

Modelo global para PIT30

5 de mayo de 2022

1. Modelo teórico

En este trabajo se ha utilizado un modelo global para calcular las densidades de las diferentes especies que se crean en el plasma, así como la densidad y energía de los electrones. En este tipo de modelos no se tienen en cuenta las dimensiones espaciales del plasma ni del reactor ECR, y se obtiene un resultado promediado en volumen. Por otro lado, se ha dejado de lado la evolución temporal del plasma, analizando así solamente la solución estacionaria.

Para realizar este modelo se han utilizado ecuaciones del balance de partículas, una ecuación para imponer la condición de neutralidad, y por ultimo, una ecuación para el balance energético.

1.1. Balance de partículas

Para cada especie que se obtiene en el plasma se puede escribir una ecuación de balance de partículas, cuya forma más general es la siguiente[1]:

$$\frac{dn}{dt} = \sum_i R_{\text{generación},i} - \sum_i R_{\text{perdida},i} \quad (1)$$

Donde n es la densidad de la especie, y $R_{\text{generación}}$ y R_{perdida} son las tasas de reacción que dan lugar a la generación y perdida de una partícula esta especie. Como hemos comentado, solamente queremos ver la solución estacionaria, por lo que las ecuaciones quedan así:

$$\sum_i R_{\text{generación},i} - \sum_i R_{\text{perdida},i} = 0 \quad (2)$$

Es decir, la tasa total de generación y perdida de cada especie debe ser la misma en cada instante. Estas tasas de reacción se definen así:

$$R = k \prod_i n_i \quad (3)$$

donde k es el coeficiente de reacción y n_i las densidades de las especies que toman parte en cada reacción.

Las reacciones de generación y perdida que se dan en el plasma se pueden clasificar en dos grandes grupos: las reacciones de volumen y las reacciones de superficie.

1.1.1. Reacciones de volumen

Estas reacciones son las que se dan en el interior del volumen del plasma cuando diferentes especies interactúan entre sí. Entre estas reacciones tenemos la ionización, excitación, colisión elástica, disociación etc.

$$k = \langle \sigma(v) v^3 \rangle_E \quad (4)$$

El coeficiente de reacción de las reacciones volumen se puede expresar con la ecuación 4, en la que σ es la sección eficaz de la reacción y v la velocidad de la partícula incidente. La expresión se promedia para la distribución de velocidades a una energía dada. Para poder evaluar esta expresión es necesario conocer la distribución de velocidades de las especies que aparecen en la reacción. Esta distribución es,

en general, desconocida, pero es habitual en este tipo de modelos suponer que tanto los electrones como las especies pesadas siguen una distribución maxwelliana de velocidades. Debido a la diferencia de masa entre los electrones y las demás especies, se asume que estos están en desequilibrio térmico, teniendo los electrones una energía promedio mucho mayor que las otras especies.

Dadas las diferencias entre las energías y masas de los electrones y las especies pesadas las reacciones de volumen pueden clasificarse en dos grupos: las reacciones entre electrones y especies pesadas, y las reacciones entre especies pesadas (se entiende como especie pesada cualquier especie cuya masa sea superior a la masa del protón).

- Reacciones entre electrones y especies pesadas: Si se asume que los electrones siguen una distribución de velocidades maxwelliana con una energía promedio ($E_e = \frac{1}{2}m_e u^2 = K_b T_e$), la tasa de reacción de una partícula con velocidad V incidiendo en esta distribución de maxwelliana de electrones, se puede obtener con la siguiente ecuación:

$$k = \frac{4}{\sqrt{\pi}u^3} \int_{v_{Th}}^{\infty} v_r^3 \sigma(v_r) e^{-\frac{v_r^2}{u^2}} dv_r \quad (5)$$

Donde $v_r = |V - u|$.

- Reacciones entre especies pesadas: En el caso de las colisiones entre especies pesadas, la tasa de reacción también tiene la expresión 4. Sin embargo, la ecuación 6 ya no es valida, ya que los iones no están en equilibrio térmico con los electrones, y sus velocidades son mucho menores. De nuevo, asumiendo una distribución de velocidades maxwelliana, se obtiene la siguiente tasa de reacción:

$$k = \frac{4}{\sqrt{\pi}uV} \int_{v_{Th}}^{\infty} v_r^2 \sigma(v_r) \left(e^{-\frac{(v_r-V)^2}{u^2}} - e^{-\frac{(v_r+V)^2}{u^2}} \right) dv_r \quad (6)$$

En la siguiente gráfica se muestran los coeficientes de las reacciones de volumen que se han tenido en cuenta en este trabajo.

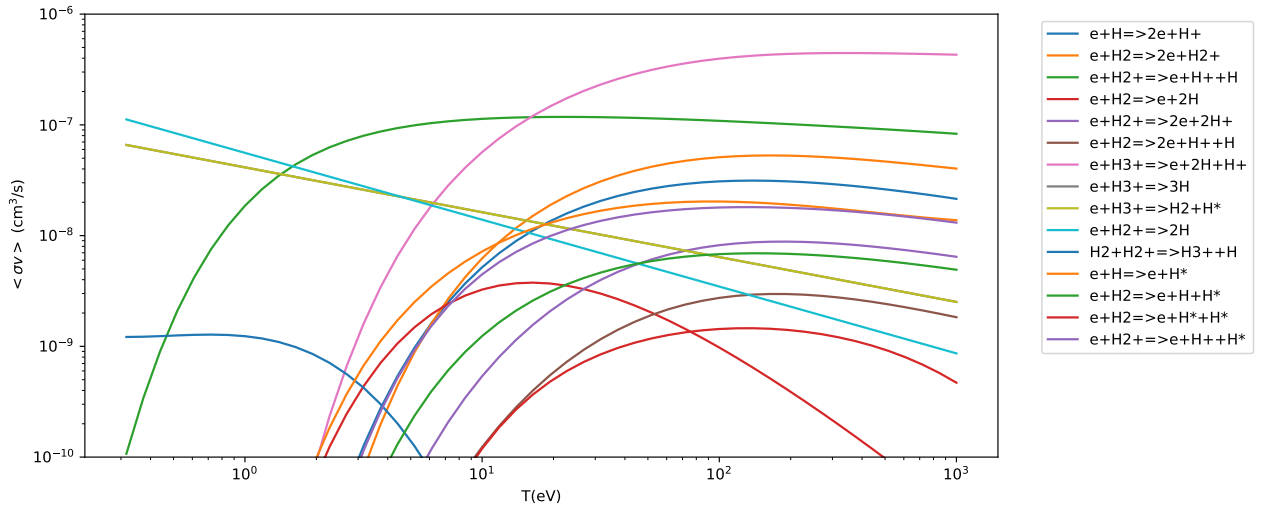


Figura 1: Coeficientes de reacción de las reacciones de volumen. Para las reacciones con electrones T representa la energía promedio de la distribución de electrones, y para las reacciones entre especies pesadas la energía de la especie incidente (teniendo la otra especie una energía promedio de 0.1eV).

Como se puede observar, se han tenido en cuenta 10 reacciones diferentes: 9 son reacciones de electrones con especies pesadas y 1 es entre especies pesadas. Como se puede observar en estas reacciones, partiendo del hidrógeno molecular se pueden generar tres iones diferentes: H^+ , H_2^+ y H_3^+ .

1.1.2. Reacciones de superficie

Las reacciones de superficie son las reacciones que se dan en los limites del plasma. Aunque las reacciones de superficie pueden ser muchas y muy variadas, en este trabajo solamente se han estudiado la perdida de los iones positivos y la perdida de atomos de hidrógeno.

- **Neutralización de los iones positivos:** Los iones positivos generados en el plasma se pierden cuando escapan de la superficie del plasma, llegando posteriormente a las paredes del reactor. Esta perdida se da a una tasa gobernada por la velocidad de Bohm.

$$k = \frac{u_B^X A_{eff}}{V} \quad (7)$$

Donde $u_B^X = \sqrt{\frac{K_B T_e}{m^X}}$ es la velocidad de Bohm del ion X , V el volumen del plasma y A_{eff} la superficie efectiva del plasma. En una cámara de plasma cilíndrica de radio R y longitud L la expresión de área efectiva se define como [2][3]:

$$A_{eff} = 2\pi R^2 h_L + 2\pi R L h_R \quad (8)$$

Donde:

$$h_L = 0,86 \left(3 + \frac{L}{2\lambda} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad h_R = 0,8 \left(4 + \frac{R}{\lambda} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (9)$$

Donde λ es el recorrido libre medio de las partículas cargadas positivamente en el plasma. El recorrido libre medio se define como $\lambda = \frac{1}{n_{neu}\sigma}$ y la sección eficaz ion-neutro en plasmas débilmente ionizados es $\sigma \sim 5 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$ [4]. (** en las simulaciones he tomado V como el volumen del reactor... quizás debería tomar el volumen del plasma, que seguramente sera menor)

- **Recombinación del hidrógeno:** Considerando que los átomos neutros de Hidrógeno llegan a la superficie del reactor por difusión, y una vez llegan ahí, se recombinan con una probabilidad de γ . Esta tasa se puede escribir de la siguiente forma[5]:

$$\frac{1}{k} = \frac{1}{k_D} + \frac{1}{k_W} \quad (10)$$

Donde k_D y k_W son las tasas de difusión y pérdida en las paredes respectivamente.

$$k_D = \frac{D_{AB}}{\Lambda_0^2} \quad (11)$$

Siendo D_{AB} el coeficiente de difusión del hidrógeno atómico en hidrógeno molecular, y Λ_0 es la longitud de difusión de primer orden [6]. Se ha utilizado $D_{AB} = 1574/p \text{ cm}^2/\text{s}$ con la presión en mbar[7] ($p = K_b n_0 T$ donde n_0 es la densidad de gas neutro y T la temperatura ambiente**). La longitud de difusión viene dada por[8]:

$$\Lambda_0 = \left[\left(\frac{\chi_{01}}{R} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{R} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (12)$$

Donde $\chi_{01} = 2,405$ es el primer cero de la función de Bessel de orden cero.

La perdida de iones en las paredes se puede modelizar con la siguiente expresión.

$$k_W = \frac{\gamma}{2(2-\gamma)} \frac{\bar{v}_{AB} A_{eff}}{V} \quad (13)$$

Donde γ es la probabilidad de recombinación de hidrógeno atómico en las paredes y \bar{v}_{AB} es la velocidad media de movimiento relativo entre hidrógeno atómico y molecular $\bar{v}_{AB} = (8eT_e/\pi M_r)^{1/2}$ [5]. En este caso se ha utilizado $\gamma = 0,1$, que es la probabilidad de recombinación del hidrógeno en acero inoxidable [9].

1.2. Condición de neutralidad

Otra ecuación que se utiliza en el modelo es la condición de neutralidad del plasma.

$$\sum_i n_i^+ - \sum_j n_j^- = 0 \quad (14)$$

En nuestro caso hemos visto que los iones que se generan en el plasma son H^+ , H_2^+ y H_3^+ , y la única especie cargada negativamente son los electrones, por lo que:

$$n_{H^+} + n_{H_2^+} + n_{H_3^+} - n_e = 0 \quad (15)$$

1.3. Balance energético

Para obtener la dependencia del modelo a la potencia transmitida al plasma se introduce una ecuación de balance energético. Si asumimos que la potencia transmitida se absorbe completamente en el plasma se obtiene que:

$$\frac{P_{abs}}{V} - e \sum_X \left[n_e n^X \epsilon_c^X k_{iz}^X + u_B^X n^X \frac{A_{eff}}{V} (\epsilon_i^X + \epsilon_e) \right] = \frac{d}{dt} \left(\frac{3}{2} n_e T_e \right) \quad (16)$$

Y cuando la solución es estacionaria:

$$\frac{P_{abs}}{V} - e \sum_X \left[n_e n^X \epsilon_c^X k_{iz}^X + u_B^X n^X \frac{A_{eff}}{V} (\epsilon_i^X + \epsilon_e) \right] = 0 \quad (17)$$

Donde:

- u_B es la velocidad de Bohm:

$$u_B = \sqrt{\frac{e T_e}{M}} \quad (18)$$

- ϵ_c es la pérdida de energía debido a las colisiones:

$$\epsilon_c = \epsilon_{iz} + \sum_i \frac{k_{ex,i}}{k_{iz}} \epsilon_{ex,i} + \frac{k_{el}}{k_{iz}} \frac{3m_e}{M} T_e \quad (19)$$

siendo k_{iz} y k_{ex} las tasas de reacción de excitación y ionización. $-\epsilon_e$ es la pérdida de energía por cada electrón perdido:

$$\epsilon_e = 2e T_e \quad (20)$$

$-\epsilon_e$ es la pérdida de energía por cada ion perdido:

$$\epsilon_e = \left(\frac{1}{2} T_e + V_s \right) \quad (21)$$

siendo V_s el sheath potential, que se puede calcular con la siguiente expresión:

$$\sum_X n^X n_B^X = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{8e T_e}{\pi m_e}} e^{\frac{-V_s}{T_e}} \quad (22)$$

Como vemos en la ecuación 17 la energía transmitida se absorbe mediante procesos de colisión dentro del volumen y por la pérdida de electrones e iones positivos.

2. Sistema de ecuaciones y resolución

Utilizando el modelo presentado en el apartado anterior, se ha obtenido un sistema de 6 ecuaciones no lineales acopladas: 4 ecuaciones para el balance de partículas (n_{H^+} , $n_{H_2^+}$, $n_{H_3^+}$ y n_H), una ecuación para la neutralidad eléctrica, y una ultima ecuación para el balance de energía.

Se ha elegido utilizar la densidad de H_2 (n_0) como una variable, ya que se asume que esta va a estar relacionada con el flujo de gas que se hace fluir a la cámara de plasma.

Por otro lado, también podemos determinar la potencia que se transmite a la cámara de ionización, por lo que P_{abs} también va a ser otro parámetro variable. Para simplificar el análisis se ha utilizado $P_\mu \equiv P_{abs}/V$ como parámetro variable.

Para realizar el cálculo se ha utilizado la función *fsolve* de la librería *scipy.optimize* de Python, y se ha obtenido la solución para pares de valores $[n_0, P_\mu]$. Este método encuentra la solución del sistema iterativamente a partir de una solución de prueba (sol_0). La elección de esta solución de prueba es crítica, ya que se ha visto que hay casos en los que se encuentra solución para un sol_0 y no para otro, e incluso se ha visto que para diferentes sol_0 se obtienen diferentes soluciones para un par $[n_0, P_\mu]$. De todas las soluciones que se han obtenido, solamente una está físicamente significativa, por lo que para los casos en los que partiendo de sol_0 no se obtiene esta solución, se varía sol_0 hasta encontrar la solución de interés.

3. Resultados

Se ha escogido la zona de $P_\mu \in [5E5, 5E6] \text{ W/m}^3$, y $n_0 \in [1E14, 3E15] \text{ 1/cm}^3$ y se han buscado las soluciones en esos rangos.

3.1. Temperatura de electrones: T_e

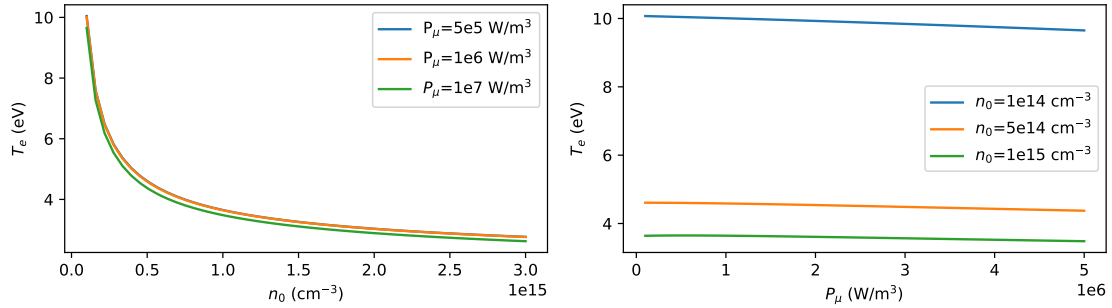


Figura 2: T_e en función de la potencia y densidad de gas neutro.

Como se puede ver en la imagen superior la energía de los electrones crece mucho al bajar la densidad de gas, y aumenta ligeramente con la potencia transmitida.

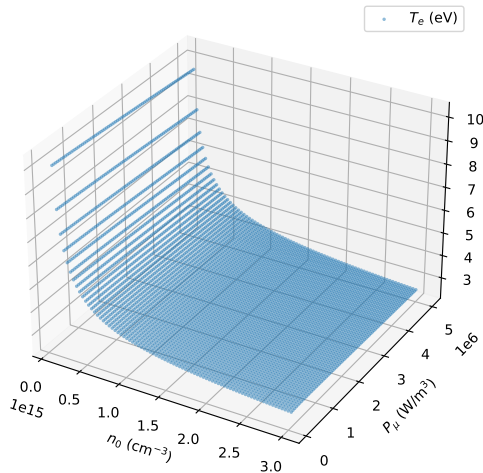


Figura 3: Superficie T_e en función de P_μ y n_e .

3.2. Densidad de electrones: n_e

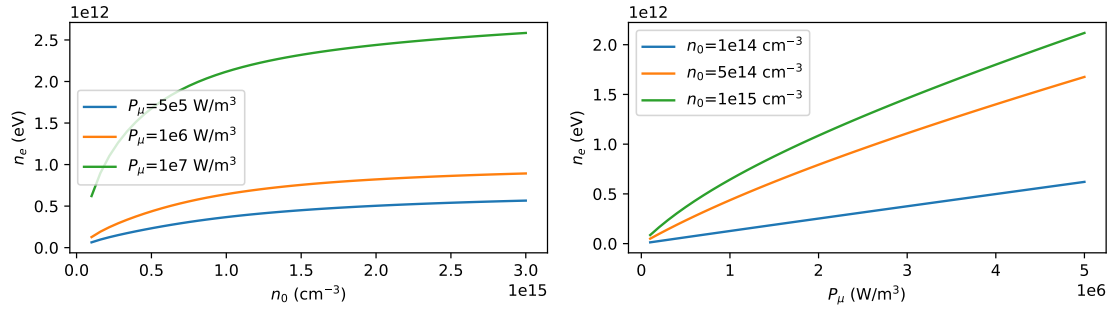


Figura 4: n_e en función de la potencia y densidad de gas neutro.

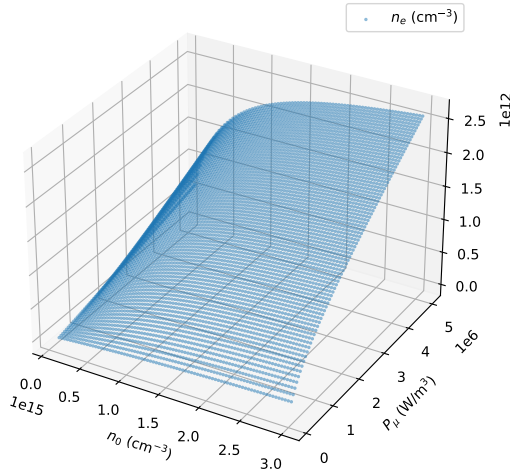


Figura 5: Superficie n_e en función de P_μ y n_e .

3.3. Densidad de iones: n_{H^+} , $n_{H_2^+}$ y $n_{H_3^+}$

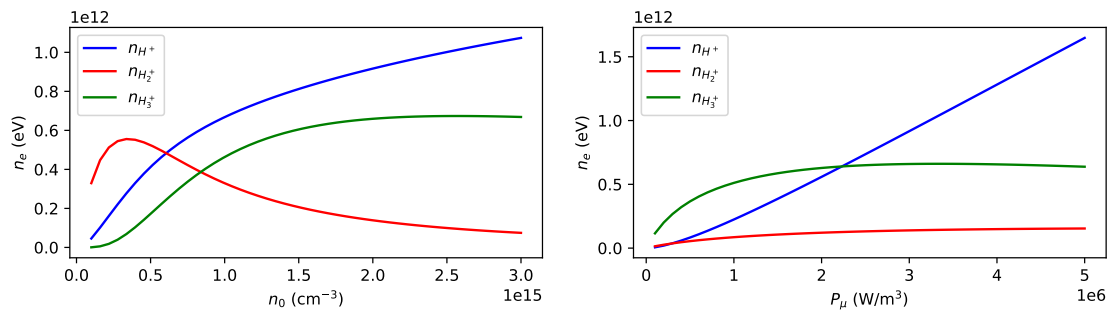


Figura 6: Densidades de iones en función de la densidad de gas neutro (izquierda. $P_\mu = 3 \times 10^6 \text{ W/m}^3$) y en función de la potencia (derecha. $n_0 = 2 \times 10^{15} \text{ 1/cm}^3$).

Como se puede ver, dependiendo de los valores de P_μ y n_0 las proporciones de los iones cambian. Hay algunas zonas donde H^+ es mayoritario, otras donde lo es H_2^+ y otras donde domina H_3^+ .

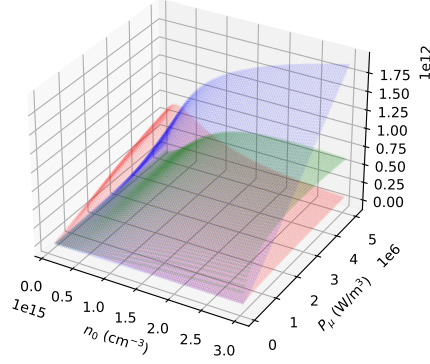


Figura 7: Superficie de las densidades de iones en función de P_μ y n_e .

En el siguiente mapa se muestra las zonas del plano $[P_\mu, n_0]$ en las que domina cada una de las especies.

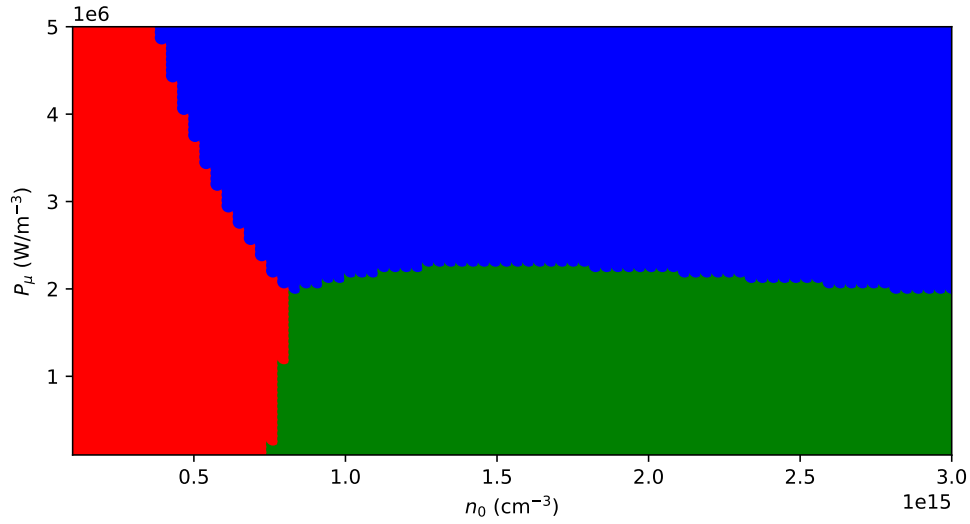


Figura 8: Mapa de mayoritarios. En azul H^+ , en rojo H_2^+ y en verde H_3^+ .

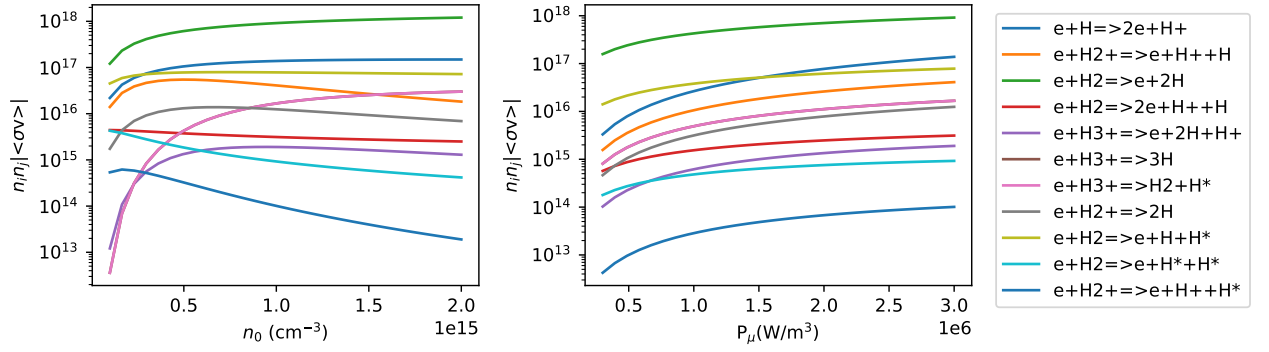
Para las densidades más bajas se genera mayoritariamente H_2^+ . Al aumentar la densidad se obtienen las otras dos especies: H_3^+ a las potencias más bajas y H^+ para las potencias más altas. Por lo tanto, hace falta una potencia mínima para generar protones eficientemente.

4. Contribución de cada reacción

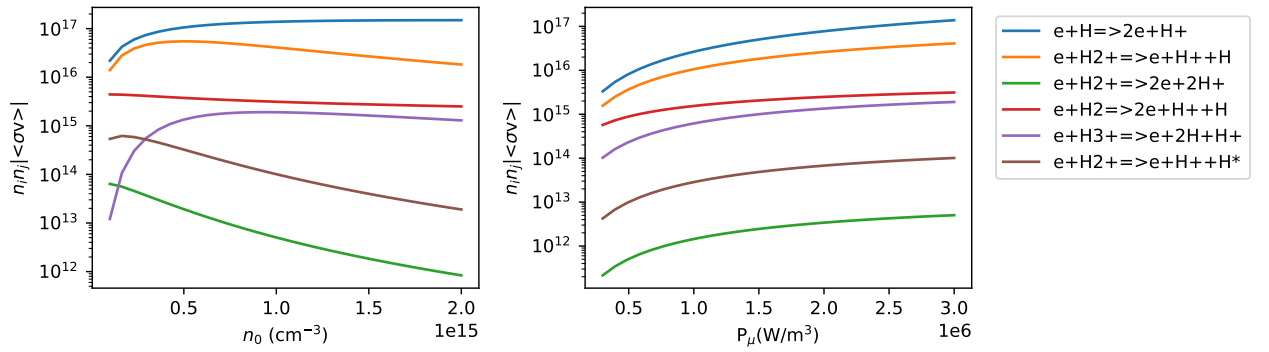
Las contribuciones de cada una de las reacciones vienen dadas como $n_i n_j < \sigma v >$. Para ver que importancia tiene cada una de las reacciones en la generación de una especie, se muestra el valor absoluto de esta cantidad.

En las siguientes imágenes se muestra un barrido de gas ($P_\mu=3e6$ W/m³) y uno de potencia ($n_0=1e15$ cm⁻³).

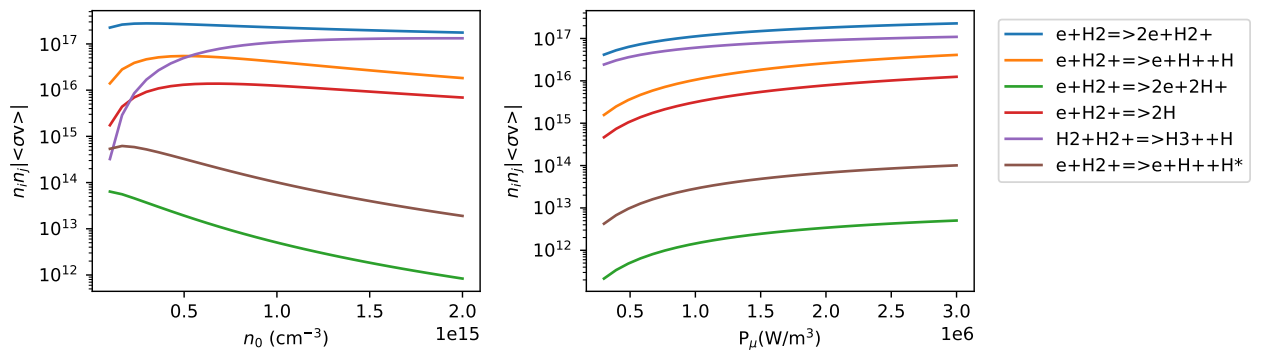
4.1. Reacciones en las que se genera o pierde H



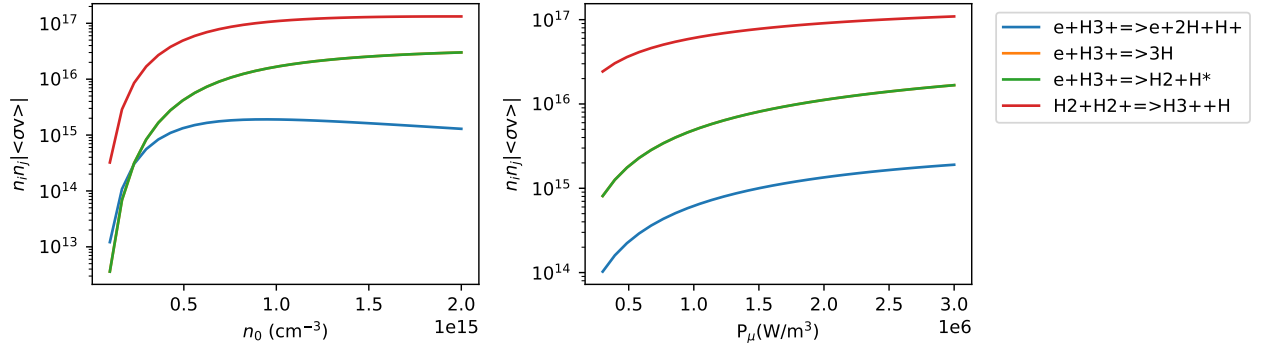
4.2. Reacciones en las que se genera o pierde H^+



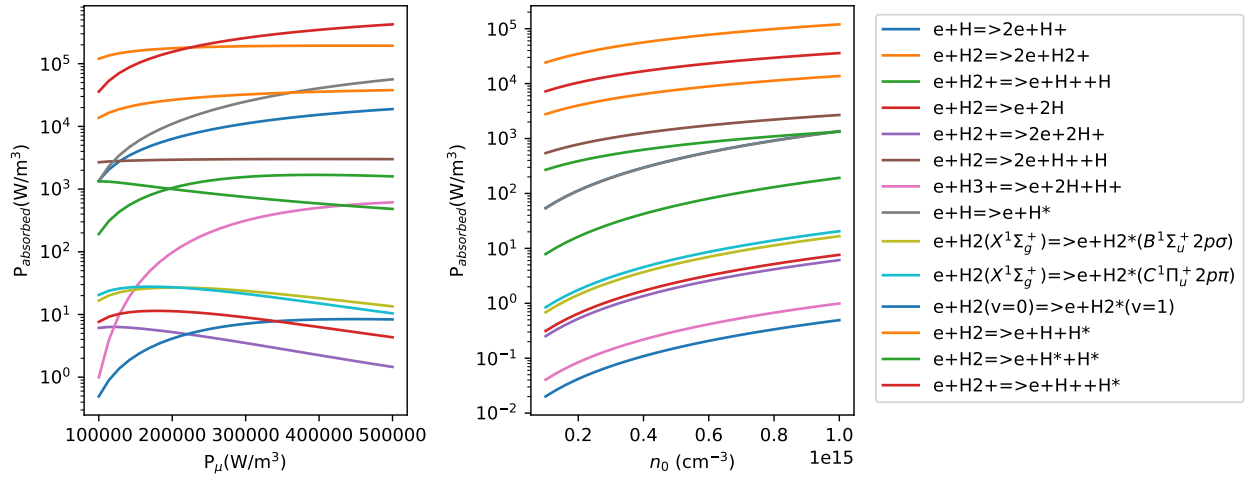
4.3. Reacciones en las que se genera o pierde H_2^+



4.4. Reacciones en las que se genera o pierde H_3^+



5. Absorción de energía de cada reacción



Referencias

- ¹C. M. Samuelli y C. S. Corr, “Low-pressure hydrogen plasmas explored using a global model”, Plasma Sources Science and Technology **25**, 015014 (2015).
- ²R. Zorat, J. Goss, D. Boilson y D. Vender, “Global model of a radiofrequency H_2 plasma in DENISE”, Plasma Sources Science and Technology **9**, 161-168 (2000).
- ³V. Godyak, *Soviet Radio Frequency Discharge Research*, Delphic emigre series (Delphic Associates, 1986).
- ⁴J. D. Huba, “NRL: Plasma Formulary”, en (2004).
- ⁵“Chemical Kinetics and Surface Processes”, en *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing* (John Wiley Sons, Ltd, 2005) cap. 9, págs. 285-325.
- ⁶P. J. Chantry, “A simple formula for diffusion calculations involving wall reflection and low density”, Journal of Applied Physics **62**, 1141-1148 (1987).
- ⁷P. Roychowdhury, L. Mishra, H. Kewlani y S. Gharat, “Hydrogen Plasma Characterization at Low Pressure in 2.45 GHz Electron Cyclotron Resonance Proton Ion Source”, IEEE Transactions on Plasma Science **45**, 665-671 (2017).
- ⁸S.-R. Huh, N.-K. Kim, B.-K. Jung, K.-J. Chung, Y.-S. Hwang y G.-H. Kim, “Global model analysis of negative ion generation in low-pressure inductively coupled hydrogen plasmas with bi-Maxwellian electron energy distributions”, Physics of Plasmas **22**, 033506 (2015).

⁹W. Wu, A. Zhang, S. Peng, T. Ma, Y. Jiang, K. Li, J. Zhang, T. Zhang, J. Wen, Y. Xu, Z. Guo y J. Chen, “A global model of 2.45 GHz ECR ion sources for high intensity H+, H2+ and H3+ beams”, Vacuum **182**, 109744 (2020).