Моделирование процессов в плазме, содержащей нанодисперсную фракцию.

Барченко В. Т., Гребнев О. И., Кузнецов В.А

(Россия, СПб, СПбГЭТУ им. В. И. Ульянова (Ленина) «ЛЭТИ»)

Технологическиепроцессы,использующиеплазменныеэмиссионные системы, находят самоеширокоеприменениевомногихотрасляхпромышленностивсего,припроизводствеизделийэлектронной техники.

Ионно-плазменные технологические процессы по сравнению с другими технологиями, например с использованием химически активных веществ (кислоты, щелочи и существенные др.), имеют преимущества И позволяют осуществлять операции, которые можно выполнить только с использованием заряженных веществ. потоков Это. прежде всего, простота управления технологического параметрами процесса, поскольку, изменяя величину тока потока заряженных частиц и ускоряющего напряжения, можно в пределах регулировать широких скорость протекания процесса, а так же менять саму сущность процесса.

В настоящей работе рассмотрены определяющие параметры процессы, плазмы в газоразрядной аргоновой камере плазменной эмиссионной системы при внесении В камеру нанодисперсного SiO₂. Газоразрядная камера (расчетная область) собой представляет цилиндрическую объемом V, полость в котором расположен накаленный катод площадью S_к, эмитирующий электроны, анод площадью S_a и стенки площадью находящиеся под S_{cm} плавающим потенциалом. Катодные электроны, ускоряясь в двойном прикатодном слое

до энергии, соответствующей разности потенциалов между плазмой и катодом, производят ионизацию газа, а так же энергию, вводят В разряд обеспечивающую разряде R определенный уровень электронной Т_е и ионной T_i температур. В работе для электронов использовалось равновесное (максвелловское) распределение ПО скоростям. В разрядах низкого давления $= 1 \Pi a$ при концентрации (p_0) электронов в диапазоне 10¹²-10¹⁴ см⁻³ будет выполнятся условие $T_e \gg T_i$.

Чтобы оторвать электрон от атома иона. находящегося или R невозбужденном состоянии, нужно совершить работу численно равную энергии связи электрона с ядром. Эта работа может быть совершена фотоном или частицей. Фотоны в плазме газовых разрядов имеют обычно длины свободного пробега, значительно превышающие размеры области с плазмой, и по этой причине покидают плазму практически не внося вклада в Взаимные ионизанию. столкновения ионов плазмы также не вносят вклада в ионизацию, поскольку относительные скорости, с которыми они происходят, малы. Таким образом, лишь электроны служить эффективными могут переносчиками энергии от внешнего источника к электронным оболочкам атома.

Налетающий электрон передает энергию не всему иону в целом, а лишь одному связанному электрону, и если переданная энергия превышает энергию связи, то происходит ионизация. Энергия связи E_{cb} и потенциал ионизации U_i связаны соотношением:

$$U_i = \frac{E_{\rm CB}}{e}.$$
 (1)

Ионизация электронным ударом может происходить несколькими путями. Наиболее простой из них – прямая однократная ионизация с отрывом одного из внешних электронов. Результатом этого процесса является увеличение заряда иона на единицу.

Каждый из перечисленных процессов ионизации характеризуется эффективным сечением реакции $\sigma_{z_1 \to z_2}(V_e)$, зависящим от скорости электрона V_e , исходного зарядового состояния z_1 и конечного z_2 .

Предположим, что из всех каналов ионизации преобладает однократная последовательная ионизация электронным ударом. Этот описан в работе [2], где случай приведено несколько полуэмпирических формул для расчета ионизации. Наибольшее сечения с экспериментальными соответствие данными дает формула Гризинского (Gryzinski):

$$\sigma_{z_1 \to z_2}(E_e) = \frac{\sigma_0}{E_i^2} f_3(\frac{E_e}{E_i}),$$
 (2)

Здесь: $\sigma 0 = 6.56 \cdot 10^{-14} z_e^2$ (эВ²см²),

 z_e — заряд налетающей частицы в единицах электронного заряда, т.е. для электрона 1; E_i — энергия, необходимая для удаления i-го электрона, эB; E_e энергия налетающего электрона в эB;

$$f_{3}(\frac{T_{e}}{E_{i}}) = \frac{E_{i}}{T_{e}} \left(\frac{E_{e} - E_{i}}{E_{e} + E_{i}}\right)^{\frac{3}{2}} \left[1 + \frac{2}{3} \left(1 - \frac{E_{i}}{2E_{e}}\right) \ln\left(2.7 + \sqrt{\frac{E_{i}}{E_{e}} - 1}\right)\right]$$
(3)

Результат расчета сечений ионизации аргона по формуле (3) приведен на рис.1.

Следует отметить, что величина $\sigma_{z_1 \rightarrow z_2}(E_e)$ не имеет большой практической ценности, поскольку никак не учитывает распределение электронов в плазме по скоростям

. Для того, чтобы учесть распределение электронов в плазме по скоростям, или, иначе говоря, функцию распределения электронов (ФРЭ),



Рис. 1. Результаты расчета сечений ионизации аргона

введем усредненное по ФРЭ сечение ионизации $\langle \sigma_{z_1} \rightarrow_{z_2} V_e(T_e) \rangle$. Здесь T_e – это параметр распределения, электронная температура.

Функция распределения электронов.

В рассматриваемой нами плазме существуют две «разновидности» электронов – плазменные и катодные.

Поскольку, ускоряясь в прикатодном слое, катодные электроны приобретают значительную по сравнению с потенциалом ионизации аргона энергию, можно ожидать, что они внесут весомый вклад в ионизацию. Это обстоятельство не позволяет нам ограничится учетом какого-либо одного вида электронов. В работе [3] для описания подобной плазмы предложено использовать двугрупповую ФРЭ. Если считать распределения катодных и плазменных электронов по отдельности максвелловскими

$$M(E_e, T_e) = 2\pi \left(\frac{e}{\pi k T_e}\right)^{1.5} \sqrt{E_e} \exp\left(\frac{-eE_e}{k T_e}\right)$$

то двугрупповая ФРЭ будет выглядеть так:

$$M_{\pi}(E_{e},T_{e_{\kappa}},T_{e_{\pi,n}},n_{e},n_{e_{\kappa}}) = \frac{2\sqrt{E_{e}}}{n_{e}\sqrt{\pi}} \left[(n_{e}-n_{e_{\kappa}})\exp\left(\frac{-eE_{e}}{kT_{e_{\pi,n}}}\right) \frac{kT_{e_{\pi,n}}}{e} \right]^{-1.5} + n_{e_{\kappa}}\exp\left(\frac{-eE_{e}}{kT_{e_{\kappa}}}\right) \frac{kT_{e_{\kappa}}}{e} \right]^{-1.5} - \frac{1}{2}$$

где $T_{e_{\rm K}}$ и $n_{e_{\rm K}}$ – температура, и концентрация плазменных электронов; $T_{e_{\rm пл}}$ – температура плазменных электронов; n_e – общая концентрация электронов в плазме. Ясно, что

$$n_e - n_{e_{\mathrm{K}}} = n_{e_{\Pi\Pi}} \; .$$

Сечения ионизации, усредненные по функции распределения электронов.

В общем виде сечение ионизации, усредненное по функции распределения электронов

$$\langle \sigma_{z_1 \to z_2} V_e \rangle (T_{e_{\kappa}}, T_{e_{\Pi\Pi}}, n_e, n_{e_{\kappa}}) =$$

$$\int_{0}^{\infty} \sigma_{z_1 \to z_2} (E_e) V_e(E_e) M_{\pi}(E_e, T_{e_{\kappa}}, T_{e_{\Pi\Pi}}, n_e, n_{e_{\kappa}}) dE_e$$

Необходимо заметить, что выражение (3) для сечения ионизации не имеет смысла, если энергия налетающего электрона меньше чем пороговая энергия процесса. Поэтому нижний предел интегрирования в (4) устанавливать необходимо равным пороговой энергии процесса ионизации. Кроме того, в качестве верхнего предела интегрирования невозможно использовать бесконечность, так как интеграл вычисляется численным методом. В расчетах использовался верхний предел интегрирования 5 кэВ. Такое ограничение не вносит заметной погрешности т.к. в принятой ФРЭ доля электронов с энергиями, превышающими 5 кэВ крайне мала.

Задаваясь типичными для рассматриваемой плазмы значениями $T_{e_e} = 10^5$ K, $n_e = 10^{21}$ см⁻³,

$$\frac{n_e}{n_{e_{\rm K}}}$$
 = 10, были получены

зависимости различных сечений ионизации аргона, усредненных по ФРЭ, от температуры плазменных электронов (Рис. 2).

 $\left\langle \sigma_{z_1 \to z_2}(E_e) V_e \right\rangle (I_e),$ $c M^3 / ce \kappa$



Рис. 2. Сечения ионизации аргона, усредненные по ФРЭ. Перезарядка. (4)

Наиболее опасным процессом снижения кратности заряда является перезарядка многозарядных ионов на нейтральных атомах остаточного газа. Суть перезарядки состоит в том, что ион и нейтральный атом притягиваются друг к другу благодаря поляризации атома в электростатическом поле и обмениваются электронами, в результате чего рождаются две новые частицы.

Если в реакции перезарядки участвуют ион и нейтральный атом одинаковых видов, то такую перезарядку называют резонансной перезарядкой на нейтральных атомах.

При условии, что в газоразрядной камере источника МЗИ с импульсным питанием присутствуют только нейтральные атомы и ионы аргона с зарядностями +1 ÷ +4, можно выделить следующие реакции перезарядки и соответствующие им сечения взаимодействия:

 $\begin{array}{ll} Ar^{1+} + Ar^0 \rightarrow Ar^0 + Ar^{1+} & \sigma_{1+\rightarrow 0} \\ Ar^{3+} + Ar^0 \rightarrow Ar^0 + Ar^{3+} & \sigma_{3+\rightarrow 0} \end{array}$

$Ar^{2+} + Ar^0 \rightarrow Ar^0 + Ar^{2+}$	$\sigma_{2+\rightarrow 0}$
$Ar^{3+} + Ar^0 \rightarrow Ar^{1+} + Ar^{2+}$	$\sigma_{3+\rightarrow 1+}$
$Ar^{2+} + Ar^0 \rightarrow Ar^{1+} + Ar^{1+}$	$\sigma_{2+\rightarrow 1+}$
$Ar^{3+} + Ar^0 \rightarrow Ar^{2+} + Ar^{1+}$	$\sigma_{3+\rightarrow2+}$
$Ar^{4+} + Ar^0 \rightarrow Ar^0 + Ar^{4+}$	$\sigma_{4+\rightarrow 0}$
$Ar^{4+} + Ar^0 \rightarrow Ar^{2+} + Ar^{2+}$	$\sigma_{4+\rightarrow2+}$
$Ar^{4+} + Ar^0 \rightarrow Ar^{1+} + Ar^{3+}$	$\sigma_{4 + \rightarrow 1 +}$
$Ar^{4+} + Ar^0 \rightarrow Ar^{3+} + Ar^{1+}$	$\sigma_{4+\rightarrow3+}$

Баланс частиц в плазме источника многозарядных ионов.

В двух предыдущих разделах мы рассматривали процессы, приводящие к образованию и уходу заряженных частиц в плазме, по отдельности и получили их основные параметры. Теперь рассмотрим эти процессы в комплексе, поскольку в плазме они протекают одновременно И тесно взаимосвязаны. Влияние геометрии разряда и некоторых его параметров на эффективность ионообразования И компонентный состав ионов можно рассмотреть на примере простой модели однородного разряда без внешнего магнитного поля, расчет проведя баланса частиц в разряде.

Вывод уравнений баланса частиц.

собой Пусть ГРК представляет некоторый объем И круглого или прямоугольного сечения, в котором имеется накаленный катод площадью *S*_к, эмитирующий электроны, анод площадью S_{ан} и стенки площадью S_{ст}, нахоляшиеся пол плавающим Катодные потенциалом. электроны ускоряются в двойном прикатодном слое до энергии, соответствующей разности потенциалов между плазмой и катодом. Эти электроны ионизируют газ, а также вводят в разряд энергию, обеспечивающий определенный уровень электронной T_e и ионной T_i разрядах температуры. В низкого давления (менее 1 Πa) при концентрации электронов $n_e = 10^{20} \div 10^{21} \text{ м}^{-3}$ выполняется условие $T_e >> T_i$. При $T_e = 5 \div 10$ эВ (или $5.6 \cdot 10^4 \div 1.2 \cdot 10^5$ К), что имеет место в разряде без магнитного поля, плазменные электроны дают значительный вклад в ионизацию газа, поэтому в уравнениях баланса частиц учитывается ионизация частиц И катодными, плазменными И электронами. Этот учет заключается в использовании введенной ранее двугрупповой ФРЭ.

Ранее мы выделили следующие процессы, протекающие в плазме:

Ионизация:

ИОНИЗация.			
$\operatorname{Ar}^{0} + e \to \operatorname{Ar}^{1+} + 2e$	σ_{0}	→1+	(5.1)
$\operatorname{Ar}^{0} + e \to \operatorname{Ar}^{2+} + 3e$	σ_{0}	→2+	(5.2)
$\operatorname{Ar}^{0} + e \rightarrow \operatorname{Ar}^{3+} + 4e$	σ_0	→3+	(5.3)
$\operatorname{Ar}^{0} + e \to \operatorname{Ar}^{4+} + 5e$	σ_{0}	→4+	(5.4)
$\operatorname{Ar}^{1+} + e \rightarrow \operatorname{Ar}^{2+} + 2e$	σ_1	+→2+	(5.5)
$\operatorname{Ar}^{1+} + e \rightarrow \operatorname{Ar}^{3+} + 3e$	σ_{l}	+→3+	(5.6)
$\operatorname{Ar}^{1+} + e \rightarrow \operatorname{Ar}^{4+} + 4e$	σ_1	+→4+	(5.7)
$\operatorname{Ar}^{2+} + e \to \operatorname{Ar}^{3+} + 2e$	σ	2+→3+	(5.8)
$\operatorname{Ar}^{2+} + e \to \operatorname{Ar}^{4+} + 3e$	σ	2+→4+	(5.9)
$\operatorname{Ar}^{3+} + e \to \operatorname{Ar}^{4+} + 2e$	σ	3+→4+	(510)
Перезаг	эядк	a:	
$Ar^{1+} + Ar^0 \rightarrow Ar^0 + Ar$	1+	σ .	(61)
	•	$O_{I+\rightarrow 0}$	(0.1)
$Ar^{2+} + Ar^0 \to Ar^0 + Ar$.2+	$\sigma_{2+\to 0}$	(6.2)
$Ar^{2+} + Ar^0 \rightarrow Ar^{1+} + Ar^0$	Ar ¹⁺	$\sigma_{2+\rightarrow 1+}$	(6.3)
$Ar^{3+} + Ar^0 \rightarrow Ar^0 + Ar^0$	r ³⁺	$\sigma_{3+\rightarrow 0}$	(6.4)
$Ar^{3+} + Ar^0 \rightarrow Ar^{1+} + A$	r ²⁺	$\sigma_{3+\rightarrow 1+}$	(6.5)
$Ar^{3+} + Ar^0 \rightarrow Ar^{2+} + Ar^0$	r ¹⁺	$\sigma_{3+\rightarrow2+}$	(6.6)
$Ar^{4+} + Ar^0 \rightarrow Ar^0 + Ar^0$	r ⁴⁺	$\sigma_{4+\rightarrow 0}$	(6.7)
$Ar^{4+} + Ar^0 \rightarrow Ar^{1+} + Ar^0$	4r ³⁺	$\sigma_{4+\rightarrow1+}$	(6.8)
$Ar^{4+} + Ar^0 \rightarrow Ar^{2+} + Ar^0$	r^{2+}	$\sigma_{4\rightarrow 2+}$	(6.9)
$Ar^{4+} + Ar^0 \rightarrow Ar^{3+} + Ar^{3+}$	r^{1+}	$\sigma_{4+\rightarrow 3+}$	(6.10)
Скорость каж	дой	pea	акции
пропорциональна	,	произвел	ению

концентраций взаимодействующих частиц и сечения взаимодействия, усредненного по распределению. Например, для реакции (5.10) интересующая нас скорость генерации Ar⁴⁺ будет:

$$q_{4+} = n_e n_{Ar^{3+}} \left\langle \sigma_{3+\to 4+} V_e \right\rangle.$$

Здесь и далее $\left<\sigma_{3+\rightarrow4+}V_{e}\right>$ – сечение усредненное взаимодействия, по распределению электронов по скоростям, является функцией переменных $T_{e_{\kappa}}, T_{e_{\Pi\Pi}}, n_e, n_{e_{\kappa}},$ но поскольку такая запись слишком громоздка, она будет опущена.

В соответствии с (5.1) – (6.10) можно записать

Скорости генерации ионов Ar¹⁺, Ar²⁺,
Ar³⁺ и Ar⁴⁺:
$$q_{1+} = n_e n_0 \langle \sigma_{0 \to 1+} V_e \rangle +$$

 $+ n_0 V_i (n_2 \sigma_{2+\to 1+} + n_3 \sigma_{3+\to 1+} + n_4 \sigma_{4+\to 1+} - n_1 \sigma_{1+\to 0})$
 $q_{2+} = n_e (n_0 \langle \sigma_{0 \to 2+} V_e \rangle + n_1 \langle \sigma_{1+\to 2+} V_e \rangle) +$
 $+ n_0 V_i (n_3 \sigma_{3+\to 2+} + n_4 \sigma_{4+\to 2+} - n_2 (\sigma_{2+\to 0} + \sigma_{2+\to 1+}))$

$$q_{3+} = n_e \left(n_0 \left\langle \sigma_{0 \to 3+} V_e \right\rangle + n_1 \left\langle \sigma_{1+\to 3+} V_e \right\rangle + n_2 \left\langle \sigma_{2+\to 3+} V_e \right\rangle \right) + n_0 V_i \left(n_4 \sigma_{4+\to 3+} - n_3 \left(\sigma_{3+\to 0} + \sigma_{3+\to 1+} + \sigma_{3+\to 2+} \right) \right)$$

$$\begin{split} q_{4+} &= n_e \Big(n_0 \big\langle \sigma_{0 \to 4+} V_e \big\rangle + n_1 \big\langle \sigma_{1+ \to 4+} V_e \big\rangle \Big) + \\ n_2 n_e \big\langle \sigma_{2+ \to 4+} V_e \big\rangle + n_3 n_e \big\langle \sigma_{3+ \to 4+} V_e \big\rangle + \\ &+ n_0 n_3 V_i \big(\sigma_{4+ \to 0} + \sigma_{4+ \to 1+} + \sigma_{4+ \to 2+} + \sigma_{4+ \to 3+} \big) , \\ r \ r \ e V_i - c p e d h s n a p u \phi metu ч e c k a s othocute n b h a s othocute n b a s othocute n b a s othocute n b a s otho$$

$$V_i = \sqrt{\frac{8kT}{\pi M_{\rm Ar}}} \,.$$

Здесь T – температура газа в камере, К; $M_{\rm Ar}$ – масса атома аргона, кг.

Рассматриваемая нами плазма считается квазинейтральной:

$$n_1 + 2n_2 + 3n_3 + 4n_4 \approx n_e \,, \quad (8)$$

поскольку $n_{e_{\kappa}} << n_{e}$.

Уравнение сохранения числа частиц запишем следующим образом:

$$n_{00} = n_0 + n_1 + n_2 + n_3 + n_4, \quad (9)$$

где n_{00} – первоначальная концентрация нейтральных частиц, а n_0 – установившаяся в разряде концентрация нейтральных частиц.

Предположим, что плазма однородна в объеме ГРК, и обозначим I_i поток частиц сорта $i=1\div 4$, идущих из плазмы на стенки камеры. Из закона сохранения числа частиц следует, что

$$I_i = eq_i V . (10)$$

Образующиеся в разряде ионы и атомы могут уходить на всю поверхность разрядной камеры. Тогда для однородного разряда плотность ионного тока на стенки

$$j_i = \frac{eq_i V}{S}.$$
 (11)

Для решения системы уравнений баланса (7), (9) необходимо связать плотности токов j_i с параметрами плазмы. Плотность ионного тока на стенки может быть представлена выражением для плотности тока, идущего из плазмы на отрицательный по отношению к ней зонд:

$$j_i = Cen_i \sqrt{\frac{2T_{e_{\Pi\Pi}}k}{M_{\rm Ar}}}, \qquad (12)$$

где коэффициент *С* для цилиндрического зонда близок к 0,4; для плоского зонда (стенка) он, ⁽⁷ио данным [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**], может быть несколько меньше. Тогда из (10) и (11) имеем

$$q_i = \frac{Cn_i}{\eta} \sqrt{\frac{2T_{e_{\Pi\Pi}}k}{M_{\text{Ar}}}}, \qquad (13)$$

где $\eta = \frac{V}{S_{cT}}$ – геометрический фактор ГРК.

Подставляя (13) в (7), получаем с учетом (8) и (9) систему из шести уравнений баланса частиц, связывающих между собой десять переменных:

 $T_{e_{\rm K}}, T_{e_{\rm ПЛ}}, n_e, n_{e_{\rm K}}, n_{00}, n_0, n_1, n_2, n_3, n_4$. На практике задаются значения

 $T_{e_{\rm K}}, n_0, \frac{n_{e_{\rm K}}}{n_e}$, и меняется n_e при измерении тока разряда. При этом в соответствии с уравнениями баланса частиц в разряде заданной геометрии ГРК должны установится определенная температура плазменных электронов T_e и концентрации ионов n_1, n_2, n_3, n_4 .

В целях снижения объема вычислений из системы уравнений баланса частиц были изъяты члены, вклад которых наименее значим, а также исключен учет роли катодных электронов ($n_{e_{\kappa}} = 0$).

В итоге мы получаем связывает с помощью шести уравнений восемь неизвестных:

 $T_{e_{\Pi\Pi}}, n_e, n_{00}, n_0, n_1, n_2, n_3, n_4.$ Решить такую систему однозначно нельзя. На практике задаются значения $T_{e_{\pi\pi}}, n_e$, а значения *n*₀₀, *n*₀, *n*₁, *n*₂, *n*₃, *n*₄ получают в результате решения. Выбор в качестве параметра $T_{e_{\pi\pi}}$, а не n_0 сделан для решения упрощения уравнений поскольку системы, входящие В уравнения усредненные сечения $\langle \sigma_{z_1 \to z_2 + V_e} \rangle = f(T_{e_{\Pi\Pi}})$ трудно представить в аналитическом виде.

Результаты решения уравнения баланса.

При введении плазму R нанодисперсной фракции, в нашем был порошок случае это SiO_2 , параметры претерпевают плазмы значительные изменения. Аналогичным образом, приведенным выше были рассчитаны сечений ионизации SiO₂, и данные были учтены при составлении и решении уравнений баланса частиц $n_{00} = n_{00}(Ar) + n_{00}(SiO_2)$

Результаты решения данной системы приведены на рис 3





в)



Заключение.

В результате работы построена самосогласованная модель, описывающая процессы, происходящие в аргоновой плазме при внесении в нее нанодисперсного материала, И позволяющая на количественном уровне оценить характер изменения зарядового состояния и компонентного состава аргоновой плазмы, содержащую, нанодисперсную фракцию. Предложенная модель дает возможность выбрать геометрические размеры ГРК и задаться начальной концентрацией *n*₀ молекул аргона для обеспечения оптимального режим ГРК. работы А так же дать рекомендации по оптимизации количества эффективно испаряемого материала при выбранных размерах ГРК и режимах ее работы



Рис. 3. Изменение $J_k = j_{+k}/j_+$, и $N_k = n_{0k}/n_0$ с изменением плотности ионного тока j_+ при различных значениях T_{e} . а) $T_e = 5$ эВ, б) $T_e = 10$ эВ, в) $T_e = 15$ эВ

Список литературы.

- 1. Физика и технология источников ионов. / Под ред. Я. Брауна. М.: Мир, 1998 496с.
- Vályi L.. Atom and ion sources. Budapest.: Akadémiai Kiadó., 1977 – 429p.
- Источники и ускорители плазмы. Межвузовский тематический сборник научных трудов. Выпуск 6. – Харьков, 1982 – стр. 29 – 38.
- Габович М. Д., Плешивцев Н. В., Семашко Н. Н. Пучки ионов и атомов для управляемого термоядерного синтеза и технологических целей. – М.: Энергоатомиздат, 1981.