

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 магнетронного розряду в рамках гібридної моделі»

Виконав:

студент 2-го курсу магістратури

денної форми навчання

спеціальності 105 – Прикладна фізика та наноматеріали

ОП «Прикладна фізика та наноматеріали»

Геращенко Сергій Васильович _____

Науковий керівник:

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

Рецензент:

д.ф.-м.н., проф. Денисенко Ігор Борисович _____

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 _____

Київ – 2023

РЕФЕРАТ

Дипломна робота вміщує 49 стор., 24 рис., 27 джерел.

МОДЕЛЬ, ЕЛЕКТРОНИ, ЙОНИ, ПОЛЕ, МАГНІТНЕ, ПЛАЗМА, ЗАРЯД, КОНЦЕНТРАЦІЯ, РІВНЯННЯ, ПОТЕНЦІАЛ, ГІБРИДНА, ШВИДКІ, ПОВІЛЬНІ.

В роботі проведено моделювання магнетронного розряду в рамках одновимірної гібридної моделі. На основі запропонованої моделі створена програма на мові програмування C++ за допомогою якої проведені розрахунки задачі при різних значеннях тиску газу та величини магнітного поля.

Одержані просторові розподіли параметрів концентрації заряджених частинок та потенціалу самоузгодженого електричного поля. Для розрахунку потоків електронів та йонів було використано дрейфово-дифузійне наближення з урахуванням магнітного поля. Досліджено вплив цих параметрів на процес іонізації атомів газу та умови підтримання магнетронного розряду.

Зміст

Вступ.....	4
Розділ 1 Огляд літератури.....	7
1.1 Гібридна модель.....	7
1.2 Результати моделювання.....	11
1.3 Моделювання за допомогою гідродинамічного підходу.....	12
1.4 Результати моделі постійного струму.....	19
1.5 Результати моделі імпульсного струму.....	22
Розділ 2 Модель та методика моделювання.....	27
2.1 Фізична та математична модель.....	27
2.2 Моделювання швидких електронів.....	31
2.3 Моделювання методом Монте-Карло.....	31
2.4 Метод числового моделювання.....	32
Результати.....	36
Висновки.....	46
Використана література.....	47

Вступ

Магнетронне напилення — це метод нанесення тонких плівок на основу за допомогою катодного розпилення матеріалу в плазмі магнетронного розряду. Технологія магнетронного напилення постійного струму довгий час була широко використовувана для нанесення тонких шарів на поверхню матеріалів. Пристрої, які використовувались для виконання процесу магнетронного напилення, отримали назву “магнетронні розпилювачі” або просто “магнетрони”. Магнетрони мають дві ключові переваги.

По-перше, їх легко використовувати для збільшення площі покриття завдяки рівномірності розподілу плазми.

По-друге, швидкість осадження матеріалу вища, ніж при використанні систем радіочастотного розпилення.

Хоча магнетронні системи мають переваги, однак вони також мають помітний недолік — низький коефіцієнт використання матеріалу мішені. Це сталося через поширення Racetrace – локальної ерозії мішені, що виникає внаслідок неоднорідного магнітного поля на катоді.

Тому є важливим контролювати структуру магнетронного розряду не лише навколо катода, але й перед підкладкою.

Для обмеження плазми в області безпосередньо перед катодом, використовується зовнішнє магнітне поле, яке застосовується до розряду. Це дозволяє розряду працювати при тисках до 1 Торр та при напругах, які зазвичай становлять від 250В до 500В. Магнітні пастки можуть забезпечувати високу щільність плазми, і вже десятиліттями магнетрони з різними конфігураціями використовуються в комерційних цілях. Однак, фізичні процеси, які відбуваються під час їх роботи, досі не повністю зрозумілі.

Існує аномальна дифузія поперек магнітних ліній, яку класична теорія дифузії не може пояснити задовільно. Це означає, що застосування класичної теорії до магнетрона з магнітним полем менше 0.1 Т призводить до неправильного висновку про майже відсутність провідності.

Електрони не можуть дістатися до анода, оскільки потрапляють в пастку сильного магнітного поля. Проте, при проведенні експериментів виникають труднощі через те, що найбільш інтенсивна плазма ті відповідні процеси розвиваються в дуже тонкому прикатодному шарі, товщина якого менше 1 мм. Тому інформація, що отримується з зондових вимірювань, може бути менш цікавою через її походження з менш важливої області.

Числове моделювання є потужним інструментом для досягнення поставленої мети. Проте, для отримання адекватних результатів модель має бути самоузгодженою та враховувати всі складові розряду з мінімальною кількістю припущень та спрощень. Дослідження числового моделювання магнетронів проводяться вже протягом багатьох років.

Для точного моделювання магнетронів необхідно враховувати їх специфіку та використовувати розмірність моделі, яка не менша за необхідну. Для циліндричних магнетронів, де магнітне поле можна розглядати як одновимірне (1D) та постійне на більшій частині розряду, 1D самоузгоджена модель дає точні результати [1]. У випадку осесиметричного магнітного поля можна використовувати 2D циліндричний підхід [2]. Необхідно враховувати три складові швидкості в просторі швидкостей для правильного опису динаміки електронів. Опис плазми може бути гідродинамічним або кінетичним, але при застосуванні сильних магнітних полів та низького робочого тиску результати моделювання можуть бути нереалістичними через дуже низькі класичні транспортні коефіцієнти. Ця проблема може бути подолана за допомогою гібридної моделі.

В гібридній моделі, електрони поділяються на дві групи: швидкі та повільні, а іони представлені як рідина. Повільна група електронів також трактується як рідина. Швидкі електрони обробляються окремо з використанням методу Монте-Карло. У класичних гібридних моделях розрядів електрон вважається повільним, якщо його енергія менша за заданий поріг і він знаходиться за межами катодного падіння потенціалу.

Останнє припущення розуміється, що розряд відбувається в присутності позитивного просторового заряду, і якщо електрон перетинає межу прикатодного шару, він не зможе отримати більше енергії.

Метою даної роботи, було створення програми на основі гібридної моделі для моделювання магнетронного розряду та проведення розрахунків параметрів плазми в такому розряді при різних значення магнітного поля та тиску.

Розділ 1 Огляд літератури

1.1 Гібридна модель

Моделювання магнетронного розряду у роботі [3] було проведено за допомогою гібридної моделі.

В гібридній моделі всі електрони поділяються на дві групи : швидкі та повільні. Швидкі електрони — це ті електрони які можуть іонізувати газ $\epsilon \geq \epsilon_{\text{пор}} = 15.6$ еВ. Повільні електрони — це електрони які навпаки, не можуть іонізувати газ, тобто їх енергія менше $\epsilon_{\text{пор}}$. У випадку розряду аргону це буде порогова енергія збудження [3].

Швидкі електрони розглядаються як окремі частинки, оскільки вони перебувають у дуже нерівноважному стані, що обмежує можливість їхнього опису. Їх траєкторії вивчаються від моменту їх появи до моменту зникнення, яке в свою чергу може бути наслідком переходу до групи так званих повільних (об'ємних) електронів або поглинання з електродів. У даному дослідженні фоновим газом є аргон, а енергетична границя, що визначає, до якої з вищезгаданих груп належить електрон, встановлена на рівні 8 еВ. Для кожного електрона на кожному етапі вирішується рівняння руху Ньютона з врахуванням сили Лоренца [3]:

$$F = F_{elec.} + F_{magn} = qE + q(v \times B) \quad (1.1.1)$$

де q — заряд електрона;

E і B — напруженість електричного та магнітного поля;

v — швидкість електрона;

Інформація про електричне поле отримується з гідродинамічного коду, тоді як магнітне поле використовується з [4]. Для числового розв'язання рівнянь руху використовується схема, описана в [5]:

$$m \frac{v_{\text{new}} - v_{\text{old}}}{\Delta t} = F_{\text{old}} \quad \frac{x_{\text{new}} - x_{\text{old}}}{\Delta t} = v_{\text{new}} \quad (1.1.2)$$

яка має другий порядок точності і центрується за часом.

Це дозволяє зберегти стійкість коду при збільшенні значення кроку по часу Δt . Для моделювання зіткнень між електронами та нейтралами використовується метод Монте-Карло, описаний в [6].

На кожному кроці моделювання ймовірність та тип зіткнень визначається з використанням випадкового числа, яке отримано за допомогою методу Монте-Карло, який описаний у [7], та порівнюється з нормованою ймовірністю P_k k -ї події, що дозволяє забезпечити центрування за часом.

$$P_k(\epsilon) = N_{Ar} \sigma_k(\epsilon) \sqrt{\frac{2\epsilon}{m_{e-}}} \Delta t \quad (1.1.3)$$

Тут N_{Ar} – густина (щільність) атомів аргону;

σ_k – це перетин для k -ї події;

m_e – маса електрона;

ϵ — енергія електрона;

Якщо відбувається зіткнення, то для визначення нової швидкості використовуються випадкові числа [8]. У всіх видів розсіювання кут відхилення має значення [9].

$$\chi = \arccos\left(1 - 2 \frac{R}{1 + 8\epsilon(1-R)}\right) \quad (1.1.4)$$

де R – випадкове рівномірно розподілене число в інтервалі $[0,1]$;

$\epsilon = E_e/E_0$, E_e – енергія падаючого електрона;

E_0 – енергія Бора.

У розгляді враховуються зіткнення, які характеризуються пружним розсіюванням, іонізацією та збудженням нейтральних частинок з їх основного стану. Електрони які створились під час іонізації, також простежуються. Коли всі електрони, які вилетіли з катоду та які з'явилися в результаті іонізації, перейдуть в низькоенергетичну групу або зникнуть, код зупиниться. Зазвичай використовують 5000 електронів. Результатом роботи коду є швидкість іонізації, швидкість створення повільних електронів та щільність швидких електронів, які є вхідними значеннями для рівнянь масового балансу для іонів і повільних електронів, а також для рівнянь Пуассона. Розраховані таким чином швидкості

робляться фізично розмірними за допомогою катодного струму. Це може бути значення, виміряне з експерименту [3].

За допомогою гідродинамічної моделі описані повільні електрони та іони. Одне з важливих припущень полягає в тому, що йонний радіус Лармора значно перевищує характерні розміри системи. Однак це не є суттєвим обмеженням, оскільки максимальна напруженість магнітного поля B не перевищує 300 G у більшості розпилювальних систем. Це означає, що йони не відчуватимуть магнітного поля, і рівняння для потоків йонів у дрейфо-дифузійному наближенні мають такий вигляд [3]:

$$\Gamma_r^{Ar^+} = (\mu^{(Ar^+)} n^{(Ar^+)} E_r - D^{(Ar^+)} \frac{\partial n^{(Ar^+)}}{\partial r}) \quad \Gamma_z^{Ar^+} = (\mu^{Ar^+} n^{Ar^+} E_z - D^{Ar^+} \frac{\partial n^{Ar^+}}{\partial z}) \quad (1.1.5)$$

де μ і D – коефіцієнт рухливості та дифузії;

n – концентрація йонів.

Електрони з малим циклотронним радіусом мають обмежений рух в магнітному полі, оскільки вони перебувають в магнітному полі, можуть рухатися лише вздовж ліній поля. Їх поперечний рух можливий лише в результаті зіткнень. Потоки таких електронів визначається за наступною формулою [3]:

$$\Gamma_r^{e^-} = -\frac{\mu_{B=0}^{e^-}}{1+\frac{\omega_z^2}{v^2}} n^{(e^-)} E_r - \frac{D_{B=0}^{e^-}}{1+\frac{\omega_z^2}{v^2}} \frac{\partial n^{(e^-)}}{\partial r} \quad \Gamma_z^{e^-} = -\frac{\mu_{B=0}^{e^-}}{1+\frac{\omega_r^2}{v^2}} n^{(e^-)} E_z - \frac{D_{B=0}^{e^-}}{1+\frac{\omega_r^2}{v^2}} \frac{\partial n^{(e^-)}}{\partial z} \quad (1.1.6)$$

де v та ω — середня частота зіткнень і гіро-частота;

μ та D – рухливість та дифузія електронів за відсутності магнітного поля [3].

Рівняння (1.1.6) було отримане з припущенням, що електричне та магнітне поле перетинаються під кутом, де $E=(E_r, 0, E_z)$ та $B=(B_r, 0, B_z)$, і воно коректне лише для сталих магнітних полів, що паралельні E . Це припущення може біти застосоване до циліндричних магнетронів, але у площинних магнетронах завжди є градієнти в усіх напрямках через кривизну магнітних ліній, і B ніколи не є одновимірним. Незважаючи на це, можна отримати розумні результати для площинних магнетронів, використовуючи зазначені

припущення. Такий підхід дозволяє зберегти форму виразів для потоку, що має місце в немагнітному випадку, але змінюються транспортні коефіцієнти. Для обох видів частинок рівняння неперервності виконуються [3]:

$$\left(\frac{\partial n^{(e-,Ar+)}}{\partial t}\right) + \text{div}\Gamma^{(e-,Ar+)} = R^{(e-,Ar+)} \quad (1.1.7)$$

де R – це швидкість утворення іонів або електронів [3].

З рівняння Пуассона отримуємо електричне поле [3]:

$$\Delta V = -\frac{q}{\epsilon_0}(n^{(Ar+)} - n_{fast}^{e-} - n_{slow}^{e-}) \quad (1.1.8)$$

де V – електричний потенціал;

ϵ_0 — електрична проникність вакууму;

n_{fast}^{e-} та R — приймаються як вхідні данні з коду Монте-Карло.

Рівняння (1.1.5 — 1.1.8) утворюють замкнуту систему для невідомих: $n^{(e-)}$, $n^{(Ar+)}$ і V . Коли V відомий, E обчислюється за формулою $E = -\text{grad } V$.

Початковий код програми базується на методі Монте-Карло і вимагає початкового припущення для електричного поля (E), яке може бути з попереднього запуску або будь-якого фізично обґрунтованого профілю. Часовий крок для Монте-Карло зазвичай складає 10^{-12} секунди. Після першого запуску, отримують концентрації швидких електронів та швидкість утворення швидких електронів та іонів, а потім виконується код для отримання концентрації повільних електронів і іонів, профіль електричного поля та потік іонів на катоді. Останні два значення повертаються як вхідні дані для Монте-Карло, і процес повторюється до досягнення стаціонарного стану. Потім розраховується стаціонарна функція розподілу енергії швидких електронів (ФРЕД). У програмі на кожному кроці часу розв'язуються одночасно рівняння (1.1.6 — 1.1.8) для електронів через їх сильний зв'язок і нелінійність. Як тільки відомо (E), рівняння (1.1.5 і 1.1.7) для іонів розв'язуються за допомогою стандартного алгоритму Томаса. Процес повторюється до досягнення заданої точності.

Результатами програми є концентрація та потоки електронів і іонів, розподіл потенціалу та розподіл електричного поля.

1.2 Результати моделювання

У цьому розділі представлені результати методу розглянутому в статті [3]. У цій роботі були отримані результати чисельного моделювання процесу розряду за певних умов:

- Напруга на катоді — 330В;
- Індукція магнітного поля $B_{\max}=160$ G;
- Анод заземлений;
- Фоновий тиск газу 5 мТорр;
- Температура 300К;
- Розміри циліндра $r=7.5$ см і $z=5$ см;

Розрахункова область була обмежена циліндром зі зазначеними розмірами та зазором між електродами, а початок осі z знаходився на катоді.

Отримані результати добре збігаються з даними з [10], проте при збільшенні індукції магнітного поля потенціал швидко зменшується. Це пов'язано з обмеженнями класичної дифузії в магнітному полі. Якщо використовувати дифузію Бома, то результати будуть дещо кращими. Однак, кращим рішенням є використання мікроскопічного опису, де транспортування може бути оброблений без застосування припущень, і отримані результати будуть більш точними та самоузгодженими. Покращити результат можливо, якщо брати транспортний коефіцієнт не з класичної теорії, а підібрати шляхом аналізу даних [3].

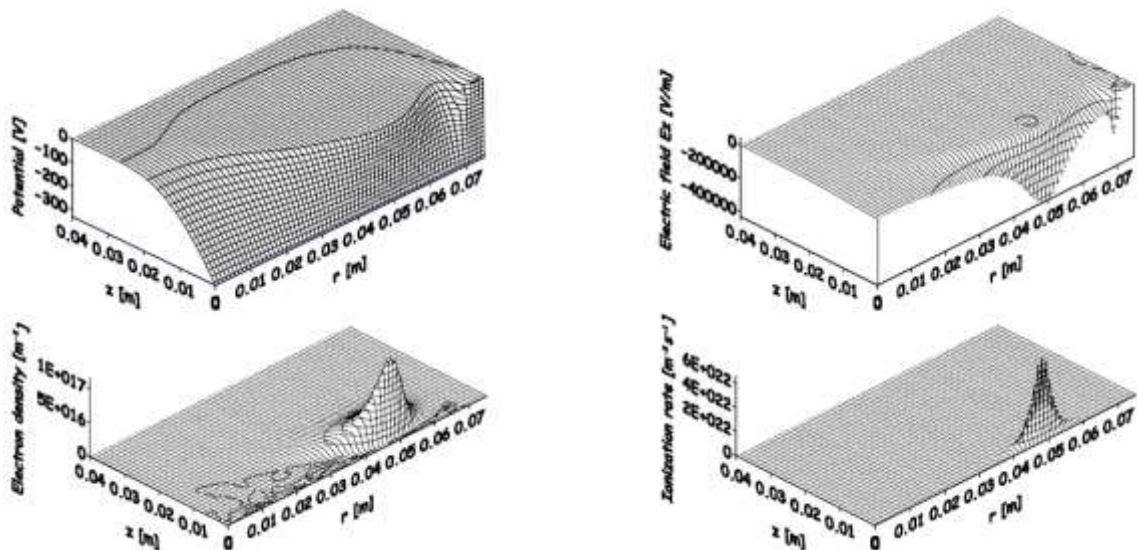


Рис. 1. Потенціал(зліва зверху), аксіальне електричне поле E_z (з права зверху), густина електронів (знизу зліва), величина іонізації (знизу з права) [3].

1.3 Моделювання за допомогою гідродинамічного підходу

В роботі [11] було показано одновимірне моделювання магнетронного розряду за допомогою гідродинамічної моделі.

Рис. 2 показує наближення одномірної циліндрично-симетричної геометрії магнетрону з двовимірними властивостями. Пунктирна лінія відображає одновимірну область, де магнітне поле накладається приблизно перпендикулярно до катоду, над так званою “біговою доріжкою”. Магнітне поле в цій області можна описати залежністю $B(z)$, що залежить від розмірів міжелектродного простору. Насправді в роботі не розглядається вплив сили $\text{grad}B$, так як було показано в [12], що це не сильно впливає на розрахункові параметри плазми. Однак майбутні моделі можуть включати такі ефекти [11].

У моделі магнетрона розглянуто два режими роботи: струм постійної напруги та імпульсний струм. У імпульсному режимі форми напруги змінюються з часом, визначаючи імпульсні частоти 100, 200, 300, 400, та 500 кГц з фіксованим співвідношенням заповнення 50%.

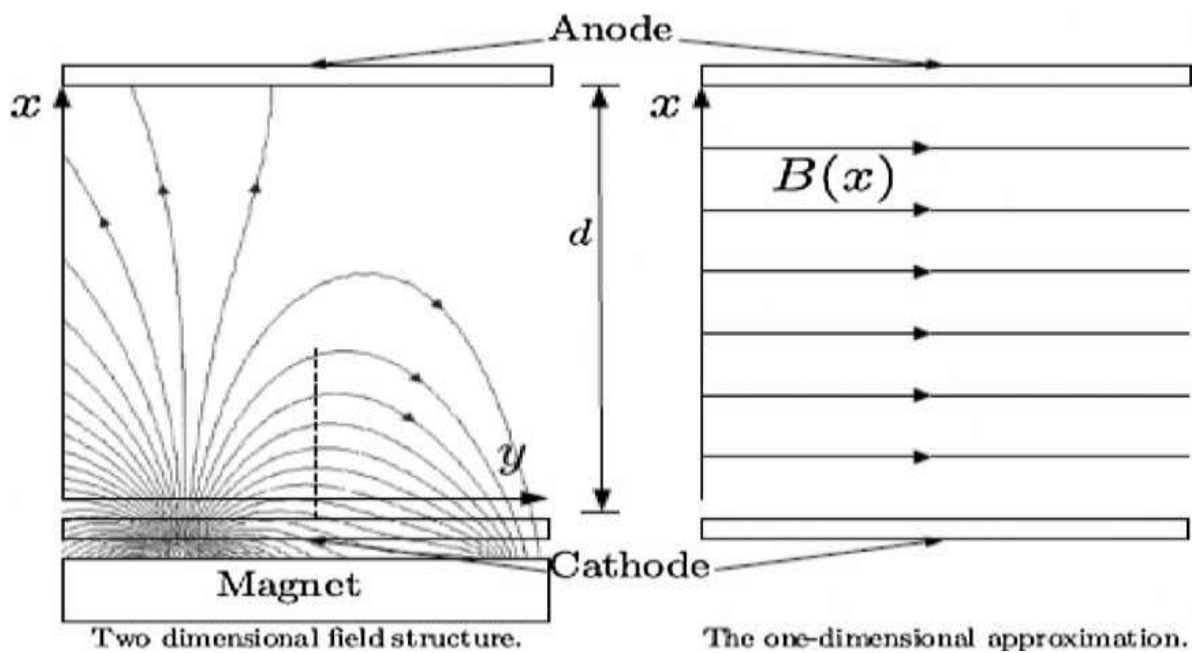


Рис. 2. Магнетрон та геометрія силових ліній магнітного поля плюс його апроксимація [11].

Робочий газ в обох випадках — аргон. У моделі постійного струму тиск був встановлений на рівні $P_N=0.25$ Па, а для імпульсного режиму $P_N=0.65$ Па. Розмір розряду d був різним для обох випадків: для постійного струму він становив $d=0.1$ м, а для імпульсного режиму — $d=0.04$ м (для скорочення обчислень) [11].

У гідродинамічній моделі розглядаються дві рідини — електрони та іони, які взаємодіють у рамках однорідного нейтрального середовища. В рамках гідродинамічної моделі електронний рух описується системою рівнянь для збереження маси, імпульсу та енергії. При цьому іонний рух вважається в тепловій рівновазі з нейтральним фоном, тому система рівнянь для іонної рідини не містить рівняння енергії.

Обчислення розв'язків рівнянь рідини (що будуть визначені нижче) проводяться за умови постійної прикладеної напруженості, яка складає 156 В для режиму постійного струму та 100 В для імпульсного режиму. Щоб досягти цього, на кожному кроці обчислення визначається напруженість, що розсіюється в розряді, і якщо вона не відповідає передбачуваній функції часу, то

потенціал зарядженого електрода змінюється на невелику величину перед наступним кроком обчислення.

Для ефективного моделювання перехідної дифузії в роботі використовується коефіцієнт дифузії Бома, який дозволяє перетворити реальний вимірюваний профіль поля на той, який забезпечує транспортні коефіцієнти, які відповідають дифузії Бома. Емпіричне значення коефіцієнта дифузії Бома можна знайти в [13] :

$$D_B = \frac{T_e}{16B} \quad (1.3.1)$$

Для моделювання переносу електронів вздовж ліній поля в інших низькотемпературних, низькотискових плазмі, таких як галоїдні двигуни [14], також використовується підхід із застосуванням дифузії Бома. Ці розряди також характеризуються дрейфами $E \times B$, подібними до дрейфів у магнетроні [11].

Ми можемо встановити зв'язок між перехресною рухливістю поля та коефіцієнтом дифузії за допомогою співвідношення Ейнштейна:

$$\mu_{\perp} = \frac{D_{\perp}}{T_e} \quad \mu_{\perp} = \frac{1}{16B_R} \quad (1.3.2)$$

У простій моделі, яку використовують, достатньо припустити, що співвідношення Ейнштейна є дійсним, так як це було показано в роботі Гаррігеса [14]. Ми можемо отримати значення рухливості шляхом порівняння класичного опису з описом Бома:

$$\mu_{\perp} = \frac{1}{16B_R} = \frac{m_e v_e}{e B_B^2} \quad (1.3.3)$$

де B_R — справжня напруженість магнітного поля;

B_B — поле, яке відповідає швидкості дифузії Бома [11].

Переставляючи маємо:

$$B_B = \left(\frac{16m_e v_e B_R}{e} \right)^{(1/2)} \quad (1.3.4)$$

На рис. 3 зображені функція та реальний профіль магнітного поля вздовж кільцевої доріжки. У моделі з однією вимірною геометрією використовується рівняння руху рідини, які описані в [15].

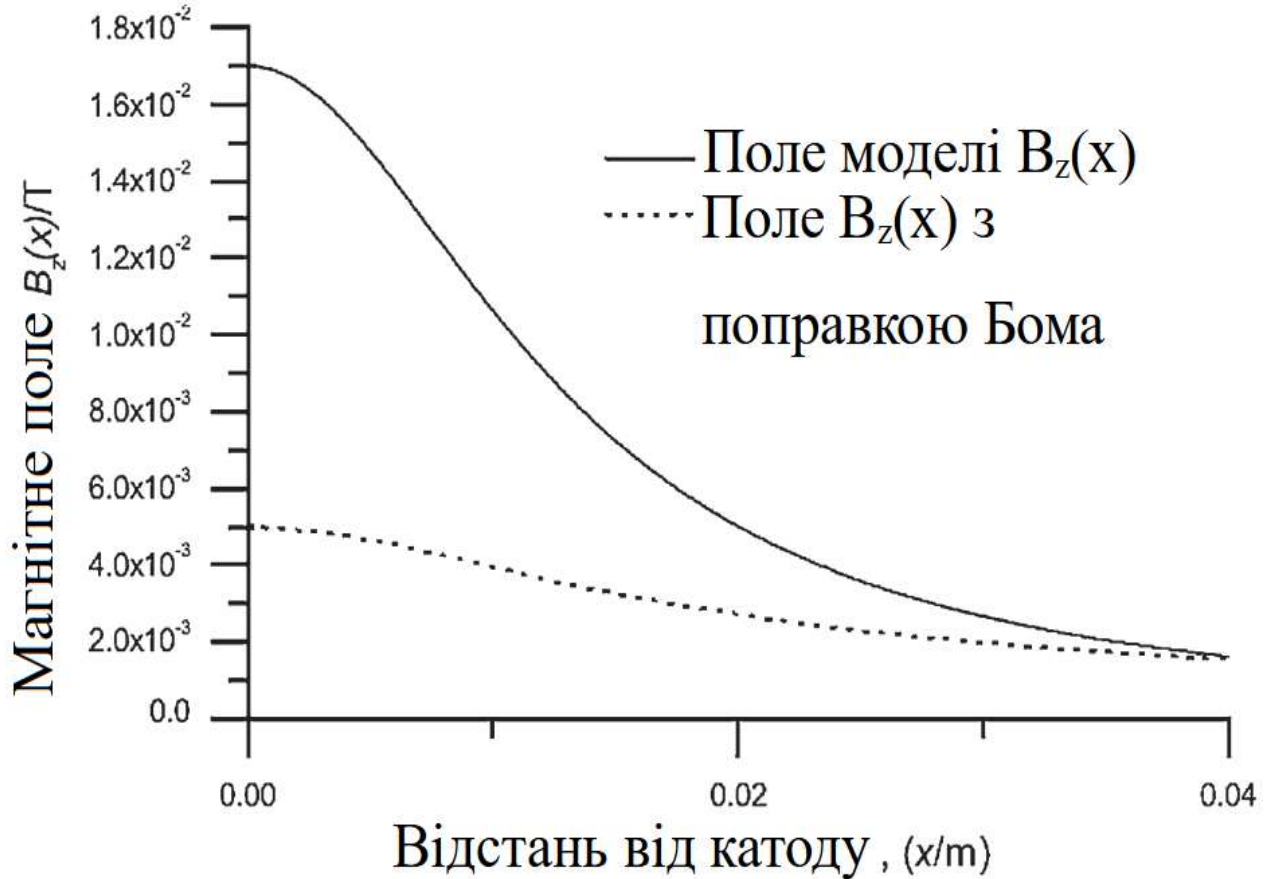


Рис. 3. Вимірний (а потім аналітично змодельований) магнітний полярний компонент V_R та змодифікований еквівалентний тангенціальний компонент магнітного поля V_B за Бомом [15].

Рівняння неперервності для електронів та йонів мають вигляд [11]:

$$\left(\frac{\partial n_e}{\partial t}\right) + \left(\frac{\partial \Gamma_e}{\partial x}\right) = n_e v_{(iz)} \quad (1.3.5)$$

$$\left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right) + \left(\frac{\partial (n_i V)}{\partial x}\right) = n_e v_{(iz)} \quad (1.3.6)$$

Електронний потік та рівняння для руху йонів мають вигляд:

$$\Gamma_e = \mu \left(\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x}\right) - \left(\frac{\partial T_e}{\partial x}\right) \right) n_e - \mu T_e \frac{\partial n_e}{\partial x} \quad (1.3.7)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} - V \frac{\partial V}{\partial x} = \frac{-e}{m_i} \frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{e T_N}{m_i n_i} \frac{\partial n_i}{\partial x} - v_i V \quad (1.3.8)$$

Енергія електронів:

$$\frac{\partial n_T}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_T}{\partial x} = S_T \quad (1.3.9)$$

Енергетичний потік електронів:

$$\Gamma_T = \alpha e T_e \Gamma_e - \frac{5}{2} \mu n_e e T_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \quad (1.3.10)$$

Рівняння Пуассона:

$$\frac{d^2 \Phi}{dx^2} = \frac{e}{\epsilon_0} (n_e - n_i) \quad (1.3.11)$$

де $n_T = \frac{3}{2} n_e e T_e$;

n_e, n_i — електронна та йонна густини,

T_e — температура електронів,

V — швидкість йонів,

Φ — електричний потенціал,

μ — мобільність електронів,

$e T_e$ — загальна енергія електрона,

S_T — величина втрати енергії електронів,

v_{iz} — частота іонізації,

v_i — загальна йонна частота зіткнень.

Інші символи визначаються як:

$$\mu_e = \frac{e}{m_e v_e}$$

$$S_T = e \Gamma_e \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) - n_e e \varepsilon_{(e)} v_{(iz)} - n_e e \varepsilon_{(iz)} v_{(iz)} - n_e e \varepsilon_{(x)} v_{(x)}$$

$$v_e = K_e n_N$$

$$v_{(iz)} = K_{(iz0)} \exp\left(\frac{-\varepsilon_{(iz)}}{T_e}\right) n_N$$

$$v_{(x)} = K_{(x0)} \exp\left(\frac{-\varepsilon_{(x)}}{T_e}\right) n_N$$

$$v_{(i)} = \frac{n_i e^4}{16\pi\epsilon_0^2 m_e^2} \left(\frac{2eT_e}{m_e}\right)^{(-3/2)} + n_N \sigma_i |v|$$

$$\epsilon_e = 2 \frac{m_e}{m_N} T_e$$

де S_T — член втрати енергії джерела електронів;

ν_e — частота зіткнень електронів;

ν_{iz} — частота іонізації;

ν_x — частота непружного збудження;

ν_i — загальна частота зіткнень іонів;

ϵ_e — іонно-нейтральний термін передачі енергії;

Значення константи швидкості електронів [11]: $K_e = 10^{-13} \text{ м}^3\text{с}^{-1}$ було взято із експериментальних результатів, представлених Ліbermanом і Ліхтенбергом [16].

Граничні умови для електронів [11]:

$$\Gamma_{e,BC} = \alpha \mu \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{\partial T_e}{\partial x} \right) n_e - \alpha \mu T_e \frac{\partial n_e}{\partial x} + \frac{1}{4} n_e b \bar{v} - \gamma \Gamma_i \quad (1.3.12)$$

В даній моделі припускається, що межа є абсолютно поглинаючою, і вхідні частинки не впливають на її присутність. На межі швидкості і потік частинок у напрямку виходу повинні дорівнювати нулю. Це означає, що потік електронів не може проходити крізь межу. Для реалізації цього обмеження вводиться логічна змінна “а”:

$$\alpha = \begin{cases} 0, \hat{\beta} \Gamma_e \leq 0 \\ 1, \hat{\beta} \Gamma_e > 0 \end{cases} \quad (1.3.13)$$

Змінна “а” приймає значення 1, якщо потік електронів спрямований до межі, та 0 в іншому випадку. Це дозволяє електронам падати на межу, але не дозволяє їм віддалятися від неї. Змінна $\hat{\beta}$ є одиничним вектором у напрямку потоку електронів, що надходять до межі. Внаслідок випадкового теплового руху електронної рідини на межі виникає ненульовий вхідний потік частинок, який не збалансований потоком, який випромінюється з межі, оскільки вона є повністю поглинаючою. Ньютон [17] кількісно визначає цей потік:

$$\Gamma_{th} = \frac{1}{4} n_e \bar{v} \quad (1.3.14)$$

де \bar{v} — середня теплова швидкість, яка має вигляд:

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8eT}{\pi m}} \quad (1.3.15)$$

Останній член граничної умови враховує потік електронів, який виникає внаслідок вторинної емісії. Для електронів гранична умова базується на рівнянні їх руху, а схожу граничні умови для потоку електронів можна знайти в роботі Nagelaar [18]. У своїй роботі автори не вважають, що межа є повністю поглинаючою для вхідних частинок і вводять коефіцієнт відбиття, щоб врахувати відбиті частинки. Однак було доведено, що рекаптура електронів є важливим явищем у магнетронах, про яке детально розповідається в літературі [19, 20]. У нашому описі руху рідини ми не враховуємо цю можливість.

Nagelaar [18] зазначають, що використана в цій роботі гранична умова містить внутрішні помилки, зокрема щодо розсіювання вторинних електронів до межі. Вони стверджують, що всі електрони, включно з вторинними, дифундують до межі перед електродом, і хоча деякі з них розсіюються назад до межі, більшість прискорюється від електричного поля і віддаляються від електрода [21,22].

У роботі не враховували можливість захоплення електронів, тому підхід до обробки бомбардувальних електронів на катоді перевищує розсіювання вторинних електронів назад до межі. Отже, недооцінка щільності плазми відбувається при переоцінці розсіювання назад та ігнорування відбивання, що фактично зменшує коефіцієнт вторинної емісії приблизно на 20%. Оскільки значення коефіцієнта вторинної емісії, яке використовується в моделі, є приблизним і базується на емпіричних даних, ефекти, пов'язані з відбиванням та розсіюванням, мають бути враховані в майбутніх дослідженнях.

Граничну швидкість йонів можна записати як: [11]:

$$bv^{\tau+1} = v^{\tau} + \beta \bar{v}_i - \delta t \left(V \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{e}{m_i} \frac{d\Phi}{dx} + \frac{eT_N}{m_i n_i} \frac{\partial n_i}{\partial x} + v_i V \right) \quad (1.3.16)$$

$$\bar{v}_i = \sqrt{\frac{8eT_N}{\pi m_i}} \quad b = \begin{cases} 0, \hat{\beta} v^{\tau+1} \leq 0 \\ 1, \hat{\beta} v^{\tau+1} > 0 \end{cases}$$

де $\hat{\beta}$ — одиничний вектор, визначений на кожній межі, спрямований від області моделі до межі. Іонна гранична умова базується на рівнянні імпульсу іона [11]:

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -V \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{e}{m_i} \frac{d\Phi}{dx} - \frac{eT_N}{m_i n_i} \frac{\partial n_i}{\partial x} - v_i V \quad (1.3.17)$$

Іонну граничну умову зручно виразити чисельно у вигляді швидкості іона на межі. Взяття прямої похідної за часом [11]:

$$v^{\tau+1} = v^{\tau} + \delta t \left(-V \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{e}{m_i} \frac{d\Phi}{dx} - \frac{eT_N}{m_i n_i} \frac{\partial n_i}{\partial x} - v_i V \right) \quad (1.3.18)$$

можна визначити швидкість на наступному кроці часу [11].

Якщо існує межа, то швидкість емісії повинна дорівнювати нулю. Для цього використовується булевий перемикач “b”, який приймає значення нуль, якщо вектор $v^{\tau+1}$ направлений від межі, і одиницю, якщо вектор швидкості направлений до межі. Так само, як і для граничної умови транспорту електронів, для граничної умови транспорту йонів використовується подібний підхід; випадковий тепловий потік йонів біля межі створює сумарну швидкість до межі [17]. В умові враховується ця швидкість [11].

1.4 Результати моделі постійного струму

На рис. 4 показано профіль концентрації електронів та йонів [11], при потужності 156 Вт і тиску нейтрального аргону 0,25Па. На рис. 4 бачимо, що розширення оболонки становить приблизно 4мм, що відповідає глибокому потенціалу мішені, близькому до 1400В.

Під час моделювання було отримано добру кількість узгодженості з

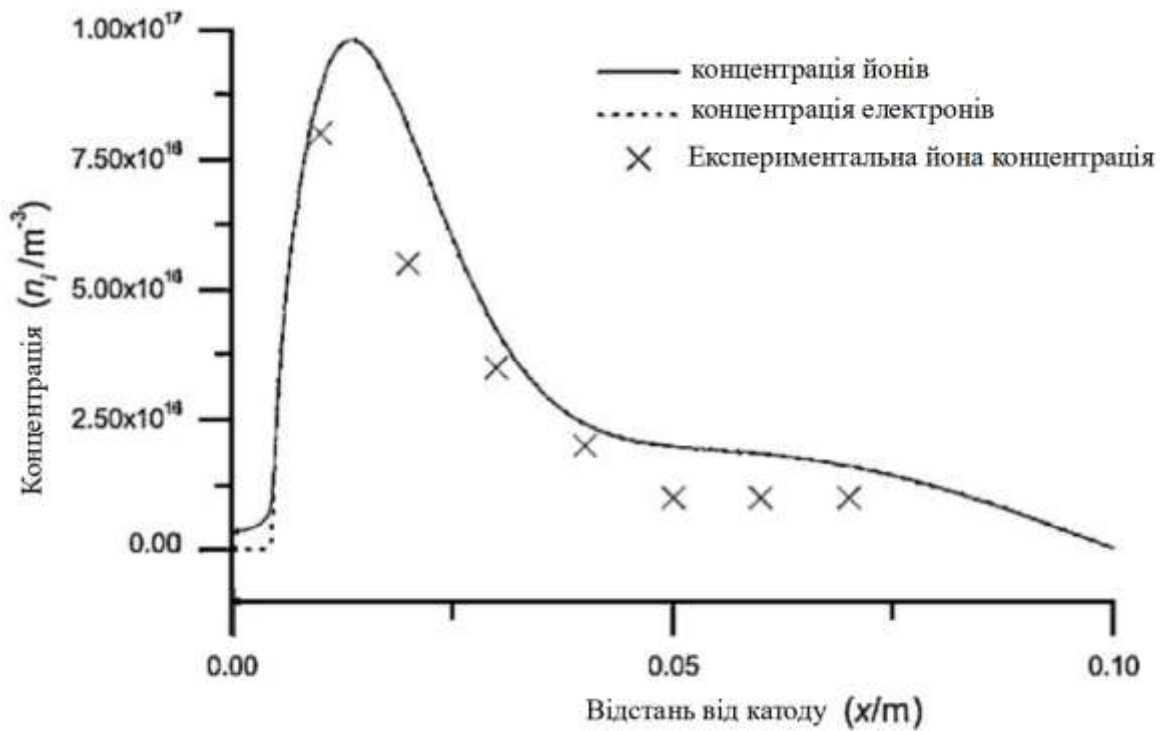


Рис. 4. Електронна та йонна густина в залежності від відстані від катоду [11].

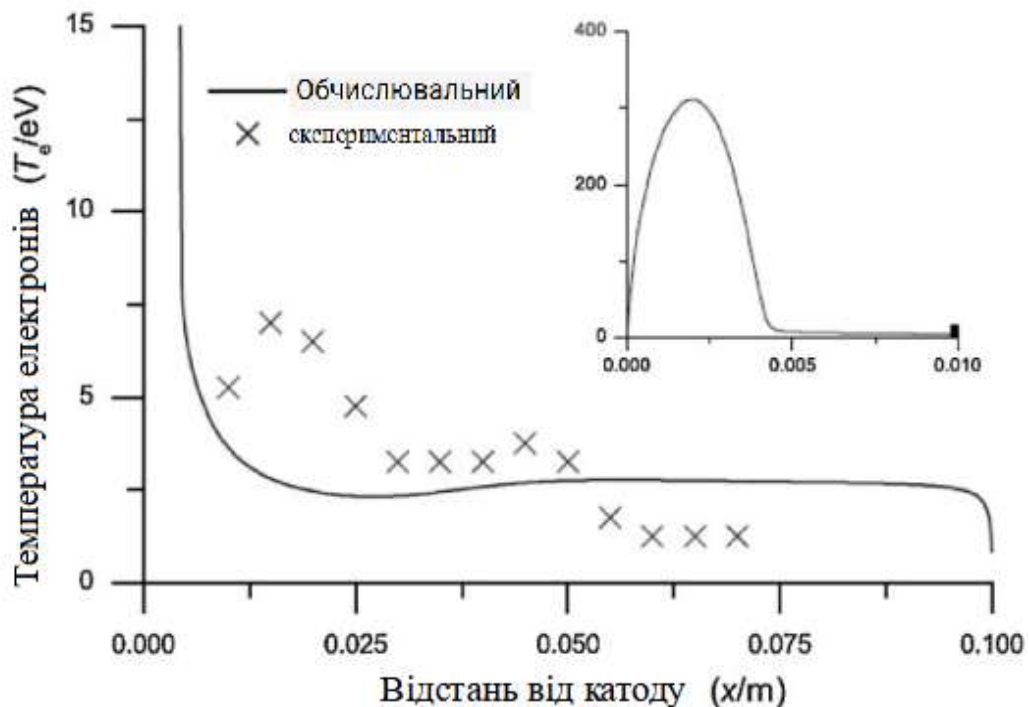


Рис. 5. Температура електронів [11].

експериментом у всіх випадках, за винятком температури електронів T_e у пограничному шарі, де передбачаються надзвичайно високі значення. Це

пов'язано з відсутністю променеподібних електронів у моделі, що можуть бути представлені вторинно прискореними електронами від мішені. Щоб компенсувати це, модель генерує розподіл Максвела з достатньо високоенергетичними електронами що створюють достатньо іонізації. Це призводить до значень T_e що перевищують 300 eV. Крім того в [13] передбачаються високі значення ефективної енергії електронів через обмеження чистого двофлюїдного підходу.

На рис. 6 показано потенціал плазми [11]:

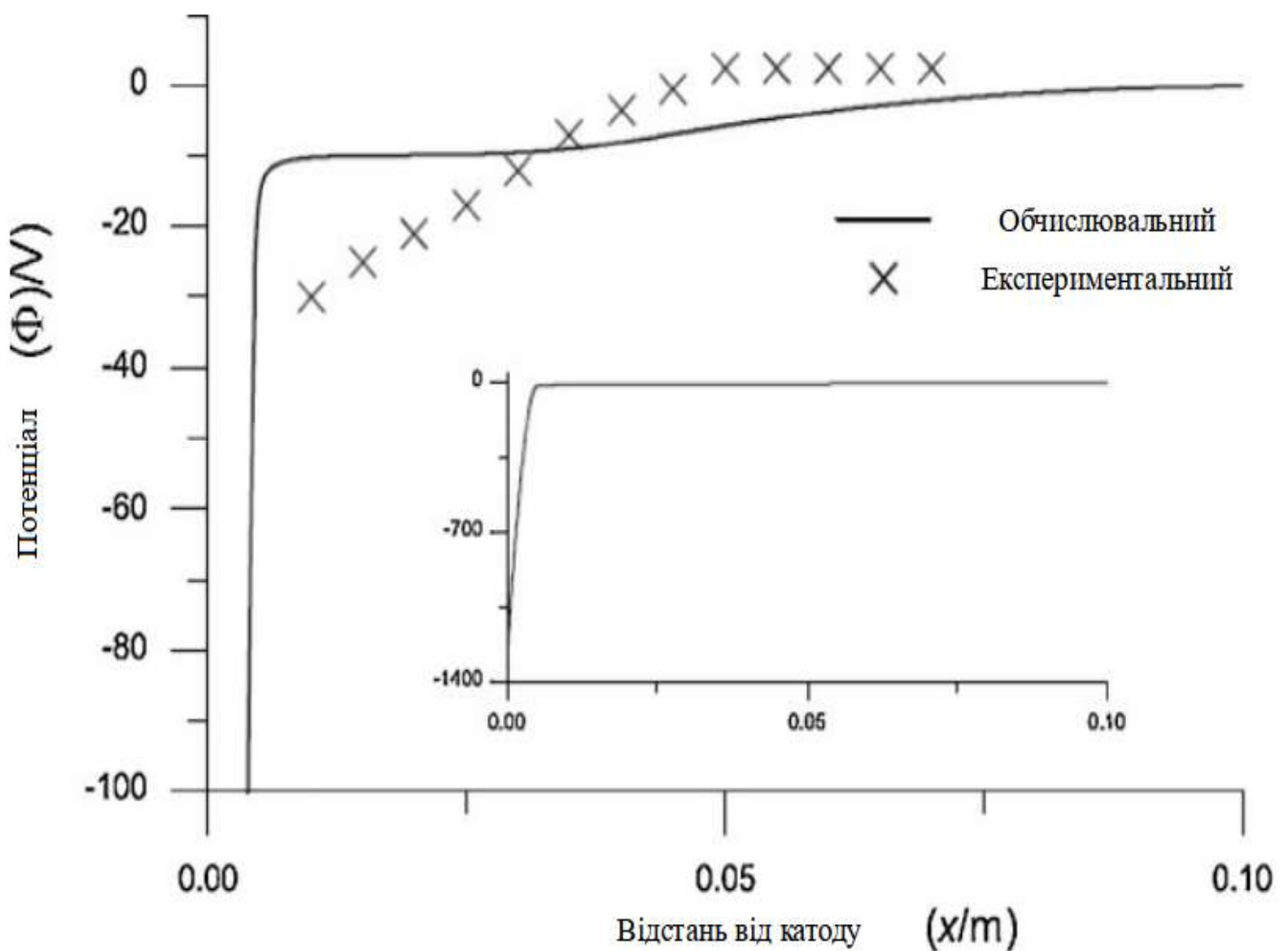


Рис.6. Профіль потенціалу плазми в режимі постійного струму [11].

1.5 Результати моделі імпульсного струму

В імпульсному режимі динамічна рівновага досягається приблизно після 300 циклів імпульсу. Для представлених тут результатів потрібен був часовий крок $dt=2.5 \cdot 10^{-12}$ с (для порівнянь з постійним струмом $dt=2 \cdot 10^{-11}$ с), необхідний просторовий крок був $dx=2.5 \cdot 10^{-5}$ м (порівняно з постійним струмом $dx=1 \cdot 10^{-4}$ м). Як і в режимі постійного струму, імпульсний режим має дві зміни P_{on} і P_{off} . На кожному кроці часу потенціал електрода, що живиться, регулюється, поки не буде досягнуто відповідної потужності [11].

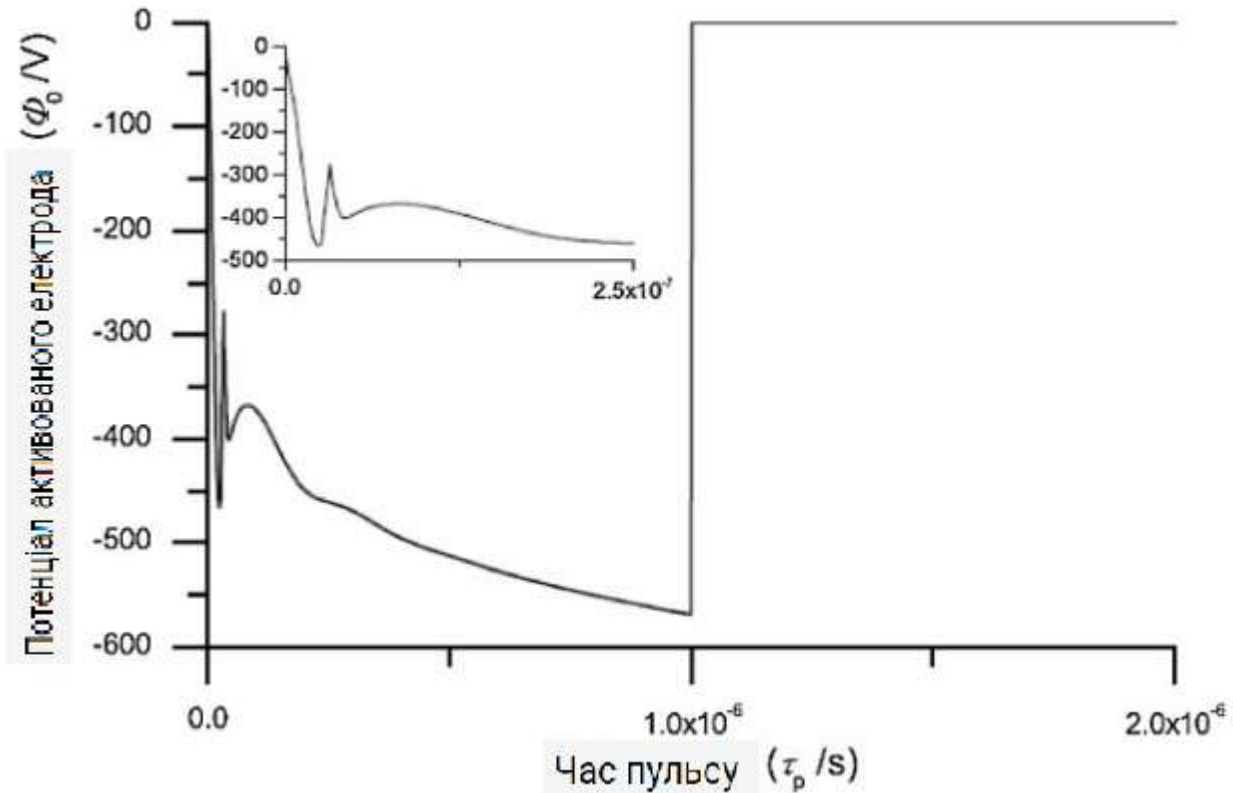


Рис. 7. Потенціал катода для пульсації 500 кГц при 50% робочому циклі [11].

На рис. 7 показано потенціал живлення електрода (катодна мішень) для пульсації 500 кГц із загальною прикладеною потужністю 100Вт і тиском 0.65 Па. Нерівномірність у формі сигналу напруги на початку «ввімкнення» є наслідком методу підтримки регулювання потужності та не накладається явно.

Зокрема, це відбувається через те, що потенціал електрода намагається узгодити струм розряду (який змінюється в часі) відповідно до потенціалу на етапі $t + 1$, який визначається струмом на етапі $t - 1$ [11].

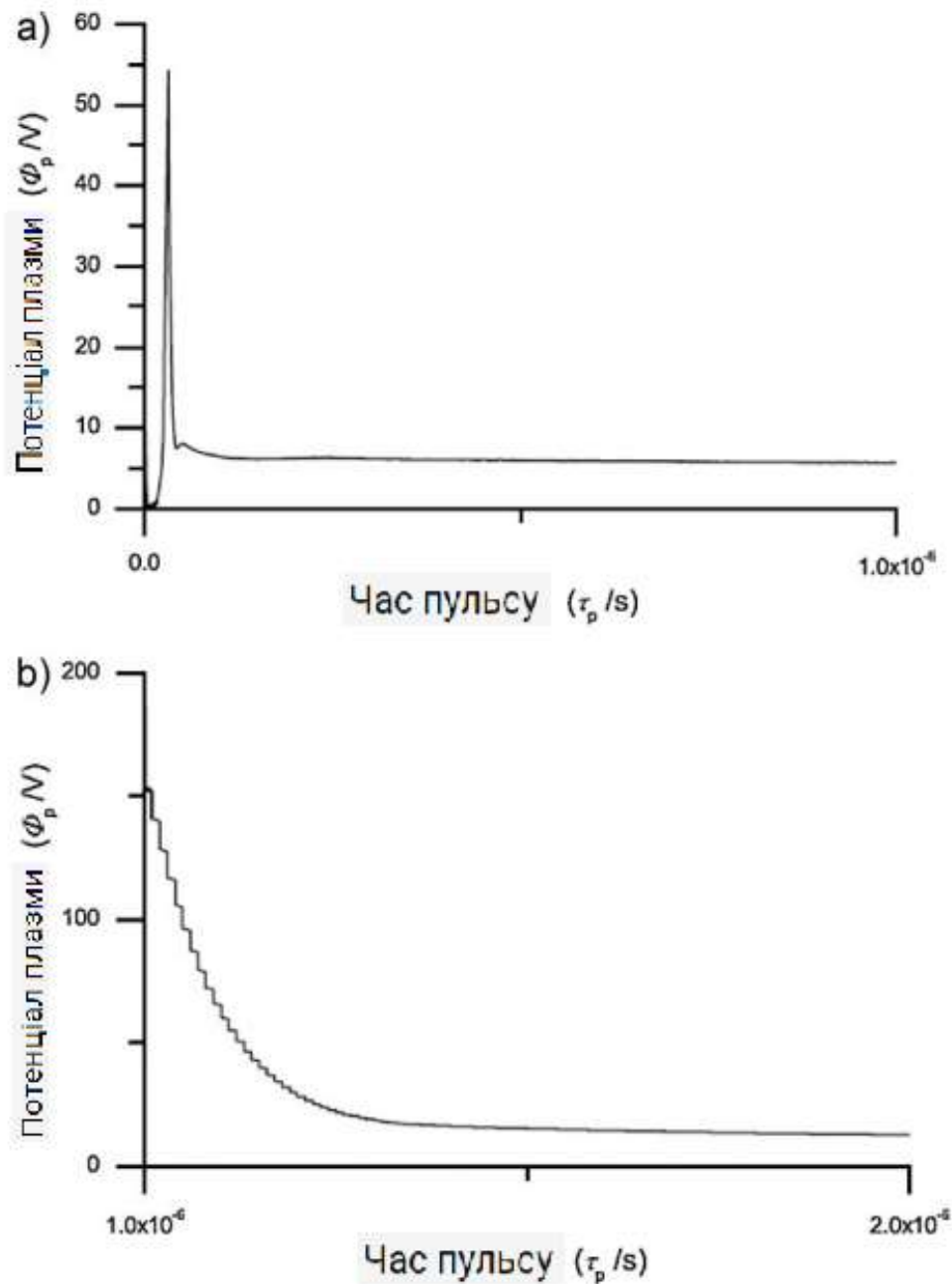


Рис. 8. Потенціал плазми (при найбільш позитивному потенціалі в плазмі) від часу під час імпульсу [розділений на графіки часу ввімкнення (a) і часу вимкнення (b)] для пульсації 500 кГц із робочим циклом 50% [11].

На малюнку 8 (а і b) показані прогнози для потенціалу плазми (найбільш позитивного потенціалу в системі) як функція часу протягом циклу. Цікаво, що пікові значення 60 і 150 В спостерігаються на початку часу ввімкнення та вимкнення відповідно. Схоже, що ці піки визначаються не напругою розряду, самою формою сигналу, а радше перерозподілом просторового заряду під час змін напруги катода [11].

Просторові розподіли потенціалу плазми в трьох різних частинах періоду імпульсу показані на рис. 9 — рис. 11 для пульсації 500кГц. Це на початку часу вимкнення в середині “часу ввімкнення” та середина “часу вимкнення” відповідно [11].

Під час перевищення потенціалу на початку часу вимкнення електричне поле змінюється (див. Рис. 9) поблизу катода [11].

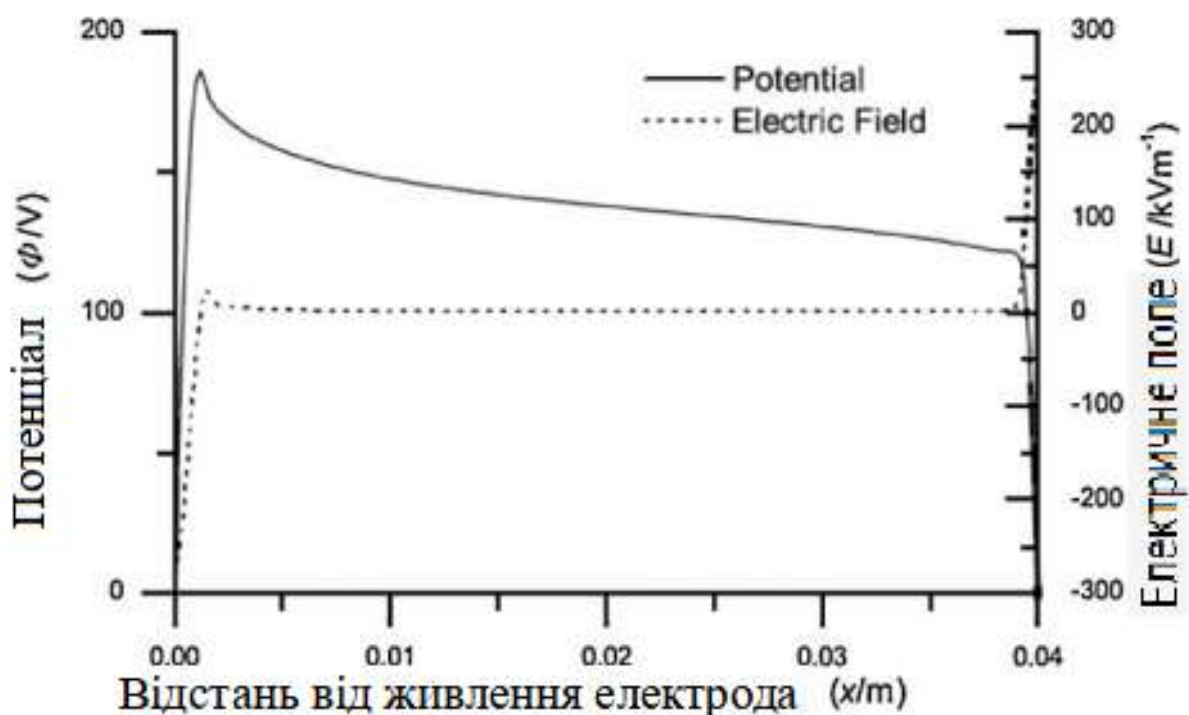


Рис. 9. Просторова зміна потенціалу плазми протягом початкової стадії часу вимкнення (перші 50 нс під час перевищення напруги — див. рис. 8), пульсація 500 кГц при 50% робочому циклі [11].

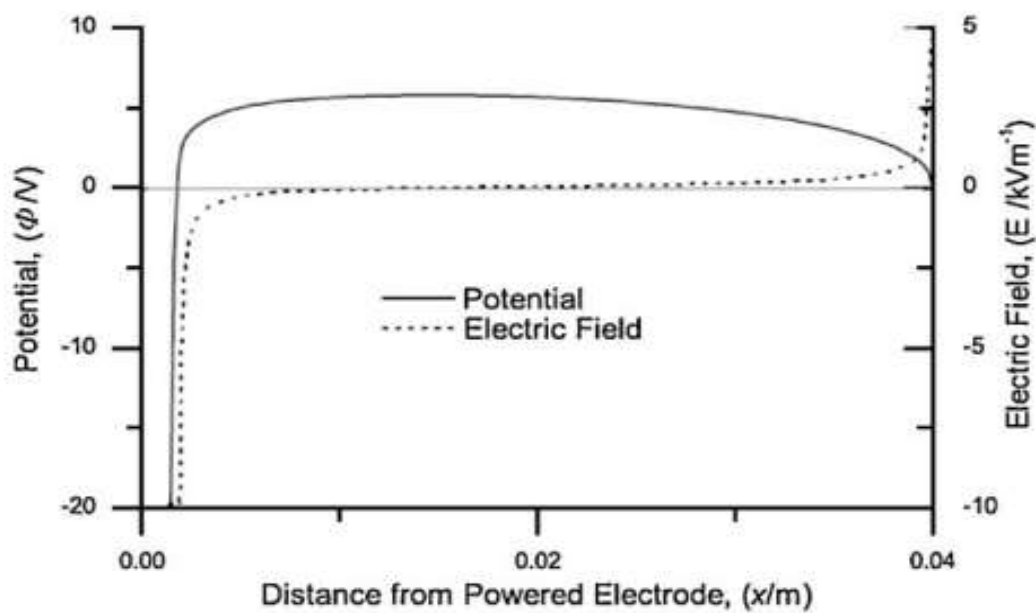


Рис. 10. Просторова зміна потенціалу плазми в середній точці часу включення, пульсація 500 кГц при робочому циклі 50% [11].

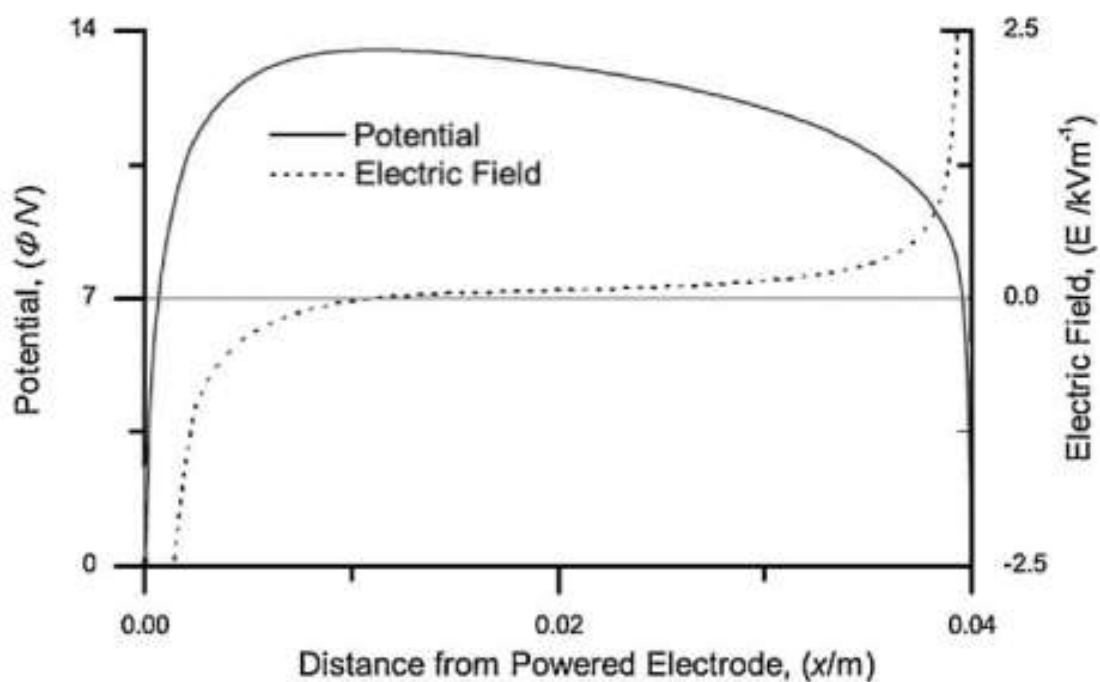


Рис. 11. Просторова зміна потенціалу плазми в середній точці часу вимкнення, пульсація 500 кГц при робочому циклі 50% [11].

Цей тип явищ спостерігався експериментально Vetushka та ін. [23], але він був пов'язаний із високим коливанням позитивного потенціалу катода протягом цього періоду (кілька сотень вольт), що тимчасово підтягує потенціал плазми. Однак тут таке коливання катодного потенціалу не накладається на модель, тому механізми між моделлю та спостереженням повинні відрізнятися. Протягом часу вимкнення (рис. 11) модель передбачає електричний колапс, як повідомляється в посиланні [23].

Розділ 2 Модель та методика моделювання

2.1 Фізична та математична модель

Розглядається розряд, який збуджується між анодом та катодом на відстані 3 см ($L=3$ см), використовуючи газ аргону при тиску $p=1$ Торр. Початкові значення концентрацій електронів та іонів встановлені на рівні $n_i=n_e=10^{16}$ м⁻³. Дослідження проводиться при наступному магнітному полі: $B = B_0 * \exp(-\frac{x*x}{0.005})$ (де B_0 — початкове значення магнітного поля, x — координата по простору) в діапазоні $B_0=0.05-0.02$ Тл;

Геометрія силових ліній магнетрона та їх апроксимація показана на рис. 12 [11]. На малюнку зображена пунктирна лінія, що представляє 1D область з майже паралельним до катоду магнітним полем $B(z)$, що залежить від лише аксіальної координати z . Для вирішення цієї задачі використовується гібридна модель [1], яка складається з двох частин — гідродинамічної та кінетичної.

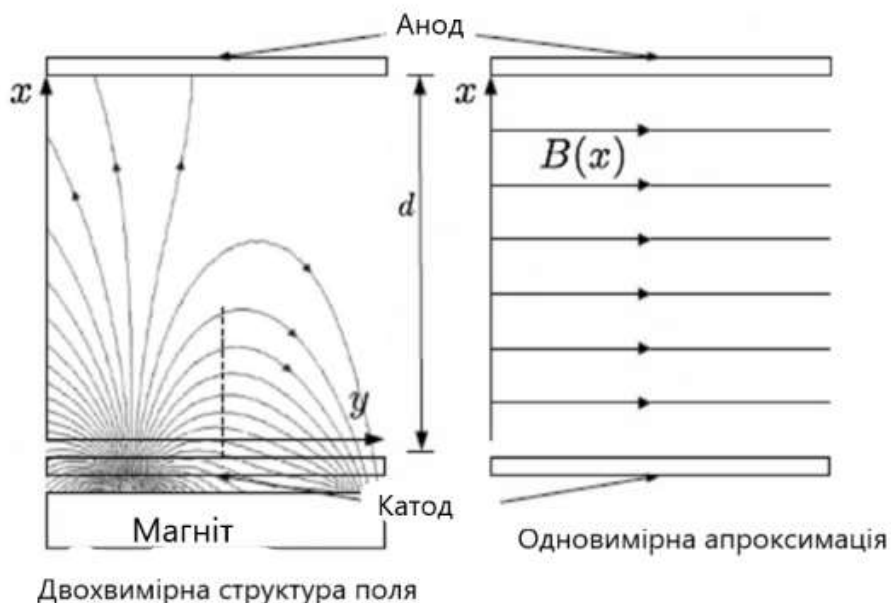


Рис. 12. Геометрія силових ліній магнетрона та їх апроксимація [11].

Згідно гібридної моделі, електрони поділяються на дві категорії: швидкі та повільні. Швидкі електрони мають достатню енергію, щоб іонізувати газ, їх

повна енергія складається з кінетичної та потенціальної енергій і дорівнює або перевищує критичну енергію іонізації $\epsilon_{\text{пор}}$, яка для газу аргону дорівнює 15,6 електронвольт. З іншого боку, повільні електрони не мають достатньої енергії, щоб іонізувати газ, їх енергія менша за $\epsilon_{\text{пор}}$.

Іони та електрони (повільні) описуються рівняннями неперервності:

$$\left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right) + \frac{\partial \Phi_i}{\partial x} = R_i \quad (2.1.1)$$

$$\left(\frac{\partial n_e}{\partial t}\right) + \frac{\partial \Phi_e}{\partial x} = R_e \quad (2.1.2)$$

А потенціал електричного поля описується рівнянням Пуассона:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{e}{\epsilon_0} (n_i - n_{es} - n_{ef}) \quad (2.1.3)$$

де n_i — концентрація іонів

n_{es} — концентрація повільних електронів

n_{ef} — концентрація швидких електронів.

Для розрахунку швидкостей іонізації R_e та R_i використовується кінетична частина гібридної моделі, яка базується на методі Монте-Карло.

Окрім того, потоки електронів та іонів визначаються за допомогою дрейфово-дифузійного наближення та записуються у відповідних формулах:

$$\Phi_e = -n_e \mu_e E - D_e \frac{\partial n_e}{\partial x}; \quad (2.1.4)$$

$$\Phi_i = n_i \mu_i E - D_i \frac{\partial n_i}{\partial x}. \quad (2.1.5)$$

Тут $\mu_e = \frac{q}{m_e v_e} \frac{1}{1 + \frac{w_e^2}{v_e^2}}$, $\mu_i = \frac{q}{m_i v_i}$ — мобільність електронів та йонів відповідно, а

$D_e = \frac{\mu_{B=0} k T_e}{1 + \frac{w_e^2}{v_e^2}}$, $D_i = \frac{\mu_i k T_i}{q}$ — коефіцієнт дифузії електронів і йонів.

В нашому випадку Ларморівський радіус йонів значно більший за розміри області моделювання, тому йони в нас не замагнічені.

Для опису швидких електронів використовується кінетична модель, та їх траєкторії фіксуються від моменту інжекції з катоду до зникнення. У даному

випадку це може бути перехід до низькоенергетичної групи електронів або поглинання на електродах. Під час руху електрона на нього діє електрична сила та сила Лоренца.

$$F = F_{elec.} + F_{magn} = qE + q(v \times B) \quad (2.1.6)$$

а зміна координати та швидкості описується рівнянням Ньютона:

$$\left(\frac{dx_i}{dt}\right) = v_{(xi)} \quad (2.1.7)$$

$$\frac{dv_{(xi)}}{dt} = \frac{q}{m} (v_{(yi)}B + E) \quad (2.1.8)$$

$$\frac{dv_{(yi)}}{dt} = -\frac{q}{m_e} v_{(xi)}B \quad (2.1.9)$$

Для розв'язання рівнянь неперервності (2.1.10, 2.1.12) для заряджених частинок та рівняння Пуассона (2.1.13) для електричного поля використовується самоузгоджена неявна інтеграційна схема, що забезпечує ефективність обчислень.

$$\left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right) + \frac{\partial \Phi_i}{\partial x} = R_i \quad (2.1.10)$$

$$\left(\frac{\partial n_e}{\partial t}\right) + \frac{\partial \Phi_e}{\partial x} = R_e \quad (2.1.12)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{e}{\epsilon_0} (n_i - n_{es} - n_{ef}) \quad (2.1.13)$$

Явні методи розв'язання рівнянь Пуассона та неперервності не враховують зміни електричного поля, що виникають під час руху заряджених частинок. Тому для точності результатів необхідно використовувати менший крок інтегрування за часом :

$$\mathfrak{J}_d = \frac{\epsilon_0}{e(n_e \mu_e + n_i \mu_i)} = \frac{\epsilon_0}{e(n_e \mu_e)} \quad (2.1.14)$$

Використання явних методів для відстеження еволюції плазми високої щільності в тривалих часових масштабах непрактично, оскільки вони не враховують змін електричного поля під час руху заряджених частинок. Тому необхідно використовувати неявну техніку для розв'язання рівнянь неперервності і Пуассона з задовільною точністю.

Однак, це обмежує крок інтегрування за часом, який повинен бути меншим:

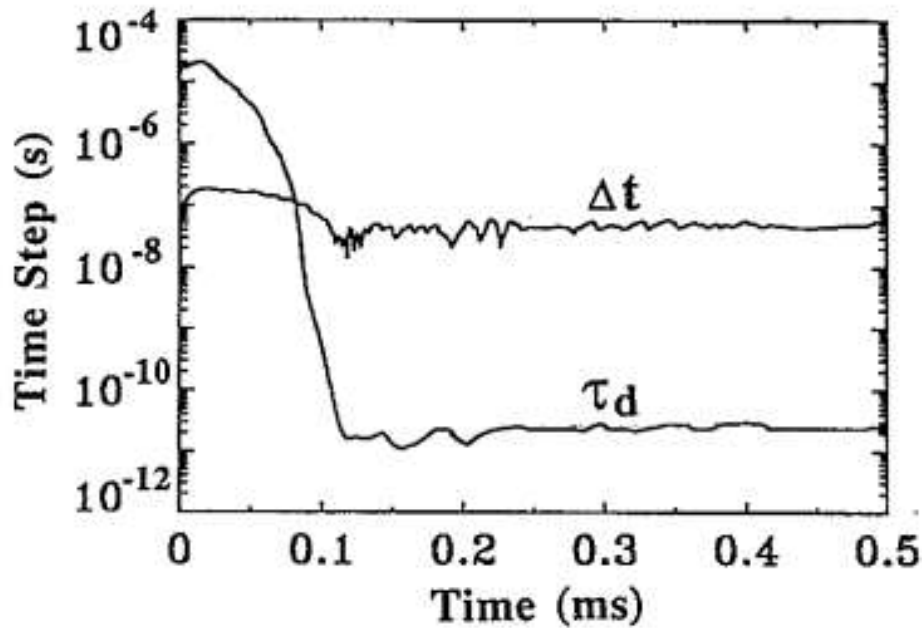


Рис. 13. Часовий крок Δt з порівнянням τ_d [27].

На рис. 13 порівнюється крок інтегрування з часом діелектричної релаксації. На ранніх етапах розряду густина електронів ще низька, тому час діелектричної релаксації досить великий. Проте з розвитком розряду густина електронів зростає, тому час діелектричної релаксації зменшується.

Тим не менш, крок інтегрування залишається приблизно 10 нс на протязі всього розряду. Це зумовлено необхідністю кількох ітерацій Ньютона для досягнення збіжності розв'язку за кожен крок.

Оскільки час амбіполярної дифузії, необхідний для досягнення стаціонарного стану, є порядку 10^{-4} до 10^{-3} сек, довший час інтегрування в неявній методиці трохи компенсується.

2.2 Моделювання швидких електронів

Для знаходження числового розв'язку системи рівнянь (2.1.7-2.1.9) використовується метод скінченних різниць. При цьому рівняння наближено розв'язуються з використанням різницевих аналогів на часовій сітці:

$$\frac{(v_{xi}^{n+1/2}) - (v_{xi}^{n-1/2})}{\Delta t} = \frac{q}{m_e} (v_{xi}^n B + E(x_i^n))$$

$$\frac{(v_{yi}^{n+1/2}) - (v_{yi}^{n-1/2})}{\Delta t} = -\frac{q}{m_e} v_{yi}^n B$$

$$\frac{(x_i^{n+1}) - x_i^n}{\Delta t} = v_{xi}^{n+1/2}$$

У цій моделі ми використовуємо одновимірну координату для опису руху електрона, але для правильного визначення обертання навколо магнітних силових ліній потрібно мати дві координати швидкості.

Наша модель дозволяє швидким електронам приймати участь в кількох елементарних процесах, які включають пружне розсіяння, збудження та іонізацію атомів аргону через електронний удар. Моделювання цих процесів здійснюється з використанням методу Монте-Карло [26].

2.3 Моделювання методом Монте-Карло

Якщо електричне поле є одновимірним, траєкторії електронів можна знайти аналітично, якщо між двома точками сітки поле є постійним або лінійно змінним. Але у двовимірному електричному полі траєкторії електронів потрібно обчислювати чисельно. В цілому, алгоритм моделювання ґрунтується на роботі Бефа і Марода [24], тоді як зв'язок із рівняннями рідини описаний Бефом і Пітчфордом [25] і підсумований нижче.

Крок інтегрування часу в рівняннях рідини обраний досить малим, щоб забезпечити мінімальну зміну вихідного члена через еволюцію поля між двома послідовними кроками часу в моделі рідини. Тому джерело іонізації

оновлюється за допомогою методу молекулярної динаміки (МС) лише після певної кількості часових кроків в інтегруванні рівнянь рідини, зазвичай декількох сотень. Член джерела іонізації між двома послідовними викликами МС перераховується після кожного кроку часу інтегрування в рівняннях рідини згідно з визначеними правилами.

$$S(r, t + \Delta t) = S(r, t) \frac{F(t+\Delta t)}{F(t)} \quad (2.3.1)$$

де $F(t)$ — кількість емітованих катодом електронів за одиницю часу, а Δt — крок інтегрування за часом у рівняннях рідини.

Під час розв'язання рівнянь рідини, ми враховуємо зміни струму електронів, які виходять з катоду, між двома послідовними часовими кроками t і $t + \Delta t$. Це дозволяє зменшити час обчислень, не впливаючи на стаціонарну поведінку системи. Важливим фактором у всіх симуляціях Монте-Карло є статистика. Нам потрібно забезпечити належний компроміс між статистичною точністю і часом обчислень, ефективно використовуючи інформацію, яка доступна в моделі.

Ми обчислюємо джерело іонізації як суму інтегралів по траєкторіях кожного електрона залежно від енергії частоти іонізації. Якщо належним чином нормалізувати струм електронів, що виходить з катода, то джерело іонізації може бути виражено в одиницях на кубічний сантиметр за секунду. Хоча можна визначити джерело іонізації з двовимірної гістограми подій іонізації, це не дає максимальних переваг інформації, яка доступна в числових траєкторіях, і, отже, цей підхід є менш точним за той самий час обчислення.

2.4 Метод числового моделювання

Для моделювання рівняння неперервності та Пуассона, розіб'ємо область між катодом та анодом сіткою яка має крок Δx (x_i , $I=0\dots N$ — вузли сітки).

Різницевий аналог рівняння (2.1.3) має вигляд :

для точок $i=2\dots N-1$:
$$\frac{\psi_{i+1}-2\psi_i+\psi_{i-1}}{\Delta x^2} = \frac{-e(n_i-n_e)i}{\epsilon_0}$$

$$\text{для точки } i=1 : 4 \frac{\psi_2}{3\Delta x^2} - \frac{4\psi_1}{\Delta x^2} + \frac{8\psi_0}{3\Delta x^2} = \frac{-e(n_i - n_e)_1}{\varepsilon_0}$$

$$\text{для точки } i=N : \frac{8\psi_2}{3\Delta x^2} - \frac{4\psi_1}{\Delta x^2} + \frac{4\psi_0}{3\Delta x^2} = \frac{-e(n_i - n_e)_N}{\varepsilon_0}$$

В загальному вигляді ці рівняння можна представити у наступному вигляді :

$$A_i \Psi_{i+1} + B_i \Psi_i + C_i \Psi_{i-1} = D_i$$

Коефіцієнти А, В, С, D, мають наступні значення:

$$\text{для } i=2 \dots N-1 : A_i = \frac{1}{\Delta x^2}, B_i = \frac{2}{\Delta x^2}, C_i = \frac{1}{\Delta x^2}, D_i = -\frac{e \cdot n_i}{\varepsilon_0}.$$

$$\text{для } i=1 : A_i = \frac{4}{3\Delta x^2}, B_i = \frac{4}{\Delta x^2}, C_i = \frac{8}{3\Delta x^2}, D_i = -\frac{e \cdot n_i}{\varepsilon_0}.$$

$$\text{для } i=N : A_i = \frac{8}{3\Delta x^2}, B_i = \frac{4}{\Delta x^2}, C_i = \frac{4}{3\Delta x^2}, D_i = -\frac{e \cdot n_i}{\varepsilon_0}.$$

За допомогою методу прогонки знаходимо значення потенціалу:

$$\psi_i = \alpha_{i+1} \psi_{i+1} + \beta_{i+1} \quad (2.4.1)$$

Для цього потрібно знати такі значення: Ψ_{N+1} , α_{N+1} , β_{N+1} .

З граничних умов випливає, що $\Psi_0 = -300\text{В}$, $\Psi_{N+1} = 0\text{В}$. Для знаходження α_i та β_i використовуємо наступні формули:

$$\alpha_{i+1} = \frac{A_i}{B_i - \alpha_i C_i} \quad (2.4.2)$$

$$\beta_{i+1} = \frac{C_i \beta_i - D_i}{B_i - \alpha_i C_i} \quad (2.4.3)$$

Також з граничних умов визначаємо початкові значення $\alpha_1 = 0$, $\beta_1 = -300$.

Для знаходження концентрації рівняння (2.1.1) та (2.1.2) потрібно записати в різницевому вигляді :

$$\frac{n_i^{k+1} - n_i^k}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x^2} \{ [n_i^{k+1} D_i \exp(z_{i+1/2}) - n_{i+1}^{k+1} D_{i+1}] \frac{z_{i+1/2}}{\exp(z_{i+1/2}) - 1} - [n_{i-1}^{k+1} D_{j-1} \exp(z_{i-1/2}) - n_j^{k+1} D_j] \frac{z_{i-1/2}}{\exp(z_{i-1/2}) - 1} \} = 0$$

(2.4.4)

$$\begin{aligned} \text{де } Z_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{e}{T_e} (\varphi_{i+1} - \varphi_i), \psi = \varphi * \frac{T_e}{e} \rightarrow Z_{i+\frac{1}{2}} = (\psi_{i+1} - \psi_i) \\ Z_{i-\frac{1}{2}} &= \frac{e}{T_e} (\varphi_{i-1} - \varphi_i), \psi = \varphi * \frac{T_e}{e} \rightarrow Z_{i-\frac{1}{2}} = (\psi_{i-1} - \psi_i) \end{aligned} \quad (2.4.5)$$

Підставимо (2.4.5) у (2.4.4):

$$\frac{n_i^{k+1}-n_i^k}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x^2} \{ [n_i^{k+1} D_i \exp(\psi_{i+1} - \psi_i) - n_{i+1}^{k+1} D_{i+1}] \frac{\psi_{i+1}-\psi_i}{\exp(\psi_{i+1}-\psi_i)-1} - [n_{i-1}^{k+1} D_{i-1} \exp(\psi_{i-1} - \psi_i) - n_i^{k+1} D_i] \frac{\psi_{i-1}-\psi_i}{\exp(\psi_{i-1}-\psi_i)-1} \} = 0$$

(2.4.6)

Апроксимація потоків відбувається за схемою Шарфетеля-Гуммеля [1]:

$$\phi_i = \frac{1}{\Delta x_i} [n_i D_i \exp(z_{i+1/2}) - n_{i+1} D_{i+1}] \frac{z_{i+1/2}}{\exp(z_{i+1/2})-1} \quad (2.4.7)$$

де $z_{i+1/2} = -s \frac{\mu_{i+1/2}}{D_{i+1/2}} (V_{i+1} - V_i)$

s=-1 для електронів та s=1 для йонів.

Запишемо рівняння (2.4.6) в загальному вигляді:

$$A_i n_{i+1}^{k+1} - B_i n_i^{k+1} + C_i n_{i-1}^{k+1} = D_i \quad (2.4.8)$$

Коефіцієнти A_i , B_i , C_i , D_i для концентрації мають наступний вигляд:

$$A_i = -\frac{D_{i+1}}{\Delta x^2} * \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{\exp(\psi_{i+1} - \psi_i) - 1}$$

$$B_i = \frac{D_i}{\Delta x^2} \left(\frac{\exp(\psi_{i+1} - \psi_i) * (\psi_{i+1} - \psi_i)}{\exp(\psi_{i+1} - \psi_i) - 1} - \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{\exp(\psi_{i+1} - \psi_i) - 1} \right) - \frac{1}{\Delta t^2}$$

$$C_i = -\frac{D_{i-1}}{\Delta x^2} * \exp(\psi_{i-1} - \psi_i) * \frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{\exp(\psi_{i-1} - \psi_i) - 1}$$

$$D_i = -\frac{n_i^k}{\Delta t}$$

Подібно як для потенціалу, значення концентрації знаходимо методом прогонки:

$$n_i^{k+1} = \alpha_{i+1} n_{i+1}^k + \beta_{i+1}$$

Прогоночні коефіцієнти α_i та β_i шукаємо так само за формулами (2.4.2) та (2.4.3).

Початкові значення отримуємо з наступних рівнянь:

$$\alpha_2 = \frac{D_2(\psi_0^k - \psi_1^k)\Delta t}{\Delta x^2 [\exp(\psi_0^k - \psi_1^k) - 1] + D_1 \exp(\psi_0^k - \psi_1^k)\Delta t - 2s\mu_1(\psi_0^k - \psi_1^k)[\exp(\psi_0^k - \psi_1^k) - 1]\Delta t}$$

$$\beta_2 = \frac{\Delta x^2 [\exp(\psi_0^k - \psi_1^k) - 1]}{\Delta x^2 [\exp(\psi_0^k - \psi_1^k) - 1] + D_1 \exp(\psi_0^k - \psi_1^k) \Delta t - 2s\mu_1 (\psi_0^k - \psi_1^k) \Delta t [\exp(\psi_0^k - \psi_1^k) - 1]}$$

Початкове значення n_N^{k+1} шукаємо наступним чином:

$$n_N^{k+1} = \frac{D_{N-1} \exp(z_{N-\frac{1}{2}}) z_{N-\frac{1}{2}} n_N^k H^2 [\exp(z_{N-\frac{1}{2}}) - 1] + \beta_N \Delta t}{D_N \exp(z_{N-\frac{1}{2}}) \{ H^2 [\exp(z_{N-\frac{1}{2}}) - 1] - s\mu_N (\varphi_{N+1}^k - \varphi_N^k) [\exp(z_{N-\frac{1}{2}}) - 1] + D_N z_{N-\frac{1}{2}} \Delta t \} - \alpha_N \Delta t}$$

де $z_{N-\frac{1}{2}} = (\psi_{i-1} - \psi_i)$.

З початкових умов нам відомі такі величини (в момент часу $t=0$):

Концентрація електронів та іонів $n_e = n_i = 10^{16} \text{ м}^{-3}$.

Потенціал на катоді дорівнює -300 В, на аноді рівен 0, і змінюється лінійно.

Рівняння концентрацій та рівняння потенціалу, вони розв'язуються разом.

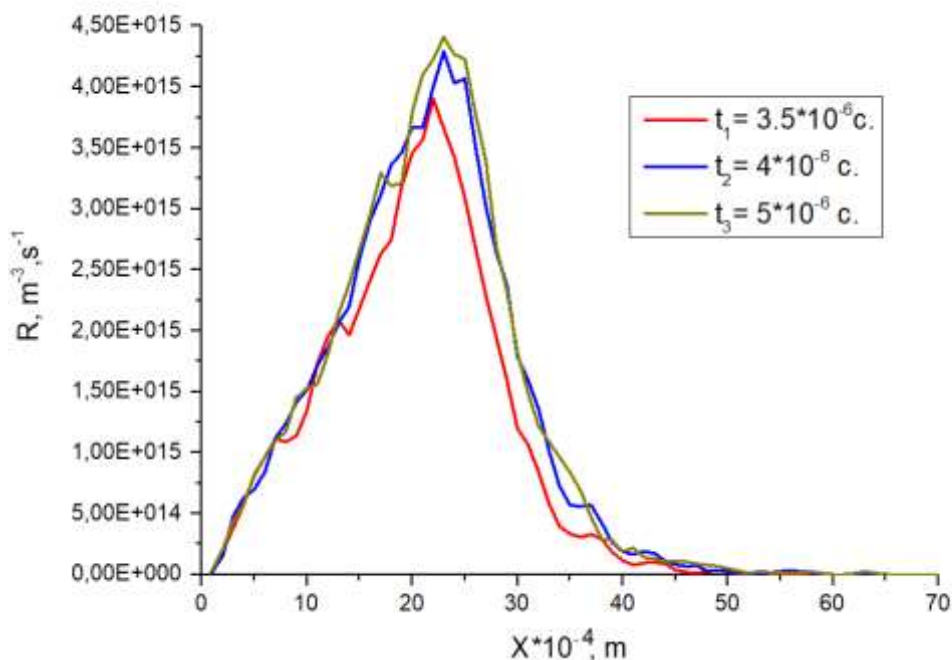
Результати

Розглянемо результати які отримали під час моделювання.

Параметри моделювання були наступні:

1. Відстань між анодом і катодом дорівнювала 3 см ($L=3$ см);
2. Буферний газ — аргон, при різних значення тиску ($p=1$ Торр, $p=0.5$ Торр, $p=0.1$ Торр)
3. Початкові значення концентрації йонів та електронів $n_i = n_e = 10^{16} m^{-3}$;
4. Магнітне поле змінювалось по простору за формулою $B = B_0 * \exp(-\frac{x*x}{0.005})$ (де B_0 — початкове значення магнітного поля, x — координата по простору) в діапазоні $B_0=0.05-0.02$ Тл;
5. Напруга на катоді дорівнювала $V=-500$ В;

На рис. 14 показано розподіл швидкості іонізації в різні моменти часу ($t_1=3.5*10^{-6}$ с, $t_2=4*10^{-6}$ с, $t_3=5*10^{-6}$ с) для таких параметрів: $V=-500$ В, $B_0=0.05$



Тл, $p=1$ Торр.

Рис. 14. Розподіл швидкості іонізації для режиму $V=-500$ В, $B_0=0.05$ Тл, $p=1$ Торр.

Як видно з графіку, швидкість іонізації майже не змінюється з часом. Також максимум іонізації досягається приблизно при $x=24 \cdot 10^{-4}$ м.

На рис. 15 показано розподіл потенціалу в різні моменту часу ($t_1=3.5 \cdot 10^{-7}$ с, $t_2=5 \cdot 10^{-7}$ с, $t_3=2 \cdot 10^{-7}$ с) для режиму: $V=-500$ В, $B_0=0.05$ Тл, $p=1$ Торр.

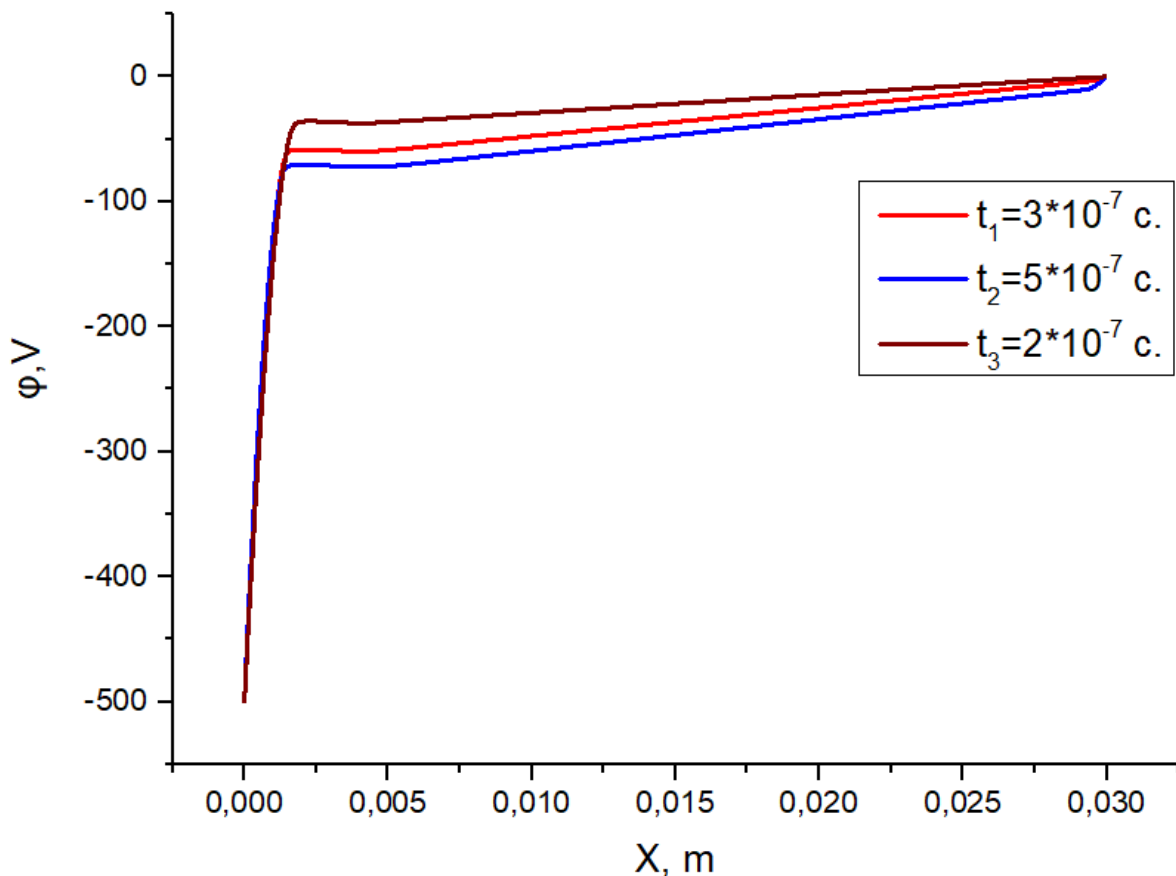


Рис. 15. Розподіл потенціалу при $V=-500$ В, $B_0=0.05$ Тл, $p=1$ Торр.

Як видно з рис. 15, розподіл потенціалу практично не змінюється з часом. Видно, що в області біля катоду при $X \leq 0.0022$ м спостерігається скачок потенціалу. Це свідчить про те, що, в цьому шарі утворюється позитивний заряд йонів.

На рис. 16 показано концентрацію електронів та йонів в один і той же момент часу ($t=5 \cdot 10^{-6}$ с). З рисунку бачимо що біля катоду утворюється заряджений шар ($X \leq 0.0023$ м.) де електронів майже немає, тобто утворюється позитивний заряд. За межами катодного шару (приблизно $X \geq 0.0035$ м),

формується область максимальної концентрації частинок. Плазма не однорідна, і існує область де її майже немає ($X \geq 0.025$ м).

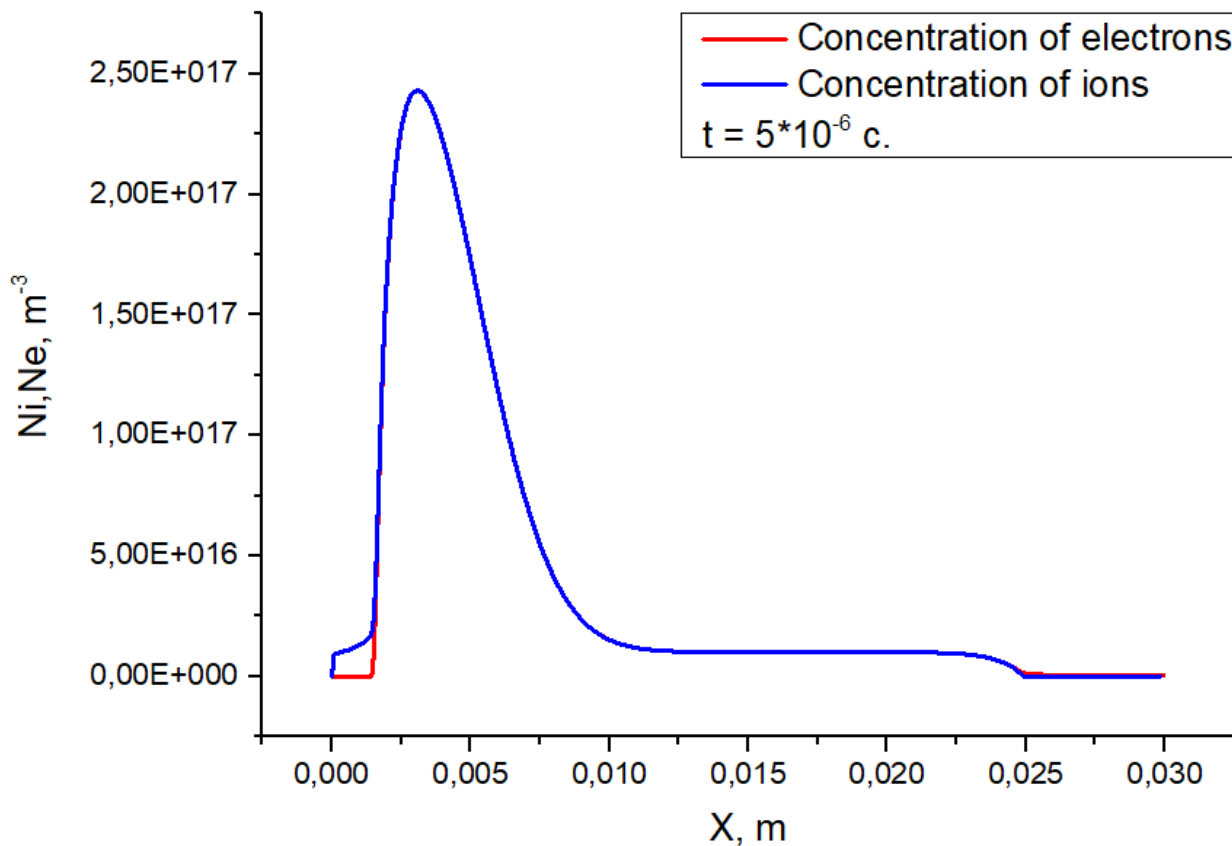


Рис. 16. Концентрація йонів та електронів в один і той же момент часу ($t=5 \cdot 10^{-6}$ с) для режиму $V=-500$ В, $B_0=0.05$ Тл, $p=1$ Торр.

На рис. 17 та рис. 18 показано розподіли концентрації йонів та електронів відповідно, для режиму $V=-500$ В, $B_0=0.05$ Тл, $p=1$ Торр, в різні моменти часу ($t_1=4 \cdot 10^{-6}$ с, $t_2=5 \cdot 10^{-6}$ с, $t_3=6 \cdot 10^{-6}$ с).

Максимуми концентрації як видно з останніх двох рисунків утворюються приблизно на відстані $x=0.0047$ м. Положення цих максимумів відповідає максимуму іонізації. Біля аноду за рахунок дифузії концентрація йонів та електронів зменшується.

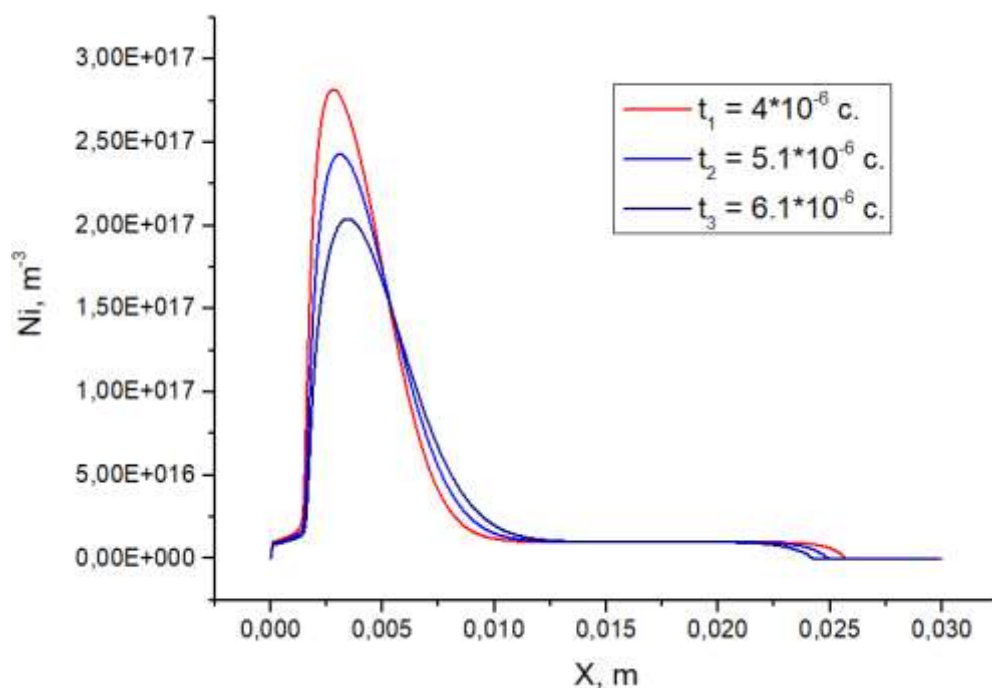


Рис. 17. Концентрація йонів для режиму $V=-500\text{В}$, $V_0=0.05$ Тл, $p=1$ Торр, в різні моменти часу.

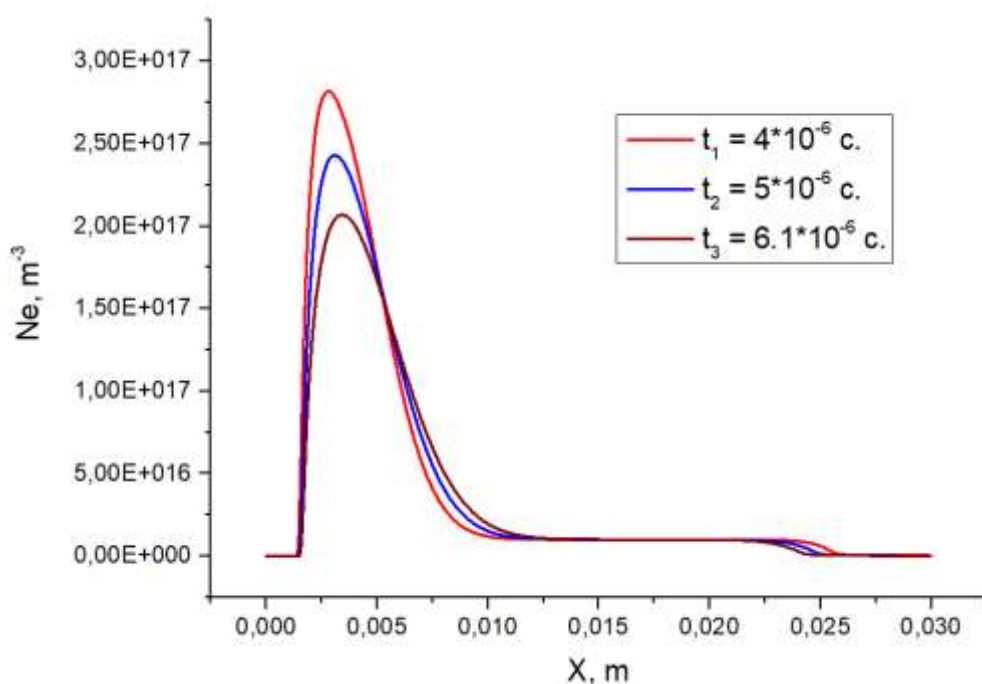


Рис. 18. Концентрація електронів для режиму $V=-500\text{В}$, $V_0=0.05$ Тл, $p=1$ Торр, в різні моменти часу.

На рис. 19 приведені швидкості іонізації для режиму $V=-500\text{В}$, $V_0=0.03$ Тл, $p=1$ Торр, та $V=-500\text{В}$, $V_0=0.05$ Тл, $p=1$ Торр в один і той же момент часу ($t_1=5 \cdot 10^{-6}$ с). Перший режим показаний червоною лінією і відповідає значенням

$V=-500\text{В}$, $B_0=0.05\text{ Тл}$, $p=1\text{ Торр}$. Другий режим показаний синьою лінією та відповідає значенням $V=-500\text{В}$, $B_0=0.03\text{ Тл}$, $p=1\text{ Торр}$.

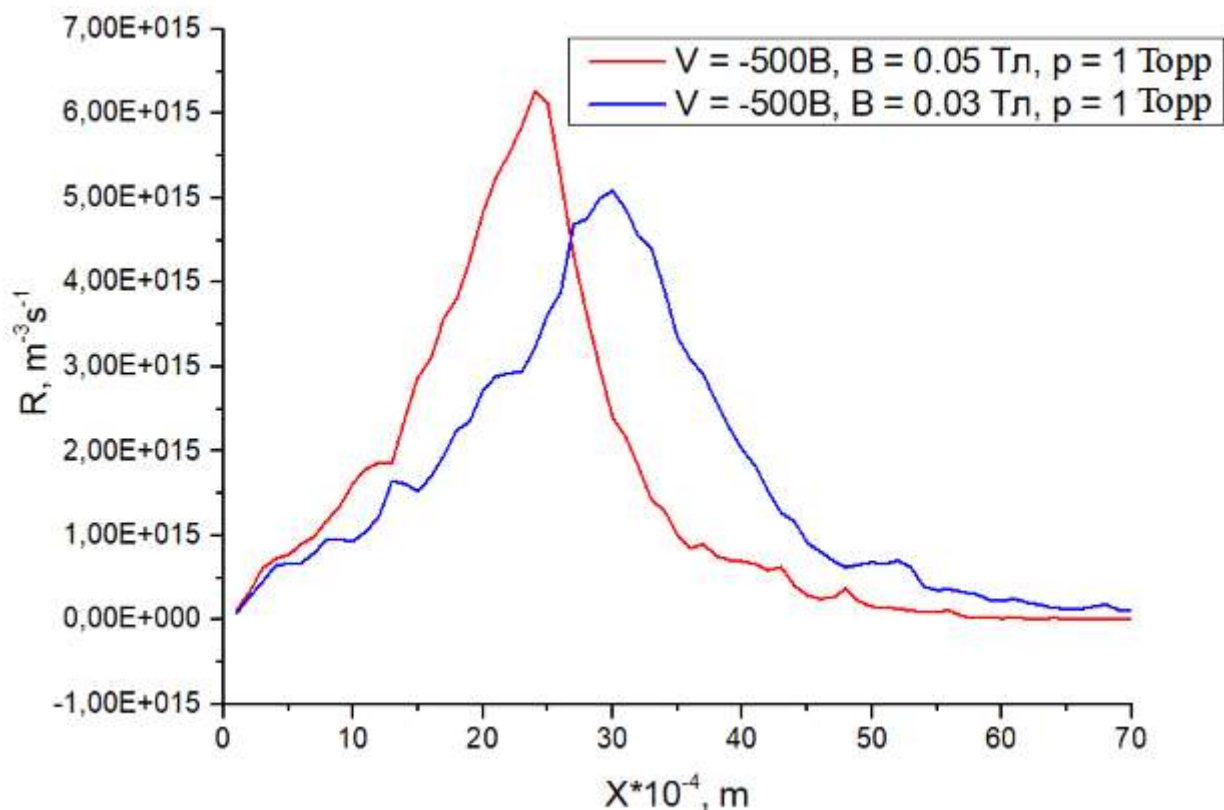


Рис. 19. Швидкість іонізації для двох різних режимів моделювання. Червона лінія режим $V=500\text{В}$, $B_0=0.05\text{ Тл}$, $p=1\text{ Торр}$, синя лінія режим $V=500\text{В}$, $B_0=0.03\text{ Тл}$, $p=1\text{ Торр}$, в один і той самий момент часу ($t=5 \cdot 10^{-6}\text{ с}$).

При збільшенні магнітного поля максимум іонізації зростає та знаходиться ближче до катоду.

На рис. 20 показано значення концентрації йонів в один і той самий момент часу але для різних двох режимів. Перший режим відповідає значенням $V=-500\text{В}$, $B_0=0.05\text{ Тл}$, $p=1\text{ Торр}$, другий режим відповідає значенням $V=-500\text{В}$, $B_0=0.03\text{ Тл}$, $p=1\text{ Торр}$.

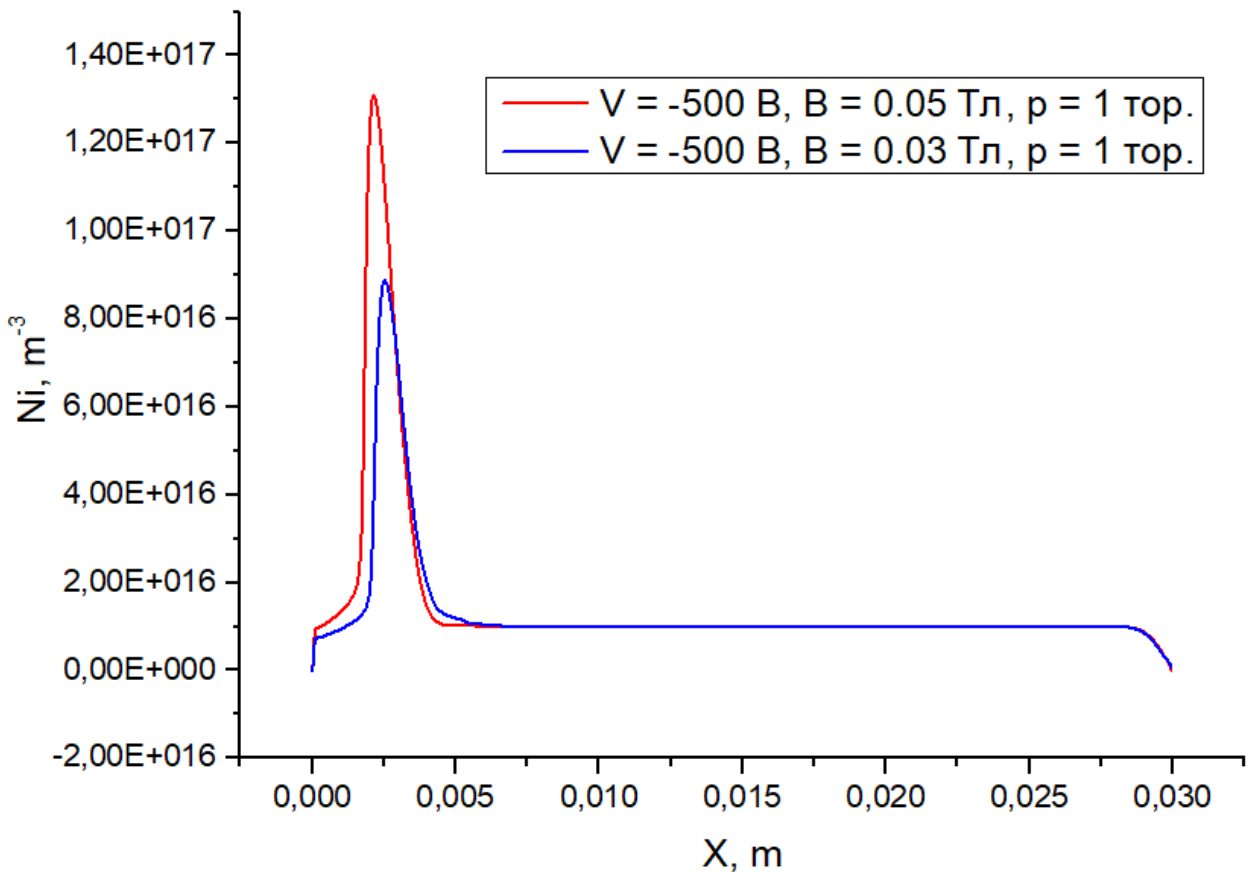


Рис. 20. Розподіл концентрації для двох різних режимів в один і той самий час.
Червона лінія відповідає режиму $V=-500\text{В}, B_0=0.05 \text{ Тл}, p=1 \text{ Торр}$, синя лінія
відповідає режиму $V=-500\text{В}, B_0=0.03 \text{ Тл}, p=1 \text{ Торр}$.

При більшому магнітному полі, концентрація йонів більша ніж в режимі з меншим магнітним полем, при цьому максимум концентрації знаходиться ближче до катоду.

На рис. 21 показано розподіл потенціалу для двох різних режимів в один і той самий момент часу. Перший режим (червона лінія) відповідає значенням: $V=-500\text{В}, B_0=0.05 \text{ Тл}, p=1 \text{ Торр}$, другий режим (зелена лінія) відповідає значенням: $V=-500\text{В}, B_0=0.05 \text{ Тл}, p=0.5 \text{ Торр}$

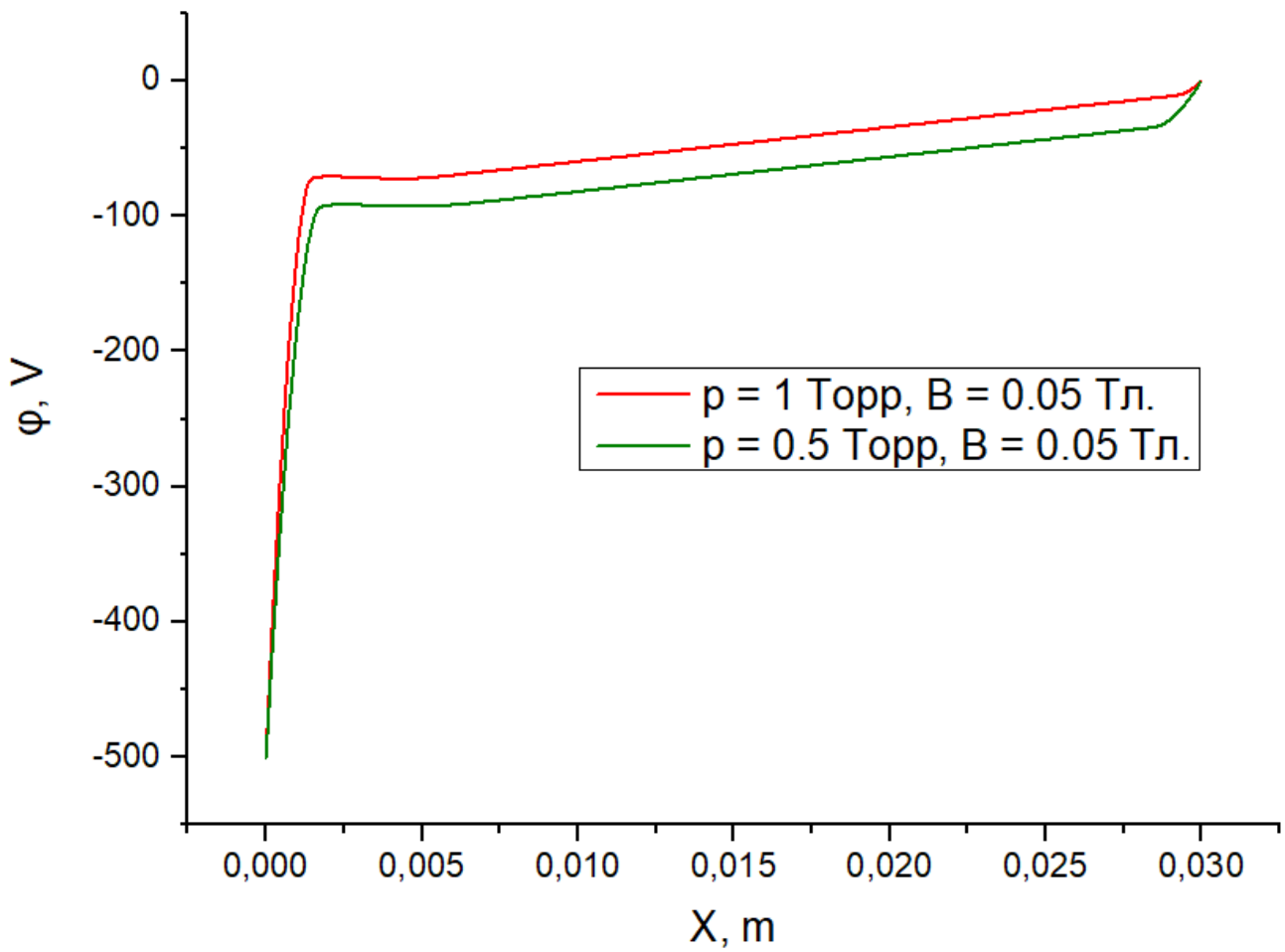


Рис. 21. Розподіл потенціалу для двох різних режимів. Перший режим (червона лінія) відповідає значенням: $V=-500\text{В}$, $V_0=0.05\text{ Тл}$, $p=1\text{ Торр}$, другий режим (зелена лінія) відповідає значенням: $V=-500\text{В}$, $V_0=0.05\text{ Тл}$, $p=0.5\text{ Торр}$

Як бачимо з наведеного вище рисунку зміна потенціалу в прикатодному шарі зменшується при зменшенні тиску. Це пояснюється зменшенням заряду в прикатодному шарі.

На рис. 22 показано розподіл швидкості іонізації в один і той самий момент часу для двох режимів. Перший режим показано червоною лінією і відповідає параметрам: $V=-500\text{В}$, $V_0=0.03\text{ Тл}$, $p=1\text{ Торр}$, другий режим показаний синьою лінією відповідає параметрам: $V=-500\text{В}$, $V_0=0.03\text{ Тл}$, $p=0.5\text{ Торр}$.

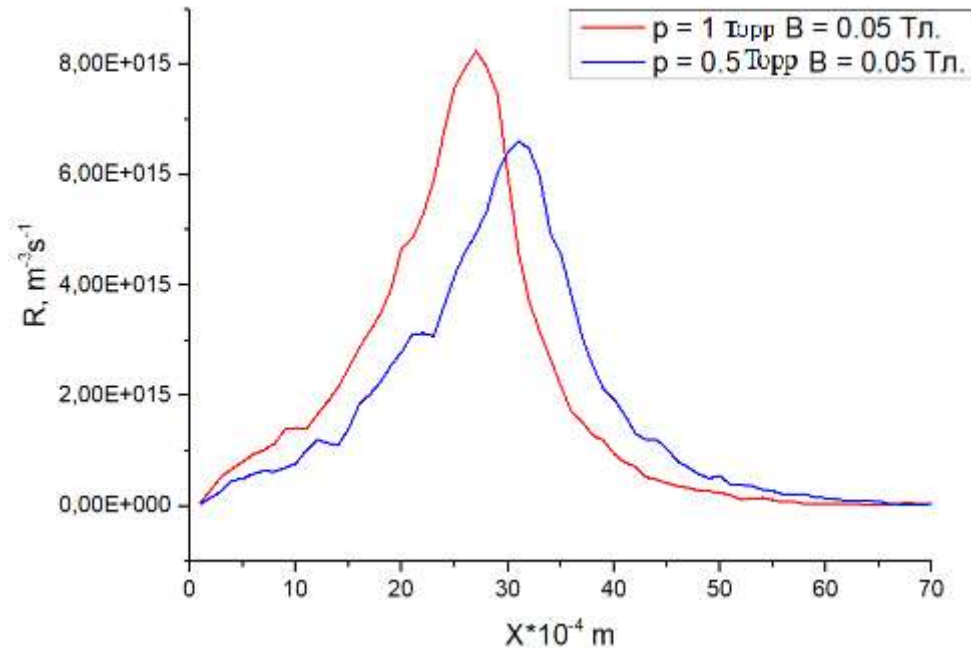


Рис. 22. Розподіл швидкості іонізації для двох режимів. Червона лінія відповідає режиму $V=500\text{В}$, $B_0=0.03\text{ Тл}$, $p=1\text{ Торр}$, синя відповідає режиму $V=-500\text{В}$, $B_0=0.03\text{ Тл}$, $p=0.5\text{ Торр}$.

При зменшенні тиску концентрація електронів зменшується, оскільки кількість зіткнень електронів з атомами газу зменшується, тим самим зменшується іонізація.

На рис. 23 показано розподіл йонів при різних значеннях тиску для магнітного поля $B_0=0.05\text{ Тл}$, в один і той же момент часу. Червона лінія для режиму: $V=500\text{В}$, $B_0=0.05\text{ Тл}$, $p=1\text{ Торр}$, зелена лінія для режиму: $V=500\text{В}$, $B_0=0.05\text{ Тл}$, $p=0.5\text{ Торр}$.

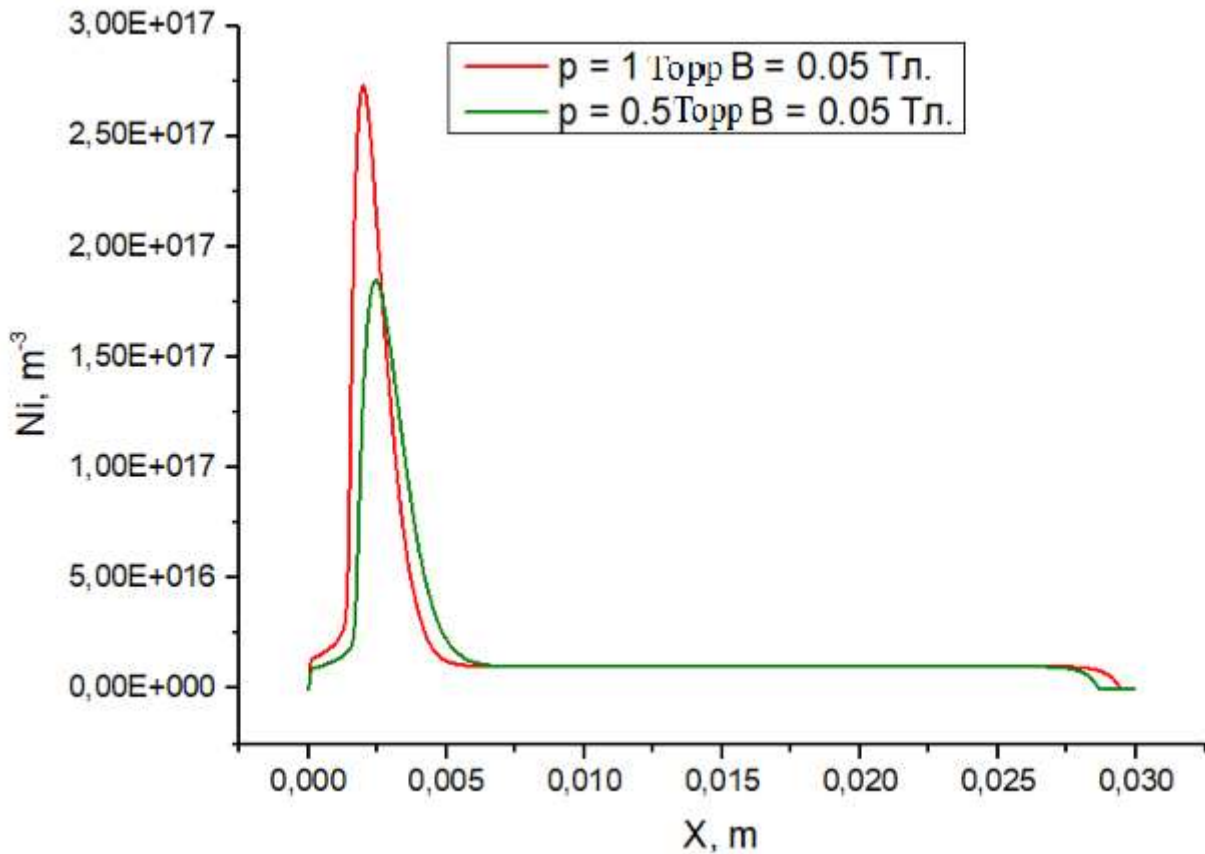


Рис. 23 Розподіл йонів при різних значеннях тиску для магнітного поля $V_0=0.05$ Тл, в один і той же момент часу. Червона лінія для режиму: $V=500\text{В}$, $V_0=0.05$ Тл, $p=1$ Торр, зелена лінія для режиму: $V=500\text{В}$, $V_0=0.05$ Тл, $p=0.5$ Торр.

З рисунку вище видно що при зростанні тиску зростає концентрація йонів, що пов'язано зі збільшенням іонізації.

На рис. 24 показано розподіл електронів при різних значеннях тиску для магнітного поля $V_0=0.05$ Тл, в один і той же момент часу. Червона лінія для режиму: $V=500\text{В}$, $V_0=0.05$ Тл, $p=1$ Торр, зелена лінія для режиму: $V=500\text{В}$, $V_0=0.05$ Тл, $p=0.5$ Торр.

На цьому рисунку видно, що при збільшенні тиску зростає концентрація заряджених частинок, що пов'язано зі збільшенням іонізації.

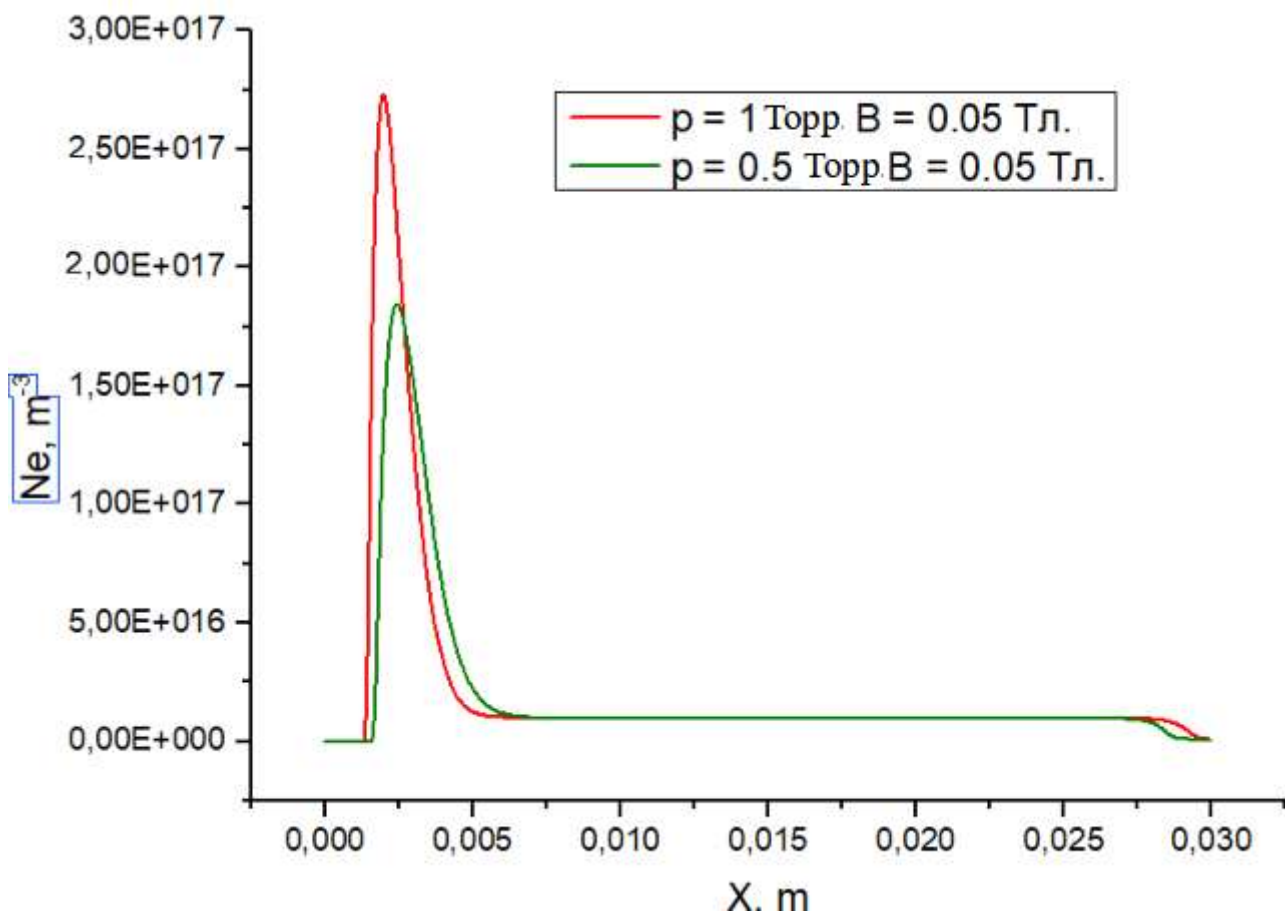


Рис. 24. Розподіл електронів при різних значеннях тиску для магнітного поля $B_0=0.05 \text{ Тл}$, в один і той же момент часу. Червона лінія для режиму: $V=500\text{В}$, $B_0=0.05 \text{ Тл}$, $p=1 \text{ Торр}$, зелена лінія для режиму: $V=500\text{В}$, $B_0=0.05 \text{ Тл}$, $p=0.5 \text{ Торр}$.

Висновки

В роботі було розроблено програму для моделювання магнетронного розряду з використанням гібридної моделі. За допомогою мови програмування C++ була написана програма за допомогою якої проведені розрахунки задачі при різних значеннях тиску газу та величини магнітного поля.

Отримані результати розподілу параметрів концентрації заряджених частинок та потенціалу самоузгодженого електричного поля. Досліджено вплив цих параметрів на іонізацію та умови підтримання магнетронного розряду.

На основі отриманих результатів моделювання можна зробити такі висновки:

1. В зоні яка знаходиться біля катоду утворюється область заряджених частинок або інакше прикатодний шар. В цій області спостерігається різка зміна потенціалу електричного поля, яка зростає при збільшенні тиску.
2. Встановлено, що при збільшенні магнітного поля зростає швидкість іонізації газу, а її максимальне значення знаходиться ближче до катоду. При цьому збільшується концентрація заряджених частинок в розряді, а їх максимуми відповідають максимумам швидкості іонізації.
3. Показано, що при збільшенні тиску газу, зростає швидкість іонізації та концентрація заряджених частинок в розряді, а відстань максимумів до катоду зменшується.
4. При наявності магнітного поля в між-електродному проміжку утворюється неоднорідна плазма. На границі прикатодного шару спостерігається максимальні значення концентрацій заряджених частинок.

Використана література

1. van der Straaten T. A. Reactive Sputter Deposition / T. A. van der Straaten, N. F. Cramer, I. S. Falconer, B. W. James // J. Phys. D: Appl. Phys. – 1998. – V.31. – P.177-191.
2. Kondo S. J. Reactive Sputter Deposition / S. Kondo, K. Nanbu // Phys. D: Appl. Phys. – 1999. – V.32. – P.1142.
3. Kolev I. Numerical Models of the Planar Magnetron Glow Discharges / I. Kolev, A. Bogaerts // Wiley Online Library. – 2004. – V.44. – P.1–7.
4. Bradley J.W. Reactive Sputter Deposition / J.W. Bradley, S. Thompson, Y. Aranda Gonzalvo // Plasma Sources Sci. Technol. – 2001. – V.10. – P.490.
5. Birdsall C.K. Reactive Sputter Deposition / C.K. Birdsall, A.B. Langdon // Plasma Physics via Computer Simulations. – 1985. – V.34. – P.85-87.
6. Kolev I. Numerical Models of the Planar Magnetron Glow Discharges / I. Kolev, A. Bogaerts // Wiley Online Library. – 2005. – V.72. – P.56.
7. Nanbu K. Simple Method to Determine Collisional Event in Monte Carlo Simulation of Electron-Molecule Collision / K. Nanbu // Jpn. J. Appl. Phys. –1994. – V.33. – P. 4752.
8. Nanbu K. Rarefied Gas Dynamics / K. Nanbu, S. Uchida // Oxford: Oxford University Press. – 1995. – V.22. – P.602.
9. Okhrimovskyy A. Electron anisotropic scattering in gases / A. Okhrimovskyy, A. Bogaerts, R. Gijbels // Phys. Rev. E 65. – 2002. – V.9. – P.37.
10. J.W. Bradley, S. Thompson, Y. Aranda Gonzalvo, / Plasma Sources Sci. Technol. 10, // 490 (2001)
11. Thomason P. 1-D Self-consistent Fluid Modelling of the Pulsed Magnetron Discharge / P. Thomason, Philippa Browning, James Bradley // Wiley Online Library. – 2009. – V.6. – P.1–6.

12. J. W. Bradley, G. Lister, / Plasma Sources Sci. Technol. //1997, 6(4), 524.
13. M. Keidar, I. I. Beilis, IEEE Trans. / Plasma Sci.// 2006, 34(3), 804
14. L. Garrigues, G. J. M. Hagelaar, J. Bareilles, C. Boniface, J. P. Boeuf, / Phys. Plasmas // 2003, 10(12), 4886
15. P. J. Thomason, / Computational Modelling of the Pulsed Magnetron System, PhD Thesis, // University of Manchester, UK 2007
16. M. A. Lieberman, A. J. Lichtenberg, / Principles of Plasma Discharges and Materials Processing, // 2nd edition, WileyInterscience, J. Wiley and Sons Inc., Hoboken, New Jersey, 2005.
17. R. R. Newton, / Phys. Rev. // 1948, 73(6), 570
18. G. J. M. Hagelaar, F. J. de Hoog, G. M. W. Kroesen, / Phys. Rev. // E 2000, 62(1), 1452.
19. I. Kolev, R. Bogaerts, R. Gijbels, / Phys. Rev. // E 2005, 72, 056402.
20. G. Buyle, W. De Bosscherb, D. Deplaa, K. Eufingera, J. Haemersa, R. De Grysea, / Vacuum // 2003, 70, 29.
21. V. P. Nagorny, P. J. Drallos, / Plasma Sources Sci. Technol. //1997, 6(2), 212.
22. A. V. Phelps, Z. Petrovic, / Plasma Sources Sci. Technol. // 1999, 8(3), R21.
23. A. Vetushka, S. K. Karkari, J. W. Bradley, / J. Vac. Sci. Technol. // A 2004, 22(6), 2459.
24. J.P. Boueuf and E. Marode, / J. Phys. // D 15, 2169 (1982)
25. J.P. Boueuf and L. C. Pitchford, / IEEE Trans. Plasma // Sci. 19, 286 (1991)
26. Bogaerts A. J. Glow Discharge Plasmas in Analytical Spectroscopy / A. Bogaerts, R. Gijbels, W. J. Goedheer // Appl. Phys. – 1995. – V.78. – P.2233.

27. A. Fiala, L. C. Pitchford, and J.P. Boeunf / Two-dimensional, hybrid model of low-pressure glow discharges // 1994 The American Physical Society