

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

На правах рукописи

СТЕПАНОВ Сергей Витальевич

Математическое моделирование плазмы комбинированных разрядов

Специальность 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва, 2013

Работа выполнена на кафедре автоматизации научных исследований факультета Вычислительной математики и кибернетики Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Научный руководитель: ШИШКИН Алексей Геннадиевич
доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник
кафедры автоматизации научных исследований
Московского государственного университета
имени М.В. Ломоносова

Официальные оппоненты: АНДРЕЕВ Валерий Филиппович
доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник
Национального исследовательского центра
“Курчатовский институт”

ЕВСТИГНЕЕВ Николай Михайлович
кандидат технических наук,
старший научный сотрудник
Института системного анализа РАН

Ведущая организация: Научно-исследовательский институт прикладной механики и электродинамики Московского авиационного института (НИИПМЭ МАИ)

Защита состоится 11 декабря 2013 года в 15.30 на заседании диссертационного совета Д.501.001.43 при Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, г. Москва, ГСП-1, Ленинские горы, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 2^{ой} учебный корпус, факультет ВМК, ауд. 685.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова по адресу: 119992, Москва, Ломоносовский проспект, 27.

Автореферат разослан « _____ » _____ 2013 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических наук,
профессор

Е.В. ЗАХАРОВ

Общая характеристика работы

Актуальность работы

Изучение газовых разрядов было начато еще в XX веке. Важное место среди них занимают емкостные высокочастотные (ВЧ) газовые разряды низкого давления. Благодаря проведенным теоретическим и экспериментальным исследованиям и полученным на их основе результатам, сегодня указанный тип газовых разрядов широко применяется для обработки материалов, включающей в себя травление, очистку и напыление, для стерилизации медицинских инструментов и материалов, а также в других областях, объединенных термином “plasma processing”.

Для возбуждения разряда применяется установка с электродами, зачастую плоско-параллельными. Как правило, электроды помещены в камеру, наполненную газом, и к ним приложено напряжение. На данный момент такие разряды хорошо описаны и исследованы как теоретически, так и практически. Однако процессы, протекающие в плазме газового разряда, в значительной мере зависят от конфигурации установки, в которой он возбуждается, в том числе от способа подключения нагрузки к электродам установки. Управление характеристиками разряда, например, энергией и потоком ионов на обрабатываемые поверхности, является одной из важнейших задач, и поэтому выявление их зависимости от конфигурации установки крайне необходимо. Возможность контролировать характеристики разряда позволяет достичь оптимальных показателей эффективности в прикладных задачах применения газового разряда. До настоящего времени не было теоретических работ, исследующих эти зависимости. Поэтому представляет интерес построение математических и численных моделей так называемых комбинированных

газовых разрядов, в которых описываются конфигурации с различными типами подключения ВЧ и постоянного напряжения к электродам.

Цели и задачи исследования

Основной целью диссертационной работы является построение математической модели и создание компьютерных кодов для численного исследования процессов, протекающих в плазме ВЧ емкостных комбинированных газовых разрядов низкого давления при различных способах подключения внешнего напряжения.

В диссертационной работе поставлены и решены следующие задачи:

- Создание методики, позволяющей исследовать комбинированные газовые разряды, возбуждаемые на установках с различными конфигурациями нагрузки электродов.
- Разработка двумерной математической модели комбинированного ВЧ газового разряда.
- Разработка интегрированной программной среды и графического интерфейса пользователя для проведения вычислительных экспериментов по моделированию комбинированных газовых разрядов, анализа получаемых данных и их визуализации. Поддержка распределенных вычислений.
- Решение ряда важных практических задач о поведении плазмы на различных установках и об изучении влияния конфигурации установки и типа нагрузки электродов на ключевые параметры плазмы возбуждаемого газового разряда. Выделение зависимостей изменения параметров газового разряда от параметров источников напряжения для каждой из рассмотренных конфигураций установок.
- Сравнение полученных теоретических результатов с экспериментальными данными и выработка рекомендаций

относительно режимов функционирования установок для получения оптимальных значений исследуемых параметров.

Научная новизна

Одной из ключевых проблем при математическом моделировании емкостных ВЧ газовых разрядов является управление их ключевыми характеристиками, такими как плотность и энергия ионов, осаждающихся на обрабатываемых поверхностях.

При возбуждении емкостного газового разряда, как правило, используется установка с двумя плоско-параллельными электродами, один из которых заземлен, а другой подключен к источнику постоянного или переменного напряжения. В такой конфигурации управление параметрами разряда в основном осуществляется с помощью изменения характеристик используемого источника.

В прикладных задачах, таких как травление, важнейшую роль играют как показатели потока, так и энергии частиц, от которых зависит эффективность и скорость основных процессов. Управление одновременно величинами потока и энергии ионов – важнейшая задача, решение которой возможно с помощью использования различных конфигураций установок с несколькими источниками постоянного или переменного напряжений.

В диссертационной работе предложены новые постановки задач математического моделирования комбинированных ВЧ газовых разрядов и изучены различные конфигурации установок, с помощью которых возбуждается разряд, с различными комбинациями ВЧ и постоянного источников напряжений. Выявлены зависимости ключевых параметров разряда, в том числе плотностей и энергии частиц, как от конфигурации подключения источников напряжения к электродам, так и от характеристик источников напряжения.

В работе сформулированы основные требования к концепции программной среды моделирования физических процессов. Так, например, важной проблемой является наличие множества численных кодов, описывающих те или иные физические процессы, с различными форматами входных и выходных данных. Ключевая задача заключается в использовании уже разработанных кодов без дополнительных трудозатрат на программирование. Разработана интегрированная программная среда моделирования «Виртуальный плазменный разряд», позволяющая в интерактивном режиме задавать последовательность вычислительного эксперимента и встраивать уже существующие коды, а также определять преобразования входных-выходных данных. С помощью разработанного компьютерного кода “Virtual Discharge” в рамках созданной в работе интегрированной среды моделирования проведены численные исследования поставленной задачи и проанализированы полученные результаты.

Теоретическая и практическая значимость

Работа имеет теоретический и прикладной характер. В диссертационной работе:

- Предложены новые постановки задач математического моделирования комбинированных высокочастотных емкостных газовых разрядов для различных способов подключения внешнего напряжения.
- Создана интегрированная среда моделирования, позволяющая с высокой эффективностью решать задачи численного определения параметров высокочастотного газового разряда и проводить вычислительные эксперименты.

- С помощью разработанных теории и программного обеспечения проведено моделирование плазменных процессов на реальных установках. Изучено влияние конфигурации установки и нагрузки электродов на ключевые параметры плазмы возбуждаемого газового разряда. Для каждой из рассмотренных конфигураций определены зависимости изменения параметров разряда от параметров источников напряжения.
- Полученные теоретические результаты использованы при решении прикладных задач, в том числе, для разработки перспективных моделей плазменных стерилизаторов медицинских изделий и инструментов.

Апробация работы

Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях и научно-исследовательских семинарах:

1. Вычислительные технологии в естественных науках. Перспективные компьютерные системы: устройства, методы и концепции. М.: ИКИ РАН, 2011.
2. XII Международный семинар "Супервычисления и математическое моделирование 11-15 октября 2010. - Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ.
3. The XXXI International Conference on Phenomena in Ionized Gases (ICPIG) July 14-19, 2013. Granada, Spain.

Публикации

По теме диссертации опубликовано 7 научных работ, в том числе 4 – в изданиях, входящих в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов ВАК РФ. Список публикаций по теме диссертации приведен в конце автореферата.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из титульного листа, оглавления, введения, трех глав, заключения и списка литературы (157 наименований). Объем работы - 107 страниц.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цели и задачи исследования, раскрыта научная новизна и практическая значимость диссертационной работы. Приведена структура диссертации и краткое содержание основных параграфов.

В **первой главе** сформулированы постановки задач исследования комбинированных газовых разрядов на установках цилиндрической формы с плоско-параллельными электродами с различными вариантами нагрузки двумя источниками ВЧ или постоянного напряжений, решению которых посвящена диссертация.

В первом параграфе главы описываются основные физические процессы плазмы газовых разрядов, приводятся их ключевые характеристики.

Во втором параграфе проводится анализ и сравнение двумерных моделей для газового разряда. Рассматриваются гидродинамическая модель, модель «частица-в-ячейке» (Particle-In-Cell) и гибридная модель. Приводятся их достоинства и недостатки, обосновывается корректность применения при различных условиях.

В третьем параграфе строится двумерная гидродинамическая модель в дрейфо-диффузионном приближении. Основу модели составляют уравнения непрерывности и передачи импульса для электронов, положительно и отрицательно заряженных ионов, уравнение баланса энергии для электронов, а

также уравнение Пуассона для электрического поля. Уравнения записываются в цилиндрических координатах:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} = - \frac{|e|}{\varepsilon_0} (n^+ - n^- - n_e) \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial (r \Gamma_{e_r})}{\partial r} - \frac{\partial \Gamma_{e_z}}{\partial z} + S_e \quad (2)$$

$$\frac{\partial n^\pm}{\partial t} = - \frac{1}{r} \frac{\partial (r \Gamma_r^\pm)}{\partial r} - \frac{\partial \Gamma_z^\pm}{\partial z} + S^\pm \quad (3)$$

$$\frac{\partial (n_e \varepsilon)}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial (r \Gamma_{\varepsilon_r})}{\partial r} - \frac{\partial \Gamma_{\varepsilon_z}}{\partial z} - \Gamma_e E - S_\varepsilon \quad (4)$$

$$\Gamma_{e_q} = - \mu_e n_e E_q - \frac{\partial (D_e n_e)}{\partial q} \quad (5)$$

$$\Gamma_{\varepsilon_q} = - \mu_\varepsilon \varepsilon n_e E_q - \frac{\partial (D_\varepsilon n_e)}{\partial q} \quad (6)$$

$$\Gamma_q^\pm = \pm \mu^\pm n^\pm (E_q^\pm)^{eff} - D^\pm \frac{\partial n^\pm}{\partial q} \quad (7)$$

$$\frac{\partial (E_q^\pm)^{eff}}{\partial t} = \frac{e}{\mu^\pm m^\pm} (E_q - (E_q^\pm)^{eff}) \quad (8)$$

где $q = (r, z)$ – радиальные и аксиальные компоненты соответственно. Используются следующие обозначения: V – потенциал электрического поля, n_e, n^\pm – плотности электронов, положительно и отрицательно заряженных ионов, $\varepsilon, \Gamma_\varepsilon$ – электронная энергия и поток электронной энергии, $(E^\pm)^{eff}$ – эффективное электрическое поле положительно и отрицательно заряженных ионов, Γ_e, Γ^\pm – потоки электронов, положительно и отрицательно заряженных ионов, ε_0 – диэлектрическая постоянная, S_e и S^\pm – суммарные изменения концентрации за счет рождения и гибели электронов вследствие кинетических процессов ионизации и рекомбинации, S_ε – диссипация энергии электронов при столкновениях, как упругих, так и неупругих, μ и D – коэффициенты подвижности и диффузии соответственно.

Диссипация энергии электронов выражается как

$$S_\varepsilon = n_e \sum_p (S_1 + S_2) \quad (9)$$

где за p обозначен тип частицы. S_1 – компонент упругих столкновений, выражаемый как

$$S_1 = n_e \frac{2m_e}{m_a} \sqrt{\frac{2e}{m_e}} \left[\int_0^\infty \sigma_{el_a} u^2 \left(f + \frac{k_B T_g}{e} \frac{\partial f}{\partial u} \right) du \right] \quad (10)$$

Здесь m_a – масса нейтрального атома или молекулы, σ_{el_a} – сечение упругих столкновений электронов с нейтралами.

S_2 – компонент неупругих столкновений, записываемый как

$$S_2 = n_e \sum_x V_{x_a} \vartheta_{x_a}, \quad (11)$$

в котором V_{x_a} – энергия возбуждения ионизации, диссоциации, возбуждения, ϑ_{x_a} – коэффициент неупругих столкновений электронов и нейтральных частиц, выражаемый через функцию распределения электронов f как:

$$\vartheta_{x_a} = \sqrt{\frac{2e}{m_e}} \int_0^\infty \sigma_{x_a} f du, \quad (12)$$

где σ_{x_a} – соответствующее сечение реакции.

Также выписываются необходимые граничные условия. На оси разряда $r = 0$ производные плотностей электронов, положительно и отрицательно заряженных ионов, средней энергии электронов и потенциала электрического поля равны нулю:

$$\frac{\partial n_e}{\partial r} = 0 \quad (13)$$

$$\frac{\partial n^\pm}{\partial r} = 0 \quad (14)$$

$$\frac{\partial (n_e \varepsilon)}{\partial r} = 0 \quad (15)$$

$$\frac{\partial V}{\partial r} = 0 \quad (16)$$

На границах установки $r = R, z = 0, z = d$, где R, d – радиус и длина цилиндра соответственно, определяются перпендикулярные потоки частиц и энергии:

$$(\Gamma_e)_\perp = \frac{1}{2} n_e \langle v \rangle \quad (17)$$

$$(\Gamma_\varepsilon)_\perp = \frac{1}{2} n_e \langle vu \rangle \quad (18)$$

$$(\Gamma^+)_\perp = \frac{1}{4} n^+ v_T^+ + \gamma^+ n^+ \mu^+ (E_\perp^+)^{\text{eff}} \quad (19)$$

$$(\Gamma^-)_\perp = 0 \quad (20)$$

Здесь

$$v_T^+ = \sqrt{\frac{8kT^+}{\pi m^+}} \quad (21)$$

$$\gamma^+ = \begin{cases} 1, (E_\perp^+)^{\text{eff}} \text{ направлено к стенке} \\ 0, (E_\perp^+)^{\text{eff}} \text{ направлено от стенки} \end{cases} \quad (22)$$

Во **второй главе** рассматривается задача проведения вычислительных экспериментов с помощью программных средств, описывается разработанная интегрированная среда моделирования «Виртуальный плазменный разряд». В главе формулируются ключевые требования к концепции программного обеспечения для проведения численных исследований:

- Возможность использования существующих кодов без дополнительных трудозатрат на программирование.
- Поддержка распределенных вычислений.
- Конвертация форматов входных-выходных данных.
- Простой и интуитивно-понятный графический интерфейс пользователя.

На основе сформулированных требований была создана интегрированная среда моделирования на языке Java, что позволило обеспечить кросс-платформенность разработанного программного обеспечения. В главе приводится описание принципа определения графа вычислительного эксперимента с помощью графического интерфейса в интерактивном режиме. В рамках интегрированной среды моделирования разработан интерактивный дизайнер гарфов вычислительных процессов (рис. 1), позволяющий легко и просто определять последовательность вычислительного эксперимента и проводить интеграцию с численными кодами, дополнительно настраивая преобразования входных-выходных данных для каждого кода.

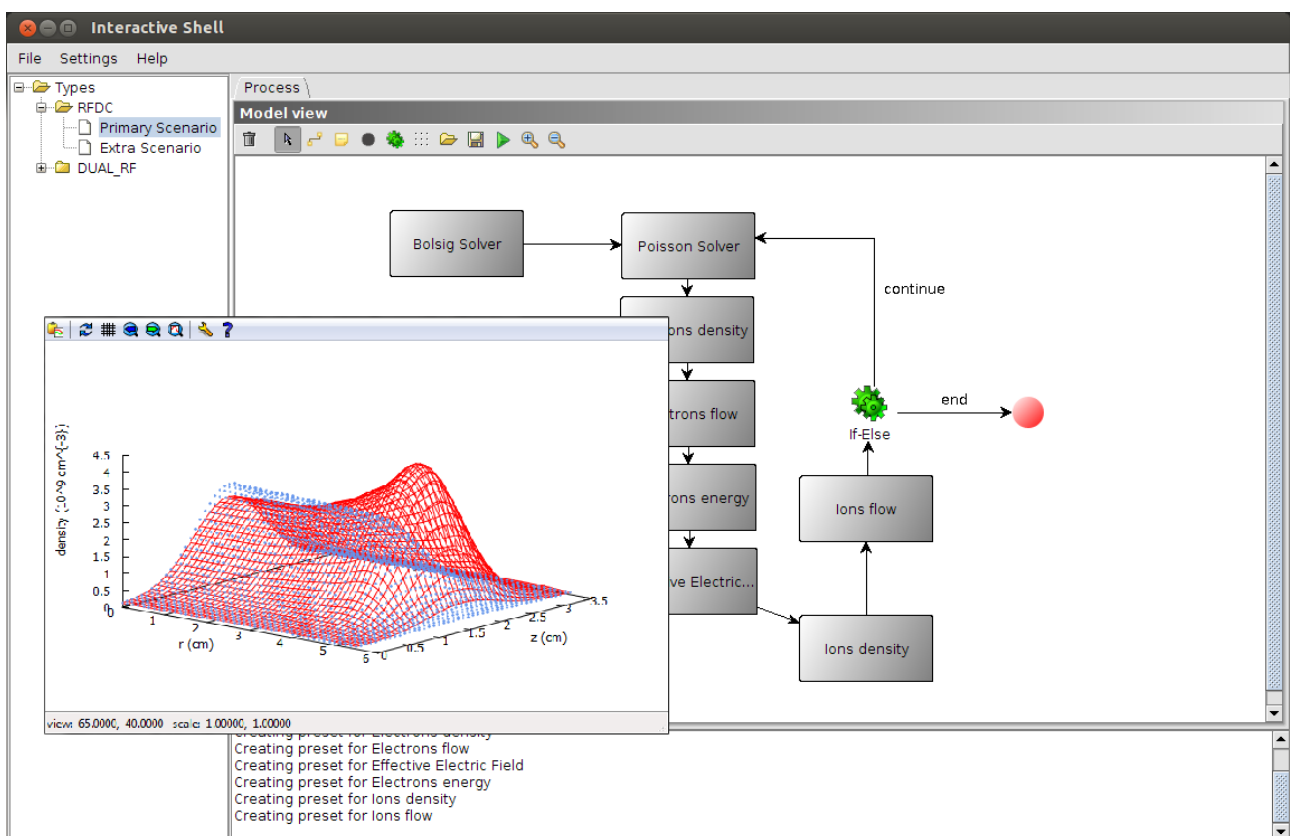


Рис 1. Пример графического интерфейса пользователя интегрированной среды моделирования «Виртуальный плазменный разряд»

Описываются механизмы интеграции с пакетами анализа и визуализации данных ScopeShell и распределенных вычислений Tadisys. Интеграция с пакетами ScopeShell и Tadisys выполнена как в локальном, так и в удаленном режимах, что позволяет подключаться к уже существующим настроенным решениям.

В главе описывается схема определения численного решения поставленной задачи моделирования и приводятся оценки эффективности применения интегрированной среды моделирования «Виртуальный плазменный разряд» для проведения вычислительных экспериментов.

В **третьей главе** описывается численное решение поставленной задачи математического моделирования комбинированных газовых разрядов. С помощью среды моделирования «Виртуальный плазменный разряд» и параллельного численного кода Virtual Discharge производится расчет основных показателей для различных конфигураций установок. Оцениваются полученные результаты, формулируются выводы о зависимости параметров газового разряда от конфигурации нагрузки электродов установки, приводятся практические рекомендации относительно выбора оптимальных конфигураций разряда и значений внешних параметров.

В первом параграфе главы для системы уравнений, составляющей основу математической модели, построена разностная схема с использованием экспоненциальной схемы Шарфеттера-Гуммеля и метода Кранка-Никольсона. Приводится описание разработанного компьютерного кода Virtual Discharge, с помощью которого численно решается поставленная задача.

Задача решается последовательно – сначала вычисляются электронные кинетические коэффициенты путем решения уравнения Больцмана в двучленном приближении, после чего вычисляется профиль электрического поля, далее находятся плотность и поток для электронов и энергии электронов.

Затем вычисляются эффективное электрическое поле, и, наконец, плотность и поток ионов.

Во втором параграфе приводятся результаты численных исследований для различных конфигураций установок:

- Один электрод подключен к двум источникам переменного ВЧ напряжения (рис. 2)
- Два электрода подключены к различным источникам переменного ВЧ напряжения (рис. 3)
- Один электрод подключен к источникам постоянного и переменного ВЧ напряжений (рис. 4)

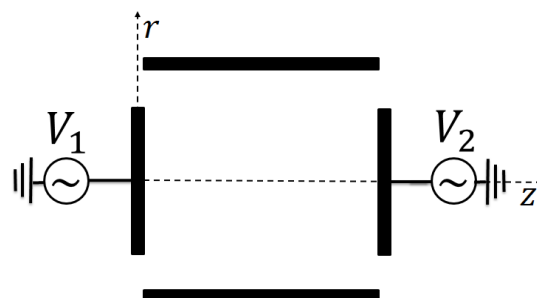
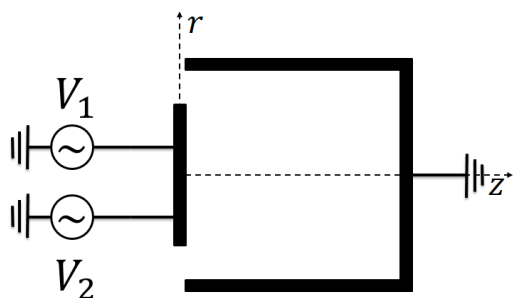


Рис. 2. Схематичное изображение конфигурации установки с одним нагруженным двумя источниками ВЧ напряжения электродом.

Рис. 3. Схематичное изображение конфигурации установки с двумя нагруженными электродами двумя источниками ВЧ напряжения.

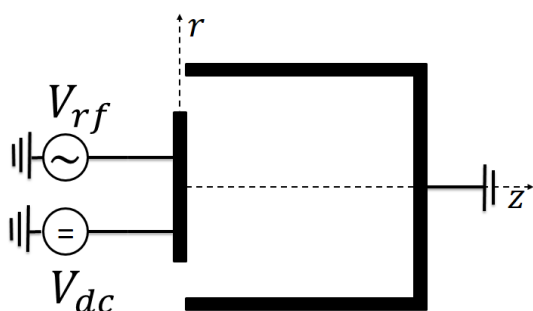


Рис. 4. Схематичное изображение конфигурации установки с одним

нагруженным электродом источниками ВЧ и постоянного напряжений.

На основе полученных с помощью интегрированной среды разработки «Виртуальный плазменный разряд» и численного кода Virtual Discharge результатов исследуется вопрос зависимости ключевых характеристик разряда от конфигурации установки и варианта подключения нагрузки к электродам.

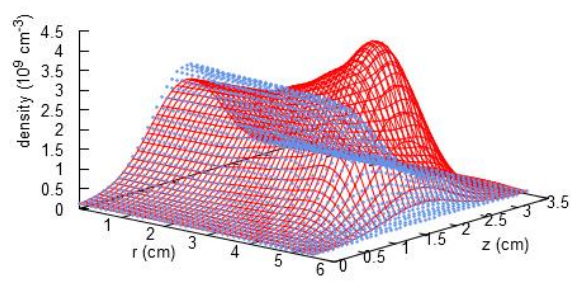
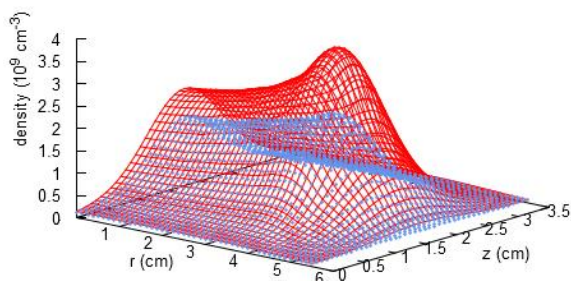


Рис. 5. Усредненные по времени плотности электронов для конфигурации с одним нагруженным электродом (синий) и двумя нагруженными электродами (красный) источниками ВЧ напряжений, давление $p=500\text{mTorr}$, напряжения, давление $p=500\text{mTorr}$, $V_{rf} = 220\text{V}$, $f_{rf} = 4,52\text{MHz}$, $V_2 = 50\text{V}$, $f_2 = 45,2\text{MHz}$.

Рис. 6. Усредненные по времени плотности электронов для конфигураций с двумя нагруженными электродами переменного и постоянного напряжений, давление $p=500\text{mTorr}$, $V_{rf} = 220\text{V}$, $f_{rf} = 13,56\text{MHz}$, $V_{dc} = 0\text{V}$ (синий), и $V_{dc} = 200\text{V}$ (красный).

На основе анализа результатов показано, что в зависимости от варианта нагрузки электродов и параметров источников напряжений возможно повышать показатели ключевых параметров, таких как плотность и энергия частиц.

Так, в случае нагрузки электродов двумя ВЧ источниками параметры разряда в значительной мере зависят как от варианта нагрузки электродов (нагружен один электрод или оба электрода), так и от частот источников. В случае совмещения источников переменного и постоянного напряжений выявлено, что параметры разряда, возбужденного на установке с указанной конфигурацией, также в значительной мере зависят от напряжения источника постоянного тока, варьируя которое, возможно управлять профилями плотностей и энергии частиц.

В третьем параграфе проведено сравнение полученных теоретических результатов с экспериментальными данными для аналогичных конфигураций установок. Отмечен высокий показатель корреляции данных.

В четвертом параграфе сделаны выводы относительно способов подключения внешнего напряжения и выработаны рекомендации для получения оптимальных значений ключевых параметров разряда при его использовании в прикладных задачах, в частности, для плазменной стерилизации медицинских инструментов и материалов.

В **заключении** сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе и выносимые на защиту.

Основные результаты

1. Предложены новые постановки задач о возбуждении высокочастотного емкостного комбинированного газового разряда для различных способов подключения внешнего напряжения.
2. Разработана математическая модель комбинированных высокочастотных газовых разрядов.
3. Разработан эффективный численный метод решения поставленных задач.
4. Создана интегрированная среда моделирования, позволяющая с высокой эффективностью решать задачи численного определения параметров

высокочастотного газового разряда и проводить вычислительные эксперименты для существующих устройств.

5. С помощью разработанных теории и программного обеспечения проведено моделирование плазменных процессов на реальных установках. Впервые изучено влияние конфигурации установки и нагрузки электродов на ключевые параметры плазмы возбуждаемого газового разряда. Для каждой из рассмотренных конфигураций определены зависимости изменения параметров разряда от параметров источников напряжения. Выработаны рекомендации относительно нахождения оптимальных режимов функционирования газоразрядных устройств для задач плазменной стерилизации.

Публикации по теме диссертации

(Научные статьи в журналах и изданиях, включенных в перечень ВАК, выделены курсивом):

1. *С.В. Степанов, А.Г. Шишкин - Использование средств статической отладки для верификации программной среды ScopeShell // Вычислительные методы и программирование. 2009. № 10. С. 22-33.*
2. *Д.П. Костомаров, Ф.С. Зайцев, А.Г. Шишкин, С.В. Степанов - Графический интерфейс ScopeShell: поддержка вычислительного эксперимента и визуализация данных // Вестн. Моск. Ун-та. Сер. 15. Вычисл. матем. и киберн. 2010. № 4. С. 42-48.*
3. *Д.П. Костомаров, Ф.С. Зайцев, А.Г. Шишкин, Д.Ю. Сычугов, С.В. Степанов, Е.П. Сучков - Программное обеспечение библиотеки "Виртуальный Токамак" // Вестн. Моск. Ун-та. Сер. 15. Вычисл. матем. и киберн. 2011. № 4. С. 48-54.*
4. *Д.П. Костомаров, Ф.С. Зайцев, А.Г. Шишкин, С.В. Степанов, Е.П. Сучков - Автоматизация проведения вычислений в программном комплексе*

"Виртуальный Токамак" // Вестн. Моск. Ун-та. Сер. 15. Вычисл. матем. и киберн. 2012. № 4. С. 7-10.

5. Ф.С. Зайцев, А.Г. Шишкин, Д.Ю. Сычугов, В.Э. Лукаш, Ю.В. Митришкин, Р.Р. Хайрутдинов, С.В. Степанов, Е.П. Сучков. Структура и функциональные возможности комплекса имитационного моделирования "Виртуальный токамак". // Вычислительные технологии в естественных науках. Перспективные компьютерные системы: устройства, методы и концепции. М.: ИКИ РАН, 2011, 3 с.
6. Ф.С. Зайцев, Д.Ю. Сычугов, А.Г. Шишкин, В.Э. Лукаш, Ю.В. Митришкин, Р.Р. Хайрутдинов, В.Н. Докука, И.Б. Семенов, А.А. Лукьяница, И.В. Зотов, В.В. Нефёдов, С.В. Степанов, Е.П. Сучков, С.А. Унучек. Концепция комплекса имитационного моделирования «Виртуальный токамак» с системами управления плазмой. // XII Международный семинар "Супервычисления и математическое моделирование 11-15 октября 2010. - Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2011, с. 194-195.
7. A.G. Shishkin, S.V. Stepanov. Theoretical Study of Dual Frequency RF and RF/DC Plasma Discharges // The XXXI International Conference on Phenomena in Ionized Gases (ICPIG) July 14-19, 2013. Granada, Spain.