

Данка Александрова Йорданова

# Моделиране на процеси в нискотемпературна плазма в кухокатоден разряд

## АВТОРЕФЕРАТ

на дисертация за присъждане на образователната и научна степен  
”доктор”

**Професионално направление:** 4.1. Физически науки

**Научна специалност:** Лазерна физика, физика на атомите, молекулите и плазмата и  
физика на вълновите процеси

**Научен ръководител:** доц. д-р М. Грозева

### Рецензенти:

Проф. д-рн Хасан Шамати - ИФТТ-БАН

Доц. д-р Станимир Колев - ФзФ-СУ

Институт по физика на твърдото тяло "Акад. Георги Наджаков" – БАН



София 2020

Дисертацията се състои от 124 страници, 43 фигури, 4 таблици и 115 цитирани литературни източника. Дисертационният труд е обсъдан и насочен за защита от научен семинар на направление „Лазерна физика и физика на атомите, молекулите и плазмата”, Институт по физика на твърдото тяло „Акад. Георги Наджаков” – БАН, състоял се на 21. 01. 2020 година.

<http://www.issp.bas.bg>

**ISSP-BAS-2020-PhD029**

Защитата на дисертационния труд ще се състои на 20. 05. 2020г. от 11:00 часа в зала 300 на Институт по Физика на Твърдото Тяло „Акад. Г. Наджаков” – БАН, бул. „Цариградско шосе” 72, пред научно жури в състав:

- 1. Проф. дфн Хассан Шамати - ИФТТ-БАН**
- 2. Доц. д-р Маргарита Грозева – ИФТТ-БАН**
- 3. Акад. дфн Никола Съботинов**
- 4. Доц. д-р Станимир Колев - ФзФ-СУ**
- 5. Доц. д-р Живко Кисъовски - ФзФ-СУ**

## Увод

През последните години научноизследователската дейност в областта на физиката на плазмата се развива интензивно, като все повече изследвания се фокусират върху индустриалните приложения като почистване, нанасяне на слоеве, в лазерните технологии и др.

За плазмени системи, включващи значителен набор от частици е необходима информация както за плътността на тези частиците, така и за реакциите, в които те участват. За да бъде получена тази информация е необходимо провеждането на редица експерименти. Въпреки богатият набор от методи за диагностициране на плазмата, като различни спектроскопски методи, има много параметри, които са трудни за измерване или резултатите от измерванията са трудни за тълкуване, а подготовката и провеждането на експеримента изискват много време и труд. Друг начин да бъде получена необходимата информация е чрез моделиране, като освен че може да бъде спестено много време, може да бъде получена информация, която е много трудно или невъзможно да бъде получена експериментално. Поради това моделирането на плазмата е от съществено значение.

Сред най-използвани техники за числено моделиране на плазмата са флуиднодинамичните, кинетичните и хибридните модели. Кинетичните модели се използват за описанието на неравновесни системи, включващи динамични изменения. Флуидните модели от своя страна осигуряват бързи изчисления, но за сметка на прецизността. От тази гледна точка хибридните модели се явяват компромисен вариант между кинетичните и флуидните модели осигурявайки баланс между точност и бързина. Двата подхода се допълват взаимно, като получените резултати от експериментите и информацията от моделите относно свойствата на плазмата могат да бъдат използвани при оптимизацията на условията в разряда.

Често срещан проблем при моделирането на процеси в плазмата е големия брой на включените в модела частици и реакции. Има модели, които съдържат стотици различни видове частици, а броят на реакциите, в които те участват може да достигне хиляди, което води до непрактичност по отношение на времето за изчисление. В такива случаи е много подходящо използването на метод за редуциране на подобни системи.

Една много изследвана плазмена система е газовия разряд, използван за възбуждане на лазерна генерация. При създаването на нови лазерни източници или нови лазерни конструкции, за да се оптимизират условията за получаване на ефективно възбуждане, е необходима информация за параметрите на плазмата в лазерната тръба като концентрация и разпределение на активните частици, процесите на възбуждане на лазерните линии, както и влиянието на геометрията на разряда върху тези параметри.

В лабораторията "Лазери с метални пари" към ИФТТ е създадена многокатодна конструкция за лазер с метални пари с разпрашване на катода [1]. Създадената конструкция дава възможност за контролирано постъпване на метални пари в обема на разряда,

а също така позволява едновременно разпръскване на различни метали и постигането на едновременна генерация на линиите им в един и същ активен обем.

Цел на настоящият дисертационен труд е моделиране на процесите в плазмата на тази нова кухокатодна лазерна конструкция за лазер с разпръскване на метални пари. За постигане на целта трябва да се решат следните задачи:

- Създаването на самостоятелен флуиден модел необходим за оценка на плътността и транспортните коефициенти на заредените частици в плазмата.
- Създаването на самостоятелен кинетичен модел за описанието на поведението на електроните, взаимодействията, в които те участват, както и функцията им на разпределение по енергия.
- Хибридно моделиране, чрез сдвояване на флуидния и кинетичния модел за описание на газов разряд в кух катод.
- Моделиране на процесите в плазмата в реална кухокатодна лазерна конструкция.
- Разработване на метод за редуциране на включените в моделите системи от частици и реакциите, в които те участват.

Дисертацията се състои от Увод, четири глави, заключение, приложение и библиография.

В *Глава. 1* е направено е кратко въведение във физиката на плазмата, газовия разряд, в частност на газовия разряд в кух катод, а също така и в численото моделиране на газови разряди в кух катод. Направен е обзор на литературата по темата.

В *Глава. 2* са описани създадените модели за кухокатодна лазерна конструкция.

*Глава. 3* е посветена на моделиране на процесите в разряда на реална кухокатодна лазерна тръба.

В последната *Глава. 4* е описан принципа на действие на метод, позволяващ редуцирането на системи, съдържащи голям брой частици и реакции в себе си, използвани при моделирането на процесите в плазмата.

За създаването на моделите се използва платформата за симулиране на процеси в плазмата PLASIMO [2, 3], която е създадена в Катедрата по приложна физика към Техническият университет Айндховен, Айндховен, Нидерландия.

## Хибридно моделиране на разряд в кух катод

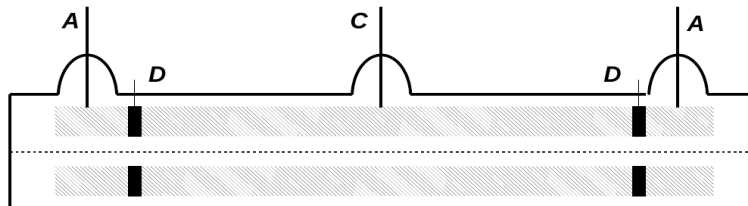
В текущото изследване на разряда на кух катод е използвана конструкция с конкретна геометрия, газова смес и налягане. Използвани са два от модулите на платформата за симулиране на процеси в плазмата PLASIMO, а именно Drift-Diffusion модел - за определянето на разпределението на електричното поле, както и за оценка на плътността на заредените частици, и модулът Монте-Карло, за описанието на кинетиката на електроните. В тази глава ще бъдат описани подробно както използваната конструкция, така и входните параметри за моделите. Ще бъдат представени резултати от двата самостоятелни модела, а също така и предварителни резултати от хибридният модел, използван за описанието на кухокатодният разряд.

### Флуиден модел за описание на разряда в кух катод

#### Работни параметри на флуидният модел

На фигура 1 е илюстрирано надлъжното сечение на геометрията, избрана за симулиране на поведението на плазмата. В разглежданата геометрия от двете страни на цилиндричния катод  $C$  са разположени два анодни пръстена  $A$ , като в така описаната конфигурация се образува надлъжен кухокатоден разряд. Цилиндричният катод и двата анода са разделени от диелектрик  $D$ .

Размерите на цилиндричния меден кух катод в представената конструкция са съответно вътрешен диаметър  $4\text{ mm}$  и дължина  $40\text{ mm}$ . Приложеното напрежение в модела е  $-400\text{ V}$ , използваната газова смес е  $\text{He} - \text{Ar}$  с  $5\%$  концентрация  $\text{Ar}$  при налягане  $1.5\text{ kPa}$ . Добавянето на  $\text{Ar}$  е с цел по-ефективно разпрашване на катода и съответно по-висока концентрация на медни пари, необходими за генерацията, т.к. разпрашването се дължи главно на йоните на аргона [20]. Основният газ е хелий, т.к. основният процес за получаване на инверсна населеност е зарядообменни удари на медните атоми с хелиеви йони.



**Фигура 1:** Дизайн на газоразрядната тръба, където  $C$  и  $A$  са съответно катодът и двата анода, а  $D$  е диелектрик. Дължината на катода е  $30\text{ mm}$ , а общата дължина на конструкцията е  $40\text{ mm}$ .

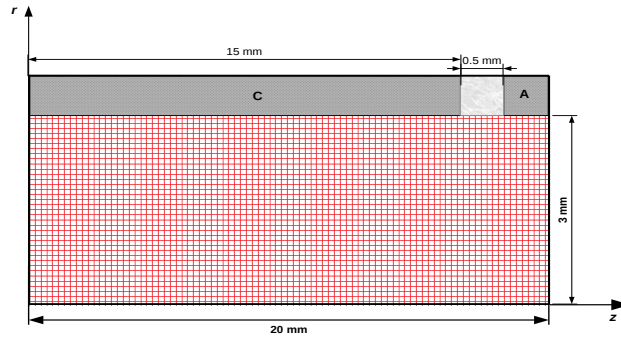
Схема на симулирания обем в модела е показана на фигура 2, като решетката се характеризира с аксиална координата  $z(x_1)$  и радиална координата  $r(x_2)$ . Поради двете оси на симетрия, е достатъчно да бъде симулиран само 1/4 от обема на показаната на фигура 1 конструкция. При избора на тези параметри са спазени основните съотношения за създаването на оптимални условия за надлъжният кухокатоден разряд [4], а именно:

$$pd = 9.2 \text{ kPa}\cdot\text{mm} \quad L = 5d. \quad (1)$$

Основно предположение използвано в модела е, че атомите на буферният газ He и Ar са разпределени равномерно в целия обем. Температурата и налягането на газа са величини, които също са необходими като входни данни в модела за определяне на плътността, чрез закона за идеален газ:

$$n_g = P_g / k_B T_g. \quad (2)$$

Тъй като газовата температура  $T_g$  е неизвестна, приемаме постоянна стойност от 1000 K в модела, като избраната стойност е в рамките на приетия диапазон за лазерно приложение [6–8].



Фигура 2: Схема на геометрията на симулирания обем

В таблица 1 са дадени всички включени в модела частици. Транспортните коефициенти  $\mu_p$ ,  $D_p$  и скоростните константи  $k_r$ , също са необходими като входни данни за модела, за да се реши набора от балансни уравнения, описващи динамиката на различните видове частици.

За положителните йони в модела е използвано локално приближение на полето, предполагащо директна връзка между разпределението на частиците по енергия и локалното електрично поле, поради което транспортните коефициенти са функция на приведеното електрично поле  $E/N$ .

Транспортните коефициенти за електроните, обаче, както и скоростните константи за реакциите включващи взаимодействие с електрони, са функция от средната енергия на електроните  $f(\varepsilon)$ . Електроните имат маса много по-малка от масата на тежките частици и електрони създадени в зона със силно електрично поле могат лесно да бъдат предвижени до зона с по-слабо поле, запазвайки голяма част от първоначалната си висока енергия. Свързаните с електроните входни данни за флуидният модел са получени от "BOLSIG +".

Частица	$\mu_p \times p$ (Torr m <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	$D_p \times p$ (Torr m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	
e	$f_e(\varepsilon)$	$D_p = \frac{k_B T_p \mu_p}{q_p}$	[9]
He <sup>+</sup>	$f_{He^+}(E/N)$	$D_p = \frac{k_B T_p \mu_p}{q_p}$	[10]
Ar <sup>+</sup>	$f_{Ar^+}(E/N)$	$D_p = \frac{k_B T_p \mu_p}{q_p}$	[10]
Cu	–	13.45	[11]
Cu <sup>+</sup>	$f_{Cu^+}(E/N)$	$D_p = \frac{k_B T_p \mu_p}{q_p}$	[12]
Ar*	–	20	[13]
He*	–	15.35	[13]

Таблица 1: Включените частици в модела и съответните им транспортни коефициенти. Коефициентът на подвижност за електроните се определя като функция от средната енергия на електроните  $f(\varepsilon)$ , а за йоните - като функция на приведеното електрично поле  $f(E/N)$ . Коефициентите на дифузия са изведени от отношението на Айнщайн.

Реакция	Скоростна константа	
$e + He \rightarrow e + He^*$	$f(\varepsilon)$	[9]
$e + He^* \rightarrow 2e + He^+$	$f(\varepsilon)$	[9]
$e + He \rightarrow 2e + He^+$	$f(\varepsilon)$	[9]
$e + Ar \rightarrow e + Ar^*$	$f(\varepsilon)$	[9]
$e + Ar^* \rightarrow 2e + Ar^+$	$f(\varepsilon)$	[9]
$e + Ar \rightarrow 2e + Ar^+$	$f(\varepsilon)$	[9]
$e + Cu \rightarrow e + Cu$	$f(\varepsilon)$	[9]
$e + Cu \rightarrow Cu^+ + 2e$	$f(\varepsilon)$	[9]
$He^* + Ar \rightarrow He + Ar^+ + e$	$1.68 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$	[14]
$He^* + Cu \rightarrow e + He + Cu^+$	$9.48 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$	[14]
$Ar^* + Cu \rightarrow e + Ar + Cu^+$	$4.4 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$	[14]
$Ar^+ + Cu \rightarrow Ar + Cu^+$	$3.16 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$	[14]
$He^+ + Cu \rightarrow He + Cu^+$	$1.00 \times 10^{-15} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$	[14]
$Ar^* + Ar^* \rightarrow Ar^+ + e + Ar$	$1.17 \times 10^{-15} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$	[15]
$He^* + He^* \rightarrow e + He + He^+$	$2.9 \times 10^{-15} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$	[16]

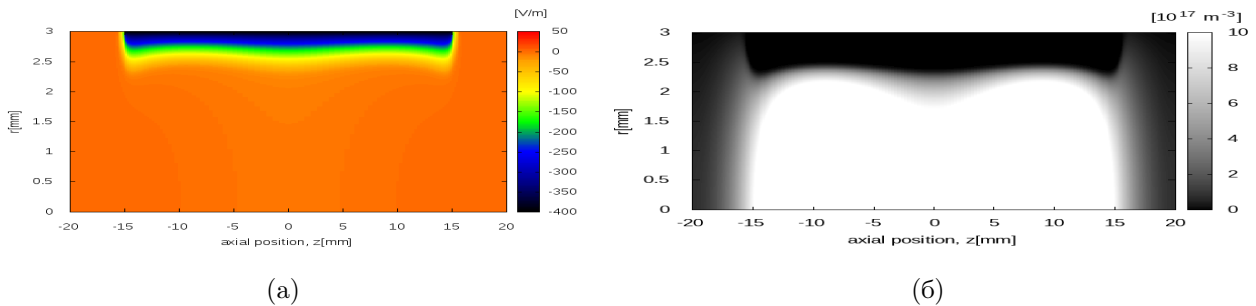
Таблица 2: Реакциите включени в модела и техните скоростни константи.

Включените в модела реакции заедно със скоростните им константи са дадени в таблица 2. Във всички реакции с участието на електроните, скоростната константа е функция от средната енергия на електроните  $f(\varepsilon)$ .

Използваните коефициенти за добив от разпрашването в модела са 0.01 за  $\text{He}^+$  и 0.2 за  $\text{Ar}^+$  [4]. Разпрашените атоми на  $\text{Cu}$  се йонизират в разряда чрез удари с електрони, реакции на зарядообмен с  $\text{He}^+$  и  $\text{Ar}^+$  или чрез Пенингови процеси с метастабилите за буферният газ. Образуваните  $\text{Cu}$  йони в плазмата могат също да участват в разпрашването на катодните стени [17], т.е. в процес на саморазпрашване. Коефициентът на добив от саморазпрашване е 0.5 [4]. За стойностите на коефициентите на вторични емисии се използват следните константни стойности: 0.2 за  $\text{He}^+$  и 0.1 за  $\text{Ar}^+$  и  $\text{Cu}^+$  [4].

## Резултати от флуидния модел

Разпределението на потенциала в обема на кухият катод, при зададените условия е представено на фигура 3(а). В целия обем се наблюдават две добре разграничени области: областта на отрицателното светене, която е с пространствен потенциал, близък до този на анода, и областта на катодният пад, където е концентрирано цялото приложено напрежение. Областта на катодният пад заема тънка зона, в съседство до катодната стена, като силно отрицателният потенциал в близост до катода ( $-400\text{ V}$ ) бързо се повишава с увеличаване на разстоянието от катода.



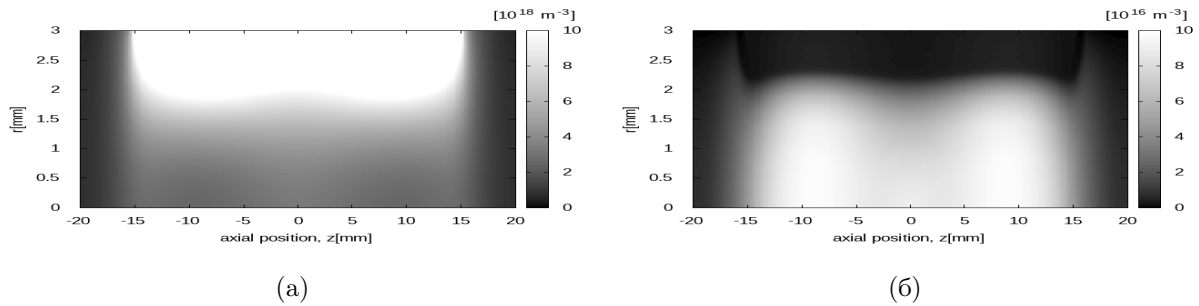
**Фигура 3:** Разпределението на потенциала в симулирания обем (а) и разпределение на плътността на електроните в симулирания обем (б)

Неравномерното потенциалното разпределение в радиално направление поражда електронен поток от катодните стени към центъра на катодния цилиндър. В близост до катодните стени по-високият потенциал поражда по-силно електрично поле, водещо до по-високи енергии на електроните. В следствие на това в центъра на катодния цилиндър се създават условия за по-ефективна йонизация в тази област, като това е доминиращ процес за образуването на електрони. Това води до по-висока електронна плътност в областта. На фигура 3(б) е представено плътностното разпределение на електроните в обема, като от фигурата се вижда, че разпределението е силно неравномерно в радиална посока и се характеризира с максимум по оста на катодният цилиндър.

Разпределението на разпрашените  $\text{Cu}$  атоми от стената на катода е показано на



фигура 4(а), от която се вижда, че те са концентрирани в близост до стената на катода, където е приложено разпрашването. Разпрашените Cu атоми също се йонизират предимно чрез сблъсъци с електрони, поради което максимумът в разпределението на плътността на  $\text{Cu}^+$  йони, 4(б), е в центъра на катодният цилиндър. Причината за това е наличната в тази област, по-висока електронна плътност, която от своя страна води до по-интензивни процеси на йонизация.



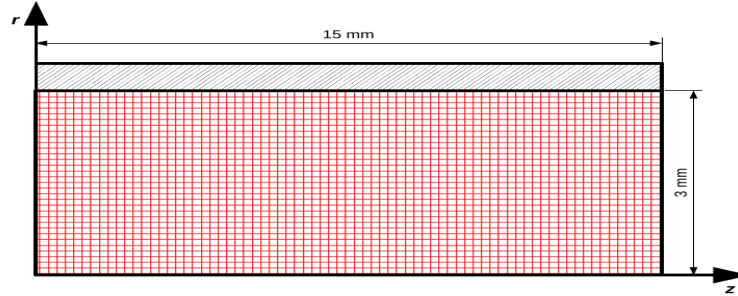
**Фигура 4:** Разпределение на плътността на медните атоми (а) и на медните йони (б) в симулирания обем

## Кинетичен модел за описание на електроните в разряда в кух катод

В областта на катодният пад, където електричното поле е силно и неравномерно, поведението на електроните не може да бъде напълно определено от локалното електрично поле и плътността на газа. В тази област електроните могат да бъдат ускорени до такава степен, че средния свободен пробег да надвиши размера на плазмата. Използването на флуидното описание в случая е неподходящо. За описанието на поведението на бързите електрони в разряда в кух катод е използван модулът Монте Карло кинетично описание на плазмата, който също е част от платформата PLASIMO .

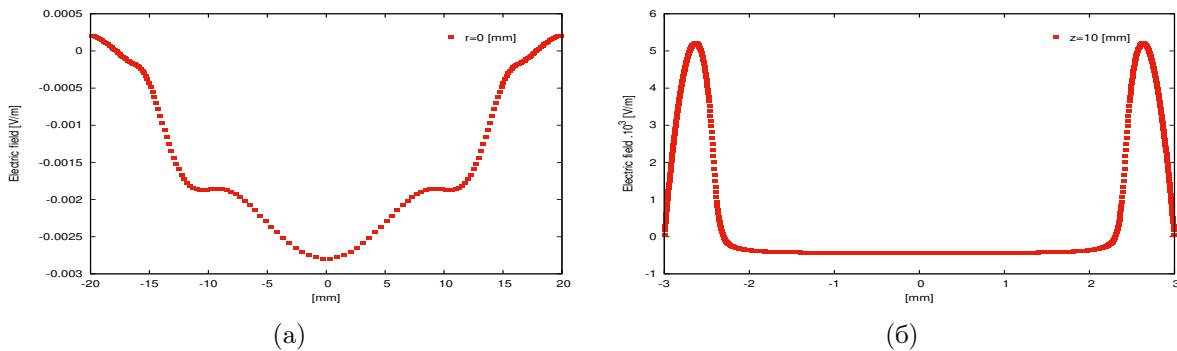
## Работни параметри на модела

Геометричните размери на изследваната конфигурация на кух катод са съответно дължина 15 mm и вътрешен радиус 3 mm . Буферният газ е хелий He и аргон Ar при налягане 1.5 kPa . Приема се, че атомите на буферният газ, He и Ar в основното състояние са равномерно разпределени в обема. Симулираният обем е само обема обхванат от катода, както е показано на на фигура 5.



**Фигура 5:** Схема на геометрията на симулираният обем, като е включен само обемът обхванат от катодният цилиндър

Моделът използва, полученото от флуидният Drift-Diffusion модел, аксиално и радиално разпределение на електричното поле. На фигура 6 е представено разпределението на електричното поле в разглежданата геометрия 2.



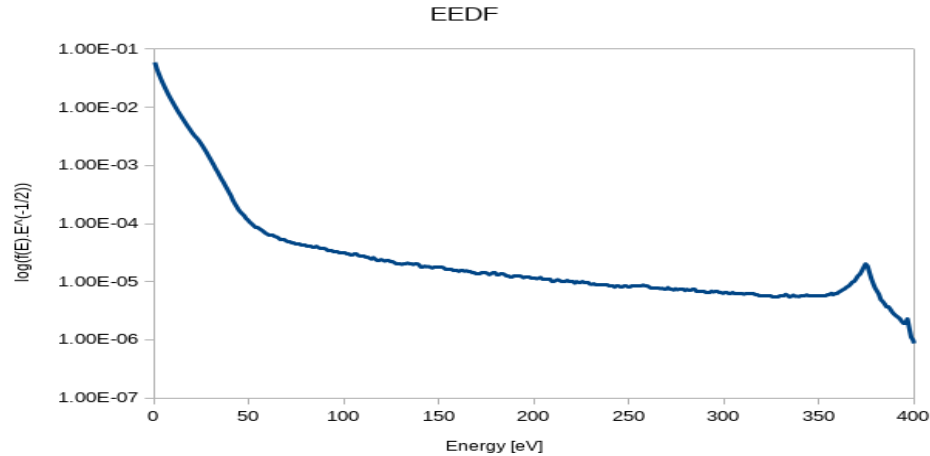
**Фигура 6:** Разпределение на електричното поле в обема, като на фигурите е представена аксиалната (а) и радиалната (б) компонента на полето. Резултатите са получени от флуидният Drift-Diffusion модел.

Поради това, че целта на модела е да симулира бързите електрони, то в него са включени само реакциите, в които има взаимодействие с електрони, като вероятността за тези реакции се определя от сеченията и относителната скорост на частиците.

### Резултати от кинетичния модел за описание на електроните в разряд в кух катод

Използваният модел дава възможност да се наблюдава еволюцията на електроните в кухокатодния разряд. Може да бъде проследено тяхното движение през разряда и процесите в които участват. В изчисленията е взета предвид и вторичната емисия електрони от катодните стени. Моделът пресмята функцията на разпределение на електроните по енергия

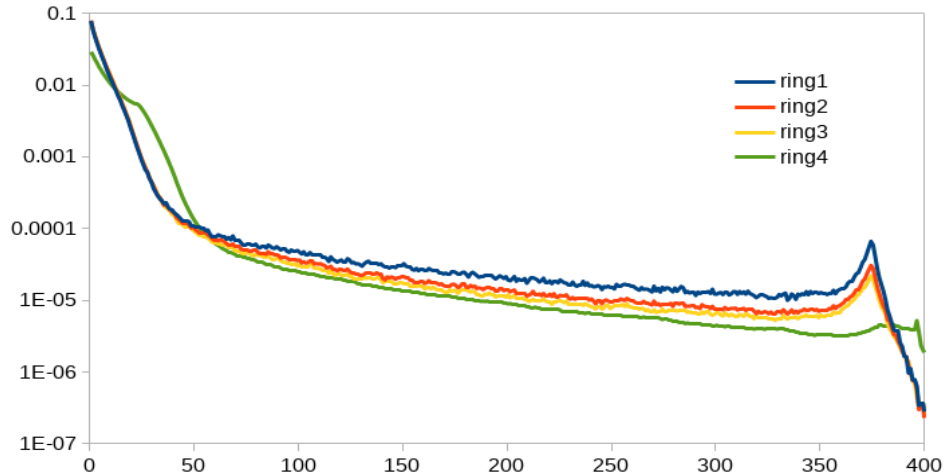
в общия обем. Друга възможност е целият обем да бъде разделен на подобеми, като функциите на разпределение по енергии могат да бъдат пресметнати и в отделните подобеми в разряда.



**Фигура 7:** Функция на разпределение на електроните по енергия в симулирания обем

От фигура 7 се вижда, че има висока концентрация на високоенергетичните електрони в разряда. В представените резултати за разпределението на електроните по енергия могат да бъдат разграничени три основни групи електрони. Електроните с ниска енергия 0 – 50 eV, локализирани предимно в областта на отрицателното светене в разряда, втората група електрони с енергии 50 – 350 eV и третата група електрони, чиято енергия достига пълният катоден пад 400 eV. Най-високо енергийните електрони са бързите електрони, които са излъчени от катодния цилиндър и все още носят енергията получена в областта на катодния пад. Групата от електрони с по-ниска енергия участват само в еластични удари, поради факта, че енергията им е недостатъчна за многократно участие в нееластични удари. Електроните от втората група притежават достатъчно енергия за възбуждане на атомни и йонни състояния на атомите на буферния газ. Третата група високоенергетични електрони притежават достатъчно енергия, за да осцилират между противоположните катодни стени в разряда.

На фигура 8 са представени получените резултати за функциите на разпределението на електроните по енергия за случая когато изследвания обем е разделен на подобеми. В това разглеждане обемът обхванат от цилиндричният катод е разделен на четири подобема, като този подобем в близост до катодната стена съвпада с областта на катодния пад. От фигурата се вижда, че концентрацията на високоенергетичните електрони е по-висока именно в подобема обхващащ катодния пад, където електроните са ускорени в следствие на силното радиално електрично поле.



Фигура 8: Функция на разпределение на електроните по енергия в симулирания обем

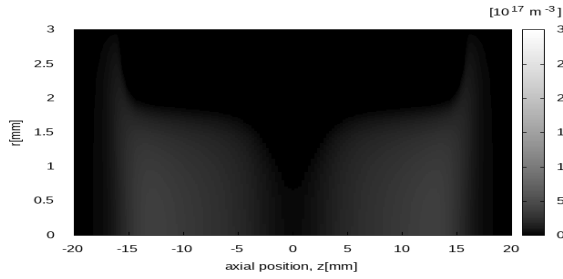
### Хибриден модел за разряд в кух катод

За изследването на кухокатоден разряд е използван времево-зависим, двуизмерен, хибриден код, базиран на сдвояването на двата самостоятелни модела: модел Монте Карло и флуиден модел. Кодът е създаден от Wouter Brok [5] с цел да се подобри описанието на поведението на електроните.

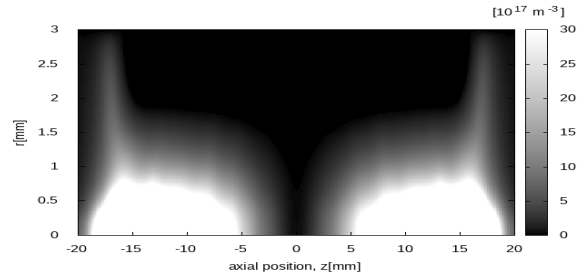
В използваният модел се осъществява комуникация между двата включени под-модела на равни интервали от време. Стойностите на електричното поле и плътностите на различните видове частици необходими за модула Монте Карло се осигуряват от флуидния модел, който пък от своя страна връща стойностите за скоростите на реакциите, осреднени за периода от последната актуализация. Двата модела се изпълняват един след друг, като докато се редуват, данните получени при изпълнението на текущият модел, се приемат за константни величини в периода на изпълнение на следващият модел.

В проведеното изследване времето на симулацията при хибридно описание е по-малко от времето необходимо за достигането на стационарно състояние. Изчисленията се извършвани до момента, в който средната енергия на електроните падне под енергията, която е необходима за ефективното им участие в нееластични взаимодействия.

Резултатите получени от флуидното и хибридно описание при една и съща продължителност на симулациите показват, че стойностите за плътностите на отделните видове частици в плазмата, получени при хибридно описание, са по-високи в сравнение със стойностите получени при използването на чисто флуидно описание.

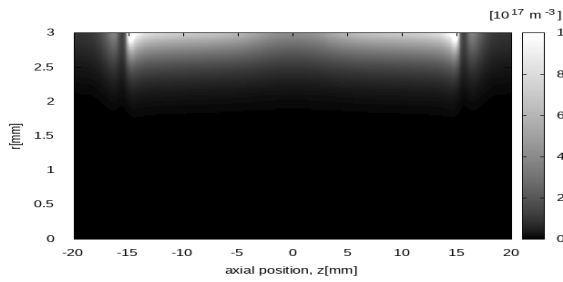


(a)

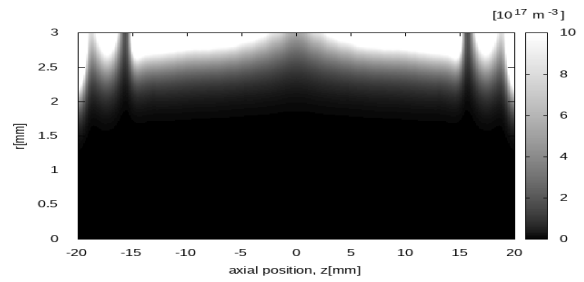


(б)

**Фигура 9:** Разпределение на плътността на електроните в симулираният обем чрез флуидния модел (a) и чрез хибридният модел (б)

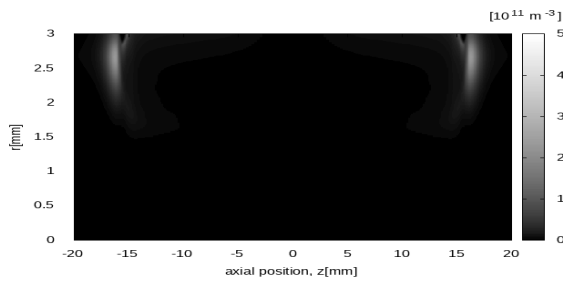


(a)

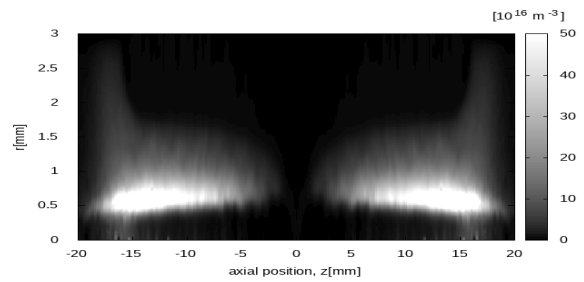


(б)

**Фигура 10:** Разпределение на плътността на разпръшените Cu атоми в симулирания обем чрез флуидния модел (a) и чрез хибридният модел (б)



(a)



(б)

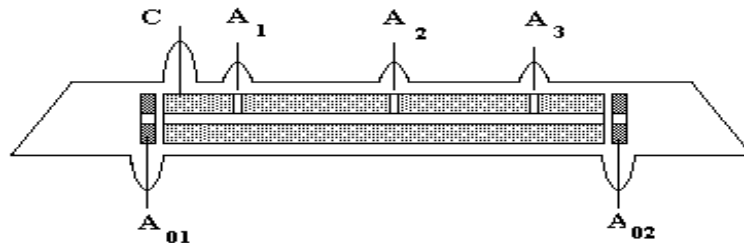
**Фигура 11:** Разпределение на плътността на  $\text{Cu}^+$  йони в симулирания обем чрез флуидния модел (a) и чрез хибридният модел (б)

## Моделиране на процесите в реална кухокатодна лазера тръба

В областта на лазерните технологии, лазерите с метални пари намират широко приложение в индустрията, медицината, науката и технологиите [18]. Платформата за симулиране на процеси в плазмата PLASIMO беше използвана за изграждането на модел, чрез който да се улесни и задълбочи изследването на поведението на плазмата в газоразрядна тръба за кухокатоден газов лазер с разпрашване на медни йони [19].

### Дизайн на газоразрядната тръба за лазери с метални пари с разпрашване на катода

Една от възможните конфигурации на новата конструкция на тръба за кухокатоден лазер с разпрашване на катода е схематично представена на фигура 12, като в конкретният случай разпрашваният метал е мед (Cu). Катодният цилиндър има вътрешен диаметър 5 mm, външен диаметър 20 mm и дължина 10 cm. От двете страни на катода са позиционирани два пръстеновидни анода  $A_{0i}$ . По продължението на катодния цилиндър са разположени три отвора, които играят роля на допълнителни странични катода  $C_i$ , като над всеки от тях има разположен пръчковиден анод  $A_i$ . Всеки от страничните катода има вътрешен диаметър 3 mm и дължина 7.5 mm.



Фигура 12: Конструкция на тръба за кухокатоден лазер с разпрашване на катода.

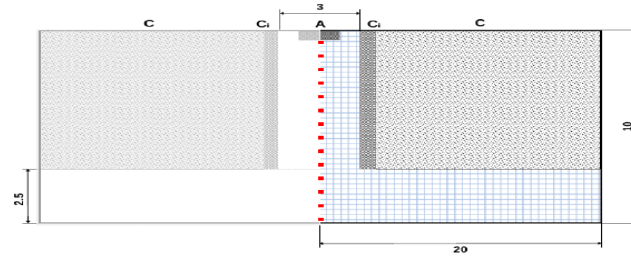
Тази конструкция позволява всеки един от страничните катода да функционира независимо от останалите, както и разрядът, възникващ във всяка една от страничните катодни кухни да бъде независим от останалите. Всички електроди са монтирани в кварцова тръба с вътрешен диаметър 20 mm, като създаденият разряд е ограничен в границите на катодната кухня. Оптичният резонатор е формиран чрез две отражателни огледала в спектралния диапазон 740 – 800 nm.

Разрядът се възбужда чрез подаване на синусоидален токов импулс с продължителност 3 ms и честота на повторение на импулса 3 Hz. Максималните стойности на изходната мощност на лазера, общият катоден ток и токът през всеки един от анодите са

измерени едновременно. Лазерната генерация е на 780.8 nm Cu йонна линия, при газова смес He и 5 % Ar при налягане на газа 1.3 kPa .

### Работни параметри на модела

Геометрията на модела е показана схематично на фигура 13. В разглежданият модел оста на симетрията  $z$  съвпада с оптичната ос на лазера. В разглеждания случай страничният катодотоден отвор е по-скоро прорез в основния катод. Разстоянието между центровете на отворите е 40 mm , но поради симетрията в разряда симулираме половината разстояние между центровете на отворите (т.е. 20 mm ). По този начин се опростява модела, а също така се намалява и изчислителното време.



**Фигура 13:** Изчислителната област, използвана за симулацията. Катодният цилиндър е с вътрешен диаметър 5 mm , външен диаметър 20 mm и дължина 10 cm . Симулираме половината разстояние между центровете на отворите, поради симетрията.

В разглежданият случай газовата смес е He с 5% Ar, а общото налягане на газа е 1.3 kPa . Приложено е постоянно напрежение от  $-300$  V . Приема се, че атомите на He и Ar са равномерно разпределени в обема на разряда, както и че температурата на газа е постоянна и е равна на 1000 K .

№	Частица	$\mu_p \times p$ (Torr m <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	$D_p \times p$ (Torr m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	
1	e	$f_e(\varepsilon)$	$D_p = \frac{k_B T_p \mu_p}{q_p}$	[9]
2	He <sup>+</sup>	$f_{He^+}(E/N)$	$D_p = \frac{k_B T_p \mu_p}{q_p}$	[10]
3	Ar <sup>+</sup>	$f_{Ar^+}(E/N)$	$D_p = \frac{k_B T_p \mu_p}{q_p}$	[10]
4	Cu	—	13.45	[11]
5	Cu <sup>+</sup>	$f_{Cu^+}(E/N)$	$D_p = \frac{k_B T_p \mu_p}{q_p}$	[12]
6	Ar*	—	20	[13]
7	He*	—	15.35	[13]

**Таблица 3:** Частиците участващи в модела и съответните им транспортни коефициенти, като коефициентите на дифузия са изведени от отношението на Айнщайн.

Транспортните коефициенти на различните частици, използвани в модела, са представени в таблица 3.

№	Реакция	Скоростна константа	
1	$e + \text{He} \rightarrow e + \text{He}^*$	$f(\varepsilon)$	[9]
2	$e + \text{He}^* \rightarrow 2e + \text{He}^+$	$f(\varepsilon)$	[9]
3	$e + \text{He} \rightarrow 2e + \text{He}^+$	$f(\varepsilon)$	[9]
4	$e + \text{Cu} \rightarrow \text{Cu}^+ + 2e$	$f(\varepsilon)$	[9]
5	$e + \text{Ar} \rightarrow e + \text{Ar}^*$	$f(\varepsilon)$	[9]
6	$e + \text{Ar}^* \rightarrow 2e + \text{Ar}^+$	$f(\varepsilon)$	[9]
7	$e + \text{Ar} \rightarrow 2e + \text{Ar}^+$	$f(\varepsilon)$	[9]
8	$\text{He}^* + \text{Ar} \rightarrow \text{He} + \text{Ar}^+ + e$	$1.68 \times 10^{-16} \text{ m}^3\text{s}^{-1}$	[20]
9	$\text{He}^* + \text{Cu} \rightarrow e + \text{He} + \text{Cu}^+$	$9.48 \times 10^{-16} \text{ m}^3\text{s}^{-1}$	[20]
10	$\text{Ar}^* + \text{Cu} \rightarrow e + \text{Ar} + \text{Cu}^+$	$4.4 \times 10^{-16} \text{ m}^3\text{s}^{-1}$	[20]
11	$\text{Ar}^+ + \text{Cu} \rightarrow \text{Ar} + \text{Cu}^+$	$3.16 \times 10^{-16} \text{ m}^3\text{s}^{-1}$	[20]
12	$\text{Ar}^* + \text{Ar}^* \rightarrow \text{Ar}^+ + e + \text{Ar}$	$1.17 \times 10^{-15} \text{ m}^3\text{s}^{-1}$	[15]
13	$\text{He}^* + \text{He}^* \rightarrow e + \text{He} + \text{He}^+$	$2.9 \times 10^{-15} \text{ m}^3\text{s}^{-1}$	[16]

Таблица 4: Включените в модела реакции и техните скоростни константи.

В таблица 4 е представен наборът от всички включени в модела реакции и техните скоростни константи.

За определяне на добива от разпрашване и саморазпрашване в следствие на бомбардирането на катода от образуваните в плазмата йони на буферния газ или на медта, в настоящия модел се използват константни стойности, като използваните коефициенти са 0.01 за  $\text{He}^+$ , 0.2 за  $\text{Ar}^+$  и 0.5 за  $\text{Cu}^+$  [4].

В разглежданият модел за стойности на коефициентите на вторични емисии се използват следните константни стойности: 0.1 за  $\text{Ar}^+$ , 0.2 за  $\text{He}^+$  и 0.1 за  $\text{Cu}^+$  [4].

## Резултати от моделирането

За флуидното описание на разряда в разглежданата конструкция и за определянето на разпределенията на плътностите на различните частици в плазмата е използван MD2D модула на платформата за моделиране на процеси в плазмата PLASIMO.

За да се провери презумцията, че се инжектират допълнителни медни атоми към основната катодна кухня, в следствие на разпрашването на стените на страничните катоди, са разгледани три отделни случая: когато разпрашването е приложено само върху основният катод  $C$ , когато се разпрашва само върху страничният катод  $C_i$  и приложено



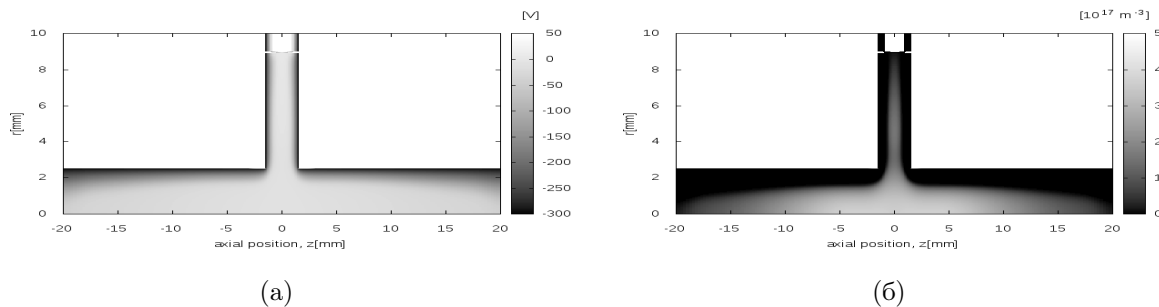
разпрашване върху двата катода  $C$  and  $C_i$ . За всеки от разглежданите случаи е намерено разпределението на потенциала и на електричното поле. Определени са разпределенията на плътностите както на електроните, така и останалите частици в разряда, като е направено сравнение на получените резултати.

### Разпрашване само на основния катод $C$

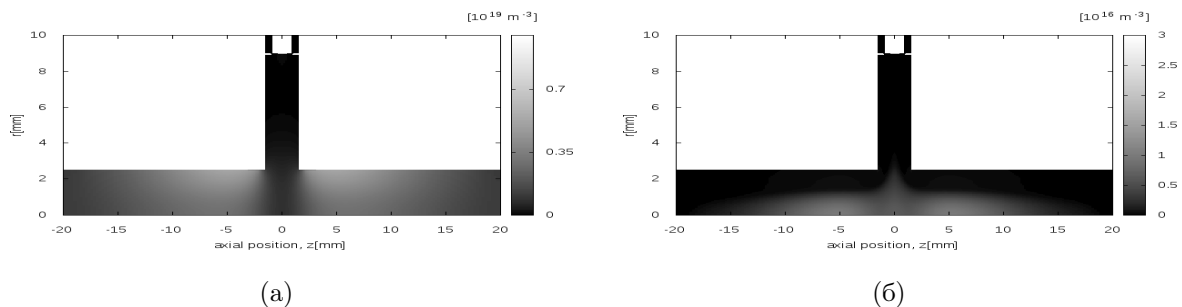
Разпределението на потенциала във вътрешността на катодната кухня, когато разпрашването е приложено само върху основният катод  $C$ , е показано на фигура 14(a). Изменението на потенциала в аксиално направление по оста  $z$  на основният катод, е от  $-10\text{ V}$  в центъра на катода до  $-42\text{ V}$  при  $z = 20\text{ mm}$ . В радиално направление изменението е от  $-300\text{ V}$  в близост до катодните стени до около  $-10\text{ V}$  в центъра на катодния цилиндър. В обема затворен от страничния катод  $C_i$ , потенциалът остава близо до анодния потенциал, поради което този регион играе ролята на "анод" за основният катод  $C$ .

Разпределението на електронната плътност, представено на фигура 14(б), има максимум в "анодната област" в аксиално направление, като плътността им намалява с отдалечаването от областта. В радиално направление електроните са локализирани в центъра на катодния цилиндър.

Разпределението на медни атоми, получени в следствие на разпрашването на стената на основния катод, е показано на фигура 15(a). От фигурата се вижда, че медните атоми са концентрирани в близост до стената на основния катод. Разпрашените медни атоми  $\text{Cu}$  се йонизират предимно чрез удари с електрони. По-високата плътност на електрони с по-висока енергия води до по-ефективни процеси на йонизация чрез удари с електрони. Поради това, медните йони  $\text{Cu}^+$ , чието разпределение на плътността е представено на фигура 15(б), са концентрирани предимно в центъра на катодния цилиндър, където плътността на електроните е по-голяма.



**Фигура 14:** Разпределение на потенциала в обема (а) и разпределение на плътността на електроните (б), когато разпрашването е приложено само върху основния катод  $C$ .



**Фигура 15:** Разпределение на плътността на медните атоми (а) и разпределение на плътността на медните йони (б), когато разпрашването е приложено само върху основния катод  $C$ .

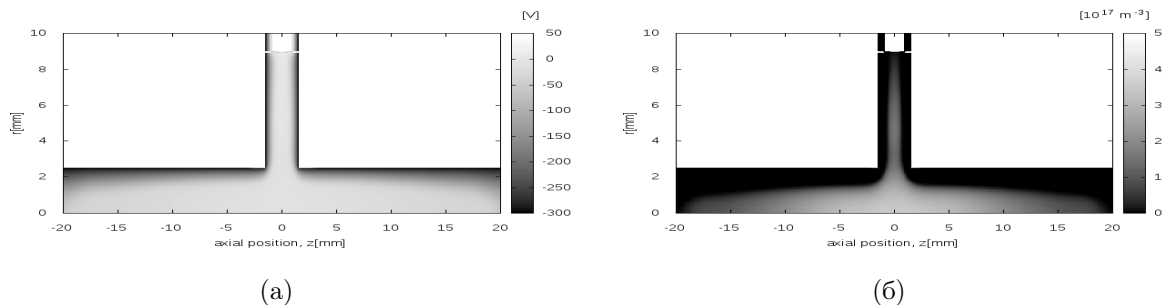
### Разпрашване само на страничния катод $C_i$

За изучаването на този случай се приема, че основният катод е направен от материал, който има незначително разпрашване, докато страничният катод е направен от мед, като разпрашването е приложено само върху страничния катод  $C_i$ .

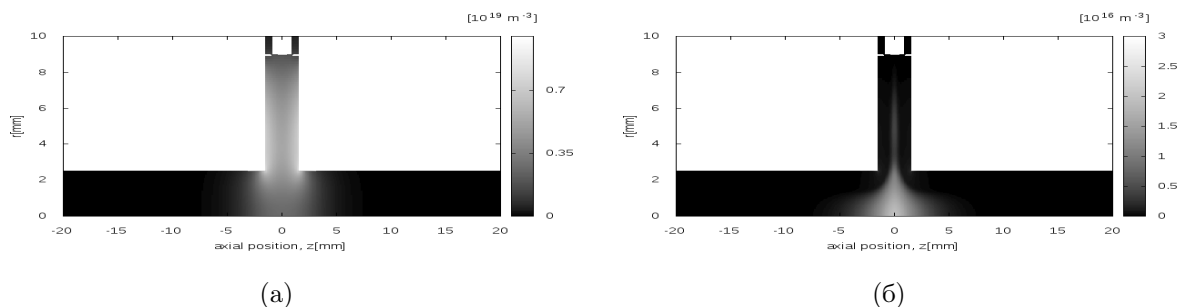
Разпределението на потенциала в разглежданата конструкция е показано на фигура 16(а). От разпределението на електронната плътност, представено на фигура 16(б), се вижда, че в следствие на силното радиално поле, максимумът на разпределението на електроните в радиална посока се намира отново в центъра на основната катодна кухина. В аксиално направление максимумът на разпределението е в анодната област, като плътността на електроните намалява по дължината на основния катод с отдалечаване от областта.

Разпределението на плътността на медните атоми, получено при разпрашване само на страничния катод  $C_i$ , е представено на фигура 17(а). Медните атоми са разположени в обема на страничните отвори в близост до разпрашваните стени. В този случай, обаче, плътността им е по-висока в сравнение с предходния случай, когато разпрашването беше приложено само върху основния катод. Концентрацията на метални пари нараства, тъй като плътността на тока е по-висока.

От разпределението на медните йони, показано на фигура 17(б) се вижда, че йоните, за разлика от разпрашените медни атоми, не са разпределени в обема обхванат от страничните катода, а навлизат в обема на основната катодна кухина. Това се дължи по-високата плътност на електроните там и съответно по-големият брой процеси на йонизация. Както може да се види на фигурата, плътността на медните йони също е по-висока, в сравнение с предходният случай с разпрашване само на основния катод.



**Фигура 16:** Потенциалното разпределение (а) и разпределението на плътността на електроните (б) за случая, когато разпрашването е приложено само върху страничния катод  $C_i$ .

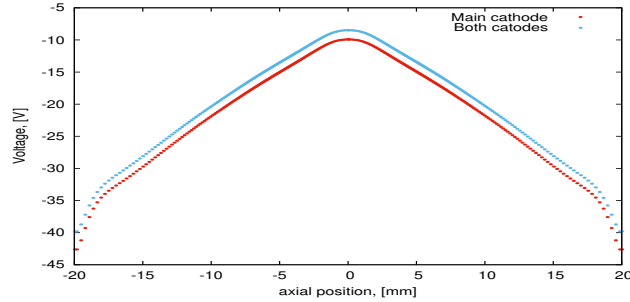


**Фигура 17:** Разпределения на плътностите на Cu атоми (а) и  $Cu^+$  йони (б) при приложено разпрашване само върху страничния катод  $C_i$

### Разпрашване на двата катода $C$ и $C_i$

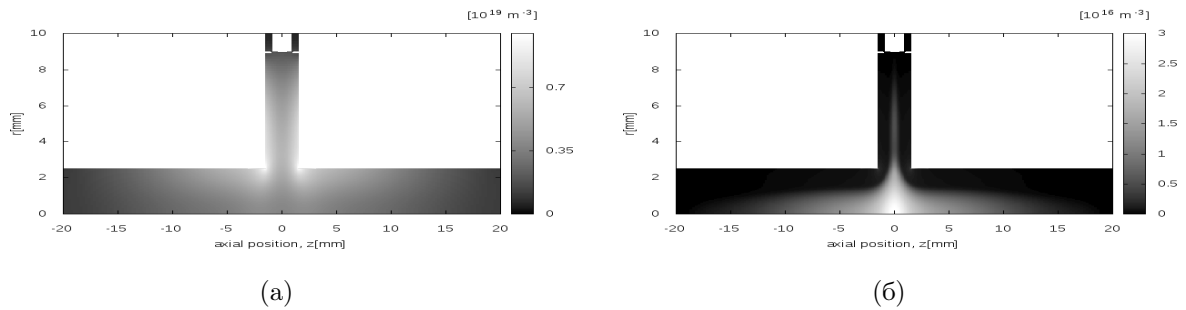
В случая, когато разпрашването е приложено не само към основният катод  $C$ , но и към страничния катод  $C_i$ , приемаме, че и основният, и страничния катод са направени от мед и се разпрашват еднакво добре.

Сравнението между профилите на потенциала в аксиално направление, за първият случай, когато разпрашването се прилага само към главния катод, и за този случай, когато е приложено разпрашване и към двата катода е показано на фигура 18. Вижда се, че двата профила са приблизително еднакви, като в случайят на разпрашване и на двата катода стойностите на потенциала варират от около  $-9 V$  в центъра на катода при  $z = 0 \text{ mm}$  до около  $-40 V$  при  $z = 20 \text{ mm}$ .



**Фигура 18:** Сравнение на профилите на разпределението на потенциала, когато разпрашването е приложено само върху основният катод, и когато се разпрашват и двата катода едновременно.

В разглежданата конфигурация, където разпрашването се прилага не само към главния катод, но и към страничния катод, профилът на аксиалното разпределение на плътностите на частиците е комбинация от профилите на двата отделни случая, когато разпрашването се прилага само към главния катод и когато се разпрашва само страничният катод. Както се вижда от представените плътностни разпределения на медните атоми и медните йони на фигура 19, плътността им значително се повишава. Разпрашените медни атоми са локализирани в близост до стените на основният и страничният катод, а металните йони са концентрирани в центъра на основният катоден цилиндър.

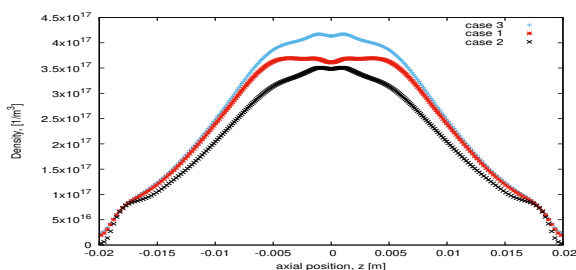


**Фигура 19:** Разпределения на плътностите на Cu атоми (а) и  $\text{Cu}^+$  йони (б) при приложено разпрашване към двата катода.

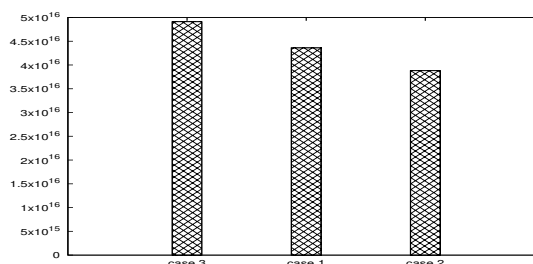
Сравнение на разпределението на плътността и средната стойност на електронната плътност в разряда в трите различни случая: 1) когато разпрашването се прилага само към главния катод; 2) когато се разпрашва само страничният катод и 3) когато е приложено разпрашване и към двата катода, е показано на фигура 20.

Максимумът в разпределението на електронната плътност е локализиран в анодната област 20(а), което води до интензивна плазмена област в близост до анода. Средната плътност на електроните когато се разпрашват и двата катода е по-висока, в сравнение със случая, когато само основният катод се разпрашва 20(б).

Максимумите в разпределенията на плътността на медните атоми 21(а) и медните йони 22(а) също се намират в анодната област.

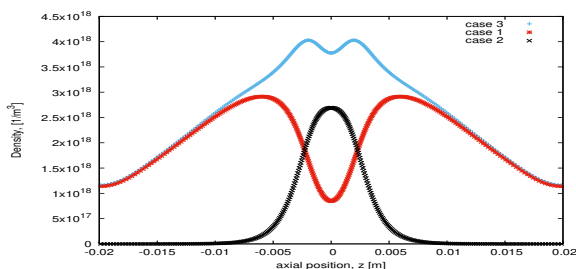


(а) Аксиално разпределение на електронната плътност.

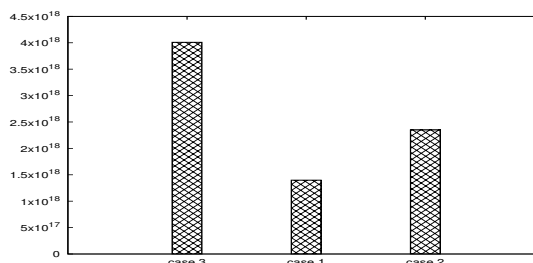


(б) Средна електронна плътност.

**Фигура 20:** Сравнение на разпределението на плътността на електроните, както и на средната плътност на електроните в трите различни случая.

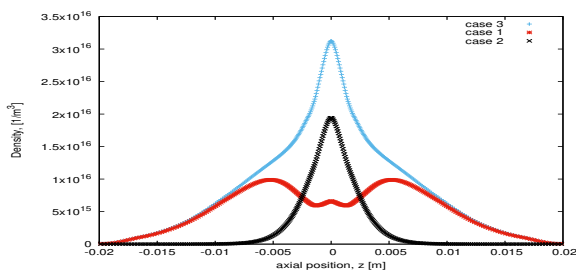


(а) Аксиално разпределение на плътността на медните атоми.

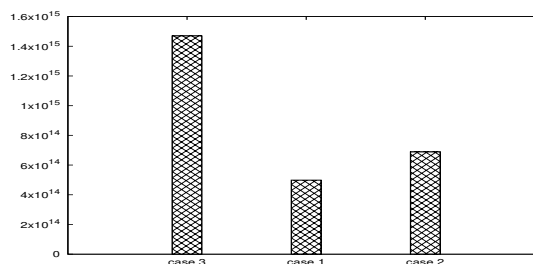


(б) Средна плътност на медните атоми.

**Фигура 21:** Сравнение на плътностните разпределения и на средните плътности на медните атоми в трите различни случая.



(а) Аксиално разпределение на плътността на медните йони.



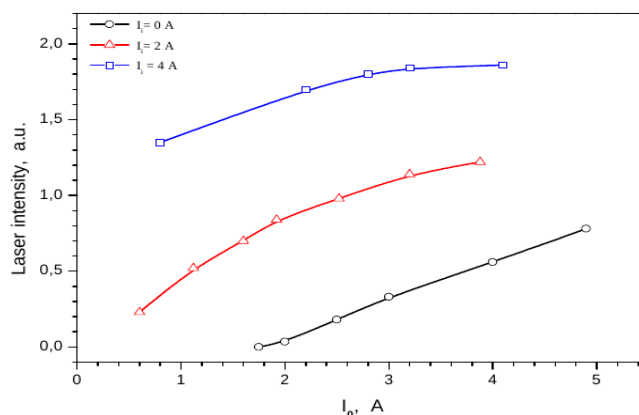
(б) Средна плътност на медните йони.

**Фигура 22:** Сравнение на разпределенията на плътностите и средните плътности на медните атоми и на медните йони в трите различни случая.

В следствие на по-високата плътност на тока в страничните катодни отвори, значително се увеличава производството на метални пари в обема на конструкцията, което е от съществено значение за лазерната генерация. Изчислените средни стойности за плътността показват, че за медните атоми 21(б) и медните йони 22(б) увеличаването е почти два пъти, когато страничният катод също се разпръсква.

## Експериментални резултати

Подобряването на свойствата на лазера, в следствие използването на новия дизайн са демонстрирани чрез експериментално изследване на генерацията на IR медния йон (780.8 nm) в He-Ar-Cu разряд в лазерната тръба, показана на фигура 12.



Фигура 23: Лазерната мощност като функция от разрядния ток  $I_0$  в основния катод

Интензивността на лазерният лъч като функция от общия ток през катода е представена на фигура 23, като на графиките са показани резултатите при различни анодни комбинации и постоянно наляне от 1.3 kPa.

В изследваната конструкция не се наблюдава генерация когато между основният катод  $C$  и двата пръстеновидни анода  $A_{0i}$ , разположени в двата края на основния катод, съществува само надлъжен разряд. При включването на един от страничните аноди  $A_i$  започва генерация, като интензивността на лазерният лъч нараства с увеличаване на броя на включените аноди. На фигура 23 се вижда, че при увеличаване на тока през страничните катода нараства и лазерната мощност.

## Метод за редуциране на набора от реакции включени в моделите

Добавянето на различни метални втулки в страничните катоди в разгледаната конструкция за лазерна тръба ще доведе до съществено увеличаване на броя на включените при моделирането частици и на реакциите, в които участват. В областта на плазменото моделиране, модели, включващи десетки типове частици и стотици до хиляди реакции, са често срещани. Пример за това е модел на хелий-кислородна плазма представен в [21], който включва 25 частици, взаимодействащи си в общо 373 реакции. Големият брой включени реакции води до непрактичност по отношение на времето за изчисление. В такива случаи е много подходящо използването на метод за редуциране на подобни системи.

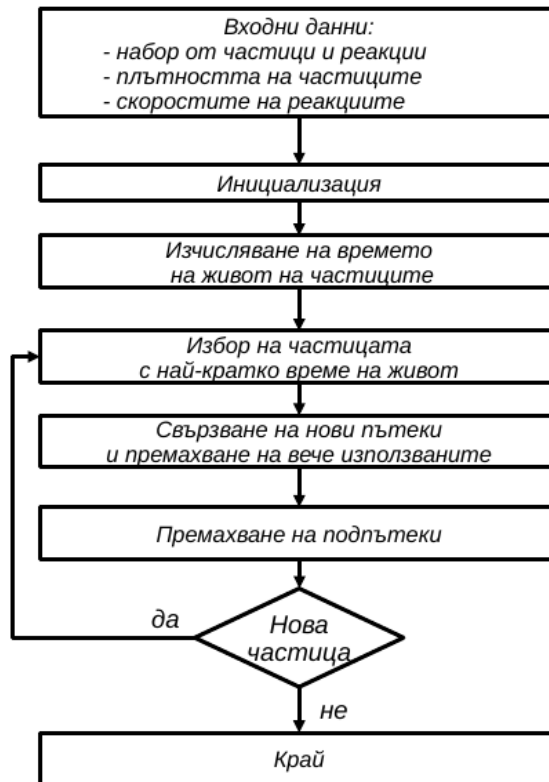
Използването на анализ на реакционните пътеки за определяне на значимите реакции включени в изследваните системи, е решение, което предлага възможност броят на включените реакции да бъде предварително редуциран. В този случай, в моделите се използва вече редуцираната система реакции, в която по-малко значимите реакции, които имат по-малък принос към процесите в системата, може да бъдат пренебрегнати.

С цел да се даде възможност за редуциране на използваните системи от частиците и реакциите участващи в моделите, в платформата за плазмено моделиране PLASIMO, беше внедрен автоматизиран инструмент за определяне на значимите реакции.

### Описание на метода за редуциране на системата от включени в моделите реакции и частици

Методът, който се използва се основава на алгоритъмът представен в [22, 23] и изисква да бъдат известни стойностите, както за плътността на частиците, така и за скоростите на реакциите, които са включени. За тази цел алгоритъмът е свързан в допълнение към PLASIMO Global Model, като по този начин плътностите на частици и скоростите на реакциите могат да бъдат изчислени, като функции на времето [24].

Принципната схема на действие на използвания метод е представена на фигура 24. Методът започва с въвеждането на всички частици, заедно със техните плътности, както и всички реакции, заедно със скоростните им константи, които са включени в системата. При инициализацията всяка отделна реакция се дефинира като отделна първоначална пътека. От плътността на дадения тип частица и скоростта, с която се произвежда или консумира тя в реакциите, се изчислява времето на живот на частицата. След като бъде определено времето на живот на всички частици, те се подреждат в списък по низходящ ред според времето си на живот.



**Фигура 24:** Схема на принципа на действие на метода за определяне на най-значимите пътеки в сложни системи от частици и реакции. Използваният метод се основава на на алгоритъма представен в [22, 23].

В изпълнението на метода за редуциране са включени следните основни стъпки:

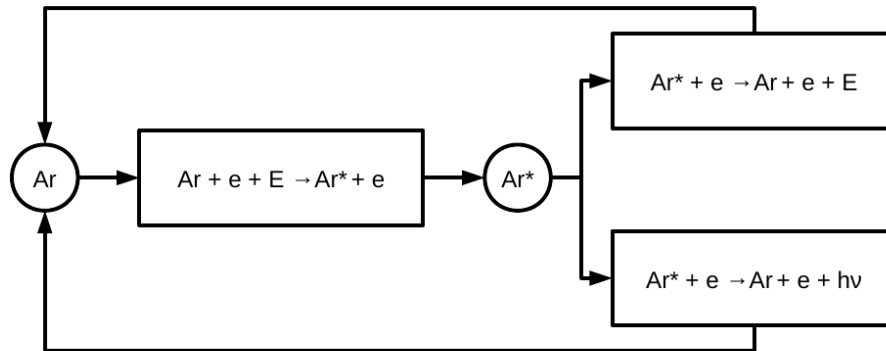
- От списъка с включените в системата видове частици се избира "свързваща частица", която представлява частицата с най-кратко време на живот.
- Започва свързването на новите пътеки спрямо тази "свързваща частица". Всяка една пътека, която образува/произвежда частица от този тип се свързва с всяка от пътеките, които я унищожават/консумират, като в така образуваниите нови пътеки сумарният брой на образувани/консумирани "свързващи частици" е нула.
- Образуват се новите пътеки, състоящи се от една произвеждаща и една консумираща първоначална пътека(реакция), като използваните вече пътеки се отстраняват от списъка с пътеки, включени в системата. Скоростите на новообразуваните пътеки се изчисляват на база скоростите на пътеките/реакциите, от които са изградени.

Следва избор на следваща частица, ако има такава, като от списъка с включени частици отново се избира частицата с най-кратко време на живот. Тази последователност



от стъпки се повтаря, докато вече няма частици, които се произвеждат или консумират във формираните нови пътеки, както е показано на фигура 24.

За да се илюстрира същността на анализа на пътеките, на фигура 25 е представен случаят за система, която се състои от три вида частици: аргон ( $Ar$ ), неговото възбудено състояние ( $Ar^*$ ) и електрон ( $e$ ). Тези три частици си взаимодействат в три реакции: електронно възбуждане, електронно девъзбуждане и девъзбуждане, чрез излъчване на фотони. Стрелките показват как реакциите се отразяват на плътността на тези частици, като със стрелка насочена от реакцията към частицата, е обозначено образуването/производството на дадената частица в следствие на протичането на конкретната реакция, или е обозначено нейното унищожаване/консумиране, в случай, че стрелката е насочена в посока от частицата към реакцията. Енергията, която е необходима или се освобождава при протичането на дадената реакция, също е включена в реакционния формат, като енергията на електрона се обозначава с  $E$ , а енергията на фотоните с  $h\nu$ .



**Фигура 25:** Примерна система състояща се от три частици ( $Ar$ ), ( $Ar^*$ ) и електрон ( $e$ ) и три реакции: електронно възбуждане, електронно девъзбуждане и девъзбуждане, чрез излъчване на фотони. Следвайки посоката на стрелките, се формират два затворени контура, които представляват новообразуваните пътеки на тази система.

В следствие на дефинирането на двата типа енергия се формират два контура в разглежданата система. Тези две възможни конфигурации от реакции, представляват новообразуваните пътеки в системата, като в конкретният случай, пътеките образуват затворени контури. Следвайки посоката на стрелките се виждат двете възможни пътеки:

- Пътеката, конструирана чрез електронното възбуждане и девъзбуждането на аргона
- Пътеката, конструирана чрез електронното възбуждане на аргона, последвано от девъзбуждане чрез фотонно излъчване.

При конструираните по този начин пътеки са отчетени скоростите на реакциите, но е пренебрегнат енергийният баланс. От фигура 25 се вижда, че в горният контур,

включващ електронното възбуждане и девъзбуждането на аргона, енергията се запазва, докато в контурът включващ електронното възбуждане на аргона и девъзбуждане чрез фотонно излъчване се променя енергийната плътност на електроните. Това от своя страна води до изменение на електронната температура, а реакциите, включващи взаимодействие с електрони, зависят силно от температурата на електроните. В тези случаи е от изключително значение да бъде направен анализа на плътността на мощността на електроните, като при конструирането на новите пътеки, тази промяна в енергийната плътност на електроните да бъде взета предвид. За тази цел в използваният метод е включен и анализ на плътността на ергията на електроните, чрез изчисляване на плътността на мощността в пътеките, разработен от Р.М.Ж. Koelman [25]. Този критерии се използва в допълнение към първоначалният алгоритъм, което дава възможност при определянето на значимостта на включените пътеки, освен скоростите на пътеките и подпътеките, да бъде взето предвид и въздействието на плътността на енергията на електроните [25, 26].

## Заклучение

За целите на изследванията в дисертацията са използвани два от модулите на платформата за симулиране на процеси в плазмата PLASIMO: Drift-Diffusion model, за направените флуидни описания и Monte Carlo modul, използван за кинетично описание на част от процесите в направените изследвания.

Основните приноси на дисертационният труд могат да се обобщят както следва:

- Направен е самостоятелен флуиден модел за описанието на разряда в кух катод. Получени са разпределенията на плътностите на частиците в разряда, както и разпределението на електричното поле в обема на кухия катод.
- Направен е самостоятелен кинетичен модел за описание на поведението на бързите електрони в разряда. Получена е функцията на разпределение на електроните по енергия.
- Направено е хибридно описание чрез сдвояването на флуидният и кинетичният модел и е получена информация за разпределението на плътностите на частиците в разряда. Показано е повишаването на стойностите на плътността на отделните видове частици в плазмата в сравнение със стойностите получени при използването на чисто флуидно описание.
- Създаден е модел за лазерна тръба за кухокатоден лазер с разпрашване на катодните стени. В резултат от моделирането са определени разпределението на плътността на електроните в разряда, разпределението на електричното поле в обема на конструкцията, разпределението на плътностите на медните атоми и йони.

Наблюдава се значително повишаване на средните стойности за плътността на медните йони в новата катодна конструкция за лазерна тръба, което може да обясни наблюдаваното повишаване на стойностите в експериментално измерената лазерна мощност.

- Разработен е код за метода за редуциране на системите от частици и реакции, използвани при моделирането на процесите в плазмата. Този метод позволява да бъдат редуцирани системи, съдържащи голям брой частици и реакции в себе си, което значително намалява изчислителното време необходимо за тяхното моделиране.

## **Изпълнение на изискванията съгласно програмата за подготовка на докторанти**

*Задължителен минимум: 250 точки*

*Общ брой получени точки: 620 т.*

### **Положени изпити в изпълнение на образователната програма**

*Задължителен минимум: 130 точки*

*Общ брой получени точки: 155 т.*

- Компютърен курс “MATLAB” - **25 т.**
- Курс по езиково обучение Английски език - **25 т.**
- “Компютърно моделиране на комплексни системи” - **20 т.**
- “Лазерни методи за диагностика, реставрация и консервация на културното наследство” - **20 т.**
- “Експериментални методи в атомната физика” - **25 т.**
- Базов специализиран изпит - **40 т.**

### **Публикации на научни резултати по темата на дисертацията в изпълнение на научната програма**

*Задължителен минимум от две публикации и 80 точки*

*Общ брой получени точки: 220 т.*

**Публикация в чуждестранно научно списание, в чуждестранен тематичен сборник или в наше научно списание с международен статут**

- Koelman, P.M.J.; **Yordanova, D.**; Graef, W.A.A.D.; Tadayon Mousavi, S.; van Dijk, J., 2019, Uncertainty analysis with a reduced set of input uncertainties selected using pathway analysis, *Plasma Sources Sci. Technol.*, Volume 28, Number 7 - **60 т.**
- **Danka Yordanova**, Margarita Grozeva, Diana Mihailova, Jan van Dijk, 2019, FLUID MODELLING OF HOLLOW CATHODE COPPER ION LASER WITH CATHODE SPUTTERING, *Comptes rendus de l'Académie bulgare des Sciences*, 72, No 12 - **60 т.**
- **D Yordanova**, K Temelkov, D Mihailova, J van Dijk, PLASIMO MODELLING OF HOLLOW CATHODE GEOMETRY: THE LASER TUBE CONFIGURATION FOR SPUTTERING METAL VAPOUR LASERS, приета за печат в *Journal of Physics: Conference Series* - **60 т.**

**Публикация на доклад в пълен текст в материали от чуждестранно научно мероприятие**

- PMJ Koelman, **D Yordanova**, S Tadayon Musavi, WAAD Graef, D Mihailova and J van Dijk, Uncertainty analysis of a reduced CO2 global model, ID Paper 200, *Montreal Online Proceedings ISPC 23, Montreal* - **40 т.**

**Докладване пред научни форуми на научни резултати по темата на дисертацията в изпълнение на научната програма**

*Задължителен минимум: 40 точки*  
*Общ брой получени точки: 304 т.*

**Доклад пред научно мероприятие в чужбина или пред международно научно мероприятие у нас**

- 19th International summer school on vacuum, electron and ion technologies VEIT, 21-25 септември 2015г., Созопол, България, Постерен доклад на тема: „LIBS analysis of valuable precious metal museum objects”, D.Yordanova, G. Malcheva, V.Tankova, A.Pirovska, M. Grozeva - **32 т.**
- INERA Workshop "Laser and Plasma Matter Interaction 18-20 ноември 2015г., Пловдив, България, Постерен доклад на тема: „Laser-Induced Breakdown Spectroscopy for Investigation of Ancient Gilding Techniques”, D. Yordanova, P. Penkova, R. Stoychev, G. Jankov, S. Karatodorov, P. Zahariev, G.Malcheva, M. Grozeva - **32 т.**
- POSTMOBILITY EXPERIENCE SHARING, Sofia, Bulgaria, September 12-14, 2016, уснен доклад: „IMPLEMENTATION AND USE OF ALGORITHM FOR CHEMICAL PATHWAY

ANALYSIS IN PLASIMO“, D. Yordanova, W. Graef, D. Mihailova, M. Grozeva, J. van Dijk - **32 т.**

- 23rd International Symposium on Plasma Chemistry, ISPC 23, Montréal, Canada, from July 30th to August 4th, 2017, доклад на тема: „Uncertainty analysis of a reduced CO2 global model“, PMJ Koelman, D Yordanova, S Tadayon Musavi, WAAD Graef, D. Mihailova and J van Dijk - **32 т.**
- 19th International Conference and School on Quantum Electronics "Laser Physics and Applications" ICSQE'20 26-30 септември 2016г., Созопол, България, Постерен доклад на тема: "Modeling Of Plasma Chemical Reactions In CO2 Laser Mixture“, D. Yordanova, W. Graef, D. Mihailova, M. Grozeva, J. van Dijk - **32 т.**
- Twentieth International Summer School on Vacuum, Electron And Ion Technologies, 20th VEIT, Созопол, България, 25-29 септември 2017г., постерен доклад: „Virtual instrument for qualitative elemental analysis of LIBS spectra“, D. Yordanova, M. Grozeva - **32 т.**
- The 20th Workshop on the Exploration of Low Temperature Plasma Physics, WELTPP-20, Conference Centre Rolduc, Kerkrade, November 30-December 1, 2017, постерен доклад: „PLASIMO modelling of hollow cathode discharges“, D. Yordanova, D. Mihailova, J. van Dijk - **32 т.**
- The 20th Workshop on the Exploration of Low Temperature Plasma Physics, WELTPP-20, Conference Centre Rolduc, Kerkrade, November 30-December 1, 2017, постерен доклад: „Patway analysis in PLASIMO“, Peter Koelman, Danka Yordanova, Samaneh Tadayon Musavi, Wouter Graef, Diana Mihailova, Jan van Dijk - **32 т.**
- TWENTY-FIRST INTERNATIONAL SUMMER SCHOOL ON VACUUM, ELECTRON AND ION TECHNOLOGIES, 23 - 27 септември 2019, Созопол, България, постерен доклад на тема: „PLASIMO MODELING OF HOLLOW CATHODE GEOMETRY: THE LASER TUBE CONFIGURATION FOR SPUTTERING METAL VAPOUR LASERS“, D. Yordanova, K. Temelkov, D. Mihailova, J. van Dijk - **32 т.**

### Доклад пред научен семинар на ПНЗ

- Отчетен семинар за дейността на докоранта за периода 01.04.15 г. - 01.10.16г., 11.10.16 г, ИФТТ-БАН, 11.10.2016г., Устен доклад на тема: Автоматизация на процеса на обработка и анализ на LIBS спектри. Числен модел за определяне на всички значими пътеки в комплексна система от химични реакции. - **8 т.**
- Отчетен семинар за дейността на докоранта за периода 01.04.15 г. - 01.04.17г., 01.06.2017г, ИФТТ-БАН, 01.06.2017г., Устен доклад на тема: LabVIEW базиран виртуален инструмент за обработка и анализ на LIBS спектри. Числен модел за определяне на всички значими пътеки в система от химични реакции. - **8 т.**

## Командировки с цел изучаване на чужд опит и специализации

- Group Elementary Processes of Gas Discharges, Department of Applied Physics, Eindhoven University of Technology, Netherlands, 06.06.2015г. - 16.06.2015г., Запознаване с използване и работа на платформа за симулиране и моделиране на плазма – PLASIMO; командировка по проект INERA, 7PI No 316309
- Group Elementary Processes of Gas Discharges, Department of Applied Physics, Eindhoven University of Technology, Netherlands, 16.03.2016г. - 31.08.2016г., Разработване на числен модел за определяне на всички значими пътеки в комплексна система от химични реакции; командировка по проект INERA, 7PI No 316309
- Group Elementary Processes of Gas Discharges, Department of Applied Physics, Eindhoven University of Technology, Netherlands, 6.10.2017г. - 6.03.2018г., Methods to describe a plasma source with low ionization degrees, по програма Erasmus + за мобилност на докторанти
- Group Elementary Processes of Gas Discharges, Department of Applied Physics, Eindhoven University of Technology, Netherlands, 2.05.2018г. - 4.06.2018г., Hybrid modeling of hollow cathode discharges
- Group Elementary Processes of Gas Discharges, Department of Applied Physics, Eindhoven University of Technology, Netherlands, 10.09.2018г. - 10.11.2018г., Modelling of multiple hollow cathode discharge, Мобилност на служители с цел обучение по програма Erasmus +
- Group Elementary Processes of Gas Discharges, Department of Applied Physics, Eindhoven University of Technology, Netherlands, 9.10.2019г. - 8.12.2019г., Fluid modelling of multiple He-Ar-Cu hollow cathode discharge, Мобилност на служители с цел обучение по програма Erasmus +

## Участие в научни проекти

- INERA Research and Innovation Capacity Strengthening of ISSP-BAS in Multifunctional Nanostructure, 7PI № 316309, 2013 – 2016.
- The National Research Programme "Young scientists and postdoctoral students" approved by DCM# 577 / 17.08.2018, Bulgarian Ministry of Education and Science

# Библиография

- [1] Grozeva M, Mihailova D and Sabotinov N, 2009, Hollow-cathode laser tube with cathode sputtering, BG Patent 65813 B1
- [2] *PLASIMO* , URL <https://plasimo.phys.tue.nl/index.php>
- [3] van Dijk J, Peerenboom K, Jimenez M, Mihailova D and van der Mullen J, 2009, The plasma modelling toolkit Plasimo, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42**, 194012
- [4] Mihailova, D. B., 2010, Sputtering hollow cathode discharges designed for laser applications : experiments and theory Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven DOI: 10.6100/IR672762
- [5] Brok, W. J. M., 2005, *Modelling of transient phenomena in gas discharges*. Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven DOI: 10.6100/IR595133
- [6] Bogaerts, A. & Grozeva, M., Axial non-uniformity of longitudinal hollow-cathode discharges for laser applications: numerical modeling and comparison with experiments, 2002, *Appl Phys B*, 75: 731
- [7] E.M. van Veldhuizen and F.J. de Hoog., Analysis of a Cu-Ne hollow cathode glow discharge at intermediate currents, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 17:953, 1984
- [8] Hamisch, J. & de la Rosa, 1987, Calculation of geometrical changes in cylindrical copper hollow cathodes due to sputtering, *J. Appl. Phys. B* **43**:189
- [9] Hagelaar G and Pitchford L, 2005, Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models, *Plasma Sources Sci. Technol.* **14** 722
- [10] Ellis H, Pai R, McDaniel E, Mason E and Viehland L 1976 Transport properties of gaseous ions over a wide energy range, *At Data and Nucl Data Tables* **17**, 177
- [11] Sekido H., Kondo T., Kono A., Goto T., 1993, Measurement of diffusion coefficients for ground-state and metastable copper atoms in rare gases, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **26** 1414
- [12] McDaniel E.W., 1964, *Collision phenomena in ionized gases.*, New York: Wiley & Sons
- [13] Grigoriev I.S., Meilikhov E.Z., Radzig A.A., 1997, *Handbook of physical quantities.*, CRC Press, London

- [14] R. Arslanbekov, R.C. Tobin, and A. Kudryatsev. *J. Appl. Phys.*, 81:554, Self-consistent model of high current density segmented hollow cathode discharges, 1997
- [15] A.N. Klucharev, V. Vujnovic., 1990, Chemi-ionization in thermal-energy binary collisions of optically excited atoms, *PHYSICS REPORTS (Review Section of Physics Letters)* 185. No. 2, p. 55-81
- [16] Stevefelt J., Pouvesle J. M., Bouchoule A., Reaction kinetics of a high pressure helium fast discharge afterglow, *J. Chem. Phys* **76**, 4006, 1982
- [17] Bogaerts, and R. Gijbel, 1996, Role of sputtered Cu atoms and ions in a direct current glow discharge: Combined fluid and Monte Carlo model, *Journal of Applied Physics* 79, 1279
- [18] Chris E. Little and Nikola V. Sabotinov, Pulsed Metal Vapour Lasers, 1996
- [19] Danka Yordanova, Margarita Grozeva, Diana Mihailova, Jan van Dijk, 2019, FLUID MODELLING OF HOLLOW CATHODE COPPER ION LASER WITH CATHODE SPUTTERING, *Comptes rendus de l'Académie bulgare des Sciences*, 72, No 12
- [20] Annemie Bogaerts and Renaat Gijbels, Hybrid modeling network for a helium–argon–copper hollow cathode discharge used for laser applications, *Journal of Applied Physics* **92**, 6408, 2002
- [21] Miles M Turner, 2015, Uncertainty and error in complex plasma chemistry models, *Plasma Sources Sci. Technol.* 24 035027
- [22] R. Lehmann, Determination of Dominant Pathways in Chemical Reaction Systems: An Algorithm and Its Application to Stratospheric Chemistry, *Journal of Atmospheric Chemistry*, 2002, 41: 297
- [23] R. Lehmann, An Algorithm for the Determination of All Significant Pathways in Chemical Reaction Systems, *Journal of Atmospheric Chemistry*, 2004, 47: 45
- [24] Graef, W. A. A. D., 2012, *Zero-dimensional models for plasma chemistry*, PhD Thesis, Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven
- [25] Koelman, P., 2019, *Chemical aspects of CO<sub>2</sub> plasma modelling*, PhD Thesis, Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven
- [26] Koelman, P.M.J.; Yordanova, D.; Graef, W.A.A.D.; Tadayon Mousavi, S.; van Dijk, J., 2019, Uncertainty analysis with a reduced set of input uncertainties selected using pathway analysis, *Plasma Sources Sci. Technol.*, Volume 28, Number 7