

04
© 1992 г.

О ФОРМИРОВАНИИ КОНЦЕНТРАЦИИ АТОМОВ МЕТАЛЛА В РАЗРЯДЕ С ПОЛЫМ КАТОДОМ

В. В. Дунаев, А. Г. Жиглинский, В. С. Сухомлинов, Э. Н. Фафурина

Рассчитан радиальный ход концентрации атомов металла в наиболее общем случае их поступления в разряд за счет распыления и испарения при наличии объемной ионизации. Результаты расчетов согласуются с известными экспериментальными данными.

Интерес к исследованию разряда с полым катодом обусловлен многообразием его применений. Примером могут служить ионные источники, источники света в спектроскопии высокого разрешения и для целей спектрального анализа, лазеры на парах металлов, а в последние годы и моделирование условий распыления первой стенки термоядерного реактора-tokамака. Во многих случаях рабочим телом в полом катоде являются атомы материала катода, которые поступают в разряд посредством ионного распыления и испарения. Концентрация и пространственное распределение атомов и ионов металла влияют на яркость источников света, интенсивность ионных пучков, мощность лазерного излучения. Однако массоперенос в плазме полого катода (ПК) изучен недостаточно. Так, в моделях [1—3] атомы металла поступают в разряд только за счет распыления, а испарение не учитывается. Тем самым исключается из рассмотрения обширный класс полых катодов, где могут иметь место и распыление, и испарение одновременно: неохлаждаемые и специально подогреваемые полые катоды, полые катоды при больших токах, в парах легколетучих элементов и др. Кроме того, предложенные ранее модели массопереноса атомов металла в полом катоде обладают тем недостатком, что в них при расчете пространственного распределения атомов металла не учитывается ионизация. Наконец, при обсуждении распылительного механизма в соответствующие уравнения вводится виртуальный источник атомов с некоторым пространственным распределением мощности. Такой подход требует для каждого конкретных условий отдельно проводить громоздкие расчеты этого источника методом Монте-Карло.

В данной работе мы ставим задачу получить достаточно простые выражения, позволяющие рассчитывать пространственное распределение атомов металла при условии одновременного существования распыления, испарения и с учетом ионизации атомов материала ПК в разряде.

Для решения поставленной задачи обратимся к P1-приближению [4] БГК модели [5] уравнения Больцмана с переменной частотой столкновений. Как известно, основная трудность использования P1-приближения заключается в том, что при наличии поглощающей стенки (в нашем случае это поверхность полого катода) этот метод может давать значительные ошибки при расчете пространственного распределения концентрации вблизи поверхности (за исключением случая плоской поверхности). Под плоской в данном случае понимается такая поверхность, у которой радиус кривизны много больше длины свободного пробега частиц, а это условие в полом катоде, как правило, выполняется.

В соответствии с P1-приближением представим функцию потока атомов металла по скоростям ξ в виде

$$\varphi(\xi, r) = \frac{1}{4\pi} \left[\varphi_0(\xi, r) + 3 \frac{(\xi, n)}{\xi} \varphi_1(\xi, r) \right],$$

где r — радиус-вектор точки пространства в цилиндрической системе координат (ось z совпадает с осью цилиндрического ПК); n — единичный вектор нормали к поверхности катода, проходящий через точку с радиусом-вектором r .

Вводя переменные $\varepsilon = \frac{M_r \xi^2}{2kT}$; $x = \frac{r}{\lambda_0}$;

$$v(\varepsilon) = \left(\sqrt{\frac{M_r}{2kT}} \right) v(\varepsilon) \lambda_0; \quad Y(\varepsilon, x) = v(\varepsilon) \varphi_0(\varepsilon, x),$$

где M_r — масса атома газа, T — газовая температура; $\lambda_0 = \frac{1}{n_r \sigma_{\text{упр}}}$, n_r — концентрация атомов газа; $\sigma_{\text{упр}}$ — сечение упругих столкновений атомов газа и металла, $v(\varepsilon)$ — частота этих столкновений, легко получить уравнение для функции $Y(\varepsilon, x)$

$$\begin{aligned} -\frac{1}{3} \Delta Y + \left[\frac{v(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}} + \frac{\alpha}{\sqrt{\varepsilon}} \right] \left[\frac{v(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}} (1 - \bar{\mu}) + \frac{\alpha}{\sqrt{\varepsilon}} \right] Y = \\ = v^2(\varepsilon) \left[\frac{v(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}} (1 - \bar{\mu}) + \frac{\alpha}{\sqrt{\varepsilon}} \right] \gamma_0 \int_0^\infty Y(\varepsilon, x) e^{-\lambda \varepsilon} d\varepsilon, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\bar{\mu}$ — средний косинус угла рассеяния при столкновении атомов газа и металла;

$$\gamma_0 = \left(\int_0^\infty \nu(\varepsilon) e^{-\lambda \varepsilon} d\varepsilon \right)^{-1}, \quad \alpha = \nu_i \lambda_0 \sqrt{\frac{M_r}{2kT}} \ll 1, \quad M_m — масса атома металла:$$

$\lambda = M_m/M_r$, ν_i — частота ионизации атомов материала ПК.

Как показывают приведенные нами оценки с использованием данных о сечениях ионизации атомов металла электронным ударом [6] и о функции распределения электронов по энергиям в полом катоде [7], при типичных концентрациях электронов порядка 10^{11} см^{-3} предположение о малости параметра α оправдано.

Далее предположим, что стенка является источником частиц с максвелловским распределением по скоростям, температура которого T_b , а мощность P . В том случае, когда распределение вылетающих атомов по скоростям отличается от максвелловского есть $\sqrt{\varepsilon} f(\varepsilon)$, в конечной формуле необходимо заменить

выражение $2\lambda^2(\eta + 1)^2 e^{-\lambda \eta \varepsilon}$ на $f(\varepsilon) \left[\int_0^\infty f(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon \right]^{-1}$. Границное условие, кото-

рое физически означает равенство потоков падающих на поверхность ПК и покидающих ее испаренных и распыленных атомов при произвольной энергии ε , запишется в виде

$$(Y + \frac{2}{3} \nabla Y)_{x=a} = 4 P \lambda^2 (\eta^2 + 1)^2 \sqrt{\varepsilon} v(\varepsilon) e^{-\lambda \eta \varepsilon}, \quad (2)$$

где a — координата стенки, $\eta = T/T_b - 1$.

В случае, когда поверхность ПК является источником двух или более потоков атомов с разными температурами (например, при наличии процессов распыления и испарения одновременно), решение представляет собой сумму концентраций, вычисленных с использованием каждого потока в отдельности.

Из вида уравнения (1) следует, что для переменной $\tilde{Y}(\varepsilon, x) = Y(\varepsilon, x) - 2P\lambda^2(\eta + 1)^2\sqrt{\varepsilon}\nu(\varepsilon)e^{-\lambda\eta\varepsilon}$ существует решение в виде

$$\tilde{Y}(\varepsilon, x) = \sum_{k=1}^{\infty} A_k(\varepsilon) J_0\left(\mu_k \frac{x}{a}\right), \quad (3)$$

где μ_k — корни уравнения

$$J_0(\mu_k) - \frac{2}{3} \frac{\mu_k}{a} J_1(\mu_k) = 0.$$

При $a >> \mu_k$ значения μ_k близки к корням уравнения $J_0(\mu_k) = 0$. Однако коэффициенты $A_k(\varepsilon)$, получающиеся при этом, имеют чрезвычайно громоздкий вид, а ряд (3) при некоторых значениях параметров λ и η сходится медленно. Поэтому мы предлагаем приближенный метод решения уравнения (1) с граничным условием (2), дающий выражение для концентрации

$$N(x) = \int_0^{\infty} Y(\varepsilon, x) \frac{1}{\sqrt{\varepsilon} \nu(\varepsilon)} e^{-\lambda\varepsilon} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon \quad (3a)$$

в форме, удобной для вычислений. Будем искать решение уравнения (1) в виде

$$Y(\varepsilon, x) = C_1(\varepsilon) I_0(\sqrt{3\mu}x) + C_2(\varepsilon) I_0(\sqrt{3\eta_0}x), \quad (4)$$

где μ и η_0 — некоторые параметры, которые будут найдены позднее, $C_1(\varepsilon)$ и $C_2(\varepsilon)$ — пока произвольные функции.

Потребуем выполнения условия

$$\int_0^{\infty} C_2(\varepsilon) e^{-\lambda\varepsilon} d\varepsilon = O(\alpha), \quad (4a)$$

так как при $\alpha = 0$ (как легко показать) функция $C_2(\varepsilon)$ удовлетворяет условию (4a) с правой частью равной нулю. Подставляя $Y(\varepsilon, x)$ в виде (4) в уравнение (1) легко получить для $C_1(\varepsilon)$ и $C_2(\varepsilon)$ интегральные уравнения

$$C_1(\varepsilon) = \gamma_0 \frac{\nu^2(\varepsilon) \left[\frac{\nu(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}} (1 - \bar{\mu}) + \frac{\alpha}{\sqrt{\varepsilon}} \right]}{\left(\frac{\nu(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}} + \frac{\alpha}{\sqrt{\varepsilon}} \right) \left(\frac{\nu(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}} (1 - \bar{\mu}) + \frac{\alpha}{\sqrt{\varepsilon}} \right) - \bar{\mu}} \int_0^{\infty} C_1(\varepsilon) e^{-\lambda\varepsilon} d\varepsilon, \quad (5)$$

$$C_2(\varepsilon) = \gamma_0 \frac{\frac{\nu^2(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}} (1 - \bar{\mu}) + \frac{\alpha}{\sqrt{\varepsilon}}}{\left(\frac{\nu(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}} + \frac{\alpha}{\sqrt{\varepsilon}} \right) \left[\frac{\nu(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}} (1 - \bar{\mu}) + \frac{\alpha}{\sqrt{\varepsilon}} \right]} \int_0^{\infty} C_2(\varepsilon) e^{-\lambda\varepsilon} d\varepsilon. \quad (5a)$$

Решение этих уравнений будем искать с точностью до $O(1)$. Тогда из условия разрешимости уравнения (5) с учетом малости величины α имеем

$$\mu = (1 - \bar{\mu}) \frac{\sqrt{\pi}}{2\lambda^{3/2}} \alpha \left[\int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{3/2}}{\nu(\varepsilon)} e^{-\lambda\varepsilon} d\varepsilon \right]^{-1}. \quad (6)$$

Из условия (4a) следует, что, вообще говоря,

$$\eta_0 = (1 - \bar{\mu}) \frac{\nu^2(\varepsilon)}{\varepsilon}.$$

Но, как показывают анализ и наши расчеты по сравнению с точным выражением для концентрации $N(x)$, полученной с использованием решения $Y(\varepsilon, x)$ в виде ряда (3) и $N(x)$, которое ниже представлено формулой (10), можно положить $\eta_0 = \eta_0(\varepsilon)$ — усреднение по функции потока, т. е.

$$\eta_0 = (1 - \bar{\mu}) \left(\frac{\nu^2(\varepsilon)}{\varepsilon} \right), \quad (7)$$

а из уравнения (5), с учетом выражения (6) получается

$$C_1(\varepsilon) = A \sqrt{\varepsilon} \nu(\varepsilon) + O(\alpha), \quad (8)$$

где A — некоторая постоянная.

Подставляя это выражение в граничное условие (2), имеем с точностью до величин $O(1)$

$$A = \frac{1}{I_0(\sqrt{3\mu} a)} 4 P \alpha^2 (\eta + 1)^2 \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} \nu(\varepsilon) e^{-\lambda\varepsilon} d\varepsilon \quad (9)$$

и

$$C_2(\varepsilon) = \frac{4P\lambda^2 (\eta + 1)^2 \sqrt{\varepsilon} \nu(\varepsilon) e^{-\lambda\varepsilon} - C_1(\varepsilon) I_0(\sqrt{3\mu} a)}{I_0(\sqrt{3\eta_0} a) + \frac{2}{3} I_1(\sqrt{3\eta_0} a)}. \quad (9a)$$

Окончательно из формулы (3а), привлекая выражения (8), (9), (9а), получим

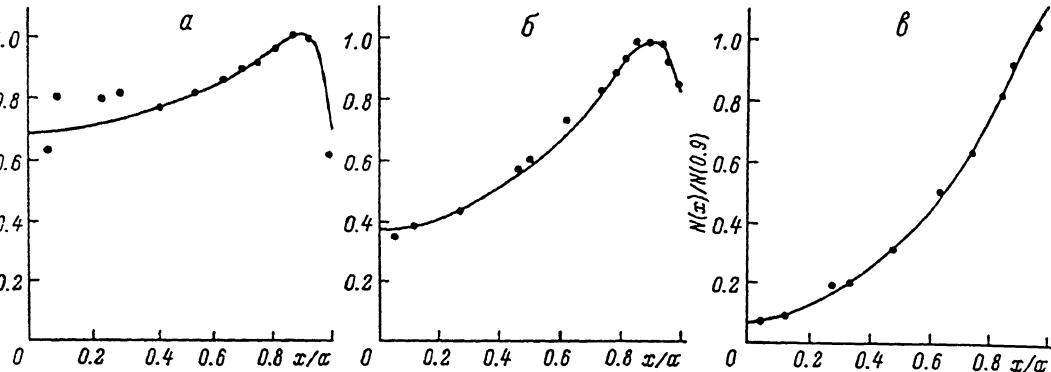
$$N(x) = 2 P \sqrt{\frac{\pi M_m}{2 kT}} (\eta + 1)^2 \gamma_0 \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} \nu(\varepsilon) e^{-\lambda(\eta+1)\varepsilon} d\varepsilon \times \\ \times \left[\frac{I_0(\sqrt{3\mu} x)}{I_0(\sqrt{3\mu} a)} + \left[\frac{\sqrt{\eta+1}}{(\eta+1)^2 \gamma_0 \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} \nu(\varepsilon) e^{-\lambda(\eta+1)\varepsilon} d\varepsilon} - 1 \right] \times \right. \\ \left. \times \frac{I_0(\sqrt{3\eta_0} x)}{I_0(\sqrt{3\eta_0} a) + \frac{2}{3} I_1(\sqrt{3\eta_0} a)} \right]. \quad (10)$$

Теперь перейдем к вычислению величины η_0 . Согласно определению,

$$\eta_0(x) = (1 - \bar{\mu}) \int_0^\infty \frac{\nu^2(\varepsilon) e^{-\lambda\varepsilon}}{\varepsilon} Y(\varepsilon, x) \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\nu(\varepsilon)} d\varepsilon \left[\int_0^\infty \frac{Y(\varepsilon, x)}{\nu(\varepsilon)} \sqrt{\varepsilon} e^{-\lambda\varepsilon} d\varepsilon \right]^{-1}, \quad (11)$$

где $Y(\varepsilon, x)$ — решение (4) с учетом (9) и (9а).

Отметим, что если $\lambda \sim 1$, то при $a \gg 1$ (обычно это условие в полом катоде выполняется) член в выражении для $Y(\varepsilon, x)$, пропорциональный $I_0(\sqrt{3\eta_0} x)$, быстро убывает при уменьшении x и существен при $x \approx a$, соответственно можно положить $\eta_0 = \eta_0(a)$. Если $\lambda \gg 1$, то $(Y(\varepsilon, x))/(Y(\varepsilon, a))$ слабо меняется при изменении x , аналогично ведет себя величина $\eta_0(x)$. Тогда аналогично предыдущему



Радиальная зависимость концентрации атомов Са в разряде с полым катодом в неоне.
Точки — экспериментальные результаты работы [8], сплошные кривые — расчет по формуле (10). Условия эксперимента: давление Ne 4 Тор; i , мА: а — 100, б — 200, в — 250; α : а — $4.1 \cdot 10^{-3}$, б — $2.6 \cdot 10^{-2}$, в — $8.7 \cdot 10^{-2}$.

$\eta_0 \approx \eta_0(a)$. Наконец, если $\lambda \rightarrow 0$, то $\eta_0(x) \rightarrow 1$ независимо от x . Исходя из вышеуказанного положим в формуле (11) $x = a$ и вычислим $\eta_0 = \eta_0(a)$

$$\begin{aligned} \eta_0 = & \lambda^2 (1 - \bar{\mu}) \int_0^\infty \nu^2(\varepsilon) e^{-\lambda\varepsilon} d\varepsilon \left\{ 1 + 0.46 \left[\left(\gamma_0 \int_0^\infty \nu^2(\varepsilon) e^{-\lambda\varepsilon} d\varepsilon \right)^{-1} \times \right. \right. \\ & \left. \left(\int_0^\infty \nu^2(\varepsilon) e^{-\lambda(\eta+1)\varepsilon} d\varepsilon \right) \left(\int_0^\infty \nu(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} e^{-\lambda(\eta+1)\varepsilon} d\varepsilon \right)^{-1} \right] \times \\ & \times \left\{ 1 + 0.46 \left[\frac{1}{(1+\eta)^2 \gamma_0 \int_0^\infty \nu(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} e^{-\lambda(\eta+1)\varepsilon} d\varepsilon} - 1 \right] \right\}^{-1}. \end{aligned} \quad (12)$$

Из формулы (12) следуют очевидные ситуации: если $\lambda \rightarrow 0$, то $\eta_0 \rightarrow 1$ независимо от η , что соответствует формуле (11); если $\lambda \rightarrow \infty$, то $\eta_0 \rightarrow \lambda(1 - \bar{\mu}) \rightarrow 0$. Последний случай соответствует при $\mu = 0$ свободному пролету частиц, следовательно, $N(x) = \text{const}$. Расчеты по полученным формулам показали, что концентрация $N(x)$, определенная выражением (10), отличается от точного решения, полученного в виде (3), не более чем на 6—8 %.

Для проверки правильности полученных формул мы использовали экспериментальные результаты работы [8] по определению пространственного распределения концентрации атомов Са в неоновой плазме полого катода при различных условиях. Концентрация атомов Са определялась методом полихроматической голографической интерферометрии [8]. Диапазон условий в разряде (разрядный ток менялся от 100 до 250 мА при давлении неона 4 Тор) позволил промоделировать различные механизмы поступления атомов металла в разряд от распылительного (при малых токах) до преимущественно испарительного (при токе 250 мА). Величина α , характеризующая эффективность ионизации атомов металла (в данном случае Са), рассчитывалась нами на основании данных работы [7], а величина $\nu(\varepsilon)$ рассчитывалась в модели упругих шаров с использованием размеров атомов Са и Ne, взятых из [9]. При расчетах мы использовали один подгоночный параметр — отношение потоков атомов металла со стенки, вылетающих в результате испарения и распыления. Средняя энергия распыленных атомов Са принималась равной $E_p \approx 1$ эВ [10], распределение по энергиям этих атомов мы

считали максвелловским (как показали наши расчеты, вид функции распределения и средняя энергия при условии $E \gg kT$ слабо влияют на пространственное распределение атомов металла). Температура испаренных атомов Са определялась по измеренным значениям температуры стенки полого катода.

На рис. 1 *а—в* видно, что при всех экспериментальных условиях наблюдается хорошее согласие расчетов с экспериментом. Приведенные данные показывают, что характер пространственного распределения атомов Са меняется при изменении разрядного тока. Эти изменения можно объяснить следующим образом. При малых токах, когда температура стенки невелика и роль испарения как механизма поступления атомов Са в разряд мала по сравнению с распылением, основная часть распыленных атомов в пристеночной области полого катода имеет большую по сравнению с тепловой энергию и, следовательно, создает вблизи поверхности малую концентрацию. По мере удаления от стенки энергия этих атомов из-за столкновений с более холодными атомами газа уменьшается и соответственно растет их концентрация. Однако одновременно с этим происходит уменьшение концентрации атомов металла из-за наличия объемной ионизации. На некотором расстоянии от стенки спад концентрации из-за ионизации начинает преобладать, в результате чего образуется максимум на зависимости $N(x)$ (рис. 1, *а*). При росте разрядного тока и соответственно увеличении потока испаренных атомов Са ситуация меняется. Испаренные атомы имеют температуру меньшую, чем газовая, и, наоборот, по мере удаления от поверхности ПК в результате столкновений с атомами газа нагреваются, так что концентрация, которую они создают, падает. Кроме того, при увеличении тока усиливается роль ионизации, что приводит к еще более быстрому спаду концентрации атомов Са при удалении от источника (поверхность ПК). Этим и обусловлено постепенное исчезновение пространственного максимума концентрации атомов Са при увеличении разрядного тока (рис. 1, *б, в*).

Таким образом, в настоящей работе разработана модель и получены аналитические формулы, позволяющие рассчитывать радиальный ход концентрации атомов металла в цилиндрическом полом катоде в случае, когда наряду с катодным распылением существенную роль в поступлении материала катода в разряд может играть испарение, с учетом объемной ионизации.

Список литературы

- [1]. Бошик Б. М., Жиглинский А. Г., и др. // Опт. и спектр. 1972, Т. 33. Вып. 6. С. 1032—1036.
- [2]. Warner B. E., Person K. B., Collins G. J. // J. Appl. Phys. 1979. Vol. 50. N 9. P. 5694—5704.
- [3]. Жиглинский А. Г., Кучинский В. В., Шейкин Е. Г. // ЖТФ. 1986. Т. 56. Вып. 4. С. 1718—1723.
- [4]. Кейз К., Цвайфель П. Линейная теория переноса. М.: Мир, 1972. 384 с.
- [5]. Черчиньянин К. Теория и приложения уравнения Больцмана. М.: Мир, 1978. 495 с.
- [6]. Gerstenberger D. C., Solansky R., Collins G. // IEEE. J. Quant. E1. 1980. Vol. QE-16. N 8. P. 820—834.
- [7]. Гофмейстер В. П., Каган Ю. М. // Rev. Roum. Phys. 1968. Vol. 13. N 1. P. 19—24.
- [8]. Самохин А. Н. Канд. дис. Л., 1989.
- [9]. Таблицы физических величин. Справочник / Под ред. И. К. Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1006 с.
- [10]. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой / Под ред. Р. Бериша. М.: Мир, 1984. 336 с.

С.-Петербургский государственный
университет

Поступило в редакцию
15 апреля 1991 г.