

УЧЕТ ПРОЦЕССА ЗАРЯДКИ ТВЕРДЫХ ЧАСТИЦ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ЭВОЛЮЦИИ ПЫЛЕВОЙ КОМПОНЕНТЫ ПЛАЗМЫ В НОРМАЛЬНОМ ТЛЕЮЩЕМ РАЗРЯДЕ

А.С. Дикалюк, С.Т. Суржиков

*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук,
119526, Москва, проспект Вернадского 101-1*

Аннотация

В работе изложены результаты применения OML-теории для моделирования процесса зарядки твердых частиц в плазме тлеющего разряда. Производится сравнение стационарных состояний пылевого облака в результате его эволюции в плазме тлеющего разряда при рассмотрении процесса зарядки по указанной теории и с помощью качественной оценочной формулы.

TAKING ACCOUNT OF CHARGING PROCESS FOR EVOLUTION OF DUSTY PLASMA COMPONENT IN NORMAL GLOWING DISCHARGE SIMULATION.

The results of the OML-theory application to grain charge calculation in normal glowing discharge are presented in the paper. Also simple formula was used in order to estimate grain charge. Both of these models were utilized to obtain stationary state distribution of dust particles. Comparison of these distributions was made.

1. ВВЕДЕНИЕ

Пылевая плазма – физический объект, который присутствует как в природных условиях (кольца планет-гигантов, межзвездная пыль, атмосфера планет), так и в лабораторных (плазма ТОКАМАК, установки для травления микросхем). В результате данный объект активно изучается: исследованию пылевой плазмы посвящены работы [2–4], а так же книга [5].

Одним из важнейших процессов для плазменнопылевых систем является зарядка твердых микрочастиц. Его важное свойство – зависимость величины заряда частицы от ее местоположения в плазме разряда. Считается, что именно благодаря этому происходит образование вихрей в пылевой плазме [5].

Потому в данной работе, основанной на [6], мы провели сравнение двух способов (OML-теория и качественная формула) вычисления заряда твердых частиц и проанализировали влияние этих моделей на эволюцию плазменнопылевой системы в целом.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В самом общем случае невозможно проводить раздельное моделирование плазмы разряда и динамики твердых частиц, так как между этими подсистемами постоянно происходит обмен энергией и веществом. Поток плазменных частиц (ионов и электронов) на пылевую частицу не прекращается даже тогда, когда заряд последней установился.

Однако если моделировать такое количество твердых частиц, что параметр Хавнеса $P = Z_d n_d / n_e \ll 1$, то можно считать, что пыль не влияет на плазму разряда [2, 3, 7]. Качественно этот параметр показывает отношение электронов накопленных на твердых частиц и свободных электронов. В типичных лабораторных экспериментах частица размером 10 мкм может накопить на себе заряд $Z_d \sim 10^4 e \div 10^5 e$ [5], а характерное число свободных электронов в плазме нормального тлеющего разряда составляет $n_e \sim 10^9 \text{ см}^{-3}$. Таким образом, можно оценить количество пылевых частиц, при котором, они не изменяют значительно состав плазмы: $n_d \sim 10^4 \text{ см}^{-3}$.

Данное замечание позволяет последовательно рассчитывать сначала распределение параметров в плазме нормального тлеющего разряда, а затем заряд и динамику твердых частиц в нем.

На Рис.1 представлена схема нормального тлеющего разряда.

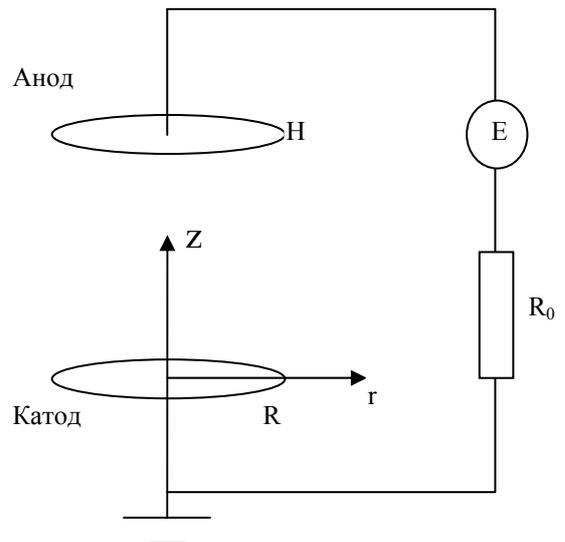


Рис. 1. Схема задачи о нахождении распределения параметров плазмы нормального тлеющего разряда

Решение данной задачи подробно рассмотрено в [1]. Задача решается в диффузионно-дрейфовом приближении. Основная система уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_{e,i}}{\partial t} + \text{div} \bar{\Gamma}_{e,i} &= \alpha |\bar{\Gamma}_e| - \beta n_e n_i, \\ \text{div} \bar{E} &= 4\pi e (n_i - n_e), \\ \bar{\Gamma}_{e,i} &= -D_{e,i} \text{grad} n_{e,i} - n_{e,i} \mu_{e,i} \bar{E}, \\ \bar{E} &= -\text{grad} \varphi, \end{aligned} \tag{1}$$

где n_e, n_i – концентрации электронов и ионов в 1 см^{-3} ;

\vec{E} и φ – вектор напряженности электрического поля и его потенциал; D_e , D_i – коэффициенты диффузии электронов и ионов; μ_e , μ_i – подвижности электронов и ионов; $\alpha = \alpha(|\vec{E}|)$ – коэффициент ударной ионизации молекул электронами (первый коэффициент Таунсенда); β – коэффициент ион-электронной рекомбинации.

Граничные условия задачи имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} z = 0: & \Gamma_{e,z} = \gamma \Gamma_{i,z}, \varphi = 0, \\ z = H: & n_i = 0, \varphi = V, \\ r = 0: & \frac{\partial n_e}{\partial r} = \frac{\partial n_i}{\partial r} = \frac{\partial \varphi}{\partial r} = 0, \\ r = R: & \text{a) } n_e = n_i = 0, \varphi = \frac{V}{H} z; \\ & \text{b) } \frac{\partial n_e}{\partial r} = \frac{\partial n_i}{\partial r} = \frac{\partial \varphi}{\partial r} = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

где R и H – размеры расчётной области вдоль осей r и z соответственно; γ – коэффициент электрон-ионной эмиссии с поверхности катода; V – падение напряжения на разрядном промежутке.

Основываясь на вычисленных распределениях параметров разряда, методом молекулярной динамики проводится моделирование движения пылевых частиц. Основные уравнения имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{r}_d}{dt} &= \vec{v}_d, \\ m_d \frac{d\vec{v}_d}{dt} &= \vec{F}_d, \end{aligned} \quad (3)$$

где \vec{r}_d – положение пылевой частицы; \vec{v}_d – её скорость; m_d – масса; \vec{F}_d – результирующая всех сил, действующих на частицу. Основываясь на работах [2–5], мы учитываем следующие силы, действующие на твердую частицу:

- $F_g = m_d g$ – сила тяжести;
- $\vec{F}_e = Q_d \vec{E}$ – электрическая сила, действующая со стороны электрического поля разряда на заряженную пылевую частицу;
- $\vec{F}_n = -\frac{8\sqrt{2}\pi}{3} \gamma_n a^2 n_n k_B T_n \frac{\vec{v}_d}{v_{Tn}}$ – сила трения пылевой частицы о нейтральные атомы плазмы (формула Эпштейна);
- $\vec{F}_{id}^c = \pi n_i v_s m_i \vec{v}_{id} b_c^2$ – неупругая составляющая силы ионного увлечения;
- $\vec{F}_{id}^o = 4\pi n_i v_s m_i \vec{v}_{id} b_{\pi/2}^2 \ln \Gamma$ – упругая составляющая силы ионного увлечения.

В данных формулах g – ускорение свободного падения; Q_d – заряд твердой частицы, выраженный в ед. заряда СГСЭ (вопрос вычисления заряда будет обсуж-

даться ниже); γ_n – коэффициент порядка единицы; a – радиус частицы; m_n , n_n , $v_{Tn} = \sqrt{k_B T_n / m_n}$, T_n – масса, концентрация, тепловая скорость и температура нейтральных атомов соответственно; k_B – константа Больцмана; $v_s = \sqrt{v_{thi}^2 + v_{id}^2}$, $\vec{v}_{id} = \vec{v}_i - \vec{v}_d$, $\vec{v}_i = \vec{\Gamma}_i / n_i$ – дрейфовая скорость ионов; $v_{thi} = \sqrt{8k_B T_i / \pi m_i}$ – средняя тепловая скорость ионов; m_i , T_i – масса и температура ионов; $b_c = a \left[1 - \frac{2e\varphi_d}{m_i v_s^2} \right]^{1/2}$ – параметр столкно-

вения ионов и твердой частицы; $b_{\pi/2} = \frac{e\varphi_d}{m_i v_s^2}$,

$$\ln \Gamma = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\lambda_{De}^2 + b_{\pi/2}^2}{b_c^2 + b_{\pi/2}^2} \right) \quad \text{– кулоновский логарифм.}$$

Твердые частицы взаимодействуют между собой по потенциалу Дебая–Хюккеля. Ввиду того, что соответствующие формулы для потенциала и силы общеприняты, они здесь не приводятся. С точки зрения реализации стоит отметить, что все частицы взаимодействуют со всеми, на каком бы расстоянии они не находились.

3. МОДЕЛИ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПРОЦЕССА ЗАРЯДКИ ТВЕРДЫХ ЧАСТИЦ

Как указывалось ранее, в данной работе вычисление заряда производится двумя методами. Стационарный заряд частицы можно оценить исходя из следующих физических соображений. Электрон, подлетая к отрицательно заряженной частице (а так чаще всего и бывает в случае лабораторной плазмы), начинает тормозиться в ее поле. Заряд частицы не будет меняться заметно, если у основной массы электронов не будет достаточно кинетической энергии для преодоления потенциальной энергии их взаимодействия с твердой частицей. В этом случае они не достигнут поверхности последней. Таким образом, получаем

$$Q_d \sim -\frac{k_B T_e a}{e}, \quad (4)$$

здесь T_e – температура электронов; e – заряд электрона по модулю.

Но преимущество данной формулы заключается только в том, что она позволяет быстро и просто оценить заряд микрочастицы. Более адекватным методом для расчета заряда твердой частицы является использование OML-теории. В основу данной теории положены два предположения [2]:

1. Независимо от пространственной структуры потенциала в плазме, любая плазменная частица, первоначально находящаяся далеко от пылевой частицы, может непосредственно попасть на её поверхность и при этом поглощается пылевой частицей (прилипает к её поверхности). Это предположение приводит к тому, что сечения рассеяния плазменных частиц на пылевой могут быть вычислены лишь исходя из законов сохранения, что позволяет избежать трудностей с вычисле-

нием точного распределения потенциала вокруг пылевой частицы.

2. Для сферических пылевых частиц существует предельный прицельный параметр плазменной частицы, когда она поглощается пылевой частицей. Этот предельный прицельный параметр соответствует нормальному касанию электронов или ионов пылевой частицы. Данное предположение подчеркивает тот факт, что если прицельный параметр плазменной и пылевой частицы больше предельного, то такая частица не поглотится ни при каких условиях.

Приведем соответствующие формулы:

$$dQ_d/dt = I_e + I_i,$$

$$I_i = en_i \pi a^2 v_s \left[1 - \frac{2e\phi_d}{m_i v_s^2} \right],$$

$$I_e = -en_e \pi a^2 v_{the} \exp\left(\frac{e\phi_d}{k_B T_e}\right),$$

$$Q_d = a\phi_d. \tag{5}$$

Преимущество этого подхода состоит в том, что величина заряда твердой частицы существенно зависит от ее положения в плазме разряда, что очень важно для моделирования динамики пылевой подсистемы, как было описано ранее.

Однако не стоит полагать, что OML-теория окончательно решает задачу о зарядке твердых микрочастиц в плазме разряда. В работе [3, 8] приводятся доводы в пользу того, что границы применимости данной теории уже, чем считается традиционно. В книге [5] указаны проблемы, которые следует рассмотреть прежде, чем утверждать, что обсуждаемая задача полностью решена.

Остановимся на численных проблемах, связанных с совместным интегрированием уравнений движения (используется алгоритм Верле) и зарядки пылевых частиц. Характерный временной масштаб (см. систему уравнений (5)), на котором происходит зарядка частиц составляет $\sim 10^{-6}$ с [5]. Движение частиц происходит на временном масштабе ~ 1 с. Для преодоления этой проблемы в работе использовался невязный метод Ньютона решения дифференциальных уравнений, что позволило сочетать простоту реализации и возможность считать уравнение зарядки с относительно произвольным шагом по времени.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Проводилось моделирование зарядки и движения пылевых частиц в плазме нормального тлеющего разряда, созданного при давлении $p = 2$ тор и $V = 2$ Кв. Как указывалось ранее, сначала производился расчет распределения плазменных параметров. На Рис. 2 представлены результаты вычислений.

Далее во всей расчетной области располагались твердые частицы. Использованное в данной работе начальное положение 400 моделируемых частиц представлено на Рис. 3, их плотность полагалась 1 г/см^3 , радиус (частицы полагались сферическими) 7 мкм . Сначала представим результаты расчета, когда заряд

частиц оценивался по формуле (4). Тут стоит отметить, что вычисление температуры электронов в плазме не производилось. Она полагалась постоянной по всей расчетной области и равной 1 эВ .

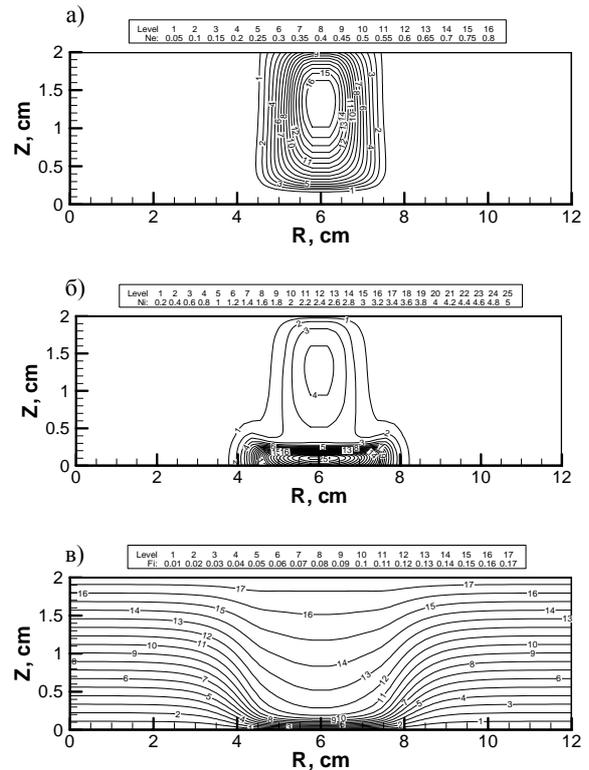


Рис. 2. Распределение плазменных параметров в тлеющем разряде при $p = 2$ тор и $V = 2$ Кв: а) распределение концентрации электронов; б) распределение концентрации ионов; в) распределение потенциала

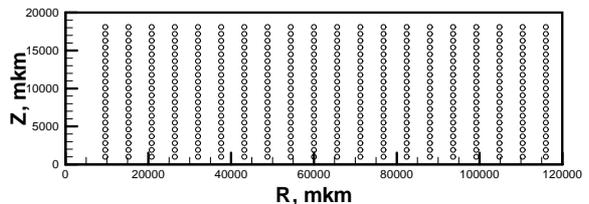


Рис. 3. Использованное в данной работе начальное распределение пылевых частиц

С учетом параметров плазмы и микросфер имеем по формуле (4) $Z_d = -4667e$. Специально отметим, что в результате использования данной формулы заряд каждой частицы в любой момент времени оказывался постоянным и равным приведенному выше значению. Рассмотрим стационарное положение частиц в данном случае. Оно представлено на Рис. 4.

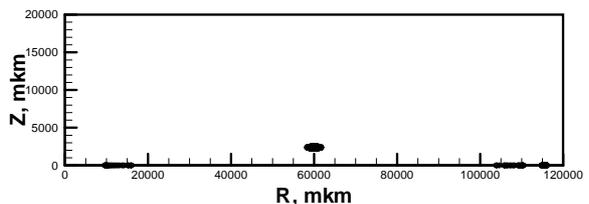


Рис. 4. Стационарное положение пылевого облака в случае, когда заряд частиц вычислялся по формуле (4)

В увеличенном масштабе детали полученной структуры можно рассмотреть на Рис. 5.

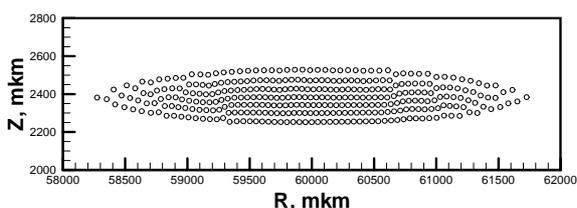


Рис. 5. Увеличенное изображение пылевого облака представленного на Рис. 4

Таким образом, мы получаем, что при использовании формулы (4) для оценки заряда микросфер форма пылевого облака оказывается вытянутой вдоль электродов. Размер облака вдоль оси R составляет 3.5 мм, в направлении оси Z – 0.275 мм. Облако находится на высоте 2.5 мм над верхним электродом, что соответствует границе катодного слоя. Структура облака в основной его части (т.к. рассматривается цилиндрическая геометрия) представляет собой плоские в горизонтальном направлении окружности, разделенные равными расстояниями $\sim 40 \div 50$ мкм. Это примерно соответствует ионной дебаевской длине в данном месте (~ 40 мкм), которая бралась в качестве дебаевской длины экранирования в потенциале взаимодействия частиц друг с другом.

Оставив неизменным начальное положение и параметры частиц, изменим способ описания зарядки. Теперь величину заряда будем описывать с помощью системы уравнений OML-теории (5). Рассмотрим результаты. На Рис. 6 представлена зависимость заряда, усредненного по всем частицам, находящимся в расчетной области от времени.

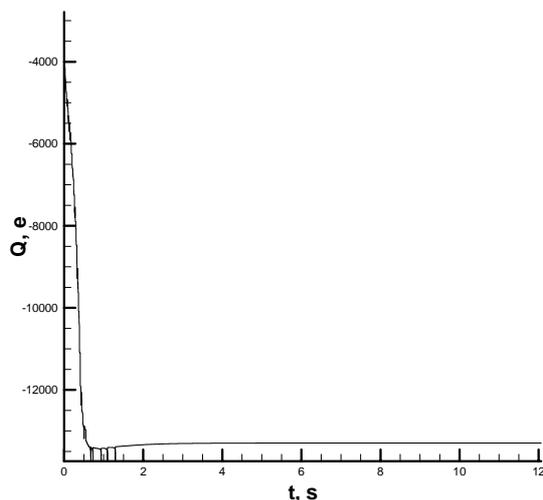


Рис. 6. Зависимость заряда усредненного по всему ансамблю частиц, находящихся в расчетной области от времени

Из этого графика следует, что средний заряд частиц составляет около $Z_d = -13270e$, что примерно в 3 раза больше, чем оценка по формуле (4). Так же видно, что значение заряда устанавливается тогда, когда перестают существенно меняться положения частиц (это следует из того, что время установления заряда приблизительно равно характерному времени движения частиц).

Распределение заряда частиц в пространстве представлено на Рис. 7. Из рисунка видно, что по абсолютному значению меньше заряд тех частиц, которые находятся ближе к катоду, что неудивительно. Это происходит потому, что в катодном слое электрическое поле больше, чем вдали от него. Масса всех частиц одинакова (значит, гравитационная сила так же одинакова), а значит заряд частиц, находящихся ближе к катодному слою должен быть по модулю меньше, чем частиц, находящихся дальше от него.

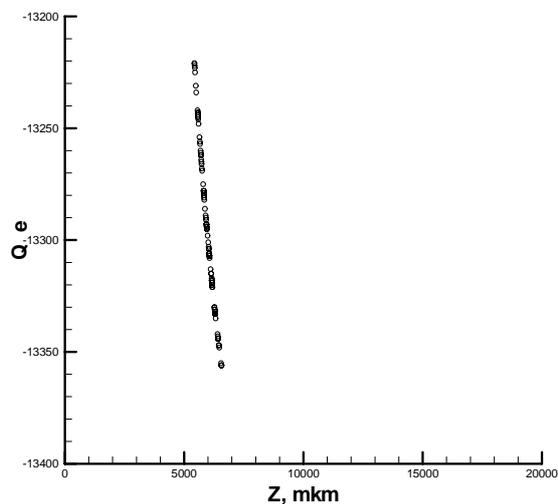


Рис. 7. Распределение заряда частиц вдоль оси Z

На Рис. 8 изображено стационарное состояние пылевого облака в рассматриваемом случае.

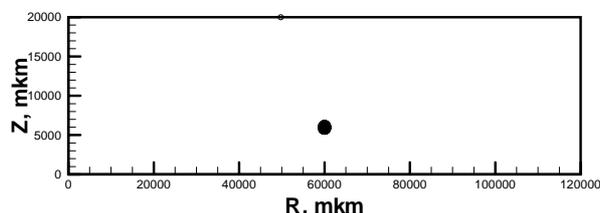


Рис. 8. Стационарное положение пылевого облака в случае, когда заряд частиц вычислялся по OML-теории

На Рис. 9 в увеличенном масштабе можно рассмотреть детали полученной структуры.

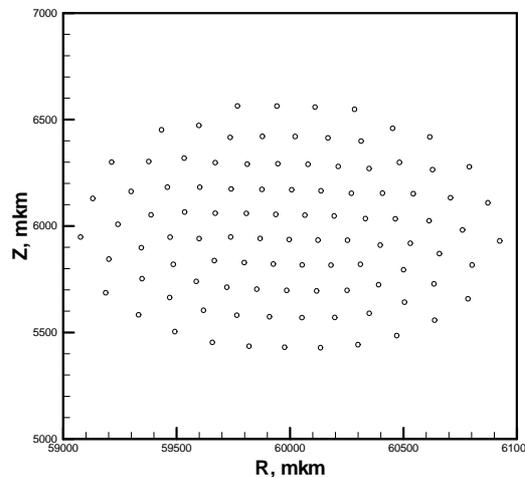


Рис. 9. Увеличенное изображение пылевого облака представленного на Рис. 8

Из Рис. 8 и 9 можно установить, что при использовании ОМЛ-теории для вычисления заряда твердой частицы форма облака представляет эллипс, у которого длина большой полуоси 1 мм, а длина малой полуоси 0.5 мм. Облако находится на высоте 6 мм над катодом, что 2 раза выше, чем высота облака в случае, когда заряд составляющих его частиц оценивался по формуле (4). Расстояние между микросферами в данном случае ~130 мкм.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате работы было исследовано влияние модели, описывающей процесс зарядки твердых частиц, помещенных в плазму разряда на стационарное состояние пылевого облака. Показано, что форма, размер и положение последнего весьма чувствительно к этому выбору. Приведены результаты применения ОМЛ-теории к процессу вычисления заряда твердых частиц, которые не противоречивы с качественной картиной явления.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Суржиков С.Т. «Физическая механика газовых разрядов» // Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2006 г.
2. Цытович В.Н. «Плазменно-пылевые кристаллы, капли и облака» // УФН Том 167 №1, 57–99 (1997).
3. Фортвов В.Е., Храпак А.Г., Храпак С.А., Молотков В.И., Петров О.Ф. «Пылевая плазма» // УФН Том 174 №5, 496–544 (2004).
4. Davoudabadi M., Mashayek F. «Simulation of Nanoparticles Dynamics in Low-Pressure Cold Plasma Reactor» // 44th AIAA 2006 — 1169, 1 – 15.
5. Tsytoovich V.N., Morfill G., Vladimirov S.V., H.M. Thomas «Elementary Physics of Complex Plasmas» // Springer Berlin / Heidelberg, 2008.
6. Дикалюк А.С., Суржиков С.Т. «Моделирование пылевой компоненты плазмы методами молекулярной динамики в нормальном тлеющем разряде» // ИПМех РАН 2010, препринт №
7. Sukhinin G.I., Fedoseev A.V., Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N., Amangalieva R. «Dust particle charging in DC glow discharge plasma» // 28th ICPIG, 2215 – 2218 (2007).