

01;04

## Соотношения подобия (скейлинги) для пространственных распределений параметров плазмы положительного столба разряда в кислороде

© Е.А. Богданов,<sup>1</sup> А.А. Кудрявцев,<sup>1</sup> Л.Д. Цендин,<sup>2</sup> Р.Р. Арсланбеков,<sup>3</sup> В.И. Колобов,<sup>3</sup> В.В. Кудрявцев<sup>4</sup><sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 195251 Санкт-Петербург, Россия<sup>3</sup> CFD Research Corp., 215 Wynn Drive, Huntsville, AL, USA<sup>4</sup> CFD-Canada, 45 English Ivyway, Toronto, Canada  
e-mail: akud@ak2138.spb.edu

(Поступило в Редакцию 4 марта 2003 г.)

С помощью коммерческого CFDRC software (<http://www.cfdrc.com/~cfdplasma>), позволяющего проводить симуляции в произвольной 3D-геометрии с использованием fluid-уравнений для тяжелых компонентов, и решения кинетического уравнения для электронов проведено полномасштабное самосогласованное моделирование плазмы положительного столба разряда постоянного тока в кислороде. Рассмотрены основные закономерности (скейлинги), которым подчиняются пространственные распределения заряженных частиц. Так как в разных областях значений параметров доминируют разные физические процессы, скейлинги эти сильно различаются. При низких давлениях во внутренней области выполняется условие больцмановского распределения не только электронов, но и отрицательных ионов, что приводит к формированию там плоского профиля электронов и параболического — ионов. В балансе ионов главную роль играют процессы переноса, поэтому учет возможного их нагрева в поле драматически влияет на пространственное распределение заряженных частиц. При повышении давления в балансе отрицательных ионов доминируют объемные процессы и профили концентраций во внутренней области становятся подобными.

Интерес к исследованиям разрядов в электроотрицательных газах связан с их широким использованием в современных плазменных технологиях [1]. Чтобы предсказывать возможные распределения параметров и прогнозировать их зависимость от внешних условий, в литературе большое внимание уделяется выявлению связей между основными характеристиками плазмы. Различные аспекты этой проблемы в электроотрицательных газах рассматривались многими группами исследователей (см., например, [1–26]). Было установлено, что наличие отрицательных ионов приводит к ряду существенных особенностей при протекании процессов пространственного переноса, определяющих профили концентраций и других параметров плазмы [26]. Знание пространственных распределений заряженных частиц принципиально важно для понимания и оптимизации работы таких практических устройств и технологий, как ионные источники, устройства для плазменной обработки материалов и т. п. Попытки в ранних работах [2–9] на основе упрощенных моделей свести задачу к набору эффективных коэффициентов амбиполярной диффузии были противоречивы, а критерии их применимости отсутствовали. В работах [10–12] было установлено, что отличительной особенностью плазмы электроотрицательных газов является ее расслоение на области с различным ионным составом, причем во внешней области электрон-ионной плазмы („шкурке“) отрицательных ионов практически нет (рис. 1–3); они втягиваются полем в глубь плазмы.

И хотя размеры этой шкурки обычно малы, ее наличие принципиально, поскольку она запирает отрицательные ионы в объеме, так что их поток на стенки отсутствует (в отличие от соответствующих потоков электронов и положительных ионов). В такой ситуации обеспечить уход отрицательных ионов на стенки можно лишь при подаче на них (или соответствующий вытягивающий электрод) ускоряющей разности потенциалов  $U$  такой величины, чтобы образуемый при этом слой объемного заряда, грубо говоря, „дорос“ до внутренней области с отрицательными ионами. Чем толще шкурка, тем большие напряжения ( $U \sim L_{sh}^{2/3}$ ) необходимо прикладывать, чтобы обратить поток отрицательных ионов и дать им возможность уходить на стенку.

Кроме практического интереса, кислородная плазма является еще и важным тестовым объектом [16], вокруг особенностей пространственного распределения параметров которого разгорелись острые дискуссии. Так, в [16–18] указано на неправомерность использования в работах [13–15] больцмановского распределения из [4] не только для электронов, но и для отрицательных ионов. В качестве альтернативы в [16–18] утверждается, что концентрации заряженных частиц здесь должны быть пропорциональны друг другу [10–12]. В [24] было показано, что в зависимости от условий реализуются оба вида распределений. Например, нами наблюдался переход от одного из этих типов профилей к другому при уменьшении давления (подробнее см. ниже).

Для проверки и тестирования функциональных зависимостей между характеристиками плазмы, которые можно получить лишь на основе упрощенных моделей, их следует сопоставлять с полномасштабным численным экспериментом. Последний должен основываться на самосогласованных моделях, учитывающих процессы пространственного переноса и плазмохимические объемные реакции. Попытка такого рода была предпринята, в частности, нами в [27], где с помощью коммерческого CFDRC software [28] было проведено сопоставление кинетического и fluid-расчетов при моделировании плазмы положительного столба разряда постоянного тока (DC) в кислороде. Была предложена 2Т fluid-model, позволяющая наиболее просто учесть кинетические эффекты в рамках традиционного fluid-моделирования.

В данной работе продолжены исследования [27] применительно к особенностям пространственного распределения параметров плазмы положительного столба DC-разряда в стеклянной трубке диаметром 12 mm в диапазоне давлений 0.05–3 Torr и разрядных токов 5–200 mA. Эти условия соответствуют исследованным в [21,22], где проведено одно из наиболее детальных, с нашей точки зрения, экспериментальных и теоретических исследований PC кислородного DC-разряда.

Симуляция параметров разряда проводилась на коммерческом программном обеспечении, разработанном в CFD Research Corporation, Huntsville, AL, USA [28]. Подробная формулировка самосогласованной модели плазмы разряда, описание итерационной численной схемы и методов решения системы уравнений приведены в [28]. Параметры (плотность и среднюю энергию) электронного газа можно было находить как при помощи fluid-уравнений баланса, так и с помощью решения кинетического уравнения для EDF. Самосогласованное электрическое поле находилось из уравнения Пуассона. Описание тяжелых частиц проводилось в рамках fluid-модели. Анализ и литературные данные показывают, что в исследованном диапазоне параметров нагрев нейтрального газа не превышает 50–150 K. Такое увеличение температуры газа  $T$  приводит по сути лишь к уменьшению его плотности. Поскольку это не принципиально для исследуемой здесь проблемы, то температура газа предполагалась равной комнатной и постоянной по сечению. В то же время нагрев ионов может быть значителен, особенно при низких давлениях [20,21]. При понижении давления приведенное поле  $E/p$  растет и ионы способны набирать в поле направленную скорость, которая может превышать их хаотическую (тепловую) [29]. При этом собственный коэффициент диффузии ионов также увеличивается. Это может приводить к драматическим изменениям профилей ионов [20]. Расчеты [20,21] с модельным учетом нагрева ионов в продольном поле дают почти полное уменьшение и даже исчезновение внешней области электрон-ионной плазмы. Нагрев ионов приводит также к уменьшению

константы отлипания и, как следствие, к увеличению относительной концентрации отрицательных ионов  $n_n/n_e$  (степени электроотрицательности) [21].

В работе использовался тот же, что и в [27], набор объемных плазмохимических процессов. Поэтому здесь мы не будем приводить его полностью. Отметим лишь, что решались уравнения баланса для колебательно-возбужденных состояний молекулы кислорода  $O_2(v)$  ( $v = 0.1$ ), а также для электронно-возбужденных состояний молекулы ( $O_2(X^3\Sigma_g^-)$ ,  $O_2(a^1\Delta)$ ,  $O_2(b^1\Sigma)$ ,  $O_2(Ry)$ ) и атома ( $O(^3P)$ ,  $O(^1S)$ ,  $O(^1D)$ ) кислорода, молекулы озона  $O_3$  и для ионов ( $O^+$ ,  $O_2^+$ ,  $O_4^+$ ,  $O^-$ ,  $O_2^-$ ,  $O_3^-$ ) с учетом 160 плазмохимических реакций между ними.

По результатам проведенных симуляций на рис. 1 представлены типичные профили ионов для давлений газа  $p = 1$  Torr и на рис. 2, 3 — для  $p = 0.15$  Torr. Различие между рис. 2 и 3 связано с учетом (рис. 3) или неучетом (рис. 2) нагрева ионов продольным полем при проведении симуляций. Этот нагрев [20–22]

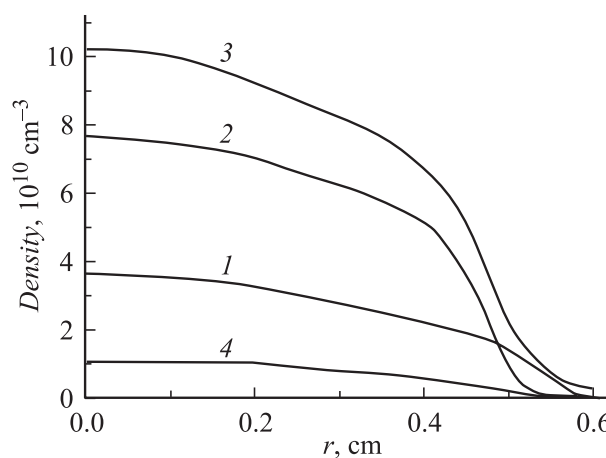


Рис. 1. Пространственные профили заряженных частиц для  $p = 1$  Torr,  $I = 50$  mA. 1 —  $n_e$ , 2 —  $n_n$ , 3 —  $n_p$ , 4 —  $n[O^+]$ .

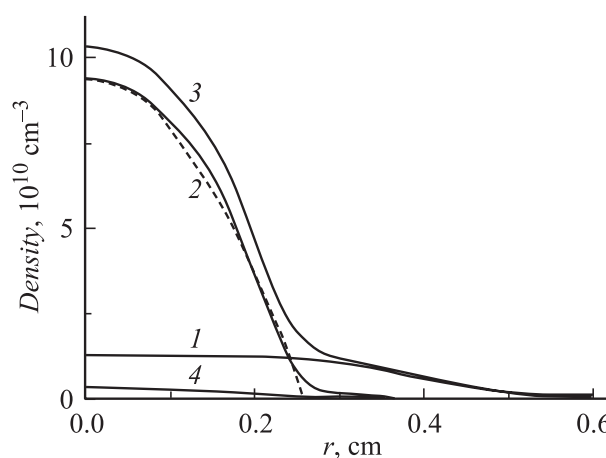


Рис. 2. То же, что на рис. 1, для  $p = 0.15$  Torr, без учета нагрева ионов. 1 —  $n_e$ , 2 —  $n_n$ , 3 —  $n_p$ , 4 —  $n[O^+]$ . Штриховая кривая — параболическое распределение (18).

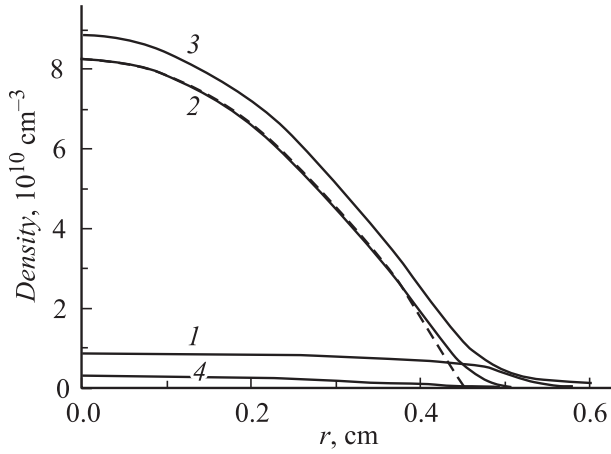


Рис. 3. То же, что на рис. 2, с учетом нагрева ионов.

рассчитывался по формулам из [29] для поперечной эффективной ионной температуры („effective transversal“ ion temperature)

$$T_i^\perp = T + \frac{(M_i + M)Mw^2}{3(2M + M_i)}, \quad (1)$$

где  $M$ ,  $M_i$  — соответственно массы молекулы и иона,  $w$  — дрейфовая скорость иона в продольном поле  $E_z$ .

Например, для  $p = 1$  Тога температура  $T_i^\perp \approx 760$  К, в то время как для  $p = 0.15$  Тога температура  $T_i^\perp \approx 5200$  К. Порядок значений температур ионов в зависимости от параметра ( $p\Lambda$ ) для кислорода можно видеть на рис. 5 из [21].

Из рис. 1–3 видно, что формируется резко неоднородное по сечению пространственное распределение концентраций заряженных частиц. Во внутренней области ион-ионной плазмы (ей придадим индекс 0; толщина ее  $r = r_0$ ) сосредоточены практически все отрицательные ионы. Внешняя область ( $r_0 < r < R$ ) электрон-ионной плазмы (индекс 1) состоит из электронов и положительных ионов, а отрицательные ионы в ней практически отсутствуют. Сопоставление профилей рис. 2, 3 показывает, что учет нагрева ионов, увеличивающий их коэффициент диффузии, драматически влияет на толщину шкурки. Поэтому вопрос о температуре ионов при анализе пространственных профилей заряженных частиц в электроотрицательных газах является одним из принципиальных [20,21].

Основным положительным ионом является  $O_2^+$ , отрицательным —  $O^-$ ; концентрации остальных малы по сравнению с ними. Поэтому для качественного анализа достаточно рассмотреть плазму, состоящую только из электронов (индекс  $e$ ), положительных ( $p$ ) и отрицательных ( $n$ ) ионов.

Для того чтобы объяснить наблюдаемые зависимости и прогнозировать их изменение в зависимости от внешних условий, как и во всех работах [1–26], запишем

стандартную систему дрейфово-диффузионных уравнений с бoльцмановским распределением для электронов ( $E = -T_e \nabla n_e / n_e$ )

$$-D_p \nabla (\nabla n_p + kn_p \nabla n_e / n_e) = v_i n_e - K_r n_n n_p, \quad (2)$$

$$-D_n \nabla (\nabla n_n - kn_n \nabla n_e / n_e) = v_a n_e - v_d n_n - K_r n_n n_p, \quad (3)$$

$$n_p = n_n + n_e. \quad (4)$$

Здесь  $v_i$ ,  $v_a$ ,  $v_d$  — соответственно частоты ионизации, прилипания и отлипания;  $K_r$  — константа ион-ионной рекомбинации;  $k = T_e / T_i$  — отношение температур электронов и ионов. Граничные условия к системе (2), (3) имеют вид [1,26]

$$\nabla n_n = \nabla n_p = 0 \quad \text{при} \quad r = 0,$$

$$n_n = n_p = \nabla n_n = 0 \quad \text{при} \quad r = R. \quad (5)$$

Поскольку поток отрицательных ионов на стенки отсутствует, то для усредненных по сечению концентраций ( $\bar{n}$ ) из (3) имеем [1,26]

$$v_a \bar{n}_e = v_d \bar{n}_n + K_r \bar{n}_n \bar{n}_p. \quad (6)$$

При дальнейшем анализе будем в основном следовать работам [24–27]. Принципиальное значение для анализа решения системы (2), (3) имеет суммарное уравнение, введенное в [10,26]. Поделив уравнения системы (2), (3) на соответствующие коэффициенты диффузии и сложив их, получим

$$-2\Delta n_n / k - \Delta n_e = n_e / l_e^2 - 2n_n / kl_n^2. \quad (7)$$

Из (7) видны два характерных пространственных масштаба  $l_e$  и  $l_n$

$$1/l_e^2 = 1/l_{ion}^2 + 1/l_a^2 = v_i / D_{ap} + v_a / D_{an} = \tau_{ap} v_i / \Lambda^2 + \tau_{an} v_a / \Lambda^2, \quad (8)$$

$$1/l_n^2 = 1/l_{nd}^2 + 1/l_{nr}^2 = v_d / 2D_n + n_p K_r / D_{np} = \tau_n v_d / \Lambda^2 + \tau_{np} K_r n_p / \Lambda^2. \quad (9)$$

В (8), (9)  $D_{an,ap} = D_{n,p}(k+1)$ ,  $D_{np} = 2D_n D_p / (D_n + D_p)$  — коэффициенты электрон-ионной и ион-ионной амбиполярной диффузии;  $\tau_j = \Lambda^2 / D_j$  — соответствующие характерные времена;  $\Lambda$  — диффузионная длина, которая для цилиндра есть  $\Lambda = R/2.4$ . Для примера по результатам проведенных симуляций на рис. 4 представлены зависимости длин (8), (9) от параметра ( $p\Lambda$ ) для кислорода.

Поскольку амбиполярное поле стремится втянуть отрицательные ионы в глубь плазмы, то во внешней области  $r_0 \leq r \leq R$ , их концентрация мала  $n_n(r) \approx 0$ , так что там  $n_e(r) \approx n_p(r)$ . После пренебрежения здесь членами с  $n_n$  уравнение (7) приобретает простой вид

$$-\Delta n_e = n_e / l_e^2.$$

Расплавание за счет ионной диффузии приводит к тому, что толщина внешней области  $(R - r_0) \leq l_e$ , так что  $l_e$  определяет максимальную толщину шкурки. В наших условиях она мала по сравнению с радиусом трубки  $R$  (характерной диффузионной длиной  $\Lambda = R/2.4$ ). Тогда геометрию внешней области 1 можно считать плоской и для профиля плазмы при  $r_0 \leq r \leq R$  можно использовать решение [10,24–26]

$$n_e(r) = n_e(r_0) \sin(\pi(R - r)/2l_e) / \sin(\pi(R - r_0)/2l_e). \quad (10)$$

Вид распределения концентраций во внутренней области 0 существенно зависит от соотношения между  $R$  и  $l_n$  (9) — между радиусом и расстоянием, на которое отрицательный ион пройдет за счет собственной диффузии за время своей жизни относительно объемных процессов [24–26]. При  $\tau_{an}v_a > 1$ , когда длина  $l_e$  (8) мала ( $l_e < \Lambda$ ), для типичных  $\bar{n}_n/\bar{n}_e < k \approx 100$  толщина  $l_n$  оказывается еще меньше ( $l_n < l_e$ ) и ионной диффузией можно пренебречь [10–12]. При обратном неравенстве ( $\tau_{an}v_a < 1$ ) электрон-ионная плазма занимает почти все сечение трубки, а длина  $l_n$  может быть как больше, так и меньше размера внутренней ион-ионной области. Поэтому для нахождения функциональных зависимостей во внутренней области целесообразно рассмотреть два предельных случая больших и малых значений параметра  $\tau_{an}v_a$ . Поскольку этот параметр квадратично зависит от давления, то граница  $\tau_{an}v_a = 1$  фиксируется достаточно точно. Для кислорода граничным является значение параметра  $p\Lambda \approx 0.07 \text{ cm} \cdot \text{Torr}$  (штриховая кривая на рис. 4), так что  $\tau_{an}v_a > 1$  при  $p\Lambda > 0.07 \text{ cm} \cdot \text{Torr}$ , и наоборот. Соответственно длина  $l_e$  (8) имеет две асимптотики:  $l_e \approx \Lambda$  при низких давлениях  $p\Lambda < 0.07 \text{ cm} \cdot \text{Torr}$  и  $l_e \approx l_n \sqrt{T_e/2T_i}$  в обратном случае (рис. 4).

При большом прилипании  $\tau_{an}v_a > 1$  характерные длины (8), (9), как уже указывалось, малы ( $l_n < l_e < \Lambda$ ) (рис. 4). Поскольку толщина  $l_n < l_e$ , то в исходной

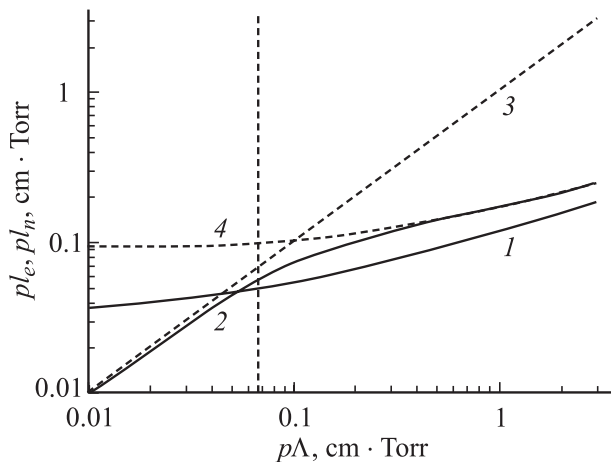


Рис. 4. Зависимости характерных длин  $l_n$  (1) и  $l_e$  (2) от параметра  $(p\Lambda)$  для кислорода. Асимптотики  $l_e$ :  $l_e \approx \Lambda$  (3) и  $l_e \approx l_n \sqrt{T_e/2T_i}$  (4).

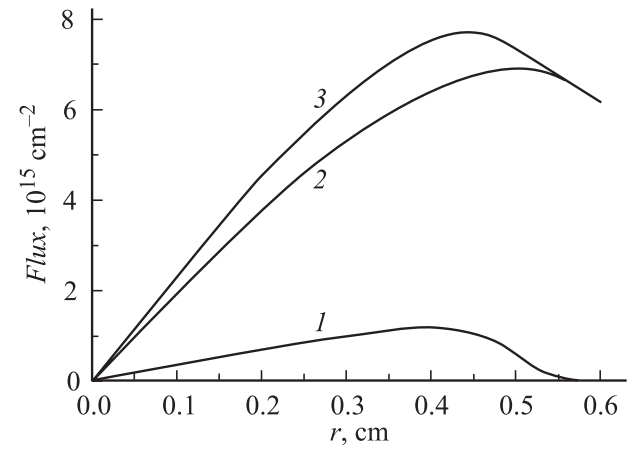


Рис. 5. Соотношение между пространственным переносом и объемными процессами в балансе отрицательных ионов при  $p = 1 \text{ Torr}$ ,  $I = 50 \text{ mA}$ . 1 — пространственный поток отрицательных ионов (со знаком минус), 2 — их суммарное рождение, 3 — гибель.

системе (2), (3) можно пренебречь ионной диффузией (как и предполагалось в [10–12]), а для толщины шкурки положить  $R - r_0 \approx l_e$ , т.е. знаменатель в (10) здесь равен единице. В рассматриваемом случае в балансе отрицательных ионов (3) их перенос играет малую роль по сравнению с объемными процессами (рис. 5), причем пространственный поток ионов практически полностью определяется дрейфовой составляющей. Поэтому при  $n_p \approx n_n > n_e$  поток положительных ионов во внутренней области будет примерно равен по величине потоку отрицательных, но иметь противоположное направление, т.е. [10,26]

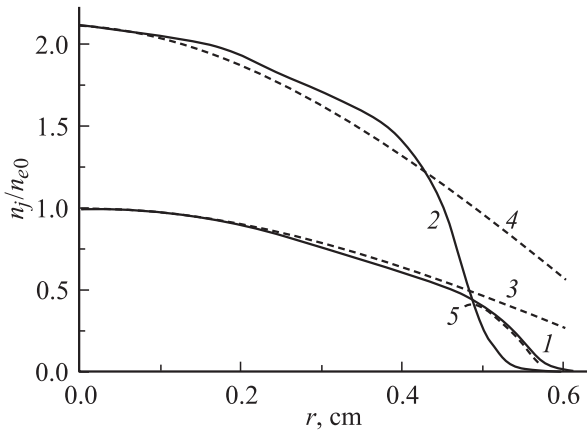
$$\Gamma_n/b_n \approx kn_p \nabla n_e/n_e \approx kn_n \nabla n_e/n_e \approx -\Gamma_p/b_p. \quad (11a)$$

Поэтому в (7), где эти потоки складываются, в центральной области ион-ионной плазмы они практически полностью компенсируют друг друга. Другими словами, при  $r < r_0$  слагаемые в левой части суммарного уравнения (7), определяемые пространственным переносом, малы по сравнению с объемными процессами в правой части. Поэтому с большой точностью выполняется локальный баланс плазмохимических процессов рождения и гибели ионов:  $n_e/l_e^2 = 2n_n/kl_n^2$ . Раскрывая это равенство, получим для условий  $\tau_{an}v_a > 1$  важное соотношение [10,24–26]

$$(v_i/D_p + v_a/D_n)n_e = v_d n_n/D_n + K_r n_n(n_n + n_e)/(1/D_p + 1/D_n), \quad (12a)$$

позволяющее найти связь между параметрами центральной области  $r < r_0$ .

В зависимости от режима преимущественной гибели отрицательных ионов (т.е. от соотношения между слагаемыми в правой части (12a)) реализуются различные связи между концентрациями заряженных частиц.



**Рис. 6.** Нормированные профили концентраций при  $p = 1$  Торг,  $I = 50$  мА. 1 —  $n_e(r)/n_{e0}$ ; 2 —  $n_n(r)/n_{e0}$ ; 3, 4 — расчет по (13); 5 — профиль (10) во внешней области.

В кислородной плазме при  $\tau_{an}v_a > 1$  отрицательные ионы гибнут за счет отлипания (отлипательный режим,  $v_d > n_p K_r$ ), а их рекомбинацией можно пренебречь. Тогда из (12а) следует, что профили концентраций электронов и отрицательных ионов подобны

$$\nabla n_e/n_e = \nabla n_n/n_n, \quad n_e(x)/n_n(x) = \text{const.} \quad (12b)$$

Это условие было предложено в [2] и позднее обосновано в [10–12] при пренебрежении ионной диффузией по сравнению с их дрейфом. Как следует из проведенного анализа, соотношение (12b) выполняется лишь при  $\tau_{an}v_a > 1$ , поэтому экстраполяция его на область более низких давлений [16–18] неправомерна. Выполнение простой закономерности (12b) для кислорода иллюстрирует рис. 6, на котором представлены нормированные на концентрацию электронов в центре профили рис. 1,  $p = 1$  Торг. Подставляя связь (12) в (2) или (3), имеем, что при заметной электроотрицательности (при  $n_n > n_e$ ) концентрации во внутренней области удовлетворяют соотношению

$$n_p(r) \sim n_n(r) \sim n_e(r) \sim J_0(r/l_0). \quad (13a)$$

Для плоской геометрии функцию Бесселя следует заменить на  $\cos(x/l_0)$ . В (13а) характерная длина [10,26]

$$l_0^2 = \frac{D_{an}}{v_d} + \frac{v_a D_{ap}}{v_i v_d} \approx \frac{\Lambda^2 \bar{n}_n}{v_i \tau_{ap} \bar{n}_e} > \Lambda^2 \quad (13b)$$

определяет также и величину амбиполярного поля ( $E(r) = -T_e \nabla n_e/n_e$ ) в центральной зоне ( $r < r_0$ )

$$E^{(0)}(r) \approx -T_e J_1(r/l_0)/l_0 \approx -T_e r/l_0^2. \quad (14a)$$

Поскольку обычно  $l_0 > \Lambda > l_e$ , то профили во внутренней области (13а) более пологие, чем во внешней; при их продолжении до стенок они не стремятся к нулю (см. (5)). Соответственно поле (14а) более слабое, чем

поле в шкурке ( $r_0 < r < R$ ), для которого из (10) имеем оценку

$$E^{(1)}(r) \approx -\frac{\pi T_e}{2l_e} \text{ctg} \frac{\pi(R-r)}{2l_e} \approx -\frac{\pi^2 T_e}{2l_e^2} (r-r_0). \quad (14b)$$

Чтобы пояснить предельные случаи более наглядно, перепишем соотношение (11а) с использованием (2), (3) в виде условия ( $D = (D_n/D_p) \sim 1$ ) [10,26]

$$\Gamma_n = v_a \int_{r_0}^R n_e(r) r dr = -\Gamma_p D = D v_i \int_0^{r_0} n_e(r) r dr \quad (11b)$$

(„сколько прилипает снаружи, столько ионизуется внутри“). В тонкой шкурке за счет прилипания рождается сравнительно небольшой поток отрицательных ионов  $\Gamma_n$ , для транспортировки которого во внутреннюю область, где они гибнут за счет отлипания, достаточно малого поля (14а). Поскольку при  $\tau_{an}v_a > 1$  электроны во внутренней области гибнут в основном за счет прилипания, необходимо обеспечить лишь незначительный вынос положительных ионов во внешнюю область. Другими словами, равенство (11b) выражает тот факт, что при доминировании локального плазмохимического баланса ионов над их пространственным переносом последний должен компенсировать лишь относительно малую разность между прилипанием и отлипанием отрицательных ионов.

После подстановки  $n_e(r)$  из (10) и (14) из условия (11b) можно найти частоту ионизации  $v_i$ , представляющую собственное число краевой задачи (2), (3) [26]. Простая оценка  $\Gamma_n \approx v_a n_e l_e \approx \Gamma_p \approx v_i n_e \Lambda$  дает  $v_i \approx v_a l_e / \Lambda \approx \sqrt{v_a / \tau_{an}}$  [10,26]. Поскольку в рассматриваемом случае  $\tau_{an}v_a > 1$ , то и  $v_i \tau_{an} \approx \sqrt{v_a \tau_{an}} > 1$ . Это означает, что частота ионизации превышает значение, даваемое из соотношения Шоттки для простой плазмы ( $\tau_{an}v_i = 1$ ) [25,26].

Концентрацию отрицательных ионов в шкурке можно найти из их потока  $\Gamma_n$  (11b), формируемого там за счет прилипания,

$$\begin{aligned} n_n &\approx \Gamma_n / b_n E^{(1)} \\ &\approx \frac{8l_e^2 n_e(r_0)}{\pi^2 D_{an}} \sin^2 \frac{\pi(R-r)}{2l_e} \text{tg} \frac{\pi(R-r)}{2l_e}. \end{aligned} \quad (15)$$

Она пренебрежимо мала по сравнению с концентрацией электронов и положительных ионов

$$n_n \approx \frac{\pi n_e(r_0) v_a}{4D_{an} l_e} (r-R)^3 \quad (r_0 < r \leq R). \quad (15a)$$

В точке  $r = r_0 \approx R - l_e$  поле  $E^{(1)}$  близко к нулю, а величина потока  $\Gamma_n$  (11b), обусловленного прилипанием во внешней области, задана и конечна. Поэтому при приближении к точке  $r = r_0$  концентрация отрицательных



ионов (15) резко возрастает

$$n_n \approx \frac{8l_e^3 n_e(r_0) v_a}{\pi^3 D_{an}(r-r_0)} \quad (r \geq r_0 = R - l_e) \quad (15b)$$

до своего значения во внутренней области, определяемого по (12). При этом переходная зона, разграничивающая области 0 и 1 с разным ионным составом, узка ( $\sim l_n < l_e$ ). Поэтому в [10,26] она трактовалась как диффузионный скачок, в котором концентрации ионов терпят разрыв, а их потоки и концентрация электронов непрерывны. Выполнение простой закономерности (12) для области  $r < r_0$  в кислороде иллюстрирует рис. 6, на котором представлены нормированные из рис. 1 профили для давления  $p = 1$  Torr. На рис. 6 пунктиром также нанесены расчеты для внутренней области по (13) и для шкурки по (10) с  $R - r_0 \approx l_e$ . При построении зависимости (10) для внешней области учтена толщина слоя  $\delta_{sh}$ , т.е. нулевое значение концентрации электронов выбрано не на стенке трубки, а при  $r = R - \delta_{sh}$ . Видно, что имеет место хорошее соответствие с результатами, полученными при полномасштабном моделировании.<sup>1</sup>

При понижении давления роль пространственного переноса возрастает, так что характерные размеры  $l_e$  и  $l_n$  (8), (9) растут. Из-за увеличения длины  $l_0$  (13b) профили (13a) во внутренней области выполаживаются. За счет роста длины  $l_n$  при этом происходит размытие ионной диффузией фронта резкого изменения их концентрации, поэтому переходную область уже нельзя трактовать как скачок. В итоге профили ионов здесь становятся колоколообразными.

При  $l_n \geq \Lambda$  ионы за счет собственной диффузии способны пересечь весь разрядный объем. Чтобы запереть их, во внутренней области для них, так же как и для электронов, имеет место бальмановское распределение

$$-T_e \nabla n_e / n_e = -T \nabla n_n / n_n = E. \quad (16)$$

Из (8), (9) следует (подробнее см. [24–26]), что обычно собственная диффузия отрицательных ионов доминирует ( $l_n > \Lambda$ ) лишь при малой роли прилипания по отношению ко времени амбиполярной диффузии отрицательных ионов (ионной диффузии с электронной температурой), т.е. когда  $\tau_{an} v_a \ll 1$ .

Условие (16) дает резко зависящее от отношения температур  $k = T_e / T_i$  соотношение

$$n_e(r) / n_e(0) = [n_n(r) / n_n(0)]^{1/k}, \quad (17)$$

которое совпадает с распределением (12b) лишь в исключительном случае  $T_e = T_i$ . Выполнение бальмановского равновесия электронов и отрицательных ионов

<sup>1</sup> Отметим, что для рекомбинационного ( $v_d < n_p K_r$ ) режима из (11a), (12a) следует связь  $\nabla n_e / n_e = \nabla n_n / n_n + \nabla n_p / n_p \approx 2 \nabla n_n / n_n$ , дающая в отличие от (12b) более плоское распределение ионов, чем электронов (подробнее см. [24–26]). В этом случае, который реализуется, например, для галогенов, приближенно выполняется условие равенства частот прилипания и ионизации  $v_i \approx v_a$ , что отмечалось в [16–18].

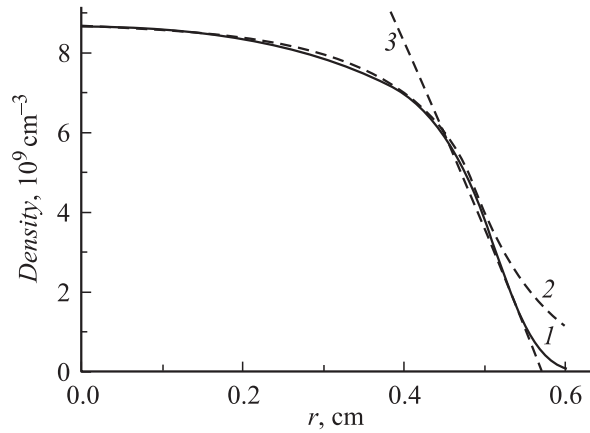


Рис. 7. Бальмановское равновесие электронов и отрицательных ионов при  $p = 0.15$  Torr,  $I = 50$  mA. 1 —  $n_e(r)$ , 2 — зависимость (17)  $n_e(0)[n_n(r)/n_n(0)]^{1/k}$ , 3 — профиль электронов (10) во внешней области.

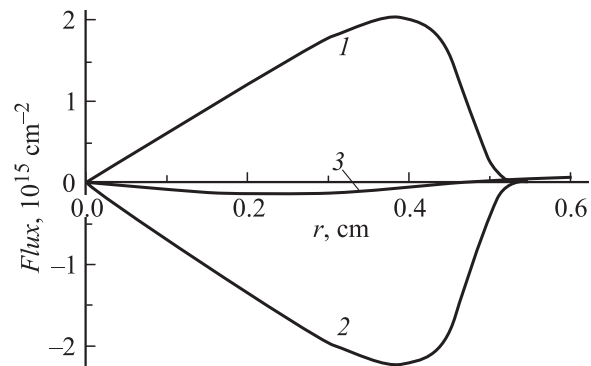


Рис. 8. Соотношение между пространственным переносом и объемными процессами при  $p = 0.15$  Torr,  $I = 50$  mA. 1 — диффузионная составляющая потока отрицательных ионов, 2 — его дрейфовая составляющая, 3 — результирующий поток рождений и гибели за счет объемных плазмохимических процессов.

при низких давлениях иллюстрирует рис. 7, где результаты симуляций, представленные на рис. 3 для давления  $p = 0.15$  Torr, перестроены в соответствии с (17).

Поскольку в разряде  $k \gg 1$ , то из (17) следует практически плоское распределение концентрации электронов  $n_e(r) \approx n_{e0} \approx \text{const}$ , которое и наблюдается при понижении давления (рис. 2, 3). В этом случае в балансе отрицательных ионов (3) перенос играет главную роль (рис. 8) (в отличие от рассмотренного выше режима  $\tau_{an} v_a > 1$  (ср. с рис. 5)). Полевой и диффузионный потоки отрицательных ионов при этом примерно равны и направлены противоположно друг к другу, так что их малой разности достаточно для компенсации объемных процессов рождения и гибели в каждом месте (рис. 8). Плазмохимические процессы определяют лишь глобальный их баланс в центральной области. В уравнении же (2) для положительных ионов  $n_p(x)$

оба члена в левой части также примерно равны друг другу, но складываются, так что при заметной электроотрицательности ( $n_n(0) > n_e(0)$ ) баланс положительных ионов (2) можно записать в виде  $-2D_p \Delta n_n = v_i n_{e0}$ . Это дает параболическое распределение концентраций ионов и плоский профиль  $n_e(r)$  при  $r < r_0$  [13–15]

$$\begin{aligned} n_n(r) &= n_{n0}(1 - r^2/r_0^2), \\ n_{n0}/n_{e0} &= v_i r_0^2/4D_p, \\ n_e(r) &\approx n_{e0} \approx \text{const}. \end{aligned} \quad (18)$$

Интересно отметить, что диффузия ионов во внутренней области происходит при этом не с обычным коэффициентом амбиполярной диффузии  $D_p(1+k)$ , а с коэффициентом  $2D_p$  собственной ион-ионной амбиполярной диффузии. Как видно из рис. 2, 3, простая параболическая закономерность (18) для профилей ионов при низких давлениях хорошо соответствует данным полномасштабного моделирования.<sup>2</sup>

Во внешней области (шкурке), где отрицательные ионы практически отсутствуют, профиль плазмы меняется согласно (10). В [13–15, 23, 24] положение граничной точки  $r = r_0$  находилось из баланса отрицательных ионов с использованием модельных профилей (18). К сожалению, такая процедура трудоемка и имеет низкую чувствительность. Представляется, что более просто и надежно положение границы можно найти из условия непрерывности потока положительных ионов при  $r = r_0$

$$2D_p \frac{n_{n0}}{r_0} = \frac{D_p(1+k)n_{e0}}{l_e \operatorname{tg}((R-r_0)/l_e)} \approx \frac{D_p(1+k)n_{e0}}{R-r_0}. \quad (19)$$

Представленные на рис. 7 модельные профили электронов (10) с  $r_0$  по (19) хорошо соответствуют данным рис. 3 полномасштабного моделирования.

На основании проведенного анализа можно рекомендовать следующую процедуру приближенного построения профилей концентраций в плазме электроотрицательных газов в отлипательном режиме ( $v_d > K_r n_p$ ).

- 1) Оценивается величина параметра  $\tau_{an} v_a$ .
- 2) От стенки следует отступить на толщину слоя объемного заряда  $\delta_{sh}$ , которую можно оценить, например, согласно [26].
- 3) Во внешней области  $1 r_0 < r < R$  электрон-ионной плазмы, где  $n_p \approx n_e \gg n_n \approx 0$ , концентрация электронов меняется согласно (10), а отрицательных ионов — согласно (15). Если  $\tau_{an} v_a > 1$ , то толщина этой области есть  $l_e$  (8) и знаменатель в (10) равен единице ( $r_0 = R - l_e$ ). Если же  $\tau_{an} v_a < 1$ , когда  $l_e \approx \Lambda$ , то толщина этой области оценивается по (19).
- 4) В центральной области  $0 r < r_0$ .

<sup>2</sup> Отметим также, что для реализации профилей (18) на практике достаточно лишь выполнения условия  $\tau_{an} v_a < 1$ . При этом механизм объемной гибели отрицательных ионов, определяемый правой частью (3), может быть любой, т.е. как рекомбинационный ( $v_d < K_r n_p$ ), так и отлипательный ( $v_d > K_r n_p$ ).

При  $\tau_{an} v_a > 1$  профили подобны и связаны соотношением (12), а изменение концентраций описывается согласно (13). При этом концентрации электронов (13) сшиваются с (10) при  $r = r_0 = R - l_e$ . Ионные же концентрации терпят скачок, причем концентрация отрицательных ионов падает практически до нуля (15), а положительных — до значения, равного электронной концентрации (10). Толщина переходной области ( $\sim l_n < l_e$ ) при  $\tau_{an} v_a > 1$  мала и ее можно рассматривать как скачок ионной концентрации.

При  $\tau_{an} v_a < 1$  профили электронов плоские  $n_e(x) \approx n_{e0}$ , а ионов — параболические. Они связаны соотношением (18). При этом концентрации электронов сшиваются при  $r = r_0$ , положение которой можно оценить из (19).

Таким образом, в работе с помощью коммерческого CFDRC software [28] проведено полномасштабное моделирование плазмы положительного столба DC-разряда в кислороде и рассмотрены основные закономерности (скейлинги), характеризующие пространственные распределения его параметров. Результаты симуляций подтверждают, что отличительной особенностью плазмы электроотрицательных газов является ее расслоение на области с различным ионным составом, причем во внешней области электрон-ионной плазмы („шкурке“) отрицательных ионов практически нет. При низких давлениях, пока параметр  $\tau_{an} v_a < 1$ , имеет место бальмановское распределение не только электронов, но и отрицательных ионов. При этом во внутренней области реализуется плоский профиль электронов и параболический для ионов. В балансе ионов главную роль играют процессы переноса, поэтому учет возможного их нагрева драматически влияет на пространственное распределение заряженных частиц. При повышении давления ( $\tau_{an} v_a > 1$ ) в балансе отрицательных ионов доминируют объемные процессы и профили во внутренней области становятся подобными.

Л.Д. Цендин 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] *Oskam H.J.* // Philips Res. Rep. 1958. Vol. 13. P. 335.
- [3] *Konjukov M.V.* // ЖЭТФ. 1958. Т. 34. С. 908–911, 1634–1635.
- [4] *Tompson J.B.* // Proc. Phys. Soc. 1959. Vol. 73. P. 818.
- [5] *Sabadil H.* // Beitr. Plasmaphys. 1973. Vol. 13. P. 235–251.
- [6] *Meccu G.* Отрицательные ионы. М.: Мир, 1979. 754 с. Massey H. // Negative Ions. Cambridge: University Press, 1976.
- [7] *Edgeley P.D., von Engel A.* // Proc. Roy. Soc. 1980. Vol. A370. P. 375–387.
- [8] *Rogoff G.L.* // J. Phys. D. 1985. Vol. 18. P. 1533–1545.

- [9] *Phelps A.V.* // J. Res. Natl. Ins. Stand. Technol. 1990. Vol. 95. N 4. P. 407–431.
- [10] *Цендин Л.Д.* // ЖТФ. 1985. Т. 55. Вып. 12. С. 2318–2322. Там же. 1989. Т. 59. Вып. 1. С. 21–28. *Tsendin L.D.* // Sov. Phys. Techn. Phys. 1985. Vol. 30. P. 1377–1379. Ibid. 1989. Vol. 34. P. 11–15.
- [11] *Ferreira C.M., Gousset G., Touzeau M.* // J. Phys. D. 1988. Vol. 21. N 3. P. 1403–1423.
- [12] *Daniels P.R., Franklin R.N., Snell J.* // J. Phys. D. 1989. Vol. 22. P. 780–785. Ibid. 1990. Vol. 23. P. 823–831. Ibid. 1993. Vol. 26. P. 1636–1649.
- [13] *Lichtenberg A.J., Vahedi V., Lieberman M.A., Rognlien T.* // J. Appl. Phys. 1994. Vol. 75. P. 2339–2347.
- [14] *Lichtenberg A.J., Kouznetsov I.G., Lee T.D., Lieberman M.A., Kadanovich I.D., Tsendin L.D.* // Plasma Sources Sci. Technol. 1997. Vol. 6. P. 437–449.
- [15] *Kouznetsov I.G., Lichtenberg A.J., Lieberman M.A.* // J. Appl. Phys. 1999. Vol. 86. P. 4142–4153.
- [16] *Franklin R.N.* // PSST. 2002. Vol. 11. P. 31–37.
- [17] *Franklin R.N., Snell J.* // J. Phys. D. 1999. Vol. 32. P. 2190–2203.
- [18] *Franklin R.N.* // J. Plasma Phys. 2000. Vol. 64. P. 131–153.
- [19] *Bereznoy S.V., Shin C.B., Buddemeier U., Kaganovich I.* // Appl. Phys. Lett. 2000. Vol. 77. N 6. P. 800–802.
- [20] *Feoktistov V.A., Ivanov V.V., Popov A.M., Rakhimov A.T., Rakhimova T.V., Slovetsky D.I., Volynets V.N.* // J. Phys. D. 1997. Vol. 30. P. 423–431.
- [21] *Ivanov V.V., Klopovsky K.S., Lopaev D.V., Rakhimov A.T., Rakhimova T.V.* // IEEE Trans. Plasma Sci. 1999. Vol. 27. P. 1279–1287.
- [22] *Ivanov V.V., Klopovsky K.S., Lopaev D.V., Rakhimov A.T., Rakhimova T.V.* // Plasma Phys. Rept. 2000. Vol. 26. N 11. P. 970–990.
- [23] *Kono A.* // Appl. Surface Sci. 2002. Vol. 192. P. 115–134.
- [24] *Богданов Е.А., Кудрявцев А.А.* // Письма в ЖТФ. 2001. Т. 27. Вып. 21. С. 36–42. *Bogdanov E.A., Kudryavtsev A.A.* // Tech. Phys. Lett. 2001. Vol. 27. N 11. P. 905–907.
- [25] *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., Kudryavtsev A.A., Tsendin L.D.* Technical Physics. 2002. Vol. 47. N 8. P. 946–954.
- [26] *Rozhansky A.V., Tsendin L.D.* // Transport Phenomena in Partially Ionized Plasma. London and New York: Taylor & Francis. 2001. Рожанский А.В., Цендин Л.Д. Столкновительный перенос в частично-ионизированной плазме. М.: Энергоатомиздат, 1988. 248 с.
- [27] *Богданов Е.А., Кудрявцев А.А., Цендин Л.Д., Арсланбеков Р.Р., Колобов В.И., Кудрявцев В.* // ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 8. С. 45–55.
- [28] <http://www.cfdrc.com/~cfdplasma>.
- [29] *Мак-Даниэль И., Мэзон Э.* Подвижность и диффузия ионов в газах. М.: Мир, 1976. *McDaniel E.W., Mason E.* The Mobility and Diffusion of Ions in Gases. New York; London; Sydney; Toronto: Wiley & Sons, 1973.