

01;04

Влияние метастабильных атомов и нелокальности электронного распределения на характеристики положительного столба разряда в аргоне

© Е.А. Богданов,¹ А.А. Кудрявцев,¹ Л.Д. Цендин,² Р.Р. Арсланбеков,³ В.И. Колобов,³ В.В. Кудрявцев⁴

¹ Санкт-Петербургский государственный университет,
198504 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: akud@ak2138.spb.edu

² Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: tsendin@phtf.stu.neva.ru

³ CFDRC, 215 Wynn Drive, Huntsville, AL, USA
e-mail: vik@cfdr.com

⁴ CFD-Canada, 45 English Ivyway, Toronto
e-mail: vvk@cfdcanda.com

(Поступило в Редакцию 3 ноября 2003 г.)

С помощью коммерческого CFDRC software (<http://www.cfdrc.com/~cfdplasma>), позволяющего проводить симуляции в произвольной 3D-геометрии с использованием уравнения Пуассона для распределения потенциала, fluid-уравнений для тяжелых компонентов и решения нелокального кинетического уравнения для электронов проведено самосогласованное моделирование плазмы положительного столба DC-разряда в аргоне. Показано, что локальное приближение для расчета функции распределения электронов неприменимо практически для всех реально используемых на практике условий диффузионного режима горения $PR < (5-10) \text{ cm} \cdot \text{Torr}$. Рассмотрено влияние метастабильных атомов, которые могут существенно повлиять на параметры плазмы РС. Показана важная роль сверхупругих ударов в обогащении быстрой части EDF и пеннинговской ионизации в возможности получения растущей вольтамперной характеристики (VAC) положительного столба разряда.

При моделировании газоразрядной плазмы до сих пор еще часто используется гидродинамическая (fluid) модель (см., например, [1–5]), основанная на предположении о максвелловской функции распределения электронов (EDF). Однако уже давно установлено (см., например, [6]), что для электронов распределение сильно отличается от максвелловского (исключая разве случай парадокса Ленгмюра в бесстолкновительном (free-fall) режиме, когда EDF хорошо аппроксимируется максвелловской [7]). Обычно же при не слишком высоких степенях ионизации $n_e/N < 10^{-3}$ EDF существенно неравновесна, причем в неупругой области энергий $\varepsilon > \varepsilon^*$ она обеднена электронами. Для реальной неравновесной EDF расчеты констант реакций в предположении максвелловского распределения не имеют особого физического смысла, так что трудно даже качественно оценить погрешности получаемых при этом данных.

Тем не менее на практике ряд основных параметров плазмы часто хорошо соответствует расчетам в рамках традиционной гидродинамической (fluid) модели. Этот довольно удивительный факт объяснялся в [8,9] тем, что в газовых разрядах обычно как баланс энергий, определяемый неупругими процессами возбуждения, так и баланс концентрации электронов, определяемый ионизацией, контролируются хвостом EDF, т.е. столкновениями с большим энергетическим порогом (грубо говоря,

определяются одной и той же температурой быстрых электронов T_{et}). Поэтому в рамках fluid модели найдется температура не „среднего“ по EDF электрона T_e (средняя энергия электронного газа), а температура $T_{et} < T_e$ — быстрой части EDF, что и позволяет получить частоты ионизации и возбуждения с достаточной точностью.

Для учета немаксвелловости EDF и нахождения соответствующих констант реакций с участием электронов на практике обычно используется решение кинетического уравнения в локальном приближении, например, с помощью пакета BOLSIG [10] или методики Lookup Tables [11]. Для применимости этого необходимо, чтобы характерная диффузионная длина Λ (для цилиндра, например, $\Lambda = R/2$, 4) превышала длину релаксации электронов по энергии λ_ε ($\Lambda \gg \lambda_\varepsilon$) [12]. При $\lambda_\varepsilon > \Lambda$ использование результатов расчетов по локальной EDF не имеет физического обоснования [12] и, как продемонстрировано в [13,20], приводит к грубым ошибкам при расчете параметров положительного столба тлеющего разряда (РС). Из анализа транспортных свойств также следует [14], что для слабоионизованной плазмы с неравновесной EDF замкнутую систему fluid уравнений переноса при редких межэлектронных столкновениях можно построить лишь в локальном режиме $\Lambda > \lambda_\varepsilon$. Таким образом, при определении параметров РС по традиционным методикам необходимо тщательно прове-

рять применимость локального приближения для расчета EDF.

При нахождении функции распределения электронов из решения кинетического уравнения необходимо знать продольное электрическое поле E/p , сообщающее энергию электронам. Поэтому в литературе при анализе EDF в плазме (см., например, [15]) и при создании пользовательских пакетов (software) для нахождения EDF (см., например, [10]) обычно используется расчет EDF в заданном поле. Однако во всех проблемах физики плазмы практически никогда ни поля, ни движение частиц нельзя считать заданными: поля определяются не только внешними условиями, но и движением заряженных частиц, которое в свою очередь задается полями. Все задачи поэтому являются самосогласованными: плазма допускает проникновение в разрядный объем только таких полей, „какие ей нужны“ для ее стационарного существования. Темп ионизации задается формой EDF, которая формируется полями в плазме. С другой стороны, необходимо, чтобы рождение заряженных частиц за счет ионизации восполняло их диффузионные потери ($\nu_i \tau_a = 1$), зависящие в первую очередь от геометрии разряда и давления $p\Lambda$. Поэтому греющее поле E/p в отличие от разрядного тока также определяется параметром $p\Lambda$ [8,9], т.е. при данной геометрии не может быть задано произвольно.

Таким образом, использование самосогласованных расчетов может приводить к неконтролируемым ошибкам в определении параметров газоразрядной плазмы. В свою очередь точность самосогласованных моделей определяется „узким местом“, т.е. наименее точно известным элементом. Поэтому применение даже самых современных и надежных методик для отдельных расчетных блоков используемого кода при плохом (или недостаточном) знании других элементов, не повышает точность результатов, т.е. на практике желательно использовать по возможности „равноточные“ элементы расчета. Проиллюстрируем это несколькими характерными примерами.

Обычно считается (см., например, [16]), что падающая вольт-амперная характеристика (VAC) разряда связана с объемными процессами, например с переходом от прямой ионизации к ступенчатой или с увеличением роли межэлектронных столкновений при максвеллизации EDF. Однако в слаботочном (особенно капиллярном) разряде к падению VAC приводит также и увеличение времени жизни заряженных частиц, связанное с уменьшением толщины слоя объемного заряда при росте тока [17,18]. В связи с этим неучет конечной толщины пристеночного слоя, т.е. экстраполяция квазинейтральной области до стенок камеры, может приводить к ошибкам при низких значениях разрядного тока. Падающая за счет изменения толщины слоя VAC была продемонстрирована также в работе [19], в которой учитывалась только прямая ионизация, поскольку при малых токах ступенчатой ионизацией можно пренебречь. Однако при относительно большой концентрации метастабильных

атомов их пеннинговская ионизация может доминировать над прямой (см., например, [20]). Это в свою очередь может приводить к росту VAC [21], т.е. при малых токах возможна как падающая, так и растущая VAC РС. Также известно, что удары 2-го рода при столкновениях медленных электронов с метастабильными атомами могут существенно обогащать быструю часть EDF и тем самым приводить к существенному увеличению констант возбуждения высоких уровней и прямой ионизации [22]. И хотя важная роль процессов с участием метастабильных атомов известна давно, их влияние на характеристики плазмы РС рассматривается, как правило, несамосогласованным образом.

В данной работе роль этих эффектов проанализирована в рамках полномасштабного моделирования. В качестве объекта исследований был выбран положительный столб DC-разряда в аргоне, который наиболее полно исследован в литературе.

Симуляция параметров разряда проводилась на коммерческом программном обеспечении, разработанном в CFD Research Corporation, Huntsville, AL, USA [11,23]. Подробная формулировка самосогласованной модели плазмы разряда и описание итерационной численной схемы и методов решения системы уравнений даны в [11,23]. Основными входными параметрами при симуляциях могут являться: геометрия разрядного объема, давление и состав газа и удельная мощность W , вводимая в единицу объема. DC-разряд представляет тот исключительный случай, когда простая связь $W = jE$ позволяет вместо W задавать разрядный ток. Самосогласованное электрическое поле находилось из уравнения Пуассона. Описание тяжелых частиц проводилось в рамках fluid model. Параметры же электронного газа можно было находить как с помощью решения нелокального, так и локального кинетического уравнения для EDF.

Одни из наиболее детальных расчетов формирования EDF в РС представлены в цикле работ [24–26] для Ar-like газа с одним и тем же набором модельных сечений: упругого рассеяния и неупругих процессов возбуждения и прямой ионизации, а также с учетом ухода электронов на стенку. При расчете концентрации заряженных частиц учитывалась только прямая ионизация, т.е. концентрация метастабильных атомов, так же как и процессы с их участием, не рассматривались. Для тестирования используемого кода, мы провели сопоставление с результатами [24–26] для условий $NR \geq 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (радиус трубки $R = 1 \text{ cm}$) с тем же самым набором объемных процессов. Они показали хорошее согласие с данными [24–26] по значениям EDF, E/p (VAC), потенциала стенки Φ_w , средней энергии T_e , концентрации электронов n_e и т.п. Из табл. 1, где представлены некоторые результаты, видно, что расхождения незначительны, т.е. используемый нами код CFDRC хорошо согласуется с данными тестовых расчетов. Далее рассмотрим влияние ряда вышеупомянутых кинетических эффектов на результаты моделирования РС в аргоне.

Таблица 1. Сопоставление используемого кода CFDRC с результатами [24–26]

| (N_0R, I) | $E_z, \text{V/cm}$ | | Φ_w, V | | $T_e(r=0), \text{eV}$ | | $n_e(r=0), \text{cm}^{-3}$ | |
|--|--------------------|-----|--------------------|------|-----------------------|-----|----------------------------|------------------|
| | | | | | | | | |
| $10^{15} \text{ cm}^{-2}, 10 \text{ mA}$ | 2.3 | 2.8 | 20.5 | 22.4 | 6 | 6.2 | $3.5 \cdot 10^9$ | $1.8 \cdot 10^9$ |
| $10^{16} \text{ cm}^{-2}, 1 \text{ mA}$ | 6.50 | 6.2 | 17 | 20.5 | 5.3 | 4.6 | — | $7.6 \cdot 10^8$ |
| $10^{16} \text{ cm}^{-2}, 10 \text{ mA}$ | | 6.1 | | 19.9 | 5.2 | 4.6 | $1.1 \cdot 10^9$ | $6.7 \cdot 10^9$ |

Примечание. Левые столбцы для каждого параметра — результаты [24–26], правые — результаты данной работы.

Как уже отмечалось, практически во всех используемых методиках расчета параметров РС используется решение кинетического уравнения для электронов в локальном приближении. Это означает, что EDF факторизуется в виде произведения

$$f_0(w, r) = n_e(r) f_0^0(w, E/p), \quad (1)$$

т.е. распределение по кинетической энергии w в данной точке r зависит от локального значения приведенного продольного поля E/p и других параметров (температуры газа, концентрации возбужденных частиц и т.п.). Такая методика применима, когда характерная диффузионная длина разрядного объема $\Lambda \gg \lambda_\varepsilon$ — длина релаксации электронов по энергии [12]. Если баланс энергии определяется упругими ударами, то для атомарных газов в области энергий $\varepsilon < \varepsilon^*$, в которой сосредоточена основная часть электронов,

$$\lambda_\varepsilon \approx \lambda / \sqrt{\delta} \approx 100 \lambda \quad (2)$$

и неравенство $\lambda_\varepsilon > \Lambda$ выполняется до сравнительно высоких давлений $pR \leq 5-10 \text{ cm} \cdot \text{Torr}$ (ε^* — порог неупругих процессов, $\delta = 2m/M$). Поэтому практически для всех реально используемых на практике условий в РС локальное приближение для атомарных газов (и основанные на нем методики для определения EDF) неприменимо. Это иллюстрирует рис. 1, из которого видно, что даже при сравнительно высоких $pR = 5.4 \text{ cm} \cdot \text{Torr}$ EDF не факторизуется в виде (1): нормированные и построенные в зависимости от кинетической энергии EDF различаются для различных радиусов r . Такая EDF является нелокальной, т.е. определяется значениями физических характеристик (в первую очередь напряженностей полей) не в данной точке, а в области, определяемой $\lambda_\delta \gg \lambda$, где λ — длина свободного пробега электрона. Поскольку при $\lambda_\varepsilon \gg \Lambda$ за время одного прохода электрона поперек трубки его энергия меняется мало, то интегралом движения для них является полная энергия

$$\varepsilon = w + e\varphi(r) = mV^2/2 + e\varphi(r) \quad (3)$$

(кинетическая плюс потенциальная) [12]. В этой связи физически наиболее подходящими аргументами нелокальной EDF являются переменные ε, r . Поведение запертых ($\varepsilon \leq e\Phi_w$) и прлетных ($\varepsilon > e\Phi_w$) электронов в нелокальном режиме резко различно (Φ_w — разность

потенциала ось-стенка). При $\varepsilon \leq e\Phi_w$, после усреднения уравнения Больцмана по объему, доступному электронам с данной полной энергией, получаем, что $f_0(\varepsilon)$ совпадают без сдвига на потенциал пространства и нормировки [12]. Это существенно упрощает анализ формирования EDF, а факт отсутствия радиальной зависимости у EDF запертых электронов $f_0(\varepsilon)$ используется на практике для обнаружения ее нелокальных свойств (рис. 2). Для пролетных электронов, способных преодолеть поперечный перепад потенциала и уходить на стенки, нелокальная EDF в столкновительном режиме может зависеть как от ε , так и от r [12]. Необходимо

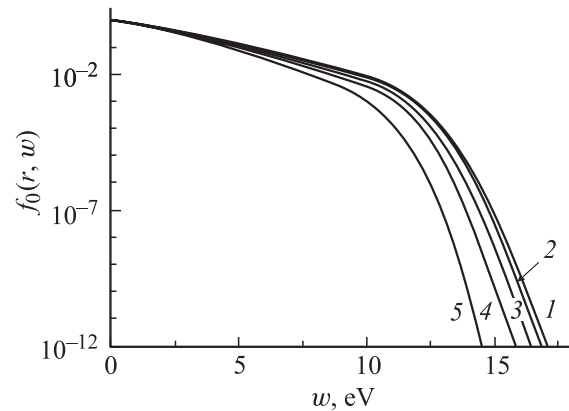


Рис. 1. Нормированные EDF при $pR = 5.4 \text{ cm} \cdot \text{Torr}$ как функция кинетической энергии. $r = 0$ (1), $0.2R$ (2), $0.4R$ (3), $0.6R$ (4), $0.8R$ (5).

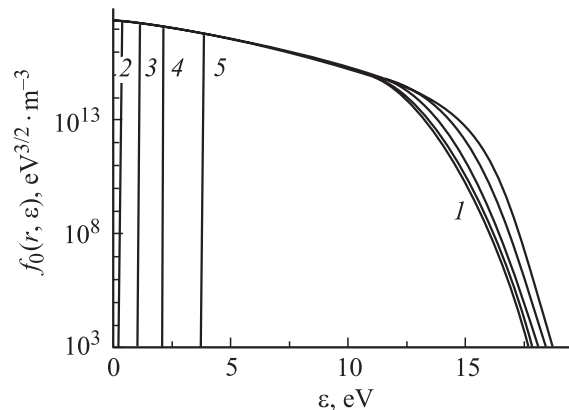


Рис. 2. EDF по полным энергиям для различных значений радиуса при $pR = 5.4 \text{ cm} \cdot \text{Torr}$. 1–5 — то же, что и на рис. 1.

также учитывать, что соотношение между объемными процессами и уходом на стенки может быть различным для различных областей энергии. Так, с повышением давления на нелокальной EDF $f_0(\varepsilon)$ в неупругой области энергий появляется радиальная зависимость и для запертых электронов. Это связано с тем, что при $\varepsilon > \varepsilon^*$ соответствующая длина релаксации электронов

$$\lambda_\varepsilon^* = \sqrt{\lambda \lambda^*} \quad (4)$$

гораздо меньше, чем (2) (λ^* — длина пробега электронов относительно неупругих процессов), так что с повышением давления может выполняться неравенство $\lambda_\varepsilon > \Lambda > \lambda_\varepsilon^*$. На первый взгляд может показаться, что в такой ситуации EDF будет состоять из нелокальной части при $\varepsilon < \varepsilon^*$ и локальной при $\varepsilon > \varepsilon^*$ (к нелокальному „телу“ пришивается локальный „хвостик“). Однако это не так: быстрые части при $\varepsilon > \varepsilon^*$ не факторизуются отдельно в виде (1). Нормированные в какой-либо точке при $w > \varepsilon^*$ (на рис. 3 при $w = 20$ eV) и перестроенные в зависимости от кинетических энергий хвосты $f_0^0(w)$ также различаются для различных радиусов r (рис. 3). Как уже отмечалось, использование локального приближения для определения EDF ограничено случаем, когда она факторизуется в виде (1). Мы предпочитаем считать EDF нелокальной, когда в кинетическом уравнении нельзя отбросить члены с пространственными градиентами. В шкале полных энергий (3) части такой нелокальной EDF могут как не иметь, так и иметь радиальную зависимость (см., например, [24]), где понятие нелокальности трактовалось в более узком смысле и нелокальными назывались только функции $f_0(\varepsilon, r)$, у которых радиальная зависимость отсутствует).

В работах [24–26] был отмечен ряд эффектов, влияющих на VAC разряда, в частности, учет изменения толщины пристеночного слоя и зависимости подвижности ионов от поля $b_i(E)$. Для иллюстрации этих особенностей на рис. 4 представлено относительное (по отношению к расчету в рамках fluid модели) изме-

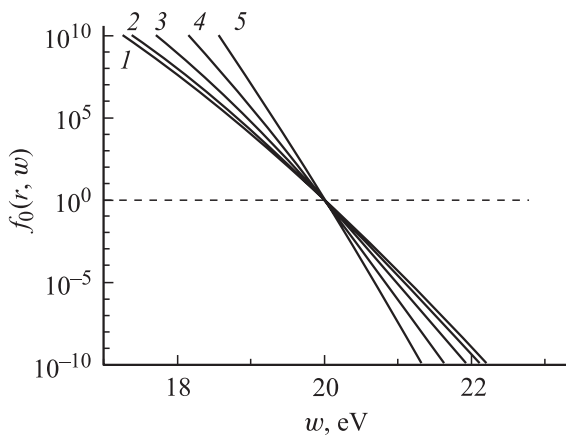


Рис. 3. Быстрые части EDF по кинетическим энергиям при $pR = 5.4$ cm · Torr, считые при $w_0 = 20$ eV. 1–5 — то же, что и на рис. 1.

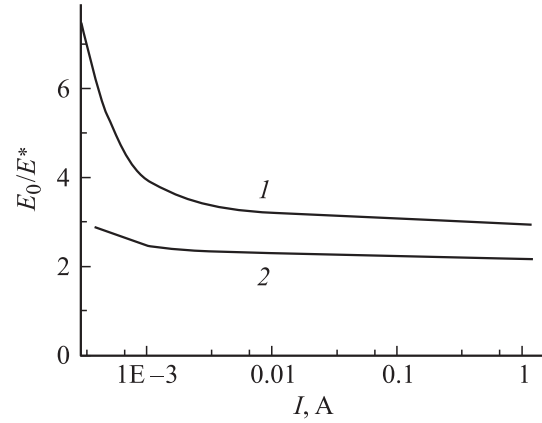


Рис. 4. Вольт-амперные характеристики, рассчитанные для набора реакций [24–26] для $p = 100$ mTorr, $R = 1$ см и нормированные на E^* — значение электрического поля полученного в гидродинамическом (fluid) расчете при тех же условиях, при токе $I = 1$ А. 1 и 2 — соответственно без учета и с учетом зависимости $b_i(E)$ по формуле Фроста.

нение VAC разряда при давлении газа $p = 100$ mTorr и радиусе трубки $R = 1$ см с учетом (кривая 2) и без учета (кривая 1) изменения $b_i(E)$. Набор плазмохимических реакций был выбран по [24–26], а подвижность ионов определялась по формуле Фроста. Поскольку, как уже указывалось, fluid-модель дает температура $T_{et} < T_e$, то значения поля в рамках fluid-модели получаются более низкими, чем при кинетическом расчете. Учет зависимости $b_i(E)$, приводящий к увеличению времени ухода зарядов на стенку, также приводит к меньшим значениям продольного греющего поля (рис. 4). Поскольку в рассматриваемом случае учитывался только один механизм ионизации, то полученная в расчете падающая VAC при малых токах связана с уменьшением толщины пристеночного слоя. Этот эффект необходимо учитывать при моделировании слаботокового (особенно капиллярного) разряда. Как только с ростом тока толщина слоя становится малой, VAC насыщается и поле слабо зависит от тока. Симуляции для получения VAC на рис. 4 проводились также как с учетом, так и без учета межэлектронных столкновений при расчетах EDF. Оказалось, что для рассматриваемого случая влияние межэлектронных столкновений сказывается лишь при больших токах (> 1 А). Поскольку в подобных условиях может наблюдаться разогрев газа и переход в дугу, то такие условия не представлены на рис. 4. Отметим также, что из-за больших значений E/p при низких давлениях EDF была далека от максвелловской вплоть до степеней ионизации $n_e/N \leq 10^{-2}$.

Так же как и в тестовых расчетах [24–26], выше нами учитывалась только прямая ионизация. Однако хорошо известно, что на параметры РС в инертных газах существенно влияют процессы с участием долгоживущих метастабильных состояний, концентрации n_m которых могут быть значительны и, как правило, превышать

Таблица 2. Используемый набор реакций для трехуровневой схемы термов атома аргона

| № | Реакция | ε , eV | Константа | Комментарий |
|---|---|--------------------|---|--|
| 1 | $e + \text{Ar} \rightarrow e + \text{Ar}$ | — | Cross Section [27] | Упругое рассеяние (momentum transfer) |
| 2 | $e + \text{Ar} \leftrightarrow e + \text{Ar}_m^*$ | 11.55 | Cross Section [28] | Возбуждение и девозбуждение метастабильного уровня |
| 3 | $e + \text{Ar} \rightarrow 2e + \text{Ar}^+$ | 15.9 | Cross Section [27] | Прямая ионизация с основного состояния |
| 4 | $e + \text{Ar}_m^* \rightarrow 2e + \text{Ar}^+$ | 4.35 | Cross Section [28] | Ступенчатая ионизация с метастабильного уровня |
| 5 | $e + \text{Ar}_m^* \rightarrow e + \text{Ar}_r^*$ | 0.07 | $k_q = 2 \cdot 10^{-13} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ [29] | Перемешивание с метастабильного на резонансный (11.67 eV) уровень (quenching) |
| 6 | $e + \text{Ar} \rightarrow e + \text{Ar}$ | 11.55 | Cross Section [28] | Полное возбуждение электронным ударом |
| 7 | $\text{Ar}_r^* \rightarrow \text{Ar} + h\nu$ | — | $A_R = 10^6 \text{ s}^{-1}$ | Резонансное излучение с учетом самопоглощения ($\lambda = 106.4 \text{ nm}$) |
| 8 | $2\text{Ar}_m^* \rightarrow \begin{cases} e + \text{Ar}^+ \rightarrow \text{Ar} \\ e + \text{Ar}_2^+ + \text{Ar} \end{cases}$ | — | $k_p = 6.2 \cdot 10^{-16} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ [29] | Пеннинговская ионизация |

Таблица 3. Сопоставление результатов симуляций РС в аргоне с тремя (3R) и восемью (8R) объемными реакциями

| № | Режим (N_0R , I) | E_z , V/cm | | Φ_w , V | | $T_e(r=0)$, eV | | $n_e(r=0)$, 10^9 cm^{-3} | |
|---|--|--------------|------|--------------|------|-----------------|-----|-------------------------------------|------|
| | | 3R | 8R | 3R | 8R | 3R | 8R | 3R | 8R |
| 1 | $3 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, 1 mA | 3.5 | 3.7 | 20.7 | 21.6 | 5.1 | 5.2 | 0.44 | 0.43 |
| 2 | $3 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, 10 mA | 3.2 | 3.3 | 19.9 | 20.6 | 5.1 | 5.2 | 4.0 | 4.0 |
| 3 | $3 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, 100 mA | 3.2 | 3.1 | 19.5 | 19.9 | 5.1 | 5.1 | 36.7 | 37.4 |
| 4 | $3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, 1 mA | 16.6 | 6.2 | 21.8 | 19.8 | 4.0 | 3.9 | 0.7 | 1.6 |
| 5 | $3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, 10 mA | 16.4 | 3.8 | 20.4 | 17.6 | 4.0 | 3.8 | 5.9 | 21.6 |
| 6 | $5.76 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, 10 mA | 30.4 | 3.3 | 21.3 | 17.5 | 3.9 | 3.5 | 5.5 | 47.6 |
| 7 | 10^{17} cm^{-2} , 1 mA | 55.4 | 4.0 | 25.5 | 18.2 | 3.8 | 3.6 | 0.6 | 6.9 |
| 8 | 10^{17} cm^{-2} , 10 mA | 52.3 | 3.47 | 22.8 | 17.6 | 3.8 | 3.4 | 5.2 | 73 |

концентрации электронов n_e . Поэтому были проведены симуляции с использованием трехуровневой модели атома аргона с набором из 8 реакций, представленных в табл. 2. Константы процессов с участием электронов находились путем свертки соответствующих сечений с рассчитываемой EDF. Как и ожидалось, использование в [24–26] двухуровневой схемы с учетом только прямой ионизации ограничивает применимость их результатов областью низких давлений $N_0R < 3 \cdot 10^{15} \text{ cm} \cdot \text{Torr}$, т.е. фактически пролетным (free fall) режимом электронов ($\lambda \geq R$). В табл. 3 представлены результаты некоторых из проведенных нами симуляций РС в аргоне с тремя и восемью реакциями (без учета и с учетом процессов с участием метастабильного уровня). Результаты показали, что с повышением давления (при $N_0R > 3 \cdot 10^{15} \text{ cm} \cdot \text{Torr}$) ступенчатая и пеннинговская ионизации становятся определяющими. Это приводит к уменьшению поля, увеличению концентрации электронов и изменению других параметров, чувствительных к концентрации n_m . Интересно также отметить, что в нелокальном случае профили концентрации электронов спадают практически линейно по радиусу в отличие от традиционных (бесселевских), полученных в рамках fluid-модели (рис. 5). Причиной этого является конкуренция двух эффектов. Во-первых, преимущественная концентрация ионизации вблизи оси трубки приводит

к сужению профиля n_e [12,13]. Во-вторых, зависимость $b_i(E) \sim E^{-1/2}$ приводит к более пологому, чем бесселевский, профилю концентрации электронов.

Ряд же параметров, таких как температура T_e (средняя энергия всего электронного распределения), потенциал стенки Φ_w и т.п. меняются слабо. Незначительное из-

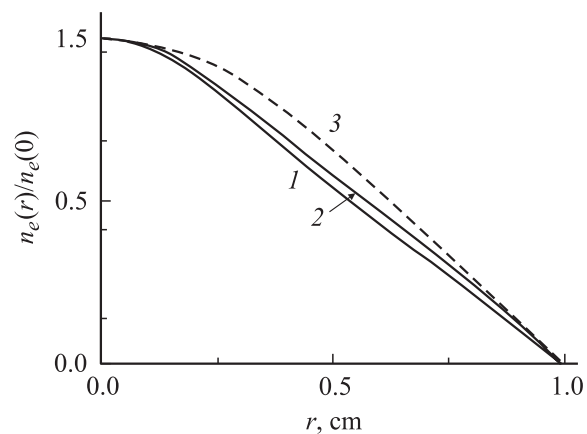


Рис. 5. Нормированные профили концентрации электронов для плотности газа $N_0 = 3 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$: 1 — без учета зависимости подвижности ионов от радиального поля (формулы Фроста); 2 — с ее учетом, штриховая кривая — функция Бесселя $J_0(2.4r/R)$.

менение T_e связано с тем фактом, что при неупругом балансе энергий форма тела EDF при $\varepsilon < \varepsilon^*$, в которой сосредоточены почти все электроны, слабо зависит от поля [9,12]. Эти электроны, получая энергию от поля в интервале $(0, \varepsilon^*)$, лишь транспортируют в хвост EDF требуемый поток электронов по энергии [9,12]. Область EDF при $\varepsilon < \varepsilon^*$ играет лишь роль своеобразного „трубопровода“ от источника в области малых энергий до стока в области хвоста $\varepsilon > \varepsilon^*$, так что электроны с $\varepsilon < \varepsilon^*$ не вносят заметного вклада в общий баланс энергий электронного газа. Распределение электронов вдоль этого „трубопровода“ определяется лишь условием „сколько втекает вблизи нуля, столько и вытекает в пороге ε^* , практически не теряясь по пути“ и не зависит от „напора“.

Быстрая же часть EDF f_{0t} определяется суммарной частотой неупругих ударов с возбуждением всех атомных состояний ν^* . Величина f_{0t} хорошо аппроксимируется экспонентой [9]

$$f_{0t}(\varepsilon) = c_m e^{-\frac{\varepsilon}{T_{et}}} \quad (5)$$

с температурой

$$T_{et} = \sqrt{\nu^*/D_E} \quad (6)$$

($D_E = 2(eE\lambda)^2\nu/3$ — коэффициент диффузии по энергии в электрическом поле; подробнее см., например, [9,12]). Величина T_{et} , как видно из (6), существенно зависит от выбора сечений процессов возбуждения.

В процессе симуляций был выявлен малоизвестный любопытный эффект, состоящий в своеобразном „копировании“ тела EDF в быструю ее часть за счет ударов 2-го рода при столкновениях медленных электронов с метастабильными атомами. На рис. 6 для $p = 1$ Torr, $R = 1$ cm и $I = 10$ mA представлена EDF, полученная при симуляциях без учета ударов 2-го рода (кривая 2) и с их учетом (кривая 1). Видно, что к обычной, резко спадающей за порогом возбуждения (для аргона $\varepsilon^* \simeq 11.55$ eV) EDF f_{0t} (5) добавляется пологая подставка f_{0h} , копирующая медленную часть (тело) EDF. В итоге быструю часть EDF можно представить как сумму $f_0 = f_{0t} + f_{0h}$. Такой вид EDF связан с наличием в кинетическом уравнении источника быстрых электронов за счет ударов 2-го рода, пропорционального низкоэнергетической части (телу) EDF $f(w - \varepsilon^*)$. Грубо говоря, к решению однородного кинетического уравнения f_{0t} , полученного без учета этого источника и имеющего вид быстроспадающей кривой 2 на рис. 6, добавляется частное решение с учетом неоднородности. При большой концентрации метастабилей вид f_{0h} можно приближенно получить, приравняв нулю интеграл неупругих столкновений

$$\nu^*(\varepsilon - e\varphi(r))\sqrt{\varepsilon - e\varphi(r)}\left(f_0(\varepsilon) - \frac{n_m g_a}{N_0 g_m} f_0(\varepsilon - \varepsilon^*)\right). \quad (7)$$

Это и дает добавку в быстрой части f_{0h} , копирующую тело EDF

$$f_{0h}(\varepsilon) \simeq \frac{n_m g_a}{N_0 g_m} f_0(\varepsilon - \varepsilon^*). \quad (8)$$

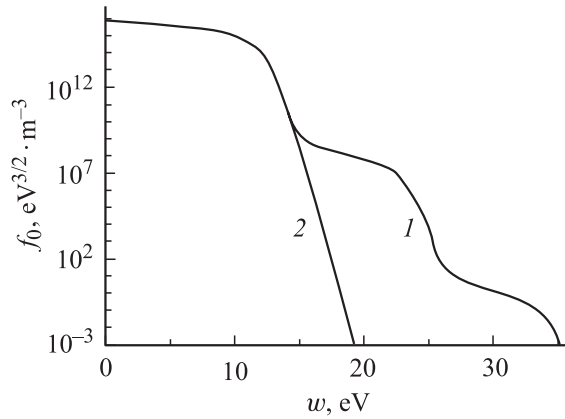


Рис. 6. Функции распределения на оси ($r = 0$), рассчитанные с учетом ударов второго рода (1) и без них (2) для $p = 1$ Torr, $R = 1$ cm и $I = 10$ mA.

И хотя амплитуда (абсолютное значение) ее в $\sim n_m/N_0$ раз меньше, чем низкоэнергетической части EDF при $\varepsilon \leq \varepsilon^*$, уже через несколько электрон-вольт от порога ε^* она превышает f_{0h} . Это связано с малостью значения T_{et} (6) и быстрым спадом f_{0h} (5) с энергией. Поскольку $f_0(\varepsilon - \varepsilon^*)$ вблизи порога ε^* меняется слабо (хорошей аппроксимацией здесь является линейная зависимость

$$f_0(\varepsilon) = c_n \left(1 - \frac{\varepsilon}{\varepsilon_1 + T_{et}}\right)$$

[9]), в итоге происходит существенное обогащение высокоэнергетической части EDF за счет своеобразного копирования туда тела EDF. В свою очередь это приводит к изменению констант возбуждения высоких уровней и прямой ионизации. Знание заселенностей таких состояний представляет интерес в источниках для масспектрометрии и оптической эмиссионной спектроскопии [30]. Для иллюстрации в табл. 4 представлено относительное изменение констант возбуждения различных высоковозбужденных состояний и прямой ионизации при использовании EDF, полученных при учете и без учета ударов 2-го рода медленных электронов с метастабильными атомами для режима $N_0 = 10^{17}$ cm $^{-3}$, $R = 1$ cm, $I = 10$ mA. Видно, что результаты сильно различаются, так что этот эффект необходимо учитывать при расчетах высоковозбужденных состояний в газах, имеющих долгоживущие метастабильные состояния.

Результаты расчетов также показали (табл. 3), что малых токах вклад пеннинговской ионизации в образование электронов может быть значительным. Как уже указывалось выше, в этом случае может наблюдаться такое интересное и необычное для РС явление, как растущая VAC. Напомним, что на практике обычно наблюдаются падающие VAC [16]. Поэтому для стабильного горения РС на практике требуется использование нагрузочных сопротивлений, потребляющих дополнительную электрическую мощность. В этой связи очевидно, что поиски режимов с растущей VAC, позволяющие избавиться от

Таблица 4. Отношение констант возбуждения и прямой ионизации, рассчитанные по EDF с учетом и без учета ударов 2 рода для режима $N_0 = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $R = 1 \text{ cm}$, $I = 10 \text{ mA}$

| № | Уровень | ϵ , eV | Отношение констант возбуждения |
|----|--|-----------------|--------------------------------|
| 1 | $3d_3^{7/2}$ | 14.01 | 1.5 |
| 2 | $3d_2^{5/2}, 5s_2^{3/2}$ | 14.06 | 1.7 |
| 3 | $3d_3^{5/2}, 5s_1^{3/2}$ | 14.09 | 1.9 |
| 4 | $3d_1^{3/2}$ | 14.15 | 2.1 |
| 5 | $3d_2^{5/2}$ | 14.21 | 2.3 |
| 6 | $3d_2^{5/2}, 3d_2^{3/2}, 5s_0^{1/2}, 3s_1^{5/2}$ | 14.23 | 2.4 |
| 7 | $3d_1^{3/2}$ | 14.30 | 2.7 |
| 8 | $3d_1^{1/2}$ | 14.71 | 19 |
| 9 | $6p_1^{1/2}, 6p_1^{3/2}, 6p_2^{3/2}$ | 15.20 | 109 |
| 10 | Ag^+ | 15.76 | 2670 |

использования балластных потерь энергии, важны для приложений. Физические причины возможной реализации растущей VAC можно пояснить, выделяя главные члены в балансе концентраций частиц [21]. Концентрация метастабильных атомов n_m в РС не слишком низких давлений, когда можно пренебречь их диффузионной гибелью на стенках, определяется рождением за счет возбуждения с основного состояния (константа k^*) и гибелью за счет перехода на близлежащий резонансный уровень (константа k_q)

$$n_m \simeq N_0 k^* / k_q. \tag{9}$$

Соответственно если главным механизмом ионизации является пеннинговская ионизация с константой k_p , то для концентрации электронов имеем

$$n_e \simeq k_p n_m^2 \tau_a \simeq k_p \tau_a (N_0 k^*)^2 / k_q^2. \tag{10}$$

где τ_a — амбиполярное время жизни.

Из (10) видно, что, для того чтобы с ростом тока увеличивалась концентрация электронов, необходимо увеличение константы k^* , т.е. должен происходить небольшой рост поля (все остальные коэффициенты в (10) слабо зависят от поля). Поскольку такие режимы представляют большой практический интерес, нами были проведены специальные модельные расчеты. Они показали, что при $pR > 1-3 \text{ cm} \cdot \text{Torr}$ и токах $I = 1-100 \text{ mA}$ реализуются условия, когда вклад пеннинговской ионизации является значительным. На рис. 7 представлены расчетные VAC для условий $p = 1 \text{ Torr}$, $R = 1 \text{ cm}$. Спад поля при малых токах связан с уже упоминаемым уменьшением толщины пристеночного слоя объемного заряда. Для выбранного набора реакций из табл. 2 (кривая 1), примерно с токов в 5 mA намечается незначительный рост VAC, который, как показывает сопоставление слагаемых в балансе n_e , обусловлен доминирующим вкладом процесса пеннинговской ионизации. Анализ литературы показал, что используемое нами в расчетах

(табл. 2) значение константы пеннинговской ионизации $k_p = 6.2 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ из [31] отличается в 2 раза от литературных данных — $k_p = 1.2 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ (см., например, [32]). Если использовать это значение k_p , то на расчетных VAC в диапазоне токов 5–50 mA получается более отчетливый рост поля. С дальнейшим ростом тока VAC выполаживается, что связано с увеличением вклада ступенчатой ионизации. Действительно, если главным механизмом ионизации является ступенчатая с константой k_{st} , то при подстановке (9) в баланс для концентрации электронов по аналогии с (10) имеем

$$n_e \simeq k_{st} n_m n_e \tau_a \simeq n_e k_{st} \tau_a N_0 k^* / k_q. \tag{11}$$

Поскольку левая и правая части здесь имеют одинаковую зависимость от концентрации электронов, то из (11) следует независимость тока от поля, т.е. горизонтальная VAC (рис. 7). К сожалению, из-за чувствительности результатов к выбору констант ступенчатой и пеннинговской ионизации выводы для каждой конкретной ситуации пока сделать трудно. В частности, необходимо оценить вклад многоступенчатой ионизации [32], для расчета которой необходимо решать систему уравнений баланса для большого числа возбужденных состояний. Поэтому для однозначного ответа на возможность реализации такого интересного и практически важного явления, как формирование растущей VAC в РС, необходимы дополнительные численные и лабораторные эксперименты.

Таким образом, в работе проведено самосогласованное моделирование плазмы положительного столба DC разряда в аргоне. Показано, что локальное приближение для расчета функции распределения электронов применимо практически для всех реально используемых на практике условий диффузионного режима горения РС. Рассмотрен ряд важных эффектов с участием метастабильных атомов, которые могут существенно повлиять на параметры плазмы РС. В частности, за счет обогащения быстрой части EDF в результате ударов 2-го

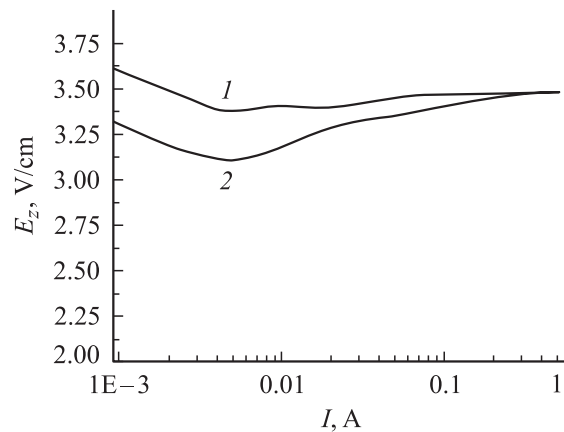


Рис. 7. Расчетные VAC положительного столба разряда в аргоне для $p = 1 \text{ Torr}$, $R = 1 \text{ cm}$: 1 — с константой пеннинговской ионизации $k_p = 6.2 \cdot 10^{-16} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$, 2 — с $k_p = 1.2 \cdot 10^{-15} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$.

рода, существенно возрастают значения констант прямого возбуждения высоколежащих уровней. Показано, что при малых токах уменьшение толщины пристеночного слоя объемного заряда приводит к падению VAC, в то время как пеннинговская ионизация может приводить к росту VAC.

Работа выполнена при поддержке CRDF NSTM (грант № RP-1-567-ST-03) Л.Д. Цендину благодарен за поддержку РФФИ (проект № 01-02-16874) и NATO SfP (№ 974 354).

Список литературы

- [1] *Lieberman M., Lichtenberg A.* Principles of Plasma Discharges and Materials Processing. New York: Wiley, 1994.
- [2] *Kouznnetsov I.G., Lichtenberg A.J., Lieberman M.A.* // PSST. 1996. Vol. 5. P. 662–676.
- [3] *Bukowski J.D., Graves D.B., Vitello P.* // J. Appl. Phys. 1996. Vol. 80. P. 2614–2623.
- [4] *Kiehlbauch M.W., Graves D.B.* // J. Appl. Phys. 2002. Vol. 91. N 6. P. 3539–3546.
- [5] *Gudmindsson J.T., Kouznnetsov I.G., Patel K.K., Liebermann M.A.* // J. Phys. D. 2002. Vol. 34. P. 1100–1112.
- [6] *Shkarovsly I.P., Johnson T.W., Bachinski M.P.* The Particle Kinetics of Plasmas. Addison–Wesley. MA, 1966.
- [7] *Kudryavtsev A.A., Tsendin L.D.* // Tech. Phys. 1999. Vol. 44. N 11. P. 1290–1297.
- [8] *Kudryavtsev A.A., Tsendin L.D.* // Tech. Phys. Lett. 2002. Vol. 28. N 10. P. 841–844.
- [9] *Богданов Е.А., Кудрявцев А.А., Цендин Л.Д., Арсланбеков Р.Р., Колобов В.И., Кудрявцев В.В.* // ЖТФ. 2003. Т. 73. № 8. С. 45–55.
- [10] *Bogdanov E.A., Kudryavtsev A.A., Tsendin L.D., Arslanbekov R.R., Kolobov V.I., Kudryavtsev V.V.* // Tech. Phys. 2003. Vol. 48. N 8. P. 983–994.
- [11] <http://www.siglo-kinema.com/BOLSIG>. Boltzmann solver for the SIGLO-series. CPA Toulouse & Kinema Software.
- [11] <http://www.cfdrc.com/~cfdplasma>.
- [12] *Tsendin L.D.* // Plasma Souse Sci. Technol. 1995. Vol. 4. P. 200–211.
- [13] *Behnke J., Golobovsky Yu., Nismov S.U., Porokhova I.A.* // Contrib. Plasma. Phys. 1996. Vol. 36. N 1. P. 75–91.
- [14] *Rozhansky A.V., Tsendin L.D.* Transport Phenomena in Partially Ionized Plasma. London and New York: Taylor & Francis, 2001.
- [15] *Ginsburg V.L., Gurevich A.V.* // Usp. Fiz. Nauk. 1960. Vol. 70. P. 201–246.
- [16] *Райзер Ю.П.* Физика газового разряда. М.: Наука, 1987. Raizer Yu.P. Gas Discharge Physics. New York: Springer, 1991.
- [17] *Привалов В.Е.* // Квантовая электрон. 1977. Т. 4. № 1. С. 2085–2111.
- [18] *Морозов Д.А., Степанов В.А., Чиркин М.В.* // Физика плазмы. 1998. Т. 24. № 7. С. 656–661.
- [19] *Lawler J.E., Kortshagen U.* // J. Phys. D. 1999. Vol. 32. P. 3188–3198.
- [20] *Golubovskii Yu., Porokhova I.A., Benke J., Bende J.P.* // J. Phys. D. 1999. Vol. 32. P. 456–470.
- [21] *Sommerer T.J.* // J. Phys. D. 1996. Vol. 29. P. 769–778.
- [22] *Bretagne J., Capitelli M., Gorse C., Puech V.* // Europhys. Lett. 1987. Vol. 3. N 11. P. 1179–1184.
- [23] *CFD Research Corporation. CFD-PLASMA User Manual* — CFD Research Corporation. Huntsville. 1999–2002.
- [24] *Kortshagen U., Parker G.I., Lawler J.E.* // Phys. Rev. E. 1996. Vol. 54. N 6. P. 6746–6761.
- [25] *Kortshagen U., Lawler J.E.* // J. Phys. D. 1999. Vol. 32. P. 2737–2745.
- [26] *Kawamura E., Ingold J.H.* // J. Phys. D. 2001. Vol. 34. N 7. P. 3150–3163.
- [27] *Phelps A.V.* // JILA Report. 1985. N 28. (ftp://jila.colorado.edu/collision_data/electronneutral).
- [28] *Hayashi M.* // Ar cross section set (ftp://jila.colorado.edu/collision_data/hayashi.txt).
- [29] *Bogaerz A., Gijbels R.* // Phys. Rev. A. 1995. Vol. 52. N 5. P. 3743–3751.
- [30] *Bogaerz A., Gijbels R., Vlcek J.* // J. Appl. Phys. 1998. Vol. 84. N 1. P. 121–136.
- [31] *Kolokolov N.B., Kudryavtsev A.A., Blagoev A.B.* // Physica Scripta. 1994. Vol. 50. P. 371–402.
- [32] *Биберман Л.Д., Воробьев В.С., Якубов И.Т.* Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. М.: Наука, 1982. Biberman L.M., Vorob'ev V.S., Yakubov I.T. Kinetics of Nonequilibrium Low-temperature Plasmas. Consultants Bureau. New York & London.