

Гидродинамическое моделирование газовых разрядов

Ляхов Анатолий Александрович

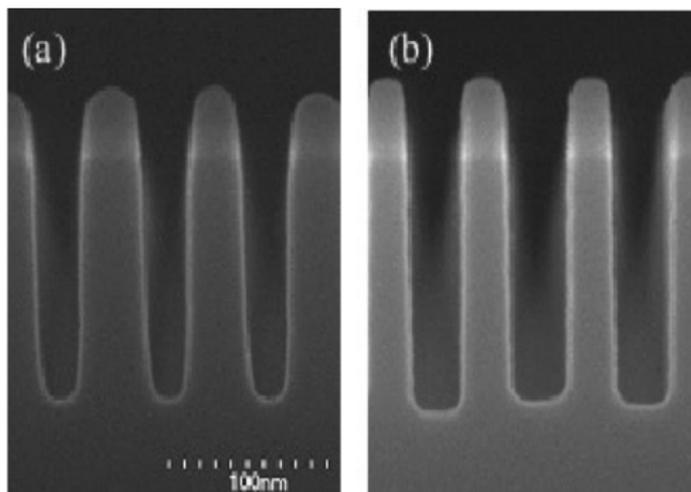
ОмГУ им. Ф.М. Достоевского

январь 2016

Применение газоразрядной плазмы низкого давления

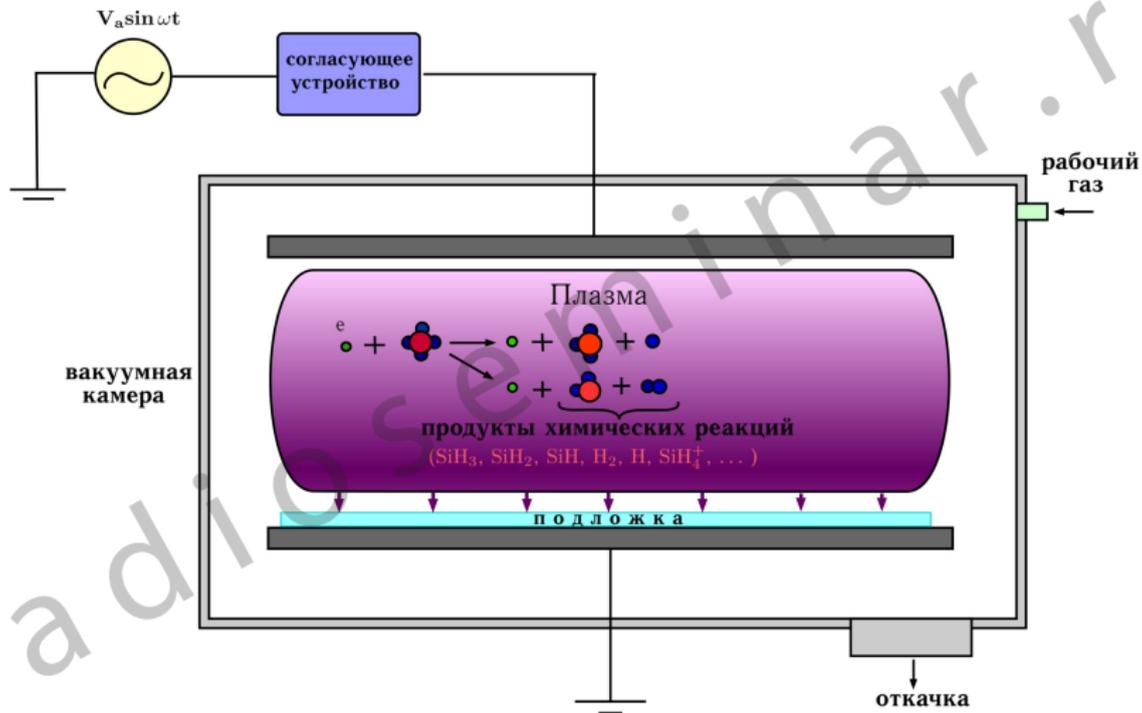
- плазмохимическое ("*сухое*") травление;
- плазмохимическое осаждение (PECVD в различных вариациях);
- газовые лазеры;
- плазменные панели;
- газоразрядные источники света.

Пример травления КМОП-структуры



Изображение со сканирующего электронного микроскопа образца, протравленного в плазме ЭЦР.
(M.Izawa, M.Tanaka et.al., 2015).

Схема осаждения в плазме ВЧ-разряда



Химические реакции в газовой фазе

В разрядной зоне протекает большое количество реакций с участием:

- электронов;
- различных нейтралов (атомы, молекулы, радикалы);
- ионов.

В зависимости от рабочего газа – десятки, сотни реакций.

Задача

Определение состава химически активной плазмы.

Экспериментальные методы: масс-спектрометрия, зонды Ленгмюра, эмиссионная спектроскопия, лазерная спектроскопия и др.

Трудности диагностики химически-активной плазмы:

- обилие взаимосвязанных процессов в разрядной зоне;
- многоканальность химических реакций;
- химическая активность реагентов.

Цели разработки моделей разрядов в плазмохимии

- Установление закономерностей в поведении параметров плазмы от условий поддержания разряда;
- определение количественного состава компонент, определяющих процессы травления, осаждения (пространственно-временное поведение);
- сокращение числа натуральных экспериментов;
- поиск оптимальных режимов реализации плазмохимических процессов.

Из истории вопроса

А.Вард (1958) – самосогласованные расчет на ЭВМ катодного падения в инертных газах.

Широкомасштабное математическое моделирование газоразрядной плазмы – середина 80-х годов.

Д.Грейвс (1986); А.Ричардс, Б.Томпсон, Г.Савин(1987),(США); Ж.Буэф (Франция,1988).

А.Т.Рахимов, Ю.А.Манкелевич (МГУ,1988),
В.А.Швейгерт (ИТПМ, Новосибирск,1989).

Теоретические предпосылки

Кинетический подход – каждый статистический ансамбль частиц одного сорта, характеризуется одночастичными функциями распределения (ФР) $f_{e,i}(\vec{r}, \vec{v}, t)$.

Момент ФР n -го порядка

$$M_{k_1 k_2 \dots k_n} = \int v_{k_1} v_{k_2} \dots v_{k_n} f d\vec{v}.$$

Гидродинамический подход – плазма рассматривается как *сплошная среда* с макроскопическими характеристиками (усредненными по ФР величинами).

Уравнения для моментов ФР – основа гидродинамического описания плазмы.

Математическая формулировка

Транспорт электронов:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \vec{\Gamma}_e = S_e \quad (1)$$

$$\vec{\Gamma}_e = -n_e \mu_e \vec{E} - \nabla (D_e n_e) \quad (2)$$

Транспорт ионов:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \vec{\Gamma}_i = S_i \quad (3)$$

$$\vec{\Gamma}_i = n_i \mu_i \vec{E} - \nabla (D_i n_i) \quad (4)$$

S_e , S_i - источниковые члены, учитывающие рождение и гибель частиц.

Математическая формулировка

Перенос энергии электронов:

$$\frac{\partial n_e \varepsilon_e}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{5}{3} \varepsilon_e \vec{\Gamma}_e + \vec{q}_e \right) = e \vec{E} \cdot \vec{\Gamma}_e - S_\varepsilon \quad (5)$$

S_ε – потери энергии в столкновениях.

Транспорт нейтралов:

$$\frac{\partial N_k}{\partial t} - D_k \nabla^2 N_k = S_{N_k} \quad (6)$$

S_{N_k} – прибыль и убыль частиц в химических реакциях.

Уравнение Пуассона:

$$\Delta \varphi = -4\pi e (Z_i n_i - n_e) \quad (7)$$

Граничные условия

Для электронов:

$$\Gamma_{e,n} = \frac{n_e v_{eT}}{4}, \quad (8)$$

Для ионов:

$$\Gamma_{i,n} = \mu_i n_i E_n. \quad (9)$$

Для потока энергии:

$$q_{e,n} = \frac{n_e v_{eT} (2k_B T_e)}{4} \quad (10)$$

Для уравнения Пуассона используются условия Дирихле и Неймана.

Алгоритм решения

Система уравнений (6)-(10) аппроксимируются конечными разностями.

Для заряженных частиц часто используется *схема Шарфеттеля-Гуммеля*.

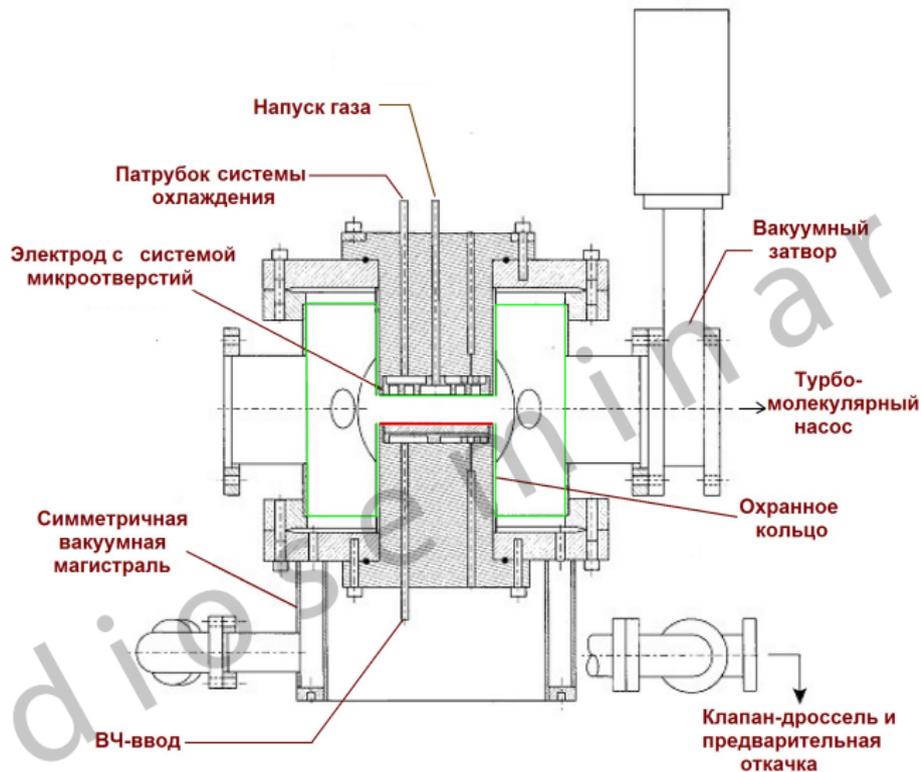
В 2-мерным моделях выполняется расщепление по координатам.

Для нейтралов применимы более простые аппроксимации.

Электроразрядная ячейка ГЕС – прототип конструкции плазмохимического реактора промышленного уровня.

Призван обеспечить:

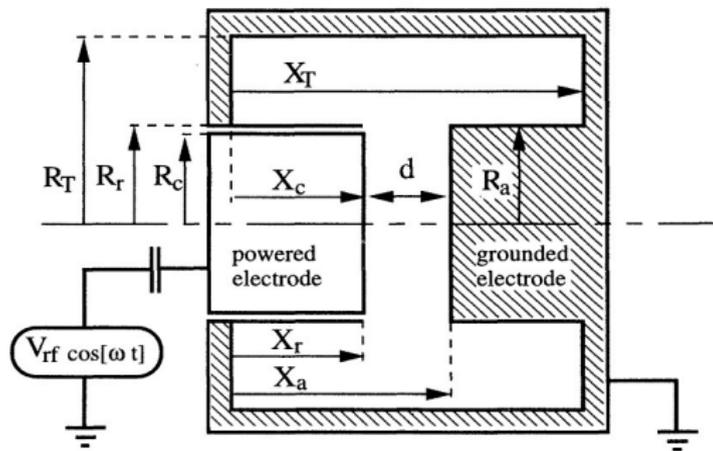
- воспроизводимость параметров плазмы ВЧ разряда;
- отработку методов диагностики ВЧ низкотемпературной плазмы и получение надежных экспериментальных данных;
- верификацию математических моделей.



Конструкция вакуумной камеры с ячейкой GEC.
(Olthoff, Greenberg, 1995).

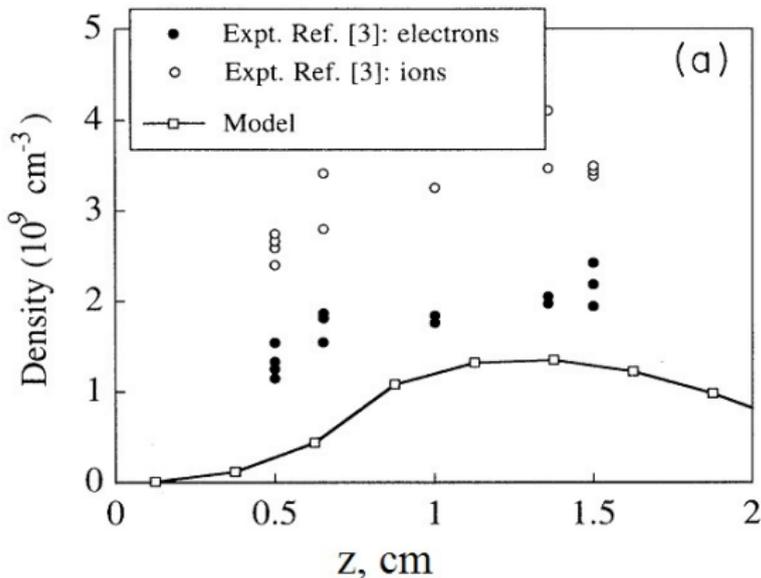
2D модель реактора ГЭС

Ж.Буэф и Л.Питчфорд разработали модель ВЧ-разряда в аргоне для ГЭС-ячейки.



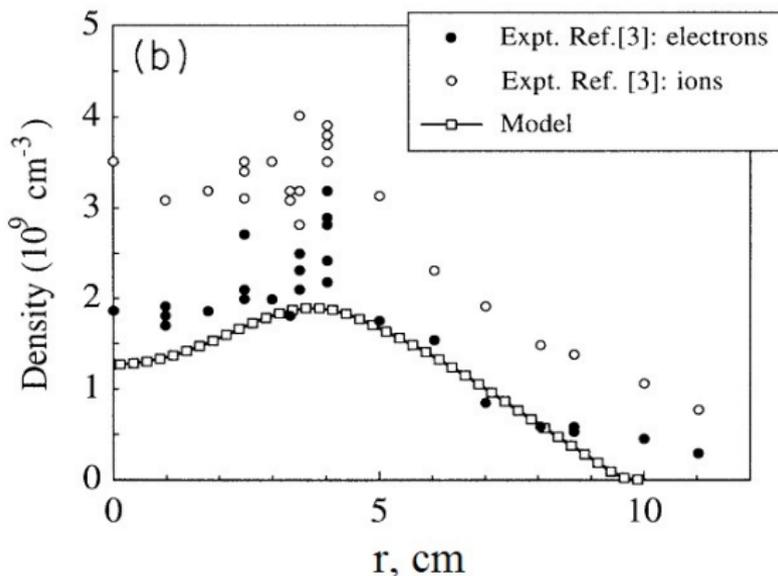
Расчетные значения концентраций сравнивались с результатами зондовых измерений (*Overzet, Hopkins 1993*).

Сравнение модели и эксперимента

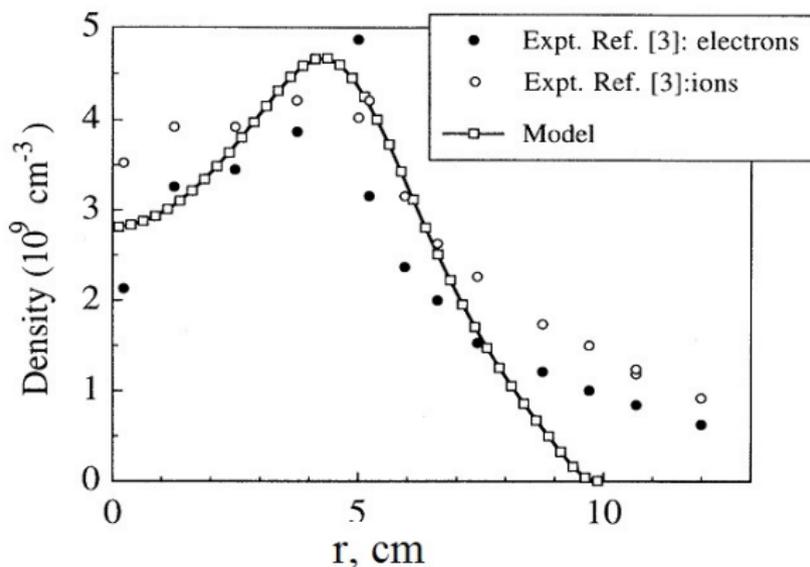


Аксиальный профиль концентрации электронов и ионов в ячейке GEC. $p = 0.1$ Торр, $f = 13,56$ МГц, $V_{rf} = 100$ В, $x = 1.25$ см. (*J.Boeuf, L.Pitchford, 1995*)

Сравнение модели и эксперимента



Радиальный профиль концентрации электронов и ионов в ячейке GEC. $p = 0.1$ Торр, $x = 1.25$ см. (*J.Boeuf, L.Pitchford, 1995*)



Радиальный профиль концентрации электронов и ионов.
 $p = 0.1$ Торр, $x = 1.25$ см (*J.Boeuf, L.Pitchford, 1995*)

Основные черты fluid-моделей

- Результаты качественно и во многих случаях количественно согласуются с экспериментальными измерениями концентрации электронов и ионов (подтверждено для ВЧ-разряда в аргоне);
- согласуются с результатами кинетического моделирования разрядов;
- в отношении вычислительных ресурсов менее затратны, чем кинетические модели;
- в области низких давлений газа ($p < 0,1$ Торр) не применимы.

Гидродинамический подход успешно используются для описания процессов в газоразрядной плазме.

Совершенствование моделей:

- Более полное описание химических процессов в газовой фазе;
- Процессы на границе "плазма-поверхность";
- Включение в модели дополнительных процессов – излучение частиц, теплопроводность нейтрального газа, и др.

-  *M.Izawa, M.Tanaka et.al.* ECS Transactions, v.66 p.143-150 (2015), рис.8.
-  *Olthoff, Greenberg J.* Res. NIST v.100, p.327, (1995).
-  *J.P. Boeuf, L.C. Pitchford* Phys.Rev.E. v.51. p.1376-1390, (1995).
-  *L.Overzet, M.Hopkins* Appl. Phys. Lett. v.63, p.2484 (1993).
-  *M.Surrendra* PSST, (1995).

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!