ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА АТОМНОЙ ФИЗИКИ, ФИЗИКИ ПЛАЗМЫ И МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

КУРСОВАЯ РАБОТА

**«Расчет функции распределения электронов по энергиям в молекулярном газе, на примере »**

Выполнил студент

206 группы Бакаев Семён Юрьевич



Научный руководитель:

к.ф.-м.н. Чукаловский Александр Александрович



Допущен к защите

Зав. кафедрой

МОСКВА

2024

[Введение 2](#_Toc166745419)

[1. Основные понятия физики атомных столкновений и кинетической теории газов. 3](#_Toc166745420)

[1.1 Виды соударений. 3](#_Toc166745421)

[1.2 Характеристики системы атомных столкновений: Ключевые величины и параметры. 3](#_Toc166745422)

[1.3 Неупругие столкновения электронов с атомами и молекулами 4](#_Toc166745423)

[2. Кинетическое уравнение для электронов в слабо ионизированном газе, находящемся в поле. 5](#_Toc166745424)

[2.1 Определение функций распределения, которые будут использованы в работе. 5](#_Toc166745425)

[2.2 Формулировка кинетического уравнения. 6](#_Toc166745426)

[3. Расчет ФРЭЭ в постоянном поле для молекулярного газа 8](#_Toc166745427)

[3.1 Данные об октафторциклобутане 8](#_Toc166745428)

[3.2 Полученные значения 9](#_Toc166745429)

[Выводы к работе 11](#_Toc166745430)

[Список литературы 12](#_Toc166745431)

# Введение

В физике плазмы знание функции распределения электронов по энергии (ФРЭЭ) играет ключевую роль для описания процессов столкновения электронов с газом. Цель данной работы анализ этой функции на примере молекулы , обзор которой проводится на основе составленной ниже модели. Разработанные методики расчета функции распределения электронов имеют широкие практические применения в различных областях для описания процессов, протекающих в условиях низкотемпературной плазмы газовых разрядов, как лабораторных разрядов, так и в реакторах травления и осаждения, применяемых в микроэлектронной промышленности.

# 1. Основные понятия физики атомных столкновений и кинетической теории газов.

## 1.1 Виды соударений.

Столкновения атомных частиц, как и удары макроскопических тел, могут иметь упругий и неупругий характер. При упругом соударении меняются направления движения партнеров, их скорости, происходит обмен импульсом и кинетической энергией, но внутренние энергии и состояния частиц остаются неизменными. При неупругом ударе внутренняя энергия и состояние одной из частиц, реже — обеих, изменяются.

## 1.2 Характеристики системы атомных столкновений: Ключевые величины и параметры.

**Эффективное сечение.**

Мера вероятности столкновения микрообъектов (атомов, ядер и частиц) в виде эффективной площади их поперечного сечения.

**Модель твердых шаров.**

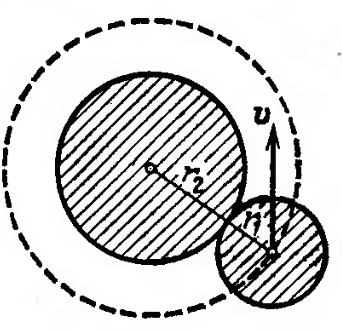


Рисунок 1.

**Частота столкновений.**

Число соударений определенного рода, которые данная частица (назовем ее 1) в среднем совершает в секунду, двигаясь в газе из частиц-мишеней 2.

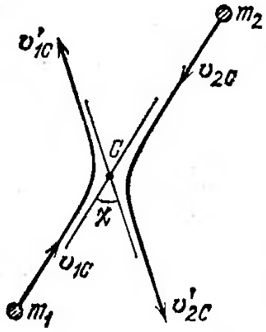
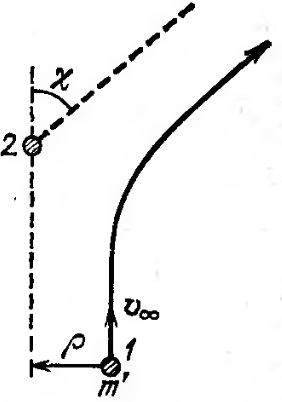
**Система центра масс**

Рисунок 2.



**Относительное движение.**

Закон сохранения энергии

Закон сохранения момента количества движения

Рисунок 3.

## 1.3 Неупругие столкновения электронов с атомами и молекулами

**Сечение передачи энергии**

Найдем сечение, используя формулу Резерфорда, и подставим передаваемую энергию, выразив её из формулы Томсона.

**Ионизация**

Ионизация атомов и молекул электронами - главнейший механизм рождения зарядов, и он, как правило, обусловливает саму возможность протекания разрядного процесса. Чтобы вырвать электрон из атома (молекулы), необходимо затратить энергию, равную энергии его связи в атоме. Эту величину называют потенциалом ионизации (I).

**Возбуждение и дезактивация электронных состояний.**

Скорости строго взаимно прямых и обратных процессов одинаковы. Тогда, согласно принципу детального равновесия, сечение дезактивации: .

Величины , – это статистические веса основного и возбужденного состояний, а – это коэффициент, полученный при аппроксимации.

**Возбуждение через захват или испускание.**

Это процесс, при котором атом или ион испускает или поглощает электрон,

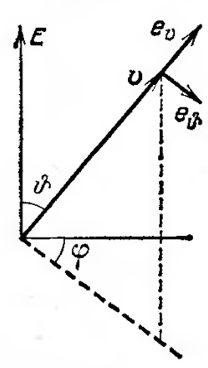
превращаясь тем самым в ион с более высоким зарядом или атом с меньшим зарядом.

**Диссоциация молекул.**

Удары достаточно энергичных электронов могут приводить к диссоциации молекул. Этот неупругий процесс, как правило, не оказывает существенного влияния на энергетический баланс электронов в разряде, уступая в этом отношении возбуждению колебательных уровней молекул. Но в определенных условиях диссоциация молекул имеет большое непосредственное значение, будучи начальным и наиболее ответственным этапом в цепочке последующих химических превращений.

# 2. Кинетическое уравнение для электронов в слабо ионизированном газе, находящемся в поле.

## 2.1 Определение функций распределения, которые будут использованы в работе.

**Вектор скорости в сферических координатах:**

**Функции распределения электронов по скоростям,**

**абсолютному значению скорости и энергиям:**

Рисунок 4.

## 2.2 Формулировка кинетического уравнения.

**Получение уравнения баланса.**

Введем фазовое пространство и выделим некоторый объём.

Тогда объём в момент времени t: Запишем

изменение числа частиц через функцию плотности фазового

пространства относительно оси z, вычитая втекающий и вытекающий

Рисунок 5.

потоки получим:

Преобразовав выражение к скорости изменения числа частиц и разделив на dГ, запишем уравнение баланса:

**Применение данного уравнения в электрическом поле и раскрытие интеграла столкновений.**

Перепишем общее уравнение баланса для функции распределения электронов в виде , раскроем градиент в пространстве скоростей в сферических координатах:

.

Разделим все столкновения на упругие и неупругие:

– интегралы, отвечающие за упругие столкновения и неупругие соответственно.

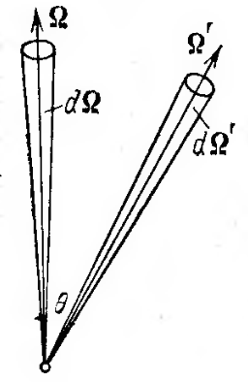
 Раскроем интеграл столкновений, введя функцию вероятности того, что при столкновении электрон, летевший в направление , приобретает направление в интервале , через число уходящих или приходящих электронов, тогда получим: , где – заданная функция смены направления.

Рисунок 6.

**Приближение для угловой зависимости функции распределения.**

Разложим функцию по системе полиномов Лежандра. Уточним, что функция отвечает за энергетический спектр электронов, а функция отвечает за

электрический ток. Запишем полученную систему уравнений:

.

**Уравнение для энергетического спектра электронов.**

При интегрировании второго уравнения (2) из полученной системы подставим усредненную за период функцию , так как она зависит от времени гораздо меньше, чем функция напряженности электрического поля (). Получим:

Преобразуем первое уравнение из полученной системы (1), перейдя к новой независимой переменной . Получим уравнение для энергетического спектра:

.

Раскроем производную в уравнении и перепишем его, введя обозначения для определенных комбинаций величин:

Распишем члены функции отвечающие за неупругие столкновения:

, где

– отвечает за возбуждение или дезактивацию,

– отвечает за ионизацию,

– отвечает за рекомбинацию,

– отвечает за пространственную диффузию.

Тогда можем переписать систему в виде:­­

# 3. Расчет ФРЭЭ в постоянном поле для молекулярного газа .

## 3.1 Данные об октафторциклобутане .

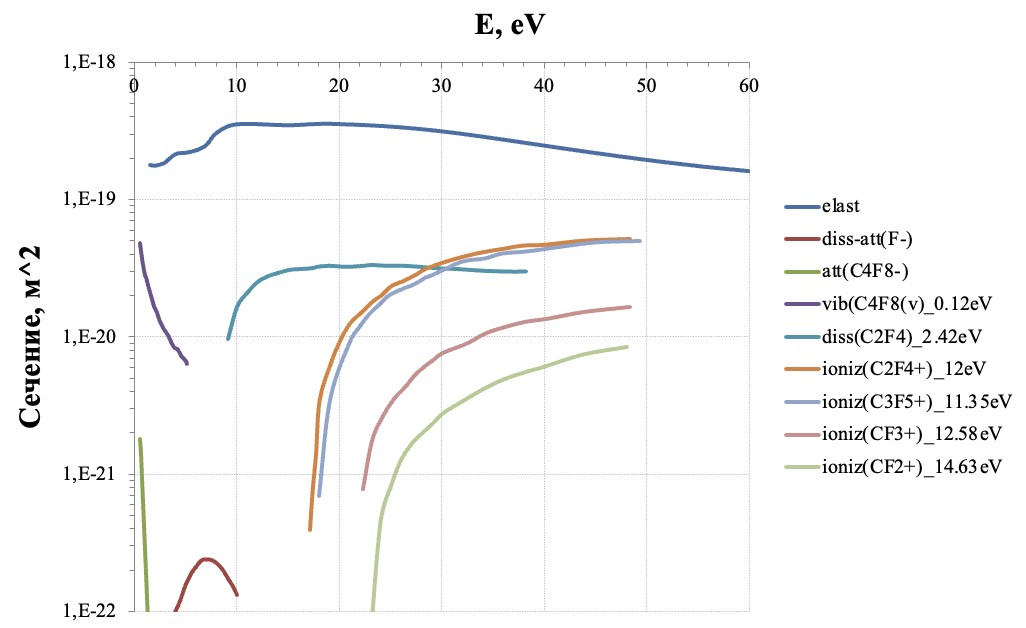
Выбор молекулы для исследования обосновывается ее селективностью по отношению к травлению диэлектриков (например в газе с добавками , а также ее возможностью снижения выбросов газов, вызывающих глобальное потепление.

Модель, используемая для анализа молекулы , позволяет фиксировать сечения ионизации на измеренных значениях, что в свою очередь позволяет варьировать сечения передачи импульса и диссоциации с целью достижения соответствия измеренной скорости дрейфа и ионизации.

Исследования, охватывающие широкий спектр сечений газа и функций распределения по энергии, оказываются недостаточно представленными, что затрудняет анализ косвенных параметров плазмы. Данные сечения были взяты из нескольких работ, опубликованных в период с 1998 по 2018 год.

В данной работе использовался для анализа ограниченный набор сечений процессов столкновений электронов с основной молекулой газа , приведенный на графике ниже. Процессы электронных соударений с участием с осколков молекулы (продуктов ее диссоциации) не учитывались.

Графики исследуемых сечений газа :



## 3.2 Полученные значения

Посредством использованных сечений была рассчитана функция распределения с помощью программы "BOLSIG+" (2). Ниже приведен график распределения.



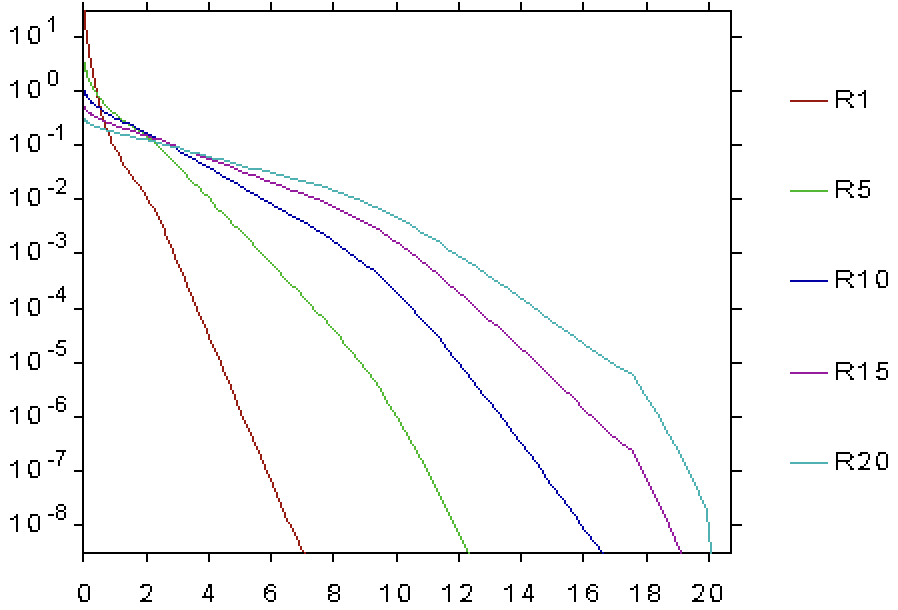
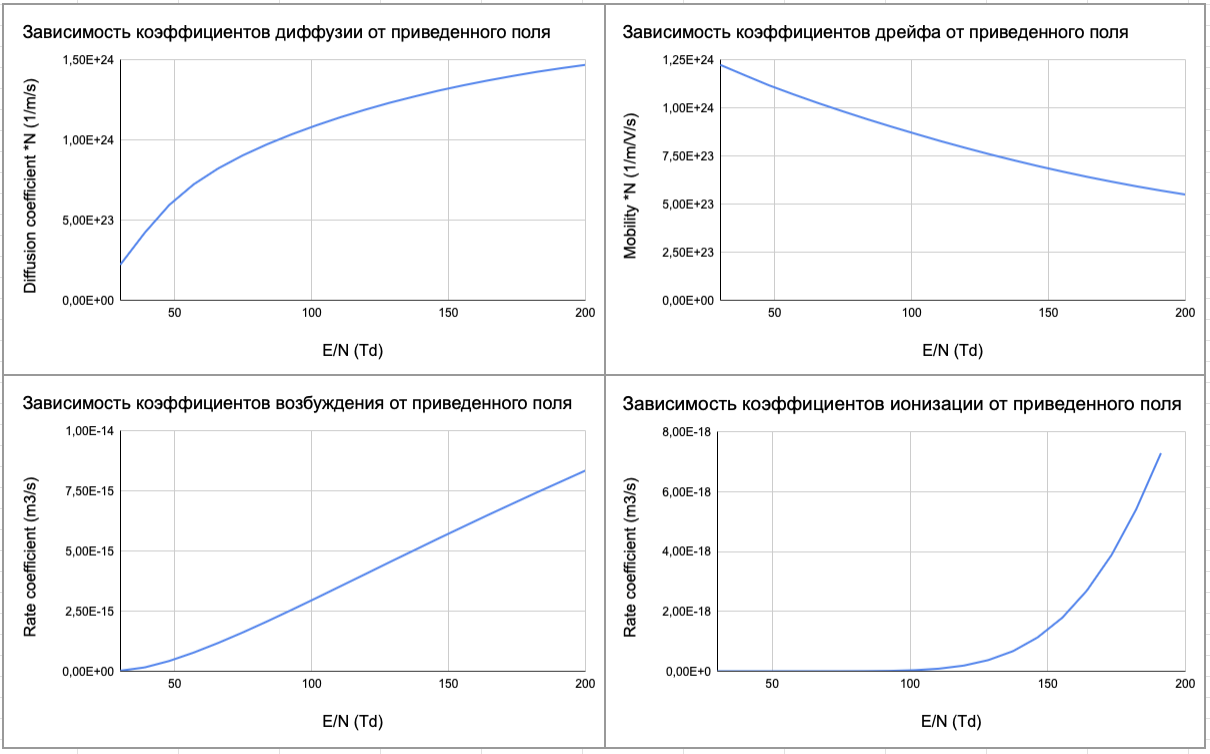


График зависимости приведенной функции распределения от энергии (1)

Где R1 при E/N=30 Td, R5 при E/N=66 Td, R10 при E/N=111 Td, R15 при E/N=155Td, R20 при E/N=200Td

Эти данные помогут определить величины, играющие ключевую роль во взаимодействии с поверхностью в объёме плазмы. Примером таких величин могут быть: коэффициенты — константы скоростей электронных столкновений в зависимости от приведенного поля, отвечающие за возбуждение, диссоциацию и ионизацию; средняя энергия электронов; а также транспортные коэффициенты — подвижности и диффузии электронов. Ниже приведены результаты расчетов:



# Выводы к работе

* Изучена методика расчета ФРЭЭ;
* Рассмотрены основные процессы электронных столкновений в плазме молекулярного газа C4F8
* Проведен расчет ФРЭЭ с использованием пакета Bolsig+ для известного набора сечений для E/N в диапазоне 30-200Td
* Для рассмотренной системы, получены зависимости транспортных коэффициентов и констант скоростей процессов электронных соударений от приведенного поля

# Список литературы

1. Райзер Ю. П. Физика газового разряда: Учеб. руководство.— М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987.- 592 с., ил.;
2. G. J. M. Hagelaar and L. C. Pitchford, Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models // Plasma Sources Sci. Technol. 14 (2005) 722–733;
3. Сross-section set and chemistry model for the simulation of c- plasma discharges G. I. Font, W. L. Morgan, and G. Mennenga.