

**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

«\_23\_» травня 2023 р.

**КВАЛІФІКАЦІЙНА МАГІСТЕРСЬКА РОБОТА**

на тему:

«Моделювання плазмових струменів низького тиску з наночастинками»

**Виконав:**

студент 2-го курсу магістратури  
денної форми навчання  
спеціальності 105 – Прикладна фізика та наноматеріали  
ОП «Прикладна фізика та наноматеріали»  
Галілейський Олександр Дмитрович

\_\_\_\_\_

**Науковий керівник:**

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

\_\_\_\_\_

**Рецензент:**

д.ф.-м.н., доц. Момот Андрій Іванович

\_\_\_\_\_

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 «17» травня 2023 р., протокол № 31.

Завідувач кафедри фізичної електроніки,  
доктор фіз.-мат. наук, професор  
Веклич Анатолій Миколайович

\_\_\_\_\_

## ЗМІСТ

Реферат .....	3
Вступ .....	4
Розділ I. Огляд літератури .....	6
1.1. Процеси в кластерній плазмі .....	6
1.2. Сили, що діють на пилові частинки в плазмі .....	8
1.3. Сила тертя іонів.....	10
1.4. Сила тертя нейтралів .....	12
1.5. Частинки в плазмовому середовищі .....	13
1.6. Дослідження динаміки пилових частинок у струмені .....	14
Розділ II. Модель задачі та методика числового моделювання .....	19
2.1. Фізична модель та математична модель.....	19
2.2. Математична модель.....	19
2.3. Методика моделювання.....	22
2.4. Результати моделювання.....	25
Висновки .....	33
Список літератури.....	34

## РЕФЕРАТ

Звіт вміщує 34 стор., 17 рис.

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

В даній роботі досліджено розширення плазмового струменю з дисперсною фазою, що представляє собою суміш наночастинок різного розміру. Задача описується в рамках багато-рідинної гідродинамічної моделі, в якій використовуються гідродинамічні рівняння для кожної з компонент плазми. Для числового моделювання використовувався метод крупних частинок. В результаті проведених розрахунків одержані просторові розподіли параметрів плазми в різні моменти часу. Досліджено нагрівання пилинок в плазмовому струмені та їх обмін енергією з плазмою у випадку суміші пилових частинок різного розміру. Показано, що швидкість плазмового струменю залежить від кількості дисперсної фази в струмені та її складу.

## ВСТУП

Сьогодні плазмові технології застосовуються у багатьох галузях промисловості, що розвиваються, таких як мікроелектроніка, нанотехнології, оптика, біологічна чи медична інженерія та багато інших, пов'язаних із модифікацією поверхні. Тут важливими є енергетичні умови на поверхні підкладки в таких процесах, як напилення, плазмове травлення, осадження тонких плівок або модифікація поверхні. Таким чином, моніторинг і контроль параметрів, таких як тиск і склад газу або температура підкладки, є важливими для розробки умов процесу.

Плазмові технології є важливим інструментом для створення плівок на підкладки. Вирощування тонких і надтонких плівок може бути досягнуто за допомогою різноманітних методів, таких як хімічне осадження з парової фази, радіочастотне напилення, імпульсне лазерне напорошення. Моделюючи наночастинки, які створюють і збирають плівку, можна підвищити фізичні властивості тонких плівок. Як відомо, наночастинки мають здатність до коагуляції, в результаті чого змінюється їх розмір. Цей процес може бути суттєвим у плазмі, і його необхідно враховувати при транспортуванні наночастинок до підкладки в плазмовому струмені. Важливо мати можливість контролювати розмір наночастинок, їхню кінетичну енергію, температуру та величину потоку на підкладці. Для ефективного керування технологічними параметрами дії плазми необхідно розрахувати характеристики плазмового потоку за допомогою відповідної математичної моделі. Для моделювання надзвукового потоку газу звичайної температури з частинками пилу в літературі вже є багато робіт.

Крім обробки пластин у плазмі, плазмовий синтез і модифікація наноскопічних або мікроскопічних частинок (пилу) зі специфічними

властивостями пропонує ряд нових застосувань, які можуть забезпечити покращення оптичних або механічних властивостей покриттів. [1], для процесів термічної обробки, дисперсні композитні каталізатори або поліморфні сонячні елементи.

Метою виконання даної роботи є дослідження впливу пилових частинок на поведінку гідродинамічних потоків плазми за допомогою чисельного моделювання.

## РОЗДІЛ І. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

### 1.1 Процеси в кластерній плазмі

Процес утворення кластерів в пучку атомів, що розширюється відбувається найбільш ефективно, якщо в ньому присутні іони, які є центрами конденсації. Є два способи формування кластерів: перший спосіб пов'язаний зі звичайним опроміненням поверхні лазерним промінням середньої інтенсивності, що призводить до випаровування поверхні та утворення пучка атомів іонів, які діють як центри конденсації. Другий спосіб використовує джерело газу або пари, що представляє собою закриту посудину, з якої пучок газу (пару) випливає через сопло і утворює групи атомів. Ці кластери можуть бути використані для різних цілей, іноді з додатковою іонізацією. Використання заряджених груп атомів дозволяє прискорювати їх і використовувати для взаємодії з поверхнею твердих тіл. На малюнках 1.1 і 1.2 показана взаємодія прискорених груп атомів з поверхневою залежністю від їх енергії[2].

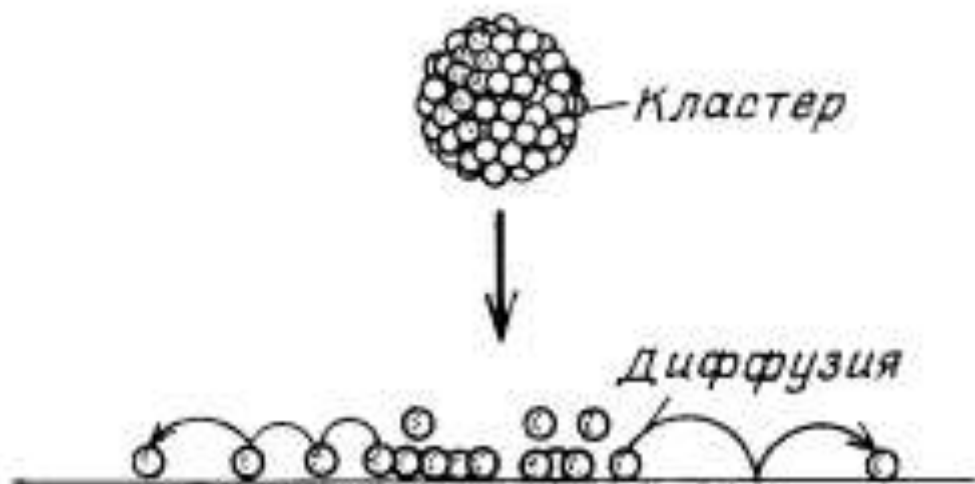


Рис 1.1. Модель зіткнення кластера з поверхнею твердого тіла

При малих енергіях (рис. 1.1) кластери лягають на поверхню і утворюють плівку, при великих енергіях (рис. 1.2) кластери знищують верхній шар поверхні матеріалу, створюючи кратери, чим викликають ерозію матеріалу.

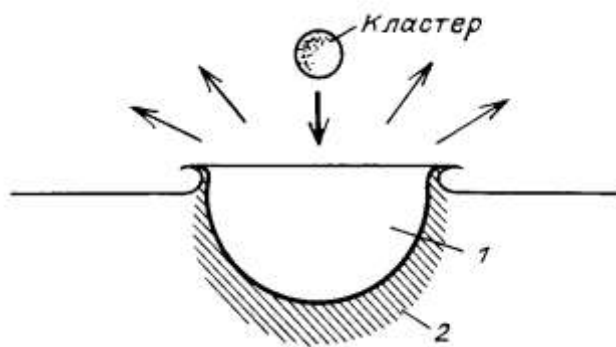


Рис 1.2. Зіткнення швидкого кластера з поверхнею, яке викликає появу ударної хвилі

Кластерні пучки використовують не лише для створення плівок, але й для очищення поверхонь. Вони забезпечують високу швидкість росту плівок до 74 нм/с для срібних кластерів та максимальну швидкість ерозії до 70 нм/с під дією кластерних пучок іонів міді. Зростання кластерів у кластерній плазмі залежить від певних процесів, які можна описати за допомогою схеми.

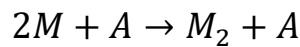


де  $M$  - атом металу,  $M$  - кластер, що складається з  $n$  атомів. процес утворення кластерів шляхом прилипання вільних атомів та їх зворотного процесу, а також процес коагуляції, який відбувається одночасно з цим



Зазначені процеси мають різну природу. Останній процес протікає в одному напрямку, тоді як процеси прилипання атомів та випаровування кластерів (відрив атомів від поверхні кластерів) компенсують один одного. У

режимі зростання кластерів, коли цей процес розпочинається з атомної пари, на першій стадії перетворення атомної пари в газові кластери важливу роль відіграє процес з трьох частинок, який описується схемою:



де  $M$  - атом металу,  $A$  - атом буферного газу. Прийнято вважати, що саме з утворенням двоатомних молекул починається процес нуклеації (формування ядер кластерів, їх зародження) відповідно до схем (1.1) і (1.2). Таким чином, двоатомні 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[3].

## 1.2 Сили, що діють на пилові частинки в плазмі

Існує низка сил, таких як електромагнітна сила, гравітаційна сила, іонні та нейтральні сили опору, термофоретична сила, сила радіаційного тиску тощо, які можуть діяти на заряджені частинки пилу та керувати їх динамікою в плазмі. Основне рівняння, що визначає динаміку зарядженої пилової частинки масою  $m_d$  а швидкість  $v_d$  записується [2]:

$$m_d \frac{dv_d}{dt} = F_{EL} + F_G + F_D + F_T + F_P$$

де  $F_{EL}$  — електромагнітна сила, пов'язана з комбінованим впливом електричного та магнітного полів,  $F_G$  — гравітаційна сила, пов'язана із притяганням між самими частинками пилу (якщо вони достатньо масивні) або між частинкою пилу та масивною планетою чи супутником,  $F_D$  – це сила

опору, пов'язана з рухом частинок або нейтралів плазми, яка фактично виникає внаслідок відносного руху між плазмою та пилом або між нейтралом і пилом,  $F_T$  – сила, пов'язана з температурним градієнтом нейтральний газ, а  $F_P$  – сила радіаційного тиску.

Оскільки пилинки мають суттєвий заряд та її розміри великі, то сили, що на неї діють, що можуть значно відрізнятись від сил, які діють на інші компоненти плазми такі як: електрони, іони та молекули нейтрального газу.

Сили, що діють на пилинки в плазмі можна поділити на сили, що не пов'язані з її електричним зарядом (гравітаційна сила та сила тертя з нейтралами), та на сили, що пов'язані з наявністю електричного заряду (електростатична сила, сила іонного тертя та сила Кулонівської взаємодії між частинками)[3].

Гравітаційна сила визначається масою пилінки та має наступний вигляд:

$$F_g = \frac{4}{3}\pi a^3 \rho_d$$

де  $a$  - радіус пилової частинки,  $\rho_d$  - її густина.

Нейтральна сила опору визначається, як швидкість обміну імпульсом між пиловими частинками та нейтралами під час їх зіткнення[3]. Сила опору оточуючого середовища навколо пилінки – це сила тертя з нейтралами, записується наступним чином:

$$F_d = -\frac{8}{3}\sqrt{2\pi}r_d^2 m n_a V_{Tn}(v_d - v_n)$$

де  $n_a$  та  $T_n$  - концентрація та температура нейтралів,  $v_n$  - швидкість руху нейтральної рідини,  $v_d$  – швидкість пилової компоненти,  $V_{Tn}$  - теплова швидкість нейтралів.

При наявності в плазмі електричного поля з напруженістю  $E$ , електрична сила матиме вигляд:

$$F_E = Z_d e E \left[ 1 + \frac{(a/\lambda_D)^2}{3(1 + a/\lambda_D)} \right]$$

де  $Z_d$  - заряд пилової частинки,  $\lambda_d$  - довжина дебаївського екранування. Для пилової плазми виконується умова  $a \ll \lambda_d$ , тоді вважається, що

$$F_E = Z_d e E$$

Слід зазначити, що поляризація плазми, навколо пилових частинок, призводить до появи у частинок дипольного моменту, але завдяки тому, що це значення дуже мале, його можна не враховувати. Однак, у випадку, якщо пилова компонента складається з діелектричної речовини, дипольний момент, що пов'язаний з асиметричністю потоків електронів та іонів на пилову частинку (наприклад, в приелектродному шарі) має набагато більшу величину[5]. В наведеному випадку не можна нехтувати силою дипольної взаємодії.

Сила опору іонам, або сила іонного тертя, визначається передачею енергії від іонів до пилу. Передачу імпульсу пов'язують з поглинанням (непружні зіткнення), і з розсіянням (пружні зіткнення). Вважається, що за поведінку та розташування пилових частинок відповідає саме сила іонного тертя і сприяє утворенню вайдів (області, в якій не має пилинок) та впливає на інші ефекти в плазмі.

Сила іонного тертя записується наступним чином

$$F_i = m_i n_i \int v f_i(v) \sigma_i^{tr}(v) v dv$$

де  $f_i(v)$  - функція розподілу іонів за швидкістю,  $\sigma_i^{tr}(v)$  - транспортний переріз при зіткненнях іонів з пиловою частинкою. Найбільш складною проблемою в розрахунку цієї сили є неможливість точного визначення транспортного перерізу взаємодії.

### 1.3 Сила тертя іонів

Сила тертя іонів, пов'язана зі збором позитивних іонів шляхом їх прямого впливу, буде називатися «колективна сила тертя» ( $F_{di}^{coll}$ ). Сила тертя іонів, пов'язана з електростатичною кулонівською взаємодією, буде

називатися «силою тертя Кулона» ( $F_{di}^{coll}$ ). Сила, пов'язана з ефектом потоку іонної рідини, буде називатися «силою тертя потоку іонів» ( $F_{di}^{flow}$ ), [2]. Отже, загальну силу тертя іонів  $F_{di}$  можна виразити як:

$$F_{di} = F_{di}^{coll} + F_{di}^{coul} + F_{di}^{flow}$$

Силою тертя іонного потоку  $F_{di}^{flow}$ , яку набагато складніше обчислити, будемо знехтувати, оскільки вона має незначний вплив на загальну силу тертя іонів [2]. Однак дві інші сили тертя,  $F_{di}^{coll}$  і  $F_{di}^{coul}$ , можуть бути розраховані таким чином.

$$F_{di}^{coll,coul} = n_i m_i \sigma^{coll,coul} V_{it} v_i$$

де  $\sigma^{coll}$  ( $\sigma^{coul}$ ) – переріз імпульсу зіткнення, що відповідає збиранню іонів прямими ударами іонів (електростатичні кулонівські зіткнення), а  $V_{it} = (v_i^2 + \frac{8k_B T_i}{\pi m_i})^{1/2}$  – загальна швидкість іонів (комбінація спрямованої і теплової швидкості).

Поперечний переріз  $\sigma_{coll} = 2\pi b_0^2 \ln \left( \frac{b_0^2 + \lambda_{De}^2}{b_0^2 + b_c^2} \right)$

де  $b$  – параметр впливу  $b_0 = r_d \frac{e\phi_d}{m_i v_i^2}$

радіус удару, що відповідає відхиленню на  $90^\circ$  і

$$b_c = r_d \left( 1 - \frac{2e\phi_d}{m_i v_i^2} \right)^{1/2}$$

Отже

$$F_{di}^{coul} = 2\pi b_0^2 n_i m_i V_{it} v_i \ln \left( \frac{b_0^2 + \lambda_{De}^2}{b_0^2 + b_c^2} \right)$$

#### 1.4 Сила тертя нейтралів

Силу тертя нейтралів можна визначити як швидкість обміну імпульсом між частинками пилу та нейтралами під час їх зіткнень. Щоб оцінити нейтральну силу тертя, необхідно розглянути два режими. Це гідродинамічний режим, де число Кнудсена набагато менше одиниці, тобто  $Kn$  (= нейтральний середній вільний пробіг/радіус частинки пилу)  $\ll 1$ , і кінетичний режим, в якому число Кнудсена набагато більше одиниці, тобто  $Kn \gg 1$  [4]. У гідродинамічному режимі (високий тиск) силу тертя можна оцінити за законом Стокса, і вона пропорційна швидкості ( $v_d$ ) і радіусу ( $r_d$ ) частинки пилу. Показано, що для типового низького тиску (тобто менше ніж один 1 Торр) середня довжина вільного пробігу нейтральної речовини довша за кілька 100 мкм, тоді як радіус частинки пилу менше кількох мкм. Таким чином, щоб оцінити нейтральну силу тертя  $F_{dn}$  в умовах плазмової обробки, ми повинні враховувати кінетичний режим[2]. Метод визначення сили тертя нейтралів майже такий самий, як той, який ми використовували для визначення сили тертя іонів. Єдина відмінність полягає в тому, що переріз зіткнення є постійним (переріз твердої сфери) для даного випадку. Нейтральна сила тертя  $F_{dn}$  для максвеллівського розподілу молекул нейтрального газу дорівнює

$$F_{dn} = -\frac{8}{3} \sqrt{2\pi} r_d^2 m_n n_n V_{Tn} \left( 1 + \alpha_{ac} \frac{\pi}{8} \right) (v_d - v_n)$$

де  $\alpha_{ac}$  - коефіцієнт акомодатії,  $v_n$  - швидкість руху нейтральної рідини,  $v_d$  - швидкість пилової компоненти,  $V_{Tn}$  - теплова швидкість нейтралів

## 1.5 Частинки в плазмовому середовищі

Якщо частинки вводять або вирощують у плазмі, вони можуть бути обмежені завдяки балансу кількох сил, що діють на них. Як правило, частинки та поверхні в плазмі мають тенденцію бути негативно зарядженими через набагато більшу рухливість електронів плазми порівняно з рухливістю позитивних іонів. Оскільки температура електронів у нетепловій плазмі значно вища, ніж температура важких частинок, збір електронів ще більш виражений у холодній плазмі [6]. Заряд (а згодом і кулонівська взаємодія) між частинками сильно зменшує агломерацію та коалесценцію. Це дозволяє досягти набагато більш вузького та чітко визначеного розподілу частинок за розміром за допомогою нетермічної плазми порівняно з іншими термічними або аерозольними процесами. Подібно до введених частинок, електрод і стінки реактора також негативно зміщені по відношенню до потенціалу плазми. Таким чином, негативно заряджені частинки відштовхуються сильними електричними полями в областях оболонки просторового заряду. Це дає можливість утримувати частинки в плазмовому реакторі та значно зменшити дифузійні втрати до стінок реактора, що є перевагою порівняно з більшістю інших аерозольних процесів для генерації частинок. Окрім заряджання, на обмежені частинки також впливають кілька енергетичних потоків від них і до них. На електронні та енергетичні умови на поверхні малих частинок у плазмі низького тиску впливають їх розмір і геометрія. Швидко досягається рівновага, в результаті чого встановлюється рівноважна температура  $T_{\mu}$ . Мікрочастинки зазвичай досягають стабільної температури протягом десятків мілісекунд, що визначається балансом обміну енергією з навколишнім середовищем. Особливо для наночастинок ефект радіаційного охолодження зменшується через їх малий розмір порівняно з довжиною хвилі випромінювання. Як наслідок, наночастинки в нетепловій плазмі можуть нагріватися до досить високих температур. Це селективне нагрівання наночастинок може мати драматичні наслідки для їх морфології та

кристалічності та, ймовірно, є однією з головних причин утворення кристалітів у нетермальній плазмі, навіть якщо температура газу залишається близькою до кімнатної. Такі кристаліти часто входять до складу композиційних матеріалів [8].

### **1.6 Дослідження динаміки пилових частинок у струмені**

Протягом останніх років було розроблено багато методів синтезу наночастинок, зокрема кілька дослідницьких груп у всьому світі застосовують плазмові процеси для синтезу твердих частинок [7]. Відповідно зростає і інтерес до вивчення динаміки пилових частинок у плазмі.

В роботі [7] проведено комп'ютерне моделювання плазмового струменя з частинками пилу, який розширюється в розрідженому нейтральному газі. Задача розглядається в рамках багаторідинної гідродинамічної моделі, яка враховує різницю швидкості та температури компонента плазми. Розрахунки виконано методом «крупних частинок» для різного ступеня іонізації плазми, її густини та радіусів пилових частинок. Просторові розподіли параметрів плазми та компонентів пилу, отримані в різні моменти часу після інжекційного струменя плазми. Показано, що при великому ступені іонізації плазми ( $\alpha > 0,001$ ) швидкість пилових частинок суттєво зменшується порівняно зі слабоіонізованим потоком плазми. Цей результат можна пояснити гальмуванням пилових частинок електричним полем, дія якого посилюється зі збільшенням концентрації електронів та іонів.

Розрахунки проводились для різних густин плазми  $\rho_0$  і пилової складової  $\rho_{d0}$  на вході, різних значень ступеня іонізації плазми  $\alpha$  і радіуса пилових частинок  $r_d$ . Моделювання тривало до тих пір, поки потік плазми не встановився. У результаті були отримані просторові розподіли параметрів плазми і параметрів дисперсної фази (густини, швидкості дрейфу, температури і тиску плазми) в різні моменти часу після початку інжекції плазмового струменя в простір, заповнений газом. Приклад просторового розподілу густини плазми наведено на рис. 1.1 при  $t=10$  мс після інжекції струменя. Видно, що ударна хвиля утворюється при розширенні струменя плазми в нейтральний газ.

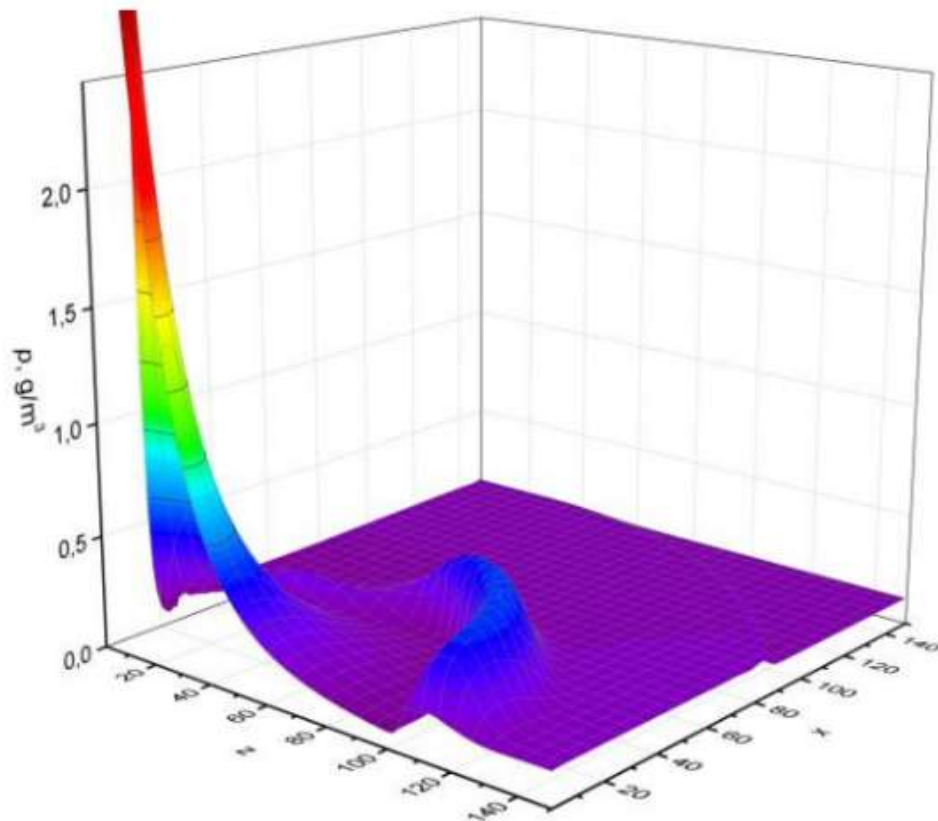


Рис. 1.3 Просторовий розподіл густини плазми при  $t=10$  мс після інжекції плазмового струменя

Просторові розподіли швидкості частинок пилу вздовж осі симетрії струменя наведено на рис. 1.4 для  $r_d = 100$  нм,  $\rho_0 = 0,006$  кг/м<sup>3</sup>,  $V_0 = 40$  м/с. Суцільна крива відповідає ступеню іонізації плазми  $\alpha = 0,001$ , штрихова крива

відповідає  $\alpha=0,05$  і крапкова крива відповідає  $\alpha=0,1$ . Бачимо, що частинки пилу розганяються в потоці в області  $z < 3R_0$  до швидкості  $v_{dz}^m$ , яка залишається майже постійною при подальшому збільшенні координати  $z$ . Причиною такого ефекту є швидке зменшення сили тертя  $\vec{F}_f$  між пиловими частинками і плазмою зі збільшенням  $z$  внаслідок зменшення густини плазми при розширенні струменя (рис. 1.5). Ця модель також враховує вплив електричної сили на частинки пилу. Його дія спрямована проти руху частинок пилу, так як вони мають негативний заряд.

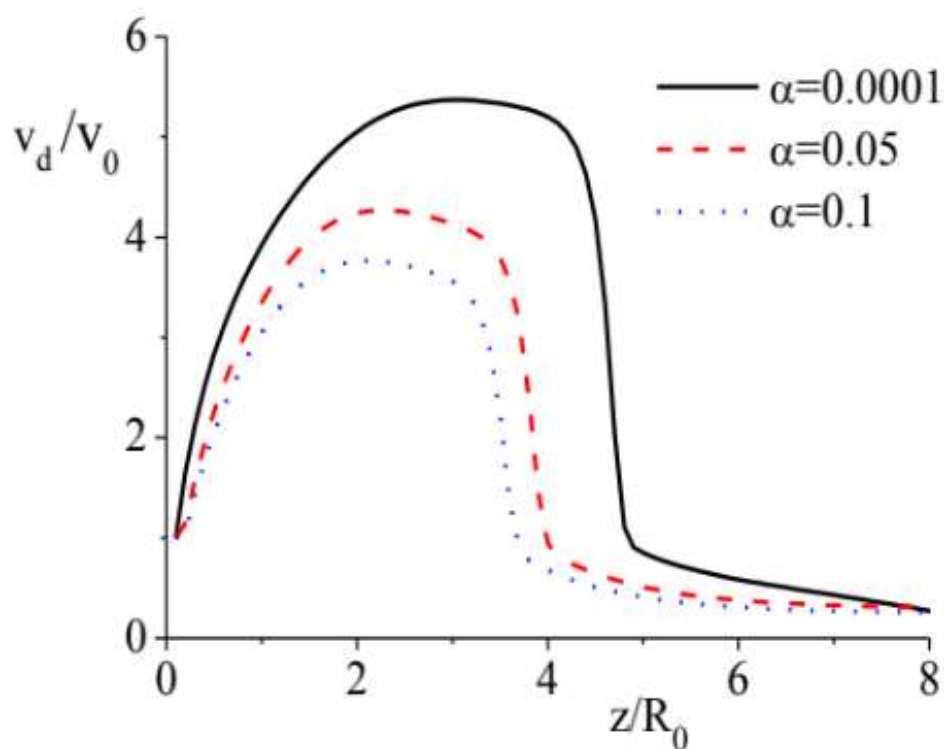


Рис. 1.4. Просторові розподіли швидкості частинок пилу вздовж осі  $z$  для різних ступенів іонізації плазми при  $t=5 \times 10^{-3}$  с

Слід зазначити, що збільшення ступеня іонізації зменшує швидкість частинок пилу, оскільки збільшується вплив електричної сили на їх динаміку.

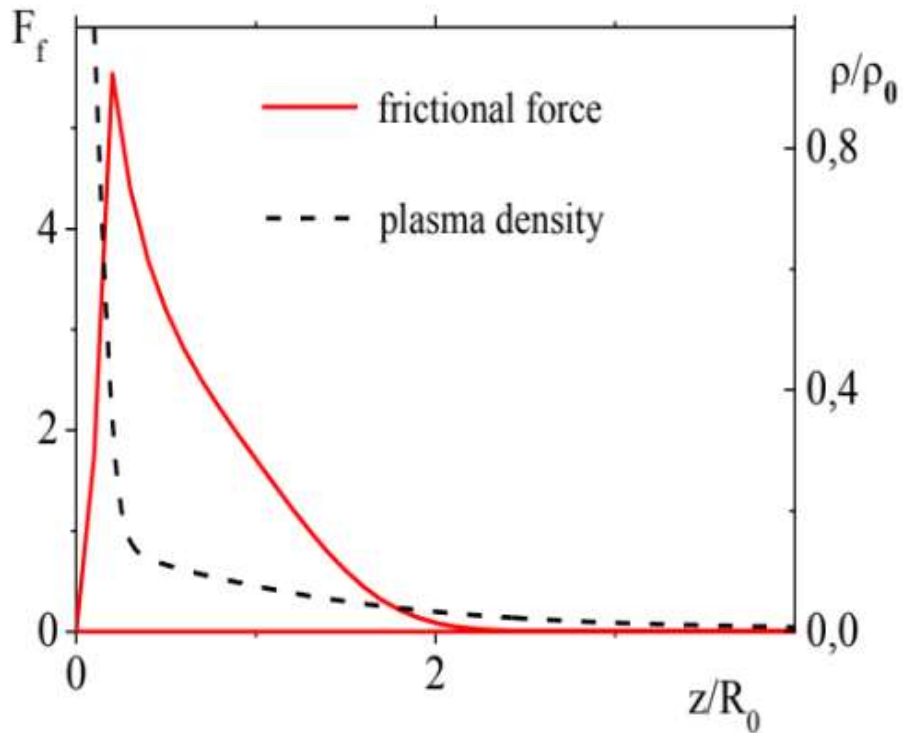


Рис. 1.5. Просторові розподіли густини плазми та сили тертя вздовж осі  $z$

На рис. 1.6 наведено розподіли густини пилових компонентів у розширюваному плазмовому струмені вздовж осі симетрії  $z$  при різних радіусах пилових частинок. Видно, що щільність пилових частинок більшого радіуса зменшується зі збільшенням координати повільніше. Максимальна швидкість, до якої розганяються частинки пилу, також залежить від їх радіуса і щільності плазми в потоці.

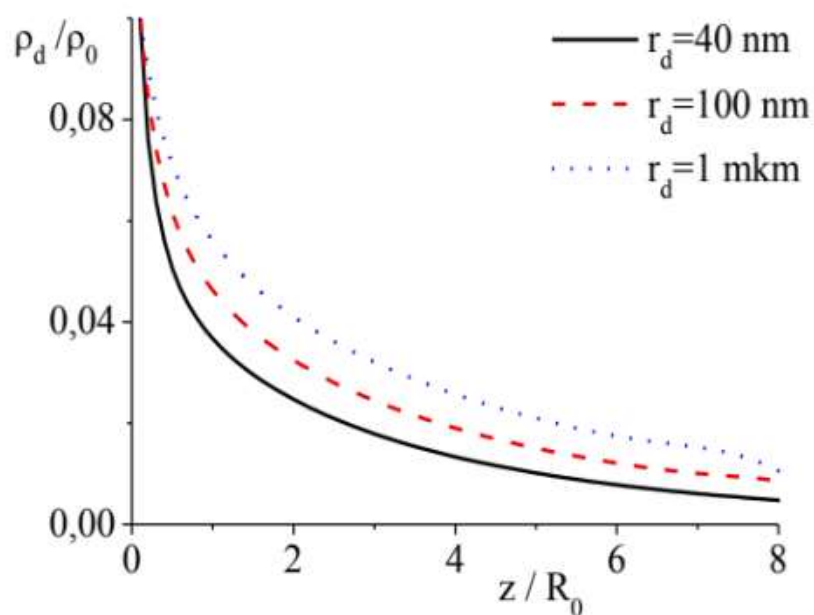


Рис. 1.6. Просторові розподіли густини пилової компоненти вздовж осі z для різних радіусів пилових частинок при  $t=5 \times 10^{-3}$  с

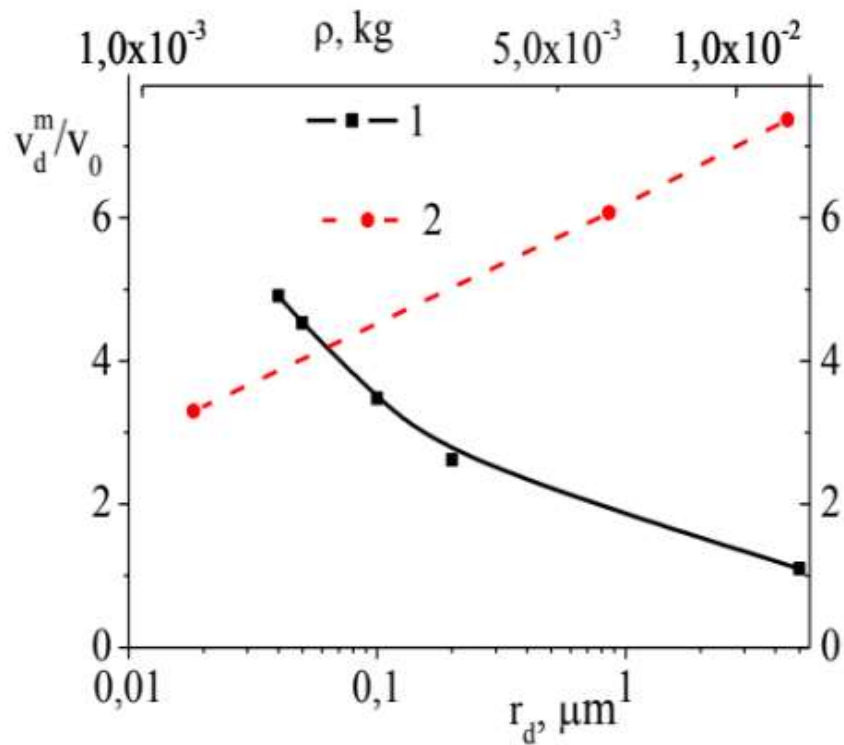


Рис. 1.7. Залежність максимальної швидкості частинок пилу в плазмовому струмені від їх радіуса (крива 1) та густини плазми на вході (крива 2)

Отже при великому ступені іонізації плазми ( $\alpha > 0,001$ ) швидкість пилових частинок суттєво зменшується порівняно зі слабоіонізованим потоком плазми за рахунок їх уповільнення електричним полем.

## РОЗДІЛ II

### МОДЕЛЬ ЗАДАЧІ ТА МЕТОДИКА ЧИСЛОВОГО МОДЕЛЮВАННЯ

#### 2.1 Фізична модель

У цій роботі аналізується витікання плазми через круглий отвір у розріджений нейтральний газ. Плазма складається з електронів, іонів, нейтральних атомів та двох видів пилу, кожна з яких має форму сфери з радіусами  $r_{d1}$  і  $r_{d2}$ . Початкові умови на вхідному отворі включають тиск плазми  $P_0$ , швидкість потоку плазми  $V_0 = 40$  м/с, температуру іонів та нейтральних атомів  $T_i = 0,025$  еВ (кімнатна температура), температуру електронів  $T_e = 1$  еВ та густину пилової компоненти  $\rho_{d0} = 0,1\rho_0$  ( $\rho_{d0} = \rho_{d0}^1 + \rho_{d0}^2$ , де  $\rho_{d0}^1$  – густина пилових частинок першого сорту,  $\rho_{d0}^2$  – густина пилових частинок другого сорту). Область моделювання циліндрична з довжиною та радіусом  $L=R=10$  см, у якому тиск нейтрального газу становив  $P = 0,1P_0$  Торр.

#### 2.2 Математична модель

Для математичного опису плазмових струменів застосовувалась гідродинамічна модель, яка включає рівняння, що описує збереження маси, моментів руху, збереження енергії для різних компонентів плазми. Рівняння неперервності для пилової компоненти:

$$\frac{\partial n_d^k}{\partial t} + \text{div} \left( n_d^k \overrightarrow{w}_d^k \right) = 0 \quad (2.1)$$

де  $n_d$  – концентрація пилових частинок,  $\overrightarrow{w}_d^k = (u_d, v_d)$  – вектор дрейфової швидкості,  $k$  – номер сорту пилінки.

Рівняння неперервності для важкої компоненти плазми (для сумарної концентрації іонів та атомів  $n$ ):

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}(n\overrightarrow{w}) = 0 \quad (2.2)$$

Рівняння неперервності для іонів:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \text{div}(n_i \vec{w}) = - \sum_{k=1}^2 \frac{I_i^k n_d^k}{e} \quad (2.2a)$$

де  $n_i$  – концентрація іонів

Заряд пилу  $q_d^k$  визначається з рівняння:

$$I_e^k + I_i^k = 0 \quad (2.3)$$

$I_e$  - електронний струм на частинках пилу.

$I_i^k$  - іонний струм на частинку пилу сорту  $k$

Іонний струм на пилову частинку:

$$I_i = \pi r_d^2 n_i e |\mathbf{w}| \left( 1 - \frac{e q_d}{4\pi \epsilon_0 r_d (m |\mathbf{w}|^2 / 2 + kT)} \right) \quad (2.4)$$

Де  $r_d$  – радіус пилової компоненти,  $T$  – іонна температура,  $q_d$  – заряд пилки,  $e$  – заряд протона,  $m$  – маса іонів і нейтралів.

Рівняння руху для важкої компоненти плазми (іонів та нейтральних атомів аргону):

$$\frac{\partial(nv)}{\partial t} + \text{div}(nvw) = - \frac{1}{m} \frac{\partial P}{\partial z} - \sum_{k=1}^2 \frac{n_d^k f_z}{m} + \frac{e}{m} n_i E_z \quad (2.5 a)$$

$$\frac{\partial(nu)}{\partial t} + \text{div}(nuw) = - \frac{1}{m} \frac{\partial P}{\partial r} - \sum_{k=1}^2 \frac{n_d^k f_r}{m} + \frac{e}{m} n_i E_r \quad (2.5 б)$$

де  $P = nkT$  - тиск плазми,  $E_r$  та  $E_z$  - радіальні та осьові компоненти електричного поля,  $m_i$  - маса іона (в рамках цієї моделі маса нейтрального атома дорівнює масі іона),  $\vec{f}$  - сила тертя між плазмою та пиловою частинкою ( $f_r$  та  $f_z$  - її компоненти вздовж осей  $r$  і  $z$ ).

Рівняння руху для пилової компоненти:

$$\rho \frac{\partial v_{dk}}{\partial t} = - \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{n_d^k}{n_e} \frac{\partial P_e}{\partial z} + C_f V_{Ta} (v_{dk} - v) n_a r_{dk}^2 n_{dk} \quad (2.6 a)$$

$$\rho \frac{\partial u_{dk}}{\partial t} = - \frac{\partial P}{\partial r} + \frac{n_d^k}{n_e} \frac{\partial P_e}{\partial r} + C_f V_{Ta} (u_{dk} - u) n_a r_{dk}^2 n_{dk} \quad (2.6 б)$$

Сила тертя для пилки:

$$\vec{f}_d = - \frac{8}{3} \sqrt{2\pi} m n_a V_{Tn} (\vec{w}_{dk} - \vec{w}) r_{dk}^2$$

(2.6)

де  $V_{Tn} = \sqrt{(w^2 + \frac{8kT}{\pi m})}$  - загальна швидкість (комбінація направленої та теплової швидкостей). Силу опору іонів можна виразити як:

$$f_{dn} = n_i m V_{Tn} \sigma^{coul} w$$

де  $\sigma^{coll}$  ( $\sigma^{coul}$ ) – переріз імпульсу зіткнення, що відповідає збиранню іонів прямими ударами іонів (електростатичні кулонівські зіткнення)

Електрична сила, що діє на плазму:

$$en_i \vec{E} = \frac{n_i}{n_e} \nabla P_e \quad (2.7)$$

Електрична сила, що діє на пилову компоненту:

$$\vec{E} q_{dl} n_{dl} = \frac{n_{dl}}{n_e} \nabla P_e \quad (2.9)$$

Рівняння для внутрішніх енергій іонів і атомів, електронів і частинок пилу задаються формулою:

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \text{div}(\rho \varepsilon \vec{w}) + P \text{div} \vec{w} = Q_{ei} + Q_{en} - n_d Q, \quad (2.9 \text{ a})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \varepsilon_e)}{\partial t} + \text{div}(\rho \varepsilon_e \vec{w}) + P_e \text{div} \vec{w} + \text{div} q_e = \\ -Q_{ei} - Q_{en} - \sum_{\alpha=1}^2 n_{d\alpha} Q_{ed}^{\alpha}, \end{aligned} \quad (2.9 \text{ б})$$

$$\frac{\partial(\rho_{d\alpha} \varepsilon_{d\alpha})}{\partial t} + \text{div}(\rho_{d\alpha} \varepsilon_{d\alpha} \vec{w}_d) = n_{d\alpha} (Q_{ad}^{\alpha} + Q_{id}^{\alpha} + Q_{ed}^{\alpha}) \quad (2.9$$

в)

де тепловий потік задається  $\vec{q}_e = \chi(T_e) \nabla T_e$ , де  $\chi(T_e)$  - коефіцієнт електронної теплопровідності,  $Q$ ,  $Q_{ed}$ ,  $Q_{id}$  - енергообмін між пиловою частинкою та нейтральними атомами, електронами та іонами,  $Q_{ei}$  - енергетичний обмін між електронами та іонами,  $Q_{en}$  - енергообмін між електронами та нейтралами[9].

Відповідні величини нормуємо на:

$\rho_d$  на  $\rho_0$  (густина плазми на перерізі сопла)

$U_d$  та  $V_d$  на  $V_0$  (швидкість плазми на перерізі сопла)

$n_d$  на  $n_{a0}$  (концентрація атомів на перерізі сопла)

$P$  на  $\rho_0 V_0^2$  (густина та швидкість плазми на перерізі сопла)

$q_d$  на  $e$  (заряд протона)

$r, z$  на  $R_0$  (радіус сопла)

$t$  на  $T_0 = \frac{R_0}{V_0}$

$E$  на  $m_i V_0^2$

### 2.3 Методика моделювання

Розрахунок задачі проводився за допомогою методу крупних частинок, який є універсальним і застосовним як для нейтральних газів, так і для гідродинамічної моделі плазми. Суть методу виникає в тому, що середовище моделюється системою рідких (крупних) частинок, які знаходяться у фіксованому просторі сітці [10].

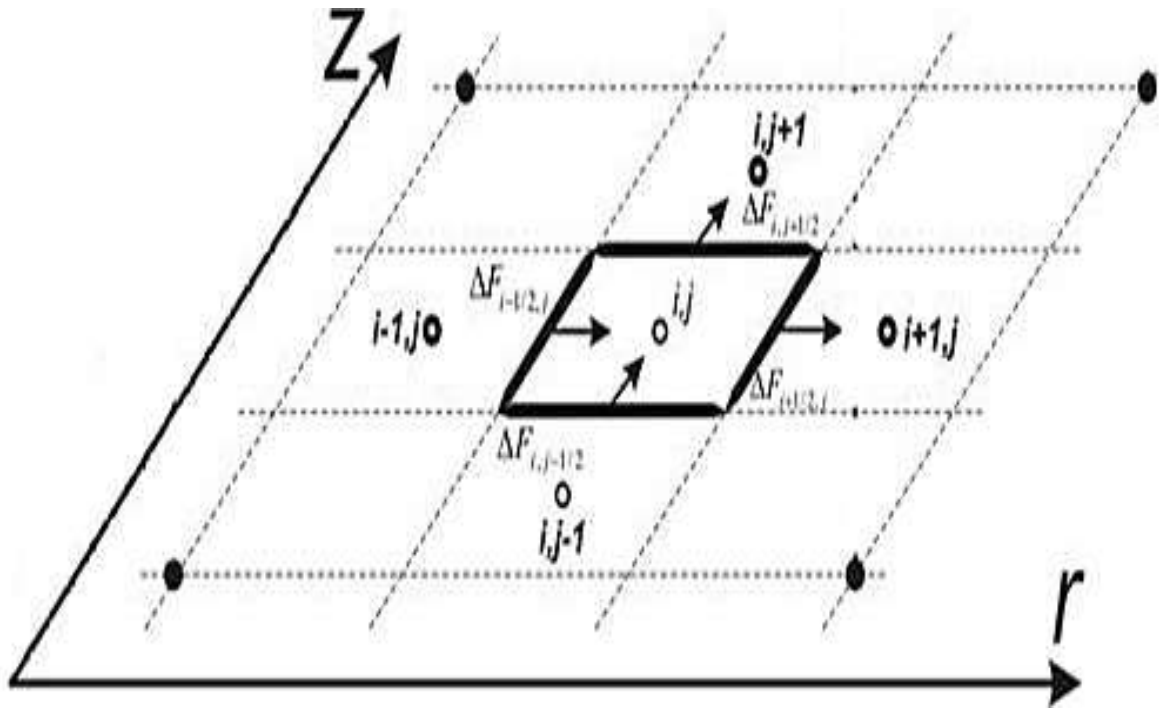


Рис 2.1. Графічне представлення роботи методу крупних частинок

Для отримання стаціонарного розв'язку за час багатократного повторення кроків. Розрахунок кожного кроку розбивається на три етапи: Ейлера, Лагранжа і заключний. На етапі Ейлера знаходяться проміжні значення параметрів для крупної частки на основі диференціальних рівнів Ейлера або системи рівнів газової динаміки в інтегральній формі. На етапі Лагранжа розраховуються потоки маси через межі комірок, а на заключному етапі відображаються остаточні значення параметрів у новий момент часу на основі законів збереження маси, імпульсу та енергії. При цьому, на етапі Ейлера потоки маси не беруться до уваги [11].

Щоб провести розрахунки згідно даної моделі, слід змінити рівняння, а саме змінити їх на різницеві аналоги:

Дискретні аналоги для рівнянь руху важкої компоненти плазми:

$$\begin{aligned}
& \rho_{ij}^k \frac{v_{ij}^{k+1} - v_{ij}^k}{\Delta t} \\
&= - \frac{P_{i,j+1/2}^k - P_{i,j-1/2}^k}{\Delta z} - \frac{(n_i)_{ij}^k}{(n_e)_{ij}^k} \frac{(P_e)_{i,j+1/2}^k - (P_e)_{i,j-1/2}^k}{\Delta z} \\
&+ C_f (V_{Ta})_{ij}^k \left[ (v_d^l)_{ij}^k - (v)_{ij}^k \right] (n_a)_{ij}^k r_{dl}^2 (n_{dl})_{ij}^k
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \rho_{ij}^k \frac{u_{ij}^{k+1} - u_{ij}^k}{\Delta t} \\
&= - \frac{P_{i+1/2,j}^k - P_{i-1/2,j}^k}{\Delta r} - \frac{(n_i)_{ij}^k}{(n_e)_{ij}^k} \frac{(P_e)_{i+1/2,j}^k - (P_e)_{i-1/2,j}^k}{\Delta r} \\
&+ C_f (V_{Ta})_{ij}^k \left[ (u_d^l)_{ij}^k - (u)_{ij}^k \right] (n_a)_{ij}^k r_{dl}^2 (n_{dl})_{ij}^k
\end{aligned}$$

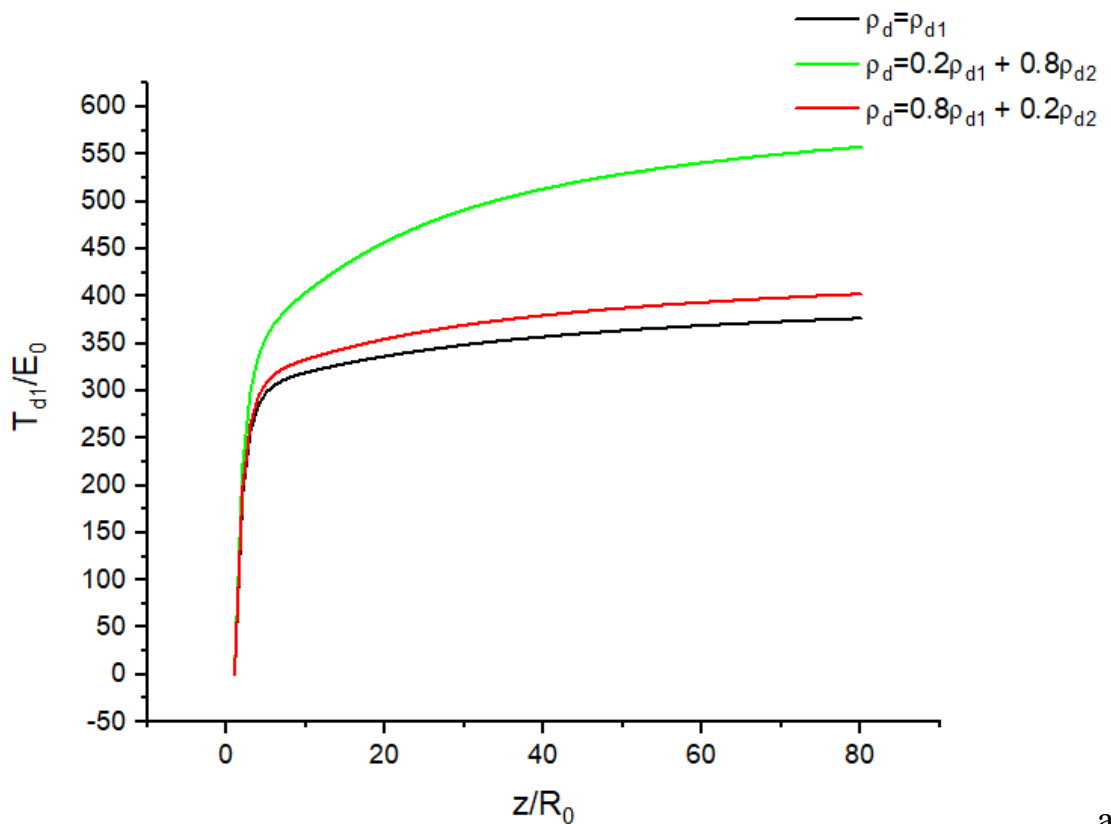
Дискретні аналоги для рівнянь руху пилової компоненти:

$$\begin{aligned}
& \rho_{ij}^k \frac{v_{dij}^{k+1} - v_{dij}^k}{\Delta t} \\
&= - \frac{P_{i,j+1/2}^k - P_{i,j-1/2}^k}{\Delta z} - \frac{\sum_{l=1}^{50} (n_{dl})_{ij}^k}{(n_e)_{ij}^k} \frac{(P_e)_{i,j+1/2}^k - (P_e)_{i,j-1/2}^k}{\Delta z} \\
&- C_f (V_{Ta})_{ij}^k \left[ (v_d^l)_{ij}^k - (v)_{ij}^k \right] (n_a)_{ij}^k r_{dl}^2 (n_{dl})_{ij}^k
\end{aligned}$$

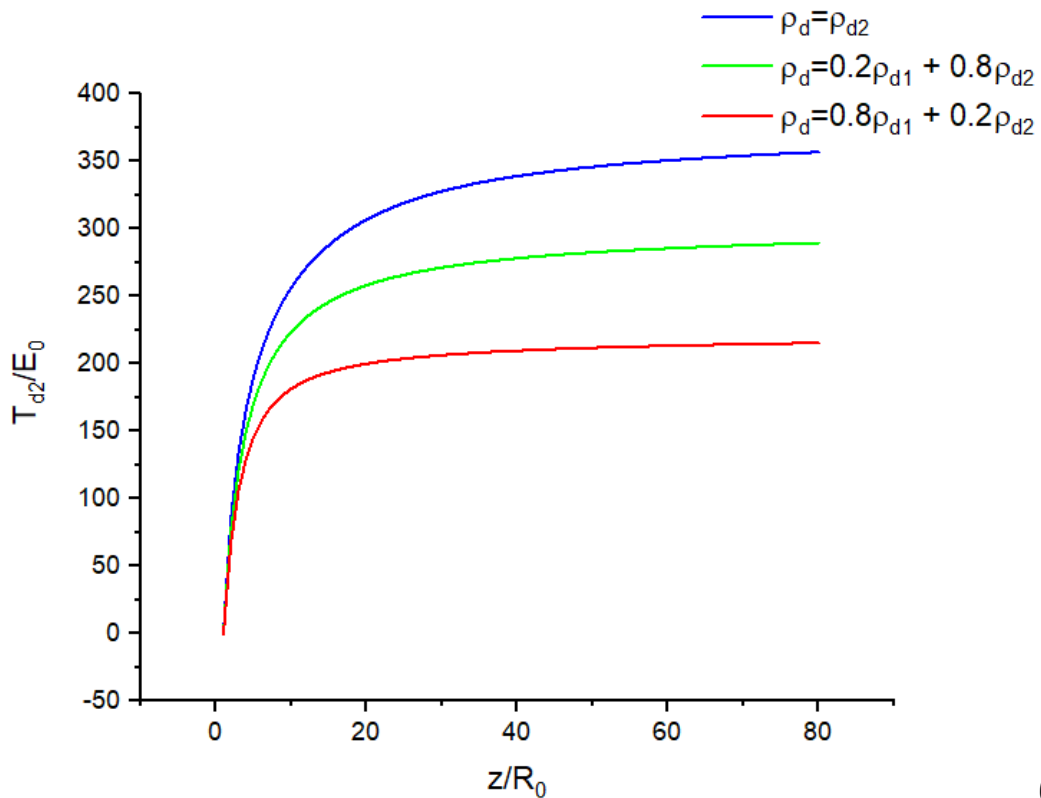
$$\begin{aligned}
& \rho_{ij}^k \frac{u_{dij}^{k+1} - u_{dij}^k}{\Delta t} \\
&= - \frac{P_{i+1/2,j}^k - P_{i-1/2,j}^k}{\Delta r} - \frac{\sum_{l=1}^{50} (n_{dl})_{ij}^k}{(n_e)_{ij}^k} \frac{(P_e)_{i+1/2,j}^k - (P_e)_{i-1/2,j}^k}{\Delta r} \\
&- C_f (V_{Ta})_{ij}^k \left[ (u_d^l)_{ij}^k - (u)_{ij}^k \right] (n_a)_{ij}^k r_{dl}^2 (n_{dl})_{ij}^k
\end{aligned}$$

## 2.4 Результати моделювання

Чисельне моделювання розширення плазмового струменя проводилось з такими параметрами на вході: швидкість потоку плазми  $v_0=40$  м/с, радіус входу  $R_0=0,01$  м, відношення загальної густини пилу компонент до густини плазми  $\rho_d/\rho_0=0,1$ , тиск плазми  $P_0=20$  та  $100$  торр. Ступінь іонізації плазми  $\alpha=5 \times 10^{-5}$ . Розрахунки проводились при різних співвідношеннях густин дрібних і великих частинок пилу  $\rho_{d1}/\rho_{d2}$  у плазмовому струмені. Радіус частинок першого сорту  $r_{d1} = 5$  нм, а другого сорту –  $r_{d2} = 25$  нм.



a

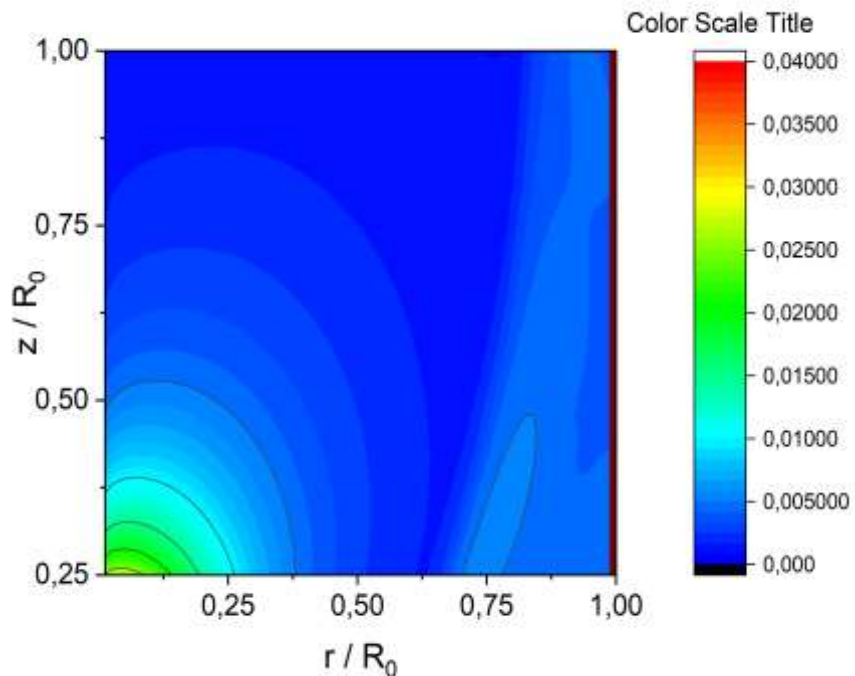


б

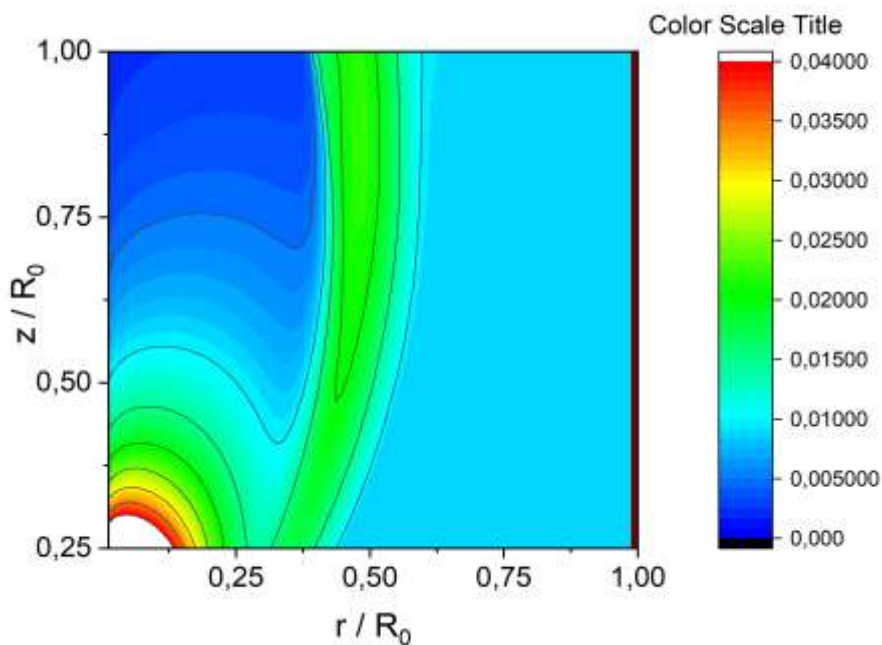
Рис.2.2. Просторові розподіли температури дрібних частинок пилу (а) та великих частинок пилу (б) на осі струменя для різних складів суміші компонентів пилу. (крива 1 –  $\rho_{d1}=\rho_d$ ,  $\rho_{d2}=0$ ; 2 -  $\rho_{d1}=0.2\rho_d$ ,  $\rho_{d2}=0.8\rho_d$ ; 3 -  $\rho_{d1}=0.8\rho_d$ ,  $\rho_{d2}=0.2\rho_d$ ; 4 -  $\rho_{d1}=0$ ,  $\rho_{d2}=\rho_d$ ).

На рис. 2.2 показано просторовий розподіл температури дрібних частинок пилу (а) і великих частинок пилу (б) на осі струменя. Тут температура нормована на енергію  $E_0 = m_i v_0^2$ . Температура частинок пилу в плазмовому струмені при низьких тисках визначається балансом потоків енергії до її поверхні, основні з яких викликані зіткненнями іонів, гарячих електронів і атомів з частинки пилу. При зіткненні іонів з частинками пилу відбувається їх рекомбінація, і енергія іонізації передається на поверхню частинки пилу. Коли атоми стикаються з пилом, пил охолоджується в результаті обміну енергією, оскільки температура плазми зазвичай нижча за температуру поверхні частинок пилу. Тому значний нагрів наночастинок спостерігається поблизу входу, де висока концентрація іонів і електронів.

При збільшенні координати процес нагрівання пилу сповільнюється, що пов'язано з швидким зменшенням концентрації іонів і електронів при розширенні струменя плазми.



а



б

Рис. 2.3. Просторові розподіли густини плазми у випадку, коли плазмовий струмінь містить частинки радіусом  $r_d=5$  nm (а) and  $r_d=50$  nm (б).

На рис. 2.2 також показано, що температура дрібних частинок пилу підвищується, коли до суміші частинок пилу додають великі частинки. Навпаки, температура великих частинок пилу знижується при додаванні в суміш дрібних частинок. Для ілюстрації цього твердження розглянемо просторові розподіли густини плазми в різних режимах розрахунку, що відрізняються процентним складом пилової суміші. На рис. 2.3 показано просторові розподіли густини плазми для випадків, коли плазмовий струмінь містить частинки однакового розміру. Видно, що якщо в струмені присутні дрібні наночастинки (рис. 2.3 а), то він розширюється в радіальному напрямку набагато більше, ніж у випадку, коли в ньому присутні наночастинки більшого розміру (рис. 2.3 б).

Цей результат також підтверджується радіальними розподілами густини плазми, наведеними на рис. 2.4 для різних складів суміші наночастинок на відстані  $z=0,05$  м від входу.

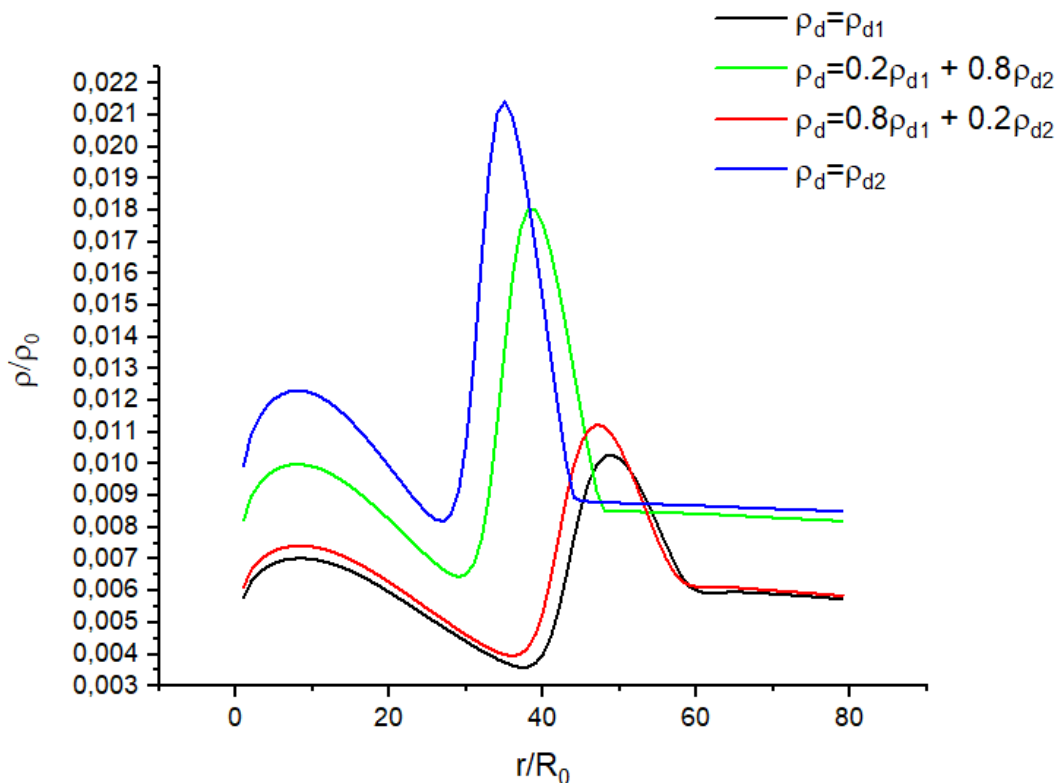


Рис. 2.4. Радіальні розподіли густини плазми при такому ж складі суміші пилового компонента, як на рис.2.2.

Цей рисунок також вказує на те, що щільність плазми в осьовій області струменя зростає із збільшенням частки великих наночастинок у суміші збільшується за умови незмінної маси пилового компонента.

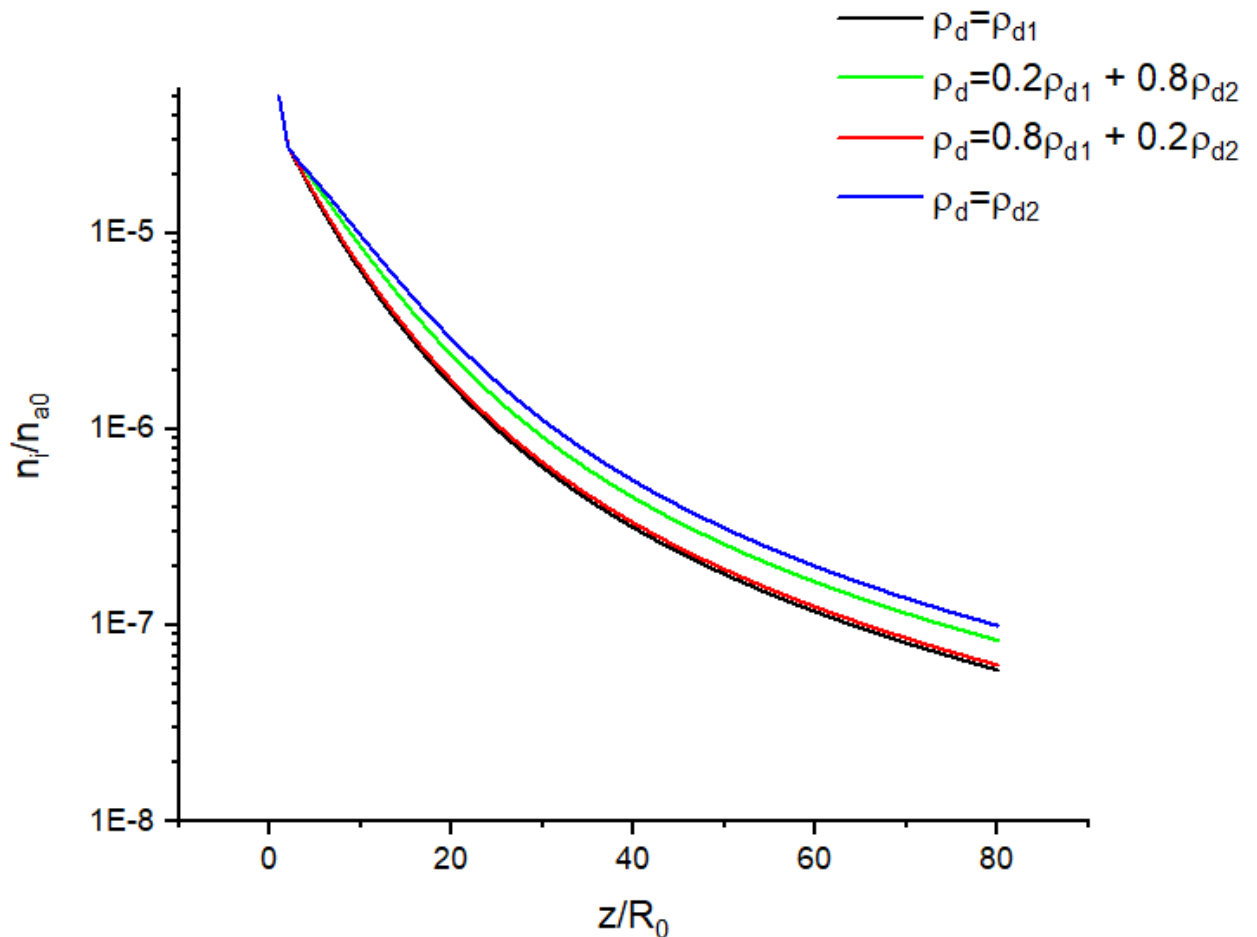


Рис.2.5. Просторові розподіли густини іонів на осі струменя (крива 1 –  $\rho_{d1} = \rho_d$ ,  $\rho_{d2} = 0$ ; 2 -  $\rho_{d1} = 0.8\rho_d$ ,  $\rho_{d2} = 0.2\rho_d$ ; 3 -  $\rho_{d1} = 0.2\rho_d$ ,  $\rho_{d2} = 0.8\rho_d$ ; 4 -  $\rho_{d1} = 0$ ,  $\rho_{d2} = \rho_d$ ).

Такий же вплив на іонну щільність мають наночастинок. Це видно з рис. 2.5, на якому показано аксіальні розподіли густини іонів для складів суміші, вказаних на рис. 2.2. Тут  $n_{a0}$  – концентрація нейтральних атомів на вході.

Таким чином, зі збільшенням частки великих пилових частинок концентрація іонів у центральній частині плазмового струменя зростає. У результаті збільшується потік іонів до пилинок, а отже, збільшується потік енергії на їх поверхні внаслідок рекомбінації.

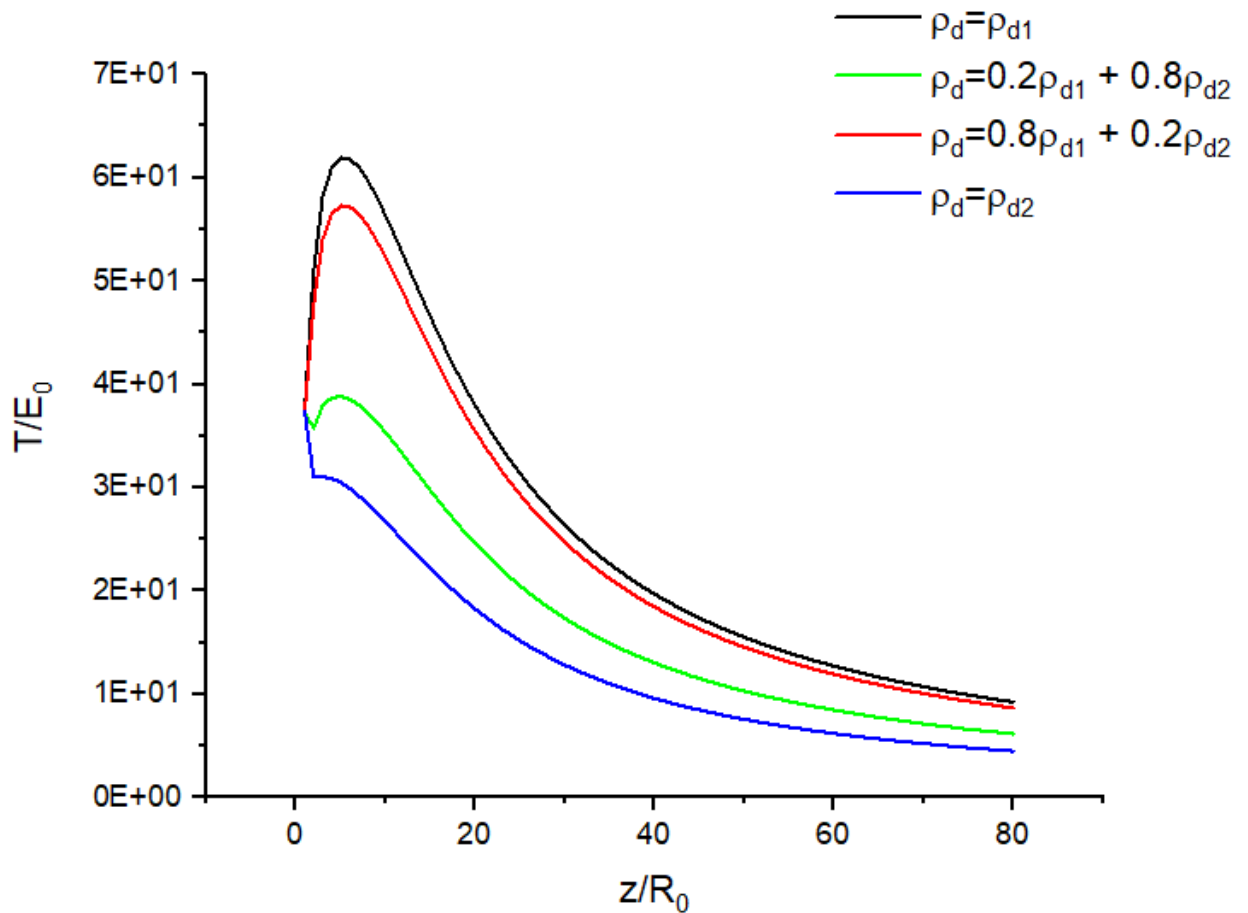


Рис. 2.4. Просторові розподіли температури важкої компоненти плазми вздовж осі струменя при різних співвідношеннях мас пилових частинок різного сорту: 1 -  $\rho_{d1} = \rho_d$ ,  $\rho_{d2} = 0$ ; 2 -  $\rho_{d1} = 0.2\rho_d$ ,  $\rho_{d2} = 0.8\rho_d$ ; 3 -  $\rho_{d1} = 0.8\rho_d$ ,  $\rho_{d2} = 0.2\rho_d$ ; 4 -  $\rho_{d1} = 0$ ,  $\rho_{d2} = \rho_d$ .

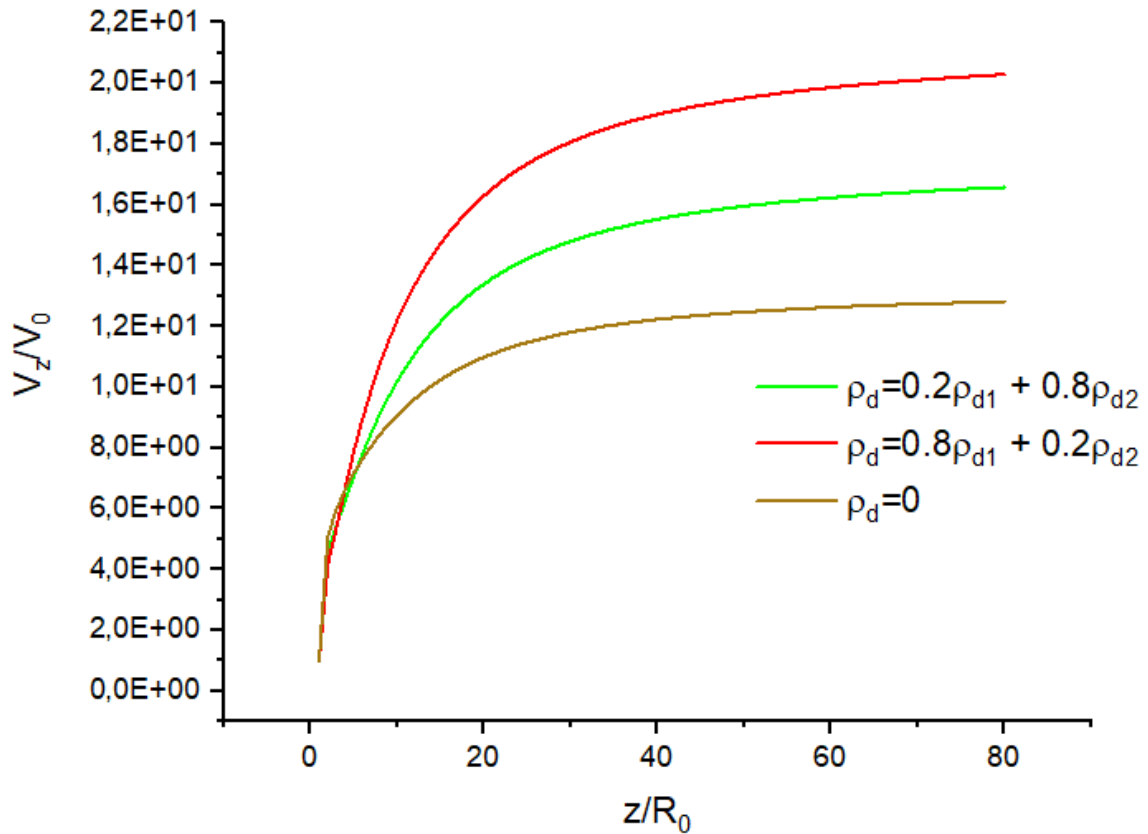


Рис.2.5. Просторові розподіли швидкості плазми вздовж осі струменя при різних співвідношеннях мас пилових частинок різного сорту.

На рисунку 2.5 зображені залежності швидкості потоку плазми від аксіальної координати. З рисунку видно, що у всіх режимах швидкість плазми зростає при збільшенні координати, що пояснюється перетворенням теплової енергії плазми в енергію направленої руху. Тому величина швидкості плазми корелює з температурою. Тобто, у випадку, коли пилова компонента складається з частинок меншого розміру швидкість плазми більше ніж у випадку, коли пилова компонента складається з більших частинок.

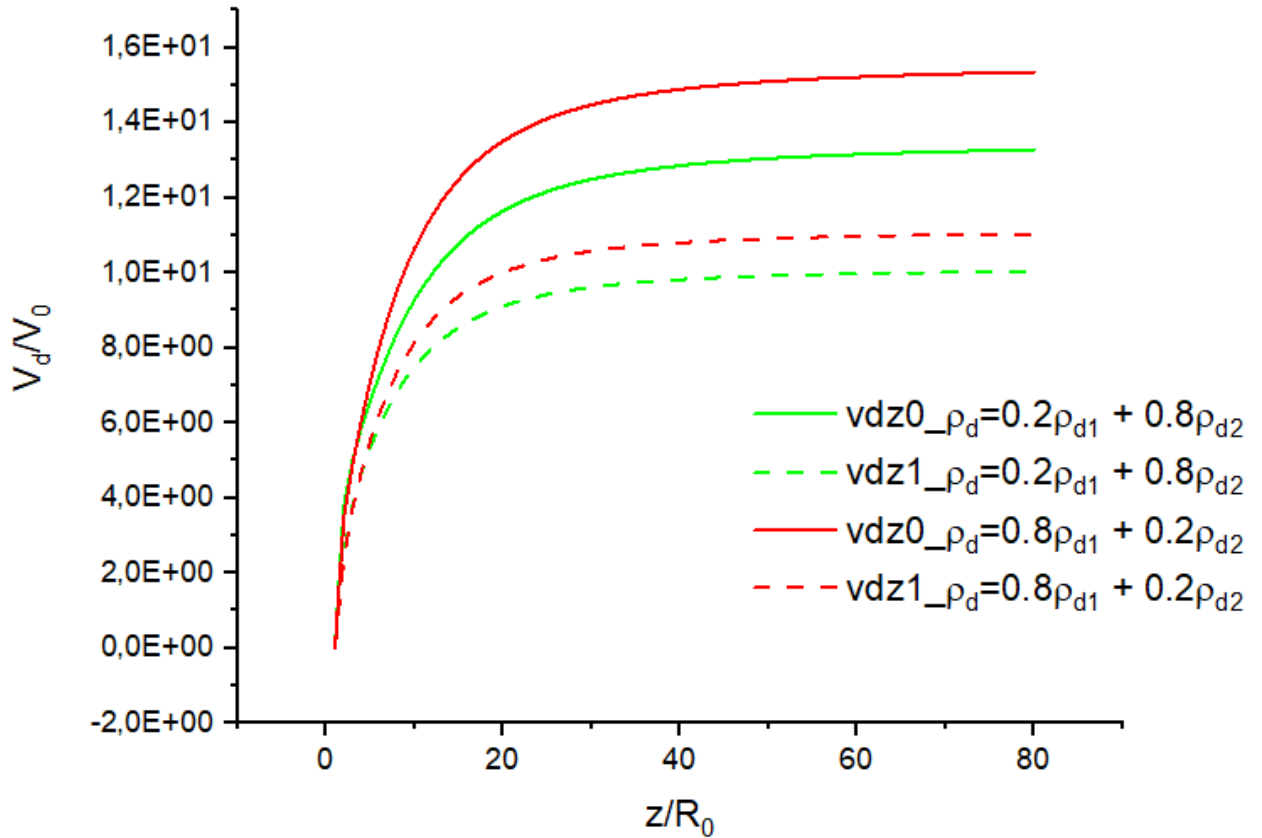


Рис.2.6. Просторові розподіли швидкості пилових частинок вздовж осі струменя при різних співвідношеннях мас пилових частинок різного сорту 1 – швидкість пилинок радіусом 5нм у суміші  $\rho_{d0}^1 = 0.2 \rho_{d0}$ ,  $\rho_{d0}^2 = 0.8\rho_{d0}$ ; 2 – швидкість пилинок радіусом 25нм у суміші  $\rho_{d0}^1 = 0.2 \rho_{d0}$ ,  $\rho_{d0}^2 = 0.8\rho_{d0}$ ; 3 – швидкість пилинок радіусом 5нм у суміші  $\rho_{d0}^1 = 0.8 \rho_{d0}$ ,  $\rho_{d0}^2 = 0.2\rho_{d0}$ , 4 – швидкість пилинок радіусом 25нм у суміші  $\rho_{d0}^1 = 0.8 \rho_{d0}$ ,  $\rho_{d0}^2 = 0.2\rho_{d0}$ .

## Висновки

За допомогою числового моделювання досліджено розширення плазмового струменю низького тиску з наночастинками різних розмірів.

Показано:

1. При збільшенні пропорції великих частинок в пиловій суміші концентрація іонів в при-осьовій області струменю збільшується, що приводить до більшого нагрівання пилинок внаслідок рекомбінації іонів на їх поверхні.
2. Вплив розміру наночастинок на параметри плазмового струменю приводить до того, що при збільшенні частки малих частинок в пиловій суміші температура пилових частинок на осі струменя зменшується, а при збільшенні частки великих пилинок – збільшується.
3. При низьких тисках плазми використання двох-рідинної моделі для пилової компоненти проводить до збільшення температури пилових частинок та, як наслідок, до збільшення швидкості потоку плазми.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Maurer H.R., Kersten H. On the heating of nano- and microparticles in process plasmas 2011. – 7 p
2. Shukla P. K., Mamun A. A. Introduction to dusty plasma physics: chapter 3: Dynamics of dust grains. – Bristol and Philadelphia: IoP, 2001. – 270 p.
3. Northrop T G, Birmingham T J Planet. Space Sci. 1990. – 319 p.
4. Uwe Kortshagen. Nonthermal plasma synthesis of semiconductor nanocrystals / Uwe Kortshagen // J. Phys. D: Appl. Phys. -2009. -V.42. - P.11301-22.
5. Sasaki A. Ionized-cluster beam deposition / Takagi T, Yamada I, Sasaki A. // Journal of Vacuum Science and Technology. – 1975.
6. B. M. Smirnov. Processes involving clusters and small particles in a buffer gas / B. M. Smirnov // UFN, 2011, –V. 181, –Number 7, –p. 713-745.
7. Ozturk A, Cetegen BM (2005) Modeling of axially and transversely injected precursor droplets into a plasma environment. Int J Heat Mass Transf 48:4367–4383
8. O.Yu. Kravchenko, I.S. Maruschak, Dynamics of dust particles in a plasma jet / Problems of atomic science and technology. № 1 – 2017
9. О. М. Белоцерковский, Ю. М. Давыдов Метод крупных частиц в газовой динамике. – М.: Наука, 1982. – 391 с.
10. E Quesnel. Modeling metallic nanoparticle synthesis in a magnetron-based nanocluster source by gas condensation of a sputtered vapor / E Quesnel, E Pauliac-Vaujour, and V Muffato // Journal of Applied Physics 107, –054309 – 2010.