

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ИОНОВ МЕТАЛЛОВ В ВАКУУМНОЙ ДУГЕ

А.В. Недоля, Е.И. Пиваев, И.Н.Титов

Запорожский национальный университет

Украина

Поступила в редакцию 25.09.2010

Предложена нелинейная модель ионизации цилиндрического потока плазмы вакуумной дуги, которая учитывает рекомбинацию ионов и позволяет рассчитать распределение ионов различных металлов в вакуумной дуге. Показано, что вблизи оси вакуумной дуги определяющее значение имеет энергия ионизации, вследствие малой длины свободного пробега ионов. С увеличением расстояния от оси вакуумной дуги более существенное влияние на распределение ионов оказывают их массы и процессы рекомбинации.

**Ключевые слова:** вакуумная дуга, математическая модель, ионизация, рекомбинация, плазма.

Запропонована нелінійна модель іонізації потоку плазми вакуумної дуги, яка враховує рекомбінацію іонів і дозволяє розрахувати розподіл іонів різних металів у вакуумній дузі. Показано, що поблизу осі вакуумної дуги визначальне значення має енергія іонізації, внаслідок малої довжини вільного руху іонів. Зі збільшенням відстані від осі вакуумної дуги вплив процесів рекомбінації і маси іонів на їх розподіл стає більш суттєвим.

**Ключові слова:** вакуумна дуга, математична модель, іонізація, рекомбінація, плазма.

A nonlinear model of a cylindrical ionization of the plasma flow of matter, which takes into account the recombination of ions and allows us to estimate distribution of ions of different metals in vacuum arc, was offered. It is shown that near the axis of the vacuum arc dominates the impact ionization energy, due to the small free length of ions. At a distance substantially influence of the masses of ions and values of the recombination coefficient.

**Keywords:** vacuum arc, a mathematic model, ionization, recombination, plasma.

## ВВЕДЕНИЕ

Исследование процессов, происходящих в плазме вакуумной дуге, является актуальной проблемой и имеет большое практическое значение для оптимизации технологических параметров при получении поверхностных слоев и пленок сверхпроводящего металла для резонаторов ускорителей элементарных частиц [1 – 3]. Из-за большого количества факторов, которые влияют на формирование вакуумной дуги, подбор условий осаждения металла для получения металлических поверхностей с заданными свойствами без использования моделирования этого процесса, является очень трудоемкой задачей. Среди процессов, которые определяют свойства вакуумной дуги, особое место занимает радиальная диффузия ионов [4].

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Для исходной модели рассмотрим процесс формирования вакуумной дуги на катоде: с катода испаряется металл, который ионизируясь, создает поток плазмы с известными

параметрами (средний заряд иона  $Z$ , концентрация ионов фоновой плазмы  $n_0$ , температура электронов  $T_e$ , температура ионов  $T_i$ ). Для упрощения модели считаем, что с цилиндрического катода происходит испарение нейтральных атомов, а ионизация этих паров происходит при их взаимодействии с электронами плазмы [5]. При этом имеет место градиент температуры электронов, который обеспечивает необходимый подвод энергии, а ионизация пара происходит за счет высокой теплопроводности электронного газа. В модели этот градиент считаем малым вследствие высокой теплопроводности электронного газа, а константу ионизации  $K_i(T_e)$ , как функцию электронной температуры, считаем постоянной и заданной, что позволяет использовать эффективное значение этой константы.

Основным приближением модели является предположение о диффузионном характере движения ионов в разлетающемся паровом облаке, что характерно для движения ионов в газоразрядной плазме высокого давления. Для плазмы вакуумной дуги также характе-

рен этот процесс благодаря тому, что движение ионов происходит в собственном газе, а сечение перезарядки металлических ионов при низких энергиях достаточно велико [6]. Температуру электронов в плазме считаем на порядок выше ионной, а для коэффициента амбиполярной диффузии ионов в собственных парах используем оценку:

$$D_a(r) = \frac{1}{3} \bar{v}_i \lambda \left(1 + \frac{T_e}{T_i}\right) \approx \sqrt{\frac{RT_e}{M}} \frac{\sqrt{T_e/T_i}}{3\sigma^* n_a(r)}, \quad (1.1)$$

где  $M$  – молярная масса ионов,  $\lambda = 1/\sigma^* \cdot n_a$  – средняя длина свободного пробега ионов,  $\sigma^*$  – транспортное сечение перезарядки,  $\bar{v}_i$  – средняя тепловая скорость ионов,  $n_a$  – концентрация нейтральных атомов.

Правомочность использования диффузионного приближения обусловлена тем, что длина свободного пробега намного меньше размеров системы, т.е. поперечного размера дуги  $R$  в нашем случае. Соответствующий критерий в нашей задаче должен выполняться только вблизи воображаемой границы плазменной струи:

$$\frac{R}{\lambda} = \sigma^* n_a(R) R \gg 1. \quad (1.2)$$

В расчетах используется концентрация нейтральных атомов  $n_a$ , которая соответствует приближению постоянной скорости струи:

$$n_a(r) = n_a(R) \left(\frac{R}{r}\right)^2. \quad (1.3)$$

Кроме того, считаем степень ионизации пара достаточно малой величиной, чтобы не учитывать влияние заряженных частиц на коэффициент диффузии ионов (1.1). С другой стороны, считаем ионизированный газ достаточно плотным, чтобы выполнялось условие квазинейтральности для концентрации ионов  $n_i$  и электронов  $n_e$ :  $n_e = Zn_i(r)$ . В дополнение учитываем рекомбинацию заряженных частиц.

Сформулированные допущения в модели соответствуют квазистационарным процессам в вакуумной дуге. Поэтому эволюция концентрации ионов плазмы, которая движется сквозь собственный пар, описывается цилиндрически симметричным нелинейным уравнением непрерывности:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r D_a(r) \frac{dn_i}{dr}) = \beta n_i^2 - K_i(T_e) n_a(r) n_e, \quad (1.4)$$

где  $r$  – радиальная координата,  $\beta$  – коэффициент рекомбинации заряженных частиц,  $K_i(T_e)$  константа ионизации, которая определяется формулой:

$$K_i(T_e) = \bar{\sigma}_i \sqrt{kT_e/m} \exp(-I/kT_e), \quad (1.5)$$

где  $I$  – энергия ионизации атома вещества,  $\bar{\sigma}_i$  – сечение ионизации.

Решение поставленной задачи имеет оценочный характер и соответствует условию, когда диффузионный процесс при испарении происходит медленно по сравнению с процессом ударной ионизации газа электронами.

Для перехода к безразмерным переменным, концентрацию ионов пронормируем на концентрацию фоновой плазмы  $n_0$ , а радиальную координату – на радиус дуги  $R$ :  $\eta = n/n_0$ ,  $\rho = r/R$ . Подставляя в (1.2) выражение (1.1), а затем (1.3), получаем безразмерное уравнение непрерывности:

$$\rho \frac{d}{d\rho} \left( \rho^3 \frac{d\eta}{d\rho} \right) + \alpha^2 \eta = \tilde{\beta} \rho^2 \eta^2. \quad (1.6)$$

Безразмерный параметр  $\alpha$  содержит все основные параметры задачи и имеет вид:

$$\alpha^2 = 3\sigma^* Z K_i(T_e) n_a^2(R) R^2 \sqrt{\frac{T_i}{T_e}} \sqrt{\frac{M}{RT_e}} \quad (1.7)$$

$\tilde{\beta}$  – безразмерный коэффициент рекомбинации, имеющий вид:

$$\tilde{\beta} = 3\beta \sigma^* Z K_i(T_e) n_a(R) R^2 n_0 \sqrt{\frac{T_i}{T_e}} \sqrt{\frac{M}{RT_e}}. \quad (1.8)$$

## РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

При апробации модели проводились расчеты для следующих металлов: Cu, Ti, Zr, Mo, Ta, W, выбор которых был обусловлен как схожестью свойств некоторых из них (Ti, Zr, или Mo, Ta, W) для оценки адекватности модели, так и с отличием свойств групп этих металлов между собой; а также с Cu, что позволяет учесть разброс характеристик материалов используемых при вакуумно дуговом осаждении (табл. 1).

Таблица 1

Значение параметров для решения задачи ионизации потока металлов в вакуумной дуге

Металл	$\sigma^*, \text{м}^2$	$\bar{\sigma}_i^*, \text{м}^2$	Ti, эВ	Te, эВ	I, эВ	M, кг/моль	$K_i \cdot 10^{12}$	$\alpha$	$\bar{\beta} \cdot 10^{12}$
Ti	$4 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-12}$	0,31	3,07	6,82	0,0479	6,82	2,6	19,1
Zr	$4,5 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-12}$	0,4	4,01	6,63	0,0912	7,8	2,8	6,93
Ta	$5,5 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-12}$	0,49	4,91	7,89	0,181	8,63	3,9	4,86
Mo	$5 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-12}$	0,42	4,21	7,09	0,0959	7,99	3,2	6,95
W	$5,6 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-12}$	0,5	5,03	7,98	0,184	8,73	4,0	4,46
Cu	$3,5 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-12}$	0,24	2,45	7,7	0,0636	6,09	2,4	59,6

Результаты расчетов концентрации ионов плазмы вакуумной дуги приведены на рис. 1.

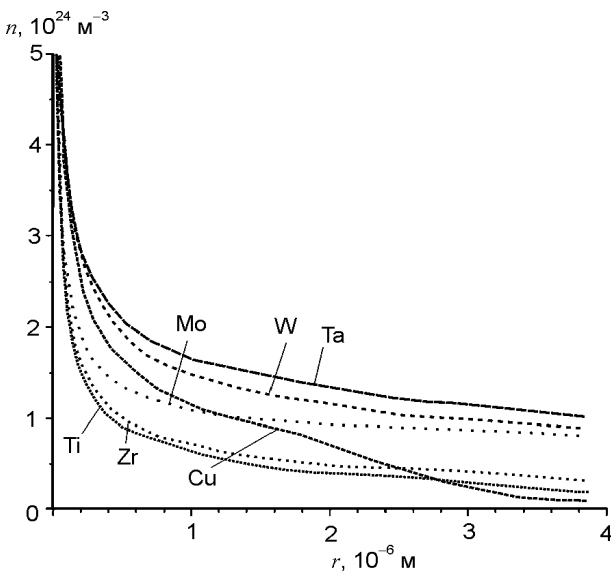


Рис. 1. Радиальное распределение концентрации ионов металлов разного сорта в плазме вакуумной дуги.

Анализ полученных результатов распределения ионов в плазме вакуумной дуги показывает, что:

1. По характеру распределения ионов металлы можно разделить на 3 группы: 1) Ti и Zr; 2) Mo, W, Ta; 3) Cu. Элементы первой группы имеют близкий потенциал ионизации (Ti = 6.82 эВ; Zr = 6.63 эВ) и относятся к IV группе периодической системы, т.е. имеют сходный характер образования ионов, хотя и отличаются массами. Все это предопределяет близкий характер радиального распределения концентрации ионов для этих металлов. Различие масс сказывается на распределении только на большом расстоянии от оси вакуумной дуги.

2. Элементы Mo и W принадлежат к VI группе периодической системы, а Ta является соседом W и имеет близкую с ним массу. Радиальное распределение ионов Ta и W схожи между собой, а некоторое отличие вдали от оси дуги также связано с разностью в массах, однако более высокие значения концентрации ионов по сравнению с первой группой можно объяснить низкими потенциалами ионизации. Такое подобие поведения распределения концентрации ионов для Ta и W указывает на слабое влияние заряда ионов на характер их распределения, что подтверждено экспериментальными данными [7] и указывает на адекватность выбранной модели. Что касается Mo, то вблизи оси вакуумной дуги распределение ионов близко к Ti и Zr, вследствие близкого с ними значения энергии ионизации. Вдали от оси вакуумной дуги сказывается наличие малой массы ионов, в сочетании с высоким значением коэффициента рекомбинации и концентрация ионов становится близкой к Ta и W.

3. Аномальное поведение ионов Cu, имеющее промежуточный характер, связано с сочетанием высокой энергии ионизации с низкой массой и высоким коэффициентом рекомбинации. А наименьшее значение концентрации ионов вдали от оси вакуумной дуги указывает на определяющее значение процессов рекомбинации на этих расстояниях.

4. Вследствие квазистационарности процессов в вакуумной дуге в произвольный момент времени количество ионов и нейтральных атомов приблизительно постоян-

но. Поэтому существует прямо пропорциональная зависимость между количеством ионов и нейтральных атомов. В свою очередь количество ионов напрямую связано с энергией ионизации. Так как связь этих величин с длиной свободного пробега обратно пропорциональна, то преимущественное влияние на распределение ионов вблизи оси вакуумной дуги имеет энергия ионизации, что связано с малыми значениями длины свободного пробега ионов вследствие их большой концентрации. На больших расстояниях от оси вакуумной дуги концентрация ионов уменьшается, длина свободного пробега увеличивается, и влияние массы ионов и процесса рекомбинации на радиальное распределение становится более существенным.

## ВЫВОДЫ

1. Предложена нелинейная модель ионизации цилиндрического потока вещества плазмы, которая учитывает рекомбинацию ионов и позволяет определить характер распределения ионов различных металлов в вакуумной дуге. Модель позволяет оценить роль физических факторов, существенно влияющих на распределение ионов от оси вакуумной дуги, свойства осаждающихся вакуумно-дуговым методом пленок и покрытий, а также оптимизировать режимы осаждения для получения металлических слоев с заданными параметрами.
2. Показано, что вблизи оси вакуумной дуги на распределение ионов преобладает влияние энергии ионизации, вследствие малой длины свободного пробега ионов: для ионов Cu, W, Ta с высокими значениями энергии ионизации (7.7 эВ, 7.98 эВ, 7.89 эВ соответственно) изменение кон-

центрации происходит более плавно; для элементов с меньшими энергиями ионизации (Mo – 7.06 эВ, Ti – 6.82 эВ, Zr – 6.63 эВ) такое изменение выражено более резко.

3. Радиальное распределение концентрации ионов Cu имеет промежуточный характер вследствие наличия следующих факторов: высокой энергии ионизации, сравнительно малой массы и высокой степени рекомбинации. Поведение ионов меди указывает на тот факт, что в промежуточном интервале расстояний от оси дуги существенным является влияние всех трех указанных факторов.
4. Сравнение противоположного поведения изменения радиальной концентрации для Cu с высоким ( $\beta = 6.21$ ) и Mo с низким ( $\beta = 0.541$ ) коэффициентами рекомбинации, указывает на преимущественное влияние процессов рекомбинации на больших расстояниях от центра вакуумной дуги.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Strzyzewski P., Sadowski M.J., Nietubyc R., at. all.//Materials Science-Poland. – 2008. – Vol. 26, No. 1. – P. 213-220.
2. Langner J., Catani L., Russo R., at. all.//Czechoslovak Journal of Physics. – 2002. – Vol. 52. – P. D829-D835.
3. Langner J., Russo R., Catani L., at. all.//Ser.: Plasma Physics (7). – 2002. – № 4. – P. 161-164.
4. Семиохин И.А. Элементарные процессы в низкотемпературной плазме. – М.: Изд-во Моск. Ун-та, 1988. – 142 с.
5. Козырев А.В., Сытников А.Г.//Письма в ЖТФ. – 2008. – Т. 34, Вып. 7. – С. 88-94.
6. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Вводный том. Кн. I/Под ред. В.Е. Фортова. – М.: Наука, 2000. – 541 с.
7. <http://www-sbras.ict.nsk.su/win/sbras/rep/2000/fiz-mat/fmn2.html>