

УДК 533.9

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНДУКЦИОННО-СВЯЗАННОЙ ПЛАЗМЫ ПОНИЖЕННОГО ДАВЛЕНИЯ С ПОТЕНЦИАЛОМ СМЕЩЕНИЯ И РАСХОДОМ ГАЗА

© 2024 г. А. Ю. Шемахин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

e-mail: shemakhin@gmail.com

Поступила в редакцию 19.05.2023 г.

После доработки 10.10.2023 г.

Принята к публикации 18.10.2023 г.

Численно исследована зависимость параметров индукционно-связанной плазмы аргона при пониженном давлении (13.3–113 Па) и частоте поля 13.56 МГц от приложенного к электроду потенциала и от расхода газа до 4000 ссст. Модель разработана в среде COMSOL Multiphysics и верифицирована с экспериментальными данными, а также по числу Кнудсена. В результате численного эксперимента выявлено: при линейном увеличении потенциала смещения экспоненциально увеличивается концентрация заряженных частиц и наблюдается несущественный прирост температуры электронов; при линейном увеличении расхода газа экспоненциально растет концентрация заряженных частиц, концентрация возбужденных состояний имеет экстремум при 2000 ссст, температура газа и электронов растет линейно.

Ключевые слова: математическое моделирование, индукционно-связанная плазма, ВЧИ-разряд, COMSOL, комбинированный ВЧ-разряд

DOI: 10.31857/S0367292124010074 EDN: SJVJCE

ВВЕДЕНИЕ

Существует ряд исследований, в которых используется индукционно-связанная плазма (ИСП) с приложенным потенциалом смещения к подложке образца для увеличения энергии заряженных частиц [1–7]. Соединение ИСП с приложенным потенциалом образует комбинированный емкостной и высокочастотный индукционный (ВЧИ) разряд [3]. Комбинированная плазма обладает положительными свойствами объединенных типов разрядов: высокая температура электронов и чистота плазмы от ИСП, смещение заряженных частиц и контроль концентрации ионов с помощью приложенного напряжения к электроду — от емкостного разряда.

Зависимость параметров плазмы от приложенного потенциала уже исследовалась во множестве публикаций.

В работе [5] моделировали ВЧИ-разряд с потенциалом смещения, и был получен экспоненциальный рост концентрации электронов в зависимости от потенциала, однако последний был приложен к индуктору, что не позволяет добиться смещения заряженных частиц.

В работе [7] исследована зависимость параметров комбинированного разряда от давления 0.4 и 20 Па с потенциалом смещения, однако сам потенциал не изменялся.

В работе [8] проведено моделирование зависимости ВЧИ плазмы с потенциалом смещения от –100 до –300 В при давлениях 0.1–10 Па с плоским индуктором. При увеличении модуля потенциала смещения поток ионов на подложку возрастал, однако в работе не приведены концентрации заряженных частиц.

В работе [9] численно исследована зависимость энергии ионов аргона и кислорода от потенциала смещения на индукторе. В результате расчетов энергия ионов возрастает с повышением потенциала смещения.

Еще одним способом вывода заряженных частиц из плазменного сгустка ВЧИ-разряда является их сдвиг потоком газа [10–12]. Данный способ сдвига в совокупности с приложенным потенциалом смещения зачастую используется в реактивном ионном травлении [13–23].

Поток ВЧ-плазмы был численно исследован в работах [24–29].

В работе [30] исследовали температуру нейтрального газа и скорость потока в зависимости от расхода газа при атмосферном давлении. В результате сопоставлены подходящие значения расхода газа и диаметра сопла для получения оптимальных характеристик разряда, однако не проведены исследования

зависимости концентрации заряженных частиц от расхода газа.

Была представлена также модель с расходом газа [31], но, как и в работе [30], изучали ИСП атмосферного давления без расчетов концентраций электронов, ионов и метастабильных состояний атомов.

На основе проведенного обзора видно, что в перечисленных работах зависимости параметров ВЧИ-плазмы, таких как концентрации электронов, ионов, возбужденных состояний атома и температуры от приложенного потенциала и расхода газа, изучены недостаточно хорошо. К тому же большинство работ по исследованию зависимости от потенциала смещения посвящены установкам с плоским индуктором; эффекты, связанные с приложенным потенциалом смещения в геометрии с соленоидальной катушкой, остаются весьма плохо изученными.

Данная работа посвящена численному исследованию влияния потенциала смещения на электроде и расхода газа на индукционно-связанную плазму пониженного давления в геометрии с соленоидальным индуктором. Такие параметры выбраны для верификации разработанной модели с экспериментальной работой [1].

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО ИНДУКЦИОННОГО РАЗРЯДА

Двумерная осесимметричная модель индуктивно-связанной плазмы разработана с помощью пакета COMSOL multiphysics. Модель состоит из уравнений Навье—Стокса (модуль laminar flow), модифицированных уравнений Максвелла (модуль magnetic fields); уравнений для плотности электронов, плотности энергии электронов и плотности возбужденных состояний.

Использована упрощенная схема атома аргона, в которой четыре низших близко расположенных электронно-возбужденных состояния (два метастабильных и два резонансных состояния) заменены единым уровнем с концентрацией n_m . Такая схема часто используется при моделировании аргоновой плазмы и обоснована эффективным перемешиванием этих уровней электронным ударом [32].

Схема установки и расчетная область представлены на рис. 1.

2.1. Моделирование течения плазмообразующего газа

Для рассматриваемых в настоящей работе расходов газа до 8000 ссст число Рейнольдса не превы-

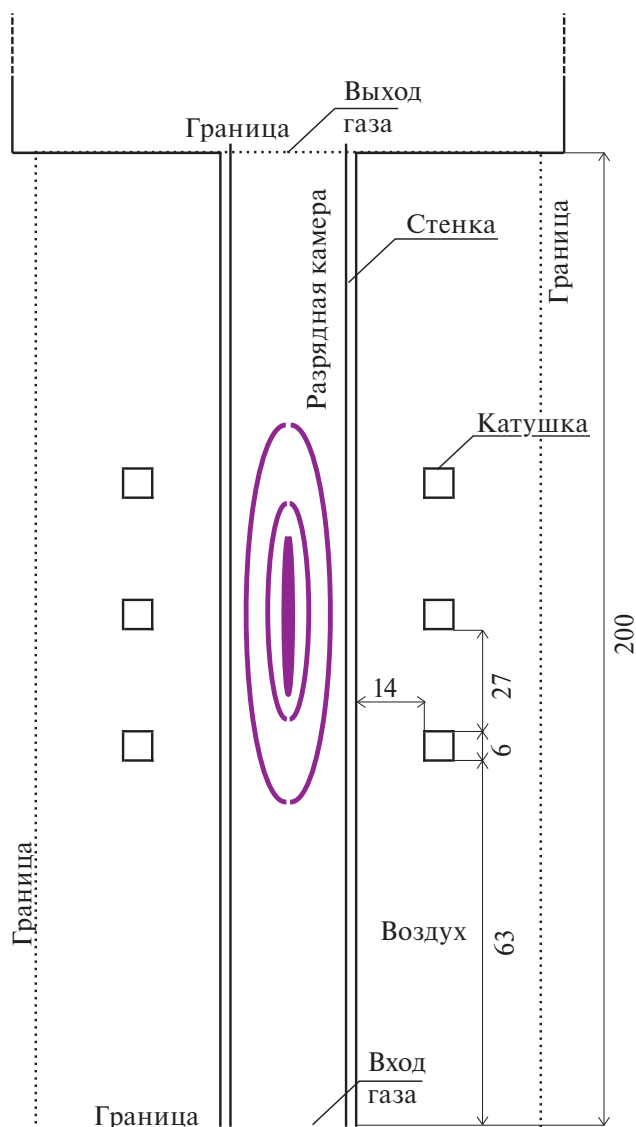


Рис. 1. Схема установки, обозначения границ и геометрия расчетной области двумерной осесимметричной модели. Размеры даны в мм, подача аргона проходит с нижнего торца трубки, на верхнем торце задано постоянное давление (граничное условие откачки газа). Фиолетовыми линиями схематично изображен плазменный стусок.

шает 10, поэтому течение плазмообразующего газа моделируется с помощью модуля Laminar Flow. Газодинамика модели основана на уравнениях Навье—Стокса для сжимаемых потоков (число Маха < 0.3):

$$\nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mathbf{K}] = 0, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (\rho_n \mathbf{v}) = 0, \quad (2)$$

$$\mathbf{K} = \mu(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \mathbf{v})\mathbf{I}, \quad (3)$$

плотность рассчитывается из уравнения Менделеева—Клайперона:

$$\rho_n = \frac{pM_n}{RT}. \quad (4)$$

Здесь $\mathbf{I}$ — единичный тензор, p — давление, ρ_n — плотность газа, $\mathbf{v}$ — скорость газа, μ — динамическая вязкость, R — газовая постоянная, M_n — молярная масса.

Граничные условия для уравнений Навье—Стокса следующие. На границе inlet рассчитывается граничная скорость газа из значения массового расхода газа

$$-\int_{\partial\Omega} \rho_n (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS = m, \quad (5)$$

где m — массовый поток газа, $\mathbf{n}$ — вектор нормали, $\mathbf{v}$ — вектор скорости потока, задаваемый пуазейлевским профилем течения.

На границе outlet установлено постоянное давление в диапазоне 13.3–113 Па.

2.2. Модель высокочастотного электромагнитного поля

Для приведения периодичных во времени уравнений Максвелла, решаемого COMSOL multiphysics (модуль Magnetic Fields), используется модифицированный закон Ампера, включающий в себя токи смещения:

$$\begin{aligned} (-i\omega\sigma - \omega^2\varepsilon_0)\mathbf{A} + \nabla \cdot (\mu^{-1}\nabla \cdot \mathbf{A} - \mathbf{M}) - \\ - \sigma\mathbf{v} \cdot (\nabla \cdot \mathbf{A}) = 0, \\ -\mathbf{E}_{\text{curl}} = -i\omega\mathbf{A}, \end{aligned} \quad (6)$$

где i — мнимая единица, ω — циклическая частота, σ — электропроводность, ε_0 — электрическая постоянная, $\mathbf{A}$ — векторный потенциал, μ_0 — магнитная постоянная, $\mathbf{M}$ — вектор намагниченности, $\mathbf{J}_e$ — плотность тока, $\mathbf{E}_{\text{curl}}$ — вихревая составляющая напряженности электрического поля.

Данные уравнения имеют следующее граничное условие (на границе ins, см. рис. 1):

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (7)$$

2.3. Моделирование динамики плазмы

Следующие уравнения были введены с использованием интерфейса PDE в пакете COMSOL multiphysics. Используется предположение о максвелловской функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ). Оценки отклонения ФРЭЭ от максвелловской, выполненные с учетом влияния электромагнитного поля и представления в виде суммы максвелловской части f_{00} и полевой f_1 [33], показали, что для частоты 13,56 МГц отклонение от

максвелловской ФРЭЭ не превышает 10% при частоте соударений 10^8 Гц. Поэтому использование ФРЭЭ Максвелла в расчетах считаем допустимым [34].

Уравнения для плотности электронов, энергии электронов и возбужденных состояний имеют следующий вид:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \Gamma_e = R_e - \nabla \cdot (\mathbf{v}n_e), \quad (8)$$

$$\frac{\partial n_\varepsilon}{\partial t} + \nabla \Gamma_\varepsilon = S_{en} - \nabla \cdot (\mathbf{v}n_\varepsilon) + \sigma E^2 n_e / e, \quad (9)$$

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \nabla \Gamma_p = R_e - \nabla \cdot (\mathbf{v}n_p), \quad (10)$$

$$\frac{\partial n_m}{\partial t} - \nabla D_m \nabla n_m = v_{c2}n_e - v_{c4}n_m - \nabla \cdot (\mathbf{v}n_e), \quad (11)$$

$$\rho_n C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_n C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T + \nabla \cdot \mathbf{q}_{\text{hf}} = Q. \quad (12)$$

Здесь C_p — теплоемкость несущего газа, $\mathbf{q}_{\text{hf}}$ — вектор потока тепла, Q — источник тепла. Вектор скорости $\mathbf{u}$ получен из уравнений Навье—Стокса (3), n_e — плотность электронов, n_p — плотность ионов, t — время, $R_e = v_{c3}n_e + v_{c4}n_m$ — источник электронов, который представляет собой сумму реакций ионизации; v_{c3} , v_{c4} — частоты ионизации для реакции 3 и 4 (табл. 1), n_m — плотность возбужденных состояний, $n_\varepsilon = (3/2)kT_e n_e$ — плотность энергии электронов, $S_{en} = v_c \delta_{\varepsilon 1} n_e + v_{c2} \delta_{\varepsilon 2} n_e + v_{c3} \delta_{\varepsilon 3} n_e + v_{c4} \delta_{\varepsilon 4} n_m$ — потеря энергии электронов, которая представляет собой сумму потерь энергии при столкновениях во всех реакциях, $\delta_{\varepsilon 2-4}$ — потеря энергии для соответствующей реакции, n_c — частота упругих столкновений, k — постоянная Больцмана, T — температура несущего газа (в данной модели начальная температура $T = 300$ К), e — элементарный заряд, D_m — коэффициент диффузии возбужденных атомов. Потоки Γ_e , Γ_p и Γ_ε имеют вид

$$\Gamma_e = -(\mu_e \mathbf{E}_p) n_e - D_e \nabla n_e, \quad (13)$$

$$\Gamma_p = (\mu_p \mathbf{E}_p) n_p - D_p \nabla n_p, \quad (14)$$

$$\Gamma_\varepsilon = -(\mu_\varepsilon \mathbf{E}_p) n_\varepsilon - D_\varepsilon \nabla n_\varepsilon, \quad (15)$$

где E_p — потенциальная составляющая электрического поля (считается, что усреднение по времени по вихревому электрическому полю дает ноль), μ_e — подвижность электронов, D_e — коэффициент диффузии электронов, μ_p — подвижность ионов, D_p — коэффициент диффузии ионов, μ_ε — коэффициент пропорциональности между дрейфовым переносом энергии и приложенным электрическим полем

Таблица 1. Используемые при моделировании реакции (сверху вниз: столкновение, возбуждение, ионизация в основном состоянии, ступенчатая ионизация). Ar^* относится к возбужденным состояниям $\text{Ar}(4s)$. Для каждой реакции приведены потери энергии $\Delta\epsilon_j$ [эВ] и частота реакции ν_{cj} [1/с], ($j=1, 2, 3, 4$).

Процесс	Реакция	$\Delta\epsilon_j$ [эВ]	ν_{cj}
Упругие соударения	$e + \text{Ar} \rightarrow e + \text{Ar}$	—	ν_c
Первичное возбуждение	$e + \text{Ar} \rightarrow e + \text{Ar}^*$	11.55	ν_{c2}
Первичная ионизация	$e + \text{Ar} \rightarrow 2e + \text{Ar}^+$	15.76	ν_{c3}
Ступенчатая ионизация	$e + \text{Ar}^* \rightarrow 2e + \text{Ar}^+$	4.21	ν_{c4}

(энергетическая подвижность), D_ϵ — коэффициент диффузии энергии электронов.

На стенке разрядной трубки wall граничные условия для потоков частиц и энергии выглядят следующим образом:

$$n \cdot \Gamma_e = \left(\frac{1}{2} \nu_e n_e \right) - \sum \gamma_j (\Gamma_j \cdot n), \quad (16)$$

$$n \cdot \Gamma_\epsilon = \left(\frac{5}{6} \nu_e n_\epsilon \right) - \sum \gamma_j \epsilon_j (\Gamma_j \cdot n), \quad (17)$$

$$-n \cdot \rho \omega_p (\nu_p + u) = \Gamma_p, \quad (18)$$

где ν_e — средняя хаотическая скорость электрона, ν_p — мультикомпонентная скорость диффузии для ионов, ω_p — массовая доля ионов, ρ — плотность смеси, γ_j — коэффициент вторичной эмиссии электронов с поверхности, n — единичный вектор нормали, ϵ — средняя энергия. На выходной границе outlet разрядной области формулируются “мягкие” краевые условия

$$n \cdot \Gamma_e = 0, \quad (19)$$

$$n \cdot \Gamma_\epsilon = 0, \quad (20)$$

$$-n \cdot \rho \omega_p \nu_p = 0. \quad (21)$$

Граничные условия для заряда:

$$n \cdot D = 0. \quad (22)$$

Здесь D — вектор электрического смещения.

Начальные условия задаются следующим образом: $n_e(0, \mathbf{r}) = 10^{15} \text{ м}^{-3}$, $n_p(0, \mathbf{r}) = 10^{15} \text{ м}^{-3}$, $n_m(0, \mathbf{r}) = 10^{15} \text{ м}^{-3}$, $n_\epsilon(0, \mathbf{r}) = 3 \cdot 10^{15} \text{ эВ/м}^3$.

Ключевым моментом в исследовании расчетной модели является описание реакций, проходящих в плазменной системе и при движении плазменного потока, а также компонентов этих реакций. Ключевой тип реакции — столкновение электронов с тяжелыми частицами, который задается в узлах electron

impact reaction. В программу задается химическая формула соответствующего типа реакции, скорость реакции зависит от порядка реакции и молярной концентрации каждого вида. В компактной форме уравнение для j -й скорости реакции выглядит следующим образом:

$$r_j = k_{f,j} \prod_{k=1}^Q c_k^{\nu_{k,j}}, \quad (23)$$

$$k_f = \gamma \int_0^\infty \epsilon \sigma_k(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon, \quad (24)$$

где c_k — молярная концентрация образца k [моль/м³], $k_{f,j}$ — коэффициент скорости j -й реакции (в [1/с] для первого порядка реакций, [м³/(моль·с)] для реакций второго порядка или [м⁶/(моль²·с)] для реакций третьего порядка), $n_{k,j}$ — стехиометрическая матрица, соответствующая прямым реакциям, $\gamma = \sqrt{2e/m_e}$, σ_k — сечение столкновений k -й реакции, $f(\epsilon)$ — функция распределения.

Коэффициенты переноса электронов и ионов рассчитываются с помощью функции распределения электронов по энергиям

$$D_e = \frac{\gamma}{3N_n} \int \frac{\epsilon}{\sigma_{cs}(\epsilon)} f(\epsilon) d\epsilon, \quad (25)$$

$$\mu_e = -\frac{\gamma}{3N_n} \int \frac{\epsilon}{\sigma_{cs}(\epsilon)} \frac{df(\epsilon)}{d\epsilon} d\epsilon, \quad (26)$$

$$D_p = \frac{k_B T_a \mu_p}{e}, \quad (27)$$

$$\mu_p = \frac{e}{m_a \nu_{cp}}, \quad (28)$$

где $\gamma = \sqrt{2e/m_e}$, m_e — масса электрона, $N_n = p/(kT)$ — концентрация нейтрального газа, e — энергия электронов, $\sigma_{cs}(\epsilon)$ — транспортное сечение рассеяния электронов на атомах, зависящее от энергии, из базы данных PHELPS [35], ν_{cp} — частота упругих соударений ионов с нейтральными атомами, $f(\epsilon)$ — функция распределения электронов по энергии (ФРЭЭ).

Для энергии электронов и компонент переноса возбужденных состояний, рассчитанных из μ_e и температуры электронов T_e , выражения выглядят следующим образом:

$$\mu_\epsilon = \frac{5}{3} \mu_e, \quad (29)$$

$$D_\epsilon = \mu_\epsilon T_e, \quad (30)$$

$$D_m = \frac{kT}{m_a \nu_c}, \quad (31)$$

где $T_e = 2/3\langle\epsilon\rangle$, $\langle\epsilon\rangle = n_e/n_e$ — средняя энергия и $m_a = 6.68 \cdot 10^{-26}$ кг — масса аргона.

Частота упругих столкновений, используемая для расчета n_e также получена из ФРЭЭ и данных поперечного сечения

$$v_c = \gamma N_n \int \epsilon \sigma_{cs}(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon, \quad (32)$$

$$v_{c2} = \gamma N_n \int \epsilon \sigma_{cs2}(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon, \quad (33)$$

$$v_{c3} = \gamma N_n \int \epsilon \sigma_{cs3}(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon, \quad (34)$$

$$v_{c4} = \gamma n_m \int \epsilon \sigma_{cs4}(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon. \quad (35)$$

Частоты упругих и неупругих столкновений вычисляются по формулам (32)–(35). $\sigma_{cs}(\epsilon)$ — $\sigma_{cs4}(\epsilon)$ — функции поперечных сечений реакций, указанных в табл. 1.

ФРЭЭ рассчитывается с использованием распределения Максвелла

$$f(\epsilon) = \langle\epsilon\rangle^{-3/2} \beta_1 \exp\left(\frac{-\epsilon\beta_2}{\langle\epsilon\rangle}\right), \quad (36)$$

$$\beta_1 = 3^{3/2} 2^{-1/2} \pi^{-1/2}, \quad (37)$$

$$\beta_2 = 3/2, \quad (38)$$

Электропроводность в области разряда рассчитывается по формуле

$$\sigma = \frac{e^2 n_e}{m_e (v_c + i\omega)}, \quad (39)$$

где $i\omega$ — мнимая часть угловой частоты тока на катушке.

Потенциальная компонента напряженности электрического поля $\mathbf{E}_p$ рассчитывается из уравнения Пуассона

$$\rho_q = e(n_i - n_e),$$

$$\nabla^2 \phi = -\rho_q / \epsilon_0, \quad (40)$$

$$\mathbf{E}_p = -\nabla \phi.$$

Здесь ρ_q — плотность заряда, ϕ — потенциал, ϵ_0 — электрическая постоянная.

Граничные условия для уравнения Пуассона записываются в следующем виде. На диэлектрической стенке wall $-\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = \sigma_s$, и решается уравнение

$$\frac{\partial \sigma_s}{\partial t} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{j}_i + \mathbf{n} \cdot \mathbf{j}_e, \quad (41)$$

где σ_s — плотность поверхностного заряда, $\mathbf{j}_i = e\mathbf{\Gamma}_i$, $\mathbf{j}_e = e\mathbf{\Gamma}_e$; на границе inlet $\mathbf{n} \cdot \mathbf{E}_p = 0$ и outlet $\phi_{outlet} = V_{shift}$, т. е. задается потенциал смещения.

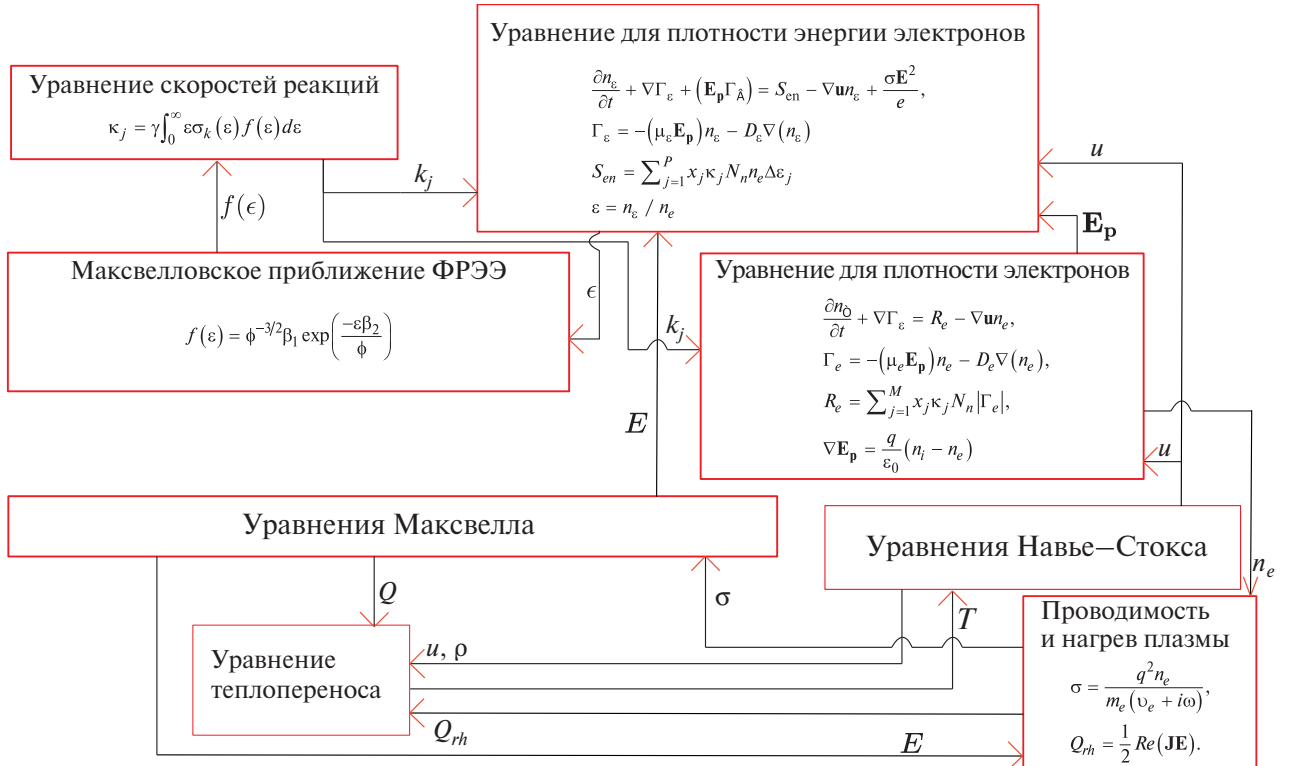


Рис. 2. Блок-схема численной модели. Основные уравнения приведены в блоках, каждый блок принимает на вход определенный набор переменных и выдает результаты расчетов в виде следующих переменных. Стрелками обозначены переходы из одного блока уравнений в другой.

3. АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ

Алгоритм решения уравнений модели представлен на рис. 2. Каждый блок состоит из уравнений, которые решаются в нем для каждой ячейки в сетке модели. Стоит отметить, что приведены лишь основные уравнения, чтобы не перегружать блок-схему. Переменные, получаемые при решении уравнений переходят из блока в блок, таким образом модель получается самосогласованной.

Рассмотрим схему подробнее. Учтем, что в начале расчета заданы значения тока на индукторе, давления, частоты тока, граничные условия и начальные приближения. Тогда из блока *Уравнения Максвелла* (модуль *Magnetic Fields*) мы получаем вихревую компоненту электрического поля $\mathbf{E}$, которая подается на вход *Уравнения для плотности энергии электронов*, откуда мы получаем значение n_e . Решаются уравнение для плотности электронов, ионов и уравнение Пуассона, находящиеся в блоке *Уравнение на плотность электронов*.

Далее определяется средняя энергия ε , с помощью нее вычисляются ФРЭЭ и частоты столкновений, ионизации и возбуждения атомов. Дополнительно, рассчитав проводимость плазмы в блоках *Проводимость и нагрев плазмы*, *Уравнения Навье–Стокса* и *Уравнение теплопереноса*, можно получить значение удельной мощности разряда Q_r и параметров s , p и v , T ; итерация завершается.

4. РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ПЛАЗМЫ ПРИ ПОНИЖЕННОМ ДАВЛЕНИИ С ПОТЕНЦИАЛОМ СМЕЩЕНИЯ И ПОТОКОМ ГАЗА

4.1. Геометрия расчетной области

Были проведены расчеты параметров плазмы с помощью пакета Comsol multiphysics [36] в двумерной осесимметричной постановке с учетом приложенного потенциала на верхнем фланце камеры, а также с потоком нейтрального газа вдоль разрядной трубки. Разрядная трубка представляет собой цилиндр высотой 200 мм, радиусом 12 мм с кварцевой стенкой толщиной 2 мм и трехвитковым индуктором с диаметром катушки 4 мм. Для упрощения построения сетки индуктор задан в виде трех колец с квадратным сечением.

Геометрия расчетной области изображена на рис. 1. Разряд моделировался при следующих параметрах: газ аргон, частота тока на индукторе 13.56 МГц, мощность на индукторе 1300 Вт.

Геометрия разделена на несколько расчетных областей: внутренняя часть трубки, заполненная аргоном, ее кварцевые стенки, медный индуктор и окружающая среда, заполненная воздухом. Внутренняя часть трубки и стенка разбиты на квадратные элементы с размером стороны в 1 мм, индуктор и окружающая среда имеют шаг сетки в 2 мм.

Проведены были численные эксперименты в двух вариантах:

1) с различными значениями потенциала смещения, поданного на верхний фланец, вследствие чего увеличивается z -компонента потенциального электрического поля $E_{p,z}$;

2) с различными значениями потока газа, продуваемого через трубку, что увеличивает z -компоненту скорости газа v_z .

Целью этих экспериментов было выявление зависимостей концентрации заряженных частиц и их температуры от данных параметров $E_{p,z}$ и v_z .

4.2. Моделирование с потенциалом смещения на границе

В первой серии экспериментов на верхнем фланце задавался потенциал смещения ϕ в диапазоне от -8 до 3 В относительно кварцевой стенки. Данное смещение вносит вклад в напряженность электрического поля $E_{p,z}$ (уравнение (40)), вследствие чего заряженные частицы приобретают дополнительную скорость по полю или против поля в зависимости от знака заряда частицы. Данный эффект объясняется увеличением дрейфового потока $\mu_{e,i} E_p n_{e,i}$ и, следовательно, относительным уменьшением диффузионного потока $D_{e,i} \nabla n_{e,i}$ в уравнениях для n_e , n_i (8).

Распределение аксиальной компоненты потенциального поля $E_{p,z}$ вдоль оси z показано на рис. 3. Поле $E_{p,z}$ изменяется на расстоянии 10 мм от выходного отверстия плазматрона, вследствие чего изменения концентрации электронов и ионов приходится на малую часть от всей расчетной области.

Зависимость концентрации частиц от приложенного потенциала показана на рис. 4. Как видно на графике, при повышении потенциала, концентрация электронов и ионов увеличивается экспоненциально. Причем концентрация электронов n_e при $\phi > 0$ увеличивается быстрее, чем ионов n_i . Следует отметить, что при $\phi < 0$ n_i имеют большую концентрацию, чем n_e .

Также установлено, что потенциал смещения на концентрации возбужденных и нейтральных частиц

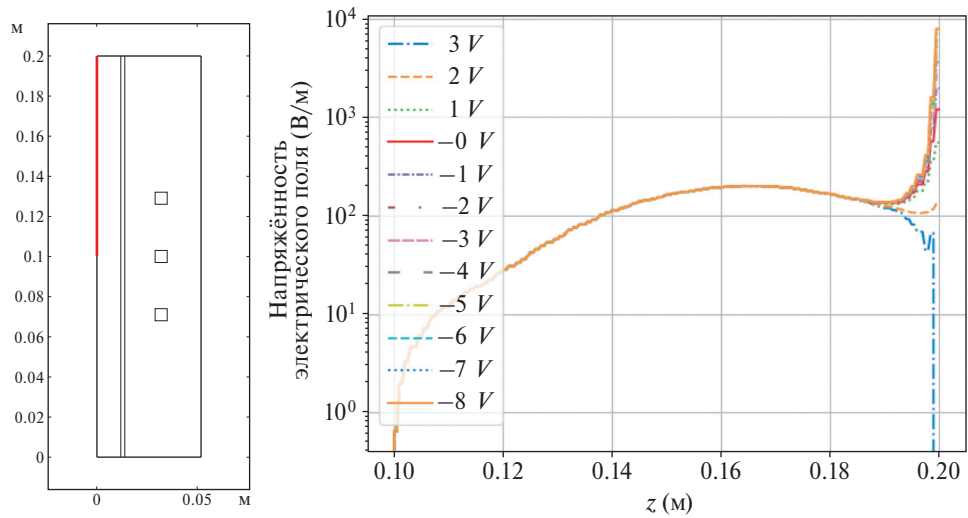


Рис. 3. Область распределения (а), распределение напряженности потенциального поля $E_{p,z}$ вдоль разрядной трубки при разных значениях потенциала смещения φ на верхней границе (б).

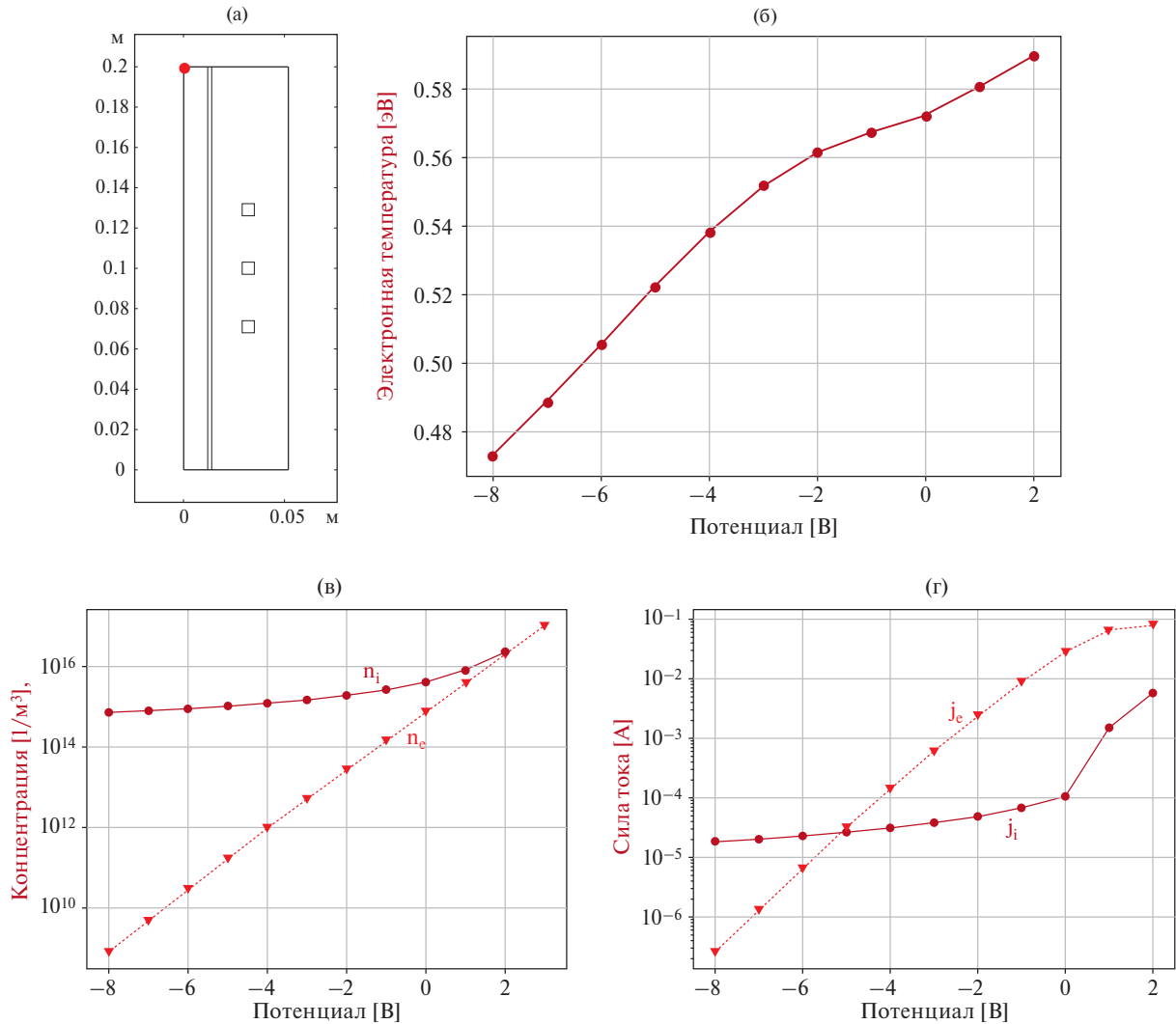


Рис. 4. Область распределения (а), зависимость температуры электронов на выходе разрядной трубки от потенциала смещения φ на верхней границе (б).

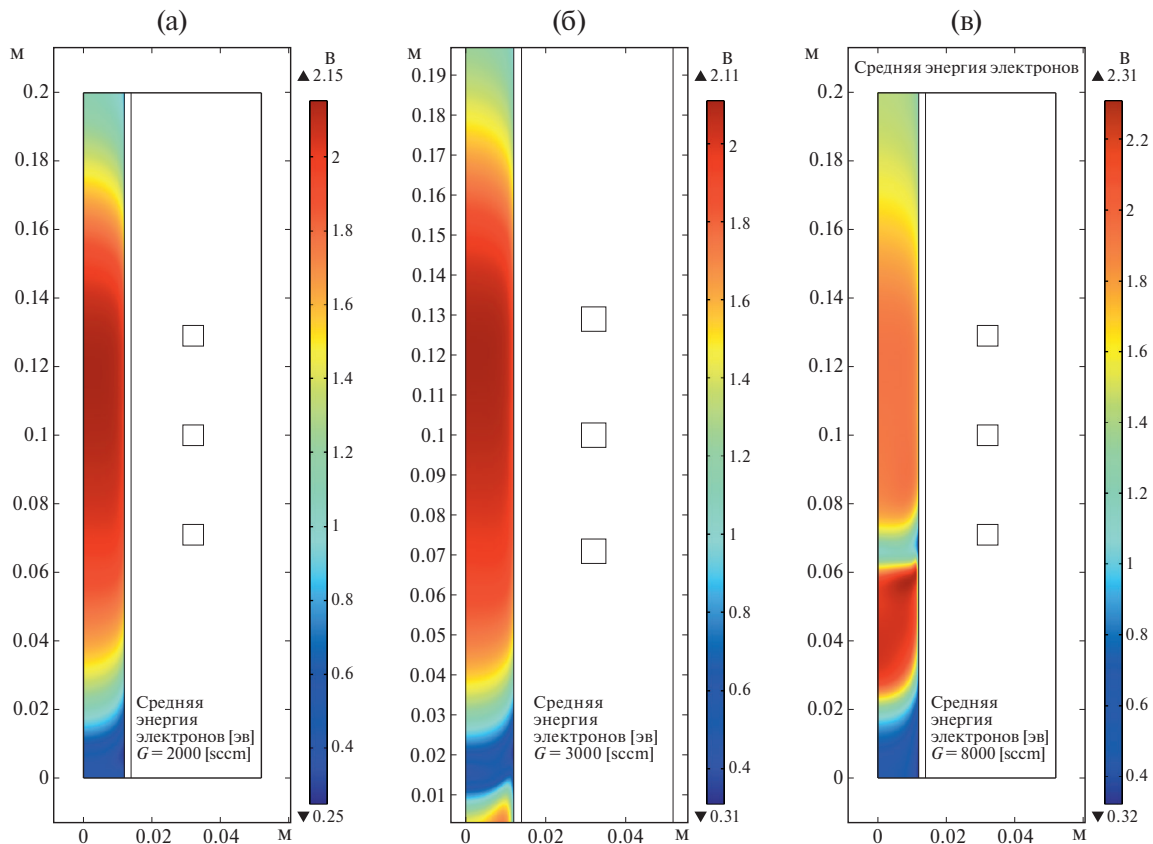


Рис. 5. Пространственное распределение средней энергии электронов $\langle \epsilon \rangle$ при расходе газа $G=2000$ sccm (а), $G=3000$ sccm (б), $G=8000$ sccm (в).

не влияет, вследствие чего не меняется и температура газа.

4.3. Верификация модели по потоку газа

Концентрация ионов и электронов имеют почти один и тот же вид из-за того, что при сдвиге ионов потоком газа создается разность потенциалов, вследствие чего электроны устремляются за ионами.

Концентрации n_e , n_i монотонно увеличиваются с увеличением расхода газа G . Увеличение концентрации электронов при $G > 4000$ sccm в модели обусловлено ростом средней энергии электронов, вследствие чего увеличивается число ионизованных частиц. В то же время экспериментальные данные [1] показывают, что начиная с расхода $G=4000$ sccm, концентрация электронов не растет, а начиная с $G=7500$ sccm падает.

Таким образом, рассмотренная модель корректно описывает характеристики разряда до $G > 4000$ sccm [26].

На рис. 5б видно, что при высоких значениях расхода газа ($G > 3000$) появляется дополнительный плазменный сгусток, который отсутствует при низ-

ких расходах газа (рис. 5а). Данный артефакт и вносит поправку в концентрацию электронов на выходе из плазмотрона (рис. 10).

На рис. 6 видно, что при $G=8000$ sccm соотношение числа Дебая к диаметру разрядной камеры $\gg 0.1$, а при $G=2000$ sccm соотношение числа Дебая к диаметру разрядной камеры не превышает 0.1. В применяемой модели соотношение числа Дебая к диаметру разрядной камеры превышает 0.1 в некоторых точках расчетной области уже с $G=3000$ sccm, чем объясняется появление артефакта на рис. 5б и 5в. Это явление объясняется тем, что в начале разрядной трубки концентрация заряженных частиц мала, что видно на рис. 11, и вследствие этого увеличивается длина Дебая.

На рис. 7 видно, что при $p = 53$ Па максимальное число Кнудсена для плазмообразующего газа (аргон) 0.0167, при $p = 26$ Па максимальное число Кнудсена равно 0.0279, а при $p = 13$ Па максимальное число Кнудсена достигает 0.0514.

Заметим, что мы вычисляли число Кнудсена в зависимости от поперечного размера частицы по формуле $Kn = k_B T / (\sqrt{2} \pi \sigma^2 p L)$. Здесь T — температура несущего газа, σ — поперечный размер частицы,

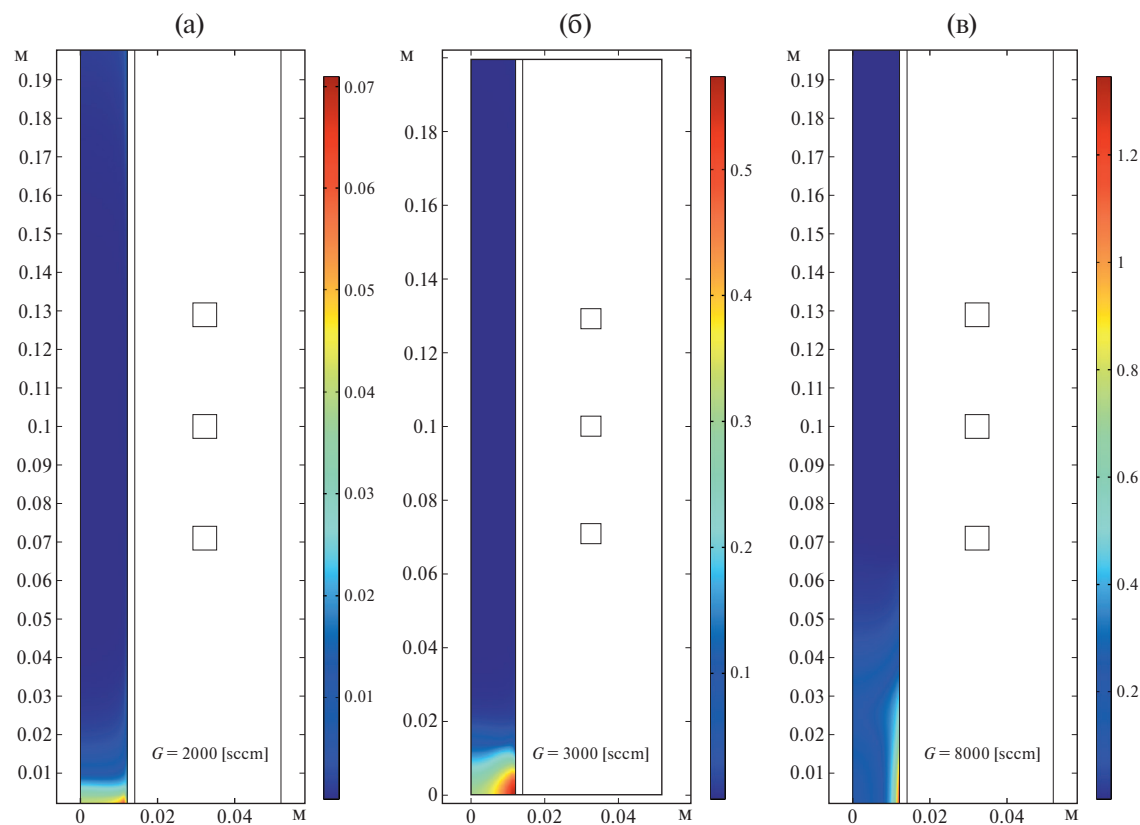


Рис. 6. Соотношение числа Дебая к диаметру разрядной камеры при расходе газа $G=2000$ sccm (а), $G=3000$ sccm (б), $G=8000$ sccm (в).

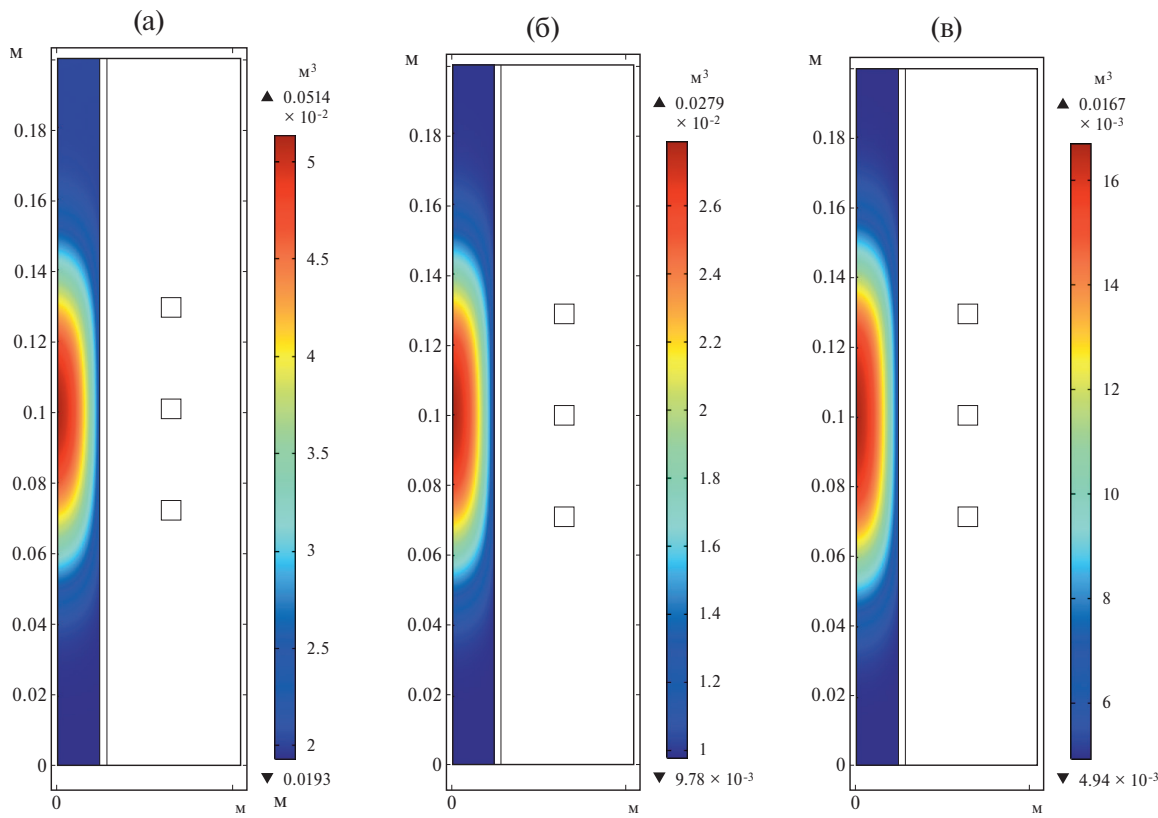


Рис. 7. Число Кнудсена Kn в безрасходном режиме при $p=13$ Па (а), $p=26$ Па (б), $p=53$ Па (в).

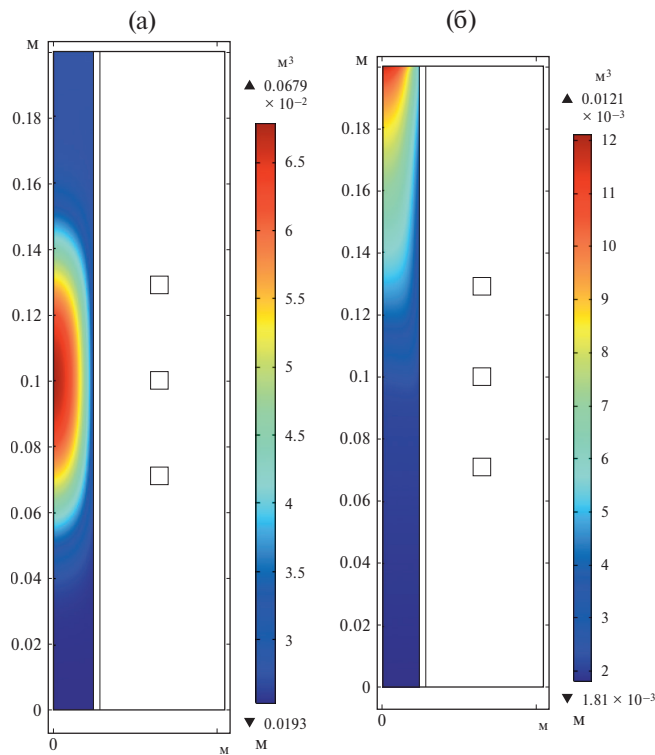


Рис. 8. Число Кнудсена Kn при $p = 9.65$ Па (а), $p = 53$ Па (б) и расходе 8000 сссм.

который в различных базах и справочниках варьирует от 142 до 384 пм для аргона; p — давление несущего газа, L — диаметр разрядной камеры. Поэтому, оценка числа Кнудсена имеет приближенный характер.

Практические численные эксперименты в пакете Comsol [36] показали, что численный метод решения системы уравнений расходится при давлении ниже 9.65 Па (рис. 8), а с увеличением расхода газа число Kn падает по сравнению с безрасходным режимом течения.

Полученные числа Кнудсена входят в разрешенные к расчету в пакете Comsol [36] для режима течения с проскальзыванием ($Kn < 0.1$), т.е. можно считать для рассматриваемых режимов течения и радиуса разрядной камеры минимально возможное расчетное давление — 9.65 Па. Основные закономерности, описанные выше, подтверждаются экспериментальными данными, полученными при расходах $G = 0 - 3000$ сссм.

4.4. Моделирование с потоком нейтрального газа

Вторая серия численных экспериментов заключалась в увеличении потока нейтрального газа вдоль разрядной трубки. Для моделирования потока газа, на границе inlet задается объемный расход газа G ,

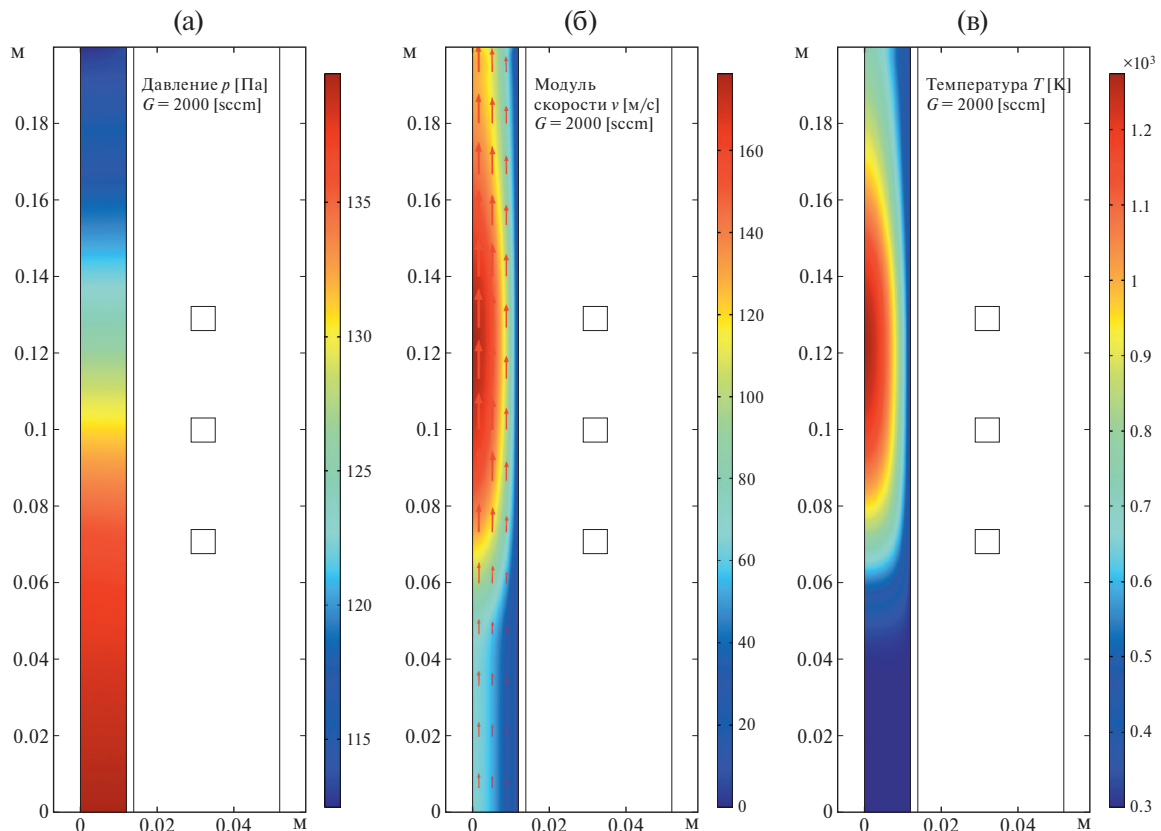


Рис. 9. Пространственное распределение давления p (а), модуля скорости v (б) и температуры газа (в) при расходе газа $G = 2000$ сссм.

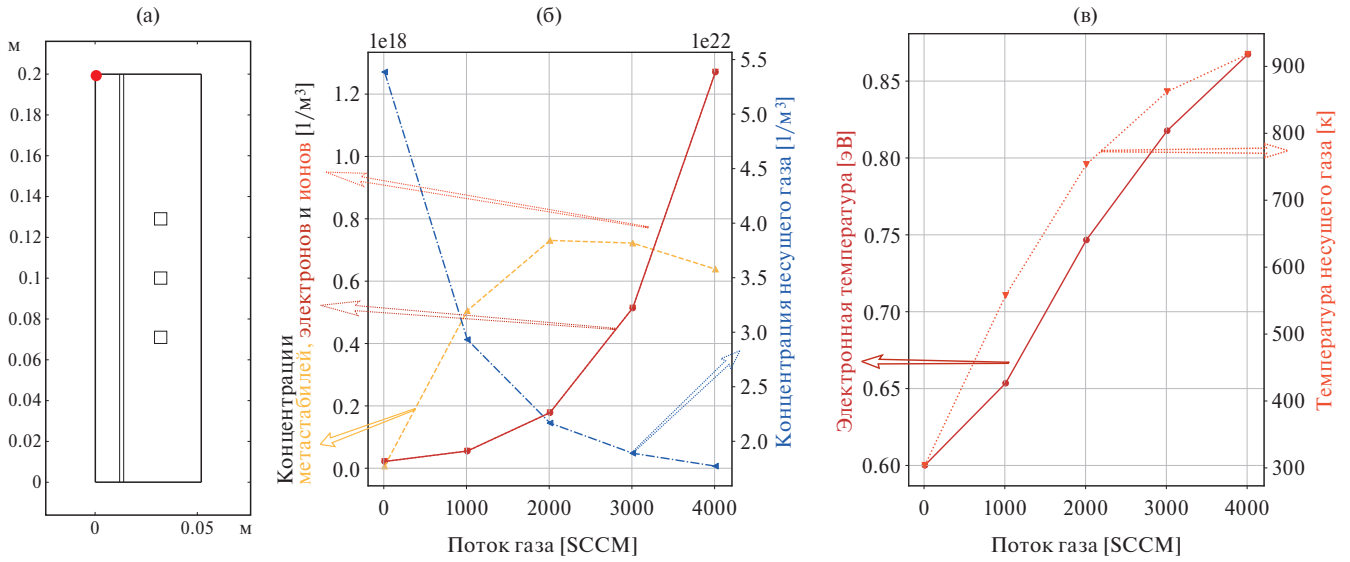


Рис. 10. Область распределения (а); зависимость концентрации электронов, возбужденных состояний и ионов на выходе разрядной трубки $n_{e,m,i,outlet}$ от расхода газа G (б). Графики концентрации электронов n_e и ионов n_i накладываются друг на друга, вследствие чего зависимость n_i плохо видна на рисунке; температура электронов и температура нейтральных частиц в зависимости от расхода газа G (в).

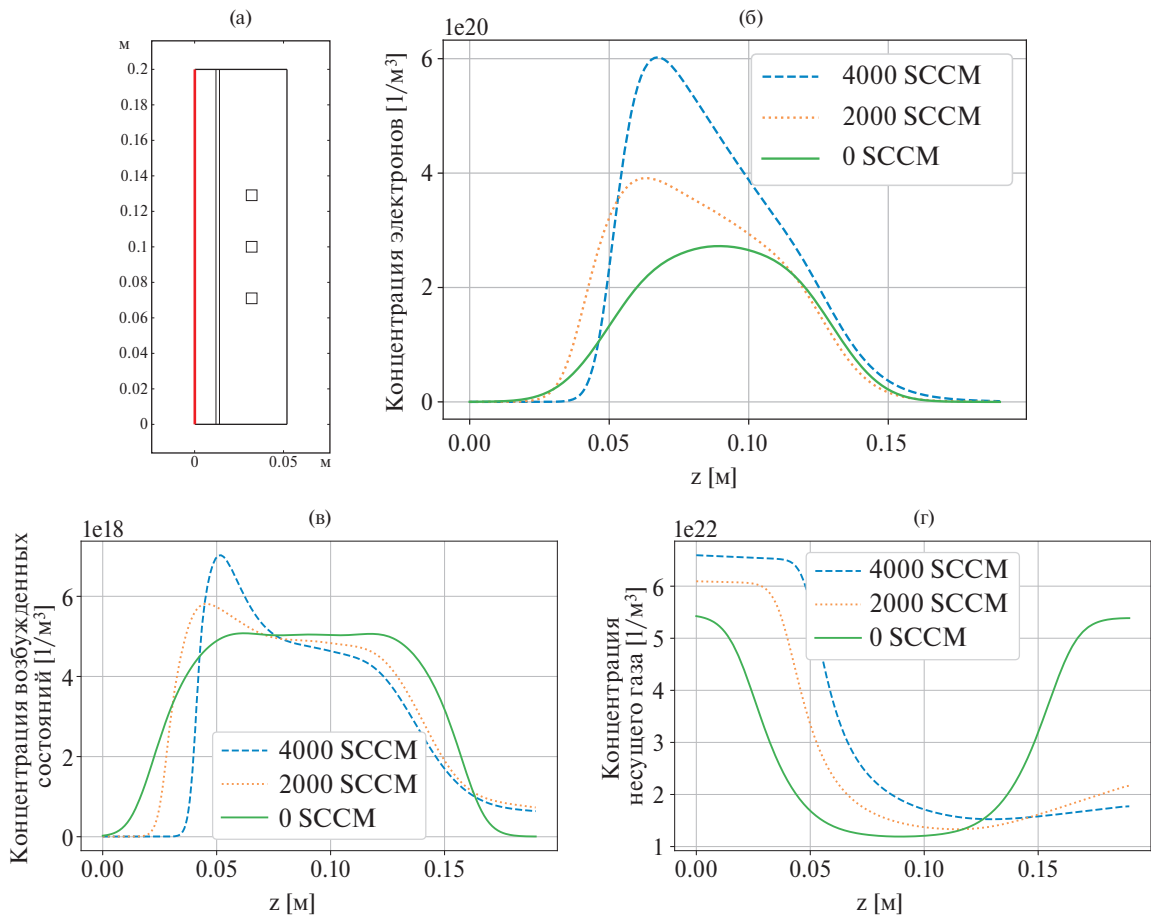


Рис. 11. Область распределения (а); зависимость концентраций электронов n_{ez} (б), возбужденных состояний n_{mz} (в) и нейтральных атомов аргона n_{iz} (г) вдоль разрядной трубки (а) от расхода газа G .

измеряемый в см³/мин (sccm). Данный объемный расход преобразуется в скорость на границе по формуле (5). Далее добавляется граничное условие, симулирующее откачку газа насосом: на противоположном конце трубки outlet задается постоянное давление.

В итоге газодинамические параметры плазмы рассчитываются с помощью уравнений Навье–Стокса (3) с названными условиями на границах inlet и outlet. Результатом решения являются пространственные распределения скорости газа v и давления p (рис. 9), которые применяются в расчетах уравнений на концентрацию электронов, ионов и метастабилей (8)–(11). Данные распределения в зависимости от расхода газа G показаны на рис. 10, 11.

Незначительное падение концентрации газа N_n на рис. 10 по сравнению с ростом концентрации ионов n_i и метастабильных состояний n_m объясняется увеличением скорости газа с ростом расхода в sccm. Таким образом, поток суммы частиц через поперечный срез разрядной трубки

$$\int_0^R (n_m + n_i + N_n) v dr$$

остается одинаковым на протяжении всей длины трубки. Вследствие этого мы можем утверждать, что столь малое падение концентрации газа при повышении G не является ошибочным.

На рис. 11б и 11в видно, что нижняя граница плазменного сгустка смещается к центру индуктора, верхняя граница отдаляется от него. Происходит перераспределение концентрации заряженных и метастабильных частиц в пределах области индуктора. Расчеты согласуются с теоретической моделью Ромиг [12] и экспериментальными данными [1].

В модели Ромиг рассмотрено влияние потока на распределение концентрации электронов в предположении ударной ионизации, постоянного коэффициента амбиполярной диффузии и частоты ионизации, равной константе в пределах области индуктора и нулю – в остальной части разрядной трубки.

Получено: с ростом скорости газа проходит смещение распределения концентрации электронов вниз по потоку, но в пределах области индуктора. В отличие от этой модели, в данной работе учитываются ступенчатая ионизация и коэффициенты диффузии и частоты ионизации, зависящие от ФРЭЭ. Поэтому в представленных результатах расчета на рис. 11б и 11в при увеличении расхода газа от 0 до 2000 sccm максимум концентрации электронов и возбужденных частиц смещается вверх по потоку, а с дальнейшим повышением расхода смещается вниз по потоку. Смещение максимума кон-

центрации электронов и возбужденных частиц в направлении противоположно потоку может быть вызвано влиянием ступенчатой ионизации.

Из рис. 10в видно, что при повышении расхода газа температура нейтральных частиц в точке, расположенной на оси у выхода из плазмотрона, растет быстрее, чем температура электронов. Эта разница в приросте обусловлена большей подвижностью электронов, вследствие чего вклад потока газа в смещение электронов значительно меньше, чем в смещение самого газа.

ВЫВОДЫ

Таким образом, в результате проведенных исследований установлено, что повышение потенциала смещения позволяет экспоненциально увеличить концентрацию заряженных частиц и температуру электронов. При этом приложение потенциала приводит к нарушению электронейтральности.

Установлено также, что потенциал смещения на концентрации возбужденных состояний и нейтральных частиц не влияет, вследствие чего не меняется и температура несущего газа. Концентрацию заряженных частиц можно увеличить и потоком газа, к тому же им смещаются и метастабильные частицы, увеличивается температура газа на выходе из разрядной камеры.

Метод расчета плазмы с потоком газа в COMSOL Multiphysics имеет ограничение, позволяющее проводить корректные расчеты ВЧИ-разрядов при пониженном давлении выше ($p > 9.65$ Па) для радиуса разрядной трубки $r = 1.2$ см. При более низких давлениях число Кнудсена превышает $Kn > 0.1$ и выходит из диапазона режима сплошности.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект 19-71-10055) <https://rscf.ru/project/19-71-10055/>.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абдуллин И., Желтухин Б., Катанов Н. Высококачественная плазменно-струйная обработка материалов при пониженных давлениях: Теория и практика применения. 2000.
2. Ventzek P.L., Sommerer T.J., Hoekstra R.J., Kushner M.J. // Appl. Phys. Lett. 1993. V. 63. P. 605.
3. Li H., Xu T., Chen J., Zhou H., Liu H. // Appl. Surface Sci. 2004. V. 227. P. 364.
4. Kosku N., Murakami H., Higashi S., Miyazaki S. // Appl. Surface Sci. 2005. V. 244. P. 39.
5. Wen D.-Q., Liu W., Gao F., Lieberman M., Wang Y.-N. // Plasma Sources Sci. Technol. 2016. V. 25. P. 045009.
6. Kim K.-Y., Kim K.-H., Moon J.-H., Chung C.-W. // Phys. Plasmas. 2020. V. 27. P. 093504.

7. Yue H., Jian S., Zeyu H., Zhang G., Chunsheng R. // Plasma Sci. Technol. 2017. V. 20. P. 014005.
8. Tinck S., Boullart W., Bogaerts A. // J. Phys. D: Applied Phys. 2008. V. 41. P. 065207. Zhang Y.-R., Zhao Z.-Z., Xue C., Gao F., Wang Y.-N. // J. Phys. D: Applied Phys. 2019. V. 52. P. 295204.
9. Reed T.B. // J. Appl. Phys. 1961. V. 32. P. 821.
10. Mostaghimi J., Proulx P., Boulos M.I. // Numerical Heat Transfer. 1985. V. 8. P. 187.
11. Romig M.F. Steady State Solutions of the Radio-frequency Discharge with Flow // The Physics of Fluids. 1960. V. 3. № 1. C. 129–133.
12. Racka-Szmidt K., Stonio B., Zelazko J., Filipiak M., Sochacki M. // Materials. 2021. V. 15. P. 123.
13. Zheng Y., Ye H., Liu J., Wei J., Chen L., Li C. // Materials Lett. 2019. V. 253. P. 276.
14. Kumabe T., Ando Y., Watanabe H., Deki M., Tanaka A., Nitta S., Honda Y., Amano H. // Japanese J. Appl. Phys. 2021. V. 60. SBBD03.
15. Dineen M., Loveday M., Goodyear A., Cooke M., Newton A., Baclet S., Ward C., Hemakumara T. // Advanced Etch Technology for Nanopatterning IX. V. 11329. SPIE. 2020. P. 54.
16. Fairushin I.I., Shemakhin A.Y. // High Energy Chemistry. 2023. V. 57. No. 41.
17. Jucius D., Grigaliunas V., Juodenas M., Guobiene A., Lazauskas A. // Optical Materials. 2023. V. 136. P. 113437.
18. Nozaki M., Terashima D., Yoshigoe A., Hosoi T., Shimura T., Watanabe H. // Japanese J. Appl. Phys. 2020. V. 59. SMMA07.
19. Puranto P., Hamdana G., Pohlenz F., Langfahl-Klabes J., Daul L., Li Z., Wasisto H. S., Peiner E., Brand U. // J. Phys.: Confer. Ser. V. 1319. IOP Publishing. 2019. P. 012008.
20. Yamada S., Takeda K., Toguchi M., Sakurai H., Nakamura T., Suda J., Kachi T., Sato T. // Appl. Phys. Express. 2020. V. 13. P. 106505.
21. Sugaya T., Yoon D., Yamazaki H., Nakanishi K., Sekiguchi T., Shoji S. // J. Microelectromechanical Systems. 2019. V. 29. P. 62.
22. Seok B., Kim S., Jun D., Jang J. // Electronics Lett. 2019. V. 55. P. 660.
23. Shemakhin A.Y., Zheltukhin V., Khubatkhuzin A. // J. Phys.: Confer. Ser. V. 774. IOP Publishing. 2016. P. 012167.
24. Shemakhin A.Y., Zheltukhin V. // Mathematica Montisnigri. 2017. V. 39. P. 126.
25. Terentev T., Shemakhin A.Y., Samsonova E., Zheltukhin V. // Plasma Sources Sci. Technol. 2022. V. 31. P. 094005.
26. Zheltukhin V., Terentev T., Shemakhin A., Samsonova E. // J. Phys.: Confer. Ser. V. 1870. IOP Publishing. 2021. P. 012018.
27. Zheltukhin V.S., Shemakhin A.Y., Terentev T.N., Samsonova E.S. // Mesh Methods for Boundary-Value Problems and Applications: 13th International Conference, Kazan, Russia, October 20–25, 2020. Springer. 2021. P. 587.
28. Zheltukhin V., Shemakhin A.Y. // Mathematical models and computer simulations. 2014. V. 6. P. 101.
29. Lindner H., Murtazin A., Groh S., Niemax K., Bogaerts A. // Analytical chemistry. 2011. V. 83. P. 9260.
30. Bernardi D., Colombo V., Ghedini E., Mentrelli A. // Pure and applied chemistry. 2005. V. 77. P. 359.
31. Ferreira C., Loureiro J., Ricard A. // J. Appl. Phys. 1985. V. 57. P. 82.
32. Гинзбург В.Л. Распространение электромагнитных волн в плазме. Наука, 1967.
33. Шемахин А.Ю. // Химия высоких энергий. 2021. Т. 58. С. 61.
34. PHELPS database. <http://www.lxcat.laplace.univ-tlse.fr>, June 4, 2013.
35. COMSOL AB. Stockholm. Sweden. COMSOL Multiphysics License No. 9602172. Ver. 5.6. <http://www.comsol.com>

SIMULATION OF LOW-PRESSURE INDUCTIVELY COUPLED PLASMA WITH DISPLACEMENT POTENTIAL AND GAS FLOW

A. Yu. Shemakhin^{a,*}

^aKazan (Volga Region) Federal University, Kazan, Russia

*e-mail: shemakhin@gmail.com

The dependence of the parameters of low-pressure inductively coupled argon plasma (13.3–113 Pa) and field frequency of 13.56 MHz at the coil on the potential applied to the electrode and on gas flow rate up to 4000 sccm is numerically studied. The model is developed in the COMSOL Multiphysics environment and verified with experimental data, as well as over the Knudsen number. As a result of a numerical experiment, it is revealed as follows: when the displacement potential increases linearly, the density of charged particles increases exponentially and a slight increase in the electron temperature is observed; when the gas flow rate increases linearly, the density of charged particles increases exponentially, the density of excited states has an extremum at 2000 sccm, and the gas and electron temperature increases linearly.

Keywords: mathematical simulation, inductively coupled plasma, ICRF discharge, COMSOL, combined RF discharge