

УДК 53.072+533.9:51-73

Н.Х. Бастыкова*, С.К. Коданова,
Т.С. РамазановКазахский национальный университет имени аль-Фараби, НИИЭТФ, Казахстан, г. Алматы
*E-mail: Bastykova_nuriya@physics.kz**Моделирование параметров пылевой плазмы в смеси газов Ar-H₂**

Исследовано распределение электрического поля и других параметров плазмы в разрядной трубке с помощью самосогласованного решения задач электронной кинетики (уравнение Больцмана для ФРЭ), уравнений движения ионов в дрейфово-диффузионном приближении и уравнения Пуассона для распределения электрического поля. Получены аксиальные и радиальные распределения параметров плазмы в смеси газов аргона и водорода.

Ключевые слова: уравнение Больцмана, дрейфово-диффузионное приближение.

Н.Х. Бастыкова, С.К. Коданова, Т.С. Рамазанов
Ar-H₂ газдар қоспасында тозанды плазма параметрлерін модельдеу

Разрядты түтікшеде электр өрісінің және басқа плазма параметрлерінің таралуы электронның кинетикасы (ЭТФ үшін Больцман теңдеуі), дрейфті-диффузиялық жуықтау негізінде иондардың қозғалыс теңдеуі және электр өрісінің таралуы үшін Пуассон теңдеуі зерттелді. Аргон және водород қоспаларында плазма параметрлерінің аксиалды және радиалды таралуы алынды.

Түйін сөздер: Больцман теңдеуі, дрейфтік-диффузиялық жуықтау.

N.Kh. Bastykova, S.K. Kodanova, T.S. Ramazanov
Simulation of dusty plasma parameters in mixture of Ar-H₂

The distribution of the electric field and other plasma parameters in the discharge tube by means of a self-consistent solution of problems of electron kinetics (Boltzmann equation for the EDF), the equations of motion of the ions in the drift-diffusion approximation and the Poisson equation for the distribution of the electric field are investigated. Axial and radial dependence of plasma parameters in a gas mixture of argon and hydrogen are obtained.

Key words: Boltzmann equation, the drift-diffusion approximation

Введение

Исследованию свойств образований из заряженных пылевых частиц в газовом разряде посвящено большое число экспериментальных и теоретических работ [1, 2], однако вопрос о влиянии состава газа на характеристики пылевых образований практически не изучен. Но разряд в смеси различных газов приводит к весьма значительному изменению характеристик как электронной, так и ионной компоненты плазмы. Причем, характеристики газового разряда могут сильно зависеть даже от

очень небольшой концентрации примеси. Это обстоятельство используется во многих технических приложениях газового разряда, таких как газовые лазеры, панели плазменных дисплеев, реакторы плазменного травления и обработки полупроводниковых материалов, осветительные лампы и вспышки и т.д.

Моделирование проводилось с целью получения основных параметров на оси разряда. Модель основана на одновременном решении кинетического уравнения Больцмана для ФРЭЭ и уравнений движения ионов в дрейфово-

диффузионном приближении и уравнения Пуассона для распределения электрического поля.

Определим функцию распределения электронов $F(\vec{r}, \vec{v})$ по скоростям v в точке r .

Функция распределения электронов (ФРЭ) удовлетворяет уравнению Больцмана:

$$\frac{\partial}{\partial t} F(\vec{r}, \vec{v}) + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} F - \frac{e_0}{m} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{v}} F = \sum_k C_k^{el}(F) + \sum_{k,l} C_{k,l}^{ex}(F) + \sum_k C_k^{io}(F), \quad (1)$$

где в правой части представлены интегралы столкновений в упругих, различных неупругих и ионизационных столкновениях.

Вектор электрического поля имеет аксиальную и радиальную компоненты, учитывая

цилиндрическую геометрию. Пространственные координаты: аксиальная z , радиальная r .

ФРЭ можно разложить в ряд по полиномам Лежандра. Оставив первые два члена разложения (двучленное приближение) ФРЭ будет иметь вид:

$$F(\vec{r}, \vec{v}) = F\left(r, z, u, \frac{\vec{v}}{v}\right) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{m}{2}\right)^{3/2} \left[f_0(r, z, u) + f_r(r, z, u) \frac{v_r}{v} + f_z(r, z, u) \frac{v_z}{v} \right], \quad (2)$$

где $u = mv^2/2$ – кинетическая энергия электронов, скалярные $f_0(r, z, u)$ – изотропная часть функции распределения электронов по энергии (ФРЭЭ), $f_r(r, z, u)$ – радиальная анизотропная часть ФРЭЭ и

$f_z(r, z, u)$ – аксиальная анизотропная часть ФРЭЭ.

Подставляя разложение (2) в уравнение (1), получим систему уравнений на изотропную (3) и анизотропные (4, 5) части ФРЭЭ.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{ru}{3K} \left(\frac{\partial}{\partial r} f_0 - e_0 E_r(r, z) \frac{\partial}{\partial u} f_0 \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{u}{3K} \left(\frac{\partial}{\partial z} f_0 - e_0 E_z(r, z) \frac{\partial}{\partial u} f_0 \right) \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial u} \left\{ \frac{u}{3K} \left[-e_0 E_r(r, z) \frac{\partial}{\partial r} f_0 - e_0 E_z(r, z) \frac{\partial}{\partial z} f_0 + e_0^2 (E_r^2 + E_z^2) \frac{\partial}{\partial u} f_0 \right] \right\} + \\ & + \frac{\partial}{\partial u} (Gf_0) = uHf_0 - S_0(r, z, u, f_0) \end{aligned} \quad (3)$$

$$f_r = -\frac{1}{K} \left(\frac{\partial}{\partial r} f_0 - e_0 E_r(r, z) \frac{\partial}{\partial u} f_0 \right), \quad (4)$$

$$f_z = -\frac{1}{K} \left(\frac{\partial}{\partial z} f_0 - e_0 E_z(r, z) \frac{\partial}{\partial u} f_0 \right). \quad (5)$$

Здесь введены функции, зависящие от парциальных плотностей компонент газовой смеси и процессов, определяемых упругими и неупругими процессами столкновения электронов с атомами смеси:

$$G(r, z, u) = \sum_k 2\xi_k(r, z) \frac{m}{M_k} u^2 Q_k^m(u), \quad (6)$$

$$H(r, z, u) = \sum_{k,l} \xi_k(r, z) Q_{k,l}^{ex}(u) + \sum_k \xi_k(r, z) Q_k^{io}(u), \quad (7)$$

$$K(r, z, u) = \sum_k \xi_k(r, z) Q_k^{io}(u) + H(r, z, u), \quad (8)$$

$$S_0(r, z, u) = \sum_{k,l} \xi_k(r, z) (u + u_{k,l}^{ex}) Q_{k,l}^{ex}(u + u_{k,l}^{ex}) f_0(r, z, u + u_{k,l}^{ex}) + \sum_k 4\xi_k(r, z) (2u + u_{k,l}^{io}) Q_{k,l}^{io}(2u + u_{k,l}^{io}) f_0(2u + u_{k,l}^{io}). \quad (9)$$

Здесь $G(u)$ - член, описывающий потери энергии в упругих столкновениях, $S_0(u)$ – член, описывающий появление электрона с энергией u в результате столкновения электрона с более высокой энергией $u+u_k$ в неупругом процессе (возбуждение или ионизация). $Q_{k,l}^{ex}(u)$ - сечение возбуждения атома сорта k из основного состояния в возбужденной l -ое состояние электроном с кинетической энергией u , $Q_k^{io}(u)$ - сечение ионизации атома сорта k из основного состояния, $Q_k^m(u)$ - моментное (диффузионное) сечение столкновения электрона с атомом сорта k , $\xi_k = N_k/N$ - парциальная концентрация

газа сорта $k=(Ar, H_2)$, $N = \sum_k N_k$ - полная плотность газа.

Систему уравнений (3-5) значительно упрощается при переходе от кинетической энергии электронов к полной энергии электронов $\varepsilon = u - e_0 V(r, z)$, где $-\text{grad}\phi(r, z) = \vec{E}(r, z)$.

По найденным изотропной и анизотропным частям ФРЭЭ можно определить следующие макроскопические параметры электронов. Плотность (10) электронов $n_e(r, z)$ и средняя энергия (11) электронов $u_e(r, z)$ определяются интегралами изотропной части ФРЭЭ:

$$n_e(r, z) = \int_0^\infty f_0(r, z, u) u^{1/2} du, \quad (10)$$

$$u_e(r, z) = \frac{1}{n_e(r, z)} \int_0^\infty f_0(r, z, u) u^{3/2} du \quad (11)$$

Степени возбуждения $P_{k,l}^{ex}(r, z)$ и ионизации $P_k^{io}(r, z)$ электронным ударом:

$$P_{k,l}^{ex}(r, z) = \sqrt{\frac{2}{m_0}} \int_0^\infty N_k(r, z) Q_{k,l}^{ex}(u) f_0(r, z, u) u du, \quad (12)$$

$$P_k^{io}(r, z) = \sqrt{\frac{2}{m_0}} \int_0^\infty N_k(r, z) Q_k^{io}(u) f_0(r, z, u) u du. \quad (13)$$

Потеря энергии электронов в упругих (14) и в неупругих (15) столкновениях определяется интегралами:

$$L^l(r, z) = \sum_k 2 \frac{m}{M_k} \sqrt{\frac{2}{m_0}} \int_0^\infty N_k(r, z) Q_k^m(u) f_0(r, z, u) u^2 du, \quad (14)$$

$$L^in(r, z) = \sum_{k,l} u_{k,l}^{ex} P_{k,l}^{ex}(r, z) + \sum_k u_k^{io} P_k^{io}(r, z). \quad (15)$$

Из уравнений Больцмана легко получить балансные уравнения для электронов

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial(n_e v_z)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r n_e v_r)}{\partial r} = N \sqrt{\frac{2}{m}} \int_{u^{io}}^{\infty} Q_k^{io}(u) f_0(r, z, u) u du = \dot{n}_e, \quad (16)$$

где v_z, v_r - аксиальные и радиальные компоненты средней скорости электронов, равные в дрейфово-диффузионном приближении

$$n_e v_z = -\mu_e n_e E_z - D_e \frac{\partial n_e}{\partial z}, \quad n_e v_r = -\mu_e n_e E_r - D_e \frac{\partial n_e}{\partial r}, \quad (17)$$

$\dot{n}_e(r, z)$ - скорость образования электронов (и ионов) в некоторой точке разрядной

трубки в единицу времени в единице объема. Для ионов уравнения баланса имеют вид

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial(n_i V_{iz})}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r n_i V_{ir})}{\partial r} = N \sqrt{\frac{2}{m}} \int_{u^{io}}^{\infty} Q_k^{io}(u) f_0(r, z, u) u du = \dot{n}_e \quad (18)$$

$$n_i V_{iz} = \mu_i n_i E_z - D_i \frac{\partial n_i}{\partial z}, \quad n_i V_{ir} = \mu_i n_i E_r - D_i \frac{\partial n_i}{\partial r}, \quad (19)$$

μ_e, D_e и μ_i, D_i - коэффициенты подвижности и диффузии электронов и ионов, соответственно, зависящие в общем случае от приведенного электрического поля E/N . Для электронов. Необходимо отметить, что для ионов коэффициенты подвижности и диффузии с хорошей точностью можно считать константами, в то время как для

электронов в неравновесной низкотемпературной плазме тлеющего разряда $\mu_e = \mu_e(r, z)$, $D_e = D_e(r, z)$ и могут быть определены по известной функции распределения электронов $f_0(r, z, u)$.

Уравнение Пуассона для двумерного распределения электрического потенциала $\varphi(r, z)$ в цилиндрической геометрии:

$$\frac{\partial^2 \varphi(r, z)}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \varphi(r, z)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi(r, z)}{\partial r} = -4\pi e_0 (n_i(r, z) - n_e(r, z)). \quad (20)$$

Компоненты электрического поля в уравнении Больцмана и в дрейфово-диффузионном уравнении непрерывности для ионов определяются через электрический потенциал следующим образом:

$$E_z = -\frac{\partial \varphi(r, z)}{\partial z}, \quad E_r = -\frac{\partial \varphi(r, z)}{\partial r}. \quad (21)$$

Уравнения (16, 18, 20) образуют полную систему для трех неизвестных - плотность электронов $n_e(r, z)$, ионов $n_i(r, z)$ и электрическое поле $E(r, z)$. Система этих уравнения решается численно методом итераций. В первоначально заданном однородном аксиальном $E_{0z} = \varphi_a/L$, и

заданном радиальном распределении электрического поля решается уравнение Больцмана (3). По найденным изотропной и анизотропным частям ФРЭЭ находим распределение плотности электронов по формуле (16) и частоты ионизации (13). Зная частоту ионизации,

решается уравнение баланса ионов (18). Зная распределение плотностей электронов $n_e(r,z)$ и ионов $n_i(r,z)$, находится распределение электрического поля $E(r,z)$ с помощью уравнения Пуассона. В полученном новом поле заново решается уравнение Больцмана, и получают новые распределения плотности электронов и частоты ионизации. Далее такой итеративный процесс повторяется до тех пор, пока распределения плотностей электронов, ионов и электрического поля не перестанут меняться с числом итераций. Конечное решение не зависит от выбора начального распределения электрического поля.

Результаты

Рассматривался положительный столб разряда в смеси газов аргона и водорода при давлении $p=0,5$ Торр в электрическом поле $E_0=2,4,8$ В/см. Рассматриваемый промежуток равен $L=20$ см, катодная сторона положительного столба соответствует $z=0$ см. Заданы размеры газоразрядной трубки: длина L и радиус R . Давление газа p . Падение напряжения φ_a на длине трубки L . Радиальное распределение потенциала $\varphi(r)$ считается всюду одинаковым. Эти газы существенно отличаются по массе ($M_{Ar}=40M_p$, $M_{H_2}=2M_p$, где M_p - масса протона), потенциалам ионизации ($I_{Ar}=15.6$ eV, $I_{H_2}=15.0$ eV) и структуре электронных состоя-

ний. Спектроскопические данные и структура энергетических состояний для инертных газов взяты от [3].

На рисунках 1-6 приведены аксиальные распределения параметров плазмы (электрическое поле, концентрация электронов, температура электронов) при различных концентрациях газов. Из рисунков видно, что при $E_0=2$ В/см в чистом водороде образование страт несущественно, с увеличением электрического поля ($E_0=4$ В/см) начинается образование страт в области катода, так как при высоких значениях электрического поля начинают играть роль неупругие столкновения. Механизмы неустойчивостей, вызывающие возникновение страт, связаны с ионизационными процессами. Это значит, что периодические изменения электронной плотности вызваны не перераспределениями фиксированного количества электронов, как в плазменных волнах, а чередованием областей, в которых электроны преимущественно рождаются и преимущественно гибнут. Поэтому при малых значениях электрического поля в чистом водороде электроны не успевают разогнаться в электрическом поле до высоких энергий, когда они могут возбуждать или ионизовать атомы водорода. При добавлении примеси аргона к водороду приводит к значительному изменению электрического поля.

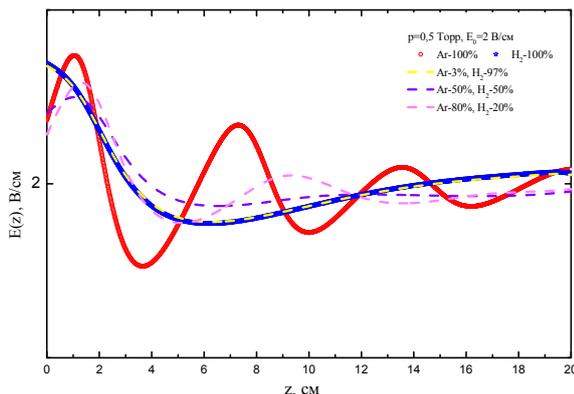


Рисунок 1 – Аксиальное распределение электрического поля в смеси газов при $E_0=2$ В/см

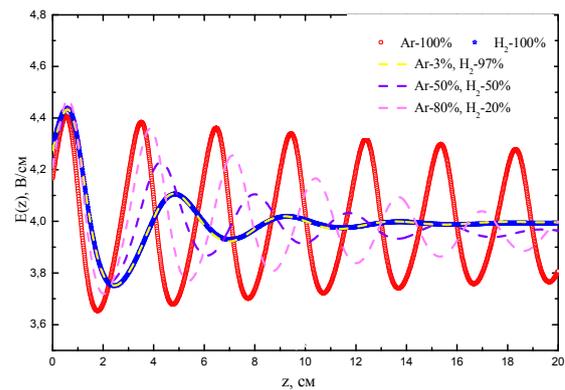


Рисунок 2 – Аксиальное распределение электрического поля в смеси газов при $E_0=4$ В/см

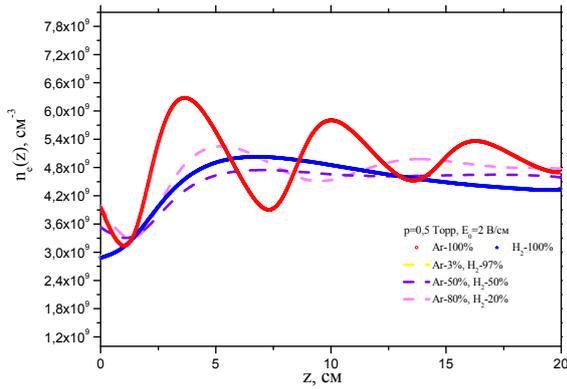


Рисунок 3 – Аксиальное распределение плотности электронов в смеси газов при $E_0=2$ В/см

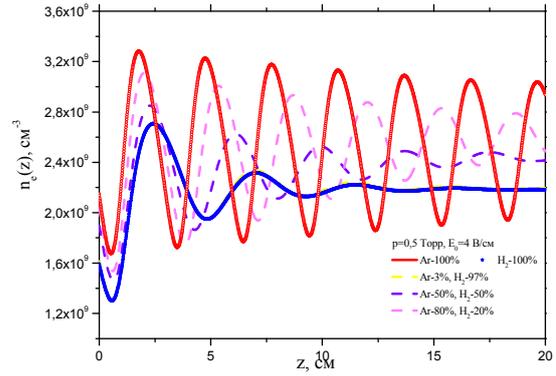


Рисунок 4 – Аксиальное распределение плотности электронов в смеси газов при $E_0=4$ В/см

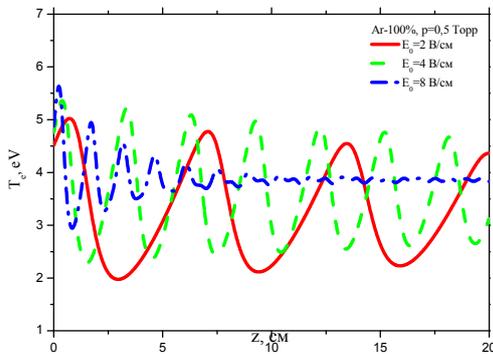


Рисунок 5 - Аксиальное распределение температуры электронов в чистом аргоне

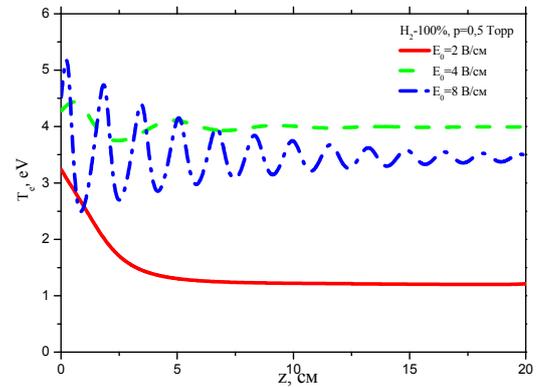
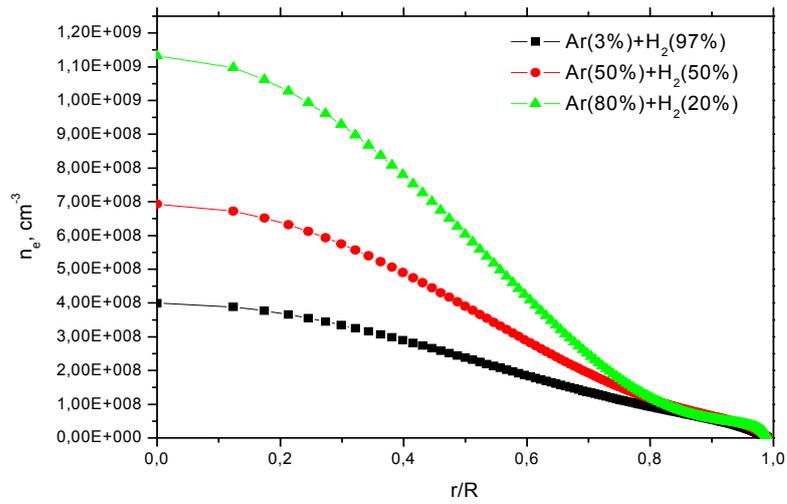


Рисунок 6 - Аксиальное распределение температуры электронов в чистом водороде

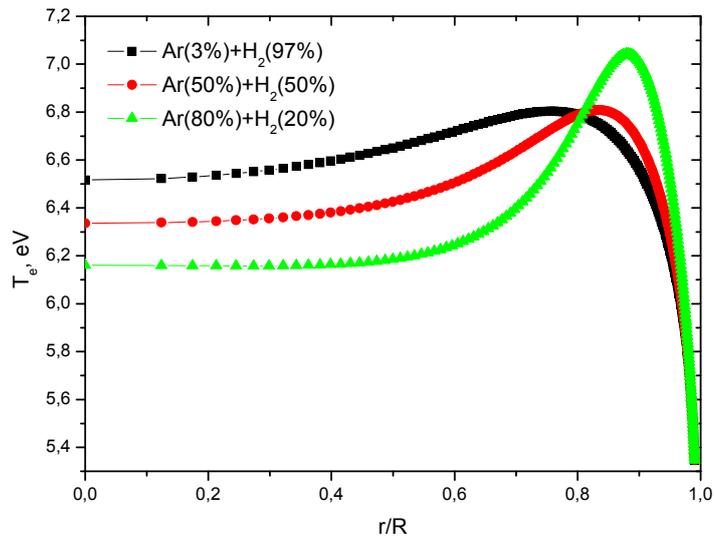
С помощью полученной аксиальных зависимостей изотропной части ФРЭЭ и самосогласованно электрического поля, в результате представления радиальной зависимости ФРЭЭ, получены следующие радиальные распределения параметров плазмы. Ниже представлены радиальные распределение параметров плазмы в минимуме электрического поля при давлении $p=0,5$ Torr в электрическом поле $E_0=4$ В/см для различных

концентрации аргона с водородом (рисунки 7-9). При большой примеси аргона Ar(80%) повышается температура электронов вблизи стенки. Отметим, что в радиальном распределении температуры и потенциала частиц наблюдаются немонотонные участки для некоторых значение аксиальной координаты. Это может быть связано с тем, что распределение электронов по энергии сильно неоднородно и имеет перегибы.



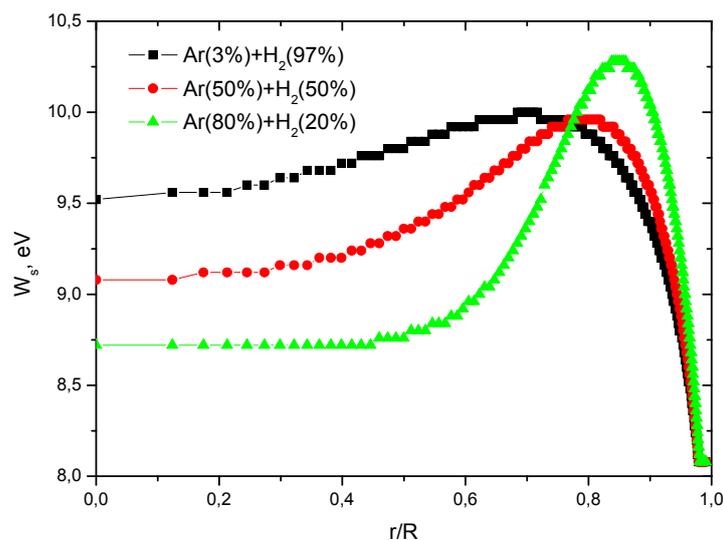
- в минимуме электрического поля при $z = 2,4$ см
- в минимуме электрического поля при $z = 2,3$ см
- ▲—▲— в минимуме электрического поля при $z = 2,0$ см

Рисунок 7 - Радиальное распределение плотности электронов в минимуме электрического поля при $E=4$ В/см



- в минимуме электрического поля при $z = 2,4$ см
- в минимуме электрического поля при $z = 2,3$ см
- ▲—▲— в минимуме электрического поля при $z = 2,0$ см

Рисунок 8 – Радиальное распределение температуры электронов в минимуме электрического поля при $E=4$ В/см



- в минимуме электрического поля при $z = 2,4$ см
- в минимуме электрического поля при $z = 2,3$ см
- ▲—▲— в минимуме электрического поля при $z = 2,0$ см

Рисунок 9 – Радиальное распределение потенциала поверхности пробной пылевой частицы $W_s(r/R)$ в минимуме электрического поля при $E=4$ В/см

Заключение

Получены аксиальные распределения электрического поля и параметров плазмы в смеси газов. Страты существуют в ограниченном диапазоне условий по значению тока, роду газа, давлению, радиусу трубки. От тех же параметров зависят и амплитуда колебаний свечения, длина волны страт, скорость их распространения. Функция распределения электронов по энергии в смеси газов зависит от приведенного электрического поля и от парциальной концентрации компонент газа. В легких газах (водород) при малых значениях электрического поля возникновение страт малы, с увеличением электрического поля появляются страты в области катода. При малых значениях электрического поля в чистом

водороде электроны не успевают разогнаться в электрическом поле до высоких энергий, когда они могут возбуждать или ионизовать атомы водорода. Средняя энергия электронов, пропорциональная “температуре” электронов, определяется главным образом потерей энергии в упругих столкновениях. При высоких значениях электрического поля начинают играть роль неупругие столкновения. Температура электронов повышается, растет частота ионизации атомов водорода. Когда в водород добавляется даже незначительное количество аргона, в плазме разряда будет подавляющее большинство ионов аргона, что имеет очень важное значение при определении ионного дрега и просто структуры пылевого облака и т.п.

References

- 1 Fortov V.Ye., Khrapak A.G., Khrapak S.A., Molotkov V.I., Petrov O.F. // UFN, 174, 495 2004.
- 2 Ignatov A.M. // Fizika plazma. 31, №1, 52. 2005.
- 3 Morgan W.L., Bouef J.P., Pitchford L. Siglo Data Base, CPAT and Kinema Software//(<http://www.csn.net/siglo>), 1998.