

УДК 533.9.01

ДВУМЕРНАЯ МОДЕЛЬ НЕРАВНОВЕСНОГО СИЛЬНО НЕОДНОРОДНОГО СВЧ-РАЗРЯДА ВО ВНЕШНЕМ ПОСТОЯННОМ ПОЛЕ

Ю.А. Лебедев, А.В. Татаринов, А.Ю. Титов, И.Л. Энштейн

Аннотация

Описана самосогласованная модель неравновесного сильно неоднородного СВЧ-разряда. Модель основана на совместном решении уравнений Максвелла, уравнения Пуассона, уравнения Больцмана для свободных электронов плазмы и уравнений, описывающих колебательную кинетику и кинетику возбужденных и заряженных частиц водородной плазмы. Представлены результаты первых расчетов, которые качественно согласуются с данными экспериментов.

Ключевые слова: микроволновая плазма, разряд в водороде, самосогласованное моделирование, неравновесная плазма.

Введение

Одной из важных проблем физики газовых разрядов является исследование влияния различных воздействий на разряд с целью поиска путей управления его параметрами. Такой подход, например, реализуется в комбинированных разрядах, когда плазма создается источником энергии одного частотного диапазона, а управление ее параметрами осуществляется электрическими полями другого частотного диапазона. Указанная система, в частности, была реализована в [1], где источником плазмы являлся микроволновый разряд, возбуждаемый замедляющей структурой, а управление параметрами плазмы у обрабатываемой подложки осуществлялось высокочастотным напряжением. Эффективным путем управления однородностью разряда, энергией ионного пучка на обрабатываемую поверхность и его плотностью в высокочастотном разряде является использование двух отличающихся частот одного диапазона [2]. К эффективным воздействиям относится и наложение внешнего магнитного поля [3].

Второй важной задачей является исследование неоднородных разрядов. Актуальность этой задачи обусловлена, во-первых, тем, что большинство электрических разрядов, если не принимать специальных мер, являются неоднородными. Для управления степенью неоднородности необходимо знать основные закономерности и механизмы влияния неоднородности на параметры плазмы. Во-вторых, сильная неоднородность может приводить к проявлению новых физических явлений. Примером таких сильно неоднородных разрядов является электродный микроволновый разряд (ЭМР) [4–6]. Интерес к ЭМР вызван рядом его отличительных особенностей, таких как малая мощность разряда, возможность создания неравновесной плазмы в широком диапазоне давлений, возможность создания компактных плазменных структур, возможность генерации активных частиц в больших камерах, возможность создания плазмы в требуемой точке пространства, возможность генерации плазмы в приповерхностных слоях тел различной формы. ЭМР позволяет исследовать и реализовать плазмохимические процессы и интенсифицировать

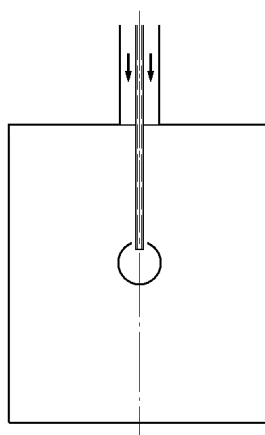


Рис. 1. Схема цилиндрической рабочей камеры для электродного микроволнового разряда. Стрелками показано направление распространения СВЧ-сигнала. Разряд шарообразной формы обычно расположен на торце центрального электрода. Радиус внешнего цилиндра коаксиала – 11.5 мм, наружный диаметр трубки центрального электрода – 5 мм, толщина трубки – 1 мм, выступающая часть трубки – 72 мм, высота камеры – 172 мм, ее радиус – 75 мм

физико-химические процессы в газовой фазе, включая процессы горения, исследовать взаимодействие плазмы с поверхностью, поведение тел с приповерхностной плазмой в потоках газа, взаимодействие плазменных структур с потоками газа. Более того, было показано, что ЭМР может быть использован в качестве плазменного катода [7].

В настоящей работе решается задача двумерного самосогласованного моделирования стационарного неравновесного ЭМР в постоянном электрическом поле в водороде. Ранее были проведены исследования электродного микроволнового разряда в азоте в постоянном электрическом поле [7–9]. Было показано, что поле изменяет структуру и форму разряда. Были получены напряженности СВЧ-поля. Было также показано, что постоянное напряжение практически не влияет на колебательное распределение молекул азота в состоянии $S^3\Pi_u$. Общие выводы о влиянии постоянного электрического поля на свойства ЭМР в водороде, полученные на основе экспериментов, такие же, как и в случае азота, то есть различия в кинетике частиц водородной и азотной плазмы на них не влияют [9].

Статья организована следующим образом. Сначала описана геометрия разряда и расчетная область. Затем приведены уравнения, учитываемые при моделировании разряда. Дана кинетическая схема процессов в разряде в водороде, описывающая наиболее важные процессы в плазме (возбуждение, ионизация, диссоциация, рекомбинация). В конце статьи в качестве примера приведены первые результаты расчетов распределения электронов в разряде при наложении внешнего постоянного поля на ЭМР при давлении 1 Торр и проведено качественное сравнение с результатами натурных экспериментов.

1. Постановка задачи

Схема рабочей камеры для ЭМР пониженного давления изображена на рис. 1. ЭМР возникает в окрестности центрального электрода обрезанной коаксиальной линии, к которому подводится СВЧ-энергия. Центральный электрод представлен в виде металлической трубки, через которую подается плазмообразующий газ.

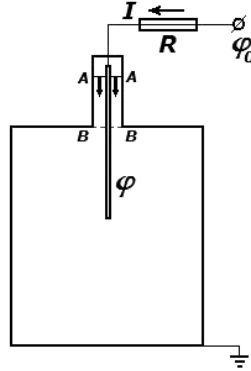


Рис. 2. Электрическая схема подключения ЭМР по постоянному току. Генератор СВЧ-волны расположен в плоскости AA . Область коаксиального ввода СВЧ-энергии отделена от области горения плазмы плоскостью BB , проницаемой для волны и непроницаемой для частиц плазмы. Источник постоянного напряжения φ соединен с центральным электродом через балластное сопротивление R . Центральный электрод расположен полностью внутри рабочей камеры

Внешняя цилиндрическая поверхность коаксиальной линии является стенкой разрядной камеры. В режиме с постоянным током постоянное напряжение приложено между центральным электродом и цилиндрической стенкой камеры. Схема по постоянному току представлена на рис. 2.

2. Моделирование разряда

Задача имеет осевую симметрию и решается в цилиндрической системе координат r, z . Поскольку при давлении 1 Торр для разряда в водороде длина релаксации энергии электронов намного меньше характерных геометрических размеров нашей системы, для описания разряда использовалась самосогласованная модель в локальном приближении. Обоснование применимости локального приближения в описываемых условиях приведено в [10, 11].

Использованная в работе самосогласованная модель ЭМР аналогична описанной в [10]. Она включала в себя уравнения Максвелла для СВЧ-поля, уравнение Больцмана для функции распределения электронов по энергии, записанное в двухчленном приближении, и стационарные балансные уравнения для заряженных и нейтральных частиц и уравнение Пуассона. Для заряженных частиц использовано диффузионно-дрейфовое приближение.

Уравнения Максвелла.

Электрическая компонента СВЧ-поля E_{MW} , вычисляется из динамических уравнений Максвелла. В случае стационарной структуры ТМ-волн, установившихся в рабочей камере, уравнения Максвелла сводятся к решению единственного комплексного уравнения для магнитной компоненты волны \mathbf{H}_φ :

$$\nabla \times \left((\varepsilon_r - j\sigma/\omega\varepsilon_0)^{-1} \nabla \times \mathbf{H}_\varphi \right) - \mu_r k_0^2 \mathbf{H}_\varphi = 0. \quad (1)$$

Здесь $\varepsilon_r = 1 - n_e/n_c$, $\sigma = \nu_{col}\varepsilon_0 n_e/n_c$ – относительная проницаемость и проводимость плазмы, концентрация электронов n_e нормирована на критическую концентрацию $n_c \approx 7.4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ для заданной частоты СВЧ-поля $\omega = 2\pi f$, $f = 2.45 \text{ ГГц}$. Относительная магнитная проводимость среды μ_r равна единице,

ν_{col} – частота столкновений электронов с нейтралами, ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума, k_0 – волновой вектор, $j = \sqrt{-1}$.

Уравнение Пуассона.

Для описания постоянных полей, возникающих в плазме вследствие разделения зарядов, используется уравнения Пуассона для потенциала φ

$$\nabla \cdot \nabla \varphi = -\frac{e}{\varepsilon_0} \left(\sum_i n_p^i - n_e \right),$$

где e – заряд электрона, n_p^i – концентрации ионов i -го сорта.

Уравнения баланса числа частиц.

Для описания плазмы используется диффузионно-дрейфовое приближение для установившихся потоков частиц [12, 13]. Уравнения баланса для электронов, ионов и нейтральных частиц записываются в следующем виде:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_e &= S_e, & \mathbf{\Gamma}_e &= -\mu_e n_e \mathbf{E} - D_e \nabla n_e, \\ \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_p^i &= S_p^i, & \mathbf{\Gamma}_p^i &= \mu_p^i n_p^i \mathbf{E} - D_p^i \nabla n_p^i, \\ \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_n^i &= S_n^i, & \mathbf{\Gamma}_n^i &= -D_n^i \nabla n_n^i. \end{aligned}$$

Здесь $\mathbf{\Gamma}_e$, $\mathbf{\Gamma}_p^i$, $\mathbf{\Gamma}_n^i$ – потоки электронов (e), ионов (p) и нейтральных частиц (n) i -го сорта; n_n^i – плотности нейтральных частиц (n) i -го сорта; S_e , S_p^i , S_n^i – суммарная скорость рождения и гибели соответствующих частиц i -го сорта в различных плазмохимических процессах; μ_e , μ_p^i , D_e , D_p^i , D_n^i – коэффициенты подвижности и диффузии соответствующих частиц i -го сорта, а $\mathbf{E} = -\nabla \varphi$ – локальное электрическое поле разделения зарядов, вычисляемое из уравнения Пуассона.

Модель включает в себя предварительно подготовленные табличные файлы констант скоростей реакций под действием электронного удара, являющихся функцией локальных значений амплитуды СВЧ-поля $f(E_{MW})$. Для расчета этих констант использовались функции распределения электронов по энергиям, полученные путем решения уравнения Больцмана для свободных электронов плазмы с самосогласованным набором сечений для водорода.

В настоящей работе определялись концентрации электронов, ионов H_2^+ , H_3^+ атома Н в основном и в возбужденных состояниях ($\text{H}(2s, 2p)$, $\text{H}(3s, 3p, 3d)$). Ионы H_s^+ , H^- и H^+ не учитывались, так как в наших более ранних расчетах было показано, что они не влияют на результаты расчета [14]. Учет процессов с участием колебательно-возбужденных молекул водорода (реакции 9, 12, табл. 1) проводился с использованием известного колебательного распределения молекул, полученного в диффузионном приближении [15, 16].

Уравнение Больцмана.

Для расчета констант скоростей реакций под электронным ударом использовалась функция распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ), полученная при решении уравнения Больцмана. Использовано уравнение для стационарной изотропной части распределения электронов f_{0G} , записанное в двухчленном приближении разложения распределения по сферическим гармоникам.

$$\frac{d}{d\varepsilon} \left[\left(\frac{E_{MW}^2 \varepsilon^2}{3} \frac{\sum_i N_i \sigma_{\text{tr}}^i(\varepsilon)}{2e\varepsilon \sum_i (N_i \sigma_{\text{tr}}^i(\varepsilon))^2 + m\omega^2} + \frac{E^2 \varepsilon}{3 \sum_i N_i \sigma_{\text{tr}}^i(\varepsilon)} \right) \frac{df_{0G}}{d\varepsilon} \right] = J_{\text{el}} + J_{\text{in}} + J_{\text{ee}} + J_{\text{r}},$$

где ε – энергия электронов, E – напряженность постоянного электрического поля e , m – заряд и масса электрона, N_i – концентрация тяжелых частиц сорта i , $\sigma_{\text{tr}}^i(\varepsilon)$ – транспортное сечение столкновений электронов с ними, J_{el} , J_{in} – интегралы упругих и неупругих столкновений электронов с тяжелыми частицами соответственно, J_{ee} – интеграл электрон-электронных столкновений, J_{r} – интеграл, отвечающий за соударения, приводящие к возбуждению вращательных степеней свободы молекулы. Интегралы электронных столкновений равны

$$J_{\text{el}} = \frac{d}{d\varepsilon} \left[\sum_i \left(\frac{2m}{M_i} N_i \sigma_{\text{tr}}^i(\varepsilon) \right) \varepsilon^2 \left(f_{0G}(\varepsilon) + \frac{kT_g}{e} \frac{df_{0G}(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right) \right],$$

$$J_{\text{in}} = \sum_i \sum_{\alpha} N_i \left[\varepsilon \sigma_{\alpha}^i(\varepsilon) f_{0G}(\varepsilon) - (\varepsilon + u_{\alpha}^i) \sigma_{\alpha}^i(\varepsilon + u_{\alpha}^i) f_{0G}(\varepsilon + u_{\alpha}^i) \right] + \\ + \sum_i \sum_{\alpha} N_{i\alpha} \left[\varepsilon \sigma_{-\alpha}^i(\varepsilon) f_{0G}(\varepsilon) - (\varepsilon - u_{\alpha}^i) \sigma_{-\alpha}^i(\varepsilon - u_{\alpha}^i) f_{0G}(\varepsilon - u_{\alpha}^i) \right],$$

$$J_{\text{ee}} = 2\nu_{\text{ee}} \varepsilon^{3/2} \frac{d}{d\varepsilon} \left[f_{0G}(\varepsilon) \int_0^{\varepsilon} \xi^{1/2} f_{0G}(\xi) d\xi + \right. \\ \left. + \frac{2}{3} \frac{df_{0G}}{d\varepsilon} \left(\int_0^{\varepsilon} \xi^{3/2} f_{0G}(\xi) d\xi + \varepsilon^{3/2} \int_{\varepsilon}^{\infty} f_{0G}(\xi) d\xi \right) \right],$$

$$J_{\text{r}} = \frac{d}{d\varepsilon} \left[\sum_i 6\varepsilon B_i N_i \sigma_{\text{tr}}^i(\varepsilon) \left(f_{0G}(\varepsilon) + \frac{kT_g}{e} \frac{df_{0G}(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right) \right].$$

Здесь T_g – температура тяжелых частиц, M_i – масса тяжелых частиц сорта i , u_{α}^i – порог α -го неупругого процесса i -й составляющей тяжелой компоненты плазмы, $u_{-\alpha}^i = 0$ – пороги соответствующих процессов 2-го рода, $\sigma_{\alpha}^i(\varepsilon)$, $\sigma_{-\alpha}^i(\varepsilon)$ – сечения неупругих столкновений электронов с тяжелыми частицами сорта i 1-го и 2-го рода соответственно, $N_{i\alpha}$ – концентрация тяжелых частиц в верхнем состоянии, участвующих в α -м неупругом процессе 2-го рода, который приводит к образованию частиц сорта i в нижнем состоянии, ν_{ee} – частота электрон-электронных столкновений, B_i – вращательная постоянная.

Условие нормировки ФРЭЭ имеет вид

$$\int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} f_{0G}(\varepsilon) d\varepsilon = 1.$$

Методика решения квазистационарного уравнения Больцмана (1) описана в [11].

Средняя энергия электронов $\bar{\varepsilon}$, коэффициенты скоростей процессов столкновений электронов с тяжелыми частицами сорта i , $k_{\pm\alpha}^i$, коэффициент свободной диффузии электронов D_e и их подвижность μ_e определялись по ФРЭЭ с помощью следующих соотношений:

$$\bar{\varepsilon} = \int_0^{\infty} \varepsilon^{3/2} f_{0G}(\varepsilon) d\varepsilon,$$

$$k_{\pm\alpha}^i = (2e/m)^{1/2} \int_{u_{\pm\alpha}^i}^{\infty} \varepsilon \sigma_{\pm\alpha}^i(\varepsilon) f_{0G}(\varepsilon) d\varepsilon,$$

$$D_e = \frac{1}{3} (2e/m)^{1/2} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{\sum_i N_i \sigma_{tr}^i(\varepsilon)} f_{0G}(\varepsilon) d\varepsilon,$$

$$\mu_e = \frac{1}{3} (2e/m)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{\sum_i N_i \sigma_{tr}^i(\varepsilon)}{(2e/m) \varepsilon \sum_i (N_i \sigma_{tr}^i(\varepsilon))^2 + \omega^2} \frac{df_{0G}(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon.$$

Колебательная кинетика.

Учет влияния колебательно-возбужденных молекул на ФРЭЭ и на скорость различных плазмохимических процессов проводился на основе подхода, разработанного в [15, 16]. Для определения колебательной энергии n -го уровня E_n использовался потенциал Морзе $E_n = E_1 n \frac{\Delta E (n-1)}{E_1}$, где E_1 и ΔE – энергия 1-го колебательного уровня молекулы и ее ангармоничность соответственно.

Функция распределения молекул по колебательным состояниям (ФКР), полученная в диффузионном приближении, описывается следующими соотношениями:

$$f_n = f_n^{tr} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{n}{n_0}\right)^2\right) \quad \text{для } n \leq n_0, \quad (2)$$

$$f_n = \frac{\Gamma}{n+1} - \frac{P_{1-0}}{Q_{1-0}} \frac{kT \delta_{VV}^3 \exp(\delta_{VT} n)}{12 \Delta E \delta_{VT} (n+1)} \quad \text{для } n_0 < n \leq n_1, \quad (3)$$

где f_n^{tr} – функция Тринора, $f_n^{tr} = f_0 \exp\left(-n \left(\frac{E_1}{T_{vib}} - (n-1) \frac{\Delta E}{T_g}\right)\right)$. Здесь P_{1-0} и Q_{1-0} – вероятности нижних $V-T$ - и $V-V$ -переходов соответственно, T_{vib} – колебательная температура, n_0 соответствует минимуму триноровского распределения, $n_0 = \frac{E_1}{2\Delta E} \frac{T}{T_{vib}} + \frac{1}{2}$. Константа Γ определяется из условия сшивки соотношений (2) и (3) в точке n_0 . Параметр n_1 , описывающий ширину плато ФКР, находится приравниванием функции (3) нулю. Параметр δ_{VV} определяется следующим образом: $\delta_{VV} = \frac{0.427}{\alpha} \sqrt{\mu/T_g} \Delta E$, где α – постоянная в экспоненциальном отталкивающем потенциале межмолекулярного взаимодействия (в A^{-1}), μ – приведенная масса сталкивающихся молекул. Параметр δ_{VT} определяется аналогично.

ФКР молекул находится самосогласованно с нахождением ФРЭЭ. При расчете ФРЭЭ учитываются удары второго рода для нескольких нижних колебательных уровней молекулы M . Сначала плотности этих колебательных уровней находятся из соотношений (2), (3) для произвольной величины T_{vib} . С помощью ФРЭЭ, полученной из уравнения Больцмана, вычисляются константы электронного возбуждения и девозбуждения k_{vib} и k_{vib}^- колебательных уровней, а затем проверяется, является ли скорость суммарного колебательного возбуждения q^* равной скорости диссипации всех колебательных квантов $-(\partial\alpha/\partial t)_{v-T}$:

$$q^* = n_e \left(\sum_{\nu=1}^l k_{vib, \nu} M(\nu=0) - \sum_{\nu=1}^l k_{vib, \nu}^- M(\nu) \right),$$

Табл. 1

№	Процессы	k ($\text{см}^3\text{с}^{-1}$); A_i (с^{-1});	Литература
Возбуждение и тушение атома H			
1	$H + e \rightarrow H(2S, 2P) + e$	$f(E_{MW})$	[22]
2	$H + e \rightarrow H(3S, 3P, 3D) + e$	$f(E_{MW})$	[23]
3	$H(2S, 2P) + e \rightarrow H(3S, 3P, 3D) + e$	$4 \cdot 10^{-7}$	[14]
4	$H_2 + e \rightarrow H(3S, 3P, 3D) + H + e$	$f(E_{MW})$	[24]
5	$H(2S, 2P) + H_2 \rightarrow H + H + H$	$1.3 \cdot 10^{-9}$	[25]
6	$H(2S, 2P) + H \rightarrow H + H$	$3.0 \cdot 10^{-11}$	[14]
7	$H(3S, 3P, 3D) + H_2 \rightarrow H + H + H$	$2.2 \cdot 10^{-9}$	[26]
8	$H(2S, 2P) + e \rightarrow H + e$	$f(E_{MW})$	[22]
Прямая и ступенчатая ионизация			
9	$H_2(\nu = 0, \dots) + e \rightarrow H_2^+ + e$	$f(E_{MW})$	[27, 28]
Диссоциативная рекомбинация			
10	$H_2^+ + e \rightarrow H + H(2S, 2P)$	$f(E_{MW})$	[24]
11	$H_3^+ + e \rightarrow H + H + H$	$f(E_{MW})$	[24]
Диссоциация H_2			
12	$H_2(\nu = 0, \dots) + e \rightarrow H + H + e$	$f(E_{MW})$	[29]
Излучение			
13	$H(2S, 2P) \rightarrow H + h\nu$	$\tau_{ef} = 1.6 \cdot 10^{-9} / f(p)$, с	[30] и см. текст
14	$H(3S, 3P, 3D) \rightarrow H(2S, 2P) + h\nu$	$5 \cdot 10^7$	[30]
Ионная конверсия			
15	$H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$	$2 \cdot 10^{-9}$	[31]

$$\begin{aligned}
-\left(\frac{\partial\alpha}{\partial t}\right)_{VT} &= ZP_{1-0} \left[\exp\left(-\frac{E_1}{kT_{\text{vib}}}\right) - 1 \right]^{-1} \times \\
&\times \left(\frac{1 - \exp\left(-\frac{E_1}{kT_{\text{vib}}}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{E_1}{kT_{\text{vib}}} + \delta_{VT}\right)} \right)^2 + \frac{2.2ZQ_{1-0}\Delta E}{kT\delta_{VV}^3} (n_0 + 1)^2 (f_{n_0}^{\text{tr}})^2. \quad (4)
\end{aligned}$$

Выражение (4) было взято из работы [15]. Здесь Z – общее число соударений молекулы M в секунду. Если q^* не равно $(\partial\alpha/\partial t)_{VT}$, то значение T_{vib} меняется, и все вычисления продолжают, пока не установится равновесие, то есть q^* не станет равным $-(\partial\alpha/\partial t)_{V-T}$.

Кинетическая модель.

Учитывались процессы прямого возбуждения, ионизации и диссоциации, процессы ступенчатого возбуждения и ионизации, гибели возбужденных состояний атома H при излучении, электрон-ионная рекомбинация и ион-молекулярные реакции (см. табл. 1).

Реабсорбция.

При расчете гибели резонансного состояния $H(2p)$ за счет излучения необходимо учитывать реабсорбцию, то есть последовательный процесс переизлучения

возбужденных атомов и поглощения возникающего излучения, в результате чего время жизни возбужденных атомов увеличивается. Обычно при рассмотрении пленения излучения вводится величина $f(\rho)$ – коэффициент переноса излучения, представляющий из себя вероятность прохождения частицей расстояния ρ без поглощения и рассеяния. Величина $f(\rho)$ зависит от формы спектральной линии поглощения (излучения) и от перераспределения частоты фотона в акте его переизлучения возбужденным атомом.

$$f(\rho) = \int \varepsilon(\nu) \exp(-k_\nu \rho) d\nu,$$

где $\varepsilon(\nu)$ – форма спектральной линии, k_ν – спектральный коэффициент абсорбции.

Рассматриваются два предельных случая формы спектральной линии: доплеровский и лоренцевский профили. Первый связан с уширением спектральной линии за счет теплового движения атомов, а второй – за счет столкновений атома с другими частицами. Форма спектральной линии при доплеровском механизме уширения является гауссовой благодаря максвелловскому распределению атомов по скоростям. При уширении за счет столкновений форма линии определяется дисперсионной формулой, полученной Лоренцом [17], а ширина ее пропорциональна давлению. Когда влияние столкновений и теплового движения на форму спектральной линии сравнимы спектральная линия определяется так называемым фойхтовским профилем [17]:

$$k_\nu = k_0 \frac{a}{\pi} \int \exp(-y^2/(a^2 + (x-y)^2)) dy, \quad a = (\tau_{\text{nat}}^{-1} + \tau_c^{-1}) \lambda_0/4\pi V_0.$$

Здесь τ_{nat} – время жизни при спонтанном излучении, τ_c – эффективное время столкновения атома в резонансном состоянии с атомами в основном состоянии, в нашем случае с атомами водорода, k_0 – коэффициент абсорбции в центре резонансной линии, $k_0 = \lambda_0^3 N g_2 / (8\pi^{3/2} g_1 V_0 \tau)$, λ_0 – длина волны рассматриваемой резонансной линии, N – суммарное число частиц, V_0 – тепловая скорость нейтральных частиц при газовой температуре T , $V_0 = \sqrt{2kT/m}$, g_1 , g_2 – статистические веса возбужденного и основного состояний, c – скорость света.

Мы в своих расчетах использовали приближенный подход, основанный на введении эффективного времени жизни. Будем придерживаться результатов, полученных в работах [18–21].

Характерное время гибели $\text{H}(2p)$ за счет процессов излучения и последующего поглощения записывается в виде $\tau_{\text{ef}} = \tau_{\text{nat}} \lambda / f(\rho)$, где λ – константа, зависящая от геометрии объема и профиля возбужденных атомов. В [18, 19] для $f(\rho)$ при условии оптической толщины $k_0 R \gg 1$ и малых значениях a было получено выражение

$$f(\rho) = f_d \exp\left(\frac{-\pi f_{cd}^2}{4f_c^2}\right) + f_c \operatorname{erf}\left(\frac{\pi^{1/2} f_{cd}}{2f_c}\right).$$

Здесь f_d и f_c – коэффициенты переноса резонансного излучения для чисто доплеровского и чисто столкновительного уширения соответственно, а f_{cd} – коэффициент переноса излучения в условиях столкновительной формы линии излучения и доплеровской формы коэффициента поглощения.

Соотношения для f_d , f_c , f_{cd} записываются в виде

$$f_d = \frac{1}{k_0 \rho (\pi \ln(k_0 \pi))^{1/2}}, \quad f_c = \frac{1}{\pi^{1/2} (\pi^{1/2} a / k_0 \rho)^{1/2}}, \quad f_{cd} = \frac{2a}{\pi (\ln(k_0 \pi))^{1/2}}.$$

Согласно нашим расчетам величина $f(\rho)$ менялась примерно от $2 \cdot 10^{-3}$ до $2 \cdot 10^{-2}$ при изменении концентрации атома H от 10^{15} до 10^{14} см $^{-3}$.

Граничные условия и процедура расчета.

Система уравнений дополняется следующими граничными условиями. На оси Oz выполняется условие осевой симметрии для всех уравнений. В уравнениях Максвелла, используемых для расчета СВЧ-полей, на идеальных тонких металлических поверхностях разрядной камеры нормальная компонента магнитного поля равна нулю. В верхней части коаксиального волновода, используемого для подвода СВЧ энергии, расположена плоскость AA с идеальным источником TM_{010} волны с $\lambda_0 = 12.45$ см заданной мощности. Математически он устроен так, что отражённая волна не взаимодействует с падающей волной источника. На плоскости BB , разделяющей область подвода СВЧ-энергии и область плазмы, задано условие непрерывности (см. рис. 2).

Граничные условия для потенциала, описываемого уравнением Пуассона, следующие. Наружная стенка рабочей камеры заземлена ($\varphi = 0$), а на внутреннем электроде самосогласованно устанавливается значение потенциала φ в соответствии с законом Ома: $\varphi_0 = IR + \varphi$. При этом ток I , текущий в цепи, должен быть равен суммарному потоку заряженных частиц плазмы, поступающему на поверхность S_{in} внутреннего центрального электрода:

$$I = \oint_{S_{in}} (\mathbf{j} \cdot \mathbf{n}) ds,$$

где $\mathbf{j} = -e(\Gamma_p^i - \Gamma_e)$, а \mathbf{n} — единичный вектор, перпендикулярно направленный к поверхности электрода (нормальный вектор).

Граничные условия для заряженных частиц плазмы, описываемых балансными уравнениями, заданы выражениями для потоков на стенки центрального электрода и камеры:

$$\begin{aligned} \Gamma_e \cdot \mathbf{n} &= -\frac{1}{4} n_e \nu_{Te} - (a-1) \mu_e n_e \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} + \sum_i \gamma_s^i (\Gamma_p^i \cdot \mathbf{n}), \\ \Gamma_p^i \cdot \mathbf{n} &= -\frac{1}{4} n_p^i \nu_{Tp}^i - (a-1) \mu_p^i n_p^i \mathbf{E} \cdot \mathbf{n}. \end{aligned}$$

Поток электронов на стенку состоит из трёх компонент: диффузионной, дрейфовой и вторичной электронной эмиссии. Потоки ионов i -го сорта на стенку состоят только из диффузионной и дрейфовой составляющих. Здесь ν_{Te} и ν_{Tp}^i — тепловые скорости электронов и ионов на стенке. Соответствующая температура электронов на стенке была вычислена с помощью уравнения Больцмана, а температура ионов на стенке равна газовой температуре. Коэффициенты вторичной электронной эмиссии γ_s^i взяты из [12]. Коэффициент $a = 1$, если вектор постоянного поля \mathbf{E} направлен в сторону стенки, то есть $\mathbf{E} \cdot \mathbf{n} \geq 0$, и $a = 0$, если $\mathbf{E} \cdot \mathbf{n} < 0$.

Концентрация всех нейтральных возбужденных частиц плазмы на стенке полагалась равной нулю. Поток на стенку невозмущенных атомов в плазме молекулярных газов равен тепловому (диффузионному) потоку, умноженному на вероятность их рекомбинационной гибели γ_{rec} :

$$\Gamma_n \cdot \mathbf{n} = -\gamma_{rec} \frac{1}{4} n_n \nu_{Te}$$

Моделирование проводилось при помощи программы Comsol 3.5a, использующей метод конечных элементов [32]. Расчеты проводились на 12-ядерном процессоре Xeon с частотой 2.3 ГГц и оперативной памятью в 32 ГБ.

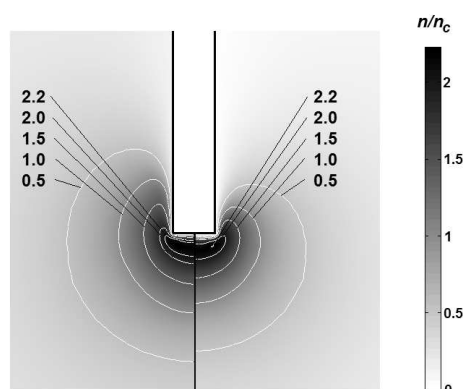


Рис. 3. Пространственные распределения плотности плазмы ЭМР в водороде при давлении 1 Торр. Левая половина рисунка соответствует положительному напряжению на антенне, правая половина – отрицательному напряжению. Линии равной плотности соответствуют плотности плазмы в единицах критической концентрации (для частоты 2.45 ГГц это $\sim 7.4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$)

3. Результаты и их обсуждение

Первые результаты расчетов в водороде при давлении 1 Торр при падающей СВЧ-мощности 30 Вт приведены на рис. 3. На нем сопоставлены пространственные распределения плотности плазмы ЭМД при приложении к антенне постоянного положительного относительно камеры напряжения 40 В (рис. 3) и отрицательного напряжения -10 В. Видно, что при отрицательных напряжениях область разряда уменьшается. Это связано с протеканием значительного тока, что качественно согласуется с результатами экспериментов [9].

Заключение

Представлена самосогласованная модель сильно неоднородного неравновесного СВЧ-разряда в водороде, описывающая воздействие на него внешнего постоянного поля. Получены первые результаты моделирования, показывающие влияние постоянного напряжения разной полярности на пространственное распределение плотности плазмы. Результаты качественно согласуются с данными экспериментов. В дальнейшем предполагается детальное изучение влияния постоянного поля на параметры СВЧ-разряда в широком диапазоне давлений и СВЧ-мощностей, расчеты вольт-амперной характеристики СВЧ-разряда по постоянному току и исследование возможности применения СВЧ-разряда в качестве плазменного катода.

Summary

Yu.A. Lebedev, A.V. Tatarinov, A.Yu. Titov, I.L. Epstein. Two-Dimensional Model of a Non-Equilibrium Strongly Non-Uniform Microwave Discharge in a DC External Field.

A self-consistent model of a non-equilibrium strongly inhomogeneous microwave discharge is described. The model is based on the simultaneous solution of the Maxwell equations, Poisson equation, Boltzmann equation for free plasma electrons, and the equations describing the vibrational kinetics and the kinetics of excited and charged particles in hydrogen plasma. The results of the first calculations are presented, which are in qualitative agreement with the experimental data.

Keywords: microwave plasma, discharge in hydrogen, self-consistent modeling, non-equilibrium plasma.

Литература

1. Wertheimer M.R., Moisan M. Processing of electronic materials by microwave plasma // Pure Appl. Chem. – 1994. – V. 66, No 6. – P. 1343–1352.
2. Lieberman M.A. Plasma Processing in the 21st Century // XXVIIth ICPIG, Eindhoven, the Netherlands, 18–22 July, 2005. – URL: <http://event.cwi.nl/icpig05/cd/D:/pdf/00-459.pdf>, свободный.
3. Asmussen J. Jr., Grotjohn T.A., Pengun Mak, Perrin M.A. The design and application of electron cyclotron resonance discharges // IEEE Trans. Plasma Sci. – 1997. – V. 25 – P. 1196–1221.
4. Lebedev Yu.A., Mokeev M.V., Solomakhin P.V., Shakhmatov V.A., Tatarinov A.V., Epstein I.L. Physics and microstructure of electrode microwave discharge // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2008. – V. 41, No 19. – Art. 194001, P. 1–4.
5. Lebedev Yu.A., Epstein I.L., Tatarinov A.V., Shakhmatov V.A. Electrode microwave discharge: areas of application and recent results of discharge physics // J. Phys.: Conf. Series. – 2010. – V. 207, No 1. – Art. 012002, P. 1–10.
6. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Т. VIII-1: Химия низкотемпературной плазмы / Под ред. Ю.А. Лебедева, Н.А. Платэ, В.Е. Фортова. – М.: Янус-К, 2005. – 567 с.
7. Лебедев Ю.А., Татаринов А.В., Эпштейн И.Л. Электродный микроволновый разряд в постоянном поле // Теплофизика высоких температур. – 2007. – Т. 45, № 3. – С. 325–332.
8. Лебедев Ю.А., Юсупова Е.В. Влияние постоянного поля на приповерхностную плазму сильно неоднородного СВЧ разряда // Физика плазмы. – 2012. – Т. 38, № 8. – С. 677–693.
9. Лебедев Ю.А., Эпштейн И.Л., Юсупова Е.В. Влияние постоянного поля на приэлектродную область неоднородного СВЧ-разряда в водороде // Теплофизика высоких температур. – 2014. – Т. 52, № 2. – С. 167–173.
10. Lebedev Yu.A., Mavludov T.B., Epstein I.L., Chvyreva A.V., Tatarinov A.V. The effect of small additives of argon on the parameters of a non-uniform microwave discharge in nitrogen at reduced pressures // Plasma Sources Sci. Technol. – 2012. – V. 21, No 1. – Art. 015015.
11. Lebedev Yu.A., Epstein I.L., Yusupova E.V. Vibrational distribution of nitrogen molecules in the $C_3\Pi_u$ state in a near-surface microwave plasma in nitrogen at pressures of 1–5 Torr // Plasma Physics Reports. – 2013. – V. 39, No 2. – P. 183–187.
12. Райзер Ю.П. Физика газового разряда. – М.: Наука, 1987. – 592 с.
13. Hagelaar G.J.M., Pitchford L.C. Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models // Plasma Sources Sci. Technol. – 2005. – V. 14, No 4. – P. 722–733.
14. Lebedev Yu.A., Epshtein I.L. Simulation of microwave plasma in hydrogen // J. Moscow Phys. Soc. – 1995. – V. 5. – P. 103–120.
15. Capitelli M., Ferreira C.M., Gordiets B.F., Osipov A.I. Plasma Kinetics in Atmospheric Gases. – Berlin; Heidelberg: Springer, 2000. – 300 p.
16. Гордиец Б.Ф., Осипов А.И., Шелепин Л.А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. – М.: Наука, 1980. – 512 с.
17. Mitchell A.C.G., Zemansky M.W. Resonance radiation and excited atoms. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1961. – 338 p.

18. *Holstein T.* Imprisonment of resonance radiation in gases // *Phys. Rev.* – 1947. – V. 72, No 12. – P. 1212–1233.
19. *Walsh P.* Effect of simultaneous Doppler and collision broadening and of hyperfine structure on the imprisonment of resonance radiation // *Phys. Rev.* – 1959. – V. 116, No 3. – P. 511–515.
20. *Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т.* Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. – М.: Наука, 1982. – 378 с.
21. *Karoulina E.V., Lebedev Yu.A.* Computer simulation of microwave and DC plasmas: comparative characterization of plasmas // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 1992. – V. 25, No 3. – P. 401–412.
22. *Koschmieder H., Raible V., Kleinpoppen H.* Resonance structure in the excitation cross section by electron impact of the $2s$ state in atomic hydrogen // *Phys. Rev. A.* – 1973. – V. 8, No 3. – P. 1365–1368.
23. *Mahan A.H., Gallagher A., Smith S.J.* Electron impact excitation of the $3S$, $3P$, and $3D$ states of H // *Phys. Rev. A.* – 1976. – V. 13, No 1. – P. 156–166.
24. *Tawara H., Itikawa Y., Nishimura H., Yoshino M.* Cross sections and related data for electron collisions with hydrogen molecules and molecular ions // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* – 1990. – V. 19, No 3. – P. 617–636.
25. *Slocomb C., Miller W., Shaefer H.* Collisional Quenching of Metastable Hydrogen Atoms // *J. Chem. Phys.* – 1971. – V. 55. – P. 926–932.
26. *Rousseau A., Granier A., Gousset G., Leprince P.* Microwave discharge in H_2 : influence of H-atom density on the power balance // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 1994. – V. 27, No 7. – P. 1412–1422.
27. *Cacciatore M., Capitelli M., Gorse C.* Non-equilibrium ionisation of molecular hydrogen in electrical discharges // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 1980. – V. 13, No 4. – P. 575–582.
28. *Rapp D., Englander-Golden P.* Total cross sections for ionization and attachment in gases by electron impact. I. Positive ionization // *J. Chem. Phys.* – 1965. – V. 43, No 5. – P. 1464–1479.
29. *Cacciatore M., Capitelli M., Dilonardo M.* A joint vibro-electronic mechanism in the dissociation of molecular hydrogen in nonequilibrium plasmas // *Chem. Phys.* – 1978. – V. 34, No 2. – P. 193–204.
30. *Wiese W.L., Smith M.W., Glennon B.M.* Atomic Transition Probabilities: in 2 vol. – Washington, DC: National Bureau of Standards, 1966.
31. *Bowers M.T., Elleman D.D., King J. Jr.* Analysis of the ion-molecule reactions in gaseous H_2 , D_2 , and HD by ion cyclotron resonance techniques // *J. Chem. Phys.* – 1969. – V. 50, No 11. – P. 4787–4804.
32. COMSOL 3.5a. – URL: <http://www.comsol.com>.

Поступила в редакцию
26.08.14

Лебедев Юрий Анатольевич – доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией плазмохимии и физикохимии импульсных процессов, Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, г. Москва, Россия.

E-mail: lebedev@ips.ac.ru

Татаринов Алексей Викторович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории плазмохимии и физикохимии импульсных процессов, Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, г. Москва, Россия.

E-mail: atat@ips.ac.ru

Титов Александр Юрьевич – аспирант лаборатории плазмохимии и физикохимии импульсных процессов, Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, г. Москва, Россия.

E-mail: *titov@ips.ac.ru*

Эпштейн Ирина Львовна – кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории плазмохимии и физикохимии импульсных процессов, Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, г. Москва, Россия.

E-mail: *epstein@ips.ac.ru*