

01;04

## Обоснование двухтемпературной кинетической (2 T fluid) модели с помощью сопоставления кинетического и fluid расчетов при моделировании плазмы положительного столба кислородного разряда постоянного тока

© Е.А. Богданов, А.А. Кудрявцев, Л.Д. Цендин,<sup>1</sup> Р.Р. Арсланбеков,<sup>2</sup> В.И. Колобов,<sup>2</sup> В.В. Кудрявцев<sup>3</sup>

Санкт-Петербургский государственный университет,  
199034 Санкт-Петербург, Россия

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,  
195251 Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> CFDRС, 215 Wynn Drive, Huntsville, AL, USA

<sup>3</sup> CFD-Canada, 45 English Ivyway, Toronto  
e-mail: akud@ak2138.spb.edu

(Поступило в Редакцию 23 декабря 2002 г.)

С помощью коммерческого CFDRС software (<http://www.cfdrc.com/~cfdplasma>), позволяющего проводить симуляции в произвольной 3D геометрии с использованием как fluid уравнений для всех компонентов (fluid model), так и с решением кинетического уравнения для нахождения функции распределения электронов (kinetic model), проведено сопоставление кинетического и fluid расчетов при моделировании плазмы положительного столба разряда постоянного тока в кислороде. Показано, что как в локальном, так и в нелокальном режимах формирования EDF электронов ее немасквелловость, удовлетворительно учитывается с помощью аппроксимации двумя группами электронов. Это позволяет наиболее просто учесть кинетические эффекты в рамках традиционной fluid модели, используя для этого предложенную двухтемпературную аппроксимацию неравновесной и нелокальной EDF (2 T fluid model).

Повышенный интерес к исследованиям разрядов в молекулярных (в первую очередь электроотрицательных) газах связан с их широким использованием в современных плазменных технологиях [1]. Параметры газоразрядной плазмы можно определить при этом лишь с помощью самосогласованных моделей с учетом процессов переноса и плазмохимических объемных реакций для большого числа атомных и молекулярных компонентов смеси, находящихся в различных возбужденных и ионизованных состояниях. Наиболее употребительной на сегодняшний день является гидродинамическая (fluid) модель, которая широко используется для описания различных плазмохимических устройств (см., например, [1–3]). Для быстрой оценки параметров используется также упрощенный вариант модели — пространственно-усредненная (global) модель [4,5]. В этих моделях константы  $K_j$  реакций с участием электронов записываются в аррениусовском виде отношения энергии активации к температуре электронов ( $K_j \sim \exp(-E_j/T_e)$ ). Для нахождения  $T_e$  через среднюю энергию  $\bar{\epsilon} = 3T_e/2$ , которая подставляется в экспоненциальную зависимость  $K_j(T_e)$ , во fluid models используется уравнение баланса энергий всего электронного газа.

Для того чтобы такое описание было адекватным реальности, необходимо, чтобы функция распределения электронов (EDF) имела стандартный (максвелловский) вид. 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  $\epsilon > \epsilon_j$  обеднена электронами. При этом в зависимости от соотношения между характерной диффузионной длиной  $\Lambda$  (для цилиндра, например,  $\Lambda = R/2.4$ ) и длиной релаксации электронов по энергии  $\lambda_e$  EDF является локальной ( $\Lambda > \lambda_e$ ) или нелокальной в обратном случае ( $\Lambda < \lambda_e$ ) [8]. Вычисление  $\Lambda$  в разрядах разной геометрии описано, например, в [1]. Так, для плоскопараллельной геометрии ( $x = 0, L$ ),  $\Lambda = L/\pi$ . Напомним, что в первом приближении любую разрядную геометрию можно приближенно свести к плоскопараллельной, вводя эффективную длину  $L = V/S$ , где  $V$  — объем,  $S$  — площадь поверхности. Локальная EDF определяется значениями параметров плазмы в данном месте пространства и факторизуется в виде произведения  $f_0(w, r) = n_e(r)f_0^0(w)$ , где  $n_e(r)$  — концентрация электронов в точке  $r$ ,  $w$  — кинетическая энергия. Нелокальная же EDF определяется значениями физических характеристик (в первую очередь напряженностей полей) не в данной точке, а в области, определяемой длиной релаксации электронов  $\lambda_e \gg \lambda$  — длины свободного пробега электрона. Для нахождения EDF при  $\lambda_e = \Lambda$ , зависящий в этом случае только от полной энергии электрона  $\epsilon = w + e\phi(r)$  (кинетический плюс потенциальной), уравнение Больцмана необходимо усреднить по всему разрядному объему [8]. Соответственно характеристики всех процессов с уча-

стием электронов определяются этой пространственно-усредненной EDF  $f_0(\varepsilon)$ , которая может существенно отличаться от рассчитанной в локальном приближении. Для таких условий, которые реализуются при низких давлениях ( $p\Lambda \leq (0.1-1) \text{ см} \cdot \text{Торр}$ ), попытки „улучшения“ fluid model путем использования уточненных констант процессов с помощью EDF, найденной в локальном приближении, не гарантируют от ошибок и погрешностей.

Поскольку для реальной неравновесной EDF расчеты констант реакций в предположении максвелловского распределения не имеют особого физического смысла, то трудно даже качественно оценить погрешности получаемых при этом данных. Из анализа транспортных свойств также следует [9], что для слабоионизованной плазмы с неравновесной EDF замкнутую систему fluid уравнений переноса можно построить лишь в локальном режиме  $\Lambda > \lambda_e$ . Однако в этом случае уравнение переноса электронного газа не несет дополнительной информации и оказывается излишним. В нелокальном же режиме  $\Lambda < \lambda_e$  использование самой fluid model для электронов не имеет физического обоснования.

С другой стороны, при самосогласованном моделировании параметров многокомпонентной плазмы желательно иметь процедуру учета неравновесности и нелокальности EDF, менее вычислительно трудоемкую, чем полномасштабное решение уравнения Больцмана с учетом пространственного переноса. Поэтому актуальным является создание упрощенного кинетического описания, основанного на физически обоснованной модификации fluid модели для немаксвелловской EDF.

С этой целью в данной работе проведено сопоставление кинетического и fluid подходов при моделировании плазмы положительного столба (РС) кислородного разряда. Показано, что в соответствии в анализом [10] немаксвелловость EDF электронов как в локальном, так и в нелокальном режимах ее формирования удовлетворительно учитывается в рамках fluid модели с помощью аппроксимации двумя группами электронов, каждой из которых можно сопоставить свою температуру (среднюю энергию). Температура быстрых электронов  $T_{et}$ , определяет значения констант скоростей возбуждения и ионизации. В стационарном разряде частота ионизации, равная обратному времени жизни, для данного сорта газа является функцией только от параметра  $p\Lambda$  и слабо (логарифмически) зависит от  $p\Lambda$ . Поэтому при том же  $p\Lambda = \text{const}$  величина  $T_{et}$  практически одинакова для различных типов газовых разрядов [10]. От температуры же  $T_{eb}$  холодной части EDF зависят амбиполярные поля в плазме. В ряде важных случаев (см. ниже) оказывается, что температура эта вообще зависит только от сорта газа. Чтобы адаптировать классическую fluid модель для нахождения параметров газоразрядной плазмы, в работе рекомендована 2 T fluid модель, в которой константы процессов с участием электронов находятся при помощи предложенной аппроксимации для EDF (см. ниже (1), (2)).

Выбор положительного столба DC разряда связан с тем, что он является тестовым объектом и наиболее хорошо изучен как для атомарных, так и для молекулярных газов. В свою очередь из всех электроотрицательных газов для кислорода выполнено наибольшее число исследований и расчетов в различных приближениях (см., например, [11–15]).

Симуляция параметров разряда проводилась на коммерческом программном обеспечении, разработанного в CFD Research Corporation, Huntsville, AL, USA [16,17]. Подробная формулировка самосогласованной модели плазмы разряда, описание итерационной численной схемы и методов решения системы уравнений даны в [16,17]. 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 плотность тока  $j$ . Самосогласованное электрическое поле находилось из уравнения Пуассона. Описание тяжелых частиц проводилось в рамках fluid модели. Параметры же электронного газа можно было находить как при помощи fluid уравнений баланса их плотности и энергии, так и с помощью решения кинетического уравнения для EDF. Так как цель работы состоит в сопоставлении fluid и kinetic описания электронов при прочих равных условиях, то ряд проблем, напрямую не затрагивающих кинетику электронов, детально не анализировался. В частности, мы не будем учитывать нагрев тяжелых компонент [12,15], поскольку физические следствия этих эффектов неприципиальны для нахождения EDF. Мы рассмотрим этот вопрос в отдельном сообщении. Здесь же температура газа и ионов будет предполагаться равной комнатной и постоянной по сечению.

Набор учитываемых объемных плазмохимических процессов с участием различных молекулярных и атомных состояний кислорода приведен в табл. 1. При использовании fluid моделирования константы процессов с участием электронов находились путем свертки сечений с максвелловской EDF, а при кинетическом расчете — свертки с EDF, рассчитанной с помощью CDFRC Kinetic Module [16,17].

Для определенности в данной работе рассматривались условия положительного столба DC разряда в стеклянной трубке диаметром 12 mm в диапазоне давлений 0.05–3 Торр и разрядных токов 5–200 mA. Эти условия соответствуют исследованным в [12,18], где проведено одно из наиболее детальных, с нашей точки зрения, экспериментальных и теоретических исследований РС кислородного DC разряда.

Примеры типичных EDF, полученных при самосогласованных симуляциях газоразрядной плазмы РС разряда, представлены на рис. 1,2 для давлений газа  $p = 1$  и 0.15 Торр. Видно, что все EDF являются сильно неравновесными. Поэтому значения констант многих плазмохимических процессов значительно отличаются

Таблица 1. Набор используемых объемных плазмохимических процессов

№	Реакция	$\Delta\epsilon$ , eV	Константа
Упругое рассеяние электронов			
1	$e + O_2 \rightarrow e + O_2$	0	Cross Section (CS) [1]
2	$e + O_2(a^1\Delta) \rightarrow e + O_2(a^1\Delta)$	0	CS (copy of 1)
3	$e + O_2(b^1\Sigma) \rightarrow e + O_2(b^1\Sigma)$	0	CS (copy of 1)
4	$e + O_2(v_1) \rightarrow e + O_2(v_1)$	0	CS (copy of 1)
5	$e + O_2(Ry) \rightarrow e + O_2(Ry)$	0	CS (copy of 1)
6	$e + O \rightarrow e + O$	0	CS [3]
7	$e + O(^1D) \rightarrow e + O(^1D)$	0	CS (copy of 6)
8	$e + O(^1S) \rightarrow e + O(^1S)$	0	CS (copy of 6)
9	$e + O_3 \rightarrow e + O_3$	0	CS [5]
Неупругие процессы с участием электронов			
10	$e + O_2 \rightarrow O_- + O$	3.637	CS [1]
11	$e + O_2 \rightarrow e + O_2(v_1)$	0.19	CS [1]
12	$e + O_2(v_1) \rightarrow e + O_2$	-0.19	CS [1]
13	$e + O_2 \rightarrow e + O_2(v_2)$	0.38	CS [1]
14	$e + O_2 \rightarrow e + O_2(v_3)$	0.57	CS [1]
15	$e + O_2 \rightarrow e + O_2(v_4)$	0.75	CS [1]
16	$e + O_2 \rightarrow e + O_2(a^1\Delta)$	0.97	CS [1]
17	$e + O_2(a^1\Delta) \rightarrow e + O_2$	-0.97	Из детального баланса с 16
18	$e + O_2 \rightarrow e + O_2(b^1\Sigma)$	1.63	CS [1]
19	$e + O_2(b^1\Sigma) \rightarrow e + O_2$	-1.63	Из детального баланса с 18
20	$e + O_2 \rightarrow e + 2O$	5.12	CS [1]
21	$e + O_2 \rightarrow e + O + O(^1D)$	7.1	CS [1]
22	$e + O_2 \rightarrow 2e + O_2^+$	12.6	CS [1]
23	$e + O_2 \rightarrow 2e + O + O_+$	18.8	CS [1]
24	$e + 2O_2 \rightarrow O_2 + O_2^-$	-5.03	$k_{24} = 3.6E - 43T_e^{-0.5} m^6/s$
25	$e + O_2^+ \rightarrow 2O$	-6.96	Cross Section (CS) from [2]
26	$e + O_2^+ \rightarrow O + O(^1D)$	-5.0	CS [2]
27	$e + O_2(a^1\Delta) \rightarrow 2e + O_2^+$	11.63	CS [3]
28	$e + O_2(b^1\Sigma) \rightarrow 2e + O_2^+$	10.97	$k_{28} = 1.3E - 15T_e^{-1.1} \exp(-10.43/T_e) m^3/s$
29	$e + O_3 \rightarrow O_- + O_2$	-0.42	CS [5]
30	$e + O_3 \rightarrow O + O_2^-$	0.60	CS [5]
31	$e + O \rightarrow e + O(^1D)$	1.97	CS [4]
32	$e + O \rightarrow e + O(^1S)$	4.24	CS [4]
33	$e + O(^1S) \rightarrow e + O$	-4.24	Из детального баланса с 32
34	$e + O \rightarrow 2e + O_+$	13.67	CS [4]
35	$e + O(^1D) \rightarrow e + O$	-1.97	CS [4]
36	$e + O(^1D) \rightarrow 2e + O_+$	11.7	CS [4]
37	$e + O(^1S) \rightarrow 2e + O_+$	9.43	$k_{37} = 6.6E - 15T_e^{0.6} \exp(-9.43/T_e) m^3/s$
38	$e + O_- \rightarrow 2e + O$	1.53	$k_{38} = 1.95E - 18T_e^{0.5} \exp(-3.4/T_e) m^3/s$
39	$e + O_+ \rightarrow O(^1D)$	-11.7	$k_{39} = 5.3E - 19T_e^{-0.5} m^3/s$
40	$2e + O_+ \rightarrow e + O(^1D)$	-11.7	$k_{40} = 5.12E - 39T_e^{-4.5} m^6/s$
41	$e + O \rightarrow e + O(3s^5S_0)$	9.15	CS [4]
42	$e + O \rightarrow e + O(3s^3S_0)$	9.51	CS [4]
43	$e + O \rightarrow e + O(3p^5P)$	10.73	CS [4]
44	$e + O \rightarrow e + O(3p^3P)$	10.98	CS [4]
45	$e + O_2 \rightarrow e + O_2(Rot)$	0.02	CS [1]
46	$e + O_2 \rightarrow e + O_2(v_5)$	0.19	CS [1]
47	$e + O_2 \rightarrow e + O_2(v_6)$	0.38	CS [1]
48	$e + O_2 \rightarrow e + O_2(^1\Pi_g)$	8.4	CS [1]
49	$e + O_2 \rightarrow e + O_2(a^1\Sigma_u^+)$	10.0	CS [1]
50	$e + O_2 \rightarrow e + O_2 + hv (130 nm)$	9.547	CS [1]
51	$e + O_2(a^1\Delta) \rightarrow e + O_2(b^1\Sigma)$	0.65	CS [1]
52	$e + O_2(b^1\Sigma) \rightarrow e + O_2(a^1\Delta)$	-0.65	CS [2]

Таблица 1 (продолжение).

53	$e + O_2 \rightarrow e + O_2(Ry)$	4.47	CS [1]
54	$e + O_2(Ry) \rightarrow e + O_2$	-4.47	CS [2]
55	$e + O_2(a^1\Delta) \rightarrow e + O_2(Ry)$	3.45	CS [2]
56	$e + O_2 \rightarrow e + O + O(^1S)$	9.36	CS [2]
57	$e + O_2(a^1\Delta) \rightarrow O + O_-$	2.57	CS [2]
58	$e + O_{2+} \rightarrow O_2(Ry)$	-7.66	CS [2]
59	$e + O_2 + O_3 \rightarrow O_2 + O_{3-}$	-0.679	$4.6E - 40 \text{ m}^3/\text{s}$
60	$e + O_{2+} \rightarrow O + O(^1S)$	-2.73	$2.42E - 13T_e^{-0.55} \text{ m}^3/\text{s}$
61	$e + O_{4+} \rightarrow 2O_2$	-0.8	$2.42E - 11T_e^{-0.5} \text{ m}^3/\text{s}$
62	$e + O_{4+} \rightarrow O_2 + O_2(Ry)$	3.68	$2.425E - 12T_e^{-0.5} \text{ m}^3/\text{s}$

## Реакции с тяжелыми частицами

63	$O_- + O_{2+} \rightarrow O + O_2$	$K_{63} = 5.96E - 11T_g^{-1} \text{ m}^3/\text{s}$
64	$O_- + O_{2+} \rightarrow 3O$	$k_{64} = 1E - 13 \text{ m}^3/\text{s}$
65	$O_- + O_{4+} \rightarrow 2O$	$k_{65} = 5.96E - 11T_g^{-1} \text{ m}^3/\text{s}$
66	$O_{2-} + O_{2+} \rightarrow 2O_2$	$k_{66} = 5.96E - 11T_g^{-1} \text{ m}^3/\text{s}$
67	$O_{2-} + O_{2+} \rightarrow O_2 + 2O$	$k_{67} = 1E - 13 \text{ m}^3/\text{s}$
68	$O_+ + O_{2-} \rightarrow O_2 + O$	$k_{68} = 5.96E - 11T_g^{-1} \text{ m}^3/\text{s}$
69	$O_{2+} + O_{3-} \rightarrow O_2 + O_3$	$k_{69} = 5.96E - 11T_g^{-1} \text{ m}^3/\text{s}$
70	$O_{2+} + O_{3-} \rightarrow 2O + O_3$	$k_{70} = 1E - 13 \text{ m}^3/\text{s}$
71	$O_+ + O_{3-} \rightarrow O + O_3$	$k_{71} = 5.96E - 11T_g^{-1} \text{ m}^3/\text{s}$
72	$O_- + O_{2+} + O_2 \rightarrow O + 2O_2$	$k_{72} = 3.066E - 31T_g^{-2.5} \text{ m}^6/\text{s}$
73	$O_- + O_+ + O_2 \rightarrow 2O + O_2$	$k_{73} = 3.066E - 31T_g^{-2.5} \text{ m}^3/\text{s}$
74	$O + O_- \rightarrow O_2 + e$	$k_{74} = 1.159E - 17T_g^{0.5} \text{ m}^3/\text{s}$
75	$O_- + O_2(a^1\Delta) \rightarrow O_3 + e$	$k_{75} = 1.738E - 17T_g^{0.5} \text{ m}^3/\text{s}$
76	$O_- + O_2(b^1\Sigma) \rightarrow O_2 + O + e$	$k_{76} = 4E - 17T_g^{0.5} \text{ m}^3/\text{s}$
77	$O_- + O_2 \rightarrow O_3 + e$	$k_{77} = 2.896E - 22T_g^{0.5} \text{ m}^3/\text{s}$
78	$O_- + O_3 \rightarrow 2O_2 + e$	$k_{78} = 1.744E - 17T_g^{0.5} \text{ m}^3/\text{s}$
79	$O_- + O_3 \rightarrow O + O_{3-}$	$k_{79} = 1.153E - 17T_g^{0.5} \text{ m}^3/\text{s}$
80	$O_- + O_3 \rightarrow O_2 + O_{2-}$	$k_{80} = 5.909E - 19T_g^{0.5} \text{ m}^3/\text{s}$
81	$O + O_{2-} \rightarrow O + O_{2-}$	$k_{81} = 8.69E - 18T_g^{0.5} \text{ m}^3/\text{s}$
82	$O + O_{2-} \rightarrow O_3 + e$	$k_{82} = 8.69E - 18T_g^{0.5} \text{ m}^3/\text{s}$
83	$O_2(a^1\Delta) + O_{2-} \rightarrow 2O_2 + e$	$k_{83} = 1.159E - 17T_g^{0.5} \text{ m}^3/\text{s}$
84	$O_{2-} + O_3 \rightarrow O_2 + O_{3-}$	$k_{84} = 3.746E - 17T_g^{0.5} \text{ m}^3/\text{s}$
85	$O + O_{3-} \rightarrow O_2 + O_{2-}$	$k_{85} = 1.448E - 17T_g^{0.5} \text{ m}^3/\text{s}$
86	$O + O_+ + O_2 \rightarrow O_2 + O_{2+}$	$k_{86} = 5.793E - 43T_g^{0.5} \text{ m}^6/\text{s}$
87	$O_+ + O_2 \rightarrow O + O_{2+}$	$k_{87} = 1.953E - 16T_g^{-0.4} \text{ m}^3/\text{s}$
88	$O_+ + O_3 \rightarrow O_2 + O_{2+}$	$k_{88} = 1E - 16 \text{ m}^3/\text{s}$
89	$O(^1D) + O \rightarrow 2O$	$k_{89} = 8E - 18 \text{ m}^3/\text{s}$
90	$O(^1D) + O_2 \rightarrow O + O_2(b^1\Sigma)$	$k_{90} = 2.56E - 17 \exp(+67/T_g) \text{ m}^3/\text{s}$
91	$O(^1D) + O_2 \rightarrow O + O_2(a^1\Delta)$	$k_{91} = 1.6E - 18 \exp(+67/T_g) \text{ m}^3/\text{s}$
92	$O(^1D) + O_2 \rightarrow O + O_2$	$k_{92} = 4.8E - 18 \exp(+67/T_g) \text{ m}^3/\text{s}$
93	$O(^1D) + O_3 \rightarrow 2O + O_2$	$k_{93} = 1.2E - 16 \text{ m}^3/\text{s}$
94	$O(^1D) + O_3 \rightarrow 2O_2$	$k_{94} = 1.2E - 16 \text{ m}^3/\text{s}$
95	$O(^1S) + O_2 \rightarrow O(^1D) + O_2$	$k_{95} = 3.2E - 16 \exp(-850/T_g) \text{ m}^3/\text{s}$
96	$O(^1S) + O_2 \rightarrow O + O_2$	$k_{96} = 1.6E - 18 \exp(-850/T_g) \text{ m}^3/\text{s}$
97	$O(^1S) + O_2(a^1\Delta) \rightarrow O + O_2$	$k_{97} = 1.1E - 16 \text{ m}^3/\text{s}$
98	$O(^1S) + O_2(a^1\Delta) \rightarrow O(^1D) + O_2(b^1\Sigma)$	$k_{98} = 2.9E - 17 \text{ m}^3/\text{s}$
99	$O(^1S) + O_2(a^1\Delta) \rightarrow 3O$	$k_{99} = 3.2E - 17 \text{ m}^3/\text{s}$
100	$O(^1S) + O \rightarrow O(^1D) + O$	$k_{100} = 1.67E - 17 \exp(-300/T_g) \text{ m}^3/\text{s}$
101	$O(^1S) + O \rightarrow 2O$	$k_{101} = 3.33E - 17 \exp(-300/T_g) \text{ m}^3/\text{s}$
102	$O(^1S) + O_3 \rightarrow 2O_2$	$k_{102} = 5.8E - 16 \text{ m}^3/\text{s}$
103	$O_2(a^1\Delta) + O \rightarrow O_2 + O$	$k_{103} = 2E - 22 \text{ m}^3/\text{s}$
104	$O_2(a^1\Delta) + O_2 \rightarrow 2O_2$	$k_{104} = 3E - 24 \exp(-200/T_g) \text{ m}^3/\text{s}$
105	$2O_2(a^1\Delta) \rightarrow 2O_2$	$k_{105} = 9E - 23 \exp(-560/T_g) \text{ m}^3/\text{s}$
106	$2O_2(a^1\Delta) \rightarrow O_2 + O_2(b^1\Sigma)$	$k_{106} = 9E - 23 \exp(-560/T_g) \text{ m}^3/\text{s}$
107	$2O_2(a^1\Delta) + O_2 \rightarrow 2O_3$	$k_{107} = 1E - 43 \exp(-560/T_g) \text{ m}^6/\text{s}$

Таблица 1 (продолжение).

108	$2O_2(a^1\Delta) + O_2 \rightarrow 2O_3$	$k_{108} = 1.709E - 28T_g m^3/s$
109	$O_2(a^1\Delta) + O_3 \rightarrow 2O_2 + O$	$k_{109} = 5.2E - 17 \exp(-2840/T_g) m^2/s$
110	$2O_2(b^1\Sigma) \rightarrow O_2(a^1\Delta) + O_2$	$k_{110} = 2.085E - 24T_g^{0.5} m^3/s$
111	$O_2(b^1\Sigma) + O_2 \rightarrow O_2(a^1\Delta) + O_2$	$k_{111} = 2.085E - 25T_g^{0.5} m^3/s$
112	$O_2(b^1\Sigma) + O_2 \rightarrow 2O_2$	$k_{112} = 2.317E - 28T_g^{0.5} m^3/s$
113	$O_2(b^1\Sigma) + O \rightarrow O_2(a^1\Delta) + O$	$k_{113} = 4.171E - 21T_g^{0.5} m^3/s$
114	$O_2(b^1\Sigma) + O \rightarrow O_2 + O$	$k_{114} = 4.634E - 22T_g^{0.5} m^3/s$
115	$O_2(b^1\Sigma) + O_3 \rightarrow 2O_2 + O$	$k_{115} = 4.246E - 19T_g^{0.5} m^3/s$
116	$O_2(b^1\Sigma) + O_3 \rightarrow O_2(a^1\Delta) + O_3$	$k_{116} = 4.246E - 19T_g^{0.5} m^3/s$
117	$O_2(b^1\Sigma) + O_3 \rightarrow O_2 + O_3$	$k_{117} = 4.246E - 19T_g^{0.5} m^3/s$
118	$O_2(v_1) + O \rightarrow O_2 + O$	$k_{118} = 5.793E - 22T_g^{0.5} m^3/s$
119	$O_2(v_1) + O_2 \rightarrow 2O_2$	$k_{119} = 5.793E - 22T_g^{0.5} m^3/s$
120	$2O + O_2 \rightarrow 2O_2$	$k_{120} = 9.268E - 45T_g^{-0.63} m^6/s$
121	$3O \rightarrow O + O_2$	$k_{121} = 3.334E - 44T_g^{-0.63} m^6/s$
122	$2O + O_2 \rightarrow O_2(a^1\Delta) + O_2$	$k_{122} = 6.987E - 46T_g^{-0.63} m^6/s$
123	$3O \rightarrow O_2(a^1\Delta) + O$	$k_{123} = 2.509E - 45T_g^{-0.63} m^6/s$
124	$O + 2O_2 \rightarrow O_3 + O_2$	$k_{124} = 5.081E - 39T_g^{-2.8} m^6/s$
125	$2O + O_2 \rightarrow O + O_3$	$k_{125} = 3.166E - 43T_g^{-1.2} m^6/s$
126	$O + O_3 \rightarrow 2O_2$	$k_{126} = 8E - 18 \exp(-2060/T_g) m^3/s$
127	$O_2 + O_3 \rightarrow O + 2O_2$	$k_{127} = 1.56E - 15 \exp(-11490/T_g) m^3/s$
128	$O_2(Ry) \rightarrow O_2$	$k_{128} = 0.015 s^{-1}$
129	$O_2 + O_2(Ry) \rightarrow O_2 + O_2(a^1\Delta)$	$k_{129} = 1.86E - 19 m^3/s$
130	$O_2 + O_2(Ry) \rightarrow O_2 + O_2(b^1\Sigma)$	$k_{130} = 1.86E - 19 m^3/s$
131	$O(^1D) + O_2(a^1\Delta) \rightarrow O_2 + O$	$k_{131} = 1E - 17 m^3/s$
132	$O(^1S) + O_2 \rightarrow O + O_2(a^1\Delta)$	$k_{132} = 1.5E - 18 \exp(-850/T_g) m^3/s$
133	$O(^1S) + O_2 \rightarrow O + O_2(b^1\Sigma)$	$k_{133} = 7.3E - 19 \exp(-850/T_g) m^3/s$
134	$O(^1S) + O_2 \rightarrow O + O_2(Ry)$	$k_{134} = 7.3E - 19 \exp(-850T_g) m^3/s$
135	$O(^1S) + O_2(a^1\Delta) \rightarrow O + O_2(Ry)$	$k_{135} = 1.3E - 16 m^3/s$
136	$O_2(b^1\Sigma) + O_3 \rightarrow O_2(a^1\Delta) + O_3$	$k_{136} = 7.1E - 18 m^3/s$
137	$O + O_2 + O_2(a^1\Delta) \rightarrow O_2(b^1\Sigma) + O_3$	$k_{137} = 1.56E - 40T_g^{-1.5} m^6/s$
138	$O + O_2 + O_2(a^1\Delta) \rightarrow O + 2O_2$	$k_{138} = 3E - 44 m^6/s$
139	$O + O_3 \rightarrow O_2 + O_2(a^1\Delta)$	$k_{139} = 2.4E - 19 \exp(-2060/T_g) m^3/s$
140	$O + O_3 \rightarrow O_2 + O_2(b^1\Sigma)$	$k_{140} = 8E - 20 \exp(-2060/T_g) m^3/s$
141	$2O_3 \rightarrow O + O_2 + O_3$	$k_{141} = 1.65E - 15 \exp(-11435/T_g) m^3/s$
142	$2O + O_2 \rightarrow O_2 + O_2(Ry)$	$k_{142} = 1.2E - 46 m^6/s$
143	$2O + O_2 \rightarrow O_2 + O_2(b^1\Sigma)$	$k_{143} = 7.6E - 44T_g^{-1} \exp(-170/T_g) m^6/s$
144	$O + O_2 + O_3 \rightarrow 2O_3$	$k_{144} = 1.3E - 41T_g^{-2} m^6/s$
145	$2O_2 + O_{2+} \rightarrow O_2 + O_{4+}$	$k_{145} = 1.25E - 38T_g^{-1.5} m^6/s$
146	$O_2(a^1\Delta) + O_{4+} \rightarrow 2O_2 + O_{2+}$	$k_{146} = 1E - 16 m^3/s$
147	$O_2(b^1\Sigma) + O_{4+} \rightarrow 2O_2 + O_{2+}$	$k_{147} = 1E - 16 m^3/s$
148	$O + O_{4+} \rightarrow O_{2+} + O_3$	$k_{148} = 3E - 16 m^3/s$
149	$O_2 + O_{4+} \rightarrow 2O_2 + O_{2+}$	$k_{149} = 0.02673T_g^{-4} \exp(-5030/T_g) m^3/s$
150	$O_- + O_2(a^1\Delta) \rightarrow O + O_{2-}$	$k_{150} = 3.3E - 17 m^3/s$
151	$O_- + O_2 \rightarrow O + O_{2-}$	$k_{151} = 1E - 20 m^3/s$
152	$O_- + O_2(a^1\Delta) \rightarrow O + O_2 + e$	$k_{152} = 2E - 16 \exp(-15000/T_g) m^3/s$
153	$O_- + 2O_2 \rightarrow O_2 + O_{3-}$	$k_{153} = 3.3E - 40T_g^{-1} m^6/s$
154	$O_{2-} + O_2 \rightarrow 2O_2 + e$	$k_{154} = 2E - 16 \exp(-5338/T_g) m^3/s$
155	$O_- + O_+ \rightarrow O_2$	$k_{155} = 2.7E - 13 m^3/s$
156	$O_- + O_{4+} \rightarrow O_2 + O_3$	$k_{156} = 6.9E - 12T_g^{-0.5} m^3/s$
157	$O_- + O_2 + O_{2+} \rightarrow O_2 + O_3$	$k_{157} = 2E - 37 m^6/s$
158	$O_{2-} + O_{2+} + O_2 \rightarrow 3O_2$	$k_{158} = 2E - 37 m^6/s$
159	$O_{2-} + O_{4+} \rightarrow 3O_2$	$k_{159} = 1E - 13 m^3/s$
160	$O + O_{3-} \rightarrow 2O_2 + e$	$k_{156} = 3E - 16 m^3/s$
161	$O_2 + O_{3-} \rightarrow 2O_2 + O_-$	$k_{161} = 1.62E - 6T_g^{-2} \exp(-18260/T_g) m^3/s$
162	$O_{3-} + O_{4+} \rightarrow 3O_2 + O$	$k_{160} = 1E - 13 m^3/s$

Таблица 1 (продолжение).

163	$O_2 + O_{2^-} + O_{4^+} \rightarrow 4O_2$	$k_{161} = 4E - 38 \text{ м}^6/\text{с}$
164	$O_2 + O_{3^-} + O_{4^+} \rightarrow 4O_2 + O$	$k_{162} = 4E - 38 \text{ м}^6/\text{с}$

Примечание.  $T_e$  — температура электронов в электрон-вольтах,  $T_g$  — температура газа в К,  $O$  и  $O_2$  — основные состояния атомов и молекулы кислорода соответственно ( $O(^3P)$  и  $O_2(X^3\Sigma_g^-)$ ),  $O_2(Ry)$  — электронно-возбужденное состояние  $O_2(A^1\Sigma_u^-)$  с энергией 4.47 eV,  $O_2(v_k)$  ( $k = 1, 2, \dots$ ) — колебательно-возбужденные состояния и  $O_2(Rot)$  — первый вращательный уровень молекулы  $O_2$ ,  $\Delta\epsilon$  — потеря энергии электрона в выходном канале ( $\Delta\epsilon < 0$  для ударов второго рода). Сечения процессов 12, 17, 19, 33 (удары второго рода) вычислялись через сечения соответствующих прямых процессов по соотношению детального баланса. Данные о константах всех процессов, частоты которых указаны в форме Аррениуса, взяты из [6].

- [1] Phelps A.V. Tabulations of Collision Cross Sections and Calculated Transport and Reaction Coefficients for Electron Collisions with Oxygen. JILA Report. N 28. 1985. ([ftp://jila.colorado.edu/collision data/](ftp://jila.colorado.edu/collision%20data/)).
- [2] Itikawa Y, Ichimura A. // Phys. Chem. Ref. Data. 1990. Vol. 19. P. 637–651.
- [3] Matejcik S, Kiendler A, Cicman P. et al. // Plasma Sources Sci. Technol. 1997. Vol. 6. P. 140–146.
- [4] Kossyi I.A., Kostinsky A.Y., Matveyev A.A., Silakov V.P. // Plasma Sources Sci. Technol. 1992. Vol. 1. P. 207–220.
- [5] Ivanov V.V., Klopovsky K.S., Lopaev D.V., Rakhimov A.T., Rakhimova T.V. // IEEE Trans. Plasma Sci. 1999. Vol. 27. N 5. P. 1279–1287.
- [6] www.kinema.com.

от полученных в рамках fluid модели, оперирующей единой для всех электронов температурой  $T_{ef}$ . В свою очередь это приводит к различиям в значениях тех характеристик плазмы, которые существенно зависят от этих констант.

При больших давлениях EDF локальна: значения функции  $f_0^0(w)$  совпадают при различных  $r$  (рис. 1). При низких давлениях EDF не только неравновесна, но и нелокальна: совпадают  $f_0(\epsilon)$ , представленные в шкале полных энергий  $\epsilon = w + e\phi(r)$ , т.е. без сдвига на потенциал пространства и без нормировки (рис. 2, a). Эти же EDF  $f_0(\epsilon)$ , построенные в традиционном локальном представлении как функции кинетической энергии  $w$  (аналогично рис. 1), различаются для различных радиусов  $r$  (рис. 2, b). Поскольку в кислороде потери энергии при неупругих ударах доминируют практически при всех энергиях, то, используя  $\lambda_\epsilon = \sqrt{\lambda\lambda^*}$  [8] с суммарными сечениями упругих  $\sigma = 5 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$  и неупругих  $\sigma^* = 5 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2$  столкновений, получим оценку

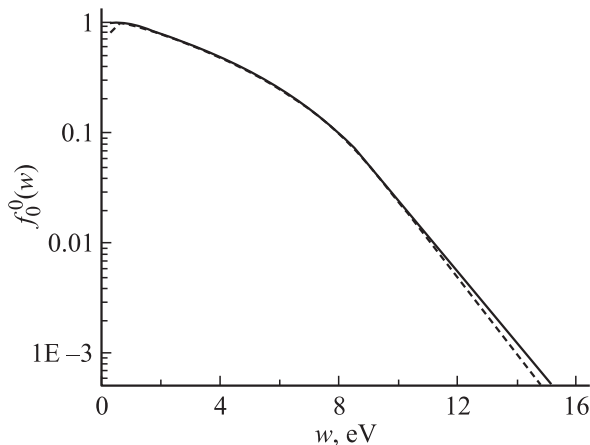
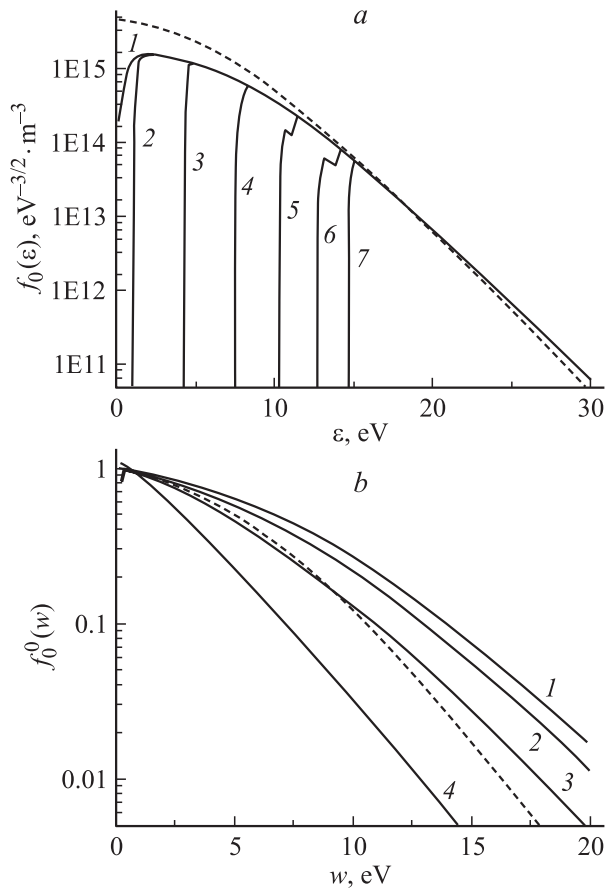


Рис. 1. Зависимости локальной EDF для  $p = 1 \text{ Торг}$ ,  $i = 50 \text{ мА}$ . Сплошные кривые — результаты самосогласованного расчета для радиусов  $r = 0, R$  с шагом  $R/5$ , штриховая — локальная EDF  $f_0^0(w)$ .

$\lambda_\epsilon \approx 0.2/p$  в см, где  $p$  выражено в Торг. Из представленных оценок критерий нелокальности EDF ( $\lambda_\epsilon > \Lambda$ ) для кислорода имеет вид  $p\Lambda < 0.2 \text{ см} \cdot \text{Торг}$ , что согласуется с результатами проведенных симуляций и полученными в [12,18]. Заметим, что при  $\lambda_\epsilon > \Lambda$  в уравнении баланса энергий электронов теплопроводность выравнивает их температуру по сечению. Этот факт лежит в основе применения пространственно-средней (global) модели [4,5]. Однако, как показано в [10], из-за неизбежной немаксвелловости EDF корректное применение пространственно-усредненного описания может быть только с использованием 2Т global модели.

Для быстрой самосогласованной оценки параметров плазмы желательно иметь менее трудоемкую, чем полномасштабное (4D) решение уравнения Больцмана, возможность учета неравновесности и нелокальности EDF. На сегодняшний день наиболее разработанным и распространенным является решение локального кинетического уравнения по известным заранее исходным параметрам, т.е. когда приведенное поле  $E/N$ , степень ионизации  $n_e/N$  и возбуждения  $n^*/N$  считаются заданными. Для реализации такого подхода в настоящее время имеются готовые и доступные пользовательские пакеты, например 0D Boltzmann Solver CFDR [16,17], BOLSIG [19] и т.п. Для сравнения на рис. 1, 2 пунктиром нанесена также и EDF  $f_0^0(w)$ , определенная по методике [16,17] решения локального уравнения Больцмана (0D Boltzmann Solver [16,17]) с теми же входными параметрами, что и при самосогласованном расчете. Как и ожидалось, эта EDF практически совпадает с нейденной для давления  $p = 1 \text{ Торг}$  (рис. 1), но значительно отличается при более низком давлении (рис. 2, b). Это означает, что в локальном режиме ( $\Lambda > \lambda_\epsilon$ ) возможно использование того или иного варианта hybrid модели с EDF, определяемой из решения локального кинетического уравнения [19]. В частности, в этой ситуации можно использовать поисковые таблицы (Lookup Tables (LUTs)) [16,17]. При более низких давлениях, когда EDF формируется в нелокальном режиме, представленные в



**Рис. 2.** Зависимости нелокальной EDF для  $p = 0.15 \text{ Torr}$ ,  $i = 50 \text{ mA}$ . *a* — сплошные кривые — результаты самосогласованного расчета для радиусов  $r = 0$  (1),  $0.6R$  (2),  $0.8R$  (3),  $0.69R$  (4),  $0.95R$  (5),  $0.98R$  (6),  $R$  (7); штриховая — локальная EDF  $f_0^0(w)$ . *b* — сплошные кривые — результаты самосогласованного расчета для радиусов  $r = 0$  (1),  $0.6R$  (2),  $0.8R$  (3),  $R$  (4); штриховая — локальная EDF  $f_0^0(w)$ .

шкале кинетических энергий EDF различны при разных радиусах и соответствующий локальный расчет EDF будет неприменим (рис. 2, *b*). Об этом свидетельствуют также и детальные сопоставления локального и нелокального подходов при моделировании положительного столба DC разряда в инертных газах (см., например, [20]). Прямые же попытки модернизации fluid модели для нелокальных условий формирования EDF (см., например, [21]) представляются малоперспективными.

Более привлекательным нам представляется подход [10]. Там было показано, что независимо от режима формирования EDF (локальный или нелокальный) для заданного значения параметра  $p\Lambda$  имеет место инвариантность быстрой части EDF. И действительно, если совместить быстрые части рассчитанных локальной  $f_0^0(w)$  и нелокальной  $f_0(\epsilon)$  (например, сшить их при энергии, близкой к порогу ионизации), то „хвосты“ обеих EDF совпадают (рис. 2, *a*). В этом на первый взгляд парадоксальном результате проявляется специфика разряда как самоорганизующейся системы — для

стационарного его существования необходим определенный темп воспроизводства электронов, который задается скоростью их гибели. Последняя же слабо чувствительна к виду EDF.

Вышесказанное поясняет тот факт, что реальная EDF в газоразрядной плазме обычно удовлетворительно аппроксимируется приближением двух (или трех) групп электронов. В [10] была использована наиболее распространенная аппроксимация двумя экспонентами

$$f_0(\epsilon) = c_n e^{-\frac{\epsilon}{T_{eb}}} - c_n e^{-\frac{\epsilon_1}{T_{eb}}} (1 - T_{et}/T_{eb}), \quad \epsilon \leq \epsilon_1,$$

$$f_0(\epsilon) = c_n \frac{T_{eb} e^{\frac{\epsilon_1}{T_{et}} - \frac{\epsilon_1}{T_{eb}}}}{T_{eb}} e^{-\frac{\epsilon}{T_{et}}}, \quad \epsilon \geq \epsilon_1,$$

$$c_n \simeq 2n_e / \sqrt{\pi T_{eb}^3} \quad (1)$$

с температурами медленных (bulk)  $T_{eb}$  при  $\epsilon < \epsilon_1$  и быстрых (tail)  $T_{et}$  (при  $\epsilon > \epsilon_1$ ) электронов. При записи (1) учтено, что для непрерывности потока по энергии в пороге  $\epsilon_1$  необходимо сшивать как сами EDF, так и их производные. Для кислородной плазмы энергия  $\epsilon_1 \simeq 10 \text{ eV}$ , соответствующая энергетическим порогам наиболее эффективных процессов диссоциативного возбуждения верхних электронных состояний молекулы кислорода [22], близка к энергии ионизации  $\epsilon_i = 12 \text{ eV}$  (рис. 1, 2). Поскольку спад хвоста (tail) EDF близок к экспоненциальному (см., например, рис. 1, 2), то величина  $T_{et}$  определяется как

$$T_{et} = - (d \ln f_0(\epsilon) / d\epsilon)^{-1}. \quad (2)$$

Энергетическая зависимость основной части (bulk) EDF с  $\epsilon < \epsilon_1$  при малой роли межэлектронных столкновений, как правило, не является экспоненциальной (рис. 1, 2). Это связано с тем, что в газовых разрядах низкого и среднего давления обычно имеет место неупругий баланс энергии, определяемый процессами с большим энергетическим порогом ( $\sim \epsilon_1$ ). При этом энергетическая зависимость EDF при  $w \leq \epsilon_1$  определяется поведением сечения  $\sigma(w)$  упругих столкновений [8]

$$f_0(w) \sim \int_w^{\epsilon_1} (\sigma(w)/w) dw + f_0(\epsilon_1). \quad (3)$$

Представляется, что такие EDF удобнее аппроксимировать степенными, а не экспоненциальными функциями от энергии. Они слабо зависят от величины поля, главным образом через величину константы сшивки  $f_0(\epsilon_1)$ . Поскольку электроны с  $\epsilon \leq \epsilon_1$  не вносят заметного вклада в общий баланс энергий электронного газа, то и их средняя энергия также практически не зависит от поля. Эти электроны, получая энергию от поля в интервале  $(0, \epsilon_1)$ , лишь транспортируют в хвост EDF требуемый поток электронов по энергии [8]. Другими словами, область EDF при  $\epsilon < \epsilon_1$  играет лишь роль своеобразного „трубопровода“ от источника в области малых энергий до стока в области хвоста  $\epsilon > \epsilon_1$ . Распределение

**Таблица 2.** Характерные температуры РС кислородного DC разряда

№	Режим	$T_{ef}, eV$	$T_e, eV$	$T_{eb}, eV$	$T_{et}, eV$	$T_i, eV$
1	150 m·Torr–5 mA	3.2	3.9	3.1	2.9	2.7
2	150 m·Torr–50 mA	2.9	4.1	3.4	2.8	2.7
3	150 m·Torr–500 mA	2.9	3.9	3.1	2.9	2.7
4	1 Torr–5 mA	1.7	2.6	2.6	1.3	1.5
5	1 Torr–50 mA	1.7	2.6	2.6	1.3	1.5
6	1 Torr–200 mA	1.7	2.6	2.6	1.4	1.5

электронов вдоль этого „трубопровода“ определяется лишь условием: „сколько втекает вблизи нуля, столько и вытекает в пороге, практически не теряясь по пути“ и не зависит от „напора“. В такой ситуации попытки найти их „температуру“ из какого-либо уравнения баланса энергий (см., например, [23–25]) представляются малоперспективными. Аппроксимация же (1) требует определения величины  $T_{eb}$ . Ситуация упрощается из-за того, что сама температура медленных электронов  $T_{eb}$  необходима для нахождения характеристик, слабо чувствительных к ее величине (амбиполярного поля в плазме, скоростей реакций с малым энергетическим порогом  $\varepsilon_j \leq T_{eb}$  и т. п.). Учитывая это и предполагая в (3) типичную растущую зависимость  $\sigma(w)$ , можно предложить для использования аппроксимацию (2Г EDF)

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

$$f_0(\varepsilon) = c_n \frac{T_{et}}{(\varepsilon_1 + T_{et})} e^{-\frac{(\varepsilon - \varepsilon_1)}{T_{et}}}, \quad \varepsilon \geq \varepsilon_1,$$

$$c_n \approx 15n_e / (4\varepsilon_1^{3/2}), \quad (4)$$

EDF (4), также обеспечивающая сохранение потока по энергии при  $\varepsilon = \varepsilon_1$ , явно зависит лишь от температуры быстрых электронов  $T_{et}$ . Температура медленной части ( $\varepsilon \leq \varepsilon_1$ ) EDF (4) есть

$$T_{eb} = 2\varepsilon_{eb}/3 \approx 0.3(\varepsilon_1 + T_{et}).$$

В табл. 2 представлены значения характерных эффективных температур  $T_j$  для наиболее типичных из исследуемых условий: нелокального при  $p = 1$  Torr и нелокального при  $p = 0.15$  Torr. Значения  $T_{ef}$  получены при симуляциях с использованием fluid model, а  $T_e, T_{eb}$  и  $T_{et}$  — из кинетического расчета согласно (2) и

$$T_{eb} = 2 \int_0^{\varepsilon_1} f_0(w) w^{3/2} dw / \left( 3 \int_0^{\varepsilon_1} f_0(w) w^{1/2} dw \right), \quad (5a)$$

$$T_e = 2 \int_0^{\infty} f_0(w) w^{3/2} dw / \left( 3 \int_0^{\infty} f_0(w) w^{1/2} dw \right). \quad (5b)$$

Температуры  $T_e, T_{eb}$ , как и ожидалось, оказались близкими друг другу ( $T_e \approx T_{eb}$ ). На первый взгляд и температура  $T_{ef}$ , которая находится в рамках fluid модели из баланса энергий всего ансамбля электронов, также должна быть близка к  $T_e$  и  $T_{eb}$ , так как из баланса энергии для всех электронов, казалось бы, должна получаться энергия „среднего“ электрона. Однако оказывается, что температура, полученная при fluid simulation, значительно меньше „средней“ температуры EDF ( $T_{ef} < T_e$ ) и оказывается близкой к температуре „хвоста“ EDF ( $T_{ef} \approx T_{et}$ ). С одной стороны, этот факт свидетельствует о неприменимости fluid описания электронов при моделировании слабоионизированной газоразрядной плазмы. С другой стороны, он проясняет причину удивительно успешного использования традиционной fluid модели при расчетах основных параметров плазмы. Для электроположительной плазмы этот факт объяснялся в [10] тем, что как потери энергии при столкновениях с большим энергетическим порогом, так и процессы ионизации определяются хвостом EDF. Поэтому как баланс энергии, так и баланс частиц определяются, грубо говоря, одной и той же температурой  $T_{et}$ . Действительно, в простой плазме из условия стационарности разряда следует условие равенства скоростей ионизации и диффузионной гибели на стенках (условие Шоттки)

$$v_i \tau_{dp} = 1, \quad (1)$$

определяющее собственное число  $v_i(T_{et})$  краевой задачи для концентрации заряженных частиц с  $n_e = n_p$ . Характерное время  $\tau_{dp}$  определяется геометрией разрядного объема и слабо зависит от вида EDF. Его можно оценить по интерполяционной формуле (см., например, [14])

$$\tau_{dp} = \tau_{ap} + \tau_{bp}. \quad (7)$$

Здесь  $\tau_{ap} = \Lambda^2 / D_{ap}$  есть характерное время амбиполярной диффузии ( $D_{ap} = D_p T_{eb} / T$ );  $\tau_{bp} = a \Lambda / V_b$  — боровская скорость, где  $V_b = \sqrt{T_{et} / M}$ ;  $a$  — коэффициент порядка единицы. Как видно из (7), характерное время  $\tau_{dp}$  определяется геометрией разрядного объема и слабо зависит от вида EDF. В то же время частота ионизации резко зависит от температуры. Например, для часто употребляемой аппроксимации от энергии сечения ионизации  $\sigma_i(\varepsilon) = \sigma_{0i}(\varepsilon / \varepsilon_i - 1)$  с порогом  $\varepsilon_i \gg T_{et}$  соответствующая частота для максвелловской EDF имеет известный аррениусовский вид

$$v_i = N \int_{\varepsilon_i}^{\infty} \sigma_i(w) \sqrt{\frac{2w}{m}} f_0(w) \sqrt{w} dw \approx N \sigma_{0i} \sqrt{\frac{8T_e}{\pi m}} e^{-\frac{\varepsilon_i}{T_e}}. \quad (8)$$

Для кислорода можно рекомендовать следующие аппроксимации для константы ионизации с максвелловской EDF:

$$k_i \approx 4 \cdot 10^{-15} \sqrt{T_e} \exp(-12.06/T_e)$$

$$\approx 3 \cdot 10^{-15} T_e \exp(-12.06/T_e), \quad \text{m}^3/\text{s}. \quad (8a), (8b)$$



Условие (6) позволяет достаточно надежно найти скорость ионизации  $\nu_i$  через равную ей диффузионную гибель  $1/\tau_{dp}$ . Поскольку она слабо (логарифмически) зависит от  $T_{eb}$ , то из (6)–(8) следует, что для данного сорта газа величина  $T_{et}$  зависит только от параметра  $p\Lambda$  [10]. Важно подчеркнуть, что выбор любой резко (экспоненциально) зависящей от энергии EDF, не обязательно максвелловской или дрювестейновской, дает более или менее близкие значения эффективных „температур“ быстрой части EDF, которые зависят от параметров разряда лишь логарифмически. С другой стороны, если в балансе энергий всего электронного газа определяющими являются процессы неупругих потерь с большим энергетическим порогом  $\varepsilon_1$ , сопоставимым с энергией ионизации  $\varepsilon_i$ , то и будет  $T_{ef} \simeq T_{et}$ . Поскольку в разрядах неупругие процессы потерь энергии обычно доминируют над упругими, то нечувствительность (своеобразное „самозалечивание“) расчета к деталям выбора быстрой части EDF во многом объясняет тот удивительный факт, что симуляции в рамках fluid модели обычно неплохо описывают основные параметры плазмы. При этом, естественно, ошибки в тех характеристиках, которые определяются медленной частью EDF с температурой  $T_{eb}$ , отличной от  $T_{et}$ , могут быть весьма значительны.

Чтобы обобщить результаты [10] по электроотрицательным газам, используем соотношения подобия (scalings laws) [14]. Они основаны на классификации режимов переноса заряженных частиц в разряде.

Основным каналом образования отрицательных ионов является диссоциативное прилипание, а процессы при тройных столкновениях в исследованном диапазоне сравнительно низких давлений ( $p\Lambda \leq 1 \text{ cm} \cdot \text{Torr}$ ) малоэффективны. Поэтому основным отрицательным ионом является ион  $O^-$ , а концентрации ионов  $O_2^-$  и  $O_3^-$  малы и они не оказывают влияния на баланс заряженных частиц. Главным механизмом ионизации является прямая ионизация молекулы  $O_2$ , так что основным положительным ионом был  $O_2^+$ , а концентрация атомарных ионов  $O^+$  была заметно меньше.

При значениях  $p\Lambda < 1 \text{ cm} \cdot \text{Torr}$  и при степенях ионизации ( $n_e/N < 10^{-4}$ ), рассматриваемых и в данной работе, рекомбинационная гибель положительных ионов в объеме мала по сравнению с их уходом на стенки, которые по-прежнему можно оценить по (7).

Как известно (см., например, [9]), отличительной особенностью плазмы электроотрицательных газов является существование внешней области электрон-ионной плазмы („шкурки“), отрицательные ионы в которой практически отсутствуют. И хотя толщина шкурки обычно мала, ее наличие принципиально, поскольку она запирает отрицательные ионы в объеме. В электроотрицательных газах у разряда имеется еще одна степень свободы — степень электроотрицательности. В простой модели [9,14], в которой плазмохимические процессы прилипания, отлипания, ионизации и рекомбинации описываются с помощью феноменологических коэффициентов  $K_a$ ,  $K_d$ ,  $K_i$  и  $K_r$ , характеристики плазмы

электроотрицательных газов зависят от соотношения между временами прилипания  $1/\nu_a$  и диффузии  $\tau_{an}$  (с электронной температурой  $T_{eb}$ ) отрицательных ионов, т. е. от параметра  $\nu_a \tau_{an}$ . Используя выявленные в [9,14] зависимости, для нахождения интересующей нас  $T_{et}$  можно исходить из следующих простых соображений. Поскольку поток отрицательных ионов на стенки отсутствует, то из баланса отрицательных и положительных ионов для усредненных по сечению концентраций ( $\bar{n}$ ) имеем

$$\nu_a \bar{n}_e = \nu_d \bar{n}_n + K_r \bar{n}_n \bar{n}_p, \tag{9}$$

$$\nu_i \bar{n}_e = \bar{n}_p / \tau_{dp}. \tag{10}$$

Здесь  $\nu_a$  — частота прилипания,  $\nu_d$  — частота отлипания,  $K_r$  — константа ион-ионной рекомбинации. Концентрация положительных ионов  $n_p = n_n + n_e$  равна сумме концентраций отрицательных ионов  $n_n$  и электронов  $n_e$ .

При низких давлениях, когда  $\tau_{an} \nu_a < 1$ , выполняется условие бальцмановского равновесия для отрицательных ионов и реализуются параболические профили ионов и плоские для электронов. В этом режиме скорость ионизации превышает скорость прилипания [9,14], а в периферийной области разряда („электрон-ионной шкурке“)  $n_e = n_p$ . Поскольку при низких давлениях „шкурка“ (в единицах длин пробега) тонкая, то для нахождения  $T_{et}$  из (10), (7) имеем простое выражение через бальцмановскую скорость (см. (7))

$$\nu_i \tau_{bp} = 1. \tag{11}$$

Используя для константы ионизации в кислороде аппроксимацию (8а), получим зависящее только от параметра  $p\Lambda$  аналитическое выражение для нахождения  $T_{et}$

$$T_t = \varepsilon_1 / (\ln 2286 p\Lambda), \tag{12}$$

где давление  $p$  в Torr, а  $\Lambda$  — в см.

Использовать соотношение (11), аналогичное уравнению (6) для обычной плазмы, для нахождения  $T_e$  в электроотрицательной плазме было предложено в [1]. Оно широко используется при анализе плазмы электроотрицательных газов (см., например, [2,3–5,13,15]). Однако следует подчеркнуть, что соотношение (11) применимо, только когда  $\tau_{an} \nu_a < 1$ , что для кислорода соответствует условиям  $p\Lambda < 0.1 \text{ cm} \cdot \text{Torr}$ . На то, что подход [1], использующий предположение о бальцмановском распределении не только электронов, но и отрицательных ионов, нельзя распространять на область более высоких давлений, было указано в [26].

При повышении давления ( $p\Lambda > 0.1 \text{ cm} \cdot \text{Torr}$ ) наблюдается переход к условию  $\nu_a \tau_{an} > 1$  и скорость ионизации становится меньше скорости прилипания [9,14]. Ситуация здесь в существенной степени зависит от режима объемной гибели отрицательных ионов. В кислороде неравенство  $\tau_{an} \nu_a > 1$  влечет за собой выполнение условия перехода к отлипательному режиму, т. е. гибель отрицательных ионов определяется отлипанием, а не рекомбинацией. В этом случае реализуются разновидности

подобных (top-flat) профилей ионов и электронов (подробнее см. [9,14,26]). Для нахождения температуры  $T_{et}$  в этом случае из (9), (10) имеем

$$v_i \tau_{ap} / (1 + \bar{n}_n / \bar{n}_e) = v_i \tau_{ap} / (1 + v_a / v_d) = 1, \quad (13)$$

что с использованием (8b) дает простую оценку

$$T_i = \varepsilon_1 / [2 \ln(182 p \Lambda) - \ln(1 + v_a / v_d)] \\ \approx \varepsilon_1 / (2 \ln(182 p \Lambda)), \quad (14)$$

где давление  $p$  в Торг, а  $\Lambda$  — в см.

Результаты расчетов  $T_i$  по формулам (12), (14) также представлены в табл. 2. Видно, что эти простейшие выражения хорошо согласуются как с температурой „хвоста“ EDF  $T_{et}$  (2) из результатов кинетического моделирования, так и с температурой „среднего“ электрона  $T_{ef}$  из результатов fluid моделирования.

Из кинетического уравнения для температуры быстрой части EDF следует простая оценка

$$T_{et} = \sqrt{\sum_j v_j / D_E}, \quad (15)$$

где  $D_E = 2(eE\lambda)^2 v / 3$  — коэффициент диффузии по энергии в электрическом поле (подробнее см., например, [8]). Поскольку именно поле сообщает энергию электронам, то температура  $T_{et}$ , а значит и частота ионизации  $\nu_i$ , определяется греющим электрическим полем, продольным в рассматриваемом здесь положительным столбе или усредненным высокочастотным  $\langle E_{\text{eff}} \rangle$  в ВЧ и СВЧ разрядах. Поэтому в литературе как при анализе EDF (см., например, [27]), так и при создании пользовательских пакетов (software) для расчета EDF (см., например, [19]) для моделирования параметров плазмы 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 (значением  $T_{et}$ ), которая формируется полями в плазме. С другой стороны, необходимо, чтобы рождение заряженных частиц восполняло их потери, зависящие в первую очередь от геометрии разряда и давления ( $p\Lambda$ ). В результате греющее поле, которое можно найти из выражения (15) по найденной из (6)–(14)  $T_{et}$ , также определяется параметром  $p\Lambda$  [10]. В этой связи отметим, что пространственное распределение самосогласованных полей в объеме заранее неизвестно и в отличие от рассматриваемого здесь положительного столба DC разряда задача нахождения их профилей в плазме для многих разрядов (ECR, ICP, SW и т.п.) представляет собой сложную самостоятельную

проблему. Попытки же находить  $T_{et}$  как функцию греющего эффективного среднего поля  $\langle E_{\text{eff}} \rangle$  в таких разрядах через соотношения, подобные (15), весьма трудоемки и приводят к сложным и малообозримым выражениям (см., например, [28]).

Обратимся теперь к причинам, по которым средняя энергия  $\bar{\varepsilon}_f = 3T_{ef}/2$ , найденная при симуляциях в рамках fluid модели из уравнения баланса энергий всех электронов, оказалась близкой не к средней энергии электронного газа  $\bar{\varepsilon}_e = 3T_e/2$ , а к температуре  $T_{et}$  быстрой части EDF. Анализ уравнения баланса энергий всех электронов показывает, что для кислородной плазмы DC разряда наиболее эффективными процессами потерь энергии являются реакции диссоциативного возбуждения верхних электронных состояний молекулы кислорода с энергетическими порогами 7–10 eV ( $\varepsilon_1 \approx 10$  eV) и ионизации ( $\varepsilon_i = 12$  eV). Поскольку эффективность этих процессов определяется быстрой частью EDF, то при использовании максвелловской EDF получаем  $T_{ef} \approx T_{et}$ . Отметим, что в стационарных разрядах при невысоких давлениях практически всегда (особенно в атомарных газах) как баланс энергий электронов, так и ионизация определяются процессами с большим порогом. Соответственно и рассмотренные в данной работе закономерности будут справедливы во всех подобных случаях. В тех же случаях, когда баланс энергий определяется упругими процессами или неупругими с малым порогом (квазиупругими), рассмотренная картина изменится принципиально. Быстрая часть EDF и ее температура  $T_{et}$  будут по-прежнему определяться из баланса ионизации и диффузионной гибели (6)–(14), а изменится лишь вид „тела“ EDF. В этом случае уравнение баланса энергий, а также и расчет в рамках fluid модели будут давать температуру „тела“  $T_{eb}$  EDF и определять значение DC или RF тока через удельную мощность  $W$ , вводимую в разряд (или через продольное поле в DC разрядах). Такая ситуация имеет место, в частности, при не слишком низких давлениях в газах, в которых доминируют потери энергии на возбуждение колебаний (например, в азоте, окиси углерода и т.п.). Возникающие при этом особенности легко учесть при конкретном использовании предлагаемой здесь 2T fluid модели.

Повышение степени ионизации за счет увеличения разрядного тока (увеличения удельной мощности  $W$ , вводимой в разряд) будет вызывать максвеллизацию EDF за счет межэлектронных столкновений. При заданных внешних условиях и механизмах ионизации и потерь температура быстрой части  $T_{et}$  по (6)–(14) остается при этом практически неизменной. Поэтому при росте частоты межэлектронных столкновений будет происходить изменение EDF медленных электронов, т.е. приближение температуры „тела“  $T_{eb}$  к неизменной температуре „хвоста“  $T_{et}$ . Этот процесс сопровождается уменьшением  $D_E$  (а значит, и уменьшением поля). Другими словами, принципиально меняется парадигма проблемы, поскольку в литературе обычно рассматривают изменение EDF с ростом плотности электронов

при фиксированном поле, когда с ростом степени ионизации меняются как тело, так и хвост распределения. Однако в стационарном разряде, заполняющем фиксированный объем, согласно представленному здесь и в [10] анализу, температура быстрой части  $T_{et}$  остается при этом практически неизменной. Поэтому рост частоты межэлектронных столкновений с ростом вкладываемой мощности (тока) практически приводит к изменению EDF только медленных электронов, т. е. к приближению температуры „тела“  $T_{eb}$  к неизменной температуре „хвоста“  $T_{et}$ .

При дальнейшем повышении степени ионизации и росте частоты межэлектронных столкновений ( $n_e T_e v_e \gg W$ ) во всех разрядах EDF становится максвелловской с единой температурой, совпадающей с температурой быстрых электронов, которая зависит только от  $p\Lambda$ .

Таким образом, с помощью коммерческого CFDRC software (<http://www.cfdrc.com/~cfdplasma>) проведено сопоставление кинетического и fluid подходов при моделировании плазмы положительного столба DC разряда в кислороде. Показано, что как в локальном, так и в нелокальном режимах формирования EDF электронов ее немасвелловость достаточно хорошо учитывается с помощью аппроксимации двумя группами электронов. При этом условие стационарности разряда позволяет определить температуру быстрых электронов  $T_{et}$  как собственное число задачи. Эта температура для данного сорта газа является функцией параметра  $p\Lambda$  и слабо (логарифмически) зависит от изменения условий. Баланс же энергий всего электронного газа не дает возможности найти характерные температуры, представляющие интерес на практике. Для моделирования параметров газоразрядной плазмы рекомендована 2 T fluid model, позволяющая включить основные характеристики неравновесной и нелокальной EDF в традиционную fluid модель.

Один из авторов (Л.Ц.) благодарен за поддержку РФФИ (проект № 01-02-16874) и NATO Sfr (№ 974 354).

## Список литературы

- [1] *Lieberman M., Lichtenberg A.* Principles of Plasma Discharges and Materials Processing. New York: Wiley, 1994.
- [2] *Kouznetsov I.G., Lichtemnebrg 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 (5). P. 2614–2623.
- [4] *Lee C., Lieberman M.A.* // J. Vac. Sci. Technol. 1995. Vol. A 13. N 2. P. 368.
- [5] *Gudmindsson J.T., Kouznetsov I.G., Patel K.K., Lieberman M.A.* // J. Phys. D. 2002. Vol. 34. P. 1100.
- [6] *Shkarovsly I.P., Johnson T.W., Bachinski M.P.* The Particle Kinetics of Plasmas. Addison–Wesley, MA, 1966.
- [7] *Кудрявцев А.А., Цендин Л.Д.* // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 11. С. 34–41. Kudryavtsev A.A., Tsendin L.D. // Tech. Phys. 1999. Vol. 44. N 11. P. 1290–1297.
- [8] *Tsendin L.D.* // Plasma Source Sci. Technol. 1995. Vol. 4. P. 200–211.
- [9] *Rozhansky A.V., Tsendin L.D.* Transport Phenomena in Partially Ionized Plasma. London; New York: Taylor & Francis, 2001.
- [10] *Кудрявцев А.А., Цендин Л.Д.* // Письма в ЖТФ. 2002. Т. 28. Вып. 20. С. 7–14. Kudryavtsev A.A., Tsendin L.D. // Tech. Phys. Lett. 2002. Vol. 28. N 10. P. 841–844.
- [11] *Gousset G., Ferreira C.M., Pinheiro M.* et al. // J. Phys. D. 1991. Vol. 24. P. 290–300.
- [12] *Ivanov V.V., Klopovsky K.S., Lopaev D.V., Rakhimov A.T., Rakhimova T.V.* // IEEE Trans. Plasma Sci. 1999. Vol. 27. P. 1279–1297.
- [13] *Gunmindsson J.T., Marakhtanov A.M., Patel K.K., Gopinath V.P., Lieberman M.A.* // J. Phys. D. 2000. Vol. 33. P. 1323.
- [14] *Богданов Е.А., Колобов В.И., Кудрявцев А.А., Цендин Л.Д.* // ЖТФ. 2002. Т. 72. Вып. 8. С. 13–20. Bogdanov E.A., Kolobov V.I., Kudrayvtsev A.A., Tsendin L.D. // Tech. Phys. 2002. Vol. 47. N 8. P. 946–954.
- [15] *Kiehlbauch M.W., Graves D.B.* // J. Appl. Phys. 2002. Vol. 91. N 6. P. 3539–3546.
- [16] *CFD Research Corporation* // CFD–PLASMA User Manual–CFD Research Corporation Huntsville, 1999–2002.
- [17] <http://www.cfdrc.com/~cfdplasma>.
- [18] *Ivanov V.V., Klopovsky K.S., Lopaev D.V., Rakhimov A.T., Rakhimova T.V.* // Plasma. Phys. Rep. 2000. Vol. 26. N 11. P. 970–990.
- [19] <http://www.siglo-kinema.com/> BOLSIG. Boltzmann Solver for the SIGLO-series. CPA Toulouse & Kinema Software.
- [20] *Behnke J., Golobovsky Yu., Nisimov S.U., Porokhova I.A.* // Contrib. Plasma. Phys. 1996. Vol. 36. N 1. P. 75–91.
- [21] *Ingold J.H.* // Phys. Rev. E. 1997. Vol. 56. N 5. P. 5932–5944.
- [22] *Eliassen B., Kogelsschalz V.* // J. Phys. B. 1986. Vol. 19. N 8. P. 1241–1248.
- [23] *Morgan W.L., Vriens L.* // J. Appl. Phys. 1980. Vol. 51 (10). P. 5300–5306.
- [24] *Dakin J.T.* // J. Appl. Phys. 1986. Vol. 60 (2). P. 563–569.
- [25] *Harters A., van der Mullen J.A.M.* // J. Phys. D. 2001. Vol. 34. P. 1907–1913.
- [26] *Franklin R.N., Snell J.* // Phys. D. 1999. Vol. 32. P. 2190–2203.
- [27] *Гинзбург В.Л., Гуревич А.В.* // Успехи физических наук. 1960. Т. 70. С. 201–246. (Ginsburg V.L., Gurevich A.V. // Usp. Fiz. Nauk. 1960. Vol. 70. P. 201–246).
- [28] *Kimura T., Oke K.* // J. Appl. Phys. 2001. Vol. 89. N 8. P. 4240–4246.