



**ISIL OLMAYAN SOĞUK PLAZMALARDAKİ
OPTİK ÖZELLİKLERİN İNCELENMESİNDE
TEORİK MODELLER**

Doktora Tezi

Sercan MERTADAM

Eskişehir 2023

**ISIL OLMAYAN SOĞUK PLAZMALARDAKİ OPTİK ÖZELLİKLERİN
İNCELENMESİNDE TEORİK MODELLER**

Sercan MERTADAM

DOKTORA TEZİ

Matematiksel Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Murat TANIŞLI

Eskişehir

Eskişehir Teknik Üniversitesi

Lisansüstü Eğitim Enstitüsü

Ocak 2023

Bu tez çalışması BAP Komisyonu tarafından kabul edilen 20DRP001 no.lu proje kapsamında desteklenmiştir

JÜRİ VE ENSTİTÜ ONAYI

Sercan Mertadam'ın, Isıl Olmayan Soğuk Plazmalardaki Optik Özelliklerin İncelenmesinde Teorik Modeller başlıklı çalışması 11/01/2023 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından değerlendirilerek “Eskişehir Teknik Üniversitesi Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Sınav Yönetmeliği”nin ilgili maddeleri uyarınca, Fizik Anabilim dalında Doktora Tezi olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri	Unvan Adı Soyadı	İmza
Üye	Prof. Dr. Barış ERBAŞ	
Üye	Prof. Dr. Suat PAT	
Üye	Doç. Dr. Neslihan ŞAHİN	
Üye	Doç. Dr. Mustafa KULAKCI	
Üye	Dr. Öğr. Üyesi Erkan İLİK	

Prof. Dr. Murat TANIŞLI
Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Müdürü

11/01/2023

DANIřMAN ONAYI

Daniřmanlıđını yrttđm Sercan MERTADAM đrencisi Isıl Olmayan Sođuk Plazmalardaki Optik zelliklerin İncelenmesinde Teorik Modeller bařlıklı tez alıřmasını tamamlamıřtır. Hazırlamıř olduđu tez tarafımca incelenmiř ve đrencinin tez savunma sınavına alınması bilimsel ve etik aıdan uygun grlmřtr.

Tez Daniřmanı

Prof. Dr. Murat TANIřLI

ÖZET

ISIL OLMAYAN SOĞUK PLAZMALARDAKİ OPTİK ÖZELLİKLERİN İNCELENMESİNDE TEORİK MODELLER

Sercan MERTADAM

Fizik Anabilim Dalı

Matematiksel Fizik Bilim Dalı

Eskişehir Teknik Üniversitesi, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, Ocak 2023

Danışman: Prof. Dr. Murat TANIŞLI

Isıl olmayan soğuk plazmalar için farklı karakterizasyon yöntemleri mevcuttur. Bu yöntemler arasında en yoğun kullanılan optik emisyon spektrumu ve Langmuir probudur. Bununla beraber, elde edilen verilerin de dahil edilebileceği şekilde matematiksel modeller de plazma karakterizasyonunda yoğun olarak kullanılmaktadır. Bu tez çalışmasında, argon gazına ait düşük basınç RF deşarjı oluşturularak, deşarj sonrası bölgeden optik emisyon spektrumu ve Langmuir probu verileri toplanmıştır. Deşarj sonrası bölge, elektrik ve manyetik alandan nispeten daha uzak ancak post-deşarj bölgesi sayılmayacak noktada olduğundan bu bölge mekaniksel zorlamalı deşarj bölgesi olarak adlandırılmıştır. Elde edilen veriler, Monte Carlo simülasyon yöntemine dayalı hücredeki parçacık yönteminde kullanılmıştır. Bu sayede plazma ortamındaki parçacık hareketi örneklenmiştir. OPSIAL isimli yazılım kullanılarak elde edilen optik emisyon spektrumlarından elektron sıcaklığı ve elektron yoğunluğu değerleri hesaplanmıştır. Optik emisyon spektrumunda yer alan göreceli şiddet değerleri kullanılarak dallanma kesri değerleri hesaplanmıştır. Çalışma sonucunda, mevcut hücredeki parçacık yönteminin mekaniksel zorlamalı deşarj bölgesinde uygulanabilir olduğu, dallanma kesri hesaplamalarında hızlı bir hesaplama olan göreceli şiddetler ile yapılan denklemin kullanılabilir olduğu görülmüştür. Böylece bu yöntemlerin, benzer deşarj ortamlarında kullanılabileceği gösterilmiştir.

Anahtar Sözcükler: Soğuk plazmalar, Plazma optik emisyon spektroskopisi, Dallanma kesri, Langmuir probu, Mekaniksel zorlamalı deşarj

ABSTRACT

Theoretical Models in Investigation of Optical Properties of Non-thermal Cold Plasmas

Sercan MERTADAM

Department of Physics

Programme in Mathematical Physics

Eskişehir Technical University, Institute of Graduate Programs, January 2023

Supervisor: Prof. Dr. Murat TANIŞLI

Different characterization methods are available for non-thermal cold plasmas. Among these methods, the most used are optical emission spectrum and Langmuir probe. However, mathematical models are also used extensively in plasma characterization, in which the obtained data can be included. In this thesis, optical emission spectrum and Langmuir probe data were collected from the post-discharge region by creating a low-pressure RF discharge of argon gas. Since the post-discharge region is relatively far from the electric and magnetic fields, but at a point where the post-discharge region cannot be counted, this region is named as the mechanical forced discharge region. The obtained data were used in the particle-in-cell method based on the Monte Carlo simulation method. In this way, particle motion in the plasma environment was sampled. Electron temperature and electron density values were calculated from the optical emission spectra obtained using the software named OPSIAL. The branching fraction values were calculated by using the relative intensity values in the optical emission spectrum. As a result of the study, it was seen that the particle method in the current cell is applicable in the mechanically forced discharge region, and the equation made with relative intensities, which is a quick calculation in branching fraction calculations, can be used. Thus, it has been shown that these methods can be used in similar discharge environments.

Keywords: Cold plasmas, Plasma optical emission spectroscopy, Branching fraction, Langmuir probe, Mechanically forced discharge

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışması boyunca, akademik süreçler başta olmak üzere desteklerini esirgemeyen danışmanım Prof. Dr. Murat Tanışlı'ya ve değerli hocam Doç. Dr. Neslihan Şahin'e, tez çalışması süresince önerileri ve yol gösterici yorumlarıyla çalışmanın ilerlemesine büyük katkı sağlayan değerli hocalarım Prof. Dr. Suat Pat'a ve Prof. Dr. Barış Erbaş'a, simülasyon çalışmalarındaki yoğun destekleri nedeniyle değerli büyüğüm ve mesai arkadaşım Serdar Murat Demirel'e, bilgilerini aktarmak konusunda hiçbir tereddütte bulunmayan kıymetli arkadaşım Mehmet Çetintaş'a, çalışmalarımın ilk anından itibaren özellikle manevi desteklerini esirgemeyen eşim Büşra Avcı Mertadam'a, anneme, abime ve tüm aileme ayrı ayrı teşekkürlerimi sunarım.

Sercan MERTADAM

ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ

Bu tezin bana ait, özgün bir çalışma olduğunu; çalışmamın hazırlık, veri toplama, analiz ve bilgilerin sunumu olmak üzere tüm aşamalarında bilimsel etik ve kurallara uygun davrandığımı; bu çalışma kapsamında elde edilen tüm veri ve bilgiler için kaynak gösterdiğimi ve bu kaynaklara kaynakçada yer verdiğimi; bu çalışmanın Eskişehir Teknik Üniversitesi tarafından kullanılan “bilimsel intihal tespit programı”yla tarandığını ve hiçbir şekilde “intihal içermediğini” beyan ederim. Herhangi bir zamanda, çalışmamla ilgili yaptığım bu beyana aykırı bir durumun saptanması durumunda, ortaya çıkacak tüm ahlaki ve hukuki sonuçları kabul ettiğimi bildiririm.

Sercan MERTADAM

İÇİNDEKİLER

BAŞLIK SAYFASI	i
JÜRİ VE ENSTİTÜ ONAYI.....	ii
DANIŞMAN ONAYI	iii
ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR	vi
ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ.....	vii
İÇİNDEKİLER	viii
TABLolar DİZİNİ.....	xi
ŞEKİLLER DİZİNİ	xii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	xiv
1. GİRİŞ.....	1
2. MONTE CARLO YÖNTEMİNİN ARAŞTIRILMASI.....	3
2.1. Olasılık Teorisinin Bileşenleri.....	3
2.2. Monte Carlo Yöntemine Giriş.....	4
2.3. Bir Monte Carlo Simülasyonunda Hata Yaklaşımı	6
2.4. Verilen Olasılık Dağılım Fonksiyonunun Simülasyona Yerleştirilmesi.....	6
3. MONTE CARLO SİMÜLASYONU İÇİN İLK DENEMELER.....	8
3.1. Pi Sayısının Tahmininde Monte Carlo Yaklaşımı.....	8
3.2. Radyasyon Transferi için Monte Carlo Yaklaşımı	11
4. MONTE CARLO SİMÜLASYON DENEMELERİ	15
4.1. Saf Monte Carlo Metodu	15
5. PLAZMA UYGULAMALARINDA ÖZELLEŞMİŞ YÖNTEMLER.....	17
5.1. Particle In Cell (PIC – Hücredeki Parçacık) Yöntemi	17
5.1.1. PIC yönteminin algoritması.....	17
6. PIC KODLARIYLA ÖRNEK ÇALIŞMA	23
6.1. PIC Kodlarıyla Oksijen Molekülü için Denemeler	23
7. DENEY SİSTEMİ	29
7.1. Optik Emisyon Spektroskopisi.....	30
7.2. Langmuir Probu.....	32
7.3. RF Güç Kaynağı.....	35
7.4. Plazmalarda Post-Deşarj Bölgesi.....	36
8. DENEYSEL SONUÇLAR	37

8.1.	OES ile Yapılan Çalışmaların Sonuçları.....	37
8.2.	OES Dallanma Kesri.....	42
8.3.	Langmuir Probu Ölçümleri	50
8.4.	Farklı Tasarlanan Sistem ile İlave Ölçümler.....	53
9.	SİMÜLASYON ÇALIŞMALARI	58
9.1.	Simülasyon Çalışmasının Hazırlığı.....	58
9.2.	PIC Kodlarının Anlaşılması ve Matematiksel Temeli	58
9.3.	Doğrudan Yaklaşım Yöntemi.....	59
9.4.	Boltzmann Denklemi.....	60
9.5.	Maxwell-Boltzmann Dağılım Fonksiyonu.....	61
9.6.	Akışkan ve Kinetik Yöntem	62
9.7.	Lagranjiyen ve Euler Açıklamaları.....	63
9.8.	Akışkan ve Kinetik Yaklaşımların Karşılaştırılması.....	63
9.9.	Elektrostatik Hücredeki Parçacık Yöntemi.....	64
9.10.	Lorentz Kuvveti	64
9.11.	Tek Parçacık Hareketi	65
9.12.	Etki Alanı Belirleme	65
9.13.	Potansiyel Çözümleyici	65
9.14.	Üç Köşeli Algoritma	67
9.15.	Jacobi İterasyonu.....	67
9.16.	Elektrik Alan.....	68
9.17.	Leapfrog (Birdirbir) Yöntemi	70
10.	ÇERÇEVELENMİŞ KUTU.....	71
10.1.	Simülasyon Kurulumu	71
10.2.	Dünya Oluşturma	71
10.3.	Tanımlar	73
10.4.	Uygulama.....	73
10.5.	Düğüm Çözünürlüğü.....	73
10.6.	Potansiyel Çözümleyici	74
10.7.	Elektrik Alan.....	74
10.8.	Parçacıklar	75
10.9.	Zaman Adımları	75
11.	KODLARIN ÇALIŞTIRILMASI	77
12.	SİMÜLASYONUN GERÇEK VERİLER İLE ÇALIŞTIRILMASI	80

12.1. OES Verilerinin Simülasyon Çalışmasında Kullanılması	86
13. YAZILIMIN UYGULAMASI	91
14. SONUÇ VE DEĞERLENDİRME.....	92
KAYNAKÇA.....	97



TABLolar/ÇİZELGELER DİZİNİ

Sayfa

Tablo 3.1. 2000 parçacık sayısı ve $r = 0,05$ m için farklı denemelerde elde edilen değerler.....	13
Tablo 3.2. 1000 parçacık sayısı ve $r = 0,05$ m için farklı denemelerde elde edilen değerler.....	13
Tablo 3.3. 2000 parçacık sayısı ve $r = 0,10$ m için farklı denemelerde elde edilen değerler.....	14
Tablo 3.4. 1000 parçacık sayısı ve $r = 0,10$ m için farklı denemelerde elde edilen değerler.....	14
Tablo 7.1. Tipik laboratuvar plazması için ideal Langmuir probu tasarımında plazma parametreleri.....	34
Tablo 8.1. Argonun yapısına ait Paschen gösterimi.....	37
Tablo 8.2. 60W RF güç değerinde, mekaniksel zorlamalı elde edilen argon deşarj bölgesi için farklı gaz akış oranlarında, hesaplanan ve ölçülen dallanma kesir değerleri.....	44
Tablo 8.3. Mekaniksel zorlamalı deşarj bölgesinden alınan Langmuir probu ölçümlerine göre sabit akışta (0,06 l/dk) RF güç değerine göre elektron yoğunluğunun değişimi.	50
Tablo 8.4. Mekaniksel zorlamalı deşarj bölgesinden alınan Langmuir probu ölçümlerine göre sabit akışta (0,06 l/dk) RF güç değerine göre elektron sıcaklığı değişimi.	50
Tablo 8.5. Farklı gaz akış oranları ve farklı RF güç değerleri için ölçülen basınç değerlerinin değişimi.....	51
Tablo 8.6. Yenilenen sistemde ölçülen basınç değerleri.....	54
Tablo 8.7. Farklı tasarlanan deşarj odasından alınan OES verileri ile NIST veri tabanından alınan verilerin karşılaştırılması.	57
Tablo 12.1. Simülasyonda kullanılan ve daha önceki deneysel çalışmalardan elde edilen Langmuir verileri.....	80
Tablo 13.1. OPSIAL yazılımından alınan sonuçlar ile Langmuir probundan alınan verilerin karşılaştırılması.....	91

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 3.1. Monte Carlo simülasyonunda yaklaşık π değerinin kodları ve 10 nokta için yaklaşık π değerinin hesaplaması.	8
Şekil 3.2. Monte Carlo simülasyonunda 10 nokta için yaklaşık π değerinin hesaplanmasında çizilen grafik.	9
Şekil 3.3. Monte Carlo simülasyonunda, sırasıyla 100, 10000, 100000 ve 1000000 nokta için yaklaşık π değerinin hesaplanmasında çizilen grafikler.	10
Şekil 3.4. (a) Monte Carlo simülasyon tekniği ile hesaplanan yaklaşık π değerinin kullanılan nokta sayısına bağlı değişimi ve (b) 10000 nokta ile 1000000 nokta grafiğine yakından bakış.	11
Şekil 3.5. 2000 parçacık sayısı için $r=0,05$ m (a) ve $r=0,10$ m (b) çapının içinde ve dışında kalan parçacıkların dağılım grafiği.	12
Şekil 3.6 1000 parçacık sayısı için $r=0,05$ m (a) ve $r=0,10$ m (b) çapının içinde ve dışında kalan parçacıkların dağılım grafiği.	13
Şekil 5.1. Elektrostatik PIC yöntemi için başlangıç durumunu temsil eden görsel [31].	18
Şekil 5.2. Elektrostatik PIC yöntemi için düğüm noktalarını gösteren temsili görsel [32].	18
Şekil 5.3. PIC kodunda kombine sınır koşullarına bir örnek [32].	20
Şekil 5.4. Leapfrog yönteminin şematik gösterimi [32].	21
Şekil 6.1. Oksijen molekülü için her 25 adımda yoğunluk dağılım grafiği.	23
Şekil 6.2. Oksijen molekülü için her 25 adımda elektriksel potansiyel dağılım grafiği.	24
Şekil 6.3. Oksijen molekülüne ait yapılan denemelerde adım sayısına göre parçacık sayını gösteren grafik.	24
Şekil 6.4. Argon gazına ait her 25 adımda yoğunluk dağılım grafiği.	25
Şekil 6.5. Argon gazı için her 25 adımda elektriksel potansiyel dağılım grafiği.	25
Şekil 6.6. Argon gazına ait yapılan denemelerde adım sayısına göre parçacık sayını gösteren grafik.	26
Şekil 6.7. Oksijen molekülüne ait deşarj için 300. adımda yoğunluk ve elektriksel potansiyel grafikleri.	27
Şekil 6.8. Argon atomuna ait deşarj için 300. adımda yoğunluk ve elektriksel potansiyel grafikleri.	27
Şekil 6.9. Sırasıyla argon atomu ve oksijen molekülüne ait deşarjların 500. adımda yoğunluk grafikleri.	27
Şekil 7.1. Düşük basınç deşarj sistemine ait şematik gösterim.	29
Şekil 7.2. İdeal I-V eğrisi soldaki eğri, belirgin olabilmesi açısından 10 kat büyütülmüştür.	32
Şekil 7.3. Langmuir probunun (çift prob) uç gösterimi [Impedans Langmuir Probu]. ..	33
Şekil 7.4. Langmuir prob ucunun şematik gösterimi [Impedans Langmuir Probu].	33
Şekil 7.5. Tablo 7.1’de verileri paylaşılan, ideal Langmuir probu akım-voltaj karakteristiği [39].	34
Şekil 8.1. Argon deşarjının vakum bölgesinden, sırasıyla 0,01; 0,02; 0,03; 0,04; 0,05 ve 0,06 l/dk gaz akış oranları için alınan OES grafikleri.	39
Şekil 8.2. Argona ait enerji geçiş diyagramı.	42
Şekil 8.3. 60W sabit RF giriş gücünde, gaz akış oranına karşılık dallanma kesrinin değişimini gösteren grafik.	45

Şekil 8.4. 60 W sabit RF güç değerinde, değişen gaz akış oranlarına göre dallanma kesrinin değişimi.	46
Şekil 8.5. Vakuma yakın bölgeden yatay kol boyunca OES alınan noktalar.	46
Şekil 8.6. Vakum bölgesi yakınında, 0,06 l/dk sabit gaz akış oranında, sırasıyla; 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, 55, 60 ve 65 W RF güç değerleri için kol boyunca alınan OES verileri.	47
Şekil 8.7. Argon deşarjına ait farklı gaz akış oranlarında RF giriş gücüne göre değişen ölçülen basınç grafiği.	52
Şekil 8.8. Argon deşarjına ait RF giriş gücüyle değişen elektron yoğunluğu grafiği.	52
Şekil 8.9. Argon deşarjına ait RF giriş gücüyle değişen elektron sıcaklığı grafiği.	53
Şekil 8.10. Yenilenen deşarj odasına ait görsel.	53
Şekil 8.11. Balon bölgesinden alınan argon deşarjına ait farklı gaz akış oranlarındaki OES grafikleri.	54
Şekil 8.12. Balon bölgesinde argon deşarjının görüntüsü.	56
Şekil 8.13. Balon bölgesinin hemen öncesinden alınan OES verilerine ait grafik.	56
Şekil 9.1. Hız dağılım fonksiyonunu gösteren yüzey için örnek [66].	60
Şekil 9.2. Hız dağılım fonksiyonu için her 3 yaklaşımın birbirleri ile karşılaştırılmasına ait grafik. Burada çizgi analitik fonksiyonu, histogram ayırık hızları, çemberler ise rastgele örnekleri temsil eder.	63
Şekil 9.3. 7 düğümlü ve Dirichlet sınır koşullarına sahip bir ağ için tek boyutlu Poisson denklem katsayı matrisi.	66
Şekil 10.1. Kartezyen örgü.	72
Şekil 11.1. $t=0$ anında hücre içinde plazma ve elektron yoğunluğu $n_{maksimum}=10^{11} \text{ m}^{-3}$	77
Şekil 11.2. $t=5\text{s}$ anında hücre içinde plazma ve elektron yoğunluğu $n_{maksimum}=10^{11} \text{ m}^{-3}$	77
Şekil 11.3. $t=10\text{s}$ anında hücre içinde plazma ve elektron yoğunluğu $n_{maksimum}=10^{11} \text{ m}^{-3}$	78
Şekil 11.4. $t=20\text{s}$ anında hücre içinde plazma ve elektron yoğunluğu $n_{maksimum}=10^{11} \text{ m}^{-3}$	78
Şekil 11.5. $t=25\text{s}$ anında hücre içinde plazma ve elektron yoğunluğu $n_{maksimum}=10^{11} \text{ m}^{-3}$	79
Şekil 11.6. $t=30\text{s}$ anında hücre içinde plazma ve elektron yoğunluğu $n_{maksimum}=10^{11} \text{ m}^{-3}$	79
Şekil 12.1. Langmuir probundan alınan veriler doğrultusunda çalıştırılan simülasyona ait görseller $n_{maksimum}=10^{13} \text{ m}^{-3}$	80
Şekil 12.2. Farklı tasarlanan deney sistemi için çalıştırılan simülasyona ait görseller, $n_{maksimum}=10^{11} \text{ m}^{-3}$	85
Şekil 12.3. OPSIAL yazılımına ait plazma özelliklerinin alınmasını sağlayan algoritmanın akış şeması. Dikdörtgen içinde gösterilenler aksiyonları ve paralelkenarlar veri nesnelerinin temsil etmektedir.	89

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

PIC	: Particle in Cell
OES	: Optik Emisyon Spektroskopisi
MSE	: Mean Squared Error
RMS	: Root Mean Square
LTE	: Local Thermodynamic Equilibrium
RF	: Radyo Frekans
EEDF	: Elektron Enerji Dağılım Fonksiyonu
NIST	: National Institute of Standards and Technology
λ_a	: Absorblanan termal nötronlar için serbest yol
λ_s	: Saçılan termal nötronlar için serbest yol
λ_t	: Toplam ortalama serbest yol
ϕ	: elektriksel potansiyel
k_B	: Boltzmann Sabiti
L	: Litre
Dk	: Dakika
H	: Planck Sabiti/pi sayısı
ε	: eV cinsinden elektron enerjisi
Γ_{ij}	: Dallanma Kesri
A_{ij}	: Einstein Katsayısı

1. GİRİŞ

Isıl olmayan soğuk plazmalar, endüstrinin çok çeşitli alanlarında yoğun olarak kullanılmaktadır. Malzeme işleme süreçlerinde, son dönemde artan bir ivmeyle kendisine yer bulan ısıl olmayan soğuk plazmalar, çeşitli gaz deşarjlarıyla elde edilebilmektedir. Isıl olmayan soğuk plazmalar, özellikle gelişen yarı iletken teknolojisinde öne çıkmaktadır. Gelişmiş kimyasal buhar birikimi (CVD), fiziksel buhar birikimi (PVD), püskürtme ve aşındırma yöntemleri özellikle endüstride çok çeşitli kullanım alanlarına sahiptir [1, 2, 3]. Plazma uygulamaları çok gelişmiş olsa da elde edilen deşarjın, fiziksel ve kimyasal özelliklerinin incelenmesinden öte yapılan çalışmalar deneysel tecrübelerle sınırlı kalmaktadır. Bu noktada, deşarj ile yüzey arasındaki etkileşimlerin fiziksel ve kimyasal açıdan incelenmesi, süreçlerin anlaşılmasında ve uygulamalarda yüksek oranda kontrolün sağlanmasında büyük önem taşımaktadır. Bu sayede, plazma uygulamalarında verimlilik artırılabilir ve farklı uygulama alanları keşfedilebilecektir.

Isıl olmayan soğuk plazmalarla yapılan uygulamaların temelinde, uyarılmış parçacıkların kinetiği yatmaktadır. Uyarılmış parçacıkların kinetiği hakkında yapılan çalışmalar ise deşarjın ışıma ve kimyasal özelliklerinin anlaşılmasında ve geliştirilmesinde faydalı olmaktadır [1, 2, 4, 5, 6, 7]. Deşarj içinde yer alan yarı-kararlı atomlar, uzun yaşam ömürleri ve yüksek enerjileri sayesinde deşarj karakteristiğinin anlaşılmasında önemli bir yere sahiptir. Ayrıca, yarı-kararlı atomların enerjilerinin, deşarj içerisinde, çarpışma süreçleri aracılığıyla iletildiği bilinmektedir [8].

Yukarıda sözü edilen tüm bu sebeplerle, yarı-kararlı atomların karakterizasyonu, temel bir gereklilik olarak öne çıkmaktadır. Plazma karakterizasyonu, son dönemde hızlı ve güvenilir sonuçlar veren Langmuir probu ile yapılabilmektedir. Bununla beraber, Langmuir probunun, metal etkileşimlerinden dolayı kullanılamadığı mikrodalga (MW) deşarjlar gibi sistemler de mevcuttur. Bu tür durumlarda ise daha uzun süredir kullanılan optik emisyon spektroskopisi (OES) tercih edilmektedir. OES, Langmuir probuna göre daha ucuz ve daha kolay bir yöntem olmasına karşın, yalnızca temel durumdan yüksek enerji seviyesindeki parçacıkların tespit edilmesiyle kullanışlı hale gelmektedir [8]. Farklı çalışmalarda, ısıl olmayan soğuk argon deşarjı için farklı basınç değerlerinde fiziksel ve kimyasal süreçler için incelemeler yapılmıştır [9, 10, 11, 12, 13].

Literatürde, elektron sıcaklığı, elektron yoğunluğu ve uyarılmış atom yoğunlukları gibi plazma parametrelerinin kullanıldığı birçok çalışma bulunmaktadır. Lazer soğurma spektroskopisi [9, 14] veya lazer-indüklenmiş flüoresans yöntemleri [10], düşük sıcaklık

plazmalarda, yarı-kararlı ve rezonans seviye yoğunluklarının incelenmesinde yoğun şekilde kullanılmaktadır.

Deneysel çalışmaların yanı sıra, gaz deşarjlarının incelenmesinde daha düşük maliyetler sunan ve müdahale edilmesi daha kolay olan simülasyon yöntemleri de yoğun olarak kullanılmaktadır. Bu simülasyon yöntemleri genellikle, akışkanların incelenmesinde kullanılan yöntemler olmakla beraber, temelinde dağılım fonksiyonlarının kullanıldığı genel simülasyon tekniklerinin uyarlamaları da bulunmaktadır. Örneğin Monte Carlo yöntemi, çok farklı hesaplamalar için kullanılmakla beraber, plazma simülasyonlarında kullanılmak üzere özelleşmiş versiyonları tercih edilmektedir.

Bu tez çalışmasında, farklı simülasyon yöntemleri araştırılarak tekniğin detayları anlaşılmaya çalışılmıştır. Elde edilen bilgiler doğrultusunda, Monte Carlo yöntemiyle beraber hücredeki parçacık (particle in cell – PIC) yöntemi kullanılarak temel plazma simülasyonları gerçekleştirilmiştir. Deneysel çalışmalarda, optik emisyon spektroskopisi yöntemi ve Langmuir probu kullanılarak düşük basınç argon plazmasının karakteristik özellikleri tespit edilmiştir. Elde edilen veriler kullanılarak, plazmanın karakteristiğine ait temel parametrelerden olan elektron yoğunluğu ve elektron sıcaklığı verileri hesaplanmıştır. Deneysel veriler kullanılarak, plazmadaki parçacıkların yarı ömürleri hakkında bilgi veren dallanma kesri hesaplamaları da yapılarak, nümerik yöntemler vasıtasıyla düşük basınç argon plazmasının karakteristiğinin belirlenmesi sağlanmıştır.

2. MONTE CARLO YÖNTEMİNİN ARAŞTIRILMASI

Monte Carlo metodu, bir çeşit simülasyon tekniği olarak özetlenebilir. Bu teknik ile birçok deneysel çalışmanın ve araştırmanın iş yükü hafifletilebileceği gibi henüz gerçekleşmemiş olaylar hakkında da önceden fikir sahibi olunabilir.

Monte Carlo yöntemi nümerik bir yöntemdir ve olasılıklara dayanır. Belirli bir olay ya da sürecin tanımlanmasıyla başlar. Olayın matematiksel sistemi, her durum için özeldir. Fiziksel bir problemin çözümünde kullanılacak denklem veya denklemler belirlenir. Denklem veya denklemlerin sahip olduğu değişkenlerin hangi aralık ve hangi olasılıklarda bulunabileceği ile ilgili değerler belirlenir ya da belirli bir aralıkta rastgele tanımlanır.

Monte Carlo yönteminin temeli, olasılık hesaplarının integral çözümüne dayanır. Rastgele olayların geniş bir aralıkta ele alınmasıyla ihtimallerin ortaya çıkarılması sağlanır [15].

Özetle Monte Carlo simülasyon yönteminde temel, olasılık teorisidir. Böylece tespit edilmesi ya da öngörülmesi zor ve zahmetli olan ihtimaller ile özellikle parçacık hareketleri hakkında kolaylıkla bilgi sahibi olunabilir.

2.1. Olasılık Teorisinin Bileşenleri

Monte Carlo simülasyonun temeli rastsal sayılar ve rastsal değişkenlerin kullanımına dayanır. Bir rastgele değişken, tekrarlanabilir bir süreçten elde edilen ve gerçek değeri tam bir kesinlikle elde edilemeyen bir niceliktir. Parçacık hareketleri gözlenmek istendiğinde, gerçekte rastsallık hem kontrol edilemeyen etkilere hem de mikroskobik sistemlerin ve süreçlerin kuantum doğasına bağlıdır. Benzer bir örnek olarak, bir kutuda bulunan iki farklı zar atıldığı varsayalım. Zarların üst yüzlerine gelen sayıların değerleri ayrık iki rastgele değişkendir ve toplamda 2 ile 12 arasında değerler alır. Burada, zarların arasındaki mesafe x sürekli bir değişkendir ve en az zarların birbirlerine boşluksuz temas ettiği mesafe 0 ile en fazla kutunun boyutu arasındadır. Bilgisayarda yapılan hesaplamada, rastgele değişkenler, rastgele sayıların numerik dönüşümünün ortalaması ile oluşturulur [16].

x değerini, $x_{min} \leq x \leq x_{max}$ aralığında değerler alan, bir sürekli rastgele değişken olarak kabul edilsin. $a - b$ aralığında elde edilen x değerinin olasılığını ölçmek için $P\{x | a < x < b\}$ olasılık denklemi kullanılır. Burada, belirtilen aralığa denk gelen x değerlerinin sayısı n 'in oluşturulan tüm x değerlerinin toplam sayısı N 'e oranı n/N ile

verilir ve $\lim N \rightarrow \infty$ şartıyla ele alınır. Uzunluğun diferansiyel aralığı dx üzerinde, elde edilen x' in olasılığı x_1 Denklem 2.1'deki şekilde verilebilir.

$$P\{x | x_1 < x < x_1 + dx\} = p(x_1)dx \quad (2.1)$$

Burada $p(x_1)$, x' e ait olasılık dağılım fonksiyonudur. Negatif olasılık fiziksel olarak anlamsızdır ve elde edilen değer (x_{min}, x_{max}) aralığında bir yerde olmalıdır. Ayrıca olasılık yoğunluk fonksiyonu kesinlikle pozitif ve normalize edilmiş olmalıdır. Bu iki şartı sağlayan bir fonksiyon olasılık yoğunluk fonksiyonu olarak yorumlanabilir. Monte Carlo simülasyonunda sıklıkla, süreksiz ve düzenli (uniform) bir dağılım kullanılır.

$$U_{x_{min}, x_{max}}(x) \equiv \begin{cases} 1/(x_{max} - x_{min}); & \text{eğer } x_{min} \leq x \leq x_{max} \\ 0; & \text{diğer durumlar} \end{cases} \quad (2.2)$$

Verilen bir sürekli rastgele değişken x için toplam dağılım fonksiyonu Denklem 2.3'teki gibi tanımlanır.

$$P(x) \equiv \int_{x_{min}}^x p(x')dx' \quad (2.3)$$

Bu fonksiyon, $P(x_{min}) = 0$ ile $P(x_{max}) = 1$ aralığında, x' in azalmayan bir fonksiyonudur.

2.2. Monte Carlo Yöntemine Giriş

Bir Monte Carlo algoritması, bir integralin değeri olan a gerçek sayısı yaklaşımla açıklanabilir. Bunun için X gibi gerçek bir değere sahip rastgele değişkene ihtiyaç duyulur.

$$E(X) = a \quad (2.4)$$

Daha sonra $E(X)$ 'e yaklaşan ve X dağılımında bağımsız rastgele değişkenler dizisi $(X_i)_i$ varsayılır.

$$M_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i \quad (2.5)$$

Burada N ; örnek sayısı, M ortalama değeri ve X_i bağımsız rastgele değişkeni göstermektedir. Bu sistemin yararlı olabilmesi için öncelikle, belirlenen rastgele değişken X 'in beklenen değerinin çözümünde problemin yeniden tanımlanmasına ihtiyaç vardır. Burada X gibi dağıtılan bağımsız değişkenler belirlenebilir olmalıdır. Son olarak, belirli durumlar altında kesin bir değer için tanımlanan yaklaşımın kontrol edilmesi gereklidir [15].

Örnekleme ortalaması, istatistikte *tahmin edici* olarak isimlendirilen bir örnektir. Bu terim, bazı istatistiksel nicelikleri hesaplamada kullanılan bir kuralı tanımlar. Tahmin edici, rastgele değişkenin bir fonksiyonudur ve burada örnek veriden gelen beklenen değeri tanımlar [15].

Tahmin edicinin beklenen değeri ile istatistiksel niceliğin arasındaki fark bias olarak tanımlanır. Bu fark eğer sıfır ise tahmin edici biaslanmamış anlamına gelir [15].

Denklem 2.5'te verilen ortalama örneğin bias değeri E , hesaplanabilir.

$$E(M_N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E(X_i) = E(X) \quad (2.6)$$

Denklem 2.6'dan görülebileceği gibi bias sıfır (0) değerine eşit olur ve buradaki örnek biaslanmamıştır.

Örnek sayısının $N \geq 2$ şartını sağladığı varsayalım. Bu şartlarda biaslanmamış bir varyansın tahmin edicisi Denklem 2.7'de örnek sayısına göre varyans V_N verilmiştir.

$$V_N = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (X_i - M_N)^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left(X_i - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i \right)^2 \quad (2.7)$$

Beklenen değer V_N hesaplanmak istenirse, $a = E(X_i)$ tanımıyla, $i = 1, \dots, N$ aralığında Denklem 2.8 elde edilir.

$$V_N = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N ((X_i - a) + (a - M_N))^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (X_i - a)^2 - \frac{N}{N-1} (M_N - a)^2 \quad (2.8)$$

Burada $2 \sum_{i=1}^N (X_i - a)(a - M_N) = -2N(M_N - a)^2$ olarak alındığında Denklem 2.8, Denklem 2.9'daki şekle dönüşür.

$$E(V_N) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N E((X_i - a)^2) - \frac{N}{N-1} E((M_N - a)^2) = \frac{N}{N-1} \sum_{i=1}^N V(X_i) - \frac{N}{N-1} V(M_N) \quad (2.9)$$

Chebyshev – Bienayme teoreminden dolayı denklem düzenlendiğinde Denklem 2.10 elde edilecektir.

$$N^2 V(M_N) = V(\sum_{i=1}^N X_i) = \sum_{i=1}^N V(X_i) = NV(X) \quad (2.10)$$

$$E(V_N) = \frac{N}{N-1} V(X) - \frac{1}{N-1} V(X) = V(X) \quad (2.11)$$

Chebyshev – Bienayme teoremine göre olasılık teorisinde, geniş çaplı bir olasılık dağılımında, belli bir değer kesrinden daha fazlası, ortalamadan belirli bir mesafeden daha fazla olamaz.

2.3. Bir Monte Carlo Simülasyonunda Hata Yaklaşımı

Genel bir yolla, tahmin edicinin ortalama kare hatası (Mean Squared Error –MSE) değerinin hesaplaması yapılabilir. Karekök ortalama hata değeri Denklem 2.12’deki gibi tanımlanır.

$$MSE(\hat{\theta}) = E((\hat{\theta} - \theta)^2) = \int ((\hat{\theta} - \theta)^2) dP \quad (2.12)$$

$\hat{\theta}$ ’nın, rastgele değişken X ’in bir fonksiyonu olarak hesaplanabilecek bir gerçek sayı olan istatistiksel nicelik θ için bir tahmin edici olduğu varsayılabilir.

Teorem 1: Rastgele değişken $\hat{\theta}$, θ ve $E(\hat{\theta}^2) < +\infty$ için bir tahmin edici olsun.

Böylece:

$$MSE(\hat{\theta}) = E((\hat{\theta} - \theta)^2) = V(\hat{\theta}) + Bias(\hat{\theta})^2 \quad (2.13)$$

İspat: Doğrudan bir hesaplama

$$MSE(\hat{\theta}) = E((\hat{\theta} - \theta)^2) = E(\hat{\theta}^2) + \theta^2 - 2\theta E(\hat{\theta}) \quad (2.14)$$

$$= E(\hat{\theta}^2) - E(\hat{\theta})^2 + E(\hat{\theta})^2 + \theta^2 - 2\theta E(\hat{\theta}) \quad (2.15)$$

$$= (E(\hat{\theta}^2) - E(\hat{\theta})^2) + (E(\hat{\theta}) - \theta)^2 \quad (2.16)$$

$$= V(\hat{\theta}) + (Bias(\hat{\theta}))^2 \quad (2.17)$$

Monte Carlo simülasyonunda tanımlanan rastgele değişken X , $E(X) < +\infty$ olarak varsayılın. Bu durumda M_N , $E(X)$ için bir tahmin edici olarak uygulanabilir.

$$MSE(M_N) = V(M_N) + (E(M_N) - E(X))^2 \quad (2.18)$$

Bu sebeple RMS hata iki parçadan oluşur; örneğin değişkeninden gelen hata ve M_N ’nin beklenen değeri ve X ’in beklenen değerine tam olarak eşit olmadığında mümkün olan bias. Birçok durumda bias sıfır olabilir ancak bazı durumlarda biasın sıfırdan farklı olarak alınması, toplam hatayı ve değişkenliği azaltmak amacıyla faydalı olabilir [15].

2.4. Verilen Olasılık Dağılım Fonksiyonunun Simülasyona Yerleştirilmesi

Bir Monte Carlo simülasyonu, verilen olasılık yasasına göre rastgele durumlara dayanır. Birkaç durum $[0,1]$ aralığında rastgele durumların düzensiz dağılımından oluşturulabilir. İyi bir yaklaşım elde etmek amacıyla karmaşık bir görev tanımlanabilir. Bu tür durumlarda iyi sonuçlara ulaşmak için çözümler nümerik yazılımlarla sağlanabilir.

Bir bilgisayarın, doğru şekilde rastgele durumları oluşturmadağı varsayılın. Bu durumda, sözde rastgele (pseudo-random) değışkenlerle daha küçük aralıkta, mümkün olduğunca düzensiz dağılmış rastgele durumların oluşturulması gereklidir. Bu sebeple de farklı teknikler kullanılmaktadır.

Statik Simölasyon Modelleri

Bir sistemin anlık veya belirli bir döneme denk gelen durumu için buna ilişkin şekilde, zamandan bağımsız olarak kurulan statik bir modeldir [17]. Genel olarak statik simölasyon modelleri Monte-Carlo simölasyonu olarak tanımlanmaktadır.

Dinamik Simölasyon Modelleri

Zamana bağılı olarak değışim gösteren modellerdir [18]. Zamandaki değışimden etkilenen sistemler için kullanılmaktadır.

Deterministik Simölasyon Modelleri

Daha önceden tahmin edilen durumlara sahip olan sistemler için kullanılabilen modellerdir. Sistemin çalışma prensibi açık bir şekilde ifade edilebilir [19]. Dışsal (eksojen) ve içsel (endojen) değışkenler deterministik modeller için rastsal değildir.

Stokastik Simölasyon Modelleri

Sistemin davranışı önceden bilinmediğinde kullanılan yöntemlerdir. Bu modelde, sistemin davranışına dair önceden tahminde bulunulması pek mümkün değildir [20]. Stokastik modellerde işleyen süreç ancak olasılık dağılımı ile belirlenebilir. Deterministik modellere göre çok daha karmaşıktır. Elde edilen sonuçların da analitik olarak yeterliliğı düşüktür. Bu sebeple de simölasyonda en çok başvuru olan yöntem olmuştur [21].

Sürekli Modeller

Zamanla sürekli değışkenlik gösteren durumlara sahip sistemlerde kullanılmaktadır. Sürekli sistemlerde, durum değışkenleri zaman üzerinde sürekli değıştiğinden dolayı, istatistikler yalnızca sistemdeki durumu sürekli bir şekilde gözlemleyerek elde edilir. Sürekli simölasyonun yerine getirilmesi temelde doğrudan doğruyadır ve buradaki simölasyon dilinin rolü görevlerin hazırlanmasında çeşitli kolaylıklar önererek modelin yorucu hesaplamalarını azaltmaktır [22].

Kesikli Modeller

Sistemin değışkenleri, sürekli olmayan ve zaman içinde kesikli yani sayılabilen noktalarda değer değıştiriyorsa bu model kullanılabilir [18].

3. MONTE CARLO SİMÜLASYONU İÇİN İLK DENEMELER

Monte Carlo simülasyonunda, soğuk plazmaların fiziksel özelliklerinin incelenmesi için hem plazmanın matematiksel temellerinin hem de Monte Carlo simülasyon tekniğinin anlaşılması gerekmektedir. Bunun için öncelikle, olasılık dağılım fonksiyonu yardımıyla basit birkaç deneme yapılarak, plazma sistemlerine geçilmesinin uygun olacağı düşünülmektedir.

3.1. Pi Sayısının Tahmininde Monte Carlo Yaklaşımı

Monte Carlo simülasyon tekniğinde klasik bir hesaplama olan yaklaşık π (pi) sayısının bulunması hesabı denenmiştir. Bu çalışmada hesaplamada kolaylık sağlanması açısından birim çember seçilmiştir. Çember denklemi kullanılmış ve hesaplamanın değişkeni olarak oluşturulan çemberin içinde bulunan nokta sayısı seçilmiştir. Denklem 3.1’de çember denklemi verilmiştir.

$$r^2 = x^2 + y^2 \quad (3.1)$$

İlk denemede 10 adet noktadan oluşan bir çember için hesaplama yaptırılmıştır. Bu hesaplamanın sonucunda yaklaşık π değeri 2 çıkmıştır.

```
>> n=input('Nokta sayısı: ');
x=rand(n,1);
y=rand(n,1);
figure('color','white');
hold all

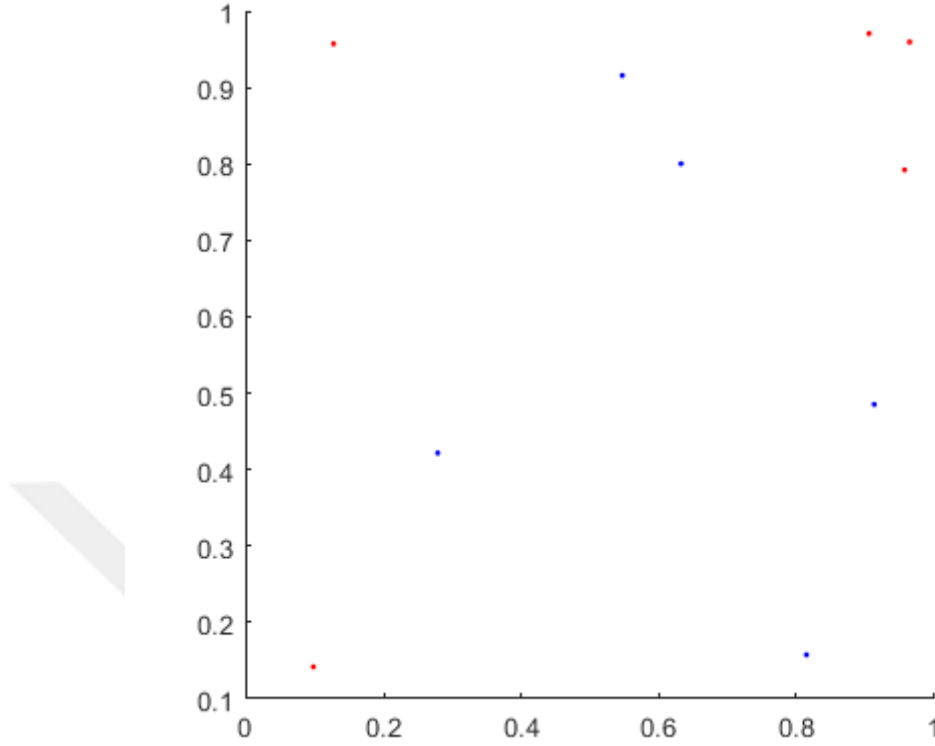
axis square;
xl=x-0.5;
yl=y-0.5; %birim çember
r=xl.^2+yl.^2;
m=0; %N çember içinde bulunan nokta sayısı
for i=1:n
    if r(i)<=0.25
        m=m+1;
        plot(x(i),y(i),'b. ');
    else
        plot(x(i),y(i),'r. ');
    end
end
m/(0.25*n)
Nokta sayısı: 10

ans =

    2
```

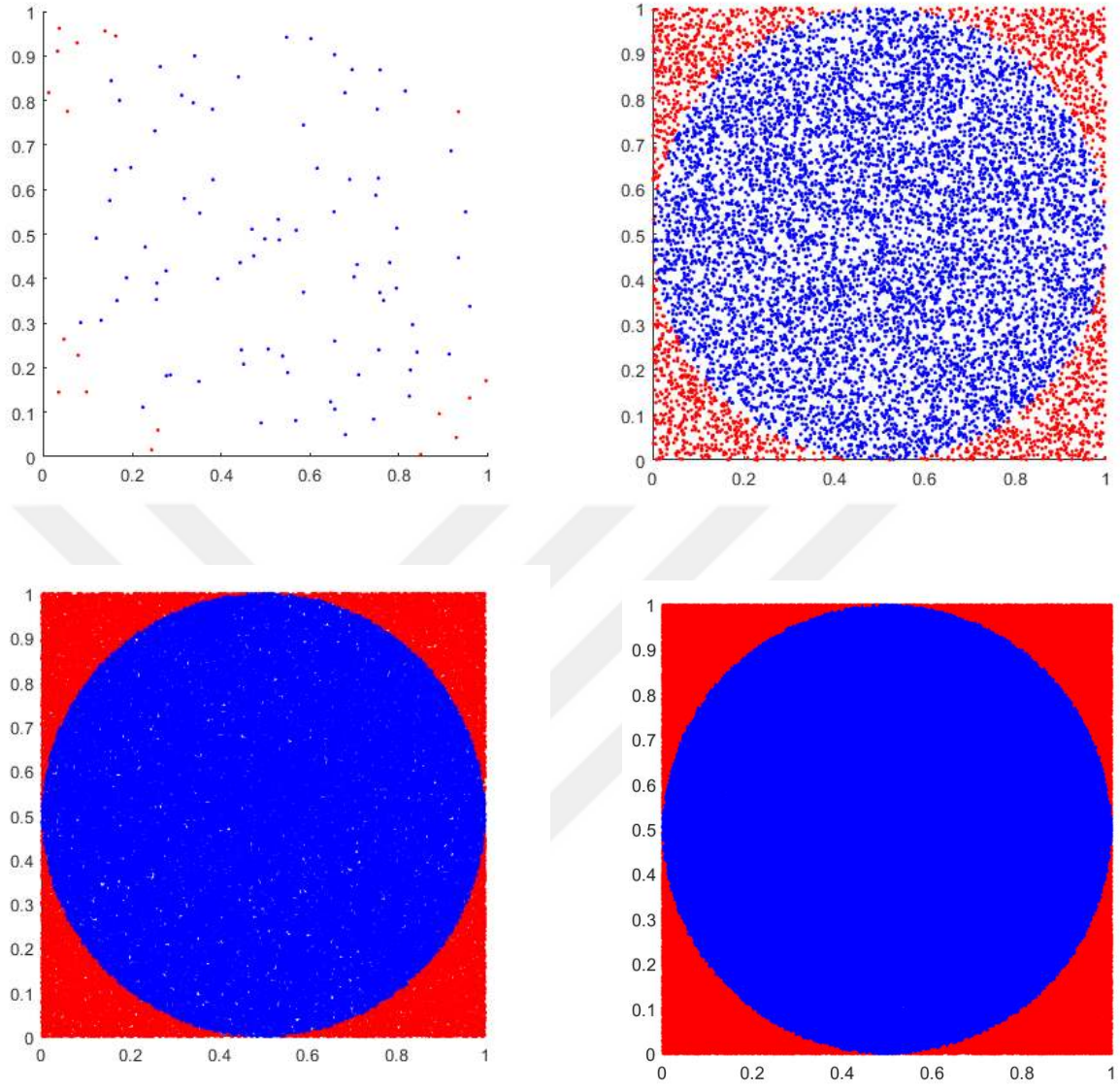
Şekil 3.1. Monte Carlo simülasyonunda yaklaşık π değerinin kodları ve 10 nokta için yaklaşık π değerinin hesaplaması.

Bu hesaplamamanın sonucunda çizdirilen grafik Şekil 3.2'deki gibidir.



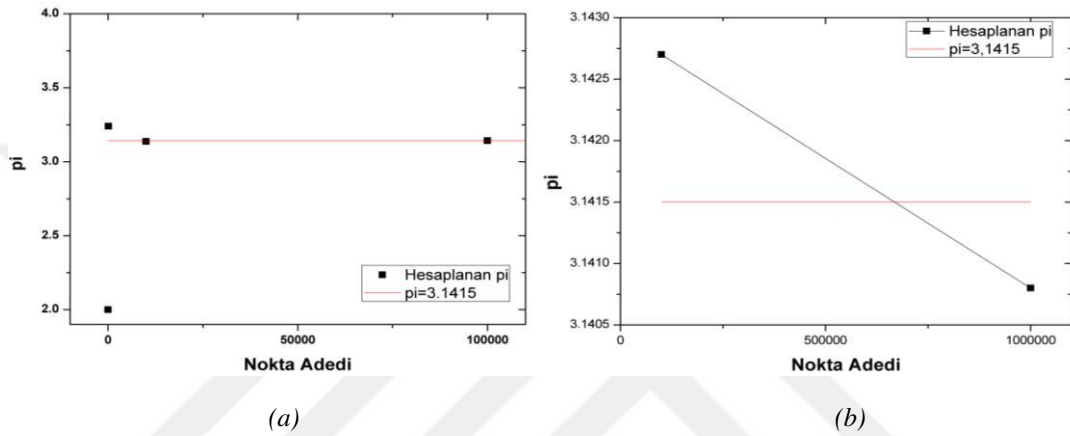
Şekil 3.2. Monte Carlo simülasyonunda 10 nokta için yaklaşık π değerinin hesaplanmasında çizilen grafik.

Ardından hesaplama 100, 10000, 100000 ve 1000000 nokta için tekrarlanmıştır. Bu hesaplamalar sonucunda yaklaşık π değeri için çıkan sonuç sırasıyla 3,2400; 3,1372 3,1427 ve 3,1408 olmuştur. Çizilen grafikler ise Şekil 3.3'te verilmiştir.



Şekil 3.3. Monte Carlo simülasyonunda, sırasıyla 100, 10000, 100000 ve 1000000 nokta için yaklaşık π değerinin hesaplanmasında çizilen grafikler.

Yapılan hesaplamalar sonucunda, hesaba dahil edilen nokta sayısı arttıkça π sayısının, on binde birlik hassasiyette gerçek değeri olan 3,1415 sayısına yaklaşıldığı görülmektedir. 10, 100, 10000 ve 1000000 nokta denemesi için Monte Carlo simülasyonu, artan denemelerin sonucu netleştirmektedir.



Şekil 3.4. (a) Monte Carlo simülasyon tekniği ile hesaplanan yaklaşık π değerinin kullanılan nokta sayısına bağlı değişimi ve (b) 10000 nokta ile 1000000 nokta grafiğine yakından bakış.

3.2. Radyasyon Transferi için Monte Carlo Yaklaşımı

Monte Carlo simülasyon yaklaşımında, sistemin çalışma şeklinin daha iyi anlaşılması ve yapılan çalışmaların doğruluğunun incelenmesi için plazma sistemleri gibi karmaşık ve çok bileşenli fiziksel sistemlerden önce daha sade ve anlaşılır bir fiziksel durumun incelenmesi yapılmıştır. Radyasyon transferine ait, basit anlamda, ışığın parçacık özelliği göz önüne alınarak, belirlenen sayıda parçacık için, belirlenen şartlar altında yansıyan ve absorblanan parçacık sayısının ve alınan yolun 3 boyutta Monte Carlo simülasyon yaklaşımı yapılmaya çalışılmıştır.

Noktasal bir kaynaktan çıkan termal nötronların sudaki durumu incelenerek, ne kadar yol alabilecekleri hesaplanmak istenmiştir. Bunun için öncelikle hem absorblanan (λ_a) hem de saçılan (λ_s) termal nötronlar için, kolaylık olması açısından sabit olan, birer ortalama serbest yol değeri seçilmiş ve toplam ortalama serbest yol λ_t ile belirtilmiştir. Burada ortalama serbest yol birimi [m] olarak kabul edilmiştir. Makroskopik kesit alanı absorblanan parçacıklar için $1/\lambda_a$, saçılan parçacıklar için $1/\lambda_s$ eşitliği kabul edilmiştir. Başlangıçta 1000 tane parçacık var sayılmıştır. 3 boyutlu sistem için x, y ve z konum

bileşenleri başlangıç durumunda $(0, 0, 0)$ değerindedir. Her bir adım, $s = -\lambda_t \cdot \log(\text{rastgele sayı})$ kuralına göre ilerletilmiştir. Küresel koordinatlar ile kartezyen koordinatlar arasında dönüşüm eşitlikleri için θ ve ϕ açılarının tanımlanmasına ihtiyaç vardır. Burada $\theta = \arcsin(-1 + s \cdot (\text{rastgele sayı}))$ ve $\phi = 2\pi \cdot (\text{rastgele sayı})$ şeklinde modele tanıtılmıştır. Konumdaki dr kadar ilerlemeyi tanımlamak için dx, dy ve dz diferansiyel büyüklükleri Denklem 3.2, 3.3 ve 3.4'te verilmiştir.

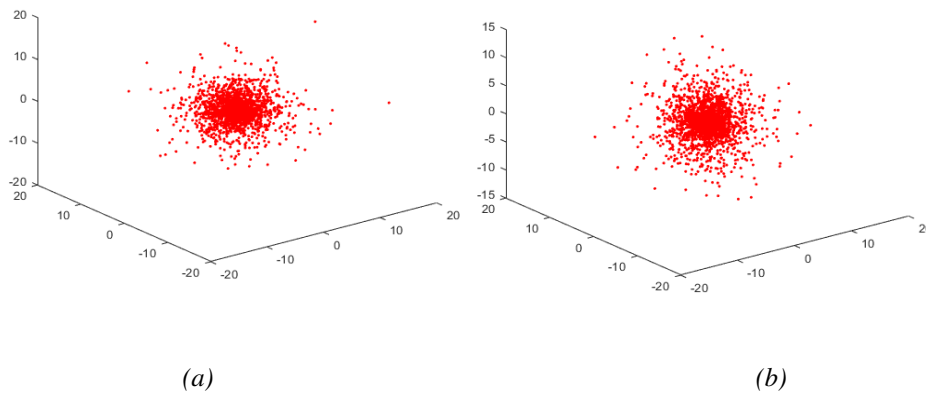
$$dx = s \cdot \cos\theta \cos\phi \quad (3.2)$$

$$dy = s \cdot \cos\theta \sin\phi \quad (3.3)$$

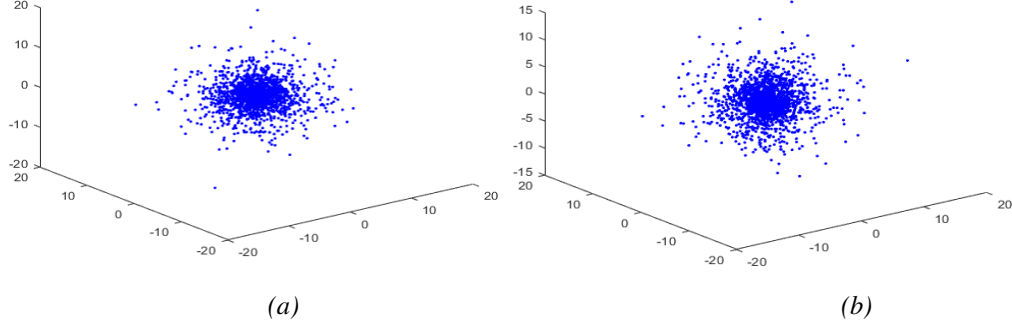
$$dz = s \cdot \sin\theta \quad (3.4)$$

Rastgele sayı seçimi, herhangi bir değer girilmediği durumda, kullanılan yazılımın kendisi tarafından $(0, 1)$ aralığında seçilmektedir. Burada rastgele sayı esasında, Monte Carlo simülasyonunun da temelini oluşturmaktadır. Döngülerle hesaplama yapılması sağlanarak, %0 ile %100 olasılık aralığında, her bir çalışma sonucunda farklı ihtimaller arasından konumun neler olabileceği tespit edilmeye çalışılmaktadır.

Konum denklemi olarak $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ eşitliği sisteme tanıtılmıştır. Bununla birlikte, daha önceden bahsedilen “belirlenen şartlar” olarak, makroskopik yapı için önce 0,1 m değerinin içinde ve dışında kalan parçacıkların sayısı istenmiştir. Ayrıca 3 boyutlu grafikler, 1000 ve 2000 parçacık sayısı ile $r = 0,05 \text{ m}$ ve $r = 0,1 \text{ m}$ konumları için çizdirilmiştir.



Şekil 3.5. 2000 parçacık sayısı için $r=0,05 \text{ m}$ (a) ve $r=0,10 \text{ m}$ (b) çapının içinde ve dışında kalan parçacıkların dağılım grafiği.



Şekil 3.6 1000 parçacık sayısı için $r=0,05$ m (a) ve $r=0,10$ m (b) çapının içinde ve dışında kalan parçacıkların dağılım grafiği.

Tablo 3.1. 2000 parçacık sayısı ve $r = 0,05$ m için farklı denemelerde elde edilen değerler.

Deneme sayısı	İçerideki parçacık sayısı	Dışarıdaki parçacık sayısı
1	650	1350
2	618	1382
3	659	1341
4	636	1364
5	647	1353

Tablo 3.2. 1000 parçacık sayısı ve $r = 0,05$ m için farklı denemelerde elde edilen değerler.

Deneme sayısı	İçerideki parçacık sayısı	Dışarıdaki parçacık sayısı
1	319	681
2	315	685
3	303	697
4	326	674
5	321	679

Tablo 3.3. 2000 parçacık sayısı ve $r = 0,10$ m için farklı denemelerde elde edilen değerler.

Deneme sayısı	İçerideki parçacık sayısı	Dışarıdaki parçacık sayısı
1	90	1910
2	94	1906
3	96	1904
4	117	1883
5	111	1889

Tablo 3.4. 1000 parçacık sayısı ve $r = 0,10$ m için farklı denemelerde elde edilen değerler.

Deneme sayısı	İçerideki parçacık sayısı	Dışarıdaki parçacık sayısı
1	56	944
2	61	939
3	55	945
4	55	945
5	42	958

Buradan, rastgele sayıların türetilbildiği Monte Carlo simülasyon yaklaşımı ile özellikle parçacık hareketlerinde birçok veriye hızlı bir şekilde ulaşılabileceği, detaylı verilerin elde edilebileceği sonucu somut şekilde görülebilmektedir. Şekil 3.5 ve 3.6'dan görüldüğü üzere, parçacık hareketleri Monte Carlo yöntemi ile incelebilmektedir.

4. MONTE CARLO SİMÜLASYON DENEMELERİ

Hesaplamalar için Monte Carlo metodunun özünde yüz yıllar önce yapılan Buffon'un iğne deneyi yatmaktadır. 1940 sonrası modern bilgisayarlar sayesinde John von Neumann, Stanislaw Ulam ve Nicholas Metropolis tarafından gerçekleştirilen öncü çalışmalar bulunmaktadır. Bu yöntem, çok sayıda pratik uygulama alanı sağlamıştır [23]. Buna rağmen, şimdiye kadar Fizikte kullanılan Monte Carlo yöntemi istatistiksel ve plazma fiziği için özel durumlarla sınırlı kalmıştır. Plazma fiziğinde kullanılan Monte Carlo yöntemi, istatistiksel ve özel durumlar seviyesinde devam etmektedir. Burada kullanılan yöntemlerde de genellikle **stokastik diferansiyel denklemlerdir**. Stokastik yöntem Monte Carlo metodunda kullanılan bir uygulamadır. Bu uygulamada belirli bir aralıkta farklı değerler alabilen değişkenler kullanılmaktadır. Kuantum mekaniğinde var olan belirsizlik ve olasılık kavramlarını kabul ettiğimizde tamamen stokastik hesaplama ve saf Monte Carlo yöntemi daha kolay anlaşılır hale gelmektedir [24]. Plazma Fiziği için Monte Carlo denemelerinde ilk olarak, daha anlaşılır olabileceği düşünülen, hücredeki parçacık (particle-in-cell) kavramıyla anılan, tek boyutlu ve stokastik denklemlere dayalı bu yöntem üzerine çalışılmaya başlanmıştır.

4.1. Saf Monte Carlo Metodu

Plazma simülasyonunda, Monte Carlo yöntemi, çarpışmalar ve safsızlık taşınımı gibi karmaşık işlemler için kullanılır. Daha önce yapılan çalışmalar göz önünde bulundurulduğunda, bu karmaşık yapıların incelenmesinde kullanılan Monte Carlo yönteminin saf Monte Carlo yöntemi üzerine inşa edildiği görülebilir. *Feynman-Kac formülünde*, birçok tipte plazma denklemi (taşınma denklemi, Vlasov denklemi vb.) Denklem 4.1'deki forma sahiptir.

$$\frac{\delta f}{\delta t} + \mu(x, t) \frac{\delta f}{\delta x} - \frac{1}{2} \sigma^2(x, t) \frac{\delta^2 f}{\delta x^2} - V(x, t)f + p(x, t) = 0 \quad (4.1)$$

Feynman-Kac formülü, $V, p = 0$ olduğunda Denklem 4.1'in, stokastik diferansiyel denkleme eşit olduğunu gösterir. Bununla beraber $V, p \neq 0$ olduğu durum için de çözülebilir.

$$dX = \mu(X, t)dt + \sigma(X, t)dW_t \quad (4.2)$$

Denklem 4.2'de W_t , Wiener sürecidir (Brownian hareketi). Denklem 4.1 ve 4.2, çok boyutlu veya daha çok değişkenli (hız ve zaman ilavesi gibi) hale getirilebilir.

Yayılm-difüzyon denklemi, Denklem 4.1'in kullanımının örneğini açıklamak için çözülebilir. Bu, stokastik diferansiyel denklem çözümünde kullanılan bir denklemdir.

Bu durumda $D = \sigma^2/2$ ve $a = \mu$ sabitlerdir. $f(x, 0) = f_0(x)$ için $\zeta_1^0, \dots, \zeta_N^0$, N sayıda örnekle başlanabilir. Her bir adım için Denklem 4.3 kullanılabilir.

$$\zeta_i^{t+dt} = \zeta_i^t + a dt + \sqrt{2Ddt}\eta_i, i = 1, \dots, N \quad (4.3)$$

Burada η_i , ortalama sıfır ve birim değişken ile normal dağılımdır. $a = 0$ için saf difüzyon ve $D = 0$ için saf yayılım mevcuttur. İntegral çözümü Denklem 4.4'te verilmiştir.

$$f(x, t) = \int G_t(x - y) f_0(y - at) dy = G_t f_0(x - at) \quad (4.4)$$

$$G_t(x - y) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{1/2}} e^{-\frac{(x-y)^2}{4Dt}} \quad (4.5)$$

Burada, integral için Monte Carlo yöntemi doğrudan uygulanırsa ve parçacıklar için N' tane örnek ve uzayda M tane nokta kullanılırsa, toplamda ortaya çıkan $O(N'xM)$ şeklinde bir matris olacaktır [24].

Burada Denklem 4.3 için Monte Carlo hesaplaması yapıldığında yayılma-difüzyon denklemi çözülmüş olur.

5. PLAZMA UYGULAMALARINDA ÖZELLEŞMİŞ YÖNTEMLER

Plazma fiziğinde, simülasyon çalışmaları yapılırken, farklı matematiksel yöntemlere başvurulmaktadır. Bu yöntemler arasında Monte Carlo yöntemi ilk sırada yer alır [15] [16] [25]. Monte Carlo çarpışmalarıyla beraber, plazma yapısının anlaşılır hale gelebilmesi için özelleşmiş yöntemler de bulunmaktadır. Elektron frekansının zaman skalasına göre tamamen kinetik model ile akışkan model arasında simülasyon yöntemi için tercih yapılabilir. Bununla beraber, zaman skalasında her iki modele göre ortalama değerlere sahip plazmalar için ise her iki modelin farklı özelliklerinden yararlanılan “hibrit model” kullanılabilir.

Akışkan model, zaman verimliliği açısından oldukça avantajlıdır. Monte Carlo çarpışmalarıyla beraber özelleşmiş uygulamalar ile plazma hakkında detaylı bilgi sahibi olmaya çalışılırken kullanılan bu yöntemlerden biri de Hücredeki Parçacık – PIC (Particle-In-Cell) yöntemidir.

5.1. Particle In Cell (PIC – Hücredeki Parçacık) Yöntemi

Bu yöntem, soğuk akan deşarjların plazma simülasyonlarında, yüksek doğruluk vermesiyle öne çıkmaktadır. PIC yöntemi, ilk olarak Buneman [26] ve Dawson [27] tarafından, 1950’lerin sonlarında kullanılmıştır. Bu çalışmalarda, 100 ile 1000 parçacık arasında denemeler yapılmıştır. Çalışmalarda, Coulomb yasası, her bir parçacık için ayrı ayrı çözülmüştür. Daha sonraki 10 yılda parçacık örgü yöntemleri üzerine çalışmalar yapılmış ve Poisson denklemi çözülmüştür. Bu sayede 10^3 - 10^4 adet parçacık için çözümler yapılabilmiştir. 1980’lerde ise PIC yöntemini formüle eden yayınlar yapılarak, yöntemin detayları anlatılmıştır [28, 29].

Plazmada sınır koşullarının önemi daha sonraki çalışmalarda öne çıkmıştır. Lawanson’ın çalışmasında, sınır koşullarıyla beraber, gerçek bir plazma sistemine yakın bir simülasyon yapılabilmiştir. Böylece, sürekli ve 10^{10} adet parçacığı barındıran çözümlemelerin olduğu simülasyon çalışmaları yapılabilir hale gelmiştir [30].

5.1.1. PIC yönteminin algoritması

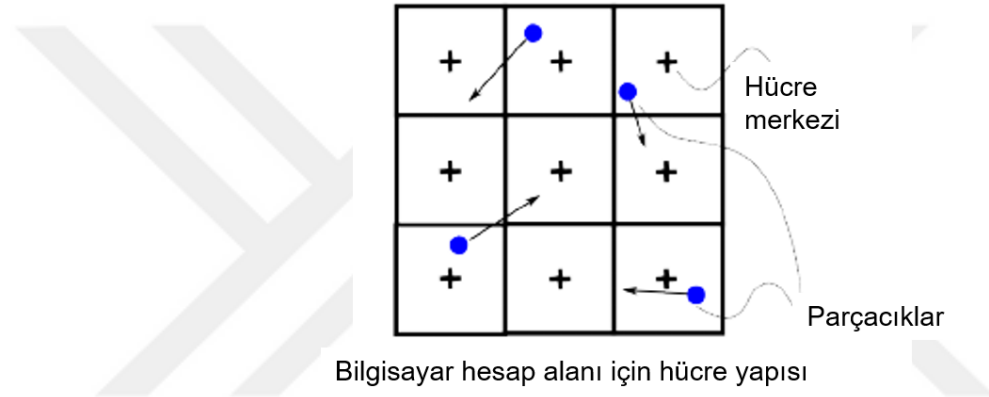
PIC yöntemi genellikle, yüklü parçacık hareketlerinin veya plazmanın simülasyonu için kullanılmaktadır. PIC yöntemine ait algoritma, simülasyonu yapılan deşarj sistemine bağlı olarak değişmektedir ancak temel anlamda yöntemin adımları belirlidir. Bu adımlar, yük yoğunluğunun hesaplanması, elektriksel potansiyelin hesaplanması, elektrik alanın hesaplanması, parçacıkların hareketi, yeni parçacıkların

oluşturulması, çıktıları ve algoritmanın belirlenen adımlarda tekrarlanması olarak sayılabilir.

PIC kodlarına başlanırken, öncelikle belirlenen sayıda parçacığın girdi olarak sisteme tanımlaması gereklidir. Sabitler belirlendikten sonra, PIC yönteminin temelini oluşturan hücre sınırları seçilmelidir.

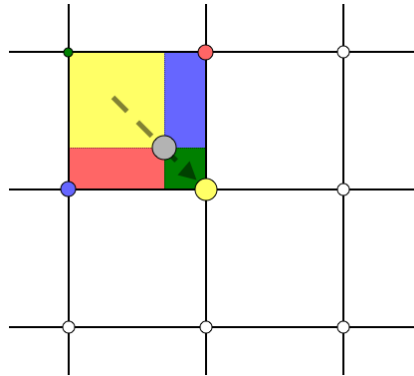
a. Yük Yoğunluğunun Hesaplanması

Yük yoğunluğu, uzayda konum olarak skalar bir değişkendir. Birim hacimdeki toplam yük sayısını temsil eder. Tüm parçacıkların, hücrelerin düğüm noktalarındaki yük dağılımının düğüm hacmine bölünmesi ile hesaplanır.



Şekil 5.1. Elektrostatik PIC yöntemi için başlangıç durumunu temsil eden görsel [31].

Birincil saçılma durumu, Şekil 5.1’de şematik olarak gösterilmiştir. Bu şekil, hesaplanan örgünün bir parçasını göstermektedir. Burada mavi nokta olarak gösterilen ise simülasyonu yapılan parçacığı temsil etmektedir. Parçacıkların yükleri, parçacığın bulunduğu hücreye ait düğümler boyunca dağılmıştır. Yöntemin ismi de tam olarak bu durumdan kaynaklanmaktadır (hücredeki parçacık).



Şekil 5.2. Elektrostatik PIC yöntemi için düğüm noktalarını gösteren temsili görsel [32].

Şekil 5.2’de yer alan şematik gösterimde sarı düğüm, parçacığın en yakın olduğu düğüm olmasından dolayı, hücredeki en büyük alana sahiptir. Bu sebeple en küçük alan ise yeşil düğüme aittir. Ağırlık etkileri, dört farklı alan kesriyle verilebilir.

$$\omega_1 = (1 - h_x)(1 - h_y) \quad (5.1)$$

$$\omega_2 = (h_x)(1 - h_y) \quad (5.2)$$

$$\omega_3 = (1 - h_x)(h_y) \quad (5.3)$$

$$\omega_4 = (h_x)(h_y) \quad (5.4)$$

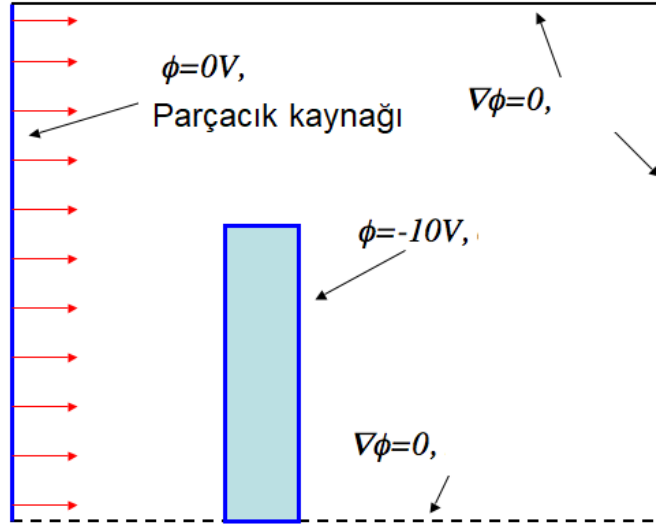
Denklem 5.1-5.4’te Şekil 5.2’de gösterilen, sırasıyla; mavi, sarı, yeşil ve kırmızı alanları temsil eder. h_x ise parçacığın, hücre merkezinden, x-doğrultusundaki kesirli olarak uzaklığıdır. Düğüm hacmi, hücre hacmine eşittir, $\Delta x \Delta y$. Etki alanı sınırları boyunca bazı istisnalar mevcuttur, çünkü burada hücrelerin sadece yarısı (veya köşelerde $1/4$ oranında) katkı vardır. Daha karmaşık sınır koşulları ilave hesaplamalar gerektirmektedir. Örneğin, periyodik sınırlar, pozitif (+) ve negatif (-) düğümlerin toplamıyla hesaplanabilmektedir.

Elektriksel Potansiyelin Hesaplanması

Bir sonraki adımda, elektriksel potansiyel, eliptik denklem çözücü ile hesaplanır. Poisson denklemi, aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\frac{\phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i+1,j}}{\Delta_x^2} + \frac{\phi_{i,j-1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j+1}}{\Delta_y^2} = -\frac{e}{\epsilon_0} \left[n_i - n_0 \exp\left(\frac{\phi - \phi_0}{kT_e}\right) \right] \quad (5.5)$$

Burada, merkezi fark ile sonlu fark yöntemi kullanılır. Bu yöntem, örgü sınırları boyunca modifiye edilebilir. Eliptik denklem, sınır değer probleminin çözümünü sunar ve tüm sınırlar boyunca sınır koşulları belirlenmelidir. İki tür sınır koşulu mevcuttur; Dirichlet ve Neumann sınır koşulları. Dirichlet sınır koşulları, potansiyel değerini tanımlar. Neumann sınır koşulları ise türevin değerini veya elektrik alanı belirler. Plazma problemlerinde, her iki sınır koşulu tipi de kullanılır. Şekil 5.3’te örnek bir görsel sunulmuştur.



Şekil 5.3. PIC kodunda kombine sınır koşullarına bir örnek [32].

b. Elektrik Alanın Hesaplanması

Elektrik alan, elektriksel potansiyeldeki fark ile Denklem 5.6 veya 5.7 kullanılarak hesaplanır.

$$E_{x,i} = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta x} \quad (5.6)$$

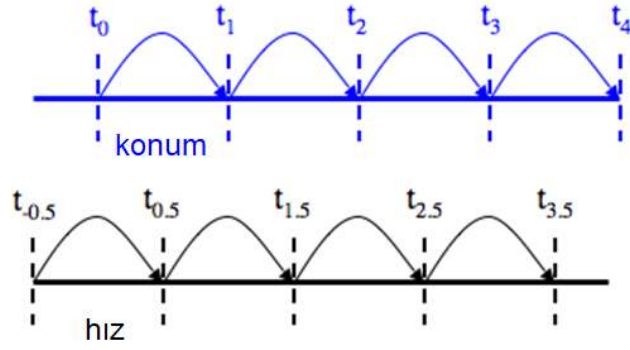
$$E_{x,i} = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{\Delta x} \quad (5.7)$$

Denklem 5.6 ve 5.7’de yalnızca x-ekseni yönündeki türevler gösterilmiştir. Bu denklemler, tek taraflı sınır koşulu için geçerli olur. Benzer şekilde 2 ve 3 boyutta elektrik alan denklemleri de yazılabilir.

c. Parçacıkların hareketi

Elektrik alanın hesaplanması sonrası, parçacıkların hareketinin belirlenmesi aşaması gelmektedir. Bu aşamada Δt zaman aralığında parçacık hareketi sisteme eklenir. Bu aşamada, orijinal adı “leapfrog” olan ve Türkçe karşılığı “birdirbir” anlamında gelen yöntem, PIC kodlarında yoğun olarak tercih edilmektedir. Burada amaç, zaman adımlarının *atlayarak* ilerletilmesidir. Bu yöntem hem hızlı hem de nümerik olarak karalıdır.

Bu yöntemde ilk olarak hız, zaman adımlarına entegre edilir ve daha sonra konum güncellenir. Hem hız hem de konum, bir zaman aralığının yarısı kadar faz farkıyla ilerlediğinden her ikisi de aynı anda bilinebilir. Her iki nicelik birbiri üzerinden atlayarak gider ve yöntem, ismini bu özelliğinden almıştır.



Şekil 5.4. Leapfrog yönteminin şematik gösterimi [32].

Nümerik olarak parçacıkların hızı Denklem 5.8 ve hareketi Denklem 5.9 ile verilmiştir.

$$\vec{v}^{k+0,5} = \vec{v}^{k-0,5} + \frac{q}{m} \vec{E} \Delta t \quad (5.8)$$

$$\vec{x}^{k+1} = \vec{x}^{k+0,5} \Delta t \quad (5.9)$$

Burada v hızı, q birim elektrik yükünü, m parçacığın (burada elektron) kütlesini, E elektrik alanı, x konumu ve Δt zaman aralığını gösterir. Her bir parçacığın konumundaki elektrik alan, toplama yöntemiyle hesaplanır. Yük yoğunluğu ise bu işlemin tam tersiyle, toplam yükün parçacık sayısına bölünmesi mantığıyla hesaplanmaktadır.

Parçacıklar yeni konumlarına hareket ettikten sonra, kod sisteminde bir kontrol gereklidir. Bu kontrol sayesinde, tüm parçacıkların, yeni konumlarındayken hala hesaplama alanında olup olmadıkları tespit edilebilir. İki sınırın birbiri ile etkileşimi mümkündür. Parçacıklar hem hesaplama için belirlenen alandan çıkabilir hem de başka bir katı bileşen ile çarpışabilir. Hesaplama sınırları, parçacıkların uzaklaşmasına, yansımaya veya hesaplama alanının aksi bölgesine geçmesine izin verebilir durumdadır. Yansıtılmalı sınırlar, simetri düzlemlerinin tanımlanması için kullanılır. Sınırların, parçacıkların katı bileşenlerle çarpışmasına izin vermesi ise parçacık-yüzey etkileşimlerinin incelenebilmesi için yapılan simülasyon çalışmaları için kullanılabilir.

d. Parçacıkların türetilmesi

Bu aşama, akan deşarjlar için kullanışlıdır. Solar wind sistemlerde veya uzay araçlarında kullanılan plazma iticiler için gerekli bir aşamadır.

Bazı durumlarda tüm parçacıklar ilk aşamada mevcuttur ve kod sisteminde hazırdır. Böylece hesaplama sonucunda yalnızca son durumları tespit edilir. Genellikle, Maxwell dağılımı kullanılır. Birdsall'un çalışmasında dağılım, yaklaşık olarak Denklem 5.10'daki şekliyle verilmiştir [28].

$$f_M = \sqrt{\frac{M}{12} \left[\sum_{i=1}^M R_i - \frac{M}{2} \right]} \quad (5.10)$$

Burada M seçilen bir sayı, R_i 0-1 aralığında $[0:1)$ i. rastgele sayıdır. M değeri, doğruluğu kontrol etmede kullanılır. Birdsall'ın örneğinde kullandığı 12 değeri ise termal hızın 6 katından büyük girdileri engellemek için seçilmiştir [28].

Son olarak leapfrog yöntemi burada da hızların ve konumların dengeli şekilde hesaplanabilmesi amacıyla yeni parçacıklar için kullanılır.

e. Çıktılar

PIC kodlarından, potansiyel, yük yoğunluğu, elektron sıcaklığı gibi plazma parametreleriyle beraber parçacıklara ait hızlar ve akım yoğunluğu gibi çıktılar elde edilebilmektedir.

f. Tekrarlama (İterasyon)

Döngü, istenen koşullar sağlanana kadar devam eder. Simülasyon, kaynak denge durumuna gelene kadar çalışır. Denge durumu, simülasyon bölgesindeki net parçacık sayısının sabit olmasıyla tanımlanır. Bir diğer deyişle, yeni parçacıklar üreten kaynaktan gelenlerle, hesaplama alanından ayrılan parçacık sayısının eşit olduğu durum denge durumudur.

6. PIC KODLARIYLA ÖRNEK ÇALIŞMA

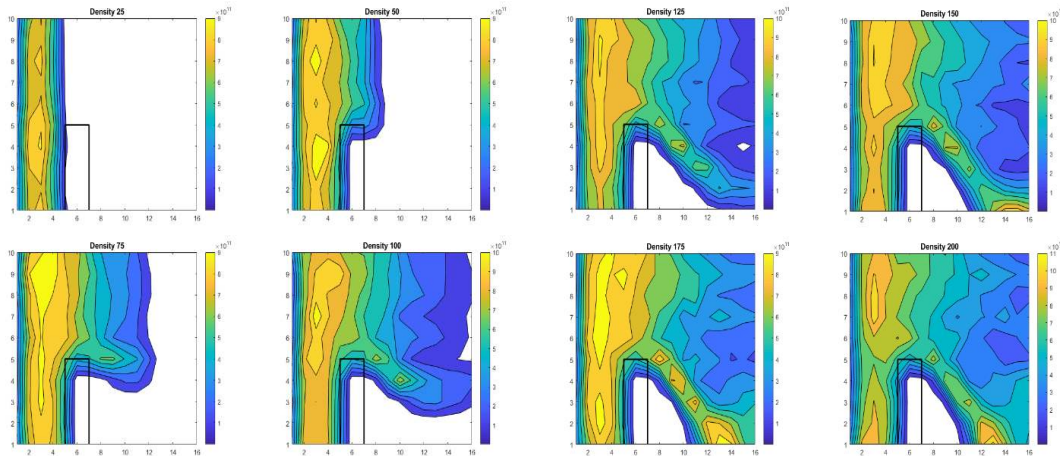
PIC kodları, plazma fiziğinde yoğun olarak kullanıldığından, birçok farklı sistem için temel oluşturacak benzer kodlar daha önceden yazılmıştır. Bu sayede, özelleşmiş sistem için kod yazmaya başlamadan önce, daha önceden denenmiş kodlar kullanılarak hazırlık yapılabilir. Böylece, değişen değerlerle ortaya çıkabilecek farklılıklar hızlı şekilde kontrol edilebilir.

Albert Einstein'ın ilk profesörlerinden biri olarak yer aldığı ve 1930 yılında 23 kişilik bir ekiple New Jersey, ABD'de kurulan Institute of Advanced Study (IAS – İleri Çalışmalar Enstitüsü), temel bir PIC kod örneğini MatLab yazılımı için hazırlamıştır.

IAS tarafından hazırlanan kod sisteminde, oksijen molekülü seçilmiştir. Burada x-ekseninde 16 birim, y-ekseninde ise 10 birimlik bir hücre tercih edilmiş ve zaman adımı 200 olarak belirlenmiştir.

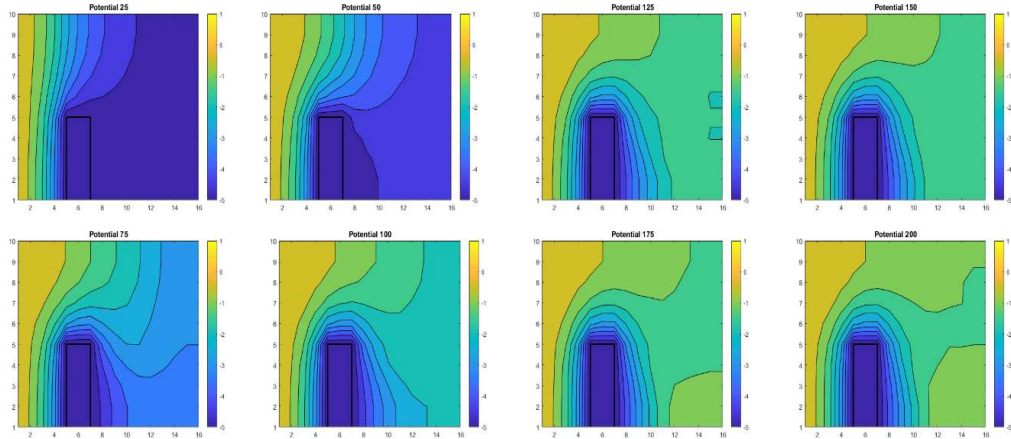
6.1. PIC Kodlarıyla Oksijen Molekülü için Denemeler

Oksijen molekülü için solar wind olarak adlandırılan plazma sistemi için 200 adımda gerçekleşen bir PIC kod sistemi hazırlanmıştır. Temel plazma oluşumunu inceleyen bu sistemde parçacıkların oluşturulması aşaması ile belirlenen hücre içinde parçacıkların dağılımlarını gösteren grafikler elde edilmektedir. Elektriksel potansiyel ve yoğunluğu gösteren grafikler Şekil 6.1 ve 6.2'de gösterilmiştir.

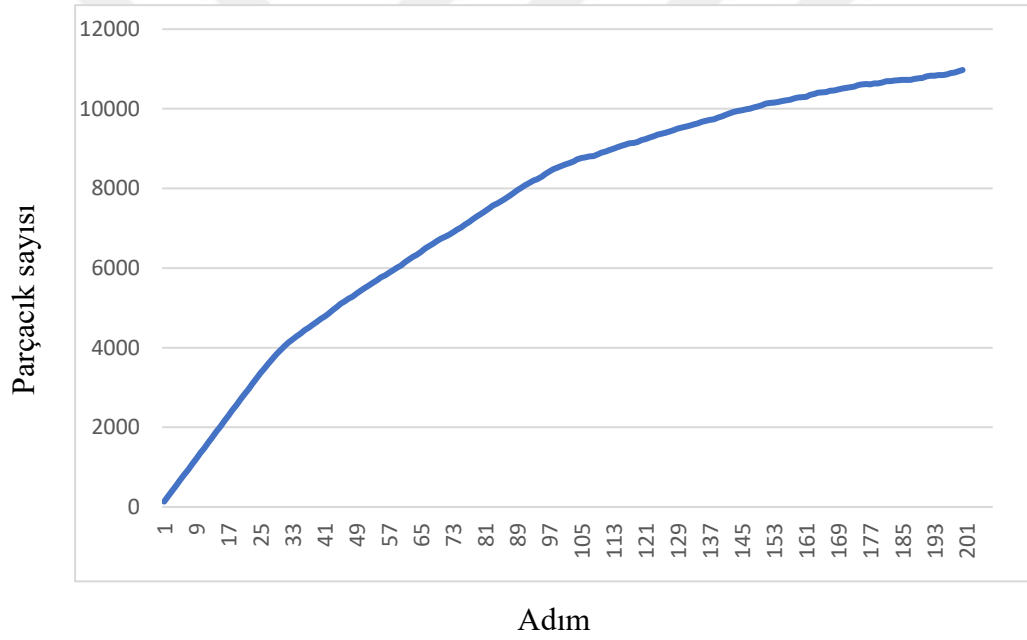


Şekil 6.1. Oksijen molekülü için her 25 adımda yoğunluk dağılım grafiği.

x-ekseninde 16, y-ekseninde ise 10 birimlik seçilen hücre içinde 200 adımda parçacıkların zaman içinde dağılımı gösterilmiştir. Aynı sistem için potansiyel hesaplaması da yapılmış ve elde edilen grafikler Şekil 6.2'de gösterilmiştir.

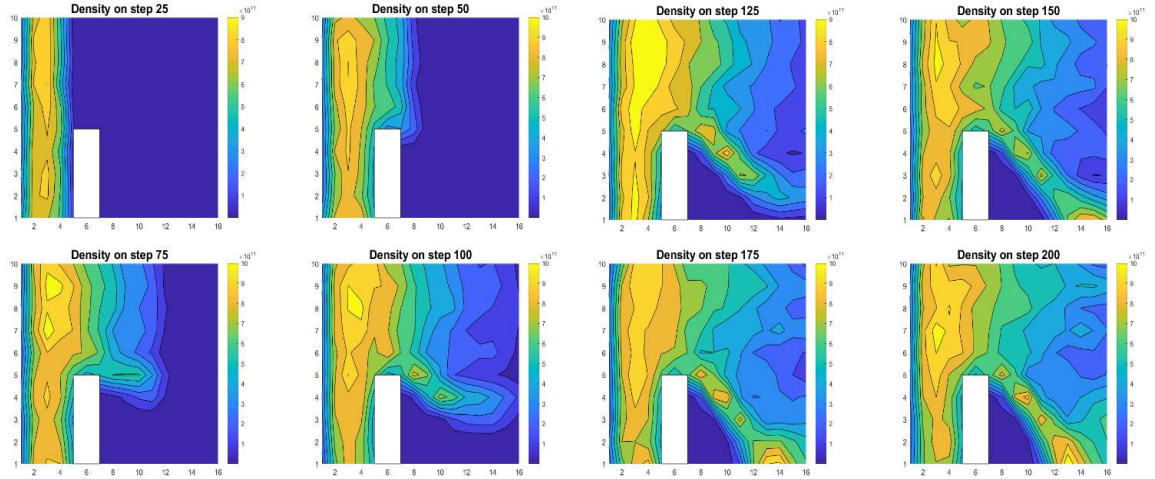


Şekil 6.2. Oksijen molekülü için her 25 adımda elektriksel potansiyel dağılım grafiği.

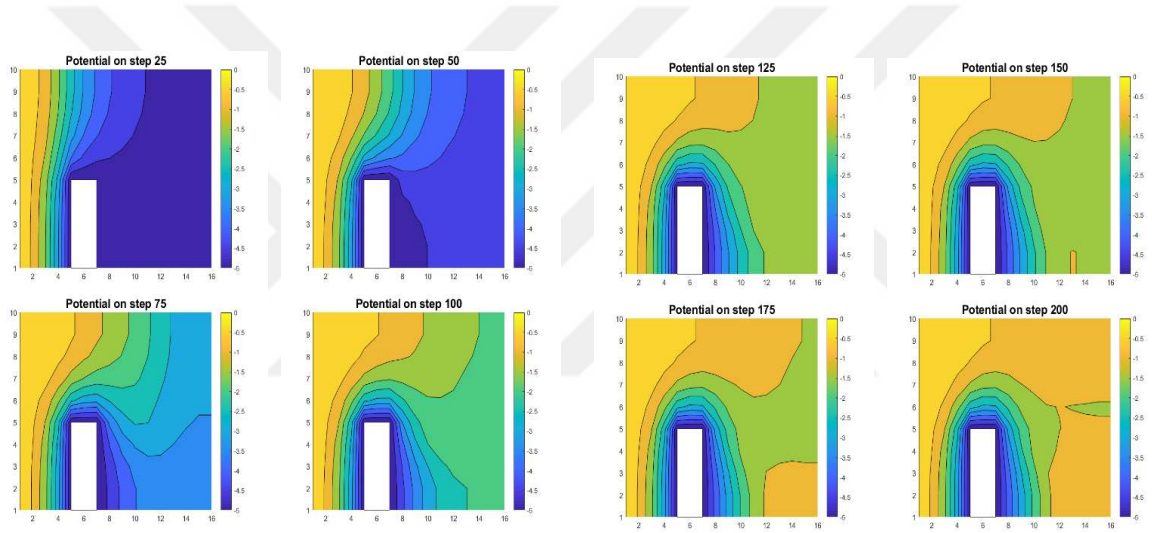


Şekil 6.3. Oksijen molekülüne ait yapılan denemelerde adım sayısına göre parçacık sayısını gösteren grafik.

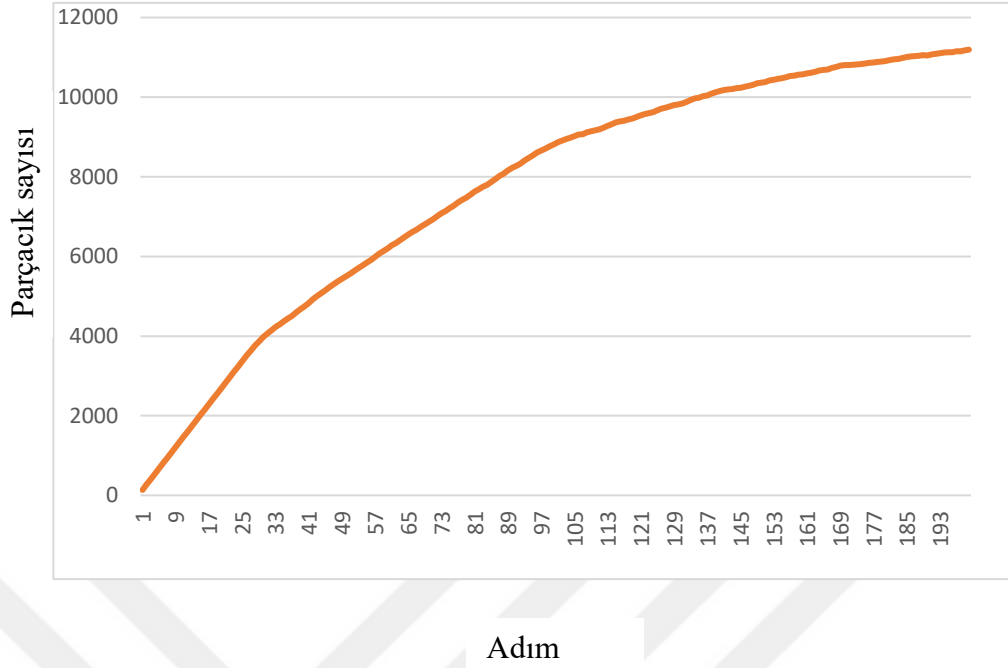
Aynı kodlar kullanılarak, daha sonra çalışılması planlanan argon gazına ait plazma için de denemeler yapılmıştır. Tüm parametreler aynı tutularak yapılan simülasyonda, argon gazına ait plazmanın yoğunluk ve elektriksel potansiyel dağılım grafikleri Şekil 6.4 ve 6.5'te gösterilmiştir.



Şekil 6.4. Argon gazına ait her 25 adımda yoğunluk dağılım grafiği.



Şekil 6.5. Argon gazı için her 25 adımda elektriksel potansiyel dağılım grafiği



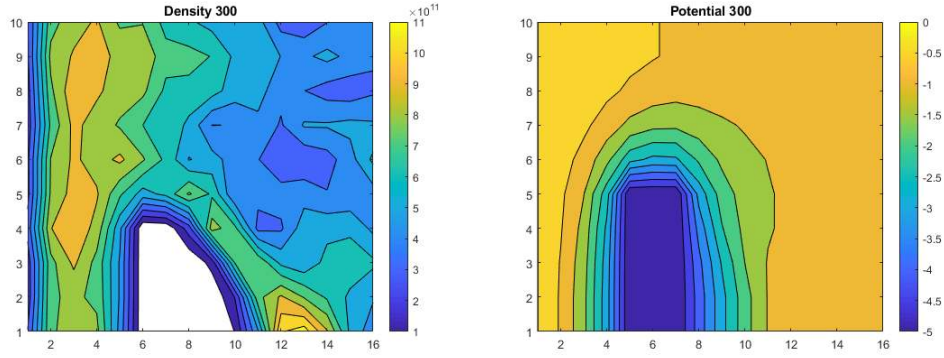
Şekil 6.6. Argon gazına ait yapılan denemelerde adım sayısına göre parçacık sayısını gösteren grafik.

Şekil 6.6’da gösterilen grafikte ise argon gazına ait yapılan denemelerde, adım sayılarına karşılık parçacık sayısındaki artış gösterilmiştir. Argon plazması için yapılan denemelerde, elektriksel potansiyelin dağılımının daha yüksek olduğu görülmektedir. Parçacıkların, hesaplanan hücre içindeki dağılımı ise benzer şekilde gözlenmiştir. Parçacık yoğunluğundaki bu benzerlik, atom numarası 8 olan oksijeni, normal şartlarda moleküler yapıda (O_2) bulunması ve bu sebeple, yapılan simülasyon çalışmasında 16 olarak tanımlanan atom numarası verisinin, argon elementinin 18 olan atom numarasına yakın olmasından kaynaklanmaktadır.

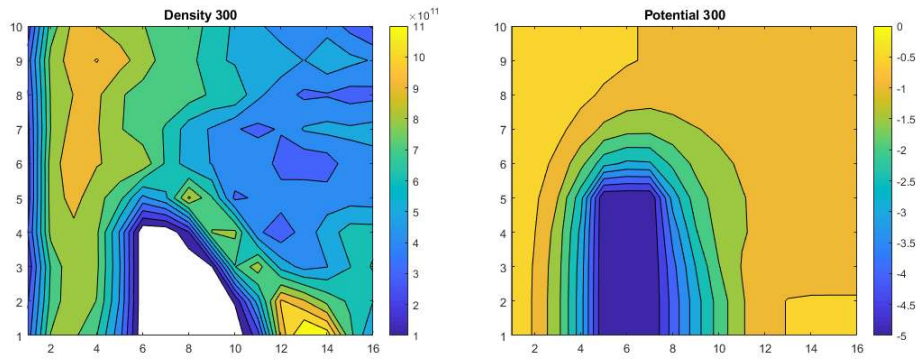
Elektriksel potansiyel hesaplamasında ise Boltzmann dağılımı kullanılmıştır.

$$n_e(\phi_2) = n_e(\phi_1)e^{e(\phi_2-\phi_1)/k_B T_e} \quad (6.1)$$

Yapılan bu çalışmalarda, bazı değişkenler değiştirilerek sonuçlar incelenmiştir. Öncelikle adım sayısı artırılarak değişim gözlenmeye çalışılmıştır. Adım sayısı 200’den 300’e çıkarılarak son adımdaki grafikler, oksijen molekülüne ait deşarj için oluşturulmuştur.

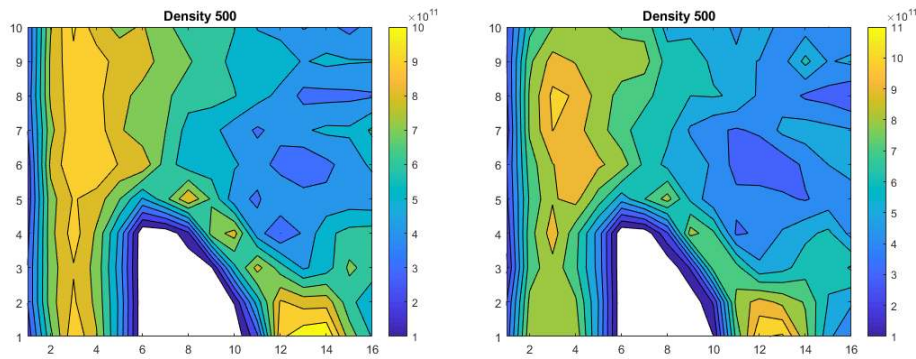


Şekil 6.7. Oksijen molekülüne ait deşarj için 300. adımda yoğunluk ve elektriksel potansiyel grafikleri.



Şekil 6.8. Argon atomuna ait deşarj için 300. adımda yoğunluk ve elektriksel potansiyel grafikleri.

Adım sayısı 200 olduğunda hem oksijen hem de argon deşarjları için kaynağa yakın bölgelerde parçacık yoğunluğunun daha fazla olduğu görülmektedir. Buna karşın, adım sayısı 300 olarak belirlendiğinde, parçacık yoğunluğunun kaynaktan uzaklaştığı görülmekte ve belirlenen hücrenin ortalarına doğru hareket ettiği gözlenmektedir.



Şekil 6.9. Sırasıyla argon atomu ve oksijen molekülüne ait deşarjların 500. adımda yoğunluk grafikleri.

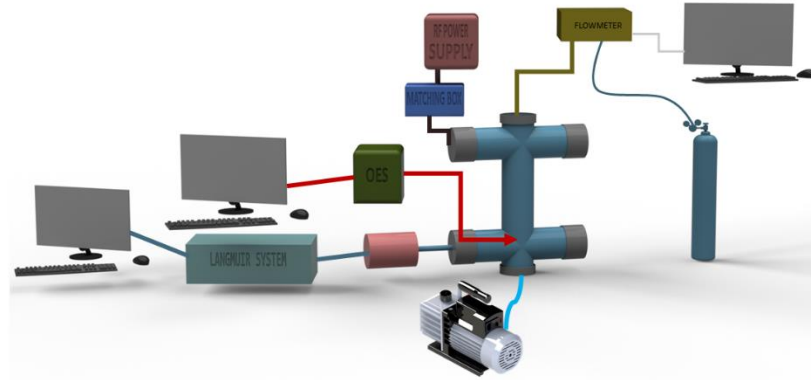
Buradan yola çıkılarak adım sayısı 500 olarak belirlenmiş ve değişiklikler gözlenmeye çalışılmıştır.

Şekil 6.9’da görüldüğü gibi özellikle argon deşarjı için parçacık yoğunluğunun belirgin şekilde kaynaktan uzaklaştığı gözlenmektedir. Buradan, sürecin devam etmesiyle, parçacıkların hücreler arasındaki geçişlerinin gözlenebildiği yorumu yapılabilir. Bununla beraber, oksijen molekülüne ait deşarjın elektriksel potansiyeli incelendiğinde, hücre sınırlarında 200. adımdakine göre 300. adımda belirgin şekilde arttığı görülmektedir. Boltzmann dağılımına göre hesaplanan elektriksel potansiyel, parçacık yoğunluğunun konumsal değişimine bağlı olarak değişmiştir.



7. DENEY SİSTEMİ

Yapılan bu çalışmada, düşük basınç deşarj sistemi kullanılmıştır. Kullanılan deşarj sistemi, özel olarak tasarlanmış çok kollu bir yapıya sahiptir. Kuvars camdan imal edilen bu sistem ile deşarj odasının tamamının gözlenebilmesi amaçlanmıştır. Kuvars cam kullanılmasının sebeplerinden bir diğeri de vakum altında dayanıklılığın sağlanabilmesi ve görünür bölge OES çalışmalarını yapabilmektir. Çok kollu yapı sayesinde, sistemin farklı noktalarından vakum bağlantısı yapılarak farklı şartlar altında deşarj oluşturulabilmektedir. Bununla beraber, sistemimizde kullanılan çok kollu tasarımın bir diğeri avantajı da farklı noktalardan enerji, topraklama ve Langmuir probunun bağlantılarının yapılabilmesidir. Böylece, OES ölçümünün alındığı noktalardan Langmuir probu ile de veri alınabilmektedir. Gaz bağlantıları da yine sistem üzerindeki kollar kullanılarak yapılabilmektedir. Düşük basınç deşarj sistemine ait tasarımın Şekil 7.1’de gösterilmiştir.



Şekil 7.1. Düşük basınç deşarj sistemine ait şematik gösterim.

Plazma fiziğinde yapılan çalışmaların büyük çoğunluğunda ve endüstride yoğun olarak argon gazı tercih edilmektedir. Bunun ana nedeni, argon gazının düşük maliyetli, kolay bulunması ve kolay iyonlaşmasıdır. Dolayısıyla yapılan bilimsel çalışmaların genişletilebilmesi, ileriye taşınabilmesi amacıyla ve yapılan çalışmaların sonucunda endüstriyel etkilerin ortaya çıkma ihtimali yüksek olduğundan argon gazının bu çalışmada kullanılması tercih edilmiştir.

Argon gazına ait deşarjın düşük basınçta oluşturulabilmesi için Edwards RV 8 vakum pompası kullanılmıştır. Bu pompanın vakum gücü $8,3 \text{ m}^3/\text{dk}$ değerindedir. Böylece, düşük basınçta argon deşarjı oluşturabilmek için ihtiyaç duyulan gerekli vakum ortamı sağlanabilmektedir.

Argon gazının, vakum altındaki ortama, istenen miktarda gönderilmesi için çok hassas olan EL-FLOW SELECT F-201CV model gaz akışmetresi kullanılmıştır. Bu sayede 0,010 – 1,2 l/dk aralığındaki miktarda argon gazı, yüksek hassasiyetli bir şekilde sisteme gönderilebilmiştir. Bunun sağlanabilmesi amacıyla akışmetrelerin, üretici firmadan argon gazının da içinde bulunduğu bazı gazlar için özellikle kalibre edilmiştir. Bunun sonucu olarak, argon gazının oda sıcaklığındaki yoğunluk değerlerine uygun şekilde kalibre edilmiş ve istenen miktarda gazı çok yüksek doğrulukla sisteme gönderebilen akışmetreler kullanılmış olmaktadır.

Tüm bunların ardından, vakum altındaki kuvars camdan imal edilen deşarj sistemi içindeki argon gazı plazması, radyo-frekans (RF) güç kaynağı ile oluşturulmaktadır. Advanced Energy Cesar model güç kaynağı, frekans ayarlamasının sağlandığı Advanced Energy Navi model matching box ile beraber çalışmaktadır. 13,56 MHz frekansa sahip RF güç kaynağı ile 20 – 65 W olarak bu çalışma için belirlenmiştir.

Elde edilen deşarja ve mekaniksel etkilerle oluşan deşarj sonrası bölgeden, Ocean Optics HR2000+ model optik emisyon spektrometresi ile veriler alınmıştır. Bu spektrometrenin ölçüm yapabildiği dalgaboyu aralığı 190 – 1100 nm aralığındadır. Görünür bölge spektrumlarını algılayan spektrometrenin çözünürlük değeri yaklaşık olarak 0,9 nm olarak belirtilmektedir.

Optik emisyon spektrometresi ile verilerin alındığı bölgeden, Langmuir probu ile de ölçümler ayrıca yapılmıştır. Impedans Langmuir probu tasarlanırken dikkat edilen nokta, bağlantısının doğru şekilde yapılabilmesidir. Tasarlanan Langmuir probu, 0,1 – 15 eV aralığında elektron sıcaklığı ölçümü yapabilmektedir. Aynı zamanda RF, DC ve mikrodalga güç kaynakları ile uyumlu şekilde çalışabilme potansiyeline sahiptir. Burada Langmuir probu ölçümleri tek prob ile yapılmıştır.

7.1. Optik Emisyon Spektroskopisi

Optik emisyon spektroskopisi, Langmuir probu yöntemi gibi plazmaların incelenmesinde çokça tercih edilen bir yöntemdir. Plazma ortamında bulunan serbest elektronların ve iyonların aralarındaki, görünür bölgede yer alan ultraviyole ve elektromanyetik radyasyondaki etkileşimler optik emisyon spektroskopisi (OES) ile

incelenebilir. Yoğunluk, enerji ve diğer plazma özellikleri, plazmanın incelenmesinde bilinmesi gereken temel parametrelerdir. OES yöntemi, uyarılmış elektronik seviyelerdeki plazma parçacıklarının lüminesans etkisini tespit etmeye dayanır. Deşarj sırasında ortaya çıkan süreçler sayesinde elektronik geçişler, bu yöntemle hesaplanabilir. OES ile parçacık yoğunluğu, viskozite ile ısı ve elektriksel iletkenlik de incelenebilmektedir. OES yöntemi ile plazmanın incelenmesinde, pertürbasyon etkisi de olmamaktadır. Böylece elde edilen sonuçların doğruluğu artmaktadır.

Plazmada bulunan aktif parçacıklar ve plazmayı oluşturan kimyasal reaksiyonlar emisyon çizgilerinin oluşmasına neden olur. Emisyon çizgileri, deşarj parametrelerine bağlı olan uyarılmış seviyelerin parçacık nüfus yoğunluğu ile ilişkilidir. Bir atom, elektron etkileşimleriyle, uyarılmış seviyeden temel duruma geçer ve bu durumda frekans ω değeri de düşer. Dalga boyları genellikle 200-900 nm aralığında yer alır [33]. Plazma ortamındaki parçacıkların, elektronlarla çarpışmaları durumu ile ilgili denklem aşağıdaki şekilde verilebilir.

$$x + e \rightarrow X^* + e \quad (7.1)$$

Bununla beraber, parçacıkların uyarılmış seviyeleri Denklem 7.2 ile açıklanır.

$$X^* \rightarrow X^{**} + \hbar\omega \quad (7.2)$$

Optik emisyon spektrumunda yer alan eksenler; dalga boyu ve şiddettir. Dalga boyu, E_p enerjisinden (p-üst enerji seviyesi) E_k enerjisine (k-alt enerji seviyesi) geçiş ile elde edilmektedir. Uyarılma sıcaklığı, uyarılmış seviyelerin nüfus yoğunluğunu hesaplamada kullanılan bir parametredir. Bu sıcaklık, ısı (LTE – Local Thermal Equilibrium) plazmalar için elektron sıcaklığına eşittir ve bu durumda Boltzmann dağılımı uygulanabilir [33].

Elektronlar ile diğer plazma parçacıkları arasındaki çarpışmalar, deşarj odasında artan basınçla artabilmektedir. Bu durum, aynı zamanda gaz akışındaki basınç ile uyarılma sıcaklığının da azalmasına neden olabilmektedir. Bu nedenle, elektron sıcaklığı da azalabilir. Bunun sonucunda, plazma ortamındaki yoğunluk, difüzyon süreçleri sebebiyle artacaktır. Bu yolla, düşük indüksiyon alanı sayesinde radyal olarak homojen deşarj ve post-deşarj elde edilebilir [33].

Düşük basınçta ısı dengede olmayan plazmalar ise ağır parçacıkların sıcaklığından daha yüksek değerlerdeki elektron sıcaklığı ile karakterize edilmektedir [34].

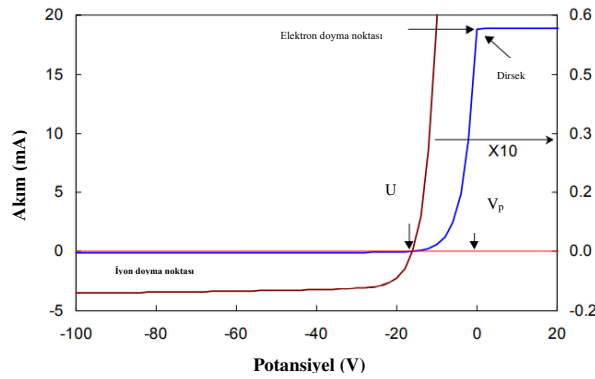
Isıl dengenin olmadığı şartlarda uyarılma sıcaklığı, elektron sıcaklığına eşit olarak kabul edilemez. Elektron sıcaklığı, uyarılma sıcaklığından çok daha büyüktür [35]. Isıl dengede olmayan (Non-LTE) plazmalar corona denge bölgesinde konumlandırılır. Isıl olmayan plazma şartlarına, etkin temel kuantum numarası kullanılarak karar verilir [33, 36, 37].

Optik emisyon spektrumundan alınan veriler, plazmanın çeşidine (LTE & Non-LTE) göre yapılacak hesaplamalarda kullanılmaktadır.

7.2. Langmuir Probu

Langmuir probu, plazmaların incelenmesinde, mevcut yöntemler arasında en kolayı olarak görülmektedir. Langmuir probu, temelde, plazma ortamının içine yerleştirilen iletken bir tel ile farklı voltajlarda, akımın ölçülmesine dayanır [38]. Bununla beraber, Langmuir probu yöntemi, müdahale edilemeyen bir tekniktir ve iletkenin tasarımı uygun şekilde yapılmalıdır. Plazma fiziğinde, soğuk plazmaların, yoğunluklarının, potansiyelinin ve elektron sıcaklığının ölçülmesinde yoğun olarak kullanılmaktadır [39]. Elde edilen I-V grafiklerinin yorumlanması konusunda, çok fazla teorik bilimsel çalışma olması sebebiyle zorluklar bulunmaktadır. Langmuir probunda, ölçümün alınmasında en önemli bölüm olan iletken telin, yayıcı prob, çift prob ve kapasitif prob gibi farklı varyasyonları mevcuttur [38, 39]. Bu farklı prob çeşitleri, farklı şartlarda elde edilen plazmaların incelenmesinde kullanılmaktadır. Langmuir probu ile plazma incelemeleri, RF kaynaklarla üretilen plazmaların yarıiletken aşındırma ve biriktirme çalışmalarında kullanılmaktadır [38].

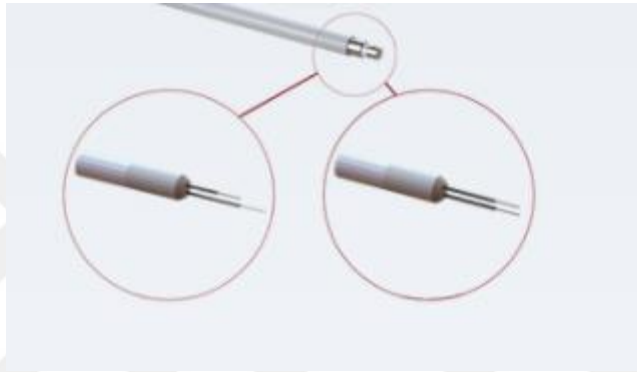
Plazma potansiyeli V_p ve proba uygulanan voltaj U olarak alınmış olsun. Langmuir probundan alınabilecek örnek bir grafik Şekil 7.2’de verilmiştir.



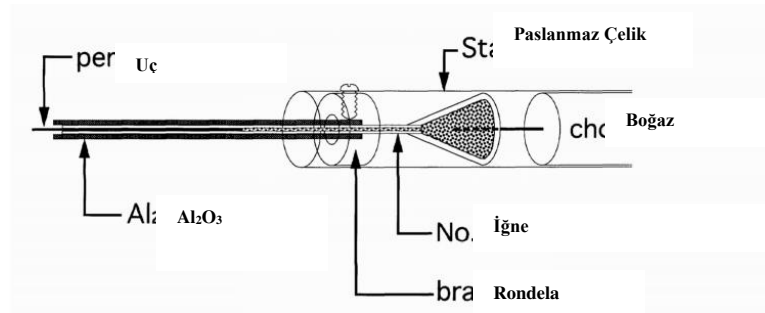
Şekil 7.2. İdeal I-V eğrisi soldaki eğri, belirgin olabilmesi açısından 10 kat büyütülmüştür.

Langmuir probunun tasarımın, çalışılacak sisteme uygun şekilde yapılması önemlidir. İletken tel, plazma ortamına sokulduğunda, zarar görmemeli, bununla beraber

plazmanın özelliklerinde değişikliğe sebep olmamalıdır. Böylece, doğru I-V verileri elde edilebilecektir. Langmuir probunun ucu, yüksek sıcaklığa dayanıklı olmalıdır. Genellikle tungstenden imal edilmektedir. Tungsten tele ait ϕ değerleri 0,1 – 1 mm aralığında değişmektedir. Tungsten tel, seramik tüp ile izole edilmektedir ve uzunluğu ise 2 – 10 mm aralığındadır. Bu tür Langmuir probu uçları, laboratuvarlarda üretilen soğuk plazmaların incelenmesinde sorunsuz olarak kullanılabilir. İzolasyon amacıyla kullanılan seramik tüpün kalınlığı, plazmanın dağılmasını önlemek amacıyla ince seçilmelidir. İletken tel, seramik tüpün tam ortasında bulunmalı ve seramik tüpe temas etmeyecek şekilde, plazma ortamında açıkta kalacak şekilde bulunmalıdır.



Şekil 7.3. Langmuir probunun (çift prob) uç gösterimi [Impedans Langmuir Probu].



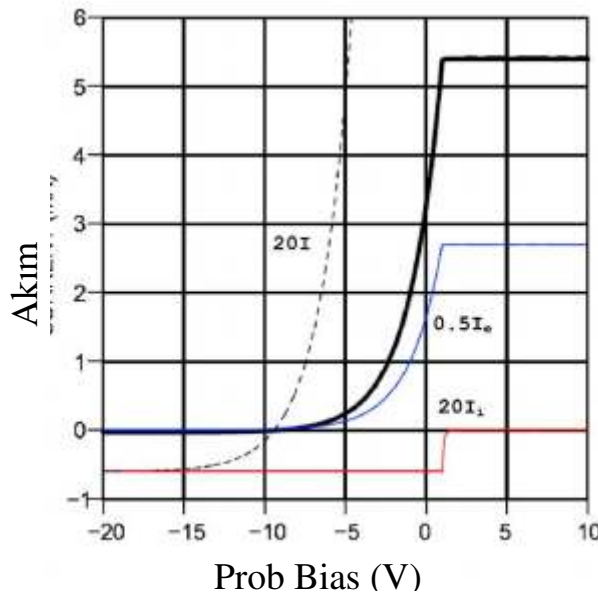
Şekil 7.4. Langmuir prob ucunun şematik gösterimi [Impedans Langmuir Probu].

Merlino yaptığı çalışmada, tipik bir laboratuvar plazması için ideal Langmuir prob voltaj-akım karakteristik değerlerini yayınlamıştır [39]. Bu değerler Tablo 7.1’de sunulmuştur.

Tablo 7.1. Tipik laboratuvar plazması için ideal Langmuir probu tasarımı plazma parametreleri.

Parametre	Sembol	Değer	Birim
İyon	Ar^+		
İyon kütlesi	m_i	$6,7 \times 10^{-26}$	Kg
Elektron yoğunluğu	n_e	$1,0 \times 10^{16}$	m^{-3}
İyon yoğunluğu	n_i	$1,0 \times 10^{16}$	m^{-3}
Elektron sıcaklığı	T_e	2,0	eV
İyon sıcaklığı	T_i	0,1	eV
Plazma potansiyeli	V_p	1,0	V
Prob çapı	d_{prob}	3,0	Mm

Tablo 7.1’de verilen değerler, argon deşarjında yapılan örnek bir çalışma içindir. Burada, prob kesit alanı $A_{prob} = 2\pi\left(\frac{d_{prob}}{2}\right)^2 = 1,41 \cdot 10^{-5} m^2$ şeklindedir. Bu çalışmada alınan I-V karakteristik grafiği Şekil 7.5’te verilmiştir [39].



Şekil 7.5. Tablo 7.1’de verileri paylaşılan, ideal Langmuir probu akım-voltaj karakteristiği [39].

İyon akım değerinin hesaplanmasında aşağıdaki denklem kullanılır

$$I(V_B) = I_e(V_B) + I_i(V_B) \quad (7.3)$$

Burada I , toplam akım; I_e , elektron akımı; I_i , iyon akımı; V_B , bias voltajı olarak tanımlanmaktadır [40].

Langmuir probundan alınan eğri grafikleri, elektron enerji dağılım fonksiyonu (EEDF) olarak, elektron sıcaklığı, elektron yoğunluğu ve iyon sıcaklığı gibi plazma parametreleri elde edilebilir [41]. Druyvesteyn’e göre, silindirik prob için I-V eğrisinin

ikinci türevi EEDF ile orantılıdır [42]. Ölçüm amacıyla EEDF kullanıldığında, n_e elektron yoğunluğu aşağıdaki denklem kullanılarak elde edilebilmektedir.

$$n_e = \int \varepsilon^{1/2} n(\varepsilon) d\varepsilon \quad (7.4)$$

Burada ε , eV cinsinden elektron enerjisi; $n(\varepsilon)$, $cm^{-1}eV^{-3/2}$ cinsinden EEDF için yoğunluktur. Bu fonksiyon Maxwellian olmayan bir fonksiyondur. Bu nedenle, aşağıdaki denklem yazılabilir.

$$n(\varepsilon) = n_e f(\varepsilon) = \frac{2I_e''}{eA} (2m_e)^{1/2} \quad (7.5)$$

Burada A, probun yüzey alanı; m_e , elektronun kütlesi; I_e'' , elektron akımının ikinci türevi ve $f(\varepsilon)$, normalize edilmiş EEDF olarak tanımlanır [43]. $f(\varepsilon)$, $\int_0^\infty f(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = 1$ denklemini kullanılarak, 1'e normalize edilmiştir. $f(\varepsilon)$, aşağıdaki gibi yazılabilir [41].

$$f(\varepsilon) = \frac{2\sqrt{2m_e}}{ne^3S} \frac{d^2I}{dV^2} \quad (7.6)$$

İyon yoğunluğu, I-V eğrisinin, iyon doyma parçasından elde edilir. İyon akımı, aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$I_i = \frac{Ae^{3/2}N}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{3T_e}{m_i}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{V-V_f}{T_e}\right)^{1/2} \quad (7.7)$$

Burada N, plazma yoğunluğu; m_i , iyon kütlesi ve T_e , elektron sıcaklığıdır. Plazma yoğunluğu, aşağıdaki denklemle bulunabilir [44].

$$\left(\frac{\partial I_i^2}{\partial V}\right) = -\frac{3A^2e^3N_i^2}{4\pi m_i} \quad (7.8)$$

Langmuir probunun verileri kullanıldığında, elektron sıcaklığı, I-V grafiğinden alınabilir. Elektronlar, Boltzmann dağılımındaysa, eğrinin elektron geciktirme kısmı elektron sıcaklığının hesaplanmasında kullanılabilir. Eğrinin, yarı logaritmik grafiği elektron sıcaklığını temsil eder [45, 46]. Bu nedenle, I_e aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$I_e = Ane \left(\frac{KT_e}{2\pi}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{eV}{KT_e}\right] \quad (7.9)$$

7.3. RF Güç Kaynağı

Plazma, maddenin dördüncü hali olarak kabul edildiğinde, özetle, maddenin gaz haline enerji verilerek elde edilmektedir. Bunun için farklı yöntemler kullanılmaktadır. Genellikle, elektriksel enerji akışı sağlanarak plazma elde edilmektedir. Kullanılan güç

kaynakları arasında, DC (doğru akım), AC (alternatif akım), RF (radyo-frekans) ve MW (mikro dalga) güç kaynakları yer almaktadır [38, 47, 48, 49].

Bu çalışmada kullanılan güç kaynağı RF olarak seçilmiştir. Düşük basınçta yapılan ve Langmuir probunun kullanıldığı birçok çalışmada da RF güç kaynağı tercih edilmektedir. RF güç kaynağı ile hem kapasitif hem de indüktif yöntemlerle plazma, laboratuvar ortamında kolaylıkla elde edilebilmektedir ve Langmuir probu ile yapılan çalışmalarda genellikle RF güç kaynağı seçilmektedir. Bunun nedeni olarak hem kapasitif hem de indüktif sistemlerle sorunsuz çalışması gösterilebilir.

Literatürde yoğun olarak 13,56 MHz frekansa sahip RF güç kaynakları kullanılsa da 27,12 MHz güç kaynakları da tercih edilebilmektedir.

7.4. Plazmalarda Post-Deşarj Bölgesi

Plazmalar, temeldedeşarj ve post-deşarj bölgelerinden oluşur. Deşarj bölgesi, elektrik ve manyetik alanın yoğun olduğu ve bu sebeple iyonlaşmanın görece daha fazla gerçekleştiği, bunun sonucu olarak da parçacık yoğunluğunun daha yüksek olduğu bölgedir. Post-deşarj bölgesi ise elektrik ve manyetik alanın,deşarj bölgesine kıyasla daha zayıf olduğu ve bu nedenle iyonlaşma miktarının azalmasıyla, parçacık yoğunluğunun da azaldığı bölgedir. Adından da anlaşılacağı gibi post-deşarj bölgesi,deşarj sonrası bölgedir. Post-deşarj plazma bölgesi,deşarj bölgesinden uzakta ancakdeşarj odasının bir parçası olarak,deşarj bölgesi ile temasta olan bir bölge olarak özetlenebilir [50].

Post-deşarj plazmalar hem düşük basınçta hem de atmosferik basınçta, dekontaminasyon, tıp ve yarıiletken teknolojilerinde kullanılmaktadır [47, 50, 51, 52].

8. DENEYSEL SONUÇLAR

8.1. OES ile Yapılan Çalışmaların Sonuçları

Bu çalışmada, anlaşılır olması açısından argonun yapısına ait Paschen notasyonu kullanılmıştır. Nötr argon atomuna ait dizilim Tablo 8.1’de verilmiştir.

Tablo 8.1. Argonun yapısına ait Paschen gösterimi.

Paschen gösterimi	Seviye	J	Enerji (eV)
Temel durum	$3p^6S_0$	0	0,0
$1s_5$	$4s[3/2]_2^3P_2$	2	11,55
$1s_4$	$4s[3/2]_1^3P_1$	1	11,62
$1s_3$	$4s'[1/2]_0^3P_0$	0	11,72
$1s_2$	$4s'[1/2]_1^1P_1$	1	11,83
$2p_{10}$	$4p[1/2]_1^3S_1$	1	12,91
$2p_9$	$4p[5/2]_3^3D_3$	3	13,08
$2p_8$	$4p[5/2]_2^3D_2$	2	13,09
$2p_7$	$4p[3/2]_1^3D_1$	1	13,15
$2p_6$	$4p[3/2]_2^3P_2$	2	13,17
$2p_5$	$4p[1/2]_0^3P_0$	0	13,27
$2p_4$	$4p'[3/2]_1^1P_1$	1	13,28
$2p_3$	$4p'[3/2]_2^1D_2$	2	13,30
$2p_2$	$4p'[1/2]_1^3P_1$	1	13,33
$2p_1$	$4p'[1/2]_0^1S_1$	0	13,48

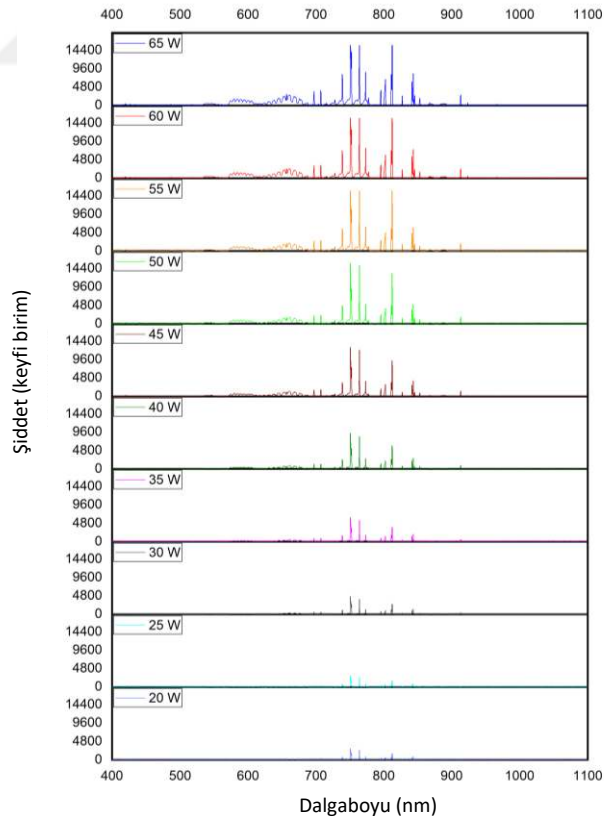
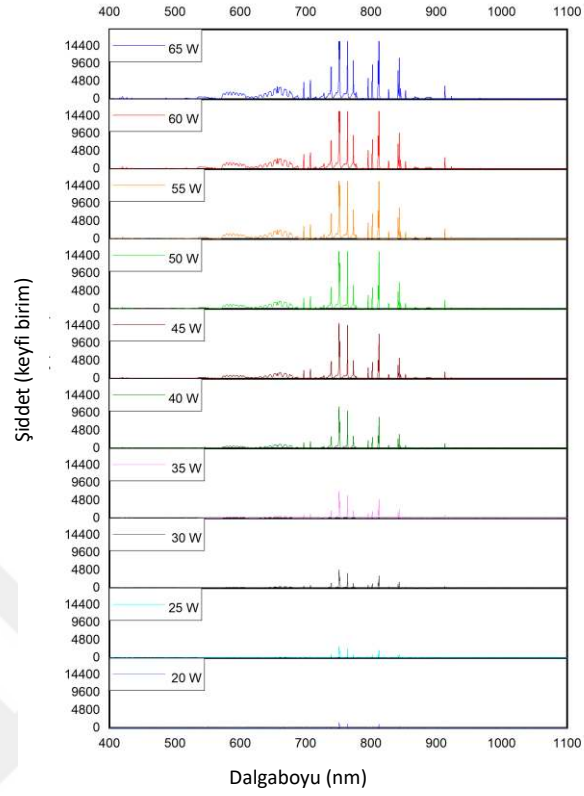
Paschen gösterimi, enerji durumlarının farklı gruplarının gösterimi için kullanılan geleneksel bir yöntemdir. Argon gazı için 4s enerji seviyesi ile başlar ve Paschen gösterimi 1s olarak gösterilmektedir. 4p enerji seviyesi için 2p gösterimi, 5p seviyesi için de 3p gösterimi kullanılmaktadır. Paschen gösterimi, soygazın birinci uyarılmış seviyesinden saymaya başlayarak ilerleme mantığına dayanır. Bu durum, soygazların birbiri ile daha kolay şekilde karşılaştırılmasını sağlar. Gösterimde kullanılan harften sonra gelen 1 ile 10 arasındaki rakam ise potansiyel enerjiyi tanımlamaktadır. Örneğin, $2p_{10}$ gösterimi 4p seviyesindeki en düşük enerji seviyesini, $2p_1$ gösterimi 4p seviyesindeki en yüksek enerji seviyesini tanımlamaktadır. Argonun 4s yarı-kararlı

durumu için $1s_2$ ile $1s_5$ arasında bir gösterim yapılmaktadır. Burada $1s_2$ en düşük enerji seviyesini $1s_5$ ise en yüksek enerji seviyesini göstermektedir.

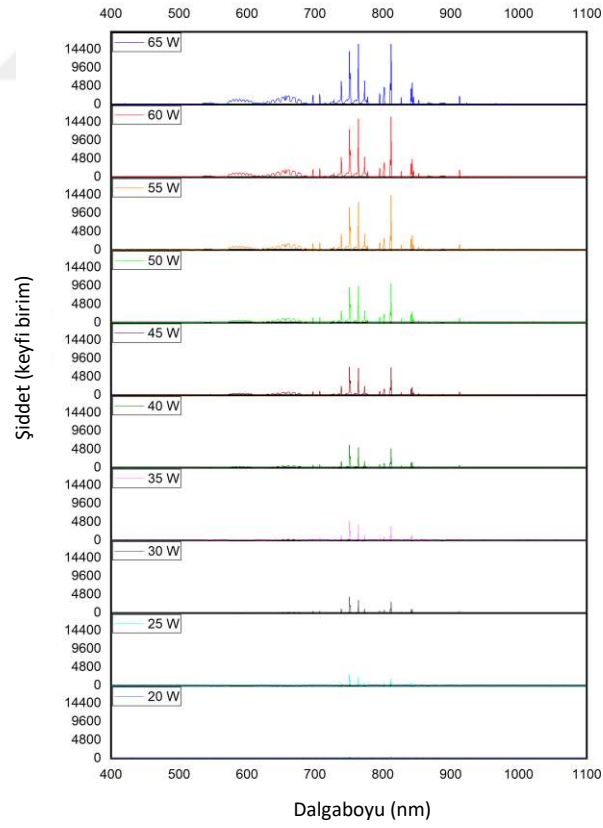
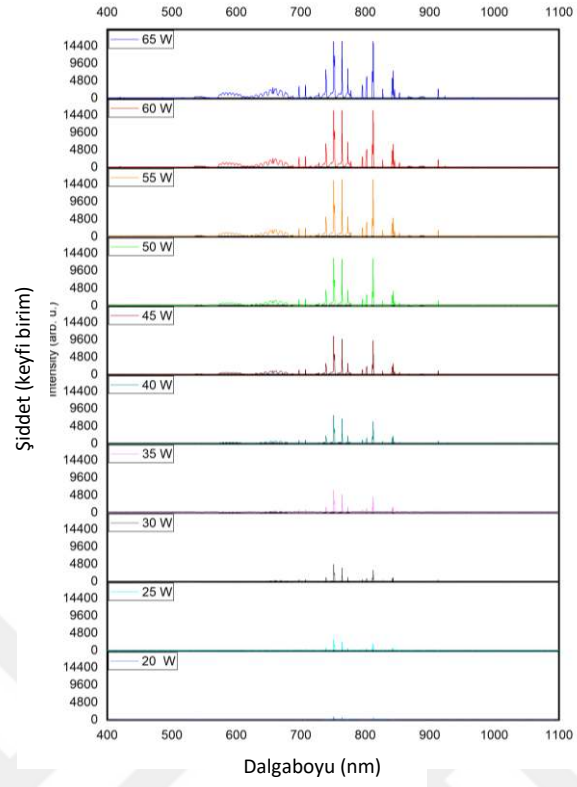
İlk uyarılmış seviye olan $1s$ seviyesi, $J=1$ ($1s_2$ ve $1s_4$) değerini karşılar ve çok hızlı bir şekilde temel duruma ($J=0$) bozunur. Radyatif yaşam ömrü 1,96 ns ve 8,4 ns değerindedir [53]. Bu seviyeler, rezonans seviyeler olarak isimlendirilmektedir. $J=2$ ($1s_5$) ve $J=0$ ($1s_3$) değerindeki en düşük seviyelerden optik geçişler, elektrik dipol yasaklı seviyelerdir ve bu durum bahsedilen bu seviyelerin kararlı olmayan seviyeler olmasına sebep olur. Argon plazmasından yayınlanan enerji, genellikle 2 uyarılmış dizilim tarafından oluşmaktadır ve bu seviyeler $4p$ ve $4s$ seviyeleridir [53]. $4p$ uyarılmış argon seviyelerinin (Paschen notasyonunda $2p_1-2p_{10}$) yoğunluğu çoğunlukla taban enerji seviyesindeki argon atomları ve yarı kararlı seviyelerdeki (Paschen notasyonunda $1s_3$ ve $1s_5$) atomları ile elektron çarpışması ile oluşur. Daha yüksek uyarılmış durumlardan ($3d$, $5s$, $4d$ ve $6s$) da kademeli olarak $4p$ seviyeleri nüfus yoğunluğuna katkıda bulunur. $4p$ 'den nüfus azaltma süreçleri $4s$ (Paschen notasyonunda $1s_2-1s_5$) durumlarına bozunma ışımayla temsil edilmektedir [54]. Plazmanın karakterizasyonu için hem üst ($4s$) hem alt enerji seviyelerindeki ($4p$) nüfus yoğunluğunun hesaplanması gerekmektedir. Üst enerji seviyelerindeki nüfus yoğunluğu, belirli dalgaboylarında yayınlanan ışık şiddetleriyle elde edilebilmektedir [55]. Argonun yarı kararlı $1s_5$ ve $1s_4$ seviyelerindeki nüfus yoğunluğunun hesaplanmasında, p seviyelerindeki nüfus yoğunluğu oranı kullanılabilir.

Bu çalışmanın deneysel aşamalarında, argon gazına ait ısı olmayan soğuk plazmanın, vakum pompasına yakın bölgede, farklı noktalardan OES verileri alınmıştır. Burada amaç, daha önce yapılan dallanma kesri hesaplamalarının, plazmaya ait farklı bölgelerde de geçerli olup olamayacağının araştırılmasıdır. Sonuçların doğru şekilde incelenebilmesi için, elde edilen plazmaya ait elektrotlar arasındaki deşarj bölgesinden de OES verileri alınmış ve dallanma kesri için hesaplamalar yapılmıştır. Elde edilen OES verilerine ait grafikler Şekil 8.1'de sunulmuştur.

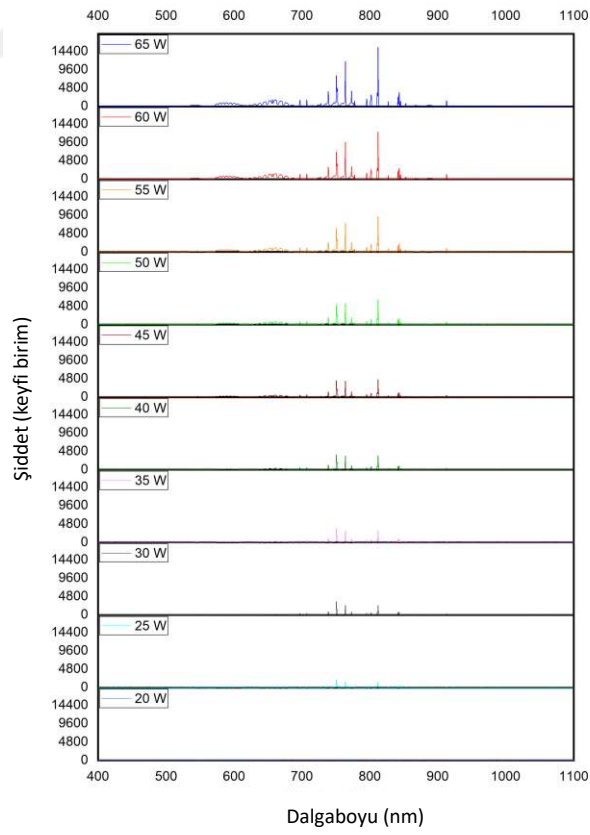
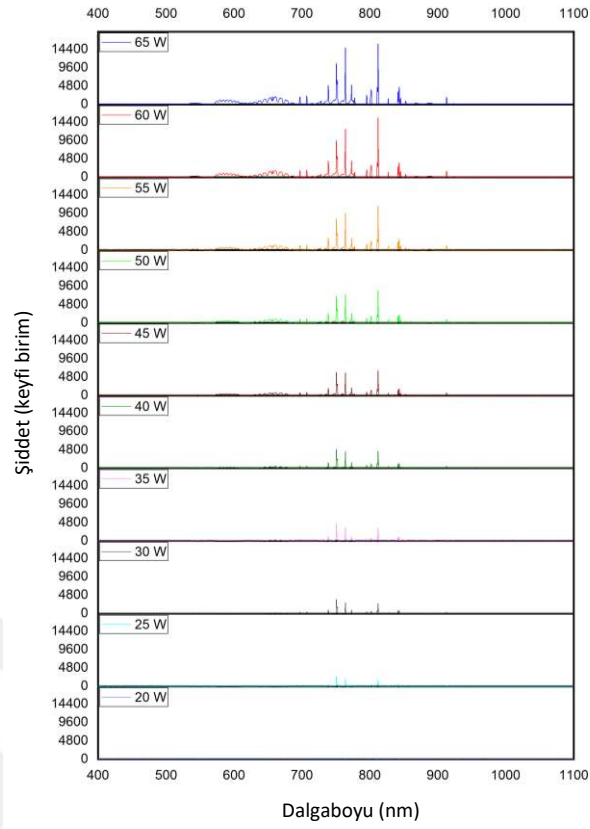
Elde edilen OES grafiklerindeki göreceli şiddetlerin, güç ile beraber arttığı gözlenmiştir. Gaz akış oranındaki değişim ise göreceli şiddetlerin aynı RF giriş güç değerlerinde benzer olduğu gözlenmiştir. Bu veriler, daha sonra elektron sıcaklığı ve elektron yoğunluğu hesaplamalarında kullanılmıştır.



Şekil 8.1. Argon deşarjının vakum bölgesinden, sırasıyla 0,01; 0,02; 0,03; 0,04; 0,05 ve 0,06 l/dk gaz akış oranları için alınan OES grafikleri.



Şekil 8.1. (Devam) Argon deşarjının vakum bölgesinden, sırasıyla 0,01; 0,02; 0,03; 0,04; 0,05 ve 0,06 l/dk gaz akış oranları için alınan OES grafikleri.



Şekil 8.1. (Devam) Argon deşarjının vakum bölgesinden, sırasıyla 0,01; 0,02; 0,03; 0,04; 0,05 ve 0,06 l/dk gaz akış oranları için alınan OES grafikleri.

8.2. OES Dallanma Kesri

Plazma için dallanma kesri hesaplamalarında OES yöntemi literatürde geniş çaplı olarak kullanılmaktadır. Bu çalışmada da plazmaya ait farklı bölgelerden alınan OES verileri ile dallanma kesrine ait hesaplamalar yapılmıştır. Argonun ilk 4 uyarılmış seviyesi, yarı-kararlı seviyeleri $1s_5$ ve $1s_3$ ile rezonans seviyeleri $1s_4$ ve $1s_2$ için dallanma kesri hesaplamaları literatürde mevcuttur [56]. i seviyesinden j seviyesine geçiş yapan fotonların ölçülen görelî ortalama ışık şiddeti oranı Φ_{ij} Denklem 8.1'deki gibi hesaplanmaktadır.

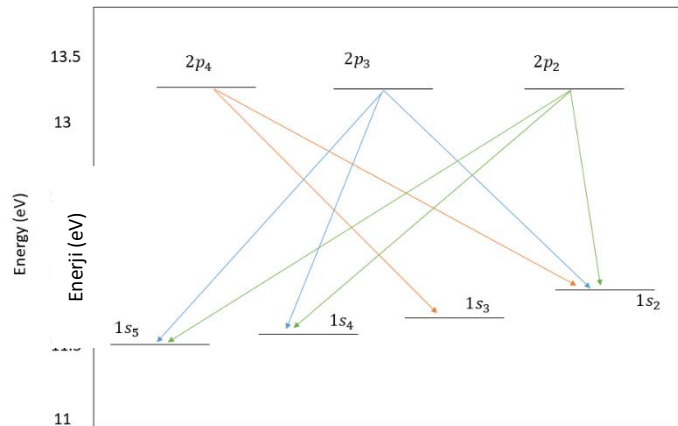
$$\Phi_{ij} = cn_i \gamma_{ij} A_{ij} \quad (8.1)$$

$$c = \int_r G dV \quad (8.2)$$

Burada c düzeltme katsayısı, n_i ortalama üst seviye yoğunluğu, γ_{ij} kaçış katsayısı, A_{ij} ise Einstein katsayısıdır. c katsayısı, geometri katsayısı G üzerinden bir integral ile tanımlanır. V , plazmanın gözlenen hacmi ve r görelî uzaklıktır. Dallanma fonksiyonu hesaplanırken, üst enerji seviyesinden geçişlerin oranına bakıldığından c katsayısı sadeleşmiş olur [3].

$$\frac{\Phi_{ij}}{\Phi_{ik}} = \frac{\gamma_{ij} A_{ij}}{\gamma_{ik} A_{ik}} \quad (8.3)$$

Paschen gösterimine göre $2p_x$ üst enerji seviyesinden, $1s_x$ alt enerji seviyesine geçişler için kurulan denklem, argonun ilk 4 enerji seviyesinin yoğunluğuna bağlıdır [3]. Şekil 8.2'de enerji geçişlerine ait diyagram sunulmuştur.



Şekil 8.2. Argon atomunun enerji geçiş diyagramı.

Dallanma kesri, enerji geçişlerinde yaşam ömrünün hesaplanmasında da ihtiyaç duyulan sonuçları vermektedir. Einstein katsayısı, uyarılma enerjisi ve spektral çizgilerin

enerji seviyeleri NIST veri tabanından elde edilebilen değerlerdir. Dallanma kesri (Γ_{ij}) değerleri NIST veri tabanından alınan verilerle hesaplanmıştır. Bu veriler, radyasyon tuzaklama limitinin olmadığı değerlere karşılık gelir. Γ_{ij} değeri, teorik olarak aşağıdaki denklem ile hesaplanabilir [57].

$$\Gamma_{ij} = \frac{A_{ij}}{\sum_l A_{il}} \quad (8.4)$$

Dallanma kesri, deneysel olarak elde edilen optik emisyon spektral çizgilerinin şiddet değerleri kullanılarak, aşağıdaki denklem ile hesaplanabilir [57].

$$\Gamma_{ij}^{deneyse} = \frac{\Phi_{ij}}{\sum_l \Phi_{il}} \quad (8.5)$$

Burada $\Gamma_{ij}^{deneyse}$; deneysel verilerden elde edilen dallanma kesrini ve $\sum_l \Phi_{il}$; aynı alt enerji seviyesine geçişe ait tüm dalgalıboylarının şiddetlerinin toplamını göstermektedir.

Dallanma kesri, yalnızca Einstein katsayısına ve foton emilimine bağılıdır. NIST veritabanında yer alan Einstein katsayıları, Denklem 8.4'te kullanılarak teorik dallanma kesri değeri hesaplanmıştır. OES ölçüm sonuçlarından elde edilen spektral çizgi şiddet değeri kullanılarak deneysel dallanma kesri hesaplanmıştır. OES ölçüm verilerinden hesaplanan değeri ile NIST verileri kullanılarak hesaplanan veriler arasında, radyasyon tuzaklama sebebiyle farklılıklar oluşabilmektedir. Bununla beraber, optik emisyon spektrometresinin çözünürlüğü de dalgalıboylarında kaymalara neden olabilmektedir [3, 57]. Dallanma kesri hesaplamaları ile parçacıkların yaşam ömürleri hakkında fikir sahibi olunabilmektedir. Denklem 8.6'da gösterildiği gibi Einstein katsayısının, ışımalı yaşam ömrünün τ tersi ile orantılı olduğu görülebilmektedir [58].

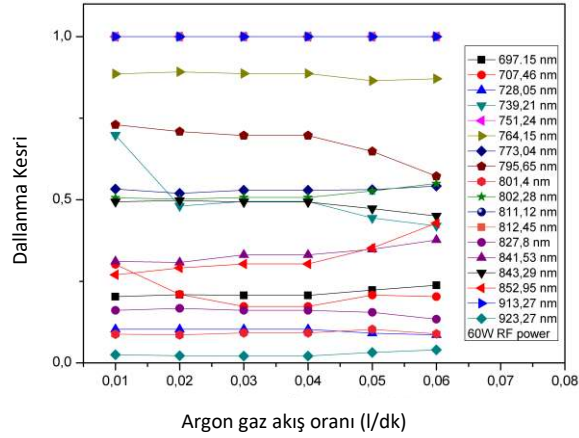
$$A_{ji} = \left(\frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \right) B_{ji} \equiv 1/\tau_{ji} \quad (8.6)$$

Argon için farklı enerji geçişleri için farklı akış oranlarında dallanma kesirleri, Tablo 8.2'de sunulmuştur.

Tablo 8.2. 60W RF güç değerinde, mekaniksel zorlamalı elde edilen argon deşarj bölgesi için farklı gaz akış oranlarında, hesaplanan ve ölçülen dallanma kesir değerleri.

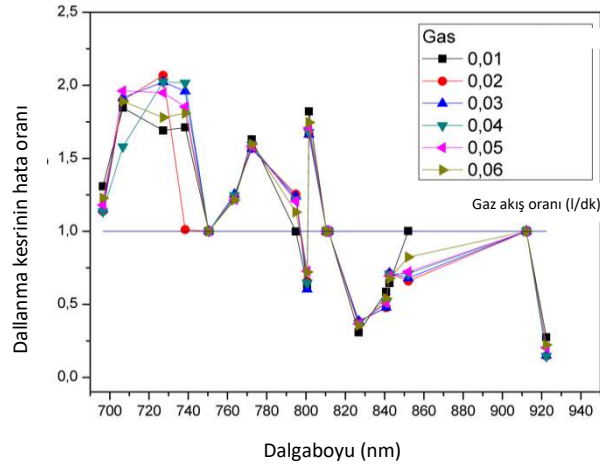
Geçişler	Dalga Boyu (nm) (NIST)	Dalga Boyu (nm) (DeneySEL)	Γ_{ij}	Akış Oranı (l/dk)					
				0,01	0,02	0,03	0,04	0,05	0,06
				Γ_{ij}					
1s ⁵ - 2p ²	696,5	697,15	0,182	0,238	0,223	0,207	0,207	0,209	0,203
1s ⁵ - 2p ³	706,7	707,46	0,110	0,203	0,208	0,173	0,173	0,210	0,302
1s ⁴ - 2p ²	727,23	728,05	0,051	0,086	0,091	0,103	0,103	0,103	0,103
1s ⁴ - 2p ³	738,4	739,21	0,246	0,420	0,444	0,495	0,495	0,481	0,698
1s ² - 2p ¹	750,4	751,24	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
1s ⁵ - 2p ³	763,5	764,15	0,712	0,871	0,865	0,887	0,887	0,892	0,886
1s ⁵ - 2p ⁷	772,4	773,04	0,332	0,542	0,531	0,529	0,529	0,520	0,533
1s ³ - 2p ⁴	794,8	795,65	0,572	0,572	0,648	0,697	0,697	0,709	0,730
1s ⁴ - 2p ⁶	800,6	801,4	0,142	0,089	0,103	0,092	0,092	0,086	0,088
1s ⁵ - 2p ⁸	801,5	802,28	0,302	0,550	0,527	0,507	0,507	0,502	0,506
1s ⁴ - 2p ⁷	810,4	811,12	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
1s ⁵ - 2p ⁹	811,5	812,45	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
1s ² - 2p ²	826,8	827,8	0,435	0,134	0,155	0,161	0,161	0,167	0,161
1s ² - 2p ³	840,8	841,53	0,645	0,377	0,348	0,331	0,331	0,308	0,311
1s ² - 2p ⁴	842,5	843,29	0,698	0,450	0,473	0,493	0,493	0,498	0,494
1s ⁵ - 2p ¹⁰	852,1	852,95	0,428	0,428	0,352	0,303	0,303	0,291	0,270
1s ² - 2p ⁶	912,3	913,27	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
1s ² - 2p ⁴	922,4	923,27	0,145	0,040	0,032	0,021	0,021	0,022	0,025

Buradan hareketle, deney sonuçlarında dallanma kesrinde değişiklik olup olmadığına bakılmıştır. 60W RF güç değerinde, 0,01; 0,02, 0,03; 0,04; 0,05 ve 0,06 l/dk gaz akış oranlarında, belirlenen dalgaboyları için dallanma kesirleri hesaplanmış ve gaz akış oranına göre değişimleri, tablodaki veriler kullanılarak görselleştirilebilmesi amacıyla grafik üzerinde de incelenmiş ve Şekil 8.3'te gösterilmiştir.



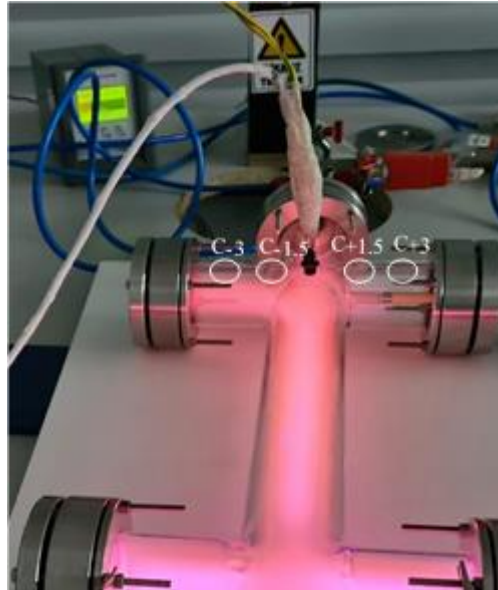
Şekil 8.3. 60W sabit RF giriş gücünde, gaz akış oranına karşılık dallanma kesrinin değişimini gösteren grafik.

Yapılan OES ölçümlerine göre Denklem 8.5 kullanılarak hesaplanan dallanma kesri değerleri, Denklem 8.4 kullanılarak hesaplanan verilere göre değerlendirilmiştir. Burada, NIST veritabanında sunulan Einstein katsayıları ile teorik olarak hesaplanan dallanma kesrinin, deneysel verilerden elde edilen OES çizgi şiddetleriyle hesaplanan dallanma kesri ile uyumluluğunun belirlenmesi amaçlanmıştır. Hata oranı, Einstein katsayısı ile yapılan hesaplamalara göre değerlendirilmiştir. Buna göre çizilen grafikte “1” değeri Einstein katsayısı ile yapılan hesaplamaları, diğer çizgiler deneysel verilerden elde edilen OES çizgi şiddetleri ile hesaplanan değerlerdeki sapma oranını göstermektedir. Gaz akış oranının artmasıyla sapma miktarının açıkça azaldığı gözlenmiştir. Özellikle 0,05 ve 0,06 l/dk gaz akış oranlarında hata oranı belirgin miktarda azalmaktadır. Denklem 8.1’den görülebileceği gibi ışık şiddeti ile Einstein katsayısı doğru orantılıdır. NIST veritabanından alınan Einstein katsayıları ile yapılan hesaplamaların, deneysel OES çizgi şiddetleri kullanılarak yapılan hesaplamalar ile uyumlu olması için çizgi şiddetlerinin de Einstein katsayıları ile orantılı olması beklenmektedir. Artan gaz akış oranı ile azalan OES çizgi şiddetleri, Einstein katsayıları ile orantılı değerler vermektedir. Bu nedenle, deneysel veriler bu çalışma için basıncın yükselmesi ile daha doğru sonuçlar vermektedir. Buradan, Denklem 8.5’te kullanılan ve bu çalışmada hesaplamaların yapıldığı yöntemin çok düşük basınçlarda hatalı sonuçlar verebileceği kanısına varılabilir.

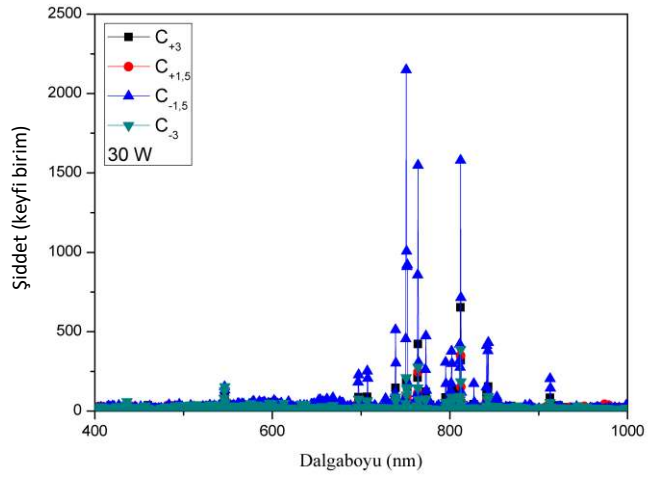
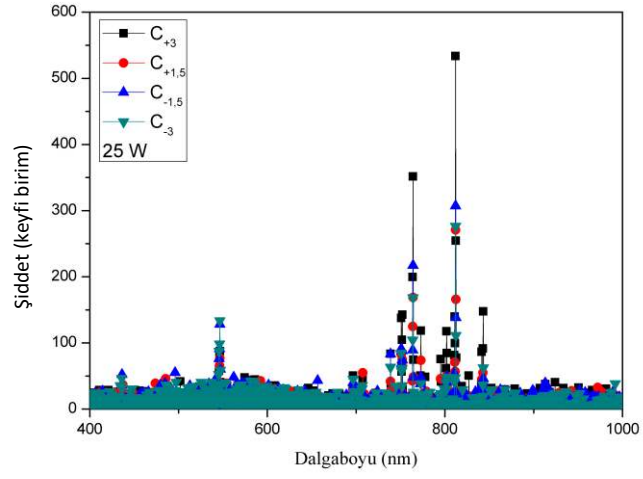
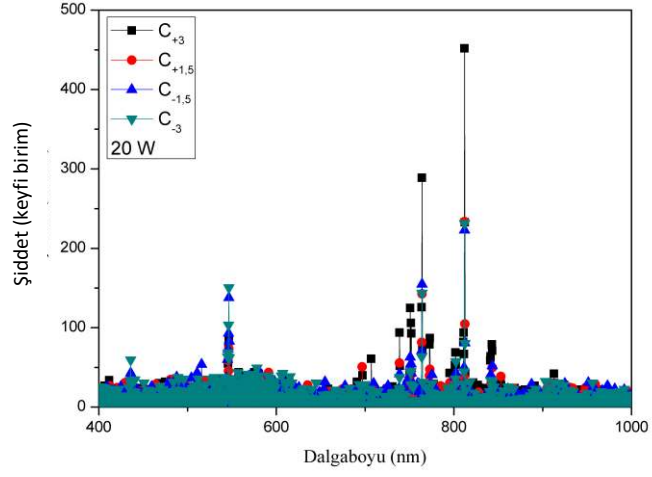


Şekil 8.4. 60 W sabit RF güç değerinde, değişen gaz akış oranlarına göre dallanma kesrinin değişimi.

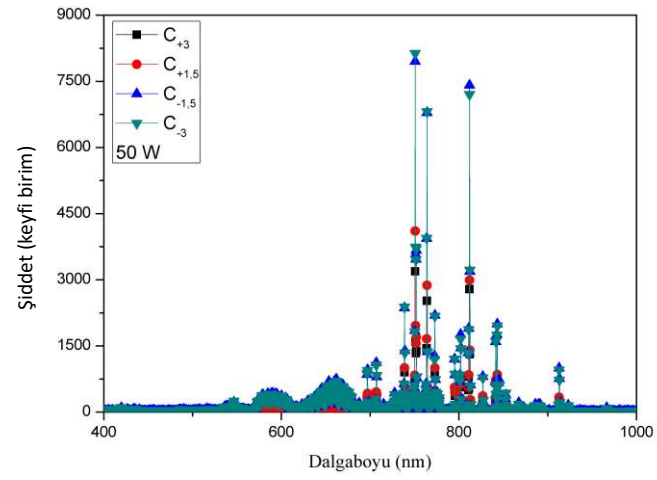
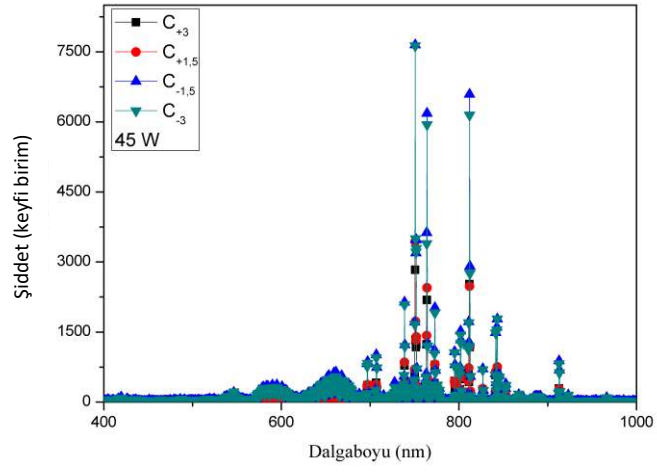
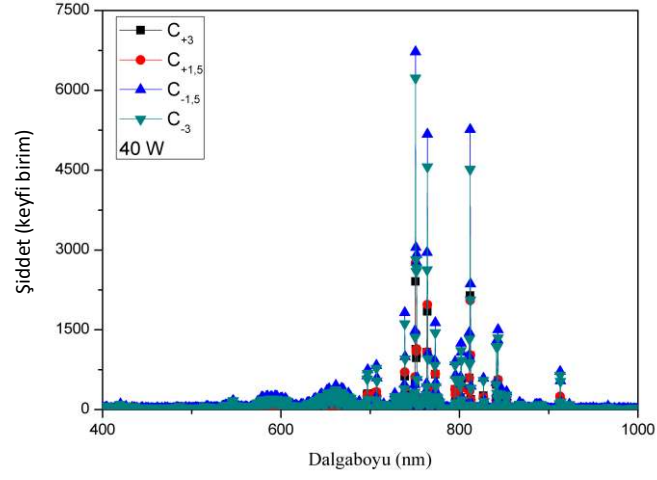
Deşarj odasının, vakum bölgesine yakın kısmında bulunan kolları boyunca da sabit 0,06 l/dk gaz akış oranında, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, 55, 60 ve 65 W RF güç değerlerinde OES verileri alınmıştır ve grafikler Şekil 8.4'te sunulmuştur. Düşük RF güç değerlerinde, RF elektrotunun bulunduğu kola yaklaştıkça OES çizgi şiddetlerinin arttığı ancak artan RF güç değeriyle çizgi şiddetlerinin tüm noktalarda birbirine yaklaştığı gözlenmiştir. Bu çalışmada orta nokta merkez kabul edilerek (C_0); 1,5 ve 3 cm sağından ve solundan 4 farklı nokta seçilmiş ve bu noktalardan OES verileri alınmıştır. C_{+3} ; merkezden 3 cm sağdaki noktayı, $C_{+1,5}$; merkezden 1,5 cm sağdaki noktayı, negatif noktalar ise soldaki noktaları temsil etmektedir. Ölçüm alınan noktalar Şekil 8.5'te ve bu ölçümlerden elde edilen OES grafikleri Şekil 8.6'da sunulmuştur.



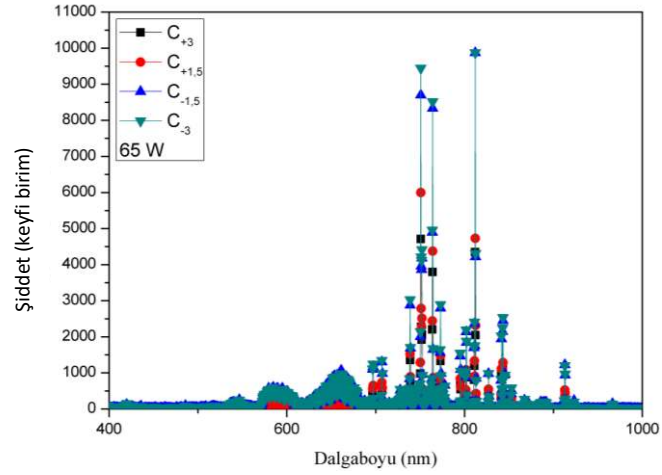
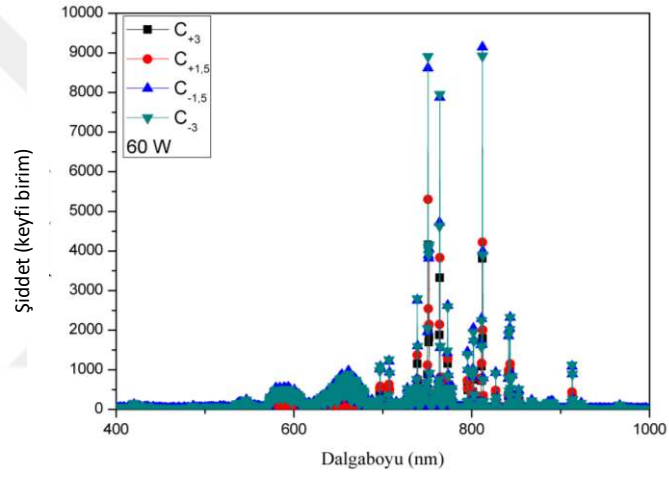
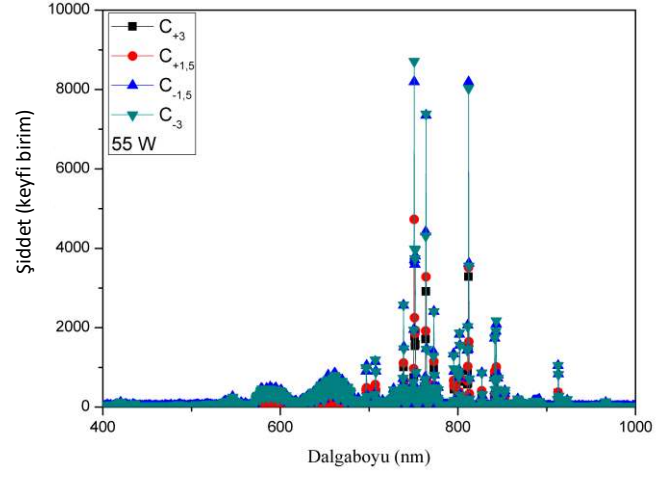
Şekil 8.5. Vakuma yakın bölgeden yatay kol boyunca OES alınan noktalar.



Şekil 8.6. Vakum bölgesi yakınında, 0,06 l/dk sabit gaz akış oranında, sırasıyla; 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, 55, 60 ve 65 W RF güç değerleri için kol boyunca alınan OES verileri.



Şekil 8.6. (Devam) Vakum bölgesi yakınında, 0,06 l/dk sabit gaz akış oranında, sırasıyla; 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, 55, 60 ve 65 W RF güç değerleri için kol boyunca alınan OES verileri.



Şekil 8.6. (Devam) Vakum bölgesi yakınında, 0,06 l/dk sabit gaz akış oranında, sırasıyla; 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, 55, 60 ve 65 W RF güç değerleri için kol boyunca alınan OES verileri.

Elde edilen bu optik emisyon spektrumlarından görüleceği üzere, mekaniksel zorlamalı deşarj bölgesinde, deşarj odasına ait kol üzerinde farklı noktalarda ışık şiddeti değişkenlik göstermektedir. Merkezdeki noktadan uzaklaştıkça, ışık şiddeti azalmaktadır.

Bu da elektron sıcaklığı ve elektron yoğunluğu değerlerini değiştirmektedir. Buradan, deşarjın oda içerisinde yayılımının merkezden farklı olduğu anlaşılmaktadır.

8.3. Langmuir Probu Ölçümleri

Deney sistemi üzerinde Langmuir probu, Şekil 8.1’de gösterildiği gibi bağlanmıştır ki böylece Langmuir probu ile verilerin alındığı noktanın, uyumluluk açısından OES ile verilerin alındığı nokta ile aynı olması sağlanmıştır. Langmuir ve OES ölçümleri ayrı olarak alınmış ve sistemlerin birbirlerinden etkilenmemesi sağlanmıştır. Langmuir probu ile alınan verilerden elde edilen elektron yoğunluğu değerlerinin, farklı RF güç değerlerindeki değişimi Tablo 8.3’te sunulmuştur.

Tablo 8.3. Mekaniksel zorlamalı deşarj bölgesinden alınan Langmuir probu ölçümlerine göre sabit akışta (0,06 l/dk) RF güç değerine göre elektron yoğunluğunun değişimi.

RF güç değeri (W)	Elektron yoğunluğu (m^{-3})
40	$1,42.10^{16}$
50	$1,70.10^{16}$
60	$1,97.10^{16}$

Buradaki değerler ile yapılan hesaplamalardan görülebileceği gibi RF güç oranında gerçekleşen %25’lik artışa karşılık elektron yoğunluğunda ortalama %14’lük bir artış gerçekleşmiştir. Elektron yoğunluğu, elektron sıcaklığının bir alt fonksiyonudur. Bu nedenle elektron yoğunluğu, elektron sıcaklığına göre daha yavaş artmakta veya azalmaktadır. Elektron sıcaklığının, elektron yoğunluğuna göre daha yavaş değişim gösterdiğine dair çalışmayı daha önce Comparo ve Fathi çalışmalarında göstermişlerdir [59]. Uygulanan RF gücüne karşılık elektron sıcaklığından değişim Tablo 8.4’te sunulmuştur.

Tablo 8.4. Mekaniksel zorlamalı deşarj bölgesinden alınan Langmuir probu ölçümlerine göre sabit akışta (0,06 l/dk) RF güç değerine göre elektron sıcaklığı değişimi.

RF güç değeri (W)	Elektron sıcaklığı (eV)
40	5,99
50	5,93
60	5,76

Tablo 8.4’te yer alan elektron sıcaklığına bakıldığında ise RF güç değeri ile az da olsa azalma gösterdiği görülmektedir. Uygulanan RF gücü, deşarjdaki parçacıkların enerjilerinin artmasına sebep olmaktadır. Bu nedenle, RF kaynağının elektrik alanından kaynaklı iyonlaşma ve uyarılmalar nedeniyle birçok yeni parçacık oluşmaktadır. Artan RF gücüyle beraber, çarpışma frekansı da artmaktadır. Elektronların enerjisi, deşarj

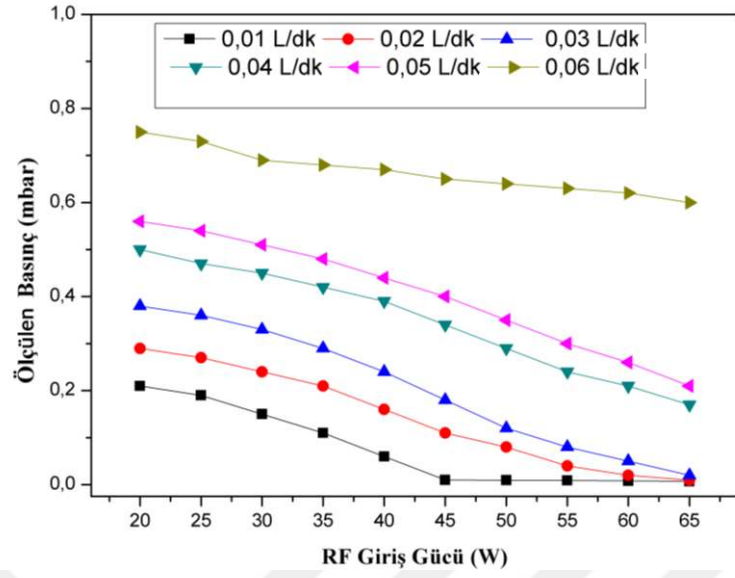
içerisindeki diğer parçacıklara aktarılır. Çarpışma frekansındaki artış, enerji kayıplarını da artırmaktadır. Buna karşılık, elektron sıcaklığı, uygulanan RF gücü ile ters orantılıdır. Artan parçacık sayısı, elektron sıcaklığını düşürmektedir. Daha önce helyum/oksijen karışım ve argon gazına ait düşük basınç deşarjlarında da bu durum gözlenmiştir [57, 60]. Bu çalışmada, artan RF gücü ile sistemin basıncının da düştüğü gözlenmiştir. Bu durumda, basıncın azalmasıyla elektron sıcaklığının da azaldığı söylenebilir. Bu değişimi gösteren grafik Şekil 8.7’de sunulmuştur.

Argon gazına ait deşarjın oluşturulmasında 6 farklı gaz akış oranı seçilmiştir. 0,01; 0,02; 0,03; 0,04; 0,05 ve 0,06 l/dk gaz akış oranları kullanılarak; 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, 55, 60 ve 65 W RF güç değerlerinde argon deşarjı oluşturulmuştur. Her bir çalışma için toplamda 60 adet optik emisyon spektrumu alınmıştır. Farklı gaz akış oranları ve farklı RF güç değerleri için ölçülen basınçlar Tablo 8.5’te sunulmuştur.

Tablo 8.5. Farklı gaz akış oranları ve farklı RF güç değerleri için ölçülen basınç değerlerinin değişimi.

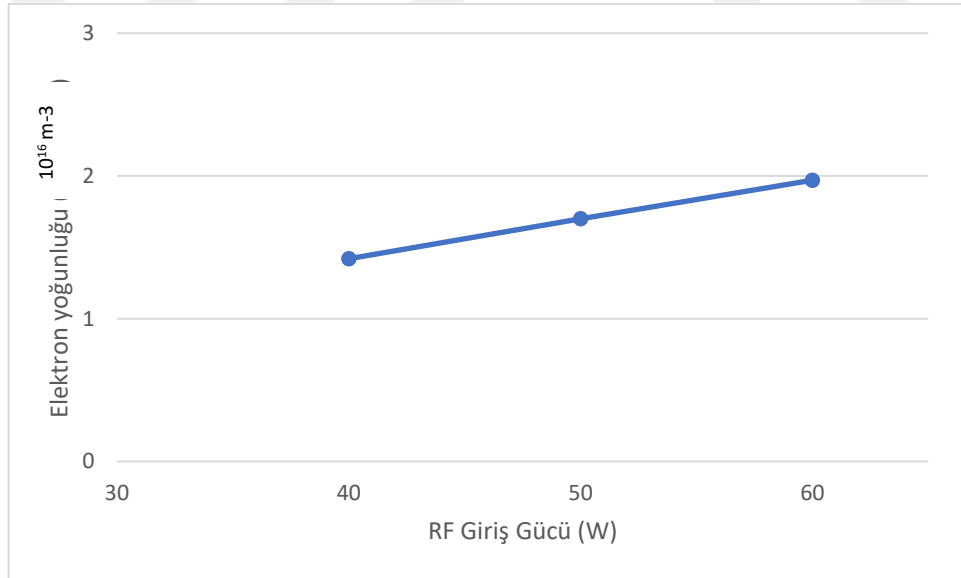
RF Giriş Gücü (W)	Gaz Basıncı (mbar)					
	0,01 l/dk	0,02 l/dk	0,03 l/dk	0,04 l/dk	0,05 l/dk	0,06 l/dk
20	0,21	0,29	0,38	0,5	0,56	0,75
25	0,19	0,27	0,36	0,47	0,54	0,73
30	0,15	0,24	0,33	0,45	0,51	0,69
35	0,11	0,21	0,29	0,42	0,48	0,68
40	0,038	0,16	0,24	0,39	0,44	0,67
45	0,034	0,072	0,18	0,34	0,4	0,65
50	-	0,068	0,081	0,29	0,35	0,64
55	-	-	-	0,24	0,3	0,63
60	-	-	-	0,21	0,26	0,62
65	-	-	-	0,18	0,21	0,6

0,01; 0,02 ve 0,02 l/dk gaz akış oranlarında, uygulanan RF güç değeri arttıkça, plazmanın uzunluğu artmıştır. Basıncadaki düşüş, vakum ölçüm aralığının dışında kaldığından ölçülememiştir. Tablo 8.5’te sunulan, farklı RF giriş gücü ve farklı gaz akış oranlarında ölçülen basınç değerleri kullanılarak, basıncın değişiminin daha net görülebilmesi için Şekil 8.7’deki grafik oluşturulmuştur. Şekil 8.7’deki grafikte, ölçülemeyen basınç değerleri için ölçülebilen değerler doğrultusunda tahminde bulunularak gösterilmiştir.

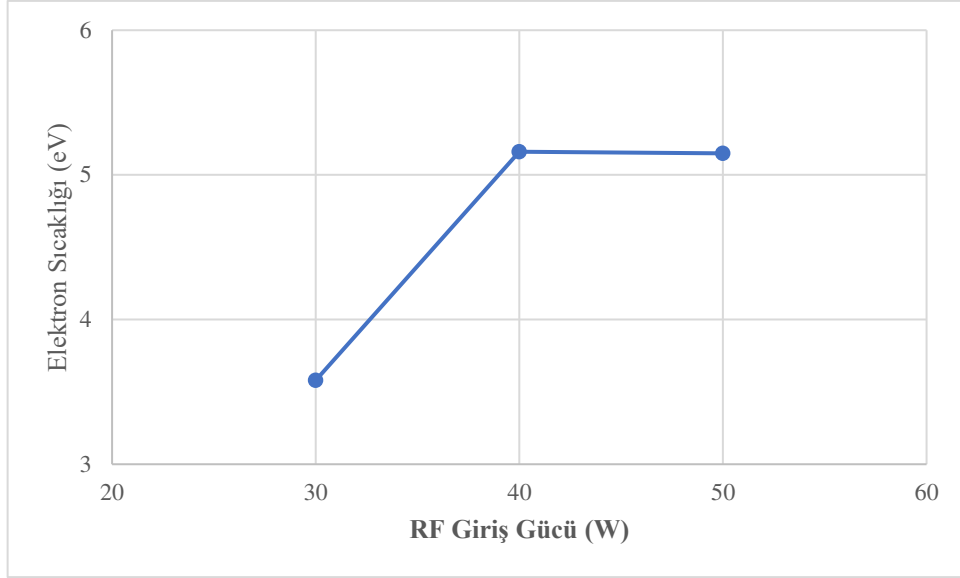


Şekil 8.7. Argon deşarjına ait farklı gaz akış oranlarında RF giriş gücüne göre değişen ölçülen basınç grafiği.

Argon gazına ait deşarjdan elde edilen elektron yoğunluğu ve elektron sıcaklığı değerlerine ait grafik Şekil 8.8 ve Şekil 8.9’da sunulmuştur.



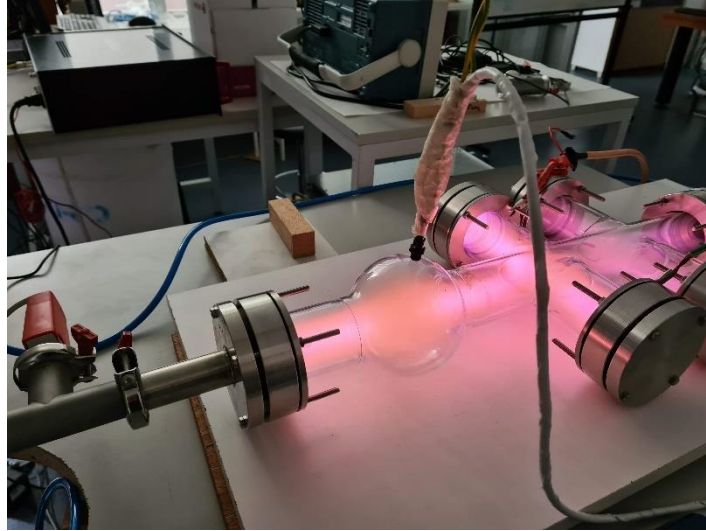
Şekil 8.8. Argon deşarjına ait RF giriş gücüyle değişen elektron yoğunluğu grafiği.



Şekil 8.9. Argon deşarjına ait RF giriş gücüyle değişen elektron sıcaklığı grafiği.

8.4. Farklı Tasarlanan Sistem ile İlave Ölçümler

Deşarj odasında, sistemin vakuma yakın bölgesine balon şeklinde cam ilavesi yapılarak artan hacimde plazma karakteristiğinin incelenmesi amaçlanmıştır. Hava kaçaklarının önlenmesi ve basıncın istenen seviyede tutulabilmesi amacıyla cam balon, deşarj odasına kaynatılarak imal edilmiştir. Sisteme ait görsel Şekil 8.8’de sunulmuştur.



Şekil 8.10. Yenilenen deşarj odasına ait görsel.

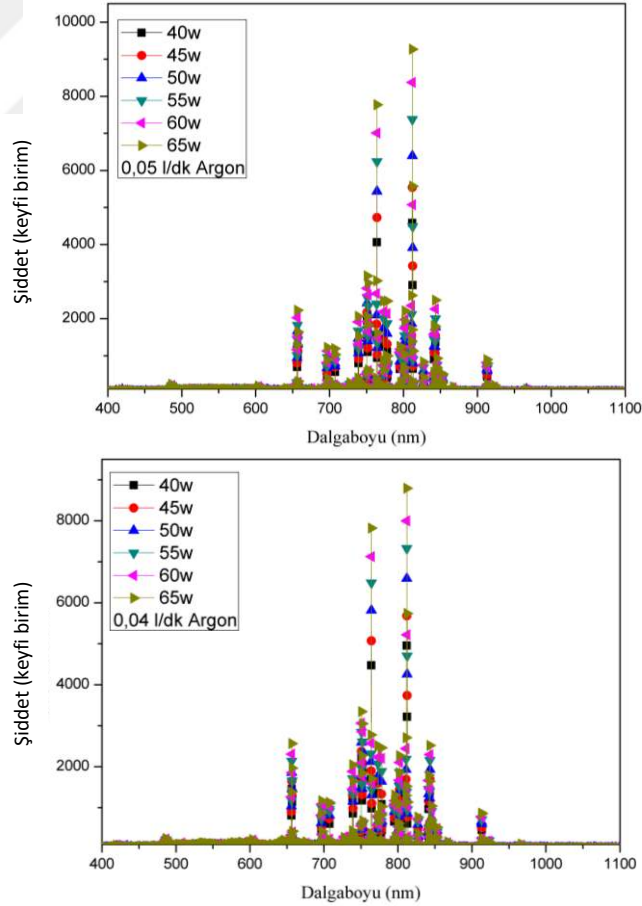
Bu tez çalışmasında, vakum pompasına yakın bir bölgeden alınan mekaniksel olarak zorlanmış plazmaya ait ölçümler kullanılmıştır. Yenilenen sistemde de amaç; aynı bölgede hacimsel değişimin plazma karakteristiğine etkinin incelenmesidir. Bu noktada

basıncıdaki değişim gözlenebilmiştir. Kullanılan ilk deşarj odasına göre yenilenen sistemdeki basınç değerlerinin aynı şartlarda daha düşük olduğu gözlenmiştir. Buna, hacimdeki artış nedeniyle yoğunluğun azalması neden olmaktadır. Yenilenen sisteme ait basınç değerleri Tablo 8.6’da sunulmuştur.

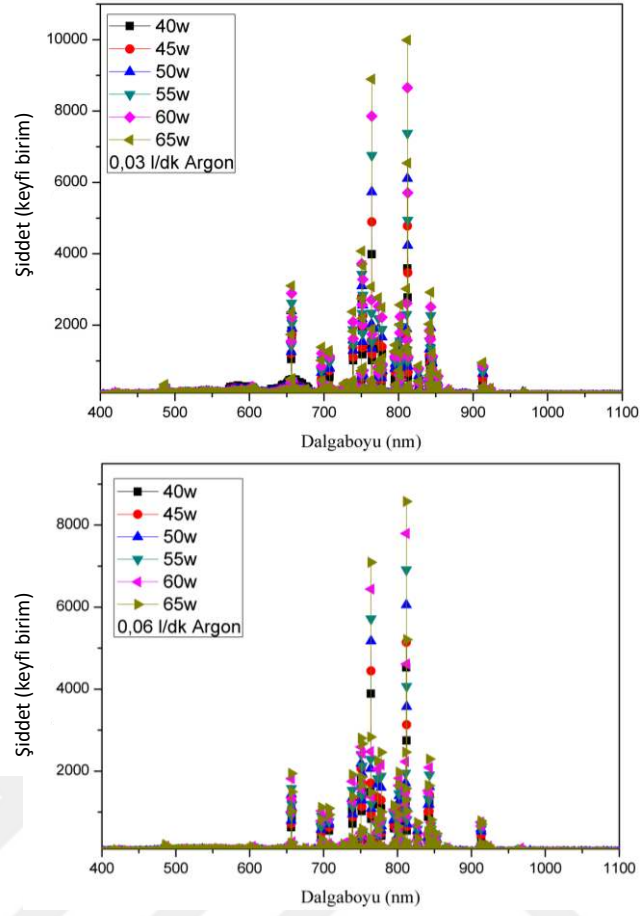
Tablo 8.6. Yenilenen sistemde ölçülen basınç değerleri.

Gaz Akış Oranı (l/dk)	RF Güç Değeri (W)					
	40	45	50	55	60	65
0,03	0,49 mbar	0,11 mbar	0,11 mbar	-	-	-
0,04	0,26 mbar	0,2 mbar	0,096 mbar	-	-	-
0,05	0,35 mbar	0,27 mbar	0,18 mbar	-	-	-
0,06	0,45 mbar	0,37 mbar	0,27 mbar	0,17mbar	-	-
(-) : Ölçüm alınmadı						

Yenilenmiş deşarj odasında elde edilen plazmaya ait balon bölgesinden alınan OES ölçümlerine ait grafikler Şekil 8.11’de sunulmuştur.

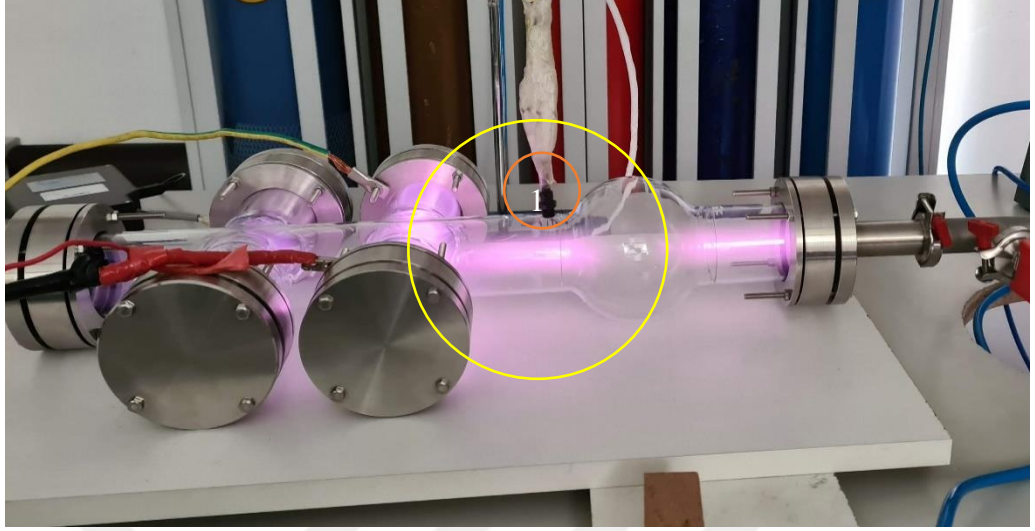


Şekil 8.11. Balon bölgesinden alınan argon deşarjına ait farklı gaz akış oranlarındaki OES grafikleri.



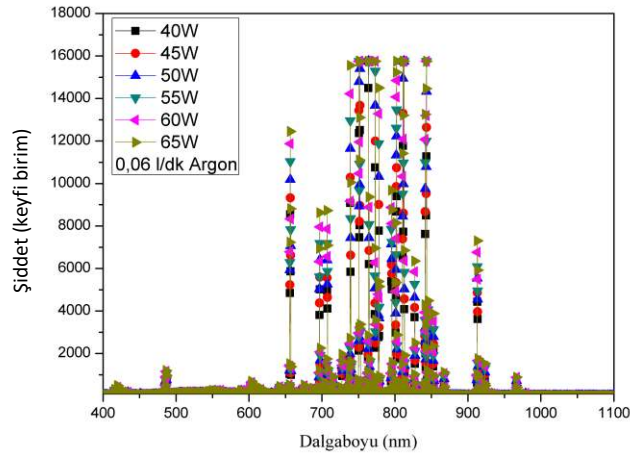
Şekil 8.11. (Devam) Balon bölgesinden alınan argon deşarjına ait farklı gaz akış oranlarındaki OES grafikleri.

Şekil 8.9’da sunulan grafiklerden görüleceği gibi daha önce kullanılan sistemdekine nazaran aynı argon gaz akış oranı ve RF güç değerlerinde OES şiddetlerinde azalma meydana gelmektedir. Bunun asıl nedeni, plazmanın balon bölgesinde daha geniş bir hacim içerisinde dağılmasıdır. Şekil 8.10’da gösterilen görselde de çıplak gözle izlenen deşarjın, diğer bölgelere göre daha soluk olduğu fark edilebilmektedir. Yoğunluğu azalan deşarj, doğrudan gözle yapılan izlemelerden de belirlenebilmektedir.



Şekil 8.12. Balon bölgesinde argon deşarjının görüntüsü.

Argon deşarjının balon bölgesindeki yoğunluğun azalmasıyla OES şiddetlerinde azalma meydana geldiğini destekleyen OES grafikleri de Şekil 8.13’de sunulmuştur. Bu OES grafikleri, Şekil 8.12’da (1) ile işaretlenen noktadan alınmıştır.



Şekil 8.13. Balon bölgesinin hemen öncesinden alınan OES verilerine ait grafik.

Tablo 8.7. Farklı tasarlanan deşarj odasından alınan OES verileri ile NIST veri tabanından alınan verilerin karşılaştırılması.

Dalga Boyu (nm) (NIST) Dalga Boyu (nm) (Deneyisel)

696,5	697,19
706,7	707,34
727,23	728,12
738,4	739,29
750,4	751,32
763,5	764,21
772,4	773,31
794,8	795,65
800,6	801,4
801,5	802,29
810,4	811,12
811,5	812,45
826,8	827,8
840,8	841,71
842,5	843,36
852,1	852,95
912,3	913,27
922,4	923,27

9. SİMÜLASYON ÇALIŞMALARI

9.1. Simülasyon Çalışmasının Hazırlığı

Isıl olmayan RF soğuk plazmalar için simülasyon kodları araştırılmıştır. RF soğuk plazmalar için hazırlanmış bazı kodlara rastlanmış ve bu kodlar için denemeler yapılmıştır. Kodların çalışırılığı test edilmiştir. Çalışan kodlar üzerinde düzenleme yapılması planlanmıştır.

Araştırma sırasında bulunan kodlar içerisinde C++, Matlab ve Fortran kodlarına rastlanmıştır. Bu kodlardan bazıları çok eski sürümlerde derlendiğinden sonuç alınamamıştır. Örneğin bulunan kodlardan biri 16 bit sisteminde derlendiğinden çalıştırabilmek veya düzenleyebilmek mümkün olmamıştır, çünkü mevcut sistemler en az 32 bit ve hatta 64 bit düzenindedir.

Lubos Brieda tarafından hazırlanan kodların istenen temeli oluşturduğu görülmüştür. Detaylı açıklamalarla sunulan bu kodlar, bu tez çalışmasında oluşturulan plazmanın simülasyonunun hazırlanmasına temel oluşturmuştur [61].

9.2. PIC Kodlarının Anlaşılması ve Matematiksel Temeli

Mevcut plazma sisteminin matematiksel modellemesinin yapılması ve sonuçların simülasyon ortamında da değerlendirilebilmesi amacıyla, temel olarak hazırlanmış kod sistemlerinin araştırması yapılmıştır. Bu süreçte; C++, Matlab ve Fortran kodlarına rastlanmıştır. Bu kodların arasında 16 bit sisteminde derlenmiş eski kodlar da mevcuttur. Mevcut deney sistemine uygunluğu görülen kodların çalıştırılması denenmiştir. Denenen kodlar içerisinde doğru şekilde çalışarak sonuç veren kod sistemi, PIC (particle in cell) tabanlı bir sistemdir.

Mikroskobik boyutta plazma, yüklü parçacıklar olan iyon ve elektronların yer aldığı bir gaz ortamı olarak özetlenebilir. Buna rağmen, doğada çok daha kompleks yapılar yer almaktadır ancak çalışmanın bu safhasında basit olarak ilk tanımda yer alan yapı göz önüne alınmıştır. Akış simülasyonlarında yaklaşım, parçacıkların hızlarındaki ve konumlarındaki değişimin gözlenmesi ile ilgilidir. Bu çalışmada tüm nötr atomlar, iyonlar ve elektronlar rijit olarak Newton'un hareket denklemleri ile hesaba dahil edilmiştir.

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{v}, \quad \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{a} \quad (9.1)$$

Burada $\vec{x}$ konum, $\vec{v}$ hız ve $\vec{a}$ ivmeyi göstermektedir. Eğer parçacığın kütlesi sabit kalıyorsa ivme Newton'un ikinci yasası ile hesaplanabilir.

Yüklü parçacıklar birbirleri ile etkileşimlidir. Bu durum Coulomb kuvveti ile gösterilir.

$$\vec{F}_{c,ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|^3} (\vec{x}_i - \vec{x}_j) \quad (9.2)$$

Burada i ve j , yükleri q_i ve q_j olan iki özgün parçacığı temsil eder. $\epsilon_0 \approx 8,8542 \times 10^{-12} \text{ C/(Vm)}$ değeriyle boşluğun elektriksel geçirgenlik sabitidir. Başlangıçta yalnızca elektrik alan etkileri dikkate alınmıştır. i parçacığı için toplam kuvvet Denklem 9.3 ile verilmektedir.

$$\vec{F}_{c,i} = \sum_j^N \vec{F}_{c,ij} \quad i \neq j \quad (9.3)$$

Parçacıkların hızları, çarpışmalarla değişebilmektedir.

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{1}{m} (\vec{F}_g + \vec{F}_c + \dots) + \left(\frac{d\vec{v}}{dt} \right)_{\text{çrp}} \quad (9.4)$$

Vakum altında elde edilen plazmalarda basınç değeri 10^{-9} bar değerlerine kadar düşebilmektedir. İdeal gaz denklemleri kullanıldığında, $p = nk_B T$, $k_B \approx 1,381 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ Boltzmann sabiti, T oda sıcaklığı ve $n = 3,3 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}$ olarak tanımlanır. Ortalama parçacıklar arası boşluk, bir birim küpü doldurmak için her iyonaya denk gelen hacimden tahmin edilebilir. Her parçacık kenarları a olan bir küp olarak modellendiğinde, parçacıklar $a = \left(\frac{1}{n} \right)^{1/3}$ veya $3\mu\text{m}$ aralıklı şekildedir. Bu mesafede, Coulomb kuvveti yaklaşık 10^{-17} N mertebesinde. Bu durumda gravitasyonel kuvvet değeri 10^{-24} N mertebesinde. Bu nedenle, büyük kütle-çekim alanlarını içeren problemlerle uğraşılmadıkça, gravitasyonel kuvvetleri hesaba katmamak sorun olmayacaktır. Çarpışmalar ise düşük basınçlarda göz ardı edilebilir [61].

9.3. Doğrudan Yaklaşım Yöntemi

Kavramsal olarak, N adet parçacık için tüm parçacıkları dolaşarak her biri için Coulomb kuvvetini aşağıdaki şekilde hesaplayabiliriz.

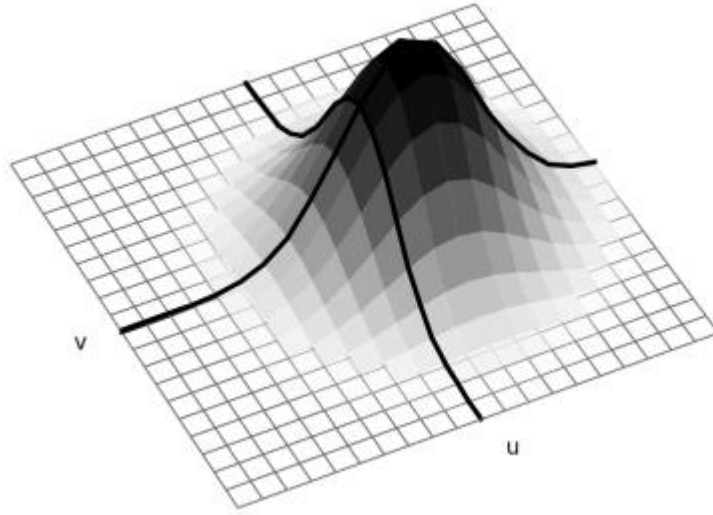
$$\vec{F}_{c,i} = q_i \vec{E}_i \quad (9.5)$$

$$\vec{E}_i = \sum_j \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_j}{r_{ij}^3} (\vec{r}_i - \vec{r}_j), \quad i \neq j \quad (9.6)$$

Bu yaklaşım çok verimli olmayacaktır. Coulomb kuvveti, her bir parçacık için $N - 1$ kez hesaplanmalıdır. Toplam parçacık sayısı N olduğunda, $N(N - 1) \approx N^2$ kez Coulomb kuvvetinin hesaplanması gerekir. Bu hesaplama zaman almaktadır. Bu nedenle alternatif bir yöntem ihtiyacı vardır.

9.4. Boltzmann Denklemi

Küçük bir kontrol hacmi içindeki tüm parçacıkların, hız bileşenlerine göre yetecek bir süre durduğu varsayalım. Gruplamayı gerçekleştirebilmek için 3-boyutlu hız uzayında bir histogram tanımlanır. Her grup, hızın özel bir x , y ve z ile u , v ve w bileşimine karşılık gelmektedir. Her bir grubun genişliği Δu , Δv ve Δw değerlerinden gelmektedir. $u \pm 0,5\Delta u$, $v \pm \Delta v$ ve $w \pm \Delta w$ değerli parçacıklar aynı gruba denk gelir. Kutuların sınırında sonsuz küçük hale gelen ayırık histogram, pürüzsüz bir hiperuzay yüzeyi haline gelir. Bu yüzey, *hız dağılım fonksiyonunu* gösterir.



Şekil 9.1. Hız dağılım fonksiyonunu gösteren yüzey için örnek [66].

Şekil 9.1'den görüleceği gibi parçacıklar, hız çiftinin ortalamasında yoğun olarak toplanmaktadır. Grafikteki $u = 0$ ve $v = 0$ çizgileri negatif ve pozitif bileşenlerine bölünmüştür. v hızları $v = 0$ noktasında merkezlenmiştir.

Çarpışmanın bulunmadığı bu yaklaşımda tüm parçacıkların hızları aynı ve sabittir. Burada kontrol hacminin, kuvvet teriminde uzaysal bir değişiklik olmayacak şekilde yeterince küçük olduğu varsayılır. Sonuç tüm parçacıklar için aynı olduğundan, grup başına birden fazla parçacık için hızı entegre etmeye gerek yoktur. Parçacık nüfusunun bir kısmının benzeri olmayan bir şekilde etkilenmesi yalnızca çarpışmalar yoluyla olur.

$$\left(\frac{df}{dt}\right) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{crp} \quad (9.7)$$

Bu ilişki, f dağılım fonksiyonunun toplam türevinin yalnızca henüz tanımlanmamış olan çarpışma operatörü aracılığıyla değiştiğini gösterir. Bu kısma kadar anlatılan dağılım, sadece örneklendiği küçük kontrol hacmidir. Diğer uzaysal bölgelere karşılık gelen farklı hacimler, benzeri olmayan bir parçacık hızları kombinasyonuna sahiptir. Dağılım da zamanla gelişir. Hız dağılım fonksiyonunun 7 farklı değişkeni vardır; $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}, t)$. Burada $\mathbf{f}$, hız bileşenleri $(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})$, konum bileşenleri $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ ve zamanı t , içerecek şekilde parçacık sayısıdır. Dağılım istenirse normalize edilebilir. Bu durumda $\hat{\mathbf{f}}$ parçacığın bulunma olasılığı değerini alır. Denklem 9.7, zincir kuralı ile yeniden yazıldığında Denklem 9.8 elde edilir.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{f} + \frac{F}{m} \nabla_{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{f} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) \quad (9.8)$$

Sağ tarafın sıfır olduğu çarpışmasız seçenek Vlasov denklemi olarak bilinir. Parçacıklar arası etkileşimleri doğrudan dikkate almak yerine, bu kısmi diferansiyel denklemi entegre ederek gaz oluşumu modellenenebilir. Plazma simülasyon kodlarının büyük çoğunluğu bu yaklaşımı kullanmaz. Nedeni, hesaplama gereksinimleridir. Rastgele bir hız dağılım fonksiyonunu sayısal olarak belirlemek için 3 boyutlu bir sistem gerekir. Bu sistem temel olarak, belirli $\mathbf{u}, \mathbf{v}$ ve $\mathbf{w}$ ile eşlenen 3 indeksli çok boyutlu kayan bir nokta dizisidir. Her bir boyut için ayrı ayrı 20 hızı destekleyen, kabaca 20x20x20 çözünürlüğü kullanılsa dahi, kontrol hacmi başına 8000 nokta değeri belirlenmesi gerekir. Gaz özelliklerindeki uzaysal değişimin çözülmesi için fiziksel alanı başka bir üç boyutlu sistem ayrılması gerekir. Boyutlar 100x100x100 değerine çıktığında veri sayısı 800 milyona kadar çıkmaktadır ve bu da çok yüksek sistem gereksinimlerine ihtiyaç duyar. Genel olarak Boltzmann denklemi için entegrasyon şemaları, bellek gereksinimlerini iki katına çıkarmaktadır. Farklı gaz türlerinin simülasyona dahil edilmesiyle sistem gereksinimleri daha da artmaktadır.

9.5. Maxwell-Boltzmann Dağılım Fonksiyonu

Sistem gereksinimlerinin arttığı durumda, alternatifler mevcut olmalıdır, çünkü üç boyutlu plazma simülasyonları standart masaüstü iş istasyonlarında çok daha düşük bant genişliğindeki ağlarla da gerçekleştirilir. Bellek gereksiniminin çoğu, her bir uzaysal hücrede ihtiyaç duyulan çok sayıda hız hücresinden kaynaklanır. Bu nedenle, bazı ek

sadeleştirmeler yapılabilir. İlk seçenek, hız dağılım fonksiyonunun bir analitik profili takip ettiğini varsaymaktır. Özellikle, her bir yönde hız Denklem 9.9'daki şekilde verilir.

$$f_M(v) = \frac{1}{\sqrt{\pi}v_{isl}} \exp\left(\frac{-(v-v_d)^2}{v_{isl}^2}\right) \quad (9.9)$$

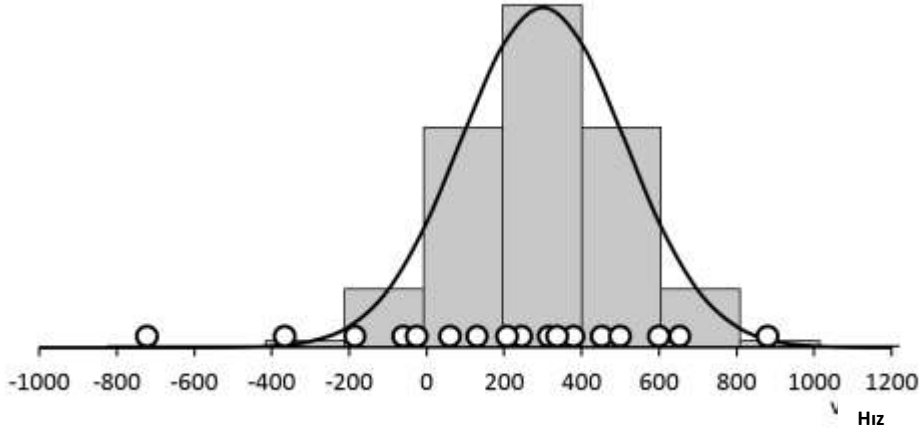
Denklem 9.9 Maxwell-Boltzmann dağılım fonksiyonu olarak bilinir. Başlangıçta gazla dolu bir hücre olduğu varsayalım. Bu hücrede iki tür parçacık olsun; A hızıyla hareket eden yavaş moleküller ve B hızıyla hareket eden hızlı moleküller. Eğer dış kuvvetler yoksa ve duvarlar tamamen yansıtıcı ise o zaman hızlar ancak çarpışmalar yoluyla değişebilir. Momentumun aktarıldığı çarpışmada daha hızlı olan molekül biraz yavaşlarken, yavaş olan molekül hızlanır. Son durumda, yeterli bir süre geçtikten sonra, başlangıçta ayrı olan iki popülasyon, net momentum aktarımının olmadığı tek bir popülasyonda birleşir. Maxwell-Boltzmann dağılımı bu son duruma karşılık gelir ve buna ulaşma sürecine termalizasyon denir. Denklem 9.9 ile her boyutu 2 parametreye indirgesidir Bu parametreler; ortalama (veya sürüklenme) hızı v_d ve ısı hızı v_{isl} . Isıl hız, sıcaklık cinsinden $v_{isl} = \sqrt{2k_B T/m}$ olarak tanımlanır.

9.6. Akışkan ve Kinetik Yöntem

Gaz simülasyonu yaklaşımları iki farklı şekilde açıklanabilir. Bunlar, akışkan ve kinetik model olarak sıralanabilir. Akışkan yaklaşımlar, hız dağılım fonksiyonu ile sürekliliği baz alarak analitik bir forma sahiptir.

$$M^k(\vec{x}, t) = \int_{\vec{v}} v^{-k} f(\vec{x}, \vec{v}; t) d\vec{v} \quad (9.10)$$

Kinetik yaklaşımlar ise hız dağılım fonksiyonunun şekli hakkında herhangi bir varsayımda bulunmaz ve kendi kendine tutarlı bir şekilde değişimine izin verir. Vlasov çözümleri ve doğrudan çözümler, kinetik yaklaşımın iki örneğidir. Neyse ki, stokastik (rastgele) örneklemeye dayanan başka bir yöntem sınıfı vardır. Birçok hız hücresi sıfır veya sadece birkaç parçacık içerir. Ayrı durumdaki hız dağılım fonksiyonunu tamamen çözmeye çalışmak yerine, dağılım fonksiyonunu izleyen olasılığa sahip bir dizi rastgele hız örneği üretilebilir. Bu örnekleme, Şekil 9.2'de gösterilmiştir. Analitik yöntem kullanılarak tek boyutlu Maxwell-Boltzmann dağılımının temsili, bir Vlasov çözümleyici hız kümesi ve rastgele örnekleme ile karşılaştırılmıştır.



Şekil 9.2. Hız dağılım fonksiyonu için her 3 yaklaşımın birbirleri ile karşılaştırılmasına ait grafik. Burada çizgi analitik fonksiyonu, histogram ayrıık hızları, çemberler ise rastgele örnekleri temsil eder.

Bu örnekler, parçacıklar olarak ele alınır ve hareket denklemlerine göre hesaplama alanında hareket ettirilir. Her parçacığa bir makro parçacık ağırlığı w_{mp} atanır. Belirli bir makro parçacık ağırlığı basitçe gerçek atomların, iyonların veya elektronların sayısını simülasyon parçacıklarıyla temsil eder. Ağırlığın sabit olduğu durumda, $w_{mp} = N_{gerçek}/N_{simülasyon}$ denklemi sağlanır. Bu yaklaşımı temel alan 2 farklı yöntem vardır. Bunlar Particle in Cell (PIC) ve Doğrudan Simülasyon Monte Carlo (DSMC) yöntemleridir [62, 63]. PIC yönteminde ivme, yalnızca elektromanyetik kuvvetlere göre değerlendirilir. DSMC yönteminde ise nötr gaz ve yalnızca modellenmiş çarpışmalar baz alınır.

9.7. Lagranjiyen ve Euler Açıklamaları

PIC ve Vlasov çözümcüleri, hız dağılım fonksiyonu içinde çözüldüğünde her ikisi de kinetik algoritmalarıdır. Ancak iki yöntem gazı farklı bir şekilde ele alırlar. PIC, etki alanı içinde hareket eden bireysel parçacıkları takip ederken, Vlasov çözümcüleri gazı sabit bir kılavuz kullanarak geliştirir.

9.8. Akışkan ve Kinetik Yaklaşımların Karşılaştırılması

Akışkan ve parçacık yöntemlerinin aralarındaki farkın canlandırılması için küreden geçen nötr bir gaz akışı varsayalım. Akışkan yaklaşımla değerlendirildiğinde, kütle, momentum ve enerjinin korunumu için kısmi diferansiyel denklemlere ulaşmak amacıyla gaz dinamiği anlayışı kullanılabilir. Sıcaklığın hesaplanması için enerji denkleminde ihtiyaç vardır ancak çoğu zaman sıcaklığın sabit olduğu varsayılmaktadır. Örneğin, yoğunluk ve momentum için aşağıdaki ifadeler kullanılabilir.

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\vec{u}) = 0 \quad (9.11)$$

$$mn \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right] = \vec{F} - \nabla p - mnv\vec{v} \quad (9.12)$$

Bu noktada bu denklemlerin zamana bağılı türevleri önem kazanmaktadır. Bir veya daha fazla terim yalnızca uzaysal özelliklere veya onların türevlerine bağlıdır. Bu eşitlikler, Denklem 9.13'teki şekilde yazılabilir.

$$\frac{\partial(\text{fonksiyon})}{\partial t} = G(X(\vec{x}, t)) \quad (9.13)$$

Burada G , uzaysal değişken gaz durumu X 'in herhangi bir fonksiyonu (hız, yoğunluk vb.), t ise zamandır. Bu formdan görülebilir ki akışkan simülasyon, yoğunluk, hız vb. için diferansiyel denklemin zaman entegrasyonunu kapsar. Bu ana denklemler, bazı özel durumlar dışında analitik çözüme sahip değildir.

9.9. Elektrostatik Hücredeki Parçacık Yöntemi

Hücredeki parçacık yöntemi, Birdsall ve Langdon tarafından öne çıkarılmıştır [63]. Günümüzde halen çalışmalara referans olmaktadır.

Yerel hız dağılım fonksiyonu f ile tanımlanan N tane gerçek iyonun yer aldığı küçük bir uzay bölgesi varsayalım. Hız dağılım fonksiyonundan M sayıda simülasyon parçacığının örneklenmesi ile bu popülasyona yaklaşılabılır. Bu çok daha küçük örnek tüm popülasyonu temsil eder ve dolayısıyla her parçacık $w_{mp} = N/M$ gerçek iyonlara veya elektronlara karşılık gelir. Her simülasyon parçacığı ayrı bir hızla oluşur ve $w_{mp}m\vec{v}$ momentumu taşır. Benzer şekilde, parçacık, yerel sayı ve yük yoğunluğu hesaplamasına w_{mp} ve $w_{mp}q$ sayımına ve yüküne katkıda bulunur. Hız ve konum, m kütleli ve q yükündeki bireysel fiziksel iyon veya elektronun kütesine ve yüküne göre güncellenir. Parçacığı hareket ettirmek için kullanılan yük ile yük yoğunluğuna katkı arasındaki karışıklığı önlemek için, her bir makroparçacığı, birlikte hareket eden bir w_{mp} gerçek iyon veya elektron yığını olarak tasavvur etmek yardımcı olur.

9.10. Lorentz Kuvveti

Parçacıklar, Denklem 9.5'e göre hesaplanan kuvvetle, daha önce tartışılan hareket denklemlerine göre hareket eder. Bununla birlikte, Coulomb yasasını kullanmak yerine, elektrik alanı adı verilen $\vec{E}$ terimini daha verimli bir şekilde elde ederiz. Denklem 9.5 ile verilen ilişki, hareketli yüklerin etkisini ihmal ettiği için aslında eksiktir. Tam form Lorentz kuvveti olarak bilinir ve Denklem 9.14'te verilmiştir.

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (9.14)$$

Burada $\vec{v}$ parçacık hızı ve $\vec{B}$ manyetik alandır.

9.11. Tek Parçacık Hareketi

Bu kısımda basit bir simülasyon programı geliştirerek PIC yönteminin temel kavramları ile ilgili uygulandığı görülmektedir. İki topraklanmış elektrot arasında tek tip yük yoğunluğu ρ_0 olan bir bölge olduğunu düşünelim. Bu kurulum Şekil 9.3'te gösterilmiştir. Ayrıca elektrotların sonsuz uzunlukta ve derin olduğunu varsayılmıştır. Yük yoğunluğu tekdüze olduğundan, plazma özellikleri yalnızca x yönünde değişir. Bu, bir boyutlu (1D) problemin bir örneğidir. Bölgenin sadece $\rho_0 = en_i$ iyonlarıyla dolu olduğunu varsayıyoruz. $\rho_0 > 0$ için iki duvar arasında pozitif potansiyel gelişir. İki elektrottan birinin yanına yerleştirilen tek bir sabit elektron, maksimum hıza ulaştığı potansiyel tepenin en üst noktasına doğru hareket etmeye başlamalıdır. Daha sonra, hızı tekrar sıfıra ulaşana kadar yol boyunca yavaşlayarak yokuş aşağı devam eder. Hareket daha sonra tersine döner ve elektron bu ileri geri hareketle salınmaya devam eder. Tabi ki bu model herhangi bir sürtünme (veya çarpışma) kaybını yok sayar. Simülasyonu geliştirmek için arka plan iyon yoğunluğunun sabit kaldığı ve yeterince yüksek olduğu, böylece tek elektron tarafından taşınan yükün potansiyel profil üzerinde ihmal edilebilir bir etkiye sahip olduğu varsayılmaktadır. Bu daha sonra potansiyelin sadece bir kez hesaplanmasına izin verir. Kodun geri kalanı sadece elektron konumunu güncellemeyi içerir.

9.12. Etki Alanı Belirleme

Potansiyel, yük yoğunluğu ve elektrik alanındaki uzaysal değişimi tanımlamak için bir hesaplama ağı kullanılır. Her değişken için n_i kayan nokta değerlerini depolamak için bir bellek dizisi tahsis etmeyi içerir, burada n_i ağ düğümlerinin sayısıdır.

9.13. Potansiyel Çözümleyici

Poisson denklemi etki alanı içinde her yerde geçerlidir. Her bir dahili düğüm için Denklem 9.15 çözümü yapılır.

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\frac{\rho_i}{\epsilon_0}, i \in [1, n_i - 2] \quad (9.15)$$

$$\frac{\phi_{i-1} - 2\phi_i + \phi_{i+1}}{\Delta^2 x} = -\frac{\rho_i}{\epsilon_0}, i \in [1, n_i - 2] \quad (9.16)$$

Burada n_i bilinmeyenleri için $n_i - 2$ denklemleri yer almaktadır. En soldaki ve en sağdaki düğüm için sınır koşulları belirleyerek sistem kapatılır. İki uç düğümdeki potansiyel sabit olduğundan Dirichlet sınırı kullanılır; $\phi_{ni} = 0$ V.

Örnek olarak, sadece yedi düğümü olan bir ağ varsayalım. Poisson denklemi için Sonlu Fark Yöntemi formülasyonu aşağıdaki denklemlerle sonuçlanır:

$$\phi_0 = \phi_{sol} \quad (9.17)$$

$$\left(\frac{1}{\Delta x^2}\right) (\phi_0 - 2\phi_1 + \phi_2) = -\rho_1/\epsilon_1 \quad (9.18)$$

$$\left(\frac{1}{\Delta x^2}\right) (\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3) = -\rho_2/\epsilon_2 \quad (9.19)$$

$$\left(\frac{1}{\Delta x^2}\right) (\phi_2 - 2\phi_3 + \phi_4) = -\rho_3/\epsilon_3 \quad (9.20)$$

$$\left(\frac{1}{\Delta x^2}\right) (\phi_3 - 2\phi_4 + \phi_5) = -\rho_4/\epsilon_4 \quad (9.21)$$

$$\left(\frac{1}{\Delta x^2}\right) (\phi_4 - 2\phi_5 + \phi_6) = -\rho_5/\epsilon_5 \quad (9.22)$$

	1						
(1/dx ²)	1	-2	1				
(1/dx ²)		1	-2	1			
(1/dx ²)			1	-2	1		
(1/dx ²)				1	-2	1	
(1/dx ²)					1	-2	1
							1

Şekil 9.3. 7 düğümlü ve Dirichlet sınır koşullarına sahip bir ağ için tek boyutlu Poisson denklem katsayı matrisi.

Bu sistemi, Şekil 9.3'te gösterildiği gibi matris gösterimini kullanarak yeniden yazabiliriz. Katsayı matrisi A , $\vec{\phi}$ vektöründen bilinmeyenleri (düğüm potansiyelleri) çarpan değerleri tutar. Potansiyelleri elde etmek o zaman “basitçe” $A\vec{\phi} = \vec{b}$ matris sisteminin çözülmesini içerir. MATLAB gibi bazı programlama dilleri, yerleşik matris çözümler içerir. Bu işlevi sağlayan LA-PACK, PETSc veya MUMPS gibi yüksek performanslı harici kitaplıklar mevcut olmasına rağmen, ne yazık ki C++ ile durum böyle değildir [64, 65, 66]. Herhangi bir lineer matris sistemi, her iki tarafı da matris tersi $A^{-1}A\vec{\phi} = A^{-1}\vec{b}$ ile çarparak çözülebilir. Bu formülasyon, tersinin var olduğunu varsayar:

matris tekil değildir. Bir matrisin tersi ile çarpımı birim matris olduğundan, $\vec{\Phi} = \mathbf{A}^{-1}\vec{b}$ denklemi elde edilir. Ne yazık ki, tersini hesaplamak, hesaplama açısından pahalıdır. Ayrıca, Poisson denkleminin katsayı matrisi, ana köşegen etrafında ortalananmış sadece birkaç sıfır olmayan banttandır oluşur. Bu, kendi içinde bir seyrek matris türü olan bantlı matrisin bir örneğidir. Seyrek matrisler, yalnızca sıfır olmayan girişleri kaydederek verimli bir şekilde saklanabilir. Tersine çevrilmiş matris, bu bantlı yapıyı kaybeder ve önemli ölçüde daha fazla sıfır olmayan girdiler içerir. Yalnızca $G = 100000$ düğümlü bir ağ için tam katsayı matrisini depolamak, G^2 ile boyut ölçeklendirmesi nedeniyle 74 Gb'den fazla RAM gerektirir.

9.14. Üç Köşeli Algoritma

Çoğu kodda benimsenen yaklaşım, verilen sistemin çözümünü, tersini açıkça hesaplamadan gerçekleştirmektir. Matris çözümleri iki türe ayrılabilir: doğrudan ve yinelemeli. Doğrudan çözümler, sabit sayıda yinelemede kesin çözümü üretmek için matris verilerindeki bazı doğal yapılardan yararlanır. Daha önce yapılan uygulamayı takiben $\vec{a}$ ve $\vec{c}$ 'nin ana köşegen $\vec{b}$ 'nin solundaki ve sağındaki bant için katsayılar içermesine izin verilmiştir [67]. Sağ taraftaki vektörü $\vec{d}$ olarak etiketlenir. Algoritma iki adımdan oluşmaktadır. İlk olarak, ileriye doğru bir taramada katsayılar aşağıdaki şekilde değiştirilir.

$$c'_i = \begin{cases} \frac{c_i}{b_i}, & i = 0 \\ \frac{c_i}{b_i - a_i c'_{i-1}}, & i = 1, \dots, n-2 \end{cases} \quad (9.23)$$

$$d'_i = \begin{cases} \frac{d_i}{b_i}, & i = 0 \\ \frac{d_i - a_i d'_{i-1}}{b_i - a_i c'_{i-1}}, & i = 1, \dots, n-2 \end{cases} \quad (9.24)$$

Bunu daha sonra geriye doğru ikame takip eder,

$$x_{n-1} = d'_{n-1} \quad (9.25)$$

$$x_i = d'_i - c'_i x_{i+1} \quad (9.26)$$

9.15. Jacobi İterasyonu

N bilinmeyenli bir sistem için, Thomas algoritması tam olarak N ileri geçiş ve ardından N geri ikame adımı gerektirir. Algoritma, belirli sınır koşulları veya sağ taraftaki

vektörün içerdiği değerler ne olursa olsun, her zaman bu kadar çok adım gerektirir. Yinelemeli şemalarda ise önceden belirlenmiş sayıda işlem yoktur. Adından da anlaşılacağı gibi, bu yöntemler matris boyunca yinelenir ve sürekli olarak $\vec{\Phi}$ için yeni bir dizi tahmin üretir, bu tahminin önceki yaklaşıma göre bir gelişmeyi temsil ettiği beklenir. Bu yakınsama olarak bilinir. Çözücünün yaklaşık ve gerçek çözüm arasındaki hata bir toleranstan daha küçük olana kadar çalışmasına izin veriyoruz. Thomas algoritması tek boyutlu problemler için verimli bir doğrudan çözücü sunarken, daha yüksek boyutlu problemler için hızlı doğrudan çözücülerin uygulanması kolay değildir. Bu nedenle, genellikle 2B ve 3B problemler için yinelemeli çözücüler kullanıyoruz. En iyi bilinen şemalardan biri Jacobi yinelemesidir. Bunu uygulamak için, bilinmeyen $\vec{\Phi}_i$ için matris satırı i tarafından verilen denklemin çözülmesi yeterlidir.

$$\Phi_i^{k+1} = \left[b_i - \sum_{j=0}^{n_j-1} (1 - \delta_{ij}) a_{ij} \Phi_j^k \right] / a_{ii} \quad (9.27)$$

Burada a_{ij} , matrisin i -inci satırı ve j -inci sütunundaki değerdir ve δ_{ij} , Kronecker deltasıdır. İki dizin eşleşirse 1 değerine sahiptir, aksi takdirde sıfırdır. $(1 - \delta_{ij})$ ifadesi sadece köşegen terimi atlar. Üst simge k ve $k + 1$, i düğümündeki ve yeni değere karşılık gelir. Burada da katsayı matrisinin seyrek yapısından yararlanmak mantıklıdır. Ayrıca, Poisson denklemi için tüm sınır olmayan katsayılar aynıdır, bu da aşağıdaki denklemin yazılmasına izin verir.

$$\Phi_i^{k+1} = (\Phi_{i-1}^k + \Phi_{i+1}^k - b\Delta^2 x) / 2 \quad (9.28)$$

9.16. Elektrik Alan

Kod sistemi içine elektrik alanın da eklenmesi gerekmektedir.

$$E = -\frac{\partial \Phi}{\partial x} \quad (9.29)$$

Birinci türevin sayısal olarak tahmin edilmesi gerekmektedir. Yine, i düğümünün solundaki ve sağındaki bir düğüm için tanımlanan Taylor serisi kullanılır.

$$f_{i+1} = f_i + \frac{\Delta x}{1} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (9.30)$$

$$f_{i-1} = f_i - \frac{\Delta x}{1} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (9.31)$$

Denklem 9.31, 9.30'dan çıkartıldığında, Denklem 9.32 elde edilir.

$$f_{i+1} - f_{i-1} = 2\Delta x \frac{\partial f}{\partial x} \quad (9.32)$$

Denklem 9.32 düzenlendiğinde aşağıdaki hale gelir.

$$\frac{\partial f}{\partial x} \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} \quad (9.33)$$

Bu, birinci türev için standart merkezi farktır. Birinci türevin kullanıldığı durumda aşağıdaki denklemler elde edilir.

$$\frac{\partial f}{\partial x} \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} \quad (9.34)$$

Bu iki ifadeye ileri ve geri sonlu fark denir. İkinci türev terimin açıkça atılması gerektiğinden, yalnızca birinci dereceden doğrudurlar. Alternatif olarak, $i + 1$ düğümündeki değeri tanımlamak için Taylor serisinin kullanıldığı gibi, $i + 2$ 'deki değer de tahmin edilebilir.

$$f_{i+2} = f_i + 2\Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + \Delta^2 x \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (9.35)$$

Potansiyel ve elektrik alanın tanımlandığı bu noktada test parçacığı sisteme dahil edilebilir. Parçacık, kütlesi, yükü, konumu ve hızı ile tanımlanır. Parçacık hareketi, $F_x = qE_x$ tarafından verilen kuvvetle hareket denklemleri tarafından yönetilir. Bu eşitlikte manyetik alanın mevcut olmadığı varsayılır, $B = 0$.

Burada yine, zaman türevlerini sonlu bir zaman adımı Δt cinsinden yazmak için sonlu fark formülasyonu kullanılır. Buradaki önemli fark, zamanın sadece ileriye doğru akması ve bu nedenle merkezi fark yönteminin kullanılmasının mümkün olmamasıdır. Bunu yapmak, k zamanındaki sonuçların $k + 1$ zamanındaki duruma bağlı olduğu anlamına gelir. Olası tek entegrasyon ile aşağıdaki denklemler elde edilir.

$$x^{k+1} = x^k + v^k \Delta t \quad (9.36)$$

$$v^{k+1} = v^k + \left(\frac{q}{m}\right) E^k \Delta t \quad (9.37)$$

$k+1$ zamanındaki yeni değer sadece k zamanındaki verilere bağlıdır. Bu nedenle, her parçacık için yeni konumu açıkça sağlayan bir denklem tanımlanabilir.

Bir parçacığı kütlesi, yükü, başlangıç konumu ve hızı ile tanımlanarak işleme başlanır. Daha sonra entegrasyon zaman adımını Δt ve ayrıca elektrik alanının sabit değer ayarlanır. Daha sonra, her zaman adımında parçacık konumlarını ve hızlarını depolamak için bir dosya açılır. Kodun geçmiş konum ve hız değerlerini korumadığına dikkat etmek önemlidir. Herhangi bir yinelemede, en fazla tek bir önceki değere ihtiyaç vardır.

9.17. Leapfrog (Birdirbir) Yöntemi

Entegrasyon sırasında hem v^k hem de v^{k+1} değerleri mevcut olduğu için ortalamaları kullanılabilir. Bu durumda aşağıdaki denklem elde edilir.

$$x^{k+1} = x^k + \left(\frac{v^k + v^{k+1}}{2} \right) \Delta t \quad (9.38)$$



10. ÇERÇEVELENMİŞ KUTU

Elektrik alan ve potansiyel belirlendikten ve test parçacığı da hesaba katıldıktan sonra, sınırlandırılmış bir kutu içindeki plazma simülasyonuna başlanabilir. Simülasyon, hücre içi elektrostatik parçacık (ES-PIC) yöntemini kullanır ve tamamen kinetiktir. Bu hem iyonların hem de elektronların parçacık olarak ele alındığı anlamına gelir. Burada başlangıç durumundaki bu çalışma, ilerleyen çalışmalar için önemli bir altyapı oluşturacaktır [61].

10.1. Simülasyon Kurulumu

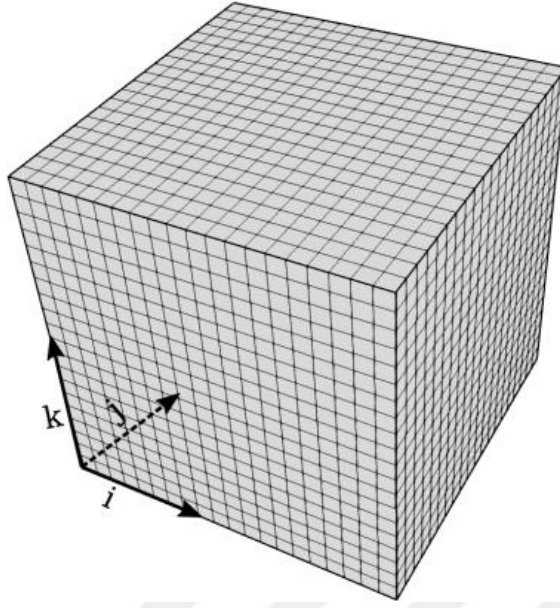
Simülasyon alanı Şekil 11.1'de gösterilmiştir. $(-0.1, -0.1, 0)$ ile $(0.1, 0.1, 0.2)$ arasında uzanan 0,2 m kenarlı bir kutudur. Alan, $21 \times 21 \times 21$ tek tip kartezyen ağ içine ayrıştırılır. Simülasyon alanı, düzgün iyon yoğunluğu $n_i = 10 \text{ m}^{-3}$ ile başlatılır. Elektron yoğunluğu iyonlarla aynıdır, ancak bu önemli kısımdır, elektronlar sadece $[-0.1, 0) \times [-0.1, 0) \times [0, 0.1)$ bölümü işgal eder. Diğer bir deyişle;

$$n_e(\vec{x}) = \begin{cases} n_i, & \vec{x} \in [\vec{x}_0, \vec{x}_c) \\ 0, & \text{diğer durumlar} \end{cases} \quad (10.1)$$

Bu bölge Şekil 10.1 de gri kutu ile gösterilmiştir. Elektronların, yerel yük ayrımını azaltmak amacıyla bu bölgelere hareket etmesi beklenebilir. Bunu yaparken iyonları aşarlar. Sonsuz büyüklükte bir alan verildiğinde, elektronlar potansiyel bir kuyuya hapsedikleri için sonunda geri dönerler. Duvarları yansıtıcı hale getirerek bu davranışa yaklaşılr. Simülasyondan ayrılan herhangi bir parçacık elastik olarak geri yansıtılır. 0 V Dirichlet sınır koşulu tüm sınırlarda ayarlanır.

10.2. Dünya Oluşturma

İlk adım, ağ geometrisini ve düğüm tabanlı değerleri depolamak için kaplar oluşturmaktır. Burada kullanılan kartezyen ağ, Şekil 10.1'de gösterilmektedir.



Şekil 10.1. Kartezyen örgü.

Düzenli yapı nedeniyle, ağ sadece dokuz nicelik kullanılarak tam olarak tanımlanabilir: x_0, y_0, z_0 orijini için üç kayan nokta değeri; x, y ve z yönlerindeki hücre aralığı için üç değer: $\Delta x, \Delta y$ ve Δz ve düğüm sayar, n_i, n_j , ve n_k . Vektör biçiminde bunlar $\vec{x}_0, \Delta \vec{h}$ ve $\vec{nn}$. Bu bilgi, dünya (World) türünde bir nesnede depolanır. Örnek bir kodlama aşağıda yer almaktadır.

```
// World .h

class World {
public:
    World(int ni , int nj , int nk) ; // c o n s t r u c t o r
    void s e t E x t e n t s (double x1 , double y1 , double z1 , double x2 ,
        double y2 , double z2 ) ;
    const int nn [ 3 ] ; // düğüm sayıları
    const int ni , nj , nk ; // değişkenlerdeki düğüm sayıları
protected :
    double x0 [ 3 ] ; // düğüm orijini
    double dh [ 3 ] ; // hücre boşluğu
    double xm [ 3 ] ; // düğüm maksimum bağı
    double xc [ 3 ] ; // etki alanı merkezi
```

10.3. Tanımlar

Bu aşamada, değişkenlerin neler olduğu ve neye bağlı olarak değiştiği belirlenerek sisteme tanıtılır. Bununla beraber, potansiyel çözümleyici gibi denklemlerin yer aldığı ayrıca tanımlanmış dosyalar ve hangilerinin nasıl bir sırada çalıştırılacağı da tanımlanmaktadır.

10.4. Uygulama

Yapıcı, sınıf sabit üyelerini ayarlamak için bir başlatıcı listesi kullanır. Kıvrımlı parantezlerden önceki değişken sınıf üyesidir, içindeki parçalar ise kendisine atanan değerlerdir. Bunlar genellikle yapıcı argümanlardır. Hem sınıf üyesi hem de argüman için aynı adın kullanılması kabul edilebilir ancak, tüm sınıflar, bir sınıf üyesine açıkça atıfta bulunmak için kullanılabilecek “*this*” adlı özel bir işaretçi içerir. Bu uzantılar işlevi ilk önce $\vec{x}_0$ ve $\vec{x}_m$ vektörleri için değerleri ayarlar. Bu başlatma aynı zamanda yapıcının bir parçası olabilir, ancak çok fazla işlev argümanına yol açacaktır. Aramayı ayırmak, kodun okunmasını biraz daha kolaylaştırır [62]. Daha sonra, Δy ve Δz için kullanılan benzer ifadelerle ağ aralığı hesaplanır.

$$\Delta x = \frac{x_m - x_0}{n_i - 1} \quad (10.2)$$

Burada n_i , x yönündeki düğüm sayısıdır ve $n_i - 1$ karşılık gelen hücre sayısıdır. Ayrıca ağ ağırlık merkezi de $\vec{x}_c = (\vec{x}_m + \vec{x}_0)/2$ değerine ayarlanmıştır. Centroid yalnızca elektron popülasyonunu yüklemek amacıyla kullanılır.

10.5. Düğüm Çözünürlüğü

Bu noktada, hücre aralığının tamamen keyfi olarak ayarlanamayacağı hatırlanmalıdır. Plazma yalnızca Debye uzunluğundan daha küçük uzunluk ölçeklerinde nötr değildir.

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T_e}{n_e q_e^2}} \quad (10.3)$$

Burada k_B Boltzmann sabitidir. Bu denklem iyon katkısını ihmal eder, ancak genel olarak $T_i \ll T_e$ olduğundan, genellikle ihmal edilmektedir. Elektronların ve iyonların karışımını simüle etmekle ilgilenildiğinden, yerel yük ayrımının çözülmesi gereklidir. Bu nedenle, hücre hacminin Debye küresinin hacminden daha küçük olması istenir.

$$(\Delta x \Delta y \Delta z) < \frac{4}{3} \pi \lambda_D^3 \quad (10.4)$$

Alternatif olarak aşağıdaki denklem de kullanılabilir.

$$\max(\Delta x, \Delta y, \Delta z) < \lambda_D \quad (10.5)$$

Bu çalışmada hem iyonlar hem de elektronlar soğuk olarak yüklendiğinden ($T_e = T_i = 0$), simülasyondan önce Debye uzunluğunun hesaplanması yine önemlidir. Ancak elektronların toplam sistem kinetik enerjisi $KE < 2 \times 10^{-11} J$ ile sınırlıdır. Sistemin 10^8 elektronu simüle ettiği göz önüne alındığında, elektron başına kinetik enerji $2 \times 10^{-19} J$ olarak hesaplanabilir. Maxwellian hız dağılımı için ayrıca $KE = (3/2)kT$ denklemi kullanılır. Bu nedenle, elektronların Maxwellian, olduğunu varsayarsak; $T_e \approx 9,600 K$ olur. Sıcaklık, elektronvolt cinsinden; $1 eV = (q/k_B) \approx 11604,5 K$ olarak belirlenir. Bu değer $n_e = 10^{11} m^{-3}$ ile kullanılarak $\lambda_D = 0,0214 m$ elde edilir. $20 \times 20 \times 20$ ağ çözünürlüğü, $\Delta x = (x_m - x_0)/n_i = (0,2m)/20 = 0,01 m$ değerini verir.

10.6. Potansiyel Çözümleyici

PIC yöntemine geri dönüldüğünde, yazılacak ilk sistem potansiyel çözücü olarak görülmektedir. Bu fonksiyon Gauss-Seidel şemasını kullanarak Poisson denklemini çözümler. Öncelikle, Poisson denkleminin açılımıyla başlanır.

$$\frac{\phi_{i-1,j,k} - 2\phi_{i,j,k} + \phi_{i+1,j,k}}{\Delta^2 x} + \frac{\phi_{i,j-1,k} - 2\phi_{i,j,k} + \phi_{i,j+1,k}}{\Delta^2 y} + \frac{\phi_{i,j,k-1} - 2\phi_{i,j,k} + \phi_{i,j,k+1}}{\Delta^2 z} = \rho_i / \epsilon_0 \quad (10.6)$$

Bu açılım, merkezi fark yöntemine göre yapılır. Burada $\Delta^2 x = (\Delta x)^2$ olduğundan, $\phi_{i,j,k}$ terimleri denklemin sol tarafına geçer.

$$\left(\frac{2}{\Delta^2 x} + \frac{2}{\Delta^2 y} + \frac{2}{\Delta^2 z} \right) \phi_{i,j,k} = \frac{\rho_i}{\epsilon_0} + \frac{\phi_{i-1,j,k} + \phi_{i+1,j,k}}{\Delta^2 x} + \frac{\phi_{i,j-1,k} + \phi_{i,j+1,k}}{\Delta^2 y} + \frac{\phi_{i,j,k-1} + \phi_{i,j,k+1}}{\Delta^2 z} \quad (10.7)$$

Son olarak, $\phi_{i,j,k}$ için çözüm yapıldığında, i, j, k düğümlerindeki potansiyel için yeni bir denklem elde edilir. Denklemin son hali aşağıdaki şekildedir.

$$\phi_{i,j,k}^* = \left(\frac{\rho_i}{\epsilon_0} + \frac{\phi_{i-1,j,k} + \phi_{i+1,j,k}}{\Delta^2 x} + \frac{\phi_{i,j-1,k} + \phi_{i,j+1,k}}{\Delta^2 y} + \frac{\phi_{i,j,k-1} + \phi_{i,j,k+1}}{\Delta^2 z} \right) / \left(\frac{2}{\Delta^2 x} + \frac{2}{\Delta^2 y} + \frac{2}{\Delta^2 z} \right) \quad (10.8)$$

$$\phi_{i,j,k} \leftarrow \phi_{i,j,k} + w(\phi_{i,j,k}^* - \phi_{i,j,k}) \quad (10.9)$$

10.7. Elektrik Alan

ES-PIC simülasyonlarında plazma potansiyeli, elektrik alanı elde etmek için sadece bir basamaktır.

$$\vec{E} = -\nabla\phi \equiv -\left(\frac{\partial\phi}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial\phi}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial\phi}{\partial z} \hat{k} \right) \quad (10.10)$$

Sonlu fark yöntemi kullanılarak denklem aşağıdaki şekilde yazılabilir.

$$\vec{E} = \left(\frac{\Phi_{i-1,j,k} - \Phi_{i+1,j,k}}{2\Delta x} \right) \hat{i} + \left(\frac{\Phi_{i,j-1,k} - \Phi_{i,j+1,k}}{2\Delta y} \right) \hat{j} + \left(\frac{\Phi_{i,j,k-1} - \Phi_{i,j,k+1}}{2\Delta z} \right) \hat{k} \quad (10.11)$$

Bu fark, yalnızca iç düğümlerde geçerlidir. Sınırlarda, tek taraflı ikinci dereceden versiyon kullanılır.

Benzer şekilde y ve z yüzlerinde de aşağıdaki denklemler kullanılır.

$$(E_x)_{i=0} = - \frac{3\Phi_{0,j,k} - 4\Phi_{1,j,k} - \Phi_{2,j,k}}{2\Delta x} \quad (10.12)$$

$$(E_x)_{i=0} = - \frac{-\Phi_{ni-3,j,k} + 4\Phi_{ni-2,j,k} - \Phi_{ni-1,j,k}}{2\Delta x} \quad (10.13)$$

Kod sisteminde, tekrar tüm düğümler arasında dolaşılır ve her birinde elektrik alanı hesaplamak için Denklem 10.11, 10.12 ve 10.13'ün negatifi kullanılır.

10.8. Parçacıklar

Parçacıkların sisteme dahil edilmesi için kodların sisteme dahil edilmesi gerekir. Parçacıkların gaz türlerine göre gruplandırılması her bir parçacık için veri girişi yapılmasına gerek kalmadan çalışabilmeyi sağlar. Sayı yoğunluğu ve ortalama akış hızı gibi makroskopik akış özelliklerinin hesaplanmasını da kolaylaştırır [61].

Popülasyonlar daha sonra parçacıklar yüklenerek başlatılır. Parçacıkların belirli bir sınırlayıcı kutu içinde belirli bir sayı yoğunluğu elde edilecek şekilde yüklenmesi istenmektedir. İyonlar için bu sınırlayıcı kutu, hesaplama alanı ile aynı boyutlara sahipken, elektronlar için yalnızca seçilen bir oktantı oluşturur. Sayı yoğunluğu, hacim başına parçacık sayısı olduğundan, hacmi V ve sayı yoğunluğu n olan bir kutu, $N_{gerçek} = nV$ fiziksel iyonlar veya elektronlar içerir. Bu gerçek parçacık sayısı N_{sim} simülasyon makroparçacıkları tarafından temsil edilir ve bu nedenle her birinin ağırlığı $w_{mp} = N_{gerçek}/N_{sim}$ 'dir. Burada N_{sim} bir kullanıcı girişidir. Ağırlığı belirlendikten sonra, küçük parçacık konumlarını ve hızlarını örneklemek için bir döngü kullanılır.

10.9. Zaman Adımları

PIC yöntemi zaman adımlarını da içerdiğinden, zaman parametrelerinin de tanımlanması gereklidir. Spesifik olarak, koda Δt için hangi değerin kullanılacağına ve kaç zaman adımının simüle edileceğinin bilgisinin girilmesi gerekir. Bu bilgiler, World (Dünya) saklanır. Simülasyon zaman adımı $\Delta t = 2 \times 10^{-10}$ saniye olarak ayarlanmıştır ve zaman adımı sayısı 10000'dir. Toplam simüle edilen süre böylece $t = 2\mu s$ 'dir. Hücre boyutuna ilişkin gereksinimler olduğu gibi simülasyon zaman adımı da keyfi olarak

ayarlanamaz. Göz önünde bulundurulması gereken iki kısıtlama vardır. İlk olarak, ilgili en hızlı frekansı, $\Delta t 1/\tau_{\max}$ 'ı çözmek için zaman adımının yeterince küçük olması gerekir. Bu, tam kinetik çalışmalarda plazma frekansı veya manyetize parçacıkların hareketini içeren simülasyonlardaki siklotron frekansı olabilir. İkinci olarak, parçacıkların itme başına bir hücre uzunluğundan daha fazla seyahat etmemesi istenir. Aksi takdirde, parçacığın gördüğü elektrik alanı sürekli değildir.

$$\Delta t < \Delta x/v_{\max} \quad (10.14)$$

Bu denklemden de görülebileceği gibi zaman adımı en hızlı hareket eden parçacıklar tarafından yönetilir. Tam kinetik simülasyonlarda en hızlı parçacıklar elektronlardır. Küçük kütleleri nedeniyle elektronlar iyonlardan çok daha hızlı hareket eder. Aynı potansiyel düşüşü boyunca hızlanan ve böylece eşit kinetik enerjiye ulaşan iyonlar ve elektronlar varsayalım. Elektron hızı iyon hızı ile $v_e = v_i \sqrt{m_i/m_e}$ ile ilişkilidir. Hidrojen için bu oran 42,6 olarak değerlendirilir. Plazma tahrik uygulamalarında karşılaşılan çok daha ağır 131,3 amu ksenon için oran neredeyse 500'e çıkar.

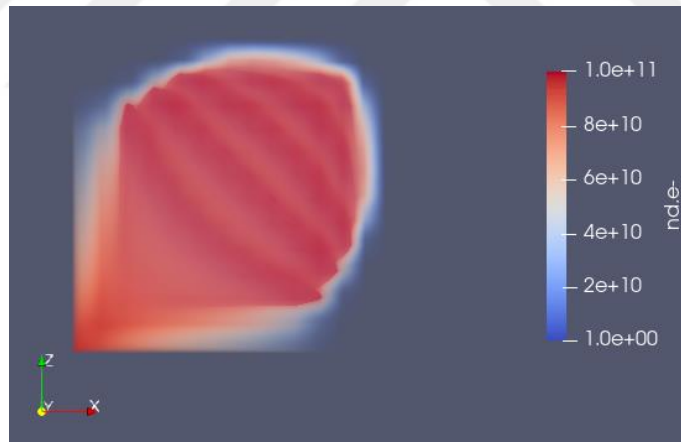
11. KODLARIN ÇALIŞTIRILMASI

Temel hazırlıkları yapılan bu kodların mevcut sisteme uyarlanmasına çalışılmıştır. Bu nedenle, temel büyüklükler argon elementine uygun şekilde güncellenmiştir.

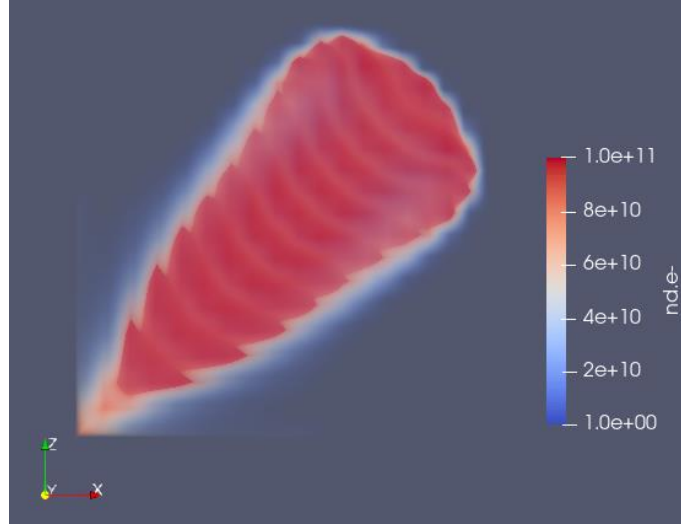
Bu şekilde çalıştırılan kodlar ile elde edilen ilk sonuçlarda plazma ortamı oluşturulmuş, parçacık hareketlendirmesi gerçekleştirilmiştir. Temel olarak hazırlanan sistemden elektron yoğunluğuna ait simülasyon verileri elde edilmiştir.



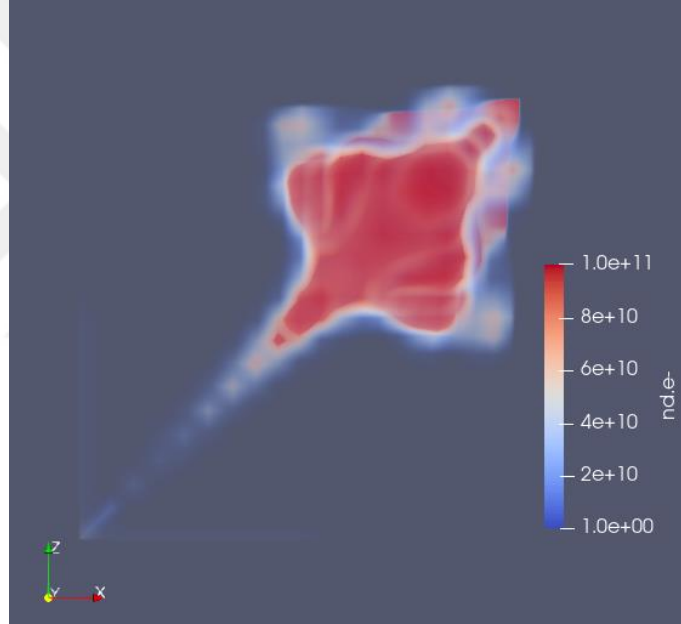
Şekil 11.1. $t=0$ anında hücre içinde plazma ve elektron yoğunluğu $n_{maksimum}=10^{11} \text{ m}^{-3}$.



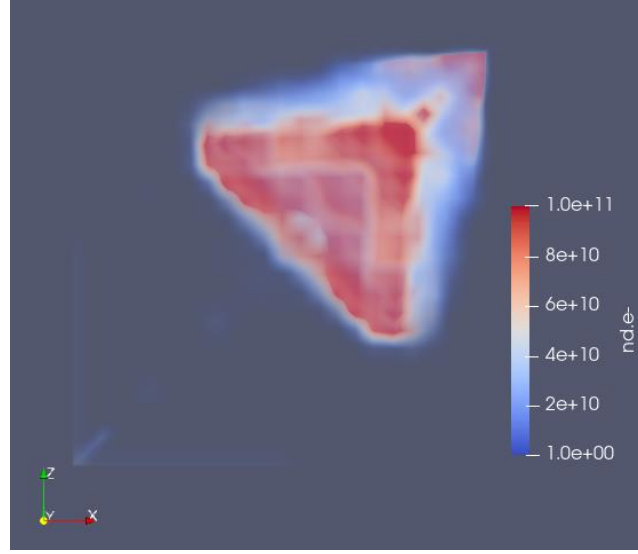
Şekil 11.2. $t=5s$ anında hücre içinde plazma ve elektron yoğunluğu $n_{maksimum}=10^{11} \text{ m}^{-3}$.



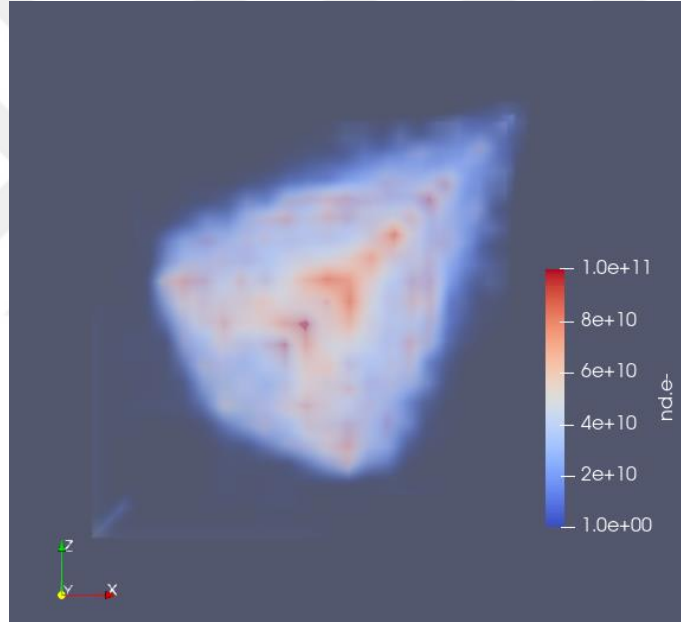
Şekil 11.3. $t=10s$ anında hücre içinde plazma ve elektron yoğunluğu $n_{maksimum}=10^{11} m^{-3}$.



Şekil 11.4. $t=20s$ anında hücre içinde plazma ve elektron yoğunluğu $n_{maksimum}=10^{11} m^{-3}$.



Şekil 11.5. $t=25s$ anında hücre içinde plazma ve elektron yoğunluğu $n_{maksimum}=10^{11} m^{-3}$.



Şekil 11.6. $t=30s$ anında hücre içinde plazma ve elektron yoğunluğu $n_{maksimum}=10^{11} m^{-3}$.

Yapılan bu çalışmalar ile hücre içi elektrostatik parçacık (ES-PIC) yöntemine dayalı ilk tam işlevsel üç boyutlu plazma simülasyon kodu düzenlenip, kullanıldı. Kod, yansıtıcı bir kutuya hapsedilmiş plazmayı simüle etmektedir. Sistemin yükü nötr değildir, bu da elektronların ağır iyon çekirdeği etrafında salınmasına neden olur. Bu sayede, potansiyeli çözme, elektrik alan hesaplama, parçacıkların yüklenmesi ve hareketlendirilmesi, sayı yoğunluğunu hesaplanması ve çıktı alınması çalışması yapılmıştır. Böylece çalışmanın devamında kullanılacak plazma ortamı simülasyonu oluşturulmuştur. Oluşturulan bu görseller, kararlı haldeki plazmanın belirlenen sınırlar içerisinde 3 boyutlu hareketini göstermektedir.

12. SİMÜLASYONUN GERÇEK VERİLER İLE ÇALIŞTIRILMASI

Temel plazma simülasyonu, Particle-in-Cell yöntemi kullanılarak elde edilmiştir. Daha önceden elde edilen deneysel veriler kullanılarak simülasyonun gerçeğe uyarlanmasına çalışılmıştır. Langmuir probu kullanılarak alınan ve simülasyona kullanılan veriler Tablo 12.1’de listelenmiştir.

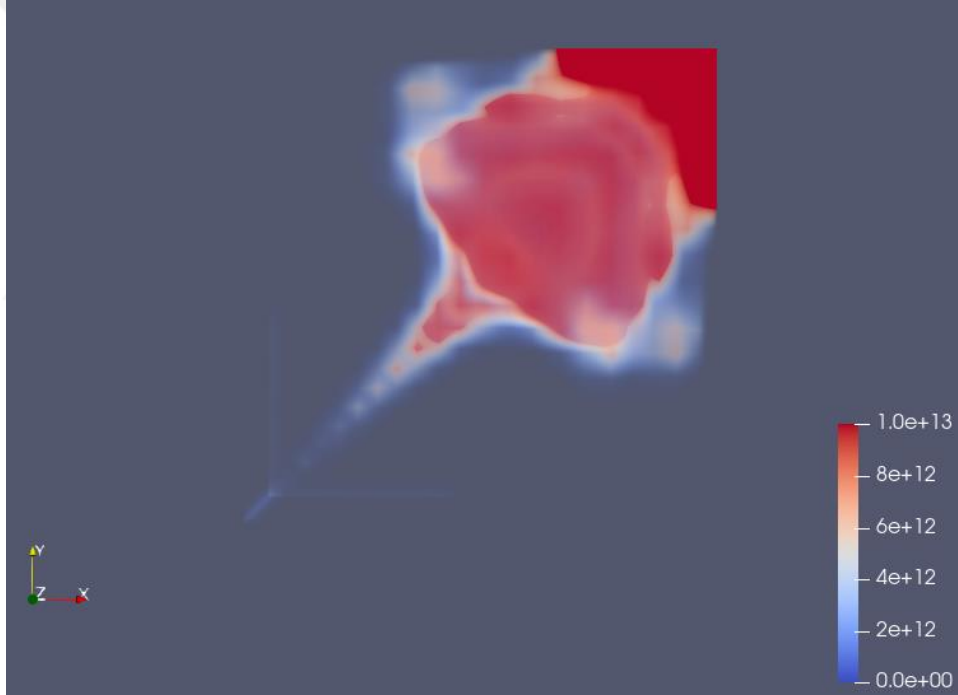
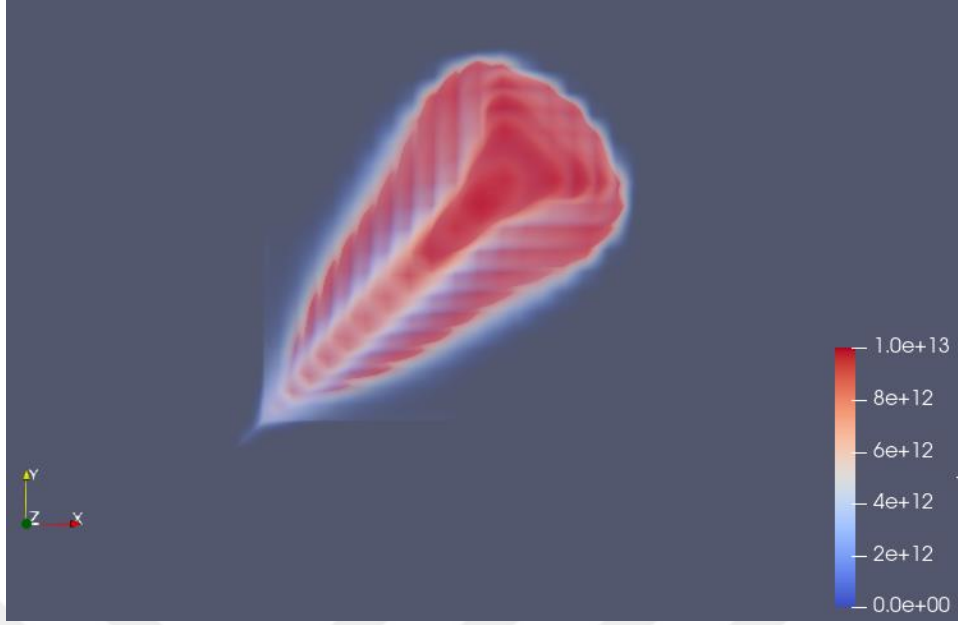
Tablo 12.1. Simülasyonda kullanılan ve daha önceki deneysel çalışmalardan elde edilen Langmuir verileri.

Gaz akış oranı (l/dk)	RF Giriş Gücü (W)	Basınç (mbar)	Elektron Sıcaklığı (eV)
0,05	30	0,51	5,81
0,05	40	0,45	5,16
0,05	50	0,35	5,62

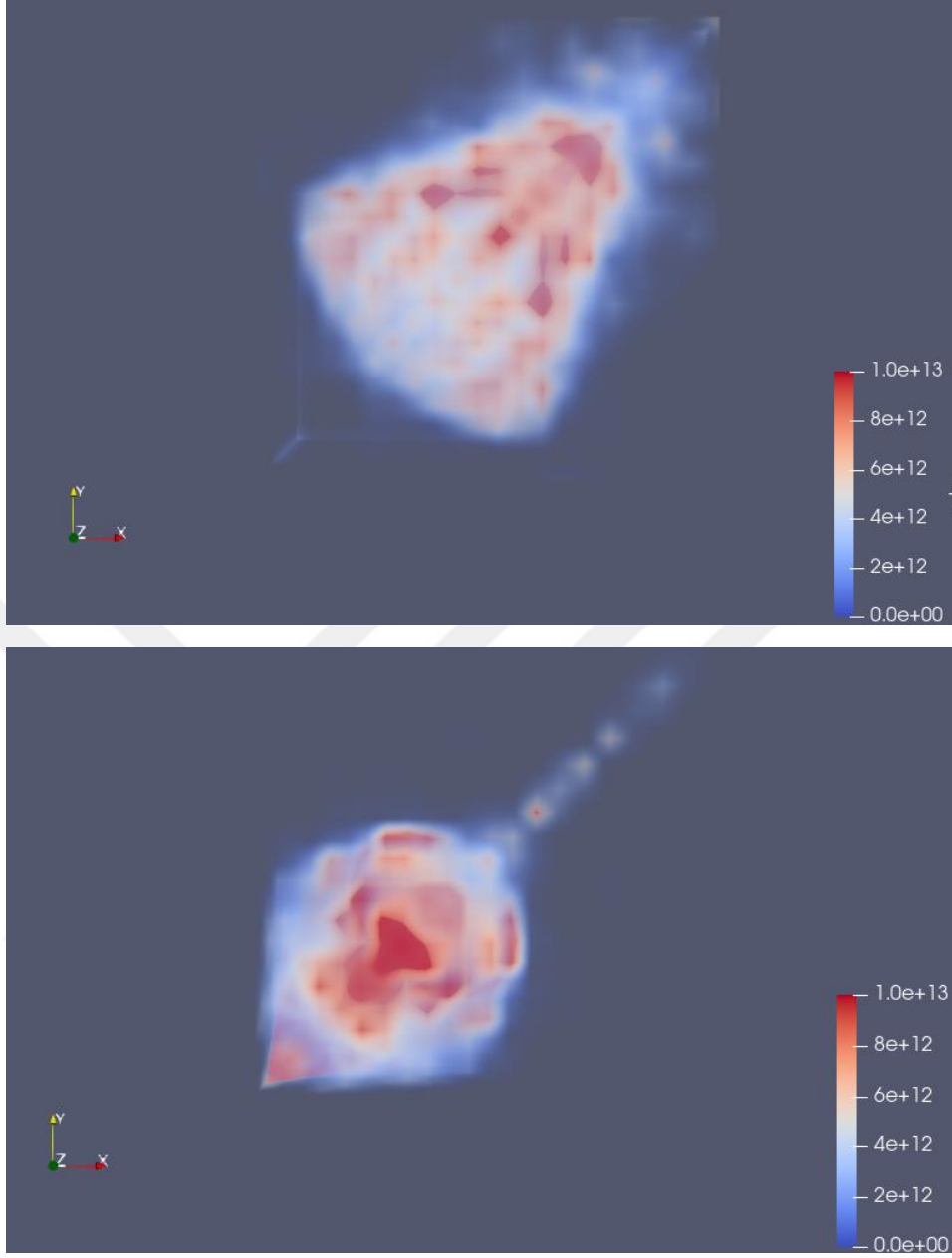
PIC yöntemi ile çalışılırken, hesaplama kolaylığı olması açısından parçacık sayı yoğunluğu değeri düşük tutulmuştur. Deneysel çalışmalarda Langmuir probu ile elde edilen verilere göre simülasyon çalıştırılmıştır. Buna göre elde edilen veriler, Şekil 12.1’de sunulmuştur.



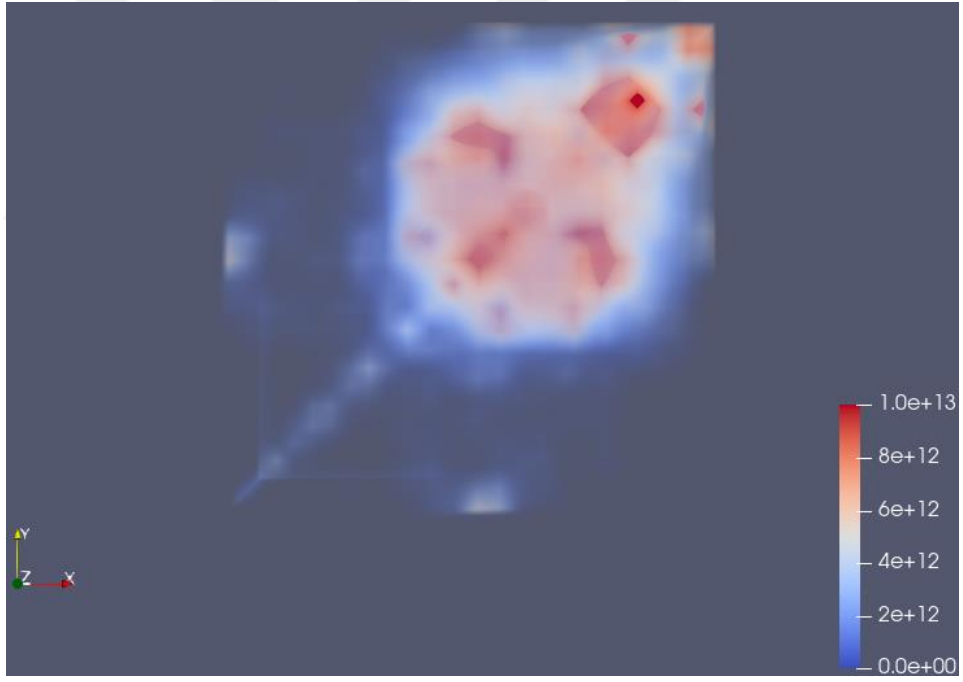
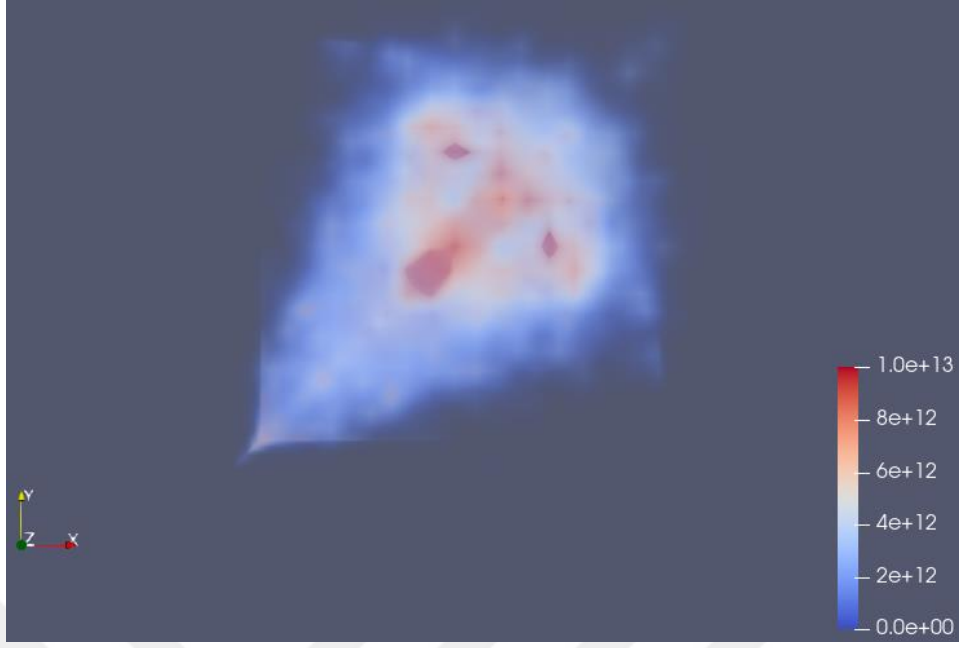
Şekil 12.1. Langmuir probundan alınan veriler doğrultusunda çalıştırılan simülasyona ait görseller $n_{\text{maksimum}}=10^{13} \text{ m}^{-3}$.



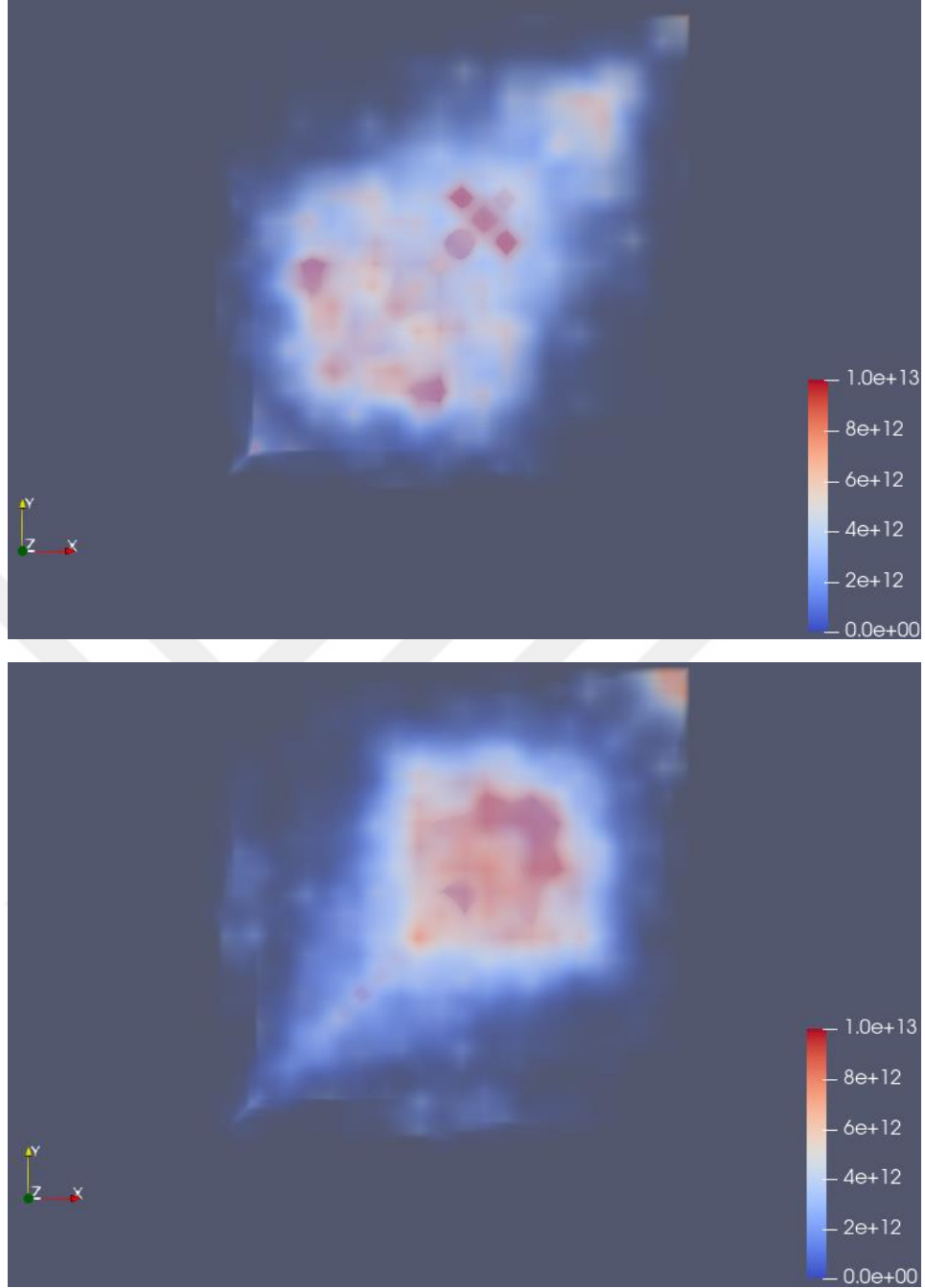
Şekil 12.1. (Devam) Langmuir probundan alınan veriler doğrultusunda çalıştırılan simülasyona ait görseller $n_{\text{maksimum}}=10^{13} \text{ m}^{-3}$.



Şekil 12.1. (Devam) Langmuir probundan alınan veriler doğrultusunda çalıştırılan simülasyona ait görseller $n_{\text{maksimum}}=10^{13} \text{ m}^{-3}$.



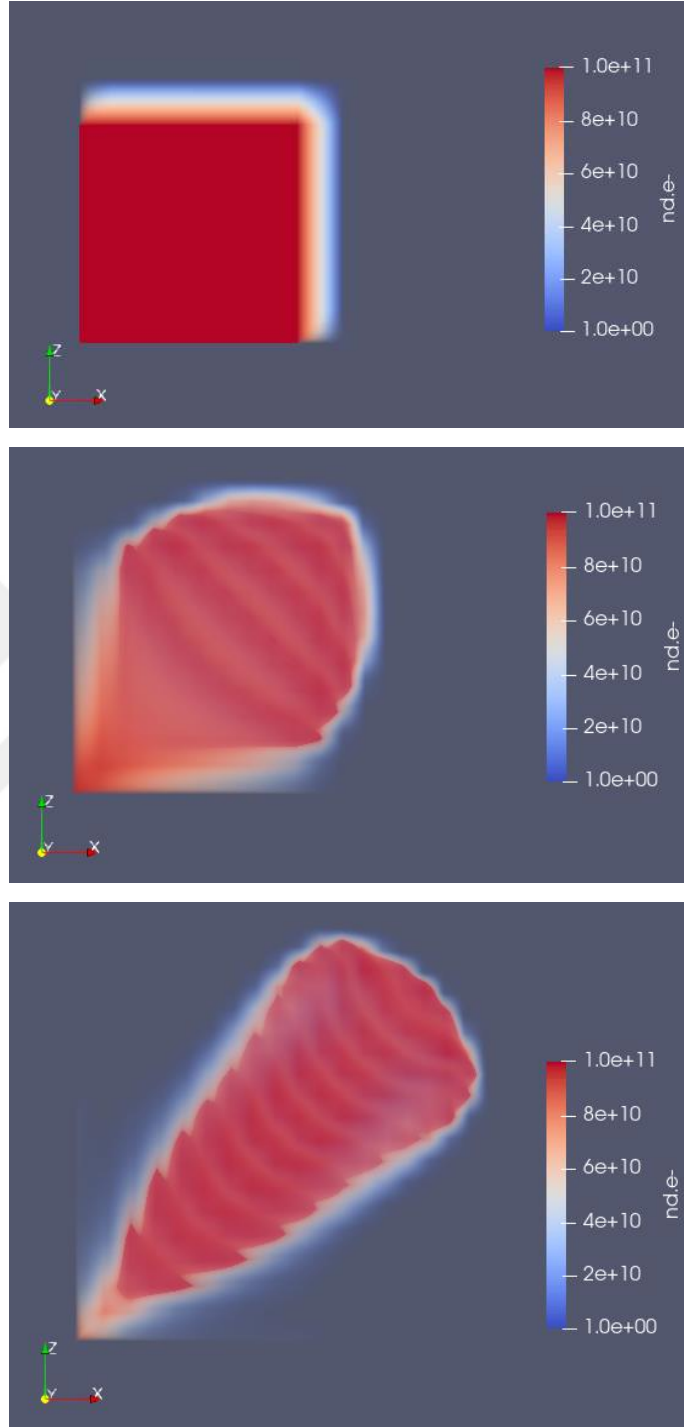
Şekil 12.1. (Devam) Langmuir probundan alınan veriler doğrultusunda çalıştırılan simülasyona ait görseller $n_{\text{maksimum}}=10^{13} \text{ m}^{-3}$.



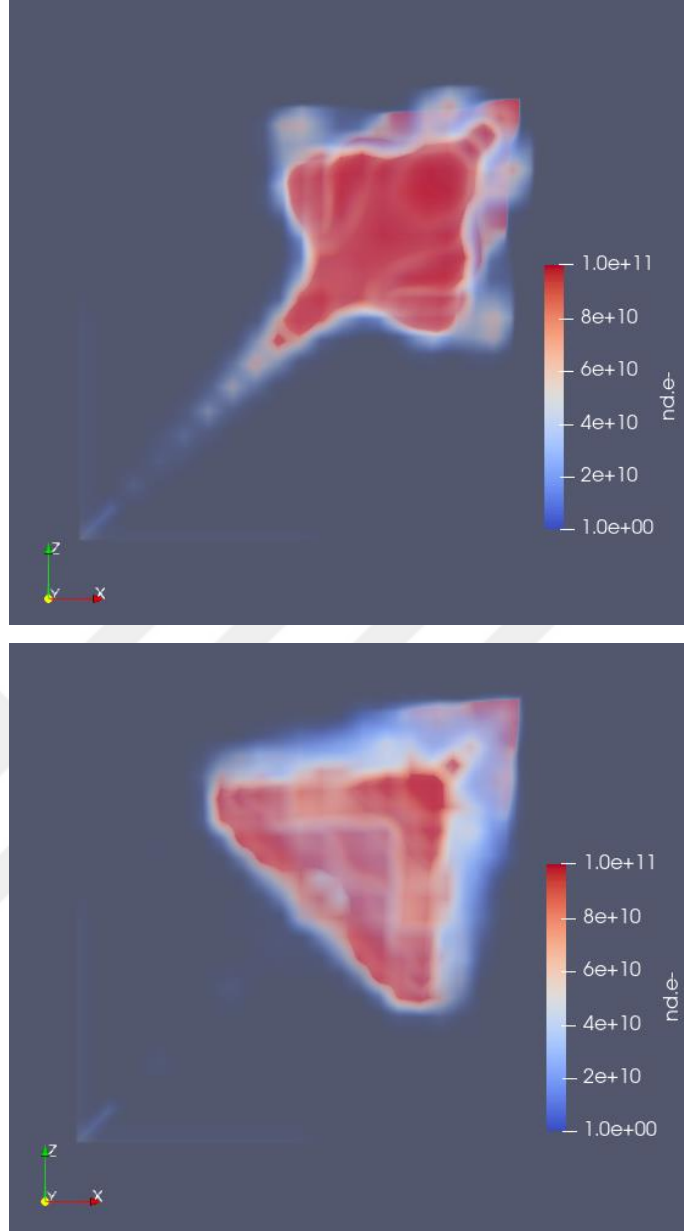
Şekil 12.1. (Devam) Langmuir probundan alınan veriler doğrultusunda çalıştırılan simülasyona ait görseller $n_{\text{maksimum}}=10^{13} \text{ m}^{-3}$.

İlk denemelerde, hesaplama kolaylığı olması açısından elektron yoğunluğu değeri azami 10^{11} m^{-3} mertebesinin üzerine çıkılmamıştır. Çalışmanın devamında, 10^{13} m^{-3} ve 10^{16} m^{-3} değerleri ile çalışılmıştır. Bu çalışma sırasında 10^{16} m^{-3} değeri için simülasyonda hata alınmıştır bu nedenle, deneysel verilerle de uyumlu olan 10^{13} m^{-3} değeri ile çalışma gerçekleştirilmiştir.

Bu çalışmanın ardından, farklı tasarlanan deney sistemi için de simülasyon çalıştırılmıştır. Elde edilen simülasyon görselleri Şekil 12.2’de sunulmuştur.



Şekil 12.2. Farklı tasarlanan deney sistemi için çalıştırılan simülasyona ait görseller, $n_{maksimum}=10^{11} m^{-3}$.



Şekil 12.2. (Devam) Farklı tasarlanan deney sistemi için çalıştırılan simülasyona ait görseller, $n_{maksimum}=10^{11} m^{-3}$.

12.1. OES Verilerinin Simülasyon Çalışmasında Kullanılması

DeneySEL çalışmalarından elde edilen OES verileri, yazılım kullanılarak normalize edilmiş ve simülasyon çalışmasına dahil edilmiştir.

Bu çalışma için Optik Plazma Spektral Hesaplama ve Parametrelerin Yeniden Eldesi – Optical Plasma Spectral Calculation And Parameters Retrieval (OPSIAL) olarak isimlendirilen bir yazılım kullanılmıştır. Plazmanın optik emisyon spektrumunun doğru hesaplanması, plazma fiziğini ve kimyasını anlamak için önemli adımlardan biridir ve astrofizik, yanma, itme, plazma dinamiği gibi temel araştırma alanlarında ve çok sayıda

pratik spektroskopik teşhis ve analiz tekniğinde muazzam uygulamalara sahiptir. Optik olarak ince olmayan önemli sayıda emisyon hattının olduğu genel durumda, radyatif transfer (RT) denkleminin çözümü önemli miktarda hesaplama gücü gerektirir. Bu nedenle, plazma optik emisyonunu işlemek için çoğu yazılım aracı emisyon problemini incelemek için doğruluk ve genelliği kaybetme pahasına hesaplama gücünde önemli bir azalmaya yol açan optik ince durumu varsayarak kestirme yolu kullanır. Xiaofeng Tan, çalışmasında çok sayıda emisyon hattına sahip gazlı emitörler için ışıma transferi denklemini çözmek için ultra hızlı satır satır algoritmayı sunmuştur [68]. Algoritma, LOS (plazma spektral çizgisi) boyunca optik derinliğin zaman alıcı entegrasyonunu çarpımlara indirgeyen ve bu nedenle hesaplamayı ilgili satırların sayısına bağlı olarak iki büyüklük sırası veya daha fazla hızlandıran Fourier uzayındaki optik derinliğin hesaplanmasına dayanır. OPSIAL paketinin geliştirilmesindeki ana motivasyonun, sorunun tedavisinde hız, doğruluk ve esneklik hedefine ulaşmak için bu yeni gelişmeyi plazma emisyon sorununa uygulamak olduğu belirtilmiştir. Bu amaca ulaşmak için OPSIAL ayrıca Doppler etkisinin neden olduğu çizgi genişlemelerini ve plazmadaki elektronlar ve diğer sahte çarpıştırıcılarla çarpışmaları titizlikle ele alır ve plazmanın dört sıcaklığının dikkate alındığı kısmi LTE koşulları altında spektral hesaplamaları destekler: gaz kinetik sıcaklık (T_g), elektron sıcaklığı (T_e), iyonizasyon sıcaklığı (T_i) ve uyarılma sıcaklığı (T_{uyr}). OPSIAL iki ana alt sistemden oluşur: Spektral Hesaplayıcı ve Fit Uygulayıcısı (SCF) ve Otomatik Analizör (AA). SCF, kullanıcının LOS bilgisi girdisini alan ve mutlak spektral parlaklığı elde etmek için ultra hızlı RT hesaplamaları yapan spektral hesaplama motorudur. OPSIAL, dört plazma sıcaklığının (T_g, T_e, T_i ve T_{uyr}) ayrı ayrı belirlenebildiği hem LTE'yi hem de kısmi LTE'yi destekler. SCF, sıcaklık, basınç ve karıştırma oranları gibi plazma parametrelerini optimize ederek belirli bir spektruma uyma yeteneğine sahiptir. OPSIAL'in AA'sı otomatik erişim sorununa adanmıştır ve temel bileşeni, bir Referans Spektral Kitaplığında (RSL) kaydedilen çıkarılan spektral özelliklerle gözlemlenen plazma emisyon spektrumunu eşleştirerek plazmadaki element türlerini otomatik olarak tanımlayan kalibre edilmiş bir tür tanımlayıcısıdır. Plazmadaki elemental türler başarılı bir şekilde tanımlandığında, AA, SCF'yi, takılan ve gözlemlenen spektrumlar arasındaki farkı en aza indirerek plazma parametrelerini otomatik olarak optimize etmeye çağırır [68, 69].

$$\tau(\tilde{\nu}; T, P, U_1, U_2, \dots, U_{N_s}) = \sum_{\alpha}^{N_s} U_{\alpha} \sum_i^{N_{\alpha}} S_{\alpha,i} V(\sigma_{\alpha,i}, \gamma_{\alpha,i}; \tilde{\nu} - \tilde{\nu}_{\alpha,i}) \quad (12.1)$$

Burada $\tau(\tilde{\nu}; T, P, U_1, U_2, \dots, U_{N_s})$; $\tilde{\nu}$ dalga sayısına sahip fonksiyonun optik derinliğini, T ; plazma sıcaklığını, P ; toplam basıncı, $S_{\alpha,i}$; toplam N_α çizgilerindeki α parçacıklarının i . çizgi kuvvetlerini temsil eder.

OPSIAL'de, farklı iyonizasyon durumlarındaki element türlerinin Saha iyonizasyon dengesinde olduğu varsayılır ve tüm elemental türler için iyonizasyon oranlarını çözmek için yerleşik bir iyonizasyon çözücüsü kullanılır.

$$S_{\alpha,i} = S_{\alpha,i}^0 \frac{Q_\alpha^0}{Q_\alpha(T)} \exp \left[-c_2 E_{\alpha,i} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^0} \right) \left[\frac{1 - \exp(-c_2 \tilde{\nu}_{\alpha,i}/T)}{1 - \exp(-c_2 \tilde{\nu}_{\alpha,i}/T^0)} \right] \right] \quad (12.2)$$

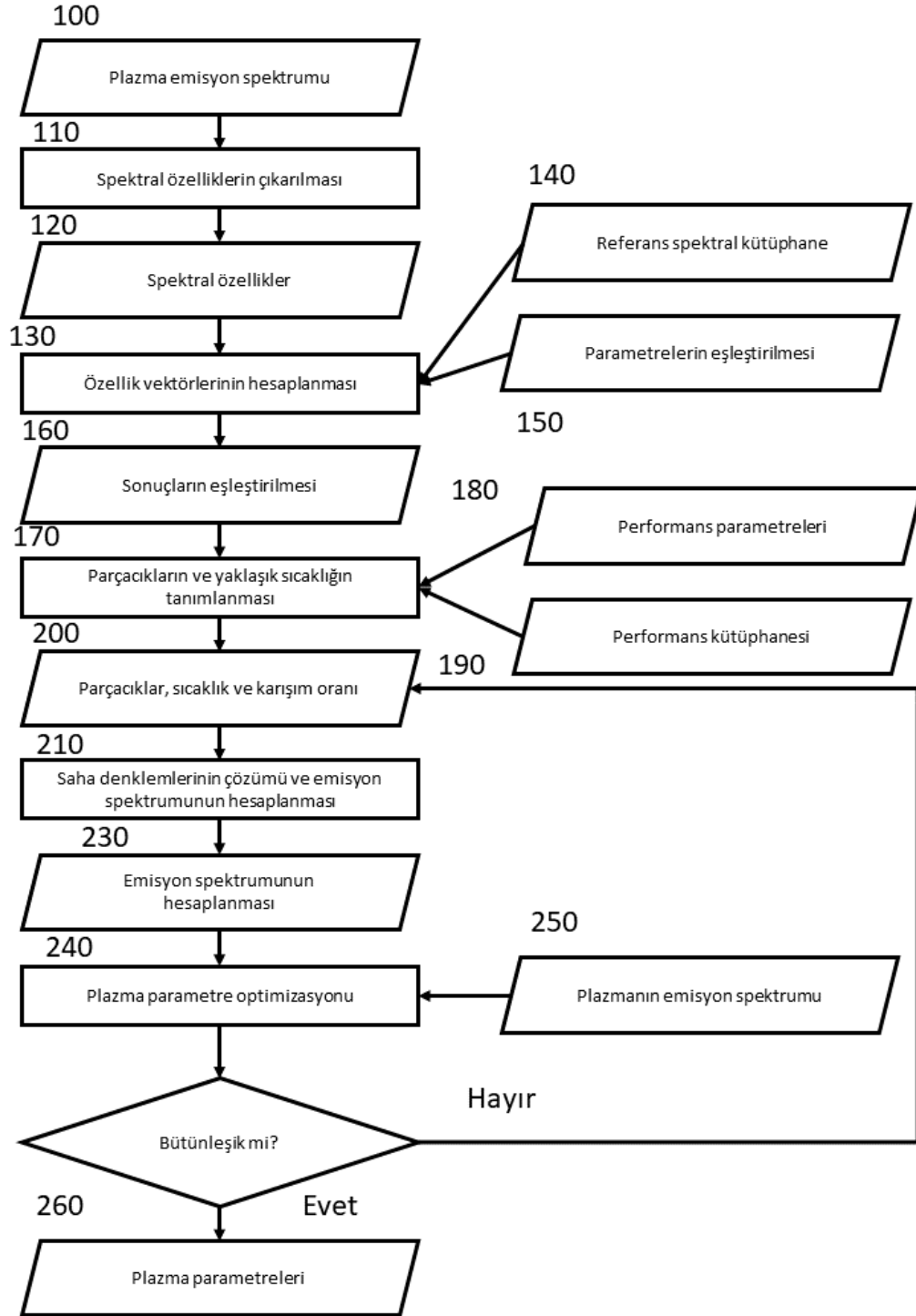
Burada, S_α^0 ; T_0 referans sıcaklığındaki çizgi kuvvetini, Q_α^0 ve $Q_\alpha(T)$ sırasıyla; referans sıcaklık T_0 ve T sıcaklığındaki gaz parçacıklarının toplam parçalı fonksiyonu, $E_{\alpha,i}$; spektral çizginin toplam alt enerji durumunu, $c_2 h_c/k_B$ 'ye eşit bir sabiti temsil eder. OPSIAL, NIST ve Kurucz Atomik Spektral Çizgi Veritabanı ile ortaklaşa çalışır.

OPSIAL, NIST Atomik Spektrum Veritabanında ve Kurucz Atomik Spektral Çizgi Veritabanında bulunan tüm atomik geçişleri 150 nm – 1000 nm arasındaki spektral dalga boyu aralığında içerir [70, 71].

Spektral çizgilerin çarpışma genişlemesi, yayıcı türlerin tüm türlerle (sözde çarpıştırıcılar) ve plazmadaki elektronlarla çarpışmalarına bağlıdır.

$$\gamma_{\alpha,i} = 0,08 \left(\frac{T^0}{T} \right)^{0,7} P \quad (12.3)$$

Burada T , plazmanın K cinsinden sıcaklığı ve P , atmosfer cinsinden basınçtır. OPSIAL yazılımında kullanılan algoritma, Şekil 12.3'de sunulmuştur.



Şekil 12.3. OPSIAL yazılımına ait plazma özelliklerinin alınmasını sağlayan algoritmanın akış şeması. Dikdörtgen içinde gösterilenler aksiyonları ve paralelkenarlar veri nesnelerinin temsil etmektedir.

OPSIAL, spektral eşleştirmeyi kolaylaştırmak için yerleşik RSL'yi (140) kullanır. RSL, desteklenen tüm temel türler için bir anahtar ve değer girdileri koleksiyonundan oluşur ve her bir girdi belirli bir plazma sıcaklığındaki bir temel türe karşılık gelir. OPSIAL, belirli bir elemental tür için RSL'deki anahtar alan, plazma sıcaklığı ve alet

yarık genişliğinin bir demetidir; buna karşılık gelen değer alanı, giriş olarak karşılık gelen anahtar alanı kullanarak hesaplanan spektrumdan çıkarılan spektral özelliklerin (120) bir listesidir.



13. YAZILIMIN UYGULAMASI

Deneyisel çalışmalardan elde edilen OES verileri, OPSIAL yazılımı ile hesaplanmıştır. OPSIAL yazılımında hesaplama yapılmadan önce girişi yapılması gereken veriler aşağıda listelenmiştir.

Dalgaboyu alt limiti

Dalgaboyu üst limiti

Yarık genişliği

Dalgaboyu kafes boyutu

Spektrum fit seçimi

Basınç

0,05 l/dk gaz akış oranında ve 30, 40 ve 50 W RF giriş gücünde argon deşarjından alınan OES verileri için OPSIAL yazılımından alınan değerler ile Langmuir probundan alınan değerlerin karşılaştırılması Tablo 13.1’de sunulmuştur.

Tablo 13.1. OPSIAL yazılımından alınan sonuçlar ile Langmuir probundan alınan verilerin karşılaştırılması.

Gaz akış oranı (l/dk)	RF Giriş Gücü (W)	Basınç (mbar)	Elektron Sıcaklığı (eV)	
			Langmuir	OPSIAL
0,05	30	0,51	3,58	0,72
0,05	40	0,45	5,16	1,15
0,05	50	0,35	5,15	1,36

OPSIAL yazılımında hesaplanan veriler ile Langmuir probundan deneyisel olarak alınan veriler karşılaştırıldığında, değerlerin birebir tutmadığı ancak her bir değer için 0,201 ile 0,264 aralığında bir oran olduğu görülmektedir. Bu oransal farkın nedeninin, Langmuir probundan deneyisel olarak alınan verilerin, prob yazılımında hesaplanırken kullanılan yöntem ile OPSIAL yazılımında kullanılan hesaplama yöntemindeki farklılıklar olabileceği tahmin edilmektedir. Bununla beraber, Langmuir probu ile alınan veriler doğrudan plazma ortamından alınmasına karşın, OPSIAL yazılımında, OES verilerindeki değerler kullanılmaktadır.

14. SONUÇ VE DEĞERLENDİRME

Plazma fiziğinde, deneysel çalışmalarla beraber önemli bir yer tutan ve deneysel çalışmalara da öncü olan matematiksel modeller, simülasyon yöntemleriyle çok daha fazla veri elde edebilmeyi sağlamaktadır. Plazma fiziğinde kullanılan matematiksel modeller, akışkanlar mekaniği ve gaz dağılım fonksiyonlarıyla birlikte, elektromanyetik etkileri de barındırdığından, birçok farklı denklemin bir arada kullanılmasıyla oluşturulmaktadır.

Bu tez çalışmasında, Monte Carlo yaklaşımı anlaşılmasına çalışılmış ve farklı çalışmalardan farklı örnekler incelenmiştir. Monte Carlo yaklaşımına dair çok çeşitli yöntemler olduğu görülmüştür. Bu yöntemlerden özellikle stokastik yaklaşımın, belirli sınırlar içindeki değerlerin kullanılmasıyla oluşturulduğu öğrenilmiş ve plazma fiziğinde de çalışma alanı bulmuş olduğu tespit edilmiştir. Monte Carlo yaklaşımının bilgisayar destekli hesaplamalara imkân tanınmasından ötürü çözümleri yapabilmek için nümerik hesaplamalar yapabilen MatLab yazılımı üzerinde çalışmalar denenmiştir. MatLab kodlarının öğrenilerek ve Monte Carlo döngülerinin yazılım kodlarına dahil edilerek, Monte Carlo yönteminin nasıl çalıştığını görebilmek için klasik bir deneme olan π sayısının yaklaşık değerinin bulunmasına ait kodlar uygulanmıştır. Bunun ardından, plazma fiziğine ait çalışmalarda, difüzyon ve parçacık hareketlerinin gözlenmesi gibi hesaplamalara temel oluşturması için radyasyon iletiminde yansıyan ve absorblanan parçacıkların oranının belirlenebilmesine ait bir çalışma yapılmıştır. Bu uygulamalar sonucunda Monte Carlo metoduna yalnızca teorik açıdan değil uygulama anlamında da daha fazla hâkim olunması amaçlanmıştır.

Plazma fiziğinde kullanılan matematiksel modellerin simülasyon yöntemlerinde kullanılabilmesi için özelleşmiş simülasyon yöntemlerinden biri olan “particle-in-cell (PIC) – hücredeki parçacık” yöntemidir. PIC yöntemi, Monte Carlo çarpışmalarının da ilave edilmesiyle, gerçekçi bir simülasyon ortamı oluşturulabilmesi açısından avantaj sağlamaktadır. Bu sebeple, bu çalışmada PIC yöntemine odaklanılmıştır.

Tez çalışmasının deneysel bölümünde, argon gazına ait farklı gaz akış oranlarında ve farklı RF giriş gücü değerlerinde deşarj oluşturulmuştur. Bu çalışmada, elektrik ve manyetik alanın yoğun olduğu deşarj bölgesinin devamında yer alan ve çalışma kapsamında “mekaniksel zorlamalı deşarj bölgesi” olarak isimlendirilen bölgenin incelenmesi amaçlanmıştır.

Bu sayede, deşarj odasına uygun şekilde tasarlanmış olan Langmuir probu ile *mekaniksel zorlamalı deşarj bölgesine* ait elektron sıcaklığı, elektron yoğunluğu, plazma potansiyeli ve denge potansiyel değerleri elde edilebilmiştir. Elde edilen değerler, plazmanın karakteristiğinin belirlenmesinde kullanılmıştır. Elektron sıcaklığı ve elektron yoğunluğu verilerine bakıldığında, elde edilen plazmanın ısıl olmayan plazma şartlarını sağladığı gözlenmiştir.

Yapılan optik emisyon spektrumu ölçümlerinden elde edilen veriler ise literatür ile karşılaştırılarak, ilk olarak elde edilen plazmanın doğruluğunun teyidini sunmuştur. NIST sisteminden alınan veriler ile sonuçlar karşılaştırılarak, elde edilen plazmanın argon gazına ait olduğu doğrulanmıştır. Dallanma kesri için hesaplamalar yapılarak, plazma karakteristiğinin belirlenmesinde kullanılacak doğru spektral çizgilerin belirlenmesi sağlanmıştır. Dallanma kesrinin hesaplanması için kullanılan OES verileri, daha önce yapılan çalışmalarla karşılaştırılmış, ayrıca deşarj bölgesi için doğrulanmış sonuçların post-deşarj bölgesi için de benzer sonuçlar ortaya koyduğunu göstermiştir. Buna göre, artan gaz akış oranı, post-deşarj bölgesi için de rezonans çizgi şiddetlerinin, metastabil seviyelerdeki çizgi şiddetlerinden daha güçlü şekilde artışına sebep olmaktadır.

Mekaniksel zorlamalı deşarjın dallanma kesri hesaplamaları, literatürdeki yöntemlere göre nispeten daha kolay bir yöntem ile hesaplanmıştır. NIST veritabanından elde edilen Einstein katsayıları ile de hesaplamalar yapılarak, kullanılan yöntemin doğruluğu incelenmiştir. Bu çalışmada düşük gaz akış oranlarıyla, düşük basınç elde edilmiştir. Gaz akış oranının artmasıyla beraber, bu çalışmada kullanılan yöntemle elde edilen sonuçların doğruluğunun arttığı gözlenmiştir. Düşük gaz akış oranlarında, OES çizgi şiddetlerinin daha yüksek olduğu gözlenmiştir. Buradan iyonlaşma enerjisinin, gaz akış oranının artışıyla azaldığı görülmektedir. Bu nedenle, hesaplamalarda hata oranının arttığı söylenebilir. Böylece, kullanılan yöntemin, çok düşük basınçlar için geçerli olmadığı sonucuna varılabilir. Buna, artan gaz basıncı ile azalan OES çizgi şiddetleri neden olmaktadır, çünkü ışık şiddeti Einstein katsayısı ile doğru orantılıdır.

Literatürde farklı hesaplama ve ölçüm yöntemleri, farklı güç kaynakları ile ve basınç değerlerinde elde edilen plazmalar için hesaplanmıştır. Yapılan çalışmalar genellikle, elektrik ve manyetik alanın yoğun olduğu elektrotlara yakın bölgelerde gerçekleştirilmiştir. Yapılan hesaplamalarda, mekaniksel zorlamalı bölgeden alınan veriler kullanılmıştır. Böylece literatüre, farklı şartlar altında elde edilen deşarj için sadeleştirilmiş bir denklem ile yapılan dallanma kesri sonuçları sunulmuştur.

Mekaniksel zorlamalı bölgeden alınan Langmuir probu verileri ile OES verileri bir arada kullanılarak plazmaya ait elektron sıcaklığı ve elektron yoğunluğu değerleri elde edilmiştir.

Elektrik ve manyetik alan kaynağına yakın bölge için literatürde elde edilen sonuçlar ile büyük oranda benzer özellik gösterdiği gözlenmiştir. Uygulanan RF gücünün artışı ile basıncın azaldığı gözlenmiş, mekaniksel zorlamalı deşarj bölgesinde elektron sıcaklığı ile basıncın ters orantılı olduğu görülmüştür. Mekaniksel zorlamalı bölgede, uygulanan RF gücünün elektron sıcaklığı ile ters orantılı olduğu tespit edilmiştir.

Dallanma kesrinin hesaplanması, optik emisyon spektrometresinin kalibrasyonunda da kullanılabilir. Bununla beraber, parçacıklarının yaşam ömrünün hesaplanmasında da kullanılmaktadır. Parçacıkların yaşam ömürleri, plazma uygulamalarında önemli rol oynamaktadır. Işıma için yaşam ömrü, enerji seviyesindeki nüfus yoğunluğunun azalmasını gösteren tek ölçektir. Işıma yaşam ömrü uyarımda, elektronun ve holün doğrudan ölçülen bulunma olasılığının optik geçiş oranını ve dalga fonksiyonunu aynı anda gösterebilen bir özelliktir. Bu nedenle, parçacıkların yaşam ömürlerinin hesaplanması ve ölçümü plazma uygulamalarının geliştirilmesine altyapı oluşturabilir. Çalışmada kullanılan optik yöntem, argon enerji seviyelerinin özelliklerinin incelenmesinde hızlı sonuç verebilen, düşük çözünürlüklü spektrometre kullanılması sebebiyle düşük maliyetli bir çözüm sunmaktadır. Bu çalışmanın sonuçları, parçacık uyarılmalarında elektronun ve holün aynı anda belirlenebilmesini gösterebilen yaşam ömrü ile ilgili çalışmalar için katkı sağlayabilecek, optik geçişlerin incelenmesinde ve buradan elde edilecek verilerle plazma uygulamalarının geliştirilmesinde kullanılabilir.

Çalışmada kullanılan bir diğer deşarj sistemi ile elde edilen argon deşarjına ait mekaniksel olarak zorlanmış bölgeden alınan OES verileri ve basınç değerleri ile plazma karakteristiğine ait değişimler gözlenmiştir. Özel olarak balon şeklinde tasarlanan bu bölgede, plazma yoğunluğunun azaldığı ve bu nedenle aynı şartlardaki basınç değerlerine göre daha düşük basınç değerleri ölçülmüştür. Bu deşarj sistemi sayesinde, bulutsu yapıya ait incelemeler laboratuvar ortamında gerçekleştirilebilecektir.

Deneysel verilerin simülasyonda kullanımıyla, simülasyonu yapılan sistemin doğruluğu görülmeye çalışılmıştır. Elde edilen veriler, deneysel çalışmada Langmuir probu ile alınan veriler ile karşılaştırılmıştır. OPSIAL yazılımından elde edilen veriler sunulmuştur. Buradaki değerler incelendiğinde, Langmuir probundan alınan veriler ile

OPSIAL yazılımı ile hesaplanan sonuçlar arasında bir oran gözlenmiştir. Değerlerin birebir olmamasına karşın bir orana sahip olmaları, yüksek görünse de bir hata oranının varlığını göstermektedir. Bununla beraber, Langmuir probundan alınan veriler, anlık olarak sabit kalmamaktadır. Bu nedenledir ki aynı şartlar altında Langmuir probu ile birden fazla sayıda ölçüm alınarak değerlerin sabit kalması beklenmektedir. Langmuir probunda olduğu gibi OES verilerinde de deşarjın nispeten kararlı hale gelmesi için, şartlar değiştirildikten sonra bir süre beklenerek ölçümler alınmaktadır. Buna rağmen, olabildiğince azaltılmasına karşın ortamdaki diğer ışık ışınları, OES cihazında zamanla meydana gelen kalibrasyon sapmaları ve teorik değerlerle birebir uyuşmayan bazı spektrum değerleri nedeniyle NIST gibi veri tabanlarındaki değerler tamamen aynı olmamaktadır.

Tez çalışmasının ana amacı, ısı olmayan soğuk plazmalardaki optik özelliklerin incelenmesinde teorik modellerin incelenmesidir. Bu tez çalışmasında dallanma kesrine ait hesaplamalar gerçekleştirilmiş, matematik model çalıştırılmış ve deneysel verilerden alınan değerler simülasyona uyarlanmıştır. Böylece, dallanma kesri hesaplaması, temel simülasyon verileri, Langmuir probundan alınan veriler ve OES verileri ile elde edilen deşarja ait farklı verilerin yer aldığı bir çalışma gerçekleştirilmiştir. Bu çalışmanın gerçekleştirilebilmesi için Boltzmann denklemi, hücredeki parçacık yöntemi, çizgi oran yöntemi kullanılarak teorik modellerin incelemesi sağlanmıştır. İncelenen bu yöntemler arasından Boltzmann denklemi, ısı ve ısı olmayan plazmalar için elektron sıcaklığı ve elektron yoğunluğu hesaplamalarında kullanılmaktadır ve bu çalışma için de Boltzmann denkleminde yararlanılmıştır. Bununla beraber, hücredeki parçacık yöntemi, hesaplamalarında Boltzmann denklemini de içerecek şekilde bir matematiksel modeldir. Bu çalışmada hücredeki parçacık yöntemi ile parçacık hareketleri, kararlı plazma hali için izlenmiştir. Yapılan çalışmalar, plazmanın *mekaniksel zorlamalı deşarj bölgesinde* gerçekleştirilmiştir. Bu sayede hem literatüre bu bölgeye ait veriler kazandırılmış hem de plazma uygulamalarında kullanılan bu bölge verisinden *akıllı ve yenilikçi malzemelerin* üretiminde verimlilik ve kolaylık amacıyla yararlanılabilecektir.

Plazma uygulamaları endüstride artarak devam etmektedir. Bu çalışmadan yola çıkılarak yapışkanlık artırma, su itici kaplama gibi özelliklerin malzemeye kazandırılması sırasında hangi gaz deşarjının hangi uygulamada kullanılabileceğine dair fikir edinebilmek, parçacıkların yaşam ömürlerinin hesaplanması sayesinde mümkün olabilecektir. Bu çalışmada simülasyon modelleri, plazmanın denge durumu için

hesaplanmıřtır. İlerleyen alıřmalarda, akan deřarjların simlasyonlarının yapılması, plazma uygulamaları aısından da faydalı olacaktır. PIC ynteminde kullanılan hcre hacmi deęiřtirilerek, alıřmanın geniřletilmesi saęlanabilecektir.



KAYNAKÇA

- [1] J. W. Coburn, «Plasma-assisted etching,» *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, cilt 2, pp. 1-41, 1982.
- [2] D. B. Graves, «Plasma processing in microelectronics manufacturing,» *AIChE Journal*, cilt 35, no. 1, pp. 1-29, 1989.
- [3] M. Fiebrandt, B. Hillebrand, S. Spiekermier, N. Bibinov, M. Böke ve P. Awakowicz, «Measurement of Ar resonance and metastable level number densities in argon containing plasmas,» *Journal of Physics D: Applied Physics*, cilt 50, p. 355202, 2017.
- [4] D. M. Manos ve D. L. Flamm, *Plasma Etching: An Introduction (Plasma - Materials Interactions)*, New York: Academic Press, 1989.
- [5] M. Konuma, *Film Deposition by Plasma Techniques*, New York: Springer, 1992.
- [6] M. A. Lieberman ve R. A. Gottscho, *Design of High Density Plasma Sources for Materials Processing*, New York: Wiley, 1994.
- [7] M. A. Lieberman ve A. J. Lichtenberg, *Principles of Plasma Discharge and Material Processing*, New York: Academic Press, 1994.
- [8] M. Nikovic, M. J. Newton, C. I. Sukenik, L. Vuskovic ve S. Popovic, «Measurements of Population Densities of Metastable and Resonant Levels of Argon using Laser Induced Fluorescence,» *Journal of Applied Physics*, cilt 117, p. 023304, 2015.
- [9] G. A. Hebner, «Spatially resolved, excited state densities and neutral and ion temperatures in inductively coupled argon plasmas,» *Journal of Applied Physics*, cilt 80, no. 5, 1996.
- [10] B. K. McMillin ve M. R. Zachariah, «Spatially resolved, excited state densities and neutral and ion temperatures in inductively coupled argon plasmas,» *Journal of Applied Physics*, cilt 79, no. 77, 1995.
- [11] N. B. e. al., «4s3P2 metastable level density and temperature measurement in a low-density argon plasma,» *Plasma Sources Science and Technology*, cilt 6, no. 2, 1997.
- [12] A. Bograerts ve R. Gijbels, «Modeling of metastable argon atoms in a direct-current glow discharge,» *Physical Review A*, cilt 52, p. 3743, 1995.
- [13] S. Rauf ve M. J. Kushner, «Argon metastable densities in radio frequency Ar, Ar/O₂ and Ar/CF₄ electrical discharges,» *Journal of applied Physics*, cilt 82, p. 2805, 1997.

- [14] E. Augustyniak, S. Filimonov ve J. Borysow, «Spatial distributions of absolute densities of argon metastable state 3p54s in a Gaseous Electronics Conference Reference Cell,» *Journal of Applied Physics*, cilt 86, p. 4767, 1999.
- [15] E. Sonnendrücker, «Monte Carlo Methods with applications to plasma physics,» Münih, 2014.
- [16] F. F.-V. J. M. S. J. Salvat, A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport, Barselona: Nuclear Energy Agency Organisation for Economic Co-Operation and Development, 2006.
- [17] H. Ö. Esen, %1 içinde *İşletme Yönetiminde Sistem Yaklaşımı*, İstanbul, Avcıol Basım Yayın, 1994, p. 27.
- [18] W. L. Winston, %1 içinde *Operations Research Application and Algorithms*, Boston, Kent Publishing Company, 1991, p. 1115.
- [19] A. E. Rafetry, «Washington University,» 9 3 2004. [Çevrimiçi]. Available: <http://csde.washington.edu/~handcock/simuw/socmeth03.pdf>. [Erişildi: 4 11 2019].
- [20] M. Pidd, %1 içinde *Computer Simulation In Management Science*, Chichester, John Wiley & Sons Ltd., 1990, p. 22.
- [21] M. Sevütekin, «Ekonometrik Simulasyon Modelleri,» *Uludağ Üniversitesi İktisadi İdari Bilimler Fakültesi Dergisi*, cilt 13, no. 1-2, 1992.
- [22] H. A. Taha, %1 içinde *Operations Research An Introduction*, New York, Macmillan Publishing Co. Inc., 1987, p. 695.
- [23] J. E. Gubernatis, *Physics of Plasmas*, no. 12, p. 057303, 2005.
- [24] H.-s. XIE, «Pure Monte Carlo Method: a Third Way for Plasma Simulation,» *Plasma Physics*, 2012.
- [25] H.-s. XIE, Pure Monte Carlo Method: a Third Way for Plasma Simulation, 2012.
- [26] O. Buneman, «Dissipation of currents in ionized media,» *Phys. Rev.*, no. 115, pp. 503-517, 1959.
- [27] J. M. Dawson, «One-dimensional plasma model,» *Phys. Fluids*, no. 5, pp. 445-459, 1962.
- [28] A. B. L. C. K. Birdsall, Plasma Physics via Computer Simulation, New York: McGraw-Hill, 1985.
- [29] J. W. E. R. W. Hockney, Computer Simulation Using Particles, New York: McGraw-Hill, 1981.

- [30] C. K. Sarıkaya, *Derivation of the parallel PIC/MCC numerical code and its application to the kinetic analysis of photoresonance plasma and the problem of identification of impurities within the ples method*, Ankara, 2017.
- [31] J. P. S. B. W. L. J. S. Frans Ebersohn, «Quasi-one-dimensional code for particle-in-cell simulation of magnetic nozzle expansion,» %1 içinde *50th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*, Ohio, 2014.
- [32] «Particle In Cell,» 8 Kasım 210. [Çevrimiçi]. Available: https://www.particleincell.com/2010/es-pic-method/#charge_density. [Erişildi: 28 Haziran 2020].
- [33] M. Tanışlı ve Şahin Neslihan, *Physics of Plasmas*, no. 23, 2016.
- [34] N. U. Rehman, M. A. Kahn, M. Y. Naz, M. Safiq ve M. Zakaullah, *Physica Scripta*, no. 88, 2013.
- [35] A. Grill, New York: IEEE Press, 1993.
- [36] C. B. Boss ve K. J. Freeden, USA: Perkin-Elmer Corporation, 1997.
- [37] V. N. Ochkin, Weinheim, New York, Basel, ,Cambridge, Tokyo: VCH, 2009.
- [38] F. F. Chen, «Langmuir Probe Diagnostic,» Jeju, 2003.
- [39] R. L. Merlino, *American Association of Physics Teachers*, cilt 12, no. 75, pp. 1078-1085, 2007.
- [40] <http://homepage.physics.uiowa.edu/~rmerlino/>. [Erişim tarihi: 12.27.2020].
- [41] M. Tanışlı, N. Şahin ve S. Demir, *Optik*, no. 142, pp. 153-162, 2017.
- [42] I. D. Sudit ve R. C. Woods, *Journal of Applied Physics*, no. 76, p. 4488, 1994.
- [43] J. s. Kim, M. V. Rao, M. A. Capelli, S. P. Sharma ve M. Meyyapan, *Plasma Sources Science Technology*, no. 10, pp. 191-204, 2001.
- [44] J. E. Heidenreich III, J. R. Paraszczack, M. Moisan ve G. Suave, *Journal of Vacuum Science Technology B*, p. 347, 1987.
- [45] J. E. Allen, *Physica Scripta*, no. 45, pp. 497-503, 1992.
- [46] L. S. Pilling ve D. A. Carnegie, *Plasma Sources Science Technology*, no. 16, pp. 570-580, 2007.
- [47] B. v. Minderhout, T. Peijnenburg, J. M. Vogels ve G. M. W. Kroesen, *Journal of Physics D: Applied Physics*, no. 52, 2010.
- [48] K. Suzuki, S. Okudaira, N. Sakudo ve I. Kanomata, *Japanese Jouranl of Applied Physics*, cilt 16, no. 11, 1979.

- [49] K. Suzuki, *Applied Physics Letters*, no. 50, p. 728, 1987.
- [50] J.-L. Brisset, D. Moussa, A. Doubla, E. Hnatiuc, B. Hnatiuc, G. K. Youbi, J.-M. Herry, M. Naitalia ve M.-N. Bellon-Fontaine, *Ind. Em. Chem. Res.*, no. 47, pp. 5761-5781, 2008.
- [51] F. Rossi, O. Kylian , H. Rauscher, M. Hasiwa ve D. Gilliland, *New Journal of Physics*, no. 11, 2009.
- [52] C. O'Riordan, T. Delaney ve T. Grimes, *Int. J. Clin. Pharm.*, no. 38, pp. 1172-1181, 2016.
- [53] J. B. Boffard, R. O. Jung, C. C. Lin ve A. E. Wendt, «Optical emission measurements of electron energy distributions in low-pressure argon inductively coupled plasmas,» *Plasma Sources Sciences and Technology*, cilt 19, p. 065001, 2010.
- [54] D. Mariotti, Y. Shimizu, T. Sasaki ve N. Koshizaki, «Method to determine argon metastable number density and plasma electron temperature from spectral emission originating from four 4p argon levels,» *Applied Physics Letter*, cilt 89, p. 201502, 2006.
- [55] M. Nikolic, «Characterization of Microwave Discharge Plasmas for Surface Processing,» Old Dominion University, Norfolk, 2013.
- [56] A. Y.-G. M. Schulze, A. v. Keudell ve P. Awakowicz, «A robust method to measure metastable and resonant state densities from emission spectra in argon and argon-diluted low pressure plasmas,» *Journal of Physics D: Applied Physics*, cilt 41, p. 065206, 2008.
- [57] N. Şahin, «An investigation of the spectral lines of argon discharge with Low electron density,» *Optik*, cilt 195, p. 163165, 2019.
- [58] R. C. Hilborn, «Einstein coefficients, cross sections, f values, dipole moments, and all that,» *American Journal of Phiscis*, cilt 50, p. 982, 1982.
- [59] J. Camparo ve G. Fathi, «Effects of rf power on electron density and temperature, neutral temperature, and Te fluctuations in an inductively coupled plasma,» *Journal of Applied Physics*, cilt 105, p. 103302, 2009.
- [60] M. Tanışlı, N. Şahin ve S. Demir, «An investigation on optical properties of capacitive coupled radio-frequency mixture plasma with Langmuir probe,» *Optik*, cilt 142, pp. 153-162, 2017.
- [61] L. Brieda, *Plasma Simulations by Examples*, Londra: Taylor & Francis, 2019.
- [62] G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Clarendon Press, 1994.

- [63] C. K. Birdsall ve A. B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulations*, CRC Press, 2004.
- [64] LAPACK, «LAPACK-Linea Algebra PACKage,» LAPACK, 2021. [Çevrimiçi]. Available: 222.netlib.org/lapack. [Erişildi: 2021].
- [65] P. R. Amestoy, I. S. Duff, J.-Y. L'Excellent ve J. Koster, «MUMPS: a general purpose distributed memory sparse solver.,» *International Workshop on Applied Parallel Computing*, pp. 121-130, 2000.
- [66] S. Balay, S. Abhyankar, M. Adams, J. Brow, P. Brune, K. Buschelman, L. Dalcin, A. Dener, V. Eijkhout ve W. Gropp, *PETSc User Manual*, Argonne National Laboratory, 2019.
- [67] Wikipedia, «Wikipedia,» 2021. [Çevrimiçi]. Available: https://en.wikipedia.org/wiki/Tridiagonal_matrix_algorithm. [Erişildi: 2021].
- [68] Xiaofeng Tan, «A Software Package for Rigorously Calculating Optical Plasma Spectra and Automatically Retrieving Plasma Properties».
- [69] S. Pellerin, J. M. Cormier, F. Richard, K. Musiol ve J. Chapelle, «A spectroscopic diagnostic method using UV OH band spectrum,» *Journal of Physics D: Applied Physics*, pp. 726-739 , 1996.
- [70] «NIST Atomic Spectra Database,» NASA, [Çevrimiçi]. Available: https://www.physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels_form.html. [Erişildi: 8 6 2022].
- [71] «Atomic Spectral Line Database from CD-ROM 23 of R. L. Kurucz,» [Çevrimiçi]. Available: <https://lweb.cfa.harvard.edu/amp/ampdata/kurucz23/sekur.html>. [Erişildi: 8 6 2022].
- [72] K. Danzmann ve M. Kock, *J. Opt. Soc. Am.*, cilt 72, no. 11, 1982.

