

И. Ш. Абдуллин, В. С. Желтухин, В. Ю. Чебакова,
М. Н. Шнейдер

ТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВЧЕ-РАЗРЯДА В АРГОНЕ ПРИ БОЛЬШИХ МЕЖЭЛЕКТРОДНЫХ РАССТОЯНИЯХ

Ключевые слова: Математическое моделирование, высокочастотный разряд, электронная температура, концентрация электронов, концентрация ионов, концентрация метастабильных атомов.

В работе построена одномерная математическая модель нестационарного высокочастотного емкостного разряда пониженного давления при больших межэлектродных расстояниях. Показано, что определяющую роль в формировании разряда играют процессы, происходящие в приэлектродных слоях, а так же процессы возбуждения и девозбуждения метастабильных атомов в объеме разряда.

Keywords: Mathematical modeling, radio-frequency discharges, electron temperature, electron density, positive ion density, metastable density.

One-dimensional model of non-stationary low pressure RF discharge at large-scale inter-electrode distances is constructed. It is shown that processes occurring in the near-electrode layer plays a decisive role in a discharge formation as well as gas excitation and heating in bulk discharge.

Введение

В последнее время устройства, использующие низкотемпературную плазму, интенсивно внедряются в промышленность и в повседневную жизнь. Плазма эффективно используется в нанотехнологиях для создания и модификации наноструктур (например, для обработки материалов с целью повышения срока службы и надежности изделий машиностроения, создания легких и прочных полимерных композиционных материалов, полиэтилен-пластиков, получения нанодисперсионных порошков металлов и соединений и т.д.) [1-2]. Высокочастотный емкостный (ВЧЕ) разряд при давлении $p=13,3$ -133 Па и межэлектродных расстояниях 20-30 см эффективно применяется для обработки кожевенно-мехового полуфабрикатов [3]. Отличительной особенностью такой обработки является большие размеры образцов (порядка 1 м^2) и партионность, когда производится обработка одновременно нескольких образцов (партии). Это требует разработки плазмотронов с большими размерами электродов (порядка $0,5 \times 1,4 \text{ м}^2$) и большим межэлектродным расстоянием (порядка 0,2 – 0,5 м).

В настоящее подробно исследованы модели ВЧЕ разряда среднего и низкого диапазонов давлений при межэлектродных расстояниях $d = 3$ -5 см. Разряд в таких условиях отличается от разряда пониженного давления, так как толщина приэлектродного слоя положительного заряда (СПЗ) много меньше области положительного столба.

При небольших межэлектродных расстояниях $d = 3$ -5 см нагрев газа не играет существенной роли в балансе рождения и гибели заряженных и метастабильных частиц в разряде, поэтому, как правило (см., например, [4, стр. 54-60]), математическая модель включает в себя только процессы, описываемые краевыми и начально-краевыми задачами: для электронной и ионной концентраций, уравнения Пуассона. Однако таунсендовский режим ионизации, согласно [5, 6] не учитывает потери энергии на возбуждение атомов и нагрев газа. Кроме того, эта

модель неприменима в случае сильных полей, так в этом случае частота ионизации монотонно нарастает с ростом отношения E/p , тогда как в очень сильных полях ионизационная способность с ростом поля падает. Здесь E – напряженность электрического поля.

Так как энергия первого возбужденного уровня аргона достаточна для того, чтобы через процессы возбуждения и девозбуждения метастабильных атомов, ступенчатой ионизации влиять на нагрев газа и электронную температуру [7-10], то при больших межэлектродных расстояниях потери энергии на нагрев газа являются существенными. Поэтому необходимо при расчете характеристик ВЧ плазмы в таких плазмотронах необходимо рассматривать уравнения нагрева атомов и электронов, баланса метастабильных атомов.

Таким образом, необходима разработка математической модели, которая учитывала бы перечисленные выше эффекты при расчете технологических процессов плазменной обработки в плазмотронах с большими межэлектродными расстояниями.

Постановка задачи

При построении математической модели предполагается, что плазма состоит из частиц четырех сортов: нейтральные атомы в основном состоянии, возбужденные атомы (метастабильные), электроны и положительные однозарядные ионы. Оценки элементарных процессов в плазме ВЧ разрядов пониженного давления показывают, что длина свободного пробега электронов $l = \leq 10^{-3}$ м, толщина дебаевского слоя $\lambda_d \cong 10^{-5}$ м, толщина СПЗ $h \cong 10^{-3}$ м [3]. Таким образом, для описания процессов в ВЧ разряде можно использовать приближение сплошной среды [11].

Изменение электронной температуры электронов может привести к изменению остальных характеристик плазмы, поэтому расчет температуры электронов при постоянном токе и давлении газа в разряде является важной задачей. Температура

электронов в газовом разряде устанавливается самоогласованно и зависит от природы газа, давления и плотности тока. Кроме того при $d \sim 10$ см и более существенную роль в определении электронной температуры играют нагрев газа и потери энергии на возбуждение метастабильных состояний. Так как массы ионов и метастабилей в одноатомном газе практически совпадают с массой атомов, и при их столкновениях не происходит преобразования кинетической энергии во вращательную или колебательную, то можно считать, что температура ионов совпадает с температурой атомов в основном состоянии. Поэтому уравнения переноса тепла ионами и метастабильными в математической модели можно не рассматривать.

В связи с этим, для определения диапазона устойчивого горения ВЧЕ разряда пониженного давления в плазматроне с большим межэлектродным расстоянием разработана математическая модель, учитывающая перенос энергии электронами, нагрев газа и потери энергии на возбуждение атомов.

Математическая модель включает в себя:

1) Уравнения непрерывности для электронного газа:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-n_e m_e E - D_e \frac{\partial n_e}{\partial x} \right) = \\ = n_e n_i - b n_+ n_e + R_1 n_m n_e + R_2 n_m^2, \end{aligned} \quad (1)$$

при $-l < x < l, t > 0$

с граничными условиями

$$G_e(\pm l, t) = -g G_+, \quad t > 0, \quad (2)$$

если поле направлено в электрод,

$$\frac{\partial G_e(\pm l, t)}{\partial x} = 0, \quad t > 0, \quad (3)$$

если поле направлено от электрода.

Здесь $G_e = -n_e m_e E - D_e \partial n_e / \partial x$ – плотность потока электронов, $G_+ = n_+ m_+ E - D_+ \partial n_+ / \partial x$ – плотность потока ионов, n_e, n_+, n_m – концентрации электронов, положительно заряженных ионов и метастабильных атомов, соответственно, m_e, m_+ – подвижности электронов и ионов, $E = -\partial f / \partial x$ – напряженность электрического поля D_e, D_+ – коэффициенты диффузии электронов и ионов, b – эффективный коэффициент рекомбинации, n_i – частота ионизации, $g = 0.01 - 0.1$ коэффициент вторичной эмиссии, который зависит от материала электрода, x – пространственная координата, координата $x = -l$ соответствует заземленному электроду, $x = l$ – нагруженному, t – время, R_1, R_2 – скорости ионизации из возбужденного состояния (табл. 1).

Таблица 1 - Коэффициенты R_q

Номер q процесса	Процесс	Коэффициент R_q
1	$Ar^* + e \rightarrow Ar^+ + 2e$	[8]
2	$Ar^* + Ar^* \rightarrow$ $\rightarrow Ar^+ + Ar^* + e$	[8]
3	$Ar + e \rightarrow Ar^* + e$	[8]
4	$Ar^* + Ar \rightarrow 2Ar$	[7]
5	$Ar^* \rightarrow Ar + hn$	[9]
6	$Ar^* + e \rightarrow Ar^r + e$	[7]

Примечание. В табл. 1 Ar^r, Ar^*, Ar^+ – резонансный и метастабильный атомы, положительный ион аргона соответственно, e – электрон, hn – энергия испущенного атомом кванта.

2) Уравнения непрерывности для ионного газа:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_+}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(n_+ m_+ E - D_+ \frac{\partial n_+}{\partial x} \right) = \\ = n_e n_i - b n_+ n_e + R_1 n_m n_e + R_2 n_m^2, \end{aligned} \quad (4)$$

при $-l < x < l, t > 0$

с граничными условиями

$$G_+(\pm l, t) = -0, \quad t > 0, \quad (5)$$

если поле направлено в электрод,

$$\frac{\partial G_+(\pm l, t)}{\partial x} = 0, \quad t > 0, \quad (6)$$

если поле направлено от электрода,

3) Уравнения Пуассона для распределения потенциала ϕ электрического поля:

$$-\frac{\partial^2 j}{\partial x^2} = \frac{e}{e_0} (n_+ - n_e), \quad -l < x < l, t > 0, \quad (7)$$

с граничными условиями

$$j(-l, t) = 0, j(l, t) = V_a \sin(\omega t), t > 0, \quad (8)$$

где e – заряд электрона, e_0 – электрическая постоянная, ω – круговая частота электромагнитного поля, V_a – амплитуда колебания приложенного напряжения;

4) Уравнение теплопроводности атомно-ионного газа:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial x} \left(l_a \frac{\partial T_a}{\partial x} \right) = \langle j_i E \rangle + \frac{3}{2} n_e k d n_m (\langle T_e \rangle - T_a), \\ \text{при } -l < x < l, \quad t > 0, \end{aligned} \quad (9)$$

с граничными условиями

$$T_a(\pm l, t) = T_w, t > 0 \quad (10)$$

Здесь T_a – атомная температура, T_w – температура электрода, l_a – коэффициент теплопроводности атомно-ионного газа, $j_i = e G_+$ – ионный ток, k –

постоянная Больцмана, $d = 2m / M$ – доля энергии, теряемая электронами в упругих столкновениях с атомами и ионами, m – масса электрона, M – масса атома аргона, T_e – электронная температура, n_m – эффективная частота столкновений электронов с атомами и ионами, $\langle \bullet \rangle$ – среднее за период значение.

5) Уравнение для скорости нагрева движущегося электронного газа:

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} n_e k \frac{dT_e}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(l_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \right) - \frac{\partial (p_e V_e)}{\partial x} - \\ en_e \langle EV_e \rangle - \frac{3}{2} n_e k (T_e - T_a) dn_m - \\ - \left(I - \frac{3}{2} k T_e \right) n_e n_i + I_1 R_1 n_m n_e, \end{aligned} \quad (11)$$

при $-l < x < l, t > 0$,

с граничными условиями

$$T_e(\pm l, t) = T_w, t > 0 \quad (12)$$

Здесь l_e – коэффициент электронной теплопроводности, $p_e = k T_e n_e$ – электронное давление, V_e – электронная скорость дрейфа, $I = 15,76$ эВ – потенциал ионизации, T_w – температура на поверхности электродов, $I_1 = 11,56$ эВ – энергия возбуждения первого уровня,

$$d_e T_e / dt = \partial T_e / \partial T + V_e \partial T_e / \partial x$$

– субстанциональная производная;

б) уравнение баланса метастабильных атомов:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_m}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_m \frac{\partial n_m}{\partial x} \right) = R_1 N n_e - \\ - R_4 N n_m - R_5 n_m^2 - R_1 n_m n_e - \\ - R_2 n_m^2 - R_6 n_m n_e, \end{aligned} \quad (13)$$

при $-l < x < l, t > 0$,

с граничными условиями

$$n_m(\pm l, t) = 0, t > 0, \quad (14)$$

Здесь D_m – коэффициент диффузии метастабильных атомов, N – концентрация нейтральных атомов, рассчитываемая из условия, $p = N k T_a$, коэффициенты $R_q, q=1, \dots, 6$ – скорости соответствующих процессов (табл.1).

В качестве начальных условия для перечисленных задач выбирались постоянные значения

$$\begin{aligned} n_m(x, 0) = \text{const}_1, -l < x < l, \\ n_e(x, 0) = n_+(x, 0) = \text{const}_2, -l < x < l, \\ T_e(x, 0) = \text{const}_3, -l < x < l, \\ T_a(x, 0) = \text{const}_4, -l < x < l. \end{aligned} \quad (15)$$

В достаточно сильно ионизированной плазме, при максвелловской функции распределения электронов по энергиям частоту ионизации в плазме аргона можно аппроксимировать функцией вида [4]:

$$n_{im} = N \bar{v} C_i \left(15,76 + 12,4 \cdot 10^{18} k T_e \right) e^{(-2,4 \cdot 10^{-18} / (k T_e))}$$

Здесь $\bar{v} = (8kT_e/pm)^{1/2}$ – средняя тепловая скорость, C_i – константа, характеризующая наклон сечения ионизации у порога [12, стр. 59].

В диапазоне энергий электронов, где происходят неупругие столкновения, спектр значительно обедняется по сравнению с максвелловским распределением, и фактически частота ионизации значительно меньше [13]

$$n_i = 0,89 \left(3/2 \right)^{1/3} \left(I/kT_e \right)^{4/3} \left(n_m / N v_i s_i \right)^{2/3} d^{2/3} n_{im}$$

где $s_i = C_i I, v_i = \sqrt{2I/m}$.

В коэффициенте рекомбинации необходимо учесть процессы фоторекомбинации и тройной ударно-радиационной рекомбинации [12]

$$b = 2,7 \cdot 10^{-19} (T_e)^{-0,75} + 8,75 \cdot 10^{-39} (T_e)^{-4,5} n_e.$$

Здесь T_e в электрон-вольтах. Остальные транспортные коэффициенты аппроксимировались зависимостями [12]

$$D_e = k T_e m_e / e, D_+ = k T_+ / e, m_+ = 2e / M n_m,$$

$$m_e = e / m n_m, l_e = 5 n_e k T_e D_e / 2, n_m = 4,1 \cdot 10^7 P.$$

$$V_e = G_e / n_e [6], D_m = 1,9 \cdot 10^{18} / N [12],$$

$$l_a = 4,25 \cdot 10^{-5} \left(T_a / 300 \right)^{0,66} [14, С. 21].$$

Численный метод и результаты решения

Построенная модель характеризуется большим количеством специфических особенностей:

1) наличием областей медленного и быстрого изменения решения, как по пространству, так и во времени;

2) сильной нелинейностью;

3) наличием уравнений разного типа (параболических и эллиптических, с параметрической зависимостью от времени).

Поэтому численные методы решения задачи должны ставиться с учетом этих особенностей.

Для численного решения системы использовалась неявная разностная схема на равномерной сетке. Оператор конвективного переноса аппроксимировался направленными разностями. Разностная схема строилась интегро-интерполяционным методом [15], что обеспечило консервативность разностной схемы.

Нелинейная система начальных и начально-краевых задач (1)-(15) решалась итерационным методом со сносом нелинейности на предыдущий слой. При этом для линеаризации нелинейных членов в уравнениях (11) и (13) применялся метод Ньютона.

Результаты тестовых расчетов ВЧЕ разряда в плазмотроне с межэлектродным расстоянием 22 мм, при давлении $p=13,3$ Па, амплитуде приложенного напряжения $V_a=25$ В, показали что концентрация метастабильных атомов достигает максиму-

ма $n_m = 5,3 \cdot 10^{13}$ в области квазинейтральной плазмы.

Температура электронов имеет два локальных максимума в приэлектродных областях (рис. 1). Максимальные значения электронная температура $T_{e, \max} = 2,85$ эВ, в области квазинейтральной плазмы минимальное значение $T_{e, \min} = 1,89$ эВ, при этом температура газа остается практически постоянной $T_a \approx 305$ К.

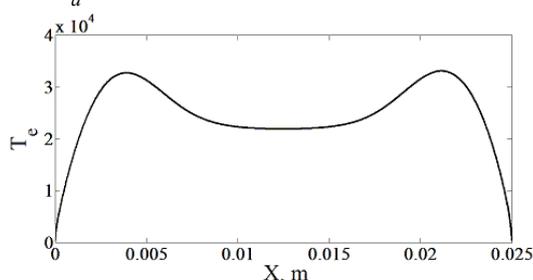


Рис. 1 - Распределение средней за период электронной температуры в межэлектродном пространстве

Концентрация электронов имеет характерную колоколообразную форму с максимумом в центре разряда (рис. 2).

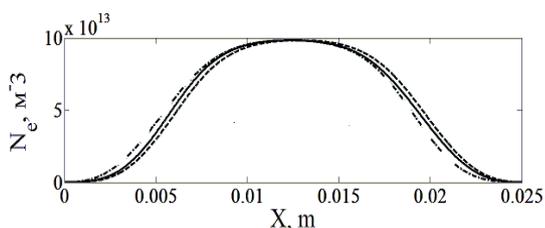


Рис. 2 - Распределение концентрации электронов в различные моменты времени: сплошная кривая соответствует моменту времени $\omega t = p/4$, пунктирная - $\omega t = p$, штрих-пунктирная - $\omega t = 3p/4$

В межэлектродном промежутке значения полной плотности тока

$$j(t) = eE(n_i m_i - n_e m_e) + e_0 \partial E / \partial t$$

в каждый момент времени остаются постоянными, но во времени испытывают практически гармонические колебания (рис. 3)

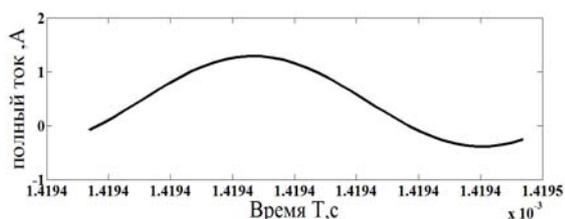


Рис. 3 - Колебания значений полного тока в течение периода

Результаты расчета качественно совпадают с данными авторов [16]. Количественные отличия по величине потенциала электрического поля и концентрации метастабильных частиц связаны с учетом

в модели, рассматриваемой в настоящей работе, неоднородного распределения газовой температуры.

Предложенная модель актуальна и в случае небольших межэлектродных расстояниях, так как позволяет провести более точные расчеты и в случае плазмообразующих устройств с небольшими межэлектродными расстояниями с различной степенью приближения:

а) при отсутствии физической диффузии - система (1)-(8) при $D_e = D_+ = R_1 = R_2 = 0$;

б) без учета нагрева электронного и атомно-ионного газов (классическая диффузионно-дрейфовая модель) - система (1)-(8) при $D_e = D_+ = 0$;

в) с учетом изменяющихся по пространственной переменной электронной и газовой температур в пренебрежении влиянием метастабильных атомов - система (1)-(15) при $R_1 = R_2 = R_4 = R_5 = R_6 = 0$;

г) с учетом процессов нагрева газа и образования возбужденных атомов, процессов ударной и ступенчатой ионизации система (1)-(15) со всеми ненулевыми коэффициентами.

Выводы

Таким образом, в результате анализа математических моделей высокочастотного емкостного разряда пониженного давления в классической постановке (учитывающей потенциал электрического поля, концентрацию электронов и ионов) и с учетом переноса энергии электронами и нагрева нейтральных атомов установлено, что они не дают адекватного описания состояния плазмы в плазмотроне с большим межэлектродным расстоянием. В связи с этим построена математическая модель высокочастотного емкостного разряда пониженного давления, в которой, в отличие от предложенных ранее, учитываются процессы ступенчатой ионизации, передачи энергии от электронов атомам в основном и возбужденном (метастабильном) состояниях, а также влияние метастабильных атомов на распределения заряженных частиц и электронной температуры, поскольку изменение последней оказывает существенное влияние на остальные характеристики плазмы.

Описанная система краевых задач позволяет провести расчеты параметров ВЧ разряда пониженного давления с различной степенью приближения: а) отсутствию физической диффузии; б) классическая диффузионно-дрейфовая модель без учета нагрева электронного и атомно-ионного газов; в) неоднородные пространственные газовой и электронной температуры; г) с учетом процессов нагрева газа и образования возбужденных атомов, ударной и ступенчатой ионизации.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант 14-01755.

Литература

1. Р. Оулет, М. Барбье, П. Черемисинофф и др. Технологическое применение низкотемпературной плазмы. М: Энергоатомиздат, 1983.– 144с
2. В.В. Кудинов, Н.В. Корнеева // Матер. Международ. конф. «Физ. Высокочастот. разрядов» и Международ. школы молодых ученых и специалистов «Высокочастот. разряд: теория и техн.».– Казань, октябрь 2011 г. / Казан. нац. исслед. технол. ун-т, 2011. – С. 35-35.
3. И.Ш.Абдуллин, В.С. Желтухин, Н.Ф. Кашапов. Высокочастотная плазменно-струйная обработка материалов при пониженных давлениях. Теория и практика применения.– Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2000.- 348 с.
4. Ю.П. Райзер, М.Н. Шнейдер, Н.А. Яценко. Высокочастотный емкостный разряд: Физика. Техника эксперимента. Приложения. – М.: Изд-во МФТИ, 1995.– 320 с.
5. В.А. Лисовский, Н.Д. Харченко // Вест. Харьк. нац. ун-та. Сер. физ.: ядра, частицы, поля.– 2010. – № 887, вып. 1 (45), С. 81-87.
6. А.Н. Ткачев, А.А. Феденев, С.И. Яковленко // Ж. техн. физ.– 2007. – Т. 77, № 6. – С. 22-27.
7. P. Dimitris Lymberopoulos, Demetre J.Economou // J. Appl. Phys.– 1993.– Vol. 73, № 8, P. 3668-3679.
8. Б.Т. Байсова, В.И. Струнин, Н.Н. Струнина, Г.Ж.Худайбергенов // Ж. техн. физ.– 2003.– Т. 73, № 8.– С. 30-33
9. Н.А. Дятко, Ю.З. Ионих, А.В. Мещанов, А.П. Напартович // Физ. плазмы.– 2005.– Т. 31, № 10.– С. 939-953.
10. Б.М. Смирнов. Возбужденные атомы.– М.: Энергоиздат, 1982.– 232 с.
11. М. Митчнер, Ч. Кругер. Частично-ионизованные газы. М.: Мир, 1976.– 496с.
12. Ю.П.Райзер. Физика газового разряда.– М.: Наука, 1987.– 592 с
13. Ю.П. Райзер, М.Н. Шнейдер // Теплофиз. высоких температур.– 1991.– Т. 29, № 6.– С. 1041-1052.
14. В.Г. Фастовский, А.Е. Ровинский, Ю.В. Петровский. Инертные газы.– М.: Атомиздат, 1972.– 352 с.
15. А. А Самарский, П.Н. Вабищевич. Численные методы решения задач конвекции-диффузии.– М.: Эдиториал УРСС, 1999.– 248с.

© **И. Ш. Абдуллин** – д. т.н., зав. каф. ПНТВМ КНИТУ; **В. С. Желтухин** – д.ф.-м.н., зав. каф. мат. статистики КФУ, vzheltukhin@gmail.com; **В. Ю. Чебакова** – асс. каф. мат. статистики КФУ, vchebakova@mail.ru; **М. Н. Шнейдер** – проф. Принстонского университета (США), shneyder@princeton.edu.