

# ФУНКЦІЯ РОЗПОДІЛУ ЕЛЕКТРОНІВ ТА ЕЛЕКТРОННІ КІНЕТИЧНІ КОЕФІЦІЄНТИ ПЛАЗМИ ПОПЕРЕЧНОГО ОБ'ЄМНОГО РОЗРЯДУ У СУМІШІ ВАЖКИХ ІНЕРТНИХ ГАЗІВ З МОЛЕКУЛАМИ ХЛОРУ

**Чигінь Василь, Горун Павло**

НУ «Львівська політехніка», вул. Митрополита Андрея, 5, Львів,

e-mail: vchygin@polynet.lviv.ua, Pawlissimo@gmail.com

Проводилося чисельне моделювання кінетичного рівняння Больцмана для функції розподілу електронів за енергіями, на підставі якого отримані транспортні характеристики електронів плазми і питомі втрати потужності розряду при різних значеннях приведеної напруженості електричного поля. Моделювання параметрів плазми виконане для чотирьохкомпонентної суміші, найбільш оптимальної для роботи багатохвильового джерела УФ-ВУФ випромінювання.

## Вступ

Для оптимізованої за тиском та складом чотирьохкомпонентної газової суміші виконані розрахунки функцій розподілу електронів за енергіями, а також електронних кінетичних коефіцієнтів (ЕКК), які залежні від приведеної напруженості електричного поля в поперечному об'ємному розряді.

Для газорозрядної плазми комплексного складу (трьох-, чотирьохкомпонентні суміші) розподіл інтенсивності в спектрі випромінювання лампи істотно визначається передачею енергії від метастабільних атомів аргону і криптону атомам ксенону (криптону), що знаходяться в основному стані. Тому важливим є розрахунок ЕКК для плазми сумішей інертних газів з молекулами хлору комплексного складу (трьох-, чотирьохкомпонентні суміші).

## Чисельне моделювання

Інформацію про параметри плазми зазвичай отримують шляхом розв'язання

кінетичного рівняння Больцмана для функції розподілу електронів за енергіями (ФРЕЕ). На основі розрахунків ФРЕЕ визначають електронні кінетичні коефіцієнти, до яких належать транспортні характеристики електронів плазми, питомі втрати потужності розряду на основні електронні процеси та їх константи швидкості залежно від параметра  $E/P$ , де  $E$  – напруженість електричного поля, а  $P$  – тиск суміші.

У зв'язку з тим, що більшість програм, які використовуються для розрахунків ФРЕЕ та ЕКК в плазмі ексимерних лазерів (чи ламп), мають значні програмні обмеження (зокрема на кількість компонент у суміші, недостатня кількість даних про ефективні перерізи електронних процесів, застарілі та неповні бази даних), нами була розроблена власна програма для чисельного моделювання кінетичного рівняння Больцмана для ФРЕЕ.

Повне рівняння Больцмана для знаходження ФРЕЕ  $f_0(\varepsilon)$  у двочленному наближенні та одновимірному випадку взято з [1]:

$$\frac{1}{n_e N} \sqrt{\frac{m}{2e}} \varepsilon^{1/2} \frac{\partial(n_e f_0)}{\partial t} - \frac{1}{3} \left(\frac{E}{N}\right)^2 \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left( \frac{\varepsilon}{\sum_j \frac{N_j}{N} Q_{Tj}} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) - \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[ 2 \sum_j \frac{N_j}{N} \frac{m}{M_j} Q_{Tj} \varepsilon^2 \left( f_0 + T \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \right] = S_{eN} \quad (1)$$

де  $\varepsilon$  – енергія електрона,  $T = \frac{kT_e}{e}$  – температура газу,  $N_j$ ,  $M_j$ ,  $Q_{Tj}$  – концентрації атомів і молекул, їх маси та ефективні перерізи транспортного розсіювання,  $m, e$  – маса та заряд електрона,  $E$  – напруженість електричного поля в розряді,  $N$  – повна

концентрація часток робочої суміші при даному  $P$  – тиску газової суміші. Ця функція вказує, яка відносна частина електронів знаходиться в околі їх енергії  $\varepsilon$ .

Умова нормування функції:

$$\int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} f_0(\varepsilon) d\varepsilon = 1. \quad (2)$$

Права частина рівняння  $S_{eN}$  – інтеграл зіткнення, який описує непружні взаємодії електронів з атомами і молекулами.

$$S_{eN} = \sum_j \frac{N_j}{N} \left[ (\varepsilon + \varepsilon_j) Q_j(\varepsilon + \varepsilon_j) f_0(\varepsilon + \varepsilon_j) - \varepsilon Q_j(\varepsilon) f_0(\varepsilon) \right] - \sum_j \frac{N_{at}}{N} \varepsilon Q_{at j}(\varepsilon) f_0(\varepsilon) + \sum_j \frac{N_{det j}}{N} \varepsilon Q_{det j}(\varepsilon) f_0(\varepsilon), \quad (3)$$

де  $Q_j$  і  $\varepsilon_{thr j}$  є, відповідно, перерізами і енергетичними порогоми процесів збудження та іонізації атомів і молекул  $j$ -го газу,  $Q_{aj}$  – переріз прилипання електронів до молекул. Концентрація молекул  $N_{at}$ , до яких прилипають електрони є відомою, вона задається. В загальному випадку рівняння (1) є нестационарним диференціальним рівнянням другого порядку в частинних похідних зі змінними коефіцієнтами та аргументами у відхиленнях.

Задача розв'язувалася не на півосі  $(0, \infty)$ , а на відрізку  $[\varepsilon_0, \varepsilon_{max}]$ , де  $\varepsilon_0 > 0$ ,  $\varepsilon_{max} = \frac{M}{2m} \frac{e^2 E^2}{m v_m^2}$  – максимальна енергія, яку може мати електрон<sup>1</sup>.

При розгляді стаціонарного випадку перший член лівої частини рівняння, який включає похідну по часу, пропадає, і рівняння зводиться до вигляду:

$$-\frac{1}{3} \left(\frac{E}{N}\right)^2 \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left( \frac{\varepsilon}{\sum_j \frac{N_j}{N} Q_{Tj}} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) - \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[ 2 \sum_j \frac{N_j}{N} \frac{m}{M_j} Q_{Tj} \varepsilon^2 \left( f_0 + T \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \right] = S_{eN} \quad (4)$$

<sup>1</sup>Поняття максимальної енергії електрона дає елементарна теорія. І хоча насправді є електрони з енергіями більшими та меншими  $\varepsilon_{max}$ , таке наближення є допустимим [9].

Ввівши рівномірну сітку

$$\bar{\omega}_h = \left\{ x_i = ih - \frac{h}{2}, \quad i = \overline{0, N}, \quad h = \frac{\varepsilon_{\max}}{N} \right\} \quad (5)$$

та використовуючи такі різницеві оператори

$$y_{\bar{x},i} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}; \quad y_{\dot{x},i} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h};$$

методом заміни похідних різницевиими схемами, отримали систему рівнянь з невідомими, привівши яку до триточкового шаблону, розв'язували методом прогонки.

Однак, через наявність у правій частині рівняння (1) аргументів у відхиленнях, наближений розв'язок шукався методом послідовних наближень таким чином, що на кожному кроці ітерації використовувалося знайдене на попередньому кроці

значення функції (враховуючи відхилення). Ітераційний процес продовжувався доти, доки не була досягнута наперед задана точність.

Значення функцій  $Q_{Tj}$  (ефективні перерізи транспортного розсіювання), де  $j$  –  $j$ -а компонента у суміші газів, відомі з літератури (в основному отримуються експериментальним шляхом) і задаються таблично. Припускаючи, що функції  $Q_{Tj}$  є лінійними між заданими точками, отримуємо набір кусково лінійних функцій. Проте для забезпечення їх диференційовності необхідно, щоб функції  $Q_{Tj}$  мали хоча б перший порядок гладкості. Для цього задані  $Q_{Tj}$  замінювали ермітовими сплайнами [2, 3].

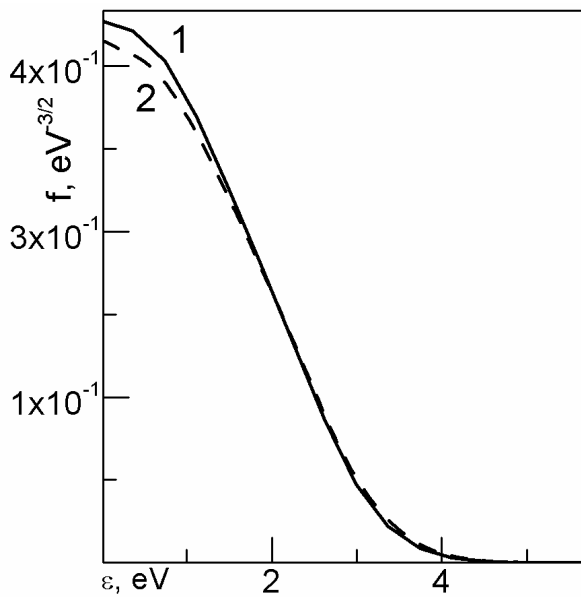


Рис.1. ФРЕЕ в розряді у суміші Ar-Kr-Xe-Cl<sub>2</sub>, розрахована при  $E/P=1.0 \text{ V}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{torr}^{-1}$ : 1 – наша методика, 2 – з використанням програми BOLSIG+.

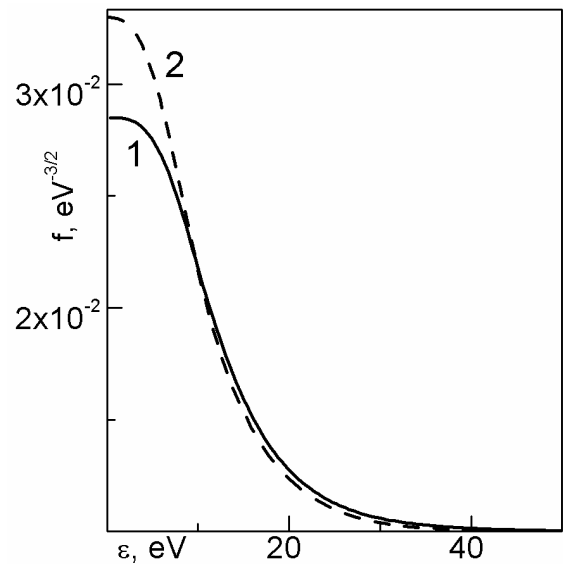


Рис.2. ФРЕЕ в розряді у суміші Ar-Kr-Xe-Cl<sub>2</sub>, розрахована при  $E/P=200 \text{ V}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{torr}^{-1}$ : 1 – наша методика, 2 – з використанням програми BOLSIG+.

ЕКК розраховувалися для розряду в суміші Ar-Kr-Xe-Cl<sub>2</sub> = 14–0,6–0,6–0,24 кПа, яка близька до оптимальних середовищ УФ-ВУФ лампи. При виконанні розрахунків використовувалася розроблена нами програма. Контрольні розрахунки

проводилися з використанням програми BOLSIG+ [4], вільно поширеній в інтернеті, порівнювалися з нашими результатами. ЕКК розраховувалися за формулами, наведеними в огляді [5].

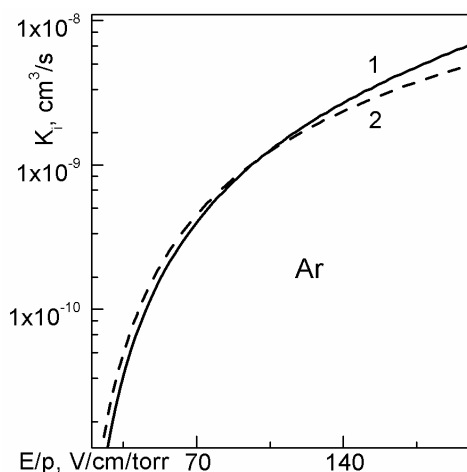


Рис.3. Константа швидкості іонізації атомів аргону в розряді у суміші Ar-Kr-Xe-Cl<sub>2</sub>: 1 – наша методика, 2 – з використанням програми BOLSIG+.

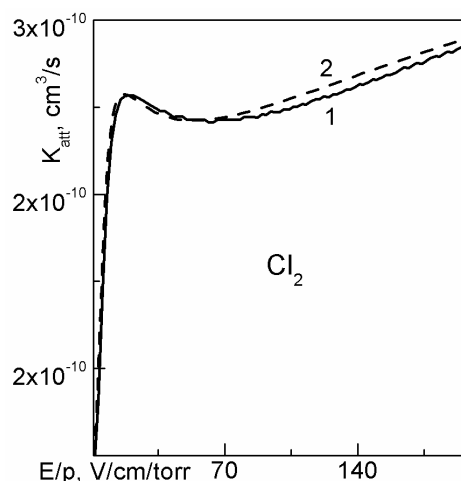


Рис.4. Константа швидкості дисоціативного прилипання електронів до молекул хлору в розряді у суміші Ar-Kr-Xe-Cl<sub>2</sub>: 1 – наша методика, 2 – з використанням програми BOLSIG+.

При розв'язуванні кінетичного рівняння Больцмана враховувалися процеси пружного розсіювання електронів, дисоціативного прилипання, коливного збудження – Cl<sub>2</sub>(v=1), збудження електронних станів атома аргону та молекули хлору (V<sup>3</sup>Π<sub>i</sub>, C<sup>1</sup>Π<sub>i</sub>, V<sup>3</sup>Π<sub>i</sub> + C<sup>1</sup>Π<sub>i</sub>), а також іонізації молекул хлору та атомів аргону.

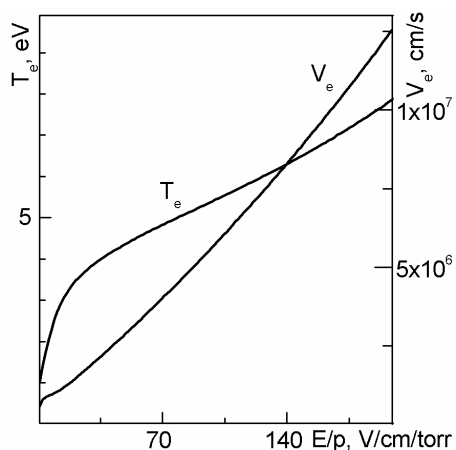


Рис. 5. Залежності температури електронів та швидкості дрейфу електронів у розряді у суміші Ar-Kr-Xe-Cl<sub>2</sub> (P<sub>зар</sub>=15,44 кПа).

### Результати моделювання

Характерний вигляд ФРЕЕ в розряді у суміші Ar-Kr-Xe-Cl<sub>2</sub> при малій та великій величинах параметра  $E/P$  (1 та 200  $V\ cm^{-1}$

$torr^{-1}$ ) представлений на рис.1 та рис.2 відповідно. Розраховані ФРЕЕ добре узгоджуються з відповідними результатами, отриманими з використанням програми BOLSIG+ [4], яка широко використовується у фізиці газового розряду. При збільшенні параметра  $E/P$  спостерігалось зростання енергії швидких електронів розряду і значне зменшення щільності електронів низьких енергій. Основна кількість електронів плазми мала енергію в діапазоні 1...10 eV. Отримані при розрахунку ФРЕЕ закономірності добре також корелюють з розрахунками для плазми тліючого розряду в сумішах Ar-Cl<sub>2</sub> [6], Ar-Xe-Cl<sub>2</sub> [7], які були розраховані також із застосуванням програми BOLSIG+ [4]. На відміну від програми BOLSIG+, у базу даних нашої програми були додані ефективні перерізи процесів ступінчатої іонізації важких інертних газів електронним ударом [8-10].

Контрольні залежності констант швидкості іонізації атомів аргону (рис.3) і дисоціативного прилипання електронів до молекул хлору (рис.4) в розряді на вказаній суміші, отримані з використанням нашої програми і програми BOLSIG+, також підтверджують коректність нашої методики розрахунків.

На рис.5 приведені залежності середньої температури і швидкості дрейфу електронів від параметра  $E/P$ .

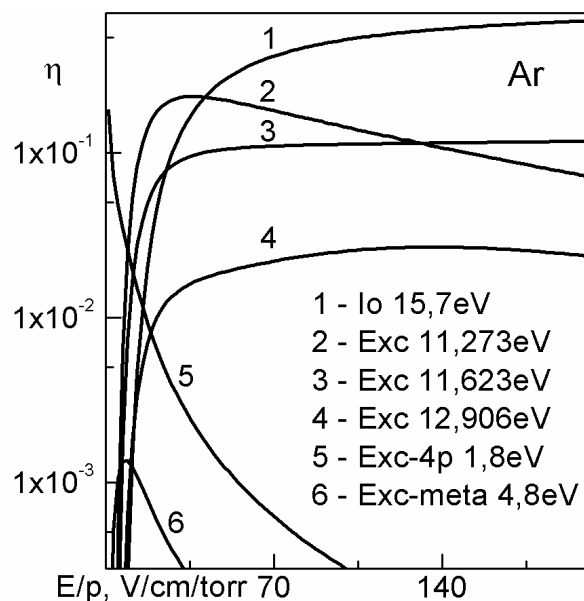


Рис.6. Питомі втрати потужності розряду на електронні процеси в плазмі для атомів аргону.

На рис.6–9 представлені залежності питомих втрат потужності розряду на пружні і непружні електронні процеси в розряді на суміші Ar-Kr-Xe-Cl<sub>2</sub>.

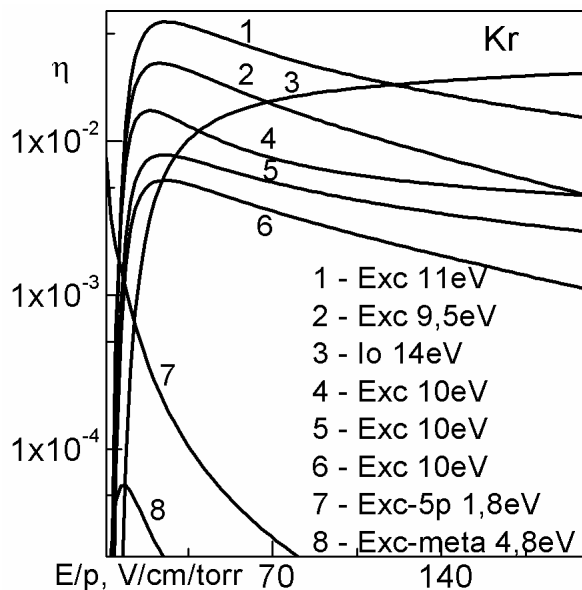


Рис.7. Питомі втрати потужності розряду на електронні процеси в плазмі для атомів криптону.

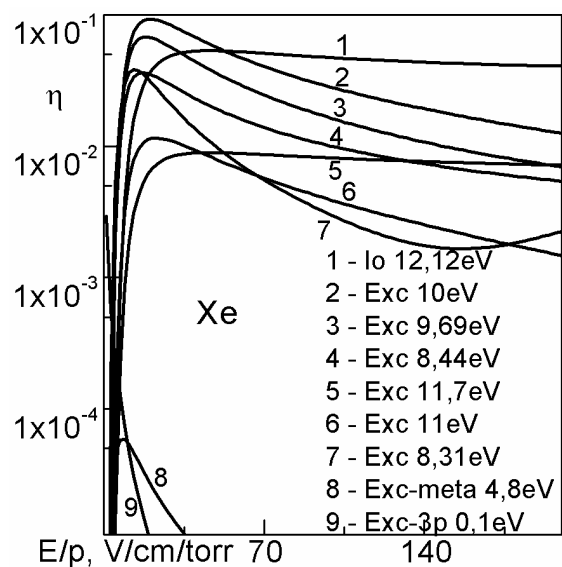


Рис.8. Питомі втрати потужності розряду на електронні процеси в плазмі для атомів ксенону.

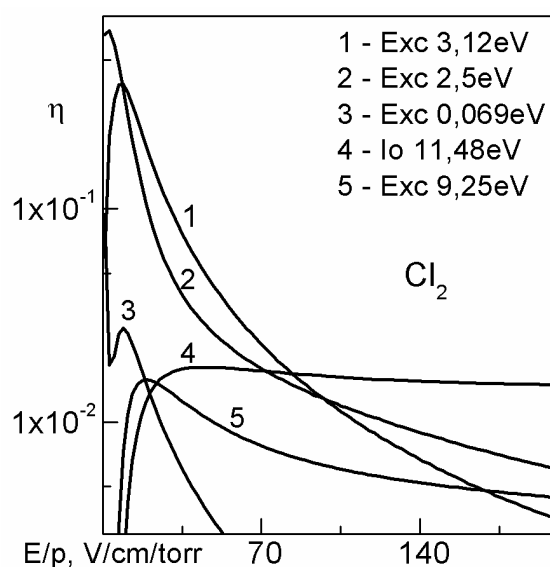


Рис.9. Питомі втрати потужності розряду на електронні процеси в плазмі для атомів молекул хлору.

### Висновки

В результаті чисельного моделювання отримано і порівняно параметри плазми, які можуть бути використаними при розрахунках кінетики процесів та інших

вихідних характеристик багатохвильової ексимерно-галогенної лампи. А це робить їх перспективними для використання у *фотохімії, мікроелектроніці і біотехнології*.

### Література

1. Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.:Наука, - 591с.
2. Самойленко А.М., Ронто Н.И. Численно-аналитические методы в теории краевых задач для ОДУ. Киев: Наукова думка, 1985. - 224 с.
3. А.Д. Мышкис. Линейные дифференциальные уравнения с запаздывающим аргументом. М.: Наука, 1972. - 352 с.
4. <http://www.siglo-kinema.com>.
5. Словецкий Д.И. Дерюгин А.А. // Химия плазмы: Сб. ст. Вып.13. Под ред Смирнова Б.М. М.: Энергоатомиздат, 1987. С.240-277.
6. Шуаибов А.К., Шевера И.В., Малинина А.А. Письма в ЖТФ. 2008. Т.34, вып.20. С.30-36.
7. Шуаибов А.К., Малинина А.А. Журнал прикладной спектроскопии. 2008. Т.75. №4. С.563-567.
8. Нуман Н.А. Phys.Rev. A, 1978. V.18, № 2. P.441-445.
9. Нуман Н.А/ Phys.Rev. A. 1979. V.20, № 3. P.855-859.
10. Шибкова Л.В., Шибков В.М. Разряд в смесях инертных газов. – М.:Физматлит, 2006. – 200 с.

## **ELECTRON ENERGY DISTRIBUTION FUNCTION AND ELECTRONIC RATES OF PLASMA IN MIXTURE Ar-Kr-Xe-Cl<sub>2</sub>**

**Vasyl Chyhin, Pavlo Gorun**

Lviv National Polytechnic University, Metropolitan Andrey St. 5, 79013, Lviv

e-mail: [vchygin@polynet.lviv.ua](mailto:vchygin@polynet.lviv.ua), [Pawlissimo@gmail.com](mailto:Pawlissimo@gmail.com)

Numerical modelling of Boltzmann kinetic equation for the electron energy distribution function was performed, being subsequently used for obtaining the transport characteristics of the plasma electrons and specific loss of the discharge power at various values of reduced electric field strength. The plasma parameter modelling was performed for a four-component mixture, being optimal for the multiwave VUV and UV radiation source operation.

