések során csak az egyes mennyiségek nagyságával foglalkozunk, így az előjelüket elhagyhatjuk és vektorjellegüktől eltekinthetünk.

Tekintsük először a kontinuitási egyenletet! Módszerünkkel az alábbi lépésekkel jutunk el az áramsűrűség becsléséhez:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \Rightarrow \rho \omega + \frac{j}{\ell} = 0 \Rightarrow j \sim \omega \ell \rho. \quad (2.49)$$

Következő lépésként bontsuk fel az elektromos teret „Coulomb”- és „Faraday”-terekre, $\mathbf{E} = \mathbf{E}_C + \mathbf{E}_F$, amelyekre igaz, hogy $\nabla \times \mathbf{E}_C = 0$ és $\nabla \cdot \mathbf{E}_F = 0$. A felosztás matematikai alapja a Helmholtz-tétel [7], melynek értelmében ez mindig megtehető (ugyanis tetszőleges vektormező felbontható egy rotációmentes és egy divergencia mentes vektormező összegére), fizikailag pedig érthető a szétválasztás, hiszen lesz egy tér, ami csak a töltéssűrűség pillanatnyi értékétől függ, illetve egy másik, ami a mágneses tér változása miatt alakul ki. Nézzük az ezekre vonat-

kozó becsléseket a Maxwell-egyenletek alapján:

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_C = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \Rightarrow \frac{E_C}{\ell} \sim \frac{\rho}{\varepsilon_0} \Rightarrow E_C \sim \frac{\ell \rho}{\varepsilon_0}, \quad (2.50)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}_F = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \Rightarrow \frac{E_F}{\ell} \sim \omega B \Rightarrow E_F \sim \omega B \ell. \quad (2.51)$$

A vezetési és eltolási áramsűrűség hányadosának meghatározásához szükség van még az utóbbi (j_d) becslésére:

$$\mathbf{j}_d = \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}_C}{\partial t} \Rightarrow j_d \sim \varepsilon_0 E_C \omega. \quad (2.52)$$

A 2.49. folytonossági egyenletből becsült vezetési áramsűrűség felhasználásával, illetve a 2.50. összefüggés figyelembevételével:

$$\frac{j}{j_d} \sim \frac{\omega \ell \rho}{\varepsilon_0 E_C \omega} \sim 1. \quad (2.53)$$

Ezt az eredményt azt mutatja, hogy az áramok összemérhetők és a negyedik Maxwell-egyenletben bármelyiküket használhatjuk a mágneses tér becslésére:

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{j} + \mathbf{j}_d) \Rightarrow \frac{B}{\ell} \sim \mu_0 j \Rightarrow B \sim \mu_0 \rho \omega \ell^2. \quad (2.54)$$

Ezt felhasználva (2.51. segítségével) megkapjuk a Coulomb- és Faraday-tér hányadosát:

$$\frac{E_F}{E_C} \sim \frac{\omega B \ell}{\ell \rho / \varepsilon_0} \sim \frac{\omega^2}{c^2} \ell^2 = \frac{\ell^2}{\lambda^2}, \quad (2.55)$$

ahol bevezettük a c fénysebességet, illetve az ω frekvenciához tartozó $\lambda = c/\omega$ hullámhosszat. Láthatóan a Faraday-tér (és ezzel együtt a mágneses tér időderiváltja) elhanyagolható, amennyiben $\omega^2 \ll \frac{c^2}{\ell^2}$, vagy $\ell \ll \lambda$.

Mielőtt megmagyaráznánk ezt a feltételt, végezzük el ugyanezt az analízist a kvázimágneses esetre is! Ekkor áramforrásaink vannak, és az a kérdés, hogy mikor tekinthetjük úgy, hogy az áram „lassan” változik, azaz mikor szabad elhanyagolni az eltolási áramot. Induljunk ki a magnetosztatikára érvényes (az eltolási áramsűrűség nélküli) Ampère-törvényből (az alábbi $\mathbf{B}_A$ jelölés ennek felel meg):

$$\nabla \times \mathbf{B}_A = \mu_0 \mathbf{j} \Rightarrow B_A \sim \mu_0 j \ell. \quad (2.56)$$

Ez a mágneses tér egy Faraday-teret fog indukálni, vagyis

$$\nabla \times \mathbf{E}_F = -\frac{\partial \mathbf{B}_A}{\partial t} \Rightarrow E_F \sim B_A \ell \omega \sim \mu_0 \omega \ell^2 j. \quad (2.57)$$

Az ebből a térből adódó eltolási áramra kapjuk, hogy

$$\mathbf{j}_d = \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}_F}{\partial t} \Rightarrow j_d \sim \varepsilon_0 \omega E_F \sim \varepsilon_0 \mu_0 \omega^2 \ell^2 j, \quad (2.58)$$

és ezért

$$\frac{j_d}{j} \sim \frac{\omega^2 \ell^2}{c^2}. \quad (2.59)$$

Az eltolási áramsűrűség elhanyagolásának a feltétele $\ell^2 \ll \lambda^2$, csakúgy, mint a kvázielektromos esetben.

Nézzük meg, hogy mit is jelent pontosan ez a feltétel! Többféleképpen tekinthetünk rá: (i) egyrészt fix ℓ esetén az szükséges, hogy a frekvencia ne legyen olyan nagy, hogy annak inverze összemérhető legyen azzal az idővel, amennyi idő alatt a fény áthalad a rendszeren, másrészt (ii) fix ω esetén az ℓ távolságskála nem lehet túl nagy. A fizikai háttér a feltétel mögött az, hogy így az elektromágneses sugárzási jelenségeket elhanyagoljuk, így nem kell figyelembe vennünk a fénysebesség végessége miatt megfigyelhető ún. *retardációs effektusokat*. Emlékezzünk vissza, hogy az elektromágneses hullámok levezetéséhez mindkét időderiváltra szükségünk volt: az itt tárgyalt közelítésekkel ezek egyikét el lehet hanyagolni. A továbbiakban látni fogjuk, hogy az áramköri elemek esetén vagy a kvázielektromos (kondenzátor), vagy a kvázimágneses (tekercs) közelítéssel fogunk élni. Megjegyezzük, hogy a fenti megfontolások vákuumban érvényesek. Anyag jelenlétében is elvégezhető az analízis, ld. [7], ekkor a kvázistacionárius közelítés sok érdekes jelenség leírására ad módot (pl. a szkinhatás, mágneses diffúzió, stb.). Egy alternatív, petrurbációszámításon alapuló módszert Fano és munkatársai könyvében találhat az Olvasó [6].

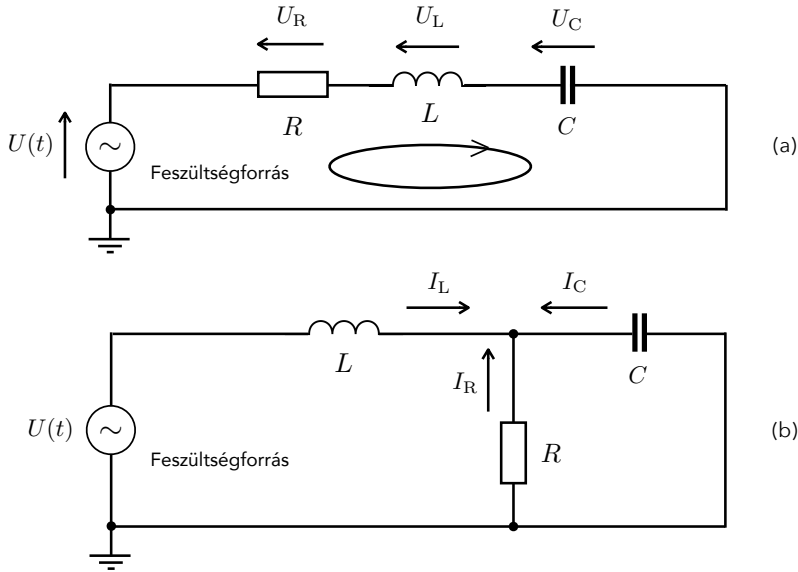
Az elektromos áramkörök alapvető passzív elemei az ellenállások, a kondenzátorok és a tekercsek. Ideális elemeket tekintve, az ellenállásokat az R ellenállásérték, a kondenzátorokat a C kapacitás, a tekercseket pedig az L induktivitás jellemzi.⁵ Tetszőleges elemekből álló hálózatok esetén általánosan érvényesek a Kirchhoff-törvények, melyek azt fogalmazzák meg, hogy a rendszer (i) bármely zárt körében az egyes elemeken eső feszültségek összege nulla és (ii) bármely csomópontba befolyó áramok összege nulla – a 2.2. ábrán szemléltetett módon.

Az ellenállások esetében az

$$R = \frac{U}{I} \quad (2.60)$$

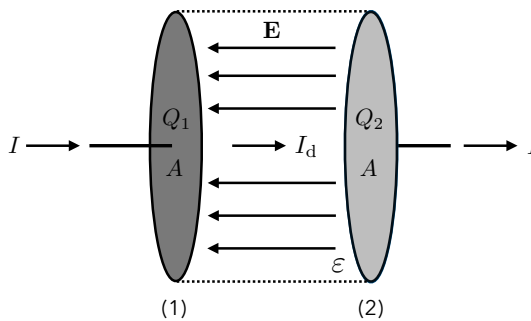
Ohm-törvény egyszerű összefüggést fogalmaz meg az alkatrészen eső feszültség (U) és az azon átfolyó áram (I) között. A kondenzátorokat és a tekercseket együtt *reaktív* elemeknek is nevezzük, „működésüket” az elektrodinamika törvényei alapján érthetjük meg (ld. alább). Az említett áramköri elemek alapesetben *lineárisak*, azaz fenti jellemzőik értéke nem függ a rájuk kapcsolt feszültségtől, ill. a rajtuk átfolyó áramtól. Ez valós elemek esetén természetesen csak korlátozottan teljesül, az eltérések oka, hogy elég nagy külső tér (feszültség) esetén a

⁵Valós áramköri elemek esetében egyes elemek nem feltétlenül írhatók le tisztán egyetlen jellemzővel, pl. a tekercseknek is van véges ellenállása, és az ellenállásoknak is van véges induktivitása.



2.2. ábra. A Kirchhoff-törvények illusztrációja: (a) „huroktörvény” ($U(t) - U_R - U_L - U_C = 0$) és (b) „csomóponti törvény” ($I_L + I_R + I_C = 0$).

rendszer lineáris válasza mellett ezen tér erőssége szerinti sorfejtésben a magasabb, nemlinearitást előidéző hatványokat is figyelembe kell venni. Egyes *nemlineáris* elemek esetén ez a viselkedés tervezett és számos elektronikai alkalmazás alapja [15].



2.3. ábra. A kondenzátor működési elvének magyarázatához.

Egy kondenzátor a legegyszerűbb esetben két párhuzamos, A felületű elektródából áll, melyek között ε permittivitású szigetelőréteg található (ld. 2.3. ábra). Az utóbbi lehet vákuum, levegő, vagy más gáz, valamilyen folyadék, ill. szilárd halmazállapotú dielektrikum. Itt feltesszük, hogy az elektródák mé-

rete jelentősen meghaladja azok távolságát. Ez alapján feltételezhetjük, hogy az elektródák közötti elektromos tér homogén, és eltekinthetünk az elektródák széleinél fellépő tértorzulástól [6].

Vizsgáljuk egy ilyen kondenzátor feltöltődését olyan kezdeti állapotból, amikor az elektródáin lévő töltések kezdeti értéke $Q_1 = Q_2 = 0$! Ha a kondenzátort $I(t)$ áram tölti, akkor t időpontban az (1) jelölésű elektródán a töltés értéke $Q_1 = \int_0^t I(\tau) d\tau$. Mivel az áramkörben az áram értéke mindenhol azonos, ezért igaz, hogy a (2) elektródán a töltés $Q_2 = -Q_1$. Az A felületű elektródán lévő $Q = Q_1$ töltés $\sigma_1 = Q/A$ felületi töltéssűrűségnek felel meg, ami a Gauss-törvény szerint $E_1 = \sigma/2\varepsilon$ erősségű elektromos teret kelt. A másik elektróda ellentétes töltését is figyelembe véve az elektródák közötti elektromostér-erősségre $E = \sigma/\varepsilon$ és a kondenzátor feszültségére

$$U = \frac{\sigma l}{\varepsilon} = \frac{Ql}{\varepsilon A} \quad (2.61)$$

adódik. A kapacitást, mint fizikai mennyiséget a feszültség és a töltés aránya definiálja, azaz

$$C = \frac{Q}{U}, \quad (2.62)$$

ami a geometriai jellemzőktől és az elektródák közötti tért kitöltő közeg permittivitásától⁶ – a 2.61. összefüggés alapján – az alábbi módon függ:

$$C = \frac{\varepsilon A}{l}. \quad (2.63)$$

Ha feltételezzük, hogy a (kezdetben nulla feszültségű) kondenzátort egy harmonikus időfüggésű ($f = \omega/2\pi$ frekvenciájú)

$$I(t) = I_0 \cos \omega t \quad (2.64)$$

áramú forrás táplálja, akkor a $dQ/dt = C dU/dt = I(t)$ összefüggés alapján a kondenzátor feszültsége az idő függvényében:

$$U(t) = \frac{1}{C} \int_0^t I(\tau) d\tau = I_0 \frac{1}{\omega C} \sin \omega t. \quad (2.65)$$

Ebből látható, hogy a kondenzátor feszültsége szintén harmonikus időfüggést követ, de 90° -kal „késik” az áramhoz képest. $U(t)$ és $I(t)$ csúcserőértékei között a

$$Z_C = \frac{1}{\omega C} \quad (2.66)$$

faktor fejezi ki a kondenzátor impedanciájának abszolút értékét.

⁶Megjegyezzük, hogy mivel az anyagok permittivitása általában frekvenciafüggő, ezért a kondenzátorban alkalmazott dielektrikumtól függően ez a frekvenciafüggés a kapacitásban is megjelenhet.

A kondenzátoron átfolyó áram az elektródák között eltolási áram formájában folyik, tényleges töltésáramlás nélkül. A fenti példát véve, a kondenzátor feszültségének 2.65. szerinti alakját felhasználva az eltolási áram:

$$I_d(t) = A\varepsilon \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{A\varepsilon}{l} \frac{\partial}{\partial t} U(t) = \frac{A\varepsilon}{l\omega C} I_0(\omega \cos \omega t) = \underbrace{\frac{A\varepsilon}{lC}}_{\equiv 1} I_0 \cos \omega t = I(t), \quad (2.67)$$

vagyis az eltolási áram pontosan megegyezik az elektródákhoz folyó vezetési árammal. Láthatóan szó sem esett a mágneses térről, vagyis a kondenzátort váltakozó áram esetén kvázielektromos közelítésben kezeltük (ami mindaddig jogos, amíg $l \ll \lambda = c/\omega$).⁷

Következő pontként ismerkedjünk meg a másik alapvető reaktív elem, a tekercs működésével! Egy mágneses rendszer (esetünkben a tekercs/vezető) teljes energiája a 2.12. összefüggés alapján $W_B = \frac{1}{2\mu} \int B^2 dV$. Elsőként tekintsünk egy egyetlen menetből álló tekercset, azaz egy egyszerű körvezetőt, amiben I áram folyik! Ennek L önindukciós együtthatóját a rendszer mágneses energiája alapján,

$$W_B = \frac{1}{2} L I^2 \quad (2.68)$$

szerint definiálhatjuk.

Vegyük észre, hogy a mágneses tér energiáját az $\mathcal{A}$ vektorpotenciál segítségével más alakba is írhatjuk:

$$\begin{aligned} W_B &= \frac{1}{2} \int \mathbf{B} \cdot \mathbf{H} dV = \frac{1}{2} \int (\nabla \times \mathcal{A}) \cdot \mathbf{H} dV \\ &= \frac{1}{2} \int \mathcal{A} \cdot (\nabla \times \mathbf{H}) dV = \frac{1}{2} \int \mathbf{j} \cdot \mathcal{A} dV, \end{aligned} \quad (2.69)$$

Amennyiben vezetőink vannak, amikben áramok folynak, a fenti integrál átalakítható:

$$\begin{aligned} W_B &= \frac{1}{2} \int \mathbf{j} \cdot \mathcal{A} dV = \frac{1}{2} I \oint \mathcal{A} \cdot d\mathbf{s} \\ &= \frac{1}{2} I \int (\nabla \times \mathcal{A}) \cdot d\mathbf{A} = \frac{1}{2} I \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A} = \frac{1}{2} I \Phi, \end{aligned} \quad (2.70)$$

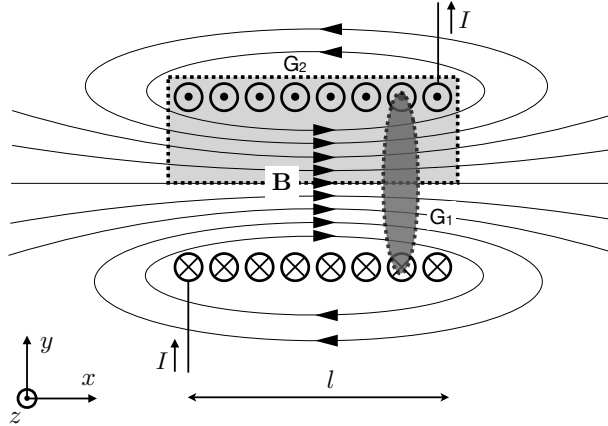
ahol Φ a mágneses fluxus. Ezek alapján az N menetszámú tekercs öninduktivitását

$$L = \frac{N\Phi}{I} \quad (2.71)$$

is definiálhatja, ahol Φ (az egy meneten mért) mágneses fluxus és I a tekercsen átfolyó áram. Egy hosszú tekercs belsejében a mágneses tér homogén és párhuzamos a tekercs tengelyével. Ekkor, ha pl. a 2.4. ábrán jelölt G_1 görbe által

⁷A nagyságrendek érzékeltetésére vegyünk egy példát! A rádiófrekvenciás plazmaforrások esetén tipikus $f = 10$ MHz frekvencia mellett $\lambda \cong 30$ m, vagyis egy néhány cm méretű kondenzátor nagyon pontosan leírható ezzel a közelítéssel. Ugyanakkor például a repülőtereken használt egésztest szkennerek a mikrohullámú tartomány felső határán, ~ 300 GHz frekvencián, ill. ~ 1 mm hullámhosszon működnek, az ilyen rendszerek elektronikai felépítése merőben más megközelítést igényel.

körbezárt A felületet tekintjük, a mágneses fluxus értéke $\Phi = BA$, ahol $B = |\mathbf{B}|$ a mágneses indukció értéke.



2.4. ábra. A tekercs működési elvének magyarázatához. Az ábra a tekercs hosszszelvényét mutatja, $\odot$ és $\otimes$ a tekercset alkotó huzalban az ábra síkjából felénk mutató z irányba folyó, illetve az azzal ellentétes irányba folyó áramot jelzik. A G_1 görbe az (y, z) síkban, míg a G_2 görbe az (x, y) síkban van.

A mágneses indukció kiszámításánál – a kvázimágneses közelítésnek megfelelően – az eltolási áram nélküli Ampère-törvényből indulunk ki, mely szerint $\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j}$. Az egyenlet integrális alakja, egy zárt G görbét feltételezve

$$\oint_G \mathbf{H} \cdot d\mathbf{s} = \int_A \mathbf{j} \cdot d\mathbf{A}, \quad (2.72)$$

ahol ds a G görbe íveleme, $d\mathbf{A}$ pedig a görbe által bezárt A felület eleme. A 2.4. ábra szerinti geometriát tekintve, (i) a mágneses térnek a tekercs végeinél fellépő inhomogenitásától eltekintve és (ii) a tekercsen kívül kialakuló (a tekercs hosszának növelésével eltűnő) mágneses teret elhanyagolva, a G_2 görbét tekintve a fenti egyenlet bal oldalára az alábbi adódik:

$$\oint_{G_2} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{s} = Hl. \quad (2.73)$$

Ugyanekkor, az egyenlet jobb oldala, ami a görbe által bezárt felületen átfolyó áram, megegyezik a tekercsen átfolyó áram és a G_2 görbe által bezárt menetek számának szorzatával, azaz

$$\int_A \mathbf{j} \cdot d\mathbf{A} = NI. \quad (2.74)$$

A fentiekből a mágneses tér erősségére, illetve a mágneses indukcióra

$$H = \frac{NI}{l}, \quad B = \mu \frac{NI}{l} \quad (2.75)$$

adódik, ahol vákuumban $\mu = \mu_0$, egy μ_r relatív permeabilitású közeg jelenlétében pedig $\mu = \mu_0\mu_r$. Az induktivitás értékére 2.71. alapján az alábbi értéket kapjuk:

$$L = \mu \frac{N^2 A}{l}, \quad (2.76)$$

ami láthatóan csak a tekercs geometriájától függ.

Természetesen az is előfordulhat, hogy nem egy, hanem több tekercsünk is van, melyek mindegyikében indukálódik mágneses tér a bennük folyó áram következtében, így ilyenkor a rendszer mágneses energiájába az egész mágneses teret bele kell venni, emiatt „kereszttagok” is lesznek, hiszen pl. két vezetőre $\mu_0 W_B = \frac{1}{2} \int (\mathbf{B}_1 + \mathbf{B}_2)(\mathbf{B}_1 + \mathbf{B}_2) dV = \frac{1}{2} \int (B_1^2 + B_2^2) dV + \int (\mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{B}_2) dV$, ahol az utóbbi tagban mindkét vezető mágneses tere szerepel. Emiatt általánosan P darab vezetőre

$$W_B = \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^P M_{kl} I_k I_l = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^P \Phi_k I_k, \quad (2.77)$$

ahol az indexek a vezetőkre vonatkoznak, illetve bevezettük az M_{kl} indukciós mátrixot, amiről elmondható, hogy szimmetrikus, azaz $M_{kl} = M_{lk}$, illetve pozitív definit (mivel az energia pozitív mennyiség). A diagonális elemek a már látott önindukciós együtthatók, $M_{kk} = L_k$, a nemdiagonális tagok pedig a *kölcsönös indukciós együtthatók* lesznek. Például két vezető esetén

$$W_B = \frac{1}{2} (L_1 I_1^2 + L_2 I_2^2) + M I_1 I_2, \quad (2.78)$$

ahol M a kölcsönös indukciós együttható.

Térjünk vissza az egy tekercs esetéhez, ahol csak az önindukciós együtthatót kell figyelembe venni! Ha a tekercsben váltakozó áram folyik, akkor a Faraday-törvény értelmében ez elektromos teret indukál a mágneses tér változása miatt. A törvény $\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B} / \partial t$ differenciális alakjának integrális változata a 2.4. ábra G_1 görbéjére felírva:

$$\oint_{G_1} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} = - \int_A \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \cdot d\mathbf{A}. \quad (2.79)$$

Az egyenlet bal oldalán a tekercs egy menetében indukált feszültség (azaz a teljes, N menetszámú tekercsen keletkező feszültség N -ed része) szerepel, a jobb oldala pedig $-A \partial_t B$ alakba írható (u.i. a G_1 görbe síkja merőleges a tekercs tengelyére). A 2.75. összefüggés segítségével tehát

$$\frac{U}{N} = -A \frac{\partial B}{\partial t} = -A \mu \frac{N}{l} \frac{dI}{dt}, \quad (2.80)$$

azaz

$$U = -\mu \frac{N^2 A}{l} \frac{dI}{dt} = -L \frac{dI}{dt}. \quad (2.81)$$

Megjegyezzük, hogy teljesen analóg módon történik több tekercs esetén is a feszültség levezetése, ám ekkor a kölcsönös indukciós együtthatót is figyelembe kell venni. Ezek alapján megérthető pl. a transzformátor működése.

Feltéve, hogy a tekercset egy szinuszosan változó áramforrásra kapcsoljuk, azaz

$$I(t) = I_0 \sin \omega t, \quad (2.82)$$

a feszültség időfüggése:

$$U(t) = -L \frac{d}{dt} I(t) = -\omega L I_0 \cos \omega t. \quad (2.83)$$

Látható, hogy itt – a kondenzátor esetével ellentétben – a feszültség időfüggése 90° -kal „siet” az áramhoz képest, $U(t)$ és $I(t)$ csúcserkéi között pedig a

$$Z_L = \omega L \quad (2.84)$$

faktor fejezi ki a tekercs impedanciájának abszolút értékét.

A tény, hogy a reaktív áramköri elemek esetén a feszültség és az áram harmonikus időfüggvényei között adott fázisszög van, illetve az a könnyen elfogadható állítás, hogy az ilyen elemekből, forrásokból és rezisztív elemekből felépülő lineáris hálózatokban ez általánosan is igaz, kézenfekvőnek látszik a releváns mennyiségek *komplex amplitúdókkal* való jellemzése, ez ugyanis információ tartalmazhat mind az amplitúdóról, mind pedig a fázisszögről. Egy „összetartozó” (azaz pl. egy, vagy több kapcsolódó áramköri elemen mért) feszültség-áram értékpár hányadosa így szintén általánosan egy komplex mennyiség lesz, mégpedig az adott elem (vagy együttesük) *komplex impedanciája*.

A komplex amplitúdók használata a fizika más területein is hasznos, a periodikus jelenségekkel kapcsolatban. Bevezetésükhöz tekintsünk valamely A , harmonikus időfüggés szerint (f frekvenciával) változó mennyiséget. Ezt általánosan

$$A(t) = A_0 e^{i(\omega t + \varphi_A)} \quad (2.85)$$

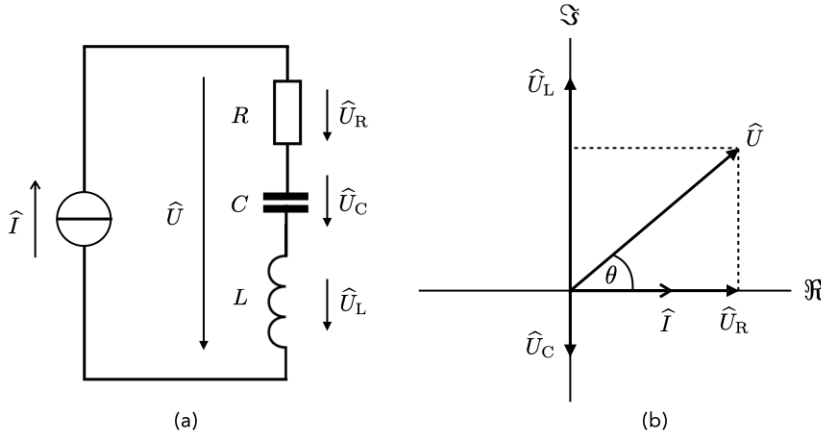
alakban reprezentálhatjuk, ahol A_0 és φ_A az adott mennyiség amplitúdója és fázisa, valamint $\omega = 2\pi f$. A fenti összefüggés

$$A(t) = A_0 e^{i\varphi_A} e^{i\omega t} = \hat{A} e^{i\omega t} \quad (2.86)$$

alakba is írható, ahol az $\hat{A}$ komplex amplitúdó mind az adott mennyiség amplitúdóját, mind pedig fázisát tartalmazza.⁸

A komplex amplitúdók alkalmazásához tekintsük példaként a 2.5.(a) ábra szerinti áramkört, ami egy f frekvenciájú harmonikus időfüggésű áramot szolgáltató forrást, egy ellenállást, egy kondenzátort és egy tekercset tartalmaz! Az ellenálláson eső feszültség fázisban van az átfolyó árammal, viszont az előzőekben láttuk, hogy a kondenzátorra és a tekercsre ez nem igaz. Az előbbi esetében a feszültség 90° -ot „késik”, az utóbbi esetében pedig 90° -ot „siet” az áram hullámformájához képest. Vegyük az áramkörben folyó áram fázisát nullának és ennek

⁸A komplex amplitúdókkal a számítások többnyire lényegesen egyszerűbbek, a releváns fizikai mennyiségek közben a komplex alakok valós, vagy képzetes részeként értelmezhetők. Például, ha egy tényleges mennyiség $A = A_0 \sin \omega t$ alakú, akkor ez $A_0 e^{i\omega t} = A_0 (\cos \omega t + i \sin \omega t)$ képzetes része.



2.5. ábra. Elektromos áramkör jellemzőinek leírása komplex amplitúdók segítségével.

megfelelően a 2.5.(b) ábra szerinti komplex síkon az áram $\hat{I}$ komplex amplitúdóját a valós tengely irányába vesszük fel. Mivel az ellenálláson eső feszültség fázisa megegyezik az áram fázisával, ezért $\hat{U}_R$ ugyanebbe az irányba mutat. A tekercsen eső feszültség komplex amplitúdója $\hat{U}_L = \tilde{Z}_L \hat{I}$, ahol

$$\tilde{Z}_L = i\omega L \quad (2.87)$$

a tekercs komplex impedanciája. Az itt megjelenő i faktor egy 90° -os elforgatást jelent, azaz $\hat{U}_L$ a képzetes tengely irányába esik. A kondenzátor esetében

$$\tilde{Z}_C = 1/i\omega C = -i/\omega C, \quad (2.88)$$

vagyis $\hat{U}_C$ ellentétes irányú $\hat{U}_L$ -hez képest. A három elemhez tartozó komplex amplitúdók vektoriális összegeként egyszerűen megszerkeszthető az $\hat{U}$ eredő feszültség, ami $\hat{U} = \tilde{Z} \hat{I}$ kapcsolatban van az árammal, ahol $\tilde{Z} = Z e^{i\theta}$ az eredő komplex impedancia.

Egyenáramú körökben egy adott elemen disszipálódó *teljesítmény* értéke:

$$P = UI, \quad (2.89)$$

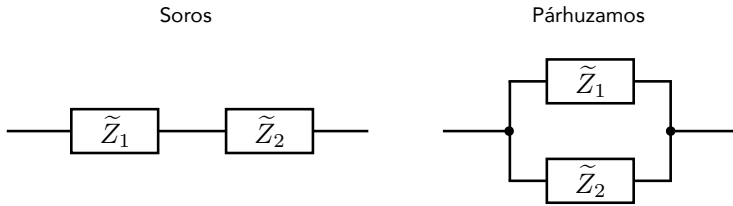
míg váltakozó áramú körökre a *komplex teljesítmény* definíciója (pl. [16]):

$$\tilde{S} = \tilde{U}_{\text{eff}} \tilde{I}_{\text{eff}}^*, \quad (2.90)$$

ahol $\tilde{U}_{\text{eff}} = \tilde{U}/\sqrt{2}$ és $\tilde{I}_{\text{eff}}^* = \tilde{I}^*/\sqrt{2}$ a feszültség és az áram *effektív* értékei, ill. $\tilde{I}^*$ az áram komplex konjugáltja. A „fogyasztó” által felvett P teljesítmény értéke a komplex teljesítmény valós része.

Fontos megjegyeznünk még, hogy sorosan, ill. párhuzamosan kapcsolt elemek eredő impedanciája (ld. 2.6. ábra)

$$\tilde{Z}_{\text{soros}} = \tilde{Z}_1 + \tilde{Z}_2 \quad , \quad \tilde{Z}_{\text{párhuzamos}} = \frac{\tilde{Z}_1 \tilde{Z}_2}{\tilde{Z}_1 + \tilde{Z}_2}. \quad (2.91)$$



2.6. ábra. Áramköri elemek soros és párhuzamos kapcsolása.

Mint már említettük, egy áramköri elem viselkedése alapvetően függ a frekvenciától. A valóságos alkatrészek nemideális jellege mellett nagyon fontos megjegyezni, hogy maguk a vezetékek is rendelkeznek rezisztív és reaktív tulajdonságokkal. Az előbbi oka a véges vezetőképesség, az utóbbi pedig abból származik, hogy például egy egyenes vezetékdarabnak is van véges induktivitása, illetve, ha több vezeték fut egymás mellett, akkor ezek között kapacitív csatolás lép fel. Míg ezek a tulajdonságok kis frekvenciákon és rövid hosszskálaikon általában elhanyagolhatóak, magasabb frekvenciákon, pl. a számunkra fontos rádiófrekvenciás tartományban ezek – elsősorban a reaktív jellemzők – alakítják ki a jelek terjedési tulajdonságait [15].

Emlékeztetünk arra a fenti feltételezésre, miszerint a vizsgált áramköri elemek lineárisak. Ezt, mint már indokoltuk, addig tehetjük meg, amíg az alkalmazott frekvenciához tartozó hullámhossz lényegesen nagyobb, mint ezen elemek mérete.



Az elektrodinamikai és villamosságtani alapok áttekintése után most a számunkra fontos alapismeretek másik részének, a statisztikus fizika alapjainak tárgyalására térünk át. E tudományterület a „rendkívül sok” (határátmenetben a *termodinamikai határesetnek* megfelelően $N \rightarrow \infty$ számú) részecskéből álló *makroszkopikus rendszerek* viselkedését és tulajdonságait meghatározó törvényszerűségeket vizsgálja, így megfelelő leírást biztosít a nagyon nagy számú töltött részecskéből álló plazmákra.

2.3. A statisztikus fizika elemei

A statisztikus fizika témaköréből itt csak a legfontosabb, a plazmafizikához feltétlen szükséges ismereteket közöljük, a részletes bevezetés pl. a [17–20]

könyvekben megtalálható.

Egy klasszikus fizikai sokrészecske-rendszert alkotó részecskéket a $\mathbf{q}$ pozíciójukkal és a $\mathbf{p}$ impulzusukkal jellemezhetjük, ami minden egyes részecskére (általános esetben) hat koordinátát jelent. Ennek megfelelően egy N részecskéből álló rendszert klasszikusan $6N$ koordinátával írhatunk le, vagyis a

$$(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = (\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_N) \quad (2.92)$$

$6N$ -dimenziós vektorral jellemezhetjük annak a Γ fázistérben felvett helyzetét.⁹ A rendszer részecskéinek adott időpillanatban a fázistérben elfoglalt helyét (ami egy pont a $6N$ -dimenziós fázistérben) a rendszer egy $\mathbf{m}(t)$ mikroállapotának nevezzük. Ennek a pontnak az időbeli mozgását (más szóval a rendszer időbeli fejlődését) a

$$\frac{d\mathbf{q}_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}_i} \quad , \quad \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}_i} \quad (2.93)$$

kanonikus egyenletek írják le a rendszerre vonatkozó, a teljes energiát megadó $\mathcal{H}$ Hamilton-függvény alapján [21].

Mivel akár csak egy molnyi anyagban $\approx 6 \times 10^{23}$ részecske található, így egy makroszkopikus rendszerben az összes részecske (teljesen determinisztikus) mozgásegyenletének megoldása reménytelen feladat. Ez azonban valójában nem probléma, hiszen a termodinamika elvei alapján elég, ha az adott rendszert néhány makroszkopikus fizikai mennyiséggel (pl. hőmérséklet, nyomás, energia, stb.) jellemezzük. A rendszer makroszkopikus mennyiségekkel történő leírása esetén ezen mennyiségeknek egy adott időbeli értékeit egy $\mathfrak{M}(t)$ makroállapotnak fogjuk nevezni.

Világos, hogy ugyanazon makroállapot nagyon sok, egymástól különböző mikroállapot esetén is megvalósulhat. Ezen megfontolás alapján vezessük be az ún. statisztikus sokaság fogalmát: ez nem lesz más, mint a valamely $\mathfrak{M}(t)$ makroállapotban lévő rendszer $\mathcal{N}$ számú másolata, amelyek mindegyike egy különböző $\mathbf{m}(t)$ mikroállapotban van a ($6N$ -dimenziós) Γ fázistérben. Legyen $d\mathcal{N}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$ a mikroállapotok száma a fázistér

$$d\Gamma = \prod_{i=1}^N d^3\mathbf{p}_i d^3\mathbf{q}_i \quad (2.94)$$

infinitesimális térfogatában a $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ pont körül. Mivel számunkra nem fontos minden pont minden koordinátájának ismerete, hiszen csak a makroszkopikus fizikai mennyiségeket szeretnénk meghatározni, célszerű bevezetni egy fázistérbeli (valószínűségi) eloszlást, $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$ -t, ahol

$$\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) d\Gamma = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{d\mathcal{N}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)}{\mathcal{N}}. \quad (2.95)$$

⁹A továbbiakban az érthetőség kedvéért a háromdimenziós vektorokat félkövér betűkkel, a $3N$ -dimenziós vektorokat dőlt félkövér betűkkel jelöljük.

Ennek ismeretében valamely $Y(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ mennyiség makroszkopikus értéke a

$$\langle Y \rangle = \int \rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}) Y(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d\Gamma = \int \rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}) Y(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \prod_{i=1}^N d^3 \mathbf{p}_i d^3 \mathbf{q}_i \quad (2.96)$$

összefüggés alapján határozható meg.

A statisztikus fizika a fizikai rendszerek *egyensúlyi* tulajdonságaival foglalkozik, az egyensúlyig való út „leírása” a kinetikus elmélet feladata (amit az 5. fejezetben tekintünk át). Egyensúlyban a makroszkopikus állapotjelzők nem változnak.

Felmerül azonban a kérdés, hogyan válasszuk adott körülmények között a rendszert jellemző egyensúlyi eloszlásfüggvényt? A számolások könnyebbségét szem előtt tartva most diszkrét valószínűségi eloszlásokkal fogunk dolgozni, de a számolás teljesen analóg módon átvihető folytonos valószínűségi eloszlások esetére is.

Legyen tehát a diszkrét valószínűségi eloszlásunk $p(i)$, amely az M lehetséges kimenetelből megadja az i -vel jelölt állapot egyensúlyi valószínűségét! Így

$$\sum_{i=1}^M p(i) = 1. \quad (2.97)$$

Definiáljuk az adott eloszlás esetén az ún. (Shannon-) *entrópiát*, S -et a következőképpen [17]:

$$S = -k_B \sum_{i=1}^M p(i) \ln p(i). \quad (2.98)$$

Nézzünk meg két extrém esetet: (i) Ha biztosak vagyunk abban, hogy melyik állapot következik be, tehát $p(i) = 1$, egyébként 0, akkor $S = 0$. (ii) Ha semmit nem tudunk, vagyis mint a dobókocka esetében minden állapot egyenlő valószínűségű, azaz $p(i) = 1/M$, akkor $S = k_B \ln M$. Az entrópia láthatóan a rendszerről rendelkezésre álló információnk *hiányát* jellemző mennyiség, azaz minél kevesebbet tudunk a rendszerről, annál nagyobb lesz az entrópia.

A statisztikus fizika *fundamentális posztulátuma* szerint a lehetséges valószínűségi eloszlások közül azt kell választanunk, amelyik a rendszerrel kapcsolatos információink mellett a *maximális* entrópiát adja. Nézzük a legegyszerűbb példát: egy zárt rendszert, amiről semmi különösebb dolgot nem tudunk. Ekkor meg kell keresnünk S maximumát úgy, hogy a valószínűségi eloszlásra vonatkozó triviális kényszer, $\sum_{i=1}^M p(i) = 1$ teljesüljön. Ezt a *Lagrange-multiplikátorok* módszerével tehetjük meg, tehát extremalizáljuk az

$$\tilde{S}/k_B = - \sum_{i=1}^M p(i) \ln p(i) + \lambda \left[\sum_{i=1}^M p(i) - 1 \right] \quad (2.99)$$

függvényt $p(i)$ szerint, vagyis

$$0 = \frac{\partial \tilde{S}}{\partial p(i)} = -\ln p(i) + \lambda - 1 \Rightarrow p(i) = e^{\lambda-1}, \quad (2.100)$$

vagyis azt kaptuk, hogy $p(i)$ egy konstans minden i értékére, ami tehát nem lehet más, mint $1/M$, hiszen $p(i)$ -re teljesülnie kell a 2.97 egyenletnek. Ismét megkaptuk tehát, hogy egy zárt rendszer valószínűségi eloszlása egyenletes eloszlás. Tegyük fel, hogy a zárt rendszerünk E energiája állandó, és $\Omega(E)$ az azon mikroállapotok száma, ami egy makroállapotnál pontosan az E energiát eredményezi. Ekkor $p(i) = 1/\Omega(E)$ és

$$S = k_B \ln \Omega(E). \quad (2.101)$$

Az így definiált rendszert hívjuk *mikrokanonikus sokaságnak*.

Számunkra a fenti mellett egy másik leírási mód is fontos lesz, amikor a rendszerünk egy nagy *hőtartállyal* van kapcsolatban, ami azt jelenti, hogy a rendszerünk állandó T hőmérsékleten van.¹⁰ Ezt az esetet *kanonikus sokaságnak* nevezzük. Állandó részecskeszám mellett a $dE = TdS - p dV$ termodinamikai összefüggés alapján állandó térfogat esetében a hőmérsékletet az

$$\frac{1}{T} = \left. \frac{\partial S}{\partial E} \right|_{N,V} \quad (2.102)$$

reláció alapján definiáljuk. Mivel egyensúlyban a rendszer makroszkopikus mennyiségei megegyeznek az átlagértékekkel, így az állandó hőmérséklet azt jelenti, hogy a rendszer

$$E = \langle E_i \rangle = \sum_{i=1}^M p(i) E_i \quad (2.103)$$

átlagenergiája állandó. Itt E a rendszer makroszkopikus (a termodinamika első főtételeben szereplő) energiája. Ez egy további kényszert jelent, így ekkor az entrópia maximumának a feltétele a következő:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial p(i)} \left(- \sum_{i=1}^M p(i) \ln p(i) + \lambda \left[\sum_{i=1}^M p(i) - 1 \right] + \beta \left[\sum_{i=1}^M p(i) E_i - \langle E_i \rangle \right] \right) \\ &= -\ln p(i) + \lambda - 1 + \beta E_i \Rightarrow p(i) \propto e^{-\beta E_i}. \end{aligned} \quad (2.104)$$

Ahhoz, hogy meghatározzuk β -t, vezessük be a

$$Z = \sum_{i=1}^M e^{-\beta E_i} \quad (2.105)$$

partíciós függvényt, amivel $p(i) = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}$. Ekkor az entrópia

$$\begin{aligned} S &= -k_B \sum_{i=1}^M p(i) \ln p(i) \\ &= k_B \beta \sum_{i=1}^M p(i) E_i + k_B \ln Z \sum_{i=1}^M p(i) = k_B \beta \langle E \rangle + k_B \ln Z. \end{aligned} \quad (2.106)$$

¹⁰ A hőmérséklet definiálhatóságához elég az, hogy a teljes rendszer még makroszkopikusnak tekinthető részrendszerei (termodinamikai) egyensúlyban legyenek, noha ilyenkor a hőmérséklet nem lesz állandó a test minden pontjában. Ekkor *részleges (termodinamikai) egyensúlyról* beszélünk, amely különösen fontos pl. a hidrodinamikában [18, 22].

Felhasználva a 2.102 egyenletet, $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}|_{N,V} = k_B\beta$, tehát megkaptuk, hogy $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

A fenti, diszkrét valószínűségi eloszlásra végzett analízist folytonos fázistérbeli eloszlásra is le lehet vezetni, amelyhez a variációs számítás ismerete szükséges. Ez, a részleteket mellőzve, a folytonos sűrűségfüggvényre az alábbi értéket adja:

$$\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = A e^{-\frac{E(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{k_B T}}, \quad (2.107)$$

ahol A egy normalizációs állandó.

A továbbiakban tekintsünk egy ideálisgáz-szerű rendszert, ahol a rendszert alkotó N számú részecske egymással nincs kölcsönhatásban. Ekkor a fenti sűrűségfüggvény triviálisan faktorizálódik N ugyanolyan részre, hiszen

$$E(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sum_{n=1}^N E(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n), \text{ így } \rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \prod_{n=1}^N f(\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n), \text{ ahol}$$

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = A e^{-\frac{E(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{k_B T}} = A e^{-\frac{K(\mathbf{p}) + U(\mathbf{q})}{k_B T}}, \quad (2.108)$$

ahol a $K(p)$ függvény a *mozgási energia*, ami az impulzusok kvadratikusság függvénye, illetve amennyiben van valamilyen külső tér, akkor az $U(q)$ a helytől függő *potenciális energia*. Egyelőre tekintsünk el az utóbbitól, így megkapjuk az ún. *Maxwell–Boltzmann-eloszlást*

$$f_M(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f_M(\mathbf{v}) = \frac{1}{V} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2k_B T}}, \quad (2.109)$$

ahol az $\int f_M(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3\mathbf{v} d^3\mathbf{r} = 1$ normálást használtuk (ami megadja A értékét), valamint kihasználtuk, hogy $p = mv$, ahol m a részecskék tömege, v a sebessége. Gyakran Maxwell–Boltzmann-eloszlás alatt csak a sebességtől függő részt értik, ekkor az $1/V$ faktor nem szerepel a függvényben. Érdekes lehet másféle normálást is használni: legyen pl. az eloszlásfüggvény teljes fázistérre vett integrálja a részecskeszám, N . Ekkor az $1/V$ faktor helyett n , a sűrűség fog megjelenni az eloszlásfüggvényben. Láthatóan a fenti kifejezés sebességtérben izotróp, így érdemes a v_x, v_y, v_z változókról a v^2 sebességnégyzetre váltani. Ekkor az integrálási mérték $dv_x dv_y dv_z$ helyett $4\pi v^2 dv$ -re változik, és ekkor az eloszlásfüggvény

$$f_M(v) = n \, 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v^2 \exp\left[-\frac{mv^2}{2k_B T}\right], \quad (2.110)$$

ahol a normálás

$$\int_0^\infty f_M(v) dv = n \quad (2.111)$$

lesz. Láthatóan szokás a koordinátatranszformáció Jacobi-determinánsát (vagyis a (v_x, v_y, v_z) változókról a $v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$ változóra való áttéréshez szükséges faktort $dv_x dv_y dv_z = 4\pi v^2 dv$ alapján a $4\pi v^2$ -et) is beledefiniálni magába az eloszlásfüggvénybe.

A Maxwell–Boltzmann-eloszlásra jellemző fontos értékek:¹¹

– a legvalószínűbb sebesség:

$$v_m = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}, \quad (2.112)$$

– az átlagos sebesség:

$$\langle v \rangle = \frac{1}{n} \int_0^\infty v f_M(v) dv = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}, \quad (2.113)$$

– és az átlagos négyzetes sebesség:

$$\langle v^2 \rangle = \frac{1}{n} \int_0^\infty v^2 f_M(v) dv = \frac{3k_B T}{m} \Rightarrow \langle \varepsilon \rangle = \frac{m}{2} \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T, \quad (2.114)$$

ahol $\langle \varepsilon \rangle$ az átlagos kinetikus energia.

Az $\varepsilon = mv^2/2$ kinetikus energia eloszlását is megkaphatjuk, ha figyelembe vesszük, hogy az integrálási mérték $4\pi v^2 dv$ -ről $4\pi \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m^3}} d\varepsilon$ -ra változik, így

$$f_M(\varepsilon) = n \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{k_B T} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \exp \left[-\frac{\varepsilon}{k_B T} \right]. \quad (2.115)$$

Kiterjedt rendszerekben a sűrűség és a hőmérséklet a hely függvényében változhat (lásd a korábbi lábjegyzetet a részleges egyensúlyról), miközben az eloszlás *lokálisan* közelíthető a Maxwell–Boltzmann-eloszlással:

$$f_{LM}(x, v) = n(x) 4\pi \left[\frac{m}{2\pi k_B T(x)} \right]^{3/2} v^2 \exp \left[-\frac{mv^2}{2k_B T(x)} \right]. \quad (2.116)$$

Semleges részecskék helyett a továbbiakban tekintsünk elektromosan töltött részecskéket! A fentiek alapján most a potenciális energia járulékát is figyelembe kell venni. Az elektronok esetét tekintve (és feltételezve, hogy a jellemző hőmérsékletük (T_e) állandó), valamely *térben változó* $\phi(x)$ potenciál jelenlétében az eloszlásfüggvény alakja:

$$\begin{aligned} f_{LM}(x, v) &= n_0 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T_e} \right)^{3/2} v^2 \exp \left[-\frac{mv^2/2 - e\phi(x)}{k_B T_e} \right] \\ &= f_M(v) \exp \left[\frac{e\phi(x)}{k_B T_e} \right], \end{aligned} \quad (2.117)$$

¹¹Ezek kiszámításához hasznos az $I(k) = \int_0^\infty v^k \exp(-\mathcal{A}v^2) dv$ típusú határozott integrálok ismerete. A $t = \mathcal{A}v^2$ helyettesítéssel $I(k) = \frac{1}{2} \mathcal{A}^{-\frac{k+1}{2}} \int_0^\infty t^{\frac{k-1}{2}} e^{-t} dt = \frac{1}{2} \mathcal{A}^{-\frac{k+1}{2}} \Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right)$, ahol $\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt$, $\text{Re } x > 0$, az ún. *Gamma-függvény*, a faktoriális általánosítása. Az első néhány k természetes számra: $I(0) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \mathcal{A}^{-1/2}$, $I(1) = \frac{1}{2} \mathcal{A}^{-1}$, $I(2) = \frac{\sqrt{\pi}}{4} \mathcal{A}^{-3/2}$, $I(3) = \frac{1}{2} \mathcal{A}^{-2}$, $I(4) = \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \mathcal{A}^{-5/2}$, $I(5) = \mathcal{A}^{-3}$.

ahol n_0 a sűrűség azon az x helyen („bázisponton”), ahol $\phi = 0$.

Egy semleges (elektronokat és ionokat azonos sűrűségben tartalmazó) plazmában az elektronsűrűség és az ionsűrűség – *Boltzmann-faktorok* által kifejezett – megváltozása a potenciál hatására tehát:

$$n_e(r) = n_0 \exp\left[+\frac{e\phi(r)}{k_B T_e}\right], \quad n_i(r) = n_0 \exp\left[-\frac{e\phi(r)}{k_B T_i}\right]. \quad (2.118)$$

Ezek az összefüggések, mint később látni fogjuk, a plazma nyomásgradienséből és az elektromos térből származó erők egyensúlyát fejezik ki.



3. fejezet

Plazmafizikai alapfogalmak

3.1. A plazmák alapvető jellemzői

A következőkben a plazmákra jellemző alapvető *karakterisztikus idő- és hosszskálákat* vezetjük be. Mielőtt azonban ezt megtennénk, röviden tekintsük át, hogy mivel foglalkoztunk eddig: olyan, termodinamikai egyensúlyban lévő részecskerendszereket vizsgáltunk, ahol a részecskék egymástól függetlenek voltak, így eltekinthettünk a részecskék közötti kölcsönhatási energiától. Más szóval a rendszereinket ideális gáznak tekintettük, ami határesetben (magas hőmérséklet, alacsony sűrűség, stb.) kielégítő közelítésnek bizonyul. Mindazonáltal számos további érdekes jelenség a kölcsönhatások „bekapcsolásával” jelenik meg. Itt olyan jelenségek leírását adjuk meg, ahol a rendszer „nem áll távol” az ideális gáztól, azaz, ahol az 1. fejezetben bevezetett csatolási paraméterre $0 < \Gamma \ll 1$. (A részecskék közötti sokkal erősebb kölcsönhatás esetét a 11. fejezetben érintjük).

3.1.1. A Debye-árnyékolás

A következőkben azt vizsgáljuk, hogy egy semleges plazma „hogyan válaszol” egy benne elhelyezkedő járulékos töltésre. Ehhez tekintsünk egy n_0 sűrűségű plazmát (azaz n_0 számsűrűségű pozitív és negatív töltésű részecskéket, amelyek között a hosszútávú Coulomb kölcsönhatás van) és helyezzünk az origóba ($r = 0$) egy pontszerű pozitív Q töltést!

A járulékos töltés a plazmában perturbációt okoz, ami az elektronok és az ionok sűrűségének megváltozását eredményezi a 2.118. szerinti Boltzmann-faktoroknak megfelelően. Az utóbbiakban megjelenő $\phi(r)$ potenciál viszont nem egyedül a Q töltés Coulomb-potenciálja, hanem ennek és a megváltozott sűrűségeknek az együttes hatásából eredő érték! Célunk most ennek kiszámítása

$$\Delta\phi(r) = -\frac{e}{\varepsilon_0} [n_i(\phi, r) - n_e(\phi, r)] - \frac{Q}{\varepsilon_0} \delta(r) \quad (3.1)$$

Poisson-egyenlet megoldásával.

Az alábbiakban először a legtöbb tankönyvben megtalálható, egyszerű levezetést fogjuk bemutatni, mely arra a feltételezésre épül, hogy a perturbáció „nem túl erős”, és így a Boltzmann-faktorok exponenciális függvényei Taylor-soruk első két tagjával közelíthetők:¹

$$n_e(r) \cong n_0 \left[1 + \frac{e\phi(r)}{k_B T_e} \right] \quad , \quad n_i(r) \cong n_0 \left[1 - \frac{e\phi(r)}{k_B T_i} \right]. \quad (3.2)$$

A $\phi(r)$ potenciál kiszámításához a

$$\Delta\phi(r) = -\frac{e}{\varepsilon_0} [n_i(r) - n_e(r)] \quad (3.3)$$

egyenlet olyan megoldását keressük, amely eleget tesz a $\phi(r \rightarrow 0) = Q/(4\pi\varepsilon_0 r)$ és $\phi(r \rightarrow \infty) = 0$ feltételeknek, hiszen azt várjuk, hogy (i) a töltéshez közel a „szokásos” Coulomb-potenciált kapjuk, valamint, hogy (ii) a potenciál a végtelenben eltűnik. A 3.2. szerinti sűrűségeloszlásokat a 3.3. összefüggésbe behelyettesítve

$$\Delta\phi(r) - \frac{1}{\lambda_D^2} \phi(r) = 0 \quad (3.4)$$

adódik, ahol

$$\lambda_D^2 = \frac{\varepsilon_0 k_B}{ne^2} \left(\frac{1}{T_e} + \frac{1}{T_i} \right)^{-1}. \quad (3.5)$$

Felhasználva a Laplace-operátor gömbi koordináta-rendszerbeli alakjának

$$\Delta\phi = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\phi}{dr} \right) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\phi), \quad (3.6)$$

sugárfüggő részét, az alábbi összefüggéshez jutunk:

$$\frac{d^2}{dr^2} (r\phi) - \frac{1}{\lambda_D^2} (r\phi) = 0. \quad (3.7)$$

Az egyenlet megoldását $\Phi = r\phi$ helyettesítéssel,

$$\Phi(r) = c_1 \exp(r/\lambda_D) + c_2 \exp(-r/\lambda_D) \quad (3.8)$$

alakban kereshetjük, vagyis:

$$\phi(r) = \frac{c_1}{r} \exp(r/\lambda_D) + \frac{c_2}{r} \exp(-r/\lambda_D). \quad (3.9)$$

A fenti, a kis és nagy távolságokra előírt viselkedésre vonatkozó feltételekből $c_1 = 0$ és $c_2 = Q/4\pi\varepsilon_0$ adódik és így a megoldás a potenciálra:

$$\phi(r) = \frac{Q}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^{-r/\lambda_D}}{r}, \quad (3.10)$$

¹Itt elegendő a helykoordináta abszolút értékével számolni, ugyanis a vizsgált rendszer gömbszimmetrikus.

ahol λ_D a Debye-hossz, vagy árnyékolási hossz:

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B}{ne^2} \left(\frac{1}{T_e} + \frac{1}{T_i} \right)^{-1}}. \quad (3.11)$$

A potenciál fenti alakja *árnyékolt Coulomb-potenciál*, *Yukawa-potenciál* és *Debye-Hückel-potenciál* néven is ismert. Matematikai alakja azt fejezi ki, hogy a plazma a töltésperturbációk hatását exponenciálisan leárnyékolja.²

Az árnyékolás karakterisztikus hossza láthatóan mindkét komponens hőmérsékletétől függ. A 3.3. egyenlet alapján a középpontba helyezett Q töltés egy $-e(n_i - n_e) = -\varepsilon_0 \phi(r)/\lambda_D^2$ töltéssűrűséggel van leárnyékolva, melynek térfogati integrálja pontosan megegyezik $-Q$ -val.

Amennyiben csak az egyik plazmakomponens, például az elektronok árnyékoló hatását vizsgáljuk, a Debye-hossz:

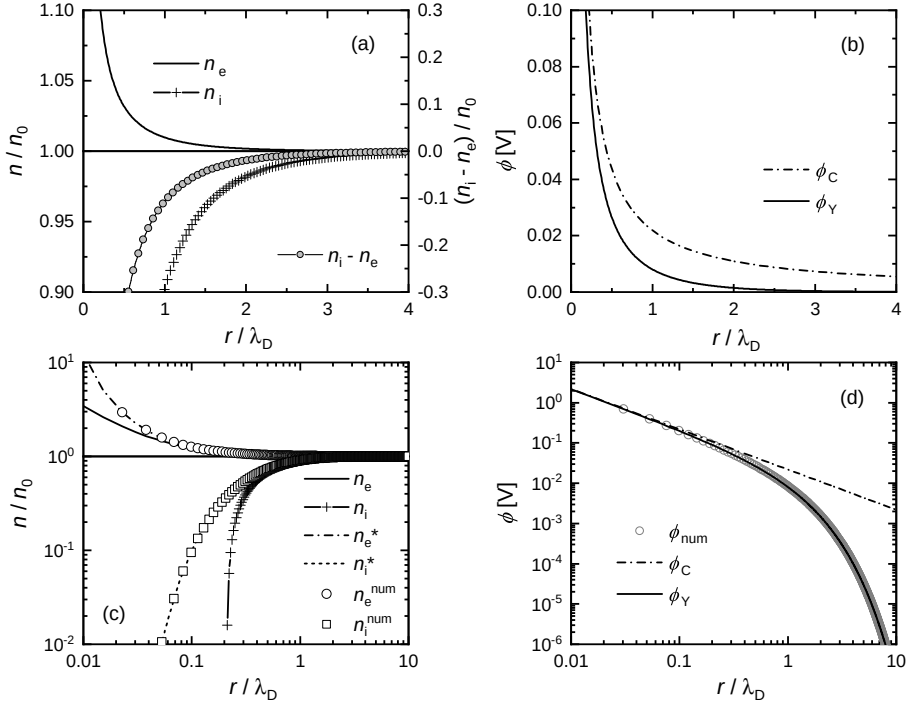
$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{ne^2}}. \quad (3.12)$$

Látható, hogy az árnyékolási hossz növekszik a elektronok hőmérsékletével, ugyanis gyorsabb elektronok trajektóriáit kevésbé tudja a perturbáló töltés módosítani. A nagyobb elektronsűrűség, triviális módon, hatékonyabb árnyékolást, kisebb λ_D értéket eredményez.

A 3.1. ábra segítségével nézzük meg a fenti modell eredményeit egy $n = 10^9 \text{ cm}^{-3}$ sűrűségű, $T_e = 10\,000 \text{ K}$ és $T_i = 1000 \text{ K}$ hőmérsékletekkel jellemzett plazma esetére, melybe egy járulékos, $Q = 1000 e$ (pozitív) töltést helyezünk. Az ábra (a) része a hely függvényében mutatja az elektronok és az ionok 3.2. összefüggés szerinti sűrűségét. A várakozásnak megfelelően az elektronok sűrűsége növekszik, a pozitív ionok sűrűsége pedig csökken az $r = 0$ pontban elhelyezett töltéshez közeledve, a Debye-hosszal összemérhető távolságon belül. Az ábra (b) része a Q töltés által létrehozott Coulomb-potenciált és a plazma árnyékoló hatásából eredő Yukawa-potenciált mutatja. Látható, hogy az utóbbi sokkal gyorsabban lecseng a Coulomb-potenciálhoz képest, azaz a plazma a járulékos töltés jelenlétét a Debye-hosszat néhányszor meghaladó távolságoknál elfedi. Az eredmények tehát teljes mértékben megfelelnek a várakozásainknak. Ugyanakkor vegyük észre, hogy a levezetésünk egy nem helytálló feltételezésre épült, ugyanis a járulékos töltés közelében, kis távolságok mellett a potenciál nyilvánvalóan divergál, és így nem jogos az a feltételezés, hogy a potenciál a Boltzmann-faktorokban csak kis perturbációt okoz. A 3.2. összefüggések ezért divergáló elektron és ionsűrűséget eredményeznek (az ionok esetében ráadásul negatív értékekkel).

A 3.1.(a) ábra ezt a problémát „eltitkolta”, ugyanis ez a sűrűség megváltozásának a $\pm 10\%$ -os értékeire korlátozódik, ahol a Taylor-sorok első tagjai még jó közelítést biztosítanak. A 3.1.(c) ábra a sűrűségek megváltozásának tággabb tartományát mutatja. Itt jól látható pl. az ionsűrűség hirtelen leesése, ami

²Az árnyékolt Coulomb-potenciálra, illetve az árnyékolási hosszra kapott fenti eredmények fontos szerepet kapnak majd a poros plazmák fizikájának tárgyalásakor (11. fejezet), ugyanis ezekben az elektronokhoz és az ionokhoz képest kis számban nano-mikrométer mérettartományú részecskék is jelen vannak, amik viszont a plazmakörnyezetből jelentős töltést vesznek fel. A köztük lévő kölcsönhatás jól közelíthető az árnyékolt Coulomb-potenciállal.



3.1. ábra. (a) Kvázisemleges, $n_0 = 10^9 \text{ cm}^{-3}$ sűrűségű plazma elektron- és ion-sűrűségének perturbációja egy, az origóba helyezett járulékos $Q = 1000 e$ (pozitív) töltés hatására, $T_e = 10\,000 \text{ K}$ és $T_i = 1000 \text{ K}$ mellett. A Q töltéstől távol $n_e/n_0 \rightarrow 1$ és $n_i/n_0 \rightarrow 1$, kis r értékeknél az elektronok sűrűsége megnő, a pozitív ionoké lecsökken. Az ábra jobb oldali skálája a normalizált netto töltéssűrűséget mutatja. (b) Az azonos paraméterekhez tartozó Coulomb ($\phi_C(r)$) és Yukawa ($\phi_Y(r)$) potenciálok. (c) Az egyszerű modellből ($n_{e,i}$) és a teljes Boltzmann-faktorokból adódó sűrűségek ($n_{e,i}^*$), valamint a Poisson-egyenlet numerikus megoldásából adódó sűrűségek ($n_{e,i}^{\text{num}}$). (d) Az analitikus Coulomb- és Yukawa-potenciálok, illetve a Poisson-egyenlet numerikus megoldásából adódó potenciál (ϕ_{num}).

a negatív értékek tartományába való nem-fizikai átmenetet jelzi. Ez az ábra a 2.118. összefüggések szerinti (teljes) Boltzmann-faktorokból számolt sűrűséget is mutatja, a fenti egyszerű levezetésből kapott a 3.10. Yukawa potenciálra, valamint a 3.1. egyenlet önkonzisztens *numerikus* megoldásának eredményeit is, a 2.118. szerinti Boltzmann-faktorokkal. Az utóbbi két adatsor teljes mértékben egyezik, ami azt jelenti, hogy az egyszerűsített modell helyes potenciálra vezetett azzal együtt, hogy hibás eredményeket adott a helyfüggő sűrűségekre. A modell eredményei a kis perturbációk tartományában helyesek és a Debye-hossz alatti tartományban is helytálló potenciál a nagyobb távolságra adódó helyes

megoldás és a $r \rightarrow 0$ melletti peremfeltétel „jótékony” eredménye.

A Debye-árnyékolás jelenségét a fentiekhez képest általánosabban, a plazmába tett bármiféle járulékos töltés nélkül is be lehet vezetni [17], mint azt az alábbiakban megmutatjuk.

K. 3: A Debye-árnyékolás általánosabb értelmezése [17]

A Debye-árnyékolás általánosabb értelmezéséhez tekintsünk egy töltött részecskéket tartalmazó rendszert T hőmérsékleten, ahol az i -edik komponensnek $q_i = Z_i e$ töltése van (specifikusan, elektronok esetén $Z = -1$). A makroszkopikus elektromosan semlegesség feltétele:

$$\sum_i Z_i n_{i,0} = 0, \quad (3.13)$$

ahol $n_{i,0}$ az i -edik komponens (homogén) sűrűségét jelöli abban az esetben, ha a többi komponens egyáltalán nincs rá hatással; $n_{i,0} = N_i/V$, ahol N_i a részecskék száma, V pedig a vizsgált rendszer térfogata ($N = \sum N_i$).

Ha a részecskék mozgási energiája (amely átlagban arányos T -vel) sokkal nagyobb, mint az átlagos kölcsönhatási energia, úgy első közelítésben eltekinthetünk a részecskék közötti kölcsönhatástól, és a komponenseket külön-külön ideális gázként írhatjuk le. Amennyiben szeretnénk figyelembe venni a részecskék közötti elektrosztatikus kölcsönhatást, úgy az elektrosztatikus energiát megkaphatjuk az alábbiak szerint [8]:

$$E = \frac{1}{2} \sum_k q_k \phi(\mathbf{r}_k), \quad (3.14)$$

ahol a k index végigmegy az összes részecskén, $\phi(\mathbf{r}_k)$ pedig az elektromos potenciál a k -adik részecske helyén (amit $\mathbf{r}_k$ -val jelölünk). Nemnulla hőmérsékleten azonban a részecskék termikus mozgást végeznek, ezért mind a potenciál, mind maga az energia is fluktuáló mennyiségek lesznek. A statisztikus fizika elvei szerint az E energia mint makroszkopikus mennyiség a fenti egyenlőség termikus átlagával lesz egyenlő, azaz

$$E = \frac{1}{2} \sum_k q_k \langle \phi(\mathbf{r}_k) \rangle, \quad (3.15)$$

ahol az átlagolás a kanonikus sokaság eloszlásfüggvénye (tehát a Boltzmann-faktor) szerint történik. Ennek pontos kiszámítása bonyolult, így gyakran közelítésekhez kell beérnünk. Ebben a fejezetben egy, a fizikában gyakran előforduló közelítési módszert az ún. *átlagtér-közelítést* mutatjuk be.^a Ennek lényege a következő: ahelyett, hogy a részecskék egymással való kölcsönhatását teljes mértékben figyelembe vennénk, feltesszük, hogy a részecskék mozgása egymástól független; mindegyikük

egy „külső” térben mozog, amely teret azonban a többi részecske által keltett tér átlagaként számítunk. Ekkor elhanyagolunk több, fontos dolgot is azért, hogy a részecskék egymáshoz képesti helyzetéről csak az átlagos téren keresztül veszünk tudomást. Ez természetesen rossz közelítés lesz olyan esetekben, amikor a részecskék elég közel kerülhetnek egymáshoz. Emiatt valamilyen kikötést kell majd tennünk arra vonatkozóan, hogy mikor használható a közelítésünk.

Az átlagtér-közelítés keretében (tehát feltételezve, hogy a kölcsönhatás ellenére is minden részecske egymástól függetlenül egy ϕ potenciálban mozog, amely azonban függ a többi részecskétől) a rendszer elektrosztatikus energiáját a következőképpen számolhatjuk:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N q_k \phi(\mathbf{r}_k) = \frac{1}{2} \sum_i Z_i e N_i \phi_i = \frac{1}{2} V \sum_i Z_i e n_{i,0} \phi_i, \quad (3.16)$$

ahol $\phi(\mathbf{r}_k)$ az „átlagtér” értéke a k -adik részecske helyén. A második egyenlőségben a minden egyes részecskére való összegzés helyett a részecsketípusokra vett összegzésre térünk át. Itt ϕ_i valamelyik, i -edik típusú részecske helyén vett potenciált jelöli (itt mutatkozik meg a részecskék függetlenségéről tett kikötésünk). Az átlagtér meghatározásához a következőképpen járunk el: válasszunk ki egy töltött részecskét: ekörül egy „átlagosan gömbszimmetrikus” töltésfelhő alakul ki, azaz az adott pont környezetében a különböző részecsketípusok sűrűsége és a potenciál is csak a „kiszemelt” részecskétől vett távolságtól függ. A vizsgált részecske (mint origó) körüli i -típusú részecskék potenciális energiája $Z_i e \phi$, ahol ϕ a részecske körüli (helyfüggő) potenciál. Így a megoldandó egyenletek, csakúgy, mint a korábbi példánkban, vö. 2.118. és 3.3. egyenletek (az egyszerűség kedvéért mindegyik részecsketípusra azonos T hőmérsékletet feltételezve):

$$n_i = n_{i,0} e^{-\frac{Z_i e \phi}{k_B T}}, \quad (3.17)$$

$$\Delta \phi = -\frac{1}{\varepsilon_0} \sum_i e Z_i n_i. \quad (3.18)$$

Alapesetben a fenti egyenletet *önkonzisztens* módon kell megoldani, azaz adott n_i és ϕ értékekkel addig iterálni, amíg az adott értékek egy meghatározott eredményhez konvergálnak (ez történt a 3.1. ábra numerikus megoldásánál is). Ha feltételezzük a magas hőmérsékletet, mint korábban (pontosabban azt, hogy a részecskék $e Z_i \phi$ potenciális energiája kicsi $k_B T$ -hez képest), sorbafejthetjük a 3.17. egyenletet és visszajutunk a 3.4. egyenlethez, valamint megkapjuk a Yukawa-potenciált egy i -típusú töltött részecske körül, ami

$$\phi = \frac{Z_i e}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^{-r/\lambda_D}}{r}, \quad (3.19)$$

ahol most $\lambda_D = \sqrt{\varepsilon_0 k_B T / (\sum_i n_{i,0} Z_i^2 e^2)}$.

A potenciál ismeretében meghatározhatjuk az elektrosztatikus energiát. Ehhez ϕ_i -re, azaz az origónak választott részecskén helyén vett potenciál értékére vagyunk kíváncsiak. Fejtsük sorba a fenti képletet r/λ_D hatványai szerint:

$$\phi = \frac{eZ_i}{4\pi\varepsilon_0 r} - \frac{eZ_i}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{\lambda_D} + \dots \quad (3.20)$$

Az első tag a részecske Coulomb-tere bármiféle egyéb töltés nélkül. A második tag magának a „felhőnek” a részecske helyén keltett terének a potenciálja, ami pontosan az a ϕ_i , amit kerestünk. Ekkor az elektrosztatikus energia

$$\begin{aligned} E &= -\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{V}{\lambda_D} \sum_i Z_i^2 e^2 n_{i,0} = -\frac{k_B T}{8\pi} \frac{V}{\lambda_D^3} \\ &= -\frac{1}{8\pi\varepsilon_0} \frac{V}{\sqrt{\varepsilon_0 k_B T}} \left(\sum_i Z_i^2 e^2 n_{i,0} \right)^{3/2} \\ &= -\frac{e^3}{8\pi\varepsilon_0^{3/2} \sqrt{k_B}} \sqrt{\frac{1}{TV}} \left(\sum_i Z_i^2 N_i \right)^{3/2}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

ami fordítottan arányos a térfogat és a hőmérséklet négyzetgyökével.^b

Az elektrosztatikus energia ismeretében kiszámíthatjuk, hogy az ideális plazmánk nyomása mennyiben tér el az ideális gázban megszokott $p = nk_B T$ értéktől. Használjuk fel, hogy $F = E - TS$, és ebből $\frac{E}{T^2} = -\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right)$, így az elektrosztatikus energiából megkapjuk a szabad energia korrekcióját, majd abból a $p = -\frac{\partial F}{\partial V}$ alapján a nyomás korrekcióját is. Mivel $F = -T \int \frac{E}{T^2} dT$, így

$$\begin{aligned} F &= -\frac{e^3}{8\pi\varepsilon_0^{3/2} \sqrt{k_B}} \left(\sum_i Z_i^2 N_i \right)^{3/2} (-T) V^{-1/2} \int T^{-5/2} dT = \\ &= -\frac{e^3}{8\pi\varepsilon_0^{3/2} \sqrt{k_B}} \left(\sum_i Z_i^2 N_i \right)^{3/2} V^{-1/2} \frac{2}{3} T^{-1/2}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

A nyomás korrekcióját (δp) ezután könnyen kiszámíthatjuk. Könnyítésként tegyük fel, hogy csak egyszeresen töltött részecskéink vannak, és így $n_{i,0} \equiv n$ és $N = nV$

$$\begin{aligned} \delta p &= \frac{2e^3}{24\pi\varepsilon_0^{3/2} \sqrt{k_B}} N^{3/2} T^{-1/2} \frac{d}{dV} V^{-1/2} \\ &= -\frac{e^3}{24\pi\varepsilon_0^{3/2} \sqrt{k_B}} N^{3/2} T^{-1/2} V^{-3/2}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Ezek alapján a közel ideális plazma nyomására (és így az állapotegyenletre) az alábbi kifejezést kapjuk:

$$pV = Nk_B T \left[1 - \frac{1}{24\pi} \left(\frac{n^{1/3} e^2}{\varepsilon_0 k_B T} \right)^{3/2} \right], \quad (3.24)$$

azaz a leárnyékolás következtében a nyomás az ideális gázhoz képest *lecsökken*. Az átalakítás miatt az is látszik, hogy a sorfejtés érvényességére vonatkozó feltétel:

$$k_B T \gg \frac{e^2}{\varepsilon_0 n^{-1/3}}, \quad (3.25)$$

ami pontosan az ideális plazma $\Gamma \ll 1$ feltétele. A fenti feltételt másképp is írhatjuk; elemi átalakítások után

$$1 \gg \left(\frac{n^{1/3} e^2}{\varepsilon_0 k_B T} \right)^{3/2} = \left(\frac{ne^2}{n^{2/3} \varepsilon_0 k_B T} \right)^{3/2} = \left(\frac{n^{-1/3}}{\lambda_D} \right)^3 = \frac{1}{\lambda_D^3 n}, \quad (3.26)$$

melyből két „követelményt” is leszűrhetünk: (i) *A Debye-hossznak sokkal nagyobbak kell lennie, mint az ionok közötti átlagos távolság.* (Ebből az is következik, hogy az átlagtér-elmélet akkor vezet pontos eredményre, ha a plazma ideális.) (ii) *Egy „Debye-gömbön” belül nagy számú részecskének kell tartózkodnia.* Ez is mutatja, hogy a leárnyékolás egy kollektív jelenség, ami több részecske „együtműködésének” eredménye. Hasonlóan látszik, hogy az átlagtér-közelítés érvényességéhez egy részecskének sok szomszédal kell rendelkeznie, hogy az átlag minél jobban közelítse a valódi értéket. A Debye–Hückel-féle átlagtér-elméletéről illetve annak finomításáról az Olvasó további információkat a [23, 24] áttekintő cikkekben, vagy pl. Ecker könyvében [25] talál.

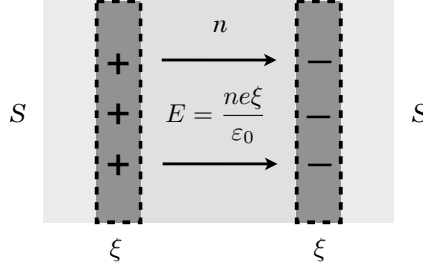
^aMegjegyezzük, hogy a módszer egyszerűsége és hatékonysága miatt az első módszer szokott lenni kölcsönható részecske-rendszerek vizsgálata során, emiatt több, különböző néven ismert, attól függően, hogy a fizika melyik ágában használják, pl. molekuláristér-közelítés, Hartree-közelítés (ld. még a 10. fejezetben), Random Phase Approximation (RPA), stb.

^bÉrdekességként megemlítjük, hogy a második egyenlőséget elemibb úton is megkaphatjuk [23]: Mivel egy részecske töltése λ_D távolságon leárnyékolódik, felfoghatjuk az N részecskét N darab λ_D sugarú gömbkondenzátornak. Tudva, hogy a kondenzátor energiája $\frac{q^2}{2C}$, ahol $C = 4\pi\varepsilon_0\lambda_D$, így $E = -\frac{1}{8\pi\varepsilon_0\lambda_D} \sum_i V n_{i,0} (Z_i e)^2 = -\frac{k_B T}{8\pi} \frac{V}{\lambda_D^3}$, ahol a negatív előjel a vonzást fejezi ki.

3.1.2. A plazmafrequencia

Egy, a semleges gázatomok mellett elektronokból és ionokból álló rendszerben a fluktuációk miatt spontán sűrűségváltozások és ennek következtében rezgések alakulhatnak ki. Az előző részben a leárnyékolást egy „statikus” kollektív jelenségként kezeltük: megfelelően hosszú idő alatt a plazmánkban a „fölső” töltések

leárnyékolódnak. Az az *időskála*, ami ehhez szükséges, szintén egy kollektív, de már „dinamikus” folyamatot jellemez – az ezzel kapcsolatos karakterisztikus frekvenciát fogjuk a következőkben körüljárni.



3.2. ábra. Modellrendszer a plazmafrekvencia származtatásához.

Első lépésként tekintsünk egy kvázisemleges plazmát, amelyben az elektronok és ionok sűrűsége (közel) megegyezik: $n_e \approx n_i \approx n$. A legegyszerűbb modellben egy spontán töltésszétválás miatt bekövetkező rezgéseket vizsgálunk, a 3.2. ábra alapján. Egydimenziós (csak x irány szerinti változást figyelembe vévő) modellünkben a plazma x irányra merőleges S felületű részét tekintjük. Az ionok térbeli eloszlását homogénnek és (nagy tömegük miatt) stacionáriusnak vesszük, illetve feltételezzük, hogy az elektronok egy tartományban x irányban úgy mozognak el, hogy ezen tartomány határain két keskeny, ξ vastagságú, ellentétes tértöltésű térrész alakul ki. Az így kialakuló $\sigma = \pm en\xi$ felületi töltéssűrűségek (együttesen) a tértöltött térrészek közötti tartományban:

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon_0} = \frac{en\xi}{\varepsilon_0}$$

térerősséget hoznak létre.

Tekintsük ebben az elektromos térben egy tetszőleges elektron mozgását, melynek eredeti (tehát a ξ -vel való elmozdulása előtti) helye x_0 ! Az elektron mozgásegyenlete:

$$m_e \frac{d^2}{dt^2}(x_0 + \xi) = m_e \ddot{\xi} = -\frac{e^2 n}{\varepsilon_0} \xi = -eE, \quad (3.27)$$

ami nem más, mint egy harmonikus oszcillátor mozgásegyenlete. A rezgés frekvenciájára, az ún. *plazmafrekvenciára* a következő kifejezés adódik:

$$\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{\varepsilon_0 m_e}}. \quad (3.28)$$

Megjegyezzük, hogy az ionok, nagyobb tömegük miatt alacsonyabb sajátfrekvenciával rendelkeznek, ezek kvázisemleges plazmában való rezgéseinek tárgyalása viszont bonyolultabb, ugyanis az ionok elmozdulásából származó polarizációt az elektronok kompenzálni igyekeznek. Ezt a jelenséget a plazmahullámok tárgyalásánál (6. fejezet) ismertetjük.

A fenti gondolatmenetet kiegészítendő nézzünk egy hasonlóan heurisztikus „levezetést” a plazmafrekvenciára [26]! Ennek során azt a kérdést vizsgáljuk, miszerint ha az előző, 3.1.1. fejezetben alkalmazott ponttöltést kívülről beletesszük az elektromosan semleges plazmánkba, mi történik addig, amíg ki nem alakul a fent már bemutatott „egyensúlyi” Debye-árnyékolás? Továbbra is feltételezve a plazma ideális jellegét, igaz, hogy az elektrosztatikus energia kicsi a termikus energiához képest, egy elektronra $|e\phi| \ll k_B T$. Emiatt az elektronok sebességét a hőmérséklet határozza meg, így a sebességre (a 2.3. fejezetben látott Maxwell–Boltzmann-eloszlás alapján) $v \sim \sqrt{k_B T/m}$ adódik. A plazmába bekerülő (a példa kedvéért pozitív) töltést az elektronok leárnyékolják egy Debye-hossznyi felhőn belül. Azon idő reciproka, amennyi alatt egy „átlagos” elektron a termikus energiájával egy Debye-hossznyi távolságot megtesz:

$$\tau^{-1} = \frac{v}{\lambda_D} \sim \frac{\sqrt{k_B T/m_e}}{\sqrt{\varepsilon_0 k_B T/ne^2}} = \sqrt{\frac{ne^2}{\varepsilon_0 m_e}} = \omega_p, \quad (3.29)$$

éppen a plazmafrekvencia. Érdekes még megjegyezni, hogy a plazmafrekvencia nem függ explicit módon a hőmérséklettől, csak a sűrűségtől.

Hangsúlyozzuk, hogy a fenti fogalmak levezetéseinél minden esetben feltettük, hogy a plazma közel ideális, azaz állapota nem sokkal különbözik egy adott T hőmérsékletű termodinamikai egyensúlytól. Nemegyensúlyi rendszerekben (amik számunkra érdekesek lesznek) a fent elmondottak nem mindig lesznek érvényesek. Erre a következő fejezetekben még visszatérünk.

3.2. A plazma mint dielektrikum

Térjünk vissza a plazma mint elektromosan töltött részecskékből álló folytonos közeg vizsgálatára, azaz elhagyva a statisztikus fizikát, foglalkozzunk ebben a fejezetben a plazma elektrodinamikájával! Az elektrodinamikai bevezetőben láttuk, hogy amennyiben nem vákuumban kívánjuk megoldani a Maxwell-egyenleteket, úgy szükségünk van az egyenletekben szereplő fizikai mennyiségek közötti további összefüggésekre, amiket anyagi egyenleteknek hívtunk. Bevezettük a permittivitást (vagy dielektromos állandót) (ε) és permeabilitást (μ), ami az anyag külső térre ($\mathbf{E}$, $\mathbf{H}$) adott válaszát ($\mathbf{D}$, $\mathbf{B}$) írta le oly módon, hogy feltételeztük, hogy a válasz *lineárisan* függ a külső tértől, a permeabilitás/permittivitás pedig egyszerű skalármennyiségek. Ez, mint említettük, egyáltalán nem magától értetődő, a linearitás elég nagy külső terek mellett már nem alkalmazható, mindazonáltal az általunk vizsgálni kívánt jelenségek körére érvényes lesz. Más kérdés azonban, hogy valóban jogos-e ezeket a mennyiségeket időben és térben állandónak tekinteni. A külső elektromágneses tér a vizsgált makroszkopikus test töltött részecskéit mozgásba hozza, gyorsítja, amelyek ennek következtében elektromágneses sugárzást fognak kibocsátani. Mivel a részecskék kölcsönhatásban állnak egymással, így ezen kisugárzott terek szuperpozíciója egy meglehetősen bonyolult kollektív effektust eredményez, amely a rendszer válasza lesz a külső elektromágneses térre. Az elektrodinamika keretein belül sajnos

nincs lehetőségünk ezen folyamat részletes leírására, így a rendszer válaszát a már említett dielektromos állandóba kényszerülünk „belesűríteni”. Mindenesetre a fentiek alapján nem lenne meglepő, ha a rendszerünk válasza nem csak a külső tér adott pillanatbeli értékétől, hanem annak „múltjától” is függene, amit matematikailag az alábbi módon fogalmazhatunk meg:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t \varepsilon(t - t') \mathbf{E}(\mathbf{r}, t') dt', \quad (3.30)$$

ahol az integrálás a „múltból” (az egyszerűség kedvéért $-\infty$ -tól) az adott időpontig tart. Ez magában foglalja azt is, hogy a jövő nem befolyásolja a jelent, amit *kauzalitásnak* nevezünk. A kauzalitás minden, a valóságot leírni szándékozó fizikai modellnek egyik alapja kell, hogy legyen. Amennyiben ε már nem állandó, úgy dielektromos állandó vagy permittivitás helyett *dielektromos függvényként* fogunk rá utalni a továbbiakban. A fenti kifejezést, vagyis amikor a rendszert leíró dielektromos függvény időfüggő, időbeli *diszperzió*nak nevezzük. Természetesen ez nem a legáltalánosabb eset: figyelembe vehetnénk térbeli diszperziót is, amely fontos a plazmák esetében. Ezt egy későbbi kiegészítő részben (K.4) fogjuk megtenni, most csak az időbeli diszperzióval foglalkozunk. A 3.30. szerinti, időeltolás-invariáns alak feltevésével annak Fourier-transzformációja egy egyszerű eredményre vezet (hiszen a fenti összefüggés jobb oldala egy konvolúció):

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \quad (3.31)$$

Ebből az alakból egyáltalán nem látszik, hogyan jelenik meg a kauzalitás, amit az előbb annyira hangsúlyoztunk. A válasz a dielektromos függvény, $\varepsilon(\omega)$ mint ω -tól függő komplex függvény tulajdonságaiban van elrejtve. Az erre vonatkozó összefüggéseket, illetve az ebből levezethető ún. *Kramers–Kronig-relációkat* a legtöbb elektrodinamika/optika témájú könyvben (pl. [7]) megtalálja az Olvasó, ezekkel itt részletesebben nem foglalkozunk.³

A dielektromos függvény viselkedésének megértéséhez próbáljuk meg valamilyen egyszerűsített modellel leírni, hogy egy makroszkopikus testben lévő részecskék hogyan válaszolnak egy külső elektromos térre. Ehhez a csillapított harmonikus oszcillátort leíró, szilárdtestfizikai *Lorentz-modellt* hívjuk segítségül [7, 27, 28], mely szerint egy elektron mozgásegyenlete:

$$m_e \ddot{x}(t) = F(t) - Kx(t) - m_e \gamma \dot{x}(t), \quad (3.32)$$

ahol m_e az elektron tömege, $F(t)$ a külső $E(t)$ elektromos tér által az elektronra ható $F(t) = -eE(t)$ erő, $K = m_e \omega_0^2$, a „rugóállandó”, amely azt hivatott leírni, hogy a testben lévő elektronok mennyire képesek szabadon mozogni (minél nagyobb K , annál kevésbé), ω_0 a megfelelő sajátfrekvencia, végül γ pedig a

³Felvetődhet a fenti kifejezés érvényességi tartományának kérdése. Egy ω karakterisztikus frekvenciával rezgő külső tér $\lambda = c/\omega$ hullámhosszal változik a pozíció függvényében is. Amennyiben ez a hullámhossz összemérhető az atomok a távolságával, vagyis amikor $\omega \sim c/a$, a klasszikus elektrodinamika, vagyis testek „makroszkopikus masszaként” történő leírása javításra szorul. Ezt azonban csak mint érdekesség említjük meg, hiszen az általunk vizsgált tartományban (látható fényig bezárólag) a fenti megkötés nem jelent problémát [9].

„súrlódási” együttható, ami ebben az esetben az elektronok atomokkal történő ütközéseinek hatását írja le.⁴

A mozgásegyenlet megoldását harmonikus időfüggésű gerjesztésre keressük, amit egy $E(t) = \hat{E}e^{-i\omega t}$ térerősség képvisel, ahol $\hat{E}$ a *komplex amplitúdó* (melyet a 2.2. fejezetben az áramkörökkel kapcsolatban vezettünk be). Az elektron kitérését szintén harmonikus, $x(t) = \hat{x}e^{-i\omega t}$ alakban keressük, ahol $\hat{x}$ a kitérés komplex amplitúdója. A továbbiakban ezen komplex amplitúdókkal számolunk, de a fenti speciális jelölést ($\hat{E}$, $\hat{x}$) elhagyjuk. Harmonikus időfüggésre a 3.32. mozgásegyenlet az alábbi alakot ölti:

$$x(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega) = -\frac{e}{m_e}E, \quad (3.33)$$

amiből

$$x = -\frac{e}{m_e} \cdot \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} E = \frac{e}{m_e} C(\omega) E. \quad (3.34)$$

A gerjesztés és a válasz – azaz az elektronok kitérése – közötti kapcsolatot (az anyagi állandóktól eltekintve) tehát egy frekvenciafüggő, komplex

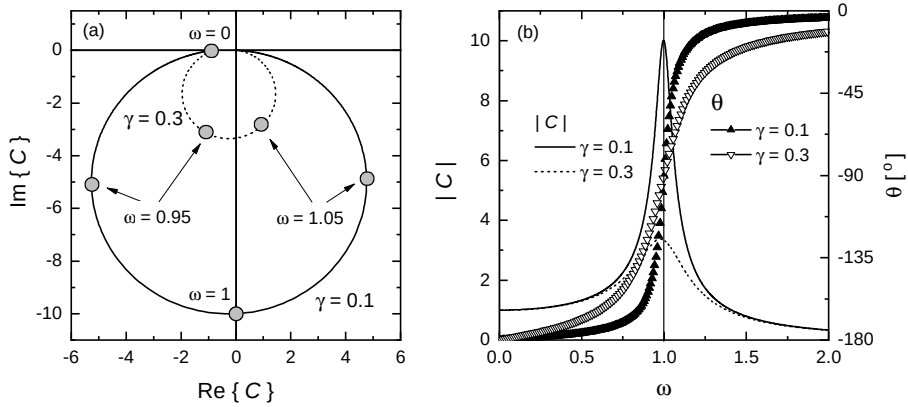
$$C(\omega) = -\frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (3.35)$$

arányossági tényező adja meg. $C(\omega)$ frekvenciafüggését a 3.3. ábra szemlélteti, egységnyi értékű rezonanciafrekvenciára ($\omega_0 = 1$), a csillapítási tényező $\gamma = 0.1$ és $\gamma = 0.3$ értékeire. A rendszer válasza $\omega \rightarrow 0$ esetén egységnyi amplitúdójú, $C \rightarrow -1$ (az elektron negatív töltése miatt), azaz ellentétes fázisú a gerjesztéshez képest ($\theta = -180^\circ$, ld. 3.3.(b) ábra). A válasz amplitúdója $\gamma \rightarrow 0$ esetén $\omega = \omega_0$ mellett maximális, fázisa -90° a gerjesztéshez képest (a maximális válasz nagyobb csillapításnál kisebb frekvencia felé tolódik). Nagyfrekvenciás határesetben, $\omega \rightarrow \infty$, a válasz amplitúdója nullához tart (miközben fázisba kerül a gerjesztéssel, $\theta \rightarrow 0^\circ$). Nagyobb csillapítás esetén a válasz amplitúdója értelemszerűen kisebb, de a fázis viselkedése hasonló.

Az elektronok x irányú mozgása az anyagban makroszkopikus *polarizációt* okoz. Ezt kiszámíthatjuk, ha tudjuk, hogy a polarizációvektor, $\mathbf{P}$ az anyagban lévő dipólusmomentum-sűrűséggel egyenlő. Mivel x egy elektronnak az egyensúlyi helyzetéből való kitérését adja meg, illetve továbbra is feltételezzük a pozitív háttér jelenlétét, így az egy elektron által indukált dipólus $-ex$ nagyságú és következésképpen az n elektronsűrűségre adódó polarizáció:

$$\begin{aligned} P = -xne &= \frac{ne^2}{m_e} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} E = \frac{ne^2}{\omega_p^2 m_e} \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} E \\ &= \varepsilon_0 \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} E, \end{aligned} \quad (3.36)$$

⁴Az itteni meghatározásokból (pl. atomi rendszerben értelmezett „rugó”, „súrlódás”, stb.) is érezhető, hogy ez a modell a valóságnak egy nagyon felületes megközelítése. Ám, mint az később kiderül, ennek ellenére nagyon jól megragadja a legalapvetőbb folyamatok lényeges elemeit és hasznos eredményekre vezet.



3.3. ábra. A Lorentz-modell választ megadó arányossági tényező a komplex síkon (a), illetve ennek abszolút értéke és fázisa (b) elektronok esetére, $\omega_0 = 1$ rezonanciafrekvencia és a csillapítási tényező $\gamma = 0.1$ és $\gamma = 0.3$ értékei mellett.

ahol felhasználtuk a plazmafrekvenciára már korábbról ismert $\omega_p^2 = ne^2/\varepsilon_0 m_e$ összefüggést. A polarizációt a $D = \varepsilon_0 E + P = \varepsilon E$ összefüggés alapján is felírhatjuk, mint

$$P = (\varepsilon - \varepsilon_0)E. \quad (3.37)$$

A fenti két egyenlet összevetésével a dielektromos függvényre az alábbi adódik:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \left[1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \right] = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega). \quad (3.38)$$

A plazma χ szuszceptibilitását $P = \varepsilon_0 \chi E$ definiálja. A 3.36. összefüggésből, láthatóan

$$\chi = \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (3.39)$$

adódik. A komplex permittivitás valós és képzetes részei a 3.38. összefüggésből:

$$\frac{\varepsilon'(\omega)}{\varepsilon_0} = 1 + \frac{\omega_p^2(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}, \quad \frac{\varepsilon''(\omega)}{\varepsilon_0} = \frac{\gamma\omega_p^2\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}. \quad (3.40)$$

Vizsgáljuk most meg, hogy a fenti eredményeknek milyen következménye van az elektromágneses hullámok terjedésére! Ehhez célszerű bevezetni a

$$\tilde{n} = n + i\kappa$$

komplex törésmutatót, ami $\tilde{n}^2 = \varepsilon$ kapcsolatban van a komplex permittivitással. A vákuumban haladó hullámok esetén láttuk, hogy $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$, ami közegben analóg módon $1/\sqrt{\varepsilon\mu}$ -re változik. A legtöbb, nem ferromágneses anyag esetén

az optikai frekvenciákon $\mu = 1$. A fenti kifejezésben n a „szokásos”, valós törésmutató, κ pedig a *csillapítási tényező*, ami – mint látni fogjuk, – a hullám elnyelődésével van kapcsolatban. Tekintsük az

$$\mathbf{E}(z, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\tilde{n}kz - \omega t)}$$

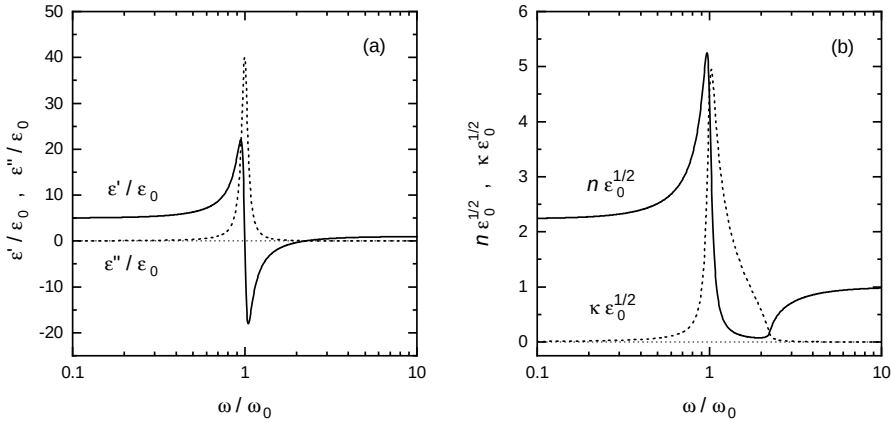
alakkal megadott síkhullámot! A fent definiált $\tilde{n} = n + i\kappa$ komplex törésmutató behelyettesítésével

$$\mathbf{E}(z, t) = \mathbf{E}_0 e^{i[(n+i\kappa)kz - \omega t]} = \mathbf{E}_0 e^{i(nkz - \omega t)} e^{-\kappa kz} \quad (3.41)$$

adódik, aminek utolsó tagja exponenciális lecsengést jelez $\kappa > 0$ értékekre. Az ehhez a jelenséghez kapcsolódó *abszorpciós együtthatót* $\alpha = 2\kappa$ alapján definiáljuk, ugyanis a hullám (térerősség négyzetével arányos) intenzitásának változása így $I(z) \propto e^{-\alpha z}$ alakú lesz.

Az $\tilde{n}$ komplex törésmutató valós és képzetes részei a permittivitás komponensivel kifejezve általános esetben az alábbiak:

$$n = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\varepsilon' + \sqrt{(\varepsilon')^2 + (\varepsilon'')^2}} \quad , \quad \kappa = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{-\varepsilon' + \sqrt{(\varepsilon')^2 + (\varepsilon'')^2}}. \quad (3.42)$$



3.4. ábra. A Lorentz-modellből származó komplex permittivitás valós (ε') és képzetes (ε'') részeinek, valamint (b) a komplex törésmutató valós (n) és képzetes (κ) részeinek frekvenciafüggése $\omega_p = 2\omega_0$ és $\gamma = 0.1$ értékek mellett.

A 3.4. ábra (a) része a komplex permittivitás, (b) része pedig a komplex törésmutató valós és képzetes komponenseit szemlélteti, az $\omega_p = 2\omega_0$ és $\gamma = 0.1$ értékekre. $\omega \rightarrow 0$ határesetben a permittivitás valós értékű ($\varepsilon'/\varepsilon_0 \approx 5$ és $\varepsilon'' \approx 0$). $\omega = \omega_0$ mellett $\varepsilon'/\varepsilon_0 = 1$, majd a frekvencia növelésével előjelet vált, ε'' pedig rezonanciát mutat. Nagyfrekvenciás határesetben $\varepsilon'/\varepsilon_0 \rightarrow 1$ és $\varepsilon'' \rightarrow 0$. A komplex törésmutató valós része $\omega \rightarrow 0$ mellett egy konstans értékhez tart (a

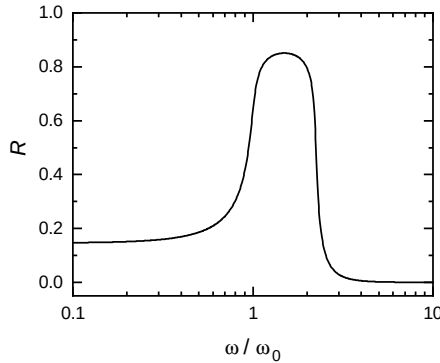
példaként vett értékekkel $n\varepsilon_0^{1/2} = \sqrt{5}$), a képzetes része nulla értéket vesz fel. $\omega \approx \omega_0$ környezetében a valós rész jelentősen csökken, míg a képzetes rész egy csúcsot mutat. Nagyfrekvenciás határesetben $n\varepsilon_0^{1/2} \rightarrow 1$ és $\kappa \rightarrow 0$.

A kicsit bonyolultabb fizikai kép mindemögött a következő [7]: a bejövő elektromágneses hullám a közeg részecskéivel kölcsönhat, azokat mozgásba hozza, amik gyorsulásuk miatt elektromágneses hullámokat fognak kibocsátani. A bejövő hullám és a részecskék összessége által keltett sugárzás szuperpozíciója lesz az általunk érzékelt „fény”: a közeg után a megtört fény, ami a bejövő és a szórt fény összegéből áll, illetve a visszavert fény, ami a közeg részecskéinek sugárzásából áll. Alacsony frekvencián a részecskék sugárzása kis mértékű, így kicsi az elnyelődés – ami esetünkben a „destruktív” sugárzásnak, azaz a bejövő térrel ellentétes tér keltésének felelne meg –, valamint emiatt a reflexió (ld. a 3.5. ábrát) is alacsony. A közeg törésmutatója alacsony frekvencián ω monoton növekvő függvénye: a fehér fény prizma által színekre való felbontása, azaz a *diszperzió* ezek alapján érthető meg: az üveg karakterisztikus frekvenciája sokkal nagyobb a látható fény frekvenciájánál, így fény esetében használható a „kis ω ” közelítés. Mivel a törésmutató ω függvénye, így a különböző színű (tehát frekvenciájú) hullámokat a közeg különböző módon töri meg. Még az is látszik, hogy a nagyobb frekvenciájú, pl. kék fényt jobban megtöri a prizma, mint pl. a pirosat. Tovább növelve a frekvenciát, elérkezünk az $\omega \approx \omega_0$ tartományába, ahol a klasszikus fizikából ismert rezonancia jelensége lép fel: mivel ebben a tartományban a közeget alkotó töltött részecskék különösen „érzékenyek” a külső erőhatásra, így az általuk visszaszórt fény (i) képes kioltani a bejövő hullámot, ezzel lecsökkentve n -et és megnövelve az abszorpció együtthatót, κ -t, illetve (ii) ezzel egyidejűleg a reflexiót is. Tovább növelve a frekvenciát a közeg részecskéi tehetetlenségük miatt egyre kevésbé tudnak reagálni a külső térre, így az általuk kifejtett sugárzás is lecsökken, ezzel csökkentve κ (és R) értékét. A törésmutató az $\omega \rightarrow \infty$ határesetben egységnyi értéket vesz fel, ami azzal egyezik meg, hogy a bejövő hullám „sértetlenül” tud áthaladni a közegen. Érdekes továbbá, hogy van olyan $\omega > \omega_0$ tartomány, ahol $n < 1$ és így a hullám közegbeli sebessége $v = c/n > c$, azaz látszólag a közegben a hullám a vákuumbeli fénysebességnél gyorsabban halad. Ez persze nem mond ellent a relativitáselméletnek, hiszen ez csak a hullám *fázissebességére* lesz igaz (ld. a 6. fejezetet) [7, 28].

Ugyancsak a komplex törésmutatóval függ össze a hullám áthaladásának / visszaverődésének foka két különböző anyag határfelületén. Példaként vizsgáljuk most a vákuum-dielektrikum határfelületet! A reflexiós tényező – amely a visszavert intenzitás és a beeső intenzitás aránya – erre a rendszerre, merőleges beesést feltételezve [7]:

$$R(\omega) = \frac{[1 - n(\omega)]^2 + \kappa^2(\omega)}{[1 + n(\omega)]^2 + \kappa^2(\omega)}. \quad (3.43)$$

A fenti összefüggést a Maxwell-egyenleteket síkhullámra felírva és a megfelelő határfeltételeket kielégítő megoldást megkeresve lehet meghatározni. Az eredmény (az ún. Fresnel-egyenletek) a legtöbb elektrodinamika/optika témájú könyvben megtalálható, így a levezetéstől eltekintünk [7].



3.5. ábra. A reflektivitás frekvenciafüggése, $\omega_p = 2\omega_0$, $\gamma = 0.1$ paraméterek mellett.

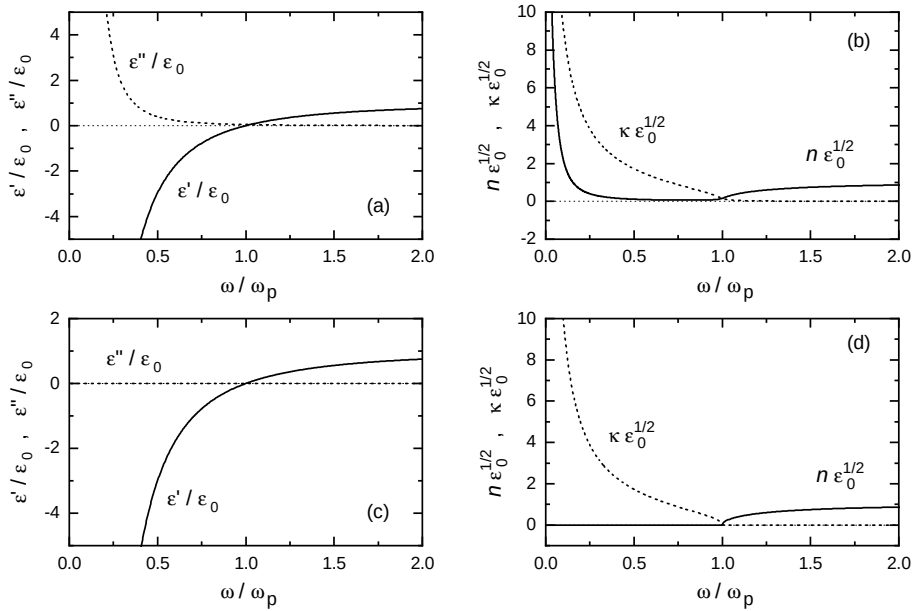
A 3.5. ábra a reflexió értékét mutatja, a fentiekben példaként vett $\omega_p = 2\omega_0$, $\gamma = 0.1$ paraméterek mellett. Alacsony frekvenciákon a törésmutató valós része dominál (lásd 3.4(b). ábra). $\omega \approx \omega_0$ értéknél a reflexió megnövekszik. Ugyanakkor jelentős abszorpció is megjelenik, amit a komplex permittivitás képzetes részének (κ) növekedése jelez. A frekvencia további növelésével a reflexió gyorsan csökken és az anyag „átlátszóvá” válik, összhangban az előzőekben elmondottakkal.

Az eddigiekben szigetelőket (dielektrikumokat) vizsgáltunk, ahol az elektronok „helyhez voltak kötve”, és csak a „rugóállandónak” megfelelő véges tartományban mozoghattak. A Lorentz-model keretei között azonban a *vezető anyagokat* is tárgyalhatjuk. Ezek fontos jellemzője, hogy a töltött részecskék szabadon mozoghatnak a külső tér hatására, így kézenfekvőnek tűnik az $\omega_0 = 0$ feltételezés – az így adódó közelítést *Drude-modellnek* hívjuk [29]. A Drude-modellnek megfelelő $\omega_0 = 0$ esetre a komplex permittivitás, valamint a komplex törésmutató valós és képzetes komponenseit a 3.6. ábra (a) és (b) paneljei szemléltetik, a csillapítási együttható $\gamma = 0.05$ értékére. A kapcsolódó reflexiós együtthatót a 3.7. ábra szaggatott vonala mutatja.

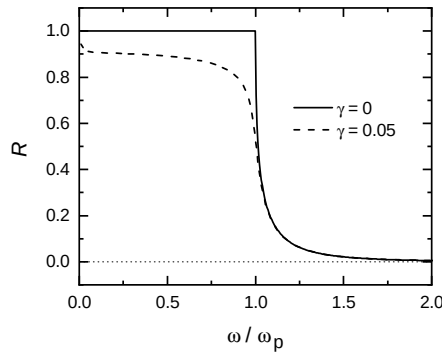
Az *ütközésmentes plazma* esetének megfelelő további egyszerűsítés, azaz $\gamma = 0$ feltételezése a 3.6. ábra (c) és (d) paneljein látható frekvenciafüggésekhez, illetve a 3.7. ábrán folytonos vonallal jelölt reflexiós együtthatóhoz vezet. Ebben az esetben a permittivitás képzetes része nulla, a valós rész az

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right) \quad (3.44)$$

alakban adható meg. Felmerül a kérdés, mikor alkalmazható az ütközésmentes közelítés, hiszen egy plazmában minden esetben vannak ütközések. Ezeket részletesebben egy későbbi fejezetben tárgyaljuk, most azonban annyit elmondhatunk, hogy az ütközések gyakoriságát az ún. ν *ütközési frekvenciával* tudjuk jellemezni, amely az egységnyi idő alatti ütközések átlagos számát adja meg.



3.6. ábra. A Lorentz-modellből származtatott komplex permittivitás valós (ϵ') és képzetes (ϵ'') részei, valamint a komplex törésmutató valós (n) és képzetes (κ) részei a frekvencia függvényében, $\omega_0 = 0$ esetre. (a),(b): $\gamma = 0.05$ (Drude-modell), (c),(d): $\gamma = 0$ (ütközésmentes plazma).



3.7. ábra. A reflektivitás frekvenciafüggése, $\omega_0 = 0$ választással, a csillapítási tényező $\gamma = 0.05$ és $\gamma = 0$ értékeire.

Amennyiben a külső tér periódusideje nagyon rövid a két ütközés között eltelt időhöz képest, akkor az ütközések hatását el lehet hanyagolni. Ennélfogva akkor beszélhetünk ütközésmentes plazmáról, ha fennáll az $\omega \gg \nu$ reláció.

A 3.44. összefüggésből, figyelembe véve, hogy $\tilde{n}^2 = \varepsilon$, látható, hogy a plazmafrekvenciánál nagyobb frekvenciáknál a törésmutató valós ($\kappa \equiv 0$), viszont a plazmafrekvenciánál kisebb frekvenciáknál tisztán képzetes ($n \equiv 0$), ami exponenciálisan lecsengő, terjedni nem képes hullámoknak felel meg. „Alacsony” frekvenciájú hullámok tehát nem tudnak a plazmába behatolni. Visszaverődésüknek jelentősége van a plazmadiagnosztikában, illetve a nagy hatótávolságú telekommunikációban, ami az ionoszféráról való visszaverődés jelenségét használja ki (pl. rövidhullámú rádiózás) [30].

Dielektrikumok esetében a külső elektromos tér válaszát a polarizáció, illetve azon keresztül az eltolási vektor adta meg. Vezetők esetében másik fizikai mennyiséget kell keresnünk; kézenfekvőnek tűnik a testben fellépő áramot választani a rendszer válaszában. Az előzőekkel analóg módon tehát keresnünk kell egy olyan $\mathbf{j}(\mathbf{E})$ relációt, amely eleget tesz a fent látott elvárásainknak (lineáris, kauzális, stb.). A $\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$ kapcsolat analógiájára bevezetjük a

$$\mathbf{j}(\omega) = \sigma(\omega) \mathbf{E}(\omega) \quad (3.45)$$

összefüggést, ami nem más, mint (a mikroszkopikus) *Ohm-törvény*. A σ függvényt *vezetőképességnek* hívjuk, melynek reciproka, $\rho = 1/\sigma$ a *fajlagos ellenállás*. Az elektronok mozgásához társítható $j = -nve$ áramsűrűség kiszámításával egyszerűen meghatározhatjuk a vezetőképességet is. Mivel (a 3.34. összefüggést felhasználva)

$$v = \dot{x} = -i\omega x = i\omega \frac{e}{m_e} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} E, \quad (3.46)$$

a vezetőképesség értéke:

$$\sigma(\omega) = \frac{-i\omega \omega_p^2 \varepsilon_0}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}. \quad (3.47)$$

Láthatóan ebben a kifejezésben benne van az ω_0 is, így szigetelőkre is érvényes. Jogosan merül fel a kérdés, hogy ez hogyan lehetséges? Ugyan ekkor az elektronok helyhez vannak kötve, mégis van áram, hiszen van töltésmozgás. A Gauss törvényből $\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_{sz}$, ahol $\rho_{sz} = \rho - \rho_k$ a szabad töltéssűrűség, mely a teljes $\rho = \varepsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E}$ töltéssűrűség és polarizáció hatására megjelenő $\rho_k = -\nabla \cdot \mathbf{P}$ kötött töltéssűrűség különbsége. Feltéve, hogy nincsenek szabad töltések, $\nabla \cdot \mathbf{D} = \nabla \cdot (\varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}) = 0$, valamint $\rho = \rho_k = -\nabla \cdot \mathbf{P}$. A töltésmegmaradás kifejező egyenlet ekkor

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \Rightarrow \nabla \cdot \left(-\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + \mathbf{j} \right) = 0. \quad (3.48)$$

Felhasználva most a 3.37. egyenletet, illetve azt, hogy az időfüggések arányosak $e^{-i\omega t}$ -vel, beírva a $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ összefüggést, megkapjuk a vezetőképesség és a dielektromos függvény kapcsolatát:

$$\sigma(\omega) = -i\omega(\varepsilon - \varepsilon_0). \quad (3.49)$$

A vezetőképesség fenti kifejezése az általános, 3.32. összefüggéssel leírt Lorentz-modell eredménye. A *Drude-modell*ből

$$\sigma(\omega) = \frac{\omega_p^2 \varepsilon_0}{-i\omega + \gamma} \quad (3.50)$$

adódik, míg az *ütközésmentes plazmára* ($\gamma = 0$) a vezetőképesség:

$$\sigma(\omega) = i\varepsilon_0 \frac{\omega_p^2}{\omega}. \quad (3.51)$$

K. 4: Térbeli diszperzió és Debye-árnyékolás

Az előzőekben láttuk, hogy ütközésmentes plazma esetén a dielektromos függvény frekvenciafüggése

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right)$$

alakú volt. A fenti képletben megjelenik a plazmafrekvencia, amellyel a korábbiakban sokat foglalkoztunk, így a plazma részecskéi által létrehozott kollektív rezgések láthatóan „benne vannak” a rendszert leíró dielektromos függvényben. Kérdés, hogy ugyanez elmondható-e a Debye-hosszról is? Ennek megválaszolásához a „térbeli diszperzióra”, azaz a dielektromos függvény helyfüggésére lesz szükségünk. A továbbiakban az egyszerűség kedvéért elhagyjuk az időbeli diszperziót (azaz ε frekvenciafüggését), hiszen amint láttuk, a Debye-árnyékolás egy „statikus” kollektív jelenség.

A modellünkhöz tekintsünk egy kvázisemleges rendszert n töltéssűrűséggel, majd vigyünk egy külső, $\rho_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ töltéssűrűséggel jellemezhető „zavart” a rendszerbe (ami pl. egy járulékos Q töltésnek felel meg). Tudjuk, hogy ez a külső töltéssűrűség a Poisson-egyenleten keresztül van kapcsolatban az általa keltett potenciállal, azaz

$$\Delta\phi_{\text{ext}} = -\frac{\rho_{\text{ext}}}{\varepsilon_0}. \quad (3.52)$$

A Debye-hossz levezetésénél (3.1.1. fejezet) láttuk, hogy ez a külső töltéssűrűség jelenléte megzavarja az eredetileg kvázisemleges plazmát, $\rho_{\text{ind}}(\mathbf{r})$ indukált töltéssűrűséget hozva létre. Végső soron tehát a plazmában mérhető ϕ elektromos potenciált az alábbi egyenlet határozza meg:

$$\Delta\phi = -\frac{1}{\varepsilon_0}(\rho_{\text{ext}} + \rho_{\text{ind}}). \quad (3.53)$$

A gondolatmenet eddig analóg a dielektrikumoknál látott esettel, ahol (i) bevezettük a polarizáció által keltett kötött töltéssűrűséget (amit itt indukált töltéssűrűségnek nevezünk, $\nabla \cdot \mathbf{P} = -\rho_{\text{ind}}$), és (ii) megállapítottuk, hogy az eltolási vektor divergenciája megegyezik a rendszerben

található szabad töltések sűrűségével (amit itt külső töltéssűrűségnek nevezünk, $\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_{\text{ext}}$). Ennélfogva:

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi, \quad \mathbf{D} = -\varepsilon_0 \nabla\phi_{\text{ext}}. \quad (3.54)$$

A szigetelőkkel ellentétben most a töltések szabadon mozoghatnak, így $\mathbf{P}$ fizikai interpretációja más, mint eddig megszoktuk: $\mathbf{P}$ nem a dipólmomentum-sűrűség, hanem egyszerűen a rendszer külső elektromos térre adott válasza, amely a ρ_{ind} indukált töltéssűrűségben manifesztálódik. Mivel mi adjuk meg ρ_{ext} -et, így ismerjük az eltolási vektort is, ezért ha tudjuk a $\mathbf{D}(\mathbf{E})$ relációt, ki tudjuk számolni $\mathbf{E}$ -t (és mellé a ρ_{ind} indukált töltéssűrűséget is).

Hogy ezt kicsit jobban megértsük, tekintsünk egy egyszerű példát, egy ε_r relatív permittivitású dielektrikumból készült, R sugarú tömör gömböt! Tegyük ennek a gömbnek a középpontjába Q töltést. Ekkor a gömbön belül az eltolási vektor sugárirányú lesz, a Gauss-tétel értelmében $D = Q/4\pi r^2$, azaz az elektromos tér a gömbön belül

$$E = \frac{D}{\varepsilon} = \frac{Q}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r} \frac{1}{r^2} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Q/\varepsilon_r}{r^2}, \quad (r < R) \quad (3.55)$$

azaz a dielektrikum „leárnnyékolja” a benne lévő töltést úgy, hogy az eredeti Q töltést Q/ε_r nagyságúra csökkenti. Ez azt jelenti, hogy $Q - Q/\varepsilon_r = \frac{1-\varepsilon_r}{\varepsilon_r}Q$ nagyságú (Q -val ellentétes előjelű, u.i. $\varepsilon_r > 1$) indukált töltés jelenik meg az eredeti Q töltés közvetlen közelében. Mivel eredetileg a gömb töltésmentes volt, így ugyanakkora abszolút értékű ellentétes töltés jelenik meg a gömb felületén, így a gömbön kívül az elektromos tér

$$E = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Q}{r^2}, \quad (r > R), \quad (3.56)$$

ahogyan azt várjuk.

Térjünk most vissza az eredeti példánkhoz. Általános esetben mind $\mathbf{D}$, mind pedig $\mathbf{E}$ helyfüggőek és semmi nem garantálja, hogy a két függvény hányadosa egy egyszerű skalár. A két mennyiség közötti lineáris kapcsolatot felhasználva írhatjuk, hogy

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \varepsilon_0 \int \varepsilon_r(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{E}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}', \quad (3.57)$$

amit Fourier-transzformálva a

$$\mathbf{D}(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 \varepsilon_r(\mathbf{k}) \mathbf{E}(\mathbf{k}) \quad (3.58)$$

relációra jutunk. Felhasználva a 3.54. szerinti összefüggéseket – mivel a gradiensképzés csak egy $\mathbf{ik}$ -val való szorzás a Fourier-térben – a potenciálokra az alábbi adódik:

$$\phi_{\text{ext}}(\mathbf{k}) = \varepsilon_r(\mathbf{k})\phi(\mathbf{k}). \quad (3.59)$$

Mivel $\phi = \phi_{\text{ext}} + \phi_{\text{ind}}$, továbbá $\Delta\phi_{\text{ind}} = -\rho_{\text{ind}}/\varepsilon_0$, ami Fourier-térben nem más, mint $k^2\phi_{\text{ind}} = \rho_{\text{ind}}/\varepsilon_0$, így végeredményben azt kapjuk, hogy

$$\phi_{\text{ext}}(\mathbf{k}) = \phi(\mathbf{k}) - \phi_{\text{ind}}(\mathbf{k}) = \phi(\mathbf{k}) - \frac{\rho_{\text{ind}}}{\varepsilon_0 k^2}. \quad (3.60)$$

A két utóbbi egyenletből meghatározható az

$$\varepsilon_r(\mathbf{k}) = 1 - \frac{1}{\varepsilon_0 k^2} \frac{\rho_{\text{ind}}(\mathbf{k})}{\phi(\mathbf{k})} \quad (3.61)$$

dielektromos függvény.

Alkalmazzuk most a formalizmusunkat a már korábban tárgyalt $\rho_{\text{ext}} = Q\delta(\mathbf{r})$ egyszerű esetre, adott T hőmérsékleten. Ekkor a 3.3. egyenlet és $\Delta\phi = -\rho/\varepsilon_0$ alapján $\rho_{\text{ind}}(\mathbf{r}) = -\varepsilon_0\phi(\mathbf{r})/\lambda_D^2$ és a dielektromos függvény

$$\varepsilon_r(\mathbf{k}) = 1 + \frac{1}{k^2\lambda_D^2} = 1 + \frac{k_D^2}{k^2}, \quad (3.62)$$

használtuk a Debye-hosszhoz tartozó $k_D = 1/\lambda_D$ hullámszámot.

Tudjuk, hogy a Q töltés elektrosztatikus potenciálja $\phi_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Q}{r}$, azaz $\phi_{\text{ext}}(\mathbf{k}) = \frac{Q}{\varepsilon_0 k^2}$ és ezért

$$\phi(\mathbf{k}) = \frac{\phi_{\text{ext}}(\mathbf{k})}{\varepsilon(\mathbf{k})} = \frac{Q}{\varepsilon_0(k^2 + k_D^2)}. \quad (3.63)$$

A fenti kifejezést inverz Fourier-transzformálva (amely kontúrintegrálás segítségével tehető meg) visszkapjuk a

$$\phi(r) = \frac{Q}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^{-r/\lambda_D}}{r}$$

Yukawa-potenciált. A dielektromos gömb analógiájára ekkor a plazma árnyékolása miatt kívülről egy helyfüggő, $Q(r) = Qe^{-r/\lambda_D}$ töltés potenciálja „látszik”. Ebből pedig megkapható $\rho_{\text{ind}}(\mathbf{r})$ valamit Q_{ind} , amely – ahogyan azt már említettük – éppen megegyezik $-Q$ -val, teljes analógiában az egyszerű, dielektromos gömb esetével. Megjegyezzünk még egy dolgot, ami a fenti dielektromos függvényből könnyen látszik: a $k \rightarrow 0$ határesetben $\varepsilon_r \rightarrow \infty$, azaz a plazmára kapcsolt külső, statikus elektromos teret a plazma teljesen leárnyékolja, annak hatása nem érzékelhető a plazmán belül.

3.3. A plazma-fal határréteg

Laboratóriumi rendszerekben a plazmákat minden esetben valamilyen fal határolja. Ez lehet egy „passzív”, szigetelő, vagy vezető fal, egy „aktív”, adott poten-

ciálra kapcsolt elektróda, a plazmába helyezett makroszkopikus „szonda”, vagy részecske. Az elektródák és a plazmadiagnosztika szempontjából fontos szondák környezetében kialakuló határrétegek tulajdonságaival később foglalkozunk, itt egyelőre csak azt vizsgáljuk, hogy miként változnak meg egy kvázisemleges plazma jellemzői egy „passzív fal” környezetében.

Ehhez tekintsünk egy $n_e \cong n_i \cong n_0$ sűrűséggel jellemezhető, nagy kiterjedésű, homogén, kvázisemleges, elektropozitív (elektronokból és pozitív ionokból álló) plazmát amely kontaktusba kerül egy felülettel (3.8. ábra). Mielőtt számításokba kezdenénk, gondoljuk meg, mit várunk a rendszertől? Elsősorban, a felület környezetében a töltött részecskék sűrűségének csökkenésére számítunk, a felületen bekövetkező veszteségek miatt. Másrészt, mivel a plazmában lévő elektronok tömege nagyságrendekkel kisebb mint az ionoké, ennél fogva a terminus sebességük ($v_T \sim \sqrt{k_B T/m_e}$) sokkal nagyobb, így sokkal több elektron vész el adott időegység alatt a plazmát határoló felületen, mint ion. Emiatt pusztán a fizikai megfontolások alapján feltételezhető, hogy a fal negatívan fog feltöltődni, ami távol tartja a „további” elektronokat és vonzza a pozitív ionokat. A kialakult negatív potenciál azonban a korábban tárgyalt jelenségek szerint leárnyékolódik, a faltól egy bizonyos értéknél nagyobb távolságra fennmarad a kvázineutralitás.

A következő számításokkal célunk egy, a plazmával kontaktusba kerülő „lebegő” (azaz külső áramkörbe nem kapcsolt) fal potenciáljának meghatározása, valamint megmutatni, hogy az ionoknak a határrétegbe való belépéskor egy adott minimális sebességgel kell rendelkezniük. Ez a feltétel – mint látni fogjuk – megköveteli, hogy a kvázisemleges plazma és a határréteg között egy átmeneti tartomány alakuljon ki. A fentieket [4] alapján tárgyaljuk.

Vegyük fel koordinátarendszerünk kezdőpontját ($x = 0$) a h hosszúságú határréteg plazma felőli szélénél és tegyük fel, hogy (i) a plazma *ütközésmentes*, (ii) az *ionok hidegek* (vagyis az ionok hőmérséklete nulla, azaz mozgásuk csak x irányú és nem véletlenszerű) és (iii) az *elektronok Maxwell-Boltzmann-eloszlást követnek* (T_e elektronhőmérséklettel)! Az $x = 0$ helyen az elektronok és az ionok sűrűsége n_h és az ionok u_h sebességgel áramlanak a határrétegbe. A potenciál értékét vegyük nullának az $x = 0$ helyen, a felülettől távol pedig legyen ϕ_p (plazmapotenciál).

Első lépésként kapcsolatot keresünk a felület közelében a $\phi(x)$ potenciál-eloszlás és az ionsűrűség között. Az energiamegmaradás értelmében az ionok sebessége:

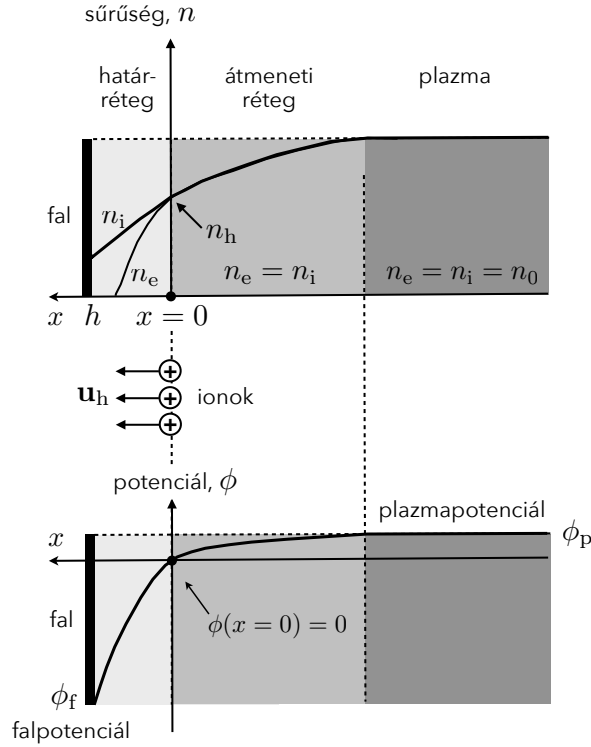
$$\frac{1}{2} m_i u_i^2 = \frac{1}{2} m_i u_h^2 - e\phi(x). \quad (3.64)$$

A folytonossági egyenlet a fenti feltételezéseink miatt az alábbi egyszerű alakra redukálódik:

$$n_i u_i = n_h u_h. \quad (3.65)$$

A fenti két összefüggésből

$$n_i(x) = n_h \left[1 - \frac{2e\phi(x)}{m_i u_h^2} \right]^{-1/2} \quad (3.66)$$



3.8. ábra. Plazma-fal határréteg ([4] alapján).

adódik, míg az elektronokra – a feltételezett Maxwell-Boltzmann-eloszlásnak megfelelően – a sűrűség eloszlása:

$$n_e(x) = n_h \exp \left[\frac{e\phi(x)}{k_B T_e} \right]. \quad (3.67)$$

A részecskesűrűségeket és a potenciáeloszlást összekötő Poisson-egyenlet:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{e}{\varepsilon_0} [n_i(x) - n_e(x)] = \frac{e}{\varepsilon_0} n_h \left\{ \exp \left[\frac{e\phi(x)}{k_B T_e} \right] - \left[1 - \frac{2e\phi(x)}{m_i u_h^2} \right]^{-1/2} \right\}. \quad (3.68)$$

A fenti egyenlet egy nemlineáris differenciálegyenlet. Emlékezzünk vissza, hogy a Debye-hossz meghatározásánál a Poisson-egyenlet lineáris volt, hiszen a sorfejtésben csak az elsőrendű tagokat hagytuk meg. Amíg lineáris differenciálegyenletek esetében a peremérték-probléma megoldásának létezésére vonatkozó kérdés nem túl izgalmas („szépen viselkedő” (folytonos, differenciálható, stb.) függvények és megfelelő határfeltételek esetén mindig van egyértelmű megoldás), addig nemlineáris esetben korántsem ilyen egyszerű a helyzet, így könnyen megeshet, hogy a fenti egyenletnek nincs is megoldása [31]. A következőkben meghatározzuk, hogy mi a feltétel (és annak fizikai jelentése) a megoldás létezésére.

3.3.1. A Bohm-kritérium

A fenti egyenlet megoldhatóságának feltétele az lesz, hogy az *ionok megfelelően nagy sebességgel áramoljanak a határrétegbe*. Ennek belátásához a 3.68. egyenlet mindkét oldalát szorozzuk be $(d\phi/dx)$ -szel és integráljuk a helykoordináta szerint!

$$\int_0^x \frac{d^2\phi}{d\xi^2} \frac{d\phi}{d\xi} d\xi = \frac{e}{\varepsilon_0} n_h \int_0^x \left\{ \exp\left[\frac{e\phi(x)}{k_B T_e}\right] - \left[1 - \frac{2e\phi(x)}{m_i u_h^2}\right]^{-1/2} \right\} \frac{d\phi}{d\xi} d\xi. \quad (3.69)$$

Ebből:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 &= \frac{e}{\varepsilon_0} n_h \int_{\phi(0)}^{\phi(x)} \left\{ \exp\left[\frac{e\phi}{k_B T_e}\right] - \left[1 - \frac{2e\phi}{m_i u_h^2}\right]^{-1/2} \right\} d\phi \\ &= \frac{e}{\varepsilon_0} n_h \left\{ \frac{k_B T_e}{e} \exp\left[\frac{e\phi}{k_B T_e}\right] + \frac{m_i u_h^2}{e} \left[1 - \frac{2e\phi}{m_i u_h^2}\right]^{1/2} \right\}_{\phi(0)}^{\phi(x)} \\ &= \frac{n_h}{\varepsilon_0} \left\{ k_B T_e \exp\left[\frac{e\phi}{k_B T_e}\right] - k_B T_e + m_i u_h^2 \left[1 - \frac{2e\phi}{m_i u_h^2}\right]^{1/2} - m_i u_h^2 \right\} \end{aligned} \quad (3.70)$$

adódik, amiben az

$$\begin{aligned} \exp\left[\frac{e\phi}{k_B T_e}\right] &\cong 1 + \frac{e\phi}{k_B T_e} + \frac{(e\phi)^2}{2(k_B T_e)^2}, \\ \left[1 - \frac{2e\phi}{m_i u_h^2}\right]^{1/2} &\cong 1 - \frac{1}{2} \frac{2e\phi}{m_i u_h^2} - \frac{1}{8} \frac{(2e\phi)^2}{(m_i u_h^2)^2} \end{aligned}$$

sorfejtésekkel élve a következő összefüggésre jutunk:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 = \frac{n_h}{\varepsilon_0} \left[\frac{(e\phi)^2}{2k_B T_e} - \frac{(e\phi)^2}{2m_i u_h^2} \right]. \quad (3.71)$$

Ennek az egyenletnek a megoldhatósága megköveteli az alábbi egyenlőtlenséget (hiszen a bal oldal nemnegatív):

$$\frac{(e\phi)^2}{2k_B T_e} - \frac{(e\phi)^2}{2m_i u_h^2} \geq 0, \quad (3.72)$$

vagyis azt, hogy az ionok sebességének a határrétegbe való belépéskor meg kell haladnia egy adott értéket, a *Bohm-sebességet* ⁵

$$u_B = \sqrt{\frac{k_B T_e}{m_i}}. \quad (3.73)$$

⁵A plazmahullámok tárgyalásánál a későbbiekben be fogjuk látni, hogy a Bohm-sebesség egyben az „ionfolyadék” hangsebessége is.

K. 5: A Szaggyejev-potenciál

A fenti, hosszadalmasnak és fizikailag kevésbé indokoltnak tűnő levezésnél gyakorlatilag a plazmában található elektromos tér

$$W_E \propto \frac{1}{2} E^2 = \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 \quad (3.74)$$

energiáját számoltuk ki és annak nemnegativitása alapján kaptuk meg a Bohm-kritériumot. A problémára létezik egy másik, hatékonyabb levezés is, az ún. *pszeudopotenciál* vagy Szaggyejev-potenciál módszere [30]. Módszerünk a klasszikus mechanikában alkalmazott stabilitáselméleten alapszik. Ehhez tekintsünk egy m tömegű részecskét, amely egy $V(x)$ potenciálban mozog! Ekkor

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{1}{m} \frac{dV}{dx}. \quad (3.75)$$

Az egyensúlyi helyzetre $F = -dV/dx = 0$ kell, hogy teljesül, vagyis egyensúlyi pontok ott lehetnek, ahol a potenciálnak szélsőértéke van. Az egyensúlyi pont akkor stabil, ha ez a pont minimum, vagyis ha $d^2 V/dx^2 > 0$. A fenti egyszerű mozgásegyenlethez matematikailag nagyon hasonlít a

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} = -\frac{d\Psi}{d\phi} \quad (3.76)$$

Poisson-egyenlet, ahol bevezettük a $\Psi(\phi)$ pszeudopotenciált, ami az elektromos potenciál függvénye. Kvázineutralitás esetén $\rho = 0$ és $\phi = 0$ az egyensúlyi állapot. A határrétegben azonban nemnulla tértöltés található, így ez az egyensúlyi állapot instabil kell, hogy legyen. Ennek feltétele az, hogy $d^2 \Psi/d\phi^2 = \frac{1}{\varepsilon_0} d\rho/d\phi < 0$ teljesüljön a $\phi = 0$ helyen (ahol az állapot stabilitását vizsgáljuk). Figyelembe véve a 3.68. egyenletet, a feltétel:

$$-\frac{d}{d\phi} \left[e^{\frac{e\phi}{k_B T_e}} - \left(1 - \frac{2e\phi}{m_i u_h^2} \right)^{-1/2} \right] \Big|_{\phi=0} = \left(-\frac{e}{k_B T} + \frac{e}{m_i u_h^2} \right) < 0, \quad (3.77)$$

vagyis $u_h > \sqrt{\frac{k_B T_e}{m_i}} = u_B$, ami a már látott Bohm-kritérium, ami tehát annak a feltétele, hogy a határrétegben lévő pozitív tértöltés ne tudjon „visszaszivárogni” a kvázineutrális zónába. A $\frac{d\rho}{d\phi} < 0$ feltételnek további fizikai értelmet is adhatunk: a feltétel szerint csökkentve a potenciált (az elektróda felé haladva) a határrétegben lévő tértöltésnek növekednie kell, azaz a pozitív tértöltés sűrűségének monoton nőnie kell az elektróda felé haladva, összhangban azzal, hogy az elektronok egyre nagyobb taszítóerőt éreznek az elektródához közeledve.

A Bohm-sebességet az ionok a kvázisemleges plazma és a határréteg között

kialakuló *átmeneti tartományban* kell, hogy felvegyék. Az ionok gyorsításához ezen a térrészen egy $\phi_p > 0$ potenciálesés szükséges (lásd 3.8. ábra):

$$\frac{1}{2}m_i u_B^2 = e\phi_p \rightarrow \phi_p = \frac{m_i u_B^2}{2e}. \quad (3.78)$$

Az elektronok Maxwell–Boltzmann-eloszlását kihasználva, ebből a potenciálkülönbségből kiszámítható a töltött részecskék sűrűsége a határreteg szélén ($x = 0$ helyen):

$$n_h = n_0 \exp\left[\frac{-e\phi_p}{k_B T_e}\right] = n_0 e^{-1/2} \cong 0.61 n_0. \quad (3.79)$$

Az átmeneti tartományban a modellünk szerint a sűrűség a plazma paramétereitől független arányban csökken a kvázisemleges térrészhez képest. A Bohm-kritérium további részleteiért ld. [32, 33].

3.3.2. A falpotenciál

Egy lebegő (külső áramkörhöz nem csatlakoztatott) fal esetén nyilvánvaló, hogy egyensúlyi állapotban a falra érkező elektronok és ionok fluxusa meg kell egyezzen. Az is nyilvánvaló, hogy a fal ϕ_f potenciálja hatással van a részecskék fluxusára, és így a fluxusok egyenlőségének feltétele meghatározza a fal potenciálját.

Adott n sűrűség mellett valamely $\hat{\mathbf{s}}$ normálvektorú sík felületre érkező részecskék fluxusának értéke $\Gamma_s = n\langle v_s \rangle$, ahol $v_s = (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{s}})$ a részecskék sebességének a felületre merőleges vetülete. $\langle v_s \rangle$ kiszámításánál az átlagolást csak a felület irányába mozgó részecskékre kell elvégezni. Maxwell–Boltzmann-sebességeloszlású elektronok esetén:

$$\Gamma_s = \int f_M(\mathbf{v}) (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{s}}) d^3\mathbf{v}. \quad (3.80)$$

Gömbi koordinátákban $d^3\mathbf{v} = v^2 \sin \theta d\theta d\varphi dv$ és $\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{s}} = v \cos \theta$, ami alapján:

$$\begin{aligned} \Gamma_s &= \int_0^\infty v^3 f_M(v) dv \int_0^{\pi/2} \sin \theta \cos \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\ &= \pi \int_0^\infty v^3 f_M(v) dv = n \left(\frac{k_B T_e}{2\pi m} \right)^{1/2} = \frac{n\langle v \rangle}{4}, \end{aligned} \quad (3.81)$$

ahol, 2.113. szerint $\langle v \rangle = \sqrt{8k_B T_e / \pi m_e}$. Az elektronok sűrűségének a határreteg széléhez viszonyított (a határreteken fellépő potenciálkülönbség miatti) csökkenését figyelembe véve a fluxus:

$$\Gamma_e = \frac{1}{4} n_h \langle v \rangle \exp\left[\frac{e\phi_f}{k_B T_e}\right] = \frac{1}{4} n_h \sqrt{\frac{8k_B T_e}{\pi m_e}} \exp\left[\frac{e\phi_f}{k_B T_e}\right]. \quad (3.82)$$

Az ionok fluxusa (mivel feltételeztük, hogy hőmérsékletük nulla és így a fal felé „irányítottan” mozognak):

$$\Gamma_i = n_h u_B. \quad (3.83)$$

A $\Gamma_i = \Gamma_e$ feltételből (3.73. felhasználásával) meghatározható a fal potenciálja:

$$\phi_f = -\frac{k_B T_e}{e} \ln \sqrt{\frac{m_i}{2\pi m_e}}. \quad (3.84)$$

A kapott érték láthatóan enyhén (logaritmikusan) függ az ion - elektron tömegaránytól. Megállapítható, hogy (i) a fal negatív potenciált vesz fel és (ii) a tipikus tömegekkel számolva ennek értéke $k_B T_e / e$ néhányszorosa.

3.4. Termikus és nemtermikus plazmák

A fentiekben, a plazmákat jellemző alapvető mennyiségek bevezetésekor nem tértünk ki arra, hogy az adott plazma hogyan *keletkezik*, pedig ez egy nagyon fontos kérdés! A bevezetőben már említettük, hogy erre különböző „utak” léteznek. A termikus plazmákkal ellentétben, amelyben a gáz hőközlés hatására ionizálódik, alacsony hőmérsékletű plazmák esetében az ionizációért „nagy energiájú” részecskék a felelősek, amik lehetnek például ultraibolya-, vagy röntgenfotonok, vagy – a számunkra legérdekesebb esetekben – magában a plazmában jelenlévő elektromos tér hatására felgyorsuló töltött részecskék (elektronok, vagy ionok). A plazmakeltés „termikus útjával” részletesen tehát nem foglalkozunk, az alábbiakban csak kitekintésképpen és röviden tárgyaljuk az ezt leíró alapegyenletet.

3.4.1. Termikus ionizáció

A termikusan generált plazmák ionizációs egyensúlyának legalapvetőbb leírását a Saha-egyenlet adja meg, melynek származtatását az alábbiakban ismertetjük.⁶

K. 6: A Saha-egyenlet

Ahhoz, hogy az ionizációt statisztikus fizikai alapokon tudjuk tárgyalni, röviden beszélni kell a kémiai reakciókról [34], melyek közül itt csak gázfázisú reakciókra fogunk szorítkozni.

Legyen m darab különböző B_i ($i \in [1, m]$) molekulánk, melyek részt vesznek egy adott reakcióban, pl. $B_1 = \text{H}_2$, $B_2 = \text{O}_2$, $B_3 = \text{H}_2\text{O}$. Ekkor egy lehetséges (kétirányú) reakció a következő:



A fentiek alapján egy reakció felírható a

$$\sum_{i=1}^m b_i B_i = 0 \quad (3.86)$$

általános alakban, ahol a b_i együtthatókat *sztoichiometriai* együtthatóknak hívjuk, és definíció szerint negatívnak vesszük, ha a reakció során a

⁶Az itt leírtak nem feltétlen szükségesek központi tematikánk követéséhez.

hozzá tartozó molekula „eltűnik” illetve pozitívnak, ha a megfelelő molekula a reakció során „megjelenik”. Ezért pl. a hidrogén és oxigén molekulák (fenti reakció szerinti) egyesülésekor $b_1 = -2$, $b_2 = -1$, $b_3 = 2$. Feltéve hogy a rendszerünk izolált, termodinamikai szempontból $dE = dV = 0$, azaz belső energiája és térfogata nem változik. Felhasználva (i) a termodinamika első főtétele, miszerint

$$dE = TdS - p dV + \sum_{i=1}^m \mu_i dN_i. \quad (3.87)$$

ahol $\mu_i = \left. \frac{\partial E}{\partial N_i} \right|_{S, V, N_j \neq N_i}$ az adott molekula *kémiai potenciálja* (j a többi molekulát jelöli) és (ii) a termodinamika második főtételenek egy változatát (miszerint egyensúlyban az entrópia maximális, azaz $dS = 0$), azt kapjuk, hogy egyensúlyban

$$\sum_{i=1}^m \mu_i dN_i = 0. \quad (3.88)$$

Mivel a reakció során a N_i értékek változnak, hiszen ezek a különböző molekulákhoz tartozó részecskeszámok, ahhoz, hogy a reakció létrejöheszen, teljesülnie kell az $N_i \propto b_i$ arányosságoknak. Felhasználva a reakció lefolyására és az egyensúlyra vonatkozó képleteinket a molekulák kémiai potenciáljai között az alábbi fontos összefüggésre jutunk:

$$\sum_{i=1}^m b_i \mu_i = 0 \quad (3.89)$$

Tegyük fel, hogy a molekulák egymással nincsenek kölcsönhatásban (a reakció lefolyását kivéve), így alkalmazható rájuk az ideálisgáz-közelítés és a már látott Maxwell-Boltzmann-eloszlás. Legyen az i -edik molekula energiája

$$\varepsilon_k^{(i)} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m_i} + \varepsilon_k^{(i), \text{res}}, \quad (3.90)$$

ahol az energia első része a (transzlációs) mozgási energia, ami csak a tömegközéppont sebességétől függ, a második tag pedig más, a molekula (általában kvantumos eredetű) belső szabadsági fokaihoz tartozó pl. forgásból, rezgésből származó energia. Emlékezzünk most vissza az előző fejezetben bevezetett

$$Z = \mathcal{C} \prod_{i=1}^m e^{-\frac{\varepsilon^{(i)}}{k_B T}} d^3 \mathbf{p}_i d^3 \mathbf{q}_i \quad (3.91)$$

partíciós függvényre!

A továbblépés előtt két megjegyzést kell tennünk: (i) a fenti feltételezésünk alapján – miszerint a molekulák nem hatnak egymással kölcsön, azaz energiáik függetlenek – a partíciós függvény m ugyanolyan integrál szorzatára esik szét (és formálisan a produktumjelet kivihetjük az integrál elé). (ii) A $\mathcal{C}$ együttthatót a klasszikus elméletből nem tudjuk meghatározni. A meghatározás módja az, hogy kidolgozzuk a kvantummechanikai leírást, majd megköveteljük, hogy határesetben kapjuk vissza a klasszikus képletet (ez az ún. *szemiklasszikus leírás* [35]). Ez az eljárás N részecske esetén $\mathcal{C} = \frac{1}{N!h^{3N}}$ értékre vezet. Az $N!$ tag abból származik, hogy a kvantummechanikában a részecskék megkülönböztethetetlenek egymástól, míg a klasszikus elméletben „felcímkezhetsük” őket. A másik, a h Planck-állandót tartalmazó tag a Heisenberg-féle határozatlansági reláció következménye: a Δp és Δq mennyiségekre, amik egy részecske helyének és impulzusának mérési bizonytalansága, a $\Delta p \Delta q \sim h$ reláció áll fenn. A partíciós függvény az összes szabadsági fokhoz tartozó exponenciális faktorok összege. Klasszikus esetben minden infinitézimális térfogatelemben ($d^3\mathbf{p} d^3\mathbf{q}$) lehet szabadsági fok, azonban ez a kvantummechanikában már nem lesz igaz: a fázistér kis, h^3 méretű fázistérfogat-kockákra van osztva, amelyekben egy-egy szabadsági fok „fér el”. (iii) Hangsúlyozzuk még egyszer: a partíciós függvény minden lehetséges szabadsági fokra súlyoz, majd összead. Az energiát tekintve a fázistérfogatra való integrálás két részre esik szét: integrálás a klasszikus „mozgási” energiára, valamint összegzés a kvantumos részre, azaz

$$Z = \prod_{i=1}^m \frac{1}{N_i! h^{3N_i}} \left(\int e^{-\frac{p_i^2}{2m_i k_B T}} \sum_k g_k e^{-\frac{\varepsilon_k^{(i),\text{res}}}{k_B T}} d^3\mathbf{p}_i d^3\mathbf{q}_i \right)^{N_i}, \quad (3.92)$$

ahol bevezettük a g_k *statisztikus súlyt*, ami annyit jelent, hogy egy kvantumrendszer esetében előfordulhat, hogy egy energiaszint degenerált, azaz több, különböző állapotnak is ugyanakkora energiája van, amelyek közül azonban mindegyiket figyelembe kell venni a partíciós függvényben. Például, ha egy s spinű részecske energiája (Hamilton-függvénye) nem függ a spintől, akkor az energia $2s + 1$ -szeresen lesz degenerált, azaz $g = 2s + 1$. A „mozgási” energiára vonatkozó integrál egy egyszerű Gauss-integrál, így tovább írhatjuk, hogy

$$Z = \prod_{i=1}^m \frac{(V\zeta_i)^{N_i}}{N_i!}, \quad (3.93)$$

ahol

$$\zeta_i = \frac{1}{\lambda_i^3} \sum_k g_k e^{-\frac{\varepsilon_k^{(i),\text{res}}}{k_B T}} = \left(\frac{2\pi m_i k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \sum_k g_k e^{-\frac{\varepsilon_k^{(i),\text{res}}}{k_B T}} \quad (3.94)$$

az ún. *kémiai állandó*, és bevezettük λ_i -t, a részecske *termikus de-Broglie-hullámhosszát*. Korábbi tanulmányaink (vagy a 2.106. egyenlet alapján)

tudjuk, hogy a partíciós függvény logaritmus arányos a rendszer *szabad energiájával*, $F = E - TS$ -sel, hiszen $F = -k_B T \ln Z$. Tudva ezt, illetve a $\mu_i = \left. \frac{\partial F}{\partial N_i} \right|_{V,T,N_j \neq N_i} = -k_B T \ln \frac{V \zeta_i}{N_i}$ összefüggést, ezt beírhatjuk az eredeti, a kémiai potenciált tartalmazó 3.89. egyenletbe:

$$\sum_{i=1}^m b_i \ln \frac{\zeta_i}{n_i} = 0, \quad (3.95)$$

ahol bevezettük a molekulák n_i sűrűségét. A fenti egyenletet átalakítva kapjuk a kémiából ismeretes *tömeghatás törvényét*:

$$\prod_{i=1}^m n_i^{b_i} = \prod_{i=1}^m \zeta_i^{b_i}. \quad (3.96)$$

Végre elérkeztünk a legfontosabb eredményünkhöz, amit egyből alkalmazhatunk is egy molekula ionizációjának vizsgálatára. Vegyünk egy molekulát, A -t, amely ionizálódik, azaz az $A + e^- \rightleftharpoons A^+ + 2e^-$ egyensúlyi reakció folyik le. Ekkor a tömeghatás törvényének alkalmazásához tisztáznunk kell, hogy a különböző, a reakcióban szereplő részecskének milyen, a klasszikus integrálásban nem szereplő kvantumos „belső” energiájuk van. Az elektron egy feles spinű részecske, és nincs a fenti értelemben további kvantumos szabadsági foka. Mivel magas hőmérsékleteket vizsgálunk, így molekulák helyett elég, ha atomokat vizsgálunk, hiszen elég magas hőmérsékleten a molekulák atomokra disszociálnak.

Atomok esetében $\zeta_i \sim \sum_k g_k e^{-\frac{\varepsilon_k^{(i),\text{res}}}{k_B T}}$, ahol $g_k = (2L+1)(2S+1)$, L és S pedig a gerjesztett atom össz-pályaimpulzus-momentuma és -spinje (bővebben lásd a spektroszkópiáról szóló 10.2 fejezetet). Láthatóan a gerjesztett állapotok – nem túl nagy hőmérsékleten – elhanyagolhatók az alapállapothoz képest. Hidrogén esetén az első gerjesztett állapot energiájának megfelelő hőmérséklet $\sim 10^5$ K, így ezen hőmérséklet alatt feltehetjük, hogy az atomunk alapállapotban van. Feltételezve továbbá, hogy az atom és annak egyszeresen ionizált változata tömeg szempontjából nem különbözik, a tömeghatás törvényéből az ezekhez tartozó termikus de-Broglie-hullámhosszak kiesnek. Ezek alapján a termikus egyensúlyban lévő plazmánkban az egymást követő, i -edik és $i+1$ -edik ionizációs állapotokban lévő atomok sűrűségének arányát a *Saha-egyenlet* adja meg:

$$\begin{aligned} \frac{n_{i+1} n_e}{n_i} &= \frac{\zeta_e \zeta_{i+1}}{\zeta_i} \Rightarrow \\ \frac{n_{i+1}}{n_i} &= \frac{2}{n_e} \left(\frac{2\pi m_e k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{g_{i+1}}{g_i} \exp\left(-\frac{\Delta\varepsilon_{i,i+1}}{k_B T}\right), \end{aligned} \quad (3.97)$$

ahol n_e az elektronsűrűség, g_i és g_{i+1} a statisztikus súlyok ($g_e = 2$ az elektron feles spinje miatt), $\Delta\varepsilon_{i,i+1}$ pedig a két szint közötti ionizációs energia.

Példaként tekintsük héliumgáz esetét és vizsgáljuk az egyszeres és kétszeres ionizációs állapotok kialakulását a hőmérséklet függvényében! Jelölje n_0 a semleges atomok, n_1 a He^+ ionok, n_2 a He^{++} és n_e az elektronok sűrűségét, a teljes sűrűség: $n = n_0 + n_1 + n_2 + n_e$. Bevezetjük még az $x_0 = n_0/n$, $x_1 = n_1/n$, $x_2 = n_2/n$ és $x_e = n_e/n$ normált sűrűségeket ($x_0 + x_1 + x_2 = 1$ és $x_e = x_1 + 2x_2$).

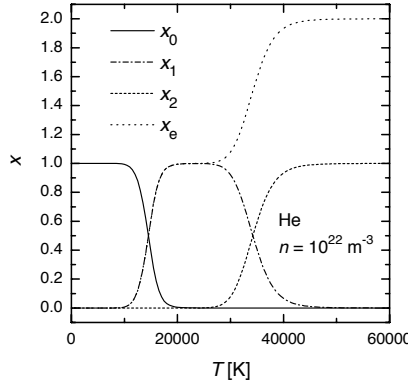
A gerjesztett állapotok elhanyagolásával a hélium atomokra $g_0 = 1$ ($L = S = 0$), az egyszeresen ionizált atomban „megmaradó” elektron spinjének két lehetséges beállása miatt $g_1 = 2$ ($S = 1/2$, $L = 0$), valamint a kétszeresen ionizált atomra $g_2 = 1$, hiszen nincsenek elektronjai. Az egymást követő ionizációs állapotok közötti sűrűségarányokat megadó egyenletek:

$$\frac{n_1}{n_0} = \frac{4}{n_e} \left(\frac{2\pi m_e k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_1}{k_B T}\right), \quad (3.98)$$

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{1}{n_e} \left(\frac{2\pi m_e k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_2}{k_B T}\right), \quad (3.99)$$

ahol $\mathcal{E}_1 = 24.59$ eV és $\mathcal{E}_2 = 54.42$ eV a He atom első és második ionizációs energiái. A fenti nemlineáris egyenletrendszer numerikus megoldása megadja a sűrűségarányok függését a hőmérséklettől.

A 3.9. ábra az egyes részecskék normált sűrűségét mutatja, $n = 10^{22} \text{ m}^{-3}$ sűrűségű gázra. $T \lesssim 10000$ K hőmérséklet alatt nincs jelentős ionizáció, $x_0 \cong 1$. Az atomok fele $T \cong 14500$ K hőmérsékletnél kerül egyszeresen ionizált állapotba, ekkor még a He^{++} ionok sűrűsége elhanyagolható ($x_0 = x_1 = 0.5$, $x_2 \cong 0$).



3.9. ábra. Normált sűrűségek a hőmérséklet függvényében hélium gázban, $n = 10^{22} \text{ m}^{-3}$ mellett: x_0 : semleges atomok, x_1 : He^+ ionok, x_2 : He^{++} ionok és x_e : elektronok.

A $20000\text{ K} \lesssim T \lesssim 27000\text{ K}$ tartományban a gáz lényegében egyszeresen ionizált. Magasabb hőmérsékleten megjelenik a második ionizációs állapot, $\cong 34000\text{ K}$ hőmérsékleten a He^+ és He^{++} ionok sűrűsége egyenlővé válik ($x_1 = x_2$). $T \cong 50000\text{ K}$ fölött lényegében már csak He^{++} ionok és elektronok vannak jelen ($x_0 = x_1 = 0$, $x_2 = 1$, $x_e = 2$). Ez a hélium teljesen ionizált, forró plazma állapota. Látható, hogy a teljesen ionizált állapot sokkal kisebb hőmérsékleten beáll, mint az ionizációs energiának megfelelő hőmérséklet ($5 \times 10^5\text{ K}$). Ennek oka, hogy az ionizáció megnöveli a rendszer lehetséges állapotainak számát a fázistérben, azaz az entrópiáját, így a rendszer szabad energiája, $F = E - TS$ alacsonyabb hőmérsékleten is kisebb értéket vehet fel ionizáció esetén. Ezek alapján egy egyszerűbb levezetést lehet kapni a Saha-egyenletnek [36].

A termikus ionizáció esetét itt csak a teljesség igénye miatt említettük meg, alacsony hőmérsékletű plazmákban ez a folyamat nem kap szerepet.

3.4.2. Nemtermikus, alacsony hőmérsékletű plazmák – elektromos gázkisülések

A nemtermikus úton létrehozott plazmák tipikusan távol állnak a termodinamikai egyensúlytól, ugyanis egy szobahőmérsékletű ($T_g \sim 300\text{ K}$) gáz részecskéinek átlagos termikus energiája $\bar{\epsilon} = \frac{3}{2}k_B T_g \approx 0.039\text{ eV}$, míg ionizáció létrehozásához az elektronok energiája meg kell, hogy haladja a gázatomok (molekulák) ionizációs potenciálját (ami pl. argon esetében 15.8 eV , hélium esetében 24.6 eV). Az alacsony hőmérsékletű plazmákban a különböző típusú részecskék (semleges atomok, vagy molekulák, elektronok, ionok) jellemző energiája tehát szükségszerűen erősen eltérő kell, hogy legyen. Továbbá, a részecskék eloszlásfüggvényei sok esetben nem követik a Maxwell–Boltzmann-statisztikát, így szigorúan véve, ezekben az esetekben nem is beszélhetünk az adott részecsketípus sokaságának hőmérsékletéről. A következőkben röviden gondoljuk át, hogy mely folyamatok alakítják ki kvalitatívan a részecskék sokaságára jellemző eloszlásfüggvényt és karakterisztikus energiát!

Elsőként tekintsük a legegyszerűbb esetet, amikor csak elektromosan semleges A^0 részecskék vannak jelen! A rendszerben az $A^0 + A^0$ rugalmas ütközések során a részecskék között energiacsere megy végbe, és ez, az ütközések gyakorisága által meghatározott időskálán – tetszőleges kezdeti eloszlásból indulva – az egyensúlyi, 2.110. összefüggés szerinti Maxwell–Boltzmann-eloszlás kialakulásához vezet.

Ha az A^0 típusú semleges részecskék mellett $B^\pm$ töltött részecskék (ionok, vagy elektronok) is jelen vannak, de nincs jelen külső elektromos tér, akkor az $A^0 + B^\pm$, $A^0 + A^0$ és $B^\pm + B^\pm$ ütközések következtében mindkét rendszerben Maxwell–Boltzmann-eloszlás alakul ki, megegyező átlagos energiával, illetve hőmérséklettel [37].

Az utóbbi „kétkomponensű” rendszerben, $E \neq 0$ térerősség mellett szerepet kap a töltött részecskék energianyeresége a külső elektromos tértől: a töltött

($B^\pm$) részecskék eloszlásfüggvényét ez az energianyereség és az $A^0 + B^\pm$ ütközésekben leadott energia nagysága határozza meg.⁷ Állandósult állapotban ez a két mennyiség (az összes részecskére és időben átlagolva) meg kell, hogy egyezzen (feltéve, hogy nincsenek felületi veszteségek). Az elektromos tértől felvett energia (adott töltés mellett) a térerősségtől és a két ütközés között befutott átlagos úthossznak az elektromos tér irányára vett vetületétől függ, míg az energiacsere mértékét – mint azt a bináris ütközések tárgyalásánál (a 4.2. fejezetben) majd látni fogjuk – a két ütköző részecske *tömegének aránya* szabja meg. Azonos, vagy hasonló tömegű részecskék esetén (pl. atom - atom és ion - atom ütközésekben) jelentős mértékű energiacsere következhet be az egyes ütközések során, míg erősen eltérő tömegek esetében, pl. elektron - atom ütközésekben az energiacsere nagyon kis mértékű. Általánosan elmondható, hogy állandósult állapotban a $B^\pm$ (töltött) részecskék átlagos energiája magasabb lesz az A^0 részecskékénél, az elektromos térből a $B^\pm$ részecskék által felvett energia az $A^0 + B^\pm$ ütközések által közvetítve áramlik az A^0 részecskék rendszerébe (ahonnan ezt a hővezetés, gázáramlás, vagy felületi veszteségek távolítják el). Mivel az elektron - atom ütközésekben az energiaátadás nem hatékony, ezért az átlagos energiák különbsége az elektronok esetében sokkal nagyobb lesz, mint ionok esetében.

Az *alacsony hőmérsékletű plazmákban* – elsődlegesen az ionizáció eléréséhez és fenntartásához – feltétlenül szükségesek a magasabb energiaküszöbű rugalmatlan ütközések. Bár ezek tipikusan sokkal ritkábbak a rugalmas ütközéseknél, a rugalmatlan folyamatokban bekövetkező nagymértékű energiavesztés szintén jelentős szerepet kap a sebességeloszlás-függvény kialakításában. Ilyen körülmények között az utóbbi általában lényegesen eltér a Maxwell-Boltzmann-alaktól. Ezek a fizikai rendszerek a legegyszerűbb esetben (pl. egy alacsony nyomású elektropozitív gázban⁸) háromkomponensű rendszert alkotnak, a részecskék nagy része A^0 semleges atom, vagy molekula, melyek mellett kis számban jelen van egy, a pozitív töltésű B^+ ionok és egy, a negatív töltésű e^- elektronok által alkotott komponens is. Kis térerősség mellett (ill. a gázkisülések kis térerősségű térrészeiben) az ionok rendszere, a gyakori ütközések és a jelentős mértékű energiaátadás miatt közelítőleg (termodinamikai) egyensúlyban van a háttérgázzal, az elektronokra viszont általában ez már nem mondható el. Nagy térerősségek mellett (ill. a gázkisülések nagy térerősségű térrészeiben) az ionok is jelentős energiát nyernek az elektromos tértől és átlagenergiájuk lényegesen a gáz termikus energiája fölé emelkedhet.

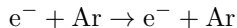
Az elektronok – a fentiek alapján láthatóan is – kulcsszerepet játszanak a plazmaforrások működtetésében, ugyanis ezek a részecskék tudnak legkönnyebben energiát felvenni az elektromos tértől (melyet a legtöbb plazmaforrásban egy külső, egyenfeszültségű vagy váltakozó feszültségű táplálás hoz létre), és így el tudják indítani azon *elemi folyamatok* sorozatát, amik a plazma kialakulását

⁷Mivel alacsony ionizációs fokú rendszerekkel foglalkozunk, melyekben a $B^\pm$ típusú részecskék koncentrációja sokkal kisebb az A típusú részecskékénél, ezért feltételezhetjük, hogy a $B^\pm + B^\pm$ ütközések hatása elhanyagolható. (Ez a közelítés nagyon kis térerősségek esetén érvényét vesztheti.)

⁸*Elektropozitív* gázok alatt azokat a gázokat értjük, amelyek semleges részecskéiből csak pozitív ionok keletkeznek. Amennyiben negatív ionok is keletkezhetnek valamely gáz plazmájában, *elektronegatív* gázról beszélünk.

hoz vezetnek és fenntartását biztosítják.

Ezen *elemi folyamatok* ismerete alapvetően fontos az elektromos gázkisülések fizikájának megértéséhez. Egy alacsony hőmérsékletű argonplazmát tekintve példaként, a legfontosabb *elemi folyamatok* az elektronok és a gázatomok ütközései. Ezek közül a



rugalmas ütközésekben csak energiaátadás történik, míg a



rugalmatlan ütközésekben további elektronok és ionok, illetve gerjesztett állapotú atomok keletkeznek. A utóbbiak közül az első folyamat szerepe a plazmát alkotó töltött részecskék folyamatos keltése, a második folyamat pedig a fénykibocsátásért felelős. A töltött részecskék reprodukciójában a *gázfázisú* folyamatok mellett sok esetben a plazmákat határoló *felületeken* lejátszódó egyes folyamatok is fontos szerepet kapnak. Az elemi folyamatok típusait és szerepét a későbbiekben részletesen tárgyaljuk.



4. fejezet

Elemi folyamatok, ütközések és hatáskeresztmetszetek

Az alacsony hőmérsékletű plazmák fizikájának megértéséhez elengedhetetlen a bennük lejátszódó *elemi (ütközési) folyamatok* ismerete. Mint már említettük, az ionizált állapot létrehozásáért és fenntartásáért főleg az elektronok és a gázatomok (molekulák) közötti ionizáló ütközések felelősek, míg a gerjesztési ütközési folyamatoknak köszönhető a plazma fénykibocsátása. A 4.1. fejezetben bevezetést adunk a legfontosabb elemi ütközési folyamatok világába. A *gázfázisú* folyamatok (4.1.1. fejezet) mellett röviden összefoglaljuk a plazma-fal kölcsönhatásban szerepet játszó legfontosabb *felületi* elemi folyamatokat (4.1.2. fejezet). Következő lépésként a 4.2. fejezetben tárgyaljuk az ütközési folyamatok kinematikáját (a klasszikus fizika szintjén maradva), majd a 4.3. fejezetben bevezetjük részecskék közötti ütközéseket jellemző *szórási hatáskeresztmetszeteket*, majd néhány speciális esetre foglalkozunk ezek kiszámításával. Ezekben a részekben nem célunk az ütközési és atomfizikai folyamatok részletes, *kvantummechanikai* szintű megértése – az utóbbiba a 4.4 fejezetben adunk rövid betekintést.

4.1. Elemi folyamatok

4.1.1. Gázfázisú folyamatok

Alacsony ionizációs fok mellett a legtöbb ütközés valamely számunkra „fontos” töltött részecske (elektron vagy ion) és a háttérgáz egy atomja, vagy molekulája között megy végbe. Ezért elsőként az *elektron - atom* ütközési folyamatokkal foglalkozunk – ennek során példaként Ar háttérgáz jelenlétét tételezzük fel.

A legalapvetőbb (és tipikusan leggyakoribb) ütközési folyamat a *rugalmas szórás*:



A folyamatnak nincs küszöbenergiája, az ütközés során az elektron szóródik, pályája eltérül, energiája kis mértékben változik (a két részecske nagyon eltérő tömege miatt, ld. később).

A további, *rugalmatlan* ütközési folyamatok, melyekben a „lövedék” (esetünkben az elektron) kinetikus energiájának egy része a „cél tárgy” (esetünkben gázatom vagy molekula) belső energiájának megváltoztatására fordítódik, módosítják az atom elektronkonfigurációját.

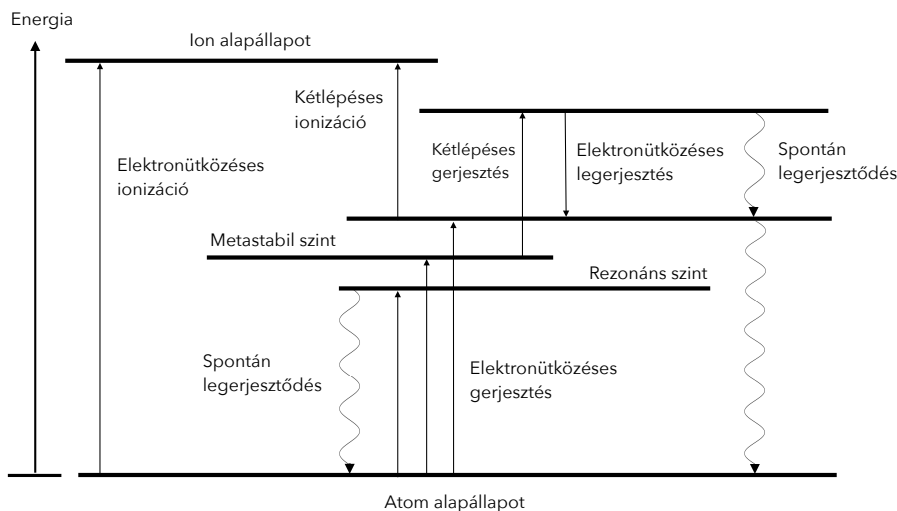
Az atomot magasabb energiájú szintre vivő



folyamatot *elektronütközéses gerjesztésnek* nevezzük, ld. 4.1. ábra. Egy magasabb energiájú Ar^{**} gerjesztett szintről alacsonyabb Ar^* gerjesztett szintre vivő ütközést pedig, mint pl. az



elektronütközéses legerjesztésnek nevezzük. A folyamatban az elektron energiájának megváltozása (jó közelítéssel) az érintett atomi energiaszintek különbségének felel meg. Megjegyezzük, hogy az ütközéses legerjesztéses folyamatok csak olyan esetekben lehetnek jelentősek, ahol nagyon gyakoriak az ütközések, ugyanis a legtöbb gerjesztett szint spontán módon is legerjesztődik foton kibocsátásával (spontán emisszió) az alapállapotba, vagy valamilyen más gerjesztett szintre, kivéve, ha azt kvantummechanikai kiválasztási szabályok tiltják (ld. 10.2.1. fejezet).



4.1. ábra. Néhány jellegzetes atomi és ion energia állapot / szint és fontos elemi folyamatok.

A gerjesztett szintek közül említést érdemelnek a *rezonáns* és *metastabil* szintek. A rezonáns szinten lévő atomok *rezonanciasugárzás* kibocsátásával gerjesztődhetnek le az alapállapotba (amelynek hullámhossza legtöbb atom esetén a vákuum-ultraibolya / ultraibolya tartományba esik¹, argon atomok esetén $\lambda \sim 100$ nm). A rezonanciasugárzás a gázban (a nagyon kis nyomások esetét kivéve) a nagy fotoabszorpciós hatáskeresztmetszet miatt sorozatos elnyelődés + kisugárzás folyamatokkal terjed. A metastabil szintek, mint nevük is jelzi, hosszú élettartamúak, ugyanis az alapállapot felé az átmenet (spontán legerjesztődés) kvantummechanikai kiválasztási szabályok értelmében tiltott. Ez a tiltás viszont nem vonatkozik az ilyen szintek elektronütközéses keletkezésére és legerjesztésére. Gázkisülések alacsony hőmérsékletű plazmáiban a metastabil atomok nagy koncentrációban lehetnek jelen és jelentős energiatároló szerepet tölthetnek be.

További fontos, a töltött részecskék keltését biztosító legalapvetőbb (rugalmatlan) ütközési folyamat az *elektronütközéses ionizáció*, melynek során egy elektron leszakad az atomról:



A rugalmatlan folyamatok több lépésben is végbemehetnek (*többlépéses folyamatok*), ilyen például az egy gerjesztett szintről „induló”, magasabb energiájú szintre vezető gerjesztési folyamat, vagy ionizáció:



Ezek a folyamatok akkor válhatnak jelentőssé, ha a kiinduló gerjesztett szint élettartama hosszabb, mint az ütközések közötti átlagos idő. Ez legtöbbször a metastabil szintekre igaz, melyek élettartama sok nagyságrenddel nagyobb, mint az egyéb gerjesztett szintek élettartama (mely tipikusan $\sim 1\text{--}10$ ns).

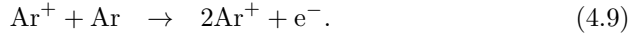
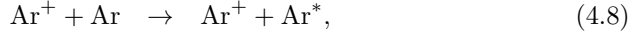
Az elektronokhoz hasonlóan az *ionok* is részt vehetnek rugalmas és rugalmatlan ütközési folyamatokban. Itt is a leggyakoribb folyamat a rugalmas ütközés,



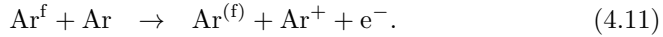
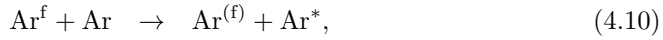
melynek során az ion, a két részecske között kialakuló polarizációs kölcsönhatás (lásd később) következtében szóródik. A folyamat során lehetőség van arra is, hogy az ütköző ion átvegyen egy elektront a semleges atomtól. Ez esetben, amennyiben ugyanazon gáz ionja és atomja ütközik, *szimmetrikus töltéscicserélő folyamatról* beszélünk, mely (az energiaviszonyokat tekintve) egy *rezonáns* folyamat és az ütköző partnerek összes kinetikus energiája változatlan marad. Így a szimmetrikus töltéscicserélő folyamat a rugalmas ütközés speciális esetének tekintendő, amely egy lassú iont és egy gyors atomot eredményez.

¹Az ultraibolya (UV) tartományba a 400 nm-nél rövidebb hullámhosszúságú sugárzás esik, a vákuumultraibolya-tartományba (VUV) pedig a 200 nm-nél rövidebb hullámhosszú sugárzás. Az utóbbi elnevezését az indokolja, hogy az ilyen sugárzás csak vákuumban tud terjedni, levegőben – az oxigén molekulák erős abszorpciója miatt – elnyelődik.

A rugalmatlan ion - atom ütközési folyamatok – az elektronütközéses folyamatokhoz hasonlóan – szintén vezethetnek gerjesztéshez és ionizációhoz:

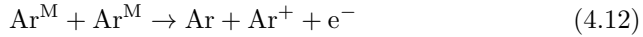


A szimmetrikus töltéscserélő ütközésekben keletkező gyors atomok az ionokhoz hasonlóan részt vehetnek további rugalmas ütközésekben, ezekben további gyors (a termikus energiánál sokkal nagyobb energiájú) atomokat létrehozva, illetve az ionokhoz hasonlóan gerjeszthetők és ionizálhatók is a háttérgáz atomjait:



Itt az „f” index a gyors atomok megkülönböztetésére szolgál, míg az „(f)” jelölés azt fejezi ki, hogy az ütközés után a gyors atomok energiájuk nagy részét elveszíthetik (azaz nem feltétlenül maradnak gyors atomok az ütközés után).

További, említést érdemlő folyamatok a metastabil atomok egymással való ütközéseinek során fellépő ionizáció:



és az atomi ionok konverziója molekuláris ionokká:



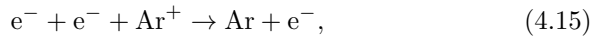
ami főleg magasabb nyomások esetén válik jelentőssé.

A töltött részecskék megjelenéséért felelős ionizációs folyamatokkal a *felületeken történő veszteségek* és a *térfogati veszteségeket okozó rekombinációs folyamatok* tartanak egyensúlyt. Az utóbbiak alapvető típusai:

– *sugárzásos rekombináció*



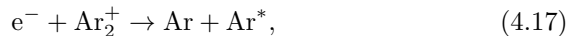
– *elektron által segített háromtest-rekombináció*



– *semleges atom által segített háromtest-rekombináció*



– illetve a nagyobb nyomásoknál jelentőssé váló *disszociatív rekombináció*

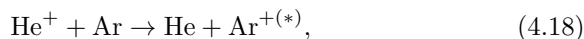


melynek során a molekuláris ion disszociál és egy gerjesztett szinten lévő atom keletkezik.

A folyamatok során a rendszer összenergiájának és impulzusának megmaradása könnyebben biztosítható egy harmadik test „bevonásával”, ezért a háromtest-rekombinációs folyamatok sebessége általában meghaladja a sugárzásos rekombinációt.

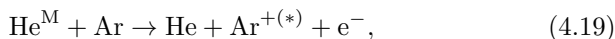
Több gáz keverékében létrehozott plazmákban számos további folyamat kap-
hat szerepet, ezek közül néhány fontosabb:

- *aszimmetrikus töltéscserélő* folyamat:



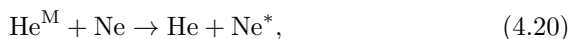
mely jó hatásokkal akkor mehet végbe, ha az ütköző részecske ionizációs energiája magasabb a „céltárgy” atom ionizációs energiájánál. Az ütközés eredményeként az ion gyakran olyan energiájú gerjesztett szintre kerül, ami közel áll a két gázatom ionizációs potenciálja közötti különbséghez. Megjegyezzük, hogy a folyamat akkor is végbemehet, ha a „lövedék” ion potenciális energiája valamivel kisebb a céltárgy atom ionizációs potenciáljánál – az energiakülönbséget a „lövedék” ion kinetikus energiája pótolhatja (endoterm folyamat).

- *Penning-ionizáció*:



melynek során egy magas energiájú metastabil szinttel rendelkező atom egy alacsonyabb ionizációs potenciálú atommal ütközve azt ionizálja (illetve esetleg egyidejűleg gerjeszti is).

- *közel rezonáns energiaátadó ütközés*:

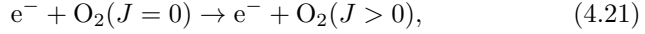


amiben valamely gerjesztett atom egy más típusú atomnak adja át potenciális energiáját. A folyamat olyan esetekben megy végbe, ahol a két atom megfelelő gerjesztett szintjeinek energiája közel egyenlő.

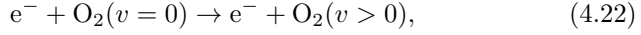
Az utóbb felsorolt rezonáns és közel rezonáns folyamatok lehetőséget adnak arra, hogy a plazmában az atomok egyes gerjesztett szintjei *szelektíven populálódjanak*, ezzel megteremtve pl. a lézerműködés feltételeit. A szelektív gerjesztés az egyes nívók termodinamikai egyensúlyra jellemző betöltöttségét (lásd 1. fejezet) megfordíthatja („*populációinverziót*” eredményezhet) és dominánssá teheti az indukált emisszió (10.2.2. fejezet) folyamatát. Az elsőként felfedezett gázlézer, a He-Ne lézer gerjesztési mechanizmusát pl. a 4.20. folyamat biztosítja.

Molekuláris gázok esetében az elektronállapotok megváltozásához vezető ütközések mellett a sokkal kisebb energiaküszöbű *forgási* (rotációs) és *rezgési* (vibrációs) gerjesztések is szerepet kapnak. Emellett, főleg azokban a gázokban, melyekben *negatív ionok* is keletkezhetnek, számos további elemi folyamat léphet fel. Ezek közül, oxigén gáz esetét példaként véve, a fontosabbak:

- *rotációs* szint gerjesztése (a J rotációs kvantumszám változása), pl.:



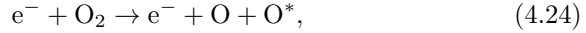
- *vibrációs* szint gerjesztése (a v vibrációs kvantumszám változása), pl.:



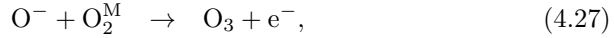
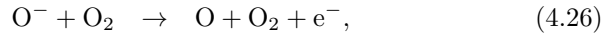
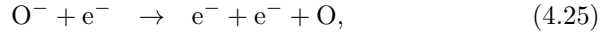
- *negatív ion keletkezése disszociációval*:



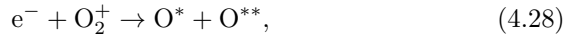
- *disszociatív gerjesztés*:



- elektron „*lehasítása*” negatív ionról (elektronokkal, semleges és metastabil molekulákkal való ütközésekben):



- *disszociatív rekombináció* (mely gerjesztett atomokat eredményez):



- *ion - ion rekombináció*:



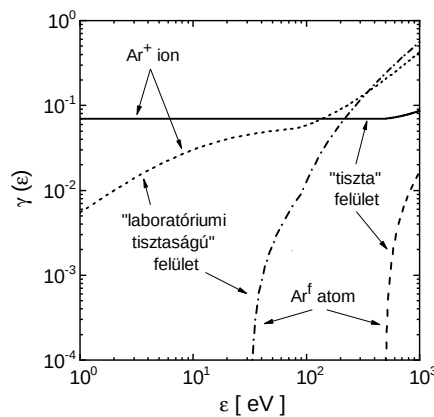
Többatomos molekulák esetében számos további folyamat (pl. fragmentáció) kaphat lényeges szerepet.

A gázkisülési plazmamodellek felépítésének kulcskérdése, hogy az előbbieken tárgyalt (ill. további, eddig nem említett) elemi ütközési folyamatok közül melyeket kell figyelembe venni. A „fontos” folyamatok száma néhánytól (pl. kis áramú nemesgázkisülések) akár a százaz nagyságrendig (pl. reaktív gázok keverékében létrehozott gázkisülések) terjedhet. A könyv terjedelmi korlátai miatt nem áll módunkban részletezni a fenti folyamatok fizikáját, amellyel a kvantummechanika foglalkozik. Ez alól kivétel csupán a 10.2. fejezet, ahol rövid áttekintést adunk az atomok és molekulák energiaszintjeiről, illetve az ezek közötti átmenetekről, valamint a 4.4. fejezet, ahol pedig a legegyszerűbb ütközések kvantummechanikai leírását tárgyaljuk. További részleteket talál az Olvasó [5, 37] könyvek megfelelő fejezeteiben és a [38] tankönyvben.

4.1.2. Felületi folyamatok

Az „aktív” részecskék (ionok, elektronok, gerjesztett állapotú atomok / molekulák) a plazmát határoló falakkal is kapcsolatba lépnek, alacsony gáznyomás mellett – ahol a (térfogati) rekombinációs folyamatok sebessége kicsi – a „plazma szempontjából” a töltött részecskékre nézve a fallal való kölcsönhatás a domináns veszteségi mechanizmus. Ez a kölcsönhatás viszont egyben forrása is lehet új töltött és semleges részecskéknak, amelyek egyes plazmaforrásokban elengedhetetlenek a plazma fenntartásához. A „felület szemszögéből” nézve a fenti kölcsönhatások jelentik az alapját a felületmódosítási eljárásoknak (pl. [4, 5], ill. 12. fejezet).

A plazma fenntartása szempontjából természetesen a töltött részecskék „mérlegét” meghatározó elemi folyamatok az elsődleges fontosságúak. A plazmát határoló felületeken az ionok becsapódása elektron kibocsátást eredményezhet; ez a mechanizmus, mint később látni fogjuk, alapvető fontosságú a hidegkatódos egyenfeszültségű gázkisülések működésében. Alacsony energiák mellett az Auger-folyamatokon [39] keresztül történő ionindukált elektron kibocsátás hatékonysága a felületre jellemző kilépési munka mellett elsősorban az ionizációs potenciáltól függ. Nagyobb ionenergiákon, néhány száz eV fölött az ionok kinetikus energiája egyre nagyobb szerepet kap. A kis energiájú tartományban a nagy potenciális energiájú metastabil atomok az ionokéhoz hasonló hatékonysággal váltanak ki elektronokat a felületekből, míg a nagy energiájú tartományban a gyors semleges atomok az ionokhoz hasonlóan viselkednek. Elektronkiváltáshoz vezethet még a plazma ultraibolya / vákuum-ultraibolya sugárzása is (fotoeffektus). Fontos megjegyezni, hogy az elektronkiváltási folyamatok hatásfoka érzékenyen függ a felület anyagától (fém, illetve dielektrikum) és jellemzőitől, mint például oxidréteg, szennyeződések, esetleg adszorbeált gáztartalom jelenlététől.



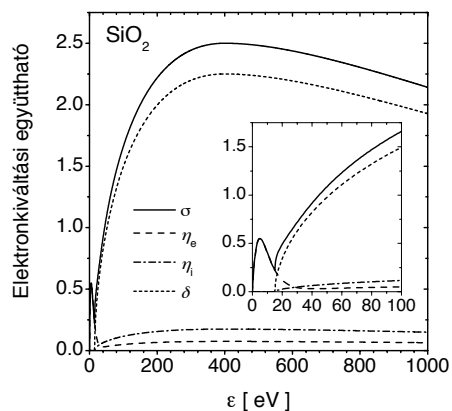
4.2. ábra. Argon ionok és gyors atomok által indukált elektronkiváltási együtt-hatói, különböző tulajdonságú felületekre. (Az adatok forrása:[40].)

A 4.2. ábra (példaként) az argon ionokra és a gyors argon atomokra (Ar^f) jellemző elektronkiváltási együtthatót (γ) szemlélteti, különböző tulajdonságú fémfelületekre. „Tiszta” felület alatt ([40] alapján) az ultranagy vákuumban végzett felületfizikai mérésekre jellemző, atomi tisztaságú felületet értjük. Ez nyilvánvalóan különbözik a tipikus gázkisülés-fizikai kísérletekben, ill. alkalmazott plazmaforrásokban található elektródafelületektől – ezek esetében ugyanis pl. egy adott fajtájú gáz, vagy gázkeverék, valamint az ezekben megtalálható szennyező anyagok² mindig jelen vannak a plazmaforrásban, továbbá reaktív gázok esetén számolni kell a felületi rétegeképződéssel. Ilyen körülmények között az elektródák felületére a „laboratóriumi tisztaságú” jelzöt használjuk. A 4.2. ábrán jól megfigyelhető, hogy „tisza” felület esetében az Ar^+ ionok elektronkiváltási együtthatója kis energiák mellett állandó, a potenciális energiától függő elektronkiváltási mechanizmusra jellemzően. Az energia növelésével szerepet kapnak a kinetikus energiától függő mechanizmusok – ekkor γ növekszik az ionok energiájával. Gyors atomok esetében természetesen csak az utóbbi mechanizmus játszik szerepet, ebben viszont az ionok és a gyors atomok hasonló hatékonysággal váltanak ki elektronokat a felületből. „Laboratóriumi tisztaságú” felületek esetén az Ar^+ ionok elektronkiváltási együtthatója a kis energiák tartományában is energiafüggő és értéke lényegesen kisebb, mint a „tisza” felületre jellemző érték. A gyors atomok által okozott elektronkiváltás „laboratóriumi tisztaságú” felületek esetében jelentősebb a „tisza” felületekhez képest.

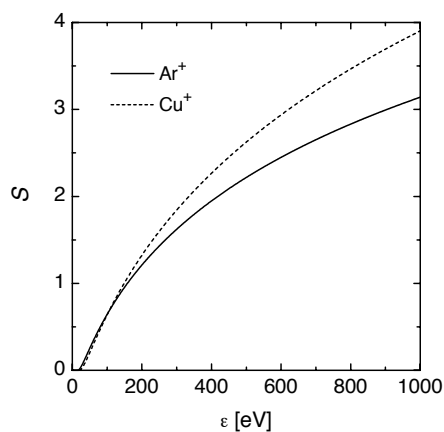
A határoló felületekre érkező elektronok elnyelődhetnek, visszaverődhetnek, valamint másodlagos elektronok kiváltását is eredményezhetik. A 4.3. ábra az elektron - elektróda kölcsönhatásra jellemző mennyiségeket mutatja, SiO_2 felület esetére [41]. Az ábrán megkülönböztetjük a rugalmas visszaszórásra (η_e), a rugalmatlan visszaszórásra (η_i) és a valódi másodlagos elektronok kiváltására jellemző (δ) együtthatókat. A három folyamat összességét a σ együttható jellemzi, ami megadja az egy elektron *beesése* következtében a felületet *elhagyó* elektronok számát. Megfigyelhető, hogy kis energiák tartományában a rugalmas elektron-visszaszórás, majd nagyobb energiáknál a valódi másodlagos elektronok kilépése dominál. Ennek értéke azt mutatja, hogy egy néhány száz eV energiával rendelkező elektron akár számos „új” elektront is kiválthat a felületből. Ezek elsősorban időben változó elektromos tér esetén tudják jelentősen befolyásolni a plazma jellemzőit, pl. rádiófrekvenciás gerjesztésű plazmákban (ld. 9. fejezet), alacsony nyomás esetén [41].

A falra érkező nagy energiájú „nehéz” részecskék (ionok és atomok) elektronok kiváltása mellett a felületből atomokat is „kiűthetnek” – ezzel a felületet *porlaszthatják*. A porlasztás hatékonysága erősen függ az ionok energiájától. A 4.4. ábra – [42] alapján – réz felületre szemlélteti az egy ion által kiváltott atomok számát, Ar^+ és Cu^+ bombázó ionok esetére. A porlasztás határfoka egy néhányszor tíz eV-os küszöb felett meredeken nő az ionok energiájával, több száz eV energia mellett egy becsapódó ion több atomot is eltávolíthat a felületről. Amennyiben a plazmában az elektródaporlasztás miatt jelentős fémgőzkoncentráció épül fel, a viszonylag alacsony ionizációs potenciálú fémek könnyen

²A laboratóriumi kísérletekben használt gázok általában 99.99%–99.9999% tisztaságúak, ezekben minden 10^4 – 10^6 atomra / molekulára 1 szennyező atom / molekula jut.



4.3. ábra. Az elektron – felület kölcsönhatásra jellemző együtthatók SiO_2 felületre. η_e , η_i és δ rendre a rugalmas visszaszórást, a rugalmatlan visszaszórást és a valódi másodlagos elektronok kiváltását jellemzi, σ a három együttható összege [41]. (Az IOP Publishing, Ltd., Copyright Clearance Center, Inc. engedélyével reprodukálva az alábbi cikkből: B. Horváth, J. Schulze, Z. Donkó, A. Derzsi: The effect of electron induced secondary electrons on the characteristics of low-pressure capacitively coupled radio frequency plasmas. Journal of Physics. D, Applied Physics. 51, 355204 (2018), <https://doi.org/10.1088/1361-6463/aad47b>.)



4.4. ábra. Ar^+ és Cu^+ ionok porlasztási együtthatója (azaz egy becsapódó ion által kiváltott felületi atomok átlagos száma) Cu felületen, az ionok energiájának függvényében [42].

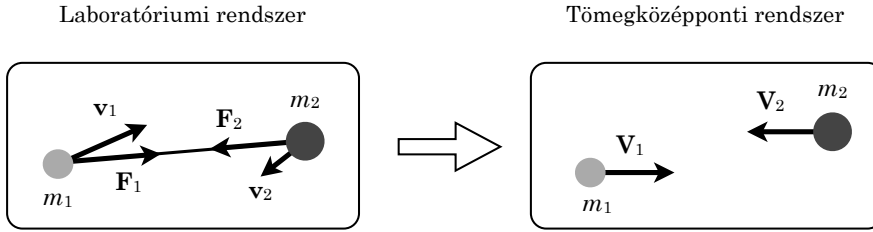
ionizálódhatnak és a gázionok mellett részt vehetnek a porlasztási folyamatban. Amikor szerepük meghatározóvá válik, „önporlasztásról” beszélünk. Az ionok

energiájától függő „fizikai porlasztás” mellett reaktív részecskék a felület „kémiai porlasztását” is okozhatják (a felületet alkotó atomokkal / molekulákkal kémiai kötések kialakítva).

A felületi folyamatok mélyebb megértéséhez a szilárdtestfizika és a felületfizika elméleti módszerei segítenek hozzá, ezekkel itt azonban nem áll módunkban foglalkozni. Megjegyezzük viszont, hogy az elméleti módszerek alkalmazását tovább nehezíti az, hogy egy plazmaforrásban a szilárdtest elektróda, vagy határoló felület nem vákuummal van „kapcsolatban”, hanem egy gázzal, vagy gázkeverékkel kerül érintkezésbe [43]. A fejezetben röviden bemutatott, elsősorban szilárdtestfizikai folyamatok alapjainak mélyebb megértéséhez ajánlani tudjuk [5] megfelelő fejezeteit.

4.2. Bináris ütközések kinematikája

A következőkben célunk a gázfázisú elemi folyamatokhoz releváns kétrészecskés ütközések kinematikájának áttekintése, a szórási folyamat leírása. Két részecske „találkozása” általában a háromdimenziós térben zajlik le. A *laboratóriumi (LAB) koordináta-rendszerből* a *tömegközépponti (TK) koordináta-rendszerbe* áttérve a folyamatot egy kétdimenziós (azaz síkbeli) problémává redukálhatjuk. Az energia- és impulzusmegmaradási tételeket alkalmazva a folyamat leírása tovább egyszerűsödik és egy részecskének egy szórócentrummal való kölcsönhatásával válik ekvivalenssé.



4.5. ábra. Két részecske mozgása a laboratóriumi (LAB) és tömegközépponti (TK) koordináta-rendszerekben.

Legyen a két részecske tömege m_1 és m_2 , koordinátái $\mathbf{r}_1$ és $\mathbf{r}_2$, valamint sebességvektorai $\mathbf{v}_1$ és $\mathbf{v}_2$. A tömegközéppont helykoordinátája és sebessége:

$$\mathbf{r}_{\text{tk}} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{w} = \frac{m_1 \mathbf{v}_1 + m_2 \mathbf{v}_2}{m_1 + m_2}, \quad (4.30)$$

valamint a két részecske relatív pozíciója és *relatív sebessége*:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{g} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2. \quad (4.31)$$

A tömegközépponti rendszerben mért helykoordináták:

$$\mathbf{R}_1 = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{\text{tk}}, \quad \mathbf{R}_2 = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_{\text{tk}}, \quad (4.32)$$

illetve sebességek:

$$\begin{aligned}\mathbf{V}_1 &= \mathbf{v}_1 - \mathbf{w} = \frac{m_2}{m_1 + m_2}(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2), \\ \mathbf{V}_2 &= \mathbf{v}_2 - \mathbf{w} = \frac{m_1}{m_1 + m_2}(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1).\end{aligned}\quad (4.33)$$

A fentiekből két fontos következtetést vonhatunk le:

- mivel a vizsgált esetben a két részecskére ható erő egyenlő nagyságú és ellentétes irányú, így $\ddot{\mathbf{r}}_{\text{tk}} = 0$, azaz *a tömegközéppont egyenes vonalú egyenletes mozgást végez*,
- a tömegközépponti rendszerben mért sebességek párhuzamosak és ellentétes irányúak.

Az $\mathbf{F}_1 = m_1\ddot{\mathbf{r}}_1$ és $\mathbf{F}_2 = m_2\ddot{\mathbf{r}}_2 = -\mathbf{F}_1$ összefüggések segítségével felírhatjuk a mozgásegyenletet a relatív pozícióra:

$$\mathbf{F}_1 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}(\ddot{\mathbf{r}}_1 - \ddot{\mathbf{r}}_2) = \mu \ddot{\mathbf{r}}, \quad (4.34)$$

ahol μ a *redukált tömeg*. Fontos további következtetéshez jutunk, ha kiszámítjuk $(d/dt)(\mathbf{r} \times \mathbf{g}) = \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{g}} = \mathbf{r} \times \ddot{\mathbf{r}}$ értékét. A 4.34. összefüggésből $\mathbf{r} \times \mathbf{F}_1 = \mu \mathbf{r} \times \ddot{\mathbf{r}}$. Mivel $\mathbf{r} \parallel \mathbf{F}_1$, ezért $\mathbf{r} \times \ddot{\mathbf{r}} = 0$, így $(d/dt)(\mathbf{r} \times \mathbf{g}) = 0$, vagyis $\mathbf{r} \times \mathbf{g} = \text{állandó}$. Ez utóbbi azt fejezi ki, hogy *az ütközés a tömegközépponti rendszerben egy síkban játszódik le*, azaz a szórási problémát így 2 dimenzióban kezelhetjük, a 4.6. ábra szerint.³ Az ábrán α az $\mathbf{r}$ vektor és az x tengely által bezárt szög, α^* ennek értéke a két részecske minimális távolságánál, b az *ütközési paraméter*, $\mathbf{V}'_1$ és $\mathbf{V}'_2$ az ütközés utáni sebességek. χ a tömegközépponti rendszerben mért szórási szög.⁴

A tömegközépponti rendszerben a kinetikus energia és az impulzusmomentum értéke:⁵

$$E_{\text{tk}} = \frac{1}{2}\mu(\dot{r}^2 + r^2\dot{\alpha}^2) \quad , \quad J_{\text{tk}} = \mu r^2 \dot{\alpha}. \quad (4.35)$$

³Ez nem más, mint a klasszikus bolygómozgás leírásából ismeretes *kéttest-probléma* [21].

⁴A szórási szög esetében nem tüntetjük fel, hogy ez a tömegközépponti rendszerben mért szög, amennyiben a laboratóriumi rendszert tekintjük, akkor a χ_{lab} jelölést használjuk.

⁵Ezek származtatásának alapja:

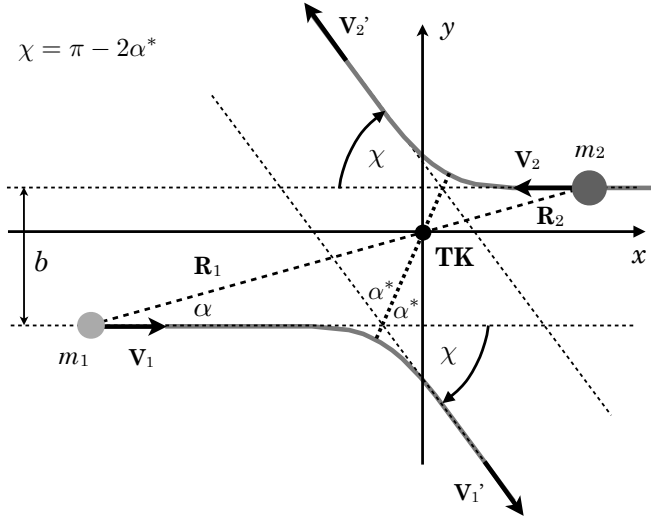
$$E_{\text{tk}} = \frac{1}{2}m_1|\mathbf{V}_1|^2 + \frac{1}{2}m_2|\mathbf{V}_2|^2 = \frac{1}{2}m_1(\dot{X}_1^2 + \dot{Y}_1^2) + \frac{1}{2}m_2(\dot{X}_2^2 + \dot{Y}_2^2) = \frac{1}{2}\mu(\dot{r}^2 + r^2\dot{\alpha}^2)$$

és

$$J_{\text{tk}} = \left| m_1 \mathbf{R}_1 \times \mathbf{V}_1 + m_2 \mathbf{R}_2 \times \mathbf{V}_2 \right| = m_1(X_1\dot{Y}_1 - \dot{X}_1Y_1) + m_2(X_2\dot{Y}_2 - \dot{X}_2Y_2) = \mu r^2 \dot{\alpha},$$

ahol

$$\begin{aligned}\mathbf{R}_1 &= \begin{pmatrix} X_1 \\ Y_1 \end{pmatrix} & \mathbf{R}_2 &= \begin{pmatrix} X_2 \\ Y_2 \end{pmatrix} \\ X_1 &= -\frac{m_2}{m_1 + m_2}r \cos \alpha & Y_1 &= -\frac{m_2}{m_1 + m_2}r \sin \alpha \\ X_2 &= \frac{m_1}{m_1 + m_2}r \cos \alpha & Y_2 &= \frac{m_1}{m_1 + m_2}r \sin \alpha.\end{aligned}$$



4.6. ábra. Két részecske ütközése a tömegközépponti koordináta-rendszerben.

A megmaradási törvényeket kihasználva a vizsgált jelenséget *egyrészecske-szórási problémaként* kezelhetjük (4.7. ábra). A szórócentrumtól távol a potenciális energia elhanyagolható, $U(r \rightarrow \infty) = 0$, így a kinetikus energia értéke $E_0 = \mu g_0^2/2$. A (megmaradó) teljes energia a folyamat során:

$$\frac{1}{2}\mu g_0^2 = \frac{1}{2}\mu(\dot{r}^2 + r^2\dot{\alpha}^2) + U(r). \quad (4.36)$$

A (szintén) megmaradó impulzusmomentum:

$$J_{\text{tk}} = \mu g_0 b = \mu r^2 \dot{\alpha}. \quad (4.37)$$

Az utóbbi egyenletből $\dot{\alpha}$ értékét az energiára vonatkozó egyenletbe helyettesítve:

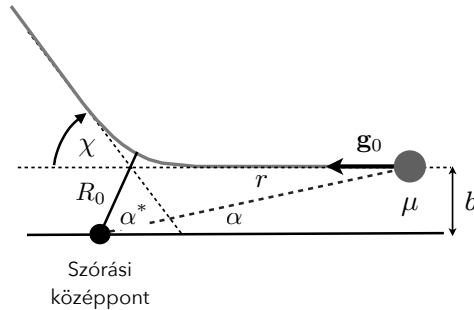
$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 + \frac{1}{2}\mu r^2 \frac{g_0^2 b^2}{r^4} + U(r) = \frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 + \frac{\mu g_0^2 b^2}{2r^2} + U(r) \\ &= \frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 + E_0 \frac{b^2}{r^2} + U(r), \end{aligned} \quad (4.38)$$

amiből a centrumtól való távolságra (r) vonatkozó differenciálegyenlet:

$$\frac{dr}{dt} = \pm \left\{ \frac{2}{\mu} \left[E_0 \left(1 - \frac{b^2}{r^2} \right) - U(r) \right] \right\}^{1/2}. \quad (4.39)$$

Ebből $(dr/dt)|_{r=R_0} = 0$ szerint meghatározhatjuk a legkisebb (R_0) távolságot az

$$1 - \frac{U(R_0)}{E_0} - \frac{b^2}{R_0^2} = 0 \quad (4.40)$$



4.7. ábra. Két részecske ütközésével ekvivalens egyrészecske-szórási probléma a tömegközépponti koordináta-rendszerben.

egyenlet megoldásával.

A szórási szög kiszámításához felhasználjuk, hogy $\chi = \pi - 2\alpha^*$ (ld. a 4.6. ábra), ahol

$$\alpha^* = \int_{R_0}^{\infty} \frac{d\alpha}{dr} dr = \int_{R_0}^{\infty} \frac{(b/r^2)dr}{\sqrt{1 - \frac{U(r)}{E_0} - \frac{b^2}{r^2}}}, \quad (4.41)$$

ugyanis a 4.37. egyenletből $\dot{\alpha} = g_0 b / r^2$ és

$$\begin{aligned} \frac{dr}{d\alpha} &= \pm \frac{r^2}{g_0 b} \left\{ \frac{2}{\mu} \left[E_0 \left(1 - \frac{b^2}{r^2} \right) - U(r) \right] \right\}^{1/2} \\ &= \pm \frac{r^2}{b} \left\{ \frac{2}{\mu g_0^2} \left[E_0 \left(1 - \frac{b^2}{r^2} \right) - U(r) \right] \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Végül a szórási szög a potenciál és a kezdeti paraméterek (az E_0 kinetikus energia és a b ütközési paraméter) függvényében:

$$\chi = \pi - 2\alpha^* = \pi - 2b \int_{R_0}^{\infty} \frac{dr/r^2}{\sqrt{1 - \frac{U(r)}{E_0} - \frac{b^2}{r^2}}}. \quad (4.43)$$

4.2.1. Impulzus- és energiaviszonyok bináris ütközésekben

A következőkben néhány, a bináris ütközésekre vonatkozó általános érvényű összefüggést származtatunk, majd ezek alapján részletesebben tárgyaljuk a gáz-kisülések legfontosabb (elektron - atom és ion - atom) ütközési folyamatainak modellezését.

Kiindulási egyenleteink (a 4.2. fejezet szerinti jelölésekkel):

$$\mathbf{w} = \frac{m_1 \mathbf{v}_1 + m_2 \mathbf{v}_2}{m_1 + m_2} \quad \mathbf{w}' = \frac{m_1 \mathbf{v}'_1 + m_2 \mathbf{v}'_2}{m_1 + m_2} \quad (4.44)$$

$$\mathbf{g} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2 \quad \mathbf{g}' = \mathbf{v}'_1 - \mathbf{v}'_2 \quad (4.45)$$

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{w} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{g} \quad \mathbf{v}'_1 = \mathbf{w}' + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{g}' \quad (4.46)$$

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{w} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{g} \quad \mathbf{v}'_2 = \mathbf{w}' - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{g}' \quad (4.47)$$

Az *impulzusmegmaradás* értelmében:

$$m_1 \mathbf{v}_1 + m_2 \mathbf{v}_2 = m_1 \mathbf{v}'_1 + m_2 \mathbf{v}'_2, \quad (4.48)$$

amiből a 4.44. egyenletek alapján

$$\mathbf{w}' = \mathbf{w} \quad (4.49)$$

következik, azaz azt a fontos, általános megállapítást kapjuk, hogy a *tömegközéppont sebessége az ütközés során nem változik*.

Rugalmas ütközéseknél az *energiamegmaradás* értelmében:

$$m_1 v_1^2 + m_2 v_2^2 = m_1 v_1'^2 + m_2 v_2'^2, \quad (4.50)$$

ami a 4.46. és a 4.47. egyenletek alapján arra vezet, hogy az *ütközés során a relatív sebesség nagysága nem változik*, azaz:

$$g' = g, \quad (4.51)$$

vagyis a szórási folyamat csak a $\mathbf{g}$ sebességvektor irányát változtatja meg.

A rugalmas ütközésekben a két részecske közötti energiaátadás mértéke erősen függ azok tömegarányától. Ezt egy olyan példa segítségével mutatjuk meg, amelyben egy m_1 tömegű, $\mathbf{v}_1$ sebességű részecske ütközik egy m_2 tömegű, álló részecskével.⁶ $\mathbf{v}_1$ iránya egyezzen meg az x tengely irányával! Követezésképpen:

$$\mathbf{w} = \frac{m_1 \mathbf{v}_1}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{g} = \mathbf{v}_1. \quad (4.52)$$

Az ütközés során, mint láttuk, $\mathbf{w}' = \mathbf{w}$ és a szórás a relatív sebességvektor $\mathbf{g} \rightarrow \mathbf{g}'$ elforgatását jelenti. A tömegközépponti rendszerben legyen a szórás szöge χ , ekkor:

$$\mathbf{g}' = \begin{pmatrix} \cos \chi & -\sin \chi \\ \sin \chi & \cos \chi \end{pmatrix} \mathbf{g} = \begin{pmatrix} \cos \chi & -\sin \chi \\ \sin \chi & \cos \chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ 0 \end{pmatrix} = v_1 \begin{pmatrix} \cos \chi \\ \sin \chi \end{pmatrix}. \quad (4.53)$$

⁶Mozgó céltárgy részecske esetén az itt származtatott eredmények módosulnak, ezért fontos megjegyezni, hogy a következtetések csak álló céltárgy esetére helytállóak [37]!

Az ütköző részecske sebességvektora a szóródás után 4.46. alapján:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}'_1 &= \mathbf{w}' + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{g}' = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{v}_1 + \frac{m_2}{m_1 + m_2} v_1 \begin{pmatrix} \cos \chi \\ \sin \chi \end{pmatrix} \\ &= v_1 \begin{pmatrix} \frac{m_1 + m_2 \cos \chi}{m_1 + m_2} \\ \frac{m_2 \sin \chi}{m_1 + m_2} \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (4.54)$$

Ugyanez a sebességvektor a laboratóriumi rendszerben χ_{lab} szöggel való eltérülés után:

$$\mathbf{v}'_1 = v'_1 \begin{pmatrix} \cos \chi_{\text{lab}} \\ \sin \chi_{\text{lab}} \end{pmatrix}.\quad (4.55)$$

A két utóbbi összefüggés megköveteli, hogy $\tan \chi_{\text{lab}} = m_2 \sin \chi / (m_1 + m_2 \cos \chi)$ teljesüljön. Ebből a *laboratóriumi és a tömegközépponti rendszerben mért szórási szögek közötti kapcsolatra*

$$\cos \chi_{\text{lab}} = \frac{\frac{m_1}{m_2} + \cos \chi}{\sqrt{1 + \frac{m_1^2}{m_2^2} + 2 \frac{m_1}{m_2} \cos \chi}}\quad (4.56)$$

adódik. A kezdetben álló 2. részecske sebessége az ütközés után (4.47. alapján):

$$\mathbf{v}'_2 = v_1 \frac{m_1}{m_1 + m_2} \begin{pmatrix} 1 - \cos \chi \\ -\sin \chi \end{pmatrix}.\quad (4.57)$$

Ebből kiszámítható a 2. részecske energiája, ami megegyezik az 1. részecske energiavesztésével:

$$\begin{aligned}\Delta \varepsilon_1 &= -\frac{1}{2} m_2 v_2'^2 = -\frac{1}{2} m_1 v_1^2 \frac{2m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} (1 - \cos \chi) \\ &= -\varepsilon_1 \frac{2m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} (1 - \cos \chi),\end{aligned}\quad (4.58)$$

ahol ε_1 az 1. részecske kezdeti kinetikus energiája. Ugyanezen részecske energiájának relatív megváltozása az ütközés következtében:

$$\frac{\Delta \varepsilon_1}{\varepsilon_1} = -\frac{2m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} (1 - \cos \chi).\quad (4.59)$$

Rugalmatlan ütközéseknél az energiamegmaradásnál a folyamatban bekövetkező, a „cél tárgy” belső (potenciális) energiájának megváltoztatására fordítandó $\Delta \varepsilon^*$ energiát is figyelembe kell venni, vagyis:

$$m_1 v_1^2 + m_2 v_2^2 = m_1 v_1'^2 + m_2 v_2'^2 + \Delta \varepsilon^*.\quad (4.60)$$

A kezdeti energia az alábbi alakba is írható:

$$\frac{1}{2}m_1v_1^2 + \frac{1}{2}m_2v_2^2 = \frac{m_1 + m_2}{2}w^2 + \frac{1}{2}\frac{m_1m_2}{m_1 + m_2}g^2 = \frac{m_1 + m_2}{2}w^2 + \frac{\mu}{2}g^2. \quad (4.61)$$

Mivel a tömegközéppont sebességét az ütközés nem változtathatja meg, ezért a fenti egyenlet jobb oldalának első tagja állandó, a második tag adja meg azt az energiát, ami az ütközésben a potenciális energia megváltoztatására (gerjesztésre, vagy ionizációra) fordítható. Az utóbbit a tömegközépponti rendszerben mért energiának is nevezzük.

Az alábbiakban példaként két ütközési folyamatot vizsgálunk, az elsőben egy elektron, a másodikban egy Ar^+ ion ütközik egy Ar atommal.

- $e^- + \text{Ar}$ ütközések: mivel $m_1 \ll m_2$, ezért a tömegközéppont sebessége $\mathbf{w} \cong \mathbf{v}_2$, ahol $\mathbf{v}_2$ az atom (termikus) sebessége. Amennyiben az ütköző elektronok energiája jóval nagyobb, mint a gázatomok termikus energiája, egy további egyszerűsítéssel, a *hideg gáz* feltételezéssel ($v_2 = 0$) élhetünk. Ekkor jó közelítés $\mathbf{w} = 0$, továbbá $\mathbf{g} = \mathbf{v}_1$. Rugalmas ütközés esetében az ütközés után az elektron sebessége $\mathbf{v}'_1 = \mathbf{g}'$ (tehát egyszerűen az elektron sebességvektorát téríthetjük el a szórás jellemzőinek megfelelően). $m_1/m_2 \rightarrow 0$ mellett $\chi_{\text{lab}} \rightarrow \chi$, valamint a szórás során az elektron energiavesztése $\Delta\varepsilon_1/\varepsilon_1 \cong -2\frac{m_1}{m_2}(1 - \cos \chi_{\text{lab}})$ (a 4.59. összefüggés szerint), ami a tipikus elektron - atom tömegarányok mellett $\sim 10^{-5} \dots 10^{-3}$ nagyságrendű. Alacsony hőmérsékletű plazmákban az elektronok többségének energiája az atomok első gerjesztési szintje alá esik, ezért a rugalmas ütközések a leggyakoribbak és kis térerősségű térrészekben főleg a rugalmas ütközések felelősek az elektronok energiavesztéséért.

Rugalmatlan ütközés esetén az elektron sebessége csökken, $m_1v_1'^2/2 = m_1v_1^2/2 - \Delta\varepsilon^*$ szerint (ahol $\Delta\varepsilon^*$ a gerjesztési, vagy ionizációs energia). Mivel a 4.61. kifejezés jobb oldalán álló első tag nulla (ugyanis $\mathbf{w} = 0$), ezért az ütköző elektron teljes kinetikus energiája „felhasználható” a folyamatban gerjesztésre, vagy ionizációra.

- $\text{Ar}^+ + \text{Ar}$ ütközések: itt a két részecske tömege egyenlőnek vehető ($m_1 \cong m_2$), ezért a tömegközéppont sebessége $\mathbf{w} = (\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2)/2$, ahol $\mathbf{v}_2$ az atom (termikus) sebessége. Rugalmas ütközés esetében az ütközés után a relatív sebesség iránya módosul, $\mathbf{g} \rightarrow \mathbf{g}'$ és az ion ütközés utáni sebessége: $\mathbf{v}'_1 = \mathbf{w} + \mathbf{g}'/2$. Az ütköző partnerek egyenlő tömege következtében a laboratóriumi és tömegközépponti rendszerben mért szórási szögek közötti kapcsolat (4.56. alapján): $\chi_{\text{lab}} = \chi/2$. Az elektron - atom ütközésekkel ellentétben az ion - atom rugalmas ütközésekre nagyfokú energiacsere jellemző, 4.59. szerint: $\Delta\varepsilon_1/\varepsilon_1 = -\frac{1}{2}(1 - \cos \chi)$. „Hátraszórás”, azaz $\chi = \pi$ esetén $\Delta\varepsilon = -\varepsilon_1$, vagyis a bejövő részecske a teljes energiáját át tudja adni egy álló részecskének (hasonlóan, mint két biliárdgolyó centrális ütközésekor).

Rugalmatlan ütközés esetén (ismét hideg gázt, vagyis álló „céltárgyat” feltételezve: $v_2 = 0$) a 4.61. kifejezés jobb oldalán álló tagok egyenlőek:

$(m_1 + m_2)w^2/2 = \mu g^2/2 = m_1 v_1^2/4$. Ebből következően az ütköző ion kinetikus energiájának csak a *fele* használható fel az ütközésben gerjesztésre, vagy ionizációra (vagyis a 15.7 eV ionizációs potenciálú argon atomok ionizálásához legalább 31.4 eV kinetikus energiájú ionok szükségesek).

4.3. Hatáskeresztmetszetek

4.3.1. A teljes hatáskeresztmetszet

A részecskék mozgásának leírásához vizsgálnunk kell az egyes folyamatok bekövetkezésének gyakoriságát, vagy valószínűségét. A vákuumbeli (külső terek által meghatározott) mozgáshoz (a 2.1. fejezet) képest gázokban, ill. plazmákban a töltött részecskék mozgása összetettebb lesz, az ütközési folyamatok hatására. Az ütköző partnerek hosszú hatótávolságú kölcsönhatása esetén a részecskék trajektóriái folyamatosan változnak a kölcsönhatás miatt. Rövid hatótávolságú kölcsönhatás esetén ezzel szemben feltételezhetjük, hogy a részecskék külső terek által meghatározott trajektóriái az ütközések miatt pillanatszerűen módosulnak (vagyis a kölcsönhatás a mozgás időskálájához képest nagyon rövid idő alatt zajlik le).

Az ütközések valószínűségének kiszámításához vizsgáljuk egy u sebességű, $\Gamma = nu$ fluxusú részecskenyaláb áthaladását egy dx vastagságú gázrétegen, a 4.8. ábra szerint. Az n_0 sűrűséggel jelenlévő gázatomokat állónak tételezzük fel. Legyen jelen *valamilyen* folyamat, aminek következtében egyes részecskék „kiszóródtak” a nyalábból! Itt kiszóródás alatt érthetjük a trajektóriák jelentős (pl. a 90°-nál nagyobb) eltérülését, vagy valamilyen elemi folyamat (pl. gerjesztés) bekövetkezését. A nyaláb sűrűségének csökkenése arányos az n_0 gázszűrűséggel, a nyaláb n sűrűségével és a dx úttal:

$$dn = -\sigma n n_0 dx, \quad (4.62)$$

ahol a σ arányossági tényező definiálja az *ütközési hatáskeresztmetszetet*.

A nyaláb sűrűségéhez hasonló egyenlet írható fel annak fluxusára ($\Gamma = nu$) is:

$$d\Gamma = -\sigma \Gamma n_0 dx. \quad (4.63)$$

A nyaláb fluxusának megváltozását egy makroszkopikus x távolság megtétele után a

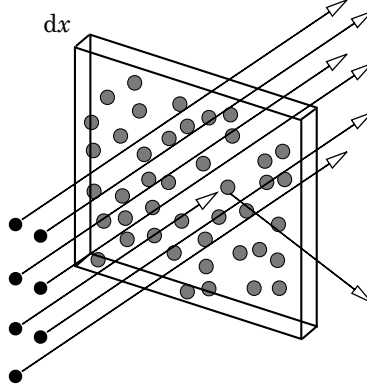
$$\frac{d\Gamma}{\Gamma} = -\sigma n_0 dx \quad (4.64)$$

egyenlet integrálásával kaphatjuk meg:

$$\Gamma(x) = \Gamma(0) \exp(-\sigma n_0 x). \quad (4.65)$$

A fluxus tehát exponenciálisan csökken, a

$$\lambda_0 = \frac{1}{n_0 \sigma} \quad (4.66)$$



4.8. ábra. Részecskenyaláb áthaladása keskeny, n_0 sűrűségű gázrétegen.

összefüggéssel definiált *szabad úthossz* skáláján. Ezen karakterisztikus „skálahossz” mellett fontos időbeli jellemző az ütközések közötti átlagos idő:

$$\tau = \frac{\lambda_0}{u}, \quad (4.67)$$

illetve ennek reciproka, az *ütközési frekvencia*,

$$\nu = \frac{1}{\tau} = n_0 \sigma u. \quad (4.68)$$

A folyamatok jellemzésének további fontos mennyisége a *folyamat sebességi állandója*

$$k = \sigma u. \quad (4.69)$$

Példaként tekintsük az ionizáció esetét, amit egy u sebességű, n_e sűrűségű elektronnal hoz létre. Az ionok sűrűségének

$$\frac{dn_+}{dt} = k n_e n_0 = \sigma u n_e n_0 \quad (4.70)$$

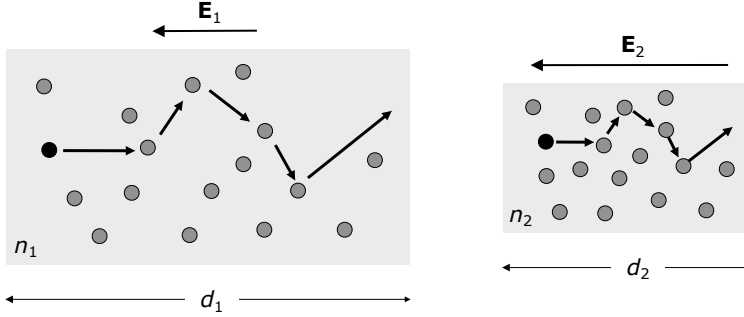
időbeli megváltozása arányos az n_e elektronsűrűséggel és a gázatomok n_0 sűrűségével, valamint az ionizációs folyamatra jellemző sebességi együtthatóval.

Különböző sebességű ütköző részecskéket és a folyamatok hatáskeresztmetszeteinek energiától, illetve sebességtől való függését figyelembe véve, a reakció sebességi állandójára általánosan az alábbi adódik:

$$k = \langle \sigma v \rangle = \frac{1}{n} \int \sigma(v) v f(v) dv = \frac{1}{n} \sqrt{\frac{2}{m}} \int \sigma(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (4.71)$$

ahol $f(v)$ és $f(\varepsilon)$ integrálja az n sűrűség. (lásd 2. fejezet).

Az ütközési szabad úthossz 4.66. összefüggés szerinti viselkedése egy fontos hasonlósági összefüggéshez vezet. Elektromos térben a mozgásuk során a (q



4.9. ábra. Két különböző gázsűrűséggel és térerősséggel jellemzett tartományban a részecskék mozgása *hasonló*, ha $E_1/n_1 = E_2/n_2$ és $n_1 d_1 = n_2 d_2$.

töltésű) részecskék két ütközés között

$$\Delta\varepsilon = \lambda_0 E q = \frac{1}{n_0 \sigma} E q = \left(\frac{E}{n_0} \right) \frac{1}{\sigma} q \quad (4.72)$$

energiát nyernek, ami – feltételezve, hogy a σ hatáskeresztmetszet állandó – láthatóan csak az E/n_0 aránytól függ. Ha a vizsgált tartomány mérete d , akkor az ütközések száma arányos lesz a

$$\frac{d}{\lambda_0} = (n_0 d) \sigma \quad (4.73)$$

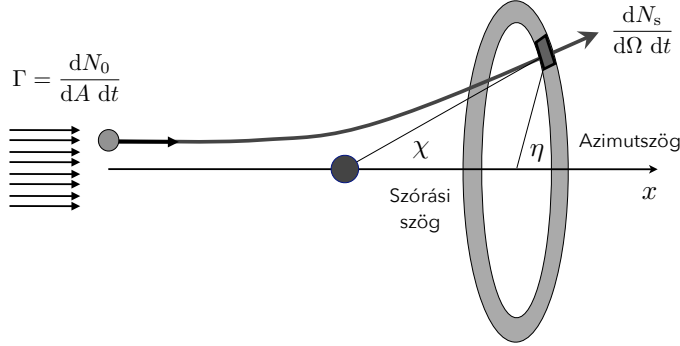
szorzattal, ami csak az $n_0 d$ értéktől függ, ha σ állandó. Tekintsünk két olyan rendszert, amiben a sűrűség és a térerősség különböző, de arányuk megegyezik, azaz $E_1/n_1 = E_2/n_2$, továbbá a tartományok méretére fennáll, hogy $n_1 d_1 = n_2 d_2$! A két rendszerben – a fentiek alapján – mind az ütközések között felvett energia (és így a részecskék átlagenergiája és energiaeloszlás-függvénye), mind a tartományokon való áthaladás során a részecskéknek a háttérgázzal való ütközéseinek a száma ugyanaz lesz, vagyis a részecskék mozgása a két rendszerben *hasonló*.

Fontossága miatt az E/n arányra a plazmafizikában külön elnevezést vezettek be, ami a *redukált elektromostér-erősség*, mértékegysége az 1 Td (Townsend) = 10^{-21} V m². Alacsony ionizációs fok mellett (vagyis amikor csak a vizsgált töltött részecskék és a háttérgáz részecskéi között mennek végbe ütközések) a részecskék mozgását jellemző transzportegyütthatók a redukált térerősség függvényei. Véges méretű tartományok vizsgálatakor hasonlóan fontos szerepet kap a nd skálaparaméter is.

4.3.2. A differenciális hatáskeresztmetszet

Az ütközési folyamatokban a „lövedék” részecskék a „cél tárgy” atomokkal való ütközések során valamilyen mértékben eltérülnek, a tömegviszonyoktól függően kisebb-nagyobb mértékű impulzus- és energiaátadást követően. Az eltérés

szögét is figyelembe vevő mennyiség a *differenciális hatáskeresztmetszet*. Ennek bevezetéséhez tekintsük a 4.10. ábrát!



4.10. ábra. A differenciális hatáskeresztmetszet értelmezése.

A szórócentrum környezetében a felületegységre időegység alatt beérkező részecskék száma, azaz a nyaláb fluxusa:

$$\Gamma = \frac{dN_0}{dA dt}, \quad (4.74)$$

a $d\Omega$ térszögbe szórt részecskék száma pedig:

$$\frac{dN_s}{d\Omega dt}. \quad (4.75)$$

A differenciális hatáskeresztmetszetet ezen két érték hányadosa definiálja:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\frac{dN_s}{d\Omega dt}}{\frac{dN_0}{dA dt}} = \frac{1}{\Gamma} \frac{dN_s}{d\Omega dt}. \quad (4.76)$$

Egy adott irányban elhelyezett detektor által észlelt részecskék

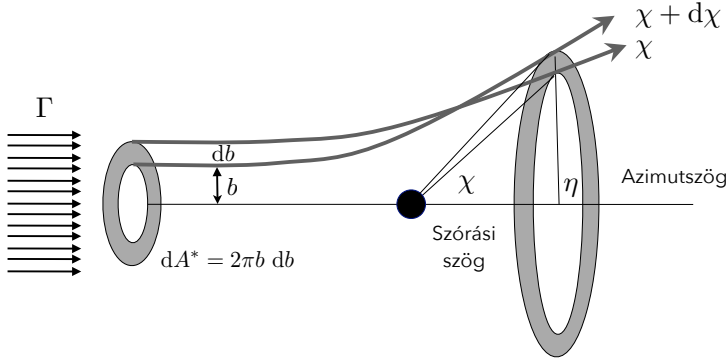
$$dN_s = \Gamma \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega dt \quad (4.77)$$

száma arányos a differenciális hatáskeresztmetszettel.

Megjegyezzük, hogy a számunkra fontos esetekben a differenciális hatáskeresztmetszet független az η azimuttszögtől, viszont nyilvánvalóan függ a nyalábot alkotó részecskék energiájától és természetesen függvénye a χ szórási szögnek is. A teljes hatáskeresztmetszetet megkapjuk, ha a differenciális hatáskeresztmet-

szetet a teljes térszögre integráljuk:

$$\begin{aligned}\sigma(\varepsilon) &= \int_{(\Omega)} \frac{d\sigma(\varepsilon, \chi)}{d\Omega} d\Omega = \int_0^{2\pi} d\eta \int_0^{\pi} \frac{d\sigma(\varepsilon, \chi)}{d\Omega} \sin \chi d\chi \\ &= 2\pi \int_0^{\pi} \frac{d\sigma(\varepsilon, \chi)}{d\Omega} \sin \chi d\chi.\end{aligned}\quad (4.78)$$



4.11. ábra. Az ütközési paraméter és a szórási szög kapcsolata.

A következőkben kapcsolatot keresünk a szórási szög, az ütközési paraméter és a differenciális hatáskeresztmetszet között. Ehhez a 4.11. ábra alapján tekintjük egy Γ fluxusú részecskenyaláb szóródását. A b és $b+db$ ütközési paraméterek között beérkező részecskék egy $dA^* = 2\pi b db$ felületű gyűrűn haladnak át (a szórócentrumtól nagy távolságban) és később, a kölcsönhatás következtében a χ és $\chi + d\chi$ szögtartományba szóródnak. Számuk dt idő alatt:

$$dN_s = \Gamma dA^* dt = \Gamma 2\pi b db dt. \quad (4.79)$$

A differenciális hatáskeresztmetszet definíciója alapján, adott $d\sigma/d\Omega$ mellett a $d\Omega$ térszögbe, dt idő alatt szóródó (ugyanezen) részecskék számát a 4.75. összefüggés adta meg, mely szerint:

$$dN_s = \Gamma \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega dt.$$

A fenti két összefüggés, valamint $d\Omega = 2\pi \sin \chi d\chi$ felhasználásával

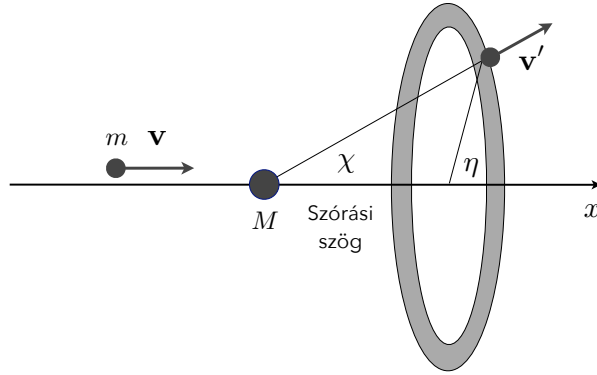
$$|2\pi b db| = \left| \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) 2\pi \sin \chi d\chi \right| \quad (4.80)$$

adódik, ami alapján megadható a differenciális hatáskeresztmetszet, mint a (tömegközépponti rendszerben mért) szórási szög és az ütközési paraméter függvé-

nye:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin \chi} \left| \frac{db(\chi)}{d\chi} \right|. \quad (4.81)$$

4.3.3. A momentum transzfer hatáskeresztmetszet



4.12. ábra. A momentum transzfer hatáskeresztmetszet bevezetéséhez.

A teljes és differenciális hatáskeresztmetszetek mellett fontos további mennyiség a *momentum transzfer hatáskeresztmetszet*, amely az ütközésben *átadott impulzussal* függ össze. Definíciója:

$$\sigma_m(\varepsilon) = \int_{(\Omega)} (1 - \cos \chi) \frac{d\sigma(\varepsilon, \chi)}{d\Omega} d\Omega = 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos \chi) \frac{d\sigma(\varepsilon, \chi)}{d\Omega} \sin \chi d\chi. \quad (4.82)$$

Az integrál alatt megjelenő $(1 - \cos \chi)$ szorzó az alábbi módon értelmezhető. Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy az m tömegű „lövedék” részecske az x irányba halad v_x sebességgel és hogy az $M \gg m$ tömegű „cél tárgy” részecske nyugalomban van (lásd 4.12. ábra). A feltételezett nagy tömegarány esetén a rugalmas szórás lényegében a bejövő részecske sebességvektorának eltérítését jelenti. A szórás során a bejövő részecske impulzusának egy részét átadja a cél tárgy részecskének, az ütközés előtti x -irányú $p_x = mv_x$ impulzusa $p'_x = mv'_x$ értékre csökken, ahol $v'_x = v_x \cos \chi$. A cél tárgynak átadott impulzus: $\Delta p_x = p_x - p'_x = p_x(1 - \cos \chi)$, vagyis $(1 - \cos \chi)$ értéke a *relatív impulzusváltozást* fejezi ki.

A szórás szög szerinti eloszlásától (azaz $d\sigma(\varepsilon, \chi)/d\Omega$ alakjától) függően a momentum transzfer hatáskeresztmetszet kisebb, vagy nagyobb is lehet, mint a teljes hatáskeresztmetszet. Ha a differenciális hatáskeresztmetszet nem függ a szórási szögtől, azaz a szórás izotróp, akkor $\sigma_m(\varepsilon) = \sigma(\varepsilon)$.

Az impulzusvesztéssel így módon kapcsolatban álló momentum transzfer hatáskeresztmetszet fontos szerepet kap a transzportfolyamatokkal kapcsolatban, mint a későbbiekben látni fogjuk [44].

4.3.4. Hatáskeresztmetszetek kapcsolata a tömegközépponti és laboratóriumi rendszerekben

Az ütközésre jellemző szórási szög a tömegközépponti és laboratóriumi koordináta-rendszerekben eltérő, kapcsolatukat a 4.56. összefüggés fogalmazza meg.⁷ Az ütközés során – mivel egy adott térszögbe szórt részecskék száma (pl. egy laboratóriumi kísérletben) nem függhet a koordináta-rendszer megválasztásától – a két rendszerre teljesülni kell az alábbiak:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)d\Omega = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{lab}} d\Omega_{\text{lab}}, \quad (4.83)$$

ahol $d\Omega = 2\pi \sin \chi d\chi$ és $d\Omega_{\text{lab}} = 2\pi \sin \chi_{\text{lab}} d\chi_{\text{lab}}$. Ebből adódóan:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{lab}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \frac{d\Omega}{d\Omega_{\text{lab}}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \frac{\sin \chi d\chi}{\sin \chi_{\text{lab}} d\chi_{\text{lab}}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \left| \frac{d \cos \chi}{d \cos \chi_{\text{lab}}} \right|. \quad (4.84)$$

$d \cos \chi / d \cos \chi_{\text{lab}}$ értékét a 4.56. összefüggés alapján kiszámítva az alábbi végeredmény adódik:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{lab}} = \frac{[1 + 2\alpha \cos \chi + \alpha^2]^{3/2}}{1 + \alpha \cos \chi} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = C(\alpha) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right), \quad (4.85)$$

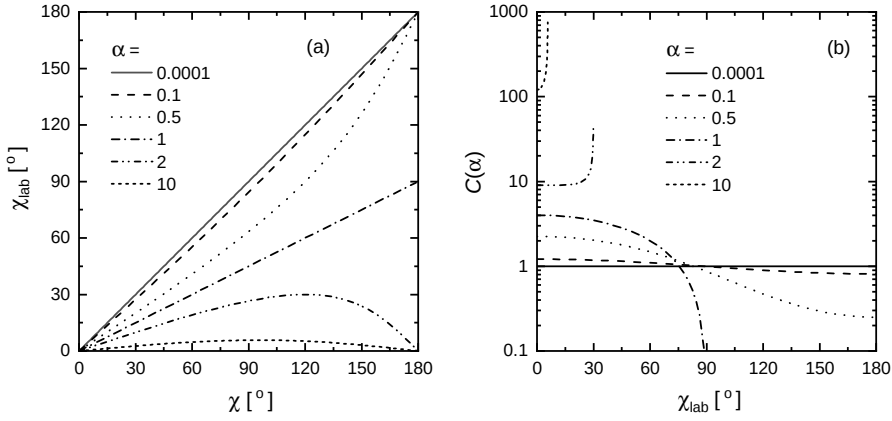
ahol $C(\alpha)$ a két koordináta-rendszerre vonatkozó differenciális hatáskeresztmetszetek aránya és $\alpha = m_1/m_2$ a részecskék tömegaránya. Az utóbbi felhasználásával 4.56. alakja

$$\cos \chi_{\text{lab}} = \frac{\alpha + \cos \chi}{\sqrt{1 + \alpha^2 + 2\alpha \cos \chi}}. \quad (4.86)$$

A 4.13.(a) ábra a szórási szögek fenti összefüggését mutatja az $\alpha = m_1/m_2$ tömegarány néhány értékére. Kis tömegarány esetén (pl. $\alpha = 0.0001$) $\cos \chi_{\text{lab}} \cong \cos \chi$. Növekvő, de még 1-nél kisebb tömegarányok mellett a két szög közötti eltérés egyre jelentősebb, de hátraszórás esetén ezekben az esetekben $\cos \chi_{\text{lab}} = \cos \chi = 180^\circ$. Az $\alpha = 1$ speciális esetben $\cos \chi_{\text{lab}, \text{max}} = 90^\circ$. $\alpha > 1$ esetén χ_{lab} maximumot mutat χ függvényében és hátraszórás esetén $\cos \chi_{\text{lab}} = 0^\circ$.

A 4.13.(b) ábra a két koordináta-rendszerre vonatkozó differenciális hatáskeresztmetszetek $C(\alpha)$ arányát mutatja χ_{lab} függvényében. Kis tömegarány mellett ($\alpha = 0.0001$) $C(\alpha) = 1$, azaz a tömegközépponti és a laboratóriumi koordináta-rendszerekre vonatkozó differenciális hatáskeresztmetszetek egyenlőek. Növekvő, de még 1-nél kisebb tömegarány mellett a laboratóriumi rendszerben a hátraszórás csökken a tömegközépponti rendszerhez képest. Fontos,

⁷Mivel ezt az összefüggést álló céltárgy részecskére származtattuk, a felhasználásával kapott összefüggések is csak ebben az esetben érvényesek.



4.13. ábra. (a) A tömegközépponti és a laboratóriumi koordináta-rendszerekben mért szórási szögek összefüggése és (b) a két koordináta-rendszerre vonatkozó differenciális hatáskeresztmetszetek $C(\alpha)$ aránya, a tömegarány (α) különböző értékeire.

hogy egyenlő tömegű részecskék esetében a szórás a 90° -nál kisebb szögekre, 1-nél nagyobb tömegarálynál pedig egy határszögnél ($\chi_{\text{max}} = \arccos(1/\alpha)$) kisebb értékekre korlátozódik, amint ezt a 4.13.(a) ábra is mutatta. Ennél a szögnél a laboratóriumi rendszerre vonatkozó differenciális hatáskeresztmetszet divergál.

A számunkra legfontosabb elemi plazmafolyamatok szempontjából itt is két speciális eset érdemel figyelmet:

- elektron - atom (molekula) ütközéseknél feltételezhetjük, hogy $\alpha \cong 0$, ez esetben

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{lab}} \cong \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right), \quad (4.87)$$

azaz – a fentiek értelmében – a két koordináta-rendszerben ugyanaz a hatáskeresztmetszet érvényes,

- egy adott gáz ionjának és atomjának (molekulájának) ütközésénél $\alpha \cong 1$, ez esetben

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{lab}} &= \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \frac{2^{3/2} [1 + \cos \chi]^{3/2}}{1 + \cos \chi} \\ &= 4 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \sqrt{\frac{1 + \cos \chi}{2}} = 4 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \cos\left(\frac{\chi}{2}\right), \end{aligned}$$

ami

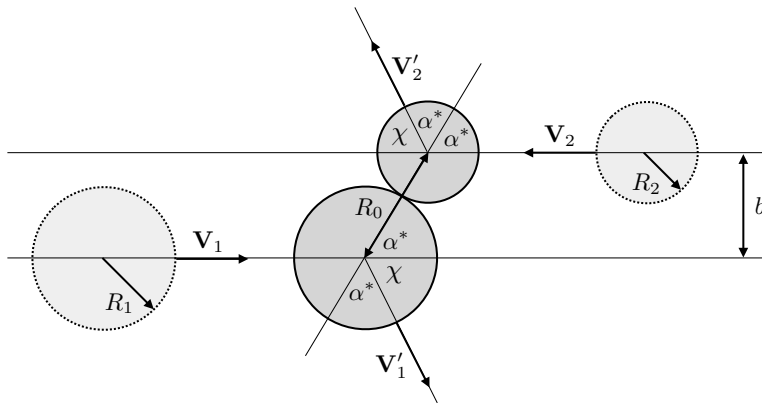
$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{lab}} = 4 \cos \chi_{\text{lab}} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \quad (4.88)$$

alakba is írható, ugyanis ebben a speciális esetben a 4.56. összefüggés szerint $\cos \chi_{\text{lab}} = \cos(\chi/2)$. Az utóbbiból az is következik, hogy azonos tömegű részecskék ütközése esetén a laboratóriumi koordináta-rendszerben mért szórási szög tartománya $0 \leq \chi_{\text{lab}} \leq \pi/2$.

4.3.5. Hatáskeresztmetszetek különböző kölcsönhatási potenciálok mellett

A következőkben néhány fontos kölcsönhatási potenciál esetére tárgyaljuk a hatáskeresztmetszetek kiszámítását és tulajdonságait.

Kemény gömbök ütközése



4.14. ábra. Kemény gömbök ütközése (tömegközépponti koordináta-rendszerben).

A fentiek alkalmazására első példaként számítsuk ki kemény gömbök (rugalmas) ütközésére vonatkozó hatáskeresztmetszeteket! Ehhez tekintsük a 4.14. ábrát! Legyen a laboratóriumi rendszerben álló céltárgy részecske sugara R_1 , tömege M_1 , a bejövő részecskére ugyanezek a paraméterek R_2 és M_2 . A két részecske távolsága az érintkezés pillanatában $R_0 = R_1 + R_2$.

Elsőként a szórás szögét számítjuk ki a 4.43. összefüggés alapján. Az ebben szereplő $U(r)$ potenciál $r > R_0$ esetben nulla, ugyanis ilyen távolságok mellett a két részecske között nincs kölcsönhatás. Ugyanakkor, $r < R_0$ esetén $U = \infty$. Ezt kihasználva:

$$\chi = \pi - 2\alpha^* = \pi - 2b \int_{R_0}^{\infty} \frac{dr/r^2}{\sqrt{1 - b^2/r^2}} = \pi - 2 \int_0^{b/R_0} \frac{dB}{\sqrt{1 - B^2}}, \quad (4.89)$$

ahol $B = b/r$. Az itt szereplő integrál értéke $\sin^{-1}(b/R_0)$, amiből a szórási szög

$b < R_0$ esetén:

$$\chi = \pi - 2 \sin^{-1}(b/R_0). \quad (4.90)$$

Az ütközési paraméter $b > R_0$ tartományában nincs ütközés és így $\chi = 0$.

A következő lépés a differenciális hatáskeresztmetszet kiszámítása. A 4.14. ábráról látható, hogy $b = R_0 \sin \alpha^* = R_0 \cos \chi/2$. Az utóbbiból $|db/d\chi| = (R_0/2) \sin \chi/2$. Ezeket a 4.3.2. fejezetben a differenciális hatáskeresztmetszetre kapott kifejezésbe helyettesítve:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin \chi} \left| \frac{db(\chi)}{d\chi} \right| = \frac{R_0 \cos \frac{\chi}{2}}{\sin \chi} \frac{R_0}{2} \sin \frac{\chi}{2} = \frac{R_0^2}{4} \quad (4.91)$$

adódik. A teljes ütközési hatáskeresztmetszet és a momentum transzfer hatáskeresztmetszet a 4.78. és a 4.82. összefüggések felhasználásával:

$$\sigma(\varepsilon) = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin \chi \, d\chi = 2\pi \int_0^\pi \frac{R_0^2}{4} \sin \chi \, d\chi = \pi R_0^2, \quad (4.92)$$

illetve

$$\begin{aligned} \sigma_m(\varepsilon) &= 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos \chi) \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin \chi \, d\chi \\ &= 2\pi \int_0^\pi \frac{R_0^2}{4} (1 - \cos \chi) \sin \chi \, d\chi = \pi R_0^2. \end{aligned} \quad (4.93)$$

Láthatóan a teljes hatáskeresztmetszet valóban a gömb „keresztmetszete”. Mint később, a kvantummechanikai szórás tárgyalásánál látni fogjuk, ez kvantumos esetben nem lesz igaz. Speciális módon itt a teljes és a momentum transzfer hatáskeresztmetszet megegyezik, összhangban azzal, hogy a differenciális hatáskeresztmetszet nem függ az eltérülés szögétől.

A Coulomb-szórás hatáskeresztmetszete

A Coulomb-kölcsönhatás alapvető szerepet játszik a plazmafizikában, ezért érdemes az ehhez kapcsolódó szórási folyamat jellegzetességeivel megismerkedni. Két, Z_1 és Z_2 töltésszámú ütköző partner közötti potenciál:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi \varepsilon_0 r}. \quad (4.94)$$

A hatáskeresztmetszetek kiszámításához új változókat (A, B, C) definiálunk:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi \varepsilon_0 r} = \frac{A}{r}, \quad B = \frac{b}{r}, \quad C = \frac{A}{E_0 b}. \quad (4.95)$$

Ezekkel a változókkal

$$1 - \frac{U(r)}{E_0} - \frac{b^2}{r^2} = 1 - BC - B^2, \quad (4.96)$$

vagyis a két részecske közötti legkisebb távolság (a 4.40. összefüggés alapján) az

$$1 - B_0 C - B_0^2 = 0 \quad (4.97)$$

egyenlet megoldásával adódik, ahonnan

$$B_0 = -\frac{C}{2} + \sqrt{\frac{C^2}{4} + 1} \rightarrow R_0 = \frac{b}{B_0}. \quad (4.98)$$

A szórási szög a 4.43. egyenlet alapján:⁸

$$\begin{aligned} \chi &= \pi - 2\alpha^* = \pi - 2b \int_{R_0}^{\infty} \frac{dr/r^2}{\sqrt{1 - BC - B^2}} = \pi - 2 \int_0^{B_0} \frac{dB}{\sqrt{1 - BC - B^2}} \\ &= \pi - 2 \left[\frac{\pi}{2} - \arcsin\left(\frac{C}{\sqrt{C^2 + 4}}\right) \right] = 2 \arcsin\left(\frac{C}{\sqrt{C^2 + 4}}\right). \end{aligned} \quad (4.99)$$

Következésképpen:

$$\sin \frac{\chi}{2} = \frac{C}{\sqrt{C^2 + 4}}, \quad C = 2 \tan \frac{\chi}{2} = \frac{A}{E_0 b} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\frac{1}{2}\mu g_0^2} \frac{1}{b} \quad (4.100)$$

és végül a tömegközépponti rendszerben a szórási szög:

$$\tan \frac{\chi}{2} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \mu g_0^2 b} = \frac{b_0}{b}, \quad (4.101)$$

ahol bevezettük a $\chi = 90^\circ$ eltérülési szöghöz tartozó

$$b_0 = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \mu g_0^2} \quad (4.102)$$

ütközési paraméter értéket (lásd 4.15. ábra).

A 4.101. összefüggésből $db/d\chi = b^2/(2b_0 \cos^2 \frac{\chi}{2})$ adódik, ezt és a szórási szög és az ütközési paraméter közötti összefüggést felhasználva a *Coulomb-szórás differenciális hatáskeresztmetszete* [21]:⁹

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin \chi} \left| \frac{db}{d\chi} \right| = \frac{b_0^2}{2 \sin^4 \frac{\chi}{2}} = \frac{b_0^2}{(1 - \cos \chi)^2}. \quad (4.103)$$

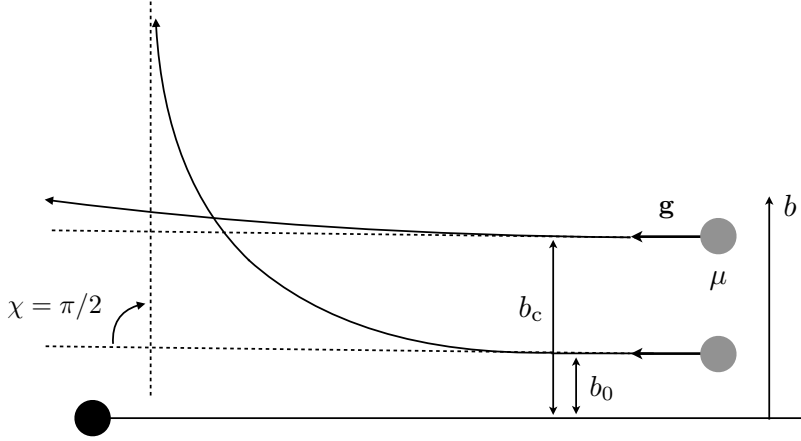
⁸Az integrálás

$$\int \frac{dx}{\sqrt{\mathcal{A}x^2 + \mathcal{B}x + \mathcal{C}}} = -\frac{1}{\sqrt{-\mathcal{A}}} \arcsin\left(\frac{2\mathcal{A}x + \mathcal{B}}{\sqrt{\mathcal{B}^2 - 4\mathcal{A}\mathcal{C}}}\right) \quad (\mathcal{A} < 0)$$

alapján és a 4.98. összefüggés felhasználásával végezhető el:

$$\begin{aligned} \int_0^{B_0} \frac{dB}{\sqrt{1 - BC - B^2}} &= \left[\arcsin\left(\frac{2B + C}{\sqrt{C^2 + 4}}\right) \right]_0^{B_0} = \arcsin\left(\frac{2B_0 + C}{\sqrt{C^2 + 4}}\right) - \arcsin\left(\frac{C}{\sqrt{C^2 + 4}}\right) \\ &= \arcsin(1) - \arcsin\left(\frac{C}{\sqrt{C^2 + 4}}\right) = \frac{\pi}{2} - \arcsin\left(\frac{C}{\sqrt{C^2 + 4}}\right). \end{aligned}$$

⁹Ez az eredmény *Rutherford-hatáskeresztmetszetként* is ismert, a XX. század elején végzett anyagszerkezet-kutatási részecskeszórási kísérletek emlékére.



4.15. ábra. Részecske szóródása Coulomb-potenciál esetén. b_0 a trajektória 90° -os eltérüléséhez tartozó ütközési paraméter.

A szórás teljes hatáskeresztmetszete 4.78. értelmében

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin \chi \, d\chi = 2\pi b_0^2 \int_{\chi_{\min}}^\pi \frac{\sin \chi}{(1 - \cos \chi)^2} \, d\chi, \quad (4.104)$$

ahol $\chi_{\min} = 0$. Ezen változó bevezetésének értelme az integrálás elvégzése után válik világossá [45], ugyanis az eredményként kapott

$$\sigma = \pi b_0^2 \left[\frac{1}{\sin^2(\chi_{\min}/2)} - 1 \right], \quad (4.105)$$

teljes hatáskeresztmetszet $\chi_{\min} = 0$ esetén láthatóan divergál. Hasonló problémával szembesülünk a momentum transzfer hatáskeresztmetszet kiszámításánál is:

$$\sigma_m = 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos \chi) \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin \chi \, d\chi = 2\pi b_0^2 \int_{\chi_{\min}}^\pi \frac{\sin \chi}{1 - \cos \chi} \, d\chi, \quad (4.106)$$

ahol $\chi_{\min}$ „elvben” ismét nulla. Az integrálást elvégezve:

$$\sigma_m = 4\pi b_0^2 \ln \left[\frac{1}{\sin(\chi_{\min}/2)} \right] \quad (4.107)$$

adódik, amiről szintén nyilvánvaló a divergencia $\chi_{\min} = 0$ esetében. A probléma forrása az, hogy a hosszú hatótávolságú potenciál miatt a $\chi_{\min} \rightarrow 0$ eltérülési szögekhez $b \rightarrow \infty$ ütközési paraméterű „bejövő” részecskéket is figyelembe kell

venni. A divergencia elkerülésére az ütközési paraméter maximális értékét korlátozni kell, ezzel az integrációs tartományból kizárva a nagyon kis eltérést okozó ütközéseket, melyekre a 4.15. ábra szerint $b > b_c$. Olyan esetekben, ahol felléphet a Debye-árnyékolás jelensége, a maximális ütközési paraméternek a Debye-hosszat szokás választani, azaz $b_c = \lambda_D$. Ekkor a 4.80. és 4.101. összefüggésekből a teljes szórási hatáskeresztmetszet:

$$\sigma = 2\pi \int_0^{b_c=\lambda_D} b db = \pi \lambda_D^2. \quad (4.108)$$

A levágás bevezetésével a $b > b_D$ esetekben a részecskék szóródás nélkül haladnak, a $b < b_D$ tartományban Coulomb-szórás következik be. Ezen a tartományon belül is elkülöníthetjük a nagy szögű szórást, ahol a szórási szög a $\pi/2 < \chi < \pi$ intervallumba esik (és $0 \leq b \leq b_0$), illetve a kis szögű szórást, ahol $\chi < \pi/2$ (és $b_0 < b < b_D$). A nagy szögű szórás járuléka a teljes hatáskeresztmetszethez:

$$\sigma_{\text{nagy}} = 2\pi \int_0^{b_0} b db = \pi b_0^2, \quad (4.109)$$

a kis szögű szórásé pedig

$$\sigma_{\text{kis}} = 2\pi \int_{b_0}^{\lambda_D} b db = \pi(\lambda_D^2 - b_0^2). \quad (4.110)$$

A két érték aránya:

$$\frac{\sigma_{\text{kis}}}{\sigma_{\text{nagy}}} = \left(\frac{\lambda_D}{b_0} \right)^2 - 1 \approx \left(\frac{\lambda_D}{b_0} \right)^2, \quad (4.111)$$

ugyanis általában $\lambda_D \gg b_0$. Ez az eredmény azt mutatja, hogy *a sok, kis szögű szórást szenvedő részecske hozzájárulása a teljes hatáskeresztmetszethez sokkal nagyobb, mint a kevés, nagy szögű szórást elszenvedő részecske járuléka.*

A fenti, $\lambda_D \gg b_0$ feltételről megmutatható, hogy nem más, mint az ideális plazma feltétele. Ezt az alábbiakban egy speciális esetre, az egykomponensű plazmára látjuk be. Erre a rendszerre

$$b_0 = \frac{Z^2 e^2}{2\pi \varepsilon_0 m g_0^2}, \quad (4.112)$$

ugyanis $\mu = m/2$. A relatív sebesség (g_0) értékét a T hőmérséklethez tartozó $\sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}$ átlagos sebességgel közelítve ez az alábbi alakra vezet:

$$b_0 = \frac{Z^2 e^2}{2\pi \varepsilon_0 m \frac{8k_B T}{\pi m}} = \frac{Z^2 e^2}{16\varepsilon_0 k_B T} = \underbrace{\frac{Z^2 e^2}{4\pi \varepsilon_0 a k_B T}}_{\Gamma} \underbrace{\frac{\pi a}{4}}_{\approx \bar{d}}, \quad (4.113)$$

ahol megjelent az 1.1. összefüggéssel definiált Γ csatolási együttható és $a = (3/4\pi n)^{1/3}$ egy karakterisztikus távolság, amely az egy részecskéhez tartozó gömb sugarának vehető (ld. 1. fejezet). Az egyenletben szereplő $\pi a/4$ faktor a $\bar{d}$ átlagos részecsketávolság nagyságrendjébe esik, így a fenti összefüggés szerint $\Gamma \ll 1$ feltétele az, hogy $b_0/\bar{d} \ll 1$ teljesüljön, vagyis b_0 értéke sokkal kisebb legyen, mint az átlagos részecsketávolság. Azt kaptuk tehát, hogy ideális plazma esetén eltekinthetünk a nagyszögű szórásoktól, csak a nagy számú kisszögű szórás határozzák meg a plazma viselkedését, amit a 3.1.1. fejezetben bevezetett átlagos elektromos térrel tudunk modellezni.

A Debye-hossznak megfelelő levágás alkalmazása a momentum transzfer hatáskeresztmetszetre az alábbira vezet:

$$\sigma_m = 2\pi b_0^2 \ln \left[1 + \left(\frac{\lambda_D}{b_0} \right)^2 \right], \quad (4.114)$$

ahol kihasználtuk, hogy $\tan(\chi_{\min}/2) = b_0/\lambda_D$ (ld. 4.101.) és az ebből számolt $\sin(\chi_{\min}/2)$ értéket behelyettesítettük a 4.107. összefüggésbe. Bevezetve a

$$\Lambda = \lambda_D/b_0 \quad (4.115)$$

paramétert, melyre tipikusan $\Lambda \gg 1$, a momentum transzfer hatáskeresztmetszet:

$$\sigma_m = 4\pi b_0^2 \ln \Lambda, \quad (4.116)$$

ahol $\ln \Lambda$ a *Coulomb-logaritmus* melynek értéke igen lassan változik a meghatározó mennyiségek függvényében, a legtöbb laboratóriumi plazmában 10 és 20 közé esik [45].

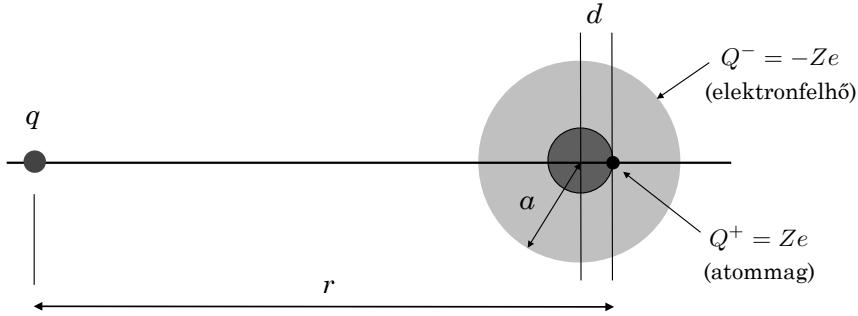
Polarizációs szórás

Következő példaként egy töltött részecske szórását vizsgáljuk egy (globálisan) semleges részecskén, pl. egy atomon. Az első gondolatunk az lehet, hogy ilyen esetben nem lép fel kölcsönhatás, viszont a töltött részecske közeledésekor hatással lesz az atom elektronhéjára, ami *polarizációhoz* és így a két részecske között kölcsönhatáshoz vezet. A jelenséget egy egyszerű klasszikus modell alapján tárgyaljuk, a 4.16. ábrán vázoltak szerint. Legyen a bejövő részecske egy pozitív ion, melynek töltése $q > 0$, az atom rendszáma Z . Az atommag töltése így $Q^+ = Ze$, elektronfelhőjének össztöltése pedig $Q^- = -Ze$. A modell feltételezései szerint az utóbbi a sugarú, gömbszimmetrikus és homogén

$$\rho^- = -\frac{Ze}{\frac{4\pi}{3}a^3}$$

töltéssűrűségű.

A „bejövő” részecske az atommagra és a körülötte lévő elektronfelhőre ellentétes erővel hat, ennek következtében az elektronfelhő középpontja és az atommag egymástól d távolságra mozdul el. Az atommag helyén az elektronfelhő által



4.16. ábra. A polarizációs szórás modellrendszere.

indukált E_{ind} elektromos térerősséget a Gauss-tétel alkalmazásával számíthatjuk ki, amit az elektronfelhő középpontjától mérve d sugarú gömbre írunk fel. Ennek értelmében:

$$\varepsilon_0 E_{\text{ind}} 4\pi d^2 = \frac{4\pi}{3} d^3 \rho^- \quad \rightarrow \quad E_{\text{ind}} = \frac{\rho^- d}{3\varepsilon_0} = -\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0} \frac{d}{a^3}. \quad (4.117)$$

Ugyanekkor a Q^+ töltésű atommag helyén a q töltésű bejövő részecske által keltett elektromos térerősség:

$$E_{\text{ext}} = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r^2}. \quad (4.118)$$

A modellben feltételezzük, hogy az elektronfelhő nagyon gyorsan reagál a bejövő részecske által keltett perturbációra, vagyis $E_{\text{ind}} + E_{\text{ext}} = 0$ minden időpillanatban teljesül. Ennek feltétele:

$$d = \frac{qa^3}{r^2 Q^+}. \quad (4.119)$$

A bejövő részecske és az atom között ható erő:

$$F = \frac{qQ^+}{4\pi\varepsilon_0} \left[\frac{1}{(r-d)^2} - \frac{1}{r^2} \right] \cong \frac{qQ^+}{2\pi\varepsilon_0 r^3} d = \frac{q^2 a^3}{2\pi\varepsilon_0 r^5}, \quad (4.120)$$

melynek integrálásával megkapható a két részecske kölcsönhatásából származó

$$U(r) = \int_{-\infty}^r F(r') dr' = \frac{q^2 a^3}{2\pi\varepsilon_0} \int_{-\infty}^r \frac{dr'}{(r')^5} = -\frac{q^2 a^3}{8\pi\varepsilon_0 r^4} \quad (4.121)$$

potenciális energia. Az $\alpha = a^3$ paraméter bevezetésével:¹⁰

$$U(r) = -\frac{\alpha q^2}{8\pi\epsilon_0 r^4}. \quad (4.122)$$

Ilyen jellegű (vonzó) kölcsönhatás esetén a részecskék kezdeti energiája és ütközési paramétere függvényében két alapvetően különböző jellegű trajektória lehetséges. Az egyik esetben az ütköző részecske egy egyszerű szórást szenved, a második esetben pedig spirál jellegű pálya áll elő. Az utóbbi esetben, amennyiben valamilyen folyamat bekövetkezhet a két részecske közötti kölcsönhatás miatt, akkor ez nagy valószínűséggel meg is fog történni. A kétféle eltérő viselkedés megkülönböztetéséhez írjuk fel a két részecske legkisebb távolságát (R_0) megadó egyenletet! A 4.40. összefüggés alapján:

$$1 - \frac{U(R_0)}{E_0} - \frac{b^2}{R_0^2} = 1 + \frac{\alpha q^2}{8\pi\epsilon_0 R_0^4 E_0} - \frac{b^2}{R_0^2} = 0. \quad (4.123)$$

Az egyszerű eltérülés feltétele az, hogy az egyenletnek legyen megoldása, ellenkező esetben a spirális trajektóriák állnak elő. Ez utóbbinak a feltétele, hogy a fenti egyenlet diszkriminánsa negatív legyen, azaz a b ütközési paraméterre fennálljon, hogy

$$b^2 \leq \sqrt{\frac{\alpha q^2}{\pi\epsilon_0\mu}} \frac{1}{g_0}, \quad (4.124)$$

ahol már felhasználtuk, hogy $E_0 = \mu g_0^2/2$ (μ a redukált tömeg és g_0 a relatív sebesség). Az egyenlőséggel definiáljuk az ú.n. *Langevin-hatáskeresztmetszetet*,

$$\sigma_L = b_L^2 \pi = \sqrt{\frac{\pi\alpha q^2}{\epsilon_0\mu}} \frac{1}{g_0}, \quad (4.125)$$

ami egy jó közelítés egyes (pl. ion - atom) ütközési folyamatokra [5].

4.4. A szórás kvantummechanikai leírása

Az alábbiakban ízelítőt adunk a szórás kvantummechanikai leírásába. A téma nagysága miatt itt csak az alapokat mutatjuk be, illetve egy, az alacsony hőmérsékletű plazmafizikában gyakran előforduló jelenség, a hatáskeresztmetszetben megjelenő Ramsauer-Townsend-minimum megértését tűzzük ki célul. Részletekért lásd a megfelelő monográfiákat, pl. [46]. A továbbiakban bizonyítás nélkül fogunk közölni a kvantummechanikai szórás megértéséhez mindenképp

¹⁰Az α paramétert az irodalomban *molekuláris polarizálhatóságnak* nevezik [4]. Értékét általában a Bohr-sugárra ($a_0 = 5.29 \times 10^{-11}$ m) normalizálva adják meg, $\alpha_r = \alpha/a_0^3$ értéke pl. Ar atomokra 11.08, O₂ molekulákra 10.6. Megjegyezzük, hogy a polarizálhatóságot (SI egységekben) a $p = \epsilon_0 \alpha^* E$ összefüggés definiálja, ahol p az indukált dipólmomentum. A 4.119. összefüggés alapján $p = dQ^+ = qa^3/d^2$. Az elektromostér-erősség 4.118. szerinti értékét tekintve $\alpha^* = 4\pi a^3$ adódik, tehát a valódi polarizálhatóság egy 4π szorzófaktorral nagyobb α értékénél.

szükséges, a témához azonban szervesen nem kapcsolódó állításokat. Ezek egy része még meg fog jelenni az optikai spektroszkópia alapjainak bevezetésénél is (10.2. fejezet). Az anyag mélyebb megértéséhez itt is a megfelelő szakkönyveket ajánljuk, pl. [47].

A kvantummechanikában egy részecskét annak hullámfüggvényével tudjuk leírni, amit $\Psi(t, \mathbf{r})$ -rel jelölünk. Ezen komplex értékű függvény értelme – nagyban leegyszerűsítve – az általa leírt részecske megtalálási valószínűsége, pontosabban: $|\Psi(t, \mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r}$ annak a valószínűsége, hogy a részecske a t időpontban az $\mathbf{r}$ körüli $d^3\mathbf{r}$ térfogatban található. A rendszer dinamikáját egy helytől és időtől függő parciális differenciálegyenlet,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}), \quad (4.126)$$

a *Schrödinger-egyenlet* írja le, ahol $V(\mathbf{r})$ a potenciál, amit a részecske „érez”, m a tömeg, $\hbar = h/2\pi$, h a Planck-állandó.

Ugyan azt gondolnánk, hogy a szórás egy időben változó jelenség, a kvantummechanikai leírásban mégis az *időfüggetlen* egyenletet igyekszünk megoldani, ugyanis ez a közelítés már a kísérletekkel jó egyezést mutató eredményt ad [48]. Ennek levezetéséhez a

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \quad (4.127)$$

feltételezéssel élünk, ahol E az energia. Ezt a függvényalakot az indokolja, hogy a 4.126. egyenlet jobb oldalának dimenziója $[V][\Psi]$, és a bal oldalán a 4.127. szerinti alak deriválását végrehajtva ugyanezt a dimenziót kapjuk.

Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet tehát a következő alakú:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}). \quad (4.128)$$

Most is hasonlóan képzeljük el a szórást, mint klasszikus esetben: két részecske szórása helyett egy részecske adott potenciálban való mozgását igyekszünk leírni, ami esetünkben a $V(\mathbf{r})$ potenciál. Hangsúlyozzuk, hogy ebben az esetben az m tömeg a két részecske redukált tömege lesz. A továbbiakban csak centrális potenciálon történő rugalmas szórással fogunk foglalkozni, így $V(\mathbf{r}) = V(|\mathbf{r}|) = V(r)$.

Elsőként, ahelyett, hogy a fenti parciális differenciálegyenlet (bonyolult) megoldásával próbálkoznánk, vizsgáljuk meg, hogy pusztán fizikai megfontolások alapján milyen következtetésre tudunk jutni a várható eredményre vonatkozóan. Ezt követően meg fogjuk adni az egyenlet megoldását a szórási problémára.

A fenti „stratégia” értelmében tekintsünk egy végtelenből induló „szabad” részecskét! Feltételezhetjük, hogy $\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0$. Ekkor a szabad részecske hullámfüggvényének alakja (a részecske haladásának irányát a x -tengellyel párhuzamosnak véve) egy

$$\Psi_1(\mathbf{r}) \sim e^{ikx} \quad (4.129)$$

síkhullám, k hullámszámmal és $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ energiával, hiszen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi_1(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{ikx} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{ikx} = E \Psi_1(\mathbf{r}). \quad (4.130)$$

A következő kérdés ami felmerül, hogy mi lesz a részecskénk hullámfüggvénye a másik határesetben, azaz nagy távolságra az izotróp potenciálban való szórás után? A feltételezésünk egy gömbhullám, azaz

$$\Psi_2(\mathbf{r}) = f(\chi, \eta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (4.131)$$

ha $r \rightarrow \infty$. Ezt a választást kétféleképp is megindokolhatjuk: (i) a szórás a bejövő részecskét (hullámot) minden irányba tovaszórja, mivel a potenciál csak r függvénye. A kezdeti, x -irányú hullám miatt Ψ_2 nem lesz teljesen gömbszimmetrikus, ezért kell az $f(\chi, \eta)$ előtag, amit *szórási amplitúdónak* nevezünk. (ii) A valószínűségi értelmezést tekintve $|\Psi_2(\mathbf{r})|^2 \sim \frac{1}{r^2}$, azaz az r sugarú gömbön „szétkent” részecske megtalálási valószínűsége nem változik r változásával, hiszen a gömb felülete arányos r^2 -tel.

Mivel a Schrödinger-egyenlet lineáris, így a végső feltételezésünk a megoldásra (aszimptotikusan) a következő:

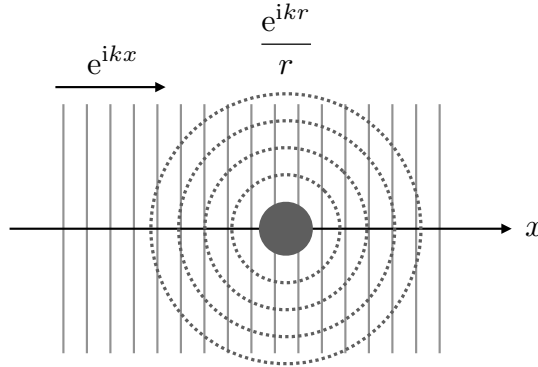
$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_1(\mathbf{r}) + \Psi_2(\mathbf{r}) = e^{ikx} + f(\chi, \eta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (4.132)$$

A szögfüggő szórási amplitúdó segítségével kifejezhetjük a differenciális hatáskeresztmetszetet, mint azt a következő gondolatmenettel megmutatjuk.

Mint említettük, a Ψ hullámfüggvény fizikai értelme valószínűségi alapú. Azonban feltéve, hogy a részecskénk minden időben megtalálható valahol, erre a valószínűségekre egy megmaradási tételt írhatunk fel a 4.126. egyenlet segítségével. Vezessük be a $\rho = |\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$ mennyiséget, ami nem más, mint a valószínűségi sűrűségfüggvény. Ekkor a Schrödinger-egyenlet segítségével írhatjuk, hogy

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} (\Psi\Psi^*) = -i \frac{\hbar}{2m} (\Psi^* \Delta \Psi - \Delta \Psi^* \Psi) \\ &= -i \frac{\hbar}{2m} \nabla \cdot (\Psi^* (\nabla \Psi) - (\nabla \Psi^*) \Psi) = \nabla \cdot \mathbf{j}, \end{aligned} \quad (4.133)$$

ahol bevezettük a $\mathbf{j}$ valószínűségiáram-sűrűséget. Ez a mennyiség fogja átvenni a klasszikus esetben látott fluxus szerepét, és ennek segítségével tudjuk majd definiálni a hatáskeresztmetszetet is.



4.17. ábra. Részecske szóródásának kvantummechanikai értelmezése. A szóró részecske a koordináta-rendszer középpontjában helyezkedik el. A bejövő részecske síkhullámként értelmezhető, a „szórási kép” a beeső (párhuzamos szürke vonalakkal jelölt) síkhullám és a szórt (szaggatott vonalakkal jelölt) gömbhullám interferenciájaként áll elő.

Felhasználva a valószínűségáram-sűrűségekre vonatkozó összefüggést, a bejövő, szabad részecske „fluxusa”

$$\mathbf{j}_{\text{in}} = -i\frac{\hbar}{2m} \left(e^{-ikx} (\nabla e^{ikx}) - (\nabla e^{-ikx}) e^{ikx} \right) = \frac{\hbar k}{m} \mathbf{e}_x, \quad (4.134)$$

ahol $\mathbf{e}_x$ az x -irányba mutató egységvektor. Nézzük meg ugyanezt a mennyiséget a szórás után, nagy távolságban is! Ekkor

$$\nabla \Psi_2 = \frac{ik f(\chi, \eta) e^{ikr}}{r} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right), \quad (4.135)$$

ahol az aszimptotikus határeset miatt az $1/r$ -nél gyorsabban lecsengő tagokkal nem foglalkozunk (és ezért nem is kell foglalkozni f szög szerinti deriválásával). Ezek alapján a kimenő fluxus

$$\mathbf{j}_{\text{out}} = \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^2} |f(\chi, \eta)|^2 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^3}\right). \quad (4.136)$$

Ebből már – a klasszikus szórási hatáskeresztmetszet definíciója alapján – meghatározhatjuk a differenciális hatáskeresztmetszetet, ugyanis egy $d\Omega$ térszögben $d\mathbf{A}$ felületre szóródó részecskék valószínűsége

$$\mathbf{j}_{\text{out}} \cdot d\mathbf{A} = \frac{\hbar k}{m} |f(\chi, \eta)|^2 d\Omega. \quad (4.137)$$

A differenciális hatáskeresztmetszet a kimenő és bejövő valószínűség hányadosa, azaz

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\hbar k |f(\chi, \eta)|^2 / m}{\hbar k / m} = |f(\chi, \eta)|^2. \quad (4.138)$$

Azt a figyelemreméltó eredményt kaptuk, hogy a rugalmas szórás hatáskeresztmetszetének kiszámításához elég, ha az f szórási amplitúdót ismerjük. Ezek alapján a teljes hatáskeresztmetszet megkapható az alábbiak szerint:

$$\sigma = \int |f(\chi, \eta)|^2 d\Omega. \quad (4.139)$$

Elvi megfontolások alapján eddig a pontig tudtunk eljutni, a hatáskeresztmetszet tényleges meghatározásához a szórási amplitúdó kiszámításán keresztül vezet az út. Ehhez meg kell oldanunk az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet a megfelelő határfeltételekkel. Ez matematikailag nehézkes feladat és a speciális függvények eszköztárát is igénybe kell venni [35]. A következő szakaszban vázoljuk a megoldás matematikai alapjait. Az egyszerűsítés jegyében a továbbiakban csak olyan esetekkel foglalkozunk, ahol $f(\chi, \eta) = f(\chi)$, azaz nincs a rendszernek η -függése.

K. 7: A parciális hullámok módszere

A feladatunk a 4.128. egyenlet megoldása gömbi polárkoordináta-rendszerben. Az egyenletben szereplő Laplace-operátor miatt az időfüggetlenség ellenére is több változó fog maradni, nevezetesen r - és χ -függése lesz a megoldásnak, azaz $\Psi = \Psi(r, \chi)$. Az egyenletet általában a változók szétválasztásának módszerével szokás megoldani, ahol feltesszük, hogy $\Psi(r, \chi) = R(r)P(\chi)$ alakba írható a megoldás. A számítások során mindkét változóra kapunk egy közös differenciálegyenletet (bővebben lásd pl. [49]). A szögfüggő megoldást a $\mathcal{P}_l(\cos \chi)$ Legendre-polinokok adják, ahol l egy nemnegatív egész szám (és a kvantummechanikában az impulzusmomentummal arányos). Érdekes és nagyon hasznos tulajdonsága ezeknek a függvényeknek az, hogy teljes, ortonormált függvényrendszert alkotnak, azaz – hasonlóan pl. a Fourier-sorfejtéshez – bármely (bizonyos feltételeket teljesítő) függvény kifejezhető ezen függvények terén [49]. Pontosabban igaz, hogy

$$\int_{-1}^1 \mathcal{P}_l(w) \mathcal{P}_k(w) dw = \frac{2}{2l+1} \delta_{kl}, \quad (4.140)$$

ahol $w = \cos \chi$ és

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \mathcal{P}_l(w) \mathcal{P}_l(w') = \delta(w - w'), \quad (4.141)$$

ahol $\delta(w - w')$ a Dirac-delta. A megoldást tehát

$$\Psi(r, \chi) = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) \mathcal{P}_l(\cos \chi) \quad (4.142)$$

alakban kereshetjük.

A sugártól való függésre vonatkozó közösleges differenciálegyenletet ($E = \hbar^2 k^2 / 2m$ felhasználásával):

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right) R_l(r) = 0, \quad (4.143)$$

ahol bevezettük a

$$U(r) = \frac{2m}{\hbar} V(r) \quad (4.144)$$

jelölést. A legegyszerűbb eset, amikor $U(r) = 0$ és $l = 0$ (az $l = 0$ esetet s -hullámnak nevezik, az atomfizikában is használt $s, p, d, \dots$ energiaszintek analógiájára (lásd még a spektroszkópiáról szóló 10.2. fejezetet). Ekkor a megoldás a már látott gömbhullám, $e^{\pm ikr}/r$, amit a fejezet elején fizikai megfontolások alapján is kikövetkeztettünk. (Az $l \neq 0$ esetekre a megoldások gömbi Bessel-függvények lesznek, de ezzel itt nem foglalkozunk.) A Legendre-polinomok teljességét felhasználva a bejövő e^{ikx} síkhullámot is felírhatjuk ezek szuperpozíciójaként:

$$\Psi_1 = e^{ikx} = e^{ikr \cos \chi} = \sum_l (2l+1) u_l(kr) \mathcal{P}_l(\cos \chi), \quad (4.145)$$

ahol

$$u_l(kr) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 e^{ikrw} \mathcal{P}_l(w) dw. \quad (4.146)$$

Mivel mi még mindig csak az $r \rightarrow \infty$ határesetre vagyunk kíváncsiak, így a fenti függvénynek csak a vezető rendjét érdemes kiszámolni, amit parciális integrálással meg is tehetünk. Ennek eredménye:

$$u_l(kr) = \frac{1}{2ikr} [e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(kr)^2}\right). \quad (4.147)$$

Végeredményben tehát

$$e^{ikx} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ik} \left[\frac{e^{ikr}}{r} - (-1)^l \frac{e^{-ikr}}{r} \right] \mathcal{P}_l(\cos \chi). \quad (4.148)$$

Ezek alapján felírhatjuk a 4.132. szerinti feltételezésünket a Legendre-polinomok segítségével. Az $f(\chi)$ szórási amplitúdót kifejtve a következőt kapjuk:

$$f(\chi) = \sum_l \frac{2l+1}{k} f_l \mathcal{P}_l(\cos \chi), \quad (4.149)$$

így a hullámfüggvény aszimptotikus alakja

$$\Psi \sim \frac{1}{2ikr} \sum_l (2l+1) [(-1)^l e^{-ikr} + S_l e^{ikr}] \mathcal{P}_l(\cos \chi), \quad (4.150)$$

ahol bevezettük az

$$S_l = e^{2i\delta_l} \Rightarrow f_l = e^{i\delta_l} \sin \delta_l \quad (4.151)$$

jelölést, ahol δ_l az l impulzusmomentumú kimenő hullám fázistolása.

A fizikai kép tehát a következő: A részecske potenciálon való szóródását úgy képzelhetjük el, mint bejövő gömbhullámok sokasága ($\sim e^{-ikr}$), amelyek a szórást követően valamilyen, δ_l fázistolást szenvednek, így a kimenő gömbhullám már $S_l e^{ikr}$ -rel lesz arányos. A fázistolások függvényében a teljes hatáskeresztmetszet

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (4.152)$$

Nézzünk mindezekre egy példát, számoljuk ki a klasszikus esetben már látott kemény gömbök szórási hatáskeresztmetszetét. Ekkor a potenciál a következő

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r < a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

A végtelen nagy potenciál miatt a $\Psi(r, \chi)$ hullámfüggvényünknek az $r = a$ helyen a nulla értéket kell felvennie. Az egyenlet, amelyet meg kell oldanunk az $R_l(kr)$ függvényekre (itt áttérünk a $\rho = kr$ változóra) a következő:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right) (\rho R_l(\rho)) = 0. \quad (4.153)$$

Tekintsük a kis impulzusú szórást, azaz amikor az ütközés hatáskeresztmetszetében az $l = 0$ tag a domináns. Ennek a feltétele $ka \ll 1$, amit az alábbi módon láthatunk be. A klasszikus esetben b ütközési paraméter mellett az impulzusmomentum $m vb$ volt, a részecske ütközésének feltétele az a sugarú gömbbel pedig $b < a$. A kvantummechanikában az impulzusmomentum értéke $L = \hbar l$, így

$$\hbar l = m vb \Rightarrow \hbar l = \hbar k b \Rightarrow l < ka. \quad (4.154)$$

Ha $ka \ll 1$ (kis impulzus), akkor $l = 0$, az egyenlet egy harmonikus oszcillátor és a lehetséges megoldások $(\sin \rho)/\rho$ és $(\cos \rho)/\rho$ lehetnek, így írhatjuk, hogy $R_l(\rho) \sim \sin(\rho + \alpha)/\rho$, ahol α egy konstans, amivel az $r = a$ -nál kirótt határfeltételt tudjuk illeszteni. Láthatóan ez az állandó $\alpha = -ka$. Átalakítva a 4.150. egyenletet és véve az $l = 0$ tagot, kapjuk, hogy

$$\Psi \sim \frac{e^{i\delta_l}}{\rho} (e^{i\delta_l + i\rho} - e^{-i\delta_l - i\rho}) \sim \frac{\sin(\rho + \delta_l)}{\rho}, \quad (4.155)$$

azaz

$$\delta_0 = -ka. \quad (4.156)$$

Ezek alapján a teljes hatáskeresztmetszet ($ka \ll 1$ határesetben)

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2(ka) = 4\pi a^2 (1 + \mathcal{O}((ka)^4)). \quad (4.157)$$

A kemény gömbön történő (kvantummechanikai) szórásra tehát azt az érdekes eredményt kaptuk tehát, hogy szórás teljes hatáskeresztmetszete négyszer nagyobb, mint a klasszikus eseté. Megjegyezzük azonban, hogy ez az eredmény nem a kvantummechanika sajátja, csak a részecske hullámként való leírásának következménye; ebből következően ugyanez a jelenség megjelenik az elektrodinamikában is [7].

Érdekességképpen megemlítjük, hogy a Coulomb-potenciállal jellemezhető Rutherford-szórás esetében a kvantummechanikai eredmény megegyezik a klasszikussal. A fenti analízis azonban bonyolultabb erre az esetre, az érdeklődő Olvasó megtalálja az eredményt specializáltabb könyvekben, pl. [35].

4.4.1. A Ramsauer–Townsend-minimum

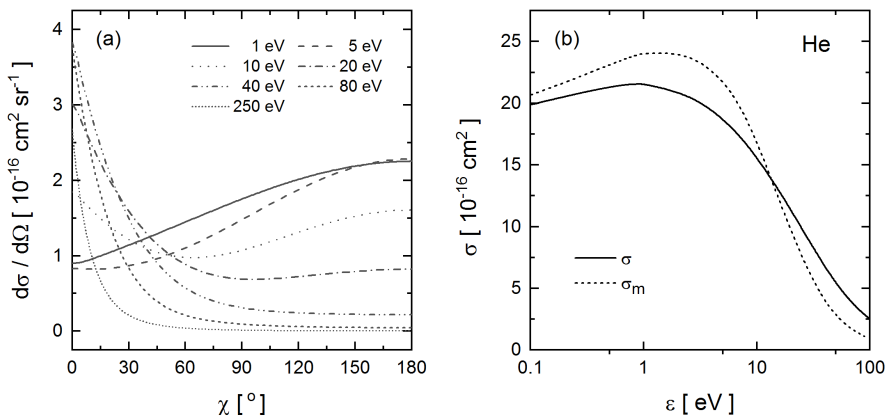
A kemény gömbön történő (kvantummechanikai) szórás után a következő, logikusnak tűnő lépés a taszító potenciál után a vonzó eset vizsgálata. Ennek leg egyszerűbb módja a K.7. részben bemutatott kemény gömb potenciáljának mintájára egy véges negatív potenciálú, gömbszimmetrikus potenciálgödör vizsgálata. A vonzó potenciál esete kissé bonyolultabb a korábban bemutatott taszító esetnél, hiszen ebben az esetben a potenciálgödörben (negatív energiájú) kötött állapotok is létesülhetnek. Ebben a fejezetben egy érdekes eredményt említünk meg a részletek mellőzésével, melyek megtalálhatók pl. a [50] referenciában.

Az említett jelenség az ún. *Ramsauer–Townsend-minimum* jelenléte. Az argon atom elektronszórási hatáskeresztmetszetében például (4.19. ábra) 0.2 eV környékén egy lokális minimum található. Ez azt jelenti, hogy az ilyen alacsony energiájú elektronok ütközési valószínűsége lecsökken. Ennek messzemenő következményei lehetnek, így érdemes magát a jelenséget jobban megérteni. A jelenség oka kvantummechanikai természetű. Az első modellt, amit használhatunk, éppen a véges, gömbszimmetrikus potenciálgödör modellje, ugyanis létezik olyan mélységű potenciál, amelyre $\sigma \rightarrow 0$, ha $k \rightarrow 0$, azaz nulla energián a hatáskeresztmetszet értéke is nulla. Ezt nevezzük „korlátozott Ramsauer–Townsend-minimumnak” [50]. Valódi gázokban azonban (mint pl. az argon) a Ramsauer–Townsend-minimumban a hatáskeresztmetszet nem nulla, illetve annak helye sem $E = 0$ -nál van. Megmutatható, hogy a gömbszimmetrikus véges potenciálgödör és a polarizációs potenciál (melynek potenciálja $1/r^4$ -el arányos, ld. 4.3.5. fejezet) együttes figyelembevételével a Ramsauer–Townsend-minimum (vagyis hogy $l = 0$ esetén $\sigma_0 \rightarrow 0$) egy véges k értéknél jelenik meg, ahol a nagyobb impulzusmomentumú járulékok már nem elhanyagolhatóak [51].

A gázok, melyek transzport-hatáskeresztmetszetében jelen van a Ramsauer–Townsend-minimum jobbára nemesgázok (Ar, Kr, Xe) de (i) He és Ne esetében a jelenség nem lép fel, viszont (ii) fellép egyes molekulák, pl. CH_4 és I_2 esetében [50]. Bizonyos atomok, mint amilyen a He vagy a Ne, kevésbé polarizálhatók, potenciáljuk nagyrészt taszító és így nem alakulhatnak ki kötött állapotok. Más atomok viszont, mint az Ar vagy a Xe nem ilyenek (létezik Ar^- és Xe^- ion), hiszen az atomok polarizálhatósága nő a rendszámmal [52]. A példaként említett molekulák esetében a magyarázatot a nagy polarizálhatóság jelenti.

4.4.2. Példák hatáskeresztmetszetekre

A szóráselméleti rész zárásaként néhány példát mutatunk hatáskeresztmetszetre. Elsőként a 4.18.(a) ábra a rugalmas $e^- + \text{He}$ ütközések differenciális hatáskeresztmetszetét mutatja az elektronenergia különböző értékeire, (b) része pedig a folyamat teljes és momentum transzfer hatáskeresztmetszetét (az adatok [53] kvantummechanikai számításának eredményei).

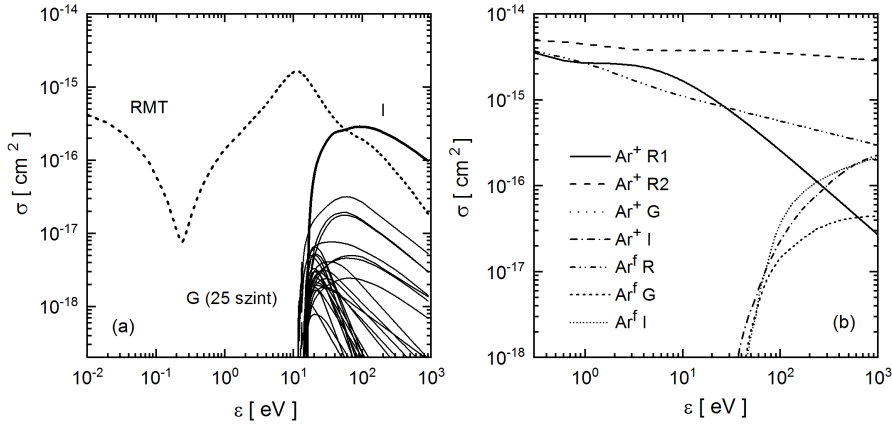


4.18. ábra. Elektron – He atom rugalmas ütközések differenciális hatáskeresztmetszete az energia függvényében (a), illetve a folyamat teljes és momentum transzfer hatáskeresztmetszete (b). (Az adatok forrása: [53].)

Megfigyelhetjük, hogy a differenciális hatáskeresztmetszet kis energiákon ($\epsilon \lesssim 10 \text{ eV}$) a nagyobb szórési szögek irányában növekszik, azaz a hátraszórás jelentősebb az előreszórásnál. Az elektron energiájának növekedésével ez az eloszlás „megfordul”, $\sim 20 \text{ eV}$ fölött kifejezett előreszórás figyelhető meg. A momentum transzfer hatáskeresztmetszet 4.82. szerinti alakjában az integrál alatt megjelenő $(1 - \cos \chi)$ faktor hátraszórás esetén egynél nagyobb értéket vesz fel, így a momentum transzfer hatáskeresztmetszet nagyobb értékű a teljes rugalmas hatáskeresztmetszethnél. Ez jó látható a 4.18.(b) ábrán a kis energiák tartományában. A szórás szög szerinti eloszlásának megváltozásával, dominánsan előre történő szórásnál $(1 - \cos \chi)$ egynél kisebbé válik, így a momentum transzfer hatáskeresztmetszet kisebbé válik a teljes rugalmas hatáskeresztmetszethnél.

A 4.1.1. fejezetben láttuk, hogy az elektron - atom ütközések során többfajta folyamat lejátszódhat, pl. argon gáz esetén rugalmas szórás, (különböző szintekre való) gerjesztés és ionizáció. Ezek bekövetkezésének valószínűsége az egyes folyamatok hatáskeresztmetszeteinek nagyságával arányos. Példaként, a 4.19.(a) ábra az $e^- + \text{Ar}$ ütközési folyamatok hatáskeresztmetszeteit mutatja az elektronenergia függvényében. A rugalmatlan folyamatok esetében jól megfigyelhetők a specifikus küszöbenergiák, a rugalmas szórás hatáskeresztmetszetében pedig a Ramsauer–Townsend-minimum. Az ábra (b) része az argon ionoknak és

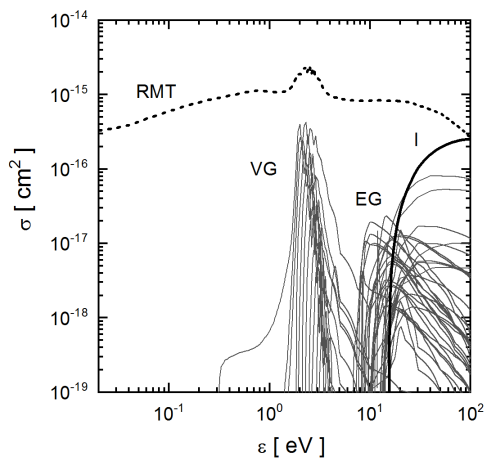
a gyors argon atomoknak a „háttér” Ar atomokkal való ütközéseinek hatáske-
resztmetszeteit szemlélteti.



4.19. ábra. (a) Elektron – Ar atom ütközések hatáske-
resztmetszetei; RMT: ru-
galmas momentum transzfer, G: gerjesztés (25 különböző szintre) és I: ionizáció,
[54] alapján. (b) Argon ionok (Ar^+) és gyors argon atomok (Ar^f) hatáske-
reszt-
metszetei Ar gázban; R1: rugalmas szórás izotróp része, R2: rugalmas hát-
raszórás (töltéscserélő ütközés), G: gerjesztés, I: ionizáció, R: gyors atomok
rugalmas szórása. (Az adatok forrásai: [55] és [56].)

Megjegyezzük, hogy míg elektronok esetében a rugalmatlan ütközések fontosak, sőt, az rugalmas ütközési hatáske-
resztmetszet csökkenése miatt elég nagy
energián ($\lesssim 100$ eV) a rugalmatlan folyamatok dominálnak, addig ionok ese-
tében ezen folyamatok legtöbb esetben elhanyagolhatóak, hiszen a megfelelő
rugalmas hatáske-
resztmetszetek több nagyságrenddel nagyobbak. Vegyük ész-
re azt is, hogy a kétféle rugalmas ütközés közül (izotróp szórás és anizotróp
„hátraszórás”) az anizotróp tag fog dominálni elég nagy energián.

Végül a 4.20.(a) ábra a nitrogén molekula elektronütközéses hatáske-
reszt-
metszeteit mutatja. A nemesgázokkal ellentétben itt fontos szerepet kap a vib-
rációs nívók gerjesztése, aminek a küszöbe lényegesen alacsonyabb az elektron-
átmeneteket eredményező ütközési folyamatokénál [5]. A vibrációs gerjesztések
maximumának megfelelő energián a momentum transzfer hatáske-
resztmetszet
lokális maximummal rendelkezik, melynek oka az elektron és nitrogénmolekula
közötti ún. rezonancia, melynek során az elektron „befogódhat”, így egy rövid
élettartamú kötött állapotot kialakítva [5].



4.20. ábra. Elektron – N_2 molekula ütközések hatáskeresztmetszetei; RMT: rugalmas momentum transzfer, VG: vibrációs átmenetek gerjesztése, EG: elektronátmenettel járó gerjesztések, I: ionizáció. (Az adatok forrása: [57].)

5. fejezet

A kinetikus elmélet alapjai

Az alábbi fejezetben bevezetjük a részecskék sokaságának leírására alkalmas eloszlásfüggvényt, illetve az erre vonatkozó kinetikus egyenletet (Boltzmann-egyenletet), ami az eloszlásfüggvény térbeli és időbeli fejlődését írja le. Ezután származtatjuk a Boltzmann-egyenlet momentumaiként ismert megmaradási egyenleteket, amelyek a hidrodinamikai transzportleírás alapegyenletei. Bemutatjuk a Boltzmann-egyenlet megoldását egy egyszerű esetre és végül a hidrodinamikai transzportra megadjuk a transzportegyütthatók definícióit.

5.1. A sebességeloszlás-függvény és a kinetikus egyenlet

Az eddigiekben elsősorban termikus egyensúlyban lévő rendszerekkel foglalkozunk. Ekkor, amint azt levezettük a 2.3. fejezetben, a részecskék eloszlását a fázistérben a Maxwell-Boltzmann eloszlás adta meg. Azonban az alacsony hőmérsékletű plazmák esetében (különösen az elektronoknál) ritkán van dolgunk termikus egyensúllyal. Az ilyen részecskék eloszlásfüggvénye ekkor nem lesz Maxwell-Boltzmann alakú. Ebben a fejezetben levezetjük azt az egyenletet, melynek megoldásával azonban megkapható a rendszer – adott esetben nem-egyensúlyi – eloszlásfüggvénye.

Emlékeztetőül (lásd a 2.3. fejezetet): egy részecsketípus (sebesség szerinti) eloszlásfüggvényét, $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ -t, úgy definiáltuk, mint a részecskék $\mathbf{r} = (x, y, z)$ és $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ hatdimenziós *fázistérén* értelmezett sűrűségfüggvényét, azaz valamely $\mathbf{r}$ és $\mathbf{v}$ koordináták környezetében lévő térfogatelemben található részecskék átlagos számát megkaphatjuk az alábbiak szerint¹:

$$dN = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v}. \quad (5.1)$$

¹Megjegyezzük, hogy az itt használt eloszlásfüggvényt valójában *egyrészecske-eloszlásfüggvénynek* kellene hívni. Az alacsony hőmérsékletű plazmafizikában legtöbb esetben ezt a függvényt használjuk, így gyakran elhagyjuk az előtagot. A K.8. kiegészítő részben nyújtunk rövid betekintést a részletekbe.

Ezt a teljes fázistérre integrálva megkapjuk a részecskék számát:

$$N = \int \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v}. \quad (5.2)$$

A sebességeloszlás-függvény ismeretében különböző fontos *makroszkopikus mennyiségeket* tudunk származtatni. Például:

– a sűrűség:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int f d^3\mathbf{v}, \quad (5.3)$$

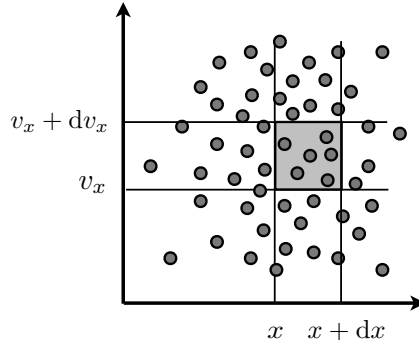
– a fluxus:

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = n\mathbf{u} = \int \mathbf{v} f d^3\mathbf{v}, \quad (5.4)$$

– és az energiasűrűség:

$$n_\varepsilon(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2}m \int v^2 f d^3\mathbf{v}. \quad (5.5)$$

A *kinetikus egyenlet* bevezetéséhez vizsgáljuk a részecskék mozgását egy, az 5.1. ábra szerinti egyszerűsített esetben, a kétdimenziós (x, v_x) fázistérben!



5.1. ábra. Részecskék a kétdimenziós (x, v_x) fázistér celláiban.

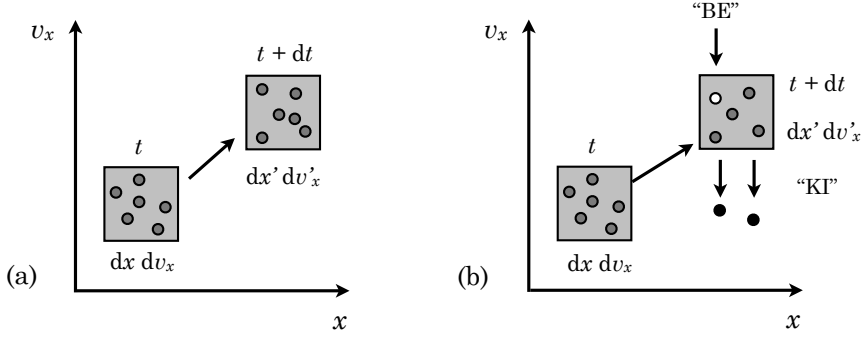
Tegyük fel, hogy minden részecskére azonos $(x$ irányú) $\mathbf{F}$ külső erő hat és, hogy nincsenek ütközések! Egy adott t időponthoz képest egy későbbi $t + dt$ időpillanatban a részecskék koordinátái (lásd 5.2.(a) ábra):

$$x'(t + dt) = x(t) + v_x dt, \quad (5.6)$$

$$v'_x(t + dt) = v_x(t) + a_x dt, \quad a_x = F/m. \quad (5.7)$$

Mivel a részecskék ugyanazok, ezért teljesülnie kell az alábbi egyenlőségnek (a részecskeszám megmaradásának):

$$f(x', v'_x, t + dt) dx' dv'_x = f(x, v_x, t) dx dv_x. \quad (5.8)$$



5.2. ábra. Részecskék elmozdulása a kétdimenziós (x, v_x) fázistér celláiban: (a) ütközésmentes eset, (b) ütközések hatása.

A fázistér térfogatelemeinek transzformációját a **J** *Jacobi-mátrix* segítségével kaphatjuk meg:

$$dx' dv'_x = |\mathbf{J}| dx dv_x, \quad (5.9)$$

ahol esetünkben:

$$\mathbf{J} = \frac{\partial(x', v'_x)}{\partial(x, v_x)} = \begin{vmatrix} \partial x' / \partial x & \partial v'_x / \partial x \\ \partial x' / \partial v_x & \partial v'_x / \partial v_x \end{vmatrix} = \frac{\partial x'}{\partial x} \frac{\partial v'_x}{\partial v_x} - \frac{\partial v'_x}{\partial x} \frac{\partial x'}{\partial v_x} = 1 + \mathcal{O}(dt^2),$$

azaz a térfogatelem nagysága dt első rendjében változatlan, ami azt jelenti, hogy időfüggetlen és az értéke 1. Ez az eredmény *Liouville-tétel* néven is ismeretes.² Az 5.8. egyenlet alapján ebből az következik, hogy

$$[f(x', v'_x, t + dt) - f(x, v_x, t)] dx dv_x = 0. \quad (5.10)$$

Az elmozdulás utáni állapotot jellemző $f(x', v'_x, t + dt)$ sebességeloszlás-függvényt dt -ben első rendig Taylor-sorba fejtvé:

$$\begin{aligned} f(x', v'_x, t + dt) &= f(x + v_x dt, v_x + a_x dt, t + dt) \\ &= f(x, v_x, t) + \frac{\partial f}{\partial t} dt + v_x \frac{\partial f}{\partial x} dt + a_x \frac{\partial f}{\partial v_x} dt \\ &= f(x, v_x, t) + \left[\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} + a_x \frac{\partial f}{\partial v_x} \right] dt. \end{aligned} \quad (5.11)$$

A fenti, 5.10. összefüggés alapján $f(x', v'_x, t + dt) = f(x, v_x, t)$, amiből az következik, hogy

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} + a_x \frac{\partial f}{\partial v_x} = 0, \quad (5.12)$$

²Megjegyezzük, hogy ez az eredmény általánosabb, Hamilton-függvénnyel rendelkező rendszerek esetén mindig fennáll. Szemléletes jelentése, hogy a részecskék által alkotott „fázisfolyadék” összenyomhatatlan [17, 21].

mely az *ütközésmentes Boltzmann-egyenlet*, a kinetikus elmélet alapegyenlete³ [58, 59]. Általános, hatdimenziós esetben az egyenlet az alábbi alakot ölti:⁴

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = \left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \right] f = 0. \quad (5.13)$$

Amennyiben a részecskék mozgásuk során ütközési folyamatokban is részt vesznek, akkor a fent kapott, a részecskék fázistérbeli áramlását leíró egyenlet kiegészítésre szorul. Az ütközések a fázistér cellák között ugrásokat eredményeznek (például egy gerjesztési folyamat esetén az elektron energiája (sebessége) „pillanatszerűen” lecsökken, így a részecske egy másik sebességvektornak megfelelő cellába „ugrik át”). Az ütközéseknek a sebességeloszlás-függvényre gyakorolt hatása a Boltzmann-egyenletben egy *ütközési taggal* vehető figyelembe, amely az egyenlet jobb oldalán jelenik meg:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \right] f = C[f]. \quad (5.14)$$

A fenti egyenletet sokszor egyszerűen *kinetikus egyenletnek* nevezik, a Boltzmann-egyenlet elnevezést pedig csak egy bizonyos ütközési tag esetén használják [60, 61]. A következő kiegészítő részben egy hosszabb bevezetést adunk a kinetikus egyenlet levezetéséről és alkalmazhatóságának feltételeiről.

K. 8: Több részecske-eloszlásfüggvények, korreláció és a BBGKY-hierarchia

A szövegben bemutatott kinetikus egyenlet csak akkor hasznos, ha a megfelelő ütközési tagot (ütközési integrált) is definiáljuk. A vizsgált rendszertől függően ez különböző lehet. Több kérdés is felmerülhet az Olvasóban: (i) Mindig alkalmazható-e ez a formalizmus, és ha nem, mik a korlátai? (ii) Teljes információnk van a rendszerről, ha tudjuk az eloszlásfüggvényt? (iii) Levezethető-e valamilyen mikroszkopikus leírásból a megfelelő ütközési integrál?

Ezen kérdések megválaszolásához emlékezzünk vissza arra, hogy mi volt az eloszlásfüggvény definíciója: $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3\mathbf{v} d^3\mathbf{r}$ megadja az $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ fázispont körüli részecskék átlagos számát. A függvény segítségével ki tudunk bizonyos makroszkopikus mennyiségeket számolni, amint azt fentebb megmutattuk; vannak azonban kivételek. Például, ha veszünk N töltött részecskét, a közöttük lévő Coulomb-kölcsönhatásból származó potenciális energia átlagát, ami függ a kölcsönhatásban lévő részecskék párok távolságától, nem tudjuk f segítségével megadni. Ehhez arról kellene információval rendelkezni, hogy mi annak a valószínűsége, hogy egy részecskepár egyik tagját az $\mathbf{r}_1$, míg másik tagját az $\mathbf{r}_2$ helyen találjuk.

³Megjegyezzük, hogy gyakran – helytelenül – a fenti egyenletet *Vlasov-egyenletnek* is nevezik. Utóbbi azonban különbözik a fenti egyenlettől, mivel ott a részecskékre ható erő az összes (töltött) részecske által keltett önkonzisztens térből származik.

⁴A térkoordinátákra vett gradiens-operátort index nélkül használjuk (∇), csak a sebességre vonatkozó $\nabla_{\mathbf{v}}$ gradiens-operátorban használjuk a „ $\mathbf{v}$ ” megkülönböztető indexet.

Általánosan bevezetve tehát egy f_2 függvényt, ahol

$$f_2(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{v}_1 d^3\mathbf{v}_2 \quad (5.15)$$

megadja azon részecskepárok átlagos számát, ahol az első részecske az $(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1)$ fázistérbeli pont környezetében, míg a második részecske az $(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2)$ pont környezetében található. Ezt a függvényt *két részecske-eloszlásfüggvénynek* nevezzük, és az alábbi normálást alkalmazzuk:

$$\int f_2(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{v}_1 d^3\mathbf{v}_2 = N(N-1). \quad (5.16)$$

Figyeljük meg, hogy a normálás megkülönbözteti a részecskéket (hiszen N részecske esetén csak $\binom{N}{2} = N(N-1)/2$ párt tudunk alkotni). Ekkor, két (azonos q töltésű) részecske között a potenciál $\phi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$, aminek átlaga

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{2} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} f_2(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{v}_1 d^3\mathbf{v}_2 \quad (5.17)$$

lesz. Az eloszlásfüggvényeket általánosíthatjuk tetszőleges $k \leq N$ -re, ahol f_N , az N -*részecske eloszlásfüggvény*, amely a normálásától eltekintve megegyezik a 2.3 fejezetben bemutatott fázistérbeli eloszlásfüggvénnyel. A normálás jelen esetben $\int f_N d\Gamma = N!$, ahol $d\Gamma$ a teljes fázistérbeli térfogatelem (lásd a 2.94 egyenletet). Ebből az eloszlásfüggvényből aztán minden $k < N$ eloszlásfüggvényt kiszámíthatunk az alábbiak szerint:

$$f_k = \int \prod_{i=k+1}^N f_N d^3\mathbf{r}_i d^3\mathbf{v}_i. \quad (5.18)$$

Az egyrészecske-eloszlásfüggvény, f_1 ezek alapján „minimális” információt nyújt a rendszerről, abban az értelemben, hogy az ún. *korrelációkat* teljesen elhanyagolja. Ha két részecske között nincs korreláció, akkor teljesen függetlenek egymástól, egyiknek nincs befolyása a másik mozgására. Ha pl. kemény gömbök rendszerét tekintjük, ahol a részecskék csak akkor hatnak kölcsön, ha érintkeznek, úgy amennyiben két részecske elég közel van egymáshoz, a köztük lévő korreláció nem nulla. Ebben az esetben f_1 nem ad elég információt a rendszerről. Általánosan, amennyiben két részecske között nincs korreláció, úgy

$$f_2(\bar{1}, \bar{2}) = f_1(\bar{1})f_1(\bar{2}), \quad (5.19)$$

ahol $\bar{1}$ és $\bar{2}$ az 1-es és 2-es részecske fázistérbeli pontját rövidíti. Amennyiben a korrelációkat is figyelembe vesszük, úgy

$$f_2(\bar{1}, \bar{2}) = f_1(\bar{1})f_1(\bar{2}) + g_2(\bar{1}, \bar{2}), \quad (5.20)$$

ahol bevezettük a g_2 kétrészecske-korrelációs függvényt [60].

Kiderül, hogy az N -részecske eloszlásfüggvényre a mikroszkopikus dinamikát ismerve (vagyis tudva a rendszer Hamilton-függvényét), egy egzakt egyenletet írhatunk fel f_N időfejlődésére, amit *Liouville-egyenletnek* hívnak [17, 18, 60]. Ezt integrálva az 5.18. egyenlet alapján egy N egyenletből álló integrodifferenciálegyenlet-rendszert kapunk, amit *BBGKY-hierarchiának* hívnak (az ezzel foglalkozó kutatók neveinek kezdőbetűi alapján: Born-Bogoljubov-Green-Kirkwood-Yvonne) [58, 60, 61]. Az egyenletrendszer bonyolultsága miatt itt mi csak a $k = 1$ esetre szorítkozunk:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} f_1 + \frac{\mathbf{F}_1}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}_1} f_1 \\ = - \int \frac{\mathbf{F}_{12}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}_1} f_2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) d^3 \mathbf{r}_2 d^3 \mathbf{v}_2 \end{aligned} \quad (5.21)$$

ahol $\mathbf{F}_1$ az egy részecskére ható külső erő, míg $\mathbf{F}_{12}$ a részecskepárok közötti kölcsönhatásból adódó erő (mint pl. Coulomb-kölcsönhatás). Láthatjuk, hogy az egyenlet csatolt (ami igaz minden más $k > 1$ esetén is), azaz az egyenlet jobb oldalán megjelenik az eggyel magasabb rendű eloszlásfüggvény. Ennek fizikai oka az, hogy az egyenlet bal oldala f_k esetén egy adott k részecskéből álló „kitüntetett” csoportot tekint, a jobb oldalon pedig megjelennek az ebbe a csoportba nem tartozó $N - k$ darab részecske és a kitüntetett részecskék közötti kölcsönhatások. Specifikusan $k = 1$ esetén a fenti egyenlet bal oldala megegyezik az ütközésmentes Boltzmann-egyenlet bal oldalával, míg a jobb oldal írja le a párok közötti kölcsönhatást.

A fenti egyenletet kinetikus egyenletté akkor tudjuk alakítani, ha a jobb oldalt kifejezzük f_1 -gyel, ezzel zárt egyenletet kapva. Ennek módja függ a vizsgált rendszertől: a két leggyakrabban tekintett eset a (i) híg gáz (ahol a gáz n sűrűsége és az ütközések d hatótávolságára igaz, hogy $nd^3 \ll 1$), illetve a (ii) töltött részecskéből álló plazma (ami közel ideális, azaz a csatolási paraméterre (lásd az 1. fejezetben) igaz, hogy $\Gamma \ll 1$). Az első esettel bővebben foglalkozunk a későbbiekben, a másodikkal azonban csak a poros plazmák esetében (lásd a 11. fejezetet), mivel az alacsony hőmérsékletű plazmák esetében a Coulomb-kölcsönhatásnak általában kisebb a szerepe mint a töltött-semleges ütközéseknek. Csupán a következőket jegyezzük meg: (i) amennyiben feltesszük, hogy nincs korreláció a részecskék között, úgy az ún. *Vlaszov-egyenletet* kapjuk meg, amely 5.13. alakú, azzal a különbséggel, hogy a részecskére ható erő az általuk önkonzisztens módon keltett elektromos térből származik (amely így a K.3. részben látott átlagtér-elmélet, valamint a K.4. részbeli dielektromos függvény nemegyensúlyi általánosítása [58, 59, 61]). Megjegyezzük azt is, hogy a Vlaszov-egyenlet „hivatalosan” nem minősül

kinetikus egyenletnek, amelynek egyik jellegetessége, hogy irreverzibilis, azaz olyan megoldásai vannak, amelyek időben nem megfordíthatók. A Vlaszov-egyenlet ütközésmentes plazmák esetén alkalmazható (vagyis $\omega \gg \nu$ esetén, ahol az elektromágneses terek időbeli változását leíró ω frekvencia sokkal nagyobb mint a ν ütközési frekvencia (ahol most Coulomb-ütközésekről beszélünk)). (ii) A részecskék közötti Coulomb-kölcsönhatást perturbációs számítás segítségével figyelembe lehet venni, amely egy olyan ütközési integrált eredményez, amiben megjelenik az irreverzibilitás. A perturbációs számítás alkalmazásának jogossága abból adódik, hogy a Coulomb-kölcsönhatás nagy hatótávolsága miatt a nagy ütközési paraméterrel rendelkező ütközések (melyek kis szögeltérüléssel járnak) száma sokkal nagyobb, mint a nagy szögeltérülést okozó ütközések (ahogyan ezt a 4.3.5. fejezetben láttuk). Az ebből adódó egyenletet Landau-egyenletnek nevezzük [58, 60]. Az ebben az ütközési integrálban előforduló divergenciák eltüntetésével, amely a Coulomb-kölcsönhatás 3. fejezetben látott árnyékolását is figyelembe veszi, eljuthatunk az eggyel pontosabb, ún. Balescu–Lenard-egyenlethez [60]. Mivel az alacsony hőmérsékletű plazmafizikában a töltött-semleges ütközések a fontosak, ezen egyenletek nem fordulnak elő, azonban a fúziós plazmafizika alapját képezik. Az érdeklődő Olvasónak ajánljuk a [13, 58, 60] könyveket.

A következő kiegészítő részben röviden áttekintjük a Boltzmann-egyenlet levezetéséhez szükséges feltételeket és a megfelelő ütközési integrált.

K. 9: A Boltzmann-egyenlet alkalmazhatóságának feltételei és a Boltzmann-féle ütközési integrál

Az előző kiegészítő részben említettük, hogy a Boltzmann-egyenlet *híg gázok* nemegyensúlyi folyamatait írja le. A híg gáz ebben az esetben az $nd^3 \ll 1$ feltételt foglalja magában, ahol d a részecskék közötti kölcsönhatás hatótávolsága (amely általában néhány Angström). Amennyiben ez a feltétel igaz, úgy a gáزرészecskék nagyrészt szabadon mozognak, és csak „esetenként” változtatják meg a pályájukat más részecskékkel való ütközések következtében. A szabad mozgás átlagos hosszát a már látott közepes szabad úthosszal (λ) jellemezzük. Híg gázok esetében $\lambda \gg d$. Az előző részben említett korreláció csak a részecskék ütközése alatti időben nem nulla. Emiatt, amennyiben olyan tér- és időskálákat vizsgálunk, amelyek sokkal nagyobbak mint az ütközések átlagos ideje és hatótávolsága, feltehetjük, hogy (i) a részecskék korrelálatlanok [58, 60] és (ii) az ütközések pontszerűek (tehát ugyanabban a pontban történnek) és pillanatszerűek. Fontos, hogy a Boltzmann-egyenlet *bináris* ütközéseket ír le: az egyszerre kettőnél több részecske közötti ütközések valószínűsége a gáz híg volta miatt elhanyagolható. Megjegyezzük, hogy a bináris ütközések és az ütközések pontszerűségének feltételén túl lehet

lépni a BBGKY-hierarchia alapján, a megfelelő egyenletek azonban felettébb bonyolultnak bizonyulnak [58].

A Boltzmann-féle ütközési integrált a fentiek alapján le tudjuk vezetni. Tételezzük fel, hogy csak rugalmas ütközések vannak a részecskék között (ez igaz lesz alacsony hőmérsékletű plazmák esetén ha az átlagenergia elég alacsony). Ekkor vegyük a $\mathbf{v}$, $\mathbf{v}_1$ kezdeti és $\mathbf{v}'$, $\mathbf{v}'_1$ végállapotú sebességekkel leírt ütközést. Az $f(\mathbf{v})$ eloszlásfüggvény megváltozását az ütközések következtében a fő szövegben mutatott módszerrel kaphatjuk meg: minden rugalmas ütközés, amely megváltoztatja a $\mathbf{v}$ sebességet, csökkenti f -et. Az ilyen ütközések száma:

$$f(\mathbf{v})d^3\mathbf{v}f(\mathbf{v}_1)d^3\mathbf{v}_1|\mathbf{v}-\mathbf{v}_1|\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega, \quad (5.22)$$

ahol $f(\mathbf{v})d^3\mathbf{v}$ adja meg a bejövő részecskék sűrűségét, a többi tag pedig ezen részecskék ütközési frekvenciáját (tehát az egységnyi időre vonatkoztatott ütközések számát). Ugyanilyen kifejezést kapunk azon ütközésekre, amelyek növelik f -et, hiszen ezen pontosan a fenti rugalmas ütközés „megfordítottjai”. Felhasználva még, hogy egy rugalmas ütközésben a relatív sebesség nem változik, és az energia megmarad, majd integrálva, kapjuk a Boltzmann-féle ütközési integrált [25, 58, 61]:

$$C[f] = \int |\mathbf{v}-\mathbf{v}_1|\frac{d\sigma}{d\Omega}(f(\mathbf{v}')f(\mathbf{v}'_1)-f(\mathbf{v})f(\mathbf{v}_1))d^3\mathbf{v}_1d\Omega. \quad (5.23)$$

A fenti egyenlet láthatóan nem lineáris f -ben, amely miatt a Boltzmann-egyenlet egy nemlineáris integrodifferenciál-egyenletté válik a hatdimenziós fázistéren. Emiatt nagyon nehéz megoldani ezt az egyenletet. Megjegyezzük, hogy (i) ez az ütközési integrál irreverzibilis, azaz egy nem-egyensúlyi eloszlásfüggvénnyel leírt rendszer az idő múlásával egy egyensúlyi eloszlásba megy át. Ez bebizonyítható az entrópia időbeli növekedésével, amit a kinetikus elméletben a *H-tételnek* neveznek [37, 58, 60]. (ii) Kiderül, hogy az egyensúlyi eloszlásfüggvény (amely azonosan nulla ütközési integrált eredményez) maga a Maxwell-Boltzmann-eloszlás [37, 60]. Végük megjegyezzük még, hogy a fenti integrál rugalmatlan ütközésekre is általánosítható, ezzel azonban itt nem foglalkozunk [37, 44].

A Boltzmann-egyenlet megoldása általános esetben nehéz feladat. Emiatt az egyenlet megoldását az 5.4. fejezetben csak egy igen egyszerű esetre adjuk meg. Előzőleg viszont még tárgyaljuk az ún. *momentumegyenletek* származtatását, amelyek fontos szerepet kapnak a transzportfolyamatok értelmezésében, a plazmák folyadékmodelljeiben és a plazmahullámok leírásánál.

5.2. A Boltzmann-egyenlet momentumai

Láttuk, hogy a plazmát jellemző makroszkopikus mennyiségek (pl. sűrűség, fluxus) kiszámíthatók az f sebességeloszlás-függvény ismeretében, ami a Boltzmann-egyenlet megoldásával kapható meg. A következőkben megmutatjuk, hogy a Boltzmann-egyenletből, annak megoldása nélkül is származtathatók a makroszkopikus mennyiségekre vonatkozó egyenletek [45, 62]. Ezeket az ún. „*momentumegyenleteket*” úgy állítjuk elő, hogy az 5.14. egyenletet a sebesség különböző hatványait tartalmazó $Z(\mathbf{v})$ függvénnyel szorozzuk, majd a sebességtérre integráljuk:⁵

$$\int Z(\mathbf{v}) \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f \right] d^3\mathbf{v} = \int Z(\mathbf{v}) C[f] d^3\mathbf{v}. \quad (5.24)$$

Az alábbiakban az 5.24. egyenlet bal oldalán álló integrál három tagjának kiszámításával foglalkozunk. Ehhez szükségünk lesz egyes fizikai mennyiségeknek a sebességtérben vett átlagértékére, ami valamely $\mathcal{A}(\mathbf{v})$ függvény esetén az

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \frac{\int \mathcal{A}(\mathbf{v}) f d^3\mathbf{v}}{\int f d^3\mathbf{v}} = \frac{1}{n} \int \mathcal{A}(\mathbf{v}) f d^3\mathbf{v} \quad (5.25)$$

módon adható meg. Az 5.24. egyenlet első tagja, kihasználva a sebesség szerinti integrálás és az idő szerinti deriválás sorrendjének felcserélhetőségét:

$$T_1 = \int Z \frac{\partial f}{\partial t} d^3\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial t} \int Z f d^3\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial t} (n \langle Z \rangle). \quad (5.26)$$

A második tag:

$$\begin{aligned} T_2 &= \int Z \mathbf{v} \cdot \nabla f d^3\mathbf{v} \\ &= \nabla \cdot \left(\int Z \mathbf{v} f d^3\mathbf{v} \right) - \int f \mathbf{v} \cdot \nabla Z d^3\mathbf{v} - \int f Z \nabla \cdot \mathbf{v} d^3\mathbf{v}. \end{aligned} \quad (5.27)$$

A ∇Z -t és $\nabla \cdot \mathbf{v}$ -t tartalmazó integrálok értéke nulla, ugyanis Z és $\mathbf{v}$ nem függenek a helykoordinátáktól. Ebből adódóan:

$$T_2 = \nabla \cdot \left(\int Z \mathbf{v} f d^3\mathbf{v} \right) = \nabla \cdot (n \langle Z \mathbf{v} \rangle). \quad (5.28)$$

Az 5.24. egyenlet harmadik tagja:

$$\begin{aligned} T_3 &= \int Z \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f d^3\mathbf{v} \\ &= \int \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (Z \mathbf{a} f) d^3\mathbf{v} - \int f \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} Z d^3\mathbf{v} - \int f Z \nabla_{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{a} d^3\mathbf{v}. \end{aligned} \quad (5.29)$$

⁵A következőkben, amennyiben másként nem jelöljük, az integrálás mindig a teljes sebességtérre vonatkozik.

Ennek utolsó tagja nulla, ugyanis $\mathbf{a} = \mathbf{F}/m$ és az erő független a sebességtől (így $\nabla_{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{a} \equiv 0$).⁶ Az első tag három integrál összege:

$$\int \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (Z\mathbf{a}f) d^3\mathbf{v} = \sum_i \int \frac{\partial}{\partial v_i} (a_i Zf) dv_x dv_y dv_z \quad (i = x, y, z). \quad (5.30)$$

Példaként az x komponenst tekintve:

$$\int \frac{\partial}{\partial v_x} (a_x Zf) dv_x dv_y dv_z = \int \left[(a_x Zf) \right]_{v_x=-\infty}^{v_x=+\infty} dv_y dv_z = 0, \quad (5.31)$$

ugyanis végtelenhez tartó sebesség esetén a sebességeloszlás-függvény nullához kell, hogy tartson. Mivel a másik két koordinátára ugyanez igaz, ezért

$$T_3 = -\frac{n}{m} \langle \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} Z \rangle. \quad (5.32)$$

5.2.1. Részecskemérleg

A 0. momentumként előálló *részecskemérleg-egyenletet*, vagy *folytonossági egyenletet* $Z(\mathbf{v}) = 1$ helyettesítéssel kapjuk meg. Ekkor:

$$\begin{aligned} T_1 &= \frac{\partial}{\partial t} (n \langle Z \rangle) = \frac{\partial n}{\partial t} \\ T_2 &= \nabla \cdot (n \langle Z\mathbf{v} \rangle) = \nabla \cdot (n\mathbf{u}) = \nabla \cdot \mathbf{\Gamma} \\ T_3 &= -\frac{n}{m} \langle \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} Z \rangle = 0 \end{aligned}$$

A tagokat összeadva adódik a folytonossági egyenlet:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma} = 0, \quad (5.33)$$

melynek általános alakja források (S) és nyelők (L) jelenlétében:⁷

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma} = S - L. \quad (5.34)$$

⁶Itt feltételeztük, hogy nincs jelen mágneses tér, de a következtetések $B \neq 0$ esetben is érvényesek maradnak.

⁷ S és L az egységnyi térfogatban egységnyi idő alatt keletkező és eltűnő részecskék száma. Példaként, a folytonossági egyenlet az elektronokra egy olyan esetre, amikor az $e^- + X \rightarrow 2e^- + X^+$ ionizációs folyamat jelenti a részecskék forrását és az $e^- + X^+ \rightarrow X$ rekombinációs folyamat jelenti a részecskék veszteségét:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_e = S - L = \left(\frac{\partial n_e}{\partial t} \right)^+ - \left(\frac{\partial n_e}{\partial t} \right)^- = k_{\text{ion}} n_e n_0 - k_{\text{rec}} n_e n_i,$$

ahol n_0 a háttérgáz sűrűsége, k_{ion} és k_{rec} az ionizációs és a rekombinációs folyamatok sebességi állandói.

5.2.2. Impulzusmérleg

A 1. momentumként adódó *impulzusmérleg-egyenlet* $Z(\mathbf{v}) = m\mathbf{v}$ helyettesítéssel adódik. A fentihez hasonló eljárást követve:

$$\begin{aligned} T_1 &= \frac{\partial}{\partial t} \langle n \langle Z \rangle \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle mn \langle \mathbf{v} \rangle \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle mn \mathbf{u} \rangle = mn \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + m \mathbf{u} \frac{\partial n}{\partial t} \\ T_2 &= \nabla \cdot \langle n \langle Z \mathbf{v} \rangle \rangle = \nabla \cdot \langle mn \langle \mathbf{v} \mathbf{v} \rangle \rangle \\ T_3 &= -\frac{n}{m} \langle \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} Z \rangle = -n \langle \mathbf{F} \rangle \end{aligned}$$

Az itt kapott három tag közül a második további kifejtést igényel. Ehhez a sebességet felbontjuk az átlagsebesség és a termikus sebesség összegére: $\mathbf{v} = \mathbf{u} + \tilde{\mathbf{v}}$. Ezzel (mivel $\langle \tilde{\mathbf{v}} \rangle = 0$):

$$\nabla \cdot \langle mn \langle \mathbf{v} \mathbf{v} \rangle \rangle = \nabla \cdot \langle mn \mathbf{u} \mathbf{u} \rangle + \nabla \cdot \langle mn \langle \tilde{\mathbf{v}} \tilde{\mathbf{v}} \rangle \rangle, \quad (5.35)$$

melynek második tagjában a

$$\overline{\overline{\mathbf{P}}} = mn \langle \tilde{\mathbf{v}} \tilde{\mathbf{v}} \rangle \quad (5.36)$$

nyomástenzor jelenik meg, első tagja pedig:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \langle mn \mathbf{u} \mathbf{u} \rangle &= \frac{\partial}{\partial x} \langle mn u_x \mathbf{u} \rangle + \frac{\partial}{\partial y} \langle mn u_y \mathbf{u} \rangle + \frac{\partial}{\partial z} \langle mn u_z \mathbf{u} \rangle \\ &= mn \left(u_x \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} + u_y \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} + u_z \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} \right) + \mathbf{u} \left[\frac{\partial \langle mn u_x \rangle}{\partial x} + \frac{\partial \langle mn u_y \rangle}{\partial y} + \frac{\partial \langle mn u_z \rangle}{\partial z} \right] \\ &= mn (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \mathbf{u} [\nabla \cdot \langle mn \mathbf{u} \rangle] \end{aligned}$$

Az itt megjelenő második tag az 5.34. folytonossági egyenlet segítségével:

$$\mathbf{u} [\nabla \cdot \langle mn \mathbf{u} \rangle] = m \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{\Gamma} = m \mathbf{u} \left(S - L - \frac{\partial n}{\partial t} \right). \quad (5.37)$$

A fentiek alapján:

$$\begin{aligned} T_1 + T_2 + T_3 &= mn \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + m \mathbf{u} \frac{\partial n}{\partial t} + mn (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + m \mathbf{u} \left(S - L - \frac{\partial n}{\partial t} \right) + \nabla \cdot \overline{\overline{\mathbf{P}}} - n \langle \mathbf{F} \rangle \\ &= mn \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right)_c \end{aligned}$$

A továbbiakban feltételezzük, hogy a nyomástenzor viszkozitásból származó nem diagonális tagjai elhanyagolhatók⁸, valamint, hogy a nyomás izotróp⁹: így

⁸Ennek alkalmazhatósága függ attól, milyen rendszert tekintünk. Például gázok esetében a viszkozitásból származó tag vezet a Navier-Stokes egyenletekre [22, 61], ennek elhanyagolása az Euler-egyenleteket adja [22]. Belátható, hogy az alacsony hőmérsékletű plazmák esetén, ahol az ionizáció foka alacsony, emiatt az elektronok száma sokkal kisebb a háttérgáz részecskéinek számánál, a viszkozitás valóban elhanyagolható [37].

⁹A nyomás izotrópiája külső tér esetén nem feltétlenül teljesül [44].

$\nabla \cdot \bar{\mathbf{P}} \rightarrow \nabla p$. Mágnesestér-mentes esetet tekintve: $\mathbf{F} = q\mathbf{E}$. Ezekkel a fenti egyenlet:

$$mn \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] = nq\mathbf{E} - \nabla p - m\mathbf{u}(S - L) + mn \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right)_c. \quad (5.38)$$

Az egyenlet bal oldalán a sebesség

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \quad (5.39)$$

konvektív deriváltja szerepel, ami az $\mathbf{u}$ sebességgel, a közeggel együtt mozgó koordináta-rendszerben mért változást fejezi ki. Megjegyezzük, hogy a derivált második tagja a gázkisülések vizsgálatánál legtöbbször elhanyagolható.

Csak rugalmas ütközéseket tekintve, az azonos fajtájú részecskék közötti ütközések esetén az $mn(\partial \mathbf{u} / \partial t)_c$ ütközési tag nulla, mivel a két ütköző részecske impulzusának összege megmaradó mennyiség. Amennyiben különböző (α és β) fajtájú részecskék ütköznek (pl. elektron - atom ütközések), impulzusátadás megy végbe [37, 44]:

$$m_\alpha n_\alpha \left(\frac{\partial \mathbf{u}_\alpha}{\partial t} \right)_c = -m_\alpha n_\alpha \nu_{\alpha\beta} (\mathbf{u}_\alpha - \mathbf{u}_\beta), \quad (5.40)$$

ahol $\nu_{\alpha\beta}$ a momentum transzfer ütközési frekvencia, $\mathbf{u}_{\alpha,\beta}$ pedig a kétfajta részecske átlagos sebessége. Ha az α -fajtájú részecske többféle, „cél tárgyként” jelenlévő részecskével ütközhet, akkor ezekre a folyamatokra az impulzusvesztést összegezni kell. Elektron - atom ütközésekben speciális esetet jelent, amikor a gázatomokat állónak tételezzük fel; ekkor $\mathbf{u}_\beta = 0$ és

$$mn \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right)_c = -mn\nu_m \mathbf{u}, \quad (5.41)$$

ahol m és $\mathbf{u}$ az elektronok tömege és átlagsebessége. (A momentum transzfer ütközési frekvenciát itt ν_m jelöli). Megjegyezzük, hogy az 5.38. egyenletből látható módon az egyes folyamatokban újonnan keletkező, illetve elvesző részecskék is hozzájárulhatnak az impulzus megváltozásához.

A 2.3. fejezetben bevezetett *Boltzmann-faktor* egyszerű módon származtatható az impulzusról egyenletből. *Stacionárius, izotermikus, forrás-, veszteség- és ütközésmentes* rendszert feltételezve (valamint a konvektív derivált második tagját elhanyagolva), az 5.38. egyenlet az alábbi egyszerű alakot ölti:

$$nq\mathbf{E} - \nabla p = nq\mathbf{E} - k_B T \nabla n = 0. \quad (5.42)$$

Egydimenziós esetet tekintve:

$$\frac{dn(x)}{n(x)} = \frac{q}{k_B T} E(x) dx, \quad (5.43)$$

melynek integrálásával

$$\ln \left[\frac{n(x)}{n(0)} \right] = -\frac{q}{k_B T} [\phi(x) - \phi(0)] \quad (5.44)$$

adódik. A potenciál értékét az $x = 0$ „referenciapozícióban” (ahol a részecskesűrűség $n(0)$) nullának véve, a töltött részecskék térbeli sűrűségeloszlására a következőt kapjuk:

$$n(x) = n(0) \exp\left(-\frac{q\phi(x)}{k_B T}\right). \quad (5.45)$$

Ez az összefüggés tehát (a fenti feltételek teljesülése esetén) az elektromos tér és a nyomásgradiens egyensúlyából következik.

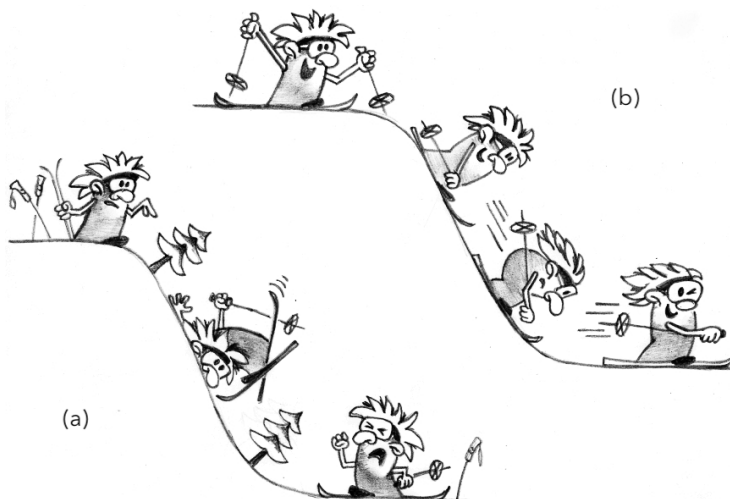
5.2.3. Energiamérleg

A 2. momentumegyenletet, az *energiamérleg-egyenletet* $Z(\mathbf{v}) = mv^2/2$ helyettesítéssel kaphatjuk meg. Az egyes tagok kiszámítását [37, 45] itt nem részletezzük, a mérlegegyenlet általános alakjára az alábbi adódik:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} p \right) + \nabla \cdot \left(\frac{3}{2} p \mathbf{u} \right) + p \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{q} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} p \right)_c - \mathbf{u} \cdot mn \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right)_c + mu^2 (S - L)/2. \end{aligned} \quad (5.46)$$

Az egyenlet bal oldalának első tagja az energiasűrűség változását fejezi ki ($3p/2 = mn\langle v^2 \rangle/2$). A további tagok sorra a konvekcióval, a kompresszió/expanszió hatásával, valamint a hővezetéssel kapcsolatosak. Az egyenlet jobb oldalán az első tag az energiasűrűségnek az ütközések hatására fellépő változását adja meg, a további két tag az impulzuserő-egyenlet és a folytonossági egyenlet ütközési tagjaiból származik.

A momentumegyenleteket gyakran *folyadékgyenleteknek* is nevezik, hiszen a hidrodinamikából ismert egyenletekre nagyon hasonlítanak. Elviekben végtelen sok momentumegyenletet tudunk felállítani, ezek összessége ekvivalens a Boltzmann-egyenlettel. Érdekes módon, a K.8. részben látott BBGKY-hierarchiához hasonló módon minden egyenletben van egy olyan tag, amelyet a következő mérlegegyenlet ír le. Emiatt csak akkor kapunk zárt egyenletrendszert, ha az egyenleteket valahol lezárjuk. Ez azt jelenti, hogy azon fizikai mennyiséget, amely csak a következő egyenlettel lehetne leírni (mint pl. a nyomás az első momentumegyenletben vagy a hőáram-vektor a másodikban), kifejezzük azon mennyiségekkel, amelyekre vannak egyenleteink. Ezt sokféleképpen lehet megtenni, általában az adott rendszertől függő módon [63]. Létezik a Boltzmann-egyenletből perturbációszámítással levezethető változata is ennek a módszernek, melyből az egyik legismertebb az ún. Chapman-Enskog módszer [61, 64]. Itt ezzel nem foglalkozunk, csak mint érdekesség említjük meg.



5.3. ábra. Az egyensúlyi (a) és nemegyensúlyi (b) transzport illusztrációja. (Bánó Gergely rajza.)

A plazma folyadékegyenletekkel történő leírása általában akkor pontos, ha a részecskék átlagos szabad úthossza és átlagos ütközési ideje sokkal kisebb mint az általunk vizsgálni kívánt folyamat hossz- és időskálája. Másképp fogalmazva, ha a megfelelő fizikai mennyiségek (sűrűség, sebesség, stb.) keveset változnak az átlagos szabad úthossz és átlagos repülési idő skáláján, a folyadékkép alkalmazható. Ellenkező esetben a kinetikus egyenlet megoldása válik szükségessé, és a rendszert csak a hatdimenziós fázistérben tudjuk megfelelően leírni. Ezt illusztrálja az 5.3 ábra is; megjegyezzük, hogy a folyadékegyenletek alkalmazhatóságának esetén egyensúlyi, ellenkező esetben nemegyensúlyi transzportról beszélhetünk.

5.3. Diffúzió és mozgékonyság

Általánosságban elmondható, hogy amennyiben nemegyensúlyi folyamatról beszélünk, ahol az egyensúlytól való eltérés mértéke nem túl nagy, úgy a fizikai mennyiségek fluxusait, amelyek egyensúlyban nullák lennének (pl. részecskeáram, hőáram, stb), a nemegyensúlyi helyzetben a fizikai mennyiségek térbeli gradienseinek soraként tudjuk felírni, ahol legtöbbször csak az első tagot hagyjuk meg [22, 34]. A megfelelő arányossági tényezőket nevezzük *transzport-együtthatóknak* [17]. Ezekre példa a Fourier-törvény alapján definiált hővezetési együttható, $\mathbf{q} = -\kappa \nabla T$, vagy a diffúziós együttható, $\mathbf{\Gamma} = -D \nabla n$. Ezek definiálhatóságának akkor van értelme, ha a folyadékegyenletek használhatók (ezt hidrodinamikai transzportnak is nevezik) [44]. Itt csak néhány egyszerű esetet tekintünk át. Részletekért lásd a fent hivatkozott könyveket.

Az impulzusmérleg-egyenletből fontos transzportjellemzők származtathatók. Az 5.38. egyenlet alakja stacionárius esetre (az inerciális, azaz a konvektív deriválttal arányos tag elhagyásával, illetve az ütközési impulzusvesztesség 5.41. szerinti alakjának behelyettesítésével):

$$nq\mathbf{E} - \nabla p - mn\nu_m\mathbf{u} = 0.$$

Itt feltételezzük, hogy az ütközési frekvencia állandó és független a sebességtől. Izotermikus rendszert tekintve $\nabla p = k_B T \nabla n$ és így a fenti egyenletből a sebességet kifejezve az alábbi összefüggéshez jutunk:

$$\mathbf{u} = \frac{q}{m\nu_m} \mathbf{E} - \frac{k_B T}{m\nu_m} \frac{\nabla n}{n}. \quad (5.47)$$

Ez alapján a részecskék $\mathbf{\Gamma} = n\mathbf{u}$ fluxusa az alábbi „drift-diffúziós” alakban adható meg:

$$\mathbf{\Gamma} = \pm \mu n \mathbf{E} - D \nabla n \quad (5.48)$$

ahol

$$\mu = \frac{|q|}{m\nu_m} \quad (5.49)$$

a mozgékonyaság és

$$D = \frac{k_B T}{m\nu_m} \quad (5.50)$$

a diffúziós együttható, melyek fontos transzportparaméterek. A két együttható közötti kapcsolatot az *Einstein-összefüggés* fejezi ki:¹⁰

$$\frac{D}{\mu} = \frac{k_B T}{|q|}. \quad (5.51)$$

5.3.1. Szabad diffúzió

Amennyiben nincs jelen elektromos tér, a részecskék fluxusára nézve az 5.48. egyenlet alapján a

$$\mathbf{\Gamma} = -D \nabla n, \quad (5.52)$$

összefüggéshez jutunk, ami *Fick-egyenlet* néven ismert. Ezt az 5.34. folytonossági egyenletbe behelyettesítve adódik a diffúziós egyenlet:

$$\frac{\partial n}{\partial t} - D \nabla^2 n = S - L, \quad (5.53)$$

melynek megoldásával a részecskék sűrűségeloszlása, a források (S) és veszteségek (L) ismeretében, a hely és az idő függvényében meghatározható.

¹⁰Ez az összefüggés csak T hőmérsékletű egyensúly esetében érvényes. Pl. nagy nyomáson, ahol az ionok eloszlása közel van az egyensúlyihoz, az Einstein-összefüggés igaz lesz. Megjegyezzük, hogy elektronok esetében bevezethető ezen összefüggés általánosítása is [44].

5.3.2. Ambipoláris diffúzió

Egy olyan véges méretű rendszerben, ahol ellentétes töltésű részecskék (pl. elektronok és pozitív ionok) együtt vannak jelen, a térbeli sűrűségeloszlásuk (pl. diffúzió miatti) változása olyan elektromos teret hoz létre, ami „igyekszik” az ellentétes töltésű részecskéket együtt tartani és *kiegyenlíti a fluxusukat*.¹¹ Tegyük fel, hogy a rendszer kvázisemleges, azaz $n_e \cong n_i = n$. Az elektronok és az ionok fluxusa:

$$\mathbf{\Gamma}_e = -\mu_e n \mathbf{E} - D_e \nabla n, \quad (5.54)$$

$$\mathbf{\Gamma}_i = \mu_i n \mathbf{E} - D_i \nabla n, \quad (5.55)$$

ahol a transzportegyütthatók „e” és „i” indexei az elektronokra és az ionokra utalnak.

A fluxusok egyenlősége ($\mathbf{\Gamma}_i = \mathbf{\Gamma}_e = \mathbf{\Gamma}$) az alábbira vezet:

$$-\mu_e n \mathbf{E} - D_e \nabla n = \mu_i n \mathbf{E} - D_i \nabla n. \quad (5.56)$$

Ebből az egyenletből kiszámítható az $\mathbf{E}$ *ambipoláris térerősség*:

$$\mathbf{E} = \frac{D_i - D_e}{\mu_i + \mu_e} \frac{\nabla n}{n}, \quad (5.57)$$

amelynek értékét a fluxusokra vonatkozó egyenletekbe behelyettesítve:

$$\mathbf{\Gamma} = -\frac{D_i \mu_e + D_e \mu_i}{\mu_e + \mu_i} \nabla n. \quad (5.58)$$

A fluxus és a sűrűséggradiens közötti arányossági tényező az eredő, vagy *ambipoláris diffúziós együttható*:

$$D_a = \frac{D_i \mu_e + D_e \mu_i}{\mu_e + \mu_i}, \quad (5.59)$$

ahol felhasználtuk, hogy a fluxus egyszerűen megadható a Fick-törvény alapján, $\mathbf{\Gamma} = -D_a \nabla n$. Mivel az elektronok mozgékonyasága lényegesen nagyobb az ionokénál, ezért

$$D_a \approx D_i + \frac{\mu_i}{\mu_e} D_e, \quad (5.60)$$

továbbá az Einstein-összefüggést felhasználva:

$$D_a \approx D_i \left(1 + \frac{T_e}{T_i} \right), \quad (5.61)$$

¹¹Ez a jelenség akkor lép fel, amikor a töltött részecskék sűrűsége elég nagy ahhoz, hogy az általuk keltett elektromos teret ne lehessen elhanyagolni. Ezt *tértöltés-effektusnak* is nevezzük. Ekkor nem csak a megfelelő folyadékegyenleteket kell megoldanunk a részecskékre, de a Poisson-egyenletet is. Emiatt ambipoláris diffúzió csak olyan esetekben jöhet létre, ahol tértöltés-effektusok vannak [30, 58].

azaz az ambipoláris diffúzió sebessége az ionok diffúziós állandójához kötött, de az ionok szabad diffúziójánál lényegesen gyorsabb, ugyanis alacsony hőmérsékletű plazmákban az elektron-hőmérséklet tipikusan sokkal nagyobb az ion-hőmérsékletnél, $T_e \gg T_i$. Az ambipoláris diffúziós együtthatóra kapott fenti összefüggés $D_i = \mu_i k_B T_i / q$ alapján a

$$D_a \approx \mu_i \frac{k_B T_e}{q} \quad (5.62)$$

alakba is írható.

5.4. A Boltzmann-egyenlet kéttag-közelítéses megoldása

A továbbiakban – az egyszerűség kedvéért – olyan rendszereket vizsgálunk, ahol eltekinthetünk a tértöltés-effektusoktól, azaz a részecskék külső elektromos térben úgy mozognak, hogy az általuk keltett elektromos tér elhanyagolható a külsőhöz képest. Szigorúan véve ezek a rendszerek nem minősülnek plazmának,¹² az angol nyelvű irodalomban „swarm”-nak nevezik őket.

Ha a Boltzmann-egyenletet (semleges) gázok esetére szeretnénk megoldani, általában valamilyen, perturbációs számításra alapuló módszert alkalmazhatunk, ahol az egyensúlyi Maxwell–Boltzmann-eloszlástól való kis eltérések hatványsoraként kereshetjük a megoldást [58, 61, 64]. Külső elektromos térben mozgó elektronok esetében azonban nincs egyensúly, emiatt a stacionárius eloszlásfüggvény nem biztos, hogy Maxwell–Boltzmann-féle lesz. Ebben az esetben a perturbációs sor felállítja az elektron és a vele ütköző gázatom tömege közötti nagy különbségére épít. Ahogyan a 4.2.1. fejezetben megmutattuk, rugalmas ütközések során az elektronok energiája alig változik, irányváltásuk azonban minden ütközés során nagy lesz. Ennek az lesz a következménye, hogy az elektronok átlagos sebességének nagysága (az elektromos tér irányában, az ún. *drift-sebessége*) sokkal kisebb lesz, mint a sebességük a véletlenszerű komponense. Ez vezet majd az eloszlásfüggvény *Legendre-polinomok szerinti sorfejtéséhez*, amit *multiterm-sorfejtésnek* nevezünk [37, 44, 65]. Amennyiben ebben a sorban csak az első két tagot tartjuk meg, úgy a *kéttag-közelítéshez* jutunk [66].

A Boltzmann-egyenlet az elektronokra felírva:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f - \frac{e}{m_e} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = C, \quad (5.63)$$

ahol e az elemi töltés és C az ütközési integrál. A következőkben azt az esetet tekintjük, amikor a térerősség iránya párhuzamos az x tengellyel, valamint *térben homogén és időben állandó*. Ebben az esetben a sebességeloszlás-függvény a sebességtérben szimmetrikus az x tengely körül és a v, θ, t, x változók függvényévé válik:

$$f = f(v, \theta, t, x),$$

¹²Gyakran $\lambda_D \rightarrow \infty$, azaz végtelen nagy Debye-hosszal rendelkező rendszereként hivatkoznak rájuk [63].

továbbá ennek megfelelően a Boltzmann-egyenlet az alábbi egyszerűbb alakot ölti:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{eE}{m_e} \frac{\partial f}{\partial v_x} = C, \quad (5.64)$$

ahol $v_x = v \cos \theta$. A problémához illeszkedő gömbi koordináta-rendszerben:¹³

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cos \theta \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{e}{m_e} E \left(\cos \theta \frac{\partial f}{\partial v} + \frac{\sin^2 \theta}{v} \frac{\partial f}{\partial \cos \theta} \right) = C. \quad (5.65)$$

A Boltzmann-egyenlet kéttag-közelítéses megoldásához a Legendre-polinomok szerinti sorfejtésének csak az első két tagját tekintjük, az eloszlásfüggvény egy izotróp és egy anizotróp részből áll:

$$f(v, \cos \theta, x, t) = f_0(v, x, t) + f_1(v, x, t) \cos \theta. \quad (5.66)$$

Ez a megközelítés természetesen csak akkor helytálló, ha az anizotrópia kicsi és a magasabb rendű tagok valóban elhanyagolhatók.¹⁴ A fenti függvényalakot az 5.65. Boltzmann-egyenletbe behelyettesítve az alábbiakat kapjuk:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f_0}{\partial t} + v \cos \theta \frac{\partial f_0}{\partial x} - \frac{eE}{m_e} \cos \theta \frac{\partial f_0}{\partial v} \\ & + \cos \theta \frac{\partial f_1}{\partial t} + v \cos^2 \theta \frac{\partial f_1}{\partial x} - \frac{eE}{m_e} \cos^2 \theta \frac{\partial f_1}{\partial v} - \frac{eE \sin^2 \theta}{m_e v} f_1 = C. \end{aligned} \quad (5.67)$$

Következő lépésként ezt az egyenletet, illetve $\cos \theta$ -val való szorzatát integráljuk $\cos \theta$ szerint a $[0, \pi]$ intervallumra. Ez az eljárás – a részletek mellőzésével – az alábbi két összefüggésre vezet:

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \frac{1}{3} v \frac{\partial f_1}{\partial x} - \frac{eE}{m_e} \frac{1}{3v^2} \frac{\partial v^2 f_1}{\partial v} = C_0, \quad (5.68)$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + v \frac{\partial f_0}{\partial x} - \frac{eE}{m_e} \frac{\partial f_0}{\partial v} = C_1. \quad (5.69)$$

A sebességről az $\varepsilon = m_e v^2/2$ energiára áttérve:

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \frac{\gamma}{3} \varepsilon^{1/2} \frac{\partial f_1}{\partial x} - \frac{\gamma}{3} \varepsilon^{-1/2} eE \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (\varepsilon f_1) = C_0, \quad (5.70)$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \gamma \varepsilon^{1/2} \frac{\partial f_0}{\partial x} - \gamma \varepsilon^{1/2} eE \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = C_1, \quad (5.71)$$

¹³Itt felhasználtuk a divergenciaképzés gömbi koordináta-rendszerbeli szabályát [49], ami szerint

$$\frac{\partial f}{\partial v_x} = \cos \theta \frac{\partial f}{\partial v} - \frac{\sin \theta}{v} \frac{\partial f}{\partial \theta}.$$

A láncszabályból adódó $\frac{\partial f}{\partial \theta} = -\sin \theta \frac{\partial f}{\partial (\cos \theta)}$ felhasználásával ez az 5.65. összefüggésre vezet. (Megjegyezzük továbbá, hogy az általános konvencióval ellentétben polártengelynek itt az x tengelyt vettük, de ez semmiben nem befolyásolja az eredményeket.)

¹⁴Ez a helyzet elég alacsony energián elektronok esetében, amikor a rugalmas ütközések a dominánsak. Megjegyezzük, hogy atomi gázok esetén ez az energiatartomány sokkal szélesebb, mint molekuláknál, ahol számos alacsony energiaküszöbű rugalmatlan folyamat létezik (ld. 4. fejezet) Részletekért lásd [67].

ahol $\gamma = \sqrt{2/m_e}$. Következő lépésként bevezetjük az alábbi normálást:

$$\tilde{f}(\varepsilon) = \frac{2\pi\gamma^3}{n} f(\varepsilon), \quad (5.72)$$

melynek köszönhetően

$$\int_0^\infty \tilde{f}(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = 1. \quad (5.73)$$

Az így normált

$$\tilde{f}_0(\varepsilon) = \frac{2\pi\gamma^3}{n} f_0(\varepsilon) \quad , \quad \tilde{f}_1(\varepsilon) = \frac{2\pi\gamma^3}{n} f_1(\varepsilon) \quad (5.74)$$

eloszlásfüggvényekre felírt 5.70. és 5.71. egyenletekben szereplő ütközési tagokat levezetés nélkül közöljük (lásd pl. [37, 68]). Feltételezve, hogy (i) csak rugalmas ütközések mennek végbe és (ii) a háttérgáz atomjai állónak tekinthetők, az $\tilde{f}_{0,1}$ függvényekre felírandó egyenletekben ezek:

$$\tilde{C}_0 = 2 \frac{m_e}{M} \varepsilon^{-1/2} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[\varepsilon^{3/2} \nu_{\text{el}}(\varepsilon) \tilde{f}_0(\varepsilon) \right], \quad (5.75)$$

$$\tilde{C}_1 = -\nu_{\text{el}}(\varepsilon) \tilde{f}_1(\varepsilon), \quad (5.76)$$

ahol

$$\nu_{\text{el}}(\varepsilon) = \gamma \varepsilon^{1/2} n \sigma_{\text{el}}(\varepsilon) \quad (5.77)$$

az ütközési frekvencia, $\sigma_{\text{el}}(\varepsilon)$ a rugalmas momentum transzfer hatáskeresztmetszet és M a gázatomok tömege. Ebből az alakból látszik, hogy az elektronok irány szerinti relaxációját (tehát annak a folyamatát melynek során egy elektron „elfelejti” a kezdeti irányát) az ütközési frekvencia írja le, míg az energia szerinti relaxációban megjelenik az m_e/M faktor, amely így sokkal kisebb lesz, mint az ütközési frekvencia. Ennek oka a fejezet elején említett tény, miszerint egy elektron egy ütközés során energiájának közelítőleg $m_e/M \ll 1$ -szeresét tudja elveszíteni. Szokás emiatt bevezetni az *energiarelatívus-frekvenciát* is, ami $\nu_\varepsilon = (m_e/M) \nu_{\text{el}}$ (pl. [69, 70]).

Az eloszlásfüggvény kiszámítását a legegyszerűbb, nulladimenziós és stationárius esetre végezzük el, amikor $\partial_x = 0$ és $\partial_t = 0$. Ekkor az 5.70. és az 5.71. egyenletek legegyszerűsödnek és az alábbi összefüggésekhez jutunk:

$$-\frac{\gamma}{3} \varepsilon^{-1/2} eE \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (\varepsilon \tilde{f}_1) = 2 \frac{m_e}{M} \varepsilon^{-1/2} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} [\varepsilon^{3/2} \nu_{\text{el}}(\varepsilon) \tilde{f}_0(\varepsilon)], \quad (5.78)$$

$$-\gamma \varepsilon^{1/2} eE \frac{\partial \tilde{f}_0}{\partial \varepsilon} = -\nu_{\text{el}}(\varepsilon) \tilde{f}_1(\varepsilon). \quad (5.79)$$

Az utóbbi egyenletből

$$\tilde{f}_1(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^{1/2} \gamma eE}{\nu_{\text{el}}(\varepsilon)} \frac{\partial \tilde{f}_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \quad (5.80)$$

adódik. Ezt az 5.78. egyenletbe behelyettesítve:

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[\frac{\gamma^2 (eE)^2}{3\nu_{\text{el}}(\varepsilon)} \varepsilon^{3/2} \frac{\partial \tilde{f}_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} + 2 \frac{m_e}{M} \varepsilon^{3/2} \nu_{\text{el}}(\varepsilon) \tilde{f}_0(\varepsilon) \right] = 0. \quad (5.81)$$

Ez az összefüggés az eloszlásfüggvény $\tilde{f}_0(\varepsilon)$ izotróp részére az alábbi differenciálegyenletre vezet:

$$\frac{\partial \tilde{f}_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = -\frac{3m_e^2}{Me^2E^2}\nu_{el}^2(\varepsilon)\tilde{f}_0(\varepsilon), \quad (5.82)$$

ami egyszerűen megoldható.¹⁵

Az izotróp tag ismeretében az $\tilde{f}_1(\varepsilon)$ anizotróp tag is meghatározható az 5.80. összefüggés alapján:

$$\tilde{f}_1(\varepsilon) = -\frac{3\gamma m_e^2}{MeE}\varepsilon^{1/2}\nu_{el}(\varepsilon)\tilde{f}_0(\varepsilon). \quad (5.83)$$

Mivel az 5.82. és az 5.83. összefüggésekben a fizikai állandók mellett a $(\nu_{el}/E)^2 \propto (E/n)^{-2}$, ill. a $\nu_{el}/E \propto (E/n)^{-1}$ arányok jelennek meg, ezért az egyenletek megoldásával kapott $\tilde{f}_0(\varepsilon)$ és $\tilde{f}_1(\varepsilon)$ az E/n redukált elektromos tér függvényei lesznek.

Példaként, az $\tilde{f}_0(\varepsilon)$ és $\tilde{f}_1(\varepsilon)$ függvényeket argon gáz esetére határozzuk meg, kis redukált térerősségek esetére, ahol feltételezhető, hogy a fentiekben bevezetett egyszerűsítések elfogadhatók. A rugalmas $e^- + \text{Ar}$ ütközések momentum transzfer hatáskeresztmetszetét a 4.19. ábrán már bemutattuk; megjegyezzük, hogy a fizikai állandók és az elektromostér-erősség mellett ez a számítások egyetlen bemenő adata. Az 5.4. ábra a fenti, 5.82. és 5.83. egyenletek alapján meghatározott $\tilde{f}_0(\varepsilon)$ és $\tilde{f}_1(\varepsilon)$ függvényeket mutatja $|E/n| = 0.1$ Td és 1 Td értékekre.¹⁶

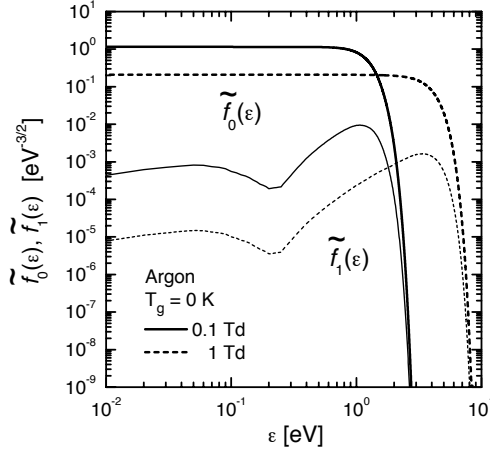
Az anizotróp tag értéke láthatóan mindig lényegesen (legalább kb. 2 nagyságrenddel) kisebb az izotróp tagnál. Ezt azt jelenti, hogy a vizsgált rendszerben a részecskék mozgása közel izotróp és csak nagyon kevésbé sodródik a részecskesokaság az elektromos tér hatására. Ilyen körülmények között nyilvánvalóan alkalmazható a kéttag-közelítés a Boltzmann-egyenlet megoldására. A kapott eloszlásfüggvények viselkedéséből az is látható, hogy az elektronok energiája nem éri el az Ar atomok első gerjesztési energiáját (mely 11.55 eV értékű) és így az elektromos tértől nyert energiával egyensúlyt tartó energiavesztesség forrását egyedül a rugalmas ütközések jelentik. Az átlagos elektronenergia ugyanakkor lényegesen nagyobb a (300 K környezeti hőmérsékletnek megfelelő) termikus energiánál, ezért az álló háttérgáz atomok feltételezése elfogadható.¹⁷

Hangsúlyozzuk, hogy a kéttag-közelítésben már a kezdetektől feltételeztük a részecskék közötti jelentős tömegkülönbséget. Emiatt pl. ionok esetén a kéttag-közelítés semmilyen energiaintervallumban sem alkalmazható; itt multiterm-közelítéssel érhetünk célhoz [44].

¹⁵A megfelelő eloszlásfüggvényt *Margenau*-eloszlásnak hívjuk. Egyszerű ν_{el} esetén ismert eloszlásokat kaphatunk. Kiderül, hogy pl. konstans ütközési frekvenciánál Maxwell-Boltzmann-eloszlást kapunk (egy módosított, effektív hőmérséklettel, amely függ az elektromos tértől), míg konstans szabad úthossz esetén elég nagy elektromos térben az ún. *Druyvesteyn*-eloszlást kapjuk meg [37, 69].

¹⁶A térerősségre feltételezzük, hogy negatív értékű és az elektronok a pozitív x irányba sodródhatnak.

¹⁷Kisebb (nullához tartó) elektromostér-erősség mellett ez a feltételezés $(\varepsilon) \rightarrow 0$ elektron-energiát eredményez, ilyen esetekben az eloszlásfüggvény izotróp tagjára ható ütközési tagban (5.75. összefüggés) figyelembe kell venni a gázatomok véges hőmérsékletét. $E = 0$ térerősség mellett az elektronok átlagos energiája ez esetben kiegyenlítődik a gázatomok átlagos energiájával.



5.4. ábra. A Boltzmann-egyenlet kéttag-közelítéses megoldásából származó eloszlásfüggvények argon gázra. Vastag vonalak: izotróp rész, vékony vonalak: anizotróp rész.

5.4.1. Az eloszlásfüggvény és a makroszkopikus jellemzők kapcsolata kéttag-közelítés esetén

A Boltzmann-egyenlet kéttag-közelítéses megoldásával kapott f_0 és f_1 függvények szoros kapcsolatban vannak a részecskesokaság makroszkopikus jellemzőivel és a transzportegyütthatókkal. Az elektronsűrűség,

$$\begin{aligned} n_e &= \int f \, d^3v = 2\pi \int_0^\pi \int_0^\infty [f_0(v) + \cos\theta f_1(v)] \sin\theta \, v^2 d\theta \, dv \\ &= 4\pi \int_0^\infty v^2 f_0 dv, \end{aligned} \quad (5.84)$$

láthatóan csak az izotróp résztől (f_0) függ, míg a fluxus,

$$\begin{aligned} \Gamma_e &= \int v_z f(v) \, d^3v = 2\pi \int_0^\pi \int_0^\infty v \cos\theta [f_0(v) + \cos\theta f_1(v)] \sin\theta \, v^2 dv \, d\theta \\ &= 2\pi \int_0^\pi \int_0^\infty v^3 \cos^2\theta \sin\theta f_1(v) dv \, d\theta = \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty v^3 f_1 dv, \end{aligned} \quad (5.85)$$

az eloszlásfüggvény anizotróp részével (f_1) áll kapcsolatban.

Stacionárius esetre további összefüggések tárhatók fel a transzportegyütthatók és az eloszlásfüggvény között. Az 5.69. egyenletet az 5.76. összefüggés szerinti

(nem normált) ütközési taggal, stacionárius esetre felírva:¹⁸

$$v \frac{\partial f_0}{\partial x} - \frac{eE}{m_e} \frac{\partial f_0}{\partial v} = -\nu_m(\varepsilon) f_1(\varepsilon), \quad (5.86)$$

amiből kifejezhető az eloszlásfüggvény anizotróp része, mint

$$f_1(\varepsilon) = -\frac{1}{\nu_m(\varepsilon)} \left[v \frac{\partial f_0}{\partial x} - \frac{eE}{m_e} \frac{\partial f_0}{\partial v} \right]. \quad (5.87)$$

Ezt az 5.85. egyenletbe helyettesítve a fluxus értéke:

$$\Gamma_e = \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty v^3 f_1 dv = -\frac{4\pi}{3} \int_0^\infty \frac{v^4}{\nu_m} \frac{\partial f_0}{\partial x} dv + \frac{4\pi}{3} \frac{eE}{m_e} \int_0^\infty \frac{v^3}{\nu_m} \frac{\partial f_0}{\partial v} dv, \quad (5.88)$$

melyet a „drift-diffúziós összefüggést” megadó

$$\Gamma_e = -\frac{\partial}{\partial x} (D_e n_e) - n_e \mu_e E \quad (5.89)$$

alakkal összevetve, a transzportegyütthatókra az alábbi kifejezések adódnak:

$$D_e = \frac{4\pi}{3n_e} \int_0^\infty \frac{v^4}{\nu_m} f_0(v) dv \quad (5.90)$$

és

$$\mu_e = -\frac{4\pi e}{3m_e n_e} \int_0^\infty \frac{v^3}{\nu_m} \frac{\partial f_0(v)}{\partial v} dv. \quad (5.91)$$

Megállapítható tehát, hogy stacionárius esetben a diffúziós és mozgékonyasági együtthatók az eloszlásfüggvény izotróp részének ismeretében kiszámíthatók. Vegyük észre, hogy mivel az ütközési frekvencia egyenes arányos a gáz sűrűségével, a $D_e n_e$ és $\mu_e n_e$ értékek csak a hatáskeresztmetszetektől és az eloszlásfüggvény alakjától függenek, vagyis ezek a *redukált* transzportegyütthatók az alapvető mennyiségek, amik csak az E/n redukált térerősség függvényei!

A következő részben bevezető szinten tárgyaljuk a sűrűséggradiens-közelítés alapjait, mivel ezek alapján érthetők meg a különböző (stacionárius, ill. impulzusszerű) fizikai rendszerekre értelmezett specifikus transzportegyütthatók.¹⁹ Fontos megjegyezni, hogy a mérésekkel való kapcsolat érdekében ennek során célszerű a mérhető fizikai mennyiségekre (sűrűség, fluxus) alapozni a leírást.

5.4.2. A sűrűséggradiens-közelítés alapjai

A töltött részecskék sokaságára vonatkozó Boltzmann-egyenlet sűrűséggradiens-közelítésre alapuló megoldásának [71–73] alapja, hogy a határoló felületektől

¹⁸Itt a ν_{el} rugalmas momentum transzfer hatáskeresztmetszet helyett a rugalmatlan folyamatokat is magában foglaló ν_m momentum transzfer hatáskeresztmetszetet használjuk.

¹⁹Megjegyezzük, hogy ezek lényegesen különbözhetnek a kéttag-közelítés esetén kapott transzportegyütthatóktól, mint pl. az 5.90. és az 5.91. egyenletekkel kapott diffúziós és mozgékonyasági együtthatók, amelyek csak az eloszlásfüggvényre vonatkozó adott feltételezések esetén érvényesek.

(forrásoktól és nyelőktől) elegendően nagy távolságban megvalósulhat a *hidrodinamikai transzport*, ahol a fázistérbeli $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ eloszlásfüggvény kifejezhető a részecskesűrűség-gradiens hatványainak soraként:²⁰

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} f^{(k)}(\mathbf{v}, t) \odot (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t), \quad (5.92)$$

ahol az $f^{(k)}$ tagok k -ad rendű tenzorok, valamint $\odot$ a k -ad rendű skalárszorzatot jelzi. A hidrodinamikai tartományban a

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = S(\mathbf{r}, t) \quad (5.93)$$

folytonossági egyenletben szereplő mennyiségek ugyancsak hasonló sorokként adhatók meg. Elsőként tekintsük a fluxusra vonatkozó sort:

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{\Gamma}^{(k+1)}(t) \odot (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t), \quad (5.94)$$

ahol $\mathbf{\Gamma}^{(k+1)}$ egy $k+1$ -rendű tenzor. Az összefüggést $k=1$ értékkel bezárólag kifejtve

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{\Gamma}^{(1)}(t) n(\mathbf{r}, t) - \overline{\overline{\mathbf{\Gamma}}}^{(2)}(t) \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) \quad (5.95)$$

adódik. Az itt szereplő együttthatókat rendre a $\mathbf{W}^*$ *fluxus-driftsebességgel* és a $\overline{\overline{\mathbf{D}}}^*$ *fluxus diffúziós tenzorral* azonosíthatjuk, $\mathbf{\Gamma}^{(1)} \equiv \mathbf{W}^*$ és $\overline{\overline{\mathbf{\Gamma}}}^{(2)} \equiv \overline{\overline{\mathbf{D}}}^*$, azaz

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{W}^*(t) n(\mathbf{r}, t) - \overline{\overline{\mathbf{D}}}^*(t) \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t), \quad (5.96)$$

ami a klasszikus drift-diffúziós közelítés. A fluxus-driftsebesség az elektronok (elektromos tér hatására felvett) sebességének az átlaga, továbbá a $\overline{\overline{\mathbf{D}}}^*$ fluxus diffúziós tenzor a részecskefelhőnek a sűrűséggradiens jelenléte miatti kiterjedését adja meg. A fluxus diffúziós tenzor mágneses tér mentes esetekben diagonális,

$$\overline{\overline{\mathbf{D}}}^* = \begin{bmatrix} D_x^* & & \\ & D_y^* & \\ & & D_z^* \end{bmatrix} \quad (5.97)$$

alakú. Ha a térerősség x irányú, akkor a diffúziót a $D_L^* = D_x^*$ longitudinális és a $D_T^* = D_y^* = D_z^*$ transzverzális diffúziós együttthatók jellemzik.

Nemkonzervatív (ionizációs, vagy elektronmegkötési) folyamatok jelenléte, azaz $S(\mathbf{r}, t) \neq 0$ esetén módosulnak a transzport jellemzői. Ehhez tekintsük a forrástagra vonatkozó

$$S(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} S^{(k)}(t) \odot (-\nabla)^k n(\mathbf{r}, t) \quad (5.98)$$

²⁰Amint azt az előző fejezetben is említettük, hidrodinamikai transzport esetén az eloszlásfüggvényt a makroszkopikus mennyiségek gradienseinek soraként lehet felírni. Mivel esetünkben csak a sűrűség megmaradó mennyiség (illetve közel megmaradó esetleges nemkonzervatív ütközések következtében), kapjuk a sűrűséggradiens-közelítést [44].

sort, ahol az $S^{(k)}$ tagok k -ad rendű tenzorok. Az összefüggést $k = 2$ értékkel bezárólag kifejtve:

$$S(\mathbf{r}, t) = S^{(0)}(t) n(\mathbf{r}, t) - \mathbf{S}^{(1)}(t) \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) + \bar{\bar{\mathbf{S}}}^{(2)}(t) : \nabla \nabla n(\mathbf{r}, t) \quad (5.99)$$

adódik.²¹

Következő lépésként az 5.96. és az 5.99. összefüggéseket a folytonossági egyenletbe helyettesítjük:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{W}^*(t) n(\mathbf{r}, t) - \bar{\bar{\mathbf{D}}}^*(t) \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t)] = \\ S^{(0)}(t) - \mathbf{S}^{(1)}(t) \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) + \bar{\bar{\mathbf{S}}}^{(2)}(t) : \nabla \nabla n(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (5.100)$$

ami

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + [\mathbf{W}^*(t) - \mathbf{S}^{(1)}(t)] \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) \\ - [\bar{\bar{\mathbf{D}}}^*(t) - \bar{\bar{\mathbf{S}}}^{(2)}(t)] : \nabla \nabla n(\mathbf{r}, t) = S^{(0)}(t) \end{aligned} \quad (5.101)$$

alakra hozható. A

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}^* - \mathbf{S}^{(1)} \quad (5.102)$$

térfogati driftsebesség és a

$$\bar{\bar{\mathbf{D}}} = \bar{\bar{\mathbf{D}}}^* - \bar{\bar{\mathbf{S}}}^{(2)} \quad (5.103)$$

térfogati diffúziós tenzor bevezetésével jutunk az általános, időfüggő diffúziós egyenletre, melyben a térfogati transzportegyütthatók szerepelnek:

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{W}(t) \cdot \nabla n(\mathbf{r}, t) - \bar{\bar{\mathbf{D}}}(t) : \nabla \nabla n(\mathbf{r}, t) = S^{(0)}(t). \quad (5.104)$$

A fentiekből következően tehát fontos különbség van a fluxus és térfogati transzportegyütthatók között. A fluxus-driftsebesség ($\mathbf{W}^*$) kizárólag az elektromos tér hatásának következménye, az elektronok átlagsebessége. Hasonlóan, a $\bar{\bar{\mathbf{D}}}^*$ fluxus diffúziós tenzor az elektronfelhőnek a sűrűséggradiens jelenléte miatti kiterjedését adja meg. Ugyanakkor a $\mathbf{W}$ térfogati driftsebesség az elektronfelhő tömegközéppontjának sebessége, melynek pozíciója nemkonzervatív (ionizációs, vagy elektronmegkötési) folyamatoknak a következményeként eltolódhat; az $\mathbf{S}^{(1)}$ tag ezt a jelenséget írja le. A nemkonzervatív folyamatok a sűrűséggradiens térbeli függéséhez is vezethetnek, az $\bar{\bar{\mathbf{S}}}^{(2)}$ tenzor ennek hatását fejezi ki. Nyilvánvaló, hogy amennyiben nemkonzervatív folyamatok nincsenek jelen, akkor a fluxus és a térfogati együtthatók megegyeznek. Végül megjegyezzük, hogy a fenti végtelen soroknak megfelelően magasabb rendű transzportegyütthatók is léteznek, ezek viszont a transzportelmélet kevésbé vizsgált részéhez tartoznak.

²¹Az Einstein-féle néma index konvenciót alkalmazva $\bar{\bar{\mathbf{S}}}^{(2)} : \nabla \nabla n = S_{ij}^{(2)} \partial_i \partial_j n$.

A következőkben a fent kapott 5.104. diffúziós egyenlet egy fontos alkalmazását mutatjuk be: arra keressük a választ, hogy egy pontszerű forrású, a $t = 0$ időpontban $x = 0$ helyről induló, n_{e0} kezdeti sűrűségű elektronfelhő sűrűségeloszlása miként fejlődik térben és időben. Feltételezzük, hogy az elektromos tér homogén és stacionárius, és hogy az elektronokat az x -irányba gyorsítja. Ennek a problémának a fontosságát az adja, hogy a transzportegyütthatók kísérleti meghatározásának az alapjául is szolgál: egy impulzusüzemű elektronforrással keltett elektronfelhő mozgását követve, illetve egy bizonyos helyen, vagy helyek sorozatán egy detektorral észlelve, mérhetővé válnak azok a transzportegyütthatók, amelyek meghatározzák a felhő mozgását.

Kiindulási egyenletünk az egy térbeli dimenzióra felírt folytonossági egyenlet:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + W \frac{\partial n}{\partial x} - D_L \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = \nu n, \quad (5.105)$$

ahol a forrástagot a ν effektív ionizációs frekvencia segítségével adtuk meg. (Az effektív ionizációs frekvencia az ionizációs frekvencia és az elektronmegkötés frekvenciájának különbsége.)

Az egyenlet megoldásához az

$$\tilde{n}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} n(x) \exp(-ikx) dx \quad (5.106)$$

Fourier-transzformációval áttérünk a hullámszámtérre, ahol az 5.105. egyenlet a

$$\frac{d\tilde{n}}{dt} + W(ik)\tilde{n} - D_L(ik)^2\tilde{n} = \nu\tilde{n} \quad (5.107)$$

alakot ölti, amiből

$$\frac{d\tilde{n}}{dt} = (\nu - ikW - D_L k^2)\tilde{n}. \quad (5.108)$$

Ennek megoldása:

$$\tilde{n} = A \exp[(\nu - ikW - D_L k^2)t], \quad (5.109)$$

ahol az A integrációs állandót a peremfeltételek határozzák meg. Mivel $t = 0$ időpillanatban $n(x, 0) = n_{e0}\delta(x)$, ezért $\tilde{n}(k, 0) = n_{e0}$, azaz $A = n_{e0}$. Következő

lépésként az inverz Fourier-transzformációt hajtjuk végre:

$$\begin{aligned}
 n(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int \tilde{n}(k) \exp(ikx) dk = \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} n_{e0} \exp[(\nu - ikW - D_L k^2)t] \exp(ikx) dk \\
 &= \frac{n_{e0} \exp(\nu t)}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[ik(x - Wt)] \exp(-D_L k^2 t) dk \\
 &= \frac{n_{e0} \exp(\nu t)}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-D_L t \left(k^2 - ik \frac{x - Wt}{D_L t}\right)\right] dk \\
 &= \frac{n_{e0} \exp(\nu t)}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-D_L t \left[\left(k - i \frac{x - Wt}{2D_L t}\right)^2 + \frac{(x - Wt)^2}{4D_L^2 t^2}\right]\right\} dk \\
 &= \frac{n_{e0} \exp(\nu t)}{2\pi} \exp\left[-\frac{(x - Wt)^2}{4D_L t}\right] \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-D_L t \left(k - i \frac{x - Wt}{2D_L t}\right)^2\right] dk.
 \end{aligned} \tag{5.110}$$

Az utolsó sor integráljának értéke $\sqrt{\pi/D_L t}$ (az $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-a(x - c)^2) dx = \sqrt{\pi/a}$ összefüggés alapján, ahol c egy tetszőleges komplex szám). Ezzel az elektronsűrűség térbeli és időbeli változására adódó végeredmény:

$$n(x, t) = \frac{n_{e0}}{(4\pi D_L t)^{1/2}} \exp\left[\nu t - \frac{(x - Wt)^2}{4D_L t}\right]. \tag{5.111}$$

Az elektronfelhő tér- és időbeli fejlődését tehát három paraméter befolyásolja, a W térfogati driftsebesség, a D_L térfogati diffúziós együttható és a ν effektív ionizációs frekvencia. Az elektronsűrűség térbeli és időbeli változásának mérésével ezek a jellemzők kísérletileg meghatározhatók (pl. [74]).

6. fejezet

Plazmahullámok

A plazmák bonyolult dinamikai rendszerek, így nem meglepő, hogy bennük számos különböző *hullámjelenség* léphet fel [75]. A hullámjelenségek tárgyalásának két alapvető megközelítése van. Az első megközelítés a Maxwell-egyenletekből, illetve az ezekből származtatott hullámegyenletből kiindulva olyan általános leírást ad, ami az összes lehetséges hullámfajtát magában foglalja; a különböző típusú hullámok az így kapott összefüggések speciális eseteként tárgyalhatók. A másik alapvető megközelítés során az egyszerűbb jelenségektől haladunk az összetettebbek felé. Mivel itt a hullámjelenségek közül csak a legegyszerűbbek leírása a célunk, melyek *ütközésmentes és nem mágnesezett plazmákban* lépnek fel,¹ ezért a második megközelítést követjük. Az alábbiakban, a hullámokkal kapcsolatos néhány alapvető fogalom bevezetése után elsőként az elektronok mozgása következtében fellépő elektrosztatikus hullámokkal foglalkozunk. Ennek során bemutatjuk a hidrodinamikai leírásra alapuló gondolatmenetet, majd, ezt követően egy olyan hullámfajta tulajdonságait tárgyaljuk, ahol az ionok mozgása a meghatározó, végül az elektromágneses hullámok terjedésével foglalkozunk hideg plazmában [26].

A vizsgálandó hullámokról feltételezzük, hogy *monokromatikus síkhullámok*. Ez azért nem jelent korlátozást, mert összetettebb hullámok *Fourier-felbontással* mindig előállíthatók ilyen hullámok szuperpozíciójaként. A hullámok feltételezett alakja tehát, a térerősséget véve példának, valamint feltételezve, hogy a hullám az x irányba terjed (azaz a hullámszámvektor: $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$):

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{E}} \sin(kx - \omega t). \quad (6.1)$$

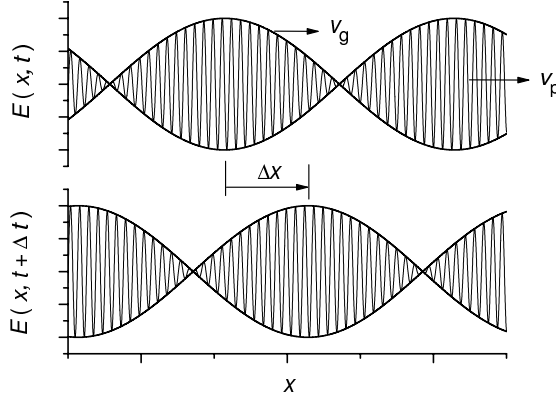
A hullám *fázissebességét* az állandó $\varphi = kx - \omega t$ fázisú pontok sebessége adja. A $\varphi(t)$ fázis idő szerinti differenciálásával az alábbi adódik:

$$\frac{d\varphi}{dt} = k \frac{dx}{dt} - \omega = 0, \quad (6.2)$$

¹Az űrfizika és fúziós célú kísérleti berendezések szempontjából releváns *mágnesezett plazmákban* fellépő hullámjelenségek részletes tárgyalása megtalálható a [76] és [77] munkákban.

amiből a fázissebesség

$$v_p = \frac{\omega}{k}. \quad (6.3)$$



6.1. ábra. Két azonos amplitúdójú, kismértékben eltérő frekvenciájú és hullámszámú harmonikus rezgésből előálló hullámcsomagok.

A fázissebesség mellett még be kell vezetnünk a *csoportsebesség* fogalmát, ami egy több hullámból felépülő *hullámcsomag* terjedését jellemzi. A legegyszerűbb hullámcsomag két (egymáshoz közeli paraméterekkel rendelkező) elemi hullám szuperpozíciójával állítható elő (lásd 6.1. ábra):

$$\mathbf{E}(x, t) = \hat{\mathbf{E}}[\sin(k_1 x - \omega_1 t) + \sin(k_2 x - \omega_2 t)], \quad (6.4)$$

ami átírható az alábbi alakra:

$$\mathbf{E}(x, t) = 2\hat{\mathbf{E}} \sin(\bar{k}x - \bar{\omega}t) \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta \omega}{2}t\right), \quad (6.5)$$

ahol $\bar{k} = (k_1 + k_2)/2$, $\Delta k = k_1 - k_2$, $\bar{\omega} = (\omega_1 + \omega_2)/2$ és $\Delta \omega = \omega_1 - \omega_2$. A hullám fázisa

$$v_p = \bar{\omega}/\bar{k} \quad (6.6)$$

sebességgel halad (ezért v_p elnevezése *fázissebesség*), míg *burkolója* a

$$v_g = \frac{\omega_1 - \omega_2}{k_1 - k_2} = \frac{\Delta \omega}{\Delta k} \quad (6.7)$$

csoportsebességgel, ami általános esetben (tetszőleges „összetételű” hullámcsomagra):

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}. \quad (6.8)$$

Látható, hogy mind a fázissebesség, mind a csoportsebesség a hullám frekvenciája és hullámszáma ismeretében kapható meg. E két mennyiség

összefüggése az $\omega(k)$ *diszperziós reláció*, melynek központi szerepe van a hullámjelenségek tárgyalásánál [78].

Említést kell még tennünk a hullámot jellemző térerősségvektor és a hullámszámvektor *iránya* közötti kapcsolatról. A két vektor iránya közötti szög tetszőleges lehet; azokban a speciális esetekben, amikor $\mathbf{E} \parallel \mathbf{k}$, *longitudinális* hullámról, amennyiben $\mathbf{E} \perp \mathbf{k}$, *transzverzális* hullámról beszélünk.

A hullámjelenségeket a Boltzmann-egyenlet momentumegyenleteiből kiindulva tárgyaljuk, azzal kiegészítve, hogy az elektromos teret önkonizisztens módon (a részecskék által keltett teret is figyelembe véve) írjuk le.² Kiindulási egyenleteink az 5.2. fejezetben származtatott folytonossági egyenlet és impulzusmérleg-egyenlet egyszerűsített alakjai:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{u}) = 0, \quad (6.9)$$

$$mn \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -ne\mathbf{E} - \nabla p, \quad (6.10)$$

ahol már kihasználtuk, hogy a részecskék száma állandó (nincsenek források és veszteségek), valamint elhanyagoltuk az ütközésekből származó impulzusvesztést. Ez utóbbi akkor tehető meg, ha a hullámok frekvenciája sokkal nagyobb a töltött részecskék és a háttérgáz részecskéi közötti ütközések frekvenciájánál. Ebben az esetben beszélünk ütközésmentes plazmáról.

A továbbiakban feltételezzük, hogy a hullámok kis amplitúdójúak és így a fizikai mennyiségek kis perturbációját eredményezik, pl. a sűrűség megváltozása (n_1) sokkal kisebb, mint annak „nyugalmi” értéke (n_0):

$$n = n_0 + n_1, \quad n_1 \ll n_0. \quad (6.11)$$

Feltesszük továbbá, hogy a rendszer makroszkopikusan térmentes: $\mathbf{E}_0 = 0$ és, hogy nincs stacionárius áramlás: $\mathbf{u}_0 = 0$. Ekkor a 6.9. folytonossági egyenlet alakja a perturbált mennyiségekkel:

$$\frac{\partial(n_0 + n_1)}{\partial t} + \nabla \cdot [(n_0 + n_1)(\mathbf{u}_0 + \mathbf{u}_1)] = 0, \quad (6.12)$$

mely, a *csak elsőrendű tagokat megtartva* az alábbi alakot ölti:

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} + n_0 \nabla \cdot \mathbf{u}_1 = 0. \quad (6.13)$$

A 6.10. impulzusmérleg-egyenlet hasonló módon az

$$mn_0 \frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial t} = -n_0 e \mathbf{E}_1 - \nabla p_1 \quad (6.14)$$

²Megjegyezzük, hogy a hullámok leírása *kinetikus szinten* is megadható, közvetlenül a Vlasov-egyenletből kiindulva. Ez olyan jelenségeket is leír, amire a fenti folyadék-leírás nem ad módot, mint pl. a plazmahullámok töltött részecskékkel való kölcsönhatása következtében történő csillapodása, a *Landau-csillapodás*. Ilyen jelenségekkel itt nem foglalkozunk, további információért ajánljuk a [58, 79] könyveket.

alakra hozható. Ez a két egyenlet az alapja további vizsgálódásainknak.

A továbbiakban az elektromos tér hely és idő szerinti függésére az alábbi komplex alakot használjuk:

$$\mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{E}}_1 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad (6.15)$$

és hasonló jellegű, harmonikus változást tételezünk fel a többi fizikai mennyiségre ($\mathbf{u}_1$ és n_1) is. A 6.15. egyenlettel adott hullámokra az időbeli és térbeli differenciálás az alábbi műveletekre egyszerűsödik:

$$\frac{\partial \mathbf{E}_1}{\partial t} \rightarrow -i\omega \mathbf{E}_1, \quad \nabla \cdot \mathbf{E}_1 \rightarrow i\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_1, \quad \nabla \times \mathbf{E}_1 \rightarrow i\mathbf{k} \times \mathbf{E}_1. \quad (6.16)$$

Mielőtt továbblépnénk, foglalkoznunk kell a 6.14. összefüggésben megjelenő ∇p_1 nyomásgradiens taggal. Ennek értéke az állapotegyenletből határozható meg:

- *izotermikus* rendszer esetében (ami lassú változások esetén feltételezhető):

$$p_1 = n_1 k_B T \rightarrow \nabla p_1 = k_B T \nabla n_1. \quad (6.17)$$

- *adiabtikus* esetben, amikor a hullám $v_p = \omega/k$ fázissebessége sokkal nagyobb, mint a részecskék v_T termikus sebessége, az állapotegyenlet alakja:

$$pV^\gamma = K, \quad (6.18)$$

ami

$$p = K' n^\gamma \quad (6.19)$$

alakba is írható, ahol K és K' állandók. Ez alapján

$$\begin{aligned} p &= p_0 + p_1 = K'(n_0 + n_1)^\gamma \cong K' n_0^\gamma \left(1 + \gamma \frac{n_1}{n_0}\right) \\ \longrightarrow \quad p_1 &= p_0 \gamma \frac{n_1}{n_0} = \gamma n_1 k_B T, \end{aligned} \quad (6.20)$$

mivel $p_0 = n_0 k_B T$. A 6.18. egyenletben megjelenő kitevő értéke $\gamma = (f + 2)/f$, ahol f a rendszer szabadsági fokainak száma. Egydimenziós mozgás esetén $f = 1$, így $\gamma = 3$, azaz

$$p_1 = 3n_1 k_B T \rightarrow \nabla p_1 = 3k_B T \nabla n_1. \quad (6.21)$$

6.1. Elektronoszillációk hideg plazmában

Az első és legegyszerűbb jelenségnek, az elektronok hideg plazmában fellépő oszcillációinak tárgyalásához a 6.13. és 6.14. egyenletekből indulunk ki, azzal a további egyszerűsítéssel, hogy a $T = 0$ (hideg plazma) feltételezés miatt a második egyenlet jobb oldalán lévő nyomásgradiens tag eltűnik, vagyis:

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} + n_0 \nabla \cdot \mathbf{u}_1 = 0, \quad (6.22)$$

$$m \frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial t} = -e \mathbf{E}_1. \quad (6.23)$$

A differenciáloperátorok 6.16. szerinti alakjait felhasználva a fenti két egyenletből az alábbi adódik:

$$-i\omega n_1 + n_0 i \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1 = 0, \quad (6.24)$$

$$-i\omega m \mathbf{u}_1 = -e \mathbf{E}_1. \quad (6.25)$$

Az első összefüggésből a perturbált sűrűség értéke:

$$n_1 = n_0 \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1}{\omega}. \quad (6.26)$$

Látható, hogy $\mathbf{k} \perp \mathbf{u}_1$ esetben nem léphet fel sűrűségperturbáció, vagyis csak *longitudinális* rezgések jöhetnek létre ($\mathbf{k} \parallel \mathbf{u}_1$, illetve $\mathbf{k} \parallel \mathbf{E}_1$).

A Gauss-tétel ($\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$) alapján:³

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_1 = -\frac{e}{\varepsilon_0} n_1 \quad \rightarrow \quad i\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_1 = -\frac{e}{\varepsilon_0} n_1. \quad (6.27)$$

A perturbált sűrűség 6.26. szerinti értékét ebbe az összefüggésbe behelyettesítve:

$$i\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_1 = -\frac{en_0}{\varepsilon_0 \omega} \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1. \quad (6.28)$$

Másrészt, a 6.25. impulzusmérleg-egyenletet a hullámszám vektorral megszorozva:

$$i\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_1 = -\frac{\omega m}{e} \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1. \quad (6.29)$$

A két utóbbi egyenletből $en_0/\varepsilon_0 \omega = \omega m/e$ adódik, amiből kifejezhető a rezgés frekvenciája,

$$\omega^2 = \omega_p^2 = \frac{n_0 e^2}{\varepsilon_0 m}. \quad (6.30)$$

Az így kapott karakterisztikus frekvenciáról (elektron-plazmafrequencia) megállapíthatjuk, hogy nem függ a hullámszámtól. Mivel így a $v_g = d\omega/dk$ csoportsebesség nulla, ebben az esetben nem beszélhetünk egy „igazi”, terjedő hullámról, csak helyi oszcillációkról (*Langmuir-oszcillációk*). A következő pontban látni fogjuk, hogy véges hőmérséklet mellett terjedő hullámokat kapunk.

6.2. Longitudinális elektrosztatikus hullámok meleg plazmában

A véges *elektronhőmérsékletű* ($T_e > 0$) plazmában fellépő longitudinális hullámok (*Langmuir-hullámok*) tulajdonságainak származtatásához a 6.14. egyenlet

³Emlékeztetünk, hogy esetünkben figyelembe vesszük a perturbáció hatására létrehozott elektromos teret, ami visszahat a részecskékre. A Debye-árnyékoláshoz hasonlóan a plazma-hullámokat is lehet a plazma dielektromos függvényével tárgyalni (lásd K.4.) [58, 79].

jobb oldalán lévő nyomásgradiens tag megtartásával végezzük el a folytonossági és impulzusmérleg egyenleteknek a (fenti esethez hasonló) linearizálását:

$$-i\omega n_1 + n_0 \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1 = 0, \quad (6.31)$$

$$-i\omega m n_0 \mathbf{u}_1 = -en_0 \mathbf{E}_1 - i\mathbf{k} p_1, \quad (6.32)$$

ahol felhasználtuk p_1 harmonikus helyfüggését, amiből $\nabla p_1 = i\mathbf{k} p_1$ következik. Az elektronokra egydimenziós mozgást feltételezve és az adiabatikus közelítést alkalmazva $p_1 = 3n_1 k_B T_e$ és így a 6.32. összefüggésből (a hullámszám vektorral való szorzással):

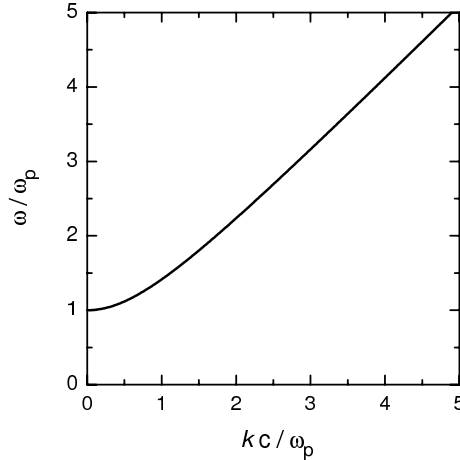
$$-i\omega m n_0 \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1 = -en_0 \mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_1 - ik^2 3n_1 k_B T_e. \quad (6.33)$$

A 6.26. és 6.27. egyenletek felhasználásával a hullám frekvenciája:

$$\omega^2 = \frac{n_0 e^2}{\varepsilon_0 m} + \frac{3k^2 k_B T_e}{m} = \omega_p^2 + k^2 c^2, \quad (6.34)$$

illetve a diszperziós összefüggés:

$$\omega(k) = \sqrt{\omega_p^2 + k^2 c^2} \quad ; \quad c = \sqrt{3k_B T_e / m}. \quad (6.35)$$



6.2. ábra. Elektrosztatikus hullámok diszperziós relációja meleg ($T_e > 0$) plazmában.

Itt a hullám c sebessége közelítőleg megegyezik az elektronok hőmérsékleti mozgására jellemző $v_T = \sqrt{8k_B T_e / \pi m}$ sebességgel. A hideg plazmával ellentétben, itt a rezgések frekvenciája függ a hullámszámtól. A 6.35. egyenlet *Bohm–Gross* diszperziós reláció néven ismert. Ebből az összefüggésből már véges csoportsebesség adódik:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{2\omega} \frac{d\omega^2}{dk} = \frac{kc^2}{\sqrt{\omega_p^2 + k^2 c^2}}. \quad (6.36)$$

Amennyiben $kc \gg \omega_p$, a hullám v_T sebességgel továbbíthat energiát.⁴

6.3. Ionakusztikus hullámok

A hullámok ezen típusa a semleges gázokban terjedő hanghullámokhoz hasonlóan longitudinális, és a sűrűség változásaiból áll. A hullámban az ionok mozgása a meghatározó, az elektronok nagy mozgékonyaságuk következtében követik az ionok mozgását [26]. Az alábbiakban az „e” és az „i” indexek az elektronokra, illetve az ionokra vonatkozó mennyiségeket jelölik. A két komponensre vonatkozó folytonossági egyenletek:

$$\frac{\partial n_{i1}}{\partial t} + n_0 \nabla \cdot \mathbf{u}_{i1} = 0 \quad \rightarrow \quad -i\omega n_{i1} + n_0 i \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_{i1} = 0 \quad (6.37)$$

$$\frac{\partial n_{e1}}{\partial t} + n_0 \nabla \cdot \mathbf{u}_{e1} = 0 \quad \rightarrow \quad -i\omega n_{e1} + n_0 i \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_{e1} = 0. \quad (6.38)$$

A hullámok időskáláján az elektrongáz nyomása egyensúlyban van az elektromos tér hatásával, emiatt az elektronokra vonatkozó impulzusmérleg-egyenletben elhanyagolhatjuk a tehetetlenségi tagot, tehát a linearizált impulzusmérleg-egyenletek a plazma két komponensére:

$$m_i n_0 \frac{\partial \mathbf{u}_{i1}}{\partial t} = n_0 e \mathbf{E}_1 - \nabla p_{i1} \quad \rightarrow \quad -i\omega m_i n_0 \mathbf{u}_{i1} = n_0 e \mathbf{E}_1 - i k p_{i1} \quad (6.39)$$

$$0 = -n_0 e \mathbf{E}_1 - \nabla p_{e1} \quad \rightarrow \quad 0 = -n_0 e \mathbf{E}_1 - i k p_{e1} \quad (6.40)$$

A nyomás számításánál az elektronokra az izotermikus közelítést (6.17. összefüggés) alkalmazzuk, $p_{e1} = n_{e1} k_B T_e$ (ugyanis az ionok mozgásából származó hullámokat az elektronok „lassúnak” érzékelik), az ionokra ugyanakkor az adiabatikus állapotegyenletből adódó összefüggést használjuk, 6.21. szerint: $p_{i1} = 3n_{i1} k_B T_i$. Az előbbi két egyenletet a hullámszám vektorral skálárisan szorozva (felhasználva, hogy a terjedés iránya párhuzamos a térerősség irányával) és a nyomásgradiens értékeket behelyettesítve:

$$-i\omega m_i n_0 \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_{i1} = n_0 e k E_1 - i k^2 3n_{i1} k_B T_i, \quad (6.41)$$

$$0 = -n_0 e k E_1 - i k^2 n_{e1} k_B T_e. \quad (6.42)$$

Az ionokra vonatkozó egyenletben $\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_{i1} = \omega n_{i1}/n_0$ helyettesítésével (lásd 6.26. egyenlet)

$$-i\omega^2 m_i n_{i1} = n_0 e k E_1 - i k^2 3n_{i1} k_B T_i \quad (6.43)$$

adódik. A 6.42. és 6.43. egyenletekből meghatározhatók az ionok és elektronok sűrűségének perturbációi (a sűrűség megváltozása a térerősség függvényében):

$$n_{i1} = \frac{n_0 e k}{i k^2 3k_B T_i - i\omega^2 m_i} E_1, \quad (6.44)$$

$$n_{e1} = -\frac{n_0 e}{i k k_B T_e} E_1. \quad (6.45)$$

⁴Megjegyezzük, hogy a fenti diszperziós reláció elég nagy k értékekre már nem lesz alkalmazható, a fejezet bevezetésében említett kinetikus effektusok elhanyagolása miatt [58, 79].

A Gauss-tétel alapján egy további kapcsolatot fogalmazhatunk meg a sűrűség perturbációi és az elektromos térerősség között:

$$ikE_1 = \frac{e}{\varepsilon_0}(n_{i1} - n_{e1}) = \frac{e}{\varepsilon_0} \left[\frac{n_0 ek}{ik^2 3k_B T_i - i\omega^2 m_i} + \frac{n_0 e}{ik k_B T_e} \right] E_1, \quad (6.46)$$

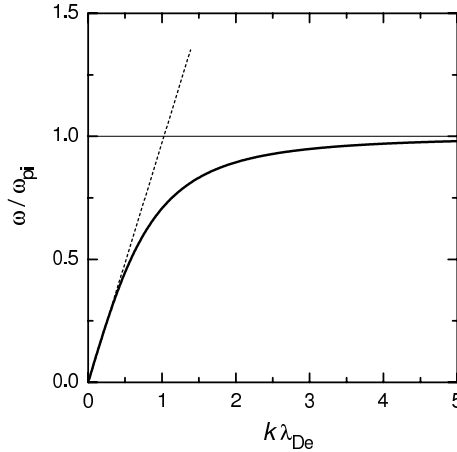
amiből:

$$0 = E_1 \left[1 + \frac{\omega_{pi}^2}{3k^2 k_B T_i / m_i - \omega^2} + \frac{1}{k^2 \lambda_{De}^2} \right]. \quad (6.47)$$

Itt $\omega_{pi} = \sqrt{e^2 n_0 / \varepsilon_0 m_i}$ az ionok plazmafrekvenciája. Az $E_1 \neq 0$ (nem triviális) megoldás feltétele:

$$\omega^2 = k^2 \left(\frac{3k_B T_i}{m_i} + \frac{\omega_{pi}^2 \lambda_{De}^2}{1 + k^2 \lambda_{De}^2} \right), \quad (6.48)$$

ahol $\lambda_{De} = \sqrt{\varepsilon_0 k_B T_e / e^2 n_0}$ az elektronok Debye-hossza.



6.3. ábra. Ionakusztikus hullámok diszperziós relációja.

Gázkisülési plazmákban általában a második tag dominál, ekkor a diszperziós összefüggés:

$$\omega(k) \cong k \frac{c_i}{\sqrt{1 + k^2 \lambda_{De}^2}} \quad ; \quad c_i = \omega_{pi} \lambda_{De} \quad (6.49)$$

ahol c_i az *ionok hangsebessége*. Kis hullámszámok mellett a diszperziós karakterisztika lineáris, $\omega(k) \cong c_i k$, nagy hullámszámoknál a frekvencia telítődik az ω_{pi} ion-plazmafrekvencia értékénél (lásd 6.3. ábra). Ez a viselkedés azt fejezi ki, hogy nagy k értékeknél (kis hullámhossznál) az elektronoknak az ionok mozgását követő árnyékoló hatása nem érvényesül, kis k mellett (azaz nagy hullámhossznál) viszont az elektronok leárnyékolják az ionok kölcsönhatását, így a frekvencia nullához tart.

6.4. Elektromágneses hullámok terjedése hideg plazmában

Utolsó példaként elektromágneses hullámok terjedését vizsgáljuk hideg, ütközésmentes, nem mágnesezett plazmában. Síkhullám alakú perturbáció esetén a Maxwell-egyenletek az alábbi alakot öltik:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad \rightarrow \quad i\mathbf{k} \cdot \mathbf{D}_1 = \rho_1 \quad (6.50)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad \rightarrow \quad i\mathbf{k} \cdot \mathbf{B}_1 = 0 \quad (6.51)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B} / \partial t \quad \rightarrow \quad i\mathbf{k} \times \mathbf{E}_1 = i\omega \mathbf{B}_1 \quad (6.52)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \partial \mathbf{D} / \partial t \quad \rightarrow \quad i\mathbf{k} \times \mathbf{H}_1 = \mathbf{J}_1 - i\omega \mathbf{D}_1 \quad (6.53)$$

A vizsgált frekvenciatartományban az ionok nem reagálnak a tér változásaira, a vezetési áramot az elektronok mozgása indukálja,

$$\mathbf{J}_1 = -en_0 \mathbf{u}_1. \quad (6.54)$$

Az elektronok mozgásegyenlete (hideg plazma közelítésben):

$$mn_0 \frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial t} = -en_0 [\mathbf{E}_1 + \mathbf{u}_1 \times \mathbf{B}_1] \quad \rightarrow \quad -i\omega m \mathbf{u}_1 = -e\mathbf{E}_1 - e\mathbf{u}_1 \times \mathbf{B}_1. \quad (6.55)$$

A 6.53. egyenlet alapján (és mivel $\mathbf{B}_1 = \mu_0 \mathbf{H}_1$):

$$i\mathbf{k} \times \mathbf{B}_1 = \mu_0 \mathbf{J}_1 - i\omega \mu_0 \varepsilon_0 \mathbf{E}_1 = -\mu_0 en_0 \mathbf{u}_1 - i\omega \mu_0 \varepsilon_0 \mathbf{E}_1. \quad (6.56)$$

Következő lépésként képezzük a 6.55. és 6.56. egyenletek vektoriális szorzatát a hullámszámmal:

$$-i\omega m (\mathbf{k} \times \mathbf{u}_1) = -e (\mathbf{k} \times \mathbf{E}_1) - e \mathbf{k} \times (\mathbf{u}_1 \times \mathbf{B}_1), \quad (6.57)$$

$$i\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{B}_1) = -\mu_0 en_0 (\mathbf{k} \times \mathbf{u}_1) - i\omega \mu_0 \varepsilon_0 (\mathbf{k} \times \mathbf{E}_1). \quad (6.58)$$

A 6.57. egyenlet jobb oldalának első tagja $-e\omega \mathbf{B}_1$ (ugyanis a 6.52. egyenlet alapján $\mathbf{k} \times \mathbf{E}_1 = \omega \mathbf{B}_1$), második tagja: $\mathbf{k} \times (\mathbf{u}_1 \times \mathbf{B}_1) = \mathbf{u}_1 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{B}_1) - \mathbf{B}_1 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1) = 0$, mivel $\mathbf{k} \cdot \mathbf{B}_1 = 0$ (lásd 6.51. egyenlet) és $\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_1 = 0$ (a hullám transzverzális volta miatt). Így ebből az egyenletből $\mathbf{k} \times \mathbf{u}_1 = e\mathbf{B}_1 / im$ adódik. Ezt az értéket a 6.58. egyenletbe helyettesítve (és itt is felhasználva, hogy $\mathbf{k} \cdot \mathbf{B}_1 = 0$) a következő összefüggéshez jutunk:

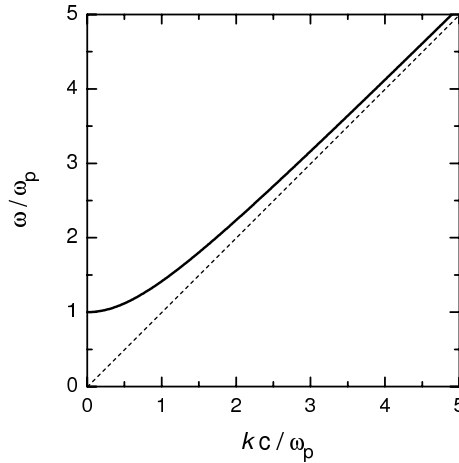
$$\begin{aligned} -ik^2 \mathbf{B}_1 &= -\mu_0 en_0 \frac{e\mathbf{B}_1}{im} - i\omega \mu_0 \varepsilon_0 (\omega \mathbf{B}_1) \\ \rightarrow 0 &= \mathbf{B}_1 \left[k^2 + \varepsilon_0 \mu_0 \left(\frac{n_0 e^2}{\varepsilon_0 m} - \omega^2 \right) \right] = \mathbf{B}_1 [k^2 + \varepsilon_0 \mu_0 (\omega_p^2 - \omega^2)], \end{aligned} \quad (6.59)$$

amelynek nem triviális ($\mathbf{B}_1 \neq 0$) megoldása megadja a hideg, nem mágnesezett plazmában terjedő elektromágneses hullámok diszperziós relációját:

$$\omega(k) = \sqrt{\omega_p^2 + k^2 c^2} \quad ; \quad c = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}, \quad (6.60)$$

ahol c a vákuumbeli fénysebesség.

Az $\omega(k)$ összefüggésből (illetve a diszperziós görbét szemléltető 6.4. ábráról) azonnal látható, hogy a plazmafrekvenciánál kisebb frekvenciájú hullámok nem tudnak terjedni a közegben, ezekre a hullámszám (illetve a közeg törésmutatója) képzetessé válik, ami egy exponenciálisan lecsengő („evanescens”) hullámot eredményez. Az ilyen hullámok a plazmáról, mint egy tükörről visszaverődnek. Ez a jelenség kihasználható a töltött részecskék sűrűségének mérésére laboratóriumi plazmákban és az ionoszférában.⁵ A 6.4. ábrán láthatóan a plazmabeli hullám $v_p = \omega/k$ fázissebessége mindig nagyobb, mint a c vákuumbeli fénysebesség (mivel $\omega/kc > 1$), ugyanakkor az információ és az energia terjedése szempontjából releváns $v_g = d\omega/dk$ csoportsebesség, vagyis az $\omega(k)$ függvény meredeksége mindig kisebb, mint c (ugyanis $d\omega/d(kc) < 1$).



6.4. ábra. Elektromágneses hullámok diszperziós relációja hideg, nem mágnesezett plazmában. A szaggatott vonal az $\omega = kc$ összefüggésnek felel meg.



⁵Megjegyezzük, hogy az itt kapott összefüggés megegyezik a korábban, a plazma dielektromos viselkedésének tárgyalásánál kapott, a Lorentz-modellre alapuló relációval.

7. fejezet

Részecsketranszport Monte-Carlo-szimulációja

A Boltzmann-egyenlet megoldásakor, mint azt az 5. fejezetben láttuk, az elsődleges cél a részecskék sebességeloszlás-függvényének kiszámítása, amiből azután minden más releváns fizikai mennyiség is meghatározható.

A *részecskealapú* szimulációs módszerek ezzel ellentétben egy teljesen más megközelítéssel élnek – ezekben a cél *egyes részecskék* mozgásának leírása, ezzel mintegy lejátszva a vizsgált jelenségeket. Az így nyert adatokból kiszámíthatók a részecskék transzportparaméterei, illetve „felépíthető” a sebességeloszlás-, valamint energiaeloszlás-függvényük. A Boltzmann-egyenlet megoldása és a szimulációs megközelítés elvben ekvivalensek, mindkettőnek vannak előnyei és nehézségei.

A szimulációs módszerek általában sokkal számításigényesebbek, mint a Boltzmann-egyenlet megoldása, mert pontos eredményekhez nagyszámú részecske követése szükséges (ugyanis a statisztikus hibák a részecskeszám négyzetgyökével csökkennek, összhangban a centrális határeloszlás-tétellel). A nagy pontosság (jó statisztika) elérése ugyanakkor a számítástechnikai háttér rohamos fejlődése miatt ma már legtöbb esetben nem jelent problémát. A szimulációs módszerek egyértelmű előnye, hogy a fizikai problémák sokkal tágabb körére alkalmazhatók, a peremfeltételeket könnyű implementálni, valamint nem jelent gondot több térbeli dimenzióban dolgozni. Mindezt a szimulációk lényegesen egyszerűbb matematikai apparátussal érik el, továbbá az egyes részecskék követése lehetővé teszi mozgásuk vizuális megjelenítését, ami a Boltzmann-egyenlet megoldásával nem lehetséges.

A szimulációkban a részecskék transzportját, a valósághoz hasonlóan, véletlenszerűen bekövetkező folyamatok irányítják. Ezek a véletlenszerű folyamatok azonban szigorúan követnek bizonyos fizikai törvényszerűségeket.

A részecskék követését a szimulációkban véletlenszámok segítségével, „sztochasztikus módon” valósítjuk meg, de az előző gondolatnak megfelelően, pon-

tosan meghatározott eloszlású véletlenszámokat használva.¹

A következőkben, a 7.1. fejezetben a véletlenszámok előállításával foglalkozunk, majd ezt követően a 7.2. fejezetben részletesen tárgyaljuk a részecsketranszport leírásának elemeit. Ezután a 7.3. fejezetben az elektronok transzportjának sajátosságaival ismerkedünk meg, homogén elektromos tér esetére.

7.1. Véletlenszámok előállítása

A magas szintű programozási nyelvek általában beépített függvényként tartalmaznak *véletlenszámokat* előállító eljárásokat. Ezek valójában meghatározott szekvencia szerinti, nagyon hosszú periódusú, *determinisztikus* számsorozatok állítanak elő – emiatt ezeket a számokat helyesebb „álvéletlen számoknak” nevezni.²

A véletlenszám-generátorok között a leggyakoribbak és a legáltalánosabban használhatók a $[0,1)$ intervallumon egyenletes eloszlású értékeket előállítóak. A továbbiakban egy ilyen generátorra alapozzuk a szimulációkhoz szükséges *valószínűségi változók* szekvenciáinak előállítását. Első feladatunk eljárást adni *adott valószínűségi sűrűségfüggvénnyel* jellemezhető véletlenszámok előállítására.

A 7.1. ábra egy példát mutat egy ξ valószínűségi változó $h(\xi)$ valószínűségi sűrűségfüggvényére és $H(\xi)$ eloszlásfüggvényére. Ismert, hogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} h(\xi) d\xi = 1 \quad , \quad H(\xi) = \int_{-\infty}^{\xi} h(\xi') d\xi'. \quad (7.1)$$

Tegyük fel, hogy az eloszlásfüggvény *invertálható*. Ekkor az ξ valószínűségi változó értékeinek véletlen sorozata előállítható az alábbi módon:

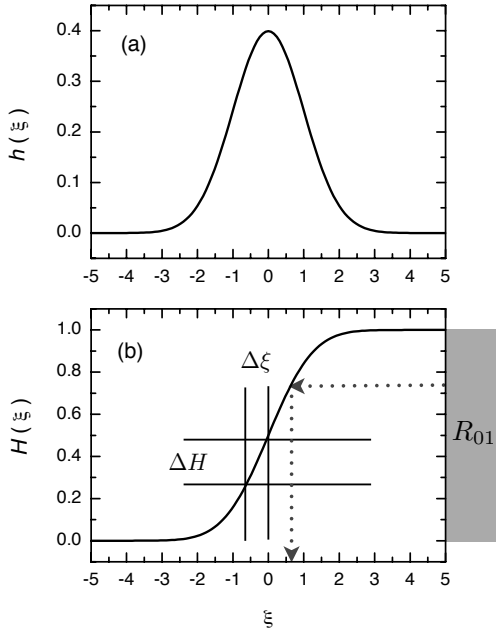
$$\xi = H^{-1}(R_{01}), \quad (7.2)$$

ahol R_{01} a $[0,1)$ intervallumon egyenletes eloszlású (a programozási nyelvekben „lehívható”) véletlenszám. Ezt az állítást a 7.1. ábra alapján láthatjuk be. A 7.2. összefüggés szerinti véletlenszám-generálás annak felel meg, hogy a $0 \dots 1$ értékeket felvevő $H(\xi)$ függvényt egyenlővé tesszük egy adott R_{01} véletlenszámmal és meghatározzuk az ehhez tartozó ξ értéket. A ξ érték $\Delta\xi$ környezetébe eső véletlenszámok száma arányos lesz a 7.1.(b) ábrán feltüntetett $\Delta H \cong H'(\xi)\Delta\xi = h(\xi)\Delta\xi$ intervallum nagyságával (ugyanis $h(\xi)$ a $H(\xi)$ függvény deriváltja). Következésképpen, valamely ξ_1 és ξ_2 értékek környezetébe eső véletlenszám értékek számának $N(\xi_1, \xi_1 + \Delta\xi)/N(\xi_2, \xi_2 + \Delta\xi)$ aránya megegyezik a h sűrűségfüggvény ezeken a helyeken vett értékeinek arányával:

$$\frac{N(\xi_1, \xi_1 + \Delta\xi)}{N(\xi_2, \xi_2 + \Delta\xi)} = \frac{h(\xi_1)}{h(\xi_2)}. \quad (7.3)$$

¹Maga a „Monte-Carlo-szimuláció” elnevezés is a véletlenszámok használatából származik, a számítógépek hőskorából, az első numerikus (a Los Alamos-i Laboratóriumban kifejlesztett) neutrontranszport szimulációk idejéből.

²Érdemes tudományos igényességgel tesztelt véletlenszám-generátorokat használni (lásd pl. [80]).



7.1. ábra. Adott sűrűségfüggvényt követő ξ valószínűségi változó szekvenciájának előállításához.

Megjegyezzük, hogy amennyiben $H(\xi)$ nem invertálható analitikusan, a probléma numerikusan akkor is kezelhető, továbbá, hogy számos más eljárás is rendelkezésre áll véletlenszámok előállítására, lásd pl. [80].

A következőkben két példával illusztráljuk a fenti eljárás működését. Az elsőben egy véletlen irányú egységvektor előállítását követjük végig, amire például a részecskék ütközés utáni irányának meghatározásához lesz szükségünk. A másik példában azt vizsgáljuk, hogy egy Maxwell–Boltzmann-sebességeloszlást követő sokaságból miként választható ki egy részecske; ilyen ütköző „partnerre” például az ion - atom ütközések „lejátzásakor” van szükség.

7.1.1. Véletlen irányú egységvektor előállítása

Véletlen irányú háromdimenziós egységvektorok előállítására a 7.2. ábra szerint az egyik lehetőség két (véletlenszerűen választott) szög (χ és η) megadása, melyek egyértelműen meghatározzák az

$$\hat{\mathbf{e}} = \begin{pmatrix} \cos \chi \\ \sin \chi \cos \eta \\ \sin \chi \sin \eta \end{pmatrix} \quad (7.4)$$

egységvektor irányát. Az ábrán látható módon valamely χ szöghöz $d\Omega = 2\pi \sin \chi d\chi$ térszög tartozik. Az egyenletes eloszlás biztosításához meg kell, hogy

követeljük a $h(\chi)d\chi \propto d\Omega$ arányosságot, vagyis

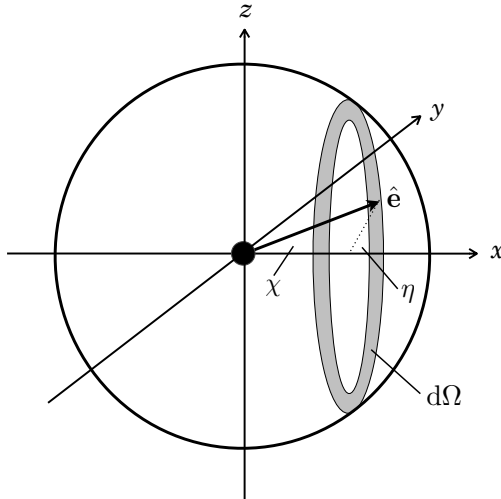
$$c h(\chi)d\chi = 2\pi \sin \chi d\chi, \quad (7.5)$$

ahol c egy állandó. A 7.5. egyenletet a $0 \leq \chi \leq \pi$ intervallumra integrálva $c = 4\pi$ és

$$h(\chi) = \frac{\sin \chi}{2} \quad (7.6)$$

adódik. Egyenletes eloszlás biztosításához tehát ilyen sűrűségfüggvényű valószínűségi változót kell előállítani! A megfelelő eloszlásfüggvény:

$$H(\chi) = \int_0^\chi h(\chi')d\chi' = \frac{1}{2}(1 - \cos \chi). \quad (7.7)$$



7.2. ábra. Véletlen irányú egységvektor előállítása.

A fent vázolt algoritmus alapján:

$$H(\chi) = R_{01} \rightarrow \frac{1}{2}(1 - \cos \chi) = R_{01}, \quad (7.8)$$

amiből a χ szórási szög egy véletlen értéke:

$$\chi = \arccos(1 - 2R_{01}). \quad (7.9)$$

Az η azimutszög egy véletlen értéke a szimmetria miatt egyszerű módon,

$$\eta = 2\pi R_{01} \quad (7.10)$$

szerint adható meg. Látszik, hogy a két szög meghatározásához két R_{01} véletlen-számra van szükség. (Jegyezzük meg, hogy itt és a következőkben R_{01} többszöri előfordulása különböző véletlenszámokat jelent és nem ugyanazon értékeket!)

7.1.2. Maxwell–Boltzmann-sebességeloszlás mintavételezése

Célunk itt egy részecske véletlenszerű kiválasztása egy Maxwell–Boltzmann-eloszlást követő részecske-sokaságból.

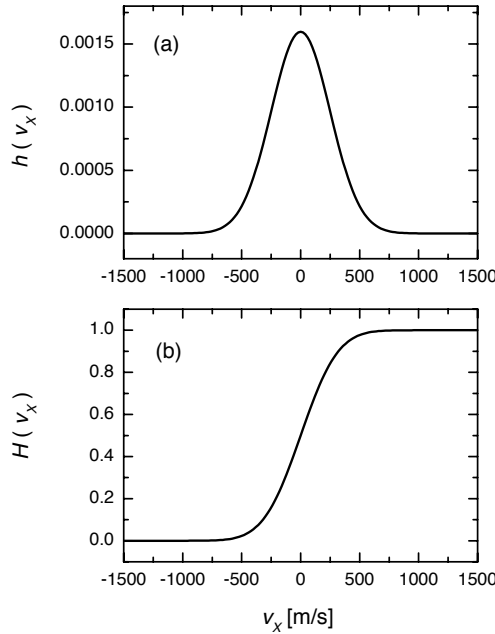
Maxwell–Boltzmann-eloszlás esetén az egyes (független) sebességkomponensek valószínűségi sűrűségfüggvénye:

$$h(v_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} e^{-mv_i^2/2k_B T} \quad (i = x, y, z), \quad (7.11)$$

ahol m a részecskék tömege, T pedig a rendszer hőmérséklete. A 7.3.(a) ábra példaként argon atomok egy adott (x) irányú sebességkomponensének $h(v_x)$ valószínűségi sűrűségfüggvényét szemlélteti $T = 300$ K mellett, míg az ábra (b) része a $h(v_x)$ -hez tartozó

$$H(v_x) = \int_{-\infty}^{v_x} h(v'_x) dv'_x = \frac{1}{2} \left[1 + \text{Erf} \left(v_x \sqrt{\frac{m}{2k_B T}} \right) \right] \quad (7.12)$$

valószínűségi eloszlásfüggvényt mutatja, ahol $\text{Erf}(x)$ az ú.n. hibafüggvény [49].



7.3. ábra. Argon atomok x irányú sebességkomponensének valószínűségi sűrűségfüggvénye (a) és eloszlásfüggvénye (b), $T = 300$ K mellett.

A fent ismertetett módszer szerint a véletlen minták előállításának módja:

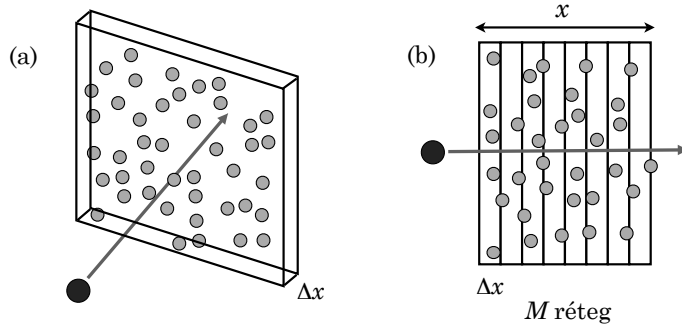
$H(v_i) = R_{01}$, amiből egy adott sebességkomponens:

$$v_i = \frac{\text{Erf}^{-1}(2R_{01} - 1)}{\sqrt{m/2k_B T}}. \quad (7.13)$$

Három minta előállításával megkapjuk a T hőmérsékletű sokaságból véletlenszerűen választott gázatom $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ sebességvektorát.³

7.2. A részecsketranszport leírása

A részecskék transzportjának szimulációjában alapvetően két feladatot kell megoldani: (i) az ütközések között a mozgásegyenlet integrálásával követni kell a részecskék trajektóriáit, (ii) valamint dönteni kell az ütközések bekövetkezéséről és meg kell valósítani ezek „lejátszását”. Az utóbbiak – mint a 4.1.1. fejezetben bemutattuk – igen sokfélék lehetnek. A továbbiakban elektronok transzportját tekintjük atomos gázban (vagyis elektronok mozgásáról és elektron - atom ütközésekről beszélünk), viszont az elmondottak értelemszerűen alkalmazhatók molekuláris gázokra, illetve ionok transzportjának leírására is.



7.4. ábra. Részecske áthaladása (a) „vékony” gágrétegen és (b) makroszkopikus méretű tartományon.

³A fenti módszer hatékony alternatívájaként alkalmazható a Box-Muller transzformáció, ami egyenletes eloszlású véletlenszámokból állít elő Gauss-eloszlást követő véletlenszámokat [81]. Ha $R_{01}^{(1)}$ és $R_{01}^{(2)}$ két független, egyenletes eloszlásból választott véletlenszám, akkor

$$S^{(1)} = \sqrt{-2 \ln R_{01}^{(1)}} \cos[2\pi R_{01}^{(2)}]$$

$$S^{(2)} = \sqrt{-2 \ln R_{01}^{(1)}} \sin[2\pi R_{01}^{(2)}]$$

a $h(x) = (1/\sqrt{2\pi})e^{-x^2/2}$ sűrűségfüggvényű standard normál eloszlást követő független véletlenszámok. Következésképpen, a fent tárgyalt, T hőmérséklettel jellemzett Maxwell-Boltzmann-eloszlásból, melyben egy sebességkomponens valószínűségi sűrűségfüggvénye 7.11. szerinti, egy részecske bármely irányú véletlen sebességkomponense $v_i = S \sqrt{k_B T/m}$ módon választható.

A 4.3. fejezetben, az ütközési hatáskeresztmetszet fogalmának bevezetésénél láttuk, hogy egy gágrétegen áthaladva a részecskenyaláb sűrűsége exponenciálisan csökken. Most, a 7.4.(a) ábra segítségével egy elektron áthaladását vizsgáljuk egy Δx vastagságú gágrétegen. A vizsgált elektron pályája véletlenszerű pozícióban keresztezi az A felületű gágréteget, amelyben a gáztomok sűrűsége n_0 , illetve száma $N_0 = n_0 A \Delta x$. Az *ütközés valószínűségét* a σ „látszólagos felületű” atomok által lefedett $N_0 \sigma$ terület és az A felület aránya adja:

$$P_c(\Delta x) = \frac{N_0 \sigma}{A} = n_0 \sigma \Delta x \quad (\Delta x \rightarrow 0). \quad (7.14)$$

Tekintsük most a részecske áthaladását egy *makroszkopikus* méretű tartományon! Az ezen való áthaladásakor bekövetkező ütközés valószínűségének kiszámításához osszuk ezt az x hosszúságú tartományt Δx vastagságú rétegek sorozatára, a 7.4.(b) ábra szerint!

Annak a valószínűsége, hogy M számú, *összesen* $x = M \Delta x$ vastagságú rétegen történt áthaladás során az elektron *még nem* ütközött:

$$\begin{aligned} P_0(x) &= [1 - P_c(\Delta x)]^M = (1 - n_0 \sigma \Delta x)^M = (1 - n_0 \sigma \Delta x)^{x/\Delta x} \\ &= (1 - n_0 \sigma \Delta x)^{n_0 \sigma x / n_0 \sigma \Delta x}, \end{aligned} \quad (7.15)$$

ami a $\Delta x \rightarrow 0$ határátmenetben:⁴

$$P_0(x) = \exp(-n_0 \sigma x), \quad (7.16)$$

vagyis az ütközés nélküli „átrepülés” valószínűsége exponenciálisan csökken, amennyiben a hatáskeresztmetszet állandó (lásd 7.5. ábra). Annak valószínűsége, hogy a megtett x út alatt egy, vagy több ütközés bekövetkezett:

$$P_c(x) = 1 - \exp(-n_0 \sigma x). \quad (7.17)$$

Továbbra is feltételezve, hogy a σ hatáskeresztmetszet állandó, a fentiek alapján egyszerűen megadható egy véletlen repülési szabad úthossz. Az x és $x + \Delta x$ helyek közötti ütközés valószínűsége

$$P(x, x + \Delta x) = P_0(x) P_c(\Delta x) = \exp(-n_0 \sigma x) n_0 \sigma \Delta x, \quad (7.18)$$

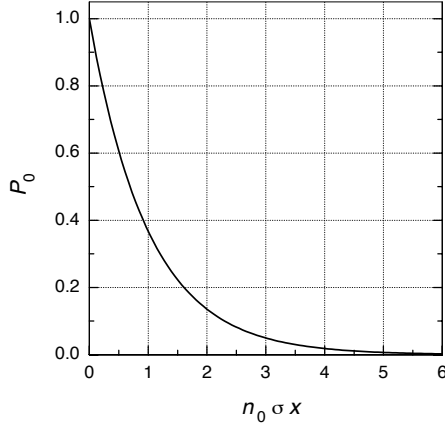
vagyis az x ütközési pozíció, mint valószínűségi változó, $h(x)$ valószínűségi sűrűségfüggvénye (lásd 7.1. fejezet):

$$h(x) = n_0 \sigma \exp(-n_0 \sigma x). \quad (7.19)$$

A szabad úthossz megadásához szükségünk van a $H(x)$ eloszlásfüggvényére, ami

$$H(x) = \int_0^x h(x') dx' = 1 - \exp(-n_0 \sigma x). \quad (7.20)$$

⁴ A $\lim_{\mathcal{A} \rightarrow 0} (1 - \mathcal{A})^{\mathcal{B}/\mathcal{A}} = \exp(-\mathcal{B})$ összefüggés felhasználásával.



7.5. ábra. A részecske ütközés nélküli úthosszának valószínűsége állandó σ mellett.

A szabad úthossz egy véletlen λ értékét, a 7.1. fejezetben leírtak alapján a $H^{-1}(R_{01}) = \lambda$ egyenlet megoldásával kapjuk:

$$\lambda = -\frac{1}{n_0 \sigma} \ln(1 - R_{01}) = -\lambda_0 \ln(1 - R_{01}), \quad (7.21)$$

ahol λ_0 az *átlagos szabad úthossz* (lásd 4.3. fejezet). Hangsúlyozzuk, hogy itt feltételeztük a hatáskeresztmetszet állandóságát. A szabad úthosszhoz hasonlóan az ütközések közötti *repülési idő* is egyszerűen megadható abban az esetben, ha a $\nu = n_0 \sigma v$ ütközési frekvencia állandó. Ekkor

$$\tau = -\frac{1}{\nu} \ln(1 - R_{01}). \quad (7.22)$$

Mivel az ütközési hatáskeresztmetszet általában energiafüggő, ezért egy makroszkopikus méterű tartományon való ütközésmentes áthaladás valószínűsége a 7.16. alakról az alábbira módosul:

$$P_0 = \exp \left[-n_0 \int_0^x \sigma[\varepsilon(x')] dx' \right], \quad (7.23)$$

vagy

$$P_0 = \exp \left[-n_0 \int_0^t \sigma[v(t')] v(t') dt' \right]. \quad (7.24)$$

A (q töltésű és m tömegű) részecskék ütközések közötti trajektóriáit a

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = q \mathbf{E} \quad (7.25)$$

mozgásegyenlet határozza meg, amit szimulációkban diszkrét Δt időlépéssel integrálunk. Ez például, a legegyszerűbb esetet képviselő térben és időben állandó

gyorsulás (vagyis homogén és stacionárius elektromos tér) esetén az alábbi séma alapján történhet:⁵

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{\mathbf{a}}{2}(\Delta t)^2 \quad (\mathbf{a} = q\mathbf{E}/m) \quad (7.26)$$

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \mathbf{a}(t)\Delta t. \quad (7.27)$$

A részecske minden, a fenti összefüggések szerinti „léptetése” után kiszámítjuk az ütközés valószínűségét:

$$P_c(\Delta t) = 1 - \exp[-n_0\sigma(v)v\Delta t], \quad (7.28)$$

ahol feltételezzük, hogy az időlépés alatt a részecske v sebessége állandó. A Δt időlépés nagyságát úgy kell megválasztani, hogy ez a feltételezés ne okozzon jelentős hibát, továbbá, hogy Δt alatt a *többszörös ütközés* valószínűsége elhanyagolhatóan kicsi legyen!⁶

Megjegyezzük, hogy amennyiben a háttérgáz atomjait nem tekinthetjük állónak, akkor az ütközési valószínűség kiszámítása az ütköző partnerek *relatív sebességén* alapul, azaz

$$P_c(\Delta t) = 1 - \exp[-n_0\sigma(g)g\Delta t], \quad (7.29)$$

ahol $\mathbf{g} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ a relatív sebesség. Itt $\mathbf{v}_1$ a követett elektron sebessége, $\mathbf{v}_2$ pedig a háttérgáz részecskéi közül véletlenszerűen választott potenciális ütköző partner sebessége. Az ütközési valószínűség kiszámításánál a *potenciális ütköző partnert* minden követett elektron és minden időlépés után újra kell választani!

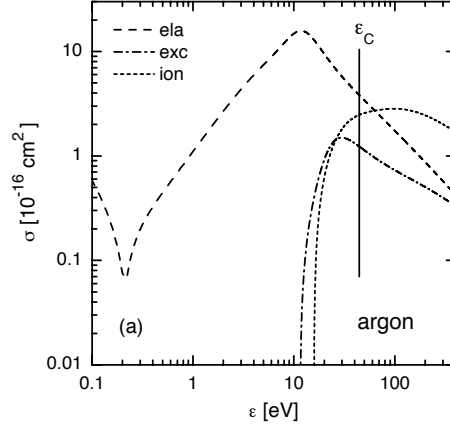
Az elektron (7.26. és 7.27. egyenletekkel megadott) új koordinátáinak kiszámítása után az ütközés bekövetkezéséről a 7.28. vagy 7.29. összefüggésekkel (a *teljes* hatáskeresztmetszet alapján) kiszámított P_c ütközési valószínűség és egy R_{01} véletlenszám összehasonlításával döntünk. Amennyiben $R_{01} < P_c$, „lejátsszuk” az ütközést, ellenkező esetben, azaz $R_{01} \geq P_c$ esetén a részecske ütközés nélkül halad tovább, egy újabb Δt idejű léptetés következhet.

Ütközés bekövetkezésekor az első feladat az ütközés *típusának* kiválasztása. Ezt argon gáz esetére és egy olyan egyszerűsített modellre mutatjuk be, ahol feltételezzük, hogy az elektronok és az atomok között három lehetséges folyamat következhet be: rugalmas szórás, ionizáció és gerjesztés (az utóbbi esetben egyetlen effektív energiaszintet veszünk figyelembe). A megfelelő hatáskeresztmetszeteket [40] a 7.6. ábra szemlélteti. Az ábra példaként feltüntet egy lehetséges ε_c ütközési energia értéket is. Az ütközés *típusának* kiválasztásához egy egységnyi hosszúságú intervallumot az aktuális ütközési energia melletti hatáskeresztmetszet értékek ($\sigma_{\text{ela}}(\varepsilon_c)$, $\sigma_{\text{exc}}(\varepsilon_c)$, $\sigma_{\text{ion}}(\varepsilon_c)$) arányában a 7.7. ábrán bemutatott módon felosztjuk, majd egy R_{01} véletlenszám segítségével a lehetséges folyamatok egyikét kiválasztjuk.⁷

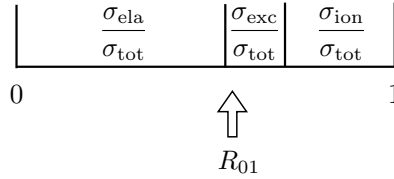
⁵Általánosabb esetben, különösen akkor, ha mágneses tér is jelen van, olyan integrálási sémát kell választani, ami pontos eredményt ad hely- vagy időfüggő tér esetén is, ilyen pl. a sebesség-Verlet („velocity-Verlet”) módszer [82].

⁶A többszörös ütközés lehetőségének elkerülése a gyakorlatban $P_c(\Delta t)$ értékét néhány százalékra korlátozza.

⁷Megjegyezzük, hogy az ütközés lefolyásának és típusának együttes meghatározására elég akár csak egy véletlenszámot használni, ld. [83].



7.6. ábra. Elektron - argon atom ütközések egyszerűsített (a gerjesztéseket egy effektív folyamatként kezelő) hatáskeresztmetszetei [40]. („ela”: rugalmas ütközés, „exc”: gerjesztés, „ion”: ionizáció.)



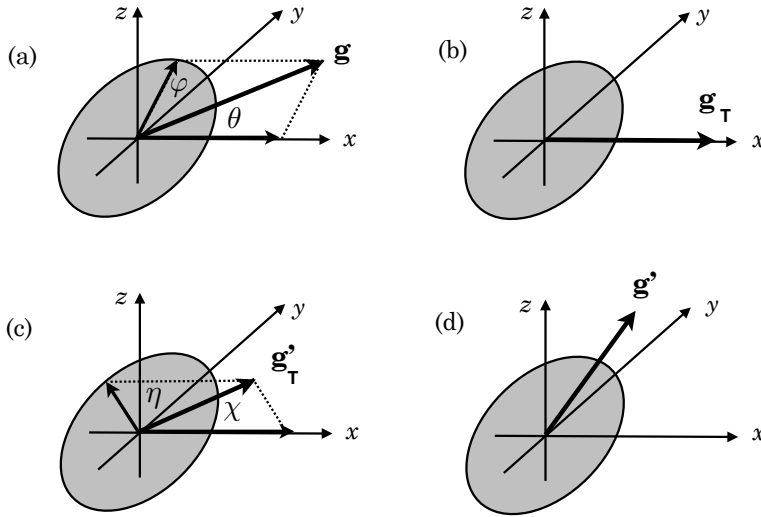
7.7. ábra. A bekövetkező ütközés típusának kiválasztásához az egységnyi hosszúságú intervallumot az aktuális részecskeenergia melletti hatáskeresztmetszet értékek arányában osztjuk fel, majd egy R_{01} véletlenszám segítségével ezek egyikét kiválasztjuk. ($\sigma_{\text{ela}} + \sigma_{\text{exc}} + \sigma_{\text{ion}} = \sigma_{\text{tot}}$)

Az ütközés során általános esetben megváltozik a követett részecske sebességvektorának nagysága és iránya. A folyamat követéséhez általában át kell térnünk a tömegközépponti koordináta-rendszerbe (lásd a 4.2. fejezet) és a **g** *relatív sebességvektort* kell módosítani. Ennek lépéseit a 7.8. ábra mutatja be.⁸

Első lépésként meghatározzuk a **g** vektor θ és φ Euler-szögeit (melyek egyértelműen meghatározzák a vektor irányát):

$$\mathbf{g} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} g_x \\ g_y \\ g_z \end{pmatrix} = g \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \end{pmatrix}. \quad (7.30)$$

⁸Megjegyezzük, hogy a konvencióknak megfelelően az óramutató járásával ellentétes irányú forgatás szögét tekintjük pozitívnak és hangsúlyozzuk, hogy a műveletek során a sebességvektort forgatjuk el és nem a koordináta-rendszert!



7.8. ábra. Az ütközési folyamat szimulációjának lépései [84]. (A CC BY 4.0 licenc alapján reprodukálva az alábbi cikkből: Z. Donkó, A. Derzsi, M. Vass, B. Horváth, S. Wilczek, B. Hartmann, P. Hartmann: eduPIC: an introductory particle based code for radio-frequency plasma simulation, Plasma Sources Science and Technology 30, 095017 (2021), <https://doi.org/10.1088/1361-6595/ac0b55>.)

Következő lépésként úgy transzformáljuk a relatív sebességvektort, hogy az x irányba mutasson. Ezt egy x tengely körüli $-\varphi$ szöggel való, majd a z tengely körüli $-\theta$ szöggel történő elforgatással érjük el (lásd 7.8.(b) ábra).⁹

$$\mathbf{g}_T = \mathbf{T}_z(-\theta)\mathbf{T}_x(-\varphi)\mathbf{g} = g \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (7.31)$$

Ezek után következik a $\mathbf{g}$ vektor nagyságának és irányának megváltoztatása (lásd 7.8.(c) ábra). (Rugalmas folyamat esetén csak a vektor iránya változik, rugalmatlan esetben a nagysága és iránya is.) Az irány megváltoztatását két szög: a szórási szög (χ) és az azimutszög (η) írja le.

$$\mathbf{g}'_T = g' \begin{pmatrix} \cos \chi \\ \sin \chi \cos \eta \\ \sin \chi \sin \eta \end{pmatrix}, \quad (7.32)$$

A szórás szög szerinti eloszlását illetően

- izotróp szórás feltételezése esetén a szórási és azimut szögeket a 7.9. és 7.10. összefüggések értelmében állíthatjuk elő;

⁹Erre a lépésre valójában nincs szükség, viszont a szórás után a transzformáció inverzét majd alkalmazni kell.

– a $d\sigma/d\Omega$ differenciális hatáskeresztmetszet ismeretében a szórási szöget az

$$\int_0^x \frac{d\sigma(\varepsilon, \chi')}{d\Omega} \sin \chi' d\chi' = R_{01} \int_0^\pi \frac{d\sigma(\varepsilon, \chi')}{d\Omega} \sin \chi' d\chi' \quad (7.33)$$

egyenlet χ -re adódó megoldása adja meg, míg az azimutszög ugyancsak 7.10. szerint választható.

A 7.32. összefüggésben megjelenő g' sebesség rugalmatlan ütközések esetén eltér az „eredeti” g sebességtől, az ütközés során bekövetkező energiaváltozás miatt. Gerjesztési folyamatok esetén a kinetikus energiából le kell vonni a gerjesztendő szint energiáját. Ionizációs folyamatok esetén a „bejövő” elektron energiájának egy része az atom egy elektronjának leszakítására fordítódik, a fennmaradó kinetikus energiát a két elektron között különböző feltételezések szerint lehet elosztani.

Az ütközési folyamat lejátszásának utolsó lépéseként a második lépés transzformációjának inverzét (a z tengely körüli θ szöggel való elforgatást, majd az x tengely körüli φ szöggel való elforgatást) hajtjuk végre (lásd 7.8.(d) ábra):

$$\begin{aligned} \mathbf{g}' &= \mathbf{T}_x(\varphi)\mathbf{T}_z(\theta)\mathbf{g}'_T \\ &= g' \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta \cos \varphi & \cos \theta \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi & \cos \theta \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \chi \\ \sin \chi \cos \eta \\ \sin \chi \sin \eta \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (7.34)$$

amiből a végeredmény az ütközés utáni relatív sebességvektorra:

$$\mathbf{g}' = g' \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \chi - \sin \theta \sin \chi \cos \eta \\ \sin \theta \cos \varphi \cos \chi + \cos \theta \cos \varphi \sin \chi \cos \eta - \sin \varphi \sin \chi \sin \eta \\ \sin \theta \sin \varphi \cos \chi + \cos \theta \sin \varphi \sin \chi \cos \eta + \cos \varphi \sin \chi \sin \eta \end{pmatrix}. \quad (7.35)$$

A két részecske ütközés utáni sebességvektorai $\mathbf{g}'$ ismeretében:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}'_1 &= \mathbf{w} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{g}' \\ \mathbf{v}'_2 &= \mathbf{w} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{g}' \end{aligned}$$

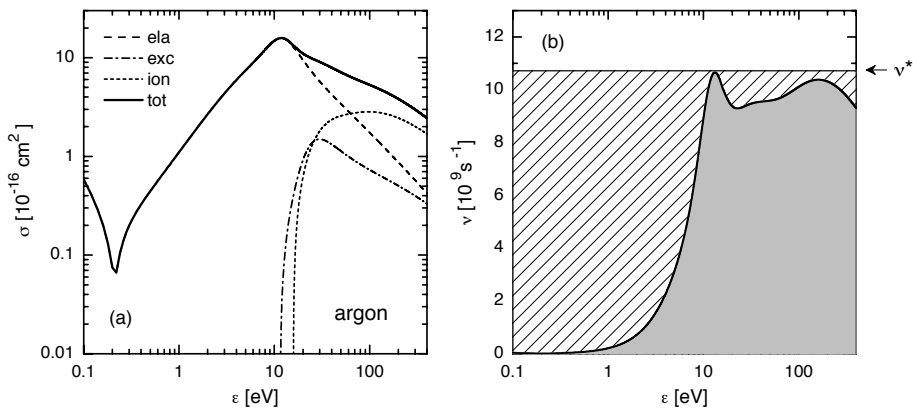
ahol $\mathbf{w} = (m_1\mathbf{v}_1 + m_2\mathbf{v}_2)/(m_1 + m_2)$ a tömegközéppont sebessége (ami a részecskék ütközés előtti sebességeiből számolható ki; lásd a 4.2. fejezet). Ezzel az ütközés, mint $\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}'_1$ transzformáció „lejátszása” megtörtént, az elektron követése a mozgásegyenlet további integrálásával folytatódik. Megjegyezzük, hogy az ismertetett eljárás teljeskörűen alkalmazható idő- és/vagy helyfüggő elektromos tér esetén is.

7.2.1. A null-ütközés módszer

Az előző fejezetben láttuk, hogy állandó hatáskeresztmetszet (σ) esetén a részecske következő (véletlen) szabad úthossza, vagy állandó ütközési frekvencia

esetén a következő (véletlen) repülési ideje egyszerűen megadható. Ugyanakkor, amennyiben a hatáskeresztmetszet és az ütközési frekvencia (a valós gázokra jellemző módon) energiafüggő, a fenti paraméterek nem adhatók meg egyszerűen, az ütközés bekövetkezéséről a részecske minden kis elmozdulása után dönteni kell a 7.28. (vagy a 7.29.) összefüggés alapján. Ha a feladatunk például csak az ütközési pozíciók meghatározása, vagy a részecskék energiaeloszlásának kiszámítása egy adott idő eltelte után és nincs szükségünk a trajektóriák ismeretére, akkor a mozgásegyenlet kis időlépésekkel végzett számításigényes integrálása ebből a szempontból nyilvánvalóan szükségtelen. Felmerül a kérdés, hogy ez valamilyen módon megkerülhető-e?

Vegyük példának a repülési idő megadását! Állandó ütközési frekvencia esetén ez a 7.22. összefüggés szerint egyszerűen megadható. A (látszólag ellentmondásos) kérdés az, hogy általános esetben, energiafüggő hatáskeresztmetszetek esetén lehet-e ν állandóságát biztosítani? A megoldást egy olyan *fiktív folyamat*, a *null-ütközés bevezetése jelenti, amely olyan hatáskeresztmetszettel rendelkezik, ami a teljes ütközési frekvenciát energiafüggetlenné teszi* [85]. A módszer magyarázatához tekintsük a 7.9. ábrát, ami argon gáz esetére mutatja az egyszerűsített hatáskeresztmetszeteket és az ezekből számolt ütközési frekvenciát az energia függvényében. A fentiek szerint a null-ütközés frekvenciáját úgy kell előírni, hogy a valós ütközési frekvenciát egy állandó ν^* értékre egészítse ki. ν^* értéke



7.9. ábra. A „null-ütközés” módszer magyarázatához. (a) Az e^- –Ar ütközések egyszerűsített hatáskeresztmetszet halmaza és a teljes ütközési hatáskeresztmetszet („tot”). (b): Az ütközési frekvencia az elektron energiájának függvényében (hideg gáz feltételezéssel, azaz álló atomokat feltételezve); a vastag vonal a valós (az (a) panel teljes ütközési hatáskeresztmetszetével számolt) ütközési frekvencia (1 Torr nyomás és 300 K hőmérsékletnek megfelelő gázsűrűséggel számolva). A null-ütközés folyamat ezt egészíti ki egy energiafüggetlen ν^* értékre; a szürke színű terület a valós ütközéseknek, a csíkozott terület a null-ütközésnek felel meg.

célszerűen $\nu(\varepsilon)$ maximumának választható.

A null-ütközés bevezetésével az állandó értékű ν^* ütközési frekvencia lehetővé teszi a következő repülési idő egyszerű megadását, mint

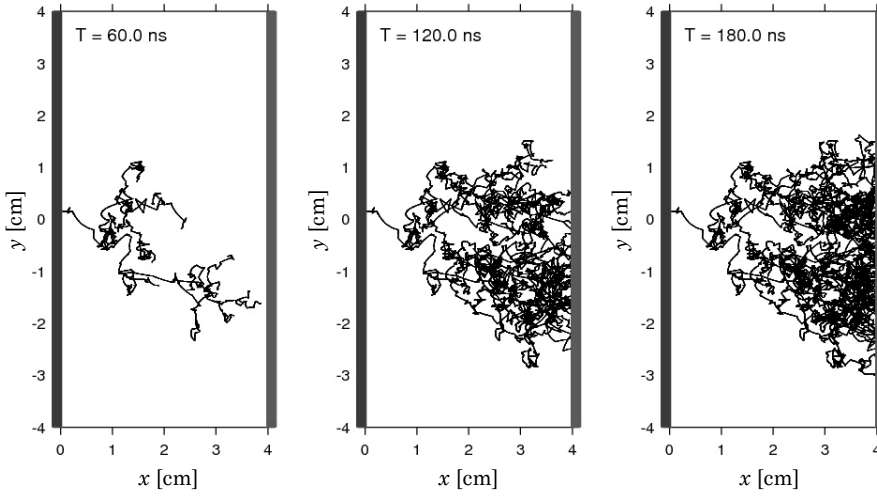
$$\tau = -\frac{1}{\nu^*} \ln(1 - R_{01}). \quad (7.36)$$

Az ütközés fajtájának kiválasztásakor a lehetséges folyamatok körét ki kell bővíteni a null-ütközés esetével! (Ütközés bekövetkezésekor a végbemenő folyamat kiválasztása a fent ismertetett módon tehető meg.) Amennyiben a valós folyamatok egyike következik be, ennek végrehajtása a már ismertetett módon történik. A null-ütközés bekövetkezésekor a részecske sebességvektora változatlan marad és követése tovább folytatódik. (A „null-ütközés módszer” alkalmazása a transzportszimulációk során általában nagyságrendnyi számítási sebesség növekedést eredményez.)

7.3. Elektronlavinák és elektrontranszport homogén elektromos térben

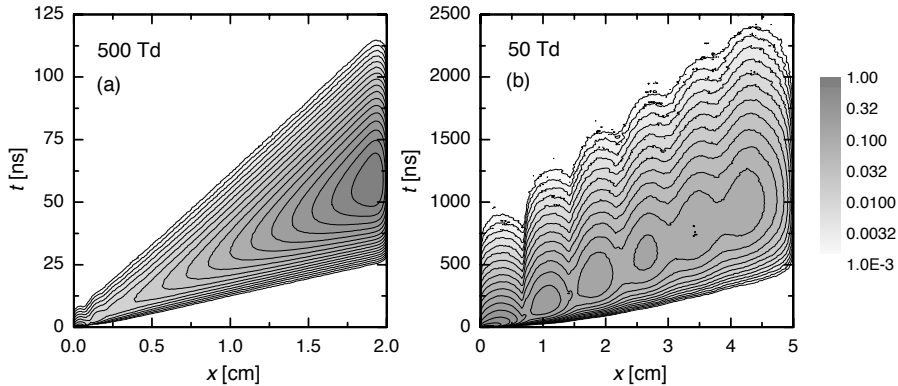
Elektronlavinák alatt az elektronok (ionizációs folyamatokkal való) sokszorozódását értjük. Ezek vizsgálatához tekintsünk két, síkpárhuzamos elrendezésű elektródát! (A fejezetben tárgyalt összes rendszernél ezt az elektródageometriát feltételezzük.) Az elektromos tér legyen homogén és vektora mutasson az elektródákra merőleges irányba! Feladatunk egy, a katódból kilépő elektron, illetve az ionizációs folyamatok során keletkező további elektronok ütközéseinek „lejátszása” és trajektóriáinak követése az anódig. Elsőként tekintsük a katódból kilépő elektront! Az előző fejezetben megismert módon az elektron trajektóriáját a mozgásegyenlet Δt időlépésű integrálásával határozzuk meg. Minden egyes időlépés után kiszámítjuk a P_c ütközési valószínűséget, a 7.28. (vagy a 7.29.) kifejezés szerint. Ezt az értéket összehasonlítjuk egy R_{01} véletlenszámmal, $R_{01} < P_c$ esetén lejátszunk az ütközést. Ennek fajtáját egy további véletlenszám segítségével választjuk ki és az ütközés során az elektron sebességének értékét és irányát az ütközési folyamat jellemzőinek megfelelően módosítjuk. Amennyiben egy ionizációs folyamat megy végbe, a továbbiakban már két elektront, további ionizációs ütközések után egyre több elektront követünk, ugyan csak a fenti lépésekkel. Az elektronok követését mindaddig folytatjuk, amíg eléri az anódot (amiről itt feltételezzük, hogy tökéletes nyelőként működik, azaz az elektronok nem verődnek vissza a felületéről).

A 7.10. ábra egy elektronlavina fejlődését mutatja az idő függvényében, $n_0 = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ gázsűrűség, $T = 300 \text{ K}$ hőmérséklet ($p = 41.4 \text{ Pa}$ nyomás), $L = 4 \text{ cm}$ elektródatávolság és $E/n_0 = 500 \text{ Td}$ redukált térerősségnek megfelelő $V_0 = 200 \text{ V}$ feszültség mellett. A trajektóriákon látható „törések” a rugalmas ütközéseknek és a gerjesztéseknek felelnek meg, az „elágazások” pedig az ionizációs ütközéseket jelzik. Látható, hogy az adott feltételek mellett jelentős elektronsokszorozódás megy végbe. A szimulációk során az elektronok összes fázistérbeli ko-



7.10. ábra. Egy elektronlavina időbeli felépülése $p = 41.4$ Pa nyomás, $L = 4$ cm elektródatávolság és $E/n_0 = 500$ Td redukált elektromostér-erősség mellett. A katód $x = 0$ cm-nél, míg az anód $x = 4$ cm-nél helyezkedik el.

ordinátája rendelkezésünkre áll az idő függvényében. Ezekből a koordinátákból felépíthető a sebességeloszlás-függvény, illetve kiszámíthatók a transzportparaméterek, vagyis mindazon információ megkapható, amit a Boltzmann-egyenlet megoldásától várhatnánk.



7.11. ábra. Az elektronsűrűség térbeli és időbeli változása (relatív egységekben): (a) $E/n = 500$ Td és (b) $E/n = 50$ Td értékekre ($p = 133$ Pa, $T = 300$ K).

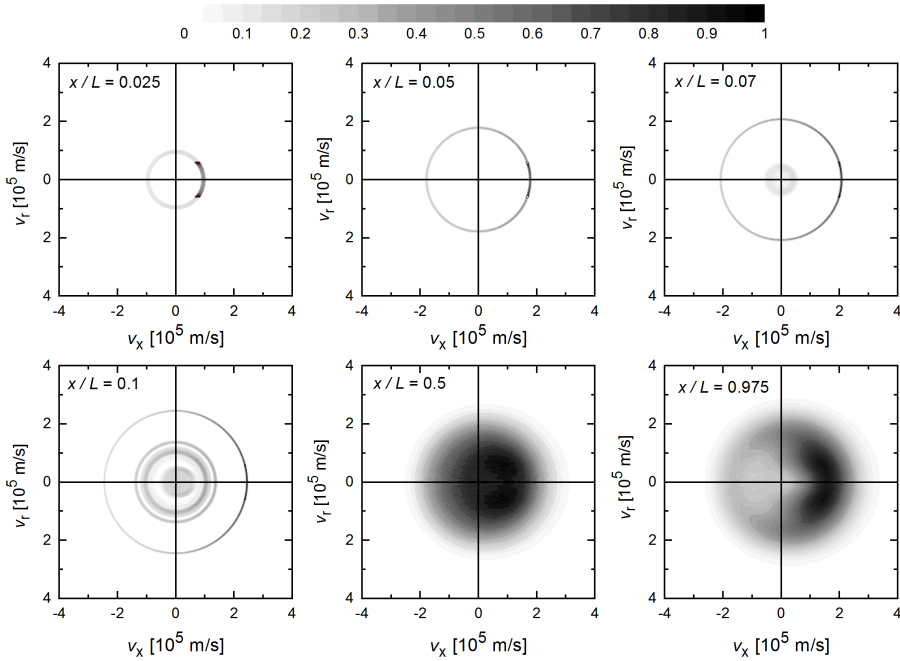
A 7.11. ábra a hely- és időfüggő $n_e(x, t)$ elektronsűrűséget mutatja 500 Td és 50 Td esetekre, $p = 133$ Pa mellett, olyan elektronlavinák sokaságára, ame-

lyeket $t = 0$ időpillanatban az $x = 0$ helyről kibocsátott elektronok keltettek (azaz egy *impulzusszerű* elektronforrás esetére). A nagyobb E/n értékhez tartozó ábra egyszerű alakot mutat, míg az alacsonyabb E/n_0 -nak megfelelő esetben egy bonyolult „mintájú” eloszlást kapunk. Az egyszerűbb szerkezet valójában az *egyensúlyi (hidrodinamikai) transzport* körülményeit jelzi – az eloszlás megfelel az 5.4.2. fejezetben kapott 5.111. összefüggés szerinti analitikus eredménynek, ami három folyamatot jelez: (i) a részecskesokaság tömegközéppontja az idő múlásával a nagyobb x koordináták felé tolódik el, ami az elektronok sodródását jelzi az elektromos térben, (ii) a sűrűség növekedése a hely függvényében az ionizációnak köszönhető részecskesokaszorozódás jele, valamint (iii) a felhő fokozódó térbeli kiterjedése az idő függvényében a diffúzióról ad számot.

A kisebb redukált térerősség ($E/n = 50$ Td) esetében a 7.11.(b) ábrán megjelenő mintázat arra enged következtetni, hogy a vizsgált térrészben az elektronok transzportja *erősen nemegyensúlyi jellegű*. Domináns jellemzőként egy ≈ 0.75 cm-es periódusú struktúrát figyelhetünk meg, ami azzal magyarázható, hogy az elektronok nagy számban, közel azonos pozíciókban vesznek részt gerjesztési folyamatokban. Ez tipikusan olyan körülmények között valósul meg, amikor az elektronok hosszú távolság befutása után érik el a gázatomok gerjesztéséhez szükséges küszöbenergiát. Az adott esetben az elektródák közé kapcsolt feszültség ≈ 80 V és a térerősség így ≈ 16 V/cm. Az argon atomok első gerjesztett állapotának energiája 11.55 eV, amelynek eléréséhez $\Delta x \approx 0.72$ cm távolság befutása szükséges. Ez a távolság jól egyezik a sűrűség változásának megfigyelhető periódusával. $E/n = 50$ Td mellett az ionizáció nem jelentős, de az elektronfelhő sodródása és kiszélesedése jól megfigyelhető a 7.11.(b) ábrán.

A következőkben egy *állandósult állapotú* rendszerre (azaz *folytonos* elektronforrás esetére) vizsgáljuk a sebességeloszlás-függvény térbeli változását két végtelen kiterjedésű párhuzamos elektróda között. Az elektromostérerősségvektor az x tengellyel párhuzamos, az ebből adódó hengerszimmetria miatt a sebességeloszlás-függvény $f(x, v_x, v_r)$ alakra redukálódik. Térbeli változását a 7.12. ábra szemlélteti $p = 133$ Pa nyomás, $L = 4$ cm elektródatávolság és $E/n = 500$ Td redukált térerősség esetére (ami 161 V feszültségnek felel meg a két elektróda között).

A szimulációban az elektronok a katódból 1 eV energiával, egy félgömbön egyenletes eloszlású irányban lépnek ki. Ennek megfelelően a sebességeloszlás-függvényük egy „fél gömbhéjnak” felel meg. (A héj jelleg a kilépő elektronok azonos energiájából következik, a kilépéskor csak pozitív x irányú sebességek lehetségesek, ezért a gömbhéjnak csak a „pozitív fele” létezik a sebességtérben.) A katódból kilépő elektronok pályáját az elektromos tér az x tengely irányába hajlítja el, ezért a sebességeloszlás-függvény a nagyobb v_x értékekre a katódtól távolodva növekszik. Ugyanakkor a rugalmas ütközések „összekeverik” az elektronok sebességének irányát, ennek következtében populálódik $f(v_x, v_r)$ negatív v_x értékek mellett is. (Megjegyezzük, hogy a katódhoz közel rugalmatlan ütközések még nem lehetségesek az alacsony elektronenergia miatt.) A fenti két folyamat együttesen alakítja ki az $x/L = 0.025$ és $x/L = 0.05$ helyeken „mért”



7.12. ábra. Az $f(x, v_x, v_r)$ sebességeloszlás-függvény alakja különböző pozíciókban, állandósult állapotú rendszerre, $E/n = 500$ Td redukált télerősség, $p = 133$ Pa nyomás és $L = 4$ cm elektródatávolság esetére.

sebességeloszlás-függvényt. Mindkét helyen megfigyelhető az elektronoknak egy előrehaladó (az adott pozíciót ütközés nélkül elérő) csoportja, amelynek súlya növekvő x mellett csökken, valamint egy izotróp, a rugalmas ütközések által létrehozott rész (gyűrű). A két pozíció közötti potenciálkülönbségnek megfelelően a gömbhéj (ill. kétdimenziós vetületének) sugara növekszik.

A katódtól távolodva az elektronok energiája növekszik a gyorsító elektromos tér hatására. Amikor az elektronok energiája eléri az argon atomok első gerjesztési szintjéhez tartozó értéket, az elektronok jelentős energiát veszíthetnek és így a sebességük lényegesen lecsökkenhet. Ekkor a sebességeloszlás-függvényben megjelenik egy lassú komponens (7.12. ábra, $x/L = 0.07$). A különböző lehetséges energiavesztések értékek a sebességeloszlás-függvényben egyre több közel koncentrikus kört eredményeznek ($x/L = 0.1$), amelyek végül egybefolynak és kialakul az egyensúlyi eloszlásfüggvény (pl. $x/L = 0.5$). Ezen jól megfigyelhető a sodródási sebességnek megfelelő, pozitív x irányba való eltolódás. Az anód környezetében (pl. $x/L = 0.975$) az elektronok elnyelése miatt csökken a negatív x irányban haladó részecskék száma, ami a sebességeloszlás-függvényben is jelentős alakváltozást eredményez.

Végül a transzportjellemzők térbeli (pontosabban az elektromos tér irányával párhuzamos, x irányú) változását mutatjuk be, *állandósult állapotú* rendszert feltételezve. Az elektronok trajektóriáinak kiszámításán keresztül meghatározzuk az u átlagsebességet, az $\bar{\varepsilon}$ átlagos energiát, valamint az α („Townsend-féle”) ionizációs együtthatót. A jellemzők meghatározásához az elektródák közötti térrészt cellákra osztjuk, u és $\bar{\varepsilon}$ értékét az egyes cellákban tartózkodó részecskék megfelelő jellemzőinek átlagolásával kapjuk meg.

Az ionizációs együttható meghatározásához az alábbi módon járunk el. Az együttható hagyományos definíciója az egy elektron által egységnyi úthosszon keltett elektron - ion párok száma. Mivel az ionizációra vonatkozó szabad úthossz fordítottan arányos az n gázsűrűséggel, ezért az ionizációs együttható αn normalizált értéke az invariáns mennyiség, ami csak az E/n redukált térerősség függvénye. Homogén elektromos tér esetén, stacionárius rendszerben, hidrodinamikai egyensúly fennállta esetén az elektronok fluxusa és árama

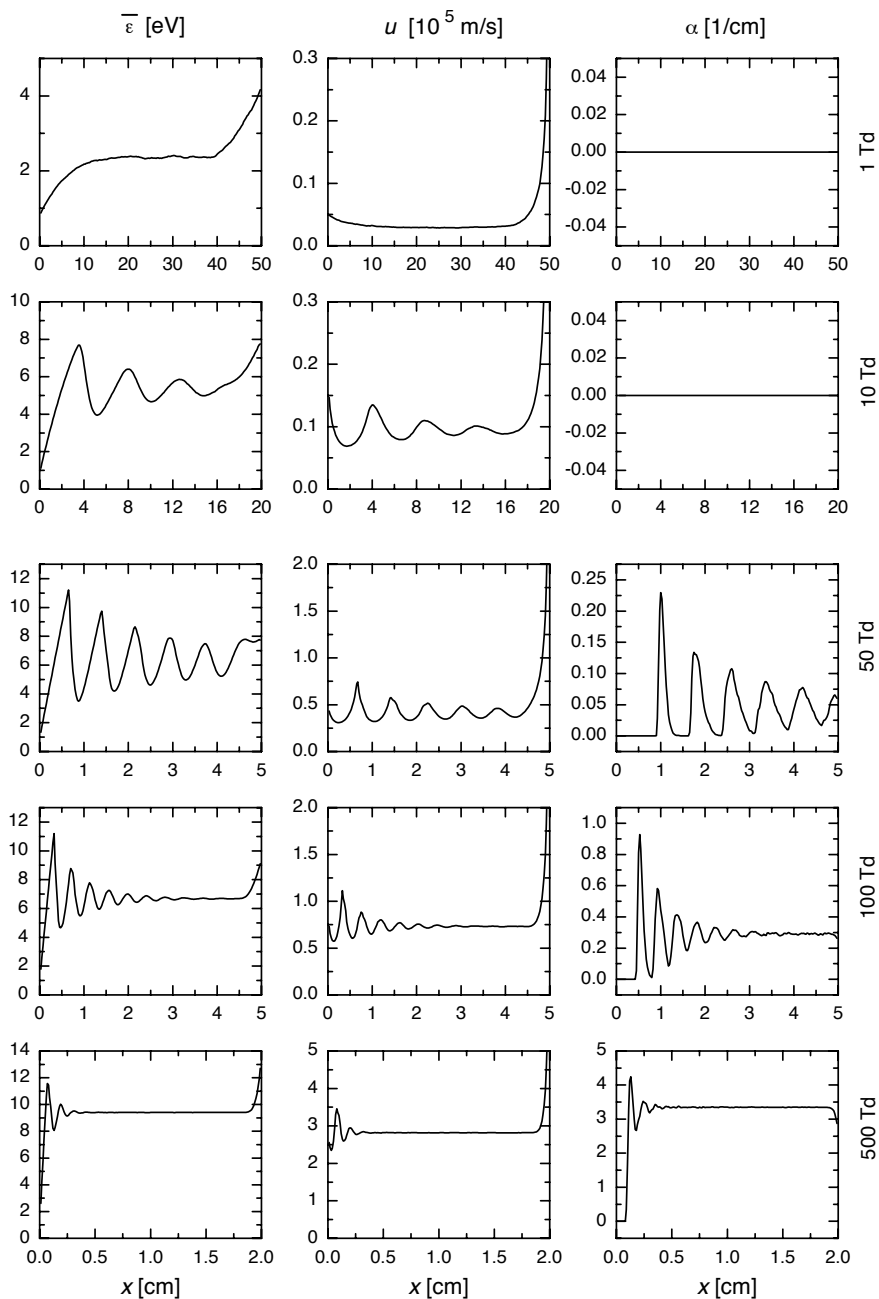
$$\Gamma(x) = \Gamma_0 \exp(\alpha x) \quad , \quad j_e(x) = j_{e,0} \exp(\alpha x) \quad (7.37)$$

szerint, exponenciálisan növekszik, ahol Γ_0 és $j_{e,0}$ a kezdőpontban vett fluxus, ill. elektronáram. Mivel az itt vizsgált rendszerben a transzport nem szükségképpen hidrodinamikai jellegű, ezért itt meg kell engednünk az α együttható helyfüggését; értékét, a fluxus térbeli változásának „mérésén” keresztül az

$$\alpha = \frac{1}{\Gamma(x)} \frac{d\Gamma(x)}{dx} = \frac{d}{dx} \ln \frac{\Gamma(x)}{\Gamma_0}. \quad (7.38)$$

összefüggés alapján határozhatjuk meg [86, 87].

A különböző E/n és elektródatávolság értékek mellett kapott transzportjellemzők térbeli változását argon gáz esetére a 7.13. ábra szemlélteti, $p = 133$ Pa mellett. Általános megfigyelésként elmondható, hogy mindkét elektróda környezetében kialakul egy nemegyensúlyi tartomány, ahol a transzportjellemzők jelentős helyfüggést mutatnak. A legkisebb E/n érték mellett (1 Td) az elektródák közötti térrész középső harmada jellemezhető (közel) állandó transzportparaméterekkel. Ilyen kis térerősség mellett az elektronok energiája alacsony és csak rugalmas ütközések következnek be. Az ionizációs folyamatok hiányát az $\alpha = 0$ érték is jelzi. Ez $E/n = 10$ Td-ra is igaz, ugyanakkor a transzportparaméterek oszcilláló jellegű térbeli változása azt mutatja, hogy a rugalmatlan (jelentős mértékű) energiavesztés is megjelenik (egyes elektronok energiája már eléri az Ar atomok gerjesztési küszöbét).



7.13. ábra. Az elektronok transzportparamétereinek térbeli változása argon gázban, a redukált térerősség (E/n) és az elektródatávolság különböző értékeire. ($p = 133 \text{ Pa}$.)

A redukált térerősséget tovább növelve, $E/n = 50$ Td mellett már ionizáció is megfigyelhető ($\alpha > 0$), ugyanakkor egyensúlyi térrész egyáltalán nem alakul ki (az adott elektródatávolság mellett). 100 Td mellett a relaxáció gyorsabb és a vizsgált tartomány egy részén egyensúlyi transzport figyelhető meg. Ez utóbbi kiterjedése jelentősen megnő 500 Td esetén, ahol a relaxáció az $x \leq 0.4$ cm tartományon játszódik le.

A fentiekből következik, hogy amennyiben Monte Carlo szimulációval kívánjuk meghatározni a részecskék *egyensúlyi* transzportparamétereit, akkor „elegendően” kiterjedt térrészre, vagy – ha a transzportot időben követjük – „elegendően” hosszú időre kell a szimulációkat elvégezni.

Továbbá, nagyon fontos megjegyezni, hogy a hidrodinamikai (egyensúlyi) transzport körülményei között a részecskék transzportparamétereit kizárólag az E/n redukált térerősség függvényei. Az itt bemutatott esetek egyértelműen azt mutatják, hogy a transzportparaméterek az elektromos tér homogén jellege ellenére helyfüggést mutatnak, ami a transzport nemegyensúlyi jellegéből fakad.



8. fejezet

Egyenfeszültségű gázkisülések

8.1. Az egyenfeszültségű gázkisülések működésének fizikai alapjai

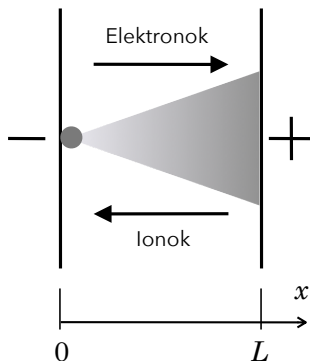
A gázkisülések legalapvetőbb fajtáját az *egyenfeszültségű gázkisülések* képviselik. A gázokat tekintve, legegyszerűbben a nemesgázokban létrehozott gázkisülések tárgyalhatók, amelyekben (a működési jellemzők viszonylag széles tartományában) csak az elektronok és az egyszeres töltésű pozitív ionok a meghatározóak,¹ bár mint látni fogjuk, egyes effektusok leírásához szükséges lehet további részecsketípusok figyelembevétele is. A továbbiakban először a gázkisülések felépüléséhez vezető folyamattal, a *gáz elektromos átütésével* foglalkozunk, melynek során az „eredetileg” szigetelő gáz – jelentős számú szabad töltéshordozó részecske megjelenése következtében – vezetővé válik. Az átütést követően, a külső áramkörü elemek és egyéb tényezők függvényében a gázkisülés különböző működési tartományokba juthat. Ezen működési tartományok közül részletesebben a „ködfénykisülésekkel” foglalkozunk, tárgyaljuk térbeli szerkezetüket, ismertetjük matematikai leírási módszereiket.

8.1.1. A gáz átütése

Az átütési folyamat követéséhez tekintsünk (a 8.1. ábra szerinti elrendezésben) két sík felületű, párhuzamos elhelyezkedésű elektródát, amelyekre egy külső forrásból V feszültséget kapcsolunk!

Az átütéshez elengedhetetlen, hogy néhány töltött részecske valamilyen módon „megjelenjen” a gáztérben. Ezen részecskék keltéséről általában a kozmikus sugárzás, vagy a radioaktív háttérsugárzás „gondoskodik”, de pl. egy külső

¹Emlékeztetjük az Olvasót, hogy alacsony ionizációs fokú plazmákkal foglalkozunk, vagyis az elektronok és az ionok sűrűsége nagyságrendekkel kisebb a semleges részecskékénél.



8.1. ábra. A gáz átütése síkpárhuzamos elektródaelrendezés esetén, a Townsend-mechanizmus körülményei (elhanyagolható tértöltés) mellett.

(mesterséges) röntgenforrás, vagy a katód fűtésével indukált termikus elektron-emisszió is létrehozhatja az „elsődleges” töltött részecskéket. Az elsődleges elektronok az elektródákra kapcsolt feszültség hatására felépülő elektromos térben az anód felé gyorsulnak és megfelelő energiát elérve, a gázban további töltött részecskéket tudnak létrehozni ionizáló ütközésekkel. Így egy *lavinafolyamat* (töltésszorzódás) indul el. Az *elektronlavinákban* keletkezett ionok a katód felé mozognak és a katód felületén elektronok kibocsátását eredményezhetik (lásd 4.1.2. fejezet). Ezek az elektronok újabb lavinákat hoznak létre, elegendően nagy feszültség esetén biztosítva a töltéshordozók körforgásszerű pótlását.

A gáz átütésének klasszikus *Townsend-féle elmélete* csak az elektronokat és a pozitív ionokat veszi figyelembe és feltételezi, hogy A 8.1. ábra szerinti elrendezésben az elektronok fluxusa a katódtól mért távolság függvényében exponenciálisan növekszik:

$$\Gamma_e(x) = \Gamma_e(0) \exp(\alpha x), \quad (8.1)$$

ahol $\Gamma_e(0)$ a katódból kilépő elektronok fluxusa, α pedig a gázra jellemző, már korábban (a 7.37. összefüggéssel) bevezetett Townsend-féle ionizációs együttható (mely az egyensúlyi transzport feltételezése miatt itt térben állandó és csak a redukált térerősség függvénye). Adott L elektródatávolság esetén az anódra érkező elektronok fluxusa

$$\Gamma_e(L) = \Gamma_e(0) \exp(\alpha L). \quad (8.2)$$

Az elektronok sokszorozódásakor a lavinákban (a keletkező elektronokkal megegyező számban) *pozitív ionok* is keletkeznek, melyekről itt feltételezzük, hogy visszajutnak a katód felületére, ahol fluxusuk:

$$\Gamma_i(0) = -\Gamma_e(0)[\exp(\alpha L) - 1], \quad (8.3)$$

hiszen a kezdeti N elektronból a katódtól L távolságra már $Ne^{\alpha L}$ elektron lesz, és mivel feltételezéseink szerint minden egyes ionizáció során egy pozitív ion is

keletkezik, így adódik az $e^{\alpha L} - 1$ faktor. A negatív előjel azt fejezi ki, hogy az ionok a 8.1. ábra szerinti geometriában az x -iránnyal ellentétesen mozognak. A pozitív ionok a γ elektronkiváltási együttható értékének megfelelő valószínűséggel elektronokat váltanak ki a felületből (lásd 4.1.2. fejezet). A gáz átütése akkor következhet be, ha ezek az ionok ezzel a folyamattal pontosan (újra) $\Gamma_e(0)$ elektronfluxust eredményeznek, azaz $\Gamma_e(0) = -\gamma\Gamma_i(0)$, amiből:

$$[\exp(\alpha L) - 1] \gamma = 1. \quad (8.4)$$

Az α ionizációs együttható redukált térerősségtől való függése az elektronüt-közéses hatáskeresztmetszetek ismeretében a Boltzmann-egyenlet megoldásával, vagy Monte Carlo szimulációval meghatározható. Az így kapott eredmények általában jól közelíthetők az alábbi kifejezéssel:

$$\frac{\alpha}{n} = A \exp\left(-\frac{B}{E/n}\right), \quad (8.5)$$

ahol A és B a gázra jellemző állandók.

K. 10: Az ionizációs együttható közelítő alakjának származtatása

A 8.5. egyenlet szerinti függvényalak a következő gondolatmenet segítségével származtatható. Az ionizációs együttható definíciója az egységnyi hosszban keltett elektron - ion párok száma. Ez két tag szorzataként kapható meg; ezek (i) az egységnyi úthosszon bekövetkező ütközések száma, vagyis a szabad úthossz reciproka és (ii) annak a valószínűsége, hogy egy ütközés során ionizáció következik be, azaz:

$$\alpha = \frac{1}{\lambda} P_{\text{ion}}.$$

Ionizáció akkor következhet be, ha az elektronoknak az utolsó ütközés óta felvett energiája meghaladja a V_i ionizációs potenciálnak megfelelő energiát, vagyis az x úthossza meghaladja a V_i/E értéket. Tudjuk, hogy az ütközés nélkül megtett út hossza exponenciális eloszlást követ (lásd 7.16. egyenlet), azaz

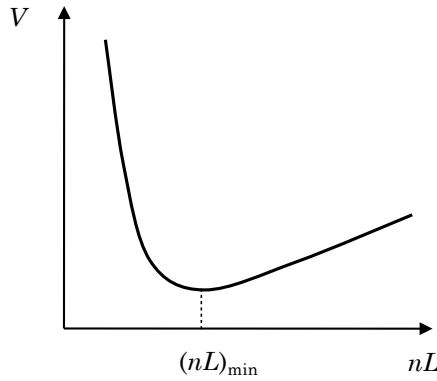
$$P_{\text{ion}} = P_0(x) = \exp(-x/\lambda) = \exp\left(-\frac{V_i/E}{\lambda}\right) = \exp\left(-\frac{V_i}{n\lambda} \frac{1}{E/n}\right).$$

Bevezetve az $A = 1/n\lambda = \sigma$ és $B = V_i/n\lambda = V_i\sigma$, csak a gáz jellemzőitől függő állandókat, az α/n redukált ionizációs együtthatóra a 8.5. függvény adódik, mely szerint α/n az A és B (állandó) paraméterek mellett csak a redukált térerősségtől (E/n) függ. Itt hallgatólágosan feltételeztük, hogy a $\lambda = 1/n\sigma$ szabad úthossz nem függ a térerősségtől – ez, a hatáskeresztmetszetek energiafüggése miatt természetesen megkérdőjelezhető. A gondolatmenet egyszerűsége ellenére a különböző gázok ionizációs együtthatói jól közelíthetők a 8.5. függvényalakokkal.

A 8.5. összefüggést L -lel megszorozva és a 8.4. egyenletet felhasználva az alábbiakat kapjuk:

$$\alpha L = A(nL) \exp\left[-\frac{B}{V/(nL)}\right] = \ln(1 + 1/\gamma). \quad (8.6)$$

Feltételezve, hogy γ állandó, a fenti összefüggés változóként csak a feszültséget és az nL (sűrűség $\times$ elektródatávolság) szorzatot tartalmazza, más szóval az így adódó, *Paschen-törvényként* ismert összefüggés azt fogalmazza meg, hogy (adott gázra) az átütési feszültség csak az nL szorzat értékétől függ.²



8.2. ábra. Paschen törvény: a gáz átütési feszültsége nL függvényében.

A 8.2. ábra egy tipikus Paschen-görbét mutat [89, 90]. A görbe minimuma („Paschen-minimum”) a töltésreprodukciós folyamatok optimumának felel meg. A görbe mentén a kis nL értékek irányába az átütési feszültség meredeken emelkedik. Ennek oka, hogy a „ritkább” gázban, vagy kisebb elektródatávolság mellett csak akkor biztosítható a töltésreprodukció, ha az ütközések között az elektronok viszonylag nagy energiát tudnak felvenni és így nagyobb valószínűséggel ionizálnak. A Paschen-minimumnál nagyobb nL értékek felé haladva az átütési feszültség lassan emelkedik. Ez azzal magyarázható, hogy az ionizációs folyamatok hatékonysága csökken, ugyanis az egyre gyakoribbá váló ütközésekben az ionizációnál alacsonyabb küszöbenergiájú gerjesztési folyamatok válnak valószínűbbé, majd az elektronok rugalmas ütközésekben fellépő energiavesztése is lényegessé válik.

²A Townsend-elmélet emellett csak olyan körülmények mellett érvényes, amikor az átütés fázisában a tértöltések felhalmozódása nem torzítja jelentősen az elektromos tér eloszlását. Nagyon nagy mértékű töltéssokszorozódás esetén az elektromos tér jelentősen torzulhat és az átütés filamentált módon, vékony csatornában megy végbe. A Paschen-törvény nem általános érvényű: pl. villámok esetében nincs másodlagoselektron-emisszió és az elektródatávolságot is viszonylag nehéz definiálni. Ekkor az elektronok sokszorozódásából adódó tértöltéseffektusok, vagyis az általuk keltett önkonzisztens elektromos tér az, ami az átütést eredményezi. Ilyen esetekben nem a Paschen-törvény, hanem az ún. *Meek–Raether*-törvény alkalmazható [88].

A fentiekben összefoglalt *klasszikus Townsend-elmélet* számos kiegészítésre szorul. Ezek (i) a katódfelületi elektronkiváltási folyamatok pontosabb tárgyalása, (ii) a gázfázisú ionizációs folyamatokban az elektronütközéses ionizáció mellett további folyamatok figyelembevétele, valamint (iii) a töltéshordozók egyensúlyi mozgására vonatkozó feltételezés feloldása.

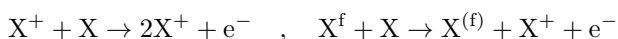
(i) A 4.1.2. fejezetben említettük, hogy a klasszikus Townsend-elméletben figyelembe vett, ionindukált elektronkiváltás mellett más folyamatok is szerepet kaphatnak a katód felületén: *metastabil atomok*, *gyors (nagy energiájú) atomok*, valamint *ultraibolya fotonok* is eredményezhetik elektronok kiváltását [40]. Mindezek figyelembevételével a 8.4. összefüggés szerinti átütési feltétel az alábbira módosul:

$$\gamma_i N_i + \gamma_p N_p + \gamma_f N_f + \gamma_m N_m = 1, \quad (8.7)$$

ahol γ_i , γ_p , γ_f , γ_m rendre az ionok, ultraibolya fotonok, gyors atomok és metastabil atomok hatását kifejező elektronkiváltási együtthatók, N_i , N_p , N_f és N_m pedig az egy elektronlavinából a katód felületére érkező különböző fajta részecskék átlagos száma. (Ez az összefüggés a 8.4. feltételnél olyan értelemben is általánosabb, hogy nem feltételezi azt, hogy az összes „aktív” részecske a katód felületére jut.) Megjegyezzük, hogy az itt megjelenő γ -együtthatók általánosan energiafüggőek.

Az elektronlavinákban keletkező, illetve ezek közül a katód felületére érkező, különböző fajtájú részecskék száma erősen függ a (redukált) térerősségtől. Argon gázra (homogén elektromos tér feltételezése mellett) végzett számítások megmutatták, hogy kis E/n értékek ($E/n \lesssim 100$ Td) mellett a katódí elektronkiváltásban a fotoeffektus játssza a legfontosabb szerepet. Közepes E/n értékeknél ($E/n \sim 1 \dots 10$ kTd) az ionok hatása dominál, a metastabil atomok $\sim 10\%$ körüli járulékot adnak, míg nagy E/n értékek mellett ($E/n \gtrsim 20$ kTd) a gyors atomok szerepe válik meghatározóvá [40].

(ii) Az ionizációs folyamatokat illetően, a klasszikus Townsend-elméletben szereplő elektronütközéses ionizáción túlmenően a gyors ionok és gyors atomok



ionizációs ütközési folyamatait is figyelembe kell venni. Egyes gázok (pl. He) esetén ezek a folyamatok eredményezik a Paschen-görbe eltérését a „klasszikus” alaktól [91].

(iii) Az elektronok transzportjának kinetikus leírásánál (a 7.3. fejezet) láttuk, hogy az elektródák környezetében nemegyensúlyi tartományok alakulnak ki, még homogén elektromos tér esetén is. A katód környezetében az egyensúlyi jellegű transzport egy adott távolság („tranzien” térrész) után alakul ki. Az átütés esetét tekintve: a Paschen-görbe „bal oldalán” (azaz a kis nL értékek tartományában) állandó L mellett a csökkenő sűrűség egyre növekvő szabad úthosszat és így hosszabb tranzienst eredményez, melynek hossza végül összemérhetővé válik az elektródatávolsággal. Ilyen körülmények között a klasszikus Townsend-elméletnek a töltött részecskék (elsősorban az elektronok) egyensúlyi mozgására vonatkozó feltételezése nyilvánvalóan megkérdőjelezhető

és a Paschen-görbére vonatkozóan pontos számítási eredmények csak a transzport nemegyensúlyi jellegének figyelembevételével várhatók, pl. [92].

Az átütési jelenségeket jelentősen befolyásolhatja továbbá az elektródák alakja, valamint bizonyos körülmények mellett megjelenő további elektronki-váltási folyamatok, mint például a fűtött katódoknál fellépő termikus emisszió és (az igen nagy térerősségek esetén megjelenő) téremisszió.

8.1.2. Állandósult állapotú gázkisülések

Mivel az alábbiakban a gázkisüléseket – praktikus szempontokból érthető módon – egy elektromos áramkör részeként kezeljük, ezért szót kell ejtenünk arról, hogy egy ilyen rendszer milyen feltételek mellett tud stabil működési módot kialakítani. Elektromos áramkörben a működési pontot, elterjedt nevén a „*munkapontot*” a táplálás (tápegység) és a terhelés (esetünkben a plazmaforrás) karakterisztikái együttesen határozzák meg. A munkapont stabilitásának feltétele, hogy a külső áramkörben lévő ellenállás és a gázkisülés differenciális ellenállásának (a feszültség-áram karakterisztika meredekségének) összege pozitív legyen, mint ezt az alábbiakban részletesebben kifejtjük.

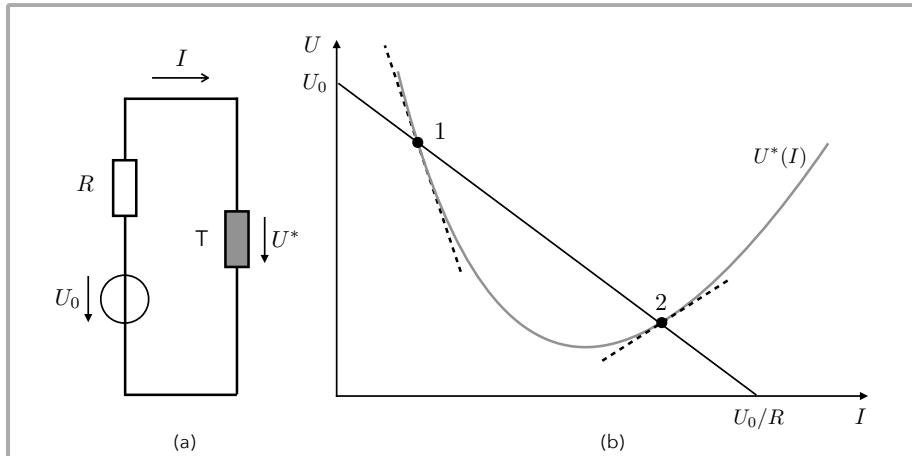
K. 11: Egyenfeszültségű áramkörök stabilitása

Itt a gázkisülést egy nemlineáris ellenállás áramköri elemmel modellezzük, ami az $U^*(I)$ karakterisztikájával jellemezhető.^a Megjegyezzük, hogy az egyenfeszültséggel táplált plazmaforrások mellett sokkal hétköznapiabb példákat is említhetünk nemlineáris áramköri elemekre, ilyenek például az izzószálas fényforrások (melyekben az izzószál ellenállása annak hőmérsékletén keresztül függ az átfolyó áramtól), vagy a szilárdtest-diódák, melyekben az áram exponenciálisan változik a nyitófeszültség környezetében.

A 8.3. ábra szerint a nemlineáris karakterisztikájú (T) terhelést egy U_0 feszültségű és R belső ellenállású forrással tápláljuk. Nyilvánvaló, hogy végtelenhez tartó ellenállású terhelés („szakadás”) esetén $U^* = U_0$ és $I = 0$, míg nulla ellenállású terhelés („rövidzár”) esetén $U^* = 0$ és $I = U_0/R$. Ez a két kitüntetett működési pont meghatározza a külső áramkör *munkagörbét* (ami esetünkben egy egyenes), az áramkör lehetséges *munkapontját*, vagy *munkapontjait* a munkaegyes és T karakterisztikájának a metszéspontjai adják meg, amik algebrailag az

$$U_0 = IR + U^*(I) \quad (8.8)$$

Kirchhoff-egyenlet megoldásaiként kaphatók meg.



8.3. ábra. Nemlineáris terhelést (T) tartalmazó elektromos áramkör (a), ill. a kapcsolódó munkagörbe és a lehetséges munkapontok (b). $U^*(I)$ a terhelés feszültség-áram karakterisztikája. A szaggatott vonalak ezen karakterisztika érintői a lehetséges (1, 2) munkapontokban.

Az így kapott munkapontok stabilak és instabilak is lehetnek. A stabilitásvizsgálathoz perturbációs számítást fogunk alkalmazni [93]: Jelöljük a valamely munkapontban mérhető áramot $\tilde{I}$ -vel, amely kielégíti a fenti Kirchhoff-egyenletet. Tegyük fel, hogy a külső feszültséget megváltoztatjuk egy, (az U_0 -hoz képest) kicsi δU értékkel! Ekkor az áram is valamilyen kicsi δI értékkel fog megváltozni. Ezen (megváltozott) értékek esetén is teljesülnie kell a Kirchhoff-egyenleteknek, így

$$\begin{aligned} U_0 + \delta U &= (\tilde{I} + \delta I)R + U^*(\tilde{I} + \delta I) \\ &= (\tilde{I} + \delta I)R + U^*(\tilde{I}) + \left. \frac{dU^*}{dI} \right|_{I=\tilde{I}} \delta I + \mathcal{O}(\delta I^2), \end{aligned} \quad (8.9)$$

ahol felhasználva, hogy a δU és δI mennyiségek kicsik, a jobb oldali Taylor-sorban az elsőnél magasabb rendű tagokat elhagyhatjuk. Ezután használjuk ki, hogy $\tilde{I}$ a munkapontban mérhető áram, amire teljesül a 8.8. egyenlet. Ezt kivonva a 8.1.2. egyenletből, kapjuk, hogy

$$\delta U = \left(R + \left. \frac{dU^*}{dI} \right|_{I=\tilde{I}} \right) \delta I = (R + R_d) \delta I, \quad (8.10)$$

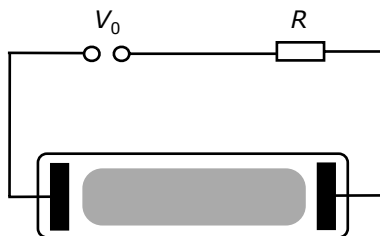
ahol bevezettük az $R_d = \left. \frac{dU^*}{dI} \right|_{I=\tilde{I}}$ differenciális ellenállást (ami általában eltér az adott pontra kiszámítható $R_s = U^*/I$ „statikus” ellenállástól). Láthatóan a nemlineáris terhelés kis perturbációkra úgy viselkedik, mint az adott munkapont körül, mintha R_d ellenállású ideális áramköri elem lenne. Ezt felhasználhatjuk arra, hogy feltételt szabjunk a munkapont stabilitására vonatkozóan [94]: tekintsük a 8.3. ábrát. Tegyük fel,

hogy valamilyen oknál fogva kicsit megnövekszik az áram! Ha a rendszer az 1-es munkapontban van, akkor a nemlineáris terhelésen eső feszültség ennek hatására lecsökken, így a továbbra is U_0 feszültséget adó generátor növelni fogja az áramot, amely tovább csökkenti a terhelés feszültségét egészen addig, amíg a rendszer 2-es munkapontba nem kerül. Ha innen indulva növekszik az áram, a terhelésen eső feszültség nő, és mivel a generátor U_0 feszültsége állandó, az áramnak csökkennie kell. Azt kapjuk tehát, hogy az 1-es munkapont instabil, a 2-es pedig stabil. A 8.10. egyenletet tekintve ezen gondolatmenetnek matematikai formát is tudunk adni: akkor lesz egy munkapont stabil, ha az áram növekedésével ($\delta I > 0$ esetén) a feszültség is nő, amit a generátor nem tud biztosítani és így kénytelen csökkenteni az áramot.

A stabilitás feltétele tehát, hogy $R_d + R > 0$ teljesüljön, azaz, hogy az áramkörre nézve a differenciális ellenállások összege pozitív legyen. A 8.3. ábrán jelölt „2” pontban $R_d > 0$, így a stabilitás feltétele teljesül. Ebből a speciális esetből levonható általános következtetés, hogy pozitív meredekségű $U^*(I)$ karakterisztika esetén a munkapont mindig stabil. Az ábrán „1”-gyel jelölt pontot tekintve látható, hogy $R_d < 0$ és $|R_d| > R$, következésképpen ez a munkapont instabil. Általánosan, olyan eset is elképzelhető, amikor $|R_d| < R$; ez esetben a negatív meredekségű karakterisztika ellenére is lehet stabil a munkapont.

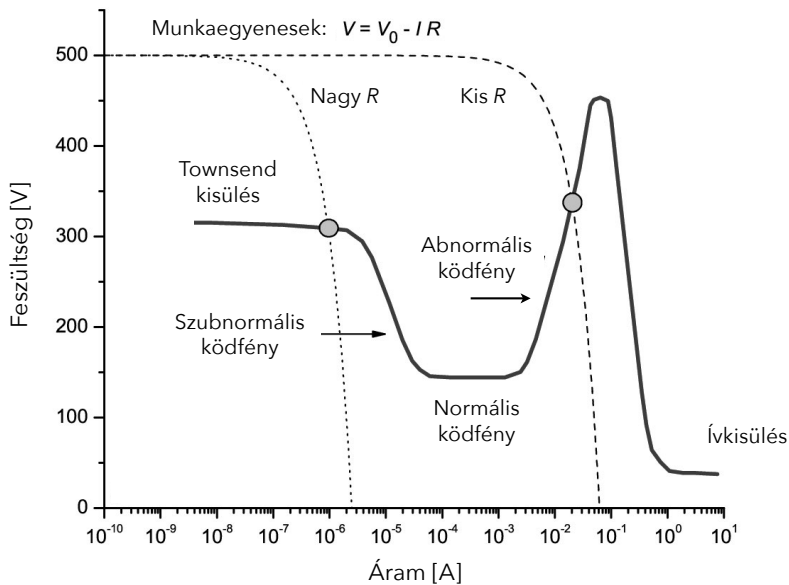
^aElőfordulhat, hogy az $U^*(I)$ reláció I -nek nem egyértelmű függvénye, így általános esetben a karakterisztikát egy $F(U^*, I) = 0$ egyenlettel adhatjuk meg [93].

Az egyenfeszültségű gázkisülések különböző működési módjainak tárgyalásához tekintsük a 8.4. ábra szerinti áramkört, ahol a gázkisülési cella egy R értékű ellenálláson keresztül kapcsolódik a tápláló feszültségforráshoz. A gázkisülés tipikus elektromos karakterisztikáját a 8.5. ábra mutatja, ami feltünteti egy állandó V_0 forrásfeszültség és az ellenállás különböző értékeire adódó „munkagörbét” is. Az előzők alapján a működési *munkapontok* a munkagörbe és a „fogyasztó” – esetünkben a gázkisülés – elektromos karakterisztikájának metszéspontjaiként adódnak.



8.4. ábra. Gázkisülési cella elektromos áramkörben.

Az áramköri ellenállás nagy értéke esetén a gázkisülésen csak igen kis áram folyhat. Kis áram esetén a tértöltések felhalmozódása nem jelentős, így a térerősségnek az elektródák elrendezése által definiált eloszlása nem torzul lényegesen a töltéshordozók jelenléte miatt. Ebben az esetben ú.n. *Townsend-kisülésről* beszélünk, amelynek árama tipikusan a $\lesssim \mu\text{A}$ tartományba esik. Mivel a kis mértékű tértöltésen keresztül az áram nem befolyásolja a töltésreprodukciós folyamatokat, a kisülés feszültsége csak igen kis mértékben függ annak áramától; a kis áramú Townsend-kisülések *égési feszültsége* lényegében megegyezik az *átütési feszültséggel*, a gázkisülés ebben a tartományban „lapos” elektromos karakterisztikával jellemezhető (lásd 8.5. ábra).

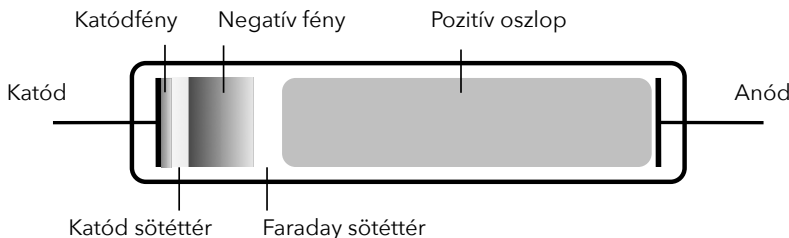


8.5. ábra. Gázkisülés tipikus elektromos karakterisztikája és működési módjai. A szürke körök a gázkisülés munkapontjait jelölik, az áramkörbe iktatott ellenállás különböző értékeire. (A munkaegyeneselek a logaritmikus skála miatt görbült alakúak.)

A Townsend-kisülésekhez képest nagyobb áramon a tértöltések kezdik deformálni az elektródák geometriája és a rájuk kapcsolt feszültség által meghatározott elektromos teret. Az áram növelésével, amit a feszültség csökkenése kísér, a gázkisülés eléri a *normális ködfénykisülés* állapotát.³ Itt a kisülés a katód felületének csak egy részét borítja, az „aktív” felület nagysága az áramerősség növelésével növekszik, miközben az áramsűrűség a katód felületén közel állandó marad, a „normál áramsűrűség” értéken.

³A Townsend-kisülés és a normális ködfénykisülés között az elektromos karakterisztika negatív differenciális ellenállást mutat, ami a külső áramköri elemektől függően instabilitásokhoz vezethet.

Miután az áram további növelésével a kisülés a katód teljes felületét fedi, az *abnormális ködfénykisülés* tartományába jutunk. Itt a kisülés (stabil) pozitív meredekségű feszültség-áram karakterisztikát mutat, nagyobb (~ 1 A fölötti) áramoknál az ívkisülések tartományába jutunk.

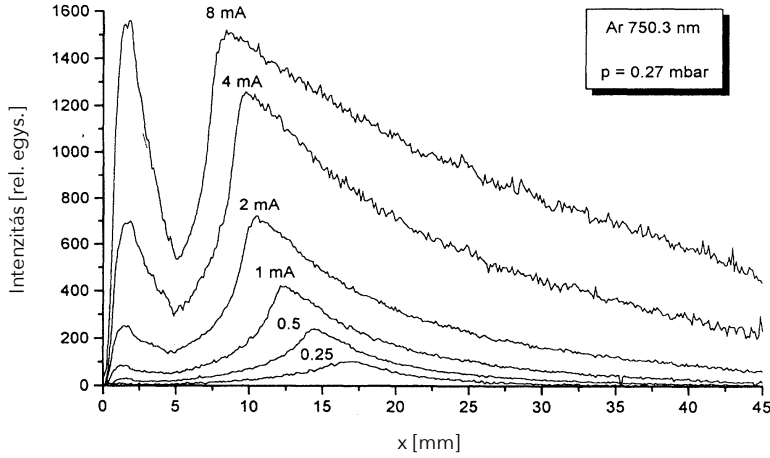


8.6. ábra. A ködfénykisülés térrészei.

A gyakorlatban alkalmazott ködfénykisülések túlnyomórészt az abnormális ködfény tartományban működnek. Nagy elektródatávolság esetén – a 8.6. ábrán vázolt módon – a kisülésnek számos térrésze (több világító és sötét tartomány) jöhet létre, amelyeknek fizikai mechanizmusai és paraméterei igen eltérőek. A katód felületénél létrejöhethet az ún. *katódfény*, melyért a katód felé haladó gyors ionok és gyors atomok és a háttérgáz atomjai közötti gerjesztési ütközések felelősek. A következő térrészt kis fényintenzitás jellemzi, ez a *katód sötéttér*, amire jelentős pozitív (ion) tértöltés, illetve nagy és közel lineárisan csökkenő térerősség jellemző. A katódból kilépő elektronok a nagy térerősség hatására felgyorsulnak, energiamérlegük pozitív, azaz az elektromos tértől több energiát nyernek, mint amennyit az ütközések során elveszítenek. A katódtól távolodva a következő térrészben, a *negatív fényben* a térerősség igen kicsi, az ionizációért és a hatékony gerjesztésért a katód sötéttérből „beinjektált” gyors elektronok felelősek. Itt az elektronok energiamérlege negatívvá válik, rugalmatlan ütközések során leadják eddigi útjukon megszerzett energiájukat.

A katódhoz közeli térrész elsődleges fontosságú a gázkisülések önfenntartásában, ugyanis az itt bekövetkező folyamatokban keletkeznek azok a részecskék amelyek a katódból az elsődleges elektronok kibocsátását biztosítják. A lejátszódó folyamatokról fontos információt ad a gázkisülés fénykibocsátásának térbeli eloszlása. A 8.7. ábra egy alacsony nyomású argon gázkisülés fénykibocsátásának intenzitását mutatja a katód térrészben. A katódtól távolabbi intenzitásmaximum az $e^- + \text{Ar} \rightarrow e^- + \text{Ar}^*$ elektronütközéses gerjesztéssel keltett negatív fénynek felel meg. A katód közvetlen közelében észlelhető maximum a katódfény, amit elsősorban a katód felé mozgó gyors atomok hoznak létre a háttérgáz atomjaival való $\text{Ar}^f + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^{(f)} + \text{Ar}^*$ ütközésekben.

Az anód felé tovább haladva kialakul a *Faraday-sötéttér*, ezt követően pedig a *pozitív oszlop* tartománya. Ez utóbbi tetszőleges hosszúságú lehet, kvázisemleges plazma alkotja, benne a kis értékű (tengelyirányú) térerősség olyan mértékű ionizációt biztosít, amennyi a töltések radiális irányú veszteségeinek fedezéséhez



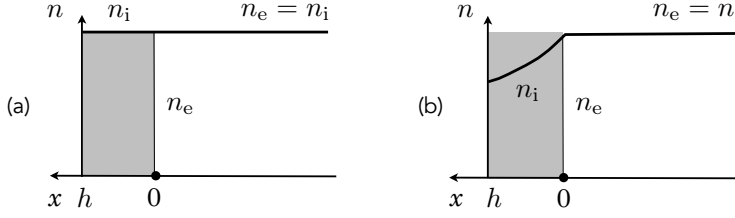
8.7. ábra. Az argon atom 705.3 nm hullámhosszúságú spektrumvonalának mért intenzitáseloszlása egy ködfénykisülés katód térrészában, különböző áramok mellett [95]. Az emelkedő árammal növekvő feszültség nagyobb számú és nagyobb energiájú gyors atomot eredményez, aminek következtében erősödik a katódfénynek a negatív fényhez viszonyított intenzitása. A katód pozíciója $x = 0$ cm, felülete $A = 43$ cm², a nyomás $p = 0.27$ mbar. (Az APS engedélyével reprodukálva az alábbi cikkből: K. Rózsa, A. Gallagher, Z. Donkó: Excitation of Ar lines in the cathode region of a DC discharge. *Physical Review E* 52, 913-918 (1995), <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.52.913>. Copyright (1995) by the American Physical Society.)

szükséges (lásd 8.1.4. fejezet).

Az alábbiakban részletesebben foglalkozunk a (feszültségvezérelt határréteggént kezelhető) katódhoz közeli térrész, majd a pozitív oszlop leírásával. Ezt követően numerikus modellekre alapozva tárgyaljuk a gázkisülések *önkonzisztens* leírásának lehetőségeit.

8.1.3. Feszültségvezérelt határrétegek

A 3.3. fejezetben megismertedtünk a plazmával kontaktusba kerülő falak környezetében kialakuló „passzív” határrétegek jellemzőivel. Ezekről eltérően most „aktív”, *feszültségvezérelt* határrétegekkel foglalkozunk: egy adott (negatív) feszültségre kapcsolt elektróda közelében kialakuló térrész tulajdonságait vizsgáljuk. A határrétegen eső feszültség itt lényegesen nagyobb egy „passzív” határréteg esetén kialakuló falpotenciálnál, vagyis $|\phi| \gg k_B T_e / e$. A nagy feszültség miatt az elektronsűrűség nagyon gyorsan csökken a határréteg plazmával érintkező szélén ($x = 0$) és közelítésképpen feltételezhetjük, hogy a határrétegben csak ionok vannak jelen (lásd 8.8. ábra).



8.8. ábra. Feszültségvezérelt határrétegek: (a) Mátrix határréteg, (b) Child–Langmuir-határréteg. (A határréteg a szürke színnel jelölt tartomány.)

Mátrix határréteg

A legegyszerűbb, „mátrix határréteg” modellt *térben állandó ionsűrűség és nulla elektronsűrűség* feltételezésével kapjuk (8.8.(a) ábra): $n_i = n_h =$ állandó (n_h az ionok sűrűsége a határréteg szélén, $x = 0$ helyen). A határréteg szélén a térerősség és a potenciál értékét nullának véve, a $dE/dx = en_h/\varepsilon_0$ Poisson-egyenlet a határrétegben lineárisan változó térerősségre vezet:

$$E(x) = \frac{e}{\varepsilon_0} n_h x, \quad (8.11)$$

valamint a térerősség integráljaként kapott potenciál parabolikus helyfüggést követ:

$$\phi(x) = - \int_0^x E(x) dx = - \frac{e}{\varepsilon_0} n_h \frac{x^2}{2}. \quad (8.12)$$

A határrétegen eső feszültség, illetve a határréteg hossza:

$$V = -\phi(h) = \frac{e}{\varepsilon_0} n_h \frac{h^2}{2} \rightarrow h = \left(\frac{2\varepsilon_0 V}{en_h} \right)^{1/2}. \quad (8.13)$$

Megjegyezzük, hogy a fenti, egyszerű modell erősen ütközéses plazmák esetén használható, hiszen ekkor a bejövő ionok sebessége nem tud nőni a sok ütközés miatt, így – a kontinuitási (folytonossági) egyenletből adódóan – a sűrűségük sem csökken.

A Child–Langmuir-határréteg

A fenti modell finomításaként [4] figyelembe vehetjük az ionok sűrűségének helyfüggését (lásd 8.8.(b) ábra). Ehhez kiindulási egyenletünk az ionok energiájára vonatkozó 3.64. összefüggés, melyben most a határréteg szélén felvett energiát elhanyagoljuk (ugyanis feltételezzük, hogy a határrétegre kapcsolt feszültség hatására az ionok ennél lényegesen nagyobb mozgási energiára tesznek szert):

$$\frac{1}{2} m_i u_i^2 = -e\phi(x). \quad (8.14)$$

Az ionok mozgásából származó, térben állandó áramsűrűség értéke:

$$j_0 = en_i(x)u_i(x). \quad (8.15)$$

Az előbbi két egyenletből megadható az ionsűrűség helyfüggése:

$$n_i(x) = \frac{j_0}{e} \left[\frac{-2e\phi(x)}{m_i} \right]^{-1/2}, \quad (8.16)$$

ami alapján a Poisson-egyenlet:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{j_0}{\varepsilon_0} \left[\frac{-2e\phi(x)}{m_i} \right]^{-1/2}. \quad (8.17)$$

Az egyenlet mindkét oldalát a potenciál x -szerinti deriváltjával beszorozva és a határrétegre integrálva:

$$\int_0^x \frac{d^2\phi}{d\xi^2} \frac{d\phi}{d\xi} d\xi = -\frac{j_0}{\varepsilon_0} \left(\frac{2e}{m_i} \right)^{-1/2} \int_0^x (-\phi)^{-1/2} \frac{d\phi}{d\xi} d\xi \quad (8.18)$$

amiből:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 = 2 \frac{j_0}{\varepsilon_0} \left(\frac{2e}{m_i} \right)^{-1/2} (-\phi)^{1/2}. \quad (8.19)$$

Az egyenletet x szerint integrálva:

$$-\phi^{3/4} = \frac{3}{2} \left(\frac{j_0}{\varepsilon_0} \right)^{1/2} \left(\frac{2e}{m_i} \right)^{-1/4} x. \quad (8.20)$$

adódik. Felhasználva, hogy $\phi(x=h) = -V$, az alábbi összefüggésekhez jutunk:

$$V^{3/2} = \frac{9}{4} \frac{j_0}{\varepsilon_0} \left(\frac{2e}{m_i} \right)^{-1/2} h^2, \quad (8.21)$$

illetve

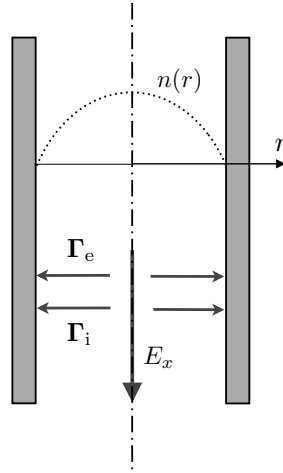
$$j_0 = \frac{4}{9} \varepsilon_0 \left(\frac{2e}{m_i} \right)^{1/2} \frac{V^{3/2}}{h^2}. \quad (8.22)$$

Ez utóbbi összefüggés a *Child–Langmuir-törvény*, ami megadja a tértöltés által korlátozott áramsűrűséget egy sík elektródaelrendezésű „dióda” konfigurációban. A potenciál és a térerősség helyfüggésének kiszámításával meghatározható az ionok $n_i(x)$ sűrűségeloszlása.⁴ Ebben az esetben sehol nem vettük figyelembe az ütközéseket, így fizikailag a Child–Langmuir-féle határréteg az *ütközésmentes* határesetnek felel meg.

⁴Megjegyezzük, hogy mivel a 8.14. egyenletben $x=0$ helyen elhanyagoltuk az ionok kinetikus energiáját, ezért a fenti egyenletekből kapott $n_i(x)$ ezen a helyen szingularitást mutat. Ez viszont feloldható a fenti számításokban az $m_i u_B^2/2$ kinetikus energia figyelembevételével a határréteg szélén.

8.1.4. A pozitív oszlop Schottky-féle modellje

A gázkisülések pozitív oszlop tartományát kvázisemleges plazma alkotja [96]. Az ionok és az elektronok (nem túl alacsony nyomás esetén, vagyis amikor az ütközési szabad úthosszuk sokkal kisebb a plazmaoszlop sugaránál) ambipoláris módon (lásd 5.3.2. fejezet) diffundálnak a fal felé (8.9. ábra), ahol rekombinálnak. A töltött részecskék (radiális irányú transzport miatti) veszteségét a tengelyirányú E_x elektromos térben gyorsuló elektronok ionizációs ütközései kompenzálják. Legegyszerűbb esetben a plazma tengelyirányban homogén, más esetekben bizonyos instabilitások térbeli / időbeli sűrűségmodulációhoz (álló, vagy haladó periodikus struktúrák kialakulásához) vezethetnek [97, 98].



8.9. ábra. A pozitív oszlop Schottky-modelljéhez. Γ itt a radiális fluxusokat jelöli.

A plazma sűrűségét ($n_e \cong n_i \cong n$) leíró folytonossági egyenlet:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma} = \nu_i n, \quad (8.23)$$

ahol ν_i az ionizációs frekvencia. Stacionárius esetet ($\partial_t = 0$) és tengelyirányban homogén plazmát feltételezve:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(r\Gamma)}{\partial r} = \nu_i n. \quad (8.24)$$

A diffúziós fluxus $\Gamma = -D_a(\partial n / \partial r)$ értékét – ahol D_a az 5.3.2. fejezetben definiált ambipoláris diffúziós együttható – az előbbi egyenletbe helyettesítve a

$$\frac{\partial^2 n}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial n}{\partial r} + \frac{\nu_i n}{D_a} = 0 \quad (8.25)$$

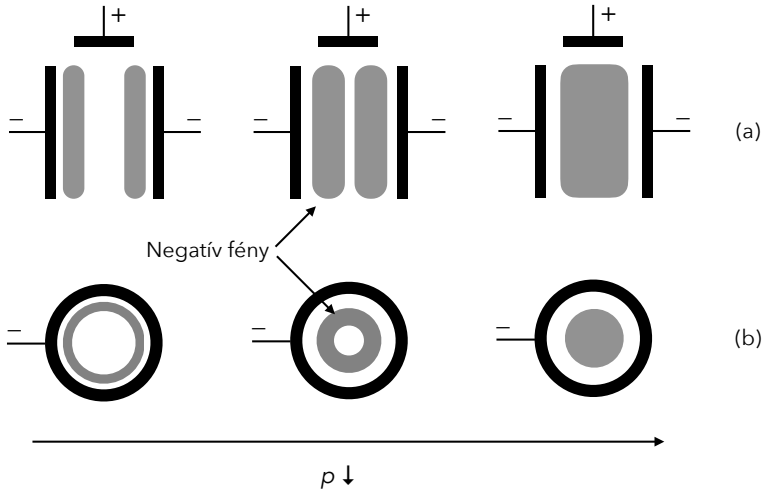
differentiálegyenlet adódik. Ennek megoldása a $(\partial n / \partial r)_{r=0} = 0$ és $n(r = R) = 0$ peremfeltételekkel:

$$\frac{n}{n(0)} = J_0\left(\zeta_0 \frac{r}{R}\right), \quad (8.26)$$

ahol $n(0)$ a sűrűség értéke a tengelyen, J_0 pedig a nulladrendű Bessel-függvény, amelynek első zérushelye $\zeta_0 \cong 2.405$, illetve igaz, hogy $\sqrt{\frac{\nu_i}{D_a}} = \frac{\zeta_0}{R}$.

8.2. Üreges katódú gázkisülések

A fentiekben két, egymástól messze elhelyezett síkpárhuzamos (katód és anód, ld. 8.6. ábra) elektróda között létrehozott gázkisüléseket tárgyaltunk. Az elektródák megfelelő kialakításával építhetők olyan plazmaforrások, ahol a katód részben, vagy teljesen körülveszi a negatív fény tartományát. A 8.10. ábra két ilyen kialakítást szemléltet. Az (a) esetben a katódok síklapok, melyek egymással szemben helyezkednek el, az anód a katódok által meghatározott térfogaton kívül található. A (b) esetben a katód egy henger, az anód (ami az ábrán nincs feltüntetve) a henger végén helyezkedik el. Az ábra a nyomás csökkentésének a függvényében mutatja a (szürke színnel jelölt) negatív fény helyzetének és kiterjedésének változását. Emlékezzünk arra, hogy a negatív fényt a katódból kilépő és a (nagy térerősséggel jellemzett) katód sötét térben felgyorsult, ill. az ionizációs folyamatok során sokszorozódott nagyenergiájú elektronok keltik elektron - atom ütközési folyamatokon keresztül. Ahogy ezek az elektronok az energiájukat leadják, a fénykibocsátás megszűnik (ld. 8.7. ábra).



8.10. ábra. Síkpárhuzamos (a) és hengeres kialakítású (b) üreges katódok. A szürkére színezett tartományok a negatív fényt jelölik – ennek alakja és kiterjedése a nyomás függvénye.

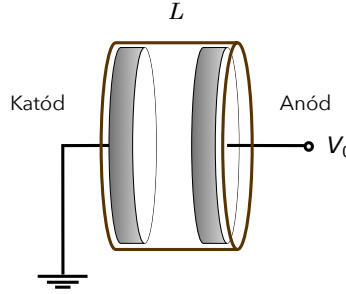
Nagy nyomás esetén a negatív fény követi a katód alakját, pl. a 8.10.(b) ábra szerinti hengeres katód belsejében gyűrű alakot vesz fel. Sík katódok esetében ugyanekkor két negatív fény tartomány jön létre. A nyomás csökkentésével az elektronok szabad úthossza és ennek következtében az energialeadás karakterisztikus hossza is növekszik. Sík elektródák esetén a nyomás csökkentése a két negatív fény összeolvadásához vezet, hengeres esetben a katód közepére koncentrálódik a negatív fény. Ilyen körülmények mellett a nagyenergiájú elektronok jó hatásfokkal csapdázódnak, ugyanis ezek a negatív fényen „átrepülve” egy nagy térerősségű tartományba érnek, ami visszaveri ezeket a negatív fénybe, miközben további ionizációs folyamatokban vehetnek részt [99]. Ez a mechanizmus biztosítja az elektronok energiájának leadását. A hatékony ionizáció miatt egy üreges katódú gázkisülés égési feszültsége tipikusan kisebb egy egyszerű „egykatódos” gázkisülés égési feszültségénél. A hatékony gerjesztés miatt az üreges katódú gázkisülések előnyösen alkalmazhatók spektrállámpákhoz és gázlézerekhez (bővebben ld. 12. fejezet).

8.3. Alacsony nyomású gázkisülések önkonzisztens leírása

A gázkisülések *több térrészre kiterjedő analitikus leírása* (elsősorban az egyes térrészek lényegesen különböző jellemzői és mechanizmusai miatt) komoly kihívást jelent, ezért ilyen célokra szinte kizárólag numerikus modelleket használnak. A továbbiakban itt is ilyen modellekkel foglalkozunk, elsőként a katódi térrészre, majd egy „hosszú” (az összes jellemző térrészt tartalmazó; lásd 8.6. ábra) gázkisülésre. Ezekben a modellekben célunk a rendszerek *önkonzisztens leírása*, ami alatt azt értjük, hogy a részecskék olyan elektromos térben mozognak, amelyet az általuk alkotott tértöltések is módosítanak. Ehhez a leíráshoz a különböző töltött részecskék transzportjának számítását össze kell kapcsolni a térerősség meghatározásával.

A katódi térrészre elsőként egy ú.n. *folyadékmodell*t tárgyalunk, majd egy *hibrid modell*t, melyben a folyadékmodellt kiegészítjük a gyors elektronok részecske alapú leírásával. Míg a katódi térrész fizikája egydimenziós modellekkel elfogadható pontossággal leírható (mindaddig, amíg az elektródák átmérője lényegesen nagyobb a távolságuknál), addig a már említett „hosszú” gázkisülés leírásához kétdimenziós megközelítést használunk, ugyanis (mint már láttuk) a pozitív oszlop térrész fizikája (a radiális transzport fontossága) ezt feltétlenül igényli.

A modellekben feltételezett geometriát a 8.11. ábra szemlélteti. A katód potenciálja nulla, az anód pozitív V_0 potenciálon van, pozíciójuk $x = 0$, illetve $x = L$. A számításokat argon gázra végezzük, önfenntartó és stacionárius állapotú esetet vizsgálunk. A modellekben semmilyen előzetes feltételezést nem teszünk a kisülés térbeli szerkezetére vonatkozóan.



8.11. ábra. A modellben feltételezett elektródaelrendezés.

8.3.1. A katódi térrész folyadékmodellje

A legegyszerűbb gázkisülési modellt a folyadékegyenletekre (lásd 5.2. fejezet) alapozzuk, a modell neve is erre utal. A modell alapegyenletei:

- a töltött részecskékre (elektronokra és pozitív ionokra) felírt folytonossági egyenletek:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_e}{\partial x} = S_e, \quad (8.27)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_i}{\partial x} = S_i, \quad (8.28)$$

- a drift-diffúziós közelítésben felírt impulzusmérleg-egyenletek:

$$\Gamma_e = n_e v_e = -n_e \mu_e E - \frac{\partial(n_e D_e)}{\partial x}, \quad (8.29)$$

$$\Gamma_i = n_i v_i = n_i \mu_i E - \frac{\partial(n_i D_i)}{\partial x}, \quad (8.30)$$

- valamint a Poisson-egyenlet, amely kapcsolatot fogalmaz meg a részecske-sűrűségek és a potenciáeloszlás között:

$$\Delta \phi = -\frac{e}{\epsilon_0} (n_i - n_e). \quad (8.31)$$

A fenti egyenletekben $n_{e,i}$, $v_{e,i}$ és $S_{e,i}$ a részecskék sűrűsége, átlagos sebessége és forrásfüggvényei, $\mu_{e,i}$ és $D_{e,i}$ a mozgékonyosság, valamint a diffúziós együtthatók, $\Gamma_{e,i}$ a fluxusok, ϕ pedig a potenciál.

A részecskék (ionizációból származó) forrását a *lokális tér közelítés* alapján az elektronfluxus és a redukált térerősségtől függő Townsend-féle ionizációs együttható (α) szorzata adja meg, azaz

$$S_i(x) = S_e(x) = \Gamma_e \alpha [E(x)/n]. \quad (8.32)$$

A térfogati veszteségeket (pl. rekombinációs folyamatokat) elhanyagoljuk.

A 8.27–8.31. differenciálegyenlet-rendszer megoldásánál peremfeltételekként megadjuk az egyes elektródákra kapcsolt potenciálokat: $\phi(x=0)=0$, $\phi(x=L)=V_0$, a részecskék sűrűségére, illetve fluxusára pedig a következő egyszerűsített peremfeltételeket alkalmazzuk: az anódnál nulla részecskesűrűséget tételezünk fel (tökéletesen abszorbeáló fal): $n_e(x=L)=n_i(x=L)=0$, a katódnál az ionsűrűsége eltűnő deriváltat írunk elő: $\partial n_i/\partial x|_{x=0}=0$, illetve az elektron- és ionfluxus arányára előírjuk, hogy

$$\Gamma_e(x=0) = -\gamma\Gamma_i(x=0),$$

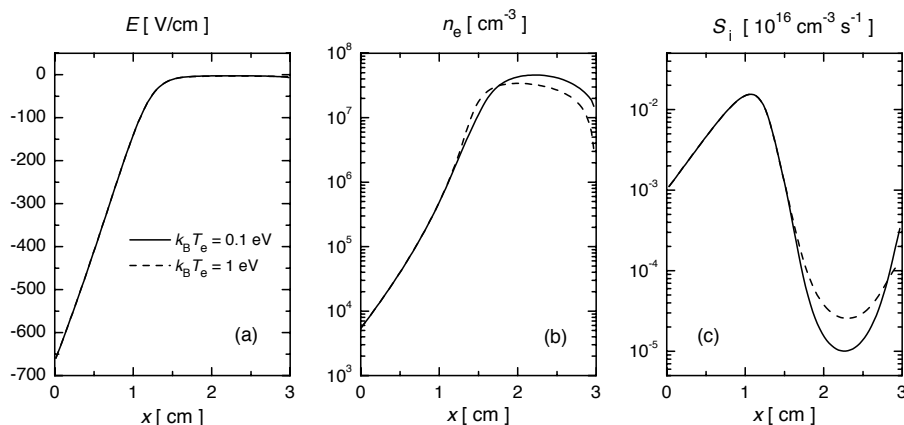
ahol γ az ionindukált elektronkiváltási együttható.

A folyadékmodell egyenleteiben megjelenő transzportegyütthatókra vonatkozóan a következő feltételezéseket használjuk. Az ionok mozgékonyasága argon gázra mérésekből ismert a redukált elektromos tér függvényében: $\mu_i = \mu_i(E/n)$ [40]. Az ionok diffúziós együtthatóját a $D_i/\mu_i = k_B T_i/e$ Einstein-összefüggés alapján adjuk meg, és feltételezzük, hogy az ionok hőmérséklete a gyakori ütközések miatt jó közelítéssel megegyezik a gázhőmérséklettel ($T_i \cong T_g$). Az elektronok mozgékonyaságára egy konstans értéket használunk [100], diffúziós együtthatójukat a $D_e/\mu_e = k_B T_e/e$ egyenlettel kapcsoljuk össze a mozgékonyasággal. Az elektronhőmérséklet értéke elvben a Boltzmann-egyenlet egy további momentumegyenletéből, az energiamérleg-egyenletből meghatározható, a jelen modellben viszont egyszerűsítésképpen, $k_B T_e$ értéke bemenő paraméterként szerepel. A gáz hőmérsékletére 300 K értéket feltételezünk.

A 8.27–8.31. egyenletek diszkretizálás után egy rácson oldhatók meg, egy numerikus integrálási sémával [101]. Ebből megkapjuk a részecskesűrűségek, a fluxusok, a potenciál, illetve a térerősség térbeli eloszlását. A 8.12. ábra a folyadékmodell így kapott eredményeit mutatja be a következő paraméterek mellett: $V_0 = 441$ V, $p = 40$ Pa (Ar), $L = 3$ cm, $T_g = 300$ K, $\gamma = 0.033$, a $k_B T_e$ elektronhőmérséklet 0.1 eV és 1 eV értékeire.

A 8.12.(a) ábra szerint a térerősség abszolút értéke a katód környezetében lineárisan csökken, $x \approx 1.5$ cm után közel nullává válik. Az elektronsűrűség 8.12.(b) ábrán mutatott térbeli változása azzal magyarázható, hogy a katód környékén található nagy térerősség hatására a katódból kilépő elektronok gyorsulnak és ionizációs ütközésekkel sokszorozódnak. Az elektronok sokszorozódása az $S_i(x)$ ionizációs forrásfüggvény (lásd 8.12.(c) ábra) gyors növekedését is eredményezi. A forrásfüggvény viszont a kis térerősséggel jellemzett tartományban lényegesen lecsökken, ugyanis az α ionizációs együttható kis E/n értékek irányába erősen csökken (kifejezve, hogy az elektronok a kis elektromos térben kis valószínűséggel tudnak az ionizációhoz elegendő energiát felvenni). Az elektronok sűrűsége ugyanakkor ebben a térrészben veszi fel maximumát, ugyanis a kis térerősség miatt sodródásuk lassúvá válik.

Mindhárom, a 8.12. ábrán bemutatott jellemző azt mutatja, hogy a kisülés két, igen eltérő jellegű tartományból áll, összhangban az egyenfeszültségű gázkisülések térbeli szerkezetének tárgyalásánál a katód közeli térrésszel kapcsolatban elmondottakkal: az első, nagy és a hely függvényében csökkenő térerősséggel („katód sötétter”), a második kis térerősséggel és jelentős elektronkoncentrációval jellemezhető („negatív fény”). Fontos, hogy ez a struktúra a számolások alap-



8.12. ábra. A katódai térrész egydimenziós folyadékmodelljének eredményei [102]: (a) térerősség, (b) elektronsűrűség, (c) ionizációs forrásfüggvény. $V_0 = 441$ V, $p = 40$ Pa (Ar), $L = 3$ cm, $T_g = 300$ K, $\gamma = 0.033$, $k_B T_e = 0.1$ eV és 1 eV. (Az IOP Publishing, Ltd., Copyright Clearance Center, Inc. engedélyével reprodukálva az alábbi cikkből: A. Derzsi, P. Hartmann, I. Korolov, J. Karácsony, G. Bánó, Z. Donkó: On the accuracy and limitations of fluid models of the cathode region of dc glow discharges, Journal of Physics. D, Applied Physics 42, 225204 (2009), <https://doi.org/10.1088/0022-3727/42/22/225204>.)

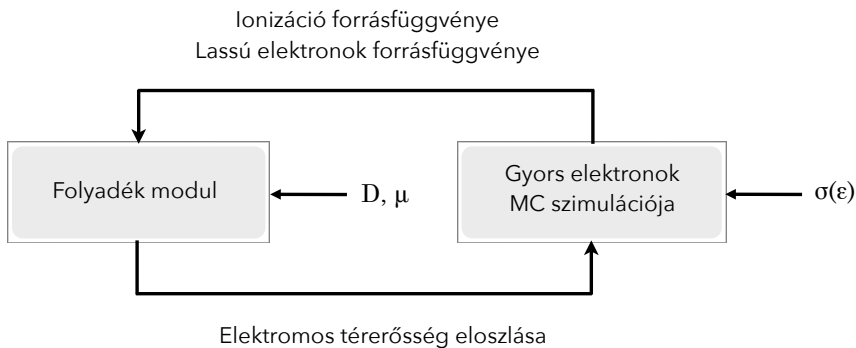
jául szolgáló modellből „automatikusan” adódik, előzetes feltételezések nélkül, ami a modell sikerének könyvelhető el. A kapott eredmények pontosságának igazi „próbáját” a kísérleti ellenőrzés jelenti. A fenti paraméterek mellett működő gázkisülésben végzett elektromos szondás mérések $\sim 3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ elektronsűrűséget adtak, ami kb. három nagyságrenddel nagyobb, mint a folyadékmodellből kapott érték [102]. Az eredmények között az is ellentmondásos, hogy a negatív fény tartományában jelentős gerjesztést és ionizációt kellene tapasztalni, hogy a kísérletileg tapasztalt fénykibocsátást magyarázni lehessen (lásd 8.7. ábra). A modellből adódó ionizációs forrásfüggvény viselkedése ezzel nincs összhangban! Felvetődik a kérdés, hogy mi lehet a folyadékmodell korlátainak az oka? A katódból kilépő és annak környezetében jelenlévő elektromos térben gyorsuló elektronok szabad úthosszát megvizsgálva azt kapjuk, hogy ez összemérhető a katód sötétter hosszával, vagyis az ionizációs forrásfüggvény 8.32. összefüggés szerinti, hidrodinamikai egyensúlyra alapuló számítása pontatlan.⁵ Az elektro-

⁵Megjegyezzük, hogy az elektronokra vonatkozó energiamérleg-egyenlet figyelembevételével némileg pontosabb eredményekre juthatunk, ugyanis (i) amennyiben kiszámítjuk az elektronok átlagenergiájának helyfüggését, akkor pontosabban megadható az ionizációs forrásfüggvény is, ami nem a lokális redukált elektromos tértől, hanem a lokális átlagenergiától függ, másrészt (ii) szükségtelenné válik a T_e elektronthőmérséklet, mint bemenő paraméter megadása, amitől a folyadékmodellből kapott elektronsűrűség függ. A modellnek ez a kiegészítése azonban nem vezet a számolt elektronsűrűség olyan mértékű növekedéséhez, ami a kísérleti eredményekkel összhangban lenne [102].

nok transzportja a gázkisülések katódi térrészében tehát erősen nemegyensúlyi jellegű és korrekt leírásukat csak a kinetikus elmélettől várhatjuk. Ennek egyik módszere a 7. fejezetben bemutatott részecske alapú szimuláció. Ennek segítségével a katódból kilépő és annak környezetében ionizációs folyamatokban keletkező „gyors” elektronok mozgását nagy pontossággal követhetjük (és ezzel egy sokkal pontosabb ionizációs forrásfüggvényt állíthatunk elő), míg a katódtól távolabb mozgó „lassú” elektronokra megtarthatjuk a folyadék közelítést (ugyanis az összes elektron részecske alapú követése túlságosan számításigényes lenne). A folyadék és kinetikus leírás ötvöztetésével egy ún. *hibrid modell* [101] áll elő, melynek részleteit az alábbiakban tárgyaljuk.

8.3.2. A katódi térrész hibrid modellje

A fent elmondottakkal összhangban ebben a modellben a *gyors elektronokat kinetikus szinten kezeljük, az $S_i(x)$ ionizációs forrásfüggvény pontos meghatározása érdekében*. Ennek megfelelően az elektronokat két csoportra osztjuk. A *gyors elektronokat*, amelyek (kinetikus + a kisülés elektromos terében elfoglalt helyükből adódó potenciális) energiájuknak köszönhetően még tudják ionizálni, vagy gerjeszteni a gázt, egy Monte Carlo szimulációs modullal követjük. Amennyiben az elektronok – energiájuk nagy részét leadva – ionizációs és gerjesztési folyamatokban már nem tudnak részt venni, a továbbiakban a modell folyadék részében (moduljában), mint *lassú elektronok* szerepelnek. A lassúvá vált elektronokat a Monte Carlo szimulációs modul a folyadék modulnak az $S_e(x)$ forrásfüggvényen keresztül „adja át”. A folyadék alapú rész megegyezik az előző fejezetben leírttal, a forrásfüggvények számításának kivételével.



8.13. ábra. A hibrid gázkisülési modell felépítése.

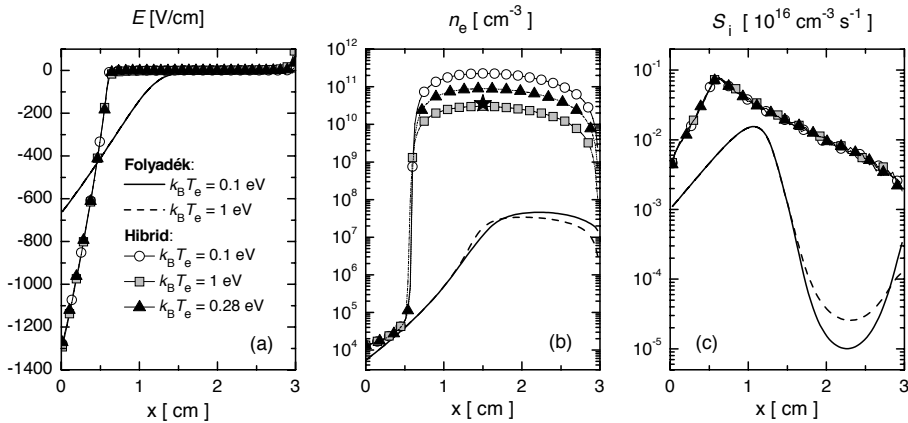
A hibrid modellben a folyadék és a Monte Carlo (MC) modulokat, a 8.13. ábrán illusztrált módon iteratívan oldjuk meg, a konvergens megoldás eléréséig. Az iteráció első lépésében a folyadék modulból meghatározható az elektródák által definiált elektromos téreloszlás. Az első MC ciklus a katódból kilépő elektronokat ebben az elektromos térben követi, majd átadja a folyadék

modul számára az ionizációs folyamatokból felépített

$$S_i(x) = \frac{j}{e(1 + 1/\gamma)\Delta x} \frac{N_i(x)}{N_0} \quad (8.33)$$

forrásfüggvényt, ahol j a kisülés áramsűrűsége, Δx a numerikus rács felosztása, $N_i(x)$ az x környezetében ($x - \Delta x/2 \leq x \leq x + \Delta x/2$) keltett ionok száma a szimulációban, amelyben a katódból N_0 elektron lépett ki. A következő folyadék ciklus már számolja a töltések felhalmozódását és transzportját, illetve a töltések által módosított elektromos teret, az ezt követő MC ciklus pedig már ebben a módosított elektromos térben követi a gyors elektronok mozgását. A folyadék modul eredményeként megkapjuk a térerősség eloszlását, az ionok és elektronok sűrűségének, valamint fluxusának térbeli eloszlását és a kisülés áramsűrűségét. A Monte Carlo szimuláció megadja az ionizáció forrásfüggvényét és a kisülés fénykibocsátásával kapcsolatban lévő elektronütközéses gerjesztések térbeli eloszlását.

A folyadék és a hibrid modellekből kapott eredmények összehasonlítása a 8.14. ábrán látható.



8.14. ábra. Argon gázkisülés folyadék és hibrid modelljével kapott eredmények összehasonlítása: (a) térerősség, (b) elektronsűrűség, (c) ionizációs forrásfüggvény. Az ábra (b) részén $\star$ a kísérletileg mért elektronsűrűséget jelzi [102]. $V_0 = 441$ V, $p = 40$ Pa (Ar), $L = 3$ cm, $T_g = 300$ K, $\gamma = 0.033$, $k_B T_e = 0.1$ eV, 1 eV és 0.28 eV. (Az IOP Publishing, Ltd., Copyright Clearance Center, Inc. engedélyével reprodukálva az alábbi cikkből: A. Derzsi, P. Hartmann, I. Korolov, J. Karácsony, G. Bánó, Z. Donkó: On the accuracy and limitations of fluid models of the cathode region of dc glow discharges, Journal of Physics. D, Applied Physics 42, 225204 (2009), <https://doi.org/10.1088/0022-3727/42/22/225204>.)

Míg a két modell közötti egyetlen lényeges különbség az, hogy a hibrid modellben az ionizációs forrásfüggvényt a gyors elektronok kinetikus szintű leírásával, MC szimulációval számoljuk, az eredmények között igen lényeges különbségeket találunk, ami rámutat a gyors elektronok korrekt leírásának fontosságára.

A térerősség hibrid modellel számolt eloszlása gyorsabb lecsengést (rövidebb katód sötét teret) mutat, ennek megfelelően $|E(x=0)|$ értéke lényegesen nagyobb, mint a folyadék modellből kapott érték (8.14.(a) ábra). Ennél sokkal fontosabb különbség továbbá, hogy a hibrid modellből számolt térerősség az anódnál a katódhoz képest ellentétes előjelű, vagyis a térerősség a negatív fény tartományában előjelet vált [103]. Ez a térkonfiguráció a negatív fény tartományában a lassú elektronokat „csapdázza”, ami lényegesen (nagyságrendekkel) nagyobb elektronsűrűséget eredményez, a folyadékmodell eredményeivel összehasonlítva. További fontos eltérés, hogy a nemegyensúlyi transzport miatt az ionizációs forrásfüggvény még a negatív fény tartományában is jelentős értéket mutat (8.14.(c) ábra); értéke a katód sötét tér – negatív fény határon maximális és a negatív fényben közel exponenciálisan csökken, a fényintenzitás eloszlására vonatkozó kísérleti megfigyelésekkel összhangban (8.7. ábra).

A bemutatott hibrid modell egyetlen hiányossága, hogy a folyadék moduljában az elektron-hőmérséklet még szintén bemenő paraméterként szerepel. A már említett elektronsűrűség mérésekben a fenti paraméterek mellett $k_B T_e$ értékére 0.28 eV adódott szondás kísérleti módszerrel (10.1. fejezet, ill. [102]). A szimulációt erre a paraméterértékre futtatva a mért elektronsűrűséggel konzisztens értéket kapunk, amint ez a 8.14.(b) ábrán is látható. Ezt azt jelzi, hogy a hibrid modellben használt megközelítés igen jónak mondható, de a modell alapján igazán pontos eredmények akkor várhatók, ha az elektronthőmérséklet kísérletileg meghatározható és a számításokban ezt az értéket használjuk.

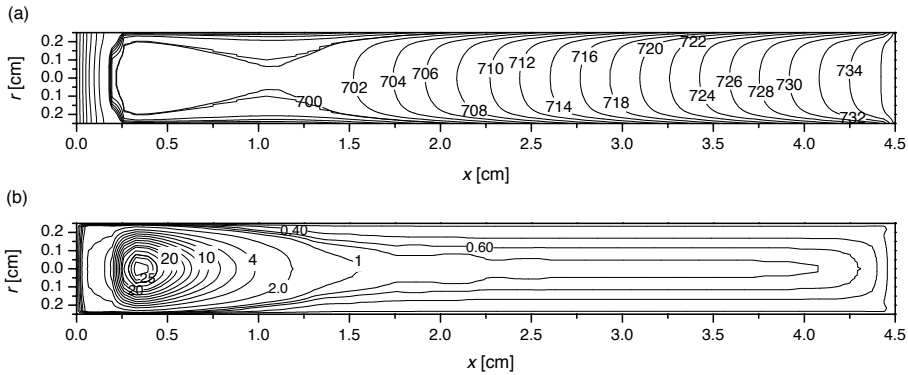
A gyors elektronok Monte Carlo szimulációjából szintén kiszámítható az elektron-ütközéses gerjesztések térbeli eloszlása, vagyis a negatív fény térbeli intenzitáseloszlása. Amennyiben a modellt kiegészítjük a gyors ionok és a gyors semleges atomok – összefoglaló néven a *nehéz részecskék* – mozgásának és ütközési folyamatainak Monte Carlo szimulációjával a gázkisülés nagy térerősséggel jellemzett részében, további jellemzők meghatározására adódik lehetőség. Kiszámítható például a gáz ütközések következtében fellépő melegeedés, információt lehet nyerni a katódra érkező nehéz részecskék energia szerinti eloszlásáról, erre alapozva a katód porlasztásáról, vagy önkonzisztens módon meghatározható a katódi effektív elektronkiváltási együttható az egyes részecskékre jellemző energiafüggő elektronkiváltási valószínűségek ismeretében. A gyors nehéz részecskék szimulációjából megkapható az általuk keltett gerjesztések (vagyis a katódfény intenzitásának) térbeli eloszlása is [104].

8.3.3. Nagy elektródatávolságú gázkisülés kétdimenziós hibrid modellje

A hibrid megközelítésre alapuló modellek kiterjeszthetők két dimenzióra és nagyobb elektródatávolságú gázkisülések önkonzisztens leírására is, amelyekben az összes, a 8.6. ábrán bemutatott térrész kialakulhat. Ennek illusztrálására az alábbiakban $2R = 0.5$ cm átmérőjű, egymástól $L = 4.5$ cm távolságra elhelyezkedő, dielektrikum fallal körülvett elektródák között kialakuló gázkisülésre kapott eredményeket mutatjuk be. A szimulációk alapja egy kétdimenziós hibrid modell, amelyben a töltött részecskék transzportegyenletei megegyeznek

a 8.3.1. fejezetben használtakkal.

A modellben a dielektrikum fal hatását is figyelembe kell venni, ugyanis a folytonossági egyenletek és a Poisson-egyenlet megoldásához elő kell írni a részecskesűrűségeknek, illetve a potenciálnak a vizsgált tartomány peremén felvett értékeit. A részecskesűrűségekre a közelítő (teljesen abszorbeáló falat feltételező) $n_i(r = R) = n_e(r = R) = 0$ peremfeltételt használjuk, a potenciál értékét a falon fekvő rácspontokban pedig iteratív módon úgy változtatjuk, hogy ezekben a pontokban a falhoz érkező (radiális) ion- és elektronfluxus értéke egyenlővé válik. A hibrid megközelítésnek megfelelően a modellben a katód környezetében Monte Carlo szimulációt használunk az ionizációs forrásfüggvény számítására, a katódtól távolabbi térrészekben az ionizáció forrását lokális tér közelítéssel (8.32. összefüggés alapján) számoljuk.



8.15. ábra. Nagy elektródatávolságú gázkisülés kétdimenziós hibrid modelljének eredményei, $p = 120$ Pa argon nyomás és $V_0 = 737$ V feszültség esetére. A katód pozíciója $x = 0$, az anódé $x = 4.5$ cm. (a) Az elektromos potenciál térbeli eloszlása. A katód közvetlen környezetében a kontúrvonalak távolsága 100 V, távolabb 2 V. (b) Az ionsűrűség térbeli eloszlása. A kontúrvonalakon a számok egysége 10^{10} cm^{-3} .

A 8.15. ábra a számított elektromos potenciáeloszlást és ionsűrűség-eloszlást szemlélteti, $p = 120$ Pa argon nyomás és $V_0 = 737$ V feszültség mellett, $k_B T_e = 1$ eV értéket feltételezve. A 8.3.1. fejezetben vizsgált „rövid” kisüléshez hasonlóan a katód környezetében (≈ 0.2 cm távolságon, a katód sötétterén) esik a feszültség jelentős része, ≈ 700 V. Ezt a térrészt követően alakul ki a gázkisülés negatív fény térrésze, ahol a térerősség előjelet vált, majd a Faraday sötétter tartománya. Az anód felé tovább haladva ($x \gtrsim 1.5$ cm) a térerősség újra pozitív lesz és egy közel állandó értéket vesz fel (a potenciál egyenletesen növekszik a tengely mentén). Ez a pozitív oszlop tartománya, ahol az elektromos tér az elektronokat az anód irányába gyorsítja. Az elektronok ionizálják a gázt, az így keletkező járulékos töltés radiális irányban a falhoz áramlik (lásd 8.1.4. fejezet). A tengelyen és a falnál, adott x pozícióban mérhető potenciálok $\cong 10$ V-os különbsége jelzi az ambipoláris elektromos tér jelenlétét (ami a 5.3.2. fejezetben megismert módon kiegyenlíti a kétféle töltéshordozó részecske radiális fluxusát). A elektron-

és ionsűrűség – az intenzív elektronütközéses ionizációnak köszönhetően – a negatív fényben maximális, amint ezt a 8.15.(b) ábra szemlélteti. A pozitív oszlopban a sűrűség (és így az ionizációs fok) ehhez viszonyítva több, mint egy nagyságrenddel kisebb. A modelltől megállapítható, hogy minden előzetes feltételezés nélkül reprodukálja a „hosszú” gázkisülés minden egyes karakterisztikus térrészét, illetve megadja ezek jellemzőit.



9. fejezet

Rádiófrekvenciás plazmaforrások

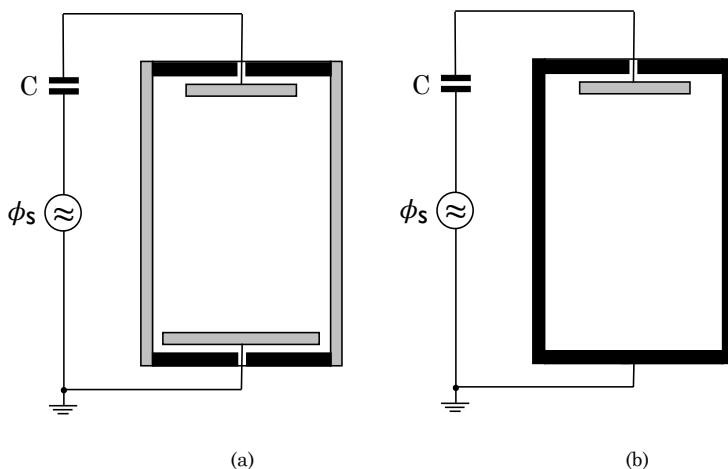
Az egyenfeszültséggel táplált plazmák után a továbbiakban *rádiófrekvenciás feszültséggel* létrehozott plazmákkal foglalkozunk, melyek tipikus működési tartománya 1 MHz és 100 MHz frekvencia közé esik. Az egyenfeszültségű és váltakozófeszültségű táplálás közötti leglényegesebb különbség az, hogy az utóbbi esetben *szigetelő, vagy félvezető* felületek között is létre lehet hozni a gázki-sülést, aminek óriási jelentősége van pl. a mikroelektronikai alkalmazásoknál, ahol szilícium, vagy más dielektrikum felületeket kell „megmunkálni” [4]. Ennek megfelelően a rádiófrekvenciás (RF) plazmaforrások fejlődését nagymértékben motiválták a plazma alapú felületkezelési eljárások, a jelenlegi kutatások nagy része is ezek optimalizálására irányul.

A fejezetben röviden áttekintjük a rádiófrekvenciás plazmaforrások főbb típusait: a kapacitív és induktív teljesítmény becsatolással működő forrásokat. Ezek közül részletesen a kapacitív táplálású rendszerekkel foglalkozunk: bemut-atjuk az ezekben keltett plazmák főbb jellemzőit, ismertetünk egy, a leírásukra alkalmas numerikus (részcseke alapú) szimulációs módszert és az ennek alkal-mazásával kapott eredmények alapján tárgyaljuk fizikai mechanizmusait. Fog-lalkozunk a kapacitív táplálású RF plazmák energiafelvételi (fűtési) módjaival, tárgyaljuk a felületekre érkező ionok jellemzőinek (fluxus és energia) szabályo-zási lehetőségeit.

9.1. Kapacitív és induktív táplálású plazmaforrások

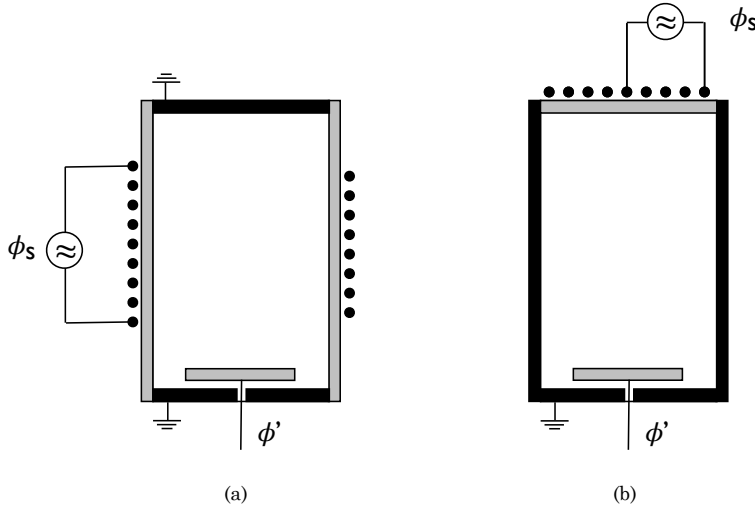
Kapacitív táplálás esetén egy $\phi_s(t)$ rádiófrekvenciás feszültséget előállító generá-tor egy leválasztó kondenzátoron (C) keresztül kapcsolódik a plazmakamrában elhelyezkedő két elektródához (lásd 9.1. ábra), melyek lényegében egy konden-

zátorszerű elrendezést alkotnak. A generátor egyik pólusa általában földelt, így módon az egyik elektróda is. A plazma árama (a falak hatásától eltekintve) az elektródákra merőlegesen folyik. A kamra fala szigetelő vagy vezető anyagból készülhet, a vezető kamrafal gyakorlati okokból általában földpotenciálán van. A leválasztó kondenzátor kapacitását úgy választjuk meg, hogy az az RF áram számára kis impedanciát jelentsen, ugyanakkor a plazmán esetlegesen kialakuló DC előfeszültséget (lásd később) a feltöltődésével kompenzálja, elérve, hogy a teljes áramkörre nézve ne legyen jelen DC komponens (és DC áram ne folyhasson).



9.1. ábra. Kapacitív rádiófrekvenciás táplálású plazmaforrások felépítésének szematikus vázlata.

Induktív táplálás esetén a rádiófrekvenciás forrás egy tekercshez kapcsolódik, ami – a 9.2. ábrán látható elrendezések esetén – vagy körülveszi a dielektrikum falú plazmakamrát, vagy annak egyik, dielektrikum (pl. kvarc) lemezzel lezárt végén helyezkedik el egy sík kialakítású tekercs (antenna) formájában. A tekercsben folyó áram mágneses teret hoz létre, ami a falon keresztül (a behatolási mélység által korlátozott hossz) behatol a plazmába és ott elektromos teret indukál, ami gyorsítja az elektronokat és áramot hoz létre. A működési elv hasonlít egy transzformátorra, amelynek az egymenetes szekunder köre maga a plazma. Az induktív teljesítmény becsatolás (a kapacitív esethez képest) a felületi határrétegeken kisebb feszültségesést eredményez, ami alacsony ion-energiákhoz vezet, egyes alkalmazásokhoz optimális módon. A kezelendő felületre való járulékos kapacitív becsatolással (a 9.2. ábrán ϕ' feszültséggel jelölve) szabályozható a felületre érkező ionok energiája.



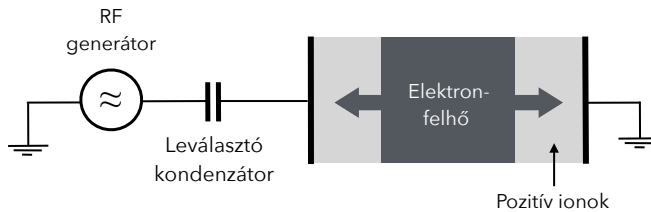
9.2. ábra. Induktív rádiófrekvenciás táplálású plazmaforrások: (a) hengeres antennás és (b) sík antennás felépítés vázlata. A pontok a tekercseket alkotó menetek keresztmetszetét szimbolizálják.

9.2. Kapacitív csatolású plazmák

A kapacitív csatolású plazmaforrások működésének megértéséhez tekintsük a 9.3. ábra szerinti modellrendszert! A plazmaforrás két síkpárhuzamos elrendezésű elektródából áll, egy

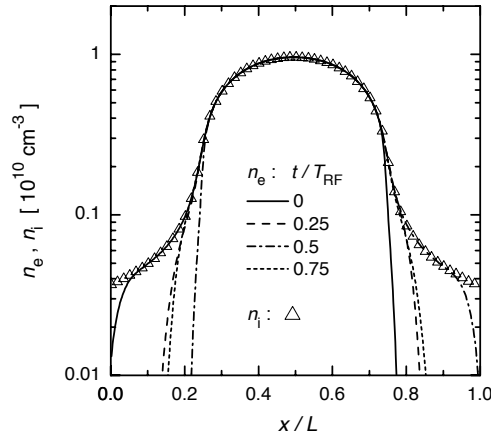
$$\phi_s(t) = \phi_0 \cos(2\pi ft) \quad (9.1)$$

feszültséget előállító rádiófrekvenciás generátor egy C leválasztó kondenzátoron keresztül kapcsolódik ezek egyikéhez, míg a másik elektróda földpotenciálón van.



9.3. ábra. RF feszültséggel gerjesztett kapacitív csatolású gázkisülés.

Az egyenfeszültségű gázkisülések tárgyalásánál láttuk, hogy a katód környezetében egy elektronokban ritka határréteg tartomány (katód sötéttér) épül fel,



9.4. ábra. A töltött részecskék térbeli sűrűségeloszlása egy RF periódus különböző időpontjaiban egy $\phi(t) = \phi_0 \cos(2\pi ft)$ feszültséggel létrehozott plazmában. ($f = 13.56$ MHz, $\phi_0 = 300$ V, $L = 2.5$ cm, $p = 10$ Pa.) A táplált elektróda pozíciója $x = 0$, míg a földelt elektróda $x = L$ -nél helyezkedik el.

ahol jelentős feszültség esik. Alacsony frekvenciájú váltakozófeszültségű táplálás esetén (amikor a frekvencia kisebb, mint a töltéshordozók transzportjának és felhalmozódásának karakterisztikus ideje) várható, hogy ez a tartomány időben felváltva alakul ki a két elektróda környezetében. Valójában a rádiófrekvenciás plazmákban, a fent említett nagy működési frekvenciák tartományában is hasonló jelenség játszódik le. A tipikus gerjesztő frekvenciák mellett az elektronok követik az elektromos tér változását, míg a pozitív ionok, lényegesen nagyobb tömegüknek megfelelően, ezekre a változásokra csak kis mértékben reagálnak és térbeli sűrűségeloszlásukat első közelítésben a térerősség *időbeli átlagértéke* határozza meg.¹

Az elektronok és az ionok erősen eltérő viselkedése jól megfigyelhető a 9.4. ábrán, amely a töltött részecskék sűrűségét mutatja egy síkpárhuzamos és azonos méretű elektródákkal rendelkező (azaz „geometriailag” szimmetrikus) plazmaforrásban, $f = 13.56$ MHz gerjesztő frekvencia, $\phi_0 = 300$ V feszültség-amplitúdó, $L = 2.5$ cm elektródatávolság és $p = 10$ Pa argon nyomás esetére, az RF periódus különböző időpontjaiban.

Az ionok sűrűségeloszlása semmilyen látható változást nem mutat az RF cikluson belül, viszont az elektronok esetében jelentős térbeli átrendeződés figyelhető meg az elektródákhoz közeli tartományokban. A gerjesztő feszültség negatív csúcsértékénél ($t/T_{\text{RF}} = 0.5$) a „pillanatnyi katódként” viselkedő táplált elektróda környezetében leghosszabb az elektronokban szegény határréteg (T_{RF} a gerjesztő feszültség periódusideje). Fél periódussal később a földelt elektróda

¹Itt elektropozitív gáz (pl. argon) esetét vettük példának, feltételezve, hogy a plazmában csak elektronok és pozitív ionok vannak jelen.

környezetében játszódik le ugyanez. A plazma „középső” tartománya minden időpillanatban kvázisemleges, az elektronok és az ionok sűrűsége közel azonos.

A két, igen eltérő tulajdonságokkal rendelkező tartomány határának pozíciója az idő függvényében változik. A határréteg kiterjedésekor az elektronok a mozgó határréteg széléről visszaverődve energiát tudnak nyerni [4] és a működési paraméterek széles tartományában ez a jelenség biztosítja az elektronok gyorsítását és így a plazma fenntartását. A plazma fenntartása RF esetben tehát kizárólag gázfázisú folyamatokkal is biztosítható, ellentétben a DC gázkisülésekkel, ahol a katódról kibocsátott elektronok alapvető fontosságúak. Az elektródákból kiváltott elektronok az RF gázkisülésekben is szerepet játszhatnak, erre a későbbiekben még visszatérünk.

A pozitív ionok esetében megfigyelhető stacionárius sűrűségprofil azt jelzi, hogy az ionok az időben folyamatosan áramlanak az elektródákhoz. Mivel az áramkörben DC komponens nem folyhat, ezért egy RF periódusra átlagolva az ionok számával megegyező elektronnak kell mindkét elektródára érkezni, vagyis az ion- és elektronfluxus időbeli átlaga (bármelyik elektródát nézve) meg kell, hogy egyezzen:

$$\langle \Gamma_i \rangle_{T_{RF}} = \langle \Gamma_e \rangle_{T_{RF}}. \quad (9.2)$$

Példaként a táplált elektródát ($x = 0$) tekintve, a 9.4. ábrán látható, hogy az elektronok csak a gerjesztő hullámforma maximuma környezetében ($t/T_{RF} \cong 0$) tudnak az elektródához áramlani, amikor a határréteg (közelítőleg) eltűnik. Az elektronfluxus az idő függvényében tehát erős modulációt mutat, a határréteg hosszának és a rajta eső feszültségnek az időfüggését a plazma – önszabályozó rendszerként – úgy állítja be, hogy a 9.2. összefüggés szerinti feltétel teljesüljön.

A kapacitív csatolású RF gázkisülések fizikájának részleteit nagyrészt szimulációs eredmények segítségével mutatjuk be, amelyek szemléletes, pontos és részletes képet adnak ezen komplex rendszerek fizikájáról. Ezen megközelítés miatt a továbbiakban először az alkalmazott szimulációs módszerrel ismerkedünk meg.

9.3. Rádiófrekvenciás gázkisülések numerikus leírása

A kapacitív táplálású rádiófrekvenciás gázkisülések numerikus leírására a legelterjedtebben használt eljárás a „Particle-in-Cell” (PIC) módszer, ami egy részecske alapú megközelítés és így a kinetikus elméletnek megfelelő leírást biztosít. A PIC szimulációs módszer a részecske–rács eljárások közé tartozik [105, 106]. A módszer alkalmas elektromágneses jelenségek és többdimenziós problémák kezelésére, itt azonban csak az *egydimenziós, elektrosztatikus esettel* foglalkozunk.

A vizsgálni kívánt, alacsony nyomású gázokban létrehozott plazmákban a részecskék sűrűsége általában a $10^8 \text{ cm}^{-3} - 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ nagyságrendbe esik. Ha figyelembe vesszük ezen laboratóriumi plazmák tipikus méretét, nyilvánvalóvá válik, hogy teljesen reménytelen minden egyes részecske, illetve minden részecske-

kepár kölcsönhatásának kezelése. Emiatt a PIC módszerben két egyszerűsítéssel élünk. (i) A módszerben „szuperrészecskéket” követünk, amelyek nagyszámú (tipikusan $\sim 10^4 - 10^7$) valódi részecskét képviselnek; ezzel a kezelendő részecskeszám már elfogadható nagyságrendűre ($\sim 10^5 - 10^7$) redukálható. (ii) Mivel az összes lehetséges *részecskepár* száma így is túlságosan nagy, ezért a modellben az egyes részecskepárok kölcsönhatásának figyelembevétele helyett a részecskék mozgását az összes többi részecske *összhatása* befolyásolja az eredő térerősségen keresztül.

A vizsgálandó *véges méretű és ütközéses jellegű* plazmák leírásához az „alap” PIC szimulációt ki kell egészíteni a határfelületek és az ott lezajló folyamatok kezelésével, valamint az ütközések leírásával, amit (a már korábban bemutatott) Monte Carlo eljárással tehetünk meg. Az így adódó eljárás neve PIC/MCC módszer (MCC = Monte Carlo Collisions), alapvető lépései (pl. [84]) a 9.5. ábrán láthatók.

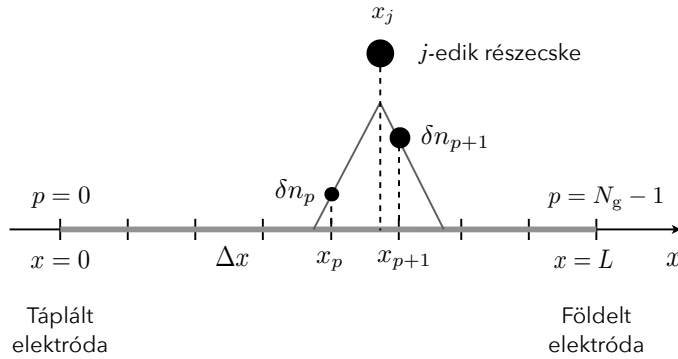


9.5. ábra. Az elektrosztatikus PIC/MCC módszer alaplépései [84]. (A CC BY 4.0 licenc alapján reprodukálva és magyarra fordítva az alábbi cikkből: Z. Donkó, A. Derzsi, M. Vass, B. Horváth, S. Wilczek, B. Hartmann, P. Hartmann: eduPIC: an introductory particle based code for radio-frequency plasma simulation, Plasma Sources Science and Technology 30, 095017 (2021), <https://doi.org/10.1088/1361-6595/ac0b55>.)

A következőkben a térben egydimenziós módszer leírását adjuk meg, mely alatt azt értjük, hogy a plazma jellemzői egy térbeli dimenzió mentén változnak, miközben a részecskéket a háromdimenziós sebességtérben követjük. Alacsony nyomású elektropozitív gázok esetét tekintjük: töltött részecskékként az

elektronokat ($q = -e$) és az egyszeres töltésű pozitív ionokat ($q = e$) vesszük figyelembe.

A plazmát határoló felületek (elektródák) között egy egyenletes, $\Delta x = L/(N_g - 1)$ felosztású rácsot veszünk fel, ahol L az elektródák távolsága és N_g a rácspontok száma (melyek indexe 0 és $N_g - 1$ között van). Az $x = 0$ pozíciójú elektródára adott időfüggésű $\phi(t)$ feszültséget kapcsolunk, a másik, $x = L$ pozíciójú elektróda földelt. A szuperrészecskék W súlyát úgy definiáljuk, hogy egy szuperrészecske hány valós részecskét reprezentál. Az elektronokra és az ionokra alapesetben egyenlő súlyt használunk.²



9.6. ábra. A részecskék hozzárendelése a rácspontokhoz [84]. (A CC BY 4.0 licenc alapján reprodukálva és magyarra fordítva az alábbi cikkből: Z. Donkó, A. Derzsi, M. Vass, B. Horváth, S. Wilczek, B. Hartmann, P. Hartmann: eduPIC: an introductory particle based code for radio-frequency plasma simulation, Plasma Sources Science and Technology 30, 095017 (2021), <https://doi.org/10.1088/1361-6595/ac0b55>.)

A szimulációban az idő diszkrét, a 9.5. ábrán bemutatott lépéseket $\Delta t = T_{\text{RF}}/N_t \ll T_{\text{RF}}$ időközönként hajtjuk végre (ahol T_{RF} a rádiófrekvenciás gerjesztés periódusideje és N_t az időlépések száma ezen periódus alatt):

1. Sűrűségeloszlások számítása a rácson: a j -edik, x_j pozíciójú, az x_p és x_{p+1} rácspontok között elhelyezkedő részecske a sűrűséghez ebben a két rácspontban ad hozzájárulást (lásd 9.6. ábra):

$$\delta n_p = [(p+1) - x_j/\Delta x] \frac{W}{A\Delta x}, \quad (9.3)$$

$$\delta n_{p+1} = (x_j/\Delta x - p) \frac{W}{A\Delta x}, \quad (9.4)$$

²Alacsony nyomású elektropozitív plazmákban az elektronok és az ionok száma általában nem tér el jelentősen, ugyan az ionok száma az elektródákhoz közeli határrétegek miatt valamivel nagyobb. Egyes (tipikusan molekuláris) gázokban, ahol többféle ion van jelen, esetenként jelentősen eltérő koncentrációban és/vagy az elektronok a negatív ionok képződése miatt kis számban találhatóak meg, szükség lehet különböző értékű súlyok használatára.

ahol p az $x_j/\Delta x$ egész része és A az elektródák felülete.³ Ezt az hozzárendelést az összes részecskére (elektronra és ionra) végrehajtva, a W súly figyelembevételével előáll a rácspontokban az $\rho_{e,p}$ elektron- és az $\rho_{i,p}$ ion-töltéssűrűség értéke, és az eredő tértöltés, pl. a p -edik rácspontban:

$$\rho_p = e(n_{i,p} - n_{e,p}). \quad (9.5)$$

2. A (rácson értelmezett) ρ_p töltéssűrűség ismeretében, az elektródákra kapcsolt $\phi_1 = \phi(t)$ és $\phi_{N_g-1} = 0$ potenciálokat peremfeltételként kezelve a rácson numerikusan megoldjuk a ϕ_p potenciáeloszlást szolgáló

$$\frac{\phi_{p-1} - 2\phi_p + \phi_{p+1}}{\Delta x^2} = -\frac{\rho_p}{\varepsilon_0} \quad (9.6)$$

diszkrétizált Poisson-egyenletet.⁴

A potenciál meghatározása után az elektromostér-erősség a rácspontokban szintén egy véges differencia séma alapján adódik:

$$E_p = \frac{\phi_{p-1} - \phi_{p+1}}{2\Delta x}, \quad (9.10)$$

a felületeknél az alábbi módosítással:

$$E_0 = \frac{\phi_0 - \phi_1}{\Delta x} - \rho_0 \frac{\Delta x}{2\varepsilon_0}, \quad (9.11)$$

³Egydimenziós szimulációról lévén szó, az elektródák térbeli kiterjedése valójában végtelen, az A „fiktív” felület egy skálázási paraméter szerepét játssza, ami lehetővé teszi, hogy összekössük a szuperrészecskék számát a valós részecskesűrűséggel. Amennyiben pl. N_e elektron szuperrészecskénk van, akkor a térben átlagolt elektronsűrűség $n_e = N_e W/LA$. Ebből láthatóan fizikai értelme a W/A aránynak van.

⁴A Poisson-egyenlet numerikus megoldása 1 dimenzióban igen egyszerű, 2 v. 3 dimenzióban ugyanez a számítási igény szempontjából a PIC szimulációk kritikus része. A feladat a potenciál meghatározása $\nabla^2 \phi = -\rho/\varepsilon_0$ alapján a rácspontokban, az elektródákra kapcsolt (ϕ_1 , ϕ_{N_g-1}) potenciálértékek, mint (Dirichlet-féle) peremfeltételek és a rácspontokhoz rendelt ρ_p tértöltés értékeinek ismeretében. A diszkrét Poisson-egyenlet az alábbi módon származtatható. A térerősség véges differenciák szerinti diszkrétizálásával a $(p-1/2)$ és $(p+1/2)$ pontokban:

$$E_{p-1/2} = -\frac{\phi_p - \phi_{p-1}}{\Delta x}, \quad E_{p+1/2} = -\frac{\phi_{p+1} - \phi_p}{\Delta x}. \quad (9.7)$$

Továbbá, a p -adik rácspontban ($k = 1, \dots, N_g - 2$):

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_{x_p} \cong \frac{E_{p+1/2} - E_{p-1/2}}{\Delta x}, \quad (9.8)$$

amiből közvetlenül adódik a 9.6. egyenlet. Az összes rácspontot tartalmazó egyenletrendszer,

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & \cdots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{N_g-3} \\ \phi_{N_g-2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha\rho_1 - \phi_0 \\ \alpha\rho_2 \\ \vdots \\ \alpha\rho_{N_g-3} \\ \alpha\rho_{N_g-2} - \phi_{N_g-1} \end{bmatrix}, \quad (9.9)$$

ahol $\alpha = -(\Delta x)^2/\varepsilon_0$, egyszerű módon megoldható, a (tridiagonális) mátrix invertálása nélkül.

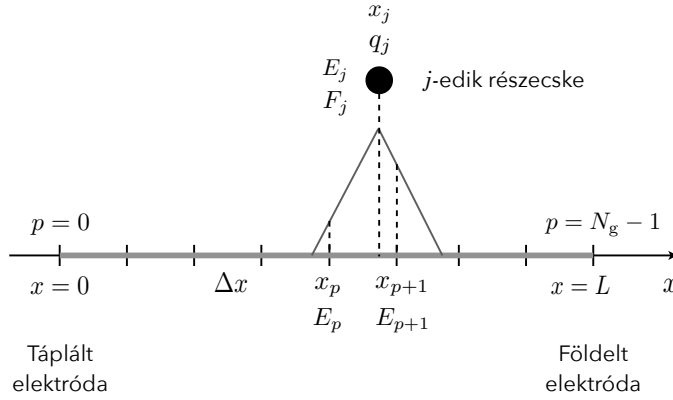
$$E_{N_g-1} = \frac{\phi_{N_g-2} - \phi_{N_g-1}}{\Delta x} + \rho_{N_g-1} \frac{\Delta x}{2\varepsilon_0}. \quad (9.12)$$

3. A térerősséget a rácspontokról az egyes töltött részecskék pozíciójába interpolálva megkapjuk a részecskék helyén a

$$E_j = E_p \frac{x_{p+1} - x_j}{\Delta x} + E_{p+1} \frac{x_j - x_p}{\Delta x}. \quad (9.13)$$

térerősséget, amiből a töltésük ismeretében a rájuk ható erő kiszámítható (lásd 9.7. ábra). A j -edik, x_p és x_{p+1} rácspontok között található részecskére ható erő:

$$F_j = E_j q_j. \quad (9.14)$$



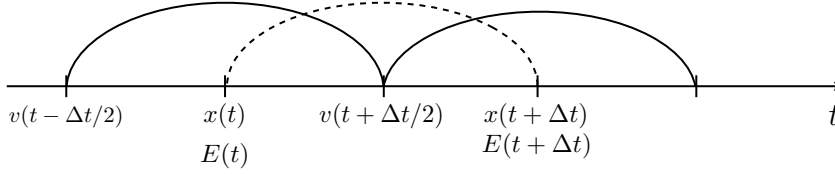
9.7. ábra. A térerősség interpolációja a részecskék pozíciójába [84]. (A CC BY 4.0 licenc alapján reprodukálva és magyarra fordítva az alábbi cikkből: Z. Donkó, A. Derzsi, M. Vass, B. Horváth, S. Wilczek, B. Hartmann, P. Hartmann: eduPIC: an introductory particle based code for radio-frequency plasma simulation, Plasma Sources Science and Technology 30, 095017 (2021), <https://doi.org/10.1088/1361-6595/ac0b55>.)

4. A diszkrétizált mozgásegyenlet megoldásával kiszámítjuk a részecskék új pozícióját és sebességét, pl. az alábbi integrálási séma alapján (lásd 9.8. ábra):

$$v(t + \Delta t/2) = v(t - \Delta t/2) + \frac{q}{m} E[x(t)]\Delta t, \quad (9.15)$$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t + \Delta t/2)\Delta t. \quad (9.16)$$

5. Az egyes részecskék mozgatása után megvizsgáljuk, hogy közülük melyek érték el a határoló falakat (elektródákat) és az ott figyelembe venni kívánt jelenségeknek megfelelően járunk el: a töltött részecskék visszaverődhetnek, elnyelődhetnek, illetve újabb részecskék kibocsátását (pl. ionindukált elektronemisszió) eredményezhetik.



9.8. ábra. A részecskék koordinátáinak időbeli léptetése a diszkretizált mozgásegyenlet alapján [84] („leapfrog” séma). (A CC BY 4.0 licenc alapján reprodukálva az alábbi cikkből: Z. Donkó, A. Derzsi, M. Vass, B. Horváth, S. Wilczek, B. Hartmann, P. Hartmann: eduPIC: an introductory particle based code for radio-frequency plasma simulation, Plasma Sources Science and Technology 30, 095017 (2021), <https://doi.org/10.1088/1361-6595/ac0b55>.)

6. A Monte Carlo szimulációs módszer tárgyalásánál ismertetett módon kiszámítjuk az egyes részecskék ütközési valószínűségeit a Δt időlépés alatt:

$$P_{\text{coll}} = 1 - \exp[-n\sigma_t(g)g\Delta t], \quad (9.17)$$

(ahol g az elektron/ion és az ütköző partner gázatom relatív sebessége és σ_t a teljes elektron - atom, illetve ion - atom ütközési hatáskeresztmetszet) és végrehajtjuk a bekövetkező ütközéseket.

A PIC/MCC szimulációknál a *stabilitás* és a *számítási pontosság* biztosítása érdekében fontos az alábbi feltételek betartása:

1. a numerikus rács fel kell, hogy bontsa a Debye-hosszat, $\Delta x \sim \lambda_D$;
2. az időlépés fel kell, hogy bontsa a rendszer legmagasabb frekvenciájú mozgásait, ami az elektronok plazmarezgése. A stabilitás feltétele $\omega_{p,\max}\Delta t \leq 2$, ahol $\omega_{p,\max} = \sqrt{n_{e,\max}e^2/\varepsilon_0 m_e}$ az elektronok plazmafrekvenciájának maximális értéke. A gyakorlatban ezt a feltételt – a trajektóriák pontos felbontása érdekében – általában szigorúbbra érdemes választani;
3. teljesülnie kell a *Courant-feltételnek*, ami megköveteli, hogy egy időlépés alatt a részecskék ne tegyenek meg egy rácsosztásnál nagyobb távolságot, azaz $v_{\max}\Delta t \leq \Delta x$ (ahol $v_{\max}$ a részecskék sebességének felső korlátja);
4. a jó statisztika és a kis numerikus hibák érdekében lehetőleg nagy számú részecske kell, hogy elhelyezkedjen egy Debye-gömbön belül: $N_D \gg 1$;
5. az egy Δt időlépés alatti P_{coll} ütközési valószínűségnek elegendően kicsinek kell lennie ahhoz, hogy Δt alatt az *egynél több ütközés* valószínűsége elhanyagolható legyen!

A fenti feltételek egy tipikus RF gázkisülésre néhány száz – néhány ezer rácspontot igényelnek és általában néhány ezer időlépést tesznek szükségessé egy rádiófrekvenciás perióduson belül.

A PIC/MCC szimulációk sebessége jelentősen növelhető a korábban ismertetett *null-ütközés* módszer adaptálásával. Ezzel elkerülhetővé válik, hogy a szimuláció minden egyes időlépésében, az összes (nagy számú) részecskére ki kelljen számítani az ütközési valószínűséget. Korábban megmutattuk, hogy *állandó ütközési frekvencia* ($\nu^* = \text{állandó}$) mellett bármely részecske ütközésének valószínűsége Δt alatt:

$$P_c = 1 - \exp(-\nu^* \Delta t). \quad (9.18)$$

Ebből adódóan, N számú részecske esetén az ütköző részecskék száma:

$$N_c = N[1 - \exp(-\nu^* \Delta t)]. \quad (9.19)$$

Ennek megfelelően minden időlépés után az adott típusú részecskék közül N_c számút véletlenszerűen választhatunk ki és ezeket ütköztetjük a háttérgáz atomjaival. (Természetesen az ütközések egy része – a 7.2.1. fejezetben megismert módon – itt is „null-típusú” lesz, ami nem változtatja meg az „ütköző” részecske mozgását.)

Ugyancsak segítheti a számítási sebesség növelését az elektronokra és ionokra különböző időlépések használata. Az ionok mozgása – nagyobb tömegük miatt – az elektronokéhoz képest lényegesen lassabb, plazmafrekvenciájuk számottevően alacsonyabb. Így az időlépések $\mathcal{R} = \Delta t_i / \Delta t_e$ aránya tipikusan 10–50 értékre állítható be.⁵

A részecskék transzportjával kapcsolatos időállandók miatt a konvergencia jellemzően néhány ezer RF periódus szimulációját igényli, negatív ionokat is tartalmazó plazmákban ez 1–2 nagyságrenddel hosszabb is lehet. Megjegyezzük, hogy a bemutatott szimulációs módszerrel alacsony nyomású elektropozitív plazmák esetében, 1 CPU-n futó szekvenciális program konvergenciájához tipikusan $\sim$ néhány óra – egy nap futási idő szükséges ($\sim 10^5$ részecskeszám mellett). Kétdimenziós esetben elengedhetetlen a szimulációs program párhuzamosítása.

További részletekért ajánljuk a [84] forrást, ami egy nyílt forráskódú PIC/MCC szimulációs kód részletes leírását adja, annak elérhetőségével.

9.4. Kapacitív csatolású RF gázkisülések fizikája

A következőkben a fent bemutatott PIC/MCC szimulációs módszerrel kapott eredmények alapján tárgyaljuk a kapacitív csatolású gázkisülések fizikáját. Példaként egy elektropozitív argon RF plazmát tekintünk, melyet a 9.1. összefüggéssel adott harmonikus feszültséggel hozunk létre, $\phi_0 = 300$ V,

⁵A gyakorlatban ez azt jelenti hogy a 9.5. ábra szerinti PIC ciklust az elektronok Δt_e időlépésének megfelelően hajtjuk végre, de az ionok által keltett töltéssűrűséget és az ionok mozgását és ütközéseit csak minden $\mathcal{R}$ -edik időlépésben kell újraszámolni, illetve végrehajtani.

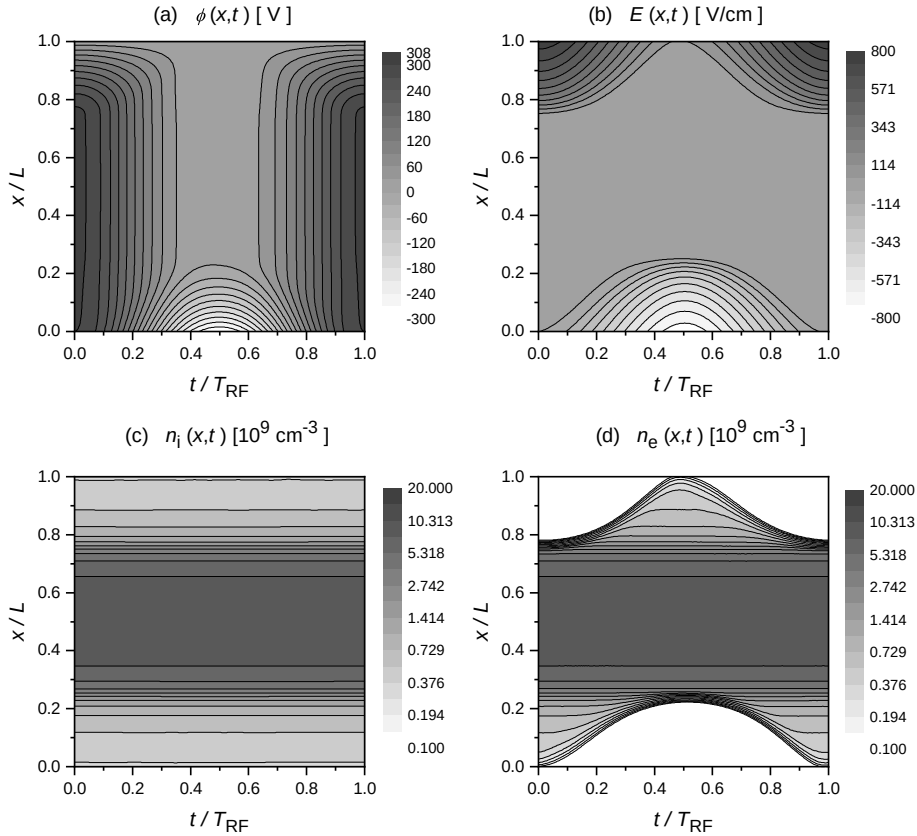
$f = 13.56$ MHz, az elektródák távolsága $L = 2.5$ cm, a nyomás $p = 10$ Pa. Feltételezzük, hogy az elektródákra érkező elektronok 20% valószínűséggel rugalmasan visszaverődnek, valamint, hogy az ionok nem váltanak ki elektronokat az elektródák felületéből (azaz $\gamma = 0$).

A gázkisülés dinamikájának részleteit a jellemzőinek *tér- és időbeli változásait* egyszerre bemutató ábrákból érthetjük meg legjobban. A 9.9. ábra a potenciál, a térerősség, az ionsűrűség és az elektronsűrűség (tér- és időbeli) változását mutatja a gerjesztő RF feszültség egy periódusára ($T_{\text{RF}} = 1/f$). Az ábrán $x/L = 0$ a táplált elektróda pozíciójának, $x/L = 1$ pedig a földelt elektróda helyének felel meg. Az előbbi pozícióban a potenciál (9.9.(a) ábra) láthatóan követi a gerjesztő feszültség koszinuszos hullámformáját, míg az $x/L = 1$ helyen $\phi \equiv 0$ („földpotenciál”). A két elektróda között a potenciál láthatóan erősen nemlineárisan esik a hely függvényében, a jelentős potenciálesés az idő függvényében felváltva a két elektróda környezetében jelenik meg. A gázkisülés középső tartományában látható közel függőleges (azonos potenciálértékhez tartozó) „szintvonalak” jó közelítéssel térmentes tartományt jeleznek.

A térerősség eloszlása (9.9.(b) ábra) $E = -\partial\phi/\partial x$ kapcsolatban van a potenciáeloszlással. Az $E(x, t)$ eloszlás jól érzékelteti a (jelentős térerősséggel jellemezhető) határrétegek kialakulását és eltűnését az elektródák környezetében, valamint azt, hogy a határrétegeken kívül a vizsgált rendszerben a térerősség elhanyagolható. Az ionok és az elektronok 9.9.(c) és (d) ábrákon szemléltetett sűrűségeloszlásai között szembetűnő különbség, hogy míg az ionok eloszlása láthatóan stacionárius, az elektronok sűrűsége lényegesen lecsökken az elektródák mellett kialakuló határrétegekben. Az eredmények tehát megfelelnek annak a várakozásnak, hogy az elektronok dinamikája követi a gerjesztő hullámforma időfüggését, az ionok nem (vagy igen kis mértékben) reagálnak a térerősség változásaira.

A vizsgált gázkisülésben a töltött részecskék folyamatosan keletkeznek ionizációs folyamatokban és vesznek el a plazmát határoló falakon (elektródákon). Eközben természetesen fellép a töltött részecskék áramlása, ami a gázkisülés áramvezetését is biztosítja. A plazma áramsűrűségének egyes komponenseit: az elektronok, valamint az ionok által hordozott (j_e , ill. j_i) *vezetési* áramsűrűséget, illetve az *eltolási* áramsűrűséget (j_d ; 2.1. fejezet) a 9.10. ábra mutatja az idő és a hely függvényében. A három komponens összegeként adódó teljes áramsűrűség csak az idő függvénye és adott időpontban független a térbeli pozíciótól (9.10.(d) ábra). Az elektronáram-sűrűség csak a plazma kvázisemleges tartományában jelentős (a gerjesztő feszültség két félpériódusában ellentétes irányú), a határrétegekben elhanyagolható. Az ionáram-sűrűség a gázkisülés szimmetriasíkjától az elektródák irányába haladva növekszik. A középső térrészben időfüggetlen jelleget mutat, míg az elektródák környezetében j_i értékében enyhe moduláció lép fel a határrétegekben az ezekben megjelenő nagy térerősség hatására (de tipikusan $|j_i| \ll |j_e|$). A (közel) zérus térerősséggel jellemezhető kvázisemleges tartományban az eltolási áram (lásd 9.10.(c) ábra) elhanyagolható, viszont a nagy és időben változó térerősséggel jellemzett határrétegekben jelentős, az áramban domináns értéket vesz fel.

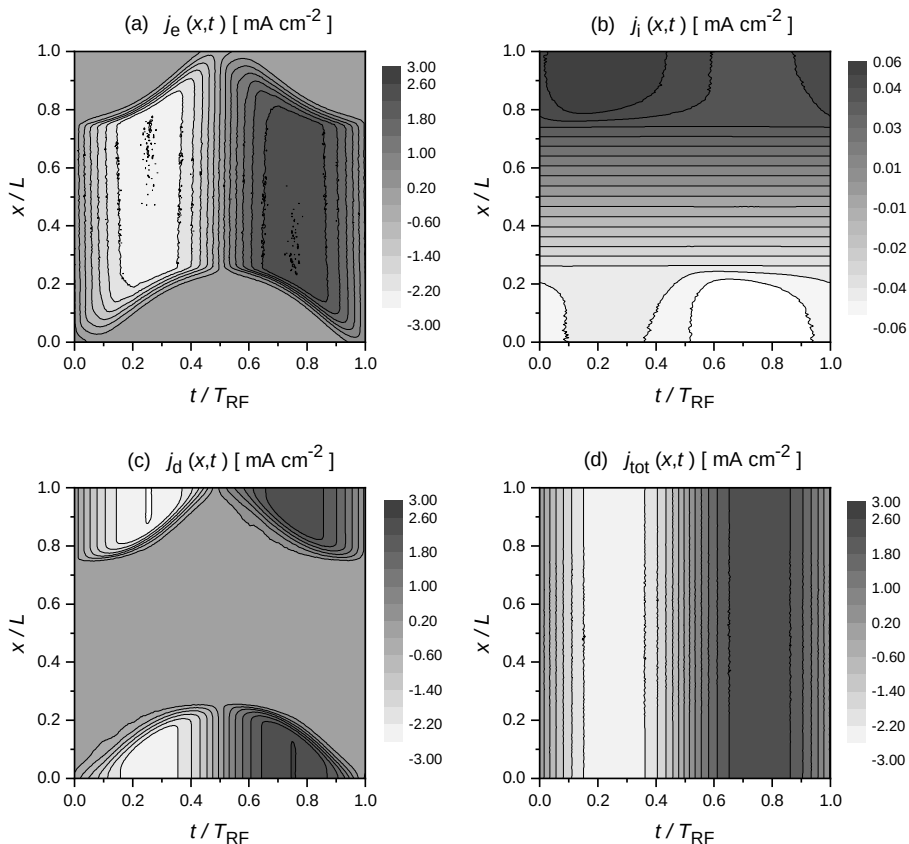
A 9.11. ábra a gázkisülés további fontos jellemzőit szemlélteti. Az RF plaz-



9.9. ábra. RF feszültséggel gerjesztett argon gázkisülés jellemzőinek tér- és időbeli eloszlása: (a) potenciál, (b) térerősség, (c) ionsűrűség, (d) elektronsűrűség. ($f = 13.56 \text{ MHz}$, $L = 2.5 \text{ cm}$, $p = 10 \text{ Pa}$, $\phi_0 = 300 \text{ V}$.)

mákban az elektronok a váltakozó elektromos tértől nyerik az energiájukat. Az egységnyi időre és egységnyi térfogatra számított felvett, illetve leadott elektronenergia, vagyis a teljesítménysűrűség a 9.11.(a) ábrán látható. Megfigyelhető, hogy az elektronok főként a kiterjedő határrétegek szélén nyernek energiát. Ezt első közelítésben úgy értelmezhetjük, hogy az elektróda felé mozgó elektronok a határréteg széléről, mint egy mozgó „falról” visszaverődnek, ami során energiájuk növekszik [4]. A határrétegek visszahúzóódásakor ellentétes folyamat, energialeadás következik be. A két ellentétes jelenségből származó energianyereség és veszteség mérlege időátlagban pozitív, ennek köszönhető, hogy a váltakozó elektromos tér energiát tud betáplálni a rendszerbe.⁶ A felvett energia következtében az elektronok átlagos energiája a kiterjedő határrétegek szélének

⁶Az itt ábrázolt $H(x,t)$ mennyiség nem tartalmazza az ütközések során fellépő energia-veszteséget.

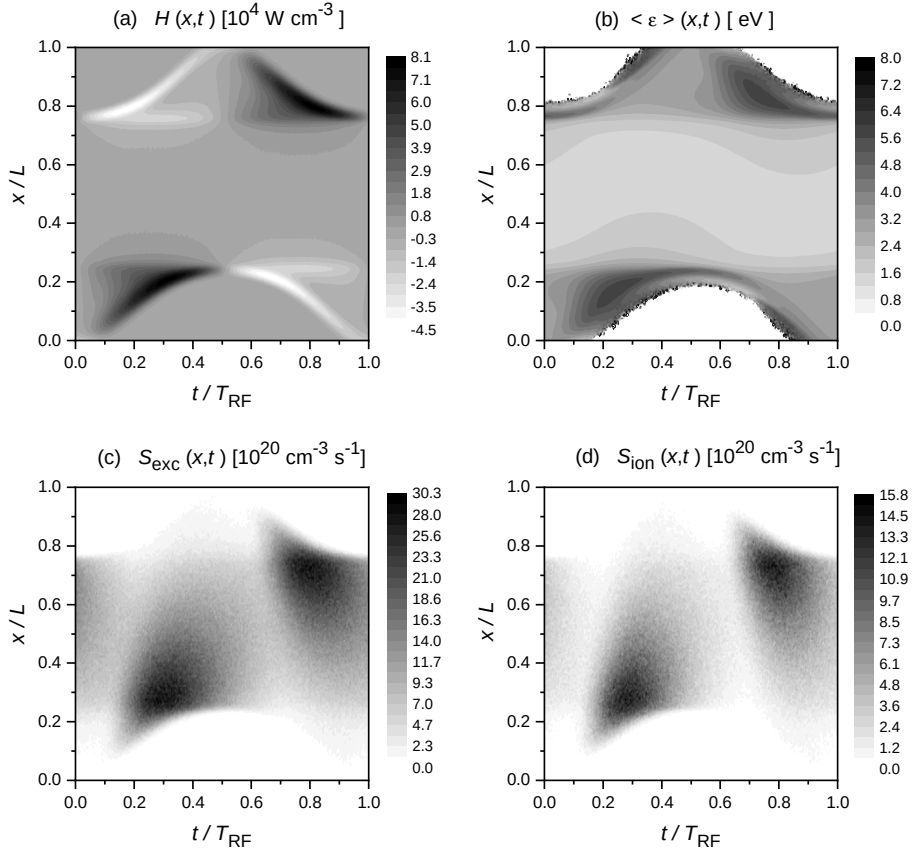


9.10. ábra. RF feszültséggel gerjesztett argon gázkisülés jellemzőinek tér- és időbeli eloszlása: (a) elektronáram-sűrűség, (b) ionáram-sűrűség, (c) eltolási áramsűrűség, (d) teljes áramsűrűség. ($f = 13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $p = 10$ Pa, $\phi_0 = 300$ V.)

közelében maximális (lásd a 9.11.(b) ábra) – a példaként bemutatott esetben ez $\sim 6\text{--}7$ eV értékű –, míg a kvázisemleges térrészben az átlagos energia ~ 2 eV. A határrétegek szélénél megnövekvő elektronenergia ezen térrész környezetében intenzív gerjesztést és ionizációt eredményez. Ezen folyamatok tér- és időbeli eloszlását a 9.11.(c) és (d) ábrák szemléltetik.

9.4.1. Energiabecsátolási mechanizmusok

A plazmákban jelenlévő töltött részecskék közül az elektronok reagálnak leggyorsabban és legnagyobb mértékben az elektromágneses terekre, így ezeknek a részecskéknek van a legfontosabb szerepük a külső terektől való energiafel-



9.11. ábra. RF feszültséggel gerjesztett argon gázkisülés jellemzőinek tér- és időbeli eloszlása: (a) az elektronok által felvett/leadott teljesítménysűrűség, (b) átlagos elektronenergia, (c,d) elektronütközéses gerjesztés és ionizáció forrásfüggvényei. ($f = 13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $p = 10$ Pa, $\phi_0 = 300$ V.)

vételben. A kapacitív csatolású RF plazmák legalapvetőbb energiateljesítményfelvételi mechanizmusa az elektronok energianyeresége a kiterjedő határrétegek szélén való visszaverődésükkor.⁷ Ez az energiateljesítményfelvételi mód a „kemény fal” modellel írható le [4], melynek lényege, hogy egy mozgó fal felé haladó könnyű részecske a falon történő visszaverődésekor energiát nyer (az elektródákra merőleges sebességkomponensének megváltozása a fal sebességének kétszerese). A 9.12. ábra első

⁷A régebbi irodalom az elektronok energiateljesítményfelvételi folyamatait „elektronfűtési” mechanizmusok néven jelöli, ami helytelen, ugyanis az energiaközlés az elektronok sebességeloszlás függvényét általában nemizotróp módon, a részecskék hőmérsékletét növelve változtatja, hanem a térerősség irányában anizotrópiát alakít ki. Az ütközések során a sebességeloszlás-függvény fokozatosan izotropizálódik, de ennek térbeli skálája alacsony nyomások mellett összemérhető lehet a rendszerek méretével [107].

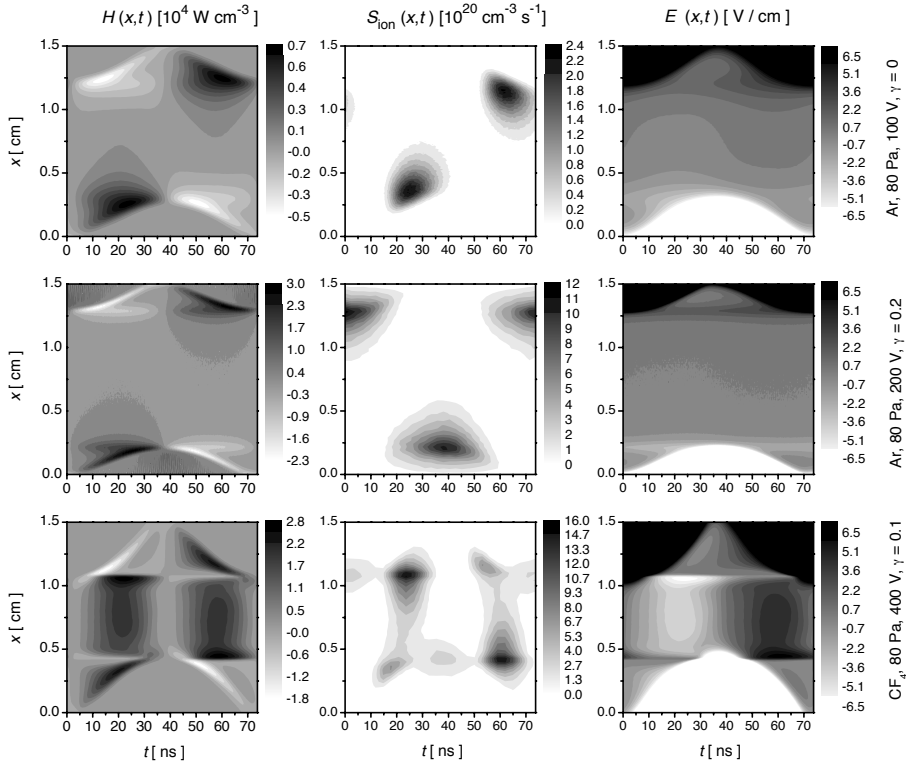
sora ezt, a már előző pontban is említett energiafelvételi módot szemlélteti egy elektropozitív argon gázkisülésre, 80 Pa nyomás, $\phi_0 = 100$ V amplitúdó mellett, az ionindukált elektronkiváltási tényezőre $\gamma = 0$ értéket feltételezve [108]. Az ábra bal oldali oszlopában az elektronok által felvett teljesítménysűrűség, középső oszlopában az ionizáció forrásfüggvénye, jobb oldali oszlopában pedig a térerősség látható. Megfigyelhető, hogy az elektronok energianyeresége a határreteg szélénél jelentős, az ionizáció tartománya a határreteg szélétől a kvázisemleges térrész felé terjed. Ezt az energiabecsatolási mechanizmust „ α -módnak” nevezzük (a gáztérben bekövetkező elektronsokszorozódást leíró Townsend-féle α ionizációs együtthatóval való kapcsolata alapján).

Amennyiben az elektródákon jelentős elektronemisszió lép fel az ionbombázás hatására, az ionizáció tér- és időbeli eloszlása jelentősen megváltozik az előzőekben tárgyalt körülményekhez képest. Ezt szemlélteti a 9.12. ábra második sora, ugyancsak egy Ar gázkisülésre, $\phi_0 = 200$ V amplitúdó, $p = 80$ Pa nyomás és $\gamma = 0.2$ értékű elektronkiváltási együttható esetére. Itt az ionizáció nagy része a határretegben megy végbe, illetve ennek teljes kiterjedése környékén a forrásfüggvény átnyúlik a kvázisemleges tartományba. A katódból kilépő elektronok igen nagy energiát tudnak felvenni a határretegben jelenlévő nagy térerősség hatására és jelentősen sokszorozódnak. Mivel ez az energiabecsatolási mód az elektródákból kilépő elektronokon alapul, ezért „ γ -módnak” nevezzük.

Az eddigiektől alapjaiban eltérő energiabecsatolási mechanizmusok figyelhetők meg *elektronegatív gázkisülésekben*. Ezekben a plazmákban az elektronmegkötéssel járó ütközési folyamatoknak köszönhetően jelentős, gyakran az elektronokét lényegesen meghaladó sűrűségben vannak jelen *negatív ionok*. A 9.12. ábra harmadik sorában példaként bemutatott CF_4 gázkisülésben F^- és CF_3^- negatív ionok keletkeznek. Ezeket a negatív ionokat – az elektronokhoz hasonlóan – a határretegben felépülő elektromos tér az elektródáktól távol tartja, így ezek csak a plazma középső tartományában találhatók meg. Ez a tartomány elektronegatív plazmákban is kvázisemleges, de ezt nagyrészt a pozitív és negatív ionok hasonló száma biztosítja, az elektronsűrűség sok esetben az ionok sűrűségének töredék része. Ugyanakkor, mivel az ionok a rádiófrekvenciás elektromos térre csak kis mértékben tudnak reagálni, ezért az áramvezetés továbbra is az elektronok feladata. A lecsökkent elektronsűrűség miatt viszont az áram vezetését csak nagyobb sebességű elektronok biztosíthatják. Ehhez elegendően nagy térerősség szükséges, amit, mint a 9.12. ábra harmadik sorában látható, a plazma ki is alakít. Ebben az elektromos térben az elektronok gyorsulnak és a kvázisemleges tartományban jelentős ionizációt okoznak. Ezekben a rendszerekben az eltűnő határreteg szélénél fellépő ambipoláris elektromos tér tipikusan tovább gyorsítja az elektronokat, az ionizációs forrásfüggvénynek itt egy éles maximuma figyelhető meg. Az itt tárgyalt energiabecsatolási mechanizmust „*drift-ambipoláris*” (DA) módnak nevezzük [108].

A gáz jellegétől és a működési paraméterektől függően az egyes energiabecsatolási mechanizmusok között átmenetek figyelhetők meg és bizonyos paramétertartományokban a gázkisülésekben egyszerre több mechanizmus is szerepet játszhat.

Megjegyezzük, hogy az energiabecsatolási mechanizmusokról a szimuláci-



9.12. ábra. RF feszítéssel ($f = 13.56$ MHz) gerjesztett gázkisülés jellemzőinek tér- és időbeli eloszlása. Bal oldali oszlop: elektronok által felvett teljesítménysűrűség, középső oszlop: ionizációs forrásfüggvény, jobb oldali oszlop: térerősség [108]. Első sor: Ar, $p = 80$ Pa, $\phi_0 = 100$ V, $\gamma = 0$. Második sor: Ar, $p = 80$ Pa, $\phi_0 = 200$ V, $\gamma = 0.2$. Harmadik sor: CF₄, $p = 80$ Pa, $\phi_0 = 400$ V, $\gamma = 0.1$. A térerősség színskálája a határrétegekben telítődik. (Az APS engedélyével reprodukálva az alábbi cikkből: J. Schulze, A. Derzsi, K. Dittmann, T. Hemke, J. Meichsner, Z. Donkó: Ionization by Drift and Ambipolar Electric Fields in Electronegative Capacitive Radio Frequency Plasmas, *Physical Review Letters* 107, 275001 (2011), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.275001>. Copyright (2011) by the American Physical Society.)

ók mellett kísérletileg is szerezhető információ, az ún. fázis-felbontott optikai emissziós spektroszkópia (PROES: „Phase-Resolved Optical Emission Spectroscopy”) [109] módszerével. A mérések egy igen gyors kamerára épülnek, amelynek kapuideje sokkal rövidebb a plazmát létrehozó RF jel periódusidejénél, tipikusan 1-2 ns nagyságú. Egy spektrométer, vagy egyszerűbb esetben egy optikai sávszűrő segítségével egy adott emissziós átmenetet kiválasztva, rövid expozíciójú, térbeli felbontású felvételek készülnek a plazmáról. Az így kapott tér- és időbeli felbontású képeken a szimulációkból kapott ábrákhoz hasonlóan azonosíthatók

a vizsgált plazmában szerepet játszó energiabecsátolási mechanizmusok.

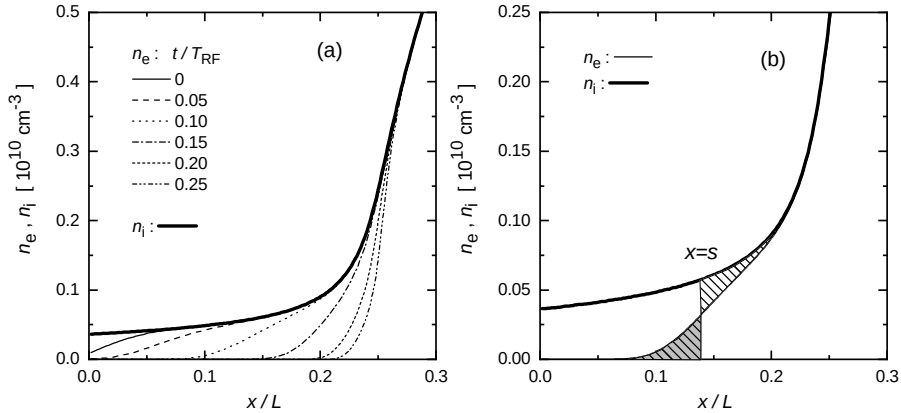
9.5. A határrétegek és a kvázisemleges térrész analitikus leírása, az RF gázkisülés elektromos helyettesítő képe és impedanciája

9.5.1. A határréteg jellemzői

A 9.13.(a) ábra a töltött részecskék sűrűségének eloszlását mutatja különböző időpillanatokra a gázkisülés ($x = 0$ pozíciójú) táplált elektródája környezetében, $f = 13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $p = 10$ Pa, $\phi_0 = 300$ V működési paraméterek mellett. A *határréteg* $s \equiv s_p$ hossza, a 9.13.(b) ábrán illusztrált módon, az alábbi egyenletből határozható meg [110]:

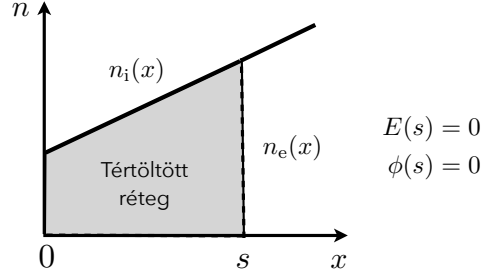
$$\int_0^s n_e(x) dx = \int_s^{L/2} [n_i(x) - n_e(x)] dx. \quad (9.20)$$

Hasonló összefüggés írható fel a földelt elektróda mellett kialakuló határréteg hosszára is.



9.13. ábra. (a) A gázkisülés stacionárius ionsűrűség-profilja (n_i) és az elektronsűrűség (n_e) eloszlása különböző időpontokban a táplált elektróda környezetében. (b) Az ion- és elektronsűrűség $t/T_{\text{RF}} = 0.1$ időpontban. A határréteg hosszának a 9.20. összefüggés szerinti meghatározása azt fejezi ki, hogy a két vonalkázott terület egyenlő. ($f = 13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $p = 10$ Pa, $\phi_0 = 300$ V.)

A határréteg analitikus leírásához tekintsük a 9.14. ábrát! Az ionsűrűség változása az $n_i(x)$ függvény szerinti, míg az elektronsűrűségről feltételezzük, hogy a



9.14. ábra. RF gázkisülés határrétegének modelljéhez. Az elektróda pozíciója $x = 0$, a határréteg hossza s , az elektronsűrűség a határréteg szélén nullára esik.

valóságos helyfüggéshez képest „meredeken” leesik a határréteg szélén, melynek pozíciója $x = s$ (v.ö. 9.13. ábra). A térerősség a tartomány valamely pontjában (a 9.14. ábrán feltüntetett módon $E(x = s) = 0$ térerősséget feltételezve):

$$E(x) = -\frac{e}{\varepsilon_0} \int_x^s n_i(x') dx'. \quad (9.21)$$

Az elektróda potenciálja (és egyben az itt tekintett táplált elektródához tartozó határrétegen eső feszültség):

$$\begin{aligned} \phi_p(x=0) &= \phi(x=s) - \int_s^0 E(x) dx = \int_0^s E(x) dx \\ &= -\frac{e}{\varepsilon_0} \int_0^s \int_x^s n_i(x') dx' dx. \end{aligned} \quad (9.22)$$

A fenti egyenlet megoldásaként⁸ az elektróda potenciáljának időfüggésére az alábbiakat kapjuk:

$$\phi_p(t) = -\frac{e}{\varepsilon_0} \int_0^{s(t)} x n_i(x) dx. \quad (9.23)$$

A $\xi = x/s$ normált koordináta és a $P(\xi) = n_i(\xi)/\bar{n}_i$ normált sűrűségprofil

⁸A $\int_0^s \int_x^s n_i(x') dx' dx$ kettős integrál értékét parciális integrálással ($\int \mathcal{U} \mathcal{V}' dx = \mathcal{U} \mathcal{V} - \int \mathcal{U}' \mathcal{V} dx$ alapján) kapjuk meg, $u = \int_x^s n_i(x') dx'$ és $v' = 1$ helyettesítéssel. Eszerint:

$$\begin{aligned} \int_0^s \int_x^s n_i(x') dx' dx &= \int_0^s 1 \left[\int_x^s n_i(x') dx' \right] dx = \\ &= \left[\int_x^s n_i(x') dx' \cdot x \right]_{x=0}^{x=s} - \int_0^s \frac{d}{dx} \left[\int_x^s n_i(x') dx' \right] x dx = \\ &= s \int_s^s n_i(x') dx' - 0 \int_0^s n_i(x') dx' - \int_0^s -n_i(x) x dx = \int_0^s x n_i(x) dx. \end{aligned}$$

bevezetésével, ahol

$$\bar{n}_i = \frac{1}{s} \int_0^s n_i(x) dx$$

az átlagos ionsűrűség a határrétegben, a potenciálra az alábbi adódik [111]:

$$\phi_p(t) = -\frac{e}{\varepsilon_0} \bar{n}_i s^2 \int_0^1 P(\xi) \xi d\xi = -\frac{e \bar{n}_i s^2}{2\varepsilon_0} I_s, \quad (9.24)$$

ahol $I_s = 2 \int_0^1 P(\xi) \xi d\xi$. A határrétegben lévő összes töltés értéke:

$$Q = A s \bar{n}_i e, \quad (9.25)$$

amiből $s \bar{n}_i e = Q/A$ (ahol A az elektróda felülete). Ezt a 9.24. egyenletbe helyettesítve, a határrétegen eső feszültség:

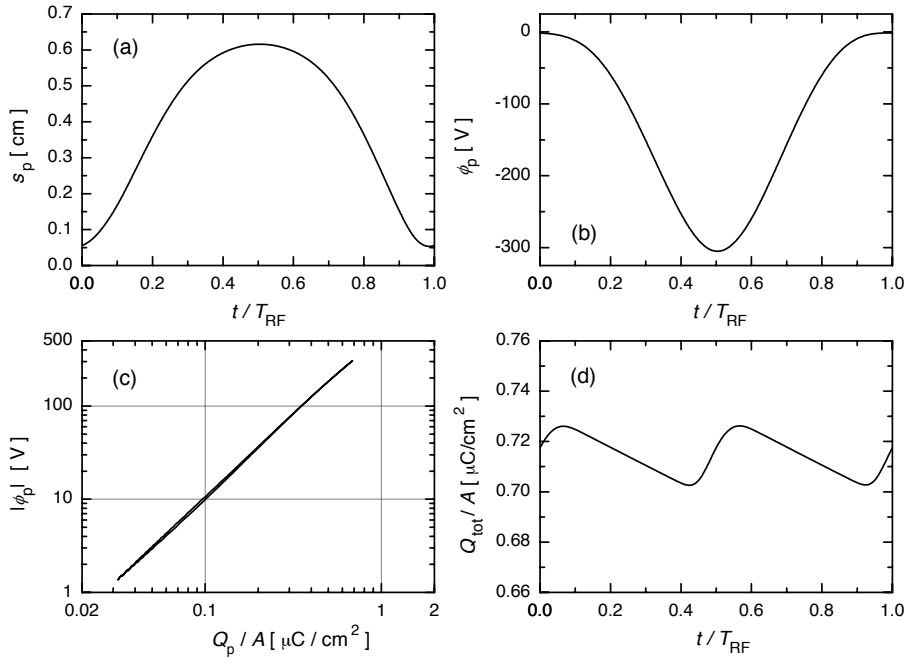
$$\phi_p(t) = -\frac{1}{2e\varepsilon_0} \left(\frac{Q}{A} \right)^2 \frac{I_s}{\bar{n}_i}. \quad (9.26)$$

Látható, hogy a feszültség a töltés négyzetével arányos ($\phi \propto Q^2$), ami egy nemlineáris kondenzátorra jellemző, vagyis a határréteg kapacitív jellegű rész.

Példaként tekintsük az $f = 13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $p = 10$ Pa, $\phi_0 = 300$ V paraméterek mellett létrehozott plazmára kapott PIC/MCC szimulációs eredményeket! A 9.15.(a) és (b) ábrák a táplált elektróda melletti határréteg (9.20. egyenletből meghatározott) s_p hosszának és a határrétegen eső ϕ_p feszültségnek az időfüggését mutatja egy RF periódus időtartamára.

A gerjesztő feszültség pozitív extrémumánál (pl. $t = 0$) a határréteg hossza és a rajta eső feszültség minimális. Ez utóbbi (jelen esetben) ≈ 1.4 V-os értékét a rendszer önszabályozó módon állítja be úgy, hogy az elektronok árama az elektródához (ami csak ϕ_p minimuma környezetében folyik) időátlagban kiegyenlítse a folyamatos ionáramot (9.2. egyenlet szerinti feltétel, ill. 9.10. ábra). A gerjesztő feszültség negatív szélsőértéke felé haladva a határréteg folyamatosan épül fel, ahogy az elektromos tér az elektronokat eltávolítja az elektródától. Míg a gerjesztő feszültség harmonikus időfüggésű, a határrétegen eső feszültség és a határréteg hossza ettől eltérést mutat. A 9.15.(c) ábra a határrétegben felületegységre eső $Q_p(t)/A$ töltés és a határrétegen eső $\phi_p(t)$ feszültség összefüggését szemlélteti – mely jó közelítéssel kvadratikussá válik, az elméleti várakozásnak (9.26. összefüggésnek) megfelelően.

Mivel a gázkisülés két elektródája környezetében a határrétegek egymással ellentétes fázisban alakulnak ki és tűnnek el, az elektronok számára egy RF periódus alatt kétszer nyílik meg az „időablak”, amikor az elektródák egyikéhez áramolhatnak. Ennek megfelelően a plazma teljes térfogatára integrált Q_{tot}/A felületegységre vonatkoztatott össztöltés értéke egy RF periódus alatt kétszer mutat (viszonylag) gyors növekedést (a gerjesztő feszültség extrémumai környezetében, lásd 9.15.(d) ábra). Q_{tot}/A egyéb időszakokban tapasztalható monoton csökkenése az elektródákhoz való folyamatos ionáramlás következménye.



9.15. ábra. (a) Az RF gázkisülés táplált elektródájához tartozó határréteg hossza és (b) a határrétegen eső ϕ_p feszültség az idő függvényében egy RF periódus alatt, (c) a határrétegen eső feszültség és a határrétegben felületegységre eső töltés $|\phi_p| - Q_p/A$ összefüggése, valamint (d) a plazmában a felületegységre eső össztöltés időfüggése. ($f = 13.56$ MHz, $\phi_0 = 300$ V, $L = 2.5$ cm, $p = 10$ Pa.)

9.5.2. A kvázisemleges térrész jellemzői

Elektropozitív gázokban az RF gázkisülések határrétegei közötti tartományt kvázisemleges plazmaként kezelhetjük, ahol az elektronok és a pozitív ionok sűrűsége közel egyenlő. A következőkben feltételezzük, hogy a rendszer egydimenziós és a plazma homogén (azaz $\partial_x = 0$).

A jelentősen eltérő mozgékonyság értékek miatt az áramot dominánsan az elektronok vezetik (lásd 9.10. ábra), ezért a kiindulási alapként szolgáló impulzusmérleg-egyenletet az elektronokra írjuk fel:

$$m_e n_e \frac{du_e}{dt} = -n_e e E - m_e n_e \nu_m u_e \quad (9.27)$$

alakba írható. A homogenitás miatt $\nabla p = 0$. Egy adott A keresztmetszet esetén a vezetési áram $I = -en_e u_e A$, amiből az elektronok átlagsebessége:

$$u_e = -\frac{I}{en_e A}. \quad (9.28)$$

Ezt a 9.27. egyenletbe helyettesítve a térerősség kifejezhető, mint

$$\begin{aligned} E &= -\frac{1}{en_e} \left[m_e n_e \frac{du_e}{dt} + m_e n_e \nu_m u_e \right] \\ &= \frac{m_e}{e} \left[\frac{1}{en_e A} \frac{dI}{dt} + \nu_m \frac{1}{en_e A} I \right] = \frac{m_e}{e^2 n_e A} \left[\frac{dI}{dt} + \nu_m I \right]. \end{aligned} \quad (9.29)$$

Ez alapján az L_b hosszúságú plazmán eső feszültség (a térben állandó sűrűség felhasználásával):

$$\phi_b = \frac{m_e L_b}{e^2 n_e A} \left[\frac{dI}{dt} + \nu_m I \right]. \quad (9.30)$$

A 9.30. összefüggésből láthatóan a térrész impedanciájának van egy

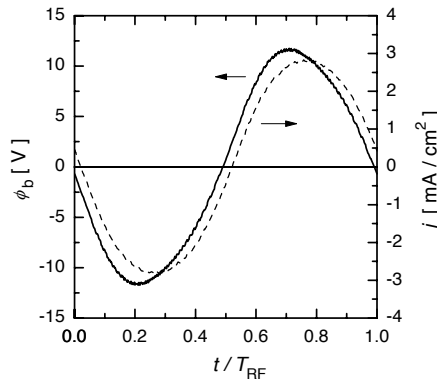
$$R = \frac{m_e L_b \nu_m}{e^2 n_e A}, \quad (9.31)$$

rezisztív komponense, ami az elektronok mozgását akadályozó ütközésekből adódik (egyenesen arányos az ütközési frekvenciával és fordítva arányos az elektronsűrűséggel) és egy

$$L = \frac{m_e L_b}{e^2 n_e A}, \quad (9.32)$$

induktív komponense, ami az elektronok tehetetlenségéből (véges tömegéből) adódik.

Az itt kapott analitikus eredményeket szintén alátámasztjuk PIC/MCC szimulációs eredményekkel. A 9.16. ábra a kvázisemleges tartományon eső ϕ_b feszültség és az átfolyó j áramsűrűség időfüggését mutatja egy RF argon gázkisülésben, $f = 13.56$ MHz, $\phi_0 = 150$ V, $L = 2.5$ cm, $p = 100$ Pa paraméterek mellett. Az áram láthatóan „késik” a feszültséghez képest, ami a térrész induktív jellegére utal.



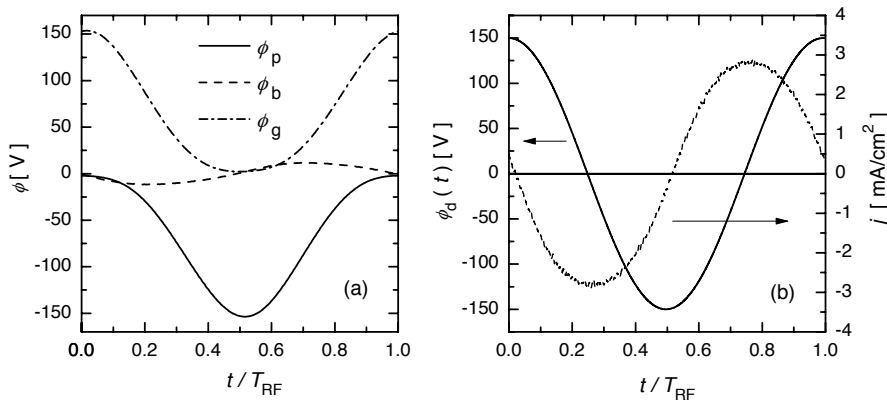
9.16. ábra. RF gázkisülés kvázisemleges térrészén eső ϕ_b feszültség (folytonos vonal) és átfolyó j áramsűrűség (szaggatott vonal) időfüggése. (Argon, $f = 13.56$ MHz, $\phi_0 = 150$ V, $L = 2.5$ cm, $p = 100$ Pa.) A plazmaforrást $\phi(t) = \phi_0 \cos(2\pi ft)$ feszültség táplálja.

9.5.3. Az RF plazma impedanciája és elektromos helyettesítőképe

Az előbbiekben láttuk, hogy az RF gázkisülés két jellegzetes tartománya elektromos szempontból igen eltérő viselkedést mutat: a határrétegek kapacitív jellegűek, míg a kvázisemleges térrész egy rezisztív és egy induktív tag összegeként modellezhető. A határrétegeken eső feszültséget a 9.26. kifejezés adja meg, a kvázisemleges tartományra pedig a 9.30. összefüggés. A gázkisülésen eső feszültség ez alapján

$$\phi_d(t) = \phi_p(t) + \phi_b(t) + \phi_g(t), \quad (9.33)$$

ahol ϕ_p és ϕ_g a táplált és a földelt elektródához tartozó határrétegeken eső feszültség. Egy $f = 13.56$ MHz, $\phi_0 = 150$ V, $L = 2.5$ cm, $p = 100$ Pa paraméterek mellett működő szimmetrikus argon RF gázkisülésre az egyes feszültségkomponensek időfüggését a 9.17.(a) ábra szemlélteti. Megfigyelhető, hogy a határrétegeken eső feszültség jelentős változást mutat, míg a kvázisemleges térrészen mindössze $|\phi_b| \lesssim 10$ V feszültség esik.⁹



9.17. ábra. (a) RF gázkisülés különböző térrészein eső feszültségek az idő függvényében és (b) a gázkisülésen eső feszültség és az átfolyó áramsűrűség időfüggése. (Argon, $f = 13.56$ MHz, $\phi_0 = 150$ V, $L = 2.5$ cm, $p = 100$ Pa.)

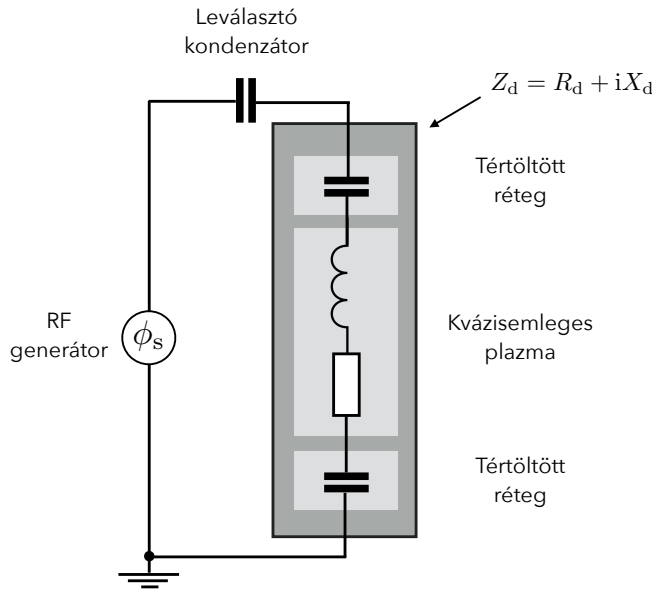
A fentiek alapján nyilvánvaló, hogy a gázkisülés egy

$$Z_d = R_d + iX_d$$

komplex impedanciával jellemezhető, amelynek komponensei a működési paraméterek (gáznyomás, feszültség, stb.) függvényei.

⁹Elektropozitív gázokban, kisebb nyomások mellett az itt megjelenő ϕ_b feszültségcsés még alacsonyabb, ugyanis a plazma elektromos ellenállásáért az ütközések felelősek (a 9.31. összefüggés szerint az ellenállás arányos a momentum transzfer ütközési frekvenciával). Elektronegatív plazmák esetében, az előbbiekkel ellentétben, az ellenállás és ϕ_b értéke lényegesen nagyobb lehet, az alacsony elektronsűrűség miatt az áram vezetését csak megnövekedett térrészség tudja biztosítani (lásd 9.4.1. fejezet).

Az impedancia komponensei a gázkisülés szimulációjából meghatározhatók. A 9.17.(b) ábra $f = 13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $p = 100$ Pa, $\phi_0 = 150$ V paraméterek mellett szemlélteti az RF gázkisülés harmonikus gerjesztő feszültségét és szimulációból meghatározott áramsűrűségét. Megfigyelhető, hogy az áramsűrűség szintén közel harmonikus időfüggést követ.¹⁰ Fázisa közel 90° -ot „siet” a feszültséghez képest, ami kapacitív jellegű impedanciát jelez; a jelek pontosabb analízise $\varphi = 82^\circ$ fáziskülönbséget mutat. Az impedancia komplex jellege kérdéseket vet fel a rendszerek hatékony meghajtásával kapcsolatban, ezzel a 9.7. fejezetben foglalkozunk.



9.18. ábra. Kapacitív csatolású rádiófrekvenciás gázkisülés elektromos helyettesítő képe, illetve meghajtó áramkörének modellje.

A kapacitív csatolású plazmák elektromos helyettesítőképe a fentiek alapján a 9.18. ábrán látható módon adható meg. Az ábra szerinti elektromos áramkörre:

$$\phi_s(t) = \phi_c(t) + \phi_p(t) + \phi_b(t) + \phi_g(t), \quad (9.34)$$

ahol ϕ_c a kondenzátoron eső feszültség. Ez utóbbi egy egyenfeszültségű (DC) és egy rádiófrekvenciás (RF) komponensből áll, de ebből az RF rész megfelelően nagy kapacitású kondenzátor választásával elhanyagolhatóvá válik. A kondenzátor feszültségében DC komponens akkor jelenik meg, ha a plazmában (pl. eltérő nagyságú elektróda felületek, vagy más okok miatt) fellép egy DC előfeszültség (η). Ilyen esetben

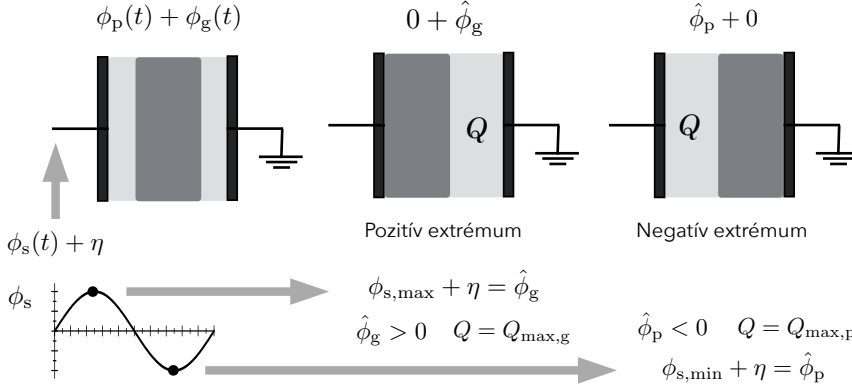
$$\phi_c = -\eta,$$

¹⁰Harmonikus feszültséggel gerjesztett RF gázkisülésekben az áram magasabb (páratlan) harmonikusai is megjelhetnek a plazma nemlineáris jellege miatt.

ugyanis a teljes áramkörre a DC komponens el kell, hogy tűnjön, továbbá:

$$\phi_d = \eta + \phi_s. \quad (9.35)$$

Szimmetrikus plazmák esetében $\eta \equiv 0$, aszimmetrikus rendszerekben a két határreteg jellemzői különbözőek és ez általában $\eta \neq 0$ értéket eredményez.



9.19. ábra. Kapacitív csatolású rádiófrekvenciás gázkisülés analitikus modelljének származtatásához.

Ha elhanyagoljuk a kvázisemleges tartományon eső ϕ_b feszültséget, valamint feltételezzük, hogy a határretek eltűnése teljes (azaz eltűnésükkor a rajtuk eső feszültség elhanyagolható), akkor a gerjesztő feszültség pozitív extrémumánál felírhatjuk, hogy (lásd 9.19. ábra)

$$\phi_{s,\max} + \eta = \hat{\phi}_g, \quad (9.36)$$

ahol $\hat{\phi}_g$ a földelt elektróda melletti határreteg feszültségének maximális értéke. Hasonló megfontolásokból ϕ_s negatív extrémumának időpontjában

$$\phi_{s,\min} + \eta = \hat{\phi}_p \quad (9.37)$$

adódik; itt $\hat{\phi}_p$ a táplált elektróda melletti határreteken eső negatív feszültség csúcsértéke. A feszültségek csúcsértékeinek aránya definiálja az ú.n. *szimmetria paraméter*t:

$$\epsilon = \left| \frac{\hat{\phi}_g}{\hat{\phi}_p} \right|, \quad (9.38)$$

ami, a határreteken eső feszültségekre korábban kapott a 9.26. kifejezés felhasználásával az alábbira vezet:

$$\epsilon = \left(\frac{A_p}{A_g} \right)^2 \frac{\bar{n}_{i,p}}{\bar{n}_{i,g}} \left(\frac{Q_{\max,g}}{Q_{\max,p}} \right)^2 \frac{I_{sg}}{I_{sp}}. \quad (9.39)$$

Itt $Q_{\max,g/p}$ a határrétegekben lévő össztöltés maximális értéke, $A_{p/g}$ pedig a táplált / földelt elektródák felülete. Amennyiben a plazma szimmetrikus, a táplált és a földelt elektródához tartozó jellemzők egyenlőek és így $\epsilon = 1$. Eltérő elektródafelületek esetében viszont $\epsilon \neq 1$ adódik, például a 9.1.(b) ábrán vázolt esetben $A_p \ll A_g$ és ebből adódóan $\epsilon \ll 1$.

A 9.36.–9.38. egyenletekből meghatározható a DC előfeszültség értéke:

$$\eta = -\frac{\phi_{s,\max} + \epsilon\phi_{s,\min}}{1 + \epsilon}. \quad (9.40)$$

$\epsilon = 1$ esetében, egy tisztán harmonikus táplálású plazmában $\eta = 0$, ugyanis $|\phi_{s,\max} = \phi_{s,\min}|$. Ez utóbbi összefüggés arra is rávilágít, hogy egyébként „geometriailag” szimmetrikus plazmaforrásokban akkor is felléphet DC előfeszültség, ha $|\phi_{s,\max} \neq \phi_{s,\min}|$, ami az egy harmonikushoz képest összetettebb hullámformákkal történő gerjesztéssel megvalósítható (lásd 9.6.2. fejezet).

9.6. Az ionok jellemzőinek szabályozása kapacitív RF gázkisülésekben

A plazma alapú felületmódosítási eljárások szempontjából alapvető fontosságú a felületre érkező ionok *fluxusának értéke és annak energia szerinti eloszlása (energiaspektruma)*. Gyakorlati szempontból az optimális esetet az olyan geometriai és működési paraméterek beállítása jelentené, amelyekkel ezek a jellemzők tetszőleges értékre, illetve alakra tervezhetők lennének. A plazmában lejátszódó folyamatok és a plazma dinamikája ennek lehetőségét jelentősen behatárolják, de, mint látni fogjuk, az egyszerű harmonikus gerjesztéshez képest összetettebb hullámformák alkalmazásával bizonyos fokig egymástól függetlenül beállítható az ionok fluxusa és átlagos energiája.

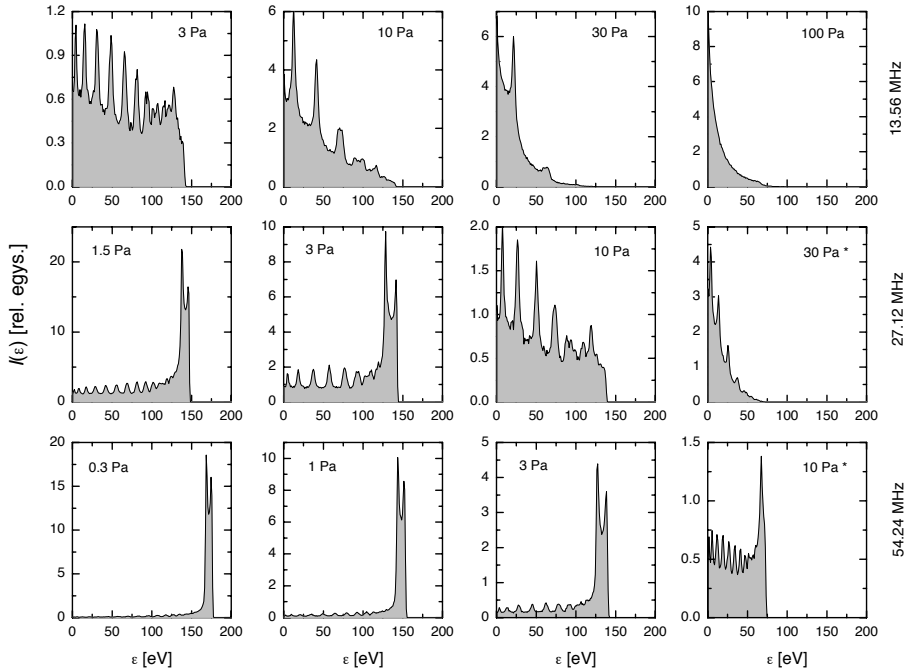
Az ionok fluxusát alapvetően a részecskemérleg határozza meg: amennyiben a rekombinációs és egyéb térfogati veszteségi folyamatok elhanyagolhatóak, akkor a forrásokkal a felületi veszteségek tartanak egyensúlyt. Ez esetben az ionfluxus tehát a gázkisülés működési paramétereit követő források függvénye.

Az ionok átlagos energiája, illetve energiaspektruma összetett módon változik a gázkisülés működési paramétereinek függvényében. Az ionok elsősorban a kvázisemleges térrészben keletkeznek és a határrétegekbe átlépve és ott felgyorsulva érik el az elektródákat; energiaspektrumuk a határrétegen való áthaladás során alakul ki. Ebben lényeges szerepet játszik a gáz nyomása, amely az ütközések gyakoriságát befolyásolja; itt fontos tényező *a határréteg hosszának és az átlagos szabad úthossznak az aránya*. Ismét argon gáz esetét példaként véve, az ionok domináns ütközései az



rugalmas folyamatok. Ezek közül az utóbbi a töltéscicserélő folyamat, amelyben az ion a töltését elveszítve gyors atomként halad tovább és az „új” ion termikus energiával rendelkezik. Alacsony nyomás mellett a határréteg ütközésmentes lehet a nagy szabad úthossz miatt, az ionok energiáját ilyenkor a határrétegen

eső feszültség határozza meg. Magasabb nyomásoknál a gyakori ütközések alacsony ionenergiát eredményeznek. A spektrum kialakulását meghatározó másik fontos paraméter a gerjesztő RF jel periódusidejének (T_{RF}) és az ion határrétegen való áthaladási idejének (τ) aránya. Amennyiben $\tau \ll T_{\text{RF}}$, akkor az ion a határrétegen eső pillanatnyi feszültségnek megfelelő energiát veheti fel. Az ellenkező határesetben – amikor az áthaladási idő számos RF periódust fed le – az ionenergia a határrétegen eső feszültség időátlagától függ.



9.20. ábra. Az Ar^+ ionok energiaspektruma rádiófrekvenciás argon gázkisülés elektródáinál a frekvencia és a nyomás függvényében [112]. Az RF feszültség amplitúdója $\phi_0 = 300$ V, a *-gal jelölt esetekben $\phi_0 = 150$ V. $L = 2.5$ cm, $\gamma = 0.1$. (Az IOP Publishing, Ltd., Copyright Clearance Center, Inc. engedélyével reprodukálva az alábbi cikkből: Z. Donkó, J. Schulze, U. Czarnetzki, A. Derzi, P. Hartmann, I. Korolov, E. Schuengel: Fundamental investigations of capacitive radio frequency plasmas: simulations and experiments, Plasma Physics and Controlled Fusion 54, 124003 (2012). <https://doi.org/10.1088/0741-3335/54/12/124003>.)

A 9.20. ábra az elektródákra érkező Ar^+ ionok energiaspektrumát szemlélteti széles nyomás- és frekvenciatartományban. A vizsgált esetek legtöbbjében az RF feszültség amplitúdója $\phi_0 = 300$ V, kivéve az ábrán csillaggal jelölt eseteket, amelyeknél $\phi_0 = 150$ V.

A spektrumok alakját illetően a két „szélsőséges” esetet a kis frekvencia / nagy nyomás esete (13.56 MHz / 100 Pa) és a nagy frekvencia / kis nyomás esete (54.24 MHz / 0.3 Pa) jelenti. Az első esetben az ionok szabad úthossza (a

nagy nyomás miatt) lényegesen kisebb a határréteg hosszánál. Ennek eredményeképpen az ionok nem tudnak jelentős energiára szert tenni, spektrumuk közel exponenciális lecsengést mutat. A második esetben az ionok szabad úthossza nagyobb a határréteg hosszánál, vagyis a határréteg ütközésmentes. Ebben az esetben a spektrum ≈ 170 eV-nál mutat egy „felhasadt” csúcsot. A felhasadás oka az, hogy a felvett energia függ attól, hogy az adott ion az RF periódus milyen fázisában lép be a határrétegbe. A felhasadás kismértékű, ugyanis az ionok τ áthaladási ideje hosszabb az RF jel T_{RF} periódusidejénél. Az ezen két szélsőséges eset közötti paramétertartományban a spektrumok bonyolult alakúak és jelentős változást mutatnak a működési paraméterek függvényében.

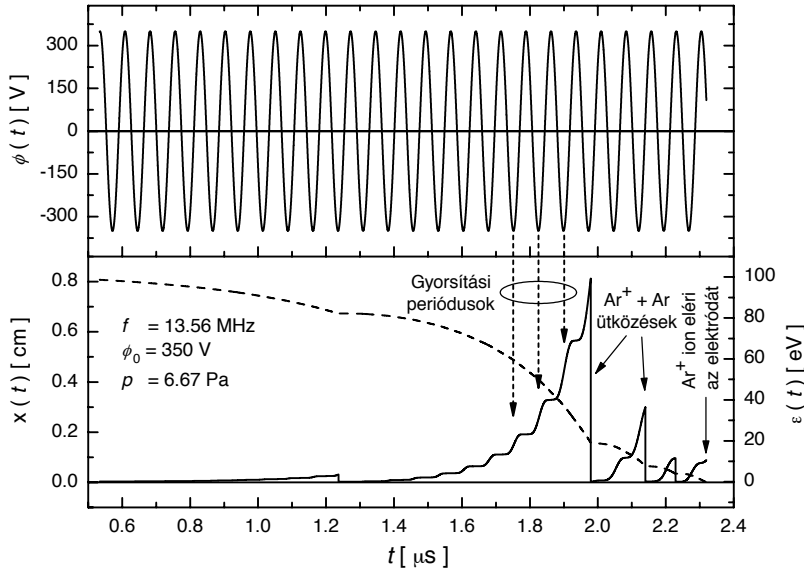
A spektrumokban megfigyelhető csúcsok a térerősség periodikus gyorsító hatásának és az ütközések szerepének tulajdoníthatók. Értelmezésükhöz a 9.21. ábra segítségével egy ion útját követjük a plazma kvázisemleges tartományától, a határrétegen át az elektródáig. Az ion a kvázisemleges tartományból a határrétegbe átlépve energiát kezd nyerni az elektromos tértől. Az ábrán látható módon az energia „lépcsőzetesen” növekszik, ugyanis az ion aktuális tartózkodási helyének környezetében a térerősség periodikusan változik (jelentős térerősség csak a határrétegben van, ami periodikusan felépül és eltűnik). Az energia hirtelen csökkenése töltéskicserélő ütközések bekövetkezését jelzi. Az ezek során létrejövő lassú (termikus energiájú) ionok pozíciója a következő gyorsítási időszakig alig változik és ez a jelenség „szinkronizálja” az újonnan keletkezett ionok mozgását, a spektrumokban látható karakterisztikus csúcsok kialakulását eredményezve (lásd 9.20. ábra).

A plazma alapú felületkezelési eljárásokhoz általában tartozik egy optimális ionenergia-spektrum, amely mellett a felületi folyamatok hatásfoka a legnagyobb. A felületkezelés sebességét emellett az ionok fluxusa is meghatározza. Míg az ionok energiaspektruma – mint láttuk – a gázkisülés működési paramétereivel bizonyos keretek között beállítható, ezek a paraméterek a fluxust is meghatározzák. Így ezen két jellemző *egymástól független* optimalizálása *egy* harmonikus feszültséggel gerjesztett gázkisülésben általában nem biztosítható. Ezt illusztrálja a 9.22. ábra, melyen a gázkisülésre kapcsolt RF feszültség (adott nyomás és elektródatávolság mellett) láthatóan mind az ionok fluxusára, mind pedig az átlagos energiájára hatással van [112].

Az energiaspektrum (vagy az átlagos ionenergia) és az ionfluxus egymástól független változtatására az egyszerű harmonikus gerjesztésnél összetettebb gerjesztő hullámformák adnak lehetőséget (pl. [113]):

$$\phi(t) = \sum_{k=1}^N \phi_k \cos(2\pi f_k t + \theta_k), \quad (9.41)$$

ahol ϕ_k , f_k és θ_k a k -adik komponens amplitúdója, frekvenciája és fázisa. A különböző frekvenciájú komponensek vagy külön RF generátorokkal állíthatók elő, vagy egy szélessávú erősítővel, ami egy programozható jelgenerátor kimenőjelét erősíti. A komponensek száma gyakorlati okok miatt mindkét esetben korlátozott. Az első esetben a külön előállított nagyfeszültségű RF jeleket úgy kell a plazmaforráshoz illeszteni, hogy a generátorok egymást ne befolyásolják

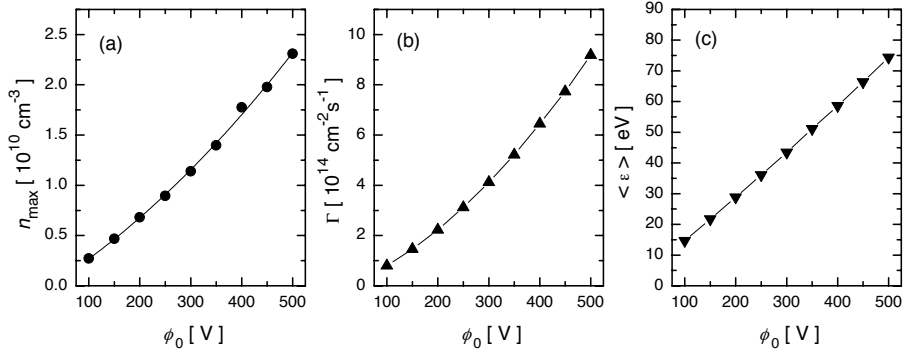


9.21. ábra. (a) RF gázkisülés $\phi(t)$ gerjesztő feszültsége, valamint (b) egy ion pozíciójának és energiájának időfüggése a kvázisemleges tartományból az elektródáig tartó útja során. $f = 13.56 \text{ MHz}$, $\phi_0 = 350 \text{ V}$, $p = 6.67 \text{ Pa}$.

– ez a technikai nehézségek és a költségek miatt a gyakorlatban a komponensek számát $N \leq 3$ -ra korlátozza. A szélessávú erősítés esetében a komponensek felső határfrekvenciája az erősítők tulajdonságai miatt korlátozott.

Kétkomponensű RF gerjesztést az 1990-es évek óta alkalmaznak az ionok jellemzőinek független szabályozására. Ez azon a felismerésen alapszik, hogy egy nagyobb ($f_1 \sim 10 - 100 \text{ MHz}$) RF frekvenciájú komponens hatékonyan növeli az elektronok energiáját a plazmában, míg a kisebb ($f_2 \sim 1 \text{ MHz}$) frekvenciájú komponens alapvetően meghatározza az ionok gyorsítását a határrétegekben. Így a magasabb, f_1 frekvenciájú komponens elvben csak a plazma sűrűségét (és ezáltal az ionok fluxusát), a kisebb, f_2 frekvenciájú komponens pedig csak az ionok átlagos energiáját befolyásolja. Ezekben a rendszerekben tehát $f_1 \gg f_2$, az ionok jellemzői a különböző frekvenciájú RF meghajtó jelek amplitúdóival befolyásolhatók. Az ilyen jellegű gerjesztéssel a 9.6.1. fejezetben foglalkozunk.

Az előző esettől (amikor két *lényegesen eltérő* frekvenciájú RF komponenssel vezéreljük a plazmát) jelentősen eltér a 2008-ban felfedezett alternatív lehetőség, amikor a gerjesztésre *egy alapharmonikust és annak felharmonikusait* használják, azaz $f_k = kf_1$ és fontos szerepet kapnak az egyes harmonikusok közötti θ_k fázisszögek [111]. Ezt a meghajtási módot először két RF komponenssel vizsgálták, $f_1 = 13.56 \text{ MHz}$ és $f_2 = 27.12 \text{ MHz}$ frekvenciákkal, a 9.6.2. fejezetben ezt az esetet mutatjuk be.



9.22. ábra. (a) A maximális ionsűrűség, (b) az elektródákra érő ionfluxus és (c) az elektródákra érő ionok átlagos energiája a gázkisülést gerjesztő ϕ_0 feszültség-amplitúdó függvényében [112]. $p = 10$ Pa argon, $f = 13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm. (Az IOP Publishing, Ltd., Copyright Clearance Center, Inc. által biztosított engedélyével reprodukálva az alábbi cikkből: Z. Donkó, J. Schulze, U. Czarnetzki, A. Derzsi, P. Hartmann, I. Korolov, E. Schuengel: Fundamental investigations of capacitive radio frequency plasmas: simulations and experiments, Plasma Physics and Controlled Fusion 54, 124003 (2012). <https://doi.org/10.1088/0741-3335/54/12/124003>.)

9.6.1. Kétfrekvenciás gerjesztés

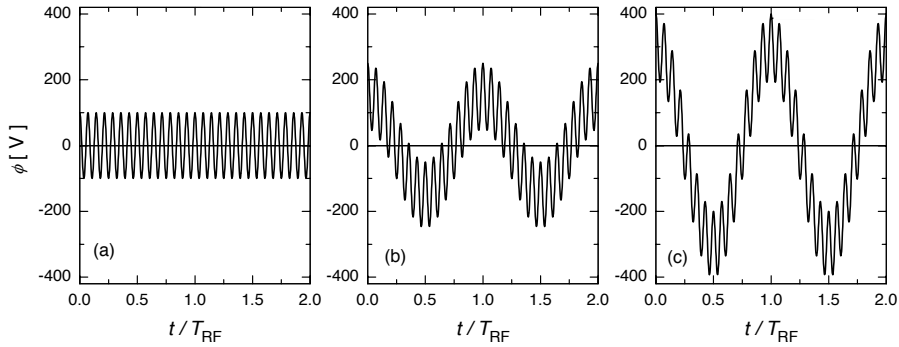
Itt, mint említettük, a plazmát két jelentősen eltérő frekvenciájú RF feszültség szuperponálásával hozzuk létre, azaz a gerjesztő feszültség hullámformája:

$$\phi(t) = \phi_1 \cos(2\pi f_1 t) + \phi_2 \cos(2\pi f_2 t) \quad (f_1 \gg f_2). \quad (9.42)$$

A 9.23. ábra példákat mutat a fenti összefüggésnek megfelelő hullámformákra, $f_1 = 27.12$ MHz és $f_2 = 1.937$ MHz esetre ($f_2 = f_1/14$), a nagyobb frekvenciájú jel állandó, $\phi_1 = 100$ V amplitúdója mellett, különböző ϕ_2 értékekre.

Az alábbiakban azt vizsgáljuk, hogy a két eltérő frekvenciájú RF komponens amplitúdójának változtatása miként befolyásolja az ionok jellemzőit. A 9.24. ábra az elektródákra érkező Ar^+ ionok (PIC/MCC szimulációkból meghatározott) energiaspektrumát szemlélteti $f_1 = 27.12$ MHz és $f_2 = 1.937$ MHz frekvenciák és 6.6 Pa gáznyomás mellett. A nagyobb frekvenciájú RF forrás feszültsége állandó, $\phi_1 = 200$ V. $\phi_2 = 0$ mellett a spektrumban megfigyelhető egy markáns csúcs a határrétegen eső átlagos feszültséghez tartozó energiánál; ezt azok az ionok „hozzák létre”, amik ütközés nélkül haladtak át a határrétegen. A 0–100 eV tartományban jól megfigyelhető az ütközések hatása. Növekvő ϕ_2 feszültséggel a spektrum szélesedik és a határréteg egyre inkább ütközéses jellegűvé válik.

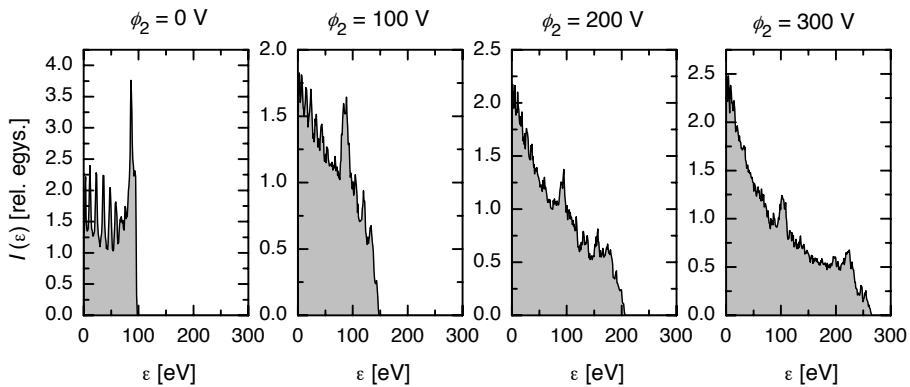
Összehasonlításképpen egy még inkább eltérő, $f_1 = 100$ MHz és $f_2 = 1$ MHz frekvenciákkal gerjesztett plazma esetét is bemutatjuk (9.25. ábra). A nagyobb frekvenciájú RF forrás feszültsége most is állandó, $\phi_1 = 60$ V. $\phi_2 = 0$ mellett a



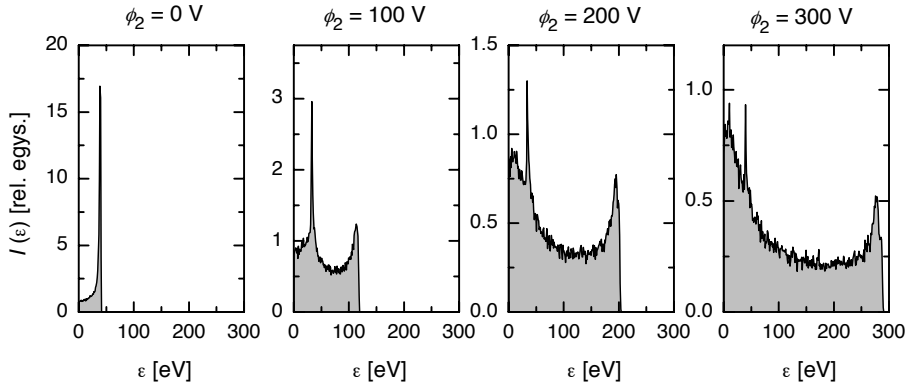
9.23. ábra. Kétfrekvenciás gerjesztés jellemző hullámformái, $f_1 = 27.12$ MHz és $f_2 = 1.937$ MHz esetre ($f_2 = f_1/14$), állandó $\phi_1 = 100$ V mellett: (a) $\phi_2 = 0$ V, (b) $\phi_2 = 150$ V, (c) $\phi_2 = 300$ V. $T_{\text{RF}} = 1/f_2$.

spektrumban egy domináns csúcs látható, ami a határréteg közel ütközésmentes voltára utal. Növekvő ϕ_2 feszültséggel a spektrum szélesedik és *bimodális* jelleget mutat, annak megfelelően, hogy az ionok áthaladási ideje (τ) kisebb mint az alacsonyabb frekvenciájú gerjesztő jel $1/f_2$ periódusideje. Ekkor ugyanis a határrétegen való áthaladás során felvett energia függ a határrétegen eső feszültség időfüggésétől, amit nagyrészt ϕ_2 határoz meg (u.i. $\phi_2 \gg \phi_1$).

Az alacsonyfrekvenciás gerjesztő feszültség ϕ_2 amplitúdójának emelésével tehát növelni lehet az ionok átlagos energiáját. Feltételezve, hogy a plazma előállításának hatékonyságát ϕ_2 értéke nem befolyásolja, azt várnánk, hogy ϕ_2 változtatásával az ionfluxus nem változik. A valóságban viszont a két folyamat



9.24. ábra. Az elektródákra érkező Ar^+ ionok energiaspektruma kétfrekvenciás gerjesztésű gázkisülésben, $f_1 = 27.12$ MHz és $f_2 = 1.937$ MHz és $\phi_1 = 200$ V mellett, ϕ_2 különböző értékeire. $p = 6.66$ Pa, $L = 2.5$ cm, $\gamma = 0.1$.



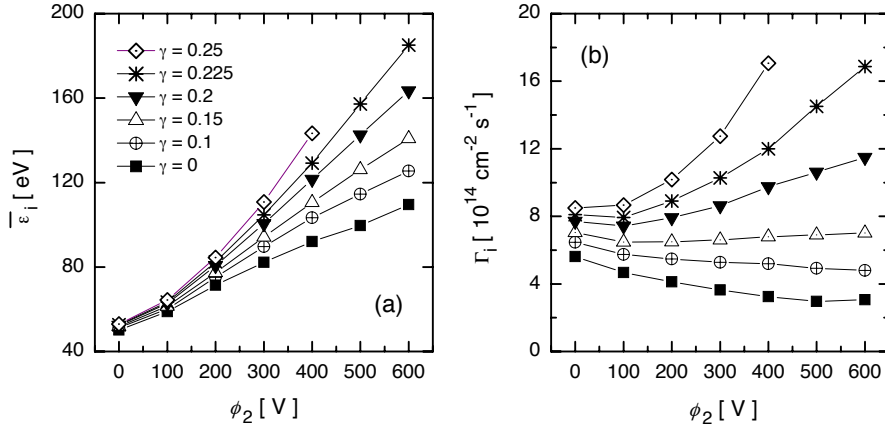
9.25. ábra. Az elektródákra érkező Ar^+ ionok energiaspektruma kétfrekvenciás gerjesztésű gázkisülésben, $f_1 = 100$ MHz és $f_2 = 1$ MHz és $\phi_1 = 60$ V mellett, ϕ_2 különböző értékeire [112]. $p = 3.33$ Pa, $L = 2$ cm, $\gamma = 0$. (Az IOP Publishing, Ltd., Copyright Clearance Center, Inc. által biztosított engedéllyel reprodukálva az alábbi cikkből: Z. Donkó, J. Schulze, U. Czarnetzki, A. Derzsi, P. Hartmann, I. Korolov, E. Schuengel: Fundamental investigations of capacitive radio frequency plasmas: simulations and experiments, Plasma Physics and Controlled Fusion 54, 124003 (2012). <https://doi.org/10.1088/0741-3335/54/12/124003>.)

közt *csatolás* van, aminek következtében általában a fluxus nem független ϕ_2 értékétől.

A 9.26. ábra ezt az effektust szemlélteti $f_1 = 27.12$ MHz és $f_2 = 1.937$ MHz esetre, állandó $\phi_1 = 200$ V és $p = 6.6$ Pa mellett, a γ elektronkiváltási együttható különböző értékeire [114]. Látható, hogy ϕ_2 növelésével az ionok átlagos energiája közel lineárisan növekszik, ugyanakkor a fluxus az elektronkiváltási együttható értékének függvényében különböző módon változik. Közel állandó fluxus csak $\gamma \cong 0.15$ érték mellett biztosítható, alacsonyabb γ értékek esetén Γ_i csökken ϕ_2 növelésével, nagyobb γ értékek mellett viszont növekszik.

A két feszültségkomponens együttes hatását a plazma dinamikájára (vagyis a plazma fűtése és az iongyorsítás közötti csatolást) a 9.27. ábrán követhetjük nyomon. Az ábra (a) része a $\phi_1 = 200$ V, $\phi_2 = 0$ V esetet mutatja, $\gamma = 0$ esetre. Jól megfigyelhetők a határreteg kiterjedését követő ionizációs folyamatok. $\phi_1 = 200$ V, $\phi_2 = 0$ V esetben (9.27.(b) ábra) a határreteg hossza összetett módon változik, ugyanis ezt mindkét feszültségkomponens befolyásolja. A határreteg hosszának nagyfrekvenciás modulációja az elektródák környezetében nagyobb, ezektől távolodva lecsökken a nagyobb ionsűrűség miatt. A határreteg (s) hosszának $f_1 = 27.12$ MHz-es modulációja szabja meg a kiterjedés sebességét és így az elektronok energiafelvételének nagyságát. Ennek megfelelően intenzív (és az egyfrekvenciás esethez képest erősebb) ionizáció s nagyobb modulációjának tartományában van, az ionizáció erőssége az elektródáktól távolabb lényegesen lecsökken. A két különböző frekvenciájú meghajtó feszültség

ezen a kölcsönhatáson keresztül végül korlátozza az ionok jellemzőinek független szabályozását. Az elektronkiváltási együttható növekvő értékével az elektronok energiafelvételi módja változik, ennek következtében a $\Gamma_i(\phi_2)$ függés (9.26.(b) ábra) alakja is összetett viselkedést mutat.



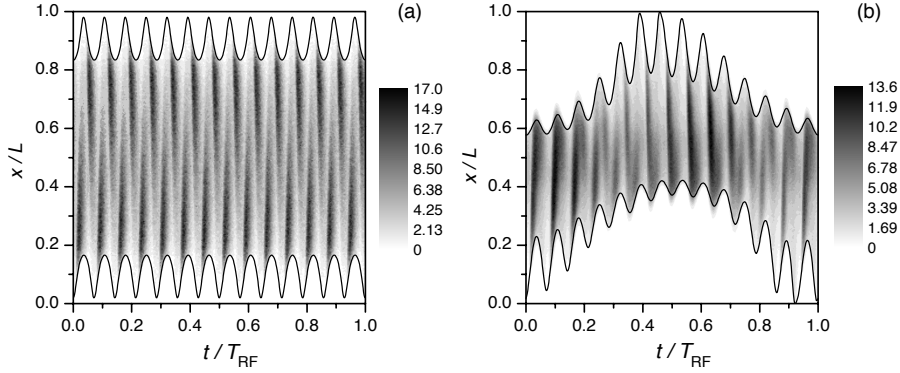
9.26. ábra. Az ionok (a) átlagos energiája és (b) fluxusa $f_1 = 27.12$ MHz és $f_2 = 1.937$ MHz kétfrekvenciás gerjesztés esetén, ϕ_2 függvényében, a γ elektronkiváltási együttható különböző értékei mellett [114]. $\phi_1 = 200$ V (állandó), $p = 6.66$ Pa. (Az IOP Publishing, Ltd., Copyright Clearance Center, Inc. engedélyével reprodukálva az alábbi cikkből: Z. Donkó, J. Schulze, U. Czarnetzki, A. Derzi, P. Hartmann, I. Korolov, E. Schuengel: Fundamental investigations of capacitive radio frequency plasmas: simulations and experiments, Plasma Physics and Controlled Fusion 54, 124003 (2012). <https://doi.org/10.1088/0741-3335/54/12/124003>.)

9.6.2. Elektromos aszimmetria effektus

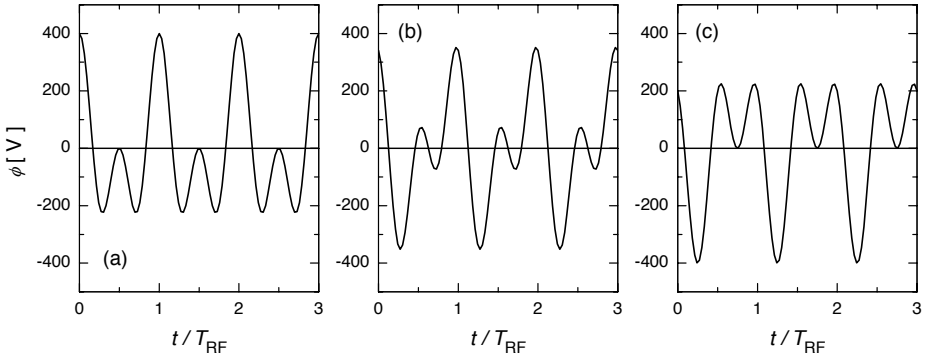
A két egymást követő harmonikus RF feszültséggel meghajtott plazmák tulajdonságai az „Elektromos aszimmetria effektus” (EAE) [111] alapján írhatók le. Mint az RF gázkisülések modelljénél láttuk, bármely különböző abszolút értékű pozitív és negatív szélsőértékekkel rendelkező meghajtó feszültség a plazma aszimmetriájához vezet. Ez a jelenség, mint látni fogjuk, hatékonyan alkalmazható az ionok jellemzőinek független szabályozására, a meghajtó feszültség hullámformájának változtatásával. A 9.28. ábra

$$\phi(t) = \phi_{12}[\cos(2\pi f_1 t + \theta_1) + \cos(4\pi f_1 t)] \quad (9.43)$$

alakú hullámformákat mutat a θ_1 fázisszög különböző értékeire. Itt tehát $\theta_2 = 0$, $f_2 = 2f_1$ és egyenlő amplitúdójú harmonikusokat tekintünk, $\phi_{12} = \phi_1 = \phi_2$.



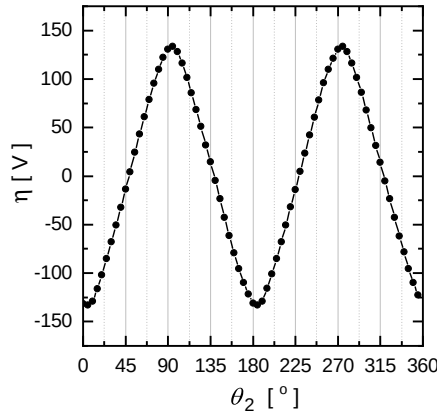
9.27. ábra. Az ionizáció tér- és időbeli eloszlása. (a) $\phi_1 = 200$ V, $\phi_2 = 0$ V, (b) $\phi_1 = 200$ V, $\phi_2 = 500$ V. $f_1 = 27.12$ MHz és $f_2 = 1.937$ MHz, $\gamma = 0$. A folytonos vonalak a határrétegek szélét jelzik. Az ionizációs forrásfüggvény (színskála) egysége: $10^{20} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$. (Az IOP Publishing, Ltd., Copyright Clearance Center, Inc. engedélyével reprodukálva az alábbi cikkből: Z. Donkó, J. Schulze, U. Czarnetzki, A. Derzsi, P. Hartmann, I. Korolov, E. Schuengel: Fundamental investigations of capacitive radio frequency plasmas: simulations and experiments, Plasma Physics and Controlled Fusion 54, 124003 (2012). <https://doi.org/10.1088/0741-3335/54/12/124003>.)



9.28. ábra. Az elektromos aszimmetria effektus létrehozásához használt (két azonos amplitúdójú harmonikus összegeként előálló) hullámformák, a θ_1 fázisszög (a) 0° , (b) 45° és (c) 90° értékeire. $\phi_{12} = 200$ V. $T_{\text{RF}} = 1/f_1$.

A gázkisülés PIC/MCC szimulációja az elméleti várakozásokkal összhangban a hullámformától (azaz a θ_1 fázisszögtől) függően különböző mértékű DC előfeszültség megjelenését mutatja (lásd 9.29. ábra, $p = 5$ Pa, $f_1 = 13.56$ MHz, $\phi_{12} = 200$ V, $L = 2.5$ cm esetre). A fázis $\theta_1 = 0^\circ \rightarrow 90^\circ$ eltolása megváltoztatja a DC előfeszültség előjelét. A maximálisan elérhető előfeszültség az adott

működési paraméterek mellett ($\theta_1 \cong 0^\circ$ esetén) $\eta = -131$ V. (A DC előfeszültség a szimulációkban vagy (i) iteratív módon határozható meg, egy megfelelő integrálási időre mérve az elektronok és az ionok fluxusát az elektródákhoz és η feltételezett értékét ennek megfelelően változtatva úgy, hogy a fluxusok időátlagban kiegyenlítődjenek, vagy (ii) a leválasztó kondenzátort tartalmazó külső áramkör figyelembevételével.)



9.29. ábra. Az elektromos aszimmetria effektus következtében fellépő DC előfeszültség a két harmonikus közötti θ_1 fázisszög függvényben, $p = 5$ Pa nyomású Ar RF gázkisülésben, $f_1 = 13.56$ MHz és $\phi_{12} = 200$ V mellett. ($L = 2.5$ cm.)

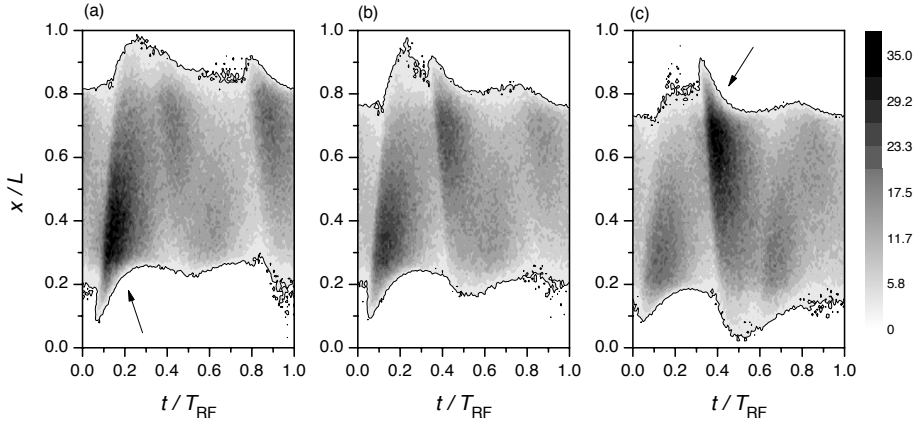
A 9.40. összefüggés szerint a DC előfeszültség kialakulásához egyrészt a gerjesztő hullámforma aszimmetriája ($|\phi_{s,\max}| \neq |\phi_{s,\min}|$), másrészt az ezáltal létrehozott (és a 9.39. kifejezéssel megadott ϵ paraméterrel jellemzett) aszimmetria járul hozzá. Az itt vizsgált gázkisülésre a szimulációkból a szimmetria paraméter értéke $\theta_1 = 0^\circ$ esetén $\epsilon = 0.77$. Ezt, valamint a $\phi_{s,\max} = 400$ V és $\phi_{s,\min} = -200$ V (lásd 9.28.(a) ábra) értékeket a 9.40. egyenletbe helyettesítve:

$$\eta = -\frac{\phi_{s,\max} + \epsilon\phi_{s,\min}}{1 + \epsilon} = -\frac{400 \text{ V} - 0.77 \cdot 200 \text{ V}}{1.77} = -139 \text{ V}$$

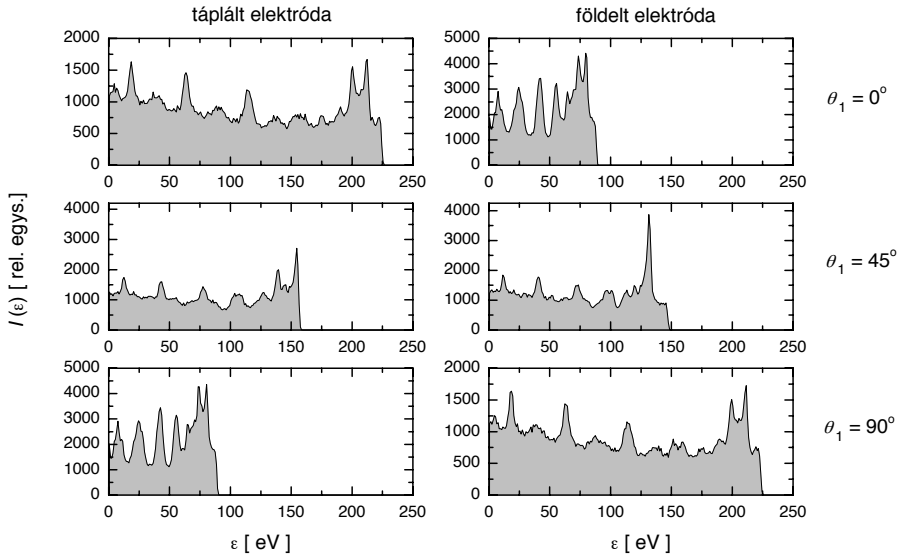
adódik, ami jól közelíti a szimulációból kapott η értéket. A gerjesztő hullámforma $|\phi_{s,\max}| \neq |\phi_{s,\min}|$ aszimmetriája önmagában (azaz $\epsilon = 1$ értéket feltételezve) $\eta = -100$ V értéket eredményezne, a plazma aszimmetriája ($\epsilon \neq 1$) ezt tovább növeli.

A gázkisülés dinamikájának aszimmetriája a gerjesztési ütközéses folyamatok (a 9.30. ábrán szemléltetett) tér- és időbeli eloszlásán is jól követhető. A legintenzívebb gerjesztés a legnagyobb aszimmetriájú hullámformák esetén látható, amikor mindkét harmonikus komponens egyaránt hozzájárul a határréteg kialakításához (ez pl. $\theta_1 = 0^\circ$ esetén a táplált elektródánál $t/T_{\text{RF}} \approx 0.15$ környezetben következik be). A fázis $\theta_1 = 0^\circ \rightarrow 90^\circ$ megváltoztatása az alapharmonikus

negyed periódusával való időeltolást és a kisülés $x/L = 0.5$ szimmetriasíkjára történő tükrözést eredményez.

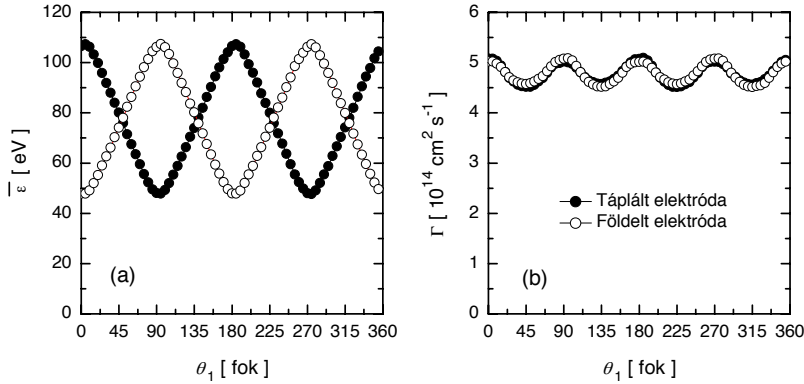


9.30. ábra. Az elektronütközéses gerjesztési folyamatok tér- és időbeli eloszlása különböző θ_1 fázisszögek esetén: (a) 0° , (b) 45° és (c) 90° . A nyilak a legintenzívebb gerjesztés helyét jelölik, ahol a két harmonikus egymást erősíti a határréteg kialakításában. $p = 5$ Pa (Ar), $f_1 = 13.56$ MHz, $f_2 = 27.12$ MHz, $\phi_{12} = 200$ V. (A gerjesztési forrásfüggvények egysége: $10^{20} \text{ m}^{-3}\text{s}^{-1}$.)



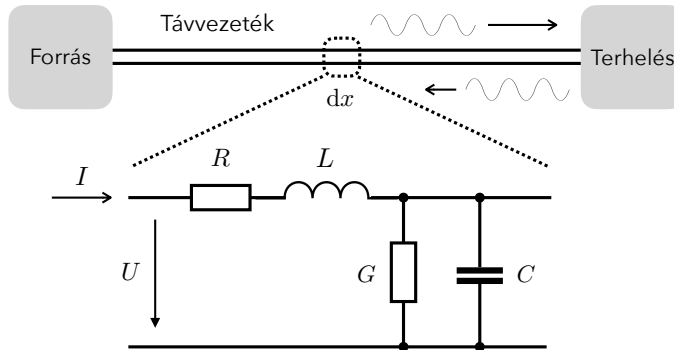
9.31. ábra. A gázkisülés táplált és földelt elektródáira érkező ionok energiaspektuma a θ_1 fázisszög különböző értékeire. (Ar 5 Pa, $f_1 = 13.56$ MHz, $f_2 = 27.12$ MHz, $\phi_{12} = 200$ V.)

A plazmán fellépő DC előfeszültség következtében a gázkisülés két elektródájára jutó ionok energiaspektruma különböző lesz. A 9.31. ábra az Ar^+ ionok spektrumát mutatja a táplált és földelt elektródáknál, a θ_1 fázisszög 0° , 45° és 90° értékeire. A vizsgált esetben az ionok maximális energiája hármas faktoral változtatható. Az ionok átlagos energiája eközben kettes faktossal változik, amint az a 9.32.(a) ábrán látható, miközben az ionfluxus értéke csak kis mértékben változik (lásd 9.32.(b) ábra).



9.32. ábra. A gázkisülés táplált és földelt elektródáira érkező ionok (a) átlagos energiájának és (b) fluxusának függése a θ_1 fázisszögtől. (Ar 5 Pa, $f_1 = 13.56$ MHz, $f_2 = 27.12$ MHz, $\phi_{12} = 200$ V.)

9.7. Impedanciaillesztés



9.33. ábra. Nagyfrekvenciás tápvonal modellje.

A nagyfrekvenciás *tápvonalakon*, vagy *távvezetéseken* a jelek terjedését egy olyan modell alapján vizsgálhatjuk, ami a vezetéket olyan elemi hosszúságú

részek sorozataként kezeli, amelyek mind rezisztív, mind reaktív tagokat tartalmaznak, amint ez a 9.33. ábrán látható. Itt két párhuzamosan futó vezetékét tételezünk fel, a tápvonalak másik gyakori kialakítását a koaxiális kábelek képviselik – ezekre a következő gondolatmenet ugyancsak alkalmazható.

A 9.33. ábrán R a vezetékdarab véges ellenállása, L annak induktivitása, C a két vezetékdarab közötti kapacitív csatolást reprezentálja, míg G a két vezeték nem tökéletes szigeteléséből adódó véges vezetőképesség. Ezen áramköri elemek figyelembevételével az alábbi differenciálegyenleteket írhatjuk fel a távvezeték adott pontjában fellépő feszültség és az ott folyó áram megváltozására:

$$\frac{\partial U(x)}{\partial x} = -(R + i\omega L) I(x), \quad (9.44)$$

$$\frac{\partial I(x)}{\partial x} = -(G + i\omega C) U(x). \quad (9.45)$$

Ezekből következnek az elektromos mennyiségre vonatkozó ún. „távíró egyenletek”:¹¹

$$\frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} = \gamma^2 U(x), \quad (9.46)$$

illetve

$$\frac{\partial^2 I(x)}{\partial x^2} = \gamma^2 I(x), \quad (9.47)$$

ahol $\gamma = \sqrt{(R + i\omega L)(G + i\omega C)}$ a terjedési együttható. A fenti egyenletek alakja megegyezik a korábban tárgyalt *hullámegyenletek* alakjával – ez azt mutatja, hogy a távvezetéken a feszültség és az áram hullámként „terjed”.

A hullámegyenletek általános megoldásai az alábbi függvények:

$$V(x) = V_+ e^{-\gamma x} + V_- e^{+\gamma x}, \quad (9.48)$$

$$I(x) = \frac{1}{Z_0} [V_+ e^{-\gamma x} + V_- e^{+\gamma x}], \quad (9.49)$$

ahol

$$Z_0 = \sqrt{\frac{R + i\omega L}{G + i\omega C}} \quad (9.50)$$

a *hullámimpedancia*, a $V_{\pm}$ együtthatók pedig a peremfeltételekből határozhatók meg. Mivel γ általában komplex mennyiség, ezért a megoldások exponenciálisan lecsengő harmonikus függvények szuperpozíciói.

A megoldások lényegesen egyszerűsödnek abban a praktikus szempontból fontos esetben, amikor a távvezeték veszteségmentes, azaz R és G elhanyagolhatóak. Ekkor $\gamma = \sqrt{-\omega^2 LC}$ tisztán képzetes és a megoldások csillapítatlan hullámok lesznek. A hullámimpedancia a $Z_0 = \sqrt{L/C}$ alakra redukálódik.

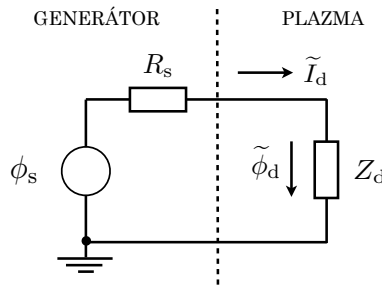
A hullámok a távvezetéken mindkét irányban tudnak haladni: a forrásból a terhelés felé haladó hullám a távvezeték végén a terhelés impedanciájától függő arányban verődik vissza. A reflexió nullává tehető amennyiben a terhelés

¹¹Ez az elnevezés abban gyökerezik, hogy az itt tárgyalt jelenségeket hosszú távíró kábelekkel kapcsolatosan kezdték tanulmányozni.

impedanciája megegyezik a hullámimpedanciával. A fentieknek fontos szerepe van a rádiófrekvenciás plazmák táplálásánál.

Mint korábban láttuk, az RF plazmák impedanciája komplex értékű. Példaként tekintsük a 9.5.3. fejezetben tárgyalt, $f = 13.56$ MHz, $\phi_0 = 150$ V, $L = 2.5$ cm, $p = 100$ Pa paraméterek mellett működő argon gázkisülést! Tegyük fel, hogy az elektródáinak felülete $A = 750$ cm²; ekkor a gázkisülés komplex impedanciájára $Z_d = R_d + iX_d = (10 - i71) \Omega$ adódik, melynek valós része ($R_d = 10 \Omega$) a plazma ellenállásából származik, képzetes (reaktív) részének negatív értéke ($X_d = -71 \Omega$) pedig a plazma kapacitív viselkedésére mutat.

A plazmaforrások táplálásához használt RF generátorok kimenő impedanciája általában tisztán rezisztív és szabványos értéke $R_s = 50 \Omega$. A tápegység és a gázkisülés impedanciáinak eltérése miatt foglalkozni kell a teljesítménybecsatlás hatékonyságának kérdésével – ehhez tekintsük a 9.34. ábra szerinti egyszerű áramkört!



9.34. ábra. RF generátorból és Z_d komplex impedanciájú terhelésből álló áramkör. R_s a generátor belső ellenállása.

A ϕ_s feszültségamplitúdójú forrásra (generátorra) Z_d impedanciájú terhelést kapcsolunk. Az utóbbira eső feszültség komplex amplitúdója:

$$\tilde{\phi}_d = \phi_s \frac{Z_d}{R_s + Z_d}, \quad (9.51)$$

míg az áramkörben folyó rádiófrekvenciás áram komplex amplitúdója:

$$\tilde{I}_d = \frac{\tilde{\phi}_d}{Z_d} = \frac{\phi_s}{R_s + Z_d}. \quad (9.52)$$

A 2.2. fejezetben leírtak alapján a komplex teljesítmény:

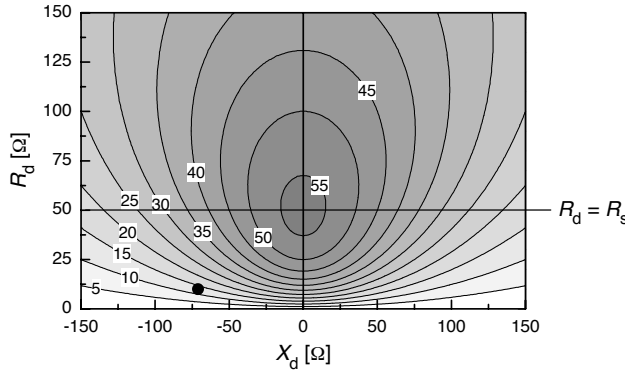
$$\tilde{S} = \tilde{\phi}_{d,\text{eff}} \tilde{I}_{d,\text{eff}}^*, \quad (9.53)$$

ahol $\tilde{\phi}_{d,\text{eff}} = \tilde{\phi}_d / \sqrt{2}$ és $\tilde{I}_{d,\text{eff}}^* = \tilde{I}_d^* / \sqrt{2}$ a feszültség és az áram *effektív* értékei, ill. $\tilde{I}_d^*$ az áram komplex konjugáltja.

Emlékezzünk (2.2. fejezet), hogy a felvett teljesítmény (P) a komplex teljesítmény valós része. A fentiekből, $Z_d = R_d + iX_d$ felhasználásával:

$$\begin{aligned} P &= \frac{1}{2} \operatorname{Re} [\tilde{\phi}_d \tilde{I}_d^*] = \frac{1}{2} \phi_s^2 \operatorname{Re} \left[\frac{Z_d}{R_s + Z_d} \left(\frac{1}{R_s + Z_d} \right)^* \right] \\ &= \frac{1}{2} \phi_s^2 \frac{R_d}{(R_s + R_d)^2 + X_d^2}. \end{aligned} \quad (9.54)$$

A 9.35. ábra a fenti összefüggésből adódó teljesítményt mutatja a terhelés komplex impedanciája függvényében. Látható, hogy a maximális teljesítmény abban az esetben táplálható be a fogyasztóba, ha $X_d = 0 \, \Omega$ és $R_d = R_s$;¹² ezen feltételek teljesülése esetén $P = \phi_s^2 / 8R_s$. Példaként $\phi_s = 150 \, \text{V}$ forrásfeszültséget és (a generátorok esetében szokásos) $R_s = 50 \, \Omega$ belső ellenállást feltételezve, $P \cong 56 \, \text{W}$ teljesítmény csatolható be egy tisztán rezisztív terhelésbe. A fent példaként említett RF gázkisülésre kapott $Z_d = (10 - i71) \, \Omega$ impedancia értékkel számolva viszont a teljesítményre mindössze $P \cong 13 \, \text{W}$ adódik! A plazma ilyen körülmények közötti gerjesztése a rossz hatásfok mellett a generátor károsodásához is vezethet.



9.35. ábra. A plazma által felvett teljesítmény a 9.54. összefüggés alapján, $\phi_s = 150 \, \text{V}$ forrásfeszültség mellett, a Z_d (terhelő) komplex impedancia komponenseinek függvényében. Az optimális teljesítménybecsatolás $R_d = R_s$ és $X_d = 0 \, \Omega$ esetén áll elő. Ugyanakkor a példaként tekintett $Z_d = (10 - i71) \, \Omega$ impedanciájú terhelés esetén (melyet az ábrán a fekete kör jelöl) a teljesítmény az optimálistól messze elmarad.

A fenti jelenség (azaz a rossz hatásfokú teljesítménybecsatolás) úgy is értelmezhető, hogy a generátorból kiinduló ϕ_+ amplitúdójú hullám a terhelésnél részben visszaverődik, egy ϕ_- amplitúdójú hullámként. A visszavert hullám amplitúdója a tápvonal Z_0 hullámimpedanciája és a fogyasztó $Z_d = R_d + iX_d$

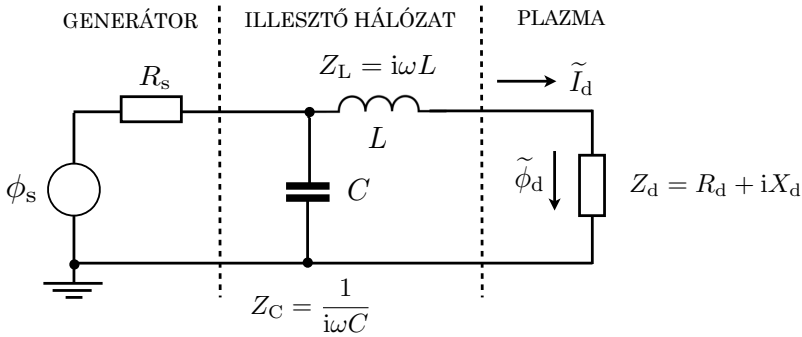
¹²Ez a 9.54. összefüggés utolsó tagjának analízisével is belátható; értékét az $X_d = 0 \, \Omega$ választás nyilvánvalóan maximalizálja, ekkor a tag szélsőértékét (maximumát) az R_d szerinti deriválásából adódóan $R_d = R_s$ esetén veszi fel.

impedanciája közötti eltérés függvénye, a *komplex reflexió tényezőt* az alábbi kifejezés adja meg:

$$\Gamma = \frac{\phi_-}{\phi_+} = \frac{Z_d - Z_0}{Z_d + Z_0}. \quad (9.55)$$

A plazmaforrások táplálásánál (hasonlóan más rádiófrekvenciás alkalmazásokhoz, pl. antennák táplálásához) a cél a minimális reflexió elérése, ami csak a $Z_d = Z_0$ egybeesés esetén teljesül. A gyakorlatban a tápláláshoz használt kábelek Z_0 hullámimpedanciáját a generátor belső ellenállásával egyenlőnek választják; $Z_0 = R_s$.

A becsatolt teljesítmény optimalizálására a megoldást a generátor és a plazmaforrás közé iktatott *impedanciaillesztő egység* adja. Ez az egység, mint látni fogjuk, gondoskodik arról, hogy a generátor a belső ellenállásával megegyező terhelést „lásson” a kimenetén. Az illesztés lehetővé teszi a rádiófrekvenciás teljesítmény optimális betáplálását a plazmaforrásba és egyszerűen minimálálja a plazmaforrásról a generátorba visszaverődő hullámot.¹³



9.36. ábra. Impedanciaillesztés vázlata „L-típusú” áramkörrel.

A következőkben a legegyszerűbb, „L-típusú” illesztőáramkörrel foglalkozunk, ami egy kondenzátorból és egy tekercsből áll, a 9.36. ábrán vázolt módon.¹⁴ Mivel ezek a reaktív elemek (legalábbis elméletileg) veszteségmentesek, rajtuk teljesítmény nem nyelődik el. Impedanciájuk tisztán képzetes, ω körfrekvencia mellett $Z_C = 1/i\omega C$ és $Z_L = i\omega L$.

A generátor által „érzékel” impedancia az L-tag és a plazma impedanciái-

¹³Itt elhanyagoljuk az egyes egységeket összekötő kábelek jelenlétét. Mivel a generátor belső ellenállását és a vezeték hullámimpedanciáját illeszteni lehet ($Z_0 = R_s$), ezért csak az illesztő hálózat és plazmaforrás közötti vezeték okoz további komplikációt az itt tekintett modellhez képest. Ennek az összekötő vezetéknek a hosszát a gyakorlatban minimálisra választják (az illesztő áramkör közvetlenül a plazmaforrás táplált elektródájánál helyezkedik el).

¹⁴A generátor és a plazmaforrás között – esetenként az illesztő hálózat részeként – még egy elválasztó kondenzátor is használatos, ami megakadályozza, hogy az áramkörben egyenáramú komponens folyjon. Ennek impedanciája az alkalmazott frekvencián viszont általában olyan kicsi, hogy nem befolyásolja az illesztés folyamatát, így a jelen analízisben figyelmen kívül hagyható.

ból:

$$Z = \frac{Z_C(Z_L + Z_d)}{Z_C + Z_L + Z_d} = \frac{\frac{1}{i\omega C}(i\omega L + R_d + iX_d)}{\frac{1}{i\omega C} + i\omega L + R_d + iX_d}, \quad (9.56)$$

amiből $Z = R_s$ megkövetelésével

$$i\omega L + R_d + iX_d = [1 - \omega^2 LC + i\omega R_d C - \omega X_d C] R_s \quad (9.57)$$

adódik. A valós és képzetes részek szétválasztásával az alábbi két egyenletre jutunk:

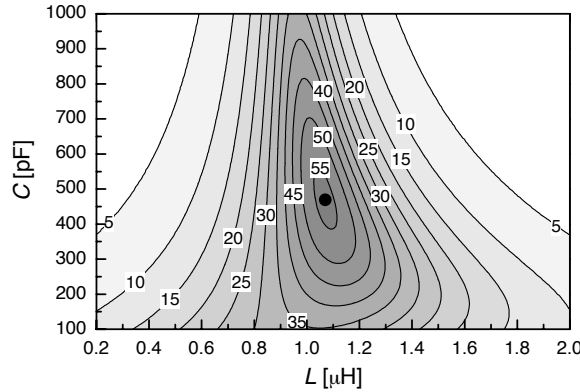
$$\omega L + X_d = \omega R_d R_s C, \quad (9.58)$$

$$R_d = [1 - \omega^2 LC - \omega X_d C] R_s, \quad (9.59)$$

melyekből az illesztőhálózat elemei meghatározhatók:

$$C = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{R_s - R_d}{R_s^2 R_d}}, \quad (9.60)$$

$$L = \frac{1}{\omega} [\sqrt{R_d(R_s - R_d)} - X_d]. \quad (9.61)$$



9.37. ábra. A generátorból kicsatolható teljesítmény az „L-típusú” illesztőhálózat elemei értékeinek függvényében, $Z_d = R_d + iX_d = (10 - i71) \Omega$ impedanciájú plazmaforrás és $R_s = 50 \Omega$ belső ellenállású generátor esetére ($f = 13.56$ MHz). A fekete kör az optimális csatolást jelöli.

Példaként, a $Z_d = R_d + iX_d = (10 - i71) \Omega$ komplex impedanciájú plazmaforrás esetére egy $R_s = 50 \Omega$ belső ellenállású generátorból kivethető teljesítményt a 9.37. ábra mutatja az illesztőhálózat elemei értékeinek függvényében. Az optimális illesztéshez a 9.60. és a 9.61. összefüggésekből az illesztőhálózat elemeire, $f = 13.56$ MHz működési frekvencia esetére ($\omega = 2\pi f$) $C = 469$ pF és $L = 1.07 \mu\text{H}$ adódik.

Megmutatható, hogy a generátor és az illesztőegység impedanciája „együtt” a plazma impedanciájának komplex konjugáltja, vagyis miközben a generátor egy R_s értékű terhelést „lát” a kimenetén, a plazma „úgy látja”, mintha egy $Z_d^* = R_d - iX_d$ impedanciájú forrás táplálná. Mivel az *optimális illesztéshez tartozó C és L értékek a plazma impedanciáján keresztül függenek annak működési paramétereitől*, ezért az illesztő áramkörökben változtatható elemeket kell használni. (A gyakorlatban általában csak a kondenzátor változtatható, míg a tekercs fix értékű.) Az ismertetett L-áramkörnél rugalmasabb megoldást biztosítanak a három reaktív elemet tartalmazó illesztő áramkörök (pl. II áramkör).

Az érdekesség kedvéért bemutatunk egy, a rádiófrekvenciás és mikrohullámú technikában kiterjedten alkalmazott grafikus módszert, mely többek között az impedanciaillesztés szemléltetésére is alkalmazható.

K. 12: A Smith-diagram

A módszer az ú.n. *Smith-diagramra* épül, amely a 9.55. kifejezéssel definiált $\Gamma = \Gamma_r + i \Gamma_i$ reflexiós tényező értékét mutatja a komplex síkon. Bevezetve a $z = Z_d/Z_0 = r_d + ix_d$ normalizálást (ahol r_d és x_d a terhelés (gázkisülés) normalizált ellenállása és reaktanciája),

$$\Gamma = \Gamma_r + i \Gamma_i = \frac{Z_d - Z_0}{Z_d + Z_0} = \frac{z - 1}{z + 1} = \frac{r_d + ix_d - 1}{r_d + ix_d + 1} \quad (9.62)$$

közvetlen kapcsolatot ad meg a reflexiós tényező és a terhelés normalizált impedanciája között. A Smith-diagram előállításához, amit a 9.38. ábra szemléltet, a fenti összefüggésből válasszuk szét a valós és képzetes részeket:

$$\Gamma_r = \frac{r_d^2 - 1 + x_d^2}{(r_d + 1)^2 + x_d^2}, \quad (9.63)$$

$$\Gamma_i = \frac{2x_d}{(r_d + 1)^2 + x_d^2}. \quad (9.64)$$

A továbbiakban elhagyjuk az impedancia komponenseinek d indexét. A 9.63. egyenletből x^2 -et kifejezve:

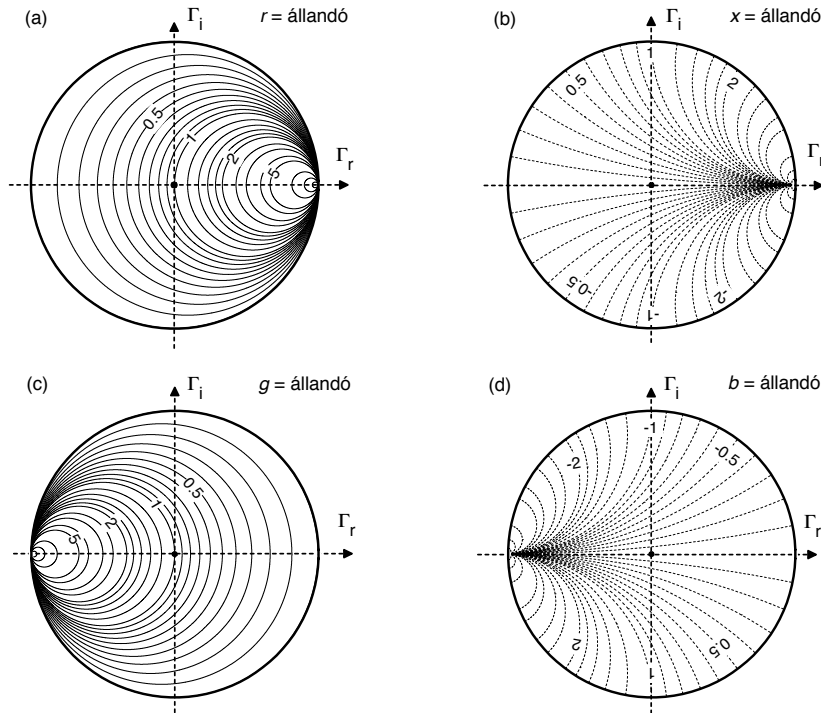
$$x^2 = \frac{\Gamma_r(r + 1)^2 + 1 - r^2}{1 - \Gamma_r}. \quad (9.65)$$

Emeljük négyzetre a 9.64. egyenletet és ebbe helyettesítsük be x^2 -nek a 9.65. egyenletben kapott értékét. Egyszerű, de hosszadalmas számolás után ebből az alábbi összefüggéshez jutunk:

$$\left(\Gamma_r - \frac{r}{r + 1}\right)^2 + \Gamma_i^2 = \left(\frac{1}{r + 1}\right)^2, \quad (9.66)$$

ami láthatóan egy olyan kör egyenlete a (Γ_r, Γ_i) síkon, melynek sugara $1/(r + 1)$ és középpontja $(r/(r + 1), 0)$.

A 9.38.(a) ábra néhány konstans r értékekhez tartozó kört szemléltet. Példaként, az $r = 1$ értékhez tartozó kör középpontja $(0.5, 0)$ és sugara 0.5 . Ez a kör tartalmazza a $(0, 0)$ pontot, ahol a reflexiós tényező értéke nulla, vagyis az impedanciaillesztés tökéletes. A rövidzár ($r = 0$) egységnyi sugarú körnek felel meg, melynek középpontja $(0, 0)$. A szakadás ($r \rightarrow \infty$) határesetében a kör sugara nullához tart, középpontja pedig az $\Gamma_r + i\Gamma_i = (1, 0)$ ponthoz. Mivel itt a reflexió egységnyi, a beeső hullám teljes amplitúdóval visszaverődik.



9.38. ábra. A $z = r + ix$ impedancia komponenseinek (a,b), illetve az $y = g + ib$ admittancia komponenseinek (c,d) állandó értékeihez tartozó körök / körívek a komplex reflexiós tényezőt ábrázoló síkon.

A Smith-diagram előállításának következő lépéseként kifejezzük a 9.64. egyenletből r értékét:

$$r = \frac{-\Gamma_i \pm \sqrt{-\Gamma_i x (\Gamma_i x - 2)}}{\Gamma_i}, \quad (9.67)$$

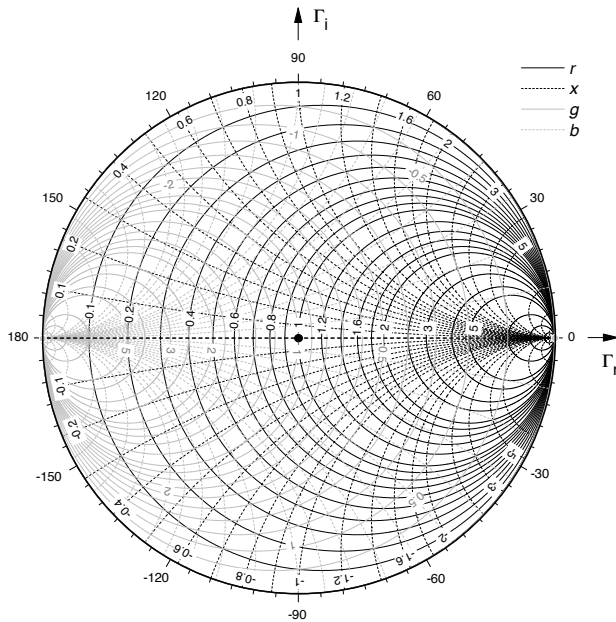
majd ezt a 9.63. egyenletbe helyettesítjük. Ebből (az elemi számolás rész-

leteit ismét mellőzve) a

$$(\Gamma_r - 1)^2 + \left(\Gamma_i - \frac{1}{x}\right)^2 = \frac{1}{x^2} \quad (9.68)$$

egyenlethez jutunk, ami a (Γ_r, Γ_i) koordináta-rendszerben $1/x$ sugarú körök egyenlete, $(1, 1/x)$ középponttal. Mivel x mind pozitív, mind negatív értékeket felvehet (az induktív, illetve kapacitív esetnek megfelelően) ezért eredményként két körsereget kapunk, melyeknek azonban csak a $|\Gamma| \leq 1$ ívei tartoznak a diagramhoz. A pozitív értékekhez tartozó körök a felső félsíkon ($\Gamma_i > 0$) helyezkednek el, míg negatív x az alsó félsíknak ($\Gamma_i < 0$) felel meg, a 9.38.(b) ábrán látható módon.

A fenti módon megrajzolható két görbesereg alkotja az (impedanciára vonatkozó) Smith-diagramot. A diagram csak a $|\Gamma| \leq 1$ tartományt tartalmazza, mely lefedi a pozitív ellenállás (r) értékeket.



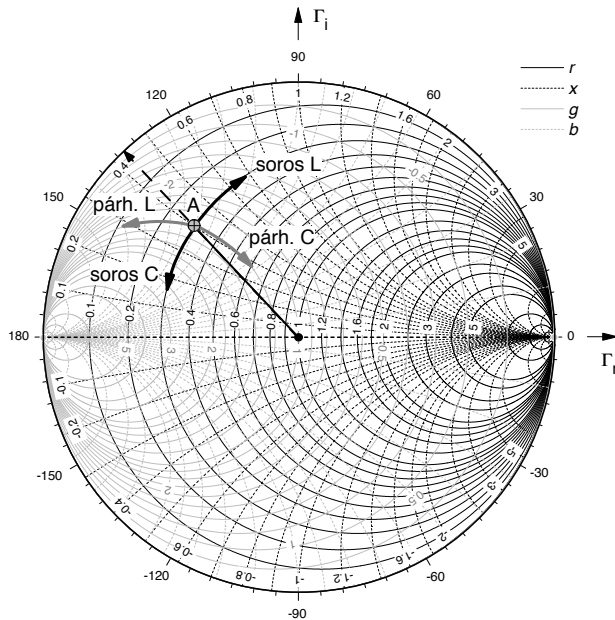
9.39. ábra. Az állandó r , x , g és b értékekhez tartozó körök / körívek superpozíciójával előálló Smith-diagram. A fekete vonalak az impedanciához tartozó görbék, míg a szürke vonalak az admittanciához kapcsolódóak.

Az illesztőhálózatok méretezéséhez szükség van még az $Y = 1/Z$ admit-

tanciára vonatkozó hasonló konstrukcióra is. Megmutatható, hogy

$$\Gamma = \frac{z-1}{z+1} = \frac{1/y-1}{1/y+1} = \frac{1-y}{1+y}, \quad (9.69)$$

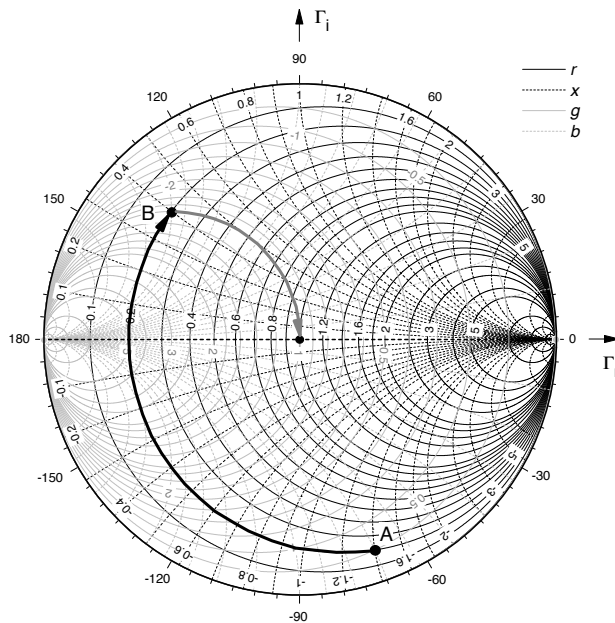
ahol $y = Y/Y_0 = g + ib$; itt g a *vezetőképesség* és b a *szuszeptancia*. Az állandó g és b értékekhez tartozó körök, ill. körívek, amint azt a 9.38.(c) és (d) ábrák szemléltetik, a konstans r és x értékekhez tartozó körök-höz, ill. körívekhez hasonlóak, csak 180° -kal elforgatva jelennek meg a komplex Γ síkon. A konstans r , x , g és b értékekhez tartozó görbék szuperpozíciójával áll elő a 9.39. ábrán látható „komplett” Smith-diagram.



9.40. ábra. Adott $z = r_A$ redukált impedanciájú terheléshez („A” pont) tartozó komplex reflexiós tényező, illetve az egyes további áramköri elemek hatása a komplex reflexiós tényező megváltozására. A sorosan kapcsolt L és C elemek hatására a reflexiós tényező a konstans ellenálláshoz tartozó görbéken „mozog” (fekete nyilak), míg a párhuzamosan kapcsolt elemek hatására a konstans vezetőképességhez tartozó görbéken (szürke nyilak).

A diagramon a tökéletes illesztésnek a koordináta-rendszer középpontja felel meg. Egy $R_s = 50 \Omega$ impedanciájú generátort feltételezve ez akkor valósítható meg, ha $r = 1$ és $x = 0$. Bármely más lezáró impedanciához véges visszaverődés tartozik. Valamely z_A redukált (terhelő) impedancia, ill. az ehhez a Smith-diagramon tartozó „A” pont esetén (lásd 9.40. ábra)

az origó és az „A” pont távolsága megadja a visszaverődési tényező abszolút értékét, valamint az ezen a két ponton átmenő vonal meghosszabbítása a diagram kerületén megadja a reflexiós tényező fázisszögét. (E két paraméter egyértelműen jellemzi a komplex reflexiós tényezőt.) Ha a terhelés elé egy soros reaktív elemet (L, vagy C) kapcsolunk, ez az impedanciára olyan hatással lesz, hogy rezisztív részét nem változtatja, ennek megfelelően az állandó r értékhez tartozó görbén mozdulunk el, induktivitás esetén a pozitív irányba (nagyobb reaktancia), kondenzátor esetén a negatív irányba. Párhuzamosan kapcsolt elemek esetén a reflexiós tényező az állandó vezetőképességhez (g) tartozó görbéken mozdul el, a 9.40. ábrán vázolt módon.



9.41. ábra. Impedanciaillesztés vázlata $Z_d = R_d + iX_d = (10 - i71) \Omega$ impedanciájú terhelés esetére, $R_s = 50 \Omega$ impedanciájú forrásra, L-típusú hálózattal. ($f = 13.56$ MHz.)

Az impedanciaillesztés bemutatásához vegyük most is a már korábban is példaként tekintett $Z_d = R_d + iX_d = (10 - i71) \Omega$ impedanciájú plazmaforrást, amit $R_s = 50 \Omega$ -os RF generátorhoz kell illeszteni! A terhelés normalizált impedanciája $z = r_d + ix_d = 0.2 - i1.42$, aminek a 9.41. ábra „A” pontja felel meg. A tökéletes illesztés eléréséhez ebből a pontból el kell jutnunk a diagram középpontjába, ami $\Gamma = 0$ reflexiónak felel meg!

A már bemutatott L-típusú illesztőhálózat a plazmaforrás irányából elő-

ször egy sorba kapcsolt induktivitást tartalmaz. Ennek hatása a reflexiós tényezőre az alábbi: r értéke változatlan marad, x értéke növekszik (a már említett módon; lásd 9.40. ábra). Ennek megfelelően az állandó $r = 0.2$ értékhez tartozó körön eljutunk a „B” pontba. A második elem, a párhuzamosan kapcsolt kondenzátor hatása az admittancia képzetes részét növeli, miközben az admittancia valós része (g) nem változik. A diagramon így egy állandó g értéknek megfelelő íven mozgunk és látható, hogy ezáltal elérhető a koordináta-rendszer középpontja, feltéve, hogy a „B” pont a $g = 1$ görbén van. Az „A”-„B” ív mentén x megváltozása megadja a szükséges soros induktivitást. A diagram alapján $\Delta x = 1.82$, ebből $\omega L = (50 \Omega) \cdot \Delta x = 91 \Omega$ és $L = 1.07 \mu\text{H}$ adódik, $f = 13.56 \text{ MHz}$ frekvenciával számolva. Az illesztést biztosító kapacitást a szuszceptancia megváltozása adja a „B” pontot és az origót tartalmazó (állandó g értékű) ív mentén, ez a konkrét esetben $|\Delta b| = 2$. Ebből az adódik, hogy $\omega C = (50 \Omega)^{-1} \cdot \Delta b = 0.04 \Omega^{-1}$ és $C = 469 \text{ pF}$. Az így kapott C és L értékek pontosan megegyeznek a 9.60. és 9.61. kifejezésekből kapottakkal.

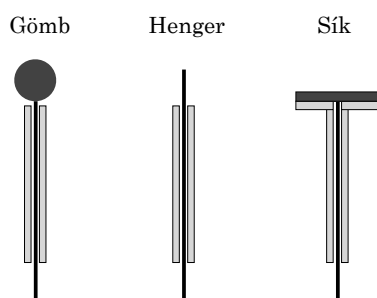
10. fejezet

Plazmadiagnosztika

10.1. Elektromos szondák

10.1.1. A Langmuir-szondák elvi felépítése és alkalmazásának alapjai

A plazmába kisméretű elektródát („szondát”) helyezve és azt egy külső áramkörbe kapcsolva egyes plazmaparaméterek meghatározhatók. A szondáknak számos típusa létezik [26], ezek közül legegyszerűbbek és leggyakrabban használtak a *Langmuir-szondák*, melyek kisméretű passzív eszközök. Kialakításukat tekintve lehetnek gömb alakúak, hengerek (vékony drót), illetve sík felületűek, amint azt a 10.1. ábra mutatja. A szonda aktív felületéhez kapcsolódó vezető minden esetben szigetelt, hogy a plazmával ne kerüljön közvetlen érintkezésbe.

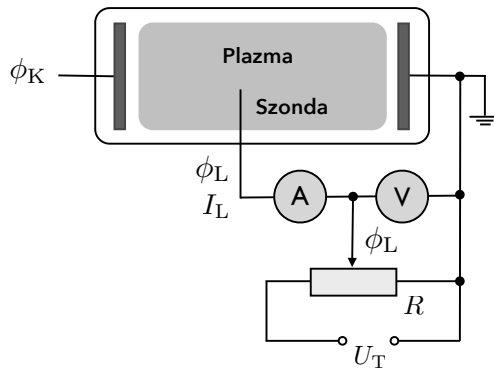


10.1. ábra. Langmuir-szondák tipikus kialakítási módjai. A szondához kapcsolódó vezeték egy szigetelő veszi körül, aminek köszönhetően a plazmával egy jól definiált alakú és méretű felület érintkezik.

A 10.2. ábra egy Langmuir-szondás mérés áramköri elrendezésének vázlatát mutatja, míg a 10.3. ábra egy tipikus szondakarakterisztikát szemléltet. A mé-

rés lényege, hogy a szondát egy változtatható ϕ_L potenciált biztosító forrásra kapcsoljuk és ϕ_L függvényében mérjük a szonda I_L áramát.

A továbbiakban feltételezzük, hogy a plazmában csak elektronok és egyfajta pozitív ion komponens van jelen. Nagy negatív ϕ_L potenciál mellett a szonda a pozitív ionokat vonzza és az elektronokat taszítja: a szondához folyó áram nagy részét az ionáram teszi ki, de az áramhoz hozzájárulhatnak azok a nagy energiájú elektronok is (amennyiben jelen vannak ilyenek), amelyek le tudják küzdeni a szondapotenciál és a ϕ_p plazmapotenciál különbségéből adódó „gátat”. A potenciál növelésével elérünk egy olyan pontot, ahol az ionok és az elektronok árama kiegyenlítődik. Ebben az esetben a szonda árama nulla, a potenciál értéke (definíciószerűen) a „lebegő potenciál”, ϕ_f .

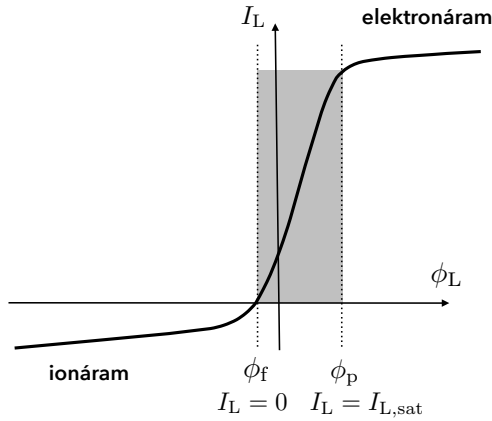


10.2. ábra. Langmuir-szondás mérés áramköri vázlatja. A mérőáramkör itt a földelt anód elektródához kapcsolódik, a plazmát a katódra kapcsolt ϕ_K feszültség hozza létre. Az „A” és „V” jelű „műszerek” a szonda áramát és potenciálját mérik.

A lebegő potenciál fölött lényegében már csak elektronáram folyik a szondához, ami növekvő ϕ_L -el monoton növekszik. Az elektronáram $\phi_L \approx \phi_p$ mellett kezd telítődni ($I_L \approx I_{L,sat}$). A plazmapotenciál a karakterisztika inflexiós pontjaként (azaz az I_L áram második deriváltjának zérushelyével) azonosítható. A szondaáram telítődésének jellege függ a szonda geometriai kialakításától (lásd 10.3. ábra); a telítés jelensége legjobban a sík felületű szonda esetén azonosítható, a telítődés kevésbé éles hengeres kialakítás esetén és gömb alakú szondáknál esetenként nem is észlelhető.

10.1.2. A mérések elvi alapjai

A következőkben csak az elektronokkal kapcsolatos plazmajellemzők meghatározásával foglalkozunk. Sík felületű szonda esetét tárgyaljuk és feltételezzük, hogy a határréteg ütközésmentesnek tekinthető. Az elektronok fluxusa egy n_0 sűrűségű plazmába helyezett, ϕ_L potenciálra kapcsolt felülethez, Maxwell–Boltzmann-eloszlású, T_e hőmérsékletű elektronokat feltételezve (lásd 3.3.2. fe-



10.3. ábra. Langmuir-szonda elektromos karakterisztikája. A szonda árama a lebegő potenciál ($\phi_L = \phi_f$) mellett nulla, negatívabb értékeknél a szonda a pozitív ionokat gyűjti és az elektronokat taszítja, pozitívabb értéknél az elektronokat vonzza. Az elektronokkal kapcsolatos plazmajellemzők méréséhez használt $\phi_f \leq \phi_L \leq \phi_p$ „retardációs” tartományt szürke szín jelöli.

jezet):

$$\Gamma_e = \frac{1}{4} n_0 \langle v_e \rangle \exp \frac{e(\phi_L - \phi_p)}{k_B T_e} = \frac{1}{4} n_0 \sqrt{\frac{8k_B T_e}{\pi m_e}} \exp \frac{e(\phi_L - \phi_p)}{k_B T_e}. \quad (10.1)$$

Az A felületű szondához folyó elektronáram ebből:

$$I_e(\phi_L) = \frac{e A n_0}{4} \sqrt{\frac{8k_B T_e}{\pi m_e}} \exp \frac{e(\phi_L - \phi_p)}{k_B T_e} = I_{e,sat} \exp \frac{e(\phi_L - \phi_p)}{k_B T_e}, \quad (10.2)$$

ahol a telítési elektronáram:

$$I_{e,sat} = I_e(\phi_L = \phi_p). \quad (10.3)$$

A 10.2. kifejezésből:

$$\ln \frac{I_e}{I_{e,sat}} = \frac{e(\phi_L - \phi_p)}{k_B T_e}. \quad (10.4)$$

Az $\ln(I_e/I_{e,sat})$ mennyiséget a ϕ_L potenciál függvényében ábrázolva $k_B T_e$ értéke a görbe meredekségének reciprokaként adódik. Az elektron hőmérséklet ismeretében a 10.2. összefüggés kapcsolatot teremt a telítési elektronáram és a plazma sűrűsége között, így $I_{e,sat}$ ismeretében n_0 is meghatározható. Az elektronsűrűsége így kapott eredmény viszont pontatlan lehet a telítési áram mérésének már említett bizonytalansága miatt.

Ezt a problémát küszöböli ki az ú.n. I^2 -módszer [115], mely a telítési áram ismerete nélkül ad mérési eljárást az elektronsűrűsége. A fenti, 10.2. egyenlet

négyzetre emelése után az exponenciális tagot első rendig sorbafejtve az alábbi adódik:

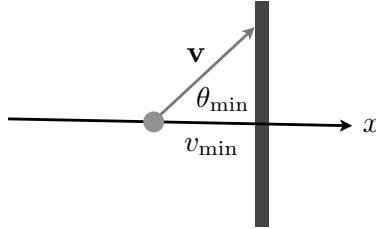
$$\begin{aligned} I_e^2(\phi_L) &= \left(\frac{eAn_0}{4} \right)^2 \frac{8k_B T_e}{\pi m_e} \left[\exp \frac{e(\phi_L - \phi_P)}{k_B T_e} \right]^2 \\ &\cong \left(\frac{eAn_0}{4} \right)^2 \frac{8k_B T_e}{\pi m_e} \left[1 + 2 \frac{e(\phi_L - \phi_P)}{k_B T_e} \right], \end{aligned} \quad (10.5)$$

azaz

$$I_e^2(\phi_L) = \frac{(eA)^2}{\pi m_e} n_0^2 \left[\frac{1}{2} k_B T_e - e\phi_P + e\phi_L \right]. \quad (10.6)$$

A szögletes zárójelben lévő tagok közül az első kettő állandó, így az $I_e^2(\phi_L)$ görbe *meredeksége az n_0 elektronsűrűség négyzetével arányos*. (Az arányossági tényezőben csak ismert értékek szerepelnek.)

A szondakarakterisztika pontos mérésével izotróp sebességeloszlás esetében lehetőség van az elektronok *energiaeloszlásának* meghatározására is [4], ugyanis a szonda potenciáljának változtatásával különböző energiájú elektronok érik el annak felületét. A méréshez a szonda „retardáló tartománya” használható ki, ami a lebegő potenciál és a plazmapotenciál értékek között helyezkedik el (lásd 10.3. ábra).



10.4. ábra. A szondát elérő elektronok áramának számolásához.

A 10.4. ábrán vázolt módon a szonda felületét valamely ϕ_L potenciál mellett azok az elektronok tudják elérni, amelyeknek az x irányú $v_{\min}$ sebessége meghalad egy, a potenciálkülönbség leküzdéséhez minimálisan szükséges értéket,

$$\frac{1}{2} m_e v_{\min}^2 = e(\phi_P - \phi_L) \quad \rightarrow \quad v_{\min} = \sqrt{\frac{2e(\phi_P - \phi_L)}{m_e}}. \quad (10.7)$$

A szondához folyó elektronáram:

$$I_e = eA \int_{v_x=v_{\min}}^{\infty} \int_{v_y=-\infty}^{\infty} \int_{v_z=-\infty}^{\infty} v_x f(v) dv_x dv_y dv_z. \quad (10.8)$$

Az elektronok (korábban feltételként szabott) izotróp sebességeloszlásának köszönhetően áttérhetünk gömbi koordinátákra, így $dv_x dv_y dv_z =$

$v^2 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \, dv$. Továbbá,

$$v_x = v \cos \theta, \quad \cos \theta_{\min} = \frac{v_{\min}}{v}$$

felhasználásával a szondához folyó elektronáram az alábbi integrál kiszámításával határozható meg:

$$\begin{aligned} I_e &= eA \int_{v=v_{\min}}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\theta_{\min}} \int_{\varphi=0}^{2\pi} v^3 f(v) \sin \theta \cos \theta \, d\theta \, d\varphi \, dv \\ &= eA\pi \int_{v=v_{\min}}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\theta_{\min}} v^3 f(v) \sin 2\theta \, d\theta \, dv. \end{aligned} \quad (10.9)$$

Mivel

$$\begin{aligned} \int_{\theta=0}^{\theta_{\min}} \sin 2\theta \, d\theta &= \frac{1}{2} [1 - \cos 2\theta_{\min}] \\ &= 1 - \cos^2 \theta_{\min} = 1 - \frac{v_{\min}^2}{v^2}, \end{aligned}$$

ezért az elektronáram értéke:

$$I_e = eA\pi \int_{v=v_{\min}}^{\infty} v^3 f(v) \left(1 - \frac{v_{\min}^2}{v^2}\right) dv. \quad (10.10)$$

Következő lépésként bevezetjük az $\varepsilon = m_e v^2/2$ és $U = \phi_p - \phi_L$ új változókat. Az $f(v)$ sebességeloszlás-függvény és a $F(\varepsilon)$ energiaeloszlás-függvény közti

$$\begin{aligned} F(\varepsilon) d\varepsilon &= 4\pi v^2 f(v) dv \\ \rightarrow f(v) dv &= \frac{1}{4\pi v^2} F(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{m_e}{8\pi \varepsilon} F(\varepsilon) d\varepsilon \end{aligned}$$

kapcsolatot felhasználva a 10.10. összefüggés a következő alakra hozható:

$$I_e = \frac{eA}{2^{3/2} m_e^{1/2}} \int_{eU}^{\infty} F(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} \left(1 - \frac{eU}{\varepsilon}\right) d\varepsilon. \quad (10.11)$$

A Leibniz-féle integrálási szabály értelmében a dI_e/dU differenciálhányadosra

az alábbi adódik¹:

$$\frac{dI_e}{dU} = \frac{eA}{2^{3/2}m_e^{1/2}} \int_{eU}^{\infty} \frac{\partial}{\partial U} \left\{ F(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} \left(1 - \frac{eU}{\varepsilon} \right) \right\} d\varepsilon \quad (10.12)$$

$$= -\frac{e^2 A}{2^{3/2}m_e^{1/2}} \int_{eU}^{\infty} \frac{F(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}} d\varepsilon, \quad (10.13)$$

melyből az áram második deriváltjának értéke:

$$\frac{d^2 I_e}{dU^2} = \frac{e^2 A}{2^{3/2}m_e^{1/2}} \frac{F(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}} \Big|_{\varepsilon=eU}. \quad (10.14)$$

Végeredményben:

$$\tilde{F}(\varepsilon) = \frac{F(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}} = \frac{2^{3/2}m_e^{1/2}}{e^2 A} \frac{d^2 I_e}{dU^2}, \quad (10.15)$$

vagyis az $\tilde{F}$ *energiaeloszlás-függvény arányos a szondakarakterisztika második deriváltjával*.² Amennyiben az elektronok energiaeloszlása Maxwell–Boltzmann-alakú, azaz $F(\varepsilon) \propto \sqrt{\varepsilon} \exp(-\varepsilon/k_B T_e)$, akkor $\tilde{F}(\varepsilon)$ exponenciálisan lecsengő függvény, illetve, ha a szondakarakterisztika mérésekor $d^2 I_e/dU^2$ -ra exponenciális lecsengést találunk, abból az következik, hogy az elektronok energiaeloszlása Maxwell–Boltzmann-alakú.

A fentiekben feltételeztük, hogy a szonda környezetében kialakuló határréteg ütközésmentes. Ütközéses esetre, illetve általánosan is elmondható, hogy a szondakarakteristikák kiértékelését nagy körültekintéssel kell végezni, az adott esetre alkalmazható elméleti leírás alapján.

Példaként a 10.5. ábra egy alacsony nyomású DC argon plazma negatív fény térrészében mért szondakarakteristikát mutat $p = 40$ Pa, $V_0 = 403$ V, $I = 2$

¹A Leibniz-féle integrálási szabály kimondja, hogy ha $\mathcal{G}(y) = \int_a^b \mathcal{F}(x, y) dx$, akkor

$$\frac{d\mathcal{G}}{dy} = \int_a^b \frac{d}{dy} \mathcal{F}(x, y) dx + \mathcal{F}(b, y) \frac{db}{dy} - \mathcal{F}(a, y) \frac{da}{dy}.$$

Ez alapján, $x \equiv \varepsilon$, $y \equiv U$, $a = eU$, $b = \infty$ választással:

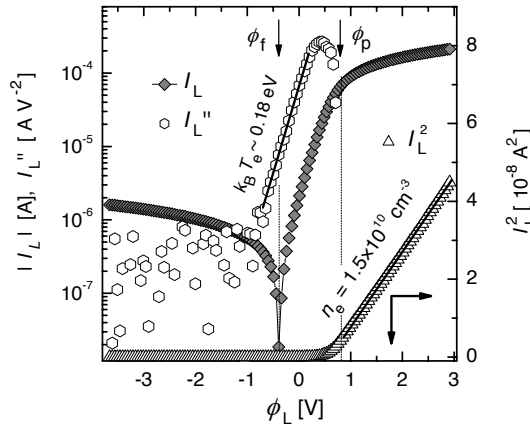
$$\mathcal{G}(U) = \int_{eU}^{\infty} \mathcal{F}(\varepsilon, U) d\varepsilon$$

és

$$\frac{d\mathcal{G}}{dU} = \frac{\partial}{\partial U} \int_{eU}^{\infty} \mathcal{F}(\varepsilon, U) d\varepsilon = \int_{eU}^{\infty} \frac{\partial}{\partial U} \mathcal{F}(\varepsilon, U) d\varepsilon - \mathcal{F}(\varepsilon = eU, U) e,$$

ugyanis a db/dy derivált eltűnik az állandó felső integrálási limit miatt. Az utóbbi kifejezés második tagja szintén eltűnik, mivel 10.11. alapján $\mathcal{F}(\varepsilon = eU, U) = 0$.

²Megjegyezzük, hogy az angol nyelvű szakirodalomban az $F(\varepsilon)$ függvény neve „*Electron energy distribution function*, EEDF”, míg az $\tilde{F}(\varepsilon)$ függvény neve „*Electron energy probability function*, EEPF”.

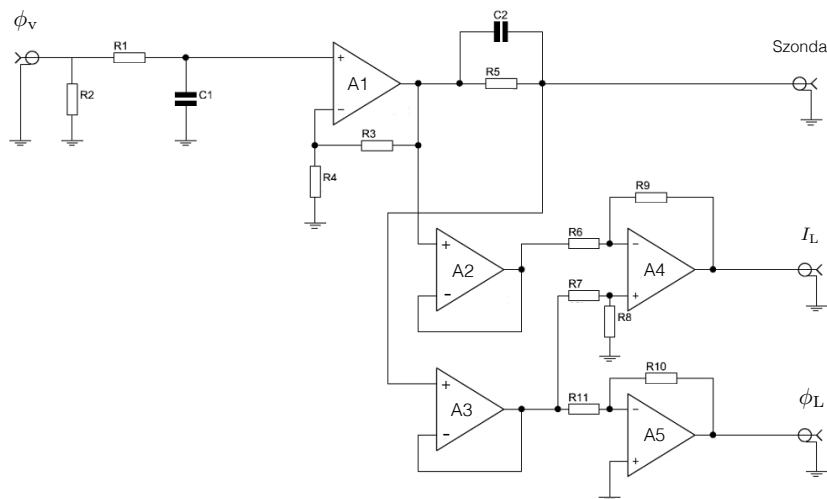


10.5. ábra. Alacsony nyomású DC argon plazma negatív fény térrészében mért szondakarakterisztika [102]. A gázkisülés paraméterei: $p = 40$ Pa, $V_0 = 403$ V, $I = 2$ mA. (Az IOP Publishing, Ltd., Copyright Clearance Center, Inc. által biztosított engedélyével reprodukálva az alábbi cikkből: A. Derzsi, P. Hartmann, I. Korolov, J. Karácsony, G. Bánó, Z. Donkó: On the accuracy and limitations of fluid models of the cathode region of dc glow discharges, Journal of Physics. D, Applied Physics 42, 225204 (2009), <https://doi.org/10.1088/0022-3727/42/22/225204>.)

mA mellett. A mérésekhez használt Langmuir-szonda egy 2.5 mm hosszú, 50 μm átmérőjű volfrám szál volt [102]. Az ábra vízszintes tengelyén a szonda ϕ_L potenciálja szerepel. A bal oldali függőleges skála az I_L áram abszolút értékét és második deriváltját mutatja, míg a jobb oldali skálán az áram négyzete szerepel. Az $|I_L|$ görbén jól megfigyelhető az eltűnő áramhoz tartozó lebegő potenciál. A fejezet elején elmondottak szerint a plazmapotenciál helyét I_L'' eltűnő értéke jelzi, ez a vizsgált esetben ≈ 0.8 V. I_L'' egy jól azonosítható tartományban exponenciális növekedést mutat ϕ_L függvényében (azaz exponenciális csökkenést $U = \phi_p - \phi_L$ függvényében). Ez a viselkedés a 10.5. ábra logaritmikus skálája miatt egyenesként jelenik meg, amely meredekségének reciproka megadja $k_B T_e$ értékét, ami itt ≈ 0.18 eV. Az $I_L^2(\phi_L)$ függvény lehetőséget ad az elektronsűrűség 10.6. kifejezés alapján való meghatározására. A mért szondakarakteristikából $n_e \cong 1.5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ elektronsűrűség adódik.

K. 13: A Langmuir-szonda áramköri kapcsolási rajza

A 10.6. ábra egy Langmuir-szonda meghajtásához alkalmas, egy lehetséges elektromos áramkört mutat be. A ϕ_v vezérlőfeszültséget az A1 műveleti erősítő neminvertáló kapcsolásban erősíti, kimenetéhez az R5 ellenálláson keresztül kapcsolódik a szonda. Az ellenállás két pólusához nagy bemenő ellenállású A2 és A3 erősítők csatlakoznak „követő” (egységnyi erősítésű) kapcsolásban. Ezek az R5 pólusain lévő potenciálokat mérik, nagy bemenő ellenállásuknak köszönhetően (lényegében) terhelésmentesen. Az A4 műveleti erősítő különbségképző kapcsolásban működik, vagyis az R5 ellenálláson átfolyó áramot méri, ami megegyezik a szonda áramával. Kimenő jele a szonda I_L áramával arányos. Az A5 erősítő a szonda potenciáljával arányos jelet szolgáltat (ϕ_L). Ez a két kimenő jel egy számítógéphez csatlakoztatott adatgyűjtő egységgel digitalizálható.



10.6. ábra. Langmuir-szonda meghajtó és mérő áramköre. (A rajzért köszönet Ihor Korolovnak.)

Végül megjegyezzük, hogy

- a méréseknél kritikus a szonda felületének tisztasága. A szennyeződések pl. elektronemissziót indukálhatnak, ami torzíthatja a szondakarakteristikát. A tisztítást „in-situ” módon elektronárammal, vagy ionbombázással lehet megvalósítani, a szondát a mérési körülményekhez képest átmenetileg nagyobb potenciálra kapcsolva,
- a szondákkal elérhető térbeli feloldást a Debye-hossz határozza meg, míg az időbeli feloldást a határréteg kialakulásának időskálája, ami az ionok plazmafrequenciájával kapcsolatos.

10.2. Optikai spektroszkópia

Spektroszkópia alatt, röviden, az *elektromágneses sugárzás* vizsgálatát értjük. A sugárzás spektrális összetétele fontos információt hordoz a sugárzást keltő, vagy azzal kölcsönható anyagokról, ezek atomjainak, illetve molekuláinak szerkezetéről és azok környezetéről, így a spektroszkópia a fizikán kívül számos más tudományterületen (pl. biológiában, kémiában) is fontos szerepet kap. Megjegyzendő az is, hogy a korai spektroszkópai kutatások, többek között a hidrogénben keltett elektromos gázkibúlések fénykibocsátásának vizsgálata, nagyban segítették a modern fizika (kvantummechanika) fejlődését.

A spektroszkópia rendkívül széles tárgyköréből itt csak az alacsony hőmérsékletű plazmák diagnosztikája szempontjából releváns területeket emeljük ki. Ennek egyik legfontosabb része a plazmában végbemenő atomfizikai folyamatok és a megfigyelhető sugárzás közötti kapcsolatok feltárása. Ennek érdekében a következő, 10.2.1. fejezetben megismerkedünk a *spektrumok eredetével* [116–119]. Elsőként a legegyszerűbb atom, a hidrogén spektrumának értelmezéséhez kapcsolódóan említést teszünk a *Bohr-féle* atommodellről és vázoljuk a *kvantummechanikai* leírást. Tovább lépve, röviden tárgyaljuk a bonyolultabb (több-elektronos) atomok és a molekulák spektrumának legfontosabb jellemzőit. Ezt követően megismerkedünk a *fénykibocsátás és fényelnyelés* elemi folyamataival (10.2.2. fejezet), a spektrumvonalak *alakját* befolyásoló jelenségekkel (10.2.3. fejezet), a legfontosabb *spektroszkópai módszerekkel* (10.2.5. fejezet), majd vázoljuk a legalapvetőbb *lézerspektroszkópai módszerek* elvét (10.2.6. fejezet). A spektroszkópia fizikai alapjaiba pl. [120] és [121] adnak részletesebb bevezetést.

10.2.1. A spektrumok eredete

Egyelektronos atomok spektruma

Az atomok közül elsőként a legegyszerűbb, az egy proton és egy elektron által alkotott hidrogénatom spektrumával foglalkozunk. A spektrum értelmezése/megértése nagyban motiválta az atommodellek fejlődését. Ugyan a kezdeti, szemléletes modellek a kvantummechanika kialakulásával túlhaladottakká váltak, mégis érdemes röviden áttekinteni a fejlődés folyamatát.

A XIX. század végén végzett kísérleti vizsgálatok a H atom spektrumának látható tartományában egy szabályos vonalsorozatot mutattak. Balmer 1885-ben úgy találta, hogy a sorozat (a „*Balmer-sorozat*”) tagjainak $\bar{\nu} = 1/\lambda$ hullámszáma a

$$\bar{\nu} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4, 5, \dots \quad (10.16)$$

formulával adható meg, ahol $R_H = 109677.58 \text{ cm}^{-1}$ egy állandó (*Rydberg-állandó*). Későbbi vizsgálatok a sugárzási spektrumban további sorozatokat is kimutattak, amelyekre azt találták, hogy ezek tagjainak hullámszámait a fenti kifejezés általánosított,

$$\bar{\nu} = R_H \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (10.17)$$

formájával adhatók meg, ahol k értékei szintén egész számok: pl. $k = 1$ a Lyman-sorozatot, $k = 2$ a (fenti) Balmer-sorozatot,³ $k = 3$ a Paschen-sorozatot jelzi.

A fenti, lényegében próbálgatással megalkotott formulák és így a H atom sugárzási spektrumának első értelmezését *Bohr elmélete* adta meg, melynek megalkotását Ernest Rutherfordnak a XX sz. elején végzett mérései alapozták meg. Ezek a mérések arra a következtetésre vezettek, hogy az atom egy pozitív töltésű atommagból és az ezt körülvevő negatív töltésű elektronokból álló diffúz felhőből áll. Bohr 1913-ban az alábbi feltételeket vezette be (posztulálta) modelljében:

1. Az elektronok csak meghatározott stacionárius pályákon keringhetnek az atommag körül. A lehetséges pályákhoz meghatározott energiaérték tartozik, az ezeken a pályákon mozgó elektronok nem sugároznak.⁴ A mag körül az elektronok olyan $r = r_n$ sugarú körpályákon keringhetnek, amelyekre az impulzusmomentum értéke (*Bohr-féle kvantumfeltétel*)

$$m_e r_n v_n = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (10.18)$$

ahol v_n az n kvantumszámú pályához tartozó sebesség, m_e az elektron tömege, $\hbar = h/2\pi$ és h a Planck-állandó.

2. Sugárzás emissziója, vagy abszorpciója csak két stacionárius állapot közötti átmenet során mehet végbe. A kibocsátott, vagy elnyelt foton energiáját a két („1” és „2”) állapot közötti energiakülönbség szabja meg, a

$$h\nu = E_1 - E_2 \quad (10.19)$$

frekvenciafeltétel értelmében.

A 10.18. feltételből, felhasználva, hogy az elektron v^2/r centripetális gyorsulásának és tömegének szorzata a proton (atommag) és az elektron között ható $e^2/4\pi\epsilon_0 r^2$ Coulomb-erővel tart egyensúlyt, az elektron energiája az n kvantumszám függvényében egyszerűen meghatározható. A nyugvónak tekintett atommagból és a körülötte keringő elektronból álló rendszer teljes energiája az elektron kinetikus energiájának és a centrális elektromos erőterben fellépő potenciális energiának az összege:

$$E_n = \frac{m_e v_n^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{m_e e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{n^2}. \quad (10.20)$$

Bohr második posztulátuma szerint két stacionárius állapot közötti, azaz pl. az $n \rightarrow k$ átmenetet jellemző energiakülönbség ebből adódóan:

$$E_n - E_k = \frac{m_e e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (10.21)$$

³A sorozat jellegzetes vonalai: H_α : 656.3 nm, H_β : 486.1 nm, H_γ : 434.0 nm, H_δ : 410.2 nm.

⁴Bohr ezzel a posztulátummal megkerülte azt a (továbbra is megmaradó) problémát, hogy az atommag körül keringő elektronoknak, mivel gyorsuló mozgást végeznek, a klasszikus elektrodinamika szerint sugározniuk kell. Ez folyamatos energiavesztéshez és egyre kisebb sugarú pályához vezetne, vagyis kizárná az atomok stabil jellegét.

Az $E = h\nu$ összefüggés alapján a sugárzás $\bar{\nu} = 1/\lambda = \nu/c = E/hc$ hullámszáma pedig:

$$\bar{\nu} = \frac{E_n - E_k}{hc} = \frac{m_e e^4}{8h^3 \varepsilon_0^2 c} \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad R = \frac{m_e e^4}{8h^3 \varepsilon_0^2 c}. \quad (10.22)$$

Ez az összefüggés – R értékét a Rydberg-állandóval azonosítva – megegyezik az empirikus, 10.17. összefüggés szerinti alakkal, vagyis a fent ismertetett Bohr-elmélet sikeresen tudta magyarázni a hidrogén atom színképében észlelt szerkezetet. Az összefüggés leírta továbbá a hidrogénszerű ionok (pl. He^+ , Li^{2+} , ...) spektrumát is, viszont a pontos mérések kimutatták, hogy a spektrumvonalak mért hullámhosszából az egyes elemekre kismértékben különböző Rydberg-állandó adódik. A jelenség az atommag mozgásával volt magyarázható, az elektron tömege helyett a *redukált tömeg* használata (azaz egy további klasszikus effektus figyelembe vétele) helyes korrekciót adott az elméletben. Ennek oka, hogy – mint azt a következőkben részletesen is bemutatjuk – a hidrogénatom Schrödinger-egyenletének megoldásánál a protont (atommagot) nagy tömege miatt rögzítettnek tekintjük, ami leegyszerűsíti a probléma megoldását. Ha az atommag mozgását is figyelembe akarjuk venni, akkor a (kvantummechanikai) kététest-problémát kell megoldanunk.

K. 14: A hidrogénatom kvantummechanikai leírása

A „mikrorendszerek”, így a hidrogénatom leírásában is az igazi áttörést a *kvantummechanika* hozta meg. A kvantummechanika szerint az elektron atombeli lehetséges (E) energiaszintjei a

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = E\Psi \quad (10.23)$$

stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldása során mint sajátértékek adódnak. Itt Ψ az elektron *hullámfüggvénye* (mely a megoldás során sajátfüggvényként adódik) és

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V(r) \quad (10.24)$$

a rendszer *Hamilton-operátora*. Itt $V(r)$ a potenciális energia, Δ pedig a (már ismert) *Laplace-operátor*.

A következőkben az egyenlet megoldását csak nagy vonalakban ismer-tetjük, a megoldás teljes részletezése (ami pl. [10]-ban megtalálható) ismert feladat a matematikai fizika témakörében. A megoldás során feltételezzük, hogy az atommag nyugalomban van. A Schrödinger-egyenlet a problémához illeszkedő gömbi koordináta-rendszerben a

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \right. \\ \left. \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \Psi + V(r)\Psi = E\Psi \end{aligned} \quad (10.25)$$

alakot ölti, ahol $\Psi = \Psi(r, \vartheta, \varphi)$. A fenti egyenlet megoldását a változók szétválasztásával, a

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi) \quad (10.26)$$

szorzat alakjában megadható hullámfüggvényekre keressük. Algebrai átalakítások után a 10.25. egyenlet az alábbi összefüggésre vezet:

$$\left[\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} (V - E) \right] + \frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial Y}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right] = 0. \quad (10.27)$$

Itt az első tag láthatóan csak az r helykoordináta függvénye, míg a második tag a ϑ és φ szögektől függ. A nemtriviális megoldás feltétele, hogy a két tag egy ellentétes előjelű „szeparációs konstans” értéket ($\pm \lambda$) vegyen fel:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} (V - E) = \lambda \quad (10.28)$$

$$\frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial Y}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right] = -\lambda. \quad (10.29)$$

A szögekre vonatkozó 10.29. egyenlet megoldásánál ismét alkalmazzuk a változók szétválasztásának módszerét és a megoldást az

$$Y(\vartheta, \varphi) = \Theta(\vartheta)\Phi(\varphi) \quad (10.30)$$

szorzat alakjában keressük. Ez az alábbi egyenletekre vezet:

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -m^2 \quad (10.31)$$

$$\frac{1}{\Theta} \sin \vartheta \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) + \lambda \sin^2 \vartheta = m^2. \quad (10.32)$$

A 10.31. egyenlet megoldását keresve nyilvánvalóvá válik a szeparációs állandó adott hatványfüggvény (m^2) szerinti alakjának feltételezése, ugyanis a megoldás így:

$$\Phi = A e^{im\varphi} \quad (10.33)$$

alakú, ahol A egy állandó és m egy egész szám (biztosítva a megoldás 2π szerinti periodicitását). A 10.32. egyenlet további átalakításokkal:

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right) \Theta = 0. \quad (10.34)$$

$m = 0$ esetben ez az összefüggés a *Legendre-féle differenciálegyenletre* vezet. Ennek megoldása során (lásd pl. [10, 49]) a 10.29. egyenletben

megjelenő λ szeparációs állandót $\lambda = l(l+1)$ alakúnak kell választani ($l \in \mathbb{N}$) ahhoz, hogy a hatványsor a $\vartheta = 0, \pi$ helyeken véges értéket vegyen fel. A megoldást a $\mathcal{P}_l(\cos \vartheta)$ Legendre-polinomok adják, amik – példaként – az $l = 0, 1, 2$ értékekre:

$$\mathcal{P}_0(\cos \vartheta) = 1, \quad \mathcal{P}_1(\cos \vartheta) = \cos \vartheta, \quad \mathcal{P}_2(\cos \vartheta) = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \vartheta - 1).$$

Az $m \neq 0$ esetben a 10.34. összefüggés a csatolt Legendre-féle differenciálegyenletre vezet, aminek megoldásai a csatolt Legendre-polinomok, amelyek a Legendre-polinomokból az alábbi módon származtathatók:

$$\mathcal{P}_l^m(\cos \vartheta) = (1 - \cos^2 \vartheta)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|} \mathcal{P}_l(\cos \vartheta)}{d(\cos \vartheta)^{|m|}}. \quad (10.35)$$

Mivel $\mathcal{P}_l(\cos \vartheta)$ egy l -ed fokú polinom, ezért látható, hogy csak az $|m| \leq l$ feltételnek megfelelő $\mathcal{P}_l^m(\cos \vartheta)$ polinomok származtathatók, ugyanis a további differenciálás $\mathcal{P}_l^m(\cos \vartheta) \equiv 0$ -ra vezet. (Megjegyezzük még, hogy $\mathcal{P}_l^{m=0}(\cos \vartheta) = \mathcal{P}_l(\cos \vartheta)$.) A Schrödinger-egyenlet szögváltozókra kapott megoldása így tehát:

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = A e^{im\varphi} \mathcal{P}_l^m(\cos \vartheta), \quad m = -l, \dots, l. \quad (10.36)$$

A radiális részre megoldandó egyenlet a 10.28. összefüggésbe a $\lambda = l(l+1)$ értéket és a $V(r)$ potenciált behelyettesítve, valamint a differenciálást elvégezve:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} - \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[\frac{8\pi^2 m_e}{h^2} E + \frac{2\pi m_e e^2}{h^2 \varepsilon_0 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0. \quad (10.37)$$

Az egyenlet végtelenben nem divergáló megoldása szükségessé teszi egy pozitív egész értékeket felvevő kvantumszám, az n főkvantumszám bevezetését (ahol $n \geq l+1$), amivel az energia lehetséges értékei:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8h^2 \varepsilon_0^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{\alpha^2 m_e c^2}{2n^2}, \quad (10.38)$$

ahol $\alpha \approx \frac{1}{137}$ az ún. *finomszerkezeti állandó* (ami alacsony energián az elektromágneses kölcsönhatás „erősségét” adja meg), $m_e c^2$ pedig az elektron nyugalmi energiája. Érdekes kérdés, hogy az energia miért nem függ az impulzusmomentumtól, azaz l -től is. A válasz egy, a gömbi szimmetrián túl is jelenlévő szimmetria, ami már csak a csoportelmélet eszköztárával tárgyalható (bővebben ld. [47]). Az így kapott energiaértékek megegyeznek a Bohr-elmélet által megadott értékekkel (10.20. összefüggés). A radiális függvényre adódó megoldás:

$$R_{n,l}(r) = e^{-r/na_0} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^l \mathcal{L}_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0} \right), \quad (10.39)$$

ahol $\mathcal{L}$ a *csatolt Laguerre-polinom*, $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ pedig a Bohr-sugár. Ezzel a hidrogénatom elektronjának hullámfüggvényére vonatkozó teljes megoldás tehát:

$$\Psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = A e^{-\frac{2r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l \mathcal{L}_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right) \mathcal{P}_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad (10.40)$$

amiben az A állandó a hullámfüggvény normálásával határozható meg.

A fentiekben az elektron lehetséges hullámfüggvényeire és energiaértékeire vonatkozó sajátérték-egyenlet megoldása három kvantumszám bevezetését tette szükségessé. Hangsúlyozzuk, hogy a kvantumszámok bevezetésének tisztán matematikai oka volt és semmilyen szemléletes képet nem társítottunk ezekhez! A kvantumszámok viszont egyes fizikai mennyiségekhez kapcsolódnak:

- az n *főkvantumszám* az elektron energiáját határozza meg,
- az l *mellékkvantumszám* a pálya-impulzusmomentum vektor abszolút értékét adja meg: $|\mathbf{l}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$,
- az m *mágneses kvantumszám* a pálya-impulzusmomentum vektor valamely komponensének (pl. z) értékét határozza meg: $l_z = m\hbar$.

Megjegyezzük továbbá, hogy az elektron egy további jellemzője, a *spin*, nem származtatható a Schrödinger-egyenlet megoldásából, az elektron saját-impulzusmomentumát (azaz spinjét) relativisztikusan figyelembe vevő egyenletet *Dirac-egyenletnek* nevezzük. Az elektron feles spinű részecske, azaz *fermion*, spinje $s = 1/2$. Az ehhez rendelhető *spin-impulzusmomentum* „vektor” nagysága $|\mathbf{s}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \hbar\sqrt{3}/2$. Ennek a z irányra vett vetülete $s_z = m_s\hbar$, ahol m_s a *spin kvantumszám* (vagy *mágneses spin kvantumszám*), ami két értéket vehet fel: $m_s = +1/2$ a $\uparrow$ állapotot (más néven „ α állapotot”), $m_s = -1/2$ a $\downarrow$ állapotot (más néven „ β állapotot”) jelzi.

A *spin kvantumszámmal négyre bővül az elektron állapotát leíró kvantumszámok köre, amelyek tehát a H atom esetében az alábbi értékeket vehetik fel:*

$$\boxed{n = 1, 2, 3, \dots \quad l = 0, 1, \dots, n-1 \quad m = -l, \dots, l \quad m_s = -1/2, +1/2} \quad (10.41)$$

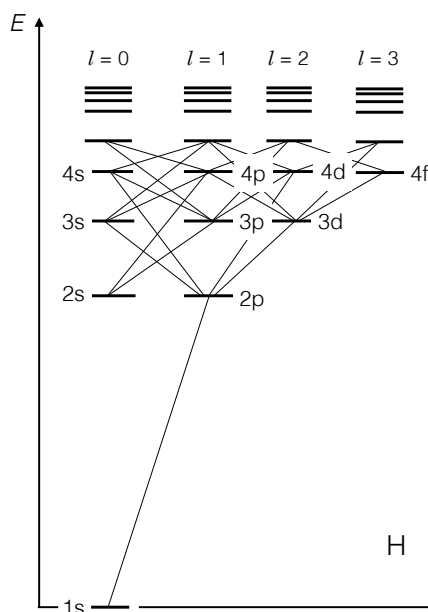
A klasszikus fizikában egy rendszer gömbszimmetriája az impulzusmomentum megmaradását vonja maga után (vö. Noether-tétel). Mivel a kvantummechanikában mind $\mathbf{l}$, mind $\mathbf{s}$ impulzusmomentum, a megfelelő megmaradó mennyiség gömbszimmetria esetén a teljes impulzusmomentum ($\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$) lesz, így bevezetve az ehhez tartozó j kvantumszámot, igaz lesz, hogy

$$|\mathbf{j}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar, \quad |l-s| \leq j \leq l+s. \quad (10.42)$$

Hangsúlyozzuk, hogy a hidrogénatom (térbeli) hullámfüggvénye csak az n, l, m kvantumszámoktól függ, ld. a 10.40. összefüggést. A spin az elektron egy

belső tulajdonsága, amit ezen a ponton csak posztulálni tudunk. Emiatt a spin bizonyos értelemben nem „ugyanolyan” impulzusmomentum, mint $\mathbf{l}$. Hasonlóan nem triviális megválaszolni, hogy miért igaz a j kvantumszám lehetséges értékeire vonatkozó a 10.42. összefüggés. Ennek korrekt leírásához a csoportelmélet apparátusát kellene alkalmaznunk, amire itt nincs lehetőségünk. Részletekért lásd pl. [47].

A 10.7. ábra a H atom elektronkonfigurációit, azaz a lehetséges hullámfüggvényeknek megfelelő energiaszinteket mutatja. Az ilyen, adott atom alap- és gerjesztett állapotait és az azok közötti átmeneteket tartalmazó ábrákat a spektroszkópiában *Grotrian-diagramnak* nevezik. Az állapotok egyszerűsített jelölésében a főkvantumszám értékét és egy, a mellékvantumszámnak megfelelő betűjelzést alkalmazunk. Az $l = 0, 1, 2, 3$ értékekhez tradicionálisan a „s”, „p”, „d” és „f” állapotjelző betűket társítjuk.⁵ A H atom alapállapota ebben a rendszerben tehát 1s.



10.7. ábra. A hidrogénatom elektronkonfigurációi.

A 10.7. ábrán a számos feltüntetett konfiguráció közötti vonalak a lehetséges átmeneteket jelölik. Megfigyelhetjük, hogy két állapot között nem mindig van átmenet, ezeket ugyanis a *kiválasztási szabályok* korlátozzák. Az ábrán a legfeltűnőbb, hogy az ugyanakkora l értékkel jellemzett nívók között nincsenek

⁵A mellékvantumszámnak megfelelő állapotokra használt betűk az alkáli atomok vonalsorozatainak tulajdonságait voltak hivatottak jellemezni, az angol *sharp*, *principal*, *diffuse* és *fundamental* szavak kezdőbetűi. Közülük az első három bevezetése George Liveing és Sir James Dewar nevéhez fűződik (~1870), a negyedik pedig Arno Bergmann nevéhez (1907).

átmenetek.⁶ A hidrogénatom elektronátmeneteire vonatkozó (dipólközelítésben érvényes) szabályok:

$$\Delta l = \pm 1 \quad , \quad \Delta m = 0, \pm 1 \quad , \quad \Delta j = 0, \pm 1.$$

Az első szabály tiltja például a $2s \rightarrow 1s$ átmenetet, amiből az következik, hogy egy, pl. elektron - atom ütközéssel $2s$ állapotba kerülő H atom nem tudja energiáját sugárzással leadni, vagyis ez a szint egy *metastabil* állapot. A metastabil állapotok élettartama a többi nívóhoz képest lényegesen hosszabb lehet, „izolált” atomok esetében a dipólnál magasabb rendű átmenetek vezethetnek mégis sugárzáshoz, plazmákban pedig más részecskékkel, vagy a fallal való ütközések során tud az atom legerjesztődni, vagy más gerjesztett állapotba kerülni.

A fentiekben láttuk, hogy az energia csak az n főkvantumszám függvénye. Mivel n adott értékéhez számos l és m érték tartozhat, ezért adott E_n energiához több (n^2 számú⁷, az elektron spinjének figyelembevételével kétszer ennyi) hullámfüggvény tartozik. Ezt a degenerációt pl. külső elektromos és mágneses terek feloldhatják (*Stark-effektus* ill. *Zeeman-effektus*), ami a spektrumvonalak „felhasadásához” vezet. További felhasadást eredményeznek a relativisztikus effektusok, amelyek teljeskörű figyelembevételéhez a már említett Dirac-egyenletet kellene alkalmazni. Ennek hiányában perturbatíván is meg lehet közelíteni a problémát. Általában három effektust szoktak figyelembe venni: (1) az elektron atommag körüli relativisztikus mozgásából adódó korrekciót, (2) az elektron pálya-impulzusmomentuma és spinje közötti kölcsönhatást (spin-pályacsatolás) és (3) egy alapvetően relativisztikus kvantummechanikai effektust, a „*Zitterbewegung*”-ot [48, 122, 123]. Ezek összessége az ún. *finomszerkezet* kialakulását eredményezi. Hidrogén esetében az így kialakuló energiaszintek az

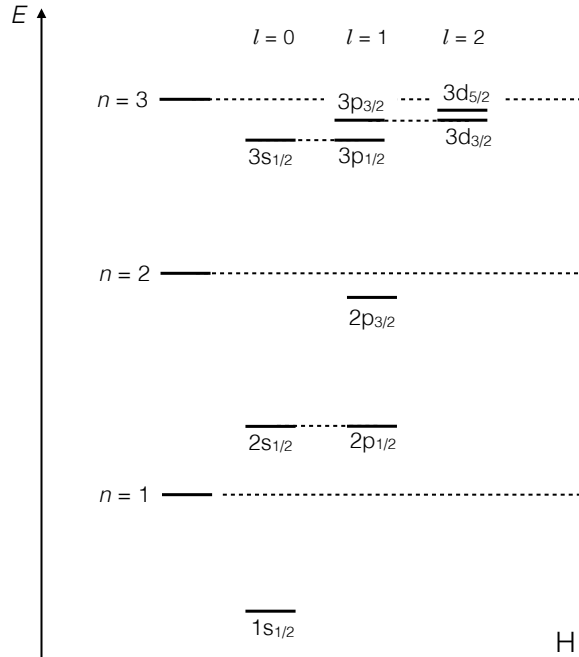
$$E_{n,j} = E_n^0 \left[1 - \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (10.43)$$

összefüggéssel adhatók meg, ahol E_n^0 a kölcsönhatás figyelembe vétele nélkül számolt energia (10.38. összefüggés), α a már említett finomszerkezeti állandó. Példaként tekintsük a H atom $n = 2$ főkvantumszámú, $l = 0$ és $l = 1$ állapotait. A két állapotra $j = 1/2$, ill. $j = 3/2$, ezekre az értékekre a fenti összefüggés

⁶A kiválasztási szabályok az atom és az elektromágneses tér közötti kölcsönhatás perturbatív leírási módjának a következményei. Az itt említett kiválasztási szabályok a legegyszerűbb *dipólközelítés* első rendbeli perturbációjából adódnak. Szimmetriaokok miatt csak bizonyos átmenetek megengedettek, ami matematikailag azt jelenti, hogy ezekben az esetekben nem nulla a perturbáció első rendjében az átmenet valószínűsége. Ez persze nem jelenti azt, hogy ezen szabályok által tiltott átmenetek soha nem következhetnek be, csupán sokkal kisebb lesz az átmenet valószínűsége, nagyban megnövelve az állapot élettartamát. Ezért is nevezzük azon gerjesztett állapotokat, ahol az elsőrendű kiválasztási szabályok tiltják a legerjesztődést, metastabil állapotoknak. Fizikailag a dipólközelítés egy foton kibocsátásaként/elnyelődéseként fogható fel. Mivel a foton spinje 1, az l -re vonatkozó kiválasztási szabályra mint az impulzusmomentum-megmaradás következményére is gondolhatunk. A magasabb rendek ennek megfelelően többfotonos átmeneteknek felelnek meg. Bővebben ld. [28].

⁷Mivel l 0-tól $n - 1$ -ig vehet fel értékeket, és minden l esetén $2l + 1$ számú m érték adódhat, ezért $\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$.

$\approx 4.5 \times 10^{-5}$ eV energiakülönbséget jelez (míg a szintek energiája az alapállapothoz képest ~ 10.2 eV). Megjegyezzük, hogy a fenti, 10.43. képlet a perturbatív számolás eredménye másodrendig, azaz v^2/c^2 rendben. Belátható, hogy az α^2 -ben való sorfejtés ekvivalens a v/c -ben való sorfejtéssel, ahol v az elektron sebessége.⁸ A hidrogénatom energiaszintjei a finomfelhasadást is figyelembe véve a 10.8. ábrán láthatók. A pályaimpulzus-momentum melletti szám a teljes impulzusmomentumot jellemző j kvantumszámot jelöli.



10.8. ábra. A hidrogénatom energiaszintjei figyelembevételével a spin-pálya kölcsönhatásból eredő finomfelhasadást is.

Egy további effektus, az elektron spin-impulzusmomentumának és az *atommag* spin-impulzusmomentumának kölcsönhatása hozza létre az ú.n. *hiperfinom szerkezetet*. Az itt megjelenő energiakülönbségek még kisebbek, mint a finom-

⁸Hidrogénre a fenti kifejezés helytálló, azonban nagyobb töltésű atommag esetén (ahol a Coulomb-kölcsönhatásban e^2 helyett Ze^2 van), már a teljes, Dirac-egyenletből kapott megoldást kell használni. Az eredmény [122, 123]:

$$E_{n,j} = mc^2 \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{(Z\alpha)^2}{n-j-\frac{1}{2} + \sqrt{(j+\frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2}}.$$

$Z = 1$ esetén a fenti kifejezést α^2 -ben másodrendig sorbafejtve megkapható a 10.43. összefüggés (felhasználva a 10.38. egyenletet).

szerkezet esetén. A H atomot tekintve, az elektron és a mag (proton) spinjének párhuzamos és ellentétes beállása $\approx 5.9 \times 10^{-6}$ eV energiakülönbséget eredményez.⁹ További érdekesség, hogy a másodperc SI-definíciója is felhasználja a hiperfinom felhasadást: definíció szerint egy másodperc a 133-as tömegszámú céziumatom (melynek magspinje $7/2$) alapállapotának két hiperfinom (a $\frac{7}{2} + \frac{1}{2} = 4$ és $\frac{7}{2} - \frac{1}{2} = 3$ impulzusmomentummal jelzett) állapota közötti átmenetének 9 192 631 770-szerese.

Kvázi-egyelektronos atomok spektruma

A többelektronos atomok elektronszerkezetének egzakt leírása reménytelen feladat – erre csak közelítő módszerek állnak rendelkezésre. Az első „ötlet” a hidrogénatom egzakt megoldásának felhasználása: elhanyagolva az elektronok közötti kölcsönhatást, a $+Ze$ töltésű atommaggal rendelkező atomra vonatkozó Schrödinger-egyenlet megoldása Z darab, egymástól független hidrogénatom megoldásával lenne ekvivalens. Ez technikailag azt jelentené, hogy a teljes hullámfüggvény az így kapott hullámfüggvények szorzata lenne, a Schrödinger-egyenlet megoldásaként kapott energia ezen energiák összege, az alapállapot pedig az, ahol ez az energia a legkisebb. Az elektronoknak azonban feles spinű részecskék, azaz fermionok, így eleget kell tenniük a *Pauli-elvnek*, amely szerint *az atomban nem lehet két olyan elektron, melyeknek kvantumszámjai, beleértve a spin-quantumszámait is, azonosak*. Emiatt a valódi hullámfüggvényt több szorzat összegeként lehet felírni, ami már tükrözi a fenti antiszimetriát, lásd még a K.15. részt.¹⁰ Ez a módszer azonban túl durva közelítés, hiszen az elektronok egymás közötti kölcsönhatása – csakúgy, mint a Debye-árnyékolás levezetésénél – fontos fizikai jelenségeket okoz. Ezért a Debye-hossznál látottakhoz nagyon hasonlóan fogunk eljárni. Feltesszük, hogy a több elektront tartalmazó atomok hullámfüggvénye megfelelő pontossággal közelíthető úgy, mintha minden elektron a többi részecske által kialakított gömbszimmetrikus térben mozogna egymástól függetlenül. Ez tehát ugyanaz az átlagtér-közelítés, mint amit a 3.1.1. fejezetben láttunk.¹¹ Emiatt a különböző energiaszintek már nem fogják követni a hidrogénatom energiaszintjeit, mégis jelölhetjük a különböző elektronok hullámfüggvényeit a hidrogénnél megszokott módon, hiszen a gömbszimmetria miatt az új, effektív kölcsönhatás (ami figyelembe veszi a mag és a többi elektron hatását) a szög szerinti egyenletet nem befolyásolja, így alkalmazható a Schrödinger-egyenlet K.14. részben látott, változók szerinti szétválasztása.

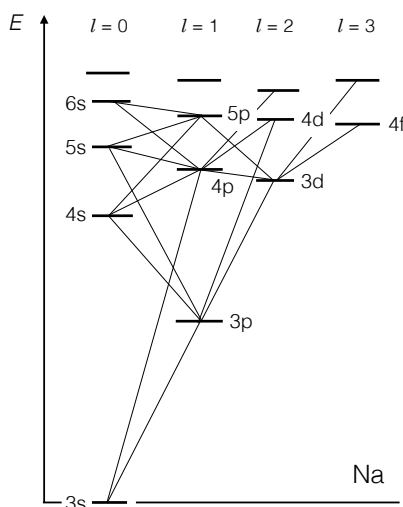
A fentiek illusztrálására példaként vegyünk az alkáli atomokat, melyek egy zárt elektronhéjjal¹² + egy „külső” elektronnal rendelkeznek, ezért tekinthetjük őket „kvázi-egyelektronos” rendszereknek. Tekintsünk pl. egy Na atomot, melynek alapállapota az $1s^2 2s^2 2p^6 3s$ állapot. Itt a kitevő az egyes n és l kvan-

⁹A hidrogénatom ezen két energiaszintje közötti átmenet $\lambda = 21$ cm hullámhosszúságú mikrohullámú sugárzásnak felel meg, aminek nagy jelentősége van asztrofizikában.

¹⁰Ezt *Slater-determinánsnak* nevezik.

¹¹Ebben a kontextusban az átlagtér-elméletet *Hartree(-Fock)*-közelítésnek hívjuk.

¹²Egy elektronhéjat definíció szerint az n főkvantumszámmal jelölünk. Mivel egy n főkvantumszámú állapot $2n^2$ -szeresen degenerált, így ennyi elektron „fér el” az n főkvantumszámú héjon.



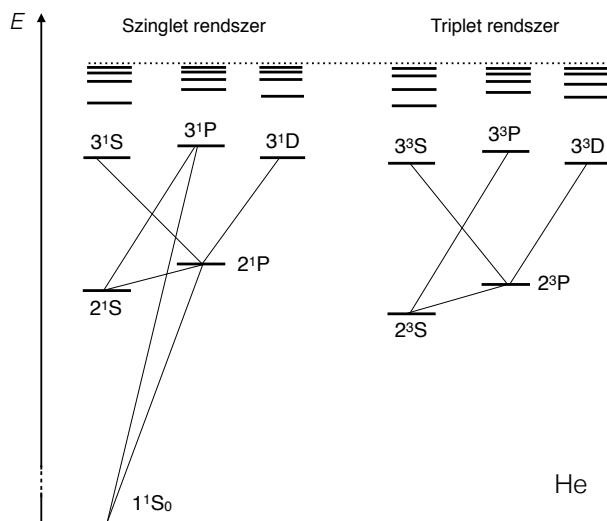
10.9. ábra. A nátriumatom elektronkonfigurációi. Az alkalmazott egyszerűsített jelölésben a megjelölt konfigurációkat a „külső” elektron n és l kvantumszámai azonosítják.

tumszámokkal jelzett konfigurációkban található elektronok számát adja meg, pl. $1s^2$ az $1s$ állapotban 2 (ellentétes spinű) elektron jelenlétét jelzi, $2p^6$ a $2p$ állapotban 6 elektron jelenlétét. Ez utóbbira $l = 1$, vagyis $m = -l, \dots, l$ három értéket vehet fel, és a két lehetséges spinbeállítás miatt a p héjon lévő elektronok száma így 6 lehet. A Na atom 10.9. ábrán bemutatott elektronkonfigurációinak sémája nagy hasonlóságot mutat a H atoméval, de szembeutó különbség, hogy az adott főkvantumszámú, de különböző mellékvantumszámú állapotok energiája itt különböző (pl. $E(4s) \neq E(4p) \neq E(4d)$). Ennek oka az, hogy a zárt elektronhéjon lévő elektronoknak a gerjesztett elektron és az atommag közötti kölcsönhatást leárnyékoló hatása a gerjesztett elektron pályájának (pontosabban a hullámfüggvény által meghatározott térbeli tartózkodási valószínűségének) függvénye. Emiatt – hasonlóan ahhoz, amint azt az árnyékolásnál láttuk a K.4. részben – egy elektron egy leárnyékolott, n -től és l -től függő töltéssel rendelkező atommagot „lát” és annak a terében mozog. Fontos megjegyezni, hogy ez a közelítés a rendszám növekedésével egyre kevésbé fogja követni a kölcsönhatás elhanyagolásakor kapott sémát (azaz amikor az elektronok a legalacsonyabb n főkvantumszámú állapotot növekvő l -értékekkel töltik be). Például Na esetében a $4s$ alhéj korábban töltődik be, mint a $3d$. Ennek oka, hogy az utóbbi esetben a nagy impulzusmomentum miatt az elektron távolabb tartózkodik a magtól, így számára a mag töltése jobban leárnyékolódik, lásd pl. [28].

Megjegyezzük továbbá, hogy nem véletlen az, hogy csak az egy „külső” elektronnal foglalkoztunk, a többi, zárt héjon lévő elektron gerjesztéséről szó sem esett. Ennek oka, hogy a zárt héjon lévő elektronok potenciális energiája általában sokkal nagyobb, mint a külső héjon lévőké, ezért optikai gerjesztés esetén

ezeztől az elektronoktól eltekinthetünk. Más jellegű spektroszkópia esetén azonban, mint pl. a röntgen- vagy az Auger-spektroszkópia, már ezekkel az elektronokkal is foglalkozni kell [28, 121]. A fenti, leegyszerűsített, az egyelektron-állapotok összességével történő leírás a kvantummechanika egyik nagy sikere, hiszen segítségével megérthető a periódusos rendszer felépítése [47], kvantitatív leírásra azonban nem teljesen alkalmas, hiszen nem minden hullámfüggvény áll elő egyrészecske-hullámfüggvények szorzataként. A pontosabb leírás érdekében figyelembe kell venni az elektronok közötti korrelációt, vagyis azt, hogy az elektronok elhelyezkedése egymástól nem független, mint azt az átlagtérelmélet feltételezi [28, 121]. Fontos további teendő azonban – a hidrogénatomnál látott példa mintájára – a relativisztikus effektusok, azaz a finomfelhasadás figyelembevétele a többelektronos atomok esetében is.

Többelektronos atomok spektruma



10.10. ábra. A héliumatom egyszerűsített Grotrian-diagramja. (A jelölések értelmezését a szövegben tárgyaljuk.)

A legegyszerűbb többelektronos rendszer a He atom, melynek alapállapotban két különböző spinű „s” elektronja tölti be a legalacsonyabb, $n = 1$ főkvantumszámú pályát, azaz elektronszerkezete: $1s^2$. A gerjesztett állapotokban az egyik elektron ugyanezen a „pályán” marad (erre az elektronra $n_1 = 1$ és $l_1 = 0$), csak a másik elektron kerül magasabb energiájú ($n_2 > 1$ és $l_2 = 0, \dots, n - 1$) állapotba.

A két elektron jelenléte az eddig tárgyalt eseteknél bonyolultabb energiaszint-rendszer kialakulásához vezet, lásd 10.10. ábra. A legfeltűnőbb különbség, hogy ez két teljesen elkülönülő részből áll, amelyek között nincsenek

átmenetek. A szinglet rendszer állapotait „parahéliumnak”, a triplet rendszer állapotait „ortohéliumnak” is nevezik.

K. 15: Az orto- és parahélium közötti különbség

A két elkülönülő rész léte kvantummechanikai megfontolásokkal magyarázható. A *Pauli-elv* értelmében a két elektronból álló rendszer hullámfüggvénye az elektronok felcserélése esetén előjelet kell, hogy váltson, azaz $\Psi(2,1) = -\Psi(1,2)$. A függetlenrészecske-közelítést alkalmazva (ami az elektronok egymás közötti kölcsönhatását elhanyagolja), a hullámfüggvényt olyan tényezők szorzataként keressük, amik csak az egyes részecskék koordinátáitól függenek. Erre az első ötlet a $\Psi(1,2) = \Psi_1(1)\Psi_2(2)$ alak, ami viszont nem antiszimmetrikus, ellentmondva a Pauli-elvnek. Ez utóbbi követelménynek megfelelő megoldást azáltal kaphatunk, ha figyelembe vesszük, hogy a lehetséges megoldások lineáris szuperpozíciója is megoldás. Ezzel eljuthatunk a

$$\Psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(1)\Psi_2(2) - \Psi_1(2)\Psi_2(1)] \quad (10.44)$$

hullámfüggvényhez, ami már antiszimmetrikus. Ψ mind a térbeli, mind a spin-hullámfüggvényt tartalmazza, vagyis

$$\Psi = \Phi \Xi, \quad (10.45)$$

ami az antiszimmetriát (i) szimmetrikus Φ és antiszimmetrikus Ξ , vagy (ii) antiszimmetrikus Φ és szimmetrikus Ξ esetén biztosítja. Tekintsük a He atom $1s2s$ gerjesztett állapotát, ahol mindkét elektron bármelyik lehetséges spinállapotot felveheti, ugyanis a főkvantumszámukban már különböznek.

Az első (szimmetrikus Φ és antiszimmetrikus Ξ) esetben

$$\begin{aligned} \Phi(1,2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\Phi_1(1)\Phi_2(2) + \Phi_1(2)\Phi_2(1)], \\ \Xi(1,2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)], \end{aligned}$$

ahol α a $\uparrow$ spinállapot, β a $\downarrow$ spinállapot hullámfüggvénye. A második (antiszimmetrikus Φ és szimmetrikus Ξ) esetben

$$\Phi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Phi_1(1)\Phi_2(2) - \Phi_1(2)\Phi_2(1)],$$

amihez $\Xi(1,2)$ -re háromféle (szimmetrikus) megoldás adódik:

$$\begin{aligned} \Xi(1,2) &= \alpha(1)\alpha(2), \\ \Xi(1,2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)], \\ \Xi(1,2) &= \beta(1)\beta(2). \end{aligned}$$

Az első esetben kapott egy megoldás a szinglet állapotnak felel meg, míg a második esetben kapott három megoldás a triplet rendszert jellemzi.

Mint említettük, a H atomhoz hasonlóan a többelektronos atomoknál is foglalkoznunk kell relativisztikus effektusokkal, köztük a spin-pálya csatolással. Attól függően, hogy ez a kölcsönhatás mekkora a többi, az atom leírásánál figyelembe vett kölcsönhatáshoz képest, kétféle csatolási módot különböztetünk meg:

- Az L-S csatolás esetében az egyes elektronok pálya-impulzusmomentumai csatolódnak egymáshoz egy teljes $\mathbf{L} = \sum \mathbf{l}_i$ pálya-impulzusmomentumot eredményezve, illetve az egyes elektronok spin-impulzusmomentumai csatolódnak egymáshoz egy teljes $\mathbf{S} = \sum \mathbf{s}_i$ spin-impulzusmomentumot eredményezve, majd $\mathbf{L}$ és $\mathbf{S}$ csatolódik egymáshoz vektoriálisan a teljes $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ impulzusmomentumot képezve.¹³
- j-j csatolás esetén az egyes elektronok $\mathbf{l}$ pálya és $\mathbf{s}$ spin-impulzusmomentumai csatolódnak a $\mathbf{j}$ eredő impulzusmomentumot képezve, majd az egyes elektronok $\mathbf{j}$ értékei adódnak össze vektoriálisan, a $\mathbf{J} = \sum \mathbf{j}_i$ vektort képezve.

Az L-S csatolás elsődlegesen a könnyebb atomokra jellemző, a nehéz atomokban az egyes elektronok pálya- és spin- impulzusmomentumainak (a rendszámmal) erősödő csatolódása miatt a j-j csatolás lép fel. Ez a két csatolás a két szélső esetet képviseli, sok atom esetében köztes eset valósul meg [28].

Az L-S csatolás

Az alábbiakban az L-S csatolás legfontosabb jellemzőit ismertetjük:

- A teljes pálya-impulzusmomentum az elektronok pálya-impulzusmomentumának összege:

$$\mathbf{L} = \sum \mathbf{l}_i, \quad (10.46)$$

melynek abszolút értékére igaz, hogy $|\mathbf{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$. Egyelektronos atom esetén $L_{(1)} = l_1$, két elektron esetén: $|l_1 - l_2| \leq L_{(2)} \leq l_1 + l_2$, további elektronok jelenlétében (példaként harmadik elektront véve): $|L_{(2)} - l_3| \leq L_{(3)} \leq L_{(2)} + l_3$, ahol $L_{(2)}$ minden lehetséges értékét figyelembe kell venni. További elektronok a séma folytatásával vehetők figyelembe [124]. Az L kvantumszám 0, 1, 2, 3, ... értékeihez tartozó konfigurációkat S, P, D, F...

¹³Ennek fizikai oka, hogy amennyiben a spin-pálya kölcsönhatás perturbációként fogható fel, az $\mathbf{L}$ és $\mathbf{S}$ vektorok külön-külön is megmaradó mennyiségek és ezért kvantumszámaikkal leírható az adott kvantumállapot. Ellenkező esetben ez – az átlagterelméletből adódó gömb-szimmetria miatt – csak az elektronok teljes $\mathbf{j}$ impulzusmomentumainak összegére igaz.

betűkkel jelöljük (hasonlóan az egyelektronos H atom esetéhez, de itt nagy betűket használunk). Optikailag megengedett átmenetekre a

$$\Delta L = 0, \pm 1 \quad (10.47)$$

kiválasztási szabály vonatkozik. $\Delta L = 0$ annak felel meg, hogy két elektron állapota változik egyszerre, ami csak a nehéz elemeknél fordul elő.

- A teljes pálya-impulzusmomentum vektor egy kitüntetett iránya vett vetülete

$$M_L = \sum m_i, \quad (10.48)$$

ahol m_i az l_i adott irányra vett vetülete. M_L lehetséges értékei: $-L \leq M_L \leq L$, ezek száma $2L + 1$.

- A teljes spin-impulzusmomentum:

$$\mathbf{S} = \sum \mathbf{s}_i, \quad (10.49)$$

melynek abszolút értékére igaz, hogy $|\mathbf{S}| = \sqrt{S(S+1)}\hbar$. Egyelektronos atom esetén $S_{(1)} = s_1$, két elektron esetén: $|s_1 - s_2| \leq S_{(2)} \leq s_1 + s_2$, további elektronok jelenlétében (példaként harmadik elektront véve): $|S_{(2)} - s_3| \leq S_{(3)} \leq S_{(2)} + s_3$, ahol $S_{(2)}$ minden lehetséges értékét figyelembe kell venni. További elektronok a séma folytatásával vehetők figyelembe. Dipólátmenetekre a

$$\Delta S = 0 \quad (10.50)$$

szabály vonatkozik, azaz a különböző teljes spin-impulzusmomentumú állapotok közötti átmenetek tiltottak. Ezek alapján érthető, miért nincs átmenet a 10.10. Grotrian-diagramon a szinglet és triplet szintek között.

- A teljes spin-impulzusmomentum vektor egy kitüntetett iránya vett vetülete

$$M_S = \sum m_{s,i}, \quad (10.51)$$

ahol $m_{s,i}$ az s_i adott irányra vett vetülete. M_S lehetséges értékei: $-S \leq M_S \leq S$, ezek száma $2S + 1$. Jegyezzük meg, egy elektronokról lévén szó, $s_i \equiv 1/2$ és $m_{s,i} = \{-1/2, 1/2\}$.

- A teljes impulzusmomentum:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (10.52)$$

amire igaz, hogy $|\mathbf{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$. J lehetséges értékei $|L - S| \leq J \leq L + S$, ezek száma $2S + 1$, ami a *multiplicitás* értéke. A J -re vonatkozó kiválasztási szabály:

$$\Delta J = 0, \pm 1, \quad 0 \nleftrightarrow 0. \quad (10.53)$$

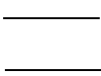
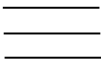
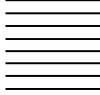
- A teljes impulzusmomentum vektor egy kitüntetett iránya vett vetülete M_J lehetséges értékei: $-J \leq M_J \leq J$, ezek száma $2J + 1$.

Az energiaszintek azonosítására az

$$\boxed{n^{2S+1}L_J} \quad (10.54)$$

jelölés használatos, ahol n a gerjesztett elektronok héjának főkvantumszáma, S , L és J pedig rendre ezen külső elektronok eredő spin-impulzusmomentum, pályá-impulzusmomentum, illetve az eredő belső (össz-impulzusmomentum) fent definiált kvantumszámait.

A fenti jelöléssel kapcsolatban érdemes tisztázni a használt terminológiát! Példaként tekintsük a He atom $1s3p$ konfigurációját! Ez egy gerjesztett állapot, az egyik elektronra $n_1 = 1$ és $l_1 = 0$, a másikra pedig $n_2 = 3$ és $l_2 = 1$. Az eredő pályá-impulzusmomentum kvantumszáma és a multiplicitás, tehát L és S határozzák meg az ú.n. *termeket*. Jelen esetben két elektronunk van, amelyek pályáimpulzus-momentumainak $L = L_{(2)}$ összege $|l_1 - l_2| \leq L_{(2)} \leq l_1 + l_2$ lehet. Az adott konfigurációra a lehetséges érték csak az $L = 1$ lehet, így a termet tradicionálisan P-vel jelöljük. A két elektron teljes $S = S_{(2)}$ spin-impulzusmomentuma $|s_1 - s_2| \leq S_{(2)} \leq s_1 + s_2$, azaz $S = 0$ és 1 lehet. Emiatt a teljes impulzusmomentum, amire $|L - S| \leq J \leq L + S$ érvényes: $S = 0$ esetén $J = 1$, $S = 1$ esetén pedig $J = \{0, 1, 2\}$ lehet. Esetünkben a termék tehát $2S + 1 = \{1, 3\}$ miatt 3^1P és 3^3P lesznek. A J értékeknek megfelelően (a spin - pályá kölcsönhatás miatt) a termék *szintekre* vagy más néven *nívókra* válhatnak szét, itt $3^1P \rightarrow 3^1P_1$, (amikor $S = 0$) és $3^3P \rightarrow 3^1P_0, 3^1P_1, 3^1P_2$ (amikor $S = 1$). Ezek a szintek $2J + 1$ degenerált *állapotot* tartalmaznak, amelyek mágneses tér hatására szétválnak. A példaként választott 1 adott konfiguráció tehát 2 termet, 4 szintet és 12 állapotot tartalmaz.

Elnevezés	Konfiguráció	Term	Szint	Állapot
				
Kölcsönhatás	Nincs e-e kölcsönhatás	e-e kölcsönhatás + elektronok megkülönböztethetetlenek	Spin-pályá kölcsönhatás	Külső mágneses tér
Releváns kvantumszámok	n, l	L, S	J, M_J	J, M_J

10.11. ábra. A szövegben szereplő terminológia magyarázatához.

A különböző felhasadásokért felelős fizikai folyamatokat a 10.11. ábra foglalja össze.

A héliumatom néhány fontos elektronkonfigurációját / atomi szintjét a 10.1. táblázat mutatja. A héliumatom jellegzetességeinek tárgyalását egy, eb-

ben a gázban létrehozott alacsony nyomású elektromos gázkisülés spektrumának bemutatásával zárjuk (10.12. ábra), ami nagyságrendileg ~ 10 intenzív vonalat mutat. Az alkalmazott felbontás nem teszi lehetővé a triplet rendszerben fellépő, egymáshoz igen közeli átmenetek szétválasztását. A $2^3P \rightarrow 2^3S$ „spektrumvonal”, például (lásd 10.10. ábra), valójában 3 igen közeli hullámhosszúságú – a $2^3P_{0,1,2}$ szintektől induló – átmenetből áll, melyek hullámhosszai: 1083.0340 nm, 1083.0250 nm és 1082.9091 nm. A $3^3D \rightarrow 2^3P$ átmenet esetében mind a felső, mind az alsó szint három szintből áll, tehát ezek között elvben 9 átmenet lehetne, ezt a számot viszont 6-ra csökkenti a 10.53. összefüggés szerinti megkötés ΔJ értékére, ami a $J = 1,2,3 \rightarrow 0,1,2$ esetekből a $2 \rightarrow 0$ és a $3 \rightarrow 0,1$ eseteket kizárja. A megengedett vonalak itt is igen keskeny hullámhossztartományban helyezkednek el, 587.5599 nm és 587.5966 nm között.

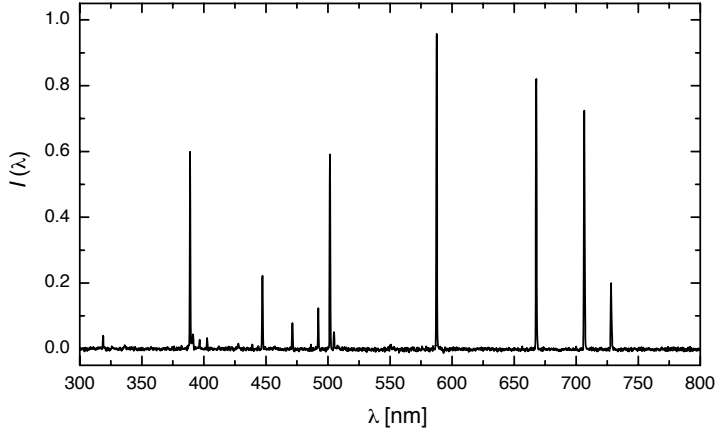
10.1. táblázat. A héliumatom néhány fontos konfigurációja és az ehhez kapcsolódó szintek. n_2 , l_2 és m_{s2} a „gerjesztett” elektron kvantumszámjai. Az alapállapotban maradó elektronra $n_1 = 1$, $l_1 = 0$ és $m_{s1} = -1/2$.

Konfiguráció	n_2	l_2	m_{s2}	L	S	J	Szint
$1s^2$	1	0	$+1/2$	0	0	0	1^1S_0 (alapállapot)
$1s 2s$	2	0	$+1/2$	0	0	0	2^1S_0
			$-1/2$	0	1	1	2^3S_1
$1s 2p$	2	1	$+1/2$	1	0	1	2^1P_1
			$-1/2$	1	1	0,1,2	$2^3P_0, 2^3P_1, 2^3P_2$
$1s 3s$	3	0	$+1/2$	0	0	0	3^1S_0
			$-1/2$	0	1	1	3^3S_1
$1s 3p$	3	1	$+1/2$	1	0	1	3^1P_1
			$-1/2$	1	1	0,1,2	$3^3P_0, 3^3P_1, 3^3P_2$
$1s 3d$	3	2	$+1/2$	2	0	2	3^1D_2
			$-1/2$	2	1	1,2,3	$3^3D_1, 3^3D_2, 3^3D_3$

Hangsúlyozzuk, hogy a termék használata nem csak egy gerjesztett elektron leírására alkalmas; valójában ez ennél általánosabb: a többielektronos, egy héjon egynél több elektronnal is rendelkező atom alap- és gerjesztett állapotainak meghatározása is elvégezhető vele. Ezt az alábbiakban a nitrogénatom esetére mutatjuk meg.

K. 16: A nitrogénatom termjei

A nitrogénatom alapállapotú elektronkonfigurációja $1s^2 2s^2 2p^3$. A termék meghatározásához a legnagyobb főkvantumszámú nem zárt elektronhéj



10.12. ábra. Alacsony nyomású hélium gázkisülés spektruma (az intenzitást relatív egységekben mérve).

elektronjait kell néznünk, ez az $n = 2$ -t jelenti. Mivel a $2s^2$ „alhéj” zárt, erre $L = S = 0$, így elég, ha a $2p$ alhéj 3 elektronjával foglalkozunk (hiszen a $2s^2$ alhéj két elektronja L -hez és S -hez is nullát ad). A p alhéjon az elektronokra $l_1 = l_2 = l_3 = 1$, az m kvantumszám értékei ezekre az elektronokra $m_i = \{-1, 0, 1\}$ lehetnek. A lehetséges spinek miatt ezen értékek közül bármelyiket két elektron veheti fel, így összesen 6 elektron fér el ezen az alhéjon. A helyekből az N atom esetében 3 „foglalt”. Mivel 3 elektronunk van 6 helyre, összesen $\binom{6}{3} = 20$ különböző lehetőségünk van elrendezni az elektronokat.

Három elektron esetén $|l_1 - l_2| \leq L_{(2)} \leq l_1 + l_2 \rightarrow L_{(2)} = \{0, 1, 2\}$ és $l_3 = 1$ miatt a teljes pálya-impulzusmomentum az $L = L_{(3)} = \{0, 1, 2, 3\}$ értékeket vehet fel általános esetben. Mivel az N atom esetén a három elektron egy alhéjon helyezkedik el, ezért az $L = 3$ érték nem valósulhat meg, ugyanis a Pauli-elv miatt csak két elektron lehet egy adott m -mel jellemzett állapotban. Emiatt a maximális érték $L = 2$, ezt akkor érhetjük el, ha két elektron az $m = 1$ vagy $m = -1$ állapotban van, a fennmaradó egy pedig az $m = 0$ állapotban. Ilyen $L = 2$ teljes pálya-impulzusmomentumú állapotok pl.:

$$\underbrace{\uparrow\downarrow}_{m=-1} \underbrace{\uparrow-}_{m=0} \underbrace{--}_{m=+1}, \quad \uparrow\downarrow \downarrow - - - , \quad - - \uparrow - \uparrow\downarrow, \quad \text{stb.},$$

ahol a nyilak az elektron spinjét ($\pm 1/2$) jelölik, „-” pedig azt, hogy az adott helyen nincs elektron, a három lehetőség pedig a lehetséges m értékeknek $\{-1, 0, 1\}$ felel meg. (Az első esetben két elektronra $m = -1$, egy elektronra $m = 0$ és nincs olyan elektron, melyre $m = 1$ lenne.)

Mivel a három elektronból egy párosítatlan, így a teljes spin $S = 1/2$. Mivel $L = 2$, ezért ez a term a 2^2D , a lehetséges szintek pedig emiatt $2^2D_{5/2}$ és $2^2D_{3/2}$ lesznek, ugyanis $S = 1/2$ és J tartománya, mint láttuk, $|L - S| \dots L + S$.

A D term összesen $(2L + 1)(2S + 1) = 10$ állapotot foglal magában, így a maradék 10 állapotot kell még termekbe rendeznünk. Mivel a legnagyobb L értékű termet már megtaláltuk, a következő az $L = 1$, azaz egy P term lesz. Ebben az esetben lehetséges állapotok pl.

$$|\uparrow\downarrow| - - | \uparrow - |, \quad |\uparrow\downarrow| - - | - \downarrow |, \quad |\uparrow - | \uparrow\downarrow | - - |, \text{ stb.}$$

Itt is egy párosítatlan elektron marad, azaz $S = 1/2$. Emiatt ez a term 2^2P lesz, a szintek pedig $2^2P_{1/2}$ és $2^2P_{3/2}$. Ez a P term összesen 6 állapotot foglal magában, így már csak 4 maradt az $L = 0$, azaz S term számára. Ezek azon állapotok, ahol egy-egy elektron van az $m = \pm 1$ állapotban és a harmadik az $m = 0$ állapotban, mégpedig úgy, hogy mindegyikük spinje „egy irányban áll”, pl.

$$|\uparrow - | \uparrow - | \uparrow - |, \text{ stb.,}$$

hiszen ekkor $2L + 1 = 1$ és ezért $2S + 1 = 4$, azaz $S = 3/2$. Ez a term tehát 2^4S , a kapcsolódó szint pedig $2^4S_{3/2}$.

Összefoglalásként tehát a lehetséges szintek: $2^4S_{3/2}$, $2^2P_{3/2}$, $2^2P_{1/2}$, $2^2D_{3/2}$, $2^2D_{5/2}$. Az alapállapot (azaz a legalacsonyabb energiájú állapot, ami a $2^4S_{3/2}$) ezek közül a Hund-szabályok [47] alapján választható ki.

Molekulaspektrumok

A molekulákban az elektronok pozitív töltésű atommagok terében mozognak, miközben egymással kölcsönhatásban állnak. Az utóbbiak, pozitív töltésük miatt taszítják egymást, de a közös elektronburok stabil konfigurációkat eredményezhet. A molekulák leírása az atomokénál természetesen bonyolultabb, így a molekulákra vonatkozó Hamilton-operátor is komplexebb alakot ölt és az emissziós / abszorpciós spektrum is összetettebb szerkezetet mutat, mint ezt látni fogjuk. A molekulafizikával részletesen foglalkozó monográfia pl. [125].

Tekintsünk egy N atommagból és n elektronból álló molekulát. Ekkor a

megfelelő Hamilton-operátor a következő [47, 119]:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= -\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \sum_{\alpha=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \Delta_\alpha + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha,\beta=1 \\ \alpha \neq \beta}}^N \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_\beta|} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^n \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{\alpha=1}^N \sum_{i=1}^n \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha|} \right] \\ &= \hat{\mathcal{H}}_{\text{el,kin}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{mag,kin}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{mag,pot}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{el-el,pot}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{el-mag,pot}}.\end{aligned}\quad (10.55)$$

Itt m az elektronok, M_α pedig az α -adik atommag tömege, $Z_\alpha e$ az α -adik atommag töltése, $\mathbf{r}$ és $\mathbf{R}$ pedig az elektronok és magok koordinátáit jelöli. A kifejezésben szereplő 1. és 2. tagok az elektronok és a magok kinetikusenergia-operátorai. A 3. tag a magok kölcsönhatásából eredő potenciális energia, a 4. tag az elektronok közötti taszító kölcsönhatást, míg az 5. tag az elektronok és a magok közötti vonzó kölcsönhatást írja le.

A magok, nagy tömegük miatt ($\frac{M}{m} \geq \frac{m_{\text{proton}}}{m_{\text{elektron}}} \approx 1836$) lényegesen lassabban mozognak az elektronoknál és az elektronok lényegében pillanatszerűen „alkalmazkodnak” a mag éppen aktuális távolságához. Az elektronok hullámfüggvénye ugyan függ a magok mozgásától, de ez a függés alapvetően a magok *távolságára* korlátozódik, ugyanis a magmozgásból származó kinetikus energia sokkal kisebb az elektronok kinetikus energiájánál. Az erre épülő, az elektronok és a magok mozgását szétválasztó *Born–Oppenheimer-approximáció*, vagy *adiabatikus közelítés* alap gondolata az, hogy a 10.55. összefüggéssel megadott Hamilton-operátor az alábbiak szerint szétválasztható [126]:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{T}}_\alpha, \quad (10.56)$$

ahol $\hat{\mathcal{H}}_0$ a merev molekula Hamilton-operátora ($= \hat{\mathcal{H}}_{\text{el,kin}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{mag,pot}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{el-el,pot}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{el-mag,pot}}$) és $\hat{\mathcal{T}}_\alpha = \hat{\mathcal{H}}_{\text{mag,kin}}$ a magok kinetikusenergia-operátora. A megoldást szorzatalakban keressük, ahol

$$\Psi(\{\mathbf{r}\}; \{\mathbf{R}\}) = \Psi_e(\{\mathbf{r}\}; \{\mathbf{R}\}) \Psi_n(\{\mathbf{R}\}). \quad (10.57)$$

Itt $\Psi_n(\{\mathbf{R}\})$ a magok, $\Psi_e(\{\mathbf{r}\}; \{\mathbf{R}\})$ az elektronok hullámfüggvénye. Itt feltettük, hogy az atommagok hullámfüggvénye csak azok koordinátáitól függ. Természetesen könnyen előfordulhat, hogy általános esetben nem tudunk ilyen megoldást találni. A Born–Oppenheimer-approximáció itt használja ki az elektron és az atommag tömege közötti nagy különbséget. Felírva a Schrödinger-egyenletet a fenti függvényekkel, kapjuk, hogy

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = E_{\text{tot}}\Psi = \hat{\mathcal{H}}_0\Psi + \Psi_e \hat{\mathcal{T}}_\alpha \Psi_n + W, \quad (10.58)$$

ahol

$$W = -\sum_{\alpha=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \left(\frac{\partial \Psi_e}{\partial \mathbf{R}_\alpha} \frac{\partial \Psi_n}{\partial \mathbf{R}_\alpha} + \frac{\partial^2 \Psi_e}{\partial \mathbf{R}_\alpha^2} \Psi_n \right). \quad (10.59)$$

A fenti tag az elektron hullámfüggvényének az atommagok koordinátáitól való függését tartalmazza. Ha azonban az atommagok – nagy tömegük miatt – olyan lassan mozognak, hogy az elektronok mozgásának időskálája alatt az atommagok alig mozognak, W elhanyagolható. Ez Born–Oppenheimer-approximáció fő gondolata. Elhanyagolva W -t, a molekula 10.58. Schrödinger-egyenletében az elektron hullámfüggvényére csak az elektron kinetikusenergia-operátora, illetve a kölcsönhatásnak megfelelő Hamilton-operátor hat, amelyben azonban csak a magok koordinátái szerepelnek, azok deriváltjai nem. Ezért előbb megoldhatjuk az elektronokra vonatkozó Schrödinger-egyenletet:

$$(\hat{H}_{\text{el,kin}} + \hat{H}_{\text{mag,pot}} + \hat{H}_{\text{el-mag,pot}} + \hat{H}_{\text{el-mag,pot}})\Psi_e(\{\mathbf{r}\}; \{\mathbf{R}\}) = E_e(\{\mathbf{R}\})\Psi_e(\{\mathbf{r}\}; \{\mathbf{R}\}), \quad (10.60)$$

ahol a magok koordinátáit paraméterként kezelhetjük, hiszen a fenti differenciálegyenletben csak $\mathbf{r}$ deriváltjai jelennek meg. Megoldva ezt az egyenletet, a magokra vonatkozó Schrödinger egyenlet

$$(\hat{T}_\alpha + E_e(\{\mathbf{R}\}))\Psi_n(\{\mathbf{R}\}) = E_{\text{tot}}\Psi_n(\{\mathbf{R}\}). \quad (10.61)$$

Az atommagok Ψ_n hullámfüggvényét szokás további tagok szorzatára felbontani, melyek a különböző, a molekula mozgása szempontjából lényeges fizikai folyamatoknak felelnek meg: ezek a transláció, a rotáció és a vibráció. Ezek alapján a molekula teljes energiájára felírhatjuk, hogy¹⁴

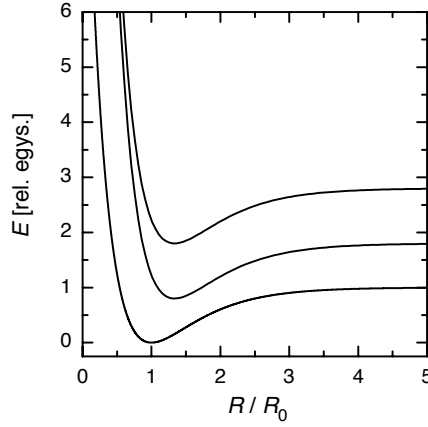
$$E_{\text{tot}} = E_e + E_{\text{vib}} + E_{\text{rot}} + E_{\text{trans}}. \quad (10.62)$$

Itt az elektronokra vonatkozó energiát a 10.61. egyenlet megoldásaként kapott $\{\mathbf{R}\}$ koordinátáknál kell kiértékelni. Ezek alapján a Schrödinger-egyenlet $\Psi_e(\{\mathbf{r}\}; \{\mathbf{R}\})$ -re való megoldásakor az $\{\mathbf{r}\}$ értékek változóként, az $\{\mathbf{R}\}$ értékek pedig állandóként szerepelnek, melyeknek egy releváns tartományára kell az egyenletet megoldani. Ezzel a számítással adódik a merev molekula energiája az $\{\mathbf{R}\}$ magkoordináták függvényében.¹⁵ A továbbiakban – az egyszerűség kedvéért – csak a legegyszerűbb, kétatomos molekulákat tekintjük, továbbá eltekintünk azok translációs energiájától (vagyis feltesszük, hogy a molekula tömegközéppontja áll).

A 10.13. ábra az $E_e(\{\mathbf{R}\})$ energiafüggést („potenciálgörbét”) mutatja egy kétatomos molekula néhány különböző elektronkonfigurációjára. A potenciálgörbétől elvárjuk, hogy az $R \rightarrow \infty$ határesetben visszakapjuk az előző fejezetben vizsgált, tiszta atomi energiaszinteket, hiszen nagy távolságban a két atom nem hathat egymásra.

¹⁴Mint később látni fogjuk, ez a felbontás valójában nem teljesen helytálló, hiszen pl. a molekula forgása hatással van annak rezgésére és fordítva.

¹⁵Ezt a függvényt az ún. *potenciálfelületnek* is nevezik; dimenziója megegyezik a molekula szabadsági fokainak számával. Egy M atomból álló molekula esetében a szabadsági fokok száma $3M - 6$ ($3M$ koordináta, 3 transláció és 3, a tömegközépponthoz rögzített, egymásra merőleges tengely körüli forgatás), lineáris molekulák esetében $3M - 5$ (u.i. az atomok pontszerűsége miatt az atomokat összekötő tengely körül nem lehet forgatni klasszikusan). Így egy kétatomos molekula, pl. N_2 esetében egydimenziós, míg egy H_2O molekula esetében háromdimenziós potenciálfelület adódik. Kétatomos molekuláknál a potenciálfelület egy, a két atommag távolságától függő *potenciálgörbére* redukálódik.



10.13. ábra. Kéttomos *merev* molekula néhány különböző (alap és gerjesztett) elektronállapotának energiája a magok távolságának függvényében. R_0 az alapállapot minimumának helye.

Belátható, hogy az átmenetek energiáinak különbségei a rotációs átmenetekre a legkisebbek, ezt követik a vibrációs, majd az elektronátmenetek, ld. a K.17. részt, illetve a 10.14. (a,b) ábrát.

K. 17: Born–Oppenheimer-approximáció és az átmenetek energiáinak nagyságrendje [47]

Dimenzióanalízis segítségével vizsgáljuk meg, hogyan aránylanak egymáshoz egy molekula rotációs, vibrációs és elektronátmeneteinek energiái! A molekulák elektronátmeneteinek energiái hasonló nagyságrendűek, mint azt az atomoknál, ezért induljunk ki a H atomra kapott energiaértékekből:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\hbar^2 \varepsilon_0^2} \frac{1}{n^2},$$

amiből egy elektronátmenet energiája

$$E_{\text{el}} \sim \frac{e^4 m_e}{\hbar^2 \varepsilon_0^2}. \quad (10.63)$$

A molekula vibrációs átmenete általában a molekulát körülvevő elektronfelhő átrendeződésének hatására alakul ki. Az ezt leíró klasszikus modell egy rugóállandóval jellemezhető (k). Ennek dimenziója $[E]/[L]^2$. Mivel az elektronok mozgásának hatására alakul ki a vibráció, így azt kapjuk, hogy

$$k \sim \frac{e^4 m_e}{\hbar^2 a_0^2 \varepsilon_0^2}, \quad (10.64)$$

ahol

$$a_0 \sim \frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}, \quad (10.65)$$

a Bohr-sugár, m_e az elektron tömege. Az atommagra vonatkozó a 10.61. egyenletben az atommag kinetikusenergia-operátorában egy $\frac{\hbar^2}{M}$ faktor található, ami az atommag tömegétől függ. A vibrációs energia becsléséhez ebből és k -ból kell energia dimenziójú mennyiséget csinálni. Mivel $\frac{\hbar^2}{M} \triangleq \sim \frac{\hbar^2}{M} \frac{1}{L^2} \sim E$, ezért $\frac{\hbar^2}{M}$ dimenziója $[E][L]^2$. Emiatt a vibrációs energia nagyságrendje

$$E_{\text{vib}} \sim \sqrt{\frac{\hbar^2 k}{M}} \sim \frac{e^4 m_e}{\varepsilon_0^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{m_e}{M}}. \quad (10.66)$$

Azt kaptuk, hogy a vibrációs energia $\sqrt{\frac{m_e}{M}}$ -szerese az elektronátmeneteknek megfelelő energiának. Emiatt a vibrációs átmenetek frekvenciája általában az infravörös tartományban található.

Hasonlóan becsülhető a rotációs energia is. A klasszikus modell értelmében ez az energia a molekula tehetetlenségi nyomatékával lesz fordítottan arányos (emlékezzünk a klasszikus mechanikai $E = \frac{L^2}{2\Theta}$ képletre, ahol L az impulzusmomentum, Θ a tehetetlenségi nyomaték). Mivel $L \sim \hbar$, Θ dimenziója pedig $[M][L]^2$, ezért

$$E_{\text{rot}} \sim \frac{\hbar^2}{Ma_0^2} \sim \frac{e^4 m_e}{\varepsilon_0^2 \hbar^2} \frac{m_e}{M}. \quad (10.67)$$

Láthatóan a rotációs energiaátmenetek a legkisebbek, hiszen ezek $\frac{m_e}{M}$ -mel arányosak. Emiatt a rotációs átmenetek frekvenciája a mikrohullámú tartományban van. Látható, hogy ha az elektron és atommag tömegének aránya valóban kicsi, a különböző energiaskálák szétválnak (azaz távol vannak egymástól). Az energiaskálák szétválasztásának ténye a Born–Oppenheimer-approximáció validitásának a fő alapja.

Kötött elektronkonfiguráció esetén az energia (a „potenciálfüggvény”) jól közelíthető a *Morse-potenciállal* (pl. [118]):

$$E_M(R) = D[1 - e^{-\alpha_M(R-R_0)}]^2, \quad (10.68)$$

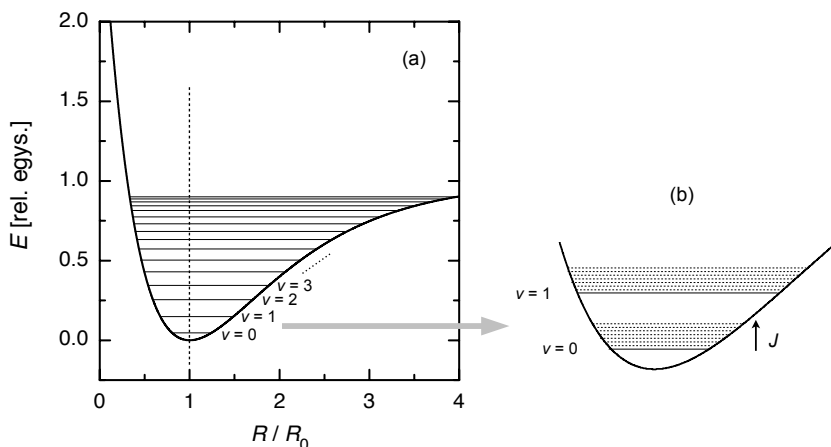
ahol R_0 a minimum helye, D a disszociációs energia és α_M egy állandó. Az $E_M(R)$ görbe a minimum környezetében egy parabolával közelíthető, $E_M(R) \cong D\alpha_M^2(R - R_0)^2$ alakban. Ebben a közelítésben a rendszer mint harmonikus oszcillátor kezelhető, melynek sajátfrekvenciája a tömegek és a rendszerben ható erők függvénye.

A kvantummechanikai leírás egyenlő távolságú diszkrét energiaszintekhez és a *nullponti energia* megjelenéséhez vezet (lásd 10.14.(a) ábra), hiszen ez nem más, mint a kvantummechanikai harmonikus oszcillátor megoldása, melynek

energiája:

$$E_{\text{vib}} = (v + 1/2)h\nu_c. \quad (10.69)$$

Itt v a *vibrációs kvantumszám*, ν_c pedig az oszcillátor klasszikus sajátfrekvenciája. A legalacsonyabb vibrációs állapothoz is véges energia, $E_0 = \frac{1}{2}h\nu_c$ tartozik. A minimumtól távolodva a harmonikus oszcillátor közelítés már nem alkalmazható, az egymást követő szintek energiakülönbsége eltérő lesz; növekvő v kvantumszámmal csökken az anharmonicitás miatt, hiszen csak az egyensúlyi helytől való kis kitérések esetén volt helytálló a harmonikus közelítés. Adott vibrációs állapotban a magok távolsága az időben periodikusan változik, a rezgés amplitúdója növekszik a v vibrációs kvantumszám függvényében. A disszociációs küszöb alatt véges számú vibrációs állapot található.¹⁶



10.14. ábra. (a) Kétatomos molekula alap elektronkonfigurációjának energiája a normalizált magtávolság függvényében (vastag vonal) és az ehhez az elektronállapothoz tartozó vibrációs állapotok. (b) Az egyes vibrációs állapotokra épülő rotációs szintek.

A vibrációs átmenetek létrejöttének (klasszikus) oka kvalitatívan a következő: a külső elektromágneses tér, ami az esetleges vibrációs átmenetet okozza, adott frekvenciával rezeg, kölcsönhatva a molekulával. Ez könnyen bekövetkezhet, ha pl. a molekula két végén nem ugyanakkora a töltés, mert ekkor a molekula dipólként közelíthető. Valójában azonban nem ilyen egyszerű a helyzet, hiszen a molekula két atomjának elektronjai nemtriviális módon oszlanak el a molekula körül. Ezért megkülönböztetünk *permanens dipólmomentumot*, azaz amikor a molekula két atomja körül tényleg különbözik a töltés (ez általában különböző atomokból álló molekulára igaz), valamint *dinamikus dipólmomentumot*, amely a molekula atomjai közötti távolság változására indukálódó dipólmomentum. Vegyük azonban figyelembe, hogy a vibrációs átmenetek hullámhossza (

¹⁶Megjegyezzük, hogy a Morse-potenciál – a harmonikus oszcillátorral egyetemben – azon kevés potenciálfajtához tartozik, amire a Schrödinger-egyenlet egzaktul megoldható, ld. [35].

$\sim 10^3 - 10^5$ nm) sokkal nagyobb, mint a molekula mérete (~ 1 nm), ezért a molekula csak egy átlagos E teret lát. Amennyiben a molekulának van dinamikus dipólmomentuma, a külső elektromos tér hatására megváltozik az atomok közötti távolság és így a dipólusmomentum is, melynek hatására a dipólmomentum időfüggővé válik és képes lesz a külső elektromágneses sugárzás felvételére. Ez különböző atomokból álló molekulákra (pl. CO, HCl) igaz, míg azonos atomokból állóra nem, mint pl. az O_2 és N_2 , amiknek nincs dipólmomentumuk (sem permanens, sem dinamikus). Megjegyezzük, hogy a *tisztán vibrációs* átmenetekre – harmonikus közelítésben – a $\Delta v = \pm 1$ kiválasztási szabály teljesül (anharmonikus esetben a magasabb átmenetek is megengedettek) [120]. Mint azt a K.17. részben is említettük, a vibrációs átmenetek az infravörös tartományban találhatók.¹⁷

A vibrációs gerjesztések mellett kisebb energiájú rotációs átmenetek is létrejöhetnek a molekulák esetében. Ezt klasszikusan kétatomos molekula esetén a két tömegpontot merev rúddal összekötő test, a *rotátor* forgásával modellezzhetjük. Ennek megoldása kvantumosan is lehetséges, melynek eredménye [47]

$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2\Theta} J(J+1), \quad (10.70)$$

ahol J a *rotációs kvantumszám* ($J \in \mathbb{N}$), $\Theta = \mu R^2$ a molekula tehetetlenségi nyomatéka, ahol μ a redukált tömeg, R pedig az atomok közötti távolság. A valóságban a magok távolsága növekszik a gyorsabb forgómozgás hatására, a növekvő centrifugális erő miatt, hiszen valójában a molekula atomjait nem merev rudak kötik össze. Ez E_{rot} értékére egy negatív korrekciót ad, hiszen növekvő távolság esetén nő a tehetetlenségi nyomaték és így csökken az energia. Tisztán rotációs átmenet csak akkor következhet be, ha a molekula rendelkezik permanens dipólmomentummal. Ehhez a vibrációs átmeneteknél már felhasznált klasszikus képet alkalmazhatjuk: mivel itt is csak egy $\bar{E}$ átlagos teret érez a molekula, ha van $\mathbf{p}$ dipólmomentuma, akkor a molekulára $\mathbf{M} = \mathbf{p} \times \bar{\mathbf{E}}$ forgatónyomaték fog hatni, ezzel forgást előidézve. A *tisztán rotációs* átmenetekre vonatkozó kiválasztási szabály a $\Delta J = \pm 1$.

A molekula forgásának következtében, a 10.14.(a) ábrán vázolt „vibrációs szerkezet” mellett egy további finomabb szerkezet is kialakul (lásd 10.14.(b) ábra). Az ugyanazon elektronkonfigurációhoz és ugyanazon vibrációs állapothoz tartozó „szomszédos” rotációs állapotok közötti átmenetek, a kis

¹⁷A ténynek, miszerint az atmoszférát 99.93 %-ban azonos atomokból álló kétatomos molekulák alkotják (N_2 , O_2 , H_2), melyeknek nincs dinamikus dipólmomentumuk, fontos következménye van a Föld felszínének hőmérsékletére és így a földi életre. A Napból a Földre érkező látható és UV-sugárzást elnyelve a Föld felszíne infravörös sugárzást bocsát ki magából. Mivel az atmoszférát alkotó említett molekulák nem IR-aktívak, hiszen a dinamikus dipólmomentum hiányában nem képesek elnyelni az infravörös sugárzást, ez a sugárzás nagy része elhagyja a Földet az atmoszférán keresztül. A maradék 0.07 % azonban – melyeket üvegházgázoknak hívunk – olyan molekulák, melyek különböző atomokból állnak és így van dinamikus dipólmomentumuk, mint pl. a CO_2 , NO_x , H_2O . Ezen gázok elnyelik a földfelszínről érkező IR-sugárzást és visszasugározzák a Földre azt, ezzel növelve a Föld hőmérsékletét. Ezt nevezzük üvegházhatásnak. Érdekes, hogy az atmoszféra mindössze 0.07%-a járul csak hozzá a globális felmelegedéshez.

energiakülönbségek miatt tipikusan a mikrohullámú ($\sim$ GHz – THz) tartományba esnek, tehát az optikai spektroszkópia szempontjából közvetlenül nem relevánsak. Megjegyezzük azonban, hogy a tény, miszerint az atmoszférában található molekulák (N_2 , O_2 , H_2) azonos atomokból állnak és ezért nincs dipólmomentumuk, hozzájárul ahhoz, hogy a műholdas/telefonos kommunikációhoz használt átviteli jel, ami mikrohullámú tartományban működik, veszteség nélkül hatoljon át az atmoszférán, hiszen dipólmomentum hiányában a tisztán rotációs átmenet tiltott.

Mindeddig csak vagy tisztán rotációs átmenetekről beszéltünk, vagy csak tisztán vibrációs átmenetekről. Valójában azonban vibrációs átmeneteket a rotációs átmenetekkel együtt kell tekintenünk, mégpedig úgy, hogy a két folyamat kölcsönhat, hiszen pl. egy kétatomos molekula tiszta vibrációja esetén változik az atomok közötti távolság, ami változtatja a tehetetlenségi nyomatékot és így a rotációs energiát. Ezt a fajta „hibrid” átmenetet *rotációs-vibrációs átmenetnek* nevezzük. Hangsúlyozzuk, hogy egyelőre nem beszélünk elektronátmenetekről, így a most általunk tekintett rotovibrációs átmenetek ugyanazon Morse-potenciálban találhatók. Amíg a lineáris tartományban vagyunk, addig ugyanazon kiválasztási szabályok érvényesek itt is, mint külön-külön a vibrációs és rotációs esetekben vagyis $\Delta v = \pm 1$ és $\Delta J = \pm 1$. A $\Delta J = +1$ -gyel jellemzett átmeneteket R-vonalaknak, $\Delta J = -1$ -hez tartozó átmeneteket P-vonalaknak nevezzük [118]. Ezen megengedett vonalak összessége alkotja a vibrációs sávot. Mivel optikai spektroszkópiával foglalkozunk, ezen átmenetek számunkra érdekelnek. Azért említjük meg őket, mert fontos szerepük lesz az olyan rotovibrációs átmeneteknek, amelyek különböző elektronkonfigurációk között mennek végbe.

Ehhez azonban először – az atomoknál látottak példáján – beszélnünk kell a molekulák elektronátmeneteiről. Emlékezzünk vissza, hogyan jártunk el az atomok esetében: a hidrogénatom egzaktul megoldható problémáját felhasználva első lépésként elhanyagoltuk az elektronok közötti kölcsönhatást, így jutottunk el az elektronkonfigurációhoz, ahol a hidrogénatom alap- és gerjesztett állapotaiba helyeztük el az elektronokat. Ezután figyelembe vettük a kölcsönhatást is – az átlagtérelmélet keretein belül –, így az elektronok mozgását úgy tudtuk leírni, mint egy effektív potenciálban való független mozgást, ahol a mag tere a többi elektron jelenléte miatt leárnyékolódik. Kiderült, hogy olyan héjon, ahol egynél több elektron van, a konfiguráció nem határozza meg egyértelműen az állapotot, így bevezettük a termeket, amelyeket az elektronok össz-pályaimpulzusmomentuma (L) és spinje (S) segítségével tudunk megadni. Amennyiben a relativisztikus korrekciókat is figyelembe vettük, különös tekintettel a spin-pálya csatolást, úgy az atomi szintekig jutottunk, ahol a termék a teljes J impulzusmomentumuk szerint hasadtak fel.

A molekulák esetén is megpróbálhatunk hasonlóan eljárni. Sajnos – a komplexebb felépítés miatt – nem reménykedhetünk egzakt megoldásokban. Ez alól kivétel a H_2^+ hidrogénmolekula-ion, amely – a Born–Oppenheimer-approximáció keretein belül – egzaktul megoldható (közelítő Schrödinger-egyenlete szétválasztható elliptikus koordináta-rendszerben) [127]. Általános esetben más jellegű közelítésekhez kell folyamodnunk. Az egyik ötlet alpja az, hogy mivel az $R \rightarrow \infty$

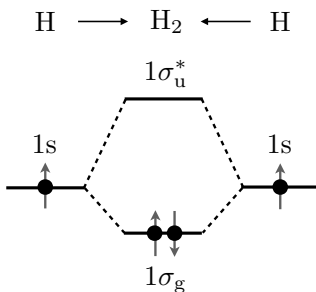
határesetben egy molekula atomjainak energiaszintjei vissza kell, hogy adják az egyes atomok energiaszintjeit, megpróbálhatjuk a molekula elektronjainak lehetséges állapotait (amit *molekulapályáknak* is nevezünk) az atomoknál meghatározható elektronállapotok lineáris kombinációjaként keresni. Ezt a módszert LCAO-módszernek hívják.¹⁸ Emlékezzünk azonban vissza, hogy az atomok esetében az elektronkonfigurációnál használt kvantumszámok a gömbszimmetria következményei voltak. A molekulák esetében ez már nem alkalmazható, így az esetlegesen meghatározott molekulapályákhoz megfelelő kvantumszámokat kell keresni, amik a molekula szimmetriáit tükrözik.

A kétatomos molekulák esetében a helyzet viszonylag egyszerű: ugyan nincs gömbszimmetria, a hengersizimmetria viszont megmarad, hiszen a két atomot összekötő tengely körül elforgatva az egész molekulát, az nem változik meg. Emiatt az egyes elektronok l pályaimpulzus-momentumainak összege helyett csak azok a molekula tengelyére vett vetülete (λ) lesz megmaradó mennyiség és így alkalmas kvantumszám. Ezt az atomoknál megszokott $l = 0, 1, 2, \dots$ számoknak megfelelő $s, p, d, \dots$ jelölések analógiájára a $\lambda = 0, 1, 2, \dots$ számoknak megfelelő $\sigma, \pi, \delta, \dots$ görög betűket fogjuk alkalmazni. Az azonos atomokból álló molekulák esetében egy további szimmetria is jelen van, az ún. *paritás*, azaz a molekula tömegközéppontjára való tükrözés. Mivel a mérhető mennyiség csak a hullámfüggvény abszolútérték-négyzete, $|\Psi|^2$, így erre a szimmetriára a hullámfüggvény vagy nem változik, vagy önmaga mínusz egyszeresébe megy át, azaz $\Psi(\{-\mathbf{r}\}) \rightarrow \pm\Psi(\{\mathbf{r}\})$ Ennek megfelelően a megfelelő molekulapálya, ha nincs előjelváltás erre a tükrözésre, kap egy g jelzőt a német „gerade”, azaz páros szónak megfelelően, illetve előjelváltás esetén egy u jelzőt a német „ungerade”, azaz páratlan szó alapján. Ez a paritászimmetria nem azonos atomokból álló molekulák esetén nincs jelen.

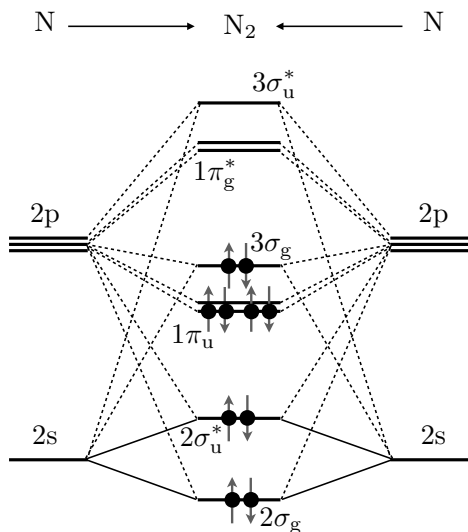
A fentiek ismeretében elkezdhetjük vizsgálni a molekulákat, kezdve a legegyszerűbb esettel, a H_2 molekulával. A két hidrogénatomnak egy-egy $1s$ állapotban lévő elektronja van, ezekből kell lineárkombinációkat alkotni. Mivel a két s -pálya impulzusmomentumainak összege 0, ezért az új molekulapálya σ lesz. Attól függően azonban, hogy az s -állapothoz tartozó hullámfüggvények összegét vagy különbségét vesszük, két különböző molekulapályát kapunk: az összegnél a hullámfüggvény értéke végig pozitív és ez középpontos tükrözésre nem változik, ezért „ g ” jelzést kap, míg a különbség esetén a tükrözés mínusz egyszeresébe viszi a molekulát és ezért ez „ u ” típusú lesz. Összeg esetén a két atom közötti régióban az elektron megtalálási valószínűsége nagy, míg különbség esetén ez a valószínűség kicsi. Emiatt az előbbit *kötő* molekulapályának, míg az utóbbit *nemkötő* molekulapályának nevezzük. A nemkötő pálya energiája magasabban van, mint a kötőé, ráadásul a kötő pálya energiája alacsonyabban van, mint a két atom energiaszintjei külön-külön, lásd a 10.15. ábrát.

A nemkötő pályákat egy további csillaggal jelöljük. Emiatt a két molekulapálya az $1\sigma_g$, amely kötőpálya, illetve az $1\sigma_u^*$, amely nemkötő molekulapálya. Az energiák meghatározása (amelyek valójában a megfelelő potenciálgörbék meghatározását jelentik) csak numerikus módszerekkel lehetséges. Ha azonban ez

¹⁸Linear Combination of Atomic Orbitals

10.15. ábra. A H_2 molekulapályái és azok betöltése.

megtörtént, a molekula elektronkonfigurációja az atomokhoz hasonlóan határozható meg: az elektronok a Pauli-elv és a Hund-szabályok figyelembevételével a legalacsonyabb energiájú állapotokat egymás után töltik fel. Mint említettük, a molekulapályák energiáit csak numerikusan tudjuk megadni, így az azok közötti energiaviszonyokra nincs fizikai képünk. Több elektronnal rendelkező atomokból álló molekulák esetében a molekulapályák és azok sorrendje meglehetősen bonyolult lehet. A továbbiakban példaként a N_2 molekulát fogjuk tekinteni. Ennek molekulapályái és az alapállapot elektronkonfigurációja a 10.16. ábrán látható.

10.16. ábra. Az N_2 molekulapályái és azok betöltése az alapállapotban.

A molekulapályák energetikai sorrendje láthatóan nem követ semmilyen könnyen érthető mintázatot. Az elektronkonfiguráción túlmenően szükségünk van a molekulatermek bevezetésére, hiszen az elektronkonfiguráció – az elektro-

nok közötti kölcsönhatás figyelembevétele esetén – nem határozza meg egyértelműen a molekula állapotát. A molekulák esetében a jó kvantumszámok a teljes spin, S , illetve (az L helyett) az impulzusmomentumok összegének a molekula tengelyére vett vetülete lesz, amit a teljes analógia szellemében Λ -val jelölünk, és a $\Lambda = 0, 1, 2, \dots$ számokat $\Sigma, \Pi, \Delta, \dots$ nagy görög betűknek feleltetjük meg. Hátra van még a középpontos tükrözést leíró jelölés is (u/g), illetve még egy szimmetria, amelyről még nem szóltunk: azon síkra vett tükrözés, amely sík tartalmazza a molekulát összekötő tengelyt. Ezt egy további $\pm$ jelöléssel illetjük, erről azonban nem fogunk részletesebben szólni, mert a továbbiak szempontjából nem fontos, és csak Σ termek esetében fordul elő. Részletekért ld. [121]. Összefoglalva tehát egy molekula termjeit az alábbi módon jelöljük:

$$\boxed{2S+1 \Lambda_{g/u}^{(\pm)}} \quad (10.71)$$

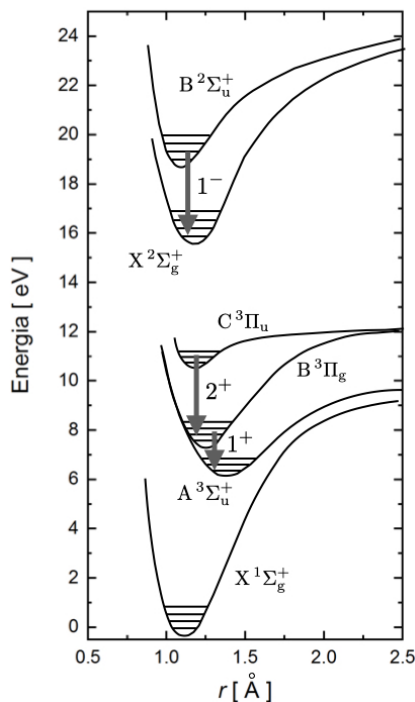
Példaként, a hidrogénmolekula alapállapotának elektronkonfigurációja $(1\sigma_g)^2$, ahol $\lambda = 0$, így ezek összege is 0, illetve az összspin is 0. Mivel mindkét elektron g szimmetriájú, ezért a közös állapot is g szimmetriájú lesz, így végeredményben a hidrogénatom alapállapotú termje $1\Sigma_g^+$. A termszimbólumokat gyakran kiegészítik kezdőbetűkkel, amik az egymáshoz képesti energiakülönbségeket hivatott tükrözni. Az alapállapot általában X előtagot kap, emiatt a hidrogénmolekula alapállapota $X1\Sigma_g^+$, a többi gerjesztett állapot növekvő energiával latin betűket kap előtagként (ami sajnálatos módon nem szisztematikus a különböző molekulák esetén, a tudományterület hagyományai miatt). Gyakran csak ezeket a latin betűket használják és nem írják ki a termszimbólumokat.

K. 18: A nitrogénmolekula és nitrogénmolekula-ion termjei

A 10.16. ábra alapján meghatározhatjuk a nitrogénmolekula alapállapotú termjeit. Az N_2 molekula alapállapotában a külső zárt héj elektronkonfigurációja $(3\sigma_g)^2$. Emiatt $\Lambda = 0$, és $S = 0$, illetve mindkét elektronpálya g típusú, így az alapállapotú term $X1\Sigma_g^+$ lesz. A 10.17. alapján a semleges nitrogénmolekula első három gerjesztett állapottal fogunk foglalkozni. Az első gerjesztett állapotban az egyik $1\pi_u$ elektron az $1\pi_g^*$ állapotba kerül. Ekkor a nem zárt héjon lévő elektronjaink konfigurációja $(1\pi_u)^1(1\pi_g^*)^1$. Mindkét elektronra $\lambda = 1$. Érdemes megjegyezni, hogy – az atomoknál látottaknál ellentétben – a π -pálya csak a $\lambda = \pm 1$ értékeket veheti fel, a $\lambda = 0$ értéket nem, mert az a σ -pályához tartozik. Ez ellentétben áll az atomoknál látottaknál, ahol p -pályára $m = \{-1, 0, 1\}$ volt. Ennek oka, hogy a π -pályához csak azok a p -pályák adnak járulékot, amikre $m = \pm 1$ [121]. Emiatt esetünkben $\Lambda = \{2, 0\}$. A két párosítatlan elektronra $S = \{0, 1\}$, továbbá mivel egyik pályája u , a másiké g szimmetriájú, így az új term szimmetriája u lesz [121]. Emiatt a lehetséges termek Σ_u, Δ_u , szinglet és triplet esetén is. Ebből a legalacsonyabb

energiaszint az $A^3\Sigma_u^+$.

A következő lehetséges gerjesztett állapot az, amikor a $3\sigma_g$ molekulapályáról kerül fel egy elektron a $1\pi_g^*$ pályára. Ekkor a nyílt héjak konfigurációja $(3\sigma_g)^1(1\pi_g^*)^1$. A lehetséges Λ -érték 1. Mivel mindkettő elektron pályájának szimmetriája g, az eredmény is g lesz. Végezetül a két elektron miatt $S = 0,1$ lehet. Emiatt ez a term egy Π_g , szinglet és triplet esetén. Az alacsonyabb energiájú a triplet, és ez a term az ábrán látható $B^3\Pi_g$.



10.17. ábra. A nitrogénmolekula és nitrogénmolekula-ion potenciálgörbéi néhány fontos term esetén. Az 1^+ és 2^+ átmenetek az N_2 molekula optikai emissziós spektrumában a hagyományos elnevezés szerint az első pozitív és a második pozitív sávrendszert jelölik, 1^- pedig az N_2^+ molekuláris ion első negatív sávrendszerét. Ezek az átmenetek a közeli ultraibolya és a látható tartományba esnek. A molekulának számos további termje és ezek közötti átmenete van, amelyeket itt nem tüntettünk fel (részletekért lásd [38]).

A következő gerjesztett állapotban egy $2\sigma_u^*$ elektron felkerül az $1\pi_g^*$ szintre. Ekkor a konfigurációnk $(2\sigma_u^*)^1(1\pi_g^*)^1$, így $\Lambda = 1$ és $S = 0,1$, valamint az állapot u lesz. Ez a Π_u termhez vezet szinglet és triplet állapot esetén

is. Az alacsonyabb energiájú ismét a triplet, így megtaláltuk az ábrán látható $C^3\Pi_u$ termet is. A kiválasztási szabályok miatt csak a triplet termék között lehet átmenet, azok nem gerjesztődhetnek le az alapállapotba.

Hasonlóan járhatunk el a nitrogénmolekula-ion esetében is. Itt egy elektron hiányzik a $3\sigma_g$ molekulapályáról, ezért az alapállapot $X^2\Sigma_g^+$. A következő gerjesztett állapot létrejöhet úgy, hogy egy $1\pi_u$ elektron felgerjesztődik a $3\sigma_g$ pályára. Ez az $A^2\Pi_u$ termet eredményezi (ami nem szerepel az ábrán). A következő gerjesztett állapotnál az egyik $2\sigma_u^*$ elektron felkerül a $3\sigma_g$ pályára. Ekkor a nyílt héj a $(2\sigma_u^*)^1$ lesz, emiatt ez a term a $B^2\Sigma_u^+$ lesz, ami az ábrán is látható.

A kétatomos molekulák elektronátmenetei közötti kiválasztási szabályok a következők [121]:

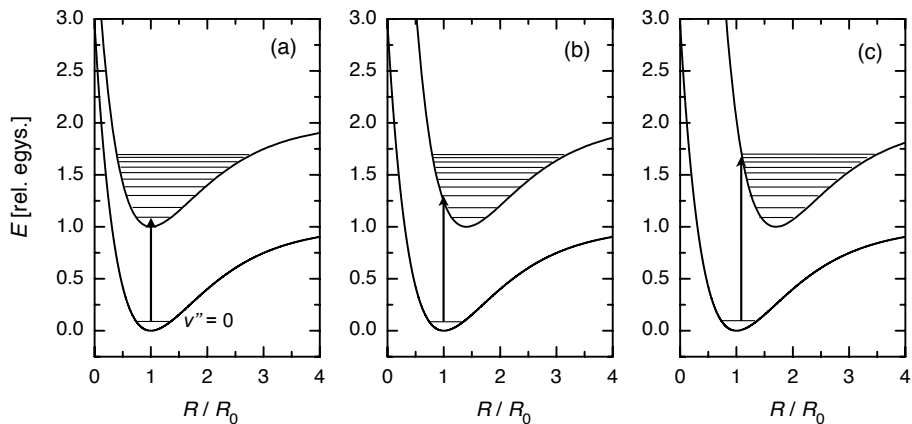
$$\Delta\Lambda = 0, \pm 1, \quad \Delta S = 0, \quad u \leftrightarrow g, \quad (10.72)$$

ahol a $\Delta\Lambda = 0$ a $\Sigma \rightarrow \Sigma$ átmenetekre vonatkozik. Ezek alapján egy érdekesség: az O_2 molekula alapállapotú termje $X^3\Sigma_g^-$, első két gerjesztett állapota pedig $a^1\Delta_g$ és $b^1\Sigma_g^+$. Mivel mindkét esetben változik a multiplicitás, ezért nem lehet átmenet – a szokásos dipólközelítésben – az alapállapot és az első két gerjesztett állapot között. Ha ez nem lenne így, az Napból érkező látható fény gerjesztené az oxigénmolekulákat, amik így elnyelnék a sugárzás megfelelő tartományait.

Az atomoknál látott gondolatmenetet követve szót kell ejtenünk a különböző relativisztikus effektusokról, különös tekintettel a spinszatelési mechanizmusokról. Molekulák esetében nem csak spin-pálya csatolás van, hanem az atomok spinjei a molekula teljes impulzusmomentumához (amit a J kvantumszámmal jelöltünk) is csatolódhatnak. Attól függően, hogy a különböző kölcsönhatási tagok egymáshoz képest milyen nagyságrendűek, és így mit tekinthetünk perturbációnak – az atomoknál látott LS- és jj-csatoláshoz hasonlóan – különböző csatolási eseteket különböztetünk meg, amiket *Hund-féle csatolási eseteknek* nevezünk. Összesen négyfélét különböztetünk meg, amiket a , b , c és d -vel jelölünk. Ezek részletes tárgyalása túlmege a fejezet keretein, részletekért ld. [35, 119].

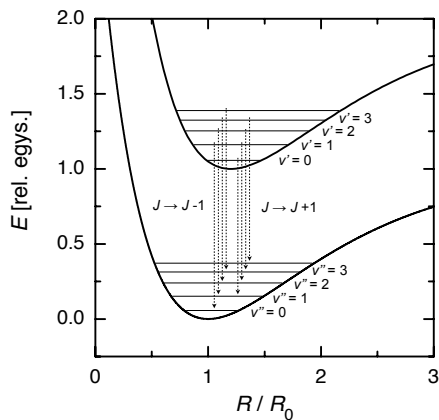
Most, hogy megismerkedtünk a kétatomos molekulák elektronátmeneteinek leírás módjával, térjünk vissza az elektronsávok közötti rotovibrációs átmenetek vizsgálatához.

Az elektronátmenetekhez tartozó vibrációs sávok struktúráját az ún. *Franck–Condon-faktorok* határozzák meg, amelyek a két elektronállapot vibrációs állapotaihoz tartozó hullámfüggvények átfedésétől függenek [119]. Klasszikus képet használva azt mondhatjuk, hogy a foton abszorpciója, vagy emissziója a magok rezgésének időskálájához képest sokkal gyorsabban megy végbe. Ez szemléletesen arra vezet, hogy a potenciálgörbék közötti átmenetek „függőlegesek” lesznek (hiszen az elektronátmenet ideje alatt az atommagnak és így az $\mathbf{R}$ koordinátáknak „nincs elég ideje” megváltozni). A 10.18. ábra az alap elektronállapot $v'' = 0$ vibrációs állapotából történő fotonabszorpciót mutatja három olyan különböző esetre, amikor a gerjesztett elektronállapothoz tartozó potenciálgörbe $R_{\min}$ minimuma különböző mértékben tér el az alapállapot mi-



10.18. ábra. A Franck–Condon-elv illusztrálása.

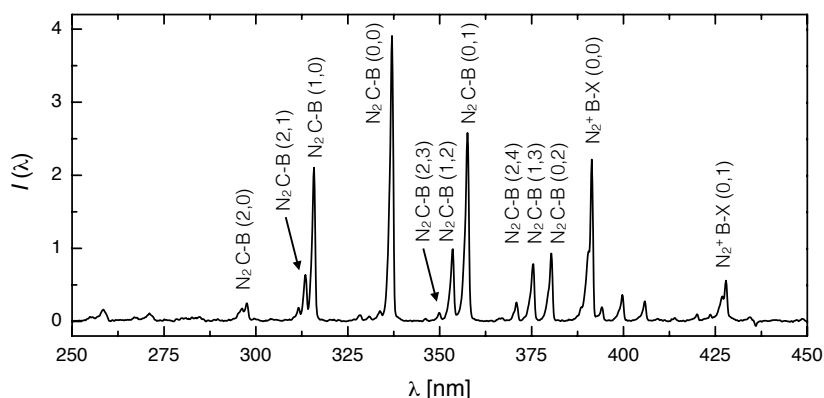
nimumának R_0 helyétől. Amennyiben ez az eltérés kicsi (10.18.(a) ábra), úgy az abszorpció nagy valószínűséggel a $v' = 0$ állapothoz vezet. Növekvő $R_{\min}$ nagyobb vibrációs kvantumszámú állapotokhoz vezet (10.18.(b),(c) ábrák).



10.19. ábra. Kéttomos molekula két különböző elektronkonfigurációjához tartozó potenciálgörbék és az azokhoz tartozó vibrációs / rotációs állapotok közötti átmenetek.

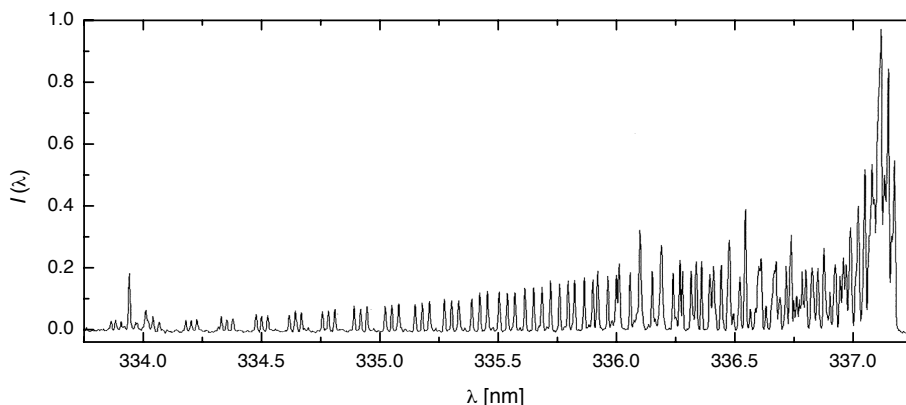
Megjegyezzük, hogy a különböző elektronsávok közötti vibrációs átmenetekre nincs kiválasztási szabály. Ezen vonalak intenzitásának arányát a megfelelő Frank–Condon-faktorok határozzák meg. A rotációs átmenetekre azonban továbbra is lesznek kiválasztási szabályok, mégpedig $\Delta J = 0, \pm 1$. Ezt a 10.19. ábra szemlélteti. Az elektronsávok közötti rotovibrációs átmenetokről bővebben ld. pl. [119, 120].

A 10.20. ábra példaként, semleges és ionizált nitrogén molekulák sugárzási spektrumát mutatja, egy levegőben létrehozott egyenfeszültségű gázkisülésben (alacsony hőmérsékletű plazmában). A spektrumban megjelenő vibrációs sávok az N_2 molekula C és B elektronkonfigurációjú állapotai és a N_2^+ molekula B és X elektronállapotai közötti, különböző (az ábrán jelölt) $v' \rightarrow v''$ vibrációs átmeneteihez tartoznak. A 10.21. ábra a N_2 molekula C–B elektronátmenetéhez tartozó $v' = 0 \rightarrow v'' = 0$ vibrációs sávját mutatja lényegesen nagyobb felbontással, ahol már jól megfigyelhetők a rotációs állapotok közötti átmenetnek megfelelő vonalak.



10.20. ábra. Levegőben keltett gázkisülés (kis felbontású) spektruma az ultraibolya – kék hullámhossztartományban. A spektrum nagyrészt a N_2 molekula C–B átmenetének és a N_2^+ molekula B–X átmenetének vibrációs sávjaiból áll. A zárójelben lévő számok a kiinduló (v') és a végállapot (v'') vibrációs kvantumszámjai.

Az atomok és a molekulák különböző energiájú állapotainak populációját a gerjesztési és ütközési viszonyok határozzák meg. Gázkisülésekben az elsődleges populáló folyamat az elektronok ütközése a gáztomokkal, illetve molekulákkal. Az egyes gerjesztett állapotokban lévő részecskék egymással és a háttérgáz atomjaival is ütközhetnek, és kis energiakülönbségek esetén a populációkat ezek az ütközések is meghatározhatják. A populációk között így, bizonyos feltételek mellett lokális termodinamikai egyensúly (LTE) alakulhat ki. Ennek teljesülése esetén a spektrumvonalak egyes csoportjainak intenzitása Boltzmann-eloszlás szerint változik, így ennek mérésével következtetni lehet a megfelelő hőmérsékletre. Alacsony hőmérsékletű plazmákban az elektronhőmérséklet tipikusan nem ér el olyan értékeket, hogy az egyes elektronkonfigurációk egymással egyensúlyba kerülhessenek. A vibrációs szintek között azonban már kialakulhat, a „vibrációs hőmérséklettel” jellemezhető egyensúlyi eloszlás, a rotációs szintek között pedig ez a jellemző eset. Az utóbbihoz tartozó „rotációs hőmérséklet” tipikusan jól közelíti a gázhőmérsékletet, így a molekulásávok rotációs szerkezetének mérésével lehetőség adódik a gázhőmérséklet „beavatkozásmentes”, kizárólag a kibocsá-



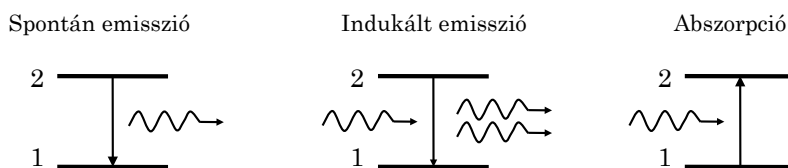
10.21. ábra. N_2 molekula C–B elektronátmenete (0,0) vibrációs sávjának rotációs szerkezete (nagy felbontású, 2 m fókusztávolságú Carl Zeiss PGS-2 spektrométerrel mérve).

tott fény spektrumának mérésére alapuló meghatározására. Erre természetesen csak molekulákat (is) tartalmazó háttérgáz esetén van lehetőség.

Végül megjegyezzük, hogy a spektroszkópiai gyakorlatban – elsősorban történeti okok miatt – gyakran nem a hullámhossz (λ), hanem az ún. hullámszám ($\bar{\nu} = 1/\lambda$) függvényében ábrázolják a spektrumvonalakat. A tradicionális mértékegység ekkor cm^{-1} . Ezt a hullámszámot ne keverjük össze a fizika bármely más részében használt hullámszámmal, melynek definíciója $k = 2\pi/\lambda$.

10.2.2. A fénykibocsátás és fényelnyelés atomi folyamatai

Az eddigiekben megismerkedtünk az atomok és molekulák energiaszint-rendszereinek alapjaival és az egyes állapotok közötti átmenetekkel, amelyek „irányától” függően fénykibocsátás, vagy fényelnyelés mehet végbe. Az alábbiakban bevezetünk néhány mennyiséget, amelyek ezekkel a folyamatokkal kapcsolatosak. Az említett (spontán) fénykibocsátási és elnyelési folyamatokat kiegészítjük egy harmadik folyamattal, az indukált emisszióval (lásd 10.22. ábra).



10.22. ábra. A három fénykibocsátási és elnyelési folyamat.

Mint már említettük, ha az atom, vagy molekula egy kötött elektronja egy

magasabb E_2 energiájú „2”-es állapotból egy alacsonyabb E_1 energiájú „1”-es állapotba kerül, eközben egy

$$\nu_0 = (E_2 - E_1)/h \quad (10.73)$$

energiájú foton keletkezik (h a Planck állandó). Ez az átmenet spontán módon következik be, a folyamat sebessége (a 2. szinten lévő atomok sűrűségének időegység alatti megváltozása) az alábbi módon adható meg [28]:

$$\left. \frac{dn_2}{dt} \right|_{2 \rightarrow 1} = -A_{21}n_2, \quad (10.74)$$

ahol A_{21} az *átmeneti valószínűség*, más néven a spontán emisszió *Einstein-együtthatója*. Amennyiben a 2. állapotból csak az 1. állapotba mehet át a rendszer (pl. ha az 1. állapot az alapállapot, a 2. állapot a legalacsonyabb gerjesztett állapot, melyről sugárzás lehetséges), akkor a 2. állapot spontán *élettartama*:

$$\tau = \frac{1}{A_{21}}. \quad (10.75)$$

Ha a rendszer több különböző alacsonyabb energiájú állapotba is legerjesztődhet, akkor az 2. szint élettartama:

$$\tau = \frac{1}{\sum_j A_{2j}}. \quad (10.76)$$

A spontán emisszió mellett fotonok kibocsátását sugárzási tér is eredményezheti. Ez esetben *indukált emisszióról* beszélünk, melynek sebessége:

$$\left. \frac{dn_2}{dt} \right|_{2 \rightarrow 1} = -B_{21}w_\nu n_2, \quad (10.77)$$

ahol w_ν a sugárzási tér energiasűrűsége. Az ellenkező folyamatban, *abszorpció* során a rendszer elnyeli a fotont, ezzel (magasabban) gerjesztett állapotba kerül. A folyamat sebessége:

$$\left. \frac{dn_1}{dt} \right|_{1 \rightarrow 2} = -B_{12}w_\nu n_1. \quad (10.78)$$

B_{21} és B_{12} az indukált emisszióra és az abszorpcióra vonatkozó Einstein-féle együtthatók, amelyekre fennáll, hogy

$$B_{21} = B_{12} \quad (10.79)$$

és

$$A_{21} = \frac{8\pi h\nu_{21}^3}{c^3} B_{21}, \quad (10.80)$$

ahol az egyenletek adott hőmérsékletű termikus egyensúlyt feltételeznek (azaz ekkor w_ν , a sugárzási tér energiasűrűsége a feketetest-sugárzásnak felel meg. A teljes levezetést pl. [47] tárgyalja. Ezt a modellt Einstein 1917-ben alkotta meg. Azóta számos finomításon esett át, az alapgondolatok azonban változatlanok. A

fent említett referenciában részletesen, egyrészt időfüggő perturbációs számítás-sal, másrészt a kvantált elektromágneses tér figyelembevételével is levezetik ezt az eredményt. Ez utóbbi megközelítés a *kvantumelektrodinamika* (QED), amely-be azonban a könyv keretein belül nincs lehetőségünk betekinteni, részletekért ld. pl. [123].

10.2.3. A spektrumvonalak alakja, vonalkiszélesedési mechanizmusok

Az eddigiekben felvázolt kép alapján arra következtethetünk, hogy az atomok és molekulák energiaszintjei közötti átmenetek tökéletesen monokromatikus sugárzás kibocsátását eredményezik, illetve elnyelődni is csak az átmenetnek tökéletesen megfelelő hullámhosszú sugárzás tud. A valóságban – mint azt a következőkben látni fogjuk – különböző *vonalkiszélesedési mechanizmusok* miatt a spektrumvonalak valójában véges szélességűek, alakjuk egy $\mathcal{L}(\lambda)$ *vonalprofil* függvénnyel adható meg (mely célszerűen $\int \mathcal{L}(\lambda) d\lambda = 1$ szerint normált). A különböző fizikai mechanizmusok alapvetően kétféle vonalprofil kialakulásához vezetnek, melyek a

– *Lorentz-profil*:

$$\mathcal{L}_L(\lambda) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta\lambda_L/2}{(\lambda - \lambda_0)^2 + (\Delta\lambda_L/2)^2}, \quad (10.81)$$

és a

– *Gauss-profil*:

$$\mathcal{L}_G(\lambda) = \sqrt{\frac{4 \ln 2}{\pi}} \frac{1}{\Delta\lambda_G} \exp \left[-4 \ln 2 \left(\frac{\lambda - \lambda_0}{\Delta\lambda_G} \right)^2 \right]. \quad (10.82)$$

$\Delta\lambda_L$, illetve $\Delta\lambda_G$ a kétféle görbe félértékszélessége, λ_0 (mindkét esetben) a központi hullámhossz, ahol a profiloknak maximumuk van. Mint a továbbiakban látni fogjuk, az atomi energiaszintek véges élettartama és a sugárzó atomokat perturbáló többi atom hatása Lorentz-profil kialakulását eredményezi. A egyes sugárzó atomok mozgásából származó, *Doppler-effektus* miatti hullámhossz eltolódás Gauss-profilhoz vezet.¹⁹ Amennyiben mindkét profil hozzájárul az eredő vonal alakjának kialakításához, akkor azt a fenti két függvény *Voigt-profil* néven ismert konvolúciója adja meg:

$$\mathcal{L}_V(\lambda) = \mathcal{L}_L(\lambda) * \mathcal{L}_G(\lambda) = \frac{1}{\Delta\lambda_G} \sqrt{\frac{4 \ln 2}{\pi}} V(X, Y), \quad (10.83)$$

ahol a *Voigt-függvény*:

$$V(X, Y) = \frac{Y}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{Y^2 + (X - t)^2} dt, \quad X = \frac{\lambda - \lambda_0}{\Delta\lambda_G} 2\sqrt{\ln 2}, \quad Y = \frac{\Delta\lambda_L}{\Delta\lambda_G} \sqrt{\ln 2}.$$

¹⁹Itt atomokról beszélünk, de az elmondottak természetesen molekulák esetén is érvényesek.

Természetes vonalszélesség

A természetes vonalszélesség bevezetéséhez alapvetően két megközelítést szoktak használni. Az egyik alapja az, hogy a gerjesztett állapotban lévő atom (spontán) sugárzása klasszikus módon egy csillapított oszcillátorként értelmezhető (pl. [28, 128]), a másik, hogy a *Heisenberg-féle határozatlansági reláció* értelmében a gerjesztett energiaszintek véges időtartama miatt azokhoz véges frekvenciakiszélesedés rendelhető (pl. [28, 129]). Mindkét jelenség véges szélességű spektrummal rendelkező sugárzáshoz vezet.

Az alábbiakban az első megközelítést követjük: az atom gerjesztett elektronját egy klasszikus harmonikus oszcillátorral modellezzük. Az oszcillátort leíró egyenlet:

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = 0, \quad (10.84)$$

ahol a γ csillapítási tényező a kisugárzott energia miatt jelenik meg, ω_0 pedig a visszatérítő erő és a tömeg függvényeként adódó sajátfrekvencia. Az egyenlet (itt nem részletezett) megoldásából adódó ω frekvencia valamivel alacsonyabb a csillapítatlan esethez tartozó ω_0 frekvenciánál, de a gyakorlatban fontos kis csillapítási tényezők mellett ez az elhangelés elhanyagolható és a megoldás az

$$x(t) = x_0 e^{-\frac{\gamma}{2}t} \cos \omega_0 t \quad (10.85)$$

alakot ölti, ahol $x_0 = x(t=0)$ az amplitúdó kezdeti értéke (feltételezve, hogy $\dot{x}(t=0) = 0$). Az oszcillátor ω_0 sajátfrekvenciája megfelel az $E_i \rightarrow E_j$ atomi átmenet $\omega_{ij} = (E_i - E_j)/\hbar$ frekvenciájának.

Az amplitúdó Fourier-transzformáltja (a konstansoktól eltekintve):

$$A(\omega) = \int_0^\infty e^{-\frac{\gamma}{2}t} \cos \omega_0 t e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{i(\omega - \omega_0) + \gamma/2} + \frac{1}{i(\omega + \omega_0) + \gamma/2} \right]. \quad (10.86)$$

A rezonanciafrekvencia közelében a fenti összefüggésben szereplő második tag elhanyagolható, ami alapján az vonalintenzitást megadó $\mathcal{L}(\omega) \propto A(\omega)A^*(\omega)$ függvény (ami már eleget tesz az $\int \mathcal{L}(\lambda) d\lambda = 1$ normálásnak), Lorentz-alakot mutat:

$$\mathcal{L}(\omega) = \frac{\gamma/2\pi}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2}. \quad (10.87)$$

A görbe félértékszélessége $\mathcal{L}_L(\Delta\omega_L/2) = 1/2$ alapján:

$$\Delta\omega_L = \gamma, \quad (10.88)$$

amivel a vonalprofil

$$\mathcal{L}(\omega) = \frac{\Delta\omega_L/2\pi}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Delta\omega_L/2)^2} \quad (10.89)$$

alakba is írható. Az eddig használt γ csillapítási tényező a valóságban a gerjesztett atomi szint élettartamával hozható kapcsolatba, ami a vonalszélességre az

$$\Delta\omega_L = \frac{1}{\tau} \quad (10.90)$$

alakra vezet.²⁰

A természetes kiszélesedés nagyságrendjének érzékeltetésére tekintsük a H atom $2p \rightarrow 1s$ átmenetét (10.7. ábra). Mivel az $1s$ állapot az alapállapot, ezért a 10.90. összefüggésben τ a $2p$ állapot élettartama, ami 1.6 ns. Ezzel $\Delta\omega_L = 6.25 \times 10^8$ rad/s, illetve, frekvenciában $\Delta\nu_L \cong 1 \times 10^8$ Hz. $\Delta\lambda = |(\lambda^2/c)\Delta\nu|$ alapján $\Delta\lambda \cong 5 \times 10^{-6}$ nm, illetve a relatív szélesség $\Delta\lambda/\lambda \cong 4 \times 10^{-8}$ (ui. $\lambda = 121.5$ nm).

Megjegyezzük, hogy a gerjesztett atomok más atomokkal való ütközései szintén spektrumvonal-kiszélesedéshez vezetnek, az ütközések perturbáló hatása miatt. Ez az effektus, mely szintén Lorentz-profil kialakulásához vezet, nagyobb nyomások esetén jelentőssé válhat. Amennyiben mind a természetes kiszélesedés, mind az ütközési kiszélesedés szerepet játszik a vonalprofil kialakításában, az eredő vonalalak Lorentz-típusú lesz, melynek félértékszélessége megegyezik a két hatásból származó félértékszélességek összegével. A természetes és az ütközési mechanizmusok a spektrumvonalak *homogén kiszélesedését* okozzák, ugyanis minden atomra ugyanolyan módon hatnak.

Megemlítjük még, hogy amennyiben a gerjesztett atomok perturbációját nem más semleges atomok, hanem elektronok, vagy ionok okozzák, akkor *Stark-kiszélesedésről* beszélünk. Ennek az effektusnak a részletes leírása megtalálható egyéb, specializált monográfiákban, pl. [129].

Doppler-kiszélesedés

Amennyiben a fotont kisugárzó atom mozog, ez a sugárzás frekvenciájának a nyugvó sugárzó esetéhez képesti megváltozásához vezet. Nemrelativisztikus sebességek tartományára szorítkozva, a kisugárzott foton ω körfrekvenciája

$$\frac{\omega - \omega_0}{\omega_0} = \frac{\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{v}}{c}, \quad (10.91)$$

ahol ω_0 az átmenet körfrekvenciája, $\mathbf{v}$ a sugárzó sebességvektora, $\hat{\mathbf{e}}$ pedig a kibocsátott foton terjedésének irányába mutató egységvektor. Az utóbbit vegyük most x -irányúnak, ekkor $\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{v} = v_x$. A sugárzók sokasága esetében a vonalprofil az

$$\mathcal{L}_D(\omega)d\omega = f(v_x)dv_x \quad (10.92)$$

összefüggés határozza meg, ahol $f(v_x)$ a sugárzók v_x sebességének eloszlásfüggvénye, ami alapesetben Maxwell-Boltzmann alakot követ,

$$f(v_x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \exp\left[-\frac{mv_x^2}{2k_B T}\right]. \quad (10.93)$$

Ebből a vonalprofil:

$$\mathcal{L}_D(\omega) = \frac{c}{\omega_0} f\left(c \frac{\omega - \omega_0}{\omega_0}\right) = A \exp\left[-\frac{mc^2(\omega - \omega_0)^2}{2k_B T \omega_0^2}\right], \quad (10.94)$$

²⁰A jelenség határozatlansági elvre alapuló tárgyalása ugyanerre a vonalprofilra vezet, ebben viszont az átmenethez kapcsolódó mindkét állapot élettartama megjelenik, ugyanis ezekből a véges élettartamokból mindkét állapotra véges energiabizonytalanság adódik, ami együttesen vezet az átmenet kiszélesedéséhez.

ami láthatóan egy Gauss-függvény (A egy állandó).

A félértékszélesség az $\mathcal{L}_D(\Delta\omega_D/2) = 1/2$ összefüggésből:

$$\Delta\omega_D = \omega_0 \sqrt{8 \ln 2 \frac{k_B T}{mc^2}}. \quad (10.95)$$

Példaként ugyancsak a H atom ($m = 1.67 \times 10^{-27}$ kg) $2p \rightarrow 1s$ átmenetét tekintve, $T = 300$ K hőmérsékletet feltételezve $\Delta\omega_D = 1.9 \times 10^{11}$ rad/s, illetve, frekvenciában $\Delta\nu_D \cong 3.05 \times 10^{10}$ Hz és hullámhosszban: $\Delta\lambda \cong 1.5 \times 10^{-3}$ nm, $\Delta\lambda/\lambda \cong 1.24 \times 10^{-5}$.

A Doppler-effektus *inhomogén kiszélesedést* eredményez, ugyanis az egyébként egyforma sugárzó atomok az egyedi sebességük alapján járulnak hozzá a kiszélesedéshez.

10.2.4. A spektrumvonalak intenzitása:

Ütközési-sugárzási modellek

A plazmák sugárzási spektrumának jellegzetességeit az ütközési, emissziós / abszorpciós és vonalkiszélesedési mechanizmusok együttesen alakítják ki. Ezeket már mind érintettük az előző fejezetekben. A spektrumok szintetizálását (azaz a spektrumot alkotó vonalak intenzitásának meghatározását) célzó modelleket *ütközési-sugárzásos modelleknek* nevezzük (pl. [130]), ezek alapjaiba itt csak egy rövid bevezetést adunk.

A spektrumvonalak intenzitásának analíziséhez tekintsük az atomi energiaszintek egy egyszerű sémáját (ld. 10.23. ábra), ahol nem vesszük figyelembe a felhasadási mechanizmusokat és csak néhány atomi szintet ábrázolunk. Feltételezzük továbbá, hogy a plazma homogén és a gerjesztett szinteken lévő atomok diffúziója elhanyagolható, vagyis modellünk „0-dimenziós”. Az ábrán folytonos vonalak a sugárzásos átmeneteket jelölik, a pontozott vonalak pedig az elektron-ütközéses folyamatokat.

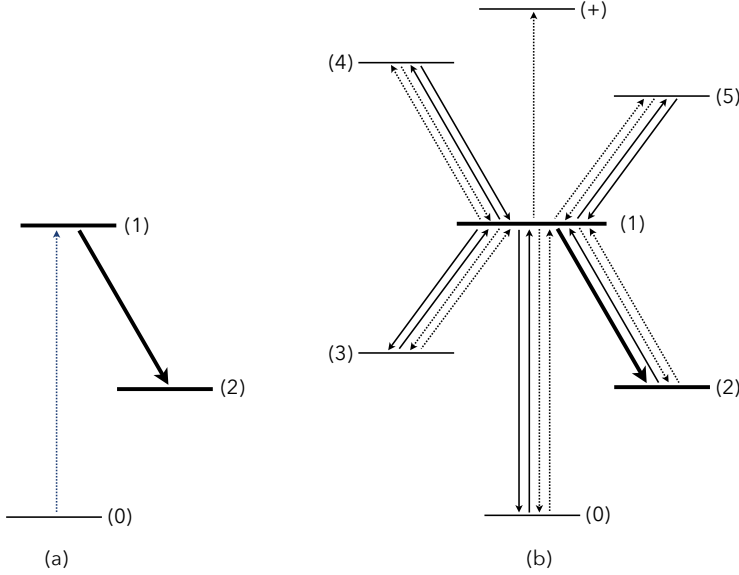
Koncentráljunk az ábrán vastag fekete nyíllal jelölt $(1) \rightarrow (2)$ emissziós spektrumvonalra. Először tekintsük az ábra (a) részén vázolt legegyszerűbb esetet: feltételezzük, hogy az (1) szint csak a (0) alapállapotból populálódik elektron-ütközéssel és csak a (2) szint felé „ürül” spontán emisszióval. Az (1) szint n_1 populációjára – kihasználva azt a feltételezésünket, hogy diffúzió elhanyagolható – az alábbi mérlegegyenletet írhatjuk fel:

$$\frac{dn_1}{dt} = k_{0 \rightarrow 1} n_e n_0 - A_{2 \rightarrow 1} n_1, \quad (10.96)$$

ahol n_e és n_0 a gerjesztési reakcióban résztvevő részecskék (az elektronok és a gázatombok) sűrűségei, illetve

$$k_{0 \rightarrow 1} = \sqrt{\frac{2}{m_e}} \int \sigma_{0 \rightarrow 1}(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (10.97)$$

az elektron-ütközéses gerjesztési folyamat sebességi állandója. Itt $\sigma_{0 \rightarrow 1}$ a megfelelő gerjesztési hatáskeresztmetszet, $f(\varepsilon)$ az elektronenergia-eloszlás függvény,



10.23. ábra. A spektrumvonalak intenzitásának elemzéséhez.

továbbá $A_{2 \rightarrow 1}$ az adott sugárzásos átmenetre jellemző Einstein-együttható (ld. 10.2.2. fejezet). A spektrumvonal intenzitása arányos lesz a térfogategységből időegység alatt kibocsátott fotonok számával, ami pont a 10.96. egyenlet jobb oldalán megjelenő utolsó tag és stacionárius esetben ($f(\varepsilon)$ ismeretében) kiszámítható, mint

$$I_{2 \rightarrow 1} = A_{2 \rightarrow 1} n_1 = k_{0 \rightarrow 1} n_e n_0. \quad (10.98)$$

Amennyiben a (2) szint populációja jelentőssé válik, az $(1) \rightarrow (2)$ sugárzás egy része abszorbeálódhat, növelve az (1) szint populációját. Ezt a gyakorlatban egy, az abszorpció hatását figyelembe vevő együtthatóval („escape factor”, η) veszük figyelembe, mellyel a 10.98. egyenlet az alábbira módosul:

$$I_{2 \rightarrow 1} = \eta_{1 \rightarrow i} A_{2 \rightarrow 1} n_1. \quad (10.99)$$

Ha az abszorpció elhanyagolható, akkor $\eta \rightarrow 1$ (és visszkapjuk a 10.98. egyenletet), erős önabszorpciónál viszont $\eta \approx 0$ és az (1) szintről kibocsátott fotonok nagy része újra abszorbeálódik.²¹

A vonalintenzitások kiszámításakor a helyzet a valóságban a fent vázoltnál általában lényegesen bonyolultabb, ugyanis, mint a 10.23. ábra (b) része mutatja, az adott spektrumvonalhoz tartozó szintek nem izolálhatók a teljes rendszerből. Így az (1) szint populációját az alapállapotból származó elektronütközéses gerjesztés mellett több folyamat is befolyásolja: (i) a más, magasabb szintekről

²¹Példaként megemlítjük, hogy egy, a Nap magjából kiinduló foton az önabszorpció és az elektronokkal történő rugalmas ütközések miatt átlagosan több tízezer év alatt éri csak el a Nap felszínét [78].

érkező „kaskád” sugárzás, (ii) a „más” szintekre (azaz nem a (2) szintre) induló emisszió, (iii) a más szintekre vezető elektronütközéses folyamatok, (iv) a más szintekről ide vezető elektronütközéses gerjesztési folyamatok, valamint az esetleges (v) elektronütközéses ionizáció ((1)→(+)) és (vi) gerjesztett állapotban lévő atomok közötti ütközés során fellépő ionizáció („pooling” folyamat). Ilyen körülmények között az (1) szintre vonatkozó mérlegegyenlet:

$$\begin{aligned} \frac{dn_1}{dt} = & \sum_i k_{i \rightarrow 1} n_e n_i - \sum_i k_{1 \rightarrow i} n_e n_1 - k_{1 \rightarrow +} n_e n_1 - \sum_i k_{p,1,i} n_1 n_i \\ & + \sum_i \eta_{i \rightarrow 1} A_{i \rightarrow 1} n_i - \sum_i \eta_{1 \rightarrow i} A_{1 \rightarrow i} n_1. \end{aligned} \quad (10.100)$$

Itt az első és a második tag az (1) szintet populáló és depopuláló elektronütközéses folyamatoknak felel meg, a harmadik tag az (1) szintről történő elektronütközéses ionizációt, a negyedik tag pedig a (1) és az (i) szinteken lévő részecskék ütközéséből eredő ionizációt (melynek sebessége együtthatója $k_{p,1,i}$). Az ötödik és a hatodik tagok a populáló (kaskád) sugárzásos átmeneteknek és az (1) szintről induló spontán emissziós folyamatoknak felelnek meg.

Az, hogy ezen folyamatok közül melyek játszanak fontos szerepet, függ az egyes szintek populációjától, a sugárzás erősségétől, az elektronok sűrűségétől és energiájának eloszlásától, valamint az ütközési hatáskeresztmetszetektől.

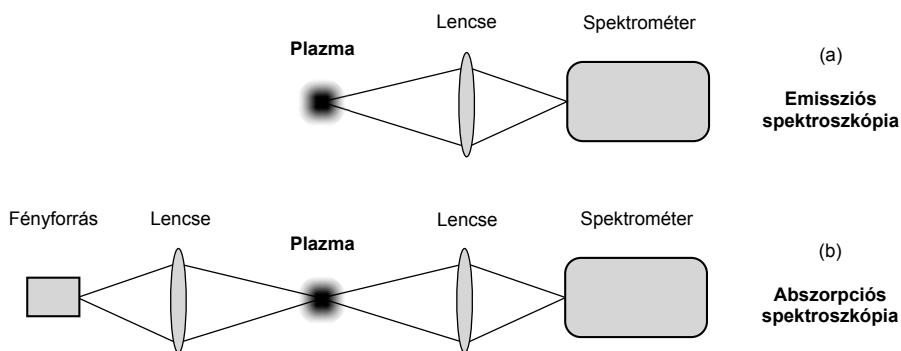
A gerjesztett szintek populációinak és a sugárzásos átmenetek erősségeinek kiszámításához az összes releváns gerjesztett szintre vonatkozó egyenletből álló differenciálegyenlet-rendszert kell megoldani. A valós esetekben a spektrum modellezése, szintetizálása nehéz feladat, ugyanis többnyire nagy számú atomi szintet kell figyelembe venni és általában jelentős a modellek bemenő adatainak bizonytalansága (gondoljunk pl. arra, hogy elektronütközéses gerjesztés / legerjesztés minden szint-pár között lehetséges).

A sugárzásos-ütközési modellek tehát a plazma paraméterei és a kisugárzott fény jellemzői (intenzitás, spektrális összetétel) között teremtenek kapcsolatot. Amennyiben egy megbízható modellel ez a kapcsolat feltérképezhető, akkor spektroszkópai mérésekből lehet következtetni a plazma paramétereire. Ez az sugárzásos-ütközési modellek egyik legfontosabb alkalmazása.

10.2.5. Spektroszkópiai berendezések és alapvető mérési módszerek

A spektrumok, azaz a sugárzás összetételének mérésére szolgáló műszereket *spektrométereknek* nevezzük. Működési elvük nagyban függ a vizsgálni kívánt hullámhossztartománytól, a továbbiakban csak az optikai tartománnyal („optikai spektroszkópiával”) foglalkozunk, ezen belül is főként a látható fény $\lambda \sim 380 \text{ nm} \dots 760 \text{ nm}$ hullámhossztartományával. Az optikai tartományban végzett mérésekkel információt nyerhetünk a plazmákat alkotó részecskék sűrűségéről, a gerjesztési és ionizációs viszonyokról, a plazmák összetételéről, hőmérsékletéről, a bennük jelenlévő elektromos / mágneses térről.

A spektroszkópai módszerek legalapvetőbb fajtája az *emissziós spektroszkópia*, ami a forrás (plazma) által *kibocsátott fény* analízisén alapul. A kibocsátott fény spektrális jellegzetességeit elsősorban maguk a sugárzók (atomok, ill. molekulák) határozzák meg. Az atomok diszkrét energiaszintjei közötti elektronátmenetek jól meghatározott, az atom típusára jellemző spektrumvonalak kibocsátását eredményezik. Molekulák esetében – mint láttuk – az egyes elektronállapotok mellett a molekula rezgési és forgási állapota is szerepet játszik a spektrum kialakításában. Legtöbb esetben az elektronátmenetekre „rakódó” rezgési és forgási szerkezet jellegzetes *molekulasávok* kialakulásához vezet (lásd pl. 10.20. és 10.21. ábrák), melyek megfigyelésével és értelmezésével a sugárzó molekulák típusa azonosítható. A spektrumban megjelenő, kötött állapotok között kialakuló sávok megfelelően nagy felbontású mérés segítségével számos vonalra bonthatók.



10.24. ábra. A két alapvető optikai spektroszkópai módszer elve: (a) emissziós spektroszkópia, (b) abszorpciós spektroszkópia.

A sugárzás kibocsátásának mérésére alapuló emissziós spektroszkópia mellett másik alapvető módszer a sugárzás *elnyelésének* vizsgálatát lehetővé tevő *abszorpciós spektroszkópia*. Míg a fénykibocsátás mindig egy magasabb energiájú állapotból alacsonyabb energiájú állapotba való atomi (vagy molekuláris) átmenet következménye, addig a fotonok abszorpciója az atomot (vagy molekulát) egy alacsonyabb energiájú állapotból egy magasabb energiájú állapotba juttatja. Ennek megfelelően az emisszió az átmenetekhez tartozó felső nívókról szolgáltat információt, az abszorpció pedig az alsó nívókról (az emisszió, vagy az abszorpció „erőssége” függ az adott nívó populációjától).

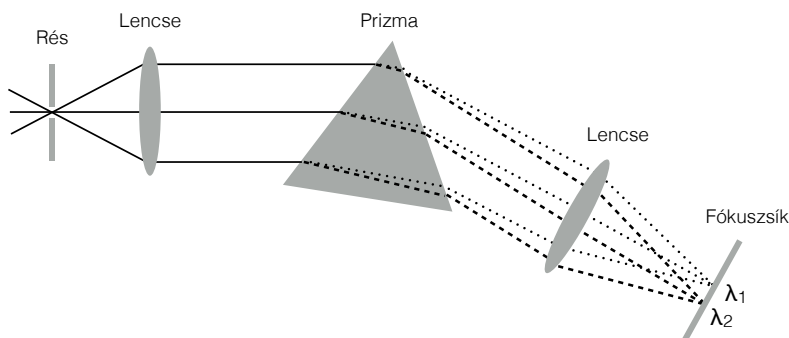
A két alapvető módszer elvi sémáját a 10.24. ábra szemlélteti. Emissziós spektroszkópia esetén a forrás fényét egy fókuszáló elem (példaként lencse) segítségével a spektrométer bemenetére vezetjük, majd a műszer segítségével meghatározzuk a sugárzás számunkra érdekes jellemzőit. Abszorpciós spektroszkópia esetében egy fényforrás fényét irányítjuk a vizsgálni kívánt plazmára, és a spektrométerrel a becsatolt fény gyengülését mérjük egy adott hullámhosszon, vagy a hullámhossz függvényében. A továbbiakban megismerkedünk a spektrométerek

felépítésével és működésének alapjaival.

Spektrométerek

A fény hullámhossz szerinti (azaz spektrális) felbontására és mérésére szolgáló *spektrométerek* a detektálás módja alapján nagyrészt két fő csoportba oszthatók. (i) Amennyiben a berendezés feladata *egy* adott hullámhossz kiválasztása, *monokromátorról* beszélünk. A kilépő fényt ez esetben egy egycsatornás detektor érzékeli. (ii) Ha a spektrum egészének, vagy egy részének egyidejű detektálása a cél és ezt egy sokcsatornás detektor végzi, *spektrográfról* beszélünk.²² Monokromátorok esetén a spektrum letapogatása a kiválasztott hullámhossz hangolásával történik. Az alábbiakban a spektrométerek elvi felépítésével és működésével foglalkozunk.

Prizmás és rácsos spektrométerek



10.25. ábra. Prizmás spektrométer vázlata.

A 10.25. ábra egy „klasszikus” prizmás spektrométer elvi vázlatát szemlélteti. A spektrométerbe a fény egy résen át jut be, a nyalábot egy lencse párhuzamosítja (kollimálja), ami ezután eléri a műszer fénybontó elemét, esetünkben egy prizmat.²³ Ez az összetett fényt alkotóira tudja bontani azáltal, hogy a különböző hullámhosszúságú komponenseket különböző irányokba téríti el. Ez annak köszönhető, hogy az anyagok (pl. üveg) törésmutatója függ a fény hullámhosszától és így a fénysugarak törésére jellemző szögek függenek a hullámhossztól,

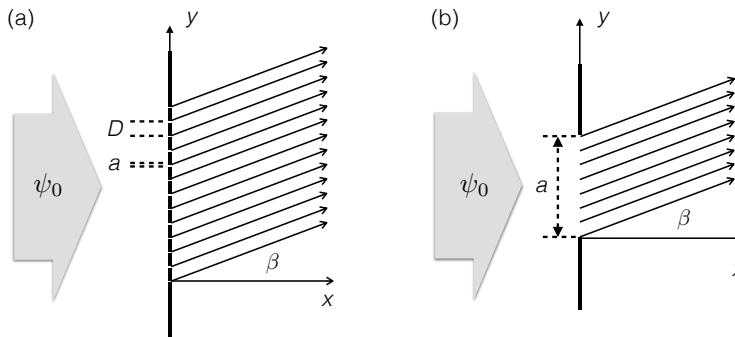
²²Érdekességgként említést érdemelnek még az ú.n. „polikromátorok”, amelyek előre meghatározott néhány spektrumvonal intenzitásának mérését teszik lehetővé, néhány, megfelelően pozícionált egycsatornás detektor alkalmazásával. Ilyen berendezések elsősorban analitikai alkalmazásokban működnek, ahol a cél a vizsgálandó anyagok elemösszetételének meghatározása néhány jellemző vonal intenzitásának mérésével.

²³A spektroszkópia korai időszakában fénybontó elemként kizárólag prizákat használtak, mára jelentőségük lényegesen csökkent.

más szóval a közeg diszperzív, ld. a 3.2 fejezetet. Így egy monokromatikus nyaláb eltérülési szöge függ a hullámhossztól, illetve összetett sugárzás esetében az egyes komponensek szétválnak és különböző irányokba haladnak. Egy második lencse a különböző irányokba haladó párhuzamos nyalábokat különböző pozíciókba fókuszálja, azaz a lencse fókusz síkjában megjelenik a spektrum, ahol az teljes egészében tanulmányozható, vagy belőle egy második rés segítségével egy adott hullámhossz kiválasztható.

Megfelelő felbontás eléréséhez viszonylag nagy méretű és hibamentes anyagú prizmákra van szükség, a szögdiszperziót a törésmutató hullámhosszfüggésének mértéke is korlátozza. Ezek a problémák megnehezítik a prizmák alkalmazását és a spektrométerek diszperzív elemeként ma már szinte kizárólag *optikai rácsokat* alkalmaznak [131]. A rácsok vonalait vagy gyémánttüvel való karcolással, vagy holografikus módon hozzák létre, mindkét módszer lehetővé teszi milliméterenként akár több ezer vonal kialakítását. Az egyes, így kialakított elemi felületekről visszaverődő hullámok interferenciája és a felületek véges méretéből adódó diffrakció együttesen alakítják ki a rács szögfüggő reflexióját, amit a következőkben részletesebben áttekintünk.

A legegyszerűbb kialakításban a rács periodikusan ismétlődő visszaverő és nem visszaverő (vagy áteresztő és nem áteresztő) elemekből álló struktúráként modellezhető. Ennek megfelelően az optikai rácsok lehetnek *reflexiós* és *transzmissziós* jellegűek. Optikai spektrométerekben jellemzően a reflexiós rácsokat használják, a rácsok működésének megértéséhez ugyanakkor az alábbiakban a transzmissziós esetet vizsgáljuk. Ehhez tekintsük a 10.26.(a) ábrát! A rács N számú, a szélességű, egymástól D távolságra lévő résből áll, a végtelen kiterjedésű (y, z) síkon. A rések az ábra síkjára merőleges (z) irányban végtelen kiterjedésűek.



10.26. ábra. Az optikai rács tárgyalásához: (a) a rács a szélességű áteresztő tartományokat tartalmaz, egymástól D távolságra. (b) Egy rés kinagyított képe, melynek pontjaiból elemi hullámok indulnak. A nyilak a beeső hullámhoz képest β szöggel eltérő irányú hullámokat jelzik.

A rács síkjára egy

$$\psi_0 = e^{i(kx - \omega t)} \quad (10.101)$$

egységnyi amplitúdójú monokromatikus síkhullám esik. A *Huygens-elv* értelmében a rések minden pontjából elemi hullámok indulnak ki és a rács „mögötti” térrészben (azaz az $x > 0$ tartományban) az intenzitáseloszlást ezen hullámok interferenciája alakítja ki.

Az intenzitáseloszlást a résektől távoli ernyőn vizsgáljuk, azaz a *távoli teret* tekintjük. Ilyen feltételek mellett az ernyő valamely pontjába tartó hullámokról feltételezhetjük, hogy párhuzamosak.²⁴ A rács és a megfigyelés helyének az egyes elemi hullámok úthosszkülönbségéhez viszonyított nagy távolsága miatt feltételezzük azt is, hogy az egyes, ugyanolyan irányban haladó elemi hullámok amplitúdói megegyeznek. Továbbá, eltekintünk attól is, hogy az ernyőre eső hengerhullámok amplitúdója növekvő β szög mellett csökken, a nagyobb úthossz következtében.

A β szöggel jellemzett irányba haladó hullámok eredője egy távoli P pontban az alábbi módon adható meg (ahol a zárójelben lévő tagok a különböző sugarak optikai úthosszai, amikből többletfázisaiuk származnak):

$$\begin{aligned} \psi(P) = A & \left[\int_0^a e^{i\varphi(\beta)} dy + \int_D^{D+a} e^{i\varphi(\beta)} dy + \dots \right. \\ & \left. + \int_{(N-1)D}^{(N-1)D+a} e^{i\varphi(\beta)} dy \right] e^{i\omega t}, \end{aligned} \quad (10.102)$$

ahol A a P pont és a rács távolságától függő komplex amplitúdó és φ az egyes elemi hullámok fáziskülönbsége valamely referenciaponthoz, esetünkben az $(x, y) = (0, 0)$ ponthoz viszonyítva. A fenti kifejezésben az egyes integrálok az egymás utáni résekre (nyílásokra) vonatkoznak. Az első integrál kiszámításához a 10.26.(b) ábra nyújt segítséget. A fáziskülönbség az y koordináta függvényében:

$$\varphi(\beta) = -ky \sin \beta. \quad (10.103)$$

Ezzel a 10.102. kifejezés első integrálja

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_0 &= \int_0^a e^{i\varphi(\beta)} dy = \int_0^a e^{-iky \sin \beta} dy \\ &= \frac{1}{-ik \sin \beta} [e^{-iky \sin \beta}]_{y=0}^{y=a} = \frac{1}{-ik \sin \beta} [e^{-ika \sin \beta} - 1], \end{aligned} \quad (10.104)$$

ami további átalakításokkal:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_0 &= \frac{e^{-i\frac{1}{2}ka \sin \beta}}{-ik \sin \beta} [e^{-i\frac{1}{2}ka \sin \beta} - e^{i\frac{1}{2}ka \sin \beta}] = \frac{e^{-i\frac{1}{2}ka \sin \beta}}{k \sin \beta} 2 \sin \left(\frac{1}{2}ka \sin \beta \right) \\ &= a e^{-i\frac{1}{2}ka \sin \beta} \frac{\sin \left(\frac{1}{2}ka \sin \beta \right)}{\frac{1}{2}ka \sin \beta}. \end{aligned} \quad (10.105)$$

²⁴A spektrométerekben erről a rács után elhelyezett fókuszáló elem „gondoskodik”, ami az adott irányba, párhuzamosan haladó hullámokat egy pontba gyűjti össze.

A 10.102. kifejezésben szereplő p -edik integrálra igaz, hogy

$$\mathcal{I}_p = \int_{pD}^{pD+a} e^{-iky \sin \beta} dy = \int_0^a e^{-ik(y+pD) \sin \beta} dy = \mathcal{I}_0 e^{-ikpD \sin \beta}. \quad (10.106)$$

Az integrálok összege tehát:

$$\sum_0^{N-1} \mathcal{I}_p = \mathcal{I}_0 [1 + z + z^2 + \dots + z^{N-1}] = \mathcal{I}_0 \frac{1 - z^N}{1 - z}, \quad (10.107)$$

ahol $z = e^{-ikD \sin \beta}$. Mivel

$$\begin{aligned} \frac{1 - z^N}{1 - z} &= \frac{1 - e^{-ikND \sin \beta}}{1 - e^{-ikD \sin \beta}} = \left(\frac{e^{-i\frac{1}{2}kND \sin \beta}}{e^{-i\frac{1}{2}kD \sin \beta}} \right) \left(\frac{e^{i\frac{1}{2}kND \sin \beta} - e^{-i\frac{1}{2}kND \sin \beta}}{e^{i\frac{1}{2}kD \sin \beta} - e^{-i\frac{1}{2}kD \sin \beta}} \right) \\ &= e^{-i\frac{1}{2}k(N-1)D \sin \beta} \frac{\sin(\frac{1}{2}kND \sin \beta)}{\sin(\frac{1}{2}kD \sin \beta)}, \end{aligned} \quad (10.108)$$

ezért az eredő hullám a β szög függvényében:

$$\begin{aligned} \psi(\beta) &= A e^{-i\frac{1}{2}k(N-1)D \sin \beta} \frac{\sin(\frac{1}{2}kND \sin \beta)}{\sin(\frac{1}{2}kD \sin \beta)} a e^{-i\frac{1}{2}ka \sin \beta} \frac{\sin(\frac{1}{2}ka \sin \beta)}{\frac{1}{2}ka \sin \beta} e^{-i\omega t} \\ &= A^* \left[\frac{\sin(\frac{1}{2}kND \sin \beta)}{\sin(\frac{1}{2}kD \sin \beta)} \right] \left[\frac{\sin(\frac{1}{2}ka \sin \beta)}{\frac{1}{2}ka \sin \beta} \right] e^{-i\omega t}, \end{aligned} \quad (10.109)$$

ahol az A^* az eredő komplex amplitúdó.

Célunk valójában a hullám

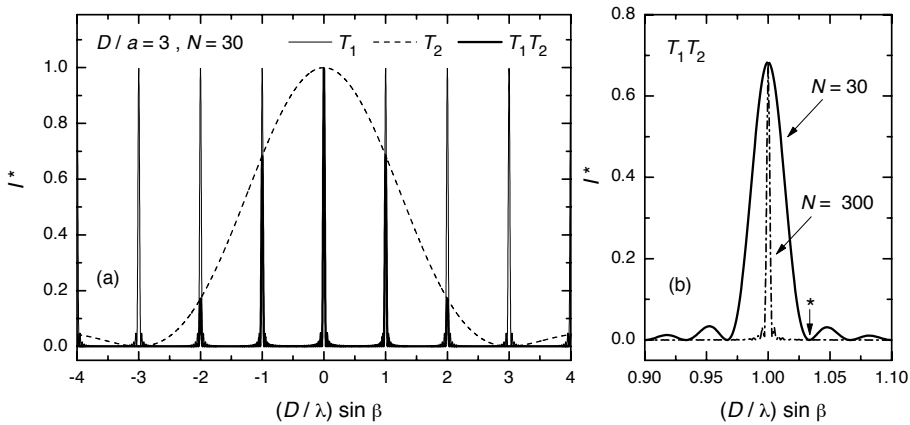
$$I^*(\beta) = \frac{I(\beta)}{I(\beta = 0)} \quad (10.110)$$

relatív intenzitásának a meghatározása a β szög függvényében. Mivel $I = |\psi|^2$, ezért $\beta \rightarrow 0$ határátmenetben $I(0) = |A^*|^2 N^2$ és végeredményben

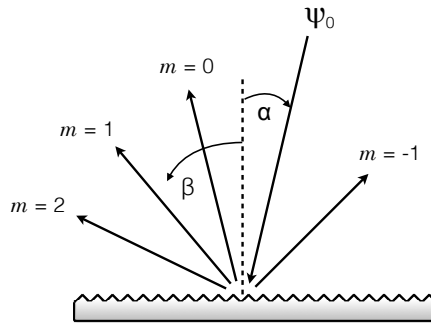
$$I^*(\beta) = \underbrace{\left[\frac{\sin(\frac{1}{2}kND \sin \beta)}{N \sin(\frac{1}{2}kD \sin \beta)} \right]^2}_{T_1} \underbrace{\left[\frac{\sin(\frac{1}{2}ka \sin \beta)}{\frac{1}{2}ka \sin \beta} \right]^2}_{T_2}. \quad (10.111)$$

A fenti eredmények (változtatások nélkül) alkalmazhatók *reflexiós rácsok* esetére is, ahol a rács szomszédos elemein *visszaverődő* hullámok úthosszkülönbsége hozza létre az interferenciát. Spektroszkópiai berendezésekben a reflexiós rácsok alkalmazása a tipikus, ezért a továbbiakban a rácsok ezen fajtájára koncentrálunk.

A 10.27.(a) ábra 10.111. formulával megadott átviteli függvényt mutatja, illusztrációként, $(D/\lambda) \sin \beta$ függvényében, $D/a = 3$ választás mellett, $N = 30$ elemű rácsra. Az ábra a fenti összefüggés első és második (T_1 , ill. T_2) tényezőjét



10.27. ábra. Optikai rács átviteli függvénye $(D/\lambda) \sin \beta$ függvényében, $D/a = 3$ esetére $N = 30$ elemű rácsra (a). T_1 és T_2 a 10.111. összefüggésben szereplő két tényező, melyek szorzata adja az I^* átviteli függvényt. (b) $N = 30$ és $N = 300$ elemű rácsok átviteli függvényének összehasonlítása az első rendnek megfelelő maximum környezetében. A csillag a 30 elemű rácsról visszavert sugárzás intenzitásának első minimumhelyét jelöli.



10.28. ábra. Optikai rács különböző rendű (m) reflexiói. A szögeket a beesési merőlegeshez képest adjuk meg, a ψ_0 beeső hullám $\alpha < 0$ szög alatt éri a rácsot.

külön-külön is szemlélteti. Látható, hogy T_1 , – ami a nagyszámú résen áthaladó hullámok interferenciáját írja le – egy éles maximumokkal rendelkező, periodikus függvény. Maximumai a

$$\sin\left(\frac{1}{2}kD \sin \beta\right) = 0 \quad (10.112)$$

egyenlet megoldásaként adódnak, amik T_1 nevezőjének zérushelyei. (A nevező zérussá válása nem jelent problémát, u.i. ugyanekkor a számláló is nullává vá-

lik, és a maximumok környezetében határátmenetben a hányadosra véges érték adódik.) A fenti egyenlőség

$$\frac{1}{2}kD \sin \beta = m\pi \quad \rightarrow \quad \sin \beta = m\lambda/D \quad (10.113)$$

esetben teljesül. Az itt megjelenő m egész szám a visszaverődés *rendje*, a rács szomszédos elemein visszaverődő hullámok úthosszkülönbsége $m\lambda$.

Amennyiben a rácsra nem merőlegesen, hanem valamely α szög alatt esik a nyaláb, akkor a fenti, a maximális reflexiók irányát megadó összefüggés a

$$\sin \alpha + \sin \beta = m\lambda/D \quad (10.114)$$

alakra módosul, ugyanis a döntés miatti többlet optikai úthossz $\sin \alpha$ -val lesz arányos, ld. a 10.28. ábrát. A spektrométerek többsége általában a rácsok alacsony rendjében, alapesetben első rendben ($m = 1$) működik. Az elsőrendű reflexió mellett megjelenik az $m = 0$ értékhez tartozó „nullad rendű” reflexió is (amikor a rács lényegében tükörként viselkedik), illetve magasabb rendű reflexiók is fellépnek. A 10.28. ábrán feltüntetett $m = 1, 2$ pozitív *rendek* mellett megjelennek a *negatív rendek* is, pl. $m = -1$.

A 10.27.(a) ábrára visszatérve, láthatjuk azt is, hogy a T_2 tényező, ami a rések véges szélessége miatti fényelhajlásból származik, egy lassan változó függvény, hatása a különböző rendű reflexiók egymáshoz viszonyított intenzitásértékének meghatározásában nyilvánul meg.

Két, λ_1 és λ_2 hullámhosszúságú spektrumvonalat – az ú.n. *Rayleigh-feltétel* szerint – akkor tartunk felbonthatónak, ha λ_1 helyen az átviteli függvénynek maximuma, λ_2 helyen pedig az ehhez legközelebbi minimuma található [132]. Mindezt a T_1 tag határozza meg, a maximumot (mint láttuk) a nevező zérushelye, a minimumot (a 10.27.(b) ábrán az $N = 30$ esetre csillaggal jelölve) a számláló zérushelye jelöli ki. A 10.113. összefüggés alapján $\frac{1}{2}k_1 D \sin \beta = m\pi$ (ahol $k_1 = 1/\lambda_1$). A legközelebbi minimumhelyre felírhatjuk, hogy

$$\frac{1}{2}k_2 D \sin \beta = \pi \left(m + \frac{1}{N} \right). \quad (10.115)$$

Felhasználva, hogy $\lambda_2 = \lambda_1 + \Delta\lambda$, a felbontóképesség inverzére a következőt kapjuk:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_1} = \frac{|\lambda_2 - \lambda_1|}{\lambda_1} = \left| \frac{\frac{1}{|m| + \frac{1}{N}}}{\frac{1}{|m|}} - 1 \right| = \left| \frac{N|m|}{N|m| + 1} - 1 \right| = \frac{1}{N|m| + 1} \cong \frac{1}{|m|N}, \quad (10.116)$$

hiszen általában $N \gg 1$.

A példaként tekintett 30 elemű rácsra a felbontás értéke első rendben $\lambda/\Delta\lambda = 30$, vagyis 500 nm hullámhossz környezetében ~ 17 nm távolságra lévő spektrumvonalak választhatók szét. A felbontás látható módon növelhető a rácselemek számának növelésével, amint ezt a 10.27.(b) ábra is mutatja, az $N = 30$ és $N = 300$ esetek összehasonlításával. Itt a felbontás már ~ 1.7 nm-re

növekszik. A gyakorlatban használt rácsok esetében az itt vázolt esetekhez képest lényegesen nagyobb N értékek a jellemzőek. Mint korábban említettük, a rácsok milliméterenként több ezer elemet tartalmaznak. Egy, a „nagy teljesítményű” spektrométerekre jellemző méretű rácsot (~ 10 cm) tekintve a rácselemek száma $N \sim 10^5$ nagyságrendbe esik, ilyenkor első rendben $\lambda/\Delta\lambda \sim 10^5$ felbontóképesség várható.

A felbontóképesség további növeléséhez tehát előnyös lehet magasabb ($|m| > 1$) rendek használata. A magasabb rendű reflexiók ugyanakkor minden esetben korlátozzák az átfogható hullámhossztartományt, ennek figyelmen kívül hagyása hamis spektrumokhoz és hibás értelmezésekhez vezethet.²⁵ Példaként tegyük fel, hogy a 300–700 nm hullámhossztartományt szeretnénk vizsgálni $m = 1$ rendben egy letapogató berendezéssel. A műszer által átengedett hullámhossz növekedésével a mérés során 600 nm és 700 nm között az elsőrendű spektrum mellett megjelenik a 300 nm és 350 nm közötti tartomány másodrendű spektruma is. Ennek elkerülésére a mérés során a 600 nm hullámhossz elérése előtt a belépő rés elé egy olyan szűrőt kell helyezni, ami blokkolja a 350 nm alatti tartományt. Kompakt spektrográfok esetén a fenti probléma elkerülésére a detektorsor egy része elé egy szűrőt helyeznek el és a műszer érzékenységeinek kalibrációját már a beépített szűrővel együtt végzik el.

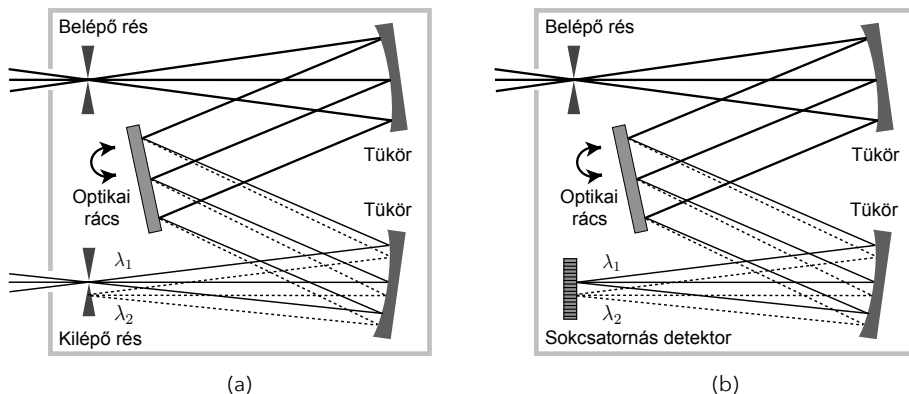
Az optikai rácsok működésének megismerése után, a 10.29. ábrán bemutatjuk az igen elterjedt, *Czerny–Turner-elrendezésű* rácsos spektrométerek elvi sémáját.

A fény a belépő résen áthaladva egy kollimáló, párhuzamos nyalábot előállító tükörrre jut. Ez a nyaláb jut a spektrális bontóelemre (optikai rácsra), ami a sugárzást – a már megismert módon – a hullámhossz függvényében különböző irányokban veri vissza. A visszavert nyalábok egy második tükörrre jutnak, ami a kilépő rés síkjára fókuszálja ezeket. A keskeny kilépő résen csak egy adott hullámhosszú (λ_1 , lásd 10.29.(a) ábra) sugárzás jut át, aminek erőssége egy oda helyezett detektorral mérhető. A spektrum letapogatását a rács forgatásával érik el. Amennyiben a kilépő rést egy detektorsorral helyettesítjük (10.29.(b) ábra), akkor a spektrum egy adott tartománya egyidejűleg mérhető. Kis felbontás esetén ez egy széles hullámhossztartomány lehet, nagy felbontás esetén a spektrum egyes részeit egymás után, a rács különböző pozíciói mellett rögzíthetjük.

Megjegyezzük, hogy

- a fentiekben az optikai rácsok elvi felbontóképességét vezettük be. A rések véges szélessége, valamint az elkerülhetetlen optikai leképzési hibák miatt a spektrométerek felbontóképessége elmarad a rácsok elvi felbontóképességétől.
- a spektrométerek, mint optikai berendezések, adott belépő nyílászíronnyal rendelkeznek. A fény becsatolását ennek figyelembevételével kell

²⁵Itt említést érdemelnek az ún. „echelette” (lépcsős) rácsok, amik igen magas rendben működnek (azaz a rács egymás melletti elemeiről visszaverődő hullámok közötti úthosszkülönbség a hullámhossz sokszorosa). A magas rend miatt a felbontás jelentősen megnövelhető, viszont az egyszerre lefedhető spektrális tartomány ugyanakkor jelentősen leszűkül.



10.29. ábra. Rácsos (Czerny–Turner-elrendezésű) spektrométer elvi felépítése, *monokromátor* (a), illetve *spektrométer* (b) kialakításban. Az előbbi esetben a kilépő résen kimenő fényt egy egycsatornás detektor érzékeli, míg az utóbbi esetben egy sokcsatornás detektor méri a teljes spektrumot, vagy annak egy részét (az átfogott hullámhossztartomány függvényében). A hullámhossz, illetve a hullámhossztartomány beállítása a rács (az ábra síkjára merőleges tengely körüli) forgatásával valósul meg.

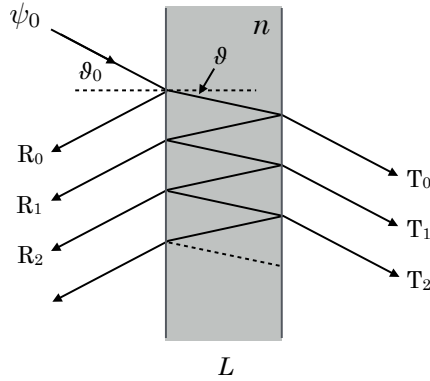
elvégezni. A megfelelő szögtartományban belépő fény ekkor a rács egész felületét megvilágítja, gondoskodva az optimális felbontásról. Amennyiben a rácsnak csak egy része van megvilágítva, csökken a rácselemek (N) effektív száma, ami kisebb felbontást eredményez (ld. a 10.116. összefüggést). Ellenkező esetben, amikor a rács optimális megvilágításához képest nagyobb szögtartományban érkezik a fény a spektrométerbe, ennek az optikai elemeket elkerülő része a berendezésben szóródhat és a mért spektrumokban egy háttér megjelenéséhez vezethet.

- Nagyon alacsony szórt fény / háttér érdekében egyes alkalmazásokban kettős (ritkán hármas) monokromátorokat alkalmaznak, amiket egymástól közös részek választanak el. A hullámhossz hangolása az egyes egységekben összehangolt módon történik.

A Fabry–Perot-interferométer

A spektroszkópiai berendezések közül végül az igen nagy felbontású méréseket lehetővé tevő *Fabry–Perot (FP) interferométerekkel* foglalkozunk. Ezek két igen nagy reflexiójú tükörből, vagy egy üveglemez két oldalára felvitt nagy reflexiójú rétegekből állnak. Az utóbbiakat *Fabry–Perot-etalonoknak* is nevezik, ezekben a tükröző felületek távolsága nem változtatható, ellentétben a két tükörből álló rendszerekkel.

Az egyszerű tárgyalás végett tegyük fel, hogy a tükröző felületek síkok, párhuzamosak és elhanyagolható vastagságúak, valamint, hogy a köztük lévő tér-



10.30. ábra. A Fabry–Perot-interferométer tárgyalásához. A két, L távolságra lévő tükröző felületen kialakuló sorozatos reflexiók miatt számos áteresztett ($T_0, T_1, \dots$) és visszavert ($R_0, R_1, \dots$) hullám alakul ki a beeső ψ_0 síkhullámból.

részt n törésmutatójú homogén anyag tölti ki, a 10.30. ábrán vázolt módon. Feltételezzük továbbá, hogy a közegben és a felületeken nincs abszorpció és szórási veszteség, azaz a felületek R reflexiójára és T transzmissziójára fennáll, hogy $R + T = 1$.

Essen a rendszerre egy egységnyi amplitúdójú $\psi_0 = e^{i(kx - \omega t)}$ síkhullám, a beesési merőlegeshez képest ϑ_0 szög alatt! A beeső hullám az első felülethez érve részben visszaverődik, ennek az R_0 hullámnak (lásd 10.30. ábra) az amplitúdója $\sqrt{R}$, a (ϑ szöggel jellemzett irányban) továbbhaladó hullám amplitúdója pedig $\sqrt{T}$ (ugyanis az R és T jellemzőket a hullámnak az amplitúdó négyzetével megadott *intenzitására* definiáljuk). A hullámnak a közegben továbbterjedő része a második felületet elérve részben szintén visszaverődik, részben pedig a 10.30. ábrán T_0 -al jelölt hullámként terjed tovább, aminek amplitúdója $A_0 = \sqrt{T}\sqrt{T} = T$. A sorozatos reflexiók a visszaverődő ($R_0, R_1, \dots$) és áthaladó ($T_0, T_1, \dots$) hullámok sokaságát eredményezik.

A T_p áthaladó hullám amplitúdója $A_p = TR^p$, az interferométer után megfigyelhető sugárzást ezen hullámok interferenciája eredményezi. Az eredő hullám komplex amplitúdója:

$$A^* = \sum_{p=0}^{\infty} A_p e^{-ip\varphi}, \quad (10.117)$$

ahol

$$\varphi = 2nLk \cos \vartheta = \frac{4\pi L}{\lambda} n \cos \vartheta \quad (10.118)$$

a két egymást követő hullám fáziskülönbsége ($k = 2\pi/\lambda$). Ezzel az eredő amplitúdó

$$A^* = \sum_{p=0}^{\infty} TR^p e^{-ip\varphi} = \sum_{p=0}^{\infty} T(R e^{-i\varphi})^p = \frac{T}{1 - R e^{-i\varphi}}, \quad (10.119)$$

illetve az intenzitás:

$$I = |A^*|^2 = \frac{T^2}{|1 - Re^{-i\varphi}|^2} = \frac{(1 - R)^2}{1 + R^2 - 2R \cos \varphi} = \frac{1}{1 + F \sin^2(\varphi/2)}, \quad (10.120)$$

ahol $F = 4R/(1 - R)^2$ és felhasználtuk, hogy $T = 1 - R$.

A φ fáziskülönbség 10.118. szerinti értékét behelyettesítve, az így adódó

$$I(\lambda, \vartheta, L) = \frac{1}{1 + F \sin^2\left(\frac{2\pi}{\lambda} nL \cos \vartheta\right)} \quad (10.121)$$

átviteli függvény a λ hullámhossz, az L távolság és a ϑ szög függvénye. A spektrum mérése L vagy ϑ változtatásával valósítható meg.²⁶ A távolságot változtató eszközöket *páztázó FP interferométereknek* nevezzük, ezekben L precíz változtatását általában piezoelektromos elemekkel valósítják meg. Merőleges beesést ($\vartheta_0 = 0$) és $n = 1$ értékű törésmutatót ($\sim$ levegőben való terjedést) feltételezve megállapíthatjuk, hogy az intenzitás azoknál a λ_m hullámhosszaknál maximális, ahol $L/\lambda_m = m$ teljesül (m egy egész szám). Ez azt fejezi ki, hogy az egymást követő $T_0, T_1, T_2, \dots$ hullámok úthosszkülönbsége a hullámhossz egész számú többszöröse.²⁷ Az $I(\lambda)$ függvény csúcsainak $\Delta\lambda_F$ távolságát *szabad spektrális tartománynak* nevezzük, ami az egy méréssel átfogható hullámhossztartományt jelenti. Mivel $\Delta\lambda_F$ a két egymást követő rendhez tartozó csúcsok távolsága, ezért igaz, hogy valamely λ_0 környezetében $\lambda_0 = nL/m$ és $\lambda_0 + (\Delta\lambda)_F = nL/(m - 1)$, amiből

$$\Delta\lambda_F = \frac{\lambda_0^2}{2L}. \quad (10.122)$$

Az átviteli függvény másik fontos jellemzője a csúcsok $\Delta\lambda_{1/2}$ félértékszélessége (ez adja meg a még éppen megkülönböztethető két spektrumvonal távolságát). A 10.120. összefüggést alapul véve, az $I = 0.5$ értékhez tartozó φ érték a $F \sin^2(\varphi/2) = 1$ egyenletből kapható meg. Nagy F értékekre ez a $\varphi = 2/\sqrt{F}$ alakra vezet. Az átviteli függvény csúcsához közeli két, 0.5 értékű pontjához ennek az értéknek a kétszerese, $\varphi^* = 2\varphi = 4/\sqrt{F}$ tartozik. A fázis és a hullámhossz $\varphi = 4\pi L/\lambda$ szerinti összefüggését differenciálva:

$$|d\varphi| = 4\pi L \frac{d\lambda}{\lambda^2}.$$

Ez alapján az átviteli függvény félértékszélessége:

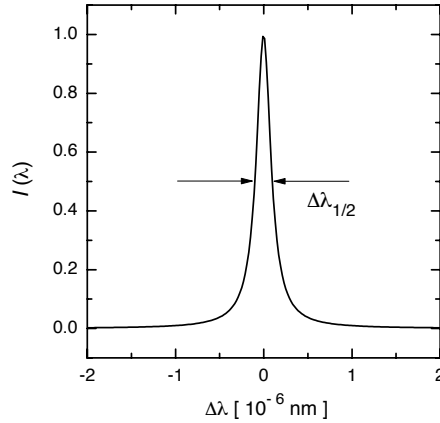
$$\Delta\lambda_{1/2} = \frac{\lambda_0^2}{\pi L \sqrt{F}}. \quad (10.123)$$

Megemlítenő még, hogy a fent kapott két mennyiség hányadosa definiálja a *finesz* nevű mennyiséget, ami

$$\mathcal{F} = \frac{\Delta\lambda_F}{\Delta\lambda_{1/2}} = \frac{\pi\sqrt{F}}{2} = \frac{\pi\sqrt{R}}{1 - R}. \quad (10.124)$$

²⁶Divergens belépő nyaláb esetén, ami különböző ϑ irányú hullámokat tartalmaz, az interferométer kimenetén a spektrum az irány függvényében jelenik meg.

²⁷Vegyük észre, hogy két hullám úthosszkülönbsége itt sokkal nagyobb, mint az optikai rácsoknál, ahol az (az intenzitásmaximumoknál) a hullámhosszal, vagy annak néhányszorosával egyenlő.



10.31. ábra. Fabry–Perot-interferométer átviteli függvénye $R = 0.99$ reflexió és merőleges beesés mellett, $\lambda \approx 500$ nm hullámhossz közelében. Az átviteli függvény félértékszélessége $\Delta\lambda_{1/2} \approx 2 \times 10^{-7}$ nm. A szabad spektrális tartomány, azaz az átviteli függvény maximumhelyeinek távolsága a 10.122. összefüggés alapján 1.25×10^{-4} nm.

Példaként $R = 0.99$ reflexiót, $L = 1$ cm távolságot, merőleges beesést és $n = 1$ értékű törésmutatót feltételezve, egy FP interferométer átviteli függvényét a 10.31. ábra mutatja egy keskeny hullámhossztartományban, 500 nm környezetében. Az ábra az $I(\lambda)$ függvénynek csak egy maximumát mutatja (a szabad spektrális tartomány $\Delta\lambda_F = 1.25 \times 10^{-4}$ nm). A példában választott értékekkel $\Delta\lambda_{1/2} \approx 2 \times 10^{-7}$ nm, ami igen nagy érték a rácsos spektrométerekkel elérhető felbontáshoz képest. Ugyanakkor viszont a szabad spektrális tartomány az FP interferométerek esetében sokkal kisebb, alkalmazásuk így valójában egy igen keskeny spektrumtartomány nagy felbontású vizsgálatára optimális. A nagy reflexiójú tükrökkel elérhető soksugaras interferencia – mint láttuk – igen éles átviteli csúcsokat eredményez, ami lehetővé teszi egyes spektrumvonalak alakjának mérését és így pl. felhasadási és vonalkiszélesedési jelenségek vizsgálatát. (Emlékezzünk ezen jelenségek leírásánál példaként megadott értékekre!)

Detektorok

A látható hullámhossztartományt tekintve, a detektorok közül az egycsatornás detektálást megvalósító fotoelektron-sokszorozók és a sokcsatornás dióda, illetve CCD és CMOS detektorok a legfontosabbak. A fotoelektron-sokszorozókban a fény egy (alacsony kilépési munkájú) fotokatódra esik. A kilépő elektronok egy elektródasorra kapcsolt (~ 1000 V) feszültség hatására gyorsulnak és az elektródák felületébe ütközve sokszorozódnak (elektronindukált elektronemissziós folyamat következtében). A sokszorozódás eredményeképpen a detektor kimenetén már egyes bejövő fotonok is mérhető impulzusokat adnak. Ezen egyes impulzusok detektálásán alapul a fotonszámlálás módszere, ami elsősorban az

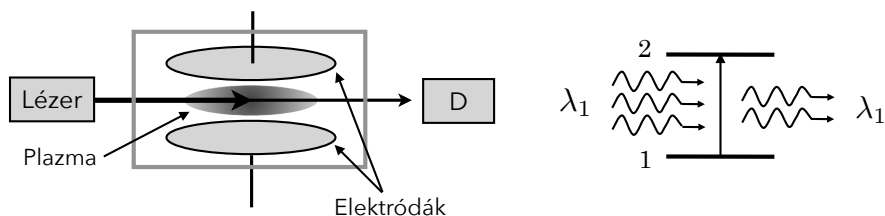
alacsony fényintenzitás-tartományban fontos detektálási módszer. Ezzel a „digitális” megközelítéssel ellentétben, analóg detektálást alkalmazva, a fotoelektron-sokszorozó kimenő jele – annak linearitási tartományán belül maradván – arányos a belépő fény intenzitásával. A fotoelektron-sokszorozók tehát széles intenzitás-tartományban alkalmazhatók és nagy sebességű detektálást tesznek lehetővé. Spektrális érzékenységük a fotokatód anyagától függ, az ultraibolya tartománytól a közeli infravörös tartományig terjed. Szintén a fotokatód választott anyagától függ kvantumhatásfokuk, ami a kilépő elektronok számának és a katódra eső fotonok számának aránya; modern fotokatódok esetében ez tipikusan néhány % és ~ 40 % közötti érték. Megjegyzendő, hogy ugyan a fotoelektron-sokszorozók kifejlesztése és megjelenése (1934) után nem sokkal (már 1940-ben) megjelentek a Si-alapú fotodiódák, a fotoelektron-sokszorozók kiváló tulajdonságaik miatt (pl. nagyon alacsony sötétáram) egyes detektálási feladatoknál ma is egyeduralkodók (és jelenleg is évi milliós darabszámban kerülnek eladásra). A sokcsatornás detektorok előnye ugyanakkor az, hogy a teljes spektrum, vagy egy részének „szimultán” detektálását teszik lehetővé. Speciális, ún. leképező spektrométerekben alkalmazva, kétdimenziós detektormátrixok lehetővé teszik a spektrális felbontás mellett egy térbeli koordináta felbontását is, azaz a forrás spektruma a hely függvényében egyidejűleg mérhető.

10.2.6. A lézeres plazmaspektroszkópia alapjai

A lézerek, mint igen keskeny hullámhossztartományban sugárzó fényforrások új lehetőségeket nyitottak a spektroszkópiában [128, 133], melyeknek csak kis része kapcsolatos a plazmák vizsgálatával. A *hangolható* lézerek (melyek legfontosabb típusai a festéklézerek és a félvezető lézerek) megjelenése pl. olyan rendkívül nagy felbontású atom- és molekulafizikai spektroszkópiai méréseket tett lehetővé, amelyek jelentősen hozzájárultak az anyagszerkezet mélyebb megismeréséhez és a kvantummechanika eredményeinek ellenőrzéséhez. Az ultrarövid lézerimpulzusok létrehozásának lehetősége pedig forradalmasította a molekulák dinamikájának vizsgálatát.

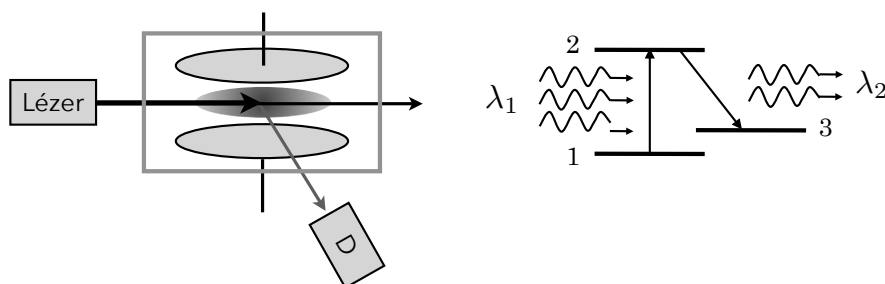
A plazmák vizsgálatára szolgáló optikai lézeres spektroszkópia módszerek elsősorban a részecskék sűrűségéről adnak információt. Ezt az információt hordozhatja a lézerfény intenzitásának megváltozása (abszorpciós spektroszkópia), a plazma sugárzásának (lézerindukált fluoreszcencia), vagy elektromos jellemzőinek (optogalvanikus spektroszkópia) megváltozása. Az alábbiakban csak a legalapvetőbb módszereket tárgyaljuk, ezeket is csak vázlatosan, a részletek mellőzésével.

Egy lézerabszorpciós spektroszkópiai mérés leegyszerűsített vázlata a 10.32. ábrán látható. A mérés alapja egy hangolható lézer, melynek fénye áthatol a két elektróda között keltett plazmán. A sugárzás λ_1 hullámhossza megfelel a vizsgált közegben valamely atom vagy molekula egy átmenetéhez tartozó hullámhossznak. A rezonancia miatt ezek a részecskék abszorbeálni tudják a sugárzást, ezzel gyengítik a továbbhaladó lézernyalábot. Lineáris tartományban a nyaláb gyengülése arányos az abszorbeáló részecskék számával, így ez utóbbi (itt nem részletezett elméleti háttér figyelembe vételével) abszolút ér-



10.32. ábra. A lézerabszorpciós spektroszkópia elve. „D” a detektort jelöli, amibe itt a hullámhosszkiválasztó elem is beleértendő.

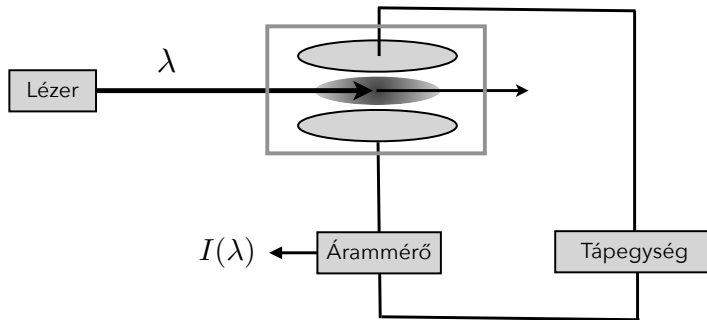
tékben meghatározható. A lézer hullámhosszának hangolásával letapogatható a spektrumvonalak alakja is, információt adva pl. a hőmérsékletről (amennyiben a Doppler-kiszélesedés dominál). Ahogy a 10.32. ábráról is látható, ez a kísérleti összeállítás „vonali menti integrált” mérést tesz lehetővé, azaz a lézersugár terjedési iránya mentén átlagolt mennyiségeket ad meg. Az abszorpciós mérések érzékenységét jelentősen lehet növelni a nyalábnak a plazmában való többszöri átvezetésével, ami az abszorpciós úthossz növelésének felel meg.



10.33. ábra. Lézerindukált fluoreszcencia spektroszkópia elve. „D” a detektort jelöli, amibe itt a hullámhosszkiválasztó elem is beleértendő.

Lézerindukált fluoreszcencia (LIF) mérések esetén az első lépésben a rendszer szintén abszorbeálja a lézer λ_1 hullámhosszúságú fotonjait, a megfigyelés viszont az így gerjesztett „2” szintről (lásd 10.33. ábra) eredő λ_2 hullámhosszúságú sugárzás megfigyelésén alapul. Az ábrán sematikus „D”-vel jelölt detektorba itt beleértjük a hullámhosszkiválasztó eszközt (interferenciaszűrőt, vagy spektrométert) is. A detektor által „látott” térrész a detektor előtti optikai rendszer, vagy a detektor mozgatásával változtatható, így a LIF mérések nagy térbeli felbontást tesznek lehetővé.

A lézer optogalvanikus spektroszkópiái mérések alapja az, hogy egy impulzusüzemű lézer perturbálhatja a plazmában lévő részecskék gerjesztett állapotainak populációit és ezzel befolyásolhatja az ionizációhoz vezető „csatornákat”



10.34. ábra. A lézeres optogalvanikus spektroszkópia elve.

(pl. a metastabil szintekről való elektronütközéses ionizációt). Az elektron- és ionsűrűség perturbációja megváltoztatja a gázkisülés impedanciáját, és pl. állandó feszültségű táplálás mellett ez az áram változásában (növekedésében, vagy csökkenésében) nyilvánul meg. A lézer hullámhosszának változtatásával feltérképezhető az ionizációs viszonyokat befolyásoló szintek populációja és szerepe.

11. fejezet

Poros plazmák

11.1. A poros plazmák keletkezése és alapvető jellemzőik

Poros, vagy komplex plazmákról olyan esetekben beszélünk, amikor az elektronok és az ionok mellett a rendszerekben nano-, vagy mikroméretű részecskék is jelen vannak, amelyek az elektronokkal és az ionokkal, illetve a plazma sugárzásával való kölcsönhatásuk következtében szintén elektromosan töltötté válnak és így a plazma szerves komponensét képezik. Ezen részecskéket a továbbiakban „pornak” nevezzük, a méretüktől függetlenül.

A porrészecskék a plazmával való kölcsönhatásuk következtében, a méretüktől függő mértékű perturbációt okoznak a plazmában, megváltoztatva annak lokális sűrűségét és áramait. Amennyiben a porrészecskék nagy számban vannak jelen a plazmában, úgy annak makroszkopikus jellemzőit (pl. sűrűséget, elektronhőmérsékletet) is lényegesen megváltoztathatják.

A természetben található poros plazmákra példaként említhető a Szaturnusz gyűrűinek rendszere, melyben a Voyager 2 űrszonda fedezett fel küllőszerű alakzatokat, amelyekről később – a Cassini űrszonda megfigyeléseiből – bebizonyosodott, hogy elektromosan töltött, mikrométeres mérettartományú por- és jégrészecskékből állnak [134]. Port tartalmazó rendszerekre további fontos példát jelentenek a csillagközi gázfelhők, amelyekben a részecskék a csillagok ultraibolya sugárzása következtében fellépő fotoeffektusnak köszönhetően válnak elektromosan töltötté. A Föld magas légkörében, a mezoszféra felső határán, ~85 km magasságban is kialakulnak töltött jégrészecskékből álló, a már lenyugodott Nap fényét visszaverő „éjszakai világító felhők”.

Laboratóriumi / ipari plazmákban a porképződés jelenségét először integrált áramkörök gyártása során tapasztalták [135, 136], ahol ez természetesen igen komoly problémát jelent. A jelenség amiatt lép fel, hogy egyes plazmakémiai folyamatokban keletkező molekulák a gáztérben agglomerálódni tudnak. Hasonlóan komoly problémát okoz a fúziós célú reaktorokban [137] a plazma - felület kölcsönhatás miatt fellépő porképződés.

Porrészecskéknek a plazmákba való kontrollált bejuttatása az erősen csatolt plazmák – melyekben a töltött porrászcscék közötti elektrosztatikus kölcsönhatásból származó potenciális energia lényegesen felülmúlhatja a termikus energiát (lásd. 1. fejezet) – laboratóriumi vizsgálatának teljesen új területét nyitotta meg [138, 139]. Mivel ezekben a rendszerekben (a mérések szempontjából kedvező hossz- és időskálák miatt) az egyes részecskék trajektóriái megfigyelhetők és rögzíthetők, klasszikus, erősen korrelált sokrészecske-rendszerek fizikája „atomi szinten” vált vizsgálhatóvá.

Az erős csatolás tartományában a rendszerekben térbeli korreláció alakulhat ki, a rendszerek így a *folyadékokhoz* hasonlóan viselkedhetnek, illetve *szilárd fázisba* is rendeződhetnek („*plazmakristályok*” keletkezhetnek). A plazmák porrászcscéknek erősen korrelált rendszerei számos olyan univerzális tulajdonsággal rendelkeznek, melyek hasonlóvá teszik őket más – nem plazmafizikai – rendszerhez is, pl. elektromosan töltött kolloidokhoz és elektrolitokhoz. Tanulmányozhatók rajtuk – többek között – a transzportjelenségek, a kollektív effektusok (hullámterjedés), valamint az olvadás / kristályosodás jelensége, szilárd fázisban a diszlokációk mozgása – mindez úgy, hogy a karakterisztikus térbeli és időbeli skálák miatt a részecskék egyesével megfigyelhetők.

A továbbiakban először a porrászcscék feltöltődésének mechanizmusával foglalkozunk, majd tárgyaljuk az erősen csatolt sokrészecske-rendszerek alapvető fizikai jellemzőit. Ezt követően bemutatjuk a laboratóriumi poros plazma kísérleti berendezések egy változatát és megismerkedünk a rendszerek simulációs leírását lehetővé tevő molekuladinamikai módszerrel. Végül bemutatunk az utóbbival kapott néhány eredményt, betekintést adva az erősen csatolt sokrészecske-rendszerek fizikájába.

11.2. A porrászcscék elektromos feltöltődése

A plazma - fal határréteg kialakulásának tárgyalásánál (3.3. fejezet) láttuk, hogy egy kvázisemleges plazmába helyezett „tárgy” a körülvevő plazmához képest *negatív potenciálra töltődik fel*, a felületi potenciál értékét a hozzá áramló pozitív és negatív részecskék fluxusának kiegyenlítése szabja meg. Első közelítésben a porrászcscék feltöltődése is ezen folyamatok alapján tárgyalható. A ϕ_d felületi potenciál és a gömb alakúnak feltételezett, r_d sugarú porrászcscike Q_d töltése közötti kapcsolat a „kondenzátormodell” szerint:

$$Q_d = C\phi_d = 4\pi\epsilon_0 r_d \phi_d, \quad (11.1)$$

ahol C a részecske, mint gömb kapacitása.¹

A részecskék feltöltődését egy olyan egyszerű modell alapján vizsgáljuk, ami feltételezi, hogy *a porrászcscike felé az elektronok és az ionok (a végtelenből) út-*

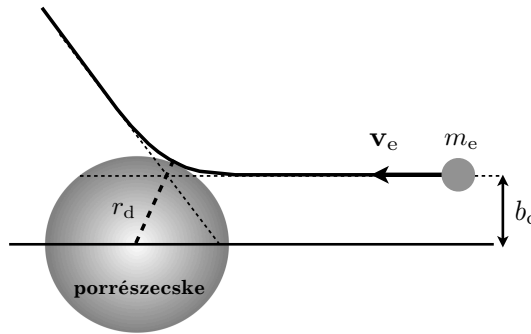
¹Tekintsünk egy r_d sugarú, vezető gömböt, amin Q_d töltés helyezkedik el. A Gauss-tételt egy $r > r_d$ sugarú gömbre felírva, vákuumban: $\int \mathbf{D} d\mathbf{A} = 4\pi\epsilon_0 r^2 E(r) = Q_d \rightarrow E(r) = Q_d/(4\pi\epsilon_0 r^2)$. A részecskétől távol a potenciált nullának véve, a felületi potenciálra $\phi_d = -\int_{\infty}^{r_d} E(r) dr = Q_d/(4\pi\epsilon_0 r_d)$ adódik, azaz a gömb kapacitása $C = Q_d/\phi_d = 4\pi\epsilon_0 r_d$.

közésmertes, az elektrosztatikus kölcsönhatás által meghatározott pályákon közelítenek.² A modell érvényességi tartományát az

$$r_d \ll \lambda_D \ll \lambda_f \quad (11.2)$$

feltétel szabja meg, ahol λ_D a 3.1.1. fejezetben bevezetett Debye-hossz és λ_f az elektronok ill. ionok átlagos ütközési szabad úthossza a környező gázban.

A plazmapotenciálhoz képest negatív felületi potenciálú porrészecske az ionokat vonzza, az elektronokat pedig taszítja. Az elektron - porrészecske és az ion - porrészecske kölcsönhatás leírására a bináris ütközések kinematikáját tárgyaló 4.2. fejezetben szerzett ismereteket alkalmazzuk.



11.1. ábra. Az elektron - porrészecske rendszer. Az ábra azt az esetet (elektrontrajektóriát) szemlélteti, amikor a mozgás során a legkisebb távolság éppen egyenlő a porrészecske r_d sugarával, ami az ütközési paraméter $b = b_c$ értéke mellett valósul meg.

Elsőként, a 11.1. ábra alapján az elektronok mozgását vizsgáljuk a porrészecske környezetében. A kölcsönhatás, ill. az ütközés leírásánál a porrészecskét állónak tekinthetjük, így a *relatív sebesség helyett az elektron sebességével, továbbá a nagy tömegarány miatt a redukált tömeg helyett az elektron tömegével számolhatunk*. A taszító kölcsönhatás miatt a legkisebb (R_0) megközelítést megadó, már korábban megismert

$$1 - \frac{U(R_0)}{E_0} - \frac{b^2}{R_0^2} = 0 \quad (11.3)$$

egyenletnek mindig van megoldása. Itt $U(r)$ a részecskék közötti kölcsönhatásból eredő potenciális energia, b az ütközési paraméter és $E_0 = m_e v_e^2 / 2$ az elektron kezdeti (a részecskék nagy távolsága melletti) mozgási energiája. A két részecske legkisebb távolsága:

$$R_0 = b \left[1 - \frac{U(R_0)}{E_0} \right]^{-1/2}. \quad (11.4)$$

²Ez a modell az irodalomban „Orbital Motion Limit” (OML) néven ismert.

Ha ez az érték nagyobb a porrészcse r_d sugaránál, akkor a porrészcse az elektron pályáját egyszerűen eltéríti, ellenkező esetben viszont az elektron beleütközik a porrészcskébe, feltéve, hogy a kezdeti kinetikus energiája elegendő a taszító kölcsönhatás „legyőzésére”. A számunkra most érdekes „elektronbefogás” tehát az $R_0 \leq r_d$ és $E_0 \geq U(R_0)$ teljesülése esetében következik be.

A taszító potenciál miatt $U > 0$, értéke az R_0 helyen $U(R_0) \equiv -e\phi_d$, így a 11.4. összefüggésből a „kritikus”, azaz az $R_0 = r_d$ egyenlőséghez tartozó ütközési paraméter:

$$b_c = r_d \sqrt{1 + \frac{2e\phi_d}{m_e v_e^2}}. \quad (11.5)$$

Az elektron a porrészcsekével $b \leq b_c$ teljesülése esetén ütközik, ennek a folyamatnak a $\sigma_{ed} = \pi b_c^2$ hatáskeresztmetszete:

$$\sigma_{ed} = \pi r_d^2 \left(1 + \frac{2e\phi_d}{m_e v_e^2}\right), \quad \text{ha} \quad \frac{2e\phi_d}{m_e v_e^2} > -1 \quad (11.6)$$

$$0, \quad \text{ha} \quad \frac{2e\phi_d}{m_e v_e^2} \leq -1. \quad (11.7)$$

A 11.6. egyenletben a feltétel azt fejezi ki, hogy – mint már említettük – az elektron kezdeti kinetikus energiája nagyobb kell hogy legyen, mint a taszításból származó potenciális energia. Amennyiben ez nem teljesül, akkor a hatáskeresztmetszet nulla, ld. 11.7. egyenlet.

Az ionok esetében a két részecske között vonzó kölcsönhatás van, ennek megfelelően $U < 0$. Feltételezve, hogy $|U(r)|$ mindenhol $1/r^2$ -nél lassabban csökken³, a legkisebb távolságot megadó 11.4. összefüggés ez esetben is érvényes. Mivel itt (egyszeres töltésű ionokat feltételezve) $U(R_0) \equiv e\phi_d$, a „kritikus” ütközési paraméter

$$b_c = r_d \sqrt{1 - \frac{2e\phi_d}{m_i v_i^2}}, \quad (11.8)$$

illetve az ebből adódó hatáskeresztmetszet:

$$\sigma_{id} = \pi r_d^2 \left(1 - \frac{2e\phi_d}{m_i v_i^2}\right). \quad (11.9)$$

A plazma elektronjai és ionjai a fenti hatáskeresztmetszeteiknek és sebességeloszlás-függvényeiknek megfelelően hatnak kölcsön a porrészcsekével és eredményeznek oda irányuló elektron- és ionfluxusokat, amelyek végül a felületi potenciál módosulásával önkonzisztens módon stabilizálódnak. Megjegyezzük, hogy egy poros plazma „környezetben” a plazmából származó elektron- és ionáramok mellett számottevő lehet az *ionok által okozott, az ultraibolya sugárzás miatti* és a *termikus eredetű elektronemisszió* is a részecske felületéről. A részecske töltését és felületi potenciálját ezen hatások is lényegesen befolyásolhatják [141], az egyszerűbb tárgyalás érdekében itt azonban ezekről a jelenségektől eltekintettünk.

³Amennyiben ez a lecsengés árnyékolási hatások miatt módosul, a 11.3. egyenlet megoldása bonyolultabbá válik [140], ezzel az esettel itt nem foglalkozunk.

11.3. A porrészecskékre ható erők

Az alábbiakban a plazmakörnyezetben elhelyezkedő porrészecskékre ható erőkkel foglalkozunk [26]. Először feltételezzük, hogy a rendszerben csak *egyetlen porrészecske* található és az erre ható erőket vesszük sorra, majd megadjuk a *porrészecskék között* ható erőt is, ami a kölcsönhatásukat jellemző potenciálból származik és erős csatolás esetén (ld. 1. fejezet) alapvető fontosságú a porrészecske-rendszer tulajdonságainak kialakításában.

11.3.1. Egy izolált porrészecskére ható erők

- A plazmában jelenlévő $\mathbf{E}$ elektromos tér a porrészecskére

$$\mathbf{F}_E = Q_d \mathbf{E} \quad (11.10)$$

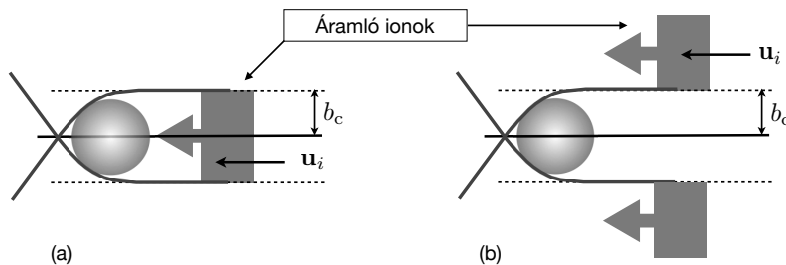
erőt fejt ki. Ez az erő módosulhat a porrészecske körüli perturbált elektron- és ionsűrűség miatt, olyan körülmények esetén, ha az árnyékolás térben nem izotróp (pl. amikor a részecskék feltöltődése irányfüggő a körülvevő plazma alkotóinak áramlása miatt).

- A gravitáció hatása:

$$\mathbf{F}_G = m_d \mathbf{g} = \frac{4}{3} r_d^3 \rho_d \mathbf{g}, \quad (11.11)$$

ahol ρ_d a porrészecske fajlagos sűrűsége és $\mathbf{g}$ a gravitációs gyorsulás. Mivel a részecske tömege a méret harmadik hatványával arányos, ezért ez az erő a releváns mérettartományban nagyon erősen változik: a nanométeres tartományban elhanyagolható, ugyanakkor a mikrométeres tartományban dominánssá válik.

- Az *ionok áramlása* következtében fellépő erő:



11.2. ábra. A porrészecskére a környező plazma ionjainak áramlása miatt ható erő számításához. (a) A porrészecskével ütköző ($b \leq b_c$) és (b) a porrészecske által eltérített ($b > b_c$) ionok hatása. $\mathbf{u}_i$ az ionok áramlási sebessége. A szürke tartományok az áramló ionok sokaságát jelképezik.

Az ionáramlás által keltett erő a 11.2. ábrán látható módon két komponensből tevődik össze. Az első részt azok az ionok okozzák, amelyek kis ütközési paraméter mellett ($b \leq b_c$) *beleütköznek* a porrészecskébe, a másik komponens pedig a porrészecskébe nem ütköző ionok *trajektóriáinak eltérítéséből* származik:

$$\mathbf{F}_I = \mathbf{F}_{\text{coll}} + \mathbf{F}_{\text{scatt}}. \quad (11.12)$$

Az ion - porrészecske ütközéseknek az (erőkomponensek kiszámításának alapjául szolgáló) analízisének is feltételezhetjük, hogy a porrészecske nyugalomban van, a redukált tömeg helyett az ion tömegével és a relatív sebesség helyett az ion sebességével számolunk. A nagy tömegarány miatt a tömegközépponti és a laboratóriumi koordináta-rendszerek egymással jó közelítéssel ekvivalensnek vehetők.

Először az erő első, az *ütközésekből eredő* komponensének meghatározásával foglalkozunk. Feltételezve, hogy az ionok áramlási sebessége u_i és elhanyagolva az ionok termikus sebességét, valamely Δt idő alatt a porrészecskére érkező ionok száma:

$$\Delta N_i = n_i b_c^2 \pi u_i \Delta t. \quad (11.13)$$

Ezek az ionok a porrészecskének $\Delta N_i m_i u_i = F_{\text{coll}} \Delta t$ impulzust adnak át, amiből egyszerűen meghatározható a porrészecskére ható erő:

$$F_{\text{coll}} = m_i u_i \frac{\Delta N_i}{\Delta t} = n_i m_i u_i^2 b_c^2 \pi = n_i m_i u_i^2 \pi r_d^2 \left(1 - \frac{2e\phi_d}{m_i v_i^2}\right). \quad (11.14)$$

Figyelembe véve az ionok $v_{i,\text{th}}$ termikus sebességét is, az előbbi formula alakja [26]:

$$F_{\text{coll}} = n_i m_i u_i v_s \pi r_d^2 \left(1 - \frac{2e\phi_d}{m_i v_s^2}\right), \quad v_s = \sqrt{u_i^2 + v_{i,\text{th}}^2}. \quad (11.15)$$

Az erő második része (lásd a 11.2.(b) ábra) a porrészecskével nem ütköző, de az általa *eltérített* ionoktól származik. Az erő számításához tekintsük a 11.3. ábrát! Itt b_c jelöli a 11.8. összefüggés szerinti kritikus ütközési paramétert, amelynél az ion pályája éppen érinti a porrészecske felületét. Az ütközési paraméter másik kitüntetett értéke $b = b_{\pi/2}$, melynél az ion szórási szöge 90° . A Coulomb-ütközések tárgyalásánál láttuk, hogy a szórási hatáskeresztmetszete végtelen, ugyanis a nagy ütközési paraméterrel érkező részecskék kisszögű szórása is hozzájárul az energia-, ill. impulzusátadáshoz. Az itt vizsgált rendszerben viszont az elektronok és az ionok jelenléte miatt fellép a Debye-árnyékolás jelensége, és ez *fizikailag értelmes felső korlátot* ad az ütközési paraméter tartományára. A 11.3. ábrán ezt a felső korlátot b_D -vel jelöljük, értékét a Debye-hosszal egyenlőnek vesszük, az ütközési paraméter $b > b_D$ tartományában a kölcsönhatást tehát elhanyagoljuk.

A 4.3.5. fejezetben a Coulomb-szórás analízisének a szórás szögére kapott (4.101. összefüggés szerinti) eredményt az ion-porrészecske rendszerre alkalmazva (és kihasználva a tömegközépponti és a laboratóriumi koordináta-rendszerek ekvivalenciáját):

$$\tan \frac{\chi}{2} = \frac{eQ_d}{4\pi\epsilon_0 m_i u_i^2 b}. \quad (11.16)$$

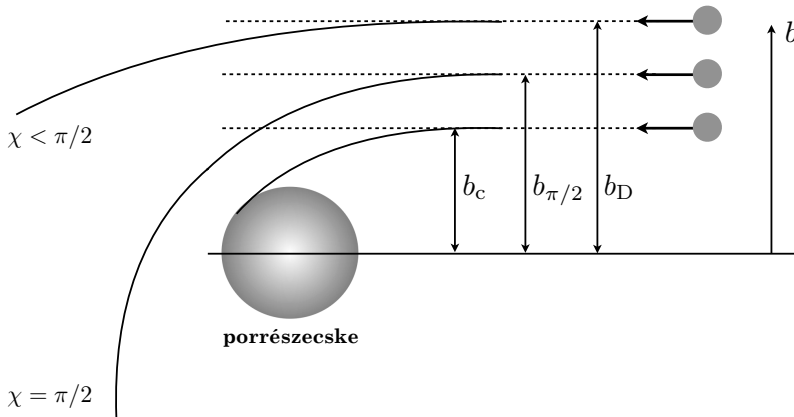
Bevezetve a $\chi = 90^\circ$ -os eltéréshez tartozó

$$b_{\pi/2} = \frac{eQ_d}{4\pi\epsilon_0 m_i u_i^2}. \quad (11.17)$$

ütközési paraméter értéket, a fenti egyenlet

$$\tan \frac{\chi}{2} = \frac{b_{\pi/2}}{b} \quad (11.18)$$

alakba is írható.



11.3. ábra. A porrészecske irányába különböző ütközési paraméterekkel (b) érkező ionok trajektóriái: $b = b_c$ esetén a trajektória éppen érinti a porrészecskét, $b = b_{\pi/2}$ mellett az eltérés szöge 90° , $b = b_D$ a levágási érték, amely fölött a modellben (a plazma árnyékoló hatása miatt) a kisszögű szórást elhanyagoljuk.

A porrészecske felé b és $b + db$ ütközési paraméterek között áramló ionok száma valamely Δt idő alatt

$$\Delta N_i(b, b + db) = n_i u_i 2\pi b db \Delta t. \quad (11.19)$$

Ezek az ionok az eltérítés miatt

$$\Delta N_i(b, b + db) \Delta p_x = \Delta N_i(b, b + db) m_i u_i (1 - \cos \chi) \quad (11.20)$$

impulzust adnak át a porrészecskének, amiből az utóbbira ható erő:

$$\begin{aligned} F_{\text{scatt}}(b, b + db) &= m_i u_i (1 - \cos \chi) \frac{\Delta N_i(b, b + db)}{\Delta t} \\ &= m_i n_i u_i^2 (1 - \cos \chi) 2\pi b db. \end{aligned} \quad (11.21)$$

Ezt az egyenletet az ütközési paraméter teljes releváns $b_c \leq b \leq b_D$ tartományára integrálva megkapjuk a porrészecskére ható teljes erőt:

$$F_{\text{scatt}} = m_i n_i u_i^2 2\pi \int_{b_c}^{b_D} (1 - \cos \chi) b db. \quad (11.22)$$

Mivel $\tan(\chi/2) = b_{\pi/2}/b$, ezért $1 - \cos \chi = 2b_{\pi/2}^2/(b^2 + b_{\pi/2}^2)$, amit a fenti integrálba helyettesítve az

$$F_{\text{scatt}} = m_i n_i u_i^2 4\pi b_{\pi/2}^2 \int_{b_c}^{b_D} \frac{b}{b^2 + b_{\pi/2}^2} db \quad (11.23)$$

alakhoz jutunk. Az integrálást elvégezve, a végeredmény:

$$F_{\text{scatt}} = m_i n_i u_i^2 2\pi b_{\pi/2}^2 \ln \left(\frac{b_{\pi/2}^2 + b_D^2}{b_{\pi/2}^2 + b_c^2} \right). \quad (11.24)$$

Az ionok termikus sebességét figyelembe véve az erő

$$F_{\text{scatt}} = m_i n_i u_i v_s 2\pi b_{\pi/2}^2 \ln \left(\frac{b_{\pi/2}^2 + b_D^2}{b_{\pi/2}^2 + b_c^2} \right) \quad (11.25)$$

alakra módosul (ahol v_s a 11.15. összefüggés szerinti sebesség).

Mindkét fent kiszámított erőkomponens iránya megegyezik az ionok áramlásának irányával.

- *Súrlódási erő*, ami a porrészecskék és a háttérgáz egymáshoz viszonyított mozgása következtében (tehát pl. a porrészecske mozgása, és / vagy a gáz áramlása esetén) lép fel,

$$\mathbf{F}_N = -\beta m_d \mathbf{v}_d, \quad (11.26)$$

ahol β a súrlódási együttható.

- Hőmérsékletgradiens jelenlétében fellépő „*termoforetikus*” erő:

$$\mathbf{F}_T = -A \nabla T_g, \quad (11.27)$$

ahol T_g a háttérgáz hőmérséklete és az A együttható a gáz hővezetési együtthatójának, a részecskék méretének és átlagsebességének függvénye. Az erő eredetét szemléletesen úgy értelmezhetjük, hogy a gáznak egy melegebb tartományából a porrészecskével ütköző atomok nagyobb impulzust közölnek a porrészecskével az ütközések során, mint egy hidegebb térrészből származó atomok.

- A porrézecskékre hatást lehet gyakorolni *fénysugárzás* segítségével. Erre a célra tipikusan lézereket használnak. A kölcsönhatás különböző részletei (pl. fényszórás miatt átadott impulzus, vagy a részecskék megvilágított felének felmelegedéséből származó effektusok) függenek a részecskék anyagától és még máig sem tekinthetők teljesen megértettnek. A fénnel való manipulálás fontos szerepet kap a rendszerek egyes jellemzőinek mérésében, pl. fénysugárral kialakítható egy áramlási mező, illetve az energiaközléssel változtatható a porrézecské-rendszer kinetikus energiája (hőmérséklete).

11.3.2. A porrézecskék között ható erő

Egy Q_d töltésű részecske (vákuumban), mint tudjuk,

$$\phi(r) = \frac{Q_d}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

Coulomb-potenciált hoz létre. Poros plazmákban ez a potenciál az elektronok és az ionok árnyékoló hatása (sűrűségük térbeli eloszlásának megváltozása) miatt egy, a λ_D Debye-hosszt tartalmazó exponenciális faktorral szorzódik, azaz a kölcsönhatási potenciál a

$$\phi(r) = \frac{Q_d}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-r/\lambda_D}}{r}$$

Debye-Hückel-, vagy *Yukawa*-alakot ölti. Megjegyzendő, hogy ez az alak csak izotróp plazma esetében érvényes, a töltött részecskék áramlása a potenciál izotróp voltát módosítja.

A fenti potenciál mellett két részecske között

$$F(r) = -Q_d \frac{\partial \phi(r)}{\partial r} = \frac{Q_d^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r^2} + \frac{1}{r\lambda_D} \right) e^{-r/\lambda_D} \quad (11.28)$$

erő hat. A részecskék azonos töltése miatt a részecskék között taszítás érvényesül.

11.4. A porrézecskék rendszerének alapvető jellemzői

A porrézecskék az őket beágyazó plazmában egytől háromdimenziós alakzatokat alkothatnak, az összetartó potenciál függvényében. A legfontosabb két- és háromdimenziós rendszerekben a porrézecskék felületi és térfogati sűrűsége

$$n_{2D} = \frac{N}{A} \quad , \quad n_{3D} = \frac{N}{V}, \quad (11.29)$$

ahol N a részecskék száma, A a kétdimenziós rendszer által lefedett felület, ill. V a háromdimenziós rendszer által kitöltött térfogat. Mindkét rendszerre

definiálható a *Wigner–Seitz-sugár*, ami két dimenzióban az egy részecskéhez tartozó terület, ill. három dimenzióban az egy részecskéhez tartozó térfogat, azaz

$$N\pi a_{\text{WS},2\text{D}}^2 = A \quad , \quad N\frac{4}{3}\pi a_{\text{WS},3\text{D}}^3 = V, \quad (11.30)$$

amiből

$$a_{\text{WS},2\text{D}} = \frac{1}{(n_{2\text{D}}\pi)^{1/2}} \quad , \quad a_{\text{WS},3\text{D}} = \frac{1}{(\frac{4}{3}n_{3\text{D}}\pi)^{1/3}}. \quad (11.31)$$

Az elektronok esetére a 3.1.2. fejezet 3.28. összefüggésével bevezetett *plazma-frekvencia* alkalmazható a porrészecskék rendszerére is. Három dimenzióban:

$$\omega_{\text{p},3\text{D}} = \sqrt{\frac{n_{3\text{D}}Q_{\text{d}}^2}{\varepsilon_0 m_{\text{d}}}}, \quad (11.32)$$

míg kétdimenziós rendszerekre egy *effektív plazmafrekvencia* definiálható:

$$\omega_{\text{p},2\text{D}} = \sqrt{\frac{n_{2\text{D}}Q_{\text{d}}^2}{2\varepsilon_0 m_{\text{d}} a_{\text{WS},2\text{D}}}}. \quad (11.33)$$

Ugyancsak hasznos itt feleleveníteni az 1. fejezetben (az 1.1. összefüggéssel) bevezetett *csatolási paramétert*, mely egy kölcsönható részecsképár potenciális energiáját viszonyítja azok kinetikus energiájához, egy karakterisztikus távolság (a_{WS}) mellett:

$$\Gamma = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Q_{\text{d}}^2}{a_{\text{WS}} k_{\text{B}} T_{\text{d}}}, \quad (11.34)$$

ahol T_{d} a porrészecske-rendszer hőmérséklete.

Ez a definíció a rendszer dimenzionalitásától függetlenül érvényes, ugyanakkor láthatóan Coulomb-kölcsönhatást tételez fel, ahol a potenciális energia $Q_{\text{d}}^2/a_{\text{WS}}$ értékével arányos. Coulomb-potenciállal jellemezhető *egykomponensű rendszerekben*⁴ a fenti paraméter egyértelműen jellemzi a rendszer állapotát, annak termodinamikai jellemzői, mint pl. belső energia, nyomás, stb. kizárólag Γ függvényei. $\Gamma \gtrsim 1$ mellett – azaz, ahol erős csatolásról beszélünk – a rendszerek rövidtávú korrelációkat és a folyadékokhoz hasonló viselkedést mutatnak. Γ növelésével a korrelációs hosszak nőnek, és ismert, hogy a háromdimenziós Coulomb-rendszerek $\Gamma \cong 175$ mellett elsőrendű fázisátalakulással BCC rácsba kristályosodnak [142, 143].

Az árnyékolt kölcsönhatási potenciálú „Yukawa-rendszerek” jellemzéséhez a Debye-hosszt szokásos egy karakterisztikus hosszzal, a rendszerre jellemző *Wigner–Seitz-sugárral* normálni, ezzel bevezetve a

$$\kappa = \frac{a_{\text{WS}}}{\lambda_{\text{D}}}$$

⁴Az *egykomponensű plazma modell* a rendszer egy komponensére fókuszál, míg a rendszer többi összetevőjét a potenciálon keresztül veszi figyelembe. Például, a csillagok bizonyos típusaiban az ionok jelentik a fő komponenst, az elektronok mint degenerált háttér jelennek meg. Poros plazmákban a fő komponenst a porrészecskék jelentik, a plazma további alkotói (elektronok, ionok) az egykomponensű plazma modellben csak a porrészecskék között ható potenciált befolyásolják (Coulomb $\rightarrow$ Yukawa).

dimenziómentes *árnyékolási paraméter*t. (A $\kappa \rightarrow 0$ határátmenet a Coulomb-rendszerek esetét képviseli.) A fázisátalakuláshoz tartozó csatolási paraméterérték függ a κ árnyékolási paramétertől, továbbá κ -tól függően a szilárd fázis BCC vagy FCC szerkezetű lehet [144]. Két dimenzióban a folyadék - szilárd átalakulás jellege máig kutatott és nem teljesen tisztázott terület (pl. [145] és az ott szereplő hivatkozások). A szilárd fázisban a jellemző szerkezet a háromszöggrács.

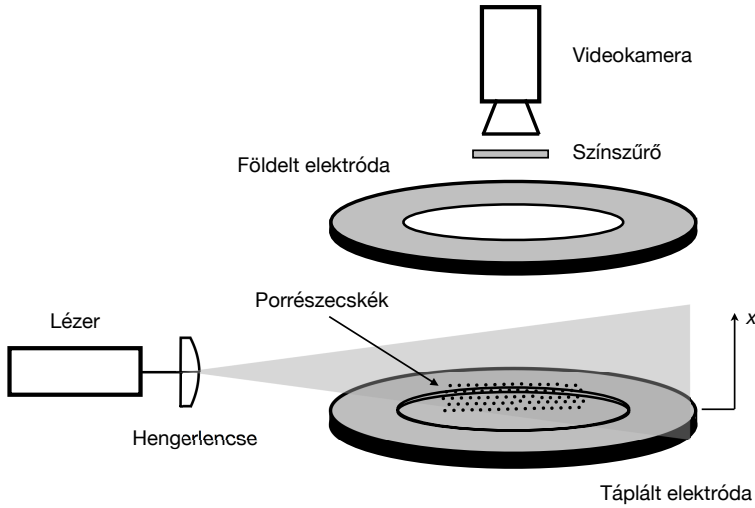
11.5. Poros plazma kísérleti berendezések

A *plazmakristályok* laboratóriumi megvalósítása [146, 147] (1994) után a poros plazmákat különböző környezetekben kezdték vizsgálni, a laboratóriumi kerektől kezdve a súlytalanság állapotát rövid ideig megvalósító parabolikus repüléseken át a Nemzetközi űrállomáson (ISS) – a súlytalanság körülményei között – folytatott kísérletekig. Az utóbbiak jelentősége a földi kísérletekhez képest abban áll, hogy „kiiktatják” a gravitáció hatását, azaz a mikrométeres mérettartományú porrészecskék esetén az egyik domináns külső (nem a plazmából származó) erőt. A különböző kísérleti berendezések részletes bemutatására itt nem vállalkozunk, csak egy tipikus laboratóriumi poros plazma kísérleti összeállítás ismertetésére szorítkozunk – ennek vázlatát a 11.4. ábra szemlélteti.

A kísérleti berendezés alapja egy (kapacitív csatolású) rádiófrekvenciás plazmaforrás, ami alacsony nyomású gázban ($\sim 1\text{--}10$ Pa) gyengén ionizált plazmát hoz létre. Az alábbiakban feltesszük, hogy a plazmába *egy* porrészecskét juttatunk be. Ez – a 3.3. fejezetben tárgyalt okok miatt és módon – jelentős negatív elektromos töltésre tesz szert, mikrométeres mérettartomány esetén ez a töltés tipikusan az elemi töltés néhány ezerszerese. Amint a rádiófrekvenciás plazmák leírásánál (9.4. fejezet) láttuk, az elektródák közelében tértöltött határrétegek alakulnak ki, melyeket nagy elektromos télerősség jellemez. Ennek az elektromos térnek fontos szerepe van a töltött porrészecske egyensúlyi pozíciójának kialakításában. A porrészecske negatív töltése miatt (a 11.4. ábra szerinti kialakítás esetén) rá az elektromos tér egy „felfelé” irányuló $\mathbf{F}_E$ erővel hat, ami a gravitáció következtében „lefelé” irányuló $\mathbf{F}_G$ erőt kompenzálva a részecske lebegtetéséhez vezet, a vázolt elektródaelrendezés esetén az alsó elektródához tartozó határréteg szélénél környezetében.

Nagy tömege miatt a porrészecske az elektromostér-erősség időátlagát érzékeli, ez jó közelítéssel lineárisan növekszik a határréteg maximális kiterjedésének pozíciójától ($s_{\max}$) az elektróda felé, $\mathbf{E}(x) = E_0(x - s_{\max})\mathbf{e}_x$. Itt $\mathbf{e}_x$ az x -irányú egységvektor és az x koordinátát a 11.4. ábra szerinti alsó elektróda pozíciójához képest mérjük, vagyis a határrétegben $x < s_{\max}$, így $\mathbf{E}(x) < 0$. Az x pozíciójú porrészecskére ható erő: $\mathbf{F}(x) = \mathbf{F}_E(x) + \mathbf{F}_G = Q_d E_0(x - s_{\max})\mathbf{e}_x - m_d \mathbf{g}$. Az *egyensúlyi pozíciót* $\mathbf{F}_E(x) + \mathbf{F}_G = 0$ *határozza meg*.

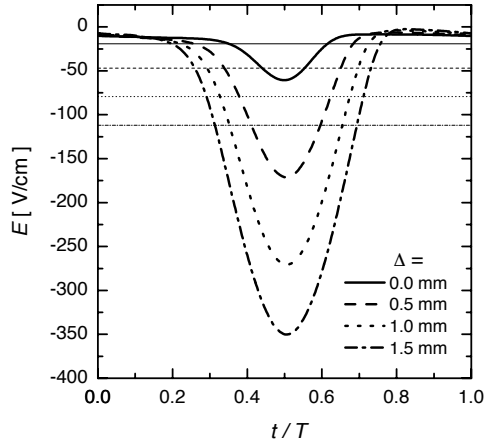
Továbbá, *mivel az erő lineárisan függ a pozíciótól, ezért a részecskét egy parabolikus potenciál tartja fogva. Ez a csapdázás megengedi, hogy a porrészecske függőleges irányban harmonikus rezgést végezzen.* (Erre a későbbiekben még visszatérünk.)



11.4. ábra. Poros plazma kísérleti berendezés vázlata [148]. A berendezés alapja egy rádiófrekvenciás plazmaforrás. A porrészecskék egyensúlyi pozícióját függőleges irányban (jó közelítéssel) az alsó elektróda közelében fellépő elektromos térből származó elektrosztatikus erő és a gravitáció egyensúlya, vízszintes irányban az ugyanezen elektróda közepén található besüllyesztés hatása biztosítja, mely annak pereme környezetében egy radiális elektromos teret hoz létre. (Az *AIP Publishing* engedélyével reprodukálva az alábbi cikkből: I. Donkó, P. Hartmann, Z. Donkó: Molecular dynamics simulation of a two-dimensional dusty plasma, *American Journal of Physics* 87, 986 (2019), <https://doi.org/10.1119/10.0000045>.)

Példaként tekintsünk egy $r_d = 5 \mu\text{m}$ sugarú (a laboratóriumi kísérletekben elterjedten használt) melamin-formaldehid anyagú porrészecskét, $Q_d = -10^4 e$ töltést feltételezve! A részecske tömege $m_d \cong 8 \times 10^{-13} \text{ kg}$, így a gravitációból származó erő $F_G \cong 8 \times 10^{-12} \text{ N}$. Ennek ellensúlyozásához $E \cong F_G/Q_d = -50 \text{ V/cm}$ térerősség szükséges. A kérdés, hogy egy adott plazmaforrásban ez milyen pozícióban található.

A 11.5. ábra az időfüggő és az időátlagolt elektromostér-erősség értékét mutatja a határréteg maximális kiterjedésének pozíciójában és a határréteg belsejébe eső egyes pozíciókban, egy harmonikus $\phi(t) = \phi_0 \cos(2\pi ft)$ feszültséggel táplált RF gázkisülésben, $\phi_0 = 300 \text{ V}$, $f = 13.56 \text{ MHz}$, $L = 2.5 \text{ cm}$, $p = 10 \text{ Pa}$ (argon) paraméterek mellett (PIC/MCC szimulációs eredmények alapján). A határréteg maximális kiterjedésének pozíciójától mért Δ pozíció függvényében a térerősség időfüggése lényegesen változik. $\Delta = 0 \text{ mm}$ mellett az RF periódus kis részében jelenik meg számottevő elektromos térerősség, növekvő Δ mellett mind a jelentős térerősséget mutató időtartam, mind a térerősség abszolút értéke növekszik. Az elektromostér-erősség időátlaga – mint eddig is állítottuk – valóban közel lineárisan nő a Δ távolság függvényében. A részecske számára az



11.5. ábra. Az elektromos térerősség az idő függvényében (egy RF perióduson belül, vastag vonalak) a táplált elektródához tartozó határrétegen belül, annak maximális hosszától mért Δ mélységben ($\Delta = s_{\max} - x$). A vékony vízszintes vonalak a térerősségnek a megfelelő pozíciókban vett, a porrészecskék által „érezkelt” átlagértékét jelölik. Az utóbbi láthatóan közel lineárisan változik a pozíció függvényében. A plazmaforrást $\phi(t) = \phi_0 \cos(2\pi ft)$ feszültség táplálja; $\phi_0 = 300$ V, $f = 13.56$ MHz, $L = 2.5$ cm, $p = 10$ Pa (argon). (PIC/MCC szimulációs eredmények.)

erők egyensúlya, azaz a lebegtetés $\Delta \cong 0.5$ mm pozícióban biztosított a fenti paraméterek mellett.

Az egy porrészecskére eddig elmondottak több részecske esetén is érvényesek, de ez esetben számolni kell a *több részecske közötti* kölcsönhatással is.⁵ Mivel a részecskék töltése (közel) azonos, ezért pl. a 11.4. ábra szerinti kísérleti berendezésben *horizontális összetartás* hiányában az elektrosztatikus taszítás miatt folyamatosan távolodnának egymástól. A horizontális összetartást az alsó elektróda közepébe mart besüllyesztés, vagy az elektródára helyezett gyűrű, esetleg a plazmakamra fala biztosíthatja, melyek megfelelő elektromos teret / potenciált hoznak létre.

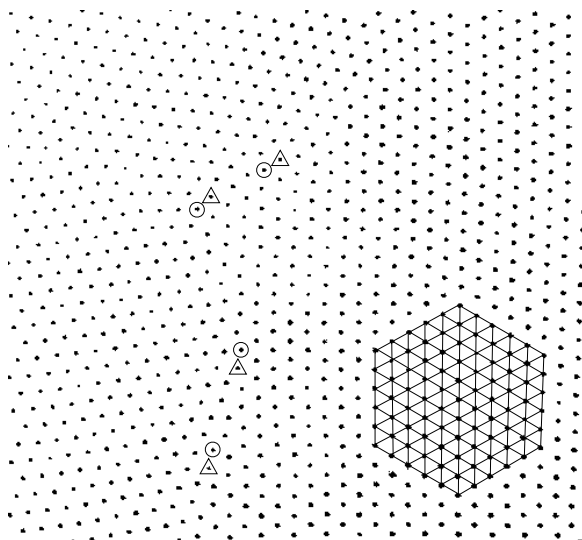
A horizontális összetartó potenciál hatására a porrészecske-rendszer az alsó elektróda középpontja fölött koncentrálódik. Amennyiben a porrészecskék száma nem túlságosan nagy, úgy a részecskék *egy réteget* alkotnak, melynek sűrűsége sugárirányban csökken. A porrészecskék számát növelve többretegű rendszerek alakulnak ki, ezekben a porrészecskék függőleges irányban láncokba rendeződhetnek, az ionáramlás hatására. A horizontális összetartási tartományt szűkítve és számottevő hőmérsékletgradienst létrehozva háromdimenziós közel

⁵Megemlítjük, hogy amennyiben a porrészecskék nagyon nagy számban vannak jelen a plazmában, akkor módosíthatják a plazma makroszkopikus paramétereit is, de ezzel a problémakörrel itt nem foglalkozunk.

gömbszerű alakzatok, „Yukawa labdák” hozhatók létre [138].

A következőkben csak a sokat vizsgált, viszonylag egyszerű elrendeződéssel, az *egy réteget alkotó* rendszerekkel foglalkozunk. Megjegyezzük, hogy ez a rendszer valójában egy „kvázi-kétdimenziós” rendszer, ugyanis a részecskék a függőleges csapdázás véges erőssége miatt a síkra merőleges irányban is mozoghatnak. Mindaddig amíg a részecskék kitérése a síktól sokkal kisebb, mint a részecskék síkbeli távolsága, a rendszer két dimenzióként kezelhető, ugyanakkor a rendszerben fellépő hullámok tárgyalásánál (11.6.2. fejezet) figyelembe kell venni a véges összetartásból adódó plusz szabadsági fokot.

A 11.4. ábrára visszatérve, az ott szereplő lézer, illetve az ennek fényét szétterítő lencse a részecskerendszer megvilágítására szolgál. A részecskerendszer megfigyelését a videokamera teszi lehetővé, mely előtt egy keskenysávú, a lézer hullámhosszán áteresztő, de a plazma fénykibocsátásának nagy részét blokkoló szűrő helyezkedik el, ami lényegesen javítja a mérés jel/zaj viszonyát. A mérések során az elsődleges eredményt az egyes részecskék trajektóriái jelentik, amiből az idő függvényében adódik az egyes részecskék pozíciója és sebessége. Ezekből a koordinátákból további mennyiségek származtathatók, pl. az átlagos négyzetes elmozdulás, ami megadja a diffúziós együtthatót. Ugyancsak a részecskék koordinátáiból határozhatók meg a struktúra jellemzői, vagy azonosíthatók a rendszerben fellépő hullámok – mint azt a későbbiekben látni fogjuk.



11.6. ábra. Poros plazma kísérletben megfigyelt részecskesorak. A kép egy részén a berajzolt vonalak a szabályos *háromszögrács* szerkezetet mutatják; itt a részecskék szomszédjainak száma 6. A körök és a háromszögek néhány olyan rácshibát azonosítanak, ahol a részecskék szomszédjainak száma 5, illetve 7. (A felvételért köszönet Hartmann Péternek.)

A 11.6. ábra egy ilyen mérésből származó képet, egy „plazmakristályt” szemléltet. A részecskék láthatóan erősen rendezett rendszert alkotnak: a rendszer több, különböző orientációjú kristályos szemcséből áll, amelyekben a részecskék szabályos háromszögrácsba rendeződnek. A szemcsékben a rács orientációja eltérő, a szemcsék határain rács hibák vannak jelen: a rácsra jellemző 6 első szomszéd helyett néhány részecske 5, illetve 7 szomszéddal rendelkezik. Az erős rendezettség oka az, hogy a részecskék közötti potenciális energia nagymértékben felülmúlja a termikus energiát, Γ csatolási paraméter értéke itt a több 100 – 1000 tartományban van.

A szilárd fázis mellett érdekes a részecskerendszer folyadék fázisának vizsgálata is. Ehhez a rendszert meg kell olvasztani, ami a részecskék kinetikus energiájának (a Γ együtttható csökkenését eredményező) növelésével lehetséges. Ezt a kísérletekben egy olyan kisfrekvenciás feszültség alkalmazásával érik el, aminek a frekvenciája rezonanciában van a függőleges csapda sajátfrekvenciájával, vagy lézeres fűtéssel, a részecskeréteget gyorsan pásztázó erős lézersugárral közölnek kinetikus energiát a részecskékkel.

Mint már említettük, a rendszereket alkotó nagyszámú részecskének a mozgását követve számos, a sokrészecske-fizika szempontjából fontos jelenség válik tanulmányozhatóvá. Ezek a jelenségek szimulációs megközelítéssel is tanulmányozhatók. A következőkben az erre a célra hatékonyan alkalmazható ún. *molekuladinamikai* (MD) szimulációs módszert tárgyaljuk.

11.6. Sokrészecske-rendszerek molekuladinamikai szimulációja

A továbbiakban megismerkedünk a sokrészecske-rendszerek szimulációs leírásának legfontosabb módszerével, a *molekuladinamikai szimulációval* [149]. A módszer alapjainak ismertetése után bemutatjuk a sokrészecske-rendszerek legfontosabb statikus és dinamikus jellemzőinek, valamint transzportparamétereinek meghatározási lehetőségeit.

11.6.1. A molekuladinamikai szimulációs módszer alapjai

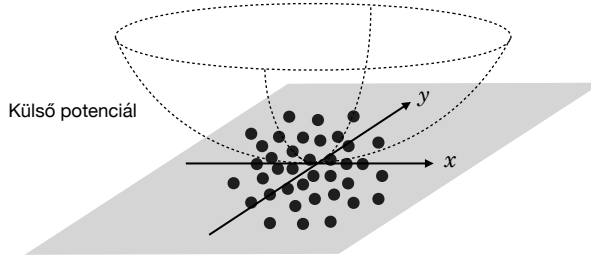
A molekuladinamikai szimulációk lehetőséget adnak egy rendszer minden egyes részecskéjének követésére, azoknak a többi részecskével való folyamatos kölcsönhatását és a külső terekből származó erőket is figyelembe véve [150]. Ehhez mindössze az összes részecske mozgásegyenletének szimultán megoldása szükséges.

Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy az összes részecske tömege és töltése azonos, illetve, hogy a részecskékre ható súrlódás elhanyagolható. Ekkor az egy (példaként az i -edik) részecskére vonatkozó mozgásegyenlet:

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{i,j} + \mathbf{F}_{i,\text{ext}}, \quad (11.35)$$

ahol a jobb oldalon álló első tag az összes többi részecskével való kölcsönhatásból származó eredő erő, a második tag pedig az i -edik részecskére ható külső (azaz nem a részecskék kölcsönhatásából származó) erőt adja meg.⁶

Véges rendszerek esetén az összetartás csak $\mathbf{F}_{i,\text{ext}} \neq 0$ mellett lehetséges – ez az erő pl. egy külső parabolikus potenciálból származhat. A 11.7. ábra egy ilyen rendszert szemléltet, itt a részecskék az (x, y) síkban mozoghatnak, az összetartást egy $\phi_{\text{ext}}(r) = \frac{1}{2} \alpha r^2$ potenciál ill. az ennek megfelelő $\mathbf{F}_{\text{ext}}(r) = -\alpha r \hat{\mathbf{e}}_r$ erő biztosítja, ahol $\hat{\mathbf{e}}_r$ az r -irányú egységvektor és α a potenciál amplitúdója.



11.7. ábra. Külső parabolikus potenciál által csapdázott sokrészecske-rendszer. A részecskék az (x, y) síkban mozoghatnak, az összetartó potenciál $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ függvénye.

Egy ilyen egyszerű rendszerben a fentiek alapján az i -edik részecske mozgásegyenlete:

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{i,j} - \alpha r_i \hat{\mathbf{e}}_r. \quad (11.36)$$

Nem túl nagy részecskeszámok esetén az erő kiszámításához szükséges összegzés problémamentes és az egyenletet diszkrétizálás után egy integrálási séma segítségével megoldhatjuk. Az egyik legelterjedtebb, a diszkrét Δt időlépésben másodrendű pontosságot biztosító ilyen séma a „*sebesség-Verlet*” módszer, melynek egyenletei minden egyes részecskére (melyek indexét itt elhagyjuk) a következő-

⁶Ha a háttérgáz részecskéivel való ütközések miatti sűrűdés nem hanyagolható el, ezt egy

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{i,j} + \mathbf{F}_{i,\text{ext}} - \beta m_d \mathbf{v}_i + \mathbf{R}.$$

alakú mozgásegyenlettel lehet figyelembe venni. Az itt járulékosan (11.35. egyenlethez képest) megjelenő utolsó két tag a környezettel bekövetkező kölcsönhatás két aspektusát reprezentálja. Az első egy makroszkopikusan értelmezhető sűrűdési erőnek, míg a második a részecskéktől kapott véletlenszerű (mikroszkopikus) „lökések” során fellépő erőnek felel meg. Az utóbbi hiányában a porrészecskék a sebességgel arányos sűrűdés miatt folyamatosan veszítenék a mozgási energiájukat. A megfelelően alkalmazott véletlenszerű erő hozzáadásával a rendszer a kívánt hőmérsékleten tartható. A fenti mozgásegyenletre épülő megközelítést „Langevin-dinamikai” szimulációnak is nevezik [151].

ek:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t)(\Delta t)^2, \quad (11.37)$$

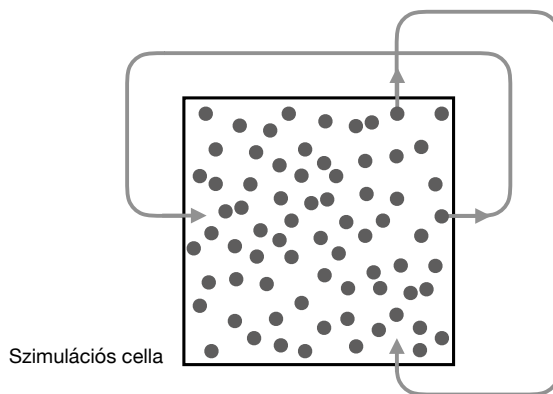
$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2}[\mathbf{a}(t) + \mathbf{a}(t + \Delta t)]\Delta t, \quad (11.38)$$

ahol $\mathbf{a} = \mathbf{F}/m$ a részecskék gyorsulása. Mivel a második egyenletben a gyorsulás mind t mind pedig $t + \Delta t$ időpillanatban is szerepel, ezért a számítás például az alábbi módon végezhető el:

1. az első egyenletnek megfelelően aktualizáljuk a pozíciókat, a releváns mennyiségek t időpillanatban ismert értékei alapján,
2. a második egyenletből, csak az $\mathbf{a}(t)$ -t figyelembe véve kiszámítunk egy „köztes” sebességet: $\mathbf{v}^* = \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t)\Delta t$,
3. az új pozíciókban meghatározzuk a részecskékre ható erőket és ezekből kiszámítjuk az egyes részecskékre ható $\mathbf{a}(t + \Delta t)$ gyorsulást,
4. és végül kiszámítjuk $\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}^* + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t + \Delta t)\Delta t$ értékét.

A sorozatos $t \rightarrow t + \Delta t$ időléptetésekkel az összes részecske fázistérbeli koordinátái megkaphatók az idő függvényében.

A 11.7. ábrán bemutatott egyszerű rendszerben a részecskék sűrűsége az origótól való távolság függvényében nyilvánvalóan változik. A gyakorlatban ugyanakkor gyakran célszerű *homogén sűrűségű* rendszerek vizsgálata, amelyekben pl.

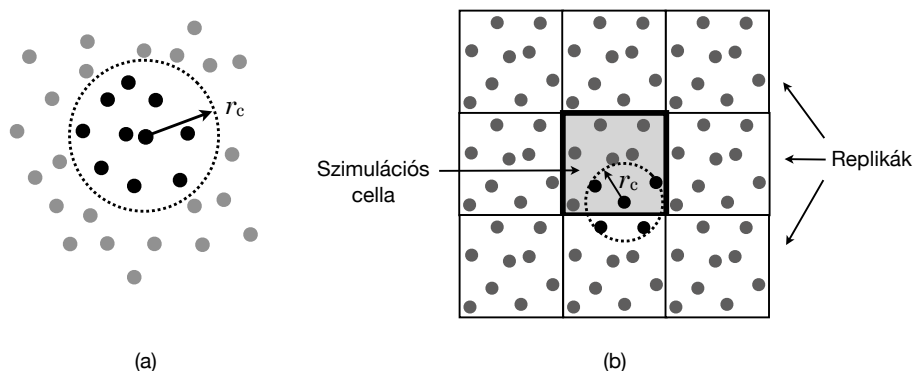


11.8. ábra. Molekuladinamikai szimulációban alkalmazott *periodikus határfeltételek* (két dimenzióban) [148]: amennyiben valamelyik részecske elhagyja a szimulációs cellát, akkor az adott oldallal ellentétes oldalon belép a cellába. (Az *AIP Publishing* engedélyével reprodukálva az alábbi cikkből: I. Donkó, P. Hartmann, Z. Donkó: Molecular dynamics simulation of a two-dimensional dusty plasma, American Journal of Physics 87, 986 (2019), <https://doi.org/10.1119/10.0000045>.)

egyértelmű kapcsolat adható meg a fő paraméterek (pl. a csatolási paraméter) és egyéb jellemzők, pl. transzportegyütthatók között. Homogén rendszerek megvalósítására a legegyszerűbb módszer a *periodikus határfeltételek* alkalmazása, ld. 11.8. ábra. A módszer lényege, hogy minden időlépésben azonosítja azokat a részecskéket, amelyek elhagyják a szimulációs cellát és ezeket a cella ellentétes oldalán újra belépteti. Ez – mint a későbbiekben látni fogjuk – szükségessé teszi annak megvalósítását, hogy a cella két szemközti oldala közelében tartózkodó részecskék valójában közeli párokként érzékeljék egymást. Ez biztosítja azt, hogy a részecskék átléptetése a cella szemközti tartományába semmiféle tranzienszt nem eredményez. A periodikus határfeltételek alkalmazása egyben biztosítja a rendszer stabilitását tisztán taszító potenciál esetében is (azaz nem szükséges egy helyfüggő csapdázó potenciál alkalmazása).

A molekuladinamikai szimulációk kulcskérdése az egyes részecskékre ható erő kiszámítása. Az, hogy az adott részecskére ható erő kiszámításánál az összegzést az összes többi részecskére, vagy csak azok egy részhalmazára, esetleg a szimulációs cella periodikus képeire is el kell-e végezni, a kölcsönhatási potenciál függvénye.

A Coulomb- és a Yukawa-potenciálok közötti matematikai eltérés – mint láttuk – egy exponenciális levágás. Ennek köszönhetően a Yukawa-potenciál *rövid hatótávolságú potenciálnak* tekinthető és definiálható egy r_c levágási hossz, amin kívül a potenciál már elhanyagolható. Véges rendszer esetén, amennyiben ez a levágási hossz kisebb a vizsgált rendszer méreténél, a szimulációt jelentősen leegyszerűsíti az, hogy az adott részecskére ható erő kiszámításához csak



11.9. ábra. Rövid hatótávolságú potenciál esete: véges (a) és periodikus határfeltételekkel emulált végtelen (b) rendszer esetén is bevezethető egy levágási hossz (r_c), melynél nagyobb távolságú részecskepárok esetén a kölcsönhatás elhanyagolható. (Az *AIP Publishing* engedélyével reprodukálva az alábbi cikkből: I. Donkó, P. Hartmann, Z. Donkó: Molecular dynamics simulation of a two-dimensional dusty plasma, *American Journal of Physics* 87, 986 (2019), <https://doi.org/10.1119/10.0000045>.)

a „közeli” (azaz a levágási hosszban belül található) részecskéket kell figyelembe venni. A 11.9.(a) ábra ezt az esetet mutatja. Ha r_c a levágási hossz, valamely részecskére ható erő kiszámításához elegendő a részecske köré írt r_c sugarú körön belül elhelyezkedő részecskéket figyelembe venni.

Periodikus határfeltételek alkalmazása esetén (ld. 11.9.(b) ábra) a levágási hosszban közelebbi szomszédok megkeresése körültekintést igényel, ugyanis a szimulációs cella határainak közelében elhelyezkedő részecskék esetén az r_c sugarú kör (ill. három dimenzióban az r_c sugarú gömb) ugyanis „kilógthat” a szimulációs cellából. Az erő számításához ebben az esetben a 11.9.(b) ábrán feltüntetett módon a szimulációs cellát körül kell venni annak replikáival, és az r_c távolságnál közelebbi szomszédok keresését ki kell terjeszteni ezekre a replikákra. Így a szimulációs cellában távol, pl. az ellentétes határokon lévő részecskék valójában egymás szomszédai lehetnek.⁷

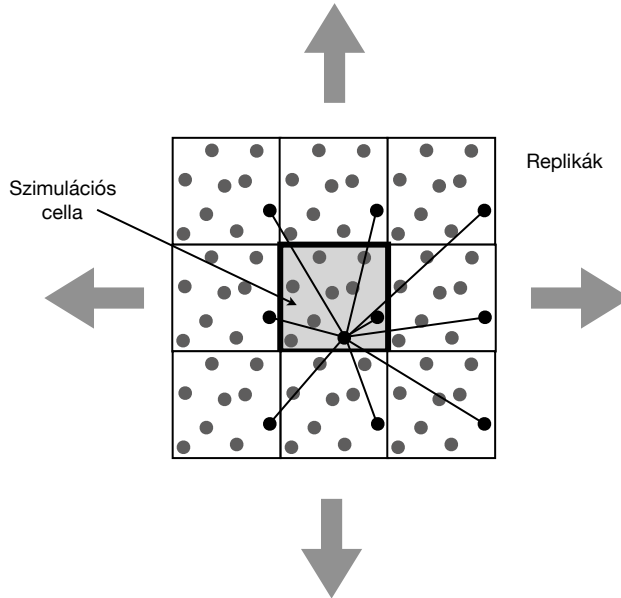
Az erők számításával kapcsolatban végül megemlíjtjük a Coulomb-potenciál esetét, ahol a kölcsönhatás hatótávolsága végtelen, és ezt a szimulációkban is figyelembe kell venni. Periodikus határfeltételek esetén az $i - j$ részecskepár kölcsönhatásának számolásánál például az i -edik részecskére ható erő számolásánál nem csak magát a j -edik részecskét kell figyelembe venni, hanem a j -edik részecske minden egyes replikában megjelenő képét is, amint azt a 11.10. ábrán vázoltuk. A Yukawa-potenciál esetére bemutatott képpel ellentétben itt a replikák minden egyes figyelembe vett dimenzióban a végtelenig kell, hogy ismétlődjenek. Természetesen így az adott részecskére ható erő meghatározásához szükséges „direkt” összegzés nem megvalósítható.

Ugyanakkor léteznek módszerek, amik ezt a problémát áthidalják – ezek közül az Ewald-összegzés módszerét [152] és a P³M („Particle - Particle Particle - Mesh”) eljárást [106] említjük meg. A P³M módszer alapötlete az, hogy a részecskék kölcsönhatásának egy részét egy rácsalapú módszerrel veszi figyelembe (PM („Particle - Mesh”) rész) és a másik, csak a közeli részecskepárookra nem eltűnő részét pedig direkt összegzéssel kezeli (PP („Particle - Particle”) rész), úgy, mint a rövid hatótávolságú potenciál esetében láttuk.⁸

⁷A szomszédok megkeresésére hatékony algoritmusok ismertek, lásd pl. [149].

⁸A PM rész az összegzést a hullámszámtérben végzi el, ezzel figyelembe veszi a replikák periodicitását. A módszer a pontszerű töltések helyett véges méretű *töltésfelhőket* használ. A felhők által képviselt („szétkent”) töltést egy rácshoz rendeli, ami megadja a $\rho^\dagger(\mathbf{r})$ *diszkrét* tértöltéssűrűséget a valós térben (a $\dagger$ jellel itt a mennyiségek rácson értelmezett voltát jelöljük). Következő lépésként diszkrét Fourier-transzformációval meghatározza a hullámszámtérbeli $\rho^\dagger(\mathbf{k})$ értéket, majd ezt egy alkalmasan választott *Green-függvény*nel megszorozva megadja a $\mathbf{k}$ -térben a $\Phi^\dagger(\mathbf{k}) = G(\mathbf{k})^\dagger \rho(\mathbf{k})^\dagger$ potenciáeloszlást. Ebből egy inverz diszkrét Fourier-transzformáció a valós térbeli rácson vett potenciáeloszláshoz vezet, aminek numerikus differenciálásával adódik az $\mathbf{E}^\dagger(\mathbf{r})$ elektromos térerősség. Ezekből a rácson ismert értékekből interpolációval meghatározható az elektromos térerősség a részecskék pozíciójában, ami megadja a rájuk ható erőket.

A kölcsönhatás két részre bontása azért szükséges, mert a pontszerű töltések potenciálja a $\mathbf{k}$ -térben divergál, tehát a probléma nem oldható meg egyedül a PM megközelítéssel. A ponttöltés helyett használt töltésfelhők Fourier-transzformáltja viszont sávkorlátozott, tehát a PM módszerrel kezelhető. A ponttöltések és a töltésfelhők kölcsönhatása a töltésfelhő méreténél nagyobb távolságok esetén megegyezik, kisebb távolságok esetén viszont a két kölcsönhatás közötti különbséget a PP módszerrel korrigálni kell, azaz $F(\cdot \circ \cdot) = F(\cdot) \circ F(\cdot)$, de $F(\cdot \circ \cdot) = F(\cdot \circ \cdot) + F_{\text{PP}}$. Itt $\cdot$ a pontszerű töltést, $\circ$ a szétkent töltésfelhőt reprezentálja.



11.10. ábra. Coulomb kölcsönhatási potenciál esete.

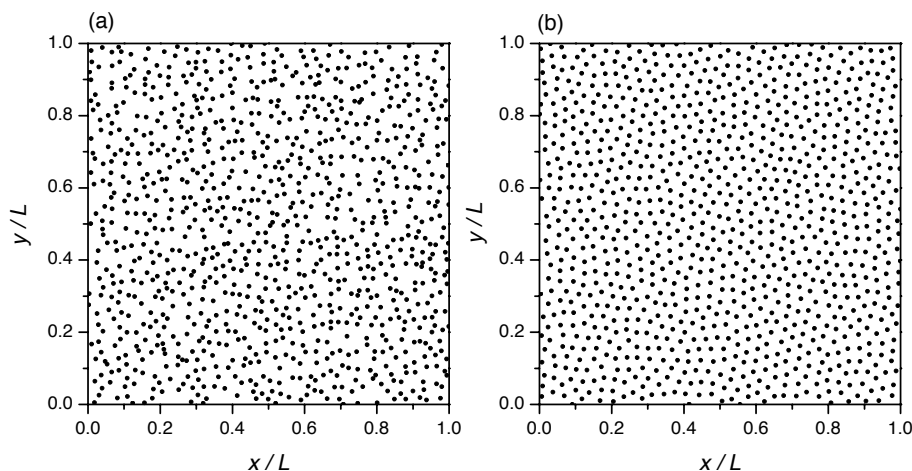
A 11.11. ábra, példaként, periodikus határfeltételeket alkalmazó molekuladinamikai szimulációval kapott képeket mutat kétdimenziós Yukawa-rendszerekre, $\Gamma = 5$ és $\Gamma = 120$ csatolási paraméter értékek, illetve $\kappa = 1$ mellett. Míg a gyengébb csatolás esetén a részecskék elrendeződése lényegében véletlennek tűnik, az erősebb csatolás esetében a 11.11.(b) ábra kifejezett, korrelált struktúrát mutat.

Szembetűnő, hogy $\Gamma = 120$ esetén az első szomszédok távolsága közel azonos, ezt az magyarázza, hogy a részecskék termikus energiája kicsi és így a szomszédok által definiált potenciálvölgyekben igyekeznek elhelyezkedni. Mivel a részecskék mozgása így korlátozott, ez egyben azt is jelenti, hogy a potenciálfelület is lassan, a részecskék diffúziója által meghatározott módon változik. Az erősen csatolt tartományban a potenciálfelület változásának időskálája hosszabb, mint a plazmafrekvencia reciproka, azaz a részecskék számos rezgést végezhetnek mialatt a környezetük nem változik jelentősen (azaz a legközelebbi szomszédjaik ugyanazok a részecskék maradnak).⁹

11.6.2. Alapvető statikus jellemzők

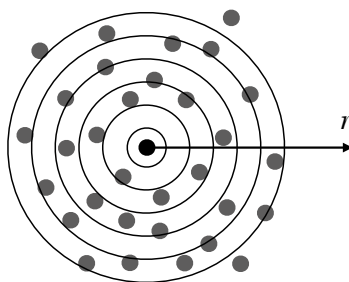
Az erősen csatolt plazmákat, mint például az itt tárgyalt poros plazmákat *klasszikus sokrészecske-rendszerként* kezeljük. Ezek a rendszerek – mint már említettük – sok szempontból a folyadékokéhoz hasonló viselkedést mutatnak, ezért

⁹Ez a megfigyelés, illetve szimulációkkal bizonyított jellegzetes viselkedés képezi az erősen csatolt plazmák kollektív gerjesztéseit leíró „Kvázilokalizált töltés elmélet” [153] alapját.



11.11. ábra. A részecskék pozíciói egy időpillanatban, kétdimenziós Yukawa rendszerben, a csatolási paraméter $\Gamma = 5$ (a) és $\Gamma = 120$ (b) értékei mellett, $\kappa = 1$. (MD szimulációs eredmény, periodikus határfeltételek alkalmazásával. L a szimulációs cella élének hossza.)

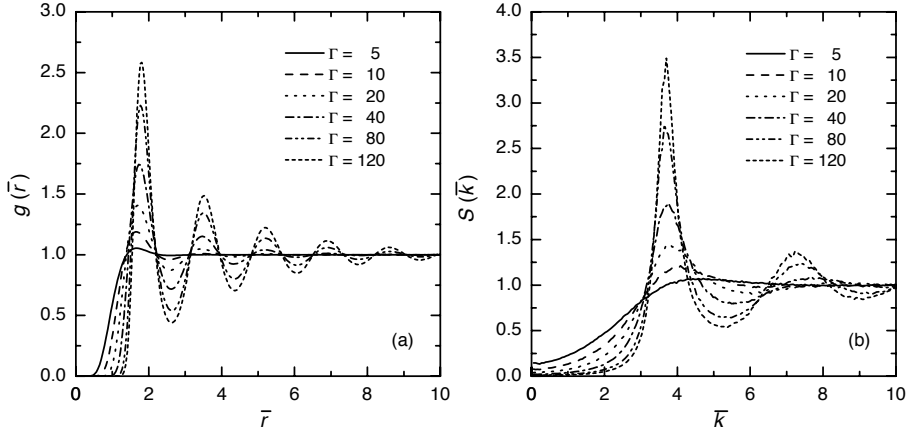
jellemzésükre is több olyan mennyiség használatos, amit a folyadékok fizikájából ismerünk. Ilyenek az alább tárgyalásra kerülő, a rendszer struktúráját jellemző párkorrelációs függvény, a koordinációs számok és a statikus struktúrafüggvény.



11.12. ábra. A párkorrelációs függvény meghatározásához a tesztrészecske körüli részecskék sűrűségét mérjük koncentrikus héjakban.

A sokrészecske-rendszerek legfontosabb statikus jellemzője a kétrészecske-korrelációkat kifejező *párbkorrelációs függvény* (más néven radiális eloszlásfüggvény). Feltételezve, hogy a rendszer *izotróp*, a $g(r)$ párbkorrelációs függvény csak a részecskék távolságának függvénye. A szimulációkban a függvény meghatározásához (a 11.12. ábrán vázolt módon) az egyes részecskék körüli héjakban mérjük a szomszédos részecskék számát, az eredményt átlagoljuk és normáljuk

az ideális gázhoz tartozó függvényhez viszonyítva (azaz $r \rightarrow \infty$ esetén $g(r) = 1$). A $g(r)$ függvény tehát a részecskék relatív sűrűségét adja meg egy kiválasztott részecske körül, az ideális gázhoz viszonyítva.



11.13. ábra. Kétdimenziós Yukawa rendszerek (a) párkorrelációs függvényei és (b) statikus struktúrafüggvényei a csatolási paraméter különböző értékeire, $\kappa = 1$ mellett. $\bar{r} = r/a_{WS}$ és $\bar{k} = ka_{WS}$.

Korrelációk jelenlétében a $g(r)$ függvény az ideális gáztól eltérő viselkedést mutat. Példaként, a 11.13(a). ábrán kétdimenziós Yukawa-rendszerek párkorrelációs függvényei láthatók, $\kappa = 1$ mellett, a csatolási paraméter különböző értékeire. A legalacsonyabb Γ értéknél a függvény csak egy nagyon kis csúcsot mutat, de már ebben az esetben is megfigyelhető a „korrelációs lyuk” kialakulása $r = 0$ környezetében, ami annak a következménye, hogy a részecskék az elektrosztatikus taszítás miatt nem kerülnek egymáshoz tetszőlegesen közel.

Nagy részecsketávolságok mellett a rendszer nem mutat struktúrát, az ideális gázhoz hasonlóan (mely a $\Gamma \rightarrow 0$ határesetet képviseli). Γ növelésével (azaz a hőmérséklet csökkenésével) a korrelációs lyuk szélesedik, a részecskék (a csökkenő kinetikus energiájuk miatt) egyre kevésbé tudják egymást megközelíteni, továbbá a függvényben határozott „hullámmás” jelenik meg, ami a *foliadékállapotra* jellemző *korrelációs héjak* kialakulását mutatja. Ez annak felel meg, hogy egy kiválasztott részecske körül nézve kialakul egy „részecskékben gazdag” tartomány, melyet egy „részecskékben szegény” tartomány követ, ismétlődve, míg a korreláció lecseng. Nagyobb Γ esetén $g(r)$ hullámmása erősebb és a korrelációs hossz megnő. A függvény első csúcsa $\bar{r} = r/a_{WS} \cong 1.9$ értéknél jelenik meg, ami a (két dimenzióra jellemző, lásd pl. 11.6. ábra) háromszögrács rácsállandójának felel meg. (A háromszögrács rácsállandóját b -nek véve, egy részecskéhez $b^2\sqrt{3}/2$ terület tartozik, ami megegyezik az a_{WS} sugarú kör területével (emlékezzünk, hogy ez definiálja a_{WS} -t!), azaz $b^2\sqrt{3}/2 = \pi a_{WS}^2$. Ebből a rácsállandó

és a Wigner–Seitz-sugár aránya: $b/a_{\text{WS}} = \sqrt{2\pi/\sqrt{3}} \cong 1.905$.)

Megjegyezzük, hogy a párkorrelációs függvény csúcsainak pozíciója Γ értéktől gyengén függ, azaz *a szilárd fázisra jellemző struktúra a folyadékfázisban is „öröklődik”*.

A párkorrelációs függvényt két egymást követő minimumhelye között integrálva megkapható az adott (pl. j -edik) csúcshoz tartozó korrelációs héjban lévő részecskék száma, azaz a *koordinációs szám*:

$$M_j = 2\pi n \int_{r_-}^{r_+} r g(r) dr = 2\pi a_{\text{WS}}^2 n \int_{r_-}^{r_+} \bar{r} g(\bar{r}) d\bar{r} = 2 \int_{\bar{r}_-}^{\bar{r}_+} \bar{r} g(\bar{r}) d\bar{r}, \quad (11.39)$$

ahol r_- és r_+ a $g(r)$ függvény minimumhelyei (és $\pi n a_{\text{WS}}^2 = 1$). A fenti integrált a 11.13.(a) ábra $\Gamma = 120$ görbéjére meghatározva $\bar{r}_- = 0$, $\bar{r}_+ = 2.58$ határookra $M_1 \cong 6$ adódik, a második csúcstól határoló $\bar{r}_- = 2.63$, $\bar{r}_+ = 4.32$ értékekre pedig $M_2 \cong 12$. Egy háromszögrács esetén mind az első, második és harmadik héjban 6-6-6 részecske helyezkedik el, ezek távolsága valamely tesztrészecskétől rendre b , $b\sqrt{3}$ és $2b$ (ahol b a rácsállandó). A folyadékállapotú rendszerben a koordinációs szám az első szomszédokra pontosan megegyezik ezzel, míg a párkorrelációs függvény által mutatott második héj már „egybemossa” a rácsban még elkülönülő, viszonylag közeli héjakat. (Természetesen a fázisátalakulás hőmérsékletét megközelítve ezek a héjak a szimulációban kapott $g(r)$ függvényben is szétválnának.)

A struktúrát jellemző másik fontos mennyiség a *statikus struktúrafüggvény*, melyet az alábbi összefüggés definiál:

$$S(k) = \frac{1}{N} \langle \rho(k, t) \rho^*(k, t) \rangle \quad (11.40)$$

összefüggésből, ahol

$$\rho(k, t) = \sum_j e^{-ikx_j(t)} \quad (11.41)$$

a *mikroszkopikus sűrűség*, $\langle \rangle$ az idő szerinti átlagolást, $*$ a komplex konjugátat jelzi. Itt feltételeztük, hogy a vizsgált rendszer izotróp, a hullámszámvektor iránya az x -iránnyal egyezik meg, a többi koordinátára ugyanilyen összefüggések írhatók fel. Ezen a módon az $S(k)$ függvény $k = mk_{\min}$ argumentumokra határozható meg, ahol $m = 1, 2, \dots$, a minimális hullámszám: $k_{\min} = 2\pi/L$ (L a szimulációs cella mérete az adott koordinátatengely mentén).

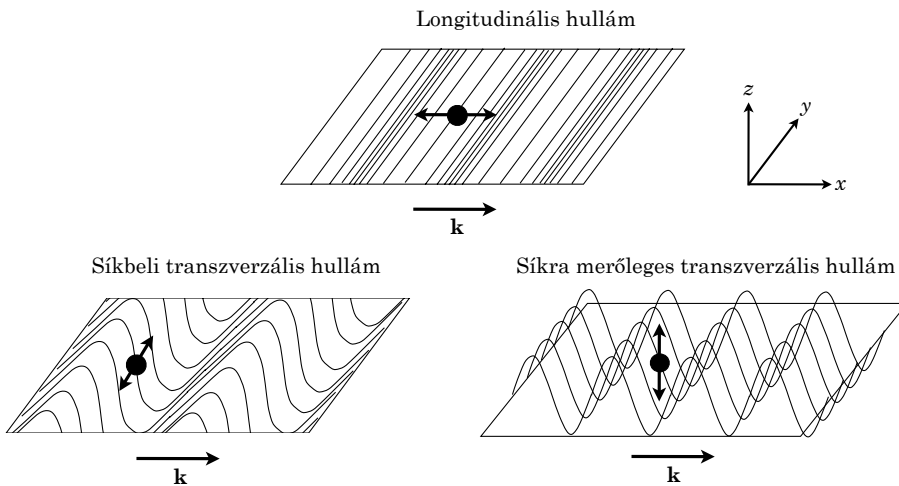
A 11.13.(b) ábra kétdimenziós Yukawa rendszerek statikus struktúrafüggvényeit szemlélteti a csatolási paraméter különböző értékeire, $\kappa = 1$ mellett. Megjegyezzük, hogy az $S(k)$ statikus struktúrafüggvény és a $g(r)$ párkorrelációs függvény között Fourier-transzformációs kapcsolat van [154]; $S(k)$ domináns csúcsa így például a párkorrelációs függvény elsődleges periodicitásának felel meg.

Ugyancsak említést érdemel, hogy az itt tárgyalt párkorrelációs és statikus struktúrafüggvények a rendszerekben fellépő *kétpont-korrelációkat* jellemzik (K.

8. rész) és a megfelelő függvények hierarchiáinak legalacsonyabb rendű elemei. A magasabb rendű függvények a részecskék többpont-korrelációit írják le – ezekkel itt nem foglalkozunk.

11.6.3. Dinamikus jellemzők

A sokrészecske-rendszerek alapvető tulajdonsága, hogy bennük *kollektív gerjesztések* alakulhatnak ki. A két legalapvetőbb kollektív gerjesztést a *longitudinális (vagy kompressziós)* és a *transzverzális (vagy nyírási) hullámok* képviselik. Az első esetben a részecskék mozgása párhuzamos a hullám haladási irányával, a második esetben erre merőleges.¹⁰ A 11.14. ábra ezt a két alapvető esetet szemlélteti, a tipikus „kvázi-kétdimenziós” kísérleti körülményekre, ahol a vertikális összetartó potenciál véges volta következtében a részecskék a rendszer síkjára merőlegesen is elmozdulhatnak. Ennek következtében a síkbeli transzverzális hullám mellett egy, a síkra merőleges transzverzális hullám is létrejöhet. Természetesen egy ideális kétdimenziós rendszerben ez utóbbi gerjesztés nem léphet fel.



11.14. ábra. Kvázi-kétdimenziós Yukawa-rendszerekben kialakuló hullámok. A részecskéket a külső potenciál az (x, y) sík környezetében csapdázza. Longitudinális esetben a részecskék rezgésének iránya megegyezik a hullám terjedési irányával (a $\mathbf{k}$ vektor irányával, melyről itt feltételeztük, hogy x -irányú), transzverzális esetben arra merőleges.

A következőkben azokat a mennyiségeket vezetjük be, amelyekkel ezek a hullámok jellemezhetők, illetve amelyek segítségével azonosíthatók egy

¹⁰Megjegyezzük, hogy a részecskék mozgása és a hullám haladási iránya általános esetben bármilyen szöget bezárhat egymással, azaz a hullám polarizációja tetszőleges lehet.

sokrészecske-szimulációban. A legalapvetőbb dinamikus jellemző az $S(k, \omega)$ *dinamikus struktúrafüggvény*, amely a k hullámszám függvényében a rendszerben fellépő rezgések frekvencia szerinti eloszlását adja meg. Amennyiben adott k mellett a rendszerben jelen van egy karakterisztikus frekvenciájú rezgés, akkor ez az $S(k, \omega)$ függvényben egy csúcsot eredményez. A hullámszám értékét változtatva $S(k, \omega)$ csúcsának helye megadja a hullámok $\omega(k)$ diszperziós relációját (amivel a 6. fejezetben már találkoztunk). A dinamikus struktúrafüggvény frekvencia szerinti integrálja megadja a statikus struktúrafüggvényt:

$$S(k) = \int_{-\infty}^{\infty} S(k, \omega) d\omega. \quad (11.42)$$

Molekuladinamikai szimulációkban a dinamikus struktúrafüggvényt a mikroszkopikus sűrűség Fourier-transzformációján keresztül kapjuk meg [155]:

$$S(k, \omega) = \frac{1}{2\pi N} \lim_{T_0 \rightarrow \infty} \frac{1}{T_0} [\rho(k, \omega) \rho^*(k, \omega)], \quad (11.43)$$

ahol T_0 a $\rho(k, t)$ adatok gyűjtésének időtartama és

$$\rho(k, \omega) = \mathcal{F}[\rho(k, t)]. \quad (11.44)$$

A függvény kiszámításához tehát először a valós térből a hullámszámtérre, majd az időtartományból a frekvenciatartományba térünk át, két Fourier-transzformációs lépéssel.

A sűrűségfluktuációkat jellemző $\rho(k, t)$ mikroszkopikus sűrűség mellett definiálhatjuk a

$$\begin{aligned} \lambda(k, t) &= \sum_j v_{j,x} e^{-ikx_j(t)} \\ \tau(k, t) &= \sum_j v_{j,y} e^{-iky_j(t)} \\ \pi(k, t) &= \sum_j v_{j,z} e^{-ikz_j(t)} \end{aligned} \quad (11.45)$$

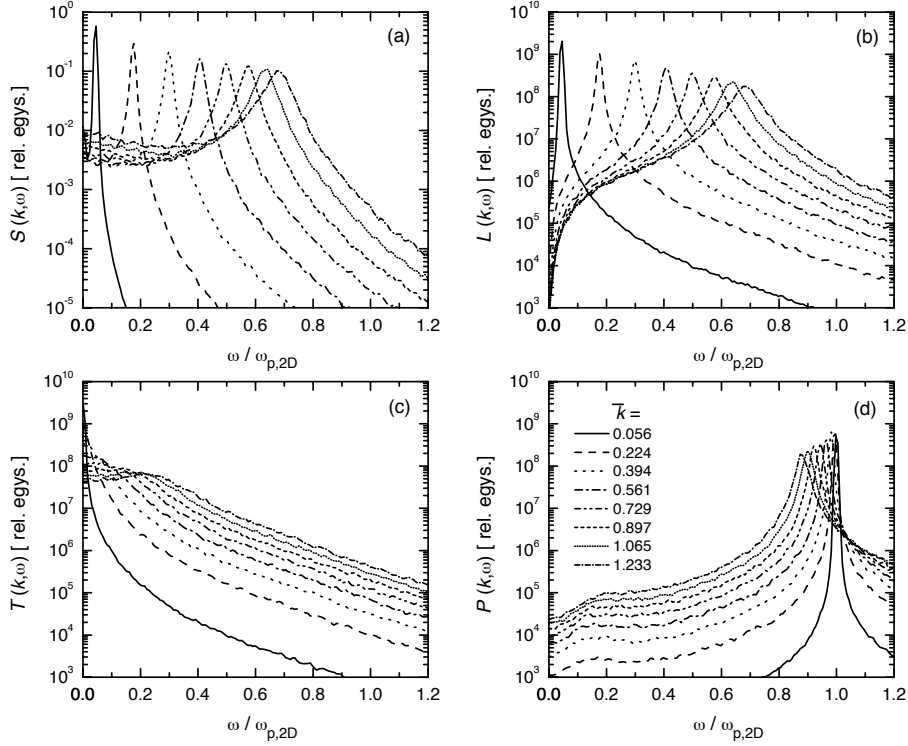
mikroszkopikus áramokat. A hullám terjedési irányát (úgy, mint a 11.14 ábrán) itt is x -irányúnak vettük, a longitudinális áram kifejezésében a részecskék sebességének x irányú komponense, a síkbeli transzverzális hullámnál a sebesség y komponense, a síkra merőleges transzverzális hullámnál a sebesség z komponense szerepel az összegzésben.

A áramfluktuációk spektrumai a dinamikus struktúrafüggvényhez hasonló módon – a 11.43. és a 11.44. összefüggések értelemszerű alkalmazásával – számíthatók ki:

$$\lambda(k, t) \rightarrow L(k, \omega) \quad , \quad \tau(k, t) \rightarrow T(k, \omega) \quad , \quad \pi(k, t) \rightarrow P(k, \omega). \quad (11.46)$$

Megjegyezzük, hogy a longitudinális áramfluktuációk $L(k, \omega)$ spektruma

$$L(k, \omega) = \left(\frac{\omega}{k}\right)^2 S(k, \omega) \quad (11.47)$$



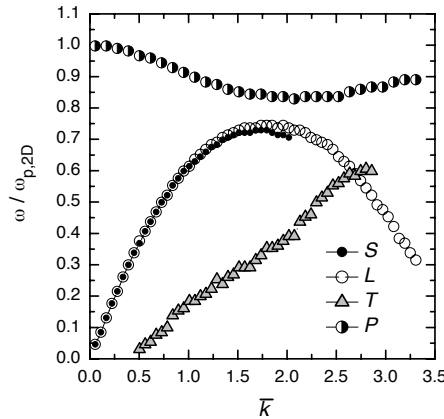
11.15. ábra. Kvázi-kétdimenziós Yukawa kölcsönhatási potenciálú sokrészecske-rendszer kollektív gerjesztéseinek spektruma, $\Gamma = 120$ és $\kappa = 1$ mellett: (a) $S(k, \omega)$ dinamikus struktúrafüggvény, (b) a longitudinális áramfluktuációk $L(k, \omega)$ spektruma, (c) a síkbeli transzverzális áramfluktuációk $T(k, \omega)$ spektruma és (d) a síkra merőleges transzverzális áramfluktuációk $P(k, \omega)$ spektruma. A görbékhez tartozó redukált hullámszám ($\bar{k}$) értékek a (d) panel szerintiék, a frekvencia a kétdimenziós plazmafrekvenciával van normálva.

kapcsolatban van az $S(k, \omega)$ dinamikus struktúrafüggvénnyel.

A 11.15. ábra egy kvázi-kétdimenziós, folyadékállapotú Yukawa-rendszerre jellemző, MD szimuláció segítségével meghatározott spektrumokat mutat, $\Gamma = 120$ és $\kappa = 1$ paraméterek esetére. A csapdázó potenciál értékét itt úgy állítottuk be, hogy az egyes részecskék síkra merőleges rezgésének frekvenciája megegyezzen a (kétdimenziós) plazmafrekvencia értékével. A 11.15.(a) ábra az $S(k, \omega)$ dinamikus struktúrafüggvényt szemlélteti, a hullámszám értékeinek sorozatára. (A statikus struktúrafüggvény a 11.41. összefüggés szerinti számításához hasonlóan itt is olyan hullámszámokra lehet az $S(k, \omega)$ -t meghatározni, amelyekre $k = mk_{\min}$ ($m = 1, 2, \dots$) és $k_{\min} = 2\pi/L$. $k_{\min}a_{\text{WS}} = \bar{k}_{\min}$ értékét a szimuláció részecskeszáma határozza meg, $N = 4000$ részecske szimulációja mellett 2

dimenzióban $\bar{k}_{\min} = 0.056$.)

Az $S(k, \omega)$ függvény kis $\bar{k}$ értékek mellett éles csúcsokat mutat, ami hosszú élettartamú kollektív gerjesztésekre utal. $\bar{k}$ növelésével a gerjesztések frekvenciaspektruma szélesedik, ami rövidebb élettartamot jelez. A longitudinális áramfluktuációk 11.15.(b) ábrán bemutatott $L(k, \omega)$ spektruma az $S(k, \omega)$ spektrumhoz nagyon hasonló viselkedést mutat (a 11.47. összefüggés szerinti kapcsolatnak megfelelően). A síkbeli transzverzális hullámokat jellemző $T(k, \omega)$ spektrum (11.15.(c) ábra) ettől alapvetően eltérő jellegű. Kis hullámszámok mellett a spektrumban nem azonosítható a kollektív gerjesztésre utaló csúcs. $\bar{k} \approx 0.5$ mellett viszont megjelenik egy kis csúcs, ami rövid hullámhosszú gerjesztések jelenlétét mutatja. Ez ellentmondásosnak tűnik a klasszikus folyadékok tulajdonságait tekintve, azokban ugyanis nem léteznek nyírási (transzverzális) hullámok – az itt vizsgált rendszerben a jelenlétük az erős korrelációknak köszönhető. A részesce-rendszer síkjára merőleges módus frekvenciája $\bar{k} \rightarrow 0$ mellett, a 11.15.(d) ábrán bemutatott $P(k, \omega)$ spektrumokból láthatóan $\omega \rightarrow \omega_{p,2D}$, ami annak felel meg, hogy a csapdázó potenciálban az egész réteg egyszerre oszcillál. Ez a frekvencia a csapdázó potenciál értékének függvénye. A $P(k, \omega)$ spektrum csúcsa a hullámszám növelésével kis mértékben a kisebb frekvenciák felé tolódik el.



11.16. ábra. Kvázi-kétdimenziós Yukawa kölcsönhatási potenciálú sokrészesce-rendszer kollektív gerjesztéseinek diszperziós relációi. ($\Gamma = 120$, $\kappa = 1$.)

A 11.16. ábra a fent bemutatott spektrumokból származtatott diszperziós relációkat szemlélteti. Látható, hogy a longitudinális hullámokra vonatkozó $S(k, \omega)$ és $L(k, \omega)$ spektrumokból azonos diszperziós görbék adódnak, viszont $\bar{k} \gtrsim 2$ értékeknél az $S(k, \omega)$ spektrumból nem határozható meg a módus frekvenciája, ugyanis a véges jel-zaj viszony miatt a spektrumban nem lehet a csúcsot azonosítani. Ez a két $\omega(k)$ görbe *kváziakusztikus jelleget* mutat: kis hullámszámoknál a k -függés lineáris, majd telítődik egy „platófrequencián”, melynek értéke κ függvénye. A síkbeli transzverzális hullámokat jellemző $T(k, \omega)$ spekt-

rumból *akusztikus* (lineáris) $\omega(k)$ függés adódik, a módus viszont csak $\bar{k} \approx 0.5$ fölött jelenik meg. Ez a küszöbérték Γ és κ függvénye, kristályos fázisban a küszöbhullámszám eltűnik és a diszperziós reláció a teljes hullámszámtartományt lefedi. A részecskerendszer síkjára merőleges hullámok $P(k, \omega)$ áramfluktuációs spektrumának diszperziós összefüggése *optikai* jelleget mutat, $k = 0$ mellett frekvenciája véges.

11.6.4. Transzportparaméterek

A poros plazmák lehetőséget adnak *transzportjelenségek* részecske szintű megfigyelésére. A transzportjelenségek vizsgálatára, illetve a transzportegyütthatók meghatározására két alapvető megközelítés kínálkozik: (i) egyensúlyban lévő rendszereken való mérés a *Green–Kubo-összefüggések* alkalmazásával a részecskék fázistérbeli koordinátáiból származtathatók a transzportegyütthatók, (ii) nemegyensúlyi mérésekkel vizsgálható a rendszernek adott perturbációra adott válasza, megfelelő perturbációt alkalmazva a válasz tartalmazza a transzportegyütthatóra vonatkozó információt. Ugyanez a két megközelítés alkalmazható molekuladinamikai szimulációkban is, amelyek közül a legegyszerűbbek az *egyensúlyi szimulációk*, de szintén megvalósíthatók *nemegyensúlyi szimulációk* is, amelyekben valamely perturbációra adott válaszból határozhatók meg a transzportparaméterek.

Egyensúlyi rendszerekre a Green–Kubo-összefüggések [154] a transzportegyütthatókat: a D diffúziós együtthatót, a η nyírási viszkozitást és a λ hővezetési együtthatót bizonyos mennyiségek autokorrelációs függvényeinek integráljaként adják meg:

$$D = \frac{1}{\mathcal{D}} \int_0^\infty C_v(t) dt, \quad C_v \equiv \langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle, \quad (11.48)$$

$$\eta = \frac{1}{Vk_B T} \int_0^\infty C_\eta(t) dt, \quad C_\eta \equiv \langle P_{\alpha\beta}(t) P_{\alpha\beta}(0) \rangle, \quad (11.49)$$

$$\lambda = \frac{1}{Vk_B T^2} \int_0^\infty C_\lambda(t) dt, \quad C_\lambda \equiv \langle J_{Q\alpha}(t) J_{Q\alpha}(0) \rangle. \quad (11.50)$$

Itt $\mathcal{D}$ a rendszer dimenzióját jelöli, $C_v = \langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle$ a sebesség autokorrelációs függvénye, $C_\eta = \langle P_{\alpha\beta}(t) P_{\alpha\beta}(0) \rangle$ a feszültség autokorrelációs függvény, és $C_\lambda = \langle J_{Q\alpha}(t) J_{Q\alpha}(0) \rangle$ az energiaáram autokorrelációs függvénye, α és β térkoordináták, valamint

$$P_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^N \left[m v_{i\alpha} v_{i\beta} - \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \frac{\alpha_{ij} \beta_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right] \quad (11.51)$$

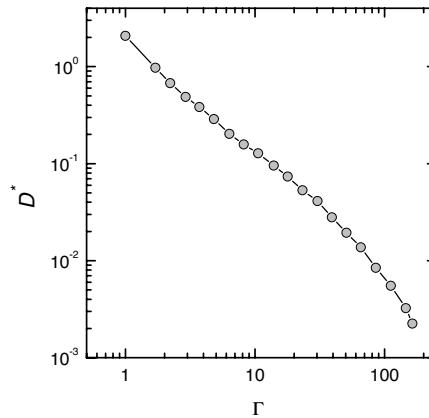
a nyomástenzor nem diagonális eleme és

$$J_{Q\alpha} = \sum_{i=1}^N v_{i\alpha} \left[\frac{1}{2} m |\mathbf{v}_i|^2 + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \phi(r_{ij}) \right] - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N (\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{v}_i) \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \quad (11.52)$$

az *energiaáram* ($\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$) [154].

A Green–Kubo-összefüggésekben megjelenő integrálok konvergenciája a transzportegyütthatók létezésének feltétele. Három dimenzióban az autokorrelációs függvények lecsengése általában elég gyors, míg két dimenzióban ugyanezek a függvények bizonyos esetekben lassú lecsengést mutatnak. A konvergencia kérdése ezekben az esetekben máig sem tisztázott [156]. A probléma részleteit itt nincs lehetőségünk elemezni és ezért a továbbiakban csak a háromdimenziós rendszerekre mutatunk be példákat.

Elsőként, a 11.17. ábra Coulomb-kölcsönhatás esetére mutatja a $D^* = D/a_{\text{WS}}^2 \omega_p$ redukált (dimenziómentes) *öndiffúziós együttható* értékét a csatolási paraméter függvényében. Az ábrán megfigyelhető módon a diffúzió sebessége Γ növekedésével csökken. Ennek szemléletes oka a rendszerek már említett azon tulajdonsága, hogy az erős csatolás tartományában a részecskék a szomszédok potenciálterében csapdázódnak, ami a mozgásukat korlátozza [157, 158]. Korábban már szintén említettük, hogy ez a rendszer $\Gamma \approx 175$ mellett szilárdul meg, a diffúziós együttható ezt a tartományt megközelítve egyre meredekebben esik.



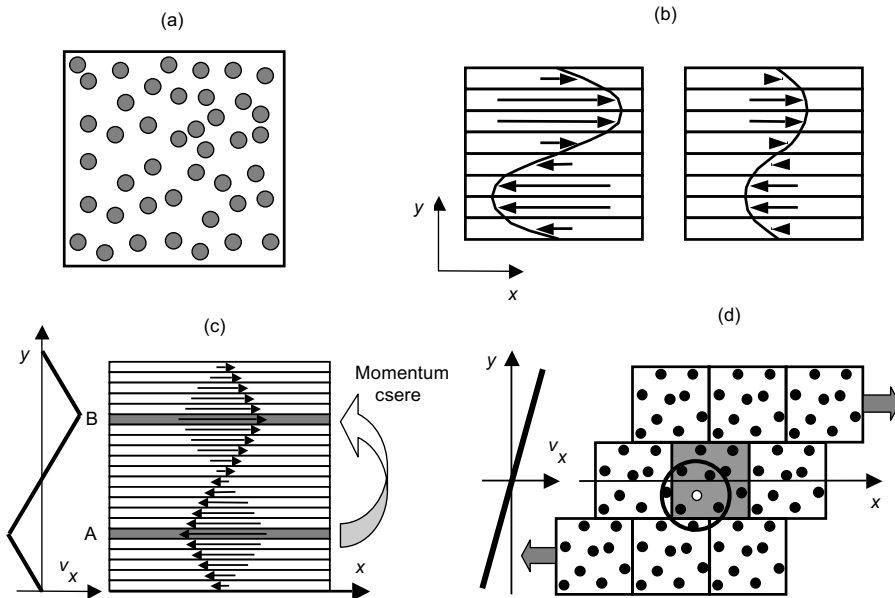
11.17. ábra. Háromdimenziós, folyadékállapotú Coulomb-rendszerek redukált öndiffúziós együtthatója a Γ csatolási paraméter függvényében.

A következőkben a *nyírási viszkozitás* esetére mutatunk néhány példát az egyensúlyi MD szimuláció alternatívájaként alkalmazható *nemegyensúlyi* MD módszerekre (ld. 11.18. ábra). A módszerek alapja az, hogy a rendszerekben jelenlévő valamilyen (pl. x) irányú sebességgradiens arra merőleges (pl. y) irány-

ban impulzusáramlást indít, azaz

$$j_y = -\eta \frac{dv_x(y)}{dy}. \quad (11.53)$$

A 11.18.(a) ábra az egyensúlyi szimulációt szemlélteti, a részecskék az egymás közötti kölcsönhatás által meghatározott módon mozognak, miközben a nyomástenzor megfelelő elemét (vagy elemeit) a 11.51. kifejezés által megadott módon mérjük. Az ábra (b) panelje egy olyan mérést illusztrál, ahol valamely kezdeti időpontban a részecskék v_x sebességét azok y koordinátái függvényében perturbáljuk, majd a perturbáció lecsengését mérjük [159]. Ez utóbbi időskálája függ a nyírási viszkozitás értékétől.



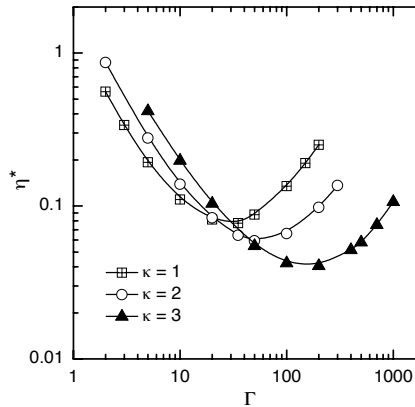
11.18. ábra. A nyírási viszkozitás mérésének egyensúlyi (a) és néhány nemegyensúlyi szimulációs mérési módja: (b) a sebességprofil perturbációja, (c) „Reverse Molecular Dynamics” módszer és (d) „Homogenous Shear Algorithm”. (Az APS engedélyével reprodukálva az alábbi cikkből: Z. Donkó, P. Hartmann: Shear viscosity of strongly coupled Yukawa liquids, *Physical Review E* 78, 026408 (2008), <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.78.026408>. Copyright (2008) by the American Physical Society.)

A következő, ún. „Reverse Molecular Dynamics” (RMD) módszer (ld. 11.18.(c) ábra) [160] a szimulációs cella két kijelölt A és B tartománya között cseréli egyes részecskék sebességét, mégpedig úgy, hogy egy adott időpillanatban az A cellában lévő legnagyobb pozitív irányú impulzusú részecske sebességét felcseréli a B cellában ugyanakkor tartózkodó legnagyobb negatív irányú impul-

zusu részecske sebességével. Ennek a cserének a sorozatos alkalmazása azt eredményezi, hogy az A cellában a részecskék $\langle v_x \rangle$ átlagsebessége negatív lesz, míg a B cellában pozitív, illetve az egész szimulációs cellában kialakul egy állandósult sebességprofil, a 11.18.(c) ábrán látható módon. Az RMD módszer neve abból származik, hogy itt egy mesterséges momentumcsere hoz létre egy sebességprofil, míg a 11.53. összefüggés a sebességprofil mint *okot* és az impulzusáramlást mint *következményt* tartalmazta.

Az utolsóként, a 11.18.(d) ábrán bemutatott módszerben („Homogenous Shear Algorithm”) a mozgásegyenletek megfelelő módosításával és a szimulációs cella szomszédos replikáinak folyamatos elcsúsztatásával homogén, kívánt mértékű nyírást lehet a rendszerben létrehozni [161]. A nyírás mértékéből és a nyomástenzor nemdiagonális elemének méréséből a viszkozitás meghatározható.

Az erősen csatolt plazmák viszkozitásának vizsgálata azért is érdekes, mert alapvetően eltér a hagyományos folyadékokétól. A fentiekben (11.51) látszott, hogy a nyomástenzor elemei egy kinetikus energiával összefüggő és egy potenciális energiával összefüggő részből állnak. Emiatt a viszkozitás hőmérsékletfüggése (ill. Γ -függése) egy jellegzetes függvényalakot mutat, a két komponens eltérő viselkedése miatt. A gyengén csatolt tartományban a kinetikus tag dominál, melynek jelentősége Γ függvényében csökken. A részecskék közötti potenciálból származó tag ugyanakkor a csatolási paraméter nagy értékei mellett jelentős és Γ csökkenésével csökken. A két effektus együtt eredményezi a 11.19. ábrán látható viselkedést, ahol háromdimenziós Yukawa-rendszerek nyíró viszkozitásának redukált értéke ($\eta^* = \eta/a_{\text{WS}}^2 \omega_{\text{p},3\text{D}} k_{\text{B}} T$) látható Γ függvényében, az árnyékolási együttható különböző értékeire.



11.19. ábra. Háromdimenziós, folyadékállapotú Yukawa-rendszerek redukált nyírási viszkozitása a Γ csatolási paraméter függvényében, κ különböző értékeire.

Az erősen csatolt plazmák *hővezető képessége* a nyíró viszkozitáshoz hasonló viselkedést mutat a csatolási együttható függvényében, ugyancsak amiatt, hogy

kis Γ értékeknél a részecskék intenzív transzportja miatti energiaáramlás dominál, nagy Γ értékek mellett pedig a részecskék rezgései továbbítják az energiát a potenciálból származó kölcsönhatással.

Végül megjegyezzük, hogy a transzportegyütthatók értéke függ a hullámszámtól, így pl. egy nemegyensúlyi algoritmus használata esetén a perturbáció hosszskálája befolyásolja a kapott eredményeket, ill. különböző skálahosszak alkalmazásával feltérképezhető a hullámszámfüggés. Ugyancsak megemlítendő, hogy – amennyiben ezt az adott nemegyensúlyi módszer lehetővé teszi – a perturbáció frekvenciájának változtatásával lehetőség adódik a transzportegyütthatók frekvenciafüggésének (pl. a rendszer komplex viszkozitásának) a meghatározására is, továbbá a perturbáció mértékének változtatásával tanulmányozható a folyadékok nem-Newtoni viselkedése.



12. fejezet

Az alacsony hőmérsékletű plazmák alkalmazásai

A bevezető fejezetben már megemlítettük az alacsony hőmérsékletű plazmák néhány fontos alkalmazási területét. Miután az előző fejezetekben megismertedtünk a plazmaforrások működésével és a bennük lejátszódó alapvető elemi folyamatokkal, most néhány fontos felhasználási területtel részletesebben foglalkozunk – elsőként a plazmák egyes, fényforrásként való alkalmazásait tárgyaljuk. Ezt követően foglalkozunk a plazmaalapú felületmódosítási (maratási és rétegleválasztási) eljárásokkal, végül rövid bevezetést adunk néhány speciális alkalmazási területbe (plazmahajtóművek, biomedikai alkalmazások, gázok konverziója, kémiai analízis, ionimplantáció). Ezekkel a területekkel korántsem merül ki az alacsony hőmérsékletű plazmák alkalmazásainak köre, de ennek teljesebb bemutatására itt nem vállalkozhatunk.

12.1. Fényforrások

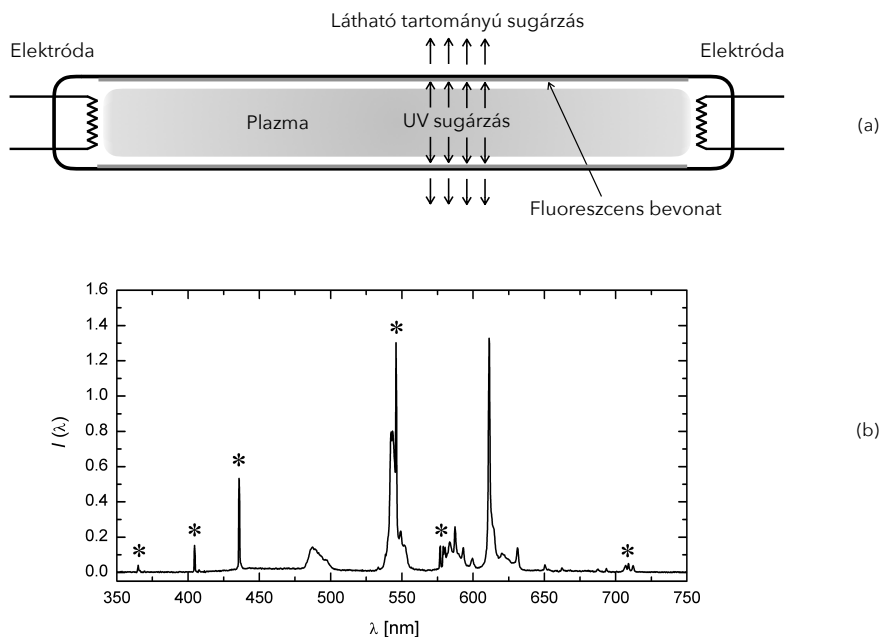
Legtöbb plazma alapvető sajátossága a fénykibocsátás, ami a gerjesztési folyamatok következménye és a plazmák fényforrásként való alkalmazásának alapja. Az alábbiakban előbb egyes lámpatípusok (pl. fénycsövek, spektrállámpák, nagyintenzitású gázkisülési lámpák), majd egyes gázlázerek működésével foglalkozunk.

12.1.1. Fluoreszcens fényforrások

A *fénycsövek* története az 1930-as évekig nyúlik vissza (gyártmányként 1938-ban jelentek meg). Ezek a fényforrások a világítástechnikában jelenleg is komoly piaci részesedéssel rendelkeznek, a trend azt mutatja, hogy a LED-es fényforrások elsősorban az izzószálas lámpákat szorítják ki a piacról (az utóbbiak nagyon

rossz hatásfoka miatt).¹

A fénycsövekben a fénykibocsátás alapja egy alacsony hőmérsékletű plazma, amit argon gáz és higanygőz keverékében hoznak létre. A hagyományos fénycsövekben a plazmát a hálózati váltakozó feszültség tartja fenn, a kis felületű elektródák a viszonylag nagy áramsűrűség következtében jelentősen melegsznek. Ez elősegíti a felületükből az elektronok kilépését (termikus emisszió) és viszonylag alacsony feszültségen lehetővé teszi a gázkisülés fenntartását.² Az elektronok emisszióját a volfrám elektródák speciális bevonatával is segítik.



12.1. ábra. Fénycső sematikus vázlata (a) és sugárzási spektruma (b). A csillagok az erős Hg spektrumvonalakat jelölik, a spektrum többi („széles”) összetevője a fluoreszcens bevonat sugárzásából származik.

¹A rossz hatásfok elsődleges oka, hogy az izzószálak termikus sugárzók; pl. volfrám esetén a behatárolt működési hőmérsékleten (max. $\sim 2400^\circ\text{C}$) a sugárzási teljesítmény nagy része az infravörös tartományba esik. A volfrám-szál üzemi hőmérsékletét a (semleges) töltőgázhoz adott halogén adalékokkal (pl. Br, I) növelni lehet, ugyanis az elpárolgott volfrám ezekkel halogenideket képez, mely molekulák viszont az izzószállal érintkezve elbomlanak és így a volfrám atomok visszajutnak az izzószálra. Az ilyen „halogén izzókban” a magasabb hőmérsékletnek köszönhetően a sugárzás nagyobb része esik a látható tartományba, ezzel egyidejűleg viszont UV tartományú sugárzás is keletkezik, aminek a szűréséről gondoskodni kell.

²A hidegkatódú gázkisülésekben a katódú elektronkiváltást elsősorban a pozitív ionok biztosítják. Ehhez a katód környezetében nagy – tipikusan több száz Voltos – feszültségesés szükséges, ugyanis a folyamat kis „hatásfoka” miatt az egyes elektronok számos iont kell, hogy keltsenek (ld. 8.1.1. fejezet). A termikus elektronemisszió ezt szükségtelenné teszi és emiatt a katódos feszültsége „meleg” katódok esetén a néhányszor tíz V tartományban van.

A gázkeverékben az $e^- + \text{Hg}$ ütközésekben igen hatékonyan gerjesztődnek a Hg atom azon állapotai (6^3P_1 és 6^1P_1), amelyekről erős ultraibolya (253.7 nm, ill. 184.9 nm) rezonanciasugárzás indul (amivel az atom az alapállapotba kerül). Ezt a sugárzást a fénycső falára felvitt fluoreszcens réteg konvertálja látható fénné. A 12.1.(a) ábra egy fénycső vázlatát, míg ugyanezen ábra (b) része egy fénycső mért spektrumát szemlélteti. A spektrumban jól megfigyelhetők a Hg atom karakterisztikus vonalai és a fluoreszcens bevonattól származó széles hullámhossztartományt átfedő sávok. A spektrumot az emberi szem (annak spektrális érzékenységi görbéjének köszönhetően) fehér fénynek érzékeli. (Ugyanakkor ezzel a fénnel és egy folytonos spektrumú fehér fénnel megvilágítva bizonyos anyagok eltérő színűnek tűnhetnek.)

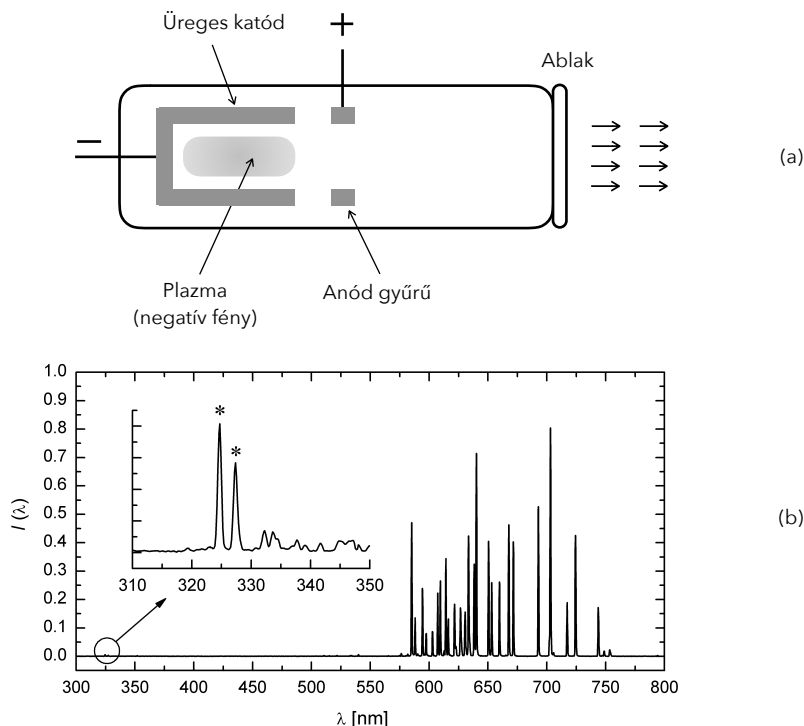
Mivel a gázkisülés fenntartásában fontos az elektródák magas hőmérséklete, amit csak működés közben érnek el, ezért a plazma begyűjtéséhez az elektródák előzetes fűtése, vagy egy nagyfeszültségű impulzus szükséges. A hagyományos fénycsövek esetében a begyűjtést egy külön gyűjtőegység segíti, ami az áramkörü kialakításnak köszönhetően a bekapcsoláskor áramot vezet át az egyes elektródák két pólusa között, felmelegítve azokat. A nagyfeszültségű impulzus alkalmazása a *kompakt fénycsövek* esetében tipikus, itt a begyűjtő impulzust előállító áramkör a fényforrás foglalatában foglal helyet. Megjegyezzük, hogy a kompakt fénycsövek nagyfrekvenciás üzemmódban ($\sim 20\text{--}100$ kHz) működnek. A fénycsövek – mivel higanygőzt tartalmaznak – környezetvédelmi szempontból kockázatot jelentenek. Ezen aktív anyag kiváltására komoly erőfeszítések folytak, de ezek a kutatások nem hozták meg a várt eredményt.

12.1.2. Spektrállámpák

A *spektrállámpák* spektroszkópiai célú fényforrások, amelyek adott elemek egyes vonalain intenzív sugárzást bocsátanak ki. Gázok esetén általában vékony üvegsőben létrehozott pozitív oszlopú kisülést használnak erre a célra. A töltőgáz nyomását alacsony értéken tartják a vonalkiszélesedési mechanizmusok minimalizálása érdekében. Szilárd anyagok esetén a katódporlás jelenségét (ld. 4.1.2. fejezet) használják ki, a gázkisülés katódja üreges kialakítású, a 12.2.(a) ábrán vázolt módon.

Az üregben létrejövő negatív fény térrészből a határretegen át gyorsuló ionok a katód felületét bombázzák és ezzel az adott anyag gőzét bejuttatják a plazmába. Ezek az atomok a töltőgáz atomjaihoz hasonlóan gerjesztődnek és ionizálódnak. A gerjesztés eredményeként a töltőgáz spektruma mellett a plazma a katód anyagát alkotó atomoknak megfelelő spektrumvonalakon is sugároz.

A 12.2.(b) ábra egy Ne töltőgázú Cu spektrállámpa emissziós spektrumát mutatja. A töltőgáz vonalai ugyan dominálnak a spektrumban, de a sugárzott Cu vonalak még mindig elég erősek és jól elkülönülnek. A spektrállámpák – „etalon” forrásként – használhatók spektroszkópiai berendezések kalibrálásához, illetve fontos felhasználási területüket jelentik az abszorpciós kémiai elemanalitikai berendezések, ahol a vizsgálandó minta kémiai összetételét annak elpárologtatásával és adott spektrumvonalakon való abszorpciójával határozzák meg (pl. a minta Cu tartalma egy Cu spektrállámpa által emittált fény abszorpciójával



12.2. ábra. (a) Üreges katódú spektrállámpa kialakítása (hosszmetszeti rajz, az elektródák kialakítása hengerszimmetrikus). (b) Cu spektrállámpa (Hamamatsu L233-29NB) emissziós spektruma: a 580 – 750 nm közötti hullámhossztartományt a Ne töltőgáz sugárzási spektruma dominálja, a Cu atom 324.75 nm és 327.40 nm hullámhosszú vonalai (csillaggal jelölve) lényegesen kisebb intenzitásúak, de az ultraibolya tartományban jól elkülönülnek.

mérhető).

12.1.3. Nagyintenzitású gázkisülési lámpák

A gázkisülések működési módjainak ismertetésénél igen röviden említettük az ívkisülés tartományát. Erre a működési módra igen nagy áramok (több 10 A) jellemzőek. A nagy áram hatására a gázkisülés katódja erőteljesen felmelegszik és az elektronok termikus emisszió következtében lépnek ki a felületéből. A fénycsőveknél már említett okok miatt így az ívkisülés feszültsége igen alacsony lehet (általában a néhányszor 10 V tartományban van).

A *nagyintenzitású gázkisülési lámpák* első elterjedt típusa a higanygőzlámpa volt. Ebben egy kvarcüveg búrában helyezkedik el a két volfrám elektróda, melyek között az ívkisülés kialakul. Ezt a konstrukciót egy nagyobb, üvegből készült búra foglalja magába, ami egyrészt termikus elválasztást biztosít (csök-

kenti az ívkiülés hőveszteségét), másrészt a belső falára felvitt (fluoreszcens) fénypor réteg a plazma UV sugárzását látható fénné alakítja. Mivel az „aktív anyagként” szolgáló Hg környezeti hőmérsékleten folyadék halmazállapotú, ezért a lámpa begyújtásához szükséges valamely más (pl. argon) gáz is, amiben a gázkiülés felépül. A plazmában keletkező hő elpárologtatja a lámpa Hg tartalmát és az ívkiülés már lényegében Hg gőzben működik. A higanygőzlámpákat elsősorban kültéri világításra, ill. nagy termék bevilágítására használják, nagy előnyük a jó színviszáadás és a hosszú élettartam. (Az alkalmazásoknál figyelni kell arra, hogy a külső burkolat ne sérülhessen meg, ekkor ugyanis a lámpa igen erős UV sugárzóvá válik.)

A nagyintenzitású gázkiületi lámpák másik fontos típusát a *xenon ívlámpák* jelentik. Ezeket tipikusan nagy (több 10 atm) nyomású gázzal töltik. A nagy részecskesűrűség miatt számottevő az ütközési vonalkiszélesedés (10.2.3. fejezet), ezért a lámpa folytonos spektrumot sugároz az UV tartománytól a közeli infravörös tartományig. Elsődleges alkalmazásukat a vetítógépek (pl. IMAX projektorok, 15 kW lámpákkal), illetve spektroszkópiai műszerek (pl. fluoriméterek, néhány száz Wattos lámpákkal) jelentik. A gépkocsik fényszóróiban használt „Xe lámpák” valójában fémhalogén fényforrások. Bekapcsoláskor a xenon gázban alakul ki az ívkiülés, a keletkező hő elpárologtatja az adalékolt nátrium és szkandium sókat, a lámpa ezek után főleg ezen fémadalékok spektrumán sugároz.

12.1.4. Gázlézerek

A lézerek legfontosabb része minden esetben egy olyan közeg, amiben a fény-sugárzás erősödni tud [162]. Az erősödés alapja az *indukált emisszió* folyamata, amit a 10.2.2. fejezetben már megemlítettünk. Ezen folyamat során egy gerjesztett állapotú, E_2 energiával rendelkező atom (molekula) legerjesztését egy alacsonyabb, E_1 energiájú állapotba az átmenetnek megfelelő energiával rezonáns elektromágneses sugárzás eredményezi. Lényeges, hogy míg a spontán emissziós folyamat során az egyes sugárzók fázisa egymáshoz képest véletlenszerű, addig indukált emisszió esetén a kisugárzott hullám a beeső hullámhoz *fázisban csatlakozik*. Ez lehetőséget ad a hely függvényében erősödő, rendezett fázisfrontú, *koherens fény* előállítására.

Az erősítés feltétele az, hogy a magasabb, E_2 energiájú állapotban nagyobb számú atom (v. molekula) tartózkodjon, mint az alacsonyabb, E_1 energiájú állapotban (feltételezve a két állapotra azonos degenerációt feltételezve). Ez a feltétel – melyet *populációinverzió*nak nevezünk – láthatóan nem következhet be termikus egyensúly esetén, ld. a Boltzmann-eloszlásra vonatkozó megállapításainkat az 1. fejezetben. Az erősítés eléréséhez tehát valamilyen, a termikus egyensúlyt „felborító” módon biztosítani kell azt, hogy a magasabb energiájú állapotban több atom tartózkodjon, mint az alacsonyabb energiájú állapotban. Ezt a lézerek *aktív közegében* valamilyen szelektív mechanizmus valósíthatja meg [163]. Aktív közegként szolgálhat egy plazma, folyadék, vagy szilárdtest, itt természetesen csak az első esettel – *gázlézerekkel* (pontosabban ezeknek néhány típusával) – foglalkozunk, ezekben is elsősorban a szelektív populációt biztosí-

tó gerjesztési mechanizmusokra koncentrálunk, melyek alapját a már korábban megismert elemi plazmafolyamatok jelentik. Az alábbiakban az erősítés jelenségének alapjait tárgyaljuk, a részletesebb analízist a szakkönyvekre bízva.

K. 19: A fényerősítés jelensége

A fényerősítés jelenségének tárgyalásához induljunk ki annak vizsgálatából, hogy mi történik akkor, ha egy izotróp és homogén közegben egy ν frekvenciájú sugárzás halad valamely adott (pl. x) irányban. Feltételezzük, hogy a közeg törésmutatója egységnyi. Legyen az energiasűrűség értéke w_ν , ekkor az energiaáram-sűrűség (amely megadja az egységnyi felületen, egységnyi idő alatt átáramló energia mennyiségét és értéke a Poynting-vektor (ld. 2. fejezet) abszolút értéke) $S_\nu = c w_\nu$.

Tételezzük fel, hogy a közegben léteznek olyan atomok (v. molekulák), amelyeknek két (1. és 2.) energiaszintje közötti átmenet a fény ν frekvenciájának felel meg! Legyen n_1 az E_1 szinten levő atomok sűrűsége és n_2 az E_2 szinten levőké. Feltesszük továbbá, hogy az energiaszintek nem degeneráltak. A 10.2.2. fejezetben már említett módon a rendszerben három folyamat játszódik le: az abszorpció, a spontán emisszió és az indukált emisszió. Ezek közül az első következtében az alacsonyabb energiaszinten lévő atomok sűrűségének megváltozása:

$$(dn_1/dt)_{\text{abs}} = -B_{12}w_\nu n_1, \quad (12.1)$$

míg az utóbbi két folyamat következtében a magasabb energiaszinten lévő atomok sűrűségének megváltozása:

$$(dn_2/dt)_{\text{sp}} + (dn_2/dt)_{\text{ind}} = -A_{21}n_2 - B_{21}w_\nu n_2. \quad (12.2)$$

A sűrűségek megváltozása azt is jelenti, hogy a közeg és a sugárzási tér között energiacsere zajlik. Pozitívnak véve a sugárzás által a közegtől felvett energiát, az egységnyi térfogatban egységnyi idő alatt létrejött energiacsere:

$$P = P_{\text{sp}} + P_{\text{ind}} - P_{\text{abs}} = (A_{21}n_2 + B_{21}w_\nu n_2)h\nu - B_{12}w_\nu n_1 h\nu. \quad (12.3)$$

Amennyiben a w_ν energiasűrűség nagy, a spontán emisszióból származó tag elhanyagolhatóvá válik, és

$$P = (B_{21}n_2 - B_{12}n_1)w_\nu h\nu. \quad (12.4)$$

Tekintsük most a közeg $dV = A_n dx$ térfogatát, ahol A_n a sugárzás terjedési irányára merőleges felület. Ezen dV térfogatelemben a sugárzás és közeg közötti teljesítménycserére írhatjuk:

$$dP = PdV = (B_{21}n_2 - B_{12}n_1)w_\nu h\nu A_n dx, \quad (12.5)$$

ahonnan az energiaáram-sűrűség változására dx út megtétele után a

$$dS_\nu = \frac{dP}{A_n} = (B_{21}n_2 - B_{12}n_1)w_\nu h\nu dx \quad (12.6)$$

kifejezést kapjuk. Ebből adódóan:

$$\frac{dS_\nu}{S_\nu} = \frac{h\nu}{c}(B_{21}n_2 - B_{12}n_1)dx = \underbrace{B_{12}\frac{h\nu}{c}(n_2 - n_1)}_{-\alpha} dx, \quad (12.7)$$

melynek megoldása

$$S_\nu = S_{\nu,0}e^{-\alpha x}, \quad (12.8)$$

ahol $S_{\nu,0}$ az energiaáram-sűrűség értéke az $x = 0$ pontban. A fenti összefüggés elnevezése Beer–Lambert–Burger-képlet. Ha a rendszer, melyen a sugárzás áthalad, termodinamikai egyensúlyban található T hőmérsékleten,

$$\frac{n_2}{n_1} = e^{-(E_2 - E_1)/(k_B T)} \quad (12.9)$$

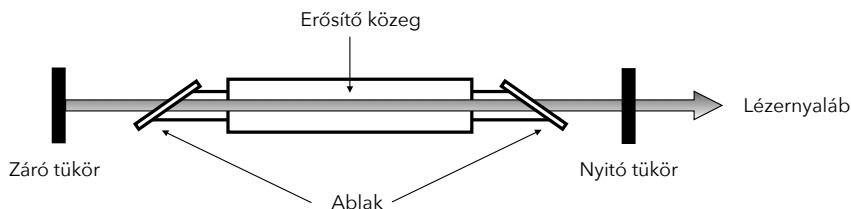
szerint $n_2 < n_1$ és így $\alpha > 0$, következésképpen S_ν értéke csökken az x növekedésével, vagyis a sugárzás elnyelődik a közegen való áthaladásakor. Azonban, ha valamilyen módon sikerül megvalósítanunk, hogy $n_2 > n_1$ legyen, azaz létrehozni a populációinverziót, α értéke negatívvá válik és S_ν nő a sugárzásnak a közegen való áthaladásakor, vagyis a sugárzás erősítése következik be.

A populációinverzió *időbeli fenntarthatósága* határozza meg azt, hogy a lézer tud-e *folytonos üzemmódban* működni, vagy csak *impulzusüzemben*. Erre vonatkozóan itt csak egy egyszerű, kvalitatív képet adunk: egy erős lézerátmenet nyilvánvalóan erősen populálja az alsó nívót, így, ha annak élettartama hosszú, akkor azon a szinten jelentősen megnőhet a populáció, ami a lézerműködés leállításához vezet. Ilyen esetben a lézer „önleállító”, vagyis csak impulzusüzemű működés lehetséges. Ha az alsó nívó élettartama rövid, akkor az ott lévő populáció hatékonyan „ürül” az alsóbb szintek felé és a populációinverzió stacionárius módon fenntartható lesz.³

Egy lézer alapvető sémáját a 12.3. ábra szemlélteti. Az erősítés korlátozott mértéke általában szükségessé teszi a visszacsatolás (tükrök) használatát; a lézer *aktív közege* és a tükrök alkotják a *lézerrezonátort*. A tükrök közül az egyik általában közel teljes reflexióval rendelkezik, a másik a sugárzás kis részét átengedi. Az aktív közeg lezárása ablakokkal történik, ezek legtöbb esetben meghatározott szögben („Brewster-szög”) helyezkednek el a veszteségek minimalizálására.

A gázlézerekben a gázkisülés jelentős fénykibocsátást mutató tartományait lehet kihasználni. Az alacsony nyomású gázkisülések esetére – mint azt

³A jelenségek pontosabb, kvantitatív tárgyalásához – mely itt nem célunk – figyelembe kell venni az egyes szintek összes populációs és depopulációs mechanizmusát, valamint a releváns szintek degenerációját.



12.3. ábra. Lézerrezonátor az aktív közeggel és a visszacsatolást biztosító elemekkel.

a 8.1.2. fejezet 8.6. ábráján láttuk – ezek a térrészek a pozitív oszlop és a negatív fény. Magasabb ($p \sim \text{atm}$) nyomások esetén, amennyiben a gázkisülés homogén jellegű marad, ugyanezek a térrészek alakulnak ki (de a plazma homogenitásának biztosítására figyelemmel kell lenni).

Ha a pozitív oszlopban szeretnénk elérni erősítést, akkor a lézer optikai tengelyét ezen a térrészen kell átvezetni és az elektródákat úgy kell elhelyezni, hogy ne zavarják a sugárzás terjedését. A 12.4.(a) ábra egy ilyen, pl. a hélium-neon lézerekben alkalmazott kialakítást mutat. A pozitív oszlop hossza, mint tudjuk, tetszőlegesen nagyra választható, ezzel az erősítés növelhető.

A negatív fény tartományt hatékonyan a katód üreges kialakításával (8.2. fejezet) lehet kihasználni a szelektív gerjesztésre és populációinverzió létrehozására. A negatív fényben az elektronok lényegesen nagyobb energiával rendelkeznek, mint egy tipikus pozitív oszlopban, ezért magasabban fekvő energiaszintek (pl. gerjesztett ionállapotok) is könnyen populálhatók. Az üreges katódú elektródakialakítás tovább növeli a nagyenergiájú elektronok koncentrációját, ugyanis ezek a szemközti katódfelületek között oszcilláló mozgást tudnak végezni. A 12.4.(b)-(d) ábrákon néhány tipikus, az *üreges katódú lézerekben* használt elektródakialakítás látható. Ezek mindegyike transzverzális jellegű, azaz a gázkisülés árama merőlegesen folyik az optikai tengelyre.

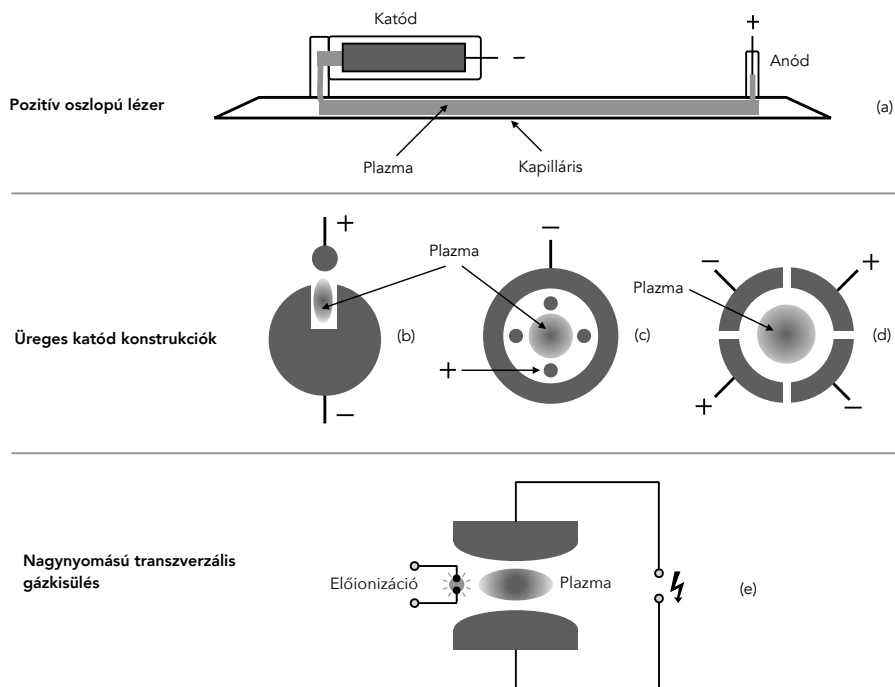
Nagyobb nyomások esetén általában szintén transzverzális elrendezést alkalmaznak, a gázkisülést többnyire rövid, nagyfeszültségű (több kV – több tíz kV) impulzusokkal gerjesztik. A plazma felépülésének elősegítésére, ill. homogenitásának biztosítására a gerjesztő feszültségimpulzust megelőzően előnyös *előionizációt* alkalmazni – ez megtehető pl. egy röntgenimpulzussal, vagy egy töltött részecskéket és UV sugárzást létrehozó szikrakisüléssel.

Az alábbiakban a gázlézerek néhány fontos típusával ismerkedünk meg.

A He-Ne lézer

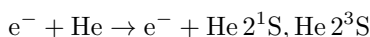
A gázlézerek közül a He-Ne lézer elsősorban a történelmi jelentősége miatt érdemel említést, ugyanis ez volt az első gázlézer, egyszersmind az első olyan lézer, amely folytonos üzemmódban működött.

A He-Ne lézer gerjesztési mechanizmusát a 12.5. ábra szemlélteti. A plazmá-

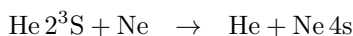
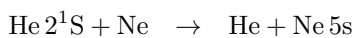


12.4. ábra. Néhány, gázlézerekben alkalmazott elektródaelrendezés vázlata. A (b)–(e) ábrákon az optikai tengely merőleges a rajz síkjára.

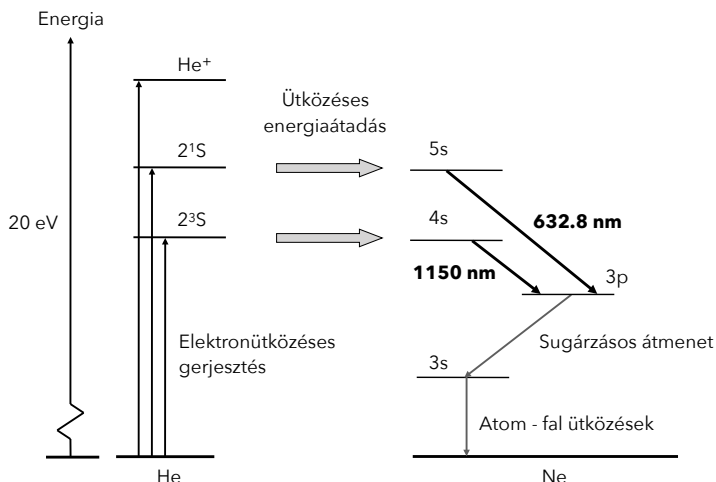
ban az



ütközéseknek köszönhetően jelentős számú szinglet (2^1S) és triplet (2^3S) metastabil He atom keletkezik.⁴ Ezek hosszú élettartamuknak köszönhetően nagy valószínűséggel ütköznek Ne atomokkal, és egyesek energiájukat átadva gerjesztett állapotú Ne atomokat hoznak létre. Vegyük észre, hogy ez a mechanizmus a Ne atomoknak csak egyes, jól meghatározott, a metastabil atomokkal energiában közel egyező (5s, ill. 4s) termjeit populálja:



⁴A He atomok esetében itt is a 10.2.1. fejezetben tárgyalt LS-csatolás szerinti jelölést alkalmazzuk – a spektroszkópiai termeket az eredő pálya impulzusmomentum kvantumszáma (L) és a multiplicitás (S) határozzák meg. A spin-pálya kölcsönhatás miatt a (triplet) 2^3S term három szintre válik szét. A Ne atomban 10 elektron található, az alapállapot konfigurációja $1s^2 2s^2 2p^6$. A gerjesztett termék jelölésére több sémát vezettek be (Paschen- és Racah-sémák). Itt, az egyszerűség kedvéért a termeket csak a „gerjesztett” elektron fő- és mellékkvantum-számával jellemezzük, így például az első gerjesztett term 3s. Megjegyezzük továbbá, hogy ezek a termék több szintre hasadhatnak, de ezt a felhasadást a gerjesztési mechanizmusokat bemutató ábrákon általában nem jelöljük.



12.5. ábra. Hélium-neon lézer gerjesztési mechanizmusa. A lézerátmeneteket a vastag nyilak jelölik. A gerjesztett termék felhasadását az ábrán nem jelöljük.

Az így populált Ne termekről „induló” sugárzás a fenti szelektív mechanizmussal nem-populált 3p termre érkezik, vagyis a felső és alsó termék között megvalósítható a populációinverzió.

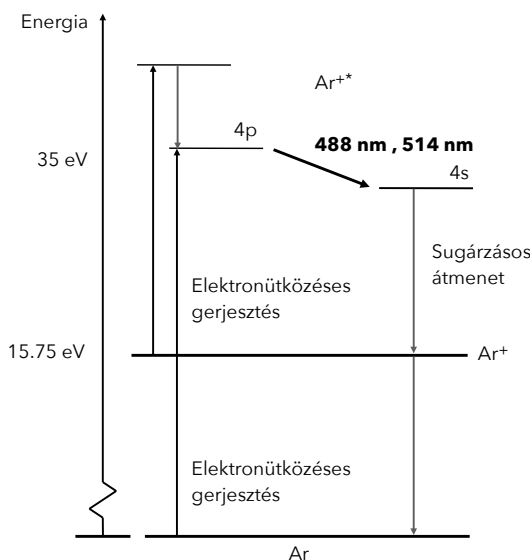
A He-Ne rendszerben lézerműködést először a He 2^1S atomok által populált Ne 4s termről induló $1.15 \mu\text{m}$ hullámhosszon érték el 1960-ban, a Bell Telephone Laboratories-ban. A vörös, 632.8 nm-es hullámhosszon 1962-ben ugyanebben a laboratóriumban demonstráltak lézerműködést.⁵ A He-Ne lézer teljesítménye a gázkisülés áramerősségével nem növelhető tetszőlegesen, mert növekvő szerepet kap a metastabil termék elektronütközéses („szuperelasztikus”) legerjesztődése és a lézerátmenetek alsó termjeinek elektronütközéses gerjesztése (ld. 4 fejezet). Az előbbi folyamat a metastabil termék populációjának telítődéséhez vezet, míg az utóbbi csökkenti a populációinverziót. Együttes hatásuk eredményeképpen a lézernek van egy optimális áramsűrűsége és behatárolt a teljesítménye (néhány-szor 10 mW értékben).

Az Ar^+ lézer

Az ionok esetében a termék energiaskálája nagyobb intervallumot fog át a semleges atomokéhoz képest, amit az alábbi erősen egyszerűsített, klasszikus, kvalitatív gondolatmenettel magyarázhatunk. Míg az atomokban a gerjesztett elektron és a Ze töltésű atommag kölcsönhatását $Z - 1$ számú elektron „árnyékolja le”,

⁵Hazánkban az első infravörös fényt sugárzó He-Ne lézer 1963-ban épült meg a KFKI Fizikai Optikai Laboratóriumában. Később ugyanitt kidolgozták különböző teljesítményű (5-50 mW) típusok gyártási technológiáját is, illetve az évek során 40-50 darabot gyártottak is ezekből; a KFKI-ban készült lézerek számos hazai intézetben és egyetemen segítették a kutatómunkát.

addig egy egyszeres ionizációs állapotban $Z - 2$ az árnyékoló elektronok száma. Emiatt az ionokban a gerjesztett elektron és az atommag elektrosztatikus kölcsönhatása erősebb, következésképpen az elektronátmenetek az atomokhoz képest tipikusan nagyobb energiaváltozással (nagyobb fotonenergiával) járnak, így jórészt a látható és az ultraibolya tartományba esnek.



12.6. ábra. Az argon ion lézer gerjesztési mechanizmusa.

Az Ar^+ lézer gerjesztési mechanizmusát 12.6. ábrán mutatjuk be. Az Ar atom alapállapotában az elektronok konfigurációja $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$. Az ionizáció során a hat $3p$ héjon lévő elektron közül egy leszakad az atomról, a gerjesztett ionállapotokban a $3p^5$ konfiguráció egyik elektronja kerül magasabb energiájú, pl. $4s$, vagy $4p$ állapotba. Az atomi alapállapotból a gerjesztés ezekre a lézerműködés szempontjából releváns termekre két lépésben történik: az első $e^- + \text{Ar}$ ütközésben az Ar atom ionizálódik, majd ezt követően a gerjesztés egy másik, $e^- + \text{Ar}^+$ ütközés következménye. Ez utóbbiak vagy direkt módon populálják a $4p$ termet, vagy magasabb termeken keresztül kaszkádfolyamattal.⁶

A direkt és a kaszkád „csatornákat” tekintve elmondhatjuk, hogy a felső lézernívók populációja az elektronsűrűség, illetve az áramsűrűség négyzetével lesz arányos: az Ar^+ lézerekben a hatékony gerjesztés az áramerősség több tíz amperes tartományában valósul meg. Ez az áram egy néhány mm^2 keresztmetszetű kapillárisban folyik, a nagymértékű hőfejlődés speciális anyagok és konstrukciók alkalmazását kívánja meg és aktív hűtést igényel.

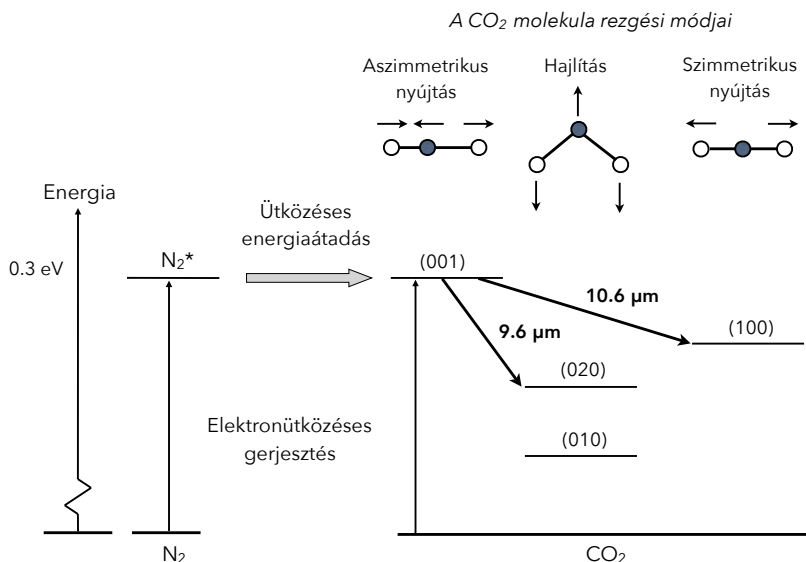
Az Ar^+ lézerek gerjesztési mechanizmusa lehetővé teszi a folyamatos műkö-

⁶Megemlíjtük még, hogy az $e^- + \text{Ar}^+$ ütközések még metastabil ionállapotokat is eredményezhetnek, amelyekből egy újabb elektronnal való ütközés szintén populálhatja a $4p$ termet.

dést, ugyanis bár a fent említett elektronütközéses gerjesztési folyamatok mind a 4s, mind pedig a 4p termeket is populálják, a 4p term élettartama (~ 10 ns) sokkal hosszabb, mint a 4s termék, így a lézertámenetek alsó nívóinak kiürülése biztosított. Mivel mind a 4p, mind a 4s termék multiplettek, ezért számos hullámhosszon jöhet létre lézerműködés, ezek közül legjelentősebbek a 514.5 nm és 488.0 nm átmenetek. A lézertükrök spektrális visszaverőképességének függvényében a lézer egy kiválasztott hullámhosszon, vagy egyszerre több átmeneten is működhet. Egyes berendezésekben a hullámhossz kiválasztását a rezonátorba helyezett prizmával valósítják meg. Az Ar^+ lézerek teljesítménye a több W tartományba esik.

A CO_2 lézer

A széndioxid lézerben az erősítés a molekulák ugyanazon elektronállapottaihoz tartozó vibrációs-rotációs szintek közötti átmeneteken megy végbe. Mivel az ilyen átmenetekhez tartozó energia lényegesen kisebb az elektronátmenetekre jellemző energiákhoz képest (ld. 10.2.1. fejezet), ezért ezek a lézerek az infravörös tartományban működnek. A CO_2 lézer a molekuláris gázlézerek legfontosabb típusa, gerjesztési mechanizmusát a 12.7. ábra mutatja be. A lézer aktív közege CO_2 mellett N_2 és He gázokat is tartalmaz.

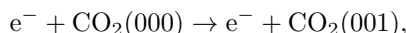


12.7. ábra. Széndioxid lézer gerjesztési mechanizmusa.

A CO_2 egy lineáris molekula, amelynek – a 12.7. ábrán látható módon – három különböző vibrációs módusa van: az aszimmetrikus nyújtás, a hajlítás és a szimmetrikus nyújtás. A molekula rezgési állapotát az egyes módusoknak megfelelő kvantumszámok által alkotott számhármassal jelöljük, pl. (001) az

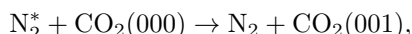
aszimmetrikus nyújtás első gerjesztett állapota (ld. 12.7. ábra), ami a kiinduló szintje a $10.6\ \mu\text{m}$, illetve $9.6\ \mu\text{m}$ hullámhosszú lézersugárzásnak.⁷ A (001) állapotot két folyamat populálja:

1. elektronütközéses gerjesztés az alapállapotú CO_2 molekulákkal:



melynek hatáskeresztmetszete lényegesen nagyobb, mint a 12.7. ábrán feltüntetett lézerátmenetek (020) és (100) alsó nivóra való elektronütközéses gerjesztés hatáskeresztmetszete;

2. rezonáns energiaátadás vibrációsan gerjesztett nitrogén molekuláktól:



ami szintén nagyon hatékony folyamat az igen kis energiakülönbség miatt.

A N_2 gáz, mint láttuk, szerepet kap a lézer pumpálásában. A gázkeverék He komponensének kettős szerepe van: egyrészt vibrációs-transzverzális relaxáción keresztül (a He atomok kis tömegének köszönhetően) jó hatékonysággal üríti a CO_2 molekula legalacsonyabb, (010) rezgési állapotát⁸, másrészt szerepe van a plazmában keletkező hő elvezetésében, ezzel csökkentve a plazma hőmérsékletét és az alacsonyan fekvő vibrációs szintek hőmérsékleti populálását.

A CO_2 lézerek a hagyományos longitudinális (pozitív oszlopú) kialakítás mellett nagynyomású transzverzális gázkisülésekben is működhetnek (melyekben a gázkisülés áramának iránya merőleges a lézer optikai tengelyére). Jellemzőjük az igen nagy elérhető teljesítmény, ami tipikusan több kW – több tíz kW értékű. Mindezt jó hatásfok mellett érik el, ugyanis a pumpálási séma az alacsony energiájú tartományban van, mivel a gerjesztéssel csak molekuláris rezgési állapotokat kell „elérni”. (Vessük össze ezt az Ar^+ ion lézer gerjesztési mechanizmusának 12.6. ábrán látható energiaskálájával!)

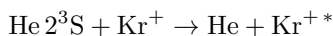
A He-Kr⁺ lézer

Gerjesztett ionállapotokat nem csak nagyáramú kisülésekben (ld. Ar^+ lézer), hanem az elérhető nagy elektronenergiát kihasználó üreges katódú kisülésekben is hatékonyan lehet populálni. Az üreges katódú gázkisülésekben működő lézerek

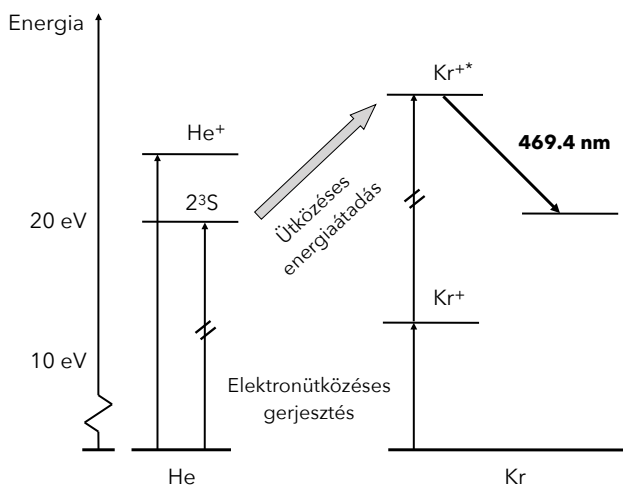
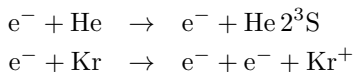
⁷Emlékezzünk arra, hogy a kétatomos molekulákat egy vibrációs kvantumszámmal jellemeztük, ezek ugyanis egy rezgési módussal rendelkeznek, ami a tengelyük irányába való rezgőmozgásnak felel meg. A CO_2 molekula esetében három ilyen rezgési módus létezik, ennek megfelelően mindegyik módus egy-egy külön kvantumszámmal jellemezhető.

⁸A CO_2 molekula (100), (020) és (010) szintjei egymáshoz erősen csatoltak, ugyanis a $\text{CO}_2(000) + \text{CO}_2(100)$ és a $\text{CO}_2(000) + \text{CO}_2(020)$ ütközések (010) állapotokhoz vezetnek ezen folyamatok (az energiát tekintve) közel rezonáns jellege miatt (vibrációs-vibrációs relaxáció). Így az említett három szint populációja nagyon rövid idő alatt hőmérsékleti egyensúlyba kerül. Ha tehát a (010) szint kiürítése lassú, akkor a lézerátmenetek alsó nivóinak populációja is megnő, ami kedvezőtlen a populációinverzió és a lézerműködés szempontjából.

közül He-Kr^+ lézer gerjesztési mechanizmusát mutatjuk be, a 12.8. ábrán. A lézerátmenet felső szintjét a



(közel) rezonáns energiaticserélő ütközések populálják. A reakcióban résztvevő metastabil hélium atomok és az alapállapotú kripton ionok az atomok alapállapotaiból elektronütközéses folyamatokkal keletkeznek [164, 165]:

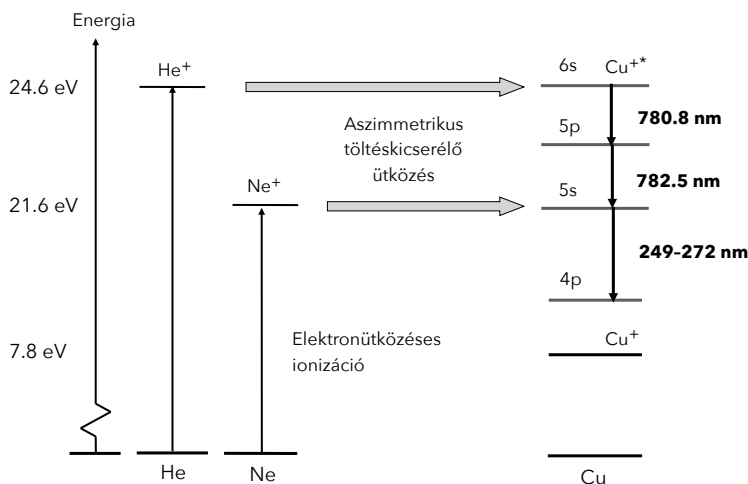


12.8. ábra. A He-Kr^+ lézer gerjesztési mechanizmusa.

A He/Ne-Cu⁺ lézer

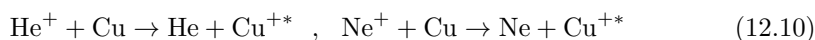
A fémek atomi és ionátmenetein működő lézerekben a szükséges fémgőzt tiszta fémek, vagy fémtartalmú molekulák elpárologtatásával, vagy katódporlasztással lehet létrehozni. A párologtatás módszere technikai okok miatt olyan fémekre korlátozódik, amelyek gőznyomása már néhány száz °C fok mellett megfelelő (pl. Cd, Zn), katódporlasztással ugyanakkor bármilyen (akár igen magas olvadáspontú) fém (pl. Cu, Fe, Al) gőze is egyszerűen előállítható. Az utóbbi felismerésre alapuló, első, katódporlasztásos elven működő fémionlézert a KFKI Szilárdtestfizikai Kutatóintézetének munkatársai építették 1978-ban; a lézer a Cu^+ ion 780.8 nm-es közeli infravörös átmenetén működött [166].

A katódporlasztásos Cu^+ ion lézerben a réz katódot a plazmában keletkező és a felületére (a határrétegben felgyorsulva) érkező, a töltőgáztól függően He^+ ,



12.9. ábra. Nemesgáz (He/Ne) - rézion lézer gerjesztési mechanizmusa.

vagy Ne^+ ionok porlasztják. A fématomok bediffundálnak a plazmába, ahol

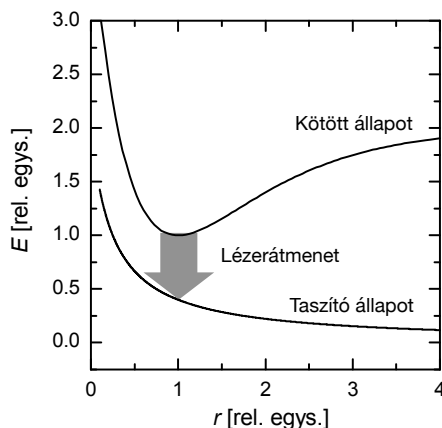


aszimmetrikus töltéscserélő ütközések populálják a rézion egyes termjeit. A folyamat során tehát a rézion atom egy lépésben ionizálódik és gerjesztődik. A folyamatnak megfelelő termsémát a 12.9. ábra mutatja. Hélium töltőgáz esetén a rézion $6s$ termje populálódik, erről (kaskád átmenettel) indul a 780.8 nm-es és a 782.5 nm-es közeli infravörös lézerátmenet. Neon töltőgáz esetén az $5s$ term populálódik, erről számos ultraibolya átmenet indul a 249 nm – 272 nm hullámhossztartományban [167].

A fémion lézerek hatékony gerjesztéséhez fontos, hogy az aktív közegben magas nemesgáz ion és fém atom sűrűséget állítsunk elő. A lézerekhez használt üreges katódú elektródaelrendezésnek köszönhetően a plazma áramerőssége az A – tíz A tartományba esik és a gázkisülés feszültsége több száz V értékű. A megfelelő feszültség egyrészt hatékony ionizációt, másrészt az elektródák felületénél nagyobb ionenergiát eredményez, ami emeli a katódporlasztás hatásfokát.

Excimer lézerek

Az excimer lézerek nevüket az „excited dimer” kifejezésről kapták, ami gerjesztett kétatomos molekulát jelent. Ezek a molekulák csak gerjesztett elektronállapotban léteznek, alapállapotukat taszító jellegű potenciálgörbe jellemzi, disszociációjuk foton kibocsátással jár együtt (12.10. ábra). Feltéve, hogy megfelelő sűrűségben tudunk előállítani gerjesztett állapotú molekulákat, a „kötött $\rightarrow$ szabad” átmenet során erősítést, illetve ennek következtében lézerműködést érhetünk el.



12.10. ábra. Excimer molekulák tipikus potenciálgörbéi: a lézerműködés alapja a molekula (kötött) gerjesztett és (taszító) alapállapota közötti elektronátmenet. Mivel az alapállapotban nincsenek vibrációs és rotációs állapotok ezért a sugárzás spektruma folytonos jellegű a gerjesztett állapot potenciálgörbéje által meghatározott hullámhossztartományban.

Az excimer lézerekben „használt” molekulák azért különlegesek, mert bennük igen kevésbé reaktív nemesgázatomok szerepelnek: vagy két nemesgázatom, vagy egy nemesgázatom és egy halogénatom alkotja őket, pl. (a megfelelő hullámhosszakkal együtt): Ar_2^* 126 nm, ArF 193 nm, KrF 248 nm, XeCl 308 nm.

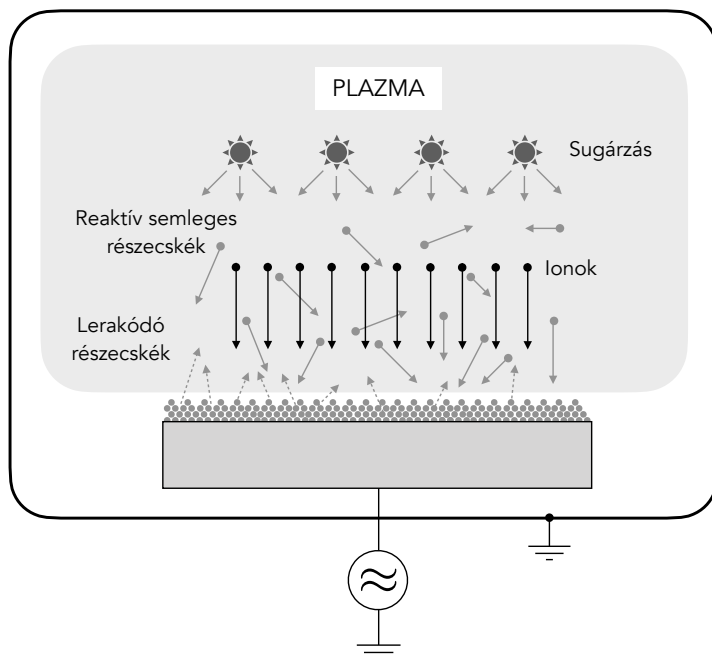
A lézerátmenet a molekula különböző elektronállapotai között jön létre, a kisugárzott hullámhossz tipikusan az ultraibolya tartományba esik. Mivel az elektronátmenetet követő disszociáció igen gyors, ezért az alsó lézernívó lényegében üresnek tekinthető, ami előnyös a lézerműködés szempontjából.

Az excimer lézerek legfontosabb alkalmazásai közül a lézeres mikrolitográfia, amorf szilícium vékonyrétegek kristályosítása, valamint szemészeti (műtéti) alkalmazások említhetők.

12.2. Felületmódosítás alacsony nyomású plazmaforrásokkal

A plazma alapú felületmódosítási eljárások közül a felületi rétegek eltávolítását (plazmamarást és porlasztást), új bevonatok kialakítását (rétegleválasztást), felületek tulajdonságainak megváltoztatását (pl. tisztítást és biokompatibilitás kialakítását) említhetjük legfontosabb alkalmazásokként. Ezek fizikai alapjait a 12.11. ábra segítségével tárgyaljuk.

A korábbiakban megismert módon (ld. 4.1.1. fejezet) a plazmákban különböző ütközési folyamatok zajlanak és ezek során elektromosan töltött és semleges (de többségükben reaktív) részecskék és sugárzás keletkezik. A 12.11. ábrán pél-



12.11. ábra. Plazmafolyamatok sémája a felületmódosítási eljárások tárgyalásához.

daként egy rádiófrekvenciás forrással létrehozott plazmát tekintünk, ez ugyanis dielektrikum felületű elektródákkal is működik. Az „aktív” részecskék fajtája, mennyisége, energiaeloszlása, illetve a plazma sugárzásának jellemzői erősen függenek magától a gáztól, vagy a gázkeveréktől és annak nyomásától, valamint a működési paraméterektől (pl. gerjesztő frekvencia és feszültség értékei, valamint a hullámforma alakja). Az egyes alkalmazásokhoz a fenti paramétereket optimalizálni kell, ez a gyakorlatban nagyrészt empirikus módon történik, bár a modellezés és az erre épülő szimulációk egyre nagyobb szerepet kapnak ebben a folyamatban.

12.2.1. Plazmamarás

A plazmamarási alkalmazások fontosságának megértéséhez ejtsünk néhány szót az elektronikai ipar fejlődéséről! Az elektronikai eszközök, főként a számítógépek rohamos elterjedésének korát „Második ipari forradalom”-ként is emlegetik. A fogyasztói, orvosi, ipari, stb. elektronikai eszközök mai fejlettségi szintje egyértelműen az energiahatékony, miniaturizált áramkörti kialakításoknak: az integrált áramköröknek, más néven „chip”-eknek köszönhető. Kevesen vannak tudatában annak, hogy a plazma alapú technológiák milyen alapvető szerepet

játszanak a mindennapi életünket segítő elektronikai eszközök létrehozása során. A mai modern elektronikai készülékek szinte kivétel nélkül tartalmaznak integrált áramköröket, amelyek előállítása során a százas nagyságrendű technológiai lépés számottevő része plazmafolyamatokra épül. Ezek nélkül az elektronikus készülékek fejlettségi szintje messze a jelenlegi alatt maradt volna – lényegében az 1970-es évek szintjén rekedt volna meg! Ugyanakkor ezekből a technológiákból a felhasználói oldalról nézve minden rejtve marad [168].⁹

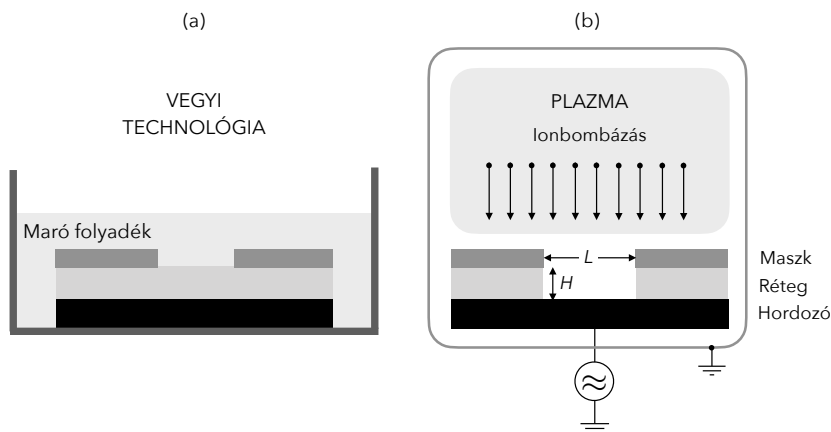


12.12. ábra. Példa félvezető struktúra kialakítására. A hordozó anyaga Si, ennek felületén egy oxidréteg (SiO_2) található, e fölé egy maszk kerül kialakításra (a). A marási folyamat célja az oxidréteg eltávolítása a maszk által nem takart felületről (b).

Az integrált áramkörök félvezető (jórészt Si) lapkákon kialakított struktúrákból épülnek fel. Egy félvezető lapkán létrehozandó struktúra kialakítását az alábbi elemi példán mutatjuk be. Tekintsük a 12.12.(a) ábra szerinti szerkezetet: a hordozó anyaga Si, melynek felületén SiO_2 réteg található, e fölé a marási folyamat megkezdése előtt egy ellenálló anyagú maszk kerül kialakításra. A cél az oxidréteg eltávolítása, azaz egy „ablak nyitása” a Si lapkához a maszk által nem fedett részen, vagyis a 12.12.(b) ábra szerinti állapot elérése. Az integrált áramkörök gyártásának kezdeti korszakában vegyi alapú eljárásokat alkalmaztak az ilyen jellegű lépések során. A vegyi technológia során (lásd 12.13.(a) ábra) a maró folyadék a maszkon kialakított ablakon keresztül érintkezésbe lép a SiO_2 réteggel. A marás során a maszk mintázatának megfelelően az oxidréteg eltűnik a Si hordozóról, viszont – mivel a folyamat izotróp – a folyadék a maszk élei alatt is kimarja az oxidréteget. Ez a nem kívánatos jelenség korlátozza a kialakítható struktúrák laterális méretét.

A plazma alapú eljárás (lásd 12.13.(b) ábra) a felület megfelelő energiájú ionok általi bombázásán alapul. A 9.6. fejezetben láttuk, hogy a pozitív ionok energiájának eloszlása az elektródáknál a feszültség, a frekvencia és a gáznyomás megválasztásával széles skálán változtatható. Nagy energiák eléréséhez nagy frekvencia (több 10 MHz) és kis gáznyomás előnyös, ekkor ugyanis (i) az ionok a felület közelében kialakuló határrétegen közel ütközésmentesen tudnak átrepülni és (ii) az energiájukat a határrétegen eső feszültség időbeli átlaga határozza

⁹Az elektronikai ipar forgalma jelenleg éves szinten ~ 2000 milliárd \$. Ennek fő mozgatóereje a félvezetőipar, kb. ~ 500 milliárd \$ éves forgalommal. Ez az iparág kb. 50 milliárd \$-t költ évente berendezésekre, amiből ~ 20 milliárd \$-t tesznek ki a plazmaalapú technológiákat képviselő berendezések. Ez utóbbi így csak kb. 1 %-a a teljes elektronikai ipar forgalmának, ami a gazdaság szereplőinek sem teszi nyilvánvalóvá ezeknek a technológiáknak a nélkülözhetetlenségét.



12.13. ábra. Struktúra marása SiO_2 rétegbe (a) vegyi technológiával, majd az ezt kiváltó (b) plazma alapú módszerrel. A (b) ábrán L a kialakítandó struktúra laterális méretét, H pedig annak mélységét jelzi.

meg. Szintén láttuk, hogy a gerjesztő hullámforma változtatásával (pl. két eltérő rádiófrekvenciás forrás segítségével) az ionok energiaeloszlása széles tartományban változtatható.

Az ionbombázás a marási folyamatot erősen anizotróppá teszi, itt ugyanis a plazmában keletkező, a minta fölötti határrétegben felgyorsult és a felületre keskeny szögtartományban érkező ionok lépnek kölcsönhatásba az oxidréteggel. Az „alámarás” jelensége így nem lép fel, ezért a módszer lehetőséget adott a struktúrák méretének radikális csökkentésére. Ehhez természetesen komoly fejlődésre volt szükség a *mikrolitográfia* területén is, melynek feladata a strukturált maszk kialakítása. A litográfiai folyamat során egy fényérzékeny (fotoreziszt) bevonatot visznek fel a szelet felületére, majd ezt a kívánt mintázatnak megfelelően (pl. egy fotomaszkon keresztül) UV fényel világítják meg. A fény megváltoztatja a reziszt tulajdonságait, ennek következtében az egy további fizikai, vagy kémiai eljárással szelektíven eltávolítható, pl. egy adott vegyülettel a megvilágítás hatására leoldható („pozitív reziszt”), vagy éppen leoldhatatlanná („negatív reziszt”) válik. A leoldási lépés eredményeként alakul ki a felületen a további megmunkálást lehetővé tevő maszk (12.12. ábra).¹⁰

Az utóbbi évtizedekben a félvezető lapkákon kialakított elemek száma kb. két évente megduplázódott – ez *Moore-törvényként* ismert. Az első mikroprocesszorok az 1970-es évek elején születtek, az 1960-as évek során kifejlesztett MOS¹¹ integrált áramkörti technológiának köszönhetően. Ezekben a tranziszto-

¹⁰ A kialakítható mintázatok finomságát a megvilágító fény hullámhossza korlátozza a diffrakció hatása miatt. A kezdetben jellemző mikrométeres struktúrákhoz alkalmas UV megvilágítást később elektronsugaras, ionsugaras, extrém UV és röntgen megvilágítás váltotta fel.

¹¹ Metal-Oxide-Semiconductor

rok száma ezres nagyságrendű volt, a struktúrák karakterisztikus mérete pedig 5-10 μm körüli. Napjainkra az egy chip-re integrált elemek száma a több 10 milliárd nagyságrendig növekedett, 7-12 nm-es struktúrákra alapozva [169]. A nagy kapacitású (flash) memóriákban még ezt is nagyságrendekkel meghaladja a tranzisztorok száma. Ez a fantasztikus fejlődés a plazma alapú technológiák nélkül nyilvánvalóan nem ment volna végbe.¹²

12.2.2. Gőzfázisú rétegleválasztás

Amennyiben a cél nem anyag eltávolítása, hanem egy bizonyos réteg kialakítása a felületre (12.11. ábra), akkor a nagy energiájú ionok porlasztó hatása nem kívánatos, ezért az ilyen alkalmazások nagyobb gáznyomás mellett működnek. A nagyobb nyomás nagy részecskesűrűségek elérését is lehetővé teszi, ami nagy fluxust eredményez a felületnél, gyorsítva az ott lejátszódó folyamatokat. A reaktív semleges részecskék itt is szerepet kapnak. Napelemek gyártásánál a hordozón egy amorf Si réteget kell kialakítani, pl. plazma által segített kémiai gőzfázisú leválasztás („Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition”, PECVD) segítségével.¹³ A folyamat során a plazmát hidrogén-szilán keverékben (H_2 - SiH_4) hozzák létre, a felületen kialakuló rétegbe 5-20% H atom épül be, ezzel amorf-Si:H réteget létrehozva. A plazmában számos folyamat megy végbe, a domináns pozitív ion SiH_3^+ , a réteg felépítésében ezen ionok mellett a SiH_2 és SiH_3 gyökök szerepe valószínűsíthető [4].

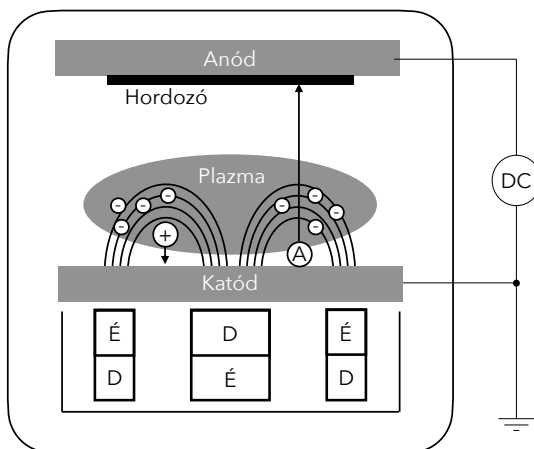
A PECVD módszer szintén fontos szerepet kap az integrált áramköröknél fedőréteggént használt szilícium-nitrid rétegek kialakításában. A réteg felépítésében itt a SiH_4/NH_3 gázban létrehozott plazmában keletkező reaktív gyökök (SiH_2 , SiH_3 és NH) játszanak szerepet [4].

12.2.3. Porlasztásos rétegleválasztás

A porlasztásra alapuló rétegleválasztás alapja az, hogy az elektródákra érkező pozitív ionok a tipikusan fémből készült elektródából atomokat ütnek ki, amelyek a gáztéren áthaladva egy hordozó felületére lerakódnak. Egy egyszerű egyenfeszültségű gázkisülés működési viszonyai (elsősorban a gáz nyomása)

¹²Jelenleg a plazmamarási technológiák egyik legnagyobb kihívása olyan struktúrák kialakítása, ahol a mélység a laterális méretet $H/L \sim 50$ -100 mértékben haladja meg. Ilyen struktúrákban komoly problémát okoz a felületek elektromos feltöltődése, amit a bombázó ionok okoznak. A felületi töltések olyan elektromos teret alakítanak ki, ami gátolja a további ionok „munkáját”. A feltöltődés kompenzálására olyan módszereket kell kidolgozni, ahol a plazmából megfelelő fluxusú elektronbombázás is éri a vájatokat, segítve a kialakult pozitív felületi töltés semlegesítését.

¹³A PECVD a kémiai gőzfázisú leválasztás („Chemical Vapor Deposition”, CVD) olyan változata, ahol elektronok ütközései eredményezik a kívánatos plazmakémiai reakciókat. CVD esetén ugyanakkor a megfelelő gőzfázisú és felületi folyamatok termikusan aktiválódnak, ehhez a gázt és a hordozót magas hőmérsékletre ($\sim 1000^\circ\text{C}$) kell felfűteni. Hőérzékeny anyagok értelemszerűen ilyen rendszerekben nem kezelhetők. Mivel a molekuláris gázok esetén a disszociációs energia tipikusan a néhány eV nagyságrendbe esik, ezt az energiát az elektronok számára könnyű biztosítani PECVD rendszerekben. A leválasztott réteg optimális növekedéséhez itt is szükség lehet a hordozó fűtésére.



12.14. ábra. Porlasztó magnetron kialakítása. A katód mögött erős permanens mágnesek helyezkednek el, az általuk keltett mágneses tér az elektronokat a katód felületéhez közeli térrészben csapdázza. Az „A”-val jelölt porlasztott atomok a kis gáznyomás miatt ütközésmentesen repülnek a hordozó irányába.

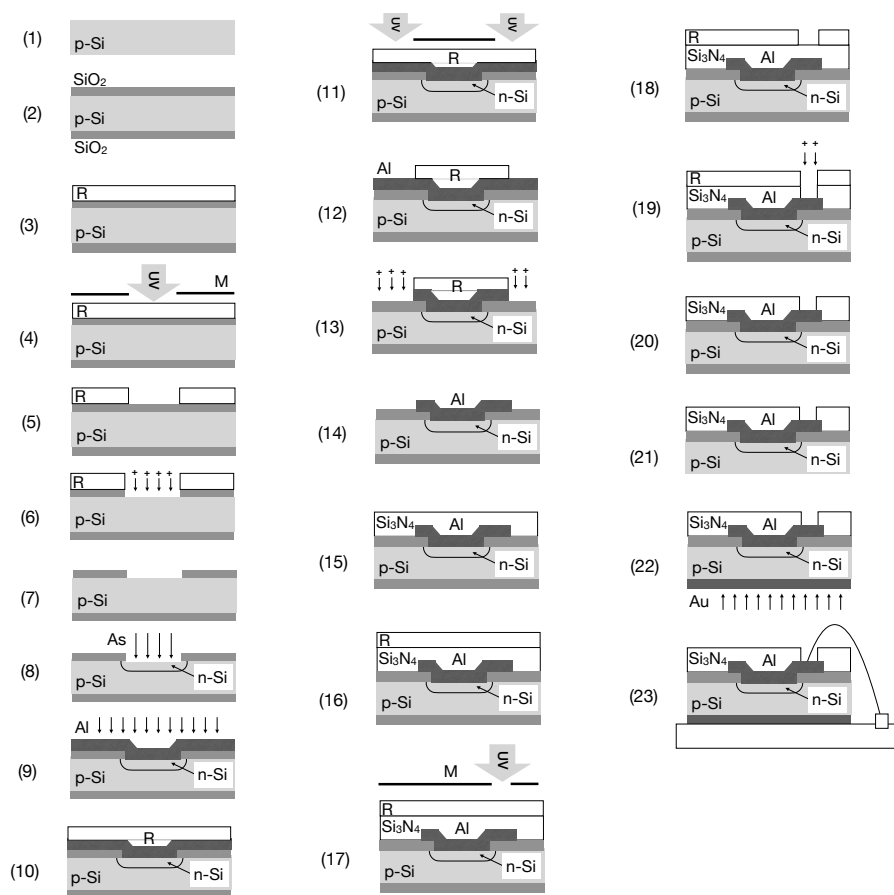
mellett a fématomok szabad úthossza tipikusan jóval kisebb a katód-hordozó távolságnál, ami nagyon alacsony hatásfokot eredményez, ugyanis a porlasztásból származó atomok így diffúzióval mozognak a plazmakamrában. Nagyobb szabad úthosszat csak kisebb gáznyomás mellett lehetne elérni, de ekkor viszont nehézségekbe ütközik a megfelelő ionizáció létrehozása.

A probléma megoldását az ún. *magnetron gázkisülések* [170] jelentik, melyekben a porlasztandó elektróda (DC esetben a katód) mögött permanens mágnesek helyezkednek el. A katód környezetében jelenlévő mágneses tér az elektronokat a katód felülete fölött egy tórusz alakú térfogatra koncentrálja. Az így csapdázódnak elektronok létre tudják hozni a gázkisülés fenntartásához szükséges ionizációt, ami a mágneses tér nélkül, az alacsony nyomásból következő nagy (a rendszer méretét jelentősen meghaladó) ionizációs szabad úthossz miatt nem történne meg. A kis gáznyomásnak köszönhetően a katód környezetében jelenlévő elektromos tér az ionizációs folyamatokban keletkező ionokat nagy energiára gyorsítja a nagy szabad úthossz miatt. Ezek a nagyenergiájú ionok a katód felületét hatékonyan porlasztják. A porlásból származó atomok lényegében ütközések nélkül érik el a hordozót, ugyanis az atomok ütközési szabad úthossza szintén nagy a háttérgáz kis nyomása miatt, ami tipikusan a 0.1–10 Pa tartományba esik. A DC táplálás mellett a magnetron gázkisülések RF táplálással is működhetnek; ezek fő előnye a DC esethez képest az, hogy a porlasztandó elektróda dielektrikum anyagból is készülhet. A magnetron gázkisülések működési feszültsége, ill. áramsűrűsége $\sim 300 \text{ V} - 700 \text{ V}$ és $5 \text{ mA cm}^{-2} - 50 \text{ mA cm}^{-2}$ nagyságú, ami $\sim 10 \text{ W cm}^{-2}$ nagyságrendű felületi teljesítménysűrűséget eredményez. Az elérhető elektronsűrűség tipikusan a 10^{11} cm^{-3} nagyságrendű. Eze-

ket az értékeket a gázkisülés stabilitása korlátozza. Magasabb részecske- és teljesítménysűrűség eléréséhez a magnetron gázkisülések az ú.n. HPIMS („High Power Impulse Magnetron Sputtering”) üzemmódban is működtethetők, ahol a felületi teljesítménysűrűség a kW cm^{-2} nagyságrendig, az elektronsűrűség 10^{12} – 10^{13} cm^{-3} nagyságrendig növelhető.

Az előzőekben ismertetett technológiák nélkülözhetetlen szerepet játszanak a modern mikroelektronikai áramkörök gyártásában. Mint említettük, ilyen elemek akár több tíz milliárd számban kerülnek kialakításra egyetlen áramköri lapkán. A 12.15. ábrán a legegyszerűbb félvezető áramköri elem, egy pn átmenetre épülő dióda „planáris technológiával” való (egy lehetséges) kialakítási módjának lépéseit követjük végig. Ebben szerepet játszanak az eddig tárgyalt ionmarás, plazmával segített kémiai gőzfázisú rétegleválasztás és porlasztásos rétegleválasztási technológiák. Az alábbi példa érzékeltetni szeretné, hogy mekkora kihívás a fent említett elemszámú áramkörök előállítás – erre valóban csak néhány vezető nagyvállalat képes.

Az alábbiakban a számok a 12.15. ábrán jelölt lépéseknek felelnek meg. Az eszköz kiinduló anyaga egy p típusú Si szelet (1). Ennek felületére hőkezeléssel egy vékony SiO_2 szigetelőréteget növesztenek (2). A következő számos lépés a szelet „felső” oldalával kapcsolatos. A kialakított oxidrétegre egy fotoreziszt („R”) bevonat kerül (3), amit egy fotomaszkon („M”) keresztül UV fénnel világítanak meg (4). Ennek az a tulajdonsága, hogy a megvilágított felület leoldható (5), vagyis a fotomaszk által definiált mintázat rámásolódik a szelet felületére. Azokon a helyeken, ahol a rezisztet eltávolították, ionbombázással marják a SiO_2 réteget, amelyen így egy ablak kerül kialakításra a Si hordozó felületéhez (6). A folyamat végén a maradék reziszt réteget eltávolítják (7), majd a SiO_2 rétegen kialakított ablakon keresztül n-típusú vezetést biztosító „szennyező” As atomokat implantálnak a Si hordozóba (8). A következő lépésben porlasztásos technológia segítségével egy Al réteget visznek fel (9), majd ezt is befedik egy újabb fotoreziszt réteggel (10). Ezt egy újabb megvilágítás – reziszt leoldás – ionmarás szekvencia követi (11,12,13), melynek eredményeként a később kontaktusként szolgáló Al réteg már csak az n-Si térrész közelében marad meg (14). Ezt követően plazmával segített kémiai gőzfázisú rétegleválasztással Si_3N_4 réteget visznek fel az eddig kialakított struktúrára. A következő lépések célja ezen a védőrétegen át egy ablak nyitása az Al réteg felé: ehhez egy újabb fotoreziszt réteg felvitele (16), megfelelő maszkon keresztül való megvilágítása (17), a megvilágított rész leoldása (18) és egy újabb ionmarási lépés (19) következik. A maradék rezisztréteg eltávolítása (20) után a szelet „hátdaláról” is eltávolítják az oxidréteget (21), majd ide egy Au bevonatot visznek fel porlasztással (22). Végül a szelet egy hordozóra kerül és a „felső” oldalon egy kontaktus kerül kialakításra (23).



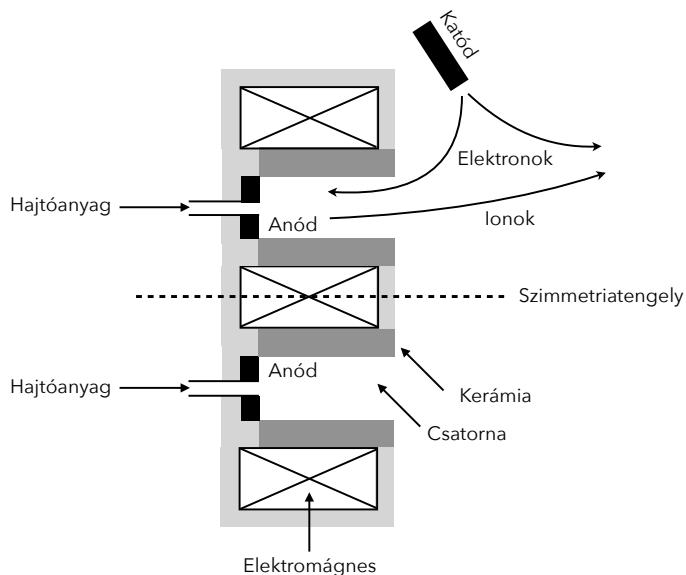
12.15. ábra. Egy pn átmenet kialakításának technológiai lépései Si lapkán.

12.3. Speciális plazmaforrások és alkalmazásaik

Az alábbiakban néhány speciális plazmaforrással és alkalmazásaikkal ismerkedünk meg, természetesen a teljesség igénye nélkül. A különböző forrásoknak egy-egy tipikus alkalmazási területét is megemlítjük, de megjegyezzük, hogy az egyes források más célra is felhasználásra kerülhetnek, illetve az adott alkalmazáshoz más típusú forrásokat is használhatnak.

12.3.1. Plazmahajtóművek

Az elektromos elven működő hajtóművek alkalmazását űreszközökön az 1960 as évek óta kutatják [171–174]. Az azóta eltelt idő során a műholdakon működő elektromos hajtóművek egyik legsikeresebb típusának a *Hall-effektuson* alapuló plazmahajtómű bizonyult.



12.16. ábra. Hall-játmű elvi vázlata.

Egy tipikus *Hall-játmű* vázlata a 12.16. ábrán látható. A rendszer alapja egy körszimmetrikus kerámia csatorna, amelynek az alapján (az ábra szerint a bal oldalon) helyezkedik el a plazmaforrás anódja, melynek nyílásain, vagy pórusain keresztül injektálják be a hajtóanyagot. A gázkísülés az anód és a (néhány centiméter hosszú) csatornán kívül elhelyezett katód között jön létre. A katód biztosítja az elektronokat a plazma fenntartásához; ezek a néhány száz Voltos katód - anód feszültség hatására felgyorsulnak és ionizálják a gázt. A csatornát belülről és kívülről körülvevő elektromágnesek közel radiális mágneses teret hoznak létre a csatorna tartományában. Mivel az alkalmazott feszültség egy axiális irányú elektromos teret hoz létre, a radiális mágneses tér az elektronok azimutális irányú ($\mathbf{E} \times \mathbf{B}$) áramlását („Hall-áramát”) eredményezi. Ez a mozgás „fogva tartja” az elektronokat, ezzel növelve a tartózkodási idejüket a csatornában, hatékonyabb ionizációt és a hajtóanyag optimális felhasználását biztosítva (az ionizáció nélkül távozó semleges gáz ugyanis veszteséget jelent).

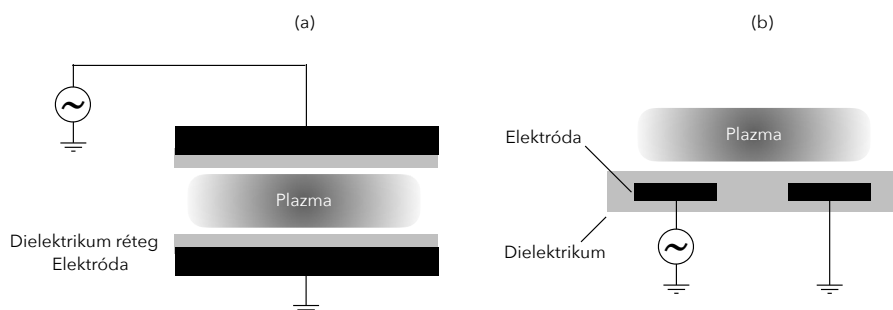
A mágneses tér az ionok mozgását (nagy tömegük miatt) nem befolyásolja jelentősen, ezek az elektromos tér irányában gyorsulnak és elhagyják a hajtóművet, ezzel biztosítva a tolóerőt. A katódból kilépő elektronok egy része az ionokkal együtt távozik a rendszerből, ezzel biztosítva a kilépő nyáláb elektromos semlegességét. (Semlegesítés nélkül az ionnyaláb kilépése a hajtómű sztatikus elektromos feltöltődéséhez vezetne, ami végül az ionáram megszűnését okozná.) Hajtóanyagként célszerű nagy atomtömegű és alacsony ionizációs potenciálú gázt, például xenont használni.

A Hall-játművek ugyan kis tolóerőt képesek kifejteni, de hosszú élettár-

tamuknak és kiváló hatásfokuknak köszönhetően előnyösen alkalmazhatók például műholdak pályán tartásánál, illetve nagy végsebességek elérését igénylő űrmissziókban.

12.3.2. Gázok konverziója szigetelt elektródájú gázkisülésekkel

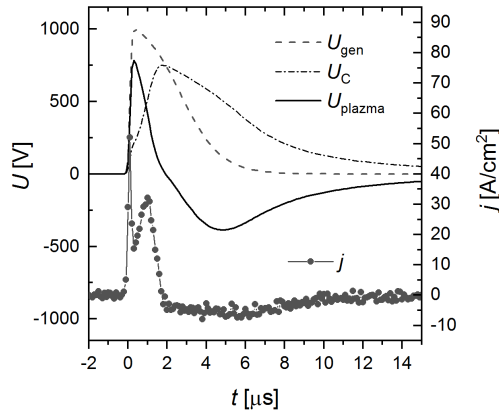
Szigetelt elektródájú plazmaforráshoz („Dielectric Barrier Discharge”, DBD) legegyszerűbben úgy jutunk, ha egy síkpárhuzamos elektródájú elrendezésben az egyik, vagy mindkét elektróda felületét egy szigetelő réteggel vonjuk be (ld. a 12.17.(a) ábra) [175]. Nyilvánvaló, hogy egy ilyen rendszerben egyenáramú gázkisülés nem alakulhat ki, ugyanis a szigetelő réteg (melynek anyaga pl. üveg, kvarc, kerámia lehet) kondenzátorként viselkedik. Ugyanakkor tranziens gázkisülések kialakulhatnak ebben a rendszerben is. Periodikus hullámformájú feszültséggel gerjesztve, a rendszerben rövid impulzus kisülések sorozata alakul ki. Az alkalmazott feszültség amplitúdója tipikusan a 1–100 kV tartományba, a gerjesztő frekvencia a kHz–MHz tartományba esik. A gáznyomás a néhány Pa nagyságrendtől atmoszférikus értékig terjedhet.



12.17. ábra. Szigetelt elektródájú plazmaforrások (DBD) vázlata: (a) térfogati DBD, (b) felületi DBD.

A 12.17.(a) ábrán vázolt kialakításban a plazma a két elektróda közötti *térfogatban* alakul ki, ezért ezeket „térfogati DBD” forrásoknak nevezik. Más elektródakialakítás esetén, pl. a 12.17.(b) ábra szerinti esetben „felületi DBD” plazmaforrásokhoz is juthatunk, ahol a plazma a dielektrikum *felületén* alakul ki.

A szigetelt elektródájú plazmaforrások működését egy szimulációs eredmény bemutatásával illusztráljuk a 12.18. ábrán. Az eredmények egy olyan térfogati DBD rendszerre vonatkoznak, amelynek egyik elektródája vezető, a másik elektródája dielektrikum réteggel borított. A síkpárhuzamos elektródák távolsága 3 cm. A gerjesztés $\sim 2 \mu\text{s}$ hosszúságú, 1000 V amplitúdójú feszültségimpulzusokkal történik 140 Pa nyomású Ar gázban. Feltesszük, hogy a szigetelő rétegen kezdetben zero feszültség esik. Amikor a rendszerre kapcsolt U_{gen} feszültség értéke eléri az átütési küszöböt, a plazma árama meredeken emelkedni kezd. Ez



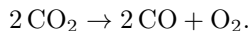
12.18. ábra. Szigetelt elektródájú gázkisülés szimulációjának eredményei: a gerjesztő hullámforma (U_{gen}), a dielektrikum rétegen (U_C) és a plazmán eső feszültség (U_{plazma}), valamint az áramsűrűség (j) az idő függvényében. ($U_{\text{gen,max}} = 1000$ V, nyomás: $p = 140$ Pa (Ar), elektródatávolság: $L = 3$ cm).

az áram ugyanakkor a kondenzátorként működő dielektrikum rétegen egy feszültségesést kezd kialakítani, melynek következtében $U_{\text{plazma}} < U_{\text{gen}}$. Amikor a tápfeszültség csökkenni kezd, egy idő után U_C meghaladja ennek értékét és $U_{\text{plazma}} = U_{\text{gen}} - U_C$ előjelet vált, aminek következtében az áram is negatív értéket vesz fel, ami U_C csökkenéséhez vezet. Látható, hogy a rendszerben a domináns folyamatok következtében egy „önleállító” gázkisülés alakul ki. Periodikus gerjesztés esetén a jelenség megismétlődik, a gáz átütését az előző impulzus során keletkezett töltött részecskék (impulzusok közt) „megmaradt” része segíti.

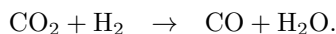
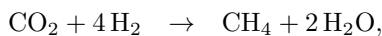
A szigetelt elektródájú gázkisülések fontos felhasználási területeiként az ózon előállítását, káros légnemű vegyi anyagok kibocsátásának csökkentését és CO_2 gáz konverziójának segítését említhetjük. Az ózon (O_3) az egyik legerősebb oxidáló és fertőtlenítő anyag, erős baktérium- és vírusölő képességgel rendelkezik, ezért hatékonyan használható víztisztításra és felületek fertőtlenítésére. A szigetelt elektródájú gázkisülésekre épülő nagy kapacitású ózongenerátorok építését elsősorban az ivóvíz tisztítása motiválta, ugyanis a folyamat kiindulási anyaga levegő, és az O_3 előállításához mindössze elektromos áram szükséges [176]. A technológiát ma is széles körben alkalmazzák az ivóvízellátásban. További fontos alkalmazásként említhető környezetszennyező illékony szerves vegyületek lebontása [177] ipari technológiák során keletkező gázokban. Ennek alapját a plazmában keletkező reaktív (oxidáló) gyökök (pl. O, OH, O_3) képezik, melyek reakcióba lépnek a lebontandó vegyületekkel. A DBD plazmaforrások az egyik lehetséges megoldást jelenthetik a CO_2 gáz más gázokká történő plazmaalapú konverziójára is [178]. A CO_2 koncentrációja a földi légkörben emelkedő tendenciát mutat [179], a kibocsátás csökkentése az emberiség előtt álló egyik legnagyobb és megkerülhetetlen feladat. Alacsony hőmérsékletű plazmák segítségével

több, a hagyományos eljárásokét lényegesen meghaladó hatásfokú reakció is kínálkozik a konverzióra [180], ezek:

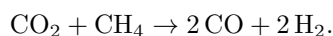
- CO₂ lebontása CO-ra és O₂-re:



- CO₂ hidrogénezése:



- CO₂ és metán együttes konverziója:



A folyamatok során keletkező gázok többsége (CO, ill. CO és H₂ („szintézisgáz” néven ismert) elegye) a vegyiparban fontos kiinduló anyag szerepét játssza. A CO₂ konverzió nagy volumenű és energiahatékony megvalósítása komoly kihívást jelent. Szigetelt elektródájú plazmaforrások mellett mikrohullámú és ív plazmákkal is folynak kísérletek a célok elérésére.

12.3.3. Felületkezelés atmoszférikus nyomású plazma „jet” forrásokkal

Az alacsony hőmérsékletű plazmák igen perspektivikus és jelenleg rendkívül gyorsan fejlődő *biomedikai* alkalmazásait [181] többek között az orvosi eszközök és implantátumok felületének sterilizálása, biokompatibilis felületek létrehozása, valamint sebek, fekélyek és rákos szövetek kezelése képviselik.

Az emberi testtel érintkezésbe hozott sebészeti eszközök, valamint a szervezetbe beépített implantátumok esetén alapvető fontosságú, hogy a felületük mentes legyen fertőző baktériumokból, gombákból és *archeákból*¹⁴ álló „biofilmektől” [182]. (Az orvosi eszközöktől szerzett kórházi fertőzések nagy része az ilyen, az antibakteriális szerekek szemben ellenálló filmektől származik, ezért ezek semlegesítésére komoly erőfeszítések folynak.) A plazmák élő szövetekkel való kölcsönhatási mechanizmusainak tisztázása még várat magára, ugyanis ez messze túlmutat a fizikai folyamatok megértésén, melyek itt biológiai folyamatokkal kombinálnak¹⁵ [184]. Az azonban egyértelműnek látszik, hogy a kezeléseknél döntő szerepe van a molekuláris gázokban keltett plazmákban létrejövő

¹⁴Az archeák az élő szervezetek egyik nagy csoportja, a baktériumokhoz hasonlóan egysejtű, sejtmag nélküli (prokarióta) szervezetek, az egyedi tulajdonságaik alapján azonban elkülönülnek a baktériumoktól és az eukariótáktól.

¹⁵Az elektromágneses terek és alacsony hőmérsékletű plazmák biomedikai alkalmazásainak kezdete a XIX. század végére nyúlik vissza (ld. [183]), Nikola Tesla ekkor mutatta meg, hogy az emberi szervezeten jelentős értékű nagyfrekvenciás áram folyhat át, káros következmények nélkül. Az áram becsatolása gyakran különböző plazmák segítségével valósult meg, amelyeket érintkezésbe hoztak a test felületével. Míg a korai kutatások alapvetően a testen átfolyó áram hatására fókuszáltak, a tényleges hatásért részben a levegőben keltett plazmában létrejövő molekulák, pl. ózon és nitrogén oxidok voltak felelősek. A „plazmagyógyászat” mai, modern megközelítése ezzel éppen ellenkezőleg, szinte kizárólag a vegyi és az ezt követő biokémiai reakciócsatornákra fókuszál és kevés figyelmet szentel az áramok jelenlétének.

reaktív nitrogén és oxigén vegyületeknek. Bár a kölcsönhatások a legmélyebb részletekig máig nem ismertek, a kezeléseket szabványosított berendezésekkel (pl. „kINPen” [185]) különböző kórképek kezelésére már rutinszerűen és sikeresen alkalmazzák.

A fent említett alkalmazásokhoz különösen jól illeszkednek a plazma „jet” típusú források, melyek szobahőmérsékleten és atmoszférikus nyomású áramló gázban működnek. Az alkalmazott gáz általában tiszta, vagy valamilyen molekuláris gázzal (N_2 , O_2) adalékolt He vagy Ar, esetleg levegő. Az atmoszférikus nyomású gázáram szükségtelenné teszi az alacsony nyomású rendszerekhez elengedhetetlen vákuumrendszereket, működtetésükhöz mindössze egy áramlásszabályzó szükséges, ami lényegesen olcsóbbá és egyszerűbbé teszi alkalmazásaikat. A működési feltételek és a források kialakítása ugyancsak egyszerűvé teszi a keletkezett aktív részecskék és a kezelni kívánt anyag kölcsönhatását, ugyanis a „jet” az előbbieket egyszerűen „kifújja” a kezelendő felületre.

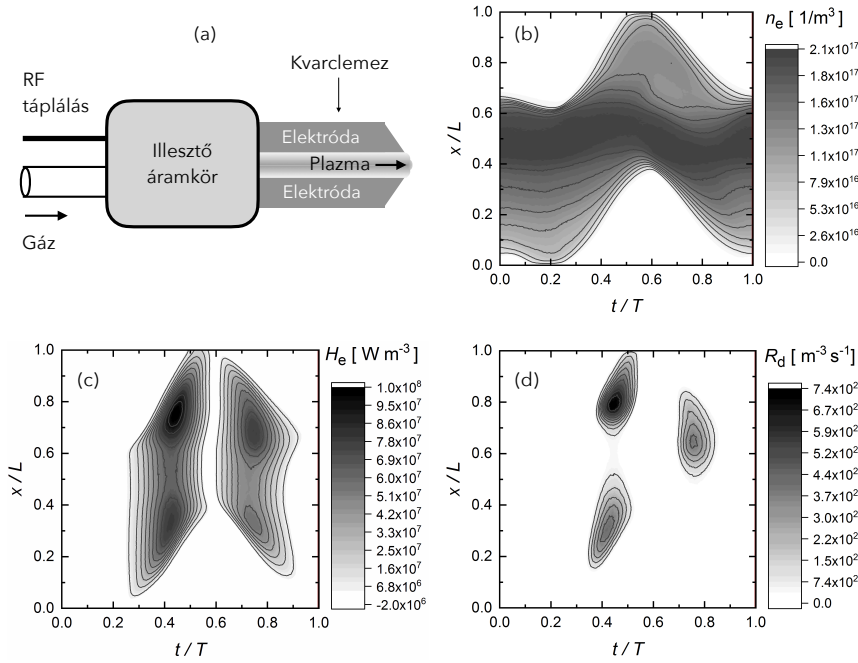
A plazma „jet”-ek egyik fontos, szabványosított típusa a „*COST Reference Jet*”, melynek vázlata a 12.19. ábrán látható [186]. A kapacitív csatolású rádiófrekvenciás plazma két fém elektróda között jön létre, melyeket oldalról két kvarclap takar. A plazmacsatorna hossza 30 mm, keresztmetszete 1 mm × 1 mm. A 12.19. ábra további részei a plazmaforrás PIC/MCC szimulációjának eredményeit mutatják, a következő feltételek mellett: $p = 1$ atm nyomású He+0.1% N_2 gázkeverék, hullámforma:

$$V(t) = V_1 \cos(2\pi ft) + V_2 \cos(4\pi ft + \pi) + \eta,$$

ahol $V_1 = 222.2$ V, $V_2 = 111.1$ V, $f = 14.0$ MHz és η a kialakuló DC előfeszültség. A plazmaforrás az adott esetben tehát a már korábban tárgyalt elektromos aszimmetria effektust létrehozó gerjesztéssel működik (ld. 9.6.2. fejezet). A szimulációs modellben [187] elektronok, He^+ , He_2^+ és N_2^+ ionok, He^* metastabil atomok ütközési folyamatai szerepelnek. A plazma fenntartásában alapvető fontosságú a



Penning-ionizációs folyamat. Az elektródák között kialakuló rádiófrekvenciás elektromos térben az elektronok oszcilláló jellegű mozgást végeznek, amint az elektronsűrűség tér- és időfelbontású eloszlását mutató 12.19.(b) ábra szemlélteti. A plazmában a domináns pozitív részecskék a N_2^+ ionok, annak ellenére, hogy az N_2 koncentrációja a gázban igen alacsony. A nagy nyomás miatt a plazma vezetőképessége korlátozott, ezért a plazma kvázisemleges részében – az elektronegatív gázokban megismert jelenséghez hasonlóan (ld. 9.4.1. fejezet) – jelentős térerősség alakul ki, ami az elektronokat gyorsítja. Ennek hatása figyelhető meg a 12.19.(c) ábrán, ami az elektronok teljesítményfelvételét mutatja. Jól látható, hogy mind a kialakuló határréteg széléhez közel, mind a kvázisemleges (középső) térrészben és az eltűnő határréteg szélénél is jelentős az elektronok teljesítményfelvétele. Fent említettük a plazmában keletkező oxigén és nitrogén vegyületek fontosságát a biomedikai alkalmazásokban. Ezen vegyületek létrehozásában fontosak a plazmában disszociációval keletkező reaktív O és N atomok. A vizsgált plazmaforrásban a 12.19.(d) ábrán látható módon az N_2 molekulák

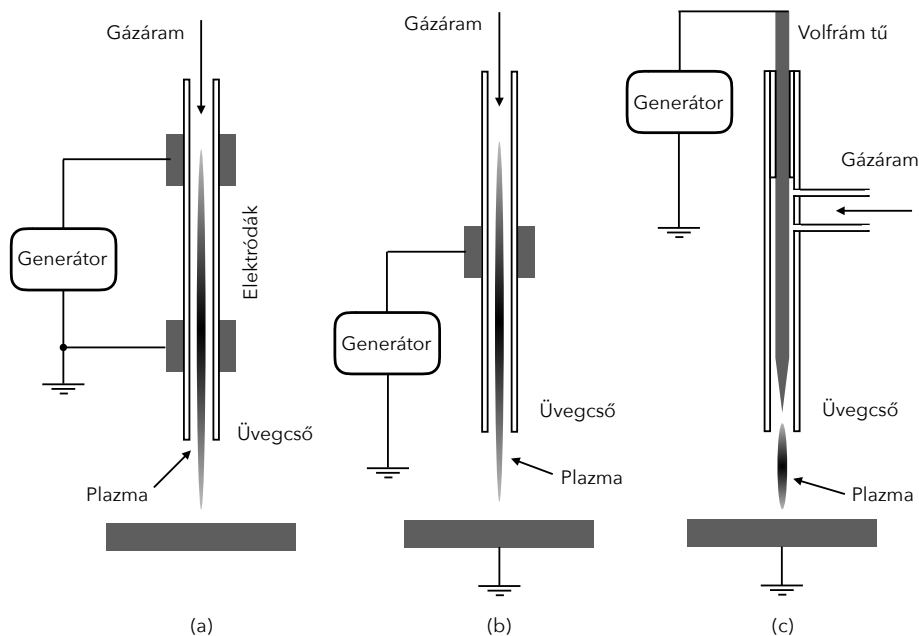


12.19. ábra. (a) A „COST Reference Jet” vázlata (oldalnézetben). (b-d) Szimulációs eredmények: elektronsűrűség, elektronok által felvett teljesítménysűrűség és az N₂ molekulák disszociációja, térbeli és időbeli felbontással. A forrás táplált elektródája az $x/L = 0$ helyen, a földelt elektródája az $x/L = 1$ helyen található, T az RF táplálás periódusideje.

jelentős mértékű disszociációjával számolhatunk, ami a He/N₂ keverékarány és a gerjesztő feszültség paramétereinek változtatásával optimalizálható.

„Jet” típusú forrásokat számos más kialakításban is fel lehet építeni – ezek közül néhányat a 12.20. ábra szemléltet. A források nagyfrekvenciás vagy bipoláris impulzusüzemű feszültséggel gerjeszthetők, ezzel a plazma létrehozható szigetelő anyaggal határolt környezetben, mint pl. a 12.20. ábrán vázolt rendszerekben üveg (kvarc) csőben. A 12.20.(a) ábra szerinti kialakítás esetén a gázkiülés mindkét elektródája magában a plazmaforrásban található. A további két bemutatott elrendezésben (b,c) a plazmaforrások csak egy elektródával rendelkeznek, az áramkör a földelt kezelendő felületen keresztül zárul. A gázáramlás mindegyik konfigurációban alapvető fontosságú, a plazmában keltett aktív állapotú atomokat illetve molekulákat a gázáramlás juttatja a kezelendő felülethez.

A biomedikai alkalmazások mellett a „jet” plazmaforrások jól használhatók felületmódosításra, nanokompozit rétegek leválasztására, valamint a mezőgazdaságban, szennyező mikrobák inaktiválására, magok csírázásának elősegítésére.

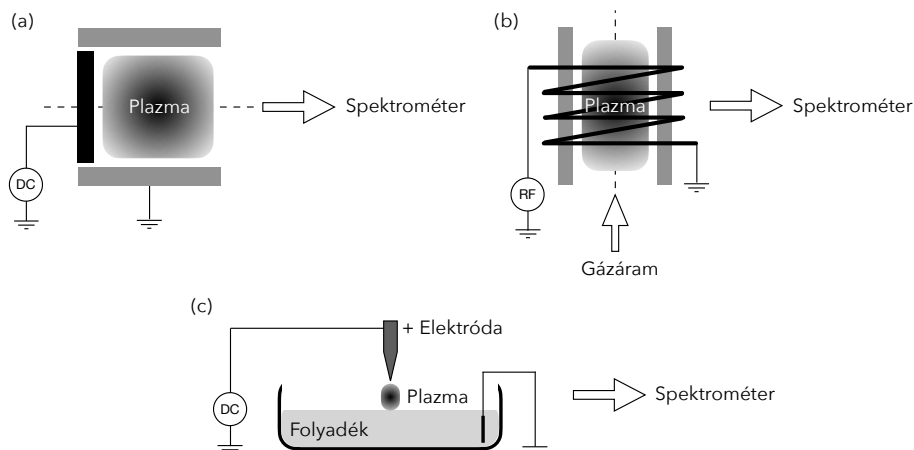


12.20. ábra. Különböző plazma „jet” konfigurációk.

12.3.4. Analitikai kémiai alkalmazások

Az alacsony hőmérsékletű plazmák analitikai kémiai felhasználására három példát mutatunk be a 12.21. ábra segítségével.

- Porlasztásos spektroszkópia („Glow discharge optical emission spectroscopy, GDOES / Glow discharge mass spectroscopy”, GDMS) [188–190]: 12.21.(a) ábra. Az eljárás célja egy szilárd (általában fémes) minta kémiai összetételének meghatározása. Ehhez a mintát a gázkisülés katódjaként használják, amit a plazmában keletkezett ionok bombázó hatása porlaszt (ugyanúgy, mint az üreges katódú fémglóbulák és gázlázerek esetében, ld. 12.1.2 és 12.1.4. fejezetek.) A minta porlasztott anyaga bejut a plazmába és atomjai különböző folyamatokkal, pl. elektronokkal való ütközésekben gerjesztődnek és/vagy ionizálódnak, vagy gázionokkal ütközve aszimmetrikus töltéscsere során gerjesztett ionállapotokba kerülnek. A GDOES módszer esetén a plazma sugárzásának spektroszkópiai elemzésével (a szükséges kalibrációk után) meghatározható a minta kvantitatív összetétele. GDMS esetén egy tömegspektrométer detektálja a plazmából egy külső elektromos térrel „kihúzott” ionokat. Szigetelő anyagú minták rádiófrekvenciás gerjesztésű plazmával vizsgálhatók.
- Induktív csatolású plazmás optikai spektroszkópia („Inductively coupled plasma optical emission spectroscopy”, ICP-OES) [191]: 12.21.(b) ábra.



12.21. ábra. Plazmaforrások analitikai kémiai alkalmazásai: (a) porlasztásos spektroszkópia, (b) induktívan csatolt plazmás spektroszkópia és (c) elektrolit katódos atmoszférikus nyomású plazma spektroszkópia vázlatai.

A módszer alapja egy induktív csatolású RF plazmaforrás („Inductively coupled plasma”, ICP), amit egy olyan vívógázban (tipikusan Ar) hoznak létre, amibe egy porlasztási folyamattal bejuttatják a vizsgálni kívánt folyadékminta anyagát. A plazmában a gázatomokkal együtt a bevitt (és a plazmában disszociálódó) vegyület atomjai is gerjesztődnek, ezek mennyisége az emissziós spektrum elemzésével meghatározható.

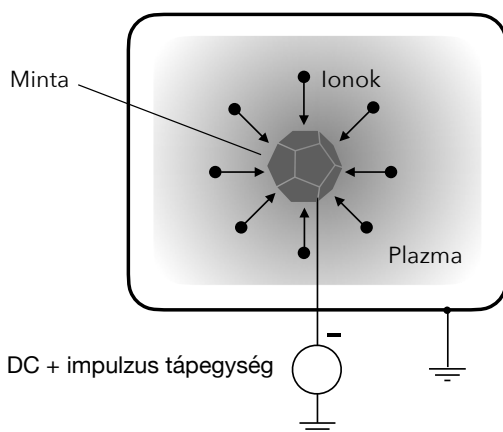
- Elektrolit katódos atmoszférikus nyomású plazma spektroszkópia („Electrolyte cathode atmospheric glow discharge” ELCAD) [192, 193]: 12.21.(c) ábra. Az analitikai eljárás alapja egy folyadékfelületen (levegőben) létrehozott ködfénykisülés. A plazma és a folyadék kölcsönhatása következtében a folyadék anyaga a plazmába kerül és elektronütközési folyamatokkal gerjesztődik. A plazma fénykibocsátása így információt hordoz a folyadékban jelenlévő szennyező kémiai elemekről. A módszer jellemző alkalmazása a természetes vizekben és szennyvizekben oldott nehézfémek koncentrációjának meghatározása.

12.3.5. Plazmaimmerziós ionimplantáció

Implantáció alatt atomok szilárdtestek felületi rétegébe való bevitelét értjük. Ezt a legtöbb esetben ion gyorsító berendezések alkalmazásával végzik, $\sim$ keV–MeV energiákon. A felgyorsított ionok az energiájuktól, tömegüktől, illetve a céltárgy atomjainak tömegétől függő mélységbe hatolnak be a felületbe, annak fizikai és kémiai jellemzőit megváltoztatva [194].

Az implantációs technika igen fontos szerepet játszik a félvezetők gyártásá-

ban, de emellett felületek optikai jellemzőinek megváltoztatására, kopásállóságának növelésére is alkalmazható. Többek között az utóbbi alkalmazáshoz jelentősen olcsóbb és egyszerűbb alternatívát a plazmaimmerziós ion implantáció („Plasma Immersion Ion Implantation”, PI³, PI³) [195], melynek sémáját a 12.22. ábrán mutatjuk be.



12.22. ábra. Plazmaimmerziós ionimplantáció sémája.

Az eljárás lényege, hogy egy vákuumkamrában a kezelendő mintát (ami leggyakrabban egyszerűbben elektromosan vezető anyagú) katódként kapcsolva, alacsony nyomáson egyenáramú ködfénykisülést hoznak létre, ami körülveszi a mintát. A plazmát fenntartó tápfeszültségre periodikusan több kV amplitúdójú negatív impulzusokat szuperponálnak, ezek hatására a plazma pozitív ionjai a minta felé gyorsulnak és nagy energiával csapódnak be annak felületére. Szigetelő anyagú minták esetén rádiófrekvenciás gerjesztés alkalmazható.

A módszer kifejezett előnye (a hagyományos, gyorsítókra épülő megközelítéssel szemben), hogy bonyolult alakú mintadarabok is kezelhetők. Főbb alkalmazási területeiként nagy keménységű és kopásálló felületek nitridálással történő létrehozása (csapágyak, szerszámok esetében), valamint orvosi implantátumok felületkezelése említendő.

Az alacsony hőmérsékletű plazmák alkalmazásai közül itt csak néhány fontos területtel volt alkalmunk megismerkedni, a számos perspektivikus felhasználási terület közül néhányról pl. [184, 196, 197] nyújtanak további ismereteket. A *Plasma Sources Science and Technology* (IOP) folyóirat gondozásában megjelenő „*Foundations of low temperature plasmas and their applications*” cikksorozat [198], valamint a *Journal of Physics D: Applied Physics* (IOP) folyóiratban öt-évenként publikált „*Plasma Roadmap*” cikkek [184, 199] szintén hasznos forrá-

sok az alacsony hőmérsékletű plazmák fizikájában és alkalmazási lehetőségeiben való elmélyülésre és alkalmazási területeik fejlődésének követésére.

* * *

Irodalomjegyzék

- [1] R. Redmer. „Physical properties of dense, low-temperature plasmas”. In: *Physics Reports* 282.2-3 (1997), pp. 35–157. DOI: [10.1016/S0370-1573\(96\)00033-6](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(96)00033-6).
- [2] F. Haas. „An introduction to quantum plasmas”. In: *Brazilian Journal of Physics* 41.4-6 (2011), pp. 349–363. DOI: [10.1007/s13538-011-0043-0](https://doi.org/10.1007/s13538-011-0043-0).
- [3] J. I. Kapusta & C. Gale. *Finite-Temperature Field Theory: Principles and Applications*. Cambridge University Press, 2006. DOI: [10.1017/cbo9780511535130](https://doi.org/10.1017/cbo9780511535130).
- [4] M. A. Lieberman & A. J. Lichtenberg. *Principles of Plasma Discharges and Materials processing*. John Wiley & Sons, 2005. DOI: [10.1002/0471724254](https://doi.org/10.1002/0471724254).
- [5] T. Makabe & Z. L. Petrović. *Plasma Electronics: Applications in Microelectronic Device Fabrication*. Vol. 26. CRC Press, 2014. DOI: [10.1201/b17322](https://doi.org/10.1201/b17322).
- [6] R. M. Fano, R. B. Adler, & L. J. Chu. *Electromagnetic Fields, Energy, and Forces*. Taylor & Francis, 1960.
- [7] A. Zangwill. *Modern Electrodynamics*. Cambridge University Press, 2013.
- [8] L. D. Landau & E. M. Lifsic. *ELMÉLETI FIZIKA II.: Klasszikus erőterek*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1976.
- [9] L. D. Landau & E. M. Lifsic. *ELMÉLETI FIZIKA VIII.: Folytonos közegek elektrodinamikája*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1986.
- [10] K. Simonyi. *Elméleti villamosságtan*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1986.
- [11] A. Simon & J. Karácsony. *Plazmafizika*. Babes-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvári Egyetemi Kiadó, Kolozsvár, 2008.
- [12] G. Veres. *Elméleti plazmafizika*. ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 2008.
- [13] R. Balescu. *Transport Processes in Plasmas vol. 1.: Classical Transport Theory*. North-Holland, 1988.

- [14] P. Goldreich, S. Mahajan, & S. Phinney. *Order-of-Magnitude Physics: Understanding the World with Dimensional Analysis, Educated Guesswork, and White Lies*. 1999.
<http://www.inference.org.uk/sanjoy/oom/book-letter.pdf>
(utolsó elérés: 2025-03-21).
- [15] P. Scherz. *Practical electronics for inventors*. McGraw-Hill, Inc., 2006.
- [16] G. Fodor. *Villamosságtan I. Villamos hálózatok*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1985.
- [17] L. D. Landau & E. M. Lifsic. *ELMÉLETI FIZIKA V.: Statisztikus fizika I*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1981.
- [18] M. Kardar. *Statistical Physics of Particles*. Cambridge University Press, 2007. DOI: [10.1017/cbo9780511815898](https://doi.org/10.1017/cbo9780511815898).
- [19] L. Peliti. *Statistical Mechanics in a Nutshell*. Princeton University Press, 2011.
- [20] R. Balescu. *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, 1975.
- [21] L. D. Landau & E. M. Lifsic. *ELMÉLETI FIZIKA I.: Mechanika*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1970.
- [22] L. D. Landau & E. M. Lifsic. *ELMÉLETI FIZIKA VI.: Hidrodinamika*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1953.
- [23] L. M. Varela, M. García, & V. Mosquera. „Exact mean-field theory of ionic solutions: non-Debye screening”. In: *Physics Reports* 382.1-2 (2003), pp. 1–111. DOI: [10.1016/s0370-1573\(03\)00210-2](https://doi.org/10.1016/s0370-1573(03)00210-2).
- [24] D. C. Brydges & P. A. Martin. „Coulomb systems at low density: A review”. In: *Journal of Statistical Physics* 96.5 (1999), pp. 1163–1330. DOI: [10.1023/a:1004600603161](https://doi.org/10.1023/a:1004600603161).
- [25] G. Ecker. *Theory of Fully Ionized Plasmas*. Academic Press, 2013.
- [26] A. Piel. *Plasma Physics: an Introduction to Laboratory, Space, and Fusion Plasmas*. Springer, 2017. DOI: [10.1007/978-3-319-63427-2](https://doi.org/10.1007/978-3-319-63427-2).
- [27] J. Sólyom. *A Modern Szilárdtest-fizika Alapjai II: Fémek, Félvezetők, Szupravezetők*. ELTE Eötvös Kiadó, 2010.
- [28] I. V. Hertel & C.-P. Schulz. *Atoms, Molecules and Optical Physics 1*. Springer, 2022.
- [29] P. Drude. „Zur Elektronentheorie der Metalle”. In: *Annalen Der Physik* 312.3 (1902), pp. 687–692. DOI: [10.1002/andp.19023120312](https://doi.org/10.1002/andp.19023120312).
- [30] F. F. Chen. *Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion*. Springer, ed. 3, 2016. DOI: [10.1007/978-3-319-22309-4](https://doi.org/10.1007/978-3-319-22309-4).
- [31] C. M. Bender & S. A. Orszag. *Advanced mathematical methods for scientists and engineers I: Asymptotic methods and perturbation theory*. Springer Science & Business Media, 2013.

- [32] K.-U. Riemann. „The Bohm criterion and sheath formation”. In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 24.4 (1991), p. 493. DOI: [10.1088/0022-3727/24/4/001](https://doi.org/10.1088/0022-3727/24/4/001).
- [33] S. D. Baalrud & C. C. Hegna. „Kinetic theory of the presheath and the Bohm criterion”. In: *Plasma Sources Science and Technology* 20.2 (2011), p. 025013. DOI: [10.1088/0963-0252/20/2/025013](https://doi.org/10.1088/0963-0252/20/2/025013).
- [34] M. Le Bellac, F. Mortessagne, & G. G. Batrouni. *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics*. Cambridge University Press, 2004. DOI: [10.1017/cbo9780511606571](https://doi.org/10.1017/cbo9780511606571).
- [35] L. D. Landau & E. M. Lifsic. *ELMÉLETI FIZIKA III.: Kvantummechanika – Nemrelativisztikus elmélet*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1978.
- [36] G. H. Nickel. „Elementary derivation of the Saha equation”. In: *American Journal of Physics* 48.6 (1980), pp. 448–450. DOI: [10.1119/1.12002](https://doi.org/10.1119/1.12002).
- [37] V. E. Golant, A. P. Zhilinskij, & I. E. Sakharov. *Fundamentals of Plasma Physics (Osnovy fiziki plazmy)*. Izdatel'stvo Atomizdat, 1977.
- [38] I. V. Hertel & C.-P. Schulz. *Atoms, Molecules and Optical Physics 2*. Springer, 2022.
- [39] H. D. Hagstrum. „Theory of Auger ejection of electrons from metals by ions”. In: *Physical Review* 96.2 (1954), p. 336. DOI: [10.1103/physrev.96.336](https://doi.org/10.1103/physrev.96.336).
- [40] A. V. Phelps & Z. L. Petrović. „Cold-cathode discharges and breakdown in argon: surface and gas phase production of secondary electrons”. In: *Plasma Sources Science and Technology* 8.3 (1999), R21. DOI: [10.1088/0963-0252/8/3/201](https://doi.org/10.1088/0963-0252/8/3/201).
- [41] B. Horváth et al. „The effect of electron induced secondary electrons on the characteristics of low-pressure capacitively coupled radio frequency plasmas”. In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 51.35 (2018), p. 355204. DOI: [10.1088/1361-6463/aad47b](https://doi.org/10.1088/1361-6463/aad47b).
- [42] N. Matsunami et al. „Energy dependence of the ion-induced sputtering yields of monatomic solids”. In: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 31.1 (1984), pp. 1–80. DOI: [10.1016/0092-640x\(84\)90016-0](https://doi.org/10.1016/0092-640x(84)90016-0).
- [43] M. Bonitz et al. „Towards an integrated modeling of the plasma-solid interface”. In: *Frontiers of Chemical Science and Engineering* 13.2 (2019), pp. 201–237. DOI: [10.1007/s11705-019-1793-4](https://doi.org/10.1007/s11705-019-1793-4).
- [44] R. E. Robson, R. D. White, & M. Hildebrandt. *Fundamentals of Charged Particle Transport in Gases and Condensed Matter*. CRC Press, 2017. DOI: [10.4324/9781315120935](https://doi.org/10.4324/9781315120935).
- [45] J. A. Bittencourt. *Fundamentals of Plasma Physics*. Springer Science & Business Media, 2013.

- [46] H. Friedrich. *Scattering Theory*. Springer, 2016. DOI: [10.1007/978-3-662-48526-2](https://doi.org/10.1007/978-3-662-48526-2).
- [47] S. Weinberg. *Lectures on Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2015. DOI: [10.1017/cbo9781316276105](https://doi.org/10.1017/cbo9781316276105).
- [48] H. Friedrich. *Theoretical Atomic Physics*. 3rd ed. Springer, 2006. DOI: [10.1007/3-540-29278-0](https://doi.org/10.1007/3-540-29278-0).
- [49] G. B. Arfken & H. J. Weber. *Mathematical Methods for Physicists*. American Association of Physics Teachers, 1999.
- [50] R. C. Greenhow. „Does the spherical step-potential well exhibit the Ramsauer–Townsend effect?” In: *American Journal of Physics* 61.1 (1993), pp. 23–27. DOI: [10.1119/1.17404](https://doi.org/10.1119/1.17404).
- [51] G. F. Drukarev. *Collisions of Electrons with Atoms and Molecules*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [52] G. D. Mahan. *Quantum Mechanics in a Nutshell*. Princeton University Press, 2008.
- [53] M. Adibzadeh & C. E. Theodosiou. „Elastic electron scattering from inert-gas atoms”. In: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 91.1 (2005), pp. 8–76. DOI: [10.1016/j.adt.2005.07.004](https://doi.org/10.1016/j.adt.2005.07.004).
- [54] M. Hayashi. „Recommended values of transport cross sections for elastic collision and total collision cross section of electrons in atomic and molecular gases”. In: *Report IPPJ-AM-19* (1981). <http://dpc.nifs.ac.jp/IPPJ-AM/IPPJ-AM-19.pdf> (utolsó elérés: 2025-03-25).
- [55] A. V. Phelps. „The application of scattering cross sections to ion flux models in discharge sheaths”. In: *Journal of Applied Physics* 76.2 (1994), pp. 747–753. DOI: [10.1063/1.357820](https://doi.org/10.1063/1.357820).
- [56] A. V. Phelps. „Cross sections and swarm coefficients for nitrogen ions and neutrals in N₂ and argon ions and neutrals in Ar for energies from 0.1 eV to 10 keV”. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 20.3 (1991), pp. 557–573. DOI: [10.1063/1.555889](https://doi.org/10.1063/1.555889).
- [57] S. F. Biagi. *Fortran program, MAGBOLTZ. Plasma Data Exchange Project*. <https://www.lxcat.net/Biagi> (utolsó elérés: 2025-04-10).
- [58] E. M. Lifsic & L. P. Pitajevszkij. *ELMÉLETI FIZIKA X.: Kinetikus fizika*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1984.
- [59] R. L. Liboff. *Kinetic Theory: Classical, Quantum, and Relativistic Descriptions*. Springer Science & Business Media, 2003. DOI: [10.1007/b97467](https://doi.org/10.1007/b97467).
- [60] R. Balescu. *Statistical Dynamics: Matter out of Equilibrium*. World Scientific, 1997.
- [61] R. Soto. *Kinetic Theory and Transport Phenomena*. Vol. 25. Oxford University Press, 2016.

- [62] I. Abonyi. *A negyedik halmazállapot : Bevezető a plazmafizikába*. Gondolat Kiadó, Budapest, 1971.
- [63] R. E. Robson, R. D. White, & Z. L. Petrović. „Colloquium: Physically based fluid modeling of collisionally dominated low-temperature plasmas”. In: *Reviews of modern physics* 77.4 (2005), pp. 1303–1320. DOI: [10.1103/revmodphys.77.1303](https://doi.org/10.1103/revmodphys.77.1303).
- [64] S. Chapman & T. G. Cowling. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases: an Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction and Diffusion in Gases*. Cambridge University Press, 1990.
- [65] W. P. Allis. „Motions of Ions and Electrons”. In: *Electron-Emission Gas Discharges I/Elektronen-Emission Gasentladungen I*. Springer, 1956, pp. 383–444.
- [66] G. J. M. Hagelaar & L. C. Pitchford. „Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models”. In: *Plasma Sources Science and Technology* 14.4 (2005), p. 722. DOI: [10.1088/0963-0252/14/4/011](https://doi.org/10.1088/0963-0252/14/4/011).
- [67] R. D. White et al. „Is the classical two-term approximation of electron kinetic theory satisfactory for swarms and plasmas?” In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 36.24 (2003), p. 3125. DOI: [10.1088/0022-3727/36/24/006](https://doi.org/10.1088/0022-3727/36/24/006).
- [68] D. Loffhagen & R. Winkler. „Spatiotemporal relaxation of electrons in non-isothermal plasmas”. In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 34.9 (2001), p. 1355. DOI: [10.1088/0022-3727/34/9/312](https://doi.org/10.1088/0022-3727/34/9/312).
- [69] J. Loureiro & J. Amorim. *Kinetics and spectroscopy of low temperature plasmas*. Springer, 2016. DOI: [10.1007/978-3-319-09253-9](https://doi.org/10.1007/978-3-319-09253-9).
- [70] R. Winkler, D. Loffhagen, & F. Sigeneger. „Temporal and spatial relaxation of electrons in low temperature plasmas”. In: *Applied Surface Science* 192.1-4 (2002), pp. 50–71. DOI: [10.1016/S0169-4332\(02\)00020-X](https://doi.org/10.1016/S0169-4332(02)00020-X).
- [71] S. Dujko, R. D. White, & Z. L. Petrović. „Monte Carlo studies of non-conservative electron transport in the steady-state Townsend experiment”. In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 41.24 (2008), p. 245205. DOI: [10.1088/0022-3727/41/24/245205](https://doi.org/10.1088/0022-3727/41/24/245205).
- [72] S. Dujko et al. „Boltzmann equation analysis of electron transport in a N₂-O₂ streamer discharge”. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 50.8S1 (2011), 08JC01. DOI: [10.1143/jjap.50.08jc01](https://doi.org/10.1143/jjap.50.08jc01).
- [73] T. Makabe & H. Sugawara. „Historical development of electron swarm physics based on the Boltzmann equation towards in-depth understanding of a low-temperature collisional plasma”. In: *Plasma Sources Science and Technology* 33.9 (2024), p. 093001. DOI: [10.1088/1361-6595/ad75b6](https://doi.org/10.1088/1361-6595/ad75b6).

- [74] I. Korolov et al. „A scanning drift tube apparatus for spatiotemporal mapping of electron swarms”. In: *Review of Scientific Instruments* 87.6 (2016), p. 063102. DOI: [10.1063/1.4952747](https://doi.org/10.1063/1.4952747).
- [75] H. L. Pecseli. *Waves and Oscillations in Plasmas (2nd ed.)* CRC Press, 2020. DOI: [10.1201/9780429489976](https://doi.org/10.1201/9780429489976).
- [76] T. H. Stix. *Waves in plasmas*. Springer Science & Business Media, 1992.
- [77] D. G. Swanson. *Plasma Waves*. Elsevier, 2012.
- [78] K. S. Thorne & R. D. Blandford. *Modern classical physics: optics, fluids, plasmas, elasticity, relativity, and statistical physics*. Princeton University Press, 2017.
- [79] T. J. M. Boyd & J. J. Sanderson. *The physics of plasmas*. Cambridge university press, 2003. DOI: [10.1017/cbo9780511755750](https://doi.org/10.1017/cbo9780511755750).
- [80] W. H. Press et al. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2007. 3rd ed.
- [81] G. E. P. Box & M. E. Muller. „A Note on the Generation of Random Normal Deviates”. In: *The Annals of Mathematical Statistics* 29 (1958), p. 610. DOI: [10.1214/aoms/1177706645](https://doi.org/10.1214/aoms/1177706645).
- [82] G. Strang. *Computational science and engineering*. SIAM, 2007. DOI: [10.1137/1.9780961408817](https://doi.org/10.1137/1.9780961408817).
- [83] K. Nanbu. „Probability theory of electron-molecule, ion-molecule, molecule-molecule, and Coulomb collisions for particle modeling of materials processing plasmas and cases”. In: *IEEE Transactions on Plasma Science* 28.3 (2000), pp. 971–990. DOI: [10.1109/27.887765](https://doi.org/10.1109/27.887765).
- [84] Z. Donkó et al. „eduPIC: an introductory particle based code for radio-frequency plasma simulation”. In: *Plasma Sources Science and Technology* 30.9 (2021), p. 095017. DOI: [10.1088/1361-6595/ac0b55](https://doi.org/10.1088/1361-6595/ac0b55).
- [85] H. R. Skullerud. „The stochastic computer simulation of ion motion in a gas subjected to a constant electric field”. In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 1.11 (1968), p. 1567. DOI: [10.1088/0022-3727/1/11/423](https://doi.org/10.1088/0022-3727/1/11/423).
- [86] T. J. Moratz. „A theoretical investigation of the cathode fall in a neon glow discharge”. In: *Journal of Applied Physics* 63.8 (1988), pp. 2558–2569. DOI: [10.1063/1.340991](https://doi.org/10.1063/1.340991).
- [87] Y. M. Kagan. „The Townsend coefficient in non-uniform electric fields”. In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 24.6 (1991), p. 882. DOI: [10.1088/0022-3727/24/6/012](https://doi.org/10.1088/0022-3727/24/6/012).
- [88] S. Nijdam, J. Teunissen, & U. Ebert. „The physics of streamer discharge phenomena”. In: *Plasma Sources Science and Technology* 29.10 (2020), p. 103001. DOI: [10.1088/1361-6595/abaa05](https://doi.org/10.1088/1361-6595/abaa05).
- [89] J. M. Meek & J. D. Craggs. *Electrical Breakdown of Gases*. Clarendon Press, Oxford, 1953.

- [90] A. von Engel. *Ionized Gases*. Clarendon Press, Oxford, 1965.
- [91] P. Hartmann et al. „Effect of different elementary processes on the breakdown in low-pressure helium gas”. In: *Plasma Sources Science and Technology* 9.2 (2000), p. 183. DOI: [10.1088/0963-0252/9/2/311](https://doi.org/10.1088/0963-0252/9/2/311).
- [92] G. Malović et al. „Measurements and analysis of excitation coefficients and secondary electron yields in Townsend dark discharges”. In: *Plasma Sources Science and Technology* 12 (2003), S1.
- [93] R. Unbehauen. *Grundlagen der Elektrotechnik 2: Einschwingvorgänge, Nichtlineare Netzwerke, Theoretische Erweiterungen*. Springer-Verlag, 2013.
- [94] D. Naumin. *Einführung in die Netzwerktheorie: Berechnung des stationären und dynamischen Verhaltens von elektrischen Netzwerken Für Studenten der Elektrotechnik*. Springer-Verlag, 2013.
- [95] K. Rózsa, A. Gallagher, & Z. Donkó. „Excitation of Ar lines in the cathode region of a dc discharge”. In: *Physical Review. E, Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics* 52.1 (1995), p. 913. DOI: [10.1103/physreve.52.913](https://doi.org/10.1103/physreve.52.913).
- [96] G. Francis. *The Glow Discharge at Low Pressure*. Handbuch der Physik, volume XXII., Springer-Verlag, Berlin, 1956. DOI: [10.1007/978-3-642-45847-7_2](https://doi.org/10.1007/978-3-642-45847-7_2).
- [97] F. Sigeneger, G. I. Sukhinin, & R. Winkler. „Kinetics of the electrons in striations of spherical glow discharges”. In: *Plasma Chemistry and Plasma Processing* 20.1 (2000), pp. 87–110. DOI: [10.1023/A:1006973911319](https://doi.org/10.1023/A:1006973911319).
- [98] V. I. Kolobov. „Striations in rare gas plasmas”. In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 39.24 (2006), R487. DOI: [10.1088/0022-3727/39/24/r01](https://doi.org/10.1088/0022-3727/39/24/r01).
- [99] H. Helm. „Experimenteller Nachweis des Pendel-Effektes in einer zylindrischen Niederdruck-Hohlkathoden-Entladung in Argon / Experimental Evidence of the Existence of the Pendel Effect1 in a Low Pressure Hollow Cathode Discharge in Argon”. In: *Zeitschrift Für Naturforschung A* 27.12 (1972), pp. 1812–1820. DOI: [10.1515/zna-1972-1218](https://doi.org/10.1515/zna-1972-1218).
- [100] A. L. Ward. „Calculations of cathode-fall characteristics”. In: *Journal of Applied Physics* 33.9 (1962), pp. 2789–2794. DOI: [10.1063/1.1702550](https://doi.org/10.1063/1.1702550).
- [101] J.-P. Boeuf & L. C. Pitchford. „Pseudospark discharges via computer simulation”. In: *IEEE Transactions on Plasma Science* 19.2 (1991), pp. 286–296. DOI: [10.1109/27.106826](https://doi.org/10.1109/27.106826).
- [102] A. Derzsi et al. „On the accuracy and limitations of fluid models of the cathode region of dc glow discharges”. In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 42.22 (2009), p. 225204. DOI: [10.1088/0022-3727/42/22/225204](https://doi.org/10.1088/0022-3727/42/22/225204).

- [103] J. P. Boeuf & L. C. Pitchford. „Field reversal in the negative glow of a DC glow discharge”. In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 28.10 (1995), p. 2083. DOI: [10.1088/0022-3727/28/10/013](https://doi.org/10.1088/0022-3727/28/10/013).
- [104] Z. Donkó. „Heavy-particle hybrid modeling of transients in a direct-current argon discharge”. In: *Journal of Applied Physics* 88.5 (2000), pp. 2226–2233. DOI: [10.1063/1.1288008](https://doi.org/10.1063/1.1288008).
- [105] C. K. Birdsall & A. B. Langdon. *Plasma Physics via Computer Simulation*. CRC press, 2018. DOI: [10.1201/9781315275048](https://doi.org/10.1201/9781315275048).
- [106] R. W. Hockney & J. W. Eastwood. *Computer Simulation Using Particles*. CRC Press, 2021. DOI: [10.1201/9780367806934](https://doi.org/10.1201/9780367806934).
- [107] S. Wilczek et al. „Electron dynamics in low pressure capacitively coupled radio frequency discharges”. In: *Journal of Applied Physics* 127.18 (2020), p. 181101. DOI: [10.1063/5.0003114](https://doi.org/10.1063/5.0003114).
- [108] J. Schulze et al. „Ionization by drift and ambipolar electric fields in electronegative capacitive radio frequency plasmas”. In: *Physical Review Letters* 107.27 (2011), p. 275001. DOI: [10.1103/physrevlett.107.275001](https://doi.org/10.1103/physrevlett.107.275001).
- [109] T. Gans, V. Schulz-Von Der Gathen, & H. F. Döbele. „Spectroscopic measurements of phase-resolved electron energy distribution functions in RF-excited discharges”. In: *EPL (Europhysics Letters)* 66.2 (2004), p. 232. DOI: [10.1209/epl/i2003-10183-2](https://doi.org/10.1209/epl/i2003-10183-2).
- [110] R. P. Brinkmann. „Beyond the step model: approximate expressions for the field in the plasma boundary sheath”. In: *Journal of Applied Physics* 102.9 (2007), p. 093303. DOI: [10.1063/1.2772499](https://doi.org/10.1063/1.2772499).
- [111] B. G. Heil et al. „On the possibility of making a geometrically symmetric RF-CCP discharge electrically asymmetric”. In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 41.16 (2008), p. 165202. DOI: [10.1088/0022-3727/41/16/165202](https://doi.org/10.1088/0022-3727/41/16/165202).
- [112] Z. Donkó et al. „Fundamental investigations of capacitive radio frequency plasmas: simulations and experiments”. In: *Plasma Physics and Controlled Fusion* 54.12 (2012), p. 124003. DOI: [10.1088/0741-3335/54/12/124003](https://doi.org/10.1088/0741-3335/54/12/124003).
- [113] T. Lafleur. „Tailored-waveform excitation of capacitively coupled plasmas and the electrical asymmetry effect”. In: *Plasma Sources Science and Technology* 25.1 (2015), p. 013001. DOI: [10.1088/0963-0252/25/1/013001](https://doi.org/10.1088/0963-0252/25/1/013001).
- [114] Z. Donkó et al. „The effect of secondary electrons on the separate control of ion energy and flux in dual-frequency capacitively coupled radio frequency discharges”. In: *Applied Physics Letters* 97.8 (2010), p. 081501. DOI: [10.1063/1.3481427](https://doi.org/10.1063/1.3481427).

- [115] P. Španěl. „An on-line Langmuir probe technique for the study of afterglow plasmas”. In: *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes* 149 (1995), pp. 299–310. DOI: [10.1016/0168-1176\(95\)04264-1](https://doi.org/10.1016/0168-1176(95)04264-1).
- [116] T. Mátrai & L. Csillag. *Kísérleti Spektroszkópia*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1990.
- [117] H. Haken & H. C. Wolf. *The Physics of Atoms and Quanta: Introduction to Experiments and Theory*. Springer Science & Business Media, 2005. DOI: [10.1007/3-540-29281-0](https://doi.org/10.1007/3-540-29281-0).
- [118] S. Svanberg. *Atomic and Molecular Spectroscopy: Basic Aspects and Practical Applications*. Vol. 6. Springer Science & Business Media, 2012.
- [119] P. W. Atkins & R. S. Friedman. *Molecular Quantum Mechanics*. 5th ed. Oxford University Press, 2011.
- [120] R. Kakkar. *Atomic and Molecular Spectroscopy*. Cambridge University Press, 2015. DOI: [10.1017/cbo9781107479999](https://doi.org/10.1017/cbo9781107479999).
- [121] T. Engel. *Quantum Chemistry and Spectroscopy*. 4th ed. Pearson Education, 2019.
- [122] L. D. Landau & E. M. Lifsic. *ELMÉLETI FIZIKA IV.: Relativisztikus kvantumelmélet*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1979.
- [123] S. Weinberg. *The Quantum Theory of Fields: Volume I, Foundations*. Cambridge University Press, 1995. DOI: [10.1017/CB09781139644167](https://doi.org/10.1017/CB09781139644167).
- [124] M. Capitelli, G. Colonna, & A. D’Angola. *Fundamental Aspects of Plasma Chemical Physics: Thermodynamics (Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics)*. Springer, 2012. DOI: [10.1007/978-1-4419-8182-0](https://doi.org/10.1007/978-1-4419-8182-0).
- [125] H. Haken & H. C. Wolf. *Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry: Introduction to Experiments and Theory*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [126] W. Demtröder. *Atoms, Molecules and Photons*. Vol. 3. 7. Springer, 2010. DOI: [10.1007/978-3-642-10298-1](https://doi.org/10.1007/978-3-642-10298-1).
- [127] A. H. Wilson. „The ionised hydrogen molecule”. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 118.780 (1928), pp. 635–647. DOI: [10.1098/rspa.1928.0074](https://doi.org/10.1098/rspa.1928.0074).
- [128] W. Demtröder. *Laser Spectroscopy: Basic Concepts and Instrumentation*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [129] H.-J. Kunze. *Introduction to Plasma Spectroscopy*. Vol. 56. Springer Science & Business Media, 2009. DOI: [10.1007/978-3-642-02233-3](https://doi.org/10.1007/978-3-642-02233-3).
- [130] A. Bogaerts, R. Gijbels, & J. Vlcek. „Collisional-radiative model for an argon glow discharge”. In: *Journal of Applied Physics* 84.1 (1998), p. 121. DOI: [10.1063/1.368009](https://doi.org/10.1063/1.368009).

- [131] C. Palmer & E. G. Loewen. *Diffraction Grating Handbook*. Newport Corporation New York, 2005.
- [132] E. Hecht. *Optics*. 5th ed. Walter de Gruyter GmbH & Co KG, 2018.
- [133] D. L. Andrews & A. A. Demidov. *An Introduction to Laser Spectroscopy*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [134] C. J. Mitchell et al. „Saturn’s spokes: Lost and found”. In: *Science* 311.5767 (2006), pp. 1587–1589. DOI: [10.1126/science.1123783](https://doi.org/10.1126/science.1123783).
- [135] G. S. Selwyn, J. Singh, & R. S. Bennett. „In situ laser diagnostic studies of plasma-generated particulate contamination”. In: *Journal of Vacuum Science & Technology. A* 7.4 (1989), pp. 2758–2765. DOI: [10.1116/1.576175](https://doi.org/10.1116/1.576175).
- [136] R. L. Merlino & J. A. Goree. „Dusty plasmas in the laboratory, industry, and space”. In: *Physics Today* 57.7 (2004), pp. 32–39. DOI: [10.1063/1.1784300](https://doi.org/10.1063/1.1784300).
- [137] S. I. Krashenninikov, R. D. Smirnov, & D. L. Rudakov. „Dust in magnetic fusion devices”. In: *Plasma Physics and Controlled Fusion* 53.8 (2011), p. 083001. DOI: [10.1088/0741-3335/53/8/083001](https://doi.org/10.1088/0741-3335/53/8/083001).
- [138] M. Bonitz, C. Henning, & D. Block. „Complex Plasmas: a Laboratory for Strong Correlations”. In: *Reports on Progress in Physics* 73.6 (2010), p. 066501. DOI: [10.1088/0034-4885/73/6/066501](https://doi.org/10.1088/0034-4885/73/6/066501).
- [139] M. Bonitz, N. Horing, & P. Ludwig. *Introduction to Complex Plasmas*. Vol. 59. Springer Science & Business Media, 2010. DOI: [10.1007/978-3-642-10592-0](https://doi.org/10.1007/978-3-642-10592-0).
- [140] V. E. Fortov & G. E. Morfill. *Complex and Dusty Plasmas: from Laboratory to Space*. CRC Press, 2009. DOI: [10.1201/9780367802882](https://doi.org/10.1201/9780367802882).
- [141] J. Goree. „Charging of particles in a plasma”. In: *Plasma Sources Science and Technology* 3.3 (1994), p. 400. DOI: [10.1088/0963-0252/3/3/025](https://doi.org/10.1088/0963-0252/3/3/025).
- [142] S. G. Brush, H. L. Sahlin, & E. Teller. „Monte Carlo Study of a One-Component Plasma. I”. In: *Journal of Chemical Physics* 45.6 (1966), pp. 2102–2118. DOI: [10.1063/1.1727895](https://doi.org/10.1063/1.1727895).
- [143] R. T. Farouki & S. Hamaguchi. „Thermal energy of the crystalline one-component plasma from dynamical simulations”. In: *Physical Review. E, Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics* 47.6 (1993), p. 4330. DOI: [10.1103/physreve.47.4330](https://doi.org/10.1103/physreve.47.4330).
- [144] S. Hamaguchi, R. T. Farouki, & D. H. E. Dubin. „Triple point of Yukawa systems”. In: *Physical Review. E, Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics* 56.4 (1997), p. 4671. DOI: [10.1103/physreve.56.4671](https://doi.org/10.1103/physreve.56.4671).

- [145] A. Derzsi et al. „On the metastability of the hexatic phase during the melting of two-dimensional charged particle solids”. In: *Physics of Plasmas* 21.2 (2014), p. 023706. DOI: [10.1063/1.4866019](https://doi.org/10.1063/1.4866019).
- [146] H. Thomas et al. „Plasma crystal: Coulomb crystallization in a dusty plasma”. In: *Physical Review Letters* 73.5 (1994), p. 652. DOI: [10.1103/physrevlett.73.652](https://doi.org/10.1103/physrevlett.73.652).
- [147] J. H. Chu & I. Lin. „Direct observation of Coulomb crystals and liquids in strongly coupled rf dusty plasmas”. In: *Physical Review Letters* 72.25 (1994), p. 4009. DOI: [10.1103/physrevlett.72.4009](https://doi.org/10.1103/physrevlett.72.4009).
- [148] I. Donkó, P. Hartmann, & Z. Donkó. „Molecular dynamics simulation of a two-dimensional dusty plasma”. In: *American Journal of Physics* 87.12 (2019), pp. 986–993. DOI: [10.1119/10.0000045](https://doi.org/10.1119/10.0000045).
- [149] D. Frenkel, B. Smit, & M. A. Ratner. *Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications*. Vol. 2. Academic press San Diego, 1996.
- [150] M. E. Tuckerman. *Statistical mechanics: theory and molecular simulation*. Oxford university press, 2023.
- [151] F. B. Baimbetov et al. „Modelling of dusty plasma properties by computer simulation methods”. In: *Journal of Physics. A, Mathematical and General* 39.17 (2006), p. 4521. DOI: [10.1088/0305-4470/39/17/s32](https://doi.org/10.1088/0305-4470/39/17/s32).
- [152] P. P. Ewald. „Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale”. In: *Annalen Der Physik* 369.3 (1921), pp. 253–287. DOI: [10.1002/andp.19213690304](https://doi.org/10.1002/andp.19213690304).
- [153] K. I. Golden & G. J. Kalman. „Quasilocalized charge approximation in strongly coupled plasma physics”. In: *Physics of Plasmas* 7.1 (2000), pp. 14–32. DOI: [10.1063/1.873814](https://doi.org/10.1063/1.873814).
- [154] J.-P. Hansen & I. R. McDonald. *Theory of Simple Liquids*. Elsevier, 1990. DOI: [10.1016/C2009-0-21643-6](https://doi.org/10.1016/C2009-0-21643-6).
- [155] J.-P. Hansen, I. R. McDonald, & E. L. Pollock. „Statistical Mechanics of Dense Ionized Matter. III. Dynamical Properties of the Classical One-component Plasma”. In: *Physical Review. A, General Physics* 11.3 (1975), p. 1025. DOI: [10.1103/physreva.11.1025](https://doi.org/10.1103/physreva.11.1025).
- [156] Z. Donkó et al. „Time-correlation functions and transport coefficients of two-dimensional Yukawa liquids”. In: *Physical Review. E* 79.2 (2009), p. 026401. DOI: [10.1103/physreve.79.026401](https://doi.org/10.1103/physreve.79.026401).
- [157] Z. Donkó, G. J. Kalman, & K. I. Golden. „Caging of particles in one-component plasmas”. In: *Physical Review Letters* 88.22 (2002), p. 225001. DOI: [10.1103/physrevlett.88.225001](https://doi.org/10.1103/physrevlett.88.225001).
- [158] J. Daligault. „Liquid-state properties of a one-component plasma”. In: *Physical Review Letters* 96.6 (2006), p. 065003. DOI: [10.1103/physrevlett.96.065003](https://doi.org/10.1103/physrevlett.96.065003).

- [159] Z. Donkó & B. Nyíri. „Molecular dynamics calculation of the thermal conductivity and shear viscosity of the classical one-component plasma”. In: *Physics of Plasmas* 7.1 (2000), pp. 45–50. DOI: [10.1063/1.873824](https://doi.org/10.1063/1.873824).
- [160] F. Müller-Plathe. „Reversing the perturbation in nonequilibrium molecular dynamics: An easy way to calculate the shear viscosity of fluids”. In: *Physical Review. E, Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics* 59.5 (1999), p. 4894. DOI: [10.1103/physreve.59.4894](https://doi.org/10.1103/physreve.59.4894).
- [161] D. J. Evans & G. P. Morriss. *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids*. ANU Press, 2007. DOI: [10.22459/smnl.08.2007](https://doi.org/10.22459/smnl.08.2007).
- [162] O. Svelto & D. C. Hanna. *Principles of Lasers*. 4th ed. Springer, 1998. DOI: [10.1007/978-1-4757-6266-2](https://doi.org/10.1007/978-1-4757-6266-2).
- [163] A. Nussbaum & R. A. Phillips. *Modern optika mérnököknek és kutatóknak*. Műszaki Könyvkiadó, 1982.
- [164] M. Jánossy & P. Tuovinen. „On the excitation mechanism of hollow cathode CW noble gas mixture ion lasers”. In: *Acta Physica Academiae Scientiarum Hungaricae* 46.3 (1979), pp. 167–175. DOI: [10.1007/bf03159428](https://doi.org/10.1007/bf03159428).
- [165] M. Jánossy et al. „He-Kr ion laser in a dc hollow cathode discharge”. In: *Optics Communications* 49.4 (1984), pp. 278–280. DOI: [10.1016/0030-4018\(84\)90191-3](https://doi.org/10.1016/0030-4018(84)90191-3).
- [166] L. Csillag et al. „Near infrared CW laser oscillation in Cu II”. In: *Physics Letters. A* 50.1 (1974), pp. 13–14. DOI: [10.1016/0375-9601\(74\)90331-4](https://doi.org/10.1016/0375-9601(74)90331-4).
- [167] R. C. Tobin et al. „High-gain hollow-cathode metal ion lasers for the UV and VUV”. In: *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* 1.3 (1995), pp. 805–810. DOI: [10.1109/2944.473662](https://doi.org/10.1109/2944.473662).
- [168] K. J. Kanarik. „Inside the mysterious world of plasma: A process engineer’s perspective”. In: *Journal of Vacuum Science & Technology. A, Vacuum Surfaces and Films* 38.3 (2020), p. 031004. DOI: [10.1116/1.5141863](https://doi.org/10.1116/1.5141863).
- [169] *Transistor count*. Wikipedia, *The Free Encyclopedia*. https://en.wikipedia.org/wiki/Transistor_count (utolsó elérés: 2025-03-12).
- [170] J. T. Gudmundsson et al. „High power impulse magnetron sputtering discharge”. In: *Journal of Vacuum Science & Technology. A, Vacuum Surfaces and Films* 30.3 (2012), p. 030801. DOI: [10.1116/1.3691832](https://doi.org/10.1116/1.3691832).
- [171] A. I. Morozov & V. V. Savelyev. „Fundamentals of stationary plasma thruster theory”. In: *Reviews of plasma physics* (2000), pp. 203–391. DOI: [10.1007/978-1-4615-4309-1_2](https://doi.org/10.1007/978-1-4615-4309-1_2).

- [172] V. V. Zhurin, H. R. Kaufman, & R. S. Robinson. „Physics of closed drift thrusters”. In: *Plasma Sources Science and Technology* 8.1 (1999), R1. DOI: [10.1088/0963-0252/8/1/021](https://doi.org/10.1088/0963-0252/8/1/021).
- [173] D. M. Goebel & I. Katz. *Fundamentals of Electric Propulsion: Ion and Hall Thrusters*. Vol. 1. John Wiley & Sons, 2008. DOI: [10.1002/9780470436448](https://doi.org/10.1002/9780470436448).
- [174] T. Lafleur, S. D. Baalrud, & P. Chabert. „Theory for the anomalous electron transport in Hall effect thrusters. I. Insights from particle-in-cell simulations”. In: *Physics of Plasmas* 23.5 (2016), p. 053502. DOI: [10.1063/1.4948495](https://doi.org/10.1063/1.4948495).
- [175] R. Brandenburg. „Dielectric barrier discharges: progress on plasma sources and on the understanding of regimes and single filaments”. In: *Plasma Sources Science and Technology* 26.5 (2017), p. 053001. DOI: [10.1088/1361-6595/aa6426](https://doi.org/10.1088/1361-6595/aa6426).
- [176] B. Eliasson, M. Hirth, & U. Kogelschatz. „Ozone synthesis from oxygen in dielectric barrier discharges”. In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 20.11 (1987), p. 1421. DOI: [10.1088/0022-3727/20/11/010](https://doi.org/10.1088/0022-3727/20/11/010).
- [177] F. Kogelheide et al. „Characterisation of volume and surface dielectric barrier discharges in N₂–O₂ mixtures using optical emission spectroscopy”. In: *Plasma Processes and Polymers* 17.6 (2020), p. 1900126. DOI: [10.1002/ppap.201900126](https://doi.org/10.1002/ppap.201900126).
- [178] A. Bogaerts & G. Centi. „Plasma technology for CO₂ conversion: a personal perspective on prospects and gaps”. In: *Frontiers in Energy Research* 8 (2020), p. 111. DOI: [10.3389/fenrg.2020.00111](https://doi.org/10.3389/fenrg.2020.00111).
- [179] R. K. Pachauri & L. A. Meyer. *IPCC, 2014: Climate Change 2014: Synthesis Report. Contribution of Working Groups I, II and III to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change, Geneva, Switzerland*. 2014.
- [180] B. Ashford & X. Tu. „Non-thermal plasma technology for the conversion of CO₂”. In: *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry* 3 (2017), pp. 45–49. DOI: [10.1016/j.cogsc.2016.12.001](https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2016.12.001).
- [181] M. Laroussi, X. Lu, & M. Keidar. „Perspective: The physics, diagnostics, and applications of atmospheric pressure low temperature plasma sources used in plasma medicine”. In: *Journal of Applied Physics* 122.2 (2017), p. 020901. DOI: [10.1063/1.4993710](https://doi.org/10.1063/1.4993710).
- [182] B. F. Gilmore et al. „Cold plasmas for biofilm control: opportunities and challenges”. In: *Trends in Biotechnology* 36.6 (2018), pp. 627–638. DOI: [10.1016/j.tibtech.2018.03.007](https://doi.org/10.1016/j.tibtech.2018.03.007).
- [183] D. B. Graves. „Lessons from Tesla for plasma medicine”. In: *IEEE Transactions on Radiation and Plasma Medical Sciences* 2.6 (2018), pp. 594–607. DOI: [10.1109/trpms.2018.2866373](https://doi.org/10.1109/trpms.2018.2866373).

- [184] I. Adamovich et al. „The 2017 Plasma Roadmap: Low temperature plasma science and technology”. In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 50.32 (2017), p. 323001. DOI: [10.1088/1361-6463/aa76f5](https://doi.org/10.1088/1361-6463/aa76f5).
- [185] S. Reuter, T. Von Woedtke, & K.-D. Weltmann. „The kINPen—a review on physics and chemistry of the atmospheric pressure plasma jet and its applications”. In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 51.23 (2018), p. 233001. DOI: [10.1088/1361-6463/aab3ad](https://doi.org/10.1088/1361-6463/aab3ad).
- [186] Y. Gorbanev et al. „Applications of the COST plasma jet: More than a reference standard”. In: *Plasma* 2.3 (2019), pp. 316–327. DOI: [10.3390/plasma2030023](https://doi.org/10.3390/plasma2030023).
- [187] I. Korolov et al. „Control of electron dynamics, radical and metastable species generation in atmospheric pressure RF plasma jets by Voltage Waveform Tailoring”. In: *Plasma Sources Science and Technology* 28.9 (2019), p. 094001. DOI: [10.1088/1361-6595/ab38ea](https://doi.org/10.1088/1361-6595/ab38ea).
- [188] A. Bogaerts & R. Gijbels. „Computer Simulation of an Analytical Direct Current Glow Discharge in Argon: Influence of the Cell Dimensions on the Plasma Quantities”. In: *Journal of Analytical Atomic Spectrometry* 12.7 (1997), pp. 751–759. DOI: [10.1039/a608262i](https://doi.org/10.1039/a608262i).
- [189] N. Jakubowski et al. „Trends in glow discharge spectroscopy”. In: *Journal of Analytical Atomic Spectrometry* 22.7 (2007), pp. 722–735. DOI: [10.1039/b705238n](https://doi.org/10.1039/b705238n).
- [190] V. Hoffmann et al. „Glow discharge mass spectrometry”. In: *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 381.1 (2005), pp. 173–188. DOI: [10.1007/s00216-004-2933-2](https://doi.org/10.1007/s00216-004-2933-2).
- [191] S. J. Hill. *Inductively Coupled Plasma Spectrometry and its Applications*. Vol. 8. John Wiley & Sons, 2008.
- [192] T. Cserfalvi, P. Mezei, & P. Apai. „Emission studies on a glow discharge in atmospheric pressure air using water as a cathode”. In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 26.12 (1993), p. 2184. DOI: [10.1088/0022-3727/26/12/015](https://doi.org/10.1088/0022-3727/26/12/015).
- [193] T. Cserfalvi & P. Mezei. „Subnanogram sensitive multimetal detector with atmospheric electrolyte cathode glow discharge”. In: *Journal of Analytical Atomic Spectrometry* 18.6 (2003), pp. 596–602. DOI: [10.1039/b300544p](https://doi.org/10.1039/b300544p).
- [194] J. F. Ziegler. *Ion Implantation Science and Technology*. Elsevier, 2012.
- [195] A. Anders et al. *Handbook of Plasma Immersion Ion Implantation and Deposition*. Vol. 8. Wiley New York, 2000.
- [196] S. M. Thagard, M. Sankaran, & M. J. Kushner. „Science Challenges in Low Temperature Plasma Science and Engineering: Enabling a Future Based on Electricity through Non-Equilibrium Plasma Chemistry”. In: *arXiv preprint arXiv:1911.07076* (2019). DOI: [10.48550/arxiv.1911.07076](https://doi.org/10.48550/arxiv.1911.07076).

-
- [197] C. Charles. „Grand challenges in low-temperature plasma physics”. In: *Frontiers in Physics* 2 (2014), p. 39. DOI: [10.3389/fphy.2014.00039](https://doi.org/10.3389/fphy.2014.00039).
- [198] L. A. Alves & A. von Keudell. *Foundations of low temperature plasmas and their applications*.
https://iopscience.iop.org/collections/0963-0252_focus_issue_Foundations-of-low-temperature-plasmas-and-their-applications (utolsó elérés: 2025-03-27).
- [199] I. Adamovich et al. „The 2022 Plasma Roadmap: low temperature plasma science and technology”. In: *Journal of Physics. D, Applied Physics* 55.37 (2022), p. 373001. DOI: [10.1088/1361-6463/ac5e1c](https://doi.org/10.1088/1361-6463/ac5e1c).

Az alacsony hőmérsékletű plazmák jellemzően elektromosan töltött és semleges részecskék ütközéseinek következtében előálló, gyengén ionizált, gázfázisú rendszerek („gázkisülések”), melyek akár szobahőmérsékleten is létrejöhetnek. Keletkezésükben termikus effektusok általában nem játszanak szerepet - innen ered az „alacsony hőmérsékletű” kategorizálás. A könyv tematikája felöleli a töltött részecskék (elektronok és ionok) elemi ütközési folyamatainak és transzportjának tárgyalását, a gázkisülések fizikai alapjelenségeinek jellemzését, a gázkisülések diagnosztikájának, modern modellezési módszereinek és egyes alkalmazásainak bemutatását, valamint bevezetést ad a poros plazmák fizikájába.

Kapcsolat

HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont
1121 Budapest, Konkoly-Thege Miklós út 29-33.

E-mail: lib@wigner.hun-ren.hu
Website: pubs.wigner.hun-ren.hu

További kiadványainkat
keresse itt: ↓

