

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЧ-ПЛАЗМЫ Пониженного Давления для Цилиндрической Вакуумной Камеры с Заряженным Образцом

Шемахин Александр Юрьевич

к. ф.-м. н, доцент кафедры радиофизики Института физики,
Казанский (Приволжский) федеральный университет,
e-mail: shemakhin@gmail.com

Желтухин Виктор Семенович

д. ф.-м. н, в.н.с. НИЛ ПРАЛ Института физики,
Казанский (Приволжский) федеральный университет,
профессор кафедры ПНТВМ,
Казанский национальный исследовательский технологический университет,
420015 г. Казань, ул. Карла Маркса, 68
e-mail: vzheltukhin@gmail.com

Шемахин Евгений Юрьевич

к. т. н, с.н.с., НИЛ ПРАЛ Института физики,
Казанский (Приволжский) федеральный университет,
e-mail: shupachet@gmail.com
420008 г. Казань, ул. Кремлевская 18.

Аннотация. Для моделирования процессов в ВЧ-плазме пониженного давления с продувом газа разработана гибридная математическая модель при числах Кнудсена $8 \cdot 10^{-3} - 7 \cdot 10^{-2}$ для несущего газа. Модель включает начально-краевую задачу для кинетического уравнения Больцмана, описывающего функцию распределения несущего нейтрального газа, краевые задачи для уравнения неразрывности электронной, ионной и метастабильной компонент, уравнения сохранения энергии электронов, для ВЧ-уравнений Максвелла в форме телеграфных уравнений и уравнения Пуассона для потенциальной составляющей поля. Приводятся результаты расчета электрической напряженности, концентрации электронов, ионов и метастабилей, потенциальной составляющей электромагнитного поля в цилиндрической вакуумной камере.

Ключевые слова: ВЧ-плазма, пониженное давление, численное моделирование, уравнение баланса электронов, уравнения Максвелла, концентрация электронов, напряженность электрического поля, математическое моделирование, пониженное давление.

Цитирование Шемахин А.Ю., Желтухин В.С., Шемахин Е.Ю. Математическое моделирование ВЧ-плазмы пониженного давления для цилиндрической вакуумной камеры с заряженным образцом // Информационные и математические технологии в науке и управлении. 2021. № 4 (24). С. 44-49. DOI:10.38028/ESI.2021.24.4.004.

Введение. Высокочастотная (ВЧ) плазма пониженного давления (13.3 – 133 Па) применяется для модификации различных материалов: диэлектриков, проводящих, полупроводниковых [1, 2]. Образованная данным видом разряда плазма, характеризуется следующими параметрами: концентрация электронов $n_e = 10^{15} - 10^{18} \text{ м}^{-3}$, степень ионизации $10^{-6} - 10^{-3}$, электронная температура $T_e = 1 - 4 \text{ эВ}$, температура атомов и ионов в плазменном сгустке $T_a = (3 - 4) \cdot 10^3 \text{ К}$, в струе $T_a = (3.2 - 10) \cdot 10^2 \text{ К}$.

ВЧ-плазма пониженного давления имеет ряд особенностей [1]. Экспериментальные результаты [1] показали, что плазменная струя является одновременно индуктивным и емкостным ВЧ-разрядом, потому что плотность электронов в плазменной струе на несколько

порядков выше, чем в околоструйном пространстве, при этом обнаружены как аксиальная, так и азимутальная компоненты напряженностей магнитного поля и тока в плазме.

Постановка задачи. Для исследования параметров ВЧ-плазмы пониженного давления разработана математическая модель на основе кинетической модели для несущего газа, уравнений неразрывности и сохранения энергии для электронов, уравнения неразрывности для ионов, преобразованных уравнений Максвелла в форме телеграфных уравнений для вихревой компоненты и уравнения Пуассона для постоянной компоненты электромагнитного поля.

Модель включает в себя следующие уравнения:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\tilde{\mathbf{F}}}{m_a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} = S(f), \quad (1)$$

$$-\text{div} \left(\lambda_e \text{grad} T_e - \frac{5}{2} k_B T_e n_e \mathbf{v}_e \right) + \frac{3}{2} k_B \delta \nu_c n_e (T_e - T_a) = \sigma E^2 - \nu_i E_i n_e - E_{im} R_3 n_m n_e, \quad (2)$$

$$\left(\Delta - \mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t), \quad (3)$$

$$\Delta \phi = \frac{e}{\varepsilon_0} (n_i - n_e), E_{cap} = -\nabla \phi, \quad (4)$$

$$-\nabla \cdot (D_e \nabla n_e - \mathbf{v}_a n_e + \mu_e \mathbf{E}_{cap} n_e) = R_1 n_e n_a + R_2 n_m^2 + R_3 n_m n_e - R_4 n_e n_i - R_5 n_e^2 n_i, \quad (5)$$

$$-\nabla \cdot (D_i \nabla n_i + \mathbf{v}_a n_i - \mu_i \mathbf{E}_{cap} n_i) = R_1 n_e n_a + R_2 n_m^2 + R_3 n_m n_e - R_4 n_e n_i - R_5 n_e^2 n_i, \quad (6)$$

$$-\nabla \cdot (D_m \nabla n_m - \mathbf{v}_a n_m) = R_6 n_e n_a - R_2 n_m^2 - R_3 n_m n_e - R_7 n_m - R_8 n_m n_a - R_9 n_m. \quad (7)$$

Здесь \mathbf{c} и \mathbf{r} – вектора скорости и координат атомов газа, соответственно, $f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)$ – функция распределения нейтральной компоненты плазмы по скоростям, $S(f)$ – интеграл столкновений, $\tilde{\mathbf{F}}$ – приведенная сила, воздействующая на нейтральные атомы за счет упругих столкновений с электронами, n_e – концентрация электронов, n_i – концентрация ионов, n_m – концентрация метастабилей, T_e – электронная температура, D_e – коэффициент диффузии электронов, D_i – коэффициент диффузии ионов, D_m – коэффициент диффузии метастабилей, μ_e – подвижность электронов, \mathbf{v}_a – скорость нейтрального газа, ν_c – частота упругих столкновений электронов с атомами, σ – проводимость плазмы, \mathbf{E} – напряженность ВЧ составляющей электрического поля, E_i – потенциал ионизации, μ_0 – магнитная постоянная, ε_0 – электрическая постоянная, ϕ – потенциал электрического поля, k_B – постоянная Больцмана, $\delta = m_e/2m_a$, m_e , m_a – массы электронов и атомов, ν_i – частота ионизации.

К системе уравнений (1)-(3) устанавливаются следующие граничные условия:

$$f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, 0) = f_0(\mathbf{c}, \mathbf{r}), f(\mathbf{c}, \mathbf{r}_{sides}, t) = f_0(\mathbf{c}, \mathbf{r}_{sides}), \quad (8)$$

$$n_e|_{inlet} = n_{e_0}, n_e|_{outlet} = n_e|_{sides} = 0, \frac{\partial n_e|_{body}}{\partial \bar{n}} = 0, \quad (9)$$

$$n_i|_{inlet} = n_{i_0} = n_{e_0}, \frac{\partial n_i|_{sides, outlet, body}}{\partial \bar{n}} = 0, \quad (10)$$

$$n_m|_{inlet} = n_{m_0}, \frac{\partial n_m|_{sides, outlet, body}}{\partial \bar{n}} = 0, \quad (11)$$

$$T_e|_{inlet, outlet, sides} = T_{e_{room}}, \frac{\partial T_e|_{inlet}}{\partial \bar{n}} = 0, \quad (12)$$

$$\phi|_{body} = \phi_0, \phi|_{outlet, sides} = 0, \frac{\partial \phi|_{inlet}}{\partial \bar{n}} = 0, \quad (13)$$

$$\mathbf{E}|_{inlet, outlet, sides} = -i\omega \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \right) \int \frac{\mathbf{j}(\mathbf{s})_{el}}{|\mathbf{r}-\mathbf{s}|} d^3 \mathbf{s}. \quad (14)$$

Здесь индексом *inlet* обозначено входное отверстие вакуумной камеры, *outlet* – выходное отверстие вакуумной камеры.

Для решения системы задач (1)-(7) разработан гибридный численный метод, который включает в себя модифицированный метод Г. Бёрда для несущего газа и метод конечных объемов для расчета распределений электронной температуры и концентрации, преобразованных уравнений Максвелла. Для реализации метода разработана программа на языке C++, использующая библиотеки пакета OpenFOAM [3]. Коэффициенты D_e , ν_c , ν_i , λ_e предполагаются зависящими от электронной температуры T_e , которые берутся из пакета BOLSIG+ [4, 5, 6, 7].

Расчеты проведены для потока ВЧ-плазмы аргона, генерируемого в камере радиусом входного отверстия $R = 12$ мм, радиусом $R = 48$ мм и длиной $L = 128$ мм. На входном сечении вакуумной камеры задавались давление 60 Па, температура 450 К, и скорость 10 м/с. Получены результаты расчетов концентрации заряженных частиц и потенциала электрического поля.

Концентрации электронов и ионов в вакуумной камере при давлении 40 Па убывают от максимальных значений на входе в вакуумную камеру на порядок при приближении к образцу, что видно по рис. 1. Концентрация метастабильных частиц убывает с $5.5 \cdot 10^{15}$ до $1.9 \cdot 10^{15}$.

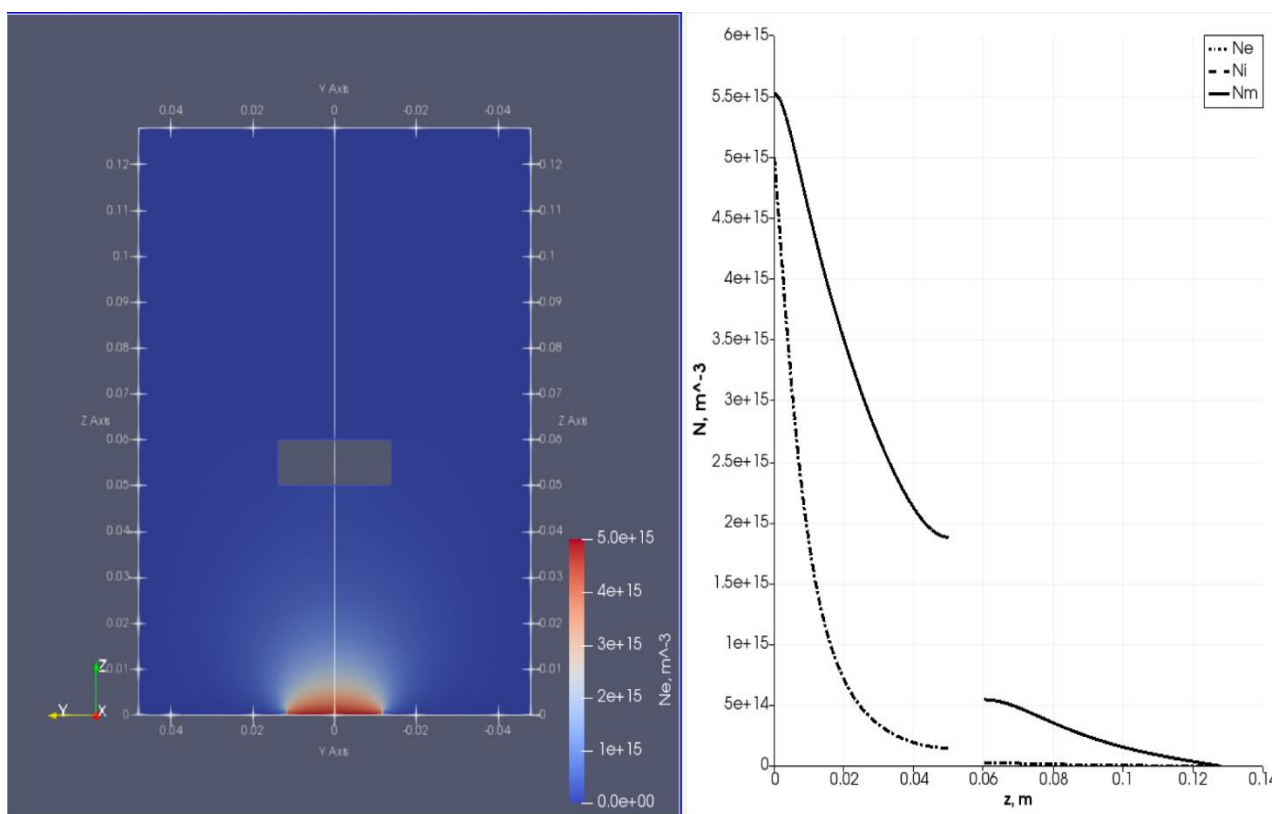


Рис. 1. Концентрации электронов, ионов и метастабильных частиц вдоль вакуумной камеру по оси. Разрыв кривой на правом графике соответствует положению образца в струе.

При мощности 1 кВт образец приобретает потенциал -30 В относительно струи, что видно по рис. 2.

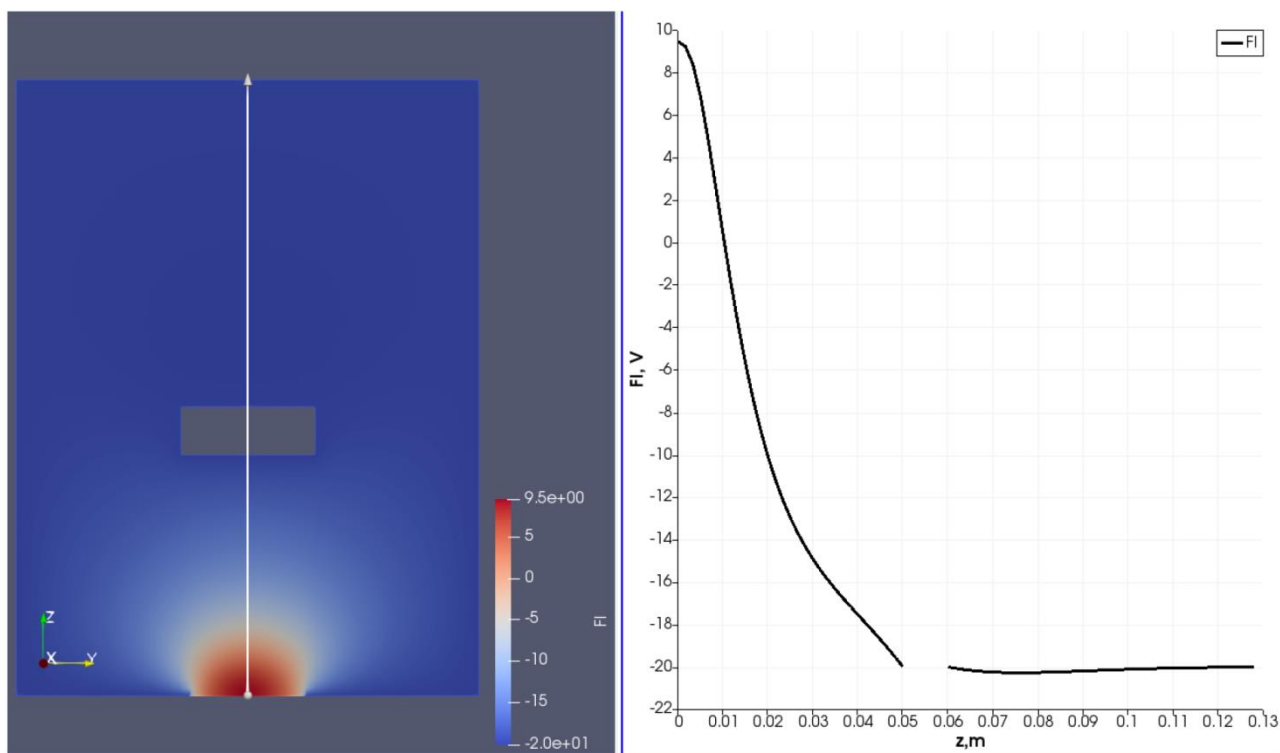


Рис. 2. Распределение потенциальной компоненты электромагнитного поля в ВЧ плазме вдоль оси по центру образца для мощности 1,0 кВт. Вертикальная белая линия показывает сечение, вдоль которого взято распределение. Разрыв кривой на правом графике соответствует положению образца в струе.

Заключение. Проведены расчеты, позволяющие определить концентрации электронов, ионов и метастабильных частиц, распределение потенциальной компоненты электрического поля при мощности разряда 0.5 – 1.5 кВт. С помощью расчета определен потенциал образца в вакуумной камере. В результате расчетов выявлено, что образец заряжается отрицательно относительно струи, а модуль потенциала зависит от мощности разряда и возрастает с увеличением мощности. Кроме того, концентрация метастабильных атомов в струе превышает концентрации электронов и ионов в 2-4 раза, то есть оказывает существенное влияние на баланс частиц и энергий в вакуумной камере.

Благодарности. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-71-10055).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абдуллин И.Ш., Желтухин В.С., Кашапов Н.Ф. Высоочастотная плазменно-струйная обработка материалов при пониженных давлениях: Теория и практика применения. Казань: Изд-во Казан. ун-та. 2000. 348 с.
2. Shemakhin A.Yu, Zheltukhin V. S. Mathematical modelling of RF plasma flow at Low Pressures with 3D Electromagnetic Field // Advances in Materials Science and Engineering. 2019. No. 7120217. DOI: 10.1155/2019/7120217.
3. Пакет OpenFOAM. Режим доступа: <https://openfoam.org/> (дата обращения: 01.10.2021).
4. BOLSIG+. Electron Boltzmann equation solver. Режим доступа: <http://www.bolsig.laplace.univ-tlse.fr/> (дата обращения: 01.10.2021).

5. Boeuf J.P., Pitchford L.C. Two-dimensional model of a capacitively coupled RF discharge and comparisons with experiments in the Gaseous Electronics Conference reference reactor // Phys. Rev. E. 1995. Vol. 51. № 2. Pp. 1376-1390. DOI: 10.1103/PhysRevE.51.1376.
6. 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. Vol. 14. p. 722-733. DOI: 10.1088/0963-0252/14/4/011.
7. UBC database, Database of scattering cross sections. Режим доступа: www.lxcat.net (дата обращения: 01.12.2019).

UDC 537.52:519.624

MATHEMATICAL MODELLING OF RF PLASMA AT LOW PRESSURES FOR CYLINDRIC VACUUM CHAMBER WITH CHARGED SPECIMAN

A. Yu. Shemakhin

Cand. Sci., Assoc. Prof. of Department of Radiophysics of Institute of Physics,
e-mail: shemakhin@gmail.com

V. S. Zheltukhin

D.Sc., Senior Fellow of Institute of Physics,
Kazan Federal University,
420008 Kazan, Kremlyovskaya st., 18,
Professor of Department of Technical Physics,
Kazan State Technical University,
420015 Kazan, Karl Marx st., 68
e-mail: vzheltukhin@gmail.com

E. Yu. Shemakhin

Cand. Sci., Senior Researcher of Institute of Physics,
e-mail: shupachet@gmail.com

Kazan Federal University
420008, Kazan, Kremlyovskaya st., 18

Abstract. A hybrid mathematical model for the Knudsen numbers $8 \cdot 10^{-3} - 7 \cdot 10^{-2}$ for the carrier gas has been developed to simulate processes in a low pressure RF plasma with gas flow. The model includes an initial boundary value problem for the kinetic Boltzmann equation describing the distribution function of the carrier neutral gas, boundary value problems for the continuity equation of the electronic, ionic and metastable components, the electron energy conservation equations, for Maxwell's RF equations in the form of telegraphic equations and the Poisson equation for the potential part of field. The results of the calculation of the electric intensity, the concentration of electrons, ions and metastables, the potential component of the electromagnetic field in a cylindrical vacuum chamber are presented.

Keywords: ICRF plasma, jet stream, low pressure, metastables, hybrid model.

Acknowledgments. The research was carried out with the financial support of the Russian Science Foundation (project No. 19-71-10055).

REFERENCES

1. Abdullin I.Sh., Zheltukhin V.S., Kashapov N.F. Vysokochastotnaya plazmenno-struynaya obrabotka materialov pri ponizhennykh davleniyakh: Teoriya i praktika primeneniya [High-frequency plasma jet treatment of materials at reduced pressures: Theory and practice of

- application]. Kazan': Izd-vo Kazan. tekhnol. un-ta= Kazan Publishing House. un-that. 2000. 348 p. (in Russian).
2. Shemakhin A.Yu, Zheltukhin V.S. Mathematical modelling of RF plasma flow at Low Pressures with 3D Electromagnetic Field // *Advances in Materials Science and Engineering*. 2019. No. 7120217. DOI: 10.1155/2019/7120217.
 3. OpenFOAM [Package OpenFOAM]. Available at: <https://openfoam.org/> (accessed 01.10.2021) (in Russian).
 4. BOLSIG+. Electron Boltzmann equation solver. Available at: <http://www.bolsig.laplace.univ-tlse.fr/> Latest version: 12/2019 (beta) (accessed 01.10.2021).
 5. Boeuf J.P., Pitchford L.C. Two-dimensional model of a capacitively coupled RF discharge and comparisons with experiments in the Gaseous Electronics Conference reference reactor // *Phys. Rev. E*, 1995. Vol. 51. №. 2. Pp. 1376–1390. DOI: 10.1103/PhysRevE.51.1376.
 6. 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. Vol. 14. Pp. 722-733. DOI: 10.1088/0963-0252/14/4/011.
 7. UBC database, Database of scattering cross sections. Available at: www.lxcat.net (accessed 01.12.2019).

Статья поступила в редакцию 03.12.2021; одобрена после рецензирования 15.12.2021; принята к публикации 20.12.2021.

The article was submitted 03.12.2021; approved after reviewing 15.12.2021; accepted for publication 20.12.2021.