MÔ HÌNH HÓA QUỸ ĐẠO CỦA ELECTRON TRONG TỪ TRƯỜNG CỦA NGUỒN PLASMA LƯỠNG CỰC TRÊN PHẦN MỀM MATLAB

MODELIZATION OF ELECTRON TRAJECTORIES IN THE MAGNETIC FIELD OF AN ELEMENTARY DIPOLAR PLASMA SOURCE BASED ON MATLAB SOFTWARE

Trần Tấn Vinh

Trường Cao đẳng Công nghệ Thông tin, Đại học Đà Nẵng; ttvinh@cit.udn.vn

Tóm tắt - Nguồn plasma lưỡng cực là giải pháp gần đây được nghiên cứu thiết kế để tạo ra các plasma đồng nhất, mật độ cao. Để tối ưu hóa nguồn plasma, cần thiết phải mô hình hóa cơ chế hình thành plasma, mà trong đó việc mô hình hóa chuyển động của các electron nhanh đóng vai trò quan trọng. Về mặt lý thuyết, bài báo trình bày mô hình giải tích của chuyển động electron trong từ trường của các dạng nam châm lưỡng cực hình cầu, hình trụ dài vô hạn với từ trường của chúng có thể biểu diễn dưới dạng giải tích. Tuy nhiên, các nam châm vĩnh cửu được nghiên cứu và sử dụng trong các bộ nguồn plasma lưỡng cực có dạng hình trụ, mà từ trường của chúng không thể mô hình hóa dưới dạng giải tích. Để giải quyết vấn đề này, bài báo trình bày mô hình tính toán số để xác định quỹ đạo của các electron nhanh trong từ trường của các nam châm lưỡng cực, dựa trên phần mềm Matlab với từ trường của các nam châm được tính toán từ phần mềm FEMM.

Từ khóa - mô hình hóa; nguồn plasma lưỡng cực; quỹ đạo của electron; chuyển động của electron; nam châm lưỡng cực; từ trường.

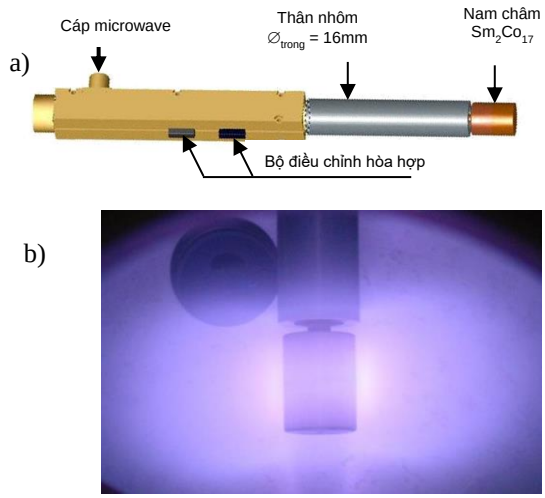
Abstract - The elementary dipolar plasma source is a recent solution devised to create plasma density and honogenity. To optimize the plasma source, it is necessary to modelize the plasma production mechanism wherein the modelization of rapid electrons plays an important role. Theoretically, this paper presents an analytical model of electron motion in the magnetic filed of a spheric dipolar magnet and an infinitely long cylindrical magnet whose magnetic field can be analytically expressed. However, the permanent magnets used in dipolar plasma sources has cylindrical configuration with differents sizes, and it is impossible for their magnetic fields to be analytically modelized. To solve this problem, this paper presents a numerical model used to caculate the motion and the trajectories of rapid electrons in the magnetic fields of dipolar magnets based on the Matlab software with the magnetic fields of the magnets being calculated via the FEMM software.

Key words - modelisation; dipolar plasma source; electron trajectory; electron motion; dipolar magnet; magnetic field.

1. Đặt vấn đề

Nhằm tạo ra plasma áp suất thấp đồng nhất và có mật độ cao, plasma đa lưỡng cực hiện đang được nghiên cứu và sử dụng. Plasma này được tạo ra từ những nguồn plasma lưỡng cực ghép nối thành một mạng với cấu trúc khác nhau. Trên Hình 1 trình bày cấu tạo cơ bản của một nguồn plasma lưỡng cực và hình ảnh của plasma do nó tạo ra. Nguồn plasma gồm hai bộ phận chính là một nam châm vĩnh cửu hình trụ Sm_2Co_{17} và bộ phận cấp nguồn vi sóng. Ở tần số vi sóng f = 2,45 GHz, hiện tượng cộng hưởng ECR sẽ xảy ra ở vùng có cảm ứng từ B = 875 Gauss. Ở vùng cộng hưởng ECR, các electron sẽ được gia tốc, tăng thêm năng lượng và được gọi là các electron nhanh. Trên đường đi, các electron nhanh sẽ va chạm đàn hồi với các phân tử khí, plasma được hình thành và sau đó sẽ khuếch tán ra xa vùng nam châm [1, 2].

Để tối ưu hóa nguồn plasma, đòi hỏi phải nghiên cứu cơ chế hình thành plasma, mà trước hết cần phải nghiên cứu mô hình hóa quỹ đạo của các electron nhiệt trong từ trường của nam châm dùng trong nguồn plasma lưỡng cực. Vấn đề đặt ra là, nam châm được nghiên cứu sử dụng là nam châm vĩnh cửu có dạng hình trụ với kích thước khác nhau, mà từ trường của chúng khó xác định theo mô hình giải tích. Vì vậy, cần phải nghiên cứu mô hình tính toán chuyển động của các electron trong từ trường của các nam châm này, mà từ trường của chúng được tính toán bằng các phần mềm có sẵn. Bên cạnh đó, mô hình giải tích cũng cần được nghiên cứu để phân tích các đặc trưng của chuyển động và kiểm chứng kết quả của mô hình xây dựng trong trường hợp nam châm lương cực có dạng hình cầu hay hình trụ dài vô hạn.



Hình 1. *a) Cấu tạo nguồn plasma lưỡng cực; b) Plasma khí Argon, áp suất 1,5 mTorr và công suất nguồn vi sóng là 100 W*

2. Mô hình giải tích quỹ đạo của electron trong từ trường của lưỡng cực từ

Chuyển động của một điện tích q trong từ trường **B** được mô tả bằng phương trình Lorentz:

$$m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v}\times\mathbf{B}) \qquad (1)$$

Trong đó m và **v** lần lượt là khối lượng và vectơ vận tốc của điện tích; **E** là vectơ cường độ điện trường và **B** là vectơ cảm ứng từ.

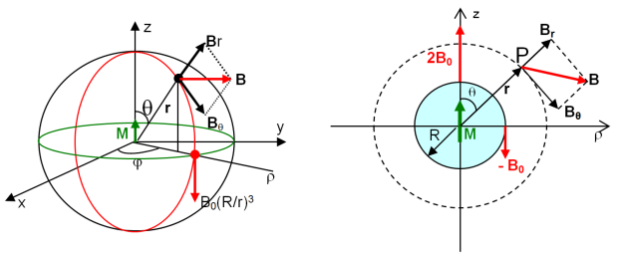
Trong trường hợp **E** = 0, nghĩa là chỉ xét từ trường thì phương trình Lorentz của electron có dạng:

$$m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e(\mathbf{v}\times\mathbf{B}) \quad (2)$$

với $m = 9{,}1\times10^{-31}$ kg; $e = -1{,}602\times10^{-19}$ coulomb.

Sau đây sẽ nghiên cứu chuyển động của electron trong từ trường không đều tạo ra bởi nam châm dạng hình cầu (lưỡng cực từ) và nam châm hình trụ dài vô hạn:

2.1. Nam châm hình cầu



Hình 2. *Các thành phần của từ cảm* ***B*** *của nam châm hình cầu, bán kính R, độ từ hóa M*

Xét một nam châm hình cầu, bán kính R, có vectơ từ hóa **M** theo chiều như Hình 2. Trong hệ tọa độ cực vec tơ từ thế **A** có dạng:

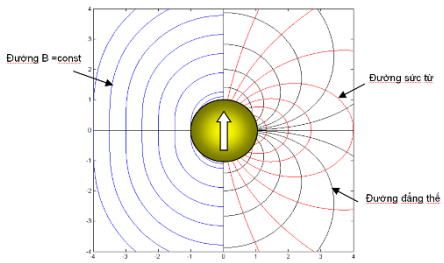
$$\mathbf{A} = \frac{MR^3\sin\theta}{3r^2}\mathbf{e}_\phi = \mathbf{J}\frac{\sin\theta}{r^2}\mathbf{e}_\phi \quad (3)$$

trong đó $J = \frac{MR^3}{3}$ với M là độ từ hóa (Tesla) và R là bán kính nam châm (m).

Các thành phần của vectơ **B** trong hệ tọa độ cực:

$$B_r = 2B_0\frac{R^3}{r^3}\cos\theta;\ B_\theta = B_0\frac{R^3}{r^3}\sin\theta;\ B_\phi = 0 \quad (4)$$

với B_0 là từ cảm tại các điểm trên bề mặt nam châm nằm trên mặt phẳng qua tâm O và vuông góc với trục Oz.



Hình 3. *Từ trường của nam châm hình cầu*

Độ lớn của vec tơ cảm ứng từ:

$$B = B_0\frac{R^3}{r^3}\sqrt{(3\cos^2\theta+1)} \quad (5)$$

Phương trình các đường sức từ:

$$r = C\sin^2\theta \quad (6)$$

với C là các hằng số.

Trên Hình 3 trình bày dạng các đường sức, các đường đẳng thế và đường đồng mức B = const của từ trường.

2.2. Phương trình chuyển động của electron

Chuyển động của các electron có thể mô tả bằng phương trình Lorentz. Tuy nhiên, để thuận tiện trong việc phân tích, có thể mô tả chuyển động của electron bằng cơ học Hamilton - được phát triển từ cơ hoc cổ điển [2]. Trong hệ tọa độ suy rộng, Hamiltonian là tổng động năng và thế năng của electron được xác định theo biểu thức:

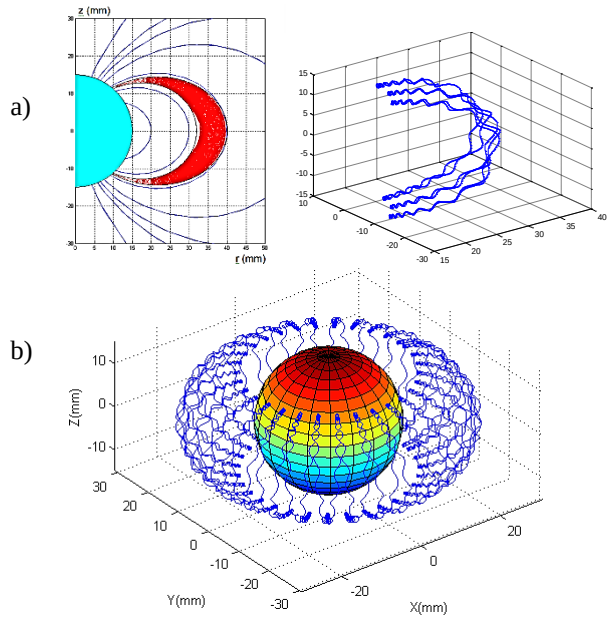
$$H(p_r, p_\theta, p_\phi, r, \theta, \phi, t) = \frac{1}{2m_e}\left[\left(p_r^2 + \frac{1}{r^2}p_\theta^2 + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}p_\phi^2\right) + 2eJ\frac{p_\phi}{r^3} + e^2J^2\frac{\sin^2\theta}{r^4}\right] \quad (7)$$

Hệ phương trình Hamilton mô tả chuyển động của electron trong từ trường của nam châm hình cầu:

$$\begin{aligned}
\dot{r} &= \frac{dr}{dt} = \frac{p_r}{m_e}\\
\dot{\theta} &= \frac{d\theta}{dt} = \frac{p_\theta}{m_e r^2}\\
\dot{\phi} &= \frac{d\phi}{dt} = \frac{1}{m_e r^2}\left(\frac{p_\phi}{\sin^2\theta} + \frac{eJ\text{[illegible]}}{r}\right)\\
\dot{p}_r &= -\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{1}{m_e}\left[p_\theta^2 r^{-3} + \frac{p_\phi^2}{\sin^2\theta}r^{-3} + \right.\\
&\quad \left. +3eJp_\phi r^{-4} + 2e^2J^2\sin^2\theta r^{-5}\right]\\
\dot{p}_\theta &= -\frac{\partial H}{\partial\theta} = -\frac{\cos\theta}{m_e}\left[e^2J^2\sin\theta r^{-4} - \frac{p_\phi^2}{\sin^3\theta}r^{-2}\right]
\end{aligned} \quad (8)$$

Trong đó p_φ là động lượng của electron theo hướng φ, được xác định theo biểu thức:

$$p_\phi = \sin^2\theta_0\left(m_e r_0^2\dot{\phi}_0 + \frac{eJ}{r_0}\right) \quad (9)$$



Hình 4. *Quỹ đạo của electron trong từ trường của nam châm hình cầu: a) mặt cắt theo trục r và b) trong không gian 3 chiều*

Tích phân số hệ phương trình trên bằng phương pháp Runge-Kutta bậc 4 [5], kết quả cho quỹ đạo của elctron trong từ trường của nam châm hình cầu như Hình 4. Có thể phân tích và nhận thấy chuyển động của electron trong từ trường của nam châm hình cầu có một số đặc điểm sau:

- Chuyển động gồm có ba thành phần: chuyển động hình xoắn ốc quanh các đường sức từ; chuyển động chu kỳ dọc theo đường sức từ, đảo chiều tại những điểm gương (mirror points) và chuyển động dịch chuyển theo hướng ngang quanh nam châm (Hình 4b).

- Các đại lượng bất biến của chuyển động:

Hamiltonian H có giá trị bằng động năng, không phụ thuộc vào thời gian và là *đại lượng bất biến chính xác thứ nhất.*

Động lượng của electron trong hệ tọa độ suy rộng $p_\phi = \sin^2\theta_0\left(m_e r_0^2\dot{\phi}_0 + \frac{eJ}{r_0}\right)$ là *đại lượng bất biến chính xác thứ hai*.

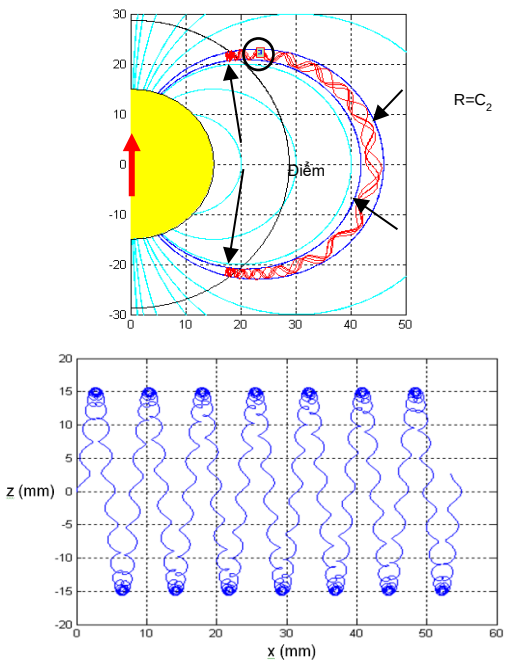
2.3. Quỹ đạo của electron trong từ trường của nam châm hình trụ dài vô hạn

Bằng phương pháp tương tự như đối với nam châm lưỡng cực hình cầu, có thể tính toán chuyển động của electron trong từ trường của một nam châm hình trụ bán kính R, dài vô hạn, có độ từ hóa M.

Các thành phần của vectơ cảm ứng từ B trong hệ tọa độ cực (x,φ,z) có dạng:

$$B_r = \frac{MR^2}{2}\frac{\sin\phi}{r^2} \text{ và } B_r = \frac{-MR^2}{2}\frac{\cos\phi}{r^2}$$

Từ hệ phương trình Hamilton, có thể tính được quỹ đạo của electron trong từ trường của nam châm. Trên Hình 5 mô tả quỹ đạo của electron trong mặt phẳng (Ox,Oz) vuông góc với trục Oz của nam châm.



Hình 5. *Quỹ đạo của electron trong từ trường của nam châm hình trụ dài vô hạn: Hình a - trong mặt phẳng (x,y) và Hình b - trong mặt phẳng tọa độ (x,z)*

3. Mô hình số quỹ đạo của electron trong từ trường của lưỡng cực từ

Đối với các nam châm hình cầu hoặc hình trụ dài vô hạn có từ trường được mô tả dưới dạng giải tích như đã trình bày ở mục 2 thì việc tính quỹ đạo bằng cách tích phân hệ phương trình Halmilton sẽ tương đối đơn giản.

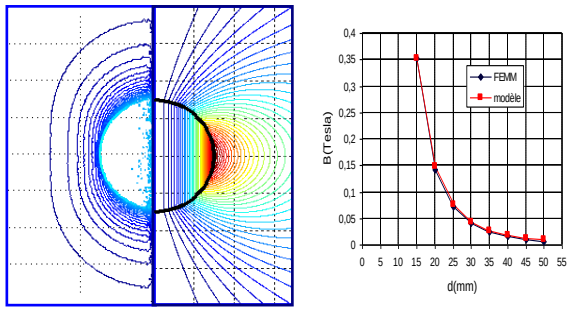
Tuy nhiên, trong thực tế các nguồn plasma lưỡng cực sử dụng các nam châm có cấu tạo và kích thước khác nhau, thường có dạng hình trụ và bằng vật liệu Sm_2Co_{17}. Từ trường các nam châm này không thể biểu diễn dưới dạng giải tích, vì vậy để mô phỏng chuyển động của electron trong từ trường của các nam châm này, không thể dùng mô hình giải tích như trên, mà cần phải xây dựng mô hình số.

3.1. Từ trường của các lưỡng cực từ

Từ trường của các nam châm với cấu hình khác nhau có thể xác định bằng các phần mềm hiện có như RADIA, FEMLAB, FEMM… Sau đây trình bày kết quả tính từ trường của một số nam châm dựa vào phần mềm FEMM (Finite Element Method Magnetics) [6].

3.1.1. Nam châm hình cầu

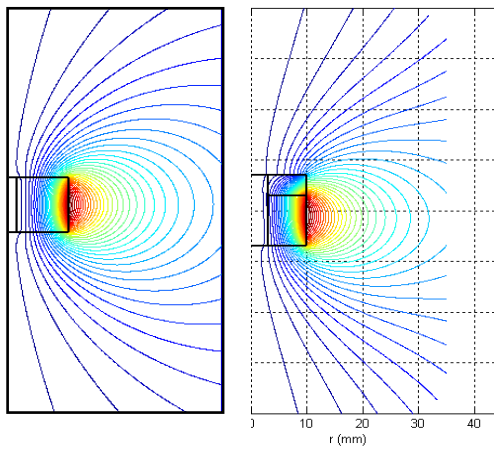
Hình 6 là từ trường của nam châm lưỡng cực hình cầu. So sánh với mô hình giải tích, kết quả của FEMM hoàn toàn phù hợp. Vì vậy, có thể sử dụng để tính toán từ trường của các nam châm sử dụng trong nguồn plasma lưỡng cực.



Hình 6. *Từ trường của nam châm hình cầu*

3.1.2. Nam châm hình trụ dài hữu hạn

Hình 7a mô tả đường sức từ của nam châm hình trụ đường kính 20 mm và cao 10 mm làm bằng vật liệu Sm_2Co_{17}; còn Hình 7b là từ trường của nam châm hình trụ đường kính 20 mm, cao 14 mm có 2 lớp, gồm một lớp 10mm bằng thép mềm và một lớp 4 mm bằng Sm_2Co_{17}.



Hình 7. *Từ trường của nam châm Sm_2Co_{17} hình trụ bán kính 10mm: Hình a) chiều cao 10mm và Hình b) chiều cao 14mm (trong đó 10mm bằng thép mềm và 4mm bằng Sm_2Co_{17})*

3.2. Thuật toán tính quỹ đạo của electron trong từ trường của nguồn plasma lưỡng cực

Hình 8 trình bày thuật toán tính quỹ đạo của electron trong từ trường của các nam châm lưỡng cực, với các nội dung chính như sau:

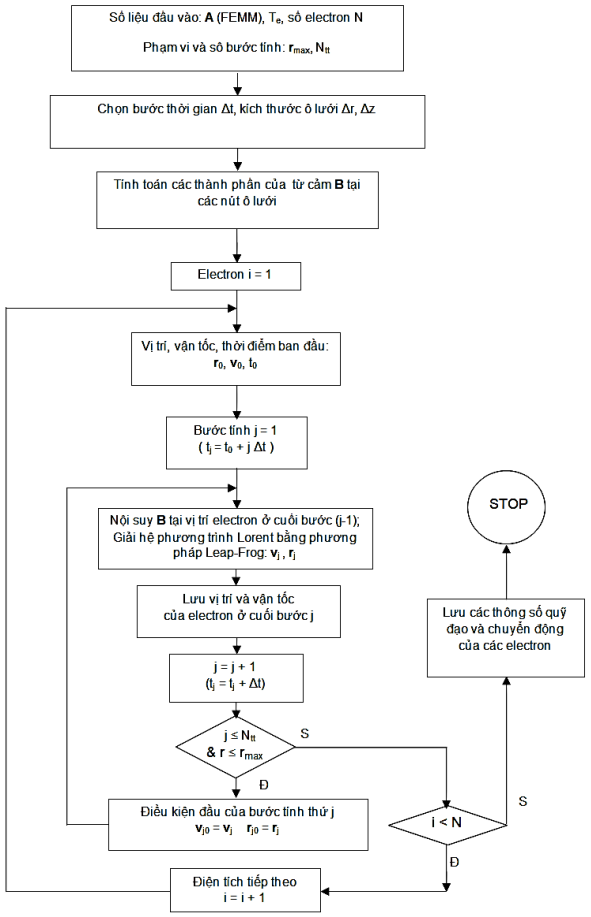
Số liệu đầu vào:

Từ trường của nam châm: tính toán bằng phần mềm FEMM như trình bày ở mục 3.2 sẽ cho kết quả từ thế A.

Số lượng elctron cần mô phỏng N; số bước tính toán N_{cal} với mỗi bước tính toán là Δt và phạm vi tính toán được giới hạn bởi bán kính r_{max};

Chọn bước thời gian tính toán Δt = 10^{-12} - 10^{-11} (s)

Chọn kích thước các ô lưới để tính toán: Δr = 0,1 mm et Δz = 0,1 mm, thỏa mãn điều kiện $\lambda_D / \Delta r \geq 2$ và $\lambda_D / \Delta z \geq 2$, trong đó λ_D là chiều dài Debye của electron [2].



Hình 8. *Thuật toán tính quỹ đạo electron trong từ trường của nam châm lưỡng cực*

Tính các thành phần của vectơ từ cảm B tại các nút ô lưới: Từ kết quả từ thế A tính từ chương trình FEMM, tính toán các giá trị thành phần của **B** tại các nút ô lưới với kích thước các ô là (Δr × Δz); lưu vào file dữ liệu từ cảm B dưới dạng file Matlab.

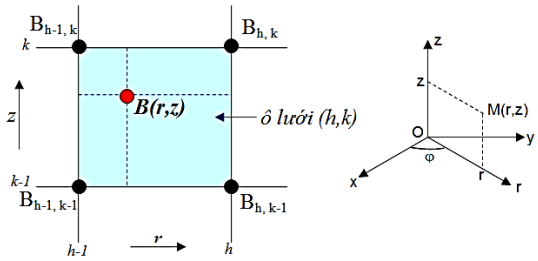
Nội suy B tại vị trí của electron: Để giải phương trình chuyển động của electron ở bước tính j cần phải xác định được **B** tại vị trí của electron ở cuối bước tính (j-1). Việc tính B tại một điểm M bất kỳ trong ô lưới được thực hiện bằng phương pháp nội suy từ giá trị B tại các điểm nút của ô lưới bằng hàm *interp2* trong Matlab, dựa trên biểu thức sau (Hình 9):

$$B(r,z) = (1-p_r)(1-p_z)B_{h-1,k-1} + (1-p_r)p_z B_{h-1,k} + p_r(1-p_z)B_{h,k-1} + p_r p_z B_{h,k} \quad (10)$$

$$\text{với } p_r = \frac{r - r_{h-1}}{\Delta r} \text{ và } p_z = \frac{z - z_{k-1}}{\Delta z} \quad (11)$$

Trong hệ tọa độ Decartes các thành phần của từ cảm **B** được xác định theo các biểu thức sau:

$$B_x = B_r \cos\phi;\ B_y = B_r \sin\phi;\ B_z = B_z$$

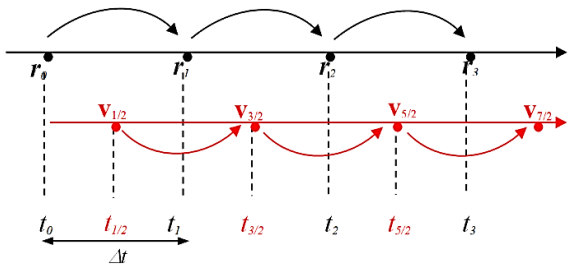


Hình 9. *Nội suy từ cảm **B** tại một điểm trong ô lưới*

Đối với mô hình giải tích như trình bày ở mục 3.1, sử dụng hệ phương trình Hamilton để giải nhằm thuận tiện phân tích các đại lượng bất biến. Ngược lại, trong trường hợp từ trường tính từ phần mềm FEMM (như các nam châm hình trụ dùng trong nguồn plasma) có thể tính toán quỹ đạo của các electron dựa vào phương trình Lorentz:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{e}{m_e}(\mathbf{v}\times\mathbf{B});\ \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v} \quad (12)$$

Giải hệ phương trình này bằng phương pháp số dựa vào thuật toán "bước nhảy ếch" (Leap – Frog) như mô tả trên Hình 10 và trình tự giải như sau [5]:



Hình 10. *Sơ đồ thuật toán Leap-Frog*

Phương trình vi phân Lorentz (12) được thay thế bằng các phương trình sai phân như sau:

$$m_e \frac{\mathbf{v}_{(n+1)/2} - \mathbf{v}_{(n-1)/2}}{\Delta t} = -e\left[\frac{\mathbf{v}_{(n+1)/2} + \mathbf{v}_{(n-1)/2}}{2}\mathbf{B}_n\right]$$
$$\frac{\mathbf{r}_{n+1} - \mathbf{r}_n}{\Delta t} = \mathbf{v}_{(n+1)/2} \quad (13)$$

Trong đó, $\mathbf{r}_n$, $\mathbf{v}_n$, $\mathbf{B}_n$ lần lượt là vị trí, vận tốc, và từ trường tại thời điểm (n Δt); $\mathbf{v}_{(n-1)/2}$ và $\mathbf{v}_{(n+1)/2}$ là vận tốc ở thời điểm ((n-1)/2) Δt và ((n+1)/2) Δt, với Δt là bước thời gian tính toán. $\mathbf{B}_n$ tại vị trí $\mathbf{r}_n$ được tính bằng phương pháp nội suy. Vị trí của electron tại thời điểm (n+1) Δt được xác định theo biểu thức:

$$x_{n+1} = x_n + v_{(n+1)/2} \times \Delta t$$

Trong đó, $v_{n+1/2}$ được xác định dựa vào vận tốc $v_{n-1/2}$ đã biết theo cách tính như sau:

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_{(n-1)/2}$$

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_1 \times \Omega_{ce}\frac{\Delta t}{2} \text{ (trong đó } \Omega_{ce} = \frac{-eB}{m_e})$$

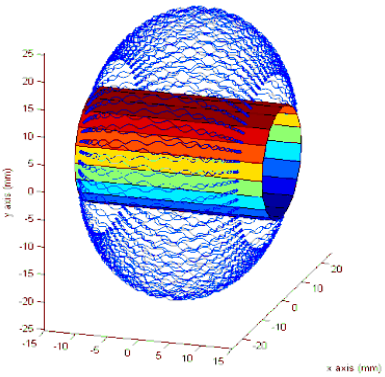
$$\mathbf{v}_{(n+1)/2} = \mathbf{v}_1 + \frac{\Delta t}{1+\left(\frac{\Omega_{ce}\Delta t}{2}\right)^2}\mathbf{v}_1 \times \Omega_{ce}$$

Kết quả mô hình hóa:

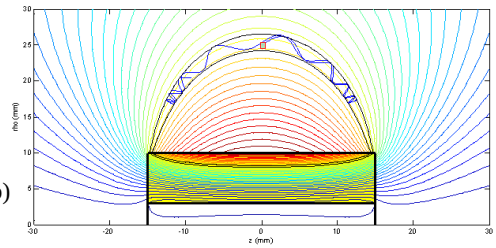
Từ thuật toán, tác giả đã xây dựng chương trình Matlab

để có thể mô hình hóa quỹ đạo của các electron nhiệt trong từ trường của các nam châm vĩnh cửu có hình dạng bất kỳ. Kết quả tính với trường hợp nam châm hình cầu đã cho thấy hoàn toàn phù hợp với mô hình lý thuyết.

a)



b)



Hình 11. *Quỹ đạo của electron trong từ trường của nam châm Sm_2Co_{17} hình trụ, đường kính 20 mm, cao 30 mm*
a) Không gian 3 chiều; b) Trong mặt phẳng (Oz, Or)

Hình 11 trình bày kết quả quỹ đạo của electron trong từ trường của một nam châm hình trụ bằng vật liệu Sm_2Co_{17} có đường kính 20 mm, cao 30 mm. Điều kiện ban đầu của electron: năng lượng $T_e = 40$ eV; vị trí ban đầu x = 25 mm, y = z = 0, góc vận tốc ban đầu 60^0; số bước tính toán $N_{tt} = 150.000$ và $\Delta t = 5.10^{-12}$ s.

Nhận thấy quỹ đạo các elctron trong từ trường của các nam châm hình trụ cũng gồm 3 thành phần như lưỡng cực hình cầu, và electron được giam bẫy trong phạm vi giữa hai đường bao nằm gần bề mặt nam châm. Ngoài ra, kết quả tính toán cũng cho thấy mô hình chuyển động của electron thỏa mãn các điều kiện bất biến của các đại lượng Halmiton và động lượng như mô hình lý thuyết.

4. Kết luận

Bài báo đã phân tích về mặt lý thuyết và mô hình tính toán số chuyển động của các electron nhanh trong từ trường của các dạng nam châm lưỡng cực, dựa trên cơ sở hệ phương trình vi phân Halmiton hay Lorentz mô tả chuyển động. Từ thuật toán đề xuất, tác giả đã xây dựng chương trình Matlab để có thể mô hình hóa quỹ đạo chuyển động của các electron nhanh trong từ trường của các dạng nam châm hình trụ sử dụng trong nguồn plasma lưỡng cực, với từ trường của chúng có thể tính toán bằng phần mềm FEMM. Đối chiếu kết quả đã cho thấy sự phù hợp giữa mô hình số với mô hình giải tích. Kết quả mô hình hóa quỹ đạo các electron nhanh được sử dụng trong nghiên cứu lựa chọn cấu hình của các nam châm để tối ưu hóa các nguồn plasma vi sóng lưỡng cực.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

[1] A. Lacoste, T. Lagarde, S. Béchu, Y. Arnal, J. Pelletier, *Multi-dipolar plasmas for uniform processing : physics, design and performance*, Plasma Sources Science Technol. 11, 407-412 (2002).

[2] Tran Tan Vinh, *Caractérisation et modélisation des plasmas micro-onde multi-dipolaires – Application à la pulvérisation assistée par plasma multi-dipolaire*, Thèse à l'UJF, 2006.

[3] Tran Tan Vinh, Stéphane Béchu, Alexandre Bès, Louis Latrasse, Ana Lacoste, Jacques Pelletier, *Plasmas Froids Système et procedes:Des sources plasma micro-onde dipolaires aux plasmas matriciels*; Publication de l'Universite de St. Etienne, 2008.

[4] Michel Hulin et Jean Pierre Maury, *Les bases de l'électro-magnétisme*, Dunod, 1996.

[5] Jean-Pierre Nougier, *Méthode de calcul numérique*, Hermes Science 2001

[6] http://www.femm.info/wiki/HomePage

(BBT nhận bài: 20/09/2015, phản biện xong: 03/10/2015)