

04

## Численное моделирование стационарных процессов в плазме тлеющего разряда

© В.А. Жовтянский, Ю.И. Лелюх

Институт газа НАН Украины, Киев, Украина

E-mail: zhovt@ukr.net

Поступило в Редакцию 12 февраля 2008 г.

Рассмотрена задача определения параметров стационарного тлеющего разряда низкого давления применительно к прикладной проблеме моделирования и повышения эффективности процессов модификации поверхности конструкций. Связанная система нелинейных уравнений включает в себя уравнения потоков заряженных частиц с учетом дрейфовой и диффузионной составляющих, а также уравнение Пуассона для электростатического потенциала. Для исследования влияния геометрических факторов на физические параметры разряда задача рассматривалась в сферической и плоской областях. Нелинейная граничная стационарная задача решалась модифицированным методом продолжения по параметру. Исследовалось влияние на характеристики разряда диффузионных процессов и геометрии области разряда.

PACS: 51.50.+v, 52.80.Nc

Теория газонаполненных диодов является одной из ключевых в физике газового разряда и низкотемпературной плазмы, а тлеющий разряд широко используется на практике. Например, в технологиях поверхностной модификации деталей и элементов конструкций одно из его несомненных преимуществ состоит в максимальной локализации технологического воздействия разряда в аномальном режиме на обрабатываемой поверхности [1]. Оптимизации этих технологий посвящено множество публикаций, имеющих, как правило, эмпирический характер. На основе подобных исследований известно также, что значительные преимущества для азотирования поверхности — одного из вариантов методов модификации — имеет применение в качестве плазмообразующего газа смеси азот–аргон (см., например, [2]).

Для целенаправленного поиска оптимальных режимов реализации подобных технологий важно разработать относительно простую и эффективную с точки зрения времени расчета модель такого разряда,

которая в дальнейшем может быть дополненной кинетикой элементарных процессов в плазме смеси газов. Решению первой части этой задачи посвящена настоящая публикация.

Существенно, что в отличие от множества расчетов тлеющих разрядов, выполненных для процессов в трубке, где диффузия в области положительного столба происходит в перпендикулярном внешнему электрическому полю направлении, здесь имеет место близкая к сферической геометрия, поэтому обычные оценки для этих процессов неприемлемы. Вот почему нам важно аккуратно оценить роль диффузии в наших условиях.

Между тем численное моделирование диффузионных процессов в тлеющем разряде связано с характерной методической проблемой — так называемой „сеточной диффузией“, обусловленной применением стандартной конечно-разностной процедуры дискретизации к производной от произведения одной неизвестной функции и производной от другой неизвестной функции [3]. Это в конечном итоге может исказить характер исследуемых физических процессов [3–5]. Именно поэтому авторами в работе [6] для нахождения стационарного решения задачи в отсутствие физической диффузии был выбран метод, основанный на сведении линеаризованной граничной задачи к системе задач Коши. Он позволил минимизировать выше упомянутую проблему „сеточной диффузии“. Недостаток представленного в работе [6] подхода заключается в способе учета диффузионных процессов, которые учитываются как поправки к бездиффузионному решению. Это ограничивало возможности решения задачи относительно небольшими разрядными токами и длинами разрядного промежутка.

Примененный в этой работе модифицированный метод продолжения решения по параметру нелинейной граничной задачи, включающий сведение к последовательности задач Коши для решения линеаризованной граничной задачи, лишен таких недостатков. Он предполагает представление исходной задачи в форме системы дифференциальных уравнений первого порядка, что, исходя из вышеизложенного, значительно ограничивает возможность возникновения „сеточной“ диффузии.

Для одномерного случая, когда численное интегрирование задачи выполняется по схемам типа Рунге–Кутты, этот метод обладает существенными преимуществами по сравнению с сеточно-разностными. Точность последних в общем случае (без применения интерполяционных формул аппроксимации производных) пропорциональна величине

шага в степени порядка старшей производной. Схемы же Рунге–Кутты, как хорошо известно, позволяют вычислять интегралы на каждом шаге с более высокой точностью относительно шага интегрирования. Применение в качестве способа решения нелинейной граничной задачи продолжения по параметру в значительно меньшей степени накладывает ограничение на „близость“ первого приближения и обладает высокой скоростью сходимости [7]. Все это в конечном итоге позволило снять ограничения на возможность получения решения по предельной величине разрядного тока и длине разрядного промежутка.

Ставя цель моделировать один из режимов экспериментальных исследований [2], полагаем, что тлеющий разряд поддерживается между двумя concentрически вложенными сферическими поверхностями, причем поверхность внутренней сферы является катодом, а внешней — анодом. В сферической системе координат уравнения баланса для концентраций заряженных частиц в дрейфовых и диффузионных процессах, а также уравнение Пуассона с учетом симметрии задачи имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^k} \frac{d}{dr} (r^k J_e) - \alpha(E) J_e &= 0, & \frac{1}{r^k} \frac{d}{dr} (r^k J_i) + \alpha(E) J_e &= 0, \\ -D_e \frac{dN_e}{dt} - \mu_e N_e E &= J_e, & -D_i \frac{dN_i}{dr} - \mu_i N_i E &= J_i, \\ \frac{1}{r^k} \frac{d}{dr} \left( r^k \frac{d\varphi}{dr} \right) &= \frac{e}{\varepsilon_0} (N_e - N_i), & E &= -\frac{d\varphi}{dr}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $J_e$  и  $J_i$  — плотности потоков электронов и ионов соответственно (т.е.  $J = e(J_i + J_e)$  — плотность электрического тока);  $E$  — напряженность электрического поля;  $N_e$ ,  $D_e$ ,  $\mu_e$ ,  $N_i$ ,  $D_i$  и  $\mu_i$  — концентрации, коэффициенты диффузии и подвижности электронов и ионов соответственно;  $\alpha(E)$  — первый коэффициент Таунсенда;  $e$  — заряд электрона,  $\varepsilon_0$  — диэлектрическая постоянная. Формальный параметр  $k$  описывает геометрический фактор ( $k = 2$  для сферического разрядного промежутка и  $k = 0$  для плоского).

Граничные условия для задачи (1) формулируются следующим образом [5]:

$$J_e = \gamma J_i, \quad eJ_e = \gamma J_K / (1 + \gamma), \quad \varphi = 0, \quad (2)$$

$$N_i = 0, \quad eJ_e = J_A, \quad dN_e/dr = 0, \quad (3)$$

на катоде (2) и аноде (3); здесь,  $J_K$  и  $J_A$  — плотность катодного и анодного тока, а  $\gamma$  — коэффициент вторичной ионно-электронной эмиссии с катода.

Для решения нелинейной связанной граничной задачи (1)–(3) используется модифицированный метод продолжения решения по параметру. Суть метода заключается в следующем. На первом шаге решается нелинейная задача Коши с учетом граничного условия (3) на аноде. На следующем шаге граничное условие на катоде определяется как линейная комбинация полученного решения нелинейной задачи Коши и умноженной на некоторый формальный параметр  $\lambda$  невязки, которая определяется как разность граничного условия (2) и решения этой задачи. При значении  $\lambda = 0$  задача эквивалентна нелинейной задаче Коши, при  $\lambda = 1$  — исходной задаче (1)–(3). Таким образом, граничные условия (2) представляются в следующем, зависящем от параметра виде

$$\begin{aligned} eJ_i &= J_i^0 + \lambda(J_K/(1 + \gamma) - J_i^0), \\ eJ_e &= J_e^0 + \lambda(\gamma J_K/(1 + \gamma) - J_e^0), \\ \varphi &= \varphi^0 - \lambda\varphi^0, \end{aligned} \quad (4)$$

где символ „0“ соответствует граничным значениям решения задачи Коши на катоде. Далее, следуя общим представлениям решения параметрических граничных задач [7], интервал значений параметра  $\lambda$  ( $[0,1]$ ) разбивается на  $L$  достаточно малых частей. Решение нелинейной граничной задачи (1), (3), (4) находится для каждого значения параметра  $\lambda$  методом линеаризации. Как первое приближение на каждом шаге по параметру используется решение задачи, сошедшееся при предыдущем значении  $\lambda$ . Для решения линеаризованной граничной задачи на каждой итерации используется метод сведения к системе задач Коши, интегрирование которых осуществляется по модифицированной неявной схеме Эйлера третьего порядка точности [7].

Для примера расчета параметров тлеющего разряда в среде молекулярного азота принимается следующее соотношение для первого коэффициента Таунсенда [3,8]:

$$\alpha = 12p \exp\left(-\frac{342p}{|E|}\right) \text{ см}^{-1}, \quad (5)$$

где  $p$  — давление (Торр). Коэффициенты диффузии определяются как  $D_e = \mu_e k T_e / e$ ,  $D_i = \mu_i k T_i / e$ , где  $k$  — постоянная Больцмана,

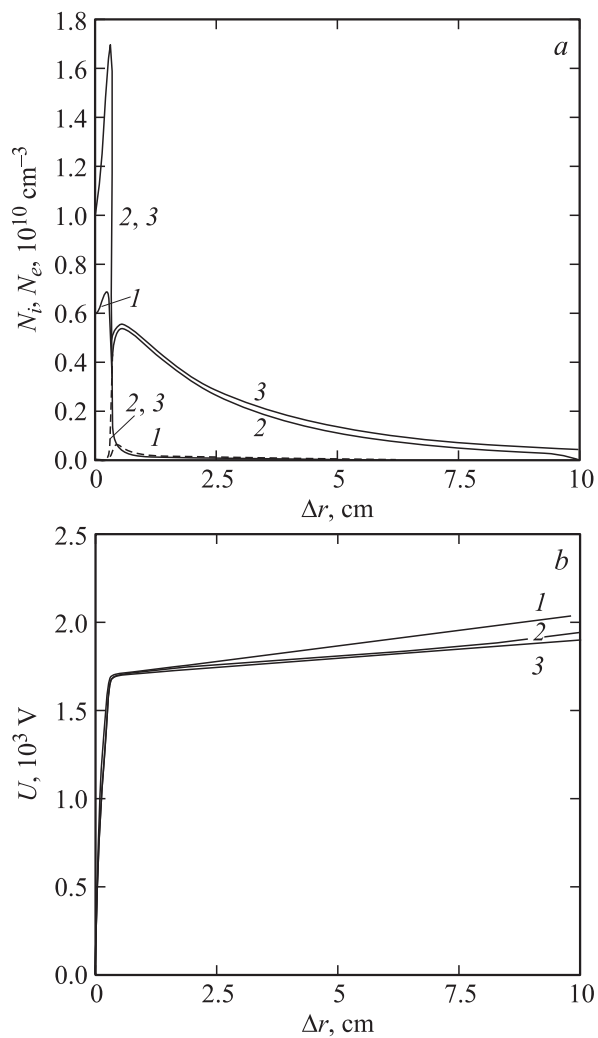
$\mu_e = 4.4 \cdot 10^5 p^{-1}$  и  $\mu_i = 1.44 \cdot 10^3 \text{ cm}^2 \cdot \text{Torr}/(\text{V} \cdot \text{s})$  [2],  $T_i = T_a = 300 \text{ K}$ ,  $T_e = 11600 \text{ K}$ . Температура  $T_e$  формально оценивалась по методике, представленной в [9], с учетом сферической симметрии разрядной области. Как было специально проверено, результаты вычислений слабо зависели от величины  $T_e$ . Коэффициент вторичной ионно-электронной эмиссии с катода принимался  $\gamma = 0.02$  [10].

Расчеты проводились при давлении  $p = 1.1 \text{ Torr}$  и радиусах катода  $r_K = 0.2\text{--}2 \text{ cm}$  и анода  $R = 10\text{--}33 \text{ cm}$ . Плотность электрического тока на катоде составляла  $2\text{--}20 \text{ mA/cm}^2$ , а разрядный ток —  $0.01\text{--}1 \text{ A}$  в зависимости от радиуса катода. Выбранное давление соответствовало верхней области давлений, характерных для плазменных технологий модификации поверхностей [2], а с другой стороны — близко к области давлений, где существенно влияние диффузионных процессов [3].

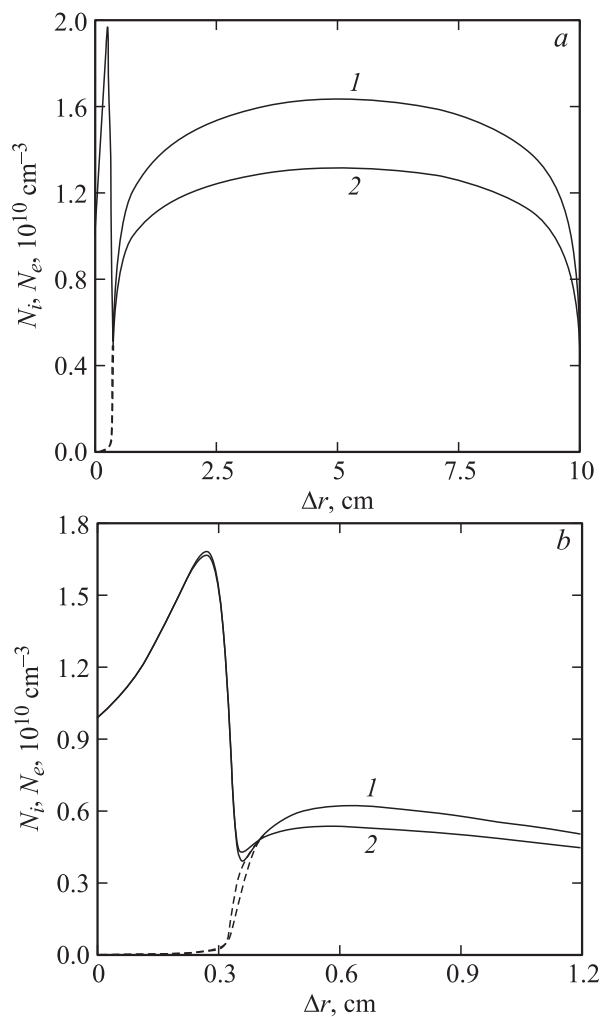
Некоторые результаты вычислений представлены на рис. 1–3. Для удобства сравнения между собой результатов для различных радиусов катода и форм разряда на этих рисунках на осях абсцисс отмечены расстояния от катода  $\Delta r$ . На рис. 1 представлены радиальные распределения концентраций заряженных частиц и потенциала в разрядном промежутке при плотности катодного тока  $J_K = 20 \text{ mA/cm}^2$  для различных значений радиуса катода ( $r_K = 0.2$  и  $2 \text{ cm}$ ) и длины разрядного промежутка ( $\Delta R = 10$  и  $31 \text{ cm}$ ) в сферических диодах. Следует отметить, что концентрации  $N_e(r)$  и  $N_i(r)$  фактически совпадают в области разряда, исключая узкий прикатодный слой (рис. 1, *a*). Наоборот, в области катодного падения потенциала  $N_i(r) \gg N_e(r) \approx 0$ . Кроме того, уменьшение радиуса катода влечет за собой уменьшение  $N_e(r)$  и  $N_i(r)$  при одинаковых плотностях катодного тока. Величина прикатодного падения потенциала (рис. 1, *b*) практически не зависит от геометрического фактора и длины разрядного промежутка. Эти вычисления выполнены с учетом процессов диффузии.

Влияние диффузионных процессов на концентрации заряженных частиц характеризуется их уменьшением в положительном столбе, как явно следует из рис. 2, *a* в случае плоской геометрии. Для случая сферического диода влияние диффузии выражено в основном в области положительного столба, прилегающей к катоду (рис. 2, *b*), причем при уменьшении значения плотности тока влияние диффузионных процессов по сравнению с дрейфовыми уменьшается.

Как в случае плоского разрядного промежутка, так и в случае сферического диода с большим радиусом катода по сравнению с



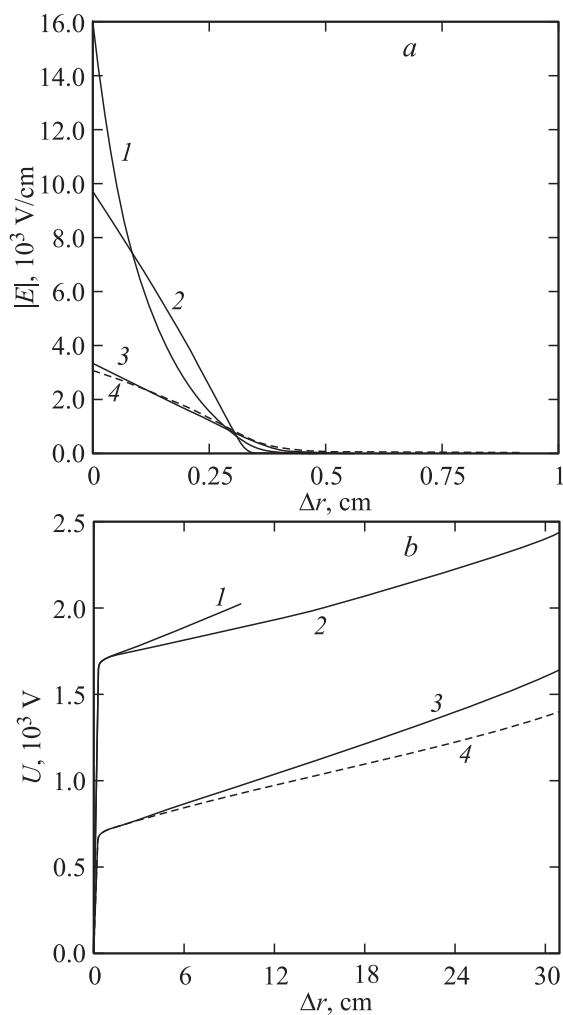
**Рис. 1.** Пространственные распределения концентрации ионов (сплошные кривые) и электронов (пунктирные кривые) в прикатодной области (а) и потенциала в разрядном промежутке сферического диода (б) в зависимости от геометрических факторов ( $J_K = 20 \text{ mA/cm}^2$ ):  $r_K = 0.2 \text{ cm}$  (1) и  $2 \text{ cm}$  (2, 3);  $\Delta R = 10 \text{ cm}$  (1, 2) и  $31 \text{ cm}$  (3).



**Рис. 2.** Влияние диффузионных процессов на пространственное распределение концентрации заряженных частиц (ионы — сплошные кривые, электроны — пунктирные кривые) для плоского разрядного промежутка (a) и сферического диода в окрестности катодного слоя ( $r_K = 2$  см) (b); ( $\Delta R = 10$  см,  $J_K = 20 \text{ mA/cm}^2$ ): 1 — „бездиффузионный“ случай; 2 — с учетом диффузионных процессов.







**Рис. 3.** Особенности пространственного распределения напряженности электрического поля в области катодного падения потенциала (а) и распределения потенциала в разрядном промежутке (б) в зависимости от геометрических факторов и плотности разрядного тока на катоде (плоской геометрии соответствует пунктирная линия): 1 —  $r_K = 0.2 \text{ cm}$ ,  $\Delta R = 10 \text{ cm}$ ,  $J_K = 20 \text{ mA/cm}^2$ ; 2 —  $r_K = 2 \text{ cm}$ ,  $\Delta R = 31 \text{ cm}$ ,  $J_K = 20 \text{ mA/cm}^2$ ; 3 —  $r_K = 2 \text{ cm}$ ,  $\Delta R = 31 \text{ cm}$ ,  $J_K = 2 \text{ mA/cm}^2$ ; 4 — плоский случай,  $\Delta R = 31 \text{ cm}$ ,  $J_K = 2 \text{ mA/cm}^2$ .

циента Таунсенда (5). Еще одна особенность этой работы заключается в том, что электронная температура определена в предположении  $T_e(r) = \text{const}$ , которое не является очевидным в сферической геометрии и формально заимствовано из подобной задачи для длинной цилиндрической трубки. Это только часть вопросов, предопределяющих интерес для проведения дальнейших исследований данной проблемы.

## Список литературы

- [1] Жовтянский В.А. // Укр. физ. журн. 2008. Т. 53. № 5. С. 488 (укр.).
- [2] Дидык Е.Г., Жовтянский В.А., Назаренко В.Г., Хомич В.А. // Укр. физ. журн. 2008. Т. 53. № 5. С. 481 (укр.).
- [3] Рейзер Ю.П., Суржиков С.Т. // ТВТ. 1988. Т. 26. В. 3. С. 428.
- [4] Surzhikov S.T., Shang J.S. // J. Comp. Phys. 2004. V. 199. P. 437.
- [5] Петрусев А.С., Суржиков С.Т., Шенг Дж.С. // ТВТ. 2006. Т. 44. В. 6. С. 814.
- [6] Жовтянский В.А., Лелюх Ю.И. // Укр. физ. журн. 2008. Т. 53. № 5. С. 495 (укр.).
- [7] Григолоук Э.И., Шалашилин В.И. Проблемы нелинейного деформирования: Метод продолжения решения по параметру в нелинейных задачах механики твердого деформированного тела. М.: Наука, 1988. 232 с.
- [8] Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.: Наука, 1988. 592 с.
- [9] Энгель А., Штеенбек М. Физика и техника электрического разряда в газах. Т. 2. М.; Л.: ОНТИ НКТП СССР, 1935. 382 с. (Пер. с нем.: Engel A., Steenbeck M. Elektrische gasentladungen ihre physik und technik. Zweiter band: Entladungseigenschaften technische anwendungen. Berlin: Verlag Von Julius Springer, 1934. 250 p.)
- [10] Ward A.L. // Phys. Rev. 1958. V. 112. N 6. P. 1852.