

01;02;03;04

## Численный расчет энергетического спектра тяжелых ионов в катодном слое тлеющего разряда в смеси газов

© В.И. Кристья

Научно-исследовательский институт материалов электронной техники,  
248650 Калуга, Россия

(Поступило в Редакцию 23 апреля 1997 г.)

Разработан метод численного решения уравнения для функции распределения тяжелых ионов по полным энергиям в катодном слое тлеющего разряда в смеси инертных газов, требующий намного меньших затрат машинного времени, чем метод Монте-Карло. Показано, что он позволяет с удовлетворительной точностью рассчитать энергетический спектр тяжелых ионов, бомбардирующих катод в приборах тлеющего разряда.

Во многих газоразрядных приборах, таких как газовые лазеры и дисплеи, рабочей средой является смесь инертных газов, содержащая легкий газ с небольшой добавкой тяжелого. Их долговечность во многих случаях определяется временем распыления катода, причем основной вклад в распыление вносят ионы тяжелой компоненты [1,2]. Для моделирования эволюции эмиссионной поверхности катода в таком разряде необходимо знать функцию распределения по энергиям ионов тяжелой компоненты смеси.

Функция распределения ионов по энергиям в катодном слое разряда рассчитывалась аналитическими методами в ряде работ [3–6] для разряда в чистом газе. Однако использование такой ФРИ для вычисления скорости распыления катода в смеси газов, как показано в [7], может приводить к качественно неверным результатам. Моделирование же функции распределения ионов методом Монте-Карло [8,9] требует больших затрат машинного времени, что ограничивает его применимость при моделировании процесса распыления катода в плазме тлеющего разряда в газовых смесях. В работе [10] предложено уравнение для функции распределения ионов тяжелой компоненты смеси по полным энергиям и найдено его аналитическое решение в приближении непрерывного торможения тяжелого иона в легком газе. Полученное выражение для функции распределения ионов позволяет с удовлетворительной точностью вычислить скорость распыления катода в смеси газов. Однако оно не описывает ряда особенностей реальной функции распределения ионов (в частности, ее высокоэнергетический хвост, обусловленный стохастической природой ион-атомных столкновений, не учитываемой в рамках приближения непрерывного торможения иона в газе).

В данной работе разработан метод численного решения предложенного в [10] уравнения для функции распределения ионов тяжелой компоненты, позволяющий рассчитать энергетический спектр тяжелых ионов без использования приближения непрерывного торможения и требующий намного меньших затрат машинного времени, чем метод Монте-Карло.

При движении иона в собственном газе в катодном слое разряда основным процессом ион-атомного взаимо-

действия является резонансная перезарядка, сечение которой значительно превосходит сечение упругих столкновений, а также сечение ионизации атома электроном. В смеси с небольшим содержанием тяжелого газа существенное влияние на движение тяжелых ионов могут оказывать их упругие столкновения с атомами легкого газа между перезарядками на атомах собственного газа. Нерезонансная же перезарядка на атомах легкого газа может не приниматься во внимание, так как ее сечение для инертных газов при энергиях ионов меньше 1 keV мало [11].

Если соотношение масс атомов двух компонент смеси велико ( $M_H/M_L \gg 1$ ), то отклонение траекторий тяжелых ионов от нормали к поверхности катода мало [10] и их движение можно рассматривать как одномерное. Тогда, если считать, что ось  $z$  направлена по нормали к поверхности катода, координата  $z = 0$  соответствует границе плазмы и катодного слоя, а  $z = d_c$  — поверхности катода, функция распределения ионов тяжелой компоненты  $f(z, \varepsilon)$  в катодном слое удовлетворяет уравнению [10]

$$\frac{\partial f}{\partial z} - e \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{\lambda_c} [\delta(\varepsilon) - f] + \frac{1}{\lambda_e} \left[ \int_{\varepsilon}^{\varepsilon/(1-\gamma)} \frac{f(z, \varepsilon') d\varepsilon'}{\gamma \varepsilon'} - f \right] \quad (1)$$

с граничным условием  $f(0, \varepsilon) = \delta(\varepsilon - \varepsilon_0)$ , где  $\lambda_c$  и  $\lambda_e$  — длины резонансной перезарядки тяжелых атомов и их упругих столкновений с легкими атомами,  $\gamma = 4M_H M_L / (M_H + M_L)^2$ ,  $\varphi$  — потенциал электрического поля,  $\varepsilon_0$  — энергия ионов на границе катодного слоя.

Интегрирование уравнения (1) по  $\varepsilon$  дает закон сохранения ионного потока

$$\int f(z, \varepsilon) d\varepsilon = 1. \quad (2)$$

Вводя вместо  $\varepsilon$  новую переменную

$$s = \varepsilon + e\varphi(z), \quad (3)$$

получим из (1) уравнение для функции  $f(z, s)$ , содержащее производную лишь по одной переменной,

$$\frac{\partial f}{\partial z} + \left[ \frac{1}{\lambda_c} + \frac{1}{\lambda_e} \right] f = \frac{1}{\lambda_c} \delta(s - e\varphi) + \frac{1}{\lambda_e} \int_s^{s_m} \frac{f(z, s') ds'}{\gamma(s' - e\varphi)}, \quad (4)$$

где

$$s_m = \begin{cases} [s - \gamma e\varphi]/(1 - \gamma), & s < \varepsilon_0(1 - \gamma) + \gamma e\varphi, \\ \varepsilon_0, & s \geq \varepsilon_0(1 - \gamma) + \gamma e\varphi. \end{cases}$$

Интегрируя уравнение (4), найдем

$$\begin{aligned} f(z, s) = & \int_0^z dz' \exp \left[ \left( \frac{1}{\lambda_c} + \frac{1}{\lambda_e} \right) (z' - z) \right] \\ & \times \left[ \frac{1}{\lambda_c} \delta(s - e\varphi) + \frac{1}{\lambda_e} \int_s^{s_m} \frac{f(z', s') ds'}{\gamma(s' - e\varphi)} \right] \\ & + \delta(s - \varepsilon_0) \exp \left[ - \left( \frac{1}{\lambda_c} + \frac{1}{\lambda_e} \right) z \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

Представим функцию  $f(z, s)$  в виде

$$f(z, s) = \delta(s - \varepsilon_0) \exp \left[ - \left( \frac{1}{\lambda_c} + \frac{1}{\lambda_e} \right) z \right] + h(z, s). \quad (6)$$

Первое слагаемое в выражении (6) представляет собой функцию распределения ионов первичного ионного пучка, поступающего в катодный слой из разряда, а второе — функцию распределения вторичных ионов, образующихся в катодном слое при перезарядке и упругих столкновениях первичных ионов. Подставляя (6) в (5), получим уравнение для  $h(z, s)$

$$\begin{aligned} h(z, s) = & \int_0^z dz' \exp \left[ \left( \frac{1}{\lambda_c} + \frac{1}{\lambda_e} \right) (z' - z) \right] \\ & \times \left[ \frac{1}{\lambda_c} \delta(s - e\varphi) + \frac{1}{\lambda_e} \right. \\ & \times \left. \int_s^{s_m} \frac{\delta(s' - \varepsilon_0) \exp \left[ - (1/\lambda_c + 1/\lambda_e) z' \right] + h(z', s')}{\gamma[s' - e\varphi(z')] } ds' \right]. \end{aligned} \quad (7)$$

После дифференцирования по  $z$  его можно привести к виду

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial z} = & - \left( \frac{1}{\lambda_c} + \frac{1}{\lambda_e} \right) h(z, s) + \frac{1}{\lambda_c} \delta(s - e\varphi) \\ & + \frac{1}{\lambda_e} \exp \left[ - \left( \frac{1}{\lambda_c} + \frac{1}{\lambda_e} \right) z \right] \frac{\theta \{ s - [\varepsilon_0 - \gamma(\varepsilon_0 - e\varphi)] \}}{\gamma(\varepsilon_0 - e\varphi)} \\ & + \frac{1}{\lambda_e} \int_s^{s_m} \frac{h(z, s')}{\gamma(s' - e\varphi)} ds', \end{aligned} \quad (8)$$

где  $\theta(x)$  — ступенчатая функция Хевисайда.

Граничное условие для уравнения (8) следует из граничного условия для функции  $f(z, s)$  и имеет вид  $h(0, s) = 0$ . Функция  $h(z, s)$ , как следует из (3), отлична от нуля в интервале от  $e\varphi(z)$  до  $\varepsilon_0$ , а условие сохранения ионного потока (2) после подстановки соотношения (6) принимает вид

$$\int_{e\varphi}^{\varepsilon_0} h(z, s) ds = 1 - \exp \left[ - \left( \frac{1}{\lambda_c} + \frac{1}{\lambda_e} \right) z \right]. \quad (9)$$

Для нахождения численного решения уравнения (8) может быть использован метод, близкий к предложенному в работе [12] для решения кинетического уравнения для функции распределения электронов в катодном слое разряда.

Разобьем интервал  $[0, d_c]$  вдоль оси  $z$  на  $n$  отрезков длиной  $\Delta z = d_c/n$ , координаты границ которых равны  $z_i = i\Delta z$ ,  $i = 0, 1, \dots, n$ . Интервал  $[e\varphi(z_i), \varepsilon_0]$  изменения  $s$  в каждом сечении  $z = z_i$  разобьем на  $m$  отрезков длиной  $\Delta s_i = (\varepsilon_0 - e\varphi(z_i))/m$ , т.е.  $s_k^i = e\varphi(z_i) + k\Delta s_i$ ,  $k = 0, 1, \dots, m$ . В начальном сечении, как следует из граничного условия для уравнения (8), имеем  $h(z_0, s_0^0) = 0$ . Для нахождения значений функции  $h(z, s)$  в других сечениях из уравнения (8) может быть использован метод Коши–Эйлера [13], который дает

$$h(z_i, s_k^i) = h(z_{i-1}, s_k^i) + h_z(z_{i-1}, s_k^i) \Delta z. \quad (10)$$

Значения  $h(z_{i-1}, s_k^i)$  определяются интерполированием по известным значениям  $h(z_{i-1}, s_k^i)$  при  $s_k^i \geq s_0^{i-1}$  и считаются равными нулю при  $s_k^i < s_0^{i-1}$ . Функция  $h_z(z_{i-1}, s_k^i)$  есть конечно-разностная аппроксимация правой части уравнения (8)

$$\begin{aligned} h_z(z_{i-1}, s_k^i) = & - \left( \frac{1}{\lambda_c} + \frac{1}{\lambda_e} \right) h(z_{i-1}, s_k^i) + \theta(-s_k^i + s_0^{i-1}) \alpha_k^i \\ & + \frac{1}{\lambda_e} \exp \left[ - \left( \frac{1}{\lambda_c} + \frac{1}{\lambda_e} \right) z_{i-1} \right] \frac{\theta(s_k^i + \varepsilon_m^{i-1} - \varepsilon_0)}{\varepsilon_m^{i-1}} \\ & + \frac{1}{\lambda_e} \int_{s_k^i}^{\tau_m^i} \frac{h(z_{i-1}, s')}{\gamma[s' - e\varphi(z_{i-1})]} ds', \end{aligned} \quad (11)$$

где

$$\varepsilon_m^{i-1} = \gamma[\varepsilon_0 - e\varphi(z_{i-1})],$$

$$\tau_m^i = \begin{cases} [s_k^i - \gamma e\varphi(z_{i-1})]/(1 - \gamma), & s_k^i < \varepsilon_0(1 - \gamma) + \gamma e\varphi(z_{i-1}), \\ \varepsilon_0, & s_k^i \geq \varepsilon_0(1 - \gamma) + \gamma e\varphi(z_{i-1}). \end{cases}$$

Функция  $\alpha_k^i$  описывает распределение ионов, подвергшихся перезарядке на отрезке  $[z_{i-1}, z_i]$  в интервале  $[s_0^i, s_0^{i-1}]$ . Выбор ее правильного вида, как показывают расчеты, оказывает существенное влияние на рассчитываемую функцию распределения ионов. Так как  $\Delta z \ll \lambda_e$ ,

то она может быть найдена из уравнения (8) в пренебрежении упругим рассеянием ионов на расстоянии  $\Delta z$  после перезарядки, что дает

$$\alpha_k^i = \frac{\exp(z_{sk}^i/\lambda_c)}{\lambda_c e \varphi'(z_{sk}^i) [\exp(z_{s0}^{i-1}/\lambda_c) - \exp(z_{s0}^i/\lambda_c)]}, \quad (12)$$

где значения  $z_{sk}^i$ ,  $z_{s0}^i$ ,  $z_{s0}^{i-1}$  определяются уравнением  $s - e\varphi(z) = 0$  при  $s$ , равном соответственно  $s_k^i$ ,  $s_0^i$ ,  $s_0^{i-1}$ .

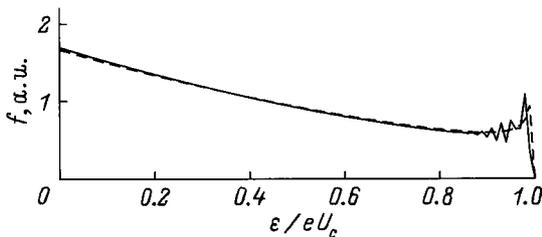
Во избежание несохранения величины ионного тока, обусловленного погрешностями дискретизации, на каждом шаге по  $z$  производится перенормировка функции  $h(z, s)$  на основе соотношения (9). Используя соотношения (6), (9)–(12) последовательно при  $i = 1, 2, \dots, n$ , можно найти энергетический спектр тяжелых ионов на всем протяжении катодного слоя от границы с плазмой до поверхности катода.

Для оценки точности предложенного метода решения уравнения (1) были проведены расчеты при отсутствии упругих столкновений тяжелых ионов с атомами легкого газа ( $\lambda_e \gg d_c$ ). В этом случае скорости ионов направлены вдоль оси  $z$  и функция распределения ионов в пренебрежении их начальной энергией  $\varepsilon_0$  на границе катодного слоя определяется выражением [3,10]

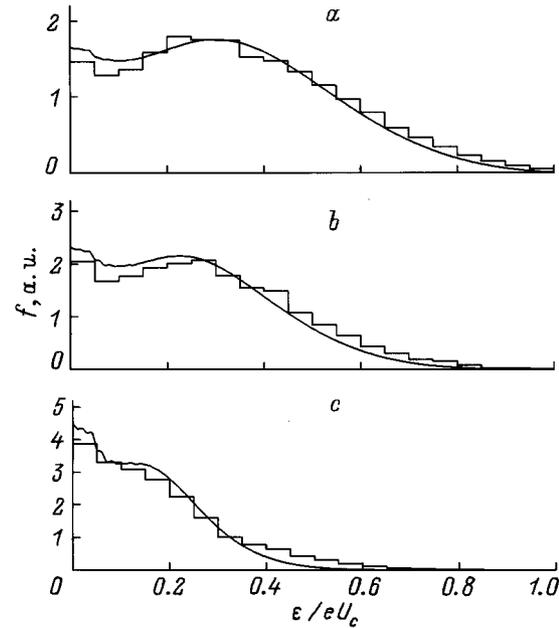
$$f(z, \varepsilon) = \frac{1}{e|\varphi'[z_0(\varepsilon)]} \left[ \delta[z_0(\varepsilon)] + \frac{1}{\lambda_c} \exp\left(\frac{z_0(\varepsilon)}{\lambda_c}\right) \right] \exp\left(-\frac{z}{\lambda_c}\right), \quad (13)$$

где зависимость  $z_0(\varepsilon)$  дается соотношением  $\varepsilon = e[\varphi(z_0) - \varphi(z)]$ .

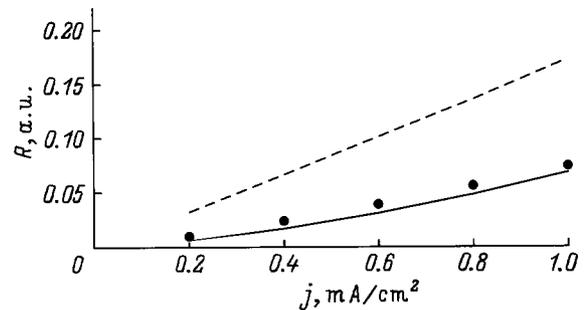
Результаты, полученные для случая квадратичной зависимости  $\varphi(z)$  [3,14] ( $\varphi(z) = -U_c(z/d_c)^2$ ,  $U_c$  — катодное падение потенциала) и  $m = n = 100$ , приведены на рис. 1, откуда следует, что при данном количестве разбиений пространственного и энергетического интервалов изменения функции  $h(z, s)$  численное решение достаточно хорошо совпадает с точным. Поэтому эти значения  $m$  и  $n$  использовались и в дальнейших расчетах функции распределения ионов при наличии упругих столкновений, когда точное решение задачи отсутствует.



**Рис. 1.** Функция распределения ионов у поверхности катода, рассчитанная данным методом (сплошная линия), и точное решение (13) (штриховая линия) при отсутствии упругих столкновений тяжелых ионов с легкими атомами ( $\lambda_e/d_c = 0.313$ ,  $\lambda_e/d_c \gg 1$ ).



**Рис. 2.** Функция распределения ионов тяжелой компоненты у поверхности катода в гелий-неоновой смеси, рассчитанные данным методом (кривые) и методом Монте-Карло (гистограммы) для трех разрядных режимов.  $j$ , mA/cm<sup>2</sup>:  $a$  — 1.0,  $b$  — 0.6,  $c$  — 0.2;  $U_c$ , V:  $a$  — 291,  $b$  — 272,  $c$  — 250;  $d_c$ , cm:  $a$  — 0.230,  $b$  — 0.269,  $c$  — 0.409;  $\lambda_c/d_c$ :  $a$  — 0.313,  $b$  — 0.226,  $c$  — 0.124;  $\lambda_e/d_c$ :  $a$  — 0.125,  $b$  — 0.090,  $c$  — 0.050.



**Рис. 3.** Зависимость усредненного по энергетическому спектру ионов коэффициента распыления катода от плотности разрядного тока в гелий-неоновой смеси при  $\varepsilon_i = 30$  eV, найденная методом Монте-Карло (точки), данным методом (сплошная линия) и на основе функции распределения ионов (13) для чистого газа (штриховая линия).

На рис. 2 приведена функция распределения ионов для трех плотностей разрядного тока  $j$  в гелий-неоновой смеси 15 : 1 при давлении 6 Torr и температуре 300 K ( $\varepsilon_0 = 4$  eV, значения  $U_c$  и  $d_c$  определялись из модели Астона [1]), найденная данным методом, а также полученная путем двумерного моделирования движения ионов в катодном слое методом Монте-Карло по методике работы [10]. Видно, что предложенный в данной работе метод расчета функции распределения ионов дает результаты, близкие к результатам двумерного моделирования.

Затраты же времени при использовании одномерной модели примерно на порядок меньше, причем в отличие от метода Монте-Карло они не возрастают с увеличением отношения  $d_c/\lambda_c$ .

На рис. 3 представлены зависимости усредненного по энергиям ионов коэффициента распыления катода

$$R = \int Y(\varepsilon)f(d_c, \varepsilon) d\varepsilon \quad (14)$$

от плотности разрядного тока, рассчитанные на основе функции распределения ионов, найденной различными методами ( $Y(\varepsilon = a(\varepsilon - \varepsilon_t)^2$  — коэффициент распыления катода ионами [1],  $\varepsilon_t$  — пороговая энергия распыления,  $a$  — постоянная для данного сорта ионов и материала катода). Имеет место хорошее согласие результатов, полученных из одномерной и двумерной моделей.

Следовательно, предложенный в данной работе метод, основанный на численном решении одномерного уравнения для функции распределения ионов по полным энергиям, позволяет с удовлетворительной точностью и без больших затрат машинного времени рассчитать энергетический спектр тяжелых ионов в катодном слое тлеющего разряда в смеси инертных газов. Он может быть использован при создании самосогласованной модели, описывающей взаимодействие плазмы тлеющего разряда сложного состава с поверхностью катода.

## Список литературы

- [1] Hall L.H. // J. Appl. Phys. 1988. Vol. 64. N 5. P. 2630–2637.
- [2] Бондаренко Г.Г., Коржавый А.П., Кристья В.И. и др. // Металлы. 1996. N 5. С. 54–60.
- [3] Abril I., Gras-Marti A., Valles-Abarca J.A. // Phys. Rev. A. 1983. Vol. 28. N 6. P. 3677–3678.
- [4] Кучинский В.В., Сухомлинов В.С., Шейкин Е.Г. // ЖТФ. 1985. Т. 55. Вып. 1. С. 67–72.
- [5] Konovalov V.P., Bretagne J., Gousset G. // J. Phys. D. 1992. Vol. 25. N 7. P. 1073–1079.
- [6] Фирсов О.Б., Кучинский В.В. // Физика плазмы. 1992. Т. 18. Вып. 1. С. 114–118.
- [7] Korgiaviy A.P., Kristya V.I. // J. Appl. Phys. 1991. Vol. 70. N 9. P. 5117–5118.
- [8] Thompson B.E., Sawin H.H. // J. Appl. Phys. 1988. Vol. 63. N 7. P. 2241–2251.
- [9] Farouki R.T., Hamaguchi S., Dalvie M. // Phys. Rev. A. 1991. Vol. 44. N 4. P. 2664–2681.
- [10] Кристья В.И. // ЖТФ. 1996. Т. 66. Вып. 6. С. 8–14.
- [11] Хастед Дж. Физика атомных столкновений. М.: Мир, 1965. 710 с.
- [12] Paulick T.C. // J. Appl. Phys. 1990. Vol. 67. N 6. P. 2774–2788.
- [13] Поттер Д. Вычислительные методы в физике. М.: Мир, 1975. 392 с.
- [14] Коржавый А.П., Кристья В.И. // ЖТФ. 1993. Т. 63. Вып. 2. С. 200–202.