

04

Аналитический расчет распределений электронной плотности и концентрации ионов примеси в термической пылевой плазме с применением модели „желе“ для конденсированных частиц

© И.И. Файрушин¹, И.Г. Даутов^{1,2}, Н.Ф. Кашапов¹,
А.Р. Шамсутдинов¹

¹ Казанский федеральный университет

² Казанский национальный исследовательский технический университет

им. А.Н. Туполева — КАИ

E-mail: wolobokr@gmail.com

Поступило в Редакцию 5 июля 2016 г.

С применением модели „желе“ к описанию частиц конденсированного вещества получены самосогласованные пространственные распределения электронной плотности во всем объеме частиц и окружающей их плазме, а также распределения концентрации ионов легкоионизирующихся примесных атомов. Установлено, что в термической пылевой плазме, содержащей примесь легкоионизирующегося элемента, при повышении температуры эмиссия электронов конденсированными частицами может ослабевать. Показано, что с уменьшением радиуса частиц при постоянной температуре эмиссия ими электронов увеличивается. Вблизи поверхности конденсированных частиц отмечается образование области плазмы с нарушением ионизационного равновесия.

Систему, состоящую из частично ионизованного газа и частиц конденсированного вещества микронных размеров, принято называть пылевой плазмой или плазмой с конденсированной дисперсной фазой (КДФ) [1]. Одной из разновидностей этого вида плазмы является термическая плазма, в которую вводят или же в ней образуются частицы микронных размеров [2–6]. Такая система, например, формируется при сгорании металлических частиц, сопровождающемся образованием оксидов металлов в форме микронных частиц [6,7]. Это связано с тем, что при температуре горения происходит тепловая ионизация

конденсированной и газовой сред, которая затрагивает все этапы становления и роста конденсированных частиц [7].

Исследования термической плазмы, содержащей заряженные микрочастицы конденсированного вещества, также актуальны в связи с возникновением такой плазмы в процессах получения функциональных покрытий плазменным напылением [8]. Необходимо отметить, что, так как термическая пылевая плазма (ТПП) является дисперсной системой, огромную роль в проявлении разнообразия ее свойств играют процессы, происходящие у поверхности конденсированных частиц. Таким образом, для описания данной системы необходимо привлекать и методы физики поверхности. На сегодняшний день в физике поверхности получено много результатов, описывающих электронные свойства поверхности веществ [9–15]. Рассмотрены также размерные зависимости различных параметров, а также влияние окружающей среды на свойства поверхности. Например, исследованы снижение работы выхода электрона из металла, покрытого диэлектрическими алмазоподобными, полимерными, оксидными пленочными покрытиями [9–11], а также влияние окружающей среды на свойства поверхности. При рассмотрении вопроса об описании распределения потенциала электрического поля внутри конденсированной среды и у ее поверхности широкое применение нашла модель „желе“, согласно которой ионный остов конденсированной среды представляется в виде непрерывного однородного положительного фона, а электроны проводимости как электронный газ внутри этого положительного фона. Данный вопрос подробно рассматривался, например в [9–14]. Применительно к малым частицам эта задача была рассмотрена в работах [16–19], в которых при описании малых частиц также использована модель „желе“.

Проблема определения распределения потенциала электрического поля также занимает одно из центральных мест в теоретическом описании ТПП. В ряде работ [3–5] по исследованию эмиссионной зарядки пылевых частиц в газе и плазме получены расчетные данные по распределению потенциала и электронной плотности в пространстве между частицами. Однако вопрос распределения потенциала и электронной плотности внутри самих частиц применительно к пылевой плазме обходит стороной, а заряд частиц определяется уравнением баланса с помощью формулы Ричардсона–Дешмана, в которой значение работы выхода электронов считается зависящим только от материала

частицы. Однако работа выхода зависит, кроме того, от радиуса частицы и ее температуры, что показано, в частности, в работе [20].

В данной работе решается задача объединенного описания распределения потенциала электрического поля для областей внутри пылевых частиц и окружающей их плазмы. Рассматриваются полупроводниковые частицы, в этом случае плотность положительного фона определяется концентрацией атомов, электроны которых способны свободно перемещаться внутри частицы. Температура компонент системы „пылевые частицы–плазма“ считается одинаковой, что реализуется в ряде случаев при атмосферном или более высоком давлениях [2].

Сделаем допущение, что электронный газ внутри частицы, как и в окружающей плазме, имеет концентрацию ниже порога вырождения, поэтому к нему можно применить распределение Больцмана

$$n_e = n_{e0} e^{\frac{q\varphi}{kT}}, \quad (1)$$

где n_e — электронная плотность, q — абсолютное значение заряда электрона, φ — потенциал электрического поля, n_{e0} — электронная плотность при $\varphi = 0$, k — постоянная Больцмана, T — абсолютное значение равновесной температуры всех компонент системы. В данной работе рассматривается диапазон изменения T от 2000 до 2500 К, характерный для ТПП [2–6]. В качестве значений плотности положительного фона частицы и относительной диэлектрической проницаемости материала частицы в расчетах взяты соответственно значения $n_i^{(1)} = 10^{21} \text{ м}^{-3}$ и $\varepsilon = 10$.

Когда газ, окружающий пылевые частицы, не содержит легкоионизирующихся примесей, ионизацией самого газа в рассматриваемом диапазоне температур можно пренебречь. В данной же работе примем, что в газе находится примесь легкоионизирующегося щелочного металла. Для определения концентрации заряженной компоненты в окружающей пылевые частицы плазме воспользуемся известным уравнением Саха

$$\frac{n_i^{(2)} n_e}{n_a} = \frac{2z_i}{z_a} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{q\varphi_i}{kT}},$$

где $n_i^{(2)}$, n_a — концентрация ионов и атомов примеси соответственно, концентрация электронов (электронная плотность), z_i , z_a — статистические суммы ионов и атомов примеси соответственно (в расчетах

далее используются значения, соответствующие калию), m_e — масса электрона, h — постоянная Планка, φ_u — потенциал ионизации примесного атома.

В рассматриваемом диапазоне температур частицы будут эмитировать в окружающие их плазму электроны и приобретать некоторый положительный заряд. Таким образом, вокруг пылевой частицы образуется электрическое поле, которое будет влиять на пространственное распределение концентраций электронов и ионов у поверхности частицы. Для простоты будем считать, что частицы имеют форму шара одного радиуса R и равномерно распределены в пространстве с расстоянием между центрами $2l$.

Как известно, связь потенциала электрического поля и концентрации электрических зарядов задается уравнением Пуассона. В представленном случае, когда электронный газ во всем объеме ТПП невырожден, данное уравнение будет являться уравнением Пуассона–Больцмана. Учитывая то, что рассматриваемая задача является сферически симметричной и ионы примеси в плазме имеют больцмановское распределение, окончательно получим

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\varphi}{dr} = \frac{q}{\varepsilon_0} \left(\frac{n_{e0} e^{\frac{q\varphi}{kT}}}{(\varepsilon - 1)\theta(R - r) + 1} - \frac{n_i^{(1)}}{\varepsilon} \theta(R - r) - n_{i0}^{(2)} e^{-\frac{q\varphi}{kT}} \theta(r - R) \right), \quad (2)$$

где r — координата, отсчитываемая от центра частицы, ε_0 — электрическая постоянная, $\theta(r)$ — функция Хевисайда, $n_{i0}^{(2)}$ — концентрация ионов примеси при $\varphi = 0$. За начало отчета потенциала примем поверхность частицы, т.е. $\varphi(R) = 0$. Задача симметрична относительно центра частицы, поэтому $\varphi'(0) = 0$. К задаче необходимо применить еще и условие равенства нулю суммарного заряда в объеме, приходящемся на одну частицу, т.е. $\varphi'(l) = 0$. В случае $|q\varphi| \ll kT$ экспоненциальные множители в правой части уравнения (2) можно разложить в ряд и ограничиться первыми двумя членами, тогда данное уравнение решается аналитически. Далее будут рассмотрены только те решения, которые достаточно хорошо удовлетворяют данному условию. Решение произведено в два этапа: сначала рассматривается область $0 \leq r < R$, а затем, принимая во внимание условия непрерывности электронной

плотности и электрического поля на поверхности частицы, получается распределение потенциала и в области $R \leq r \leq l$. Аналитическая запись выражений, описывающих распределение потенциала, будет следующей:

$$\psi(x) = (\bar{n}_i^{(1)} - 1) \left(\frac{e^{-ax} - e^{ax}}{x(e^a - e^{-a})} + 1 \right) \text{ для } 0 \leq x < 1,$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\bar{n}_{i0}^{(2)} + 1} \left(\frac{C_2 e^{bx} + C_3 e^{-bx}}{x} + \bar{n}_{i0}^{(2)} - 1 \right) \text{ для } 1 \leq x \leq \lambda.$$

Здесь

$$\psi = \frac{q\phi}{kT}; \quad \bar{n}_i^{(1)} = \frac{n_i^{(1)}}{n_{e0}}; \quad x = \frac{r}{R}; \quad a = qR \sqrt{\frac{n_{e0}}{\varepsilon \varepsilon_0 kT}};$$

$$\bar{n}_{i0}^{(2)} = \frac{An}{n_{e0}^2 + An_{e0}}; \quad A = \frac{2z_i}{z_a} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{q\phi_0}{kT}};$$

$n = n_a + n_{i0}^{(2)}$ — концентрация атомов примеси до ионизации, а n_a — после ионизации; $b = a \sqrt{\varepsilon(1 + \bar{n}_{i0}^{(2)})}$; $\lambda = \frac{l}{R}$. Кроме того,

$$\bar{n}_i^{(1)} = 1 - C_1(e^a - e^{-a}); \quad C_1 = \frac{C_2 - (b+1)(1 - \bar{n}_{i0}^{(2)})}{(\bar{n}_{i0}^{(2)} + 1)(e^a(a-1) + e^{-a}(a+1))};$$

$$C_2 = \frac{(b\lambda + 1)(1 - \bar{n}_{i0}^{(2)})e^{b(1-2\lambda)}}{(b\lambda + 1)e^{b(1-2\lambda)} + b\lambda - 1}; \quad C_3 = e^b(1 - \bar{n}_{i0}^{(2)} - C_2 e^b).$$

Зная распределение потенциала, через формулу (1) несложно определить распределения электронной плотности и концентрации ионов примеси. На рис. 1 приведен график распределения концентраций электронов и ионов в области $0 \leq r \leq l$.

Как видно из рис. 1, с повышением температуры величина электронной плотности на всем интервале от центра частицы до $r = l$ растет. Рост электронной плотности в плазме, очевидно, объясняется повышением ее степени ионизации при увеличении температуры. Внутри же частицы плотность электронов с повышением температуры должна была бы понизиться, так как в этом случае следовало бы ожидать увеличения эмиссии электронов, как это происходит, когда ионизация

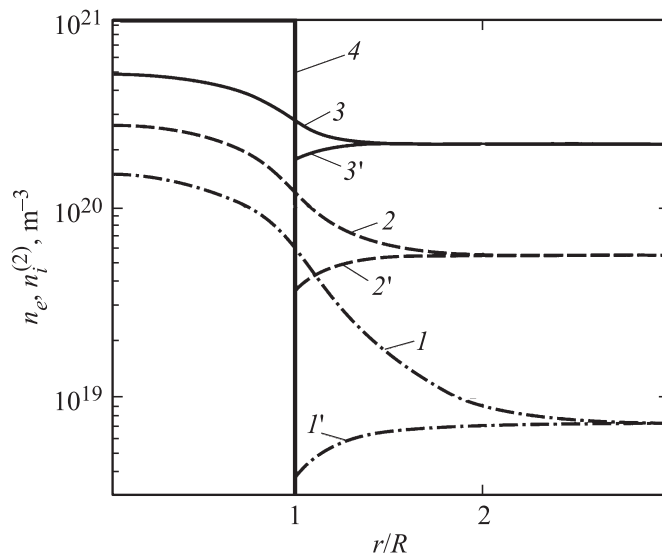


Рис. 1. Распределения электронной плотности (кривые 1, 2, 3) и концентрации ионов примеси (кривые 1', 2', 3') при $n = 10^{23} \text{ m}^{-3}$, $R = 10^{-6} \text{ m}$, $l = 3R$ и различных значениях температуры (1 и 1' при $T = 2000 \text{ K}$, 2 и 2' при $T = 2250 \text{ K}$, 3 и 3' при $T = 2500 \text{ K}$); кривая 4 соответствует величине $n_i^{(1)}$.

газа, окружающего частицу, пренебрежимо мала [21]. В рассматриваемом случае выходу электронов из частиц начинает препятствовать увеличивающаяся концентрация электронов самой плазмы, возникающих благодаря процессу ионизации атомов примеси. При понижении температуры видно, что увеличение концентрации свободных электронов в плазме происходит в основном за счет электронной эмиссии из конденсированных частиц, а ионизация атомов примеси достаточно низкая (кривые 1 и 1').

Также наблюдается изменение характера пространственного распределения электронной плотности в зависимости от радиуса частицы (рис. 2). С уменьшением размера частиц увеличивается выход электронов из частицы в окружающую плазму. Это объясняется увеличением удельной поверхности с уменьшением радиуса частиц. Таким образом,

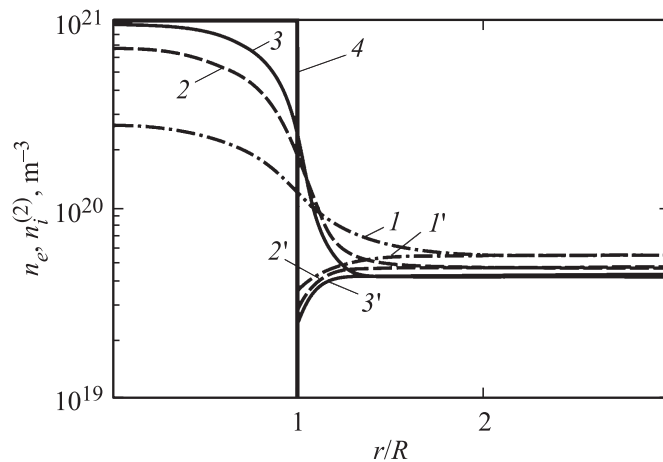


Рис. 2. Распределения электронной плотности (кривые 1, 2, 3) и концентрации ионов примеси (кривые 1', 2', 3') при $n = 10^{23} \text{ m}^{-3}$; $T = 2250 \text{ K}$; $l = 3R$ и различных значениях радиуса частиц (1 и 1' при $R = 10^{-6} \text{ m}$, 2 и 2' при $R = 2 \cdot 10^{-6} \text{ m}$, 3 и 3' при $R = 3 \cdot 10^{-6} \text{ m}$); кривая 4 соответствует величине $n_i^{(1)}$.

частицы меньших размеров более эффективно эмитируют электроны в окружающую плазму.

Нужно заметить, что у поверхности частицы ионизационное равновесие нарушается. На больших расстояниях от частицы концентрации ионов и электронов выравниваются, плазма здесь квазинейтральная. Нарушение ионизационного равновесия более отчетливо наблюдается при уменьшении температуры плазмы и радиуса частиц.

Следует отметить, что решенная в данной работе задача подобна той, которая возникает при определении распределения концентрации электронов в контакте двух полупроводников n -типа с разной концентрацией свободных носителей заряда (в данном случае электронов) [см., например, 22]. Разница, по существу, состоит в том, что в нашем случае, когда рассматривается контакт равновесной плазмы с полупроводником, носители положительного заряда со стороны плазмы подвижны и испытывают влияние от возникающего вследствие перераспределения зарядов электрического поля.

В заключение можно сказать следующее, подбирая параметры термической плазмы, окружающей конденсированные частицы, появляется возможность влиять на величину и распределение электронной плотности в пространстве между пылевыми частицами, а значит, и на электропроводность пылевой плазмы в целом. Это важно для ряда приложений, таких, например, как получение покрытий плазменным напылением и плазмохимический синтез дисперсных материалов.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

Список литературы

- [1] *Фортвов В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.Т.* Физика неидеальной плазмы: Учебное пособие. М.: Физматлит, 2004.
- [2] *Vishnyakov V.I.* // Phys. Rev. E. 2012. V. 85. P. 026 402.
- [3] *Фортвов В.Е., Филинов В.С., Нефедов А.П.* и др. // ЖЭТФ. 1997. В. 111. С. 889.
- [4] *Дьячков Л.Г., Храпак А.Г., Храпак С.А.* // ЖЭТФ. 2008. В. 133. С. 197.
- [5] *Khrapak S.A., Morfill G.E., Fortov V.E.* et al. // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 99. P. 055 003.
- [6] *Драган Г.С.* // ЖЭТФ. 2004. В. 125. С. 507.
- [7] *Золотко А.Н., Полетаев Н.И., Вовчук Я.И.* // ФГВ. 2015. В. 2. С. 125.
- [8] *Пузряков А.Ф.* Теоретические основы технологии плазменного напыления. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2003.
- [9] *Юмагузин Ю.М., Корнилов В.М., Лачинов А.Н.* // ЖЭТФ. 2006. В. 130. С. 303.
- [10] *Лошицкая К.П., Созаев В.А., Чернышова Р.А.* // Поверхность. 2005. В. 9. С. 104.
- [11] *Смогунов А.Н., Куркина Л.И., Фарберович О.В.* // ФГТ. 2000. В. 42. С. 1848.
- [12] *Коротков П.К., Созаев В.А., Тхакахов Р.Б., Уянаева З.А.* // Изв. РАН. Сер. Физ. 2009. В. 73. С. 1038.
- [13] *Мамонова М.В., Прудников В.В., Прудникова И.А.* Физика поверхности. Теоретические модели и экспериментальные методы. М.: Физматлит, 2011.
- [14] *Ролдугин В.И.* Физикохимия поверхности. Долгопрудный: Интеллект, 2011.
- [15] *Партенский М.Б.* // УФН. 1979. В. 128. С. 69.
- [16] *Партенский М.Б.* // Поверхность. 1982. В. 10. С. 15.
- [17] *Смирнов М.Б., Крайнов В.П.* // ЖЭТФ. 1999. В. 115. С. 2014.

- [18] *Ekaradt W.* // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. P. 1558.
- [19] *Иванов В.К., Ипатов А.Н.* // ЖЭТФ. 1996. В. 109. С. 902.
- [20] *Смирнов Б.М.* // УФН. 2000. В. 170. С. 495.
- [21] *Dautov G., Fayrushin I., Dautov I., Kashapov N.* // J. Phys.: Conf. Ser. 2013. V. 479. P. 012 014.
- [22] *Бонч-Бруевич В.Л., Калашиников С.Г.* Физика полупроводников. М.: Наука, 1977.