

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

ФАКУЛЬТЕТ РАДІОФІЗИКИ, ЕЛЕКТРОНІКИ ТА КОМП'ЮТЕРНИХ СИСТЕМ

кафедра фізичної електроніки

До захисту допущено:

«На правах рукопису»

Завідувач кафедри _____ Анатолій ВЕКЛИЧ

«_19_» червня 2023 р.

БАКАЛАВРСЬКА РОБОТА

на тему:

**«МОДЕЛЮВАННЯ УТВОРЕННЯ КЛАСТЕРІВ В ПОТОЦІ ПЛАЗМИ, ЩО
ТЕЧЕ В ОСЕ-СИМЕТРИЧНІЙ КАМЕРІ ЗМІННОГО ПЕРЕРІЗУ»**

Виконав:

студент 4-го курсу

денної форми навчання

спеціальності 105 – Прикладна фізика та наноматеріали

ОП «Прикладна фізика, наноелектроніка та комп'ютерні технології»

Агафонов Олег Ігорович _____

Науковий керівник:

к.ф.-м.н., доц. Кравченко Олександр Юрійович _____

Рецензент:

к.ф.-м.н., доц. Кельник Олександр Ігорович _____

Засвідчую, що у цій бакалаврській роботі
немає запозичень з праць інших авторів без
відповідних посилань

Студент _____

Робота допущена до захисту в ЕК рішенням кафедри фізичної електроніки
від «15» червня 2023 р., протокол № 32.

Завідувач кафедри фізичної електроніки,

доктор фіз.-мат. наук, професор

Веклич Анатолій Миколайович _____

ЗМІСТ

РЕФЕРАТ	3
ВСТУП	4
ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ	6
1.1 Магнетрон.....	6
1.2 Магнетронне напилення.....	6
1.3 Нуклеацію та кристалізацію наночастинок у неперервному потоці плазми.....	8
1.4 Кластерна плазма.....	11
1.5 Процеси в кластерній плазмі.....	13
1.6 Характеристики плазмових струменів.....	16
1.7 Розширення плазмових струменів.....	18
МОДЕЛЬ ЗАДАЧІ ТА МЕТОДИКА ЧИСЛОВОГО МОДЕЛЮВАННЯ.....	19
2.1 Модель та методика моделювання.....	19
2.2 Результати моделювання	21
ВИСНОВКИ.....	30
СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ.....	31

РЕФЕРАТ

Звіт вміщує 31 стор., 15 рис.

ПЛАЗМА, КЛАСТЕР, МОДЕЛЮВАННЯ, МЕТОД КРУПНИХ ЧАСТИНОК,
ГІДРОДИНАМІЧНА МОДЕЛЬ ПЛАЗМИ, РОЗРАХУНОК.

В даній роботі було досліджено вплив динамічних характеристик потоку плазми в камері змінного діаметру на процес утворення кластерів. Плазма складалась з суміші атомів та іонів аргону, атомів титану та електронів. Комп'ютерне моделювання проводилося в рамках гідродинамічного наближення. Для числового моделювання використовувався «метод крупних частинок».

В результаті проведених розрахунків одержані просторові розподіли концентрацій атомів титану та кластерів різних розмірів для різних співвідношень між концентраціями атомів аргону і титану, а також для різних початкових тисків газу в камері. Отримані результати свідчать про те, що використання конічної камери може призводити до підвищення ефективності утворення кластерів у потоці плазми.

ВСТУП

У зв'язку зі стрімким розвитком нанонаук і наукових досліджень в галузі нанофізики, область застосування цих досліджень все більше розширюється у різних сферах людської діяльності. Однією з таких сфер є дослідження кластерів у плазмі, які також привертають все більший інтерес вчених фізиків.

Вчені вивчають різні напрямки застосування кластерних пучків, включаючи їх розпорошення на підкладку для створення тонких плівок та нових матеріалів. За допомогою кластерів можна контролювати товщину плівок і формувати багатосарові структури. Виробництво тонких плівок має велике значення для розвитку нанотехнологій, які використовуються для створення матеріалів та пристроїв з нанометровими розмірами їх складових елементів. Зменшення розмірів елементів пристроїв призводить до зміни їх фізичних властивостей.

Процес розпорошення плівок та формування кластерів є складним завданням. Існує кілька способів генерації кластерів, але вони всі базуються на тому факті, що кластери є перехідним станом між газовою і конденсованою фазами для даного матеріалу. Один з найбільш ефективних методів генерації кластерів вважається генерація їх у кластерній плазмі. Цей підхід дозволяє отримувати стабільні кластери з бажаною кількістю атомів та контролювати їх розміри.

Застосовуються наноструктури в електронних приладах з нанорозмірними елементами. Для цієї мети створюються маленькі острівці наноматеріалів на плівках або підкладках; ці області мають специфічні властивості, що забезпечують роботу того чи іншого приладу. Також виробництво наноплівок, які характеризуються специфічними механічними, оптичними та хімічними властивостями.

Існує ряд способів генерації кластерів, але практично всі вони ґрунтуються на тому факті, що кластери є проміжною стадією між газовою та

конденсованою фазою для даного матеріалу. Одним з найбільш ефективних методів генерації вважається генерація кластерів в кластерній плазмі.

Кластерна плазма представляє собою комбінацію слабо-іонізованого буферного газу (зазвичай інертного газу, наприклад аргону) і пару атомів матеріалу, який кластеризується. Пара металу може бути отримана в плазмі різними способами, такими як випаровування поверхні металу під впливом лазерного випромінювання та подальше виведення отриманого пару з зони випаровування за допомогою потоку буферного газу, або термічна дисоціація сполук, що містять метал.

Зрозуміло, що якщо температура пару металу (і відповідно плазми) буде нижче критичного значення, і пара буде перенасиченою, то при таких умовах можна очікувати конденсацію пару.

Процес конденсації пару в кластери можна поділити на два етапи, і тривалість цих етапів значно залежить від початкового перенасичення. Перший етап полягає у формуванні зародків кластерів в парі, яке відбувається внаслідок тричастинкових зіткнень або теплових флуктуацій щільності пару, і подальшого зростання цих зародків за рахунок прилипання атомів до поверхні - цей процес відомий як поверхневе зростання кластерів. Цей етап можливий тільки за умови значного перенасичення пару металу, коли ймовірність формування зародків кластерів є низькою, і процес випаровування атомів з поверхні кластерів можна знехтувати порівняно з процесом конденсації.

Другий етап настає після зниження перенасичення. На цьому етапі можна виділити два процеси, що сприяють зростанню кластерів: процес коалесценції і процес коагуляції. Перший з цих процесів можливий при наявності слабого перенасичення пару. У цьому випадку можна стверджувати, що переважання процесу конденсації атомів на поверхню кластера є необгрунтованим, оскільки конкуренція між процесами конденсації і випаровування стає значною.

Метою даної роботи було дослідити процес утворення кластерів в потоці плазми, який складається з суміші атомів аргону та атомів титану.

РОЗДІЛ І.

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

1.1 Магнетрон

Магнетрон є електронно-променевою лампою, яка генерує мікрохвильове випромінювання. Він складається з вакуумної колби з катодом, анодом та магнітними полями. Основним принципом роботи магнетрона є використання збудженого електронного променя, який рухається під впливом магнітного поля. При цьому відбувається взаємодія електронів з анодом, що призводить до випромінювання електромагнітної енергії у мікрохвильовому діапазоні.

1.2 Магнетронне напилення

Магнетронне напилення є одним з найпоширеніших методів нанесення тонких плівок на поверхні різних матеріалів. Цей процес використовується в багатьох промислових сферах, таких як електроніка, оптика, металургія та інші, де необхідно створювати покриття з різних матеріалів з мінімальною товщиною і високою якістю. Магнетронне напилення є фізичним процесом нанесення плівок, в якому використовується ефект магнетрона.

Магнетронне напилення розглядалось в роботі П. В. Каштанова [10]. Де він дослідив що більшість розпилених атомів у магнетронному кластерному джерелі повернутися до катода або прилипають до стінок камери магнетрона. Але є декілька переваг магнетронного напилення:

1. Висока якість плівок: Магнетронне напилення дозволяє отримати плівки з високою гладкістю, однорідністю та чистотою матеріалу. Це важливо в багатьох застосуваннях, де потрібна точна контрольована товщина плівок і відмінна якість поверхні.
2. Широкий вибір матеріалів: Магнетронне напилення дозволяє наносити плівки з різних матеріалів, включаючи метали, напівпровідники, оксиди,

нітриди, фториди та інші. Це дає можливість створювати покриття з потрібних матеріалів залежно від конкретних вимог застосування.

3. Висока швидкість напилення: Магнетронне напилення відрізняється високою швидкістю процесу, що дозволяє ефективно виготовляти плівки в промисловому масштабі. Це особливо важливо для велико серійного виробництва, де потрібно виробляти плівки на великій кількості субстратів.
4. Універсальність та гнучкість: Магнетронне напилення може бути використане для різних типів субстратів, включаючи скло, кераміку, пластик, метал та інші матеріали. Це робить його універсальним методом нанесення плівок для різних галузей промисловості.
5. Мінімальні дефекти та деформації: Магнетронне напилення забезпечує мінімальну кількість дефектів та деформацій в плівках. Це дозволяє отримувати високоякісні покриття з високою стійкістю та довговічністю.

1.3 Нуклеація та кристалізація наночастинок у неперервному потоці плазми

Нуклеація відбувається, коли атоми або молекули збираються разом для формування першої стадії наночастинок. Цей процес може відбуватися шляхом конденсації газу, дифузії атомів або реакцій хімічного осадження. Після нуклеації настає кристалізація, у цьому процесі атоми або молекули наночастинок розташовуються впорядковано, утворюючи кристалічну ґратку з характерними розмірами та орієнтацією.

Ці процеси було досліджено в роботі Томаса Лопаса [11] де він використав пристрій із зовнішнім діаметром 1 дюйм, внутрішнім діаметром 0,8 дюйма та скляний хрест довжиною 33 дюйма вздовж напрямку потоку та довжиною 7,5 дюйма вздовж прямої перпендикулярної до потоку. Дві мідні електроди завширшки 1,2 дюйма (30 мм). розміщені на зовнішній стороні трубки. Відстань між електродами становить 3 дюйми. Верхній електрод (тобто перший електрод у напрямку потоку газу) рухається за допомогою джерела живлення, тоді як інший електрод є заземлений. Перехресна конструкція дозволяє нам або витягувати частинки з плазми, або виконувати вимірювання на місці FTIR системи в різних осьових положеннях. Це досягається зміною положення електродів з дотримання точки відліку. На рис. 1.1 показано схеми цих двох конфігурацій. Вхідна потужність плазми можна регулювати в широкому діапазоні значень. Для даних, наведених у цьому роботі, вхідна потужність залишається 90 Вт. За цих умов реактор виробляє наночастинок кремнію зі 100% кристалічної фракції. Швидкість потоку аргону становить 70 кубічних сантиметрів на хвилину (SCCM) і швидкість потоку силану (1,37% розчину в аргоні) дорівнює 30 SCCM. Частинок виділяються з об'єму плазми за допомогою підходу, показаного на рис. 1.2(a).

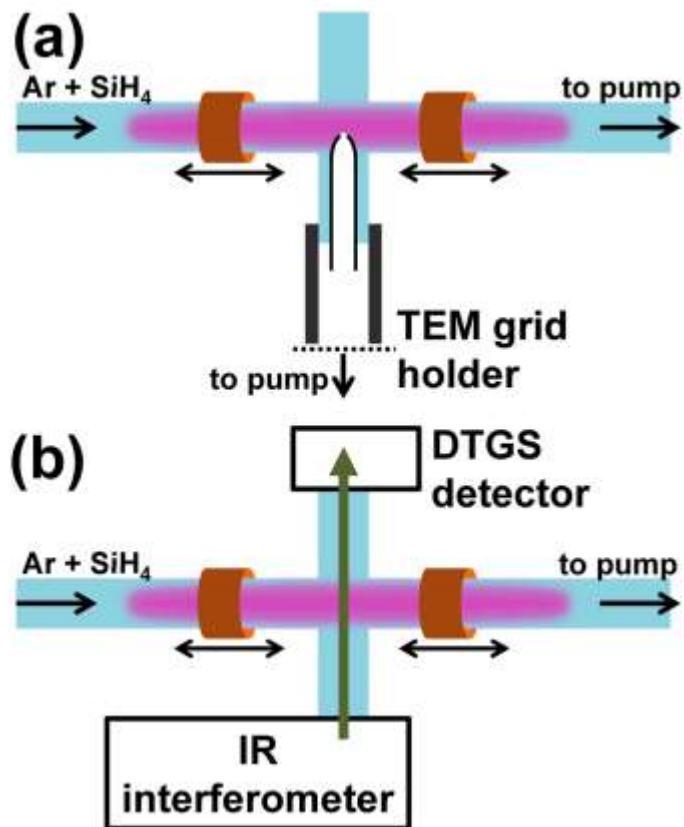


Рис. 1.1 (а) Схема обладнання, що використовується для відбору частинок в різних положеннях уздовж плазми. (б) Схема обладнання для визначення характеристик

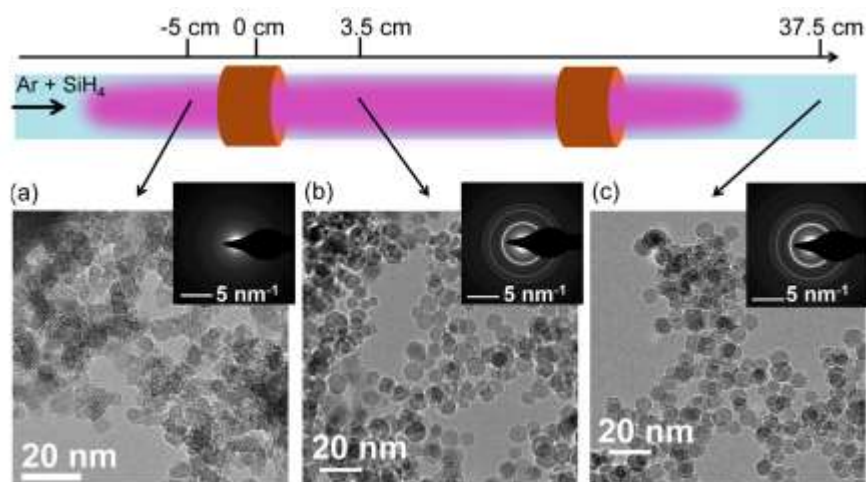


Рис. 1.2 мікрофотографії з вибраними областями дифракційних картин для частинок кремнію, виділених на відстанях, що дорівнюють (а) 5 см, (б) 3,5 см і (с) 37,5 см відносно центральної лінії верхнього електрода (0 см)

На рисунку 1.2 узагальнено результати, отримані в результаті вимірювань аеродинамічного зонда екстракції. Хоча маємо отримувати зразки пилової плазми в кількох місцях уздовж довжини реактора, для простоти наведемо пов'язані дані до трьох точок екстракції: перед першим кільцевим електродом (5 см порівняно з середньою лінією першого кільцевого електрода), нижче за перший кільцевий електрод (3,5 см порівняно з середньої лінії першого кільцевого електрода) і нижче за потіком плазми (37,5 см порівняно з середньою лінією першого кільцевого електрода). Для кожної з точок відбору ми показуємо яскраве поле мікрофотографії вибраних областей, отримані за допомогою діафрагми великої площі. На рис. 1.2(a) зображено ці дані для точки відбору, найближчої до першого електрода. Частинки мають розміри 5–10 нм, з слабо вираженою формою і з аморфною структурою. На рис. 1.2(b) ми бачимо ті самі дані для другої точки вибору. Для цієї точки ми спостерігаємо значний розпад газу за течією потоку отвору екстракційного зонда. Ця вторинна плазма призводить до модифікації структури частинок, коли вони безпосередньо зіштовхуються на них, в той час коли вони збиралися або на сітці, або на фільтрі.

1.4 Кластерна плазма

Кластерна плазма складається з невеликих кластерів (груп) атомів або молекул, що знаходяться в зарядженому стані. Кластери можуть містити від декількох десятків до тисяч атомів, в залежності від їхньої величини та складу. Дослідження кластерної плазми викликає інтерес через її унікальні властивості та потенційні застосування у різних галузях науки і технології.

Одне з цих досліджень розглядалось в книзі Боніц [5]. Дослідження було проведено в експериментальній установці, де створювалися плазмові струмині з частинками, що включали домішку кластерів.

Для вивчення формування кластерів і їхньої динаміки, учені використовували оптичні методи, такі як лазерне розсіяння світла та фотографування. За допомогою цих методів, вони спостерігали за розмірами, формами та розподілом кластерів у плазмовій струмені.

Під час дослідження було виявлено, що кластери у плазмовій струмені підлягають процесам коагуляції та фрагментації. Коагуляція відбувається, коли два або більше кластери зчіплюються, утворюючи більший кластер. Фрагментація, навпаки, відбувається, коли кластер розпадається на менші частинки. Ці процеси створюють динамічну систему, в якій кластери постійно змінюють свій розмір та кількість.

Дослідники також виявили, що формування та динаміка кластерів в плазмі можуть бути суттєво змінені зовнішніми параметрами, такими як інтенсивність розряду, температура, склад газу тощо. Зміна цих параметрів може призводити до зміни розмірів та конфігурацій кластерів, а також до зміни швидкості їхньої коагуляції та фрагментації.

Один з основних, використаних в цьому досліді, параметрів кластерної плазми - це заряд кластера, який може бути визначений за формулою:

$$Q = n * Z,$$

де Q - заряд кластера, n - кількість заряджених атомів у кластері, а Z - заряд кожного атома. Ця формула вказує, що заряд кластера залежить від кількості атомів та їхнього заряду.

Іншим важливим параметром є радіус кластера, який може бути визначений за формулою:

$$R = a * \left(3 * \frac{V}{4 * \pi}\right)^{\frac{1}{3}},$$

де R - радіус кластера, a - міжатомна відстань, а V - об'єм кластера. Ця формула показує, що радіус кластера залежить від його об'єму та міжатомної відстані.

Дослід також включає вивчення динаміки кластерів та їх руху в плазмі. Цю динаміку можна описати за допомогою рівняння руху:

$$m * a = F,$$

де m - маса кластера, a - прискорення, а F - сила, що діє на кластер. Залежно від розміру кластера та умов плазми, ця формула може включати додаткові терміни, які враховують вплив електростатичних, магнітних чи інших сил на кластер.

1.5 Процеси в кластерній плазмі

Процес утворення кластерів в пучку атомів, що розширюється відбувається найбільш ефективно, якщо в ньому присутні іони, які є центрами конденсації. Найпростіший спосіб утворення пучка кластерів пов'язаний з опроміненням поверхні лазерним випромінюванням середньої інтенсивності, в результаті чого температура поверхні досягає декількох тисяч градусів. Це викликає інтенсивне випаровування поверхні, так що тиск пари поблизу поверхні становить десятки і сотні атмосфер. Матеріал, що випарувався формує пучок атомів, в якому в силу високої температури поверхні присутня невелика домішка іонів [1]. Ці іони є далі центрами конденсації. Інший спосіб отримання пучка кластерів використовує джерело газу або пари, що представляє собою закриту посудину, з якого пучок газу (пару) впливає через сопло. У процесі розширення газового струменя в ньому утворюються кластери.

Продовження розвитку цієї техніки включає в себе модифікацію джерела пари, методів формування пучка та методів виявлення кластерних пучків. Один зі способів досягнути цього прогресу - це застосування додаткової іонізації пучка пари шляхом перетину його з електронним пучком. Цей метод, відомий як "пучок кластерних іонів", сприяв розвитку практичних застосувань цієї техніки.

Зручність в застосуванні пучка заряджених кластерів пов'язана з можливістю прискорювати іони зовнішнім електричним полем, досягаючи відповідних енергій кластерів в пучку. Це забезпечує можливість використання кластерного пучка, що стикається з поверхнею твердого тіла, для різних цілей. На рис. 1.3 і 1.4 представлений характер взаємодії прискореного кластера з поверхнею в залежності від його енергії .

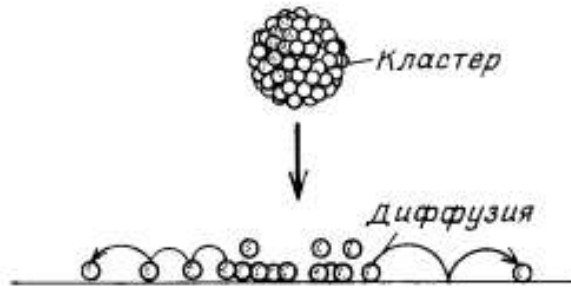


Рис 1.3. Модель зіткнення кластера з поверхнею твердого тіла

При малих енергіях (рис. 1.3) Кластери лягають на поверхню і утворюють плівку, при високих енергіях (рис. 1.4) вони створюють кратери на поверхні: матеріалу і викликають його ерозію.

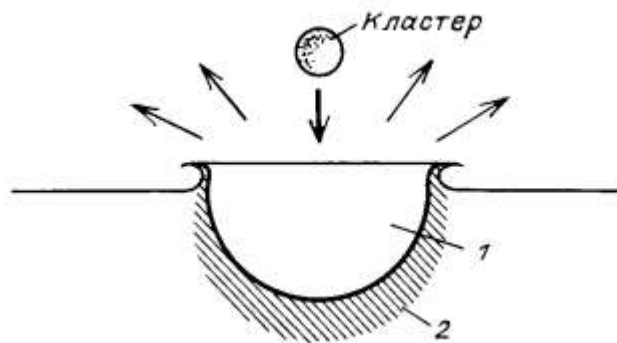


Рис 1.4. Зіткнення швидкого кластера з поверхнею, яке викликає появу ударної хвилі

Кластерні пучки мають використання не лише в напорошенні плівок, але й у поверхневому очищенні. Вони дозволяють досягти високих швидкостей росту плівок, до 74 нм/с для срібляних кластерів, а також максимальну швидкість ерозії поверхні, досягаючи 70 нм/с при використанні сфокусованого пучка кластерних іонів міді.

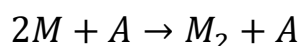
Зростання кластерів в кластерній плазмі визначається процесами, що описуються схемою:



де M - атом металу, M - кластер, що складається з n атомів. Мається на увазі прилипання вільних атомів до кластеру і зворотний йому процес. Одночасно при цьому утворення кластерів відбувається також за рахунок їх коагуляції, що протікає по схемі:



Зазначені процеси мають різну природу. Зокрема, останній процес є одностороннім, тоді як прилипання атомів і випаровування кластерів (відокремлення атомів від поверхні кластерів) компенсують один одного. У режимі зростання кластерів, коли процес починається з атомного пару і перетворюється на газові кластери, важливу роль відіграє трьохчастинковий процес, що описується схемою:



де M - атом металу, A - атом буферного газу. Прийнято вважати, що саме з утворенням двохатомних молекул починається процес нуклеації (формування ядер кластерів, їх зародження) відповідно до схем (1.1) і (1.2). Таким чином, двохатомні молекули є ядрами конденсації для кластерів.

Принциповим етапом процесу зростання кластерів є стадія нуклеації атомного пара в буферному газі, а отже, реалізації відповідної схеми, тобто (1.1) або (1.2). Так, якщо щільність атомів N багато більше щільності зв'язаних в кластери атомів – N_b , зростання кластерів визначається процесами (1.1). В іншому режимі, коли $N \ll N_b$, зростання кластерів відбувається за схемою (1.2). У першому випадку процес зростання не залежить від заряду кластера, у другому ріст припиняється, коли кластери набувають заряд одного знака.

1.6 Характеристики плазмових струменів

У книзі Лібермана, Ліхтенберга та Уайлі [12], автори розглядають різні аспекти плазмових розрядів і їх вплив на обробку матеріалів.

Один з таких параметрів плазмовий струмінь - це щільність струму (J), яка визначається як відношення електричного струму (I) до перерізного поперечного розміру струменя (A). Формула для обчислення щільності струму має вигляд:

$$J = \frac{I}{A}$$

Дана формула показує, що щільність струму залежить від інтенсивності струму та площі поперечного перерізу струменя.

Інший важливий параметр - це температура плазми (T), яка визначається за допомогою розподілу швидкостей частинок в плазмі. Один із способів вимірювання температури плазми - це використання формули для розподілу Максвелла-Больцмана:

$$f(v) = \frac{m}{2\pi kT}^{\frac{3}{2}} * \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT}\right)$$

де $f(v)$ - функція розподілу швидкостей, m - маса частинки, k - стала Больцмана, v - швидкість частинки, T - температура плазми. Ця формула дозволяє визначити розподіл швидкостей частинок та зв'язану з цим температуру плазми.

Третій параметр - це потужність струменя (P), яка визначається як добуток щільності струму на напругу (U). Формула для обчислення потужності струменя має вигляд:

$$P = J * U$$

Ця формула показує, що потужність струменя залежить від щільності струму та напруги.

Крім того, вивчення плазмових струменів передбачає аналіз їхньої енергетичної ефективності. Це може бути визначено за допомогою формули:

$$\eta = \frac{P}{P_{in} + P_{loss}}$$

де η - енергетична ефективність, P_{in} - вхідна потужність, P_{loss} - втрати потужності. Ця формула показує, яку частину вхідної потужності вдається ефективно використати в плазмовому струмі.

1.7 Розширення плазмових струменів

Розширення плазмових струменів включає збільшення поперечних розмірів плазмового пучка від вихідного джерела до більш широкої області. Розширення струменя може бути досягнуто за допомогою різних методів та технік, і воно має велике значення для багатьох практичних застосувань.

Одним з основних методів розширення плазмових струменів є використання плазмових оптичних систем. Ці системи можуть використовувати магнітні поля, електричні поля або комбінацію обох, щоб управляти розмірами та формою плазмового пучка. Наприклад, магнітні лінзи можуть збільшувати поперечні розміри струменя шляхом фокусування плазми та контролю над рухом частинок у магнітному полі. Електричні поля також можуть використовуватися для створення потенціальних бар'єрів, які утримують плазму та контролюють її розподіл.

Інший підхід до розширення плазмових струменів полягає у використанні резонансних ефектів. Наприклад, використання резонансних поверхневих хвиль може сприяти взаємодії з плазмою та розширенню струменя. Цей метод може бути особливо корисним для отримання великих поперечних розмірів плазмового пучка.

Розширення плазмових струменів має широкі застосування в різних галузях, зокрема в плазмових обробках матеріалів, плазмових джерелах для нано- та мікроелектроніки, плазмовому напиленню та плазмовій обробці поверхонь. Збільшення розмірів струменя дозволяє збільшити площу взаємодії плазми з поверхнею та покращити її ефективність.

Дослідження та оптимізація розширення плазмових струменів мають велике значення для розуміння процесів, що відбуваються в плазмі, а також для розробки нових методів та технологій, які базуються на використанні плазми.

РОЗДІЛ II

МОДЕЛЬ ЗАДАЧІ ТА МЕТОДИКА ЧИСЛОВОГО МОДЕЛЮВАННЯ

2.1 Модель та методика моделювання

В роботі розглядається потік плазми через циліндричну камеру, радіус якої змінюється. Плазма на вхідному отворі являє собою суміш атомів та іонів аргону, атомів титану та електронів. Склад цієї суміші визначається параметрами $\alpha = n_{i0}/n_{a0}$, та $\beta = n_{a0}/N_0$, де n_{a0}, N_0 – концентрації атомів аргону та титану, а n_{i0} – концентрація іонів аргону на вхідному отворі. Задається на вході в камеру також температура важких частинок плазми (атомів та іонів) $T_0 = 0.03$ еВ, температура електронів $T_{e0} = 1$ еВ та швидкість потоку плазми $v_0 = 5 \frac{M}{c}$. Тиск важкої компоненти плазми обчислюється згідно формули $P = kT_0(n_{a0} + n_{i0} + N_0)$.

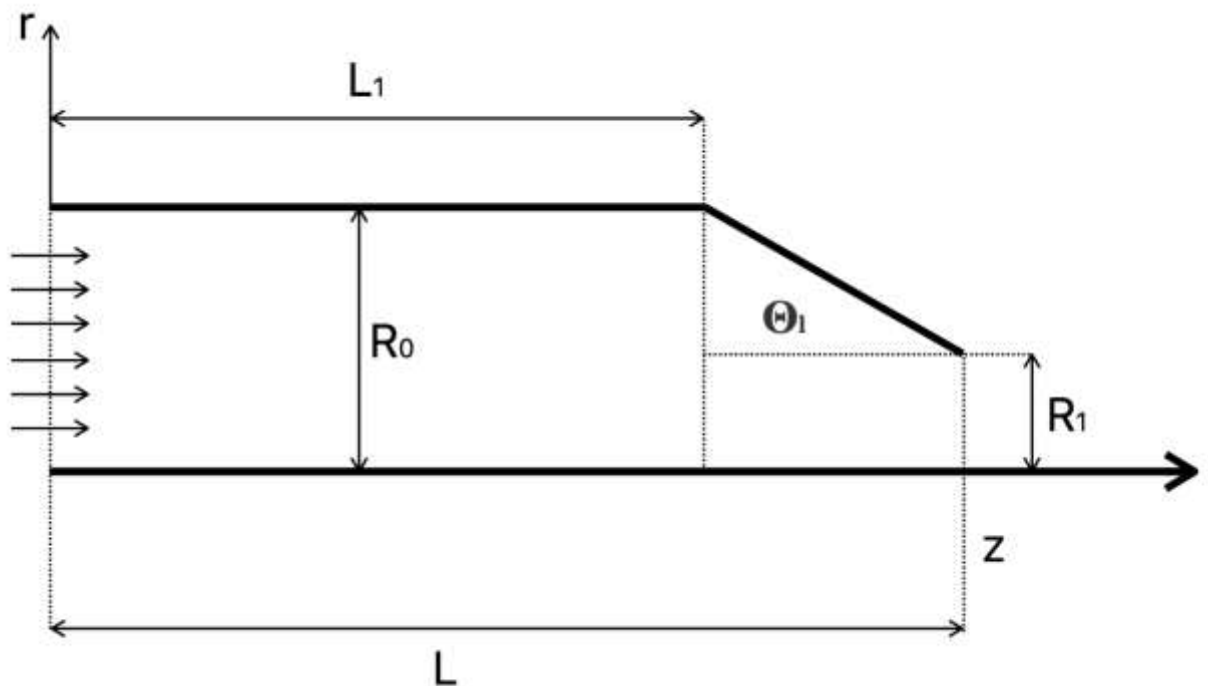


Рис. 2.1. Макет області моделювання.

Переріз камери вздовж осі z зображений на рис.1. При $z \leq L_1$ радіус камери незмінний і дорівнює R_0 . При $L_1 \leq z \leq L$ радіус камери зменшується по лінійному закону до значення R_1 при $z = L$.

В камері внаслідок зіткнень атомів титану та аргону утворюються димери [], тобто кластери які складаються з двох атомів титану. Вони є зародками кластерів більшого розміру. В подальшому при зіткненні атомів металу з кластерами, що містять n зв'язаних атомів металу, утворюється кластер, що містить $n + 1$ атом металу. Рівняння, які описують процеси зародження кластерів та їх зростання мають вигляд

$$\frac{df_2}{dt} = KN^2n_a - k_2Nf_2,$$

$$\frac{df_n}{dt} = k_{n-1}Nf_{n-1} - k_nNf_n,$$

де f_n – концентрація кластерів, що містять n зв'язаних атомів металу, $K = 2.5 \cdot 10^{-33} \text{ см}^6\text{с}^{-1}$ – константа тричастинкової реакції, $k_n = k_0n^{\frac{2}{3}}$, $k_0 = 2.6 \cdot 10^{-11} \text{ см}^3$

Система рівнянь гідродинаміки, яка описує потік плазми включає рівняння неперервності, які мають вигляд:

$$\frac{dn_a}{dt} + \text{div}(\vec{w}n_a) = 0,$$

$$\frac{dn_i}{dt} + \text{div}(\vec{w}n_i) = 0,$$

$$\frac{dN}{dt} + \text{div}(N\vec{w}) = S,$$

$$S = \sum_{n=2}^{n_{max}} f_n$$

де \vec{w} – вектор швидкості, n_a – концентрація атомів аргону, n_i – концентрація іонів, N – концентрація атомів титану, S – кількість зв'язаних атомів титану в

кластерах які знаходяться в одиниці об'єму, n – кількість атомів у кожному кластері, f_n – концентрація кластерів.

Також нам потрібно доповнити систему рівнянь, рівняннями руху, які мають вигляд:

$$\vec{w} = (u, v)$$

$$\rho = (n_i + n_a)m_a + Nm_{Ti}$$

$$\frac{d(u\rho)}{dt} + \text{div}(u\rho\vec{w}) = -\frac{dP}{dz}$$

$$\frac{d(v\rho)}{dt} + \text{div}(v\rho\vec{w}) = -\frac{dP}{dr}$$

$$\frac{d(\rho\varepsilon)}{dt} + \text{div}(\varepsilon\rho\vec{w}) + P\text{div}(\vec{w}) = Q_e$$

де u – компонента швидкості по z , v – компонента швидкості по радіусу, ρ – , m_a – маса атому аргону, m_{Ti} – маса атому титану, ε – внутрішня енергія, Q_e – енергообмін важкої компоненти з електронами за рахунок зіткнень

2.2 Результати моделювання

Числове моделювання плазмового струменя проводилося з такими параметрами на вході: швидкість потоку плазми $v_0 = 2 \frac{M}{c} \div 10 \frac{M}{c}$, діаметр циліндричної камери $r_0 = 0.05m$, відношення концентрації атомів аргону до концентрації атомів титану на вхідному отворі $\beta = 5 \div 10$, тиск плазми на вхідному отворі $P = 0.5 \text{ Торр} \div 2 \text{ Торр}$.

На рисунку 2.2 зображено просторовий розподіл сумарної густини плазми (сума густин атомів та йонів аргону, а також атомів титану в одиниці об'єму) при $t = 0.2c$, де t час після інжекції потоку плазми в камеру.

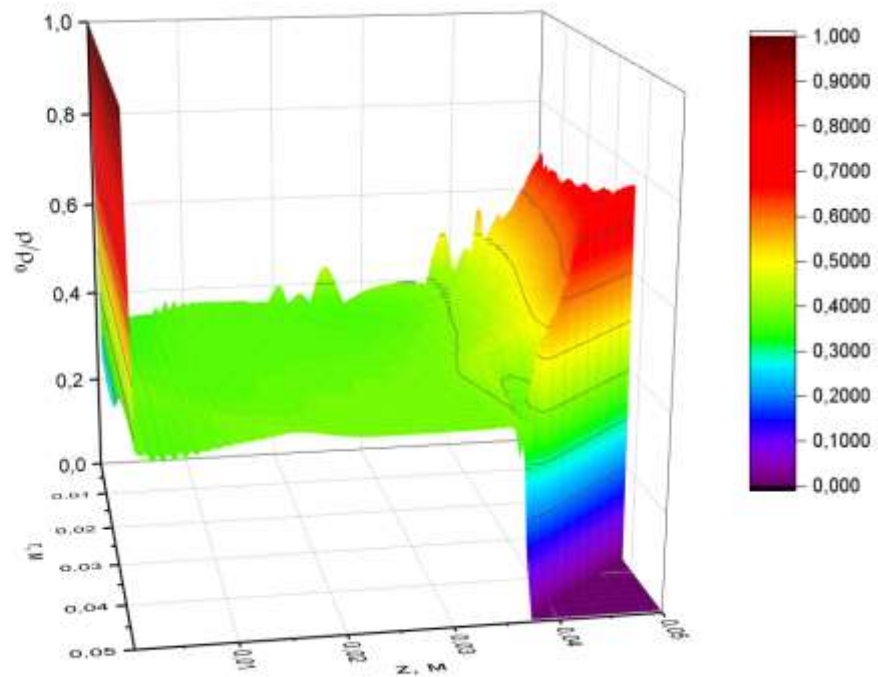


Рис. 2.2. Просторовий розподіл сумарної густини плазми.

Ми бачимо що в області звуження камери (при $z > 0.0375\text{м}$) відбувається збільшення сумарної густини плазми.

Проаналізуємо вплив параметру $\beta = 5, 7, 10$, на просторові розподіли сумарної густини. На рисунку 2.3 зображені просторові розподіли сумарної густини плазми вздовж осі z при $r = 0.0025\text{ м}$. Видно, що склад суміші практично не впливає на сумарну густину плазми.

На рисунку 2.4 зображені просторові розподіли сумарної густини плазми по радіусу при $z = 0.1\text{ м}$, що відповідає вихідному отвору. Видно що біля стінки відбувається збільшення густини плазми, проте склад суміші практично на неї не впливає.

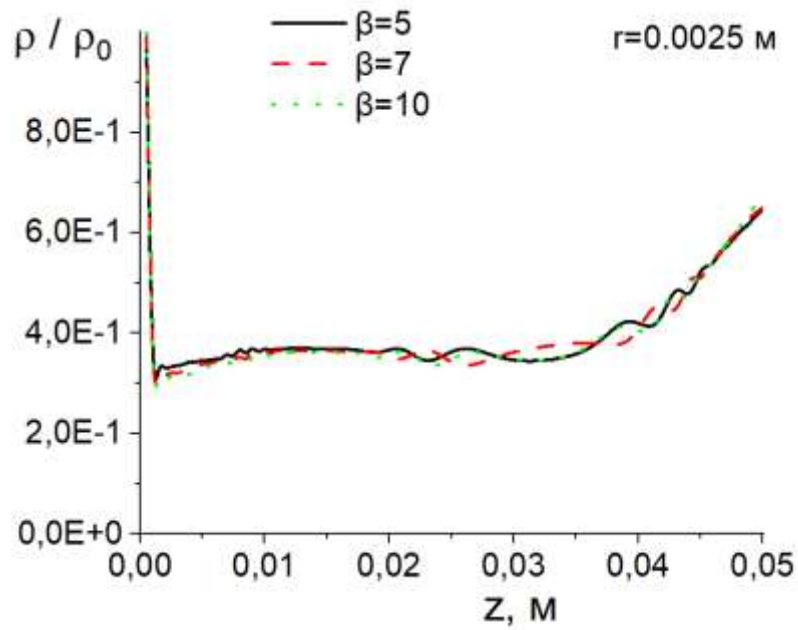


Рис. 2.3. Просторові розподіли сумарної густини плазми при різних значеннях β .

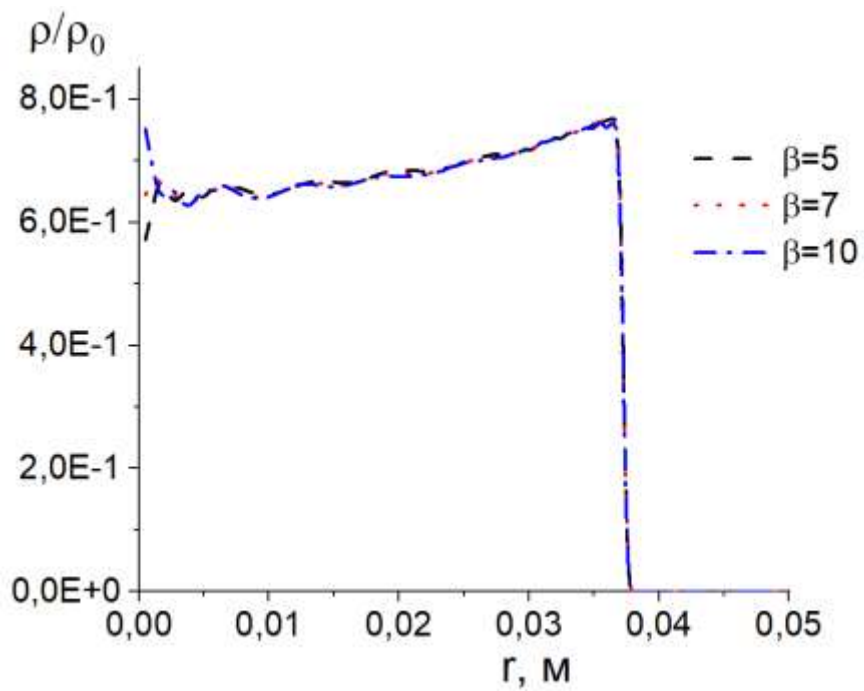


Рис. 2.4. Просторові розподіли по радіусу сумарної густини плазми при різних значеннях β .

Проаналізуємо вплив параметру β на просторові розподіли концентрацій атомів титану. На рисунку 2.5 зображені концентрації атомів титану з різними значеннями параметру β вздовж осі z .

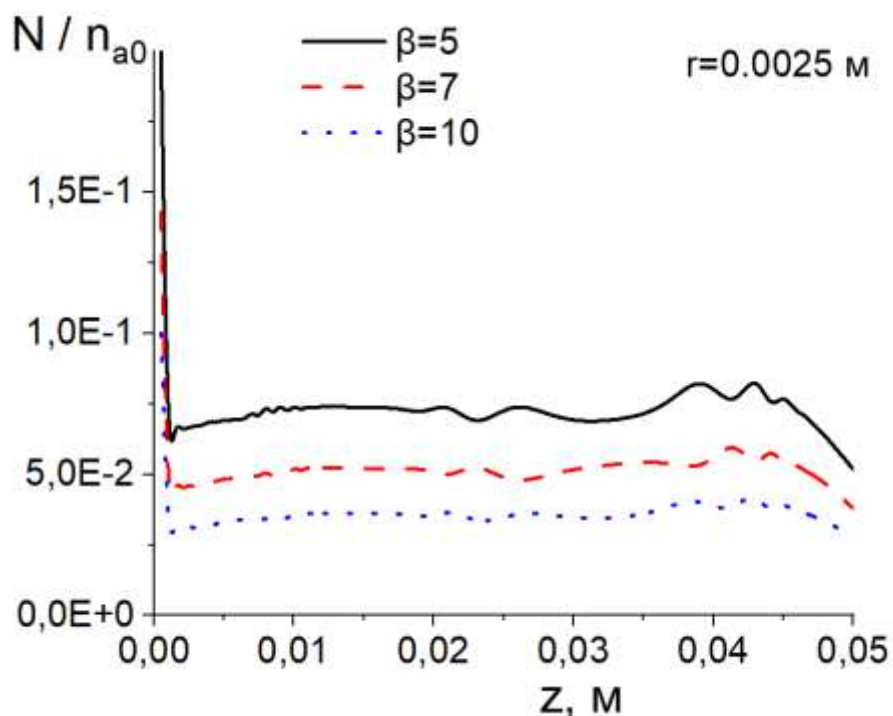


Рис. 2.5. Просторові розподіли концентрацій атомів титану при різних значеннях β .

Бачимо, що вздовж осі Z концентрація атомів титану постійна і збільшується при зменшенні параметру β , слід зазначити незначне зростання концентрацію атомів титану в області звуження камери.

На рисунку 2.6 зображені просторові розподіли густини атомів титану по радіусу для різних значень параметру δ при $z = 0.1$ м, де $\delta = \frac{n_{Ta0}}{n_{Ar0}}$ (відношення концентрацій атомів в камері в початковий момент часу до концентрації атомів аргону на вхідному отворі).

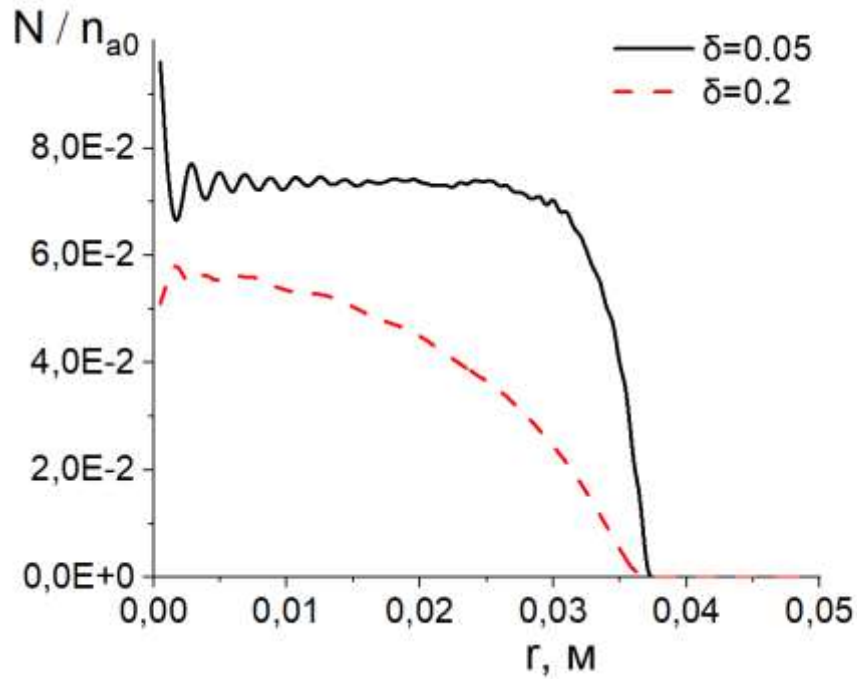


Рис. 2.6. Просторові розподіли концентрацій атомів титану по радіусу при різних значеннях δ .

Бачимо, що концентрація біля самих стінок зменшується та залежність концентрації атомів титану від параметру δ обернено пропорційно, при більших значеннях - концентрація зменшується, та відповідно при менших значеннях - концентрація збільшується.

Проаналізуємо вплив складу суміші плазми на вході в камеру на просторовий розподіл концентрації кластерів різного розміру. На рисунку 2.7 зображена концентрація кластерів який вміщує в собі 5 атомів, з різними значеннями параметру β вздовж осі z .

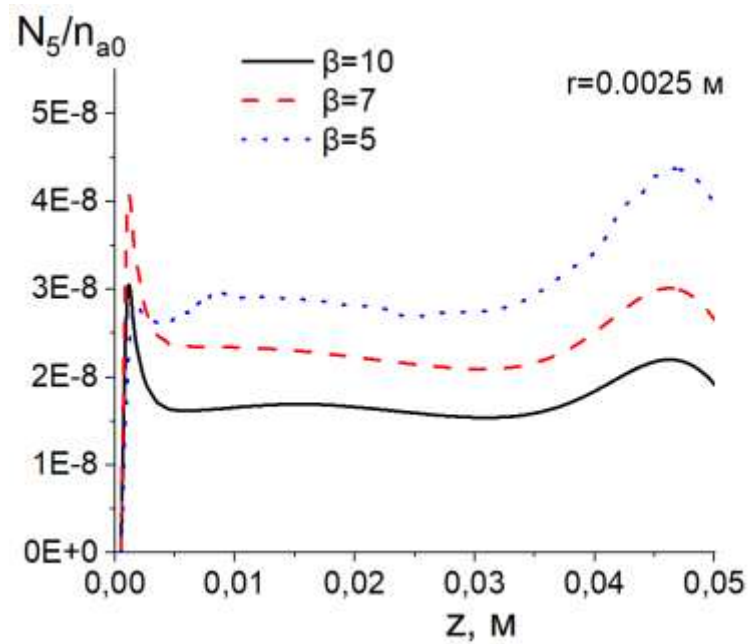


Рис. 2.7. Просторові розподіли кластерів при різних значеннях β .

Бачимо поведінку практично аналогічну до атомів титану, при різних значеннях параметру β концентрація кластерів зменшується та відповідно при менших значеннях параметру β збільшується. Також бачимо що в області звуження камери у всіх режимах відбувається збільшення густини кластерів.

На рисунку 2.8 зображені просторові розподіли густини кластерів, для різних значень параметру δ вздовж осі Z .

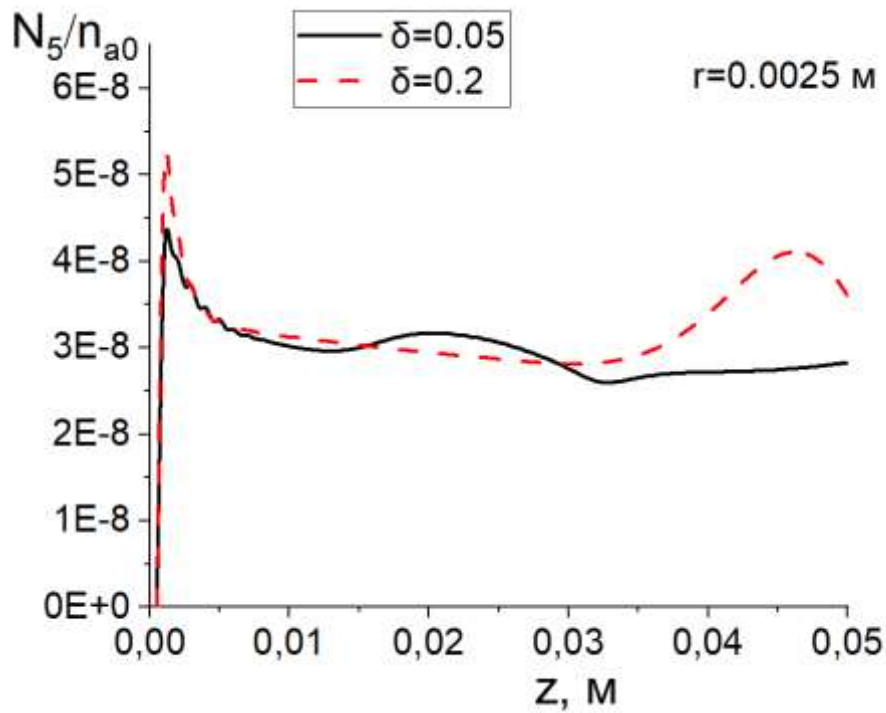


Рис. 2.8. Просторові розподіли кластерів при різних значеннях δ .

Бачимо, що в області звуження камери відбувається збільшення густини кластерів, також видно що параметр δ практично не впливає на густину кластерів.

На рисунку 2.9 та 2.10 зображені просторові розподіли густини димерів та кластерів, відповідно, по радіусу для різних значень параметру δ при $z = 0.1$ м.

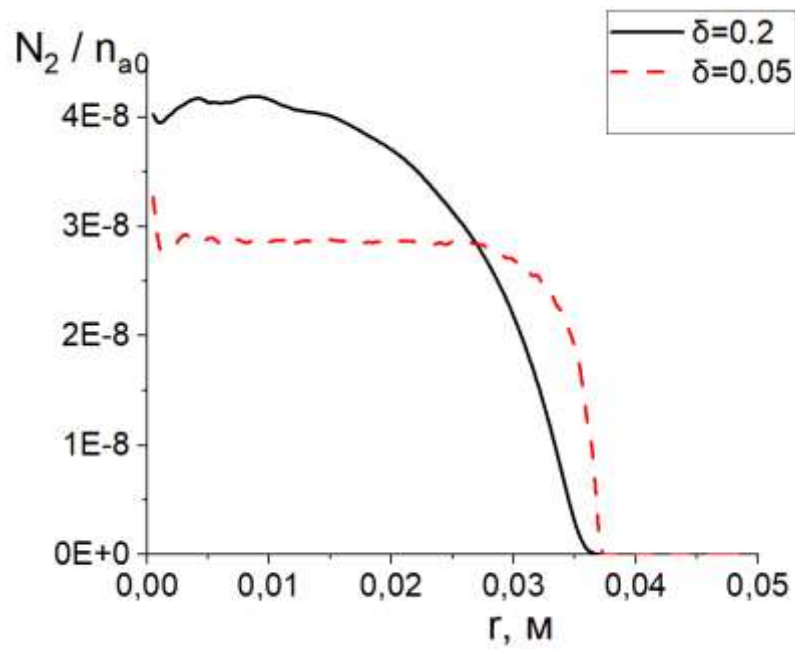


Рис. 2.9. Просторові розподіли димерів по радіусу при різних значеннях δ .

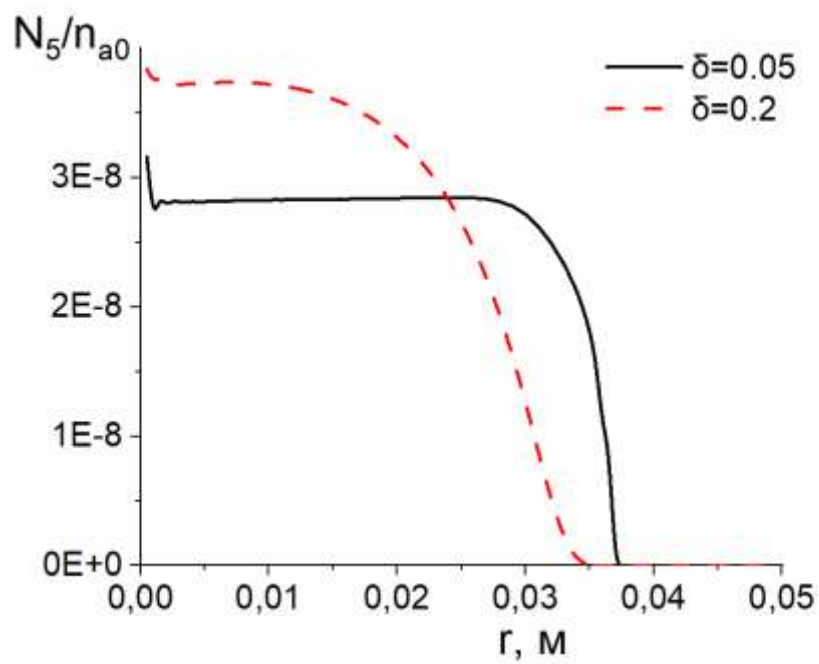


Рис. 2.10. Просторові розподіли кластерів по радіусу при різних значеннях δ .

Бачимо, що при $\delta = 0.2$ немає димерів та кластерів біля стінки, а в при осьовій зоні навпаки, при $\delta = 0.05$ густина димерів та кластерів більша ніж при $\delta = 0.2$. Таку поведінку димерів та кластерів можна пояснити рисунком 2.11 та рисунок 2.6. З рисунка 2.6, робимо висновок, що густина атомів титану менша при $\frac{n_{Ta0}}{n_{a0}} = 0.2$, отже димери та кластери не будуть утворюватися біля стінки. З рисунку 2.11 та 2.6 ми бачимо, що в при осьовій зоні більше аргону, отже димери та кластери не будуть в при осьовій зоні.

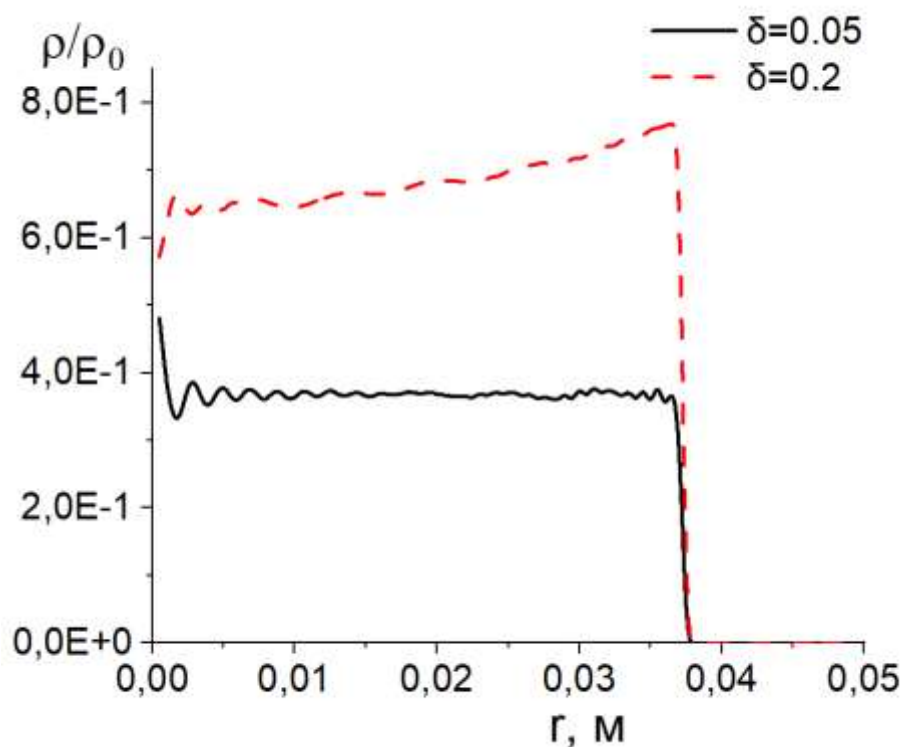


Рис. 2.11. Просторові розподіли по радіусу сумарної густини плазми при різних значеннях δ .

ВИСНОВКИ

В ході роботи була модифікована програма для числового моделювання потоку плазми в осе-симетричній камері, що містить суміш атомів та іонів аргону, атомів титану та електронів. Проведено дослідження утворення кластерів при тиску плазми на вхідному отворі в камеру $p_0 = 2$ Торр, різному складу суміші та початкових тисках газу в камері $p_{01} = 0.4$ Торр і $p_{01} = 0.1$ Торр. Показано:

- Початковий тиск газу в камері суттєво впливає на просторовий розподіл параметрів плазми в камері. При $p_{01} = 0.4$ Торр в області звуження камери спостерігається збільшення густини плазми, а при тиску $p_{01} = 0.1$ Торр густина плазми майже однорідна по об'єму камери.
- При $p_{01} = 0.4$ Торр в області звуження камери концентрація атомів титану швидко зменшується в радіальному напрямку при наближенні до стінки, а при $p_{01} = 0.1$ Торр атоми титану розподілені по радіусу більш рівномірно.
- Концентрація кластерів в центральній області камери більша при $p_{01} = 0.4$ Торр, а біля стінок камери при $p_{01} = 0.1$ Торр.
- Концентрація кластерів зменшується при збільшенні відношення концентрації атомів аргону до концентрації атомів титану на вхідному отворі.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. B. M Smirnov. Formation of clusters through generation of free atoms / B. M Smirnov, I. Shyjumon and R. Hippler. Phys. Scr. – 2006. –V.73. -P.288-295.
2. O.Yu. Kravchenko, I.S. Maruschak, Dynamics of dust particles in a plasma jet / Problems of atomic science and technology. № 1 – 2017.
3. О. М. Белоцерковский, Ю. М. Давыдов Метод крупных частиц в газовой динамике. – М.: Наука, 1982. – 391 с.
4. Vladimirov S.V., Samarian A.A. Non-extensive self-organized dusty structures in plasma. - Plasma Physics and Controlled Fusion. – 2007. – V.49, №7.
5. Introduction to Complex Plasmas – Bonitz, M., Springer – 2010
6. Shukla P. K., Mamun A. A. Introduction to dusty plasma physics: chapter 3: Dynamics of dust grains. – Bristol and Philadelphia: IoP, 2001. – 270 с.
7. E. Quesnel, E. Pauliac-Vaujour, and V. Muffato. JOURNAL OF APPLIED PHYSICS 107, 054309 –2010– Modeling metallic nanoparticle synthesis in a magnetron-based nanocluster source by gas condensation of a sputtered vapor.
8. The European Physical Journal D - Plasma based formation and deposition of metal and metal oxide nanoparticles using a gas aggregation source.
9. V. Vekselman and Y. Raitses. PHYSICAL REVIEW E 99, 063205 -2019- Growth of nanoparticles in dynamic plasma
- 10.P. V. Kashtanov, B. M. Smirnov and R. Hippler. Efficiency of cluster generation in a magnetron discharge 2010
- 11.Journal of Vacuum Science and Technology B Thomas Lopez and Lorenzo Mangolini. On the nucleation and crystallization of nanoparticles in continuous-flow nonthermal plasma reactors.
- 12.Principles of Plasma Discharges and Materials Processing (Liebermann, M. A., Lichtenberg, A. Дж., Wiley, 2005)