

HORVÁTH BENEDEK

ELTE TTK, FIZIKUS MSC

TDK-DOLGOZAT

**Az elektron-elektroda kölcsönhatás  
szerepe alacsony nyomású rádió-  
frekvenciás gázkisülésekben**

*Témavezető:*

Dr. Derzsi Aranka

MTA Wigner FK SZFI

Komplex Folyadékok Osztály

2017. november



# Tartalomjegyzék

<b>1. Bevezetés</b>	<b>2</b>
1.1. Alacsony nyomású gázkisülések . . . . .	2
1.2. Kapacitív csatolású rádiófrekvenciás gázkisülések . . . . .	4
1.3. Motiváció, célkitűzések . . . . .	8
<b>2. A "Particle-in-Cell/Monte Carlo Collisions" (PIC/MCC) szimulációs módszer</b>	<b>9</b>
2.1. A PIC/MCC ciklus . . . . .	10
2.2. A szuperrészecskék és a rács bevezetése . . . . .	11
2.3. Az ütközések Monte Carlo szimulációja . . . . .	12
<b>3. Az elektron-elektroda kölcsönhatás valóságű modellje</b>	<b>14</b>
3.1. A modell ismertetése . . . . .	14
3.2. Paraméterbeállítások SiO <sub>2</sub> elektródákra . . . . .	17
3.3. A felületi folyamatok szimulációs algoritmus . . . . .	20
<b>4. Szimulációs eredmények</b>	<b>22</b>
4.1. A plazmasűrűség vizsgálata . . . . .	23
4.2. Plazmaparaméterek összehasonlítása a két modellben . . . . .	25
4.3. Az ionizációs dinamika részletei . . . . .	28
4.4. Az ionizációs dinamika és az elektronkiváltás összetett mechanizmusa . . . . .	30
<b>5. Következtetések</b>	<b>34</b>
5.1. Összefoglalás . . . . .	34
5.2. Az eredmények hibája . . . . .	36
5.3. Kitekintés . . . . .	37
<b>6. Köszönetnyilvánítás</b>	<b>37</b>
<b>7. Függelék</b>	<b>38</b>

# 1. Bevezetés

A plazmafizika történetileg az egyik legkésőbb kialakult területe a fizikának, amely komplexitása révén csak a XX. században vált önálló tudományággá. A plazmafizikán belül igen kiterjedt területet alkot az alacsony hőmérsékletű plazmák vizsgálata, amelyek jelentőségéhez számos ipari-technológiai alkalmazás hozzájárul: felületek biokompatibilissá tétele, plazmaalapú ionmarás a mikroelektronikában, rétegek leválasztása napelemek gyártásánál [1]. A termikus (magas hőmérsékletű) plazmákkal ellentétben ezeket a plazmákat főként elektron-atom ütközési folyamatok hozzák létre és tartják fenn, miközben a gáz lényegében szobahőmérsékletű marad.

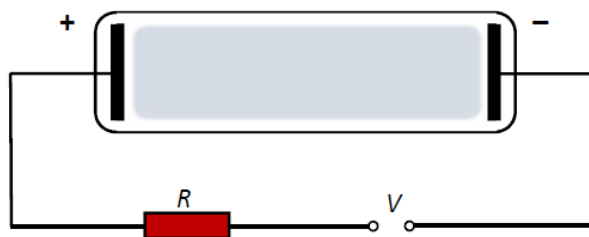
Dolgozatomban az **alacsony hőmérsékletű plazmák** egy speciális típusának, a **kapacitív csatolású rádiófrekvenciás gázkisüléseknek a modellezésével és szimulációjával foglalkozom**. Az első fejezetben áttekintem az önfenntartó gázkisülés kialakulásának feltételeit az egyenfeszültségű eseten keresztül, majd bemutatom a kapacitív csatolású rádiófrekvenciás kisülések működési mechanizmusát. Ezt követően megfogalmazom az elektron-elektroda kölcsönhatás modellezésére vonatkozó célkitűzéseimet. A második fejezetben részletesen ismertetem az alkalmazott szimulációs eljárást, a harmadik fejezetben pedig annak felületi folyamatokra vonatkozó kiegészítését. A negyedik fejezetben bemutatom a számolási eredményeimet, amit az ötödik fejezetben egy rövid összefoglalás követ.

## 1.1. Alacsony nyomású gázkisülések

A gázkisülések kialakulásának és működési jellemzőinek áttekintésére a legegyszerűbb esetet, az egyenfeszültségű gázkisülést vesszük alapul: a feszültségforrásra egy ellenálláson keresztül kapcsoljuk rá a kisülési cellát, ami egy alacsony nyomású (0,1–10000 Pa) gázt tartalmazó cső, két végén elektromosan vezető anyagú elektródákkal (lásd: 1. ábra). A gáz sokféle anyagi minőségű lehet; legegyszerűbben a nemesgázokban lejátszódó kisülések modellezhetők, ahol a töltött részecskék túlnyomó többsége egyszeres pozitív töltésű ion és elektron. Jelen munkámban argon gázban létrehozott kisüléseket vizsgálok.

**A gázkisülések kialakulásának alapvető mechanizmusa a gáz átütése.** Az átütés létrejöttének alapfeltétele a töltött részecskék jelenléte a kisülési térben, amelyet alapvetően semleges gáz tölt ki. Az elsődleges töltött részecskék megjelenését biztosíthatja a (kozmosis eredetű) háttérsugárzás, mesterséges röntgenforrás vagy a katód fűtése. Az elektronok és az ionok a feszültség hatására az elektródák felé gyorsulnak, és útjuk során a háttérgáz atomjaival





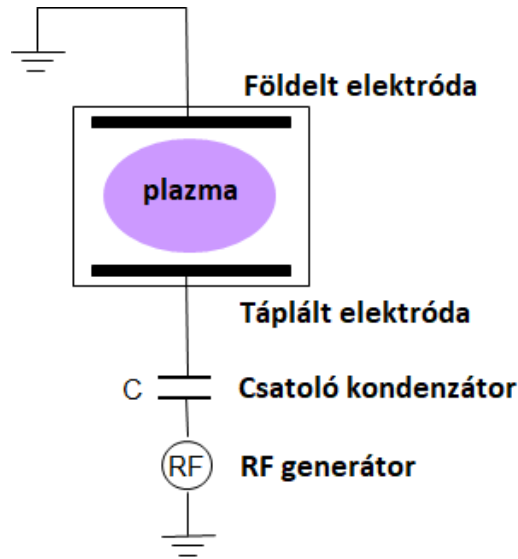
1. ábra. Egyenfeszültségű (DC) gázkisülés áramkörének vázlata.

ütköznek. Ilyenkor rugalmas ütközés, gerjesztés vagy ionizáció játszódik le. Az átütés szempontjából ez utóbbi folyamat kulcsjelentőségű: növeli a töltött részecskék számát a kisülési térben. Az egyre több, elektromos térben gyorsuló töltött részecske hatására egyre gyakoribb ütközések, egyre intenzívebb ionizáció játszódik le: ezt a töltésszorzódási folyamatot nevezzük elektronlavinának<sup>1</sup>.

A gáz átütésének legegyszerűbb leírását a Townsend-elmélet adja meg, mely szerint az átütés feltétele az, hogy az egy elektronlavinában keletkezett pozitív ionok a katódra jutva onnan átlagosan egy újabb elektront váltsanak ki. Ezen feltétel teljesülésével a gázban tértöltések halmozódnak fel, az elektromos tér torzul, és széles paramétertartományban **állandósult állapot alakulhat ki** a belső és/vagy az áramköri visszacsatolási mechanizmusok miatt.

**Az állandósult állapotú kisülésben folyamatos töltésreprodukció megy végbe a gáztérben és az elektródák – DC esetben a katód – felületén. A gáztérben ennek alapvető folyamata az elektronütközéses ionizáció, az elektródán az ionok által keltett elektronemisszió.** A kisülés viselkedése szempontjából az ionizáció mellett meghatározó még az atom és elektron közti rugalmas ütközés, illetve a gerjesztés, ami általában fotonkibocsátást eredményez – ez utóbbinak köszönhető, hogy a plazma világít. Az atomok és elektronok ütközése mellett gyakoriak az atomok és ionok közti ütközések: itt a rugalmas szórás mellett nagy feszültségnél szintén jelentős lehet az ionizáció. Az egyes folyamatok hatáskeresztmetszetei energiafüggők, az irodalomban fellelhetők rájuk részletes adatok. A folyamatok hatáskeresztmetszeteinek viszonyai együttesen határozzák meg a végbemenő ionizációk gyakoriságát, így végeredményben az egész gázkisülés működését.

<sup>1</sup>Megjegyzés: ilyen elven működnek a részecske- és magfizikában széles körben alkalmazott gáztöltésű detektorok, ahol a detektálandó részecske megjelenése hozza létre a kezdeti töltést, a beütésenként újra és újra felépülő és részecske-utánpótlás híján lecsengő elektronlavina pedig mérhető impulzust eredményez az áramkörben.

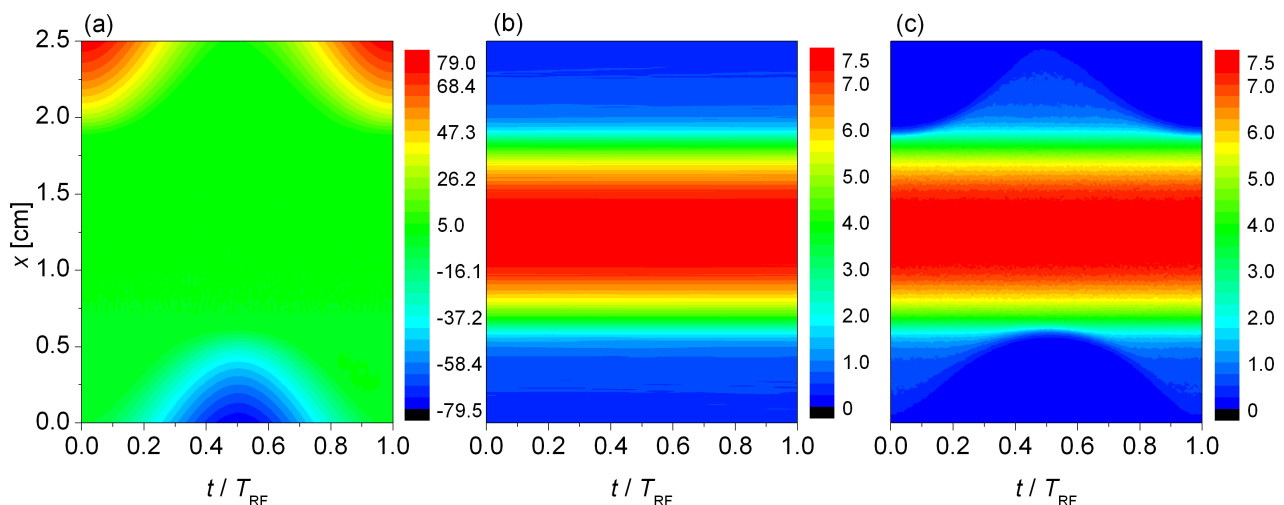


2. ábra. *Kapacitív csatolású rádiófrekvenciás gázkisülés áramkörének sematikus rajza.*

## 1.2. Kapacitív csatolású rádiófrekvenciás gázkisülések

Gázkisülések kialakítására nemcsak az imént áttekintett egyenfeszültségű táplálás mellett van lehetőség: a gyakorlati alkalmazások szempontjából igen jelentős a rádiófrekvenciás (RF, 1–100 MHz) váltakozó (többnyire szinuszos) feszültséggel táplált kisülések vizsgálata. **Kapacitív rádiófrekvenciás gázkisüléseket** tipikusan két, vákuumkamrába helyezett síkpárhuzamos elektróda között hozunk létre, vagyis az elrendezés egy kondenzátorra emlékeztet (lásd: 2. ábra) – innen származik a rendszer elnevezése. Ebben az összeállításban az egyik elektróda földelt, a másik RF feszültséggel táplált. A generátor és a táplált elektróda egy csatoló kondenzátoron keresztül van összekötve. A kondenzátorra azért van szükség, mert bizonyos esetekben – bármilyen jellegű aszimmetria esetén – plazmában egy egyenfeszültségű (DC) komponens is megjelenhet, amit a kondenzátor egyenlít ki, azaz, az RF feszültséggel táplált teljes áramkörben továbbra sem jelenik meg DC komponens. A plazmában az áram jó közelítéssel az elektródákra merőlegesen folyik, amennyiben az elektródák átmérője jóval nagyobb azok távolságánál.

A kapacitív csatolású, rádiófrekvenciás gerjesztésű gázkisülések működési mechanizmusa elsősorban abban tér el az egyenfeszültségűekétől, hogy a részecskék utánpótlásához, **a plazma önfenntartásához nem feltétlenül van szükség az elektródákból kilépő elektronokra.** Emellett gyakorlati szempontból kulcsfontosságú sajátosságuk, hogy szigetelő elektródák között is létrehozhatók. A szigetelő elektródák gyakorlati jelentősége abban



3. ábra. Az  $E$  [kV/m] elektromos térerősség (a), az  $n_i$  [ $10^{15}/\text{m}^3$ ] ionsűrűség (b) és az  $n_e$  [ $10^{15}/\text{m}^3$ ] elektronsűrűség (c) tér- és időbeli eloszlása. A vízszintes skála egy rádiófrekvenciás periódus ( $T_{\text{RF}}$ ) időtartamának felel meg. A függőleges skálán  $x = 0$  cm a táplált,  $x = 2,5$  cm a földelt elektróda pozíciója. Kisülési paraméterek: Ar gáz,  $f = 13,56$  MHz;  $L = 2,5$  cm;  $p = 10$  Pa;  $V_0 = 300$  V.

áll, hogy az elektródákra érkező ionok fluxusának és energiájának megfelelő szabályozásával a kisülés az elektródák felületkezelési eljárásaként alkalmazható. Jelen munkám lényegi részében szilícium-dioxid ( $\text{SiO}_2$ ) elektródák között lejátszódó kisüléseket modellezek. Ezt a választást az indokolja, hogy a számítástechnikai ipar komoly igényt jelent az ilyen irányú kutatásokra.

A 3. ábra egy

$$\Phi(t) = V_0 \cos(2\pi ft) \quad (1)$$

feszültséggel táplált RF gázkisülés néhány fontos – szimulációval meghatározott – jellemzőjét mutatja ( $f = 13,56$  MHz gerjesztési frekvencia,  $V_0 = 300$  V feszültségamplitúdó,  $p = 10$  Pa nyomás és  $L = 2,5$  cm elektródatávolság esetére). Az ábra (a) része az elektromos térerősség, (b) része az ionsűrűség, (c) része az elektronsűrűség tér- és időbeli változását mutatja. Az elektromos térerősség nagyrészt az elektródák közelében koncentrálódik, követi a tápfeszültség frekvenciáját. A tipikus gerjesztési frekvenciák (nagyságrendileg 10 MHz) mellett az elektronok követik a rádiófrekvenciával modulált elektromos tér változását, az ionok viszont nagyságrendekkel nagyobb tömegük miatt annak időátlagára szerint mozognak. Ennek következtében az ionsűrűség-profil időben stacionárius, az elektródák közelében pedig félperiódusonként

elektronokkal telített, illetve kiürített réteg jelenik meg, a kettő egymáshoz képest egy időben ellentétes oldalon. Az elektronok és az ionok számsűrűsége a plazma közepén maximális, az elektródák felé mindkét irányban folyamatosan csökken. A középső tartomány kvázisemleges plazmát alkot, benne a pozitív és negatív töltéshordozók sűrűsége gyakorlatilag egyenlő, azaz itt az elektronok sűrűsége sem változik időben. Az ionsűrűség a teljes térrészben szimmetrikus, míg az elektronsűrűség leesésének helye, ahogy arról fentebb is szó volt, a periódusidőnek megfelelően változik.

A gáztér tehát három jól elkülönülő tartományra oszlik: a két **tértöltött határrétegre** és a középső **kvázisemleges térrészre**. A határrétegek hossza a periódusidőnek megfelelően változik, szélső helyzetben az egyik oldalt maximális, másik oldalt minimális. Az RF plazmát a határréteg léte és változása teszi önfenntartóvá: kiterjedésekor az elektronok a határréteggel mint kemény fallal ütköznek [1], és energiát nyernek. A visszahúzó határréteggel ütköző elektronok ugyanakkor energiát vesztenek, de megmutatható, hogy a határrétegek mozgásának és az ütközések hatásának következtében az elektronok időátlagban energiát nyernek a rádiófrekvenciás táplálásnak köszönhetően.

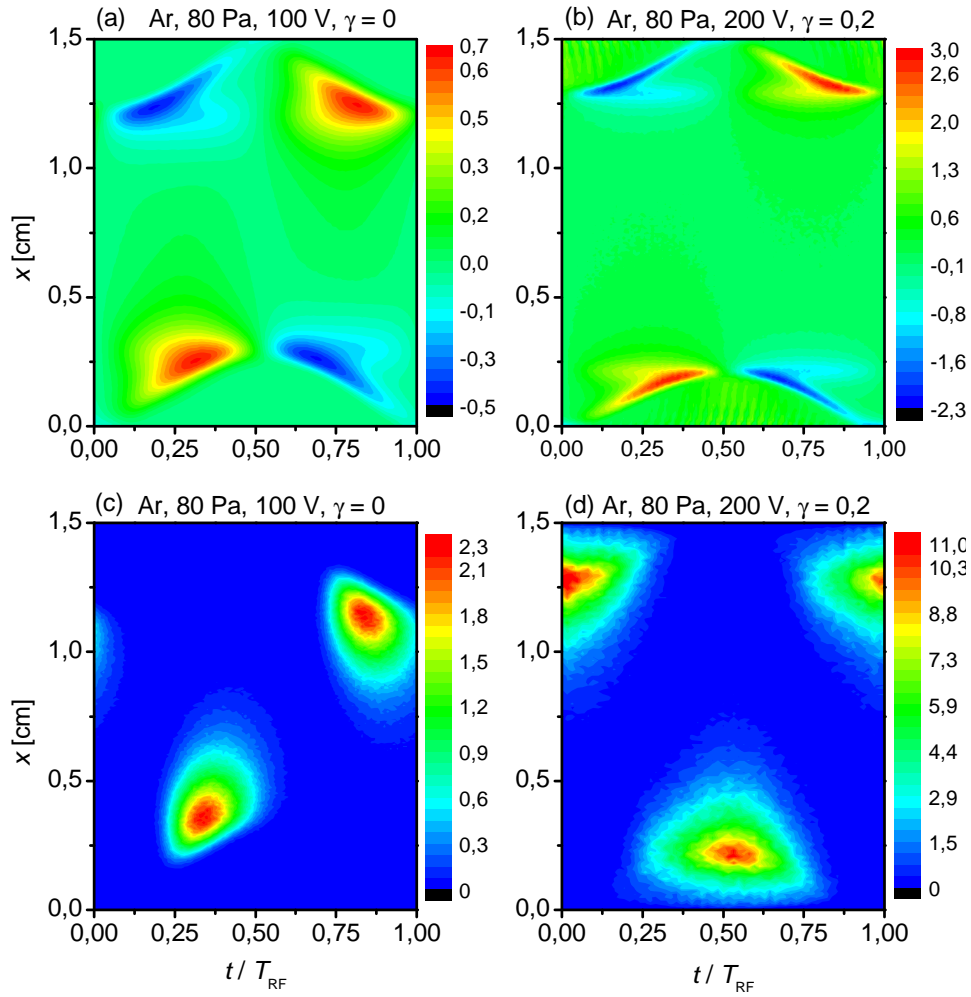
A nagy energiájú elektronok biztosítják az újabb és újabb ionizációt, vagyis a töltéshordozók utánpótlását. A rádiófrekvenciás gázkisülés tehát az elektródák felületéből kilépő elektronok nélkül is önfenntartóvá válhat, nem úgy, mint az egyenfeszültségű kisülés.

Az imént leírt, **a határrétegek kiterjedésével összefüggő energiabetáplálási mechanizmust  $\alpha$ -módnak nevezzük**, mivel a tértöltött réteg határán gyorsuló elektronok intenzív ionizációt keltenek, ami a Townsend-féle  $\alpha$  ionizációs együtthatóval áll kapcsolatban<sup>2</sup>. Emellett megjelenhet, illetve ennél intenzívebbé válhat a  **$\gamma$ -módnak nevezett energiabetáplálás: itt a kisülés fenntartásában nagy jelentősége van az elektródáknak ütköző ionok által keltett másodlagos elektronoknak**. Ezeket az elektronokat  $\gamma$  elektronoknak is szokás nevezni, a  $\gamma$ -val jelölt felületi elektronkiváltási együttható után.

A kétféle energiafelvételi mechanizmus működését a 4. ábra segítségével [3] ismertetjük és szemléltetjük. Az elektronok által felvett teljesítménysűrűség mintázata mindkét vizsgált esetben hasonló, ez ugyanis a teljes elektron-populációt jellemzi. Az ionizációért és a gerjesztésekért

---

<sup>2</sup>A Townsend-féle  $\alpha$  ionizációs együttható a gáztérben fellépő ionizáció hatékonyságát jellemzi; értéke megadja az egy elektron által egységnyi úthosszon keltett elektron-ion párok számát.



4. ábra. Az elektronok által felvett  $P$  [ $10^5 \text{ Wm}^{-3}$ ] teljesítménysűrűség (a, b) és az  $S$  [ $10^{21} \text{ m}^{-3}\text{s}^{-1}$ ] ionizációs ráta (c, d) tér- és időbeli eloszlása  $\alpha$ -módban (a, c), illetve  $\gamma$ -módban (b, d) működő kisülésekre [3]. Kisülési paraméterek: Ar gáz,  $f = 13,56 \text{ MHz}$ ;  $L = 1,5 \text{ cm}$ ; a többi paramétert az egyes panelek mutatják. A táplált elektróda pozíciója  $x = 0 \text{ cm}$ , míg a földelt elektródáé  $x = 1,5 \text{ cm}$ .

ugyanakkor a viszonylag kis számban jelenlévő nagy energiájú elektronok felelősek, és az ionizáció mintázata a két esetben lényegesen eltérő.  $\gamma = 0$  mellett, azaz  $\alpha$ -módban az ionizáció a határrétegek kiterjedésének környezetére koncentrálódik. A  $\gamma$ -mód lényege, hogy az elektródákból kilépő elektronokat a kiterjedt állapotú határrétegben jelenlévő elektromos tér erőteljesen gyorsítja, így ezek a határréteget elhagyva intenzíven ionizálnak. Az ilyen módon végbemenő energiabetáplálást nevezzük  $\gamma$ -módnak, ami hatékony felületi

**folyamatok esetén meghatározóvá válhat a kisülés tulajdonságai szempontjából.**

A fentiekben több különböző plazmajellemzőről ejtettünk szót (elektromos térerősség, ionsűrűség, elektronsűrűség, az ionizáció térfogat- és időegységre jutó gyakorisága, az úgynevezett ionizációs ráta és az elektronok energiafelvétele). Megjegyzendő, hogy mindezek kialakulásának lényegi mozgatórugója a kisülést meghajtó váltakozó feszültség és az általa a részecskeáramra szabott feltétel: a váltakozó feszültségű táplálás következtében egyenáram nem folyhat a rendszerben, a soros kapcsolás miatt pedig önmagában a plazmán sem. A rádiófrekvenciás periódusra ( $T_{\text{RF}}$ ) vett időátlagban zérus áram kétféle töltéshordozó mozgása mellett úgy jöhet létre, ha mindkét elektródára azonos mennyiségű pozitív és negatív töltéshordozó érkezik, azaz az elektron- illetve ionfluxus időátlagban mindkét elektródán egyenlő:

$$\langle \Gamma_i \rangle_{T_{\text{RF}}} = \langle \Gamma_e \rangle_{T_{\text{RF}}}. \quad (2)$$

### 1.3. Motiváció, célkitűzések

A rádiófrekvenciás gázkisülések numerikus szimulációjában lényeges kérdés a felületi folyamatok modellezése. A szimulációk összetett volta, nagy számításigénye miatt ennek részletes kidolgozása sokszor háttérbe szorul, sok esetben pedig az adott – a plazma töltött részecskéinek az elektródákkal való ütközésekor végbemenő – felületi folyamatokra vonatkozó mérési eredmények hiánya gátolja a pontos leírás megvalósítását a szimulációban.

Az elektron-elektroda kölcsönhatás kapcsán gyakori közelítés, hogy az elektródákra érkező elektronok kivétel nélkül elnyelődnek, illetve ennél valamivel árnyaltabb megközelítés a konstans – energia- és szögfüggetlen, azaz a kisülés paramétereire kevésbé érzékeny – rugalmas reflexiók együttható feltételezése, például  $\delta_e = 0,2$  értékkel [4]. Részletes vizsgálatok kimutatták, hogy a rugalmas visszaverődési együttható különböző, 0 és 1 közötti értékeire a minden más paraméterben megegyező szimulációk jelentősen eltérő eredményeket produkálnak: az átlagos plazmasűrűség akár kettes faktorral változhat, valamint megváltozik a tértöltött réteg kiterjedése, a térerősség nagysága, az ionizációs dinamika, illetve az elektródákra érkező ionok fluxusa és átlagenergiája [5]. Ebből is látszik, hogy a szimulációkban fontos a felületi folyamatok pontos, minél valóságosabb leírása, hiszen azok nagy mértékben befolyásolhatják a kisülés működését és a plazmajellemzőket.

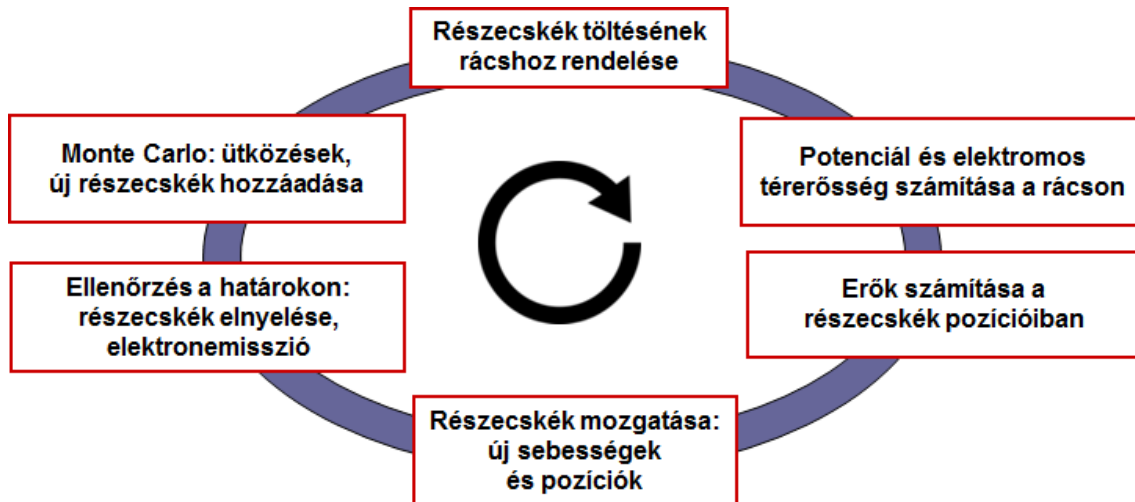
Valójában **mind az elektronok, mind az ionok összetett módon hatnak kölcsön az elektródákkal: az energiájuk és a beesési szögük lényegi tényező lehet, és az elektróda anyagi minősége, felszínének tulajdonságai – mint például a simaság és a**

kémiai tisztaság – is nagyban meghatározzák a valóságban végbemenő folyamatokat. Az elektronok esetében a visszaverődés és az elnyelődés mellett a kisülés viselkedésére jelentős hatással bír az **elektronkiváltás**: ahogy az ionok, úgy a megfelelő energiával érkező elektronok is kiválthatnak az elektródák felületéről elektronokat. **Céлом ez utóbbi folyamat, az elektronok által kiváltott másodlagos elektronok kisülésre gyakorolt hatásának vizsgálata szimulációs módszerekkel.** Ehhez egy empirikus energiafüggő modellt veszek alapul, amit egy szimulációs kódba implementálok.

## 2. A "Particle-in-Cell/Monte Carlo Collisions" (PIC/MCC) szimulációs módszer

A plazmák leírásának – a különféle közelítésekkel élő elméleti modellek mellett – egyik széles körben elterjedt megközelítése a kinetikus elmélettel ekvivalens részecskealapú numerikus (Monte Carlo) szimuláció. Ennek során egyenként követjük a részecskék (részecskecsoportok) mozgását mozgásegyenleteik numerikus integrálásával. Ez igen nagy számítási igényű művelet, így a módszer lehetőségei a számítástechnikai fejlődéssel együtt folyamatosan bővülnek. Az eljárás csupán néhány évtizedes múltra tekint vissza; manapság leginkább a párhuzamosítás elterjedése és fejlődése jelent benne nagy előrelépést.

A rádiófrekvenciás gázkisülések numerikus szimulációjához a területen széles körben elterjedt "Particle-in-Cell/Monte Carlo Collisions" (PIC/MCC) módszert használom [6]. A PIC-szimuláció két legfontosabb alapjellemezője, hogy **több részecskét együtt kezel (ún. szuper részecskékként – lásd később), így a plazmában jelen lévő részecskék számának csak a töredéke a követendő részecske**, valamint, hogy **az elektrosztatikus kölcsönhatást átlagtérelmélet alapján közelíti.** Ezt egészíti ki a Monte Carlo eljárás, ami a részecskék közti ütközési folyamatokat valószínűségi alapon, véletlen számok előállítására alapszik. Jelen esetben a PIC/MCC modell koordinátatérben egydimenziós – a részecskéknek csak a két elektródára merőlegesen mért pozícióját ( $x$ ) tartjuk számon, ami síkpárhuzamos elektródák esetén elegendő –, sebességtérben háromdimenziós. A szimulációban az idő diszkrét; az 5. ábrán vázolt, az alábbiakban részletezésre kerülő lépéseket a rádiófrekvenciás gerjesztő feszültség  $T_{RF}$  periódusidejénél lényegesen – tipikusan 3-4 nagyságrenddel – kisebb  $\Delta t$  időközönként kell végrehajtani.



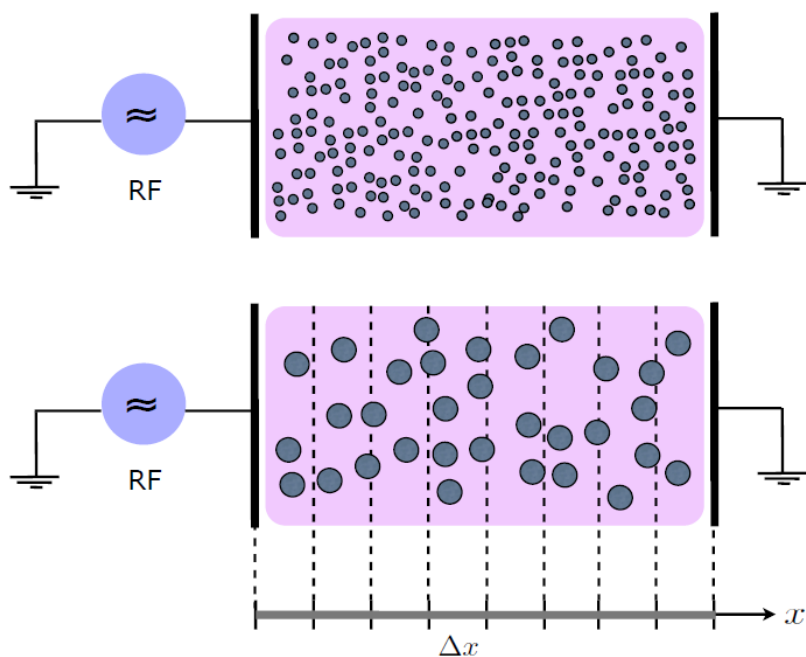
5. ábra. A PIC-MCC szimuláció egy  $-\Delta t$  időközönként végrehajtandó – ciklusának folyamat-ábrája.

## 2.1. A PIC/MCC ciklus

Röviden áttekintve, a PIC/MCC szimuláció egy ciklusa (egy  $\Delta t$  időlépés) a következő műveletekből áll (5. ábra, [8, 9, 10, 11]):

1. A szuperrészecskék töltését hozzárendeljük a rácspontokhoz.
2. A Poisson egyenlet megoldásával kiszámítjuk a potenciált és a térerősséget a rácspontokban (az elektródákra kapcsolt feszültség és a tértöltés ismeretében).
3. Kiszámítjuk a térerősséget és az erőt a részecskék pozícióiban (lineáris interpoláció).
4. A mozgásegyenletek integrálásával kiszámítjuk a részecskék új koordinátáját és sebességét.
5. A kisülési tér határfelületére érkező részecskék kezelését az elektródákon végbemenő felületi folyamatoknak megfelelően végezzük el: különböző valószínűséggel történhet elnyelődés, visszaverődés és másodlagoselektron-emisszió (oldalsó falakat az egydimenziós modellben természetesen nem veszünk figyelembe).
6. Az ütközéseket Monte Carlo módszerrel szimuláljuk: az ütközés típusának megfelelően megváltoztatjuk az ütköző részecskék sebességvektorát, illetve koordinátákat adunk az újonnan keletkezett részecskéknek.





6. ábra. A szuperrészecskék és a rács bevezetése.

## 2.2. A szuperrészecskék és a rács bevezetése

A PIC-módszer egyik lényegi technikai egyszerűsítése a bizonyos számú részecskék koordinátáinak együtt történő kezelése. Az ebben a munkában ismertetett szimulációk esetében  $10^4$ – $10^7$  között változik a részecskék súlytényezője, ami az együtt kezelt részecskék száma. A kisülések szimulációja így jellemzően mintegy  $10^5$  szuperrészecske követését igényli. Ezzel az elfogadható futási időt eredményező egyszerűsítéssel hatékonyan nyomon követhető a kisülések működése. A szimulációkban szuperrészecskéket – jelen esetben elektronokat és  $\text{Ar}^+$  ionokat – követünk.

A töltött részecskék közti elektrosztatikus kölcsönhatás számolásához bevezetünk egy rácsot: a helykoordináták szerint felosztjuk a kisülési teret bizonyos számú cellára (a későbbiekben ismertetett szimulációk esetében ez a szám 500–1200 közötti). A szuperrészecskék és a rács bevezetését egy sematikus rajzon szemléltetjük (6. ábra). A szuperrészecskék töltését hozzárendeljük a hozzájuk legközelebb lévő két rácsponthoz, az egyes rácspontoktól való távolságukkal fordított arányban súlyozva. Így a számolásnál kizárólag a rácspontokban jelenik meg zérustól különböző töltéssűrűség. Az elektromos potenciál rácspontokban érvényes értékét a Poisson-egyenlet numerikus megoldásával számoljuk ki, ami az egydimenziós rácson elhelyez-

kedő ponttöltések esetére igen egyszerű. Határfeltételként figyelembe kell vennünk az elektródákra kapcsolt feszültséget: a földelt elektróda potenciálja zérus, a meghajtotté a generátor szinuszos váltakozó feszültsége. A potenciálból egyszerű numerikus deriválással kiszámolható a rácspontokban felvett térerősség, a rácspontok közötti pontokban – a részecskék valódi helyén – pedig lineáris interpolációval adjuk meg a térerősséget. Ebből adódik az egyes részecskékre ható elektrosztatikus erő, aminek ismeretében külön-külön megoldjuk azok mozgásegyenleteit. A mozgásegyenletek numerikus integrálása az alábbi séma szerint történik: a diszkrét időlépés nagysága azonos a részecskék koordinátájára, sebességére és a térerősségre, azonban a sebességet az időlépés felével eltolva értékeljük ki a másik két mennyiséghez képest. Az egyenletek:

$$v\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = v\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{q}{m}E(x(t))\Delta t, \quad (3)$$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t,$$

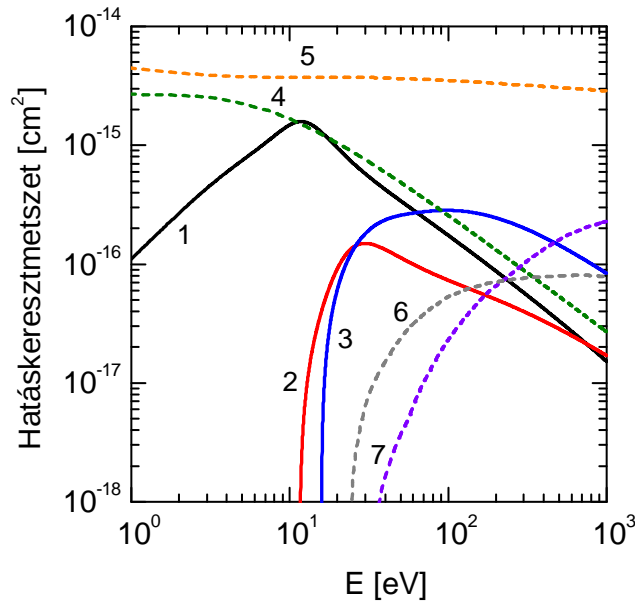
ahol  $q$  és  $m$  a szuperrészecske töltése és tömege,  $E(x(t))$  a részecske helyén felvett térerősség,  $\Delta t$  az időlépés hossza, ami a későbbiekben ismertetésre kerülő szimulációkban a rádiófrekvenciás periódus (73,75 ns) 16000-ed része, 4,6 ps.

### 2.3. Az ütközések Monte Carlo szimulációja

Az ütközési folyamatok kezelése a számításokban elméleti és megvalósítási síkon egyaránt igen összetett [7], és a mozgásegyenletek megoldása mellett a számítási műveletek meghatározó részét teszi ki. Egy adott időpillanathoz képest eltelt diszkrét  $\Delta t$  időlépés után egy adott részecske (elektron vagy ion) atommal való ütközésének valószínűsége a következő:

$$P_c(\Delta t) = 1 - \exp[-n_0\sigma(g)g\Delta t], \quad (4)$$

ahol  $n_0$  a háttérgáz részecskeszám-sűrűsége,  $\sigma$  a teljes – minden lehetséges folyamatot tartalmazó – ütközési hatáskeresztmetszet, ami függ a vizsgált részecske potenciális ütközőpartneréhez képesti  $g$  relatív sebességétől [7]. A szimulációban az időlépést úgy kell megválasztani, hogy az alatt a részecskék sebessége állandónak legyen tekinthető, és elhanyagolható legyen a többszörös ütközések valószínűsége. A potenciális ütközőpartnerét véletlenszerűen választjuk minden részecskére, minden időlépésben. Az ütközés bekövetkezését a fenti valószínűség egy 0 és 1 közötti egyenletes eloszlású véletlen számmal ( $R_{01}$ ) történő összehasonlításával döntjük



7. ábra. Az ütközési folyamatok hatáskeresztmetszetei az energia függvényében, Ar gázban.

el:  $R_{01} < P_c$  esetén következik be az ütközés. Az ütközés típusát a különböző folyamatok hatáskeresztmetszeteinek arányában határozzuk meg, egy további véletlen szám segítségével. Ütközés bekövetkeztekor megváltozik a részecskék sebességvektora: ilyenkor a tömegközépponti koordináta-rendszerbe áttérve, az adott típusú ütközésnek megfelelő energia- és szögeloszlás szerint transzformáljuk a sebességeket.

A későbbiekben ismertetésre kerülő szimulációk esetén az 1. táblázatban látható ütközési folyamatokat vesszük figyelembe argongázban a plazmát alkotó részecskék között, melyek hatáskeresztmetszetei a 7. ábrán láthatók.

Reakcióegyenlet	Jelentése	Hatáskeresztmetszeti adatok
1 $e^- + \text{Ar} \rightarrow e^- + \text{Ar}$	elektron rugalmas szóródása atomon	[12]
2 $e^- + \text{Ar} \rightarrow e^- + \text{Ar}^*$	elektron általi atomi gerjesztés	[12]
3 $e^- + \text{Ar} \rightarrow 2e^- + \text{Ar}^+$	elektron általi ionizáció	[12]
4 $\text{Ar}^+ + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar}$	izotrop rugalmas szórás	[13]
5 $\text{Ar}^+ + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar}$	rugalmas visszaszórás	[13]
6 $\text{Ar}^+ + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar}^*$	ion általi atomi gerjesztés <sup>1</sup>	[12, 14]
7 $\text{Ar}^+ + \text{Ar} \rightarrow 2\text{Ar}^+ + e^-$	ion általi ionizáció	[12, 14]

<sup>1</sup> Valójában három különböző folyamatról van szó, különböző hatáskeresztmetszetekkel, azonban ezeket együtt tüntetjük fel itt és a 7. ábrán is: az Ar atom UV-vonala, valamint a 488 nm és 811 nm hullámhosszú vonalak.

1. táblázat. A szimuláció során figyelembe vett ütközési folyamatok.

### 3. Az elektron-elektroda kölcsönhatás valóság-hű modellje

#### 3.1. A modell ismertetése

Az elektronok és az elektróda kölcsönhatásának PIC-szimulációval történő leírásában a Sydorenko által kidolgozott gondolatmenetet követjük [15]. Az elsődleges – elektródára érkező – elektronfluxusra bevezetjük a  $\Gamma_1$ , a másodlagos – az elsődleges hatására az elektródából kiinduló – fluxusra a  $\Gamma_2$  jelölést. Ezek hányadosa a **teljes másodlagos emissziós együttható** ( $\sigma_t$ ), amely rugalmas és rugalmatlan visszaverődésből, illetve valódi másodlagoselektron-kibocsátásból tevődik össze [16, 17]:

$$\frac{\Gamma_2}{\Gamma_1} = \sigma_t = \delta_e + \delta_i + \delta_v, \quad (5)$$

ahol  $\delta_e$  a **rugalmas visszaverődési együttható**,  $\delta_i$  a **rugalmatlan visszaverődés**,  $\delta_v$  pedig a **valódi másodlagos elektronok kibocsátásának együtthatója**. A  $\delta$  együtthatók külön-külön az adott folyamatból származó, elektródáról induló másodlagos fluxus elsődlegeshez viszonyított arányát adják meg, ami az elemi folyamatok szintjén valószínűségként értelmezhető: Monte Carlo szimulációban véletlen szám generálásával döntünk az adott folyamat bekövetkeztéről.

A **teljes másodlagos elektronfluxus** numerikus számolására Vaughan vezetett be elsőként **empirikus összefüggést**, ami az adott felületre beeső elektronnyaláb által keltett **másodlagos elektronnyaláb fluxusát adja meg a beeső nyalábéhoz képest** [18, 19]:

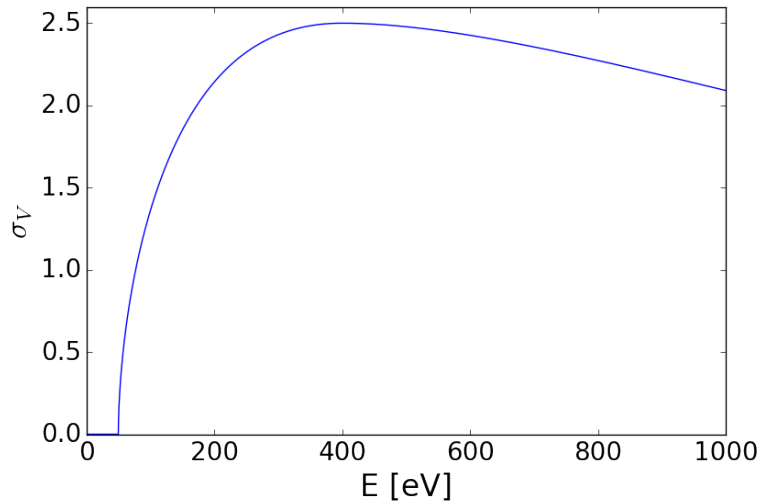
$$\sigma_V = \sigma_{max} [w e^{1-w}]^k, \quad (6)$$

ahol

$$w(\varepsilon, \theta) = \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon_{max}(\theta) - \varepsilon_0},$$

$$\varepsilon_{max}(\theta) = \varepsilon_{max,0} \left( 1 + \frac{k_s}{2\pi} \theta^2 \right),$$

$$\sigma_{max}(\theta) = \sigma_{max,0} \left( 1 + \frac{k_s}{2\pi} \theta^2 \right),$$



8. ábra. A Vaughan-féle emissziós együttható a merőlegesen beeső ( $\theta = 0$ ) elektron energiájának függvényében,  $\varepsilon_0 = 50$  eV;  $\varepsilon_{max,0} = 400$  eV;  $\sigma_{max,0} = 2,5$ ;  $k_s = 1$  paraméterek mellett.

$$k = \begin{cases} 0,56 & w < 1, \\ 0,25 & w \geq 1. \end{cases}$$

A fentiekben  $\varepsilon$  és  $\theta$  a beérkező elektronok energiája és beesési szöge, a merőleges beesést véve  $\theta = 0$ -nak. A többi paraméter egy adott tulajdonságokkal rendelkező felületre beeső elektronnyaláb esetén állandó.  $\varepsilon_0$  az **elektronemissziós küszöbenergia** – az ennél kisebb energiájú nyaláb elnyelődik –,  $\varepsilon_{max,0}$  és  $\sigma_{max,0}$  pedig a **másodlagos emisszióknak az adott felületre tapasztalható maximális értékéhez tartozó elektronenergia és maga a maximális relatív emisszió**, amelyeket előzetes mérési vagy elméleti számolási adatokból ismerünk.  $k_s$  a **felület simaságát jellemző tényező**: durva felületre az értéke 0 – ami szögfüggetlen másodlagos fluxust eredményez –, ideálisan sima felületre 2. A függvényalakot egy adott paraméterbeállításra a 8. ábrán szemléltetem.

Sydorenko ezt az összefüggést azzal egészíti ki a PIC-szimulációkban való alkalmazáshoz, hogy a fent említett három folyamatra bontja a Vaughan-féle együtthatót, és alacsony energiákra bevezet egy korrekciót, ami energiafüggő módon veszi figyelembe az ebben a tartományban igen jelentős rugalmas visszaverődést, így a fenti  $\varepsilon_0$  energiaküszöb alatt sem tűnik el a másodlagos emisszió. A rugalmas visszaverődés energiafüggése Sydorenko szerint:

$$\delta_e(\varepsilon, \theta) = r_e \sigma_V + \delta_{e,max} \begin{cases} w_1 e^{1-w_1} & \varepsilon_{e,0} < \varepsilon < \varepsilon_{e,max}, \\ [1 + w_2] e^{-w_2} & \varepsilon_{e,max} < \varepsilon, \end{cases} \quad (7)$$

ahol

$$w_1(\varepsilon) = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{e,0}}{\varepsilon_{e,max} - \varepsilon_{e,0}},$$

$$w_2(\varepsilon) = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{e,max}}{\Delta_e}.$$

A paraméterek:  $\varepsilon_{e,0}$  a **rugalmas visszaverődés küszöbenergiája** – ez vehető 0-nak is –,  $\varepsilon_{e,max}$  az **az energia**, ahol a **legjelentősebb a rugalmas visszaverődés**,  $\delta_{e,max}$  az ehhez tartozó **maximális visszaverődési együttható**,  $\Delta_e$  a (7)-es kifejezés második tagjának nagy energián történő exponenciális lecsengését meghatározó **kontrollparaméter**,  $r_e$  pedig megadja, hogy **nagy energián a teljes másodlagos elektronnyaláb mekkora része származik rugalmas visszaverődésből** – a rugalmas együttható ennek megfelelő konstans értékhez tart.

A **rugalmatlan visszaverődés teljes másodlagos nyalábhoz képesti aránya energiafüggetlen** [17]:

$$\delta_i(\varepsilon, \theta) = r_i \sigma_V, \quad (8)$$

ahol  $r_i$  egy konstans arányszám.

A **valódi másodlagoselektron-kiváltás együtthatója** ezek után egyszerűen úgy adódik, hogy a Vaughan-féle teljes másodlagos emissziós együtthatóból kivonjuk a rugalmas és rugalmatlan visszaverődés arányának megfelelő tagot:

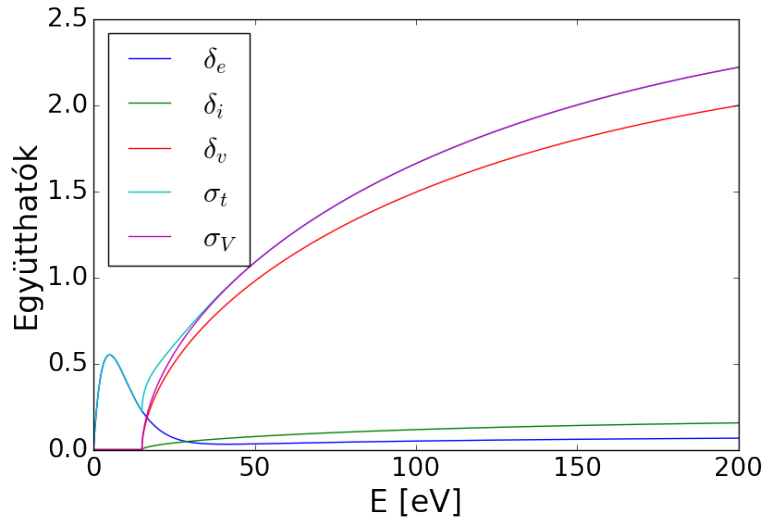
$$\delta_v(\varepsilon, \theta) = (1 - r_e - r_i) \sigma_V. \quad (9)$$

A **korrigált teljes másodlagos emissziós együttható**:

$$\sigma_t = \delta_e + \delta_i + \delta_v, \quad (10)$$

ami nagy energiákon megegyezik a Vaughan-féle  $\sigma_V$  együtthatóval, míg kis energián megjelenik benne a rugalmas visszaverődésből adódó többlet. A Vaughan-féle és a Sydorenko-féle másodlagos emissziós együtthatót, valamint külön-külön a rugalmas és rugalmatlan visszaverődés

illetve a valódi másodlagoselektron-kibocsátás ilyen módon definiált energiafüggő együttthatóit a szilícium-dioxid következőkben részletesen megindokolt paraméterkombinációjára a 9. ábrán tüntettem fel.



9. ábra. Az egyes folyamatok együttthatói, az ezek összegeként előálló teljes másodlagos emissziós együtttható és a Vaughan-féle együtttható  $\text{SiO}_2$  felületre, melynek paramétereit:  $\varepsilon_0 = 15$  eV;  $\varepsilon_{max,0} = 400$  eV;  $\sigma_{max,0} = 2,5$ ;  $k_s = 1$ ;  $\varepsilon_{e,0} = 0$  eV;  $\varepsilon_{e,max} = 5$  eV;  $\delta_{e,max} = 0,55$ ;  $\Delta_e = 5$  eV.

### 3.2. Paraméterbeállítások $\text{SiO}_2$ elektródákra

Az imént ismertetett modellt szilícium-dioxid ( $\text{SiO}_2$ ) elektródák közt létrehozott, igen alacsony nyomású (0,5 Pa) gázkisülésekben az elektronok és a felület között lezajló kölcsönhatások leírására alkalmazom. Különböző anyagú felületek másodlagos emissziós görbéjének maximumhelyére és maximumának értékére található adatok az irodalomban [16]. Szilícium-dioxidra 400 eV-nál tapasztalható maximális emisszió, aminek értéke 2,1–2,9 között változik a mérési adatokban. Ezek alapján a szimulációkban az  $\varepsilon_{max,0} = 400$  eV, illetve a  $\sigma_{max,0} = 2,5$  értékeket állítottam be. A felületet geometriáját jellemző paraméter Vaughan modelljében 0–2 közötti értékeket vehet fel, a durvától a tökéletesen sima felszín felé haladva. Mivel általánosságban vizsgálom a  $\text{SiO}_2$  elektródák között létrehozott kisüléseket, a köztes  $k_s = 1$  értékre állítottam be a paramétert, eltekintve a modellnek ettől a szabadsági fokától.

A rugalmas visszaverődés  $\varepsilon_{e,0}$  küszöbenergiáját zérusnak vettem: indokolatlan lenne azt feltételezni, hogy a kis energiájú elektronok egyáltalán nem verődnek vissza, az alsó limit nélküli

görbe pedig alakilag jól egyezik egyes fénoxidok és sók elektronemissziós együtthatóira vonatkozó mérési adatokkal [20]. A rugalmas visszaverődési csúcs helyének és nagyságának esetében szilícium-dioxidra vonatkozó pontos adatok híján egyéb dielektrikum felületek irodalmi adataiból indultam ki [21]: szilícium-dioxid rugalmas visszaverődési csúcsának helyét  $\varepsilon_{e,max} = 5$  eV-nak, a maximális visszaverődést  $\delta_{e,max} = 0,55$ -nek vettem.

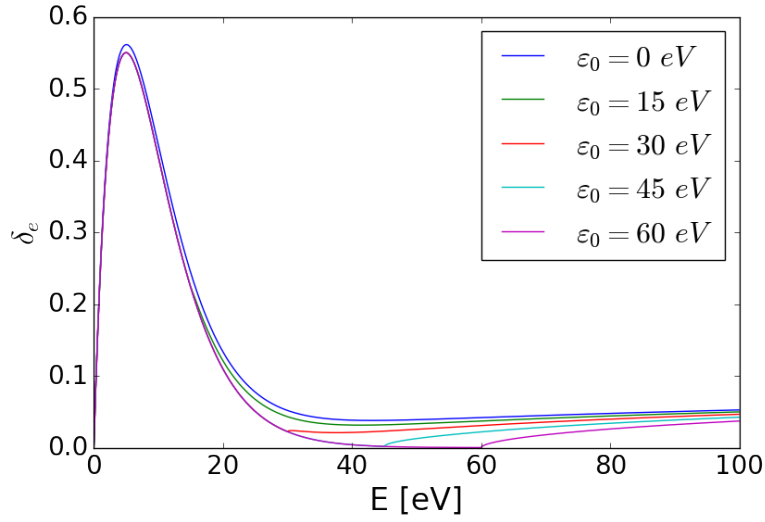
A Vaughan-féle  $\varepsilon_0$  küszöbenergiát, azaz a felületből történő elektronkiváltás és a rugalmatlan visszaverődés küszöbenergiáját úgy állítottam be, hogy ezáltal az ettől a paramétertől szintén függő rugalmas reflexió függvényében ne legyen jelentős törés: ez a fennmaradó  $\Delta_e$  paraméter különböző értékeinél egyaránt  $\varepsilon_0 = 15$  eV környékén teljesül, ezért  $\varepsilon_0$ -ra ezt az értéket választottam.  $\Delta_e$  értékét úgy állítottam be, hogy a rugalmas visszaverődés együtthatója hamar lecsengjen: Seiler cikke [16] alapján a rugalmas visszaverődési csúcs félértékszélessége még a szélsőséges esetnek számító igen sima felszínű tiszta fémekre sem haladja meg a 12 eV-ot. A kontrollparamétert  $\Delta_e = 5$  eV-nak választva az 5 eV-nál feltételezett rugalmas reflexiós csúcs 20 eV környékén cseng le teljesen, ez tehát megfelelő választás. A paraméterek hatását a rugalmas visszaverődés energiafüggésére a 10. és a 11. ábrákon illusztrálom.

A rugalmas és rugalmatlan visszaverődésből származó elektronok aránya a teljes másodlagos nyalábhoz képest:  $r_e = 0,03$  és  $r_i = 0,07$  [17]. A  $\text{SiO}_2$  energiafüggő másodlagos emissziós együtthatóit már fentebb, a 9. ábrán feltüntettem, a paramétereket pedig táblázatos formában is közlöm (2. táblázat).

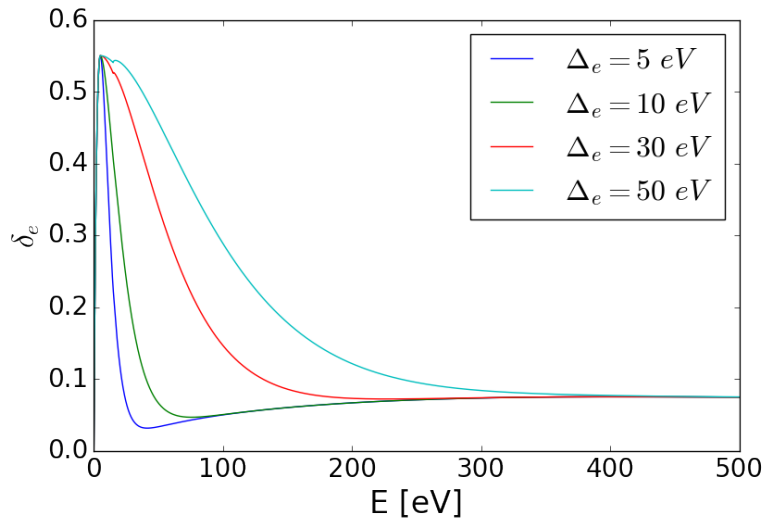
	Paraméter	Jelentése	Értéke ( $\text{SiO}_2$ )	Forrás
1	$\varepsilon_0$	a Vaughan-féle másodlagos emisszió küszöbenergiája	15 eV	
2	$\varepsilon_{max,0}$	a másodlagos emissziós görbe maximumhelye	400 eV	[16]
3	$\sigma_{max,0}$	a maximális másodlagos emisszió értéke	2,5	[16]
4	$k_s$	a felszín simaságát jellemző paraméter	1	
5	$\varepsilon_{e,0}$	a rugalmas visszaverődés küszöbenergiája	0 eV	[20]
6	$\varepsilon_{e,max}$	a rugalmas visszaverődés maximumhelye	5 eV	[21]
7	$\delta_{e,max}$	a maximális rugalmas visszaverődés értéke	0,55	[21]
8	$\Delta_e$	a rugalmas visszaverődés lecsengésének paramétere	5 eV	[20]
9	$r_e$	a rugalmatlanul visszaverődött elektronok részaránya	0,07	[17]
10	$r_i$	a rugalmasan visszaverődött elektronok részaránya	0,03	[17]

2. táblázat. *A másodlagos elektronemisszió modelljének bemeneti paraméterei  $\text{SiO}_2$  elektródákra.*





10. ábra. A Vaughan-féle küszöbenergia változtatásának hatása a rugalmas visszaverődés együtt-hatójára, a merőlegesen beeső ( $\theta = 0$ ) elektron energiájának függvényében,  $\varepsilon_{max,0} = 400$  eV;  $\sigma_{max,0} = 2,5$ ;  $k_s = 1$ ;  $\varepsilon_{e,0} = 0$  eV;  $\varepsilon_{e,max} = 5$  eV;  $\delta_{e,max} = 0,55$ ;  $\Delta_e = 5$  eV választása mellett.



11. ábra. A  $\Delta_e$  paraméter változtatásának hatása a rugalmas visszaverődés együtt-hatójára, a merőlegesen beeső ( $\theta = 0$ ) elektron energiájának függvényében,  $\varepsilon_{max,0} = 400$  eV;  $\sigma_{max,0} = 2,5$ ;  $k_s = 1$ ;  $\varepsilon_{e,0} = 0$  eV;  $\varepsilon_{e,max} = 5$  eV;  $\delta_{e,max} = 0,55$ ;  $\varepsilon_0 = 15$  eV választása mellett.

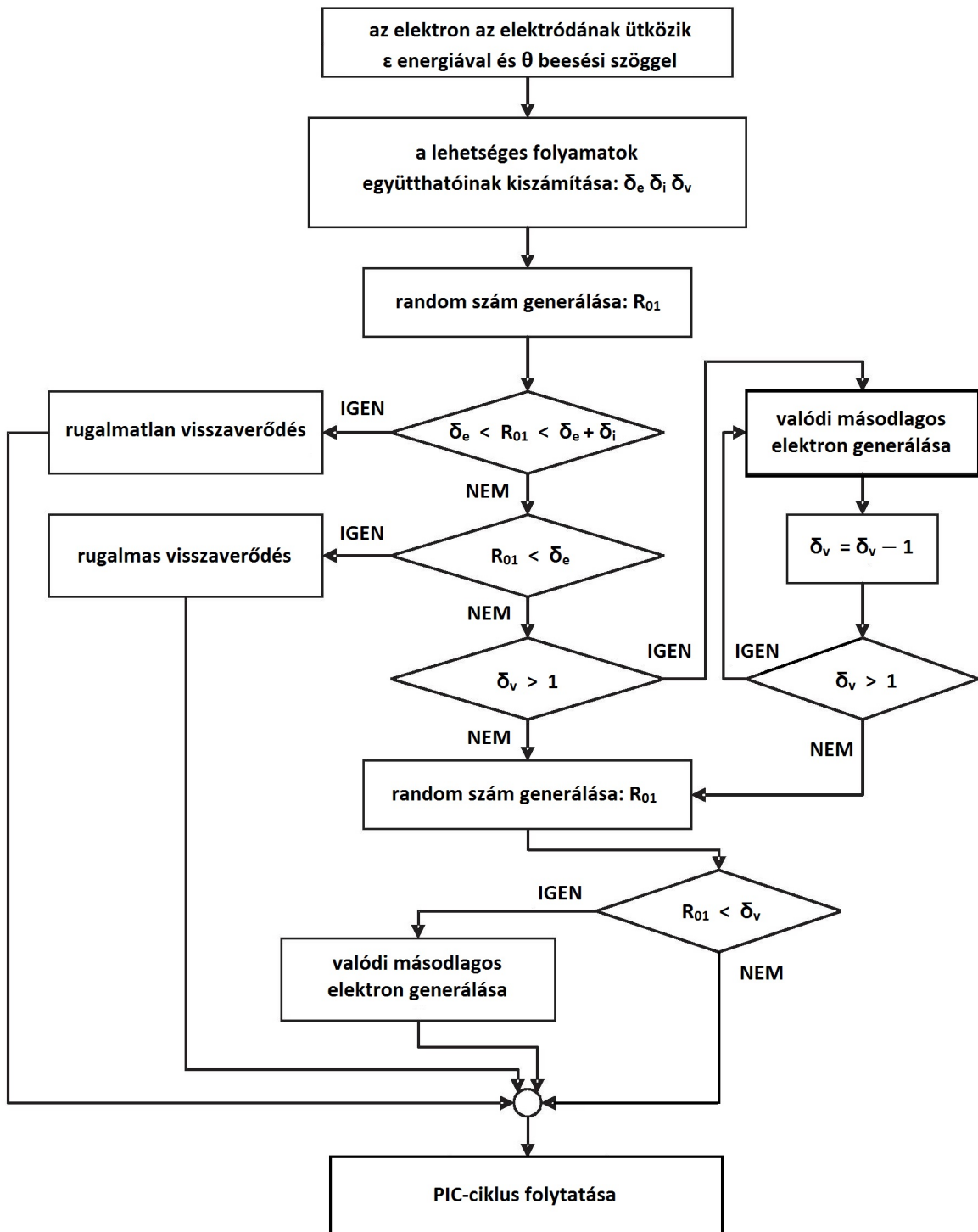
### 3.3. A felületi folyamatok szimulációs algoritmus

Az elektródák és a vele ütköző elektronok kölcsönhatásának szimulációja külön egységet képez a PIC/MCC ciklusban, ezen folyamatok implementációjával egészítettem ki a programkódot. Sydorenko ismertetett erre egy lehetséges megoldást, amit a szimulációkban felhasználtam [15]. Az algoritmus folyamatábrája a 12. ábrán látható. A lényegi lépések:

1. Az elektródának ütköző részecske energiájának és beesési szögének ismeretében kiszámolható a rugalmas és rugalmatlan visszaverődés és a valódi elektronemisszió együtthatójának értéke, ami egyetlen elektron esetében az egyes folyamatok bekövetkezési valószínűségét jelenti.
2. Elsőként a visszaverődés végbemeneteléről kell dönteni, amit egy 0 és 1 közötti véletlen szám generálásával és ennek a megfelelő valószínűségekkel való összehasonlításával teszünk meg. A lényeg, hogy amennyiben az adott folyamat együtthatójának megfelelő hosszúságú intervallumba esik a véletlen szám, akkor "lejátsszuk" az adott folyamatot. Az, hogy melyik típusú visszaverődésről döntünk előbb, nem lényeges, csak az a fontos, hogy ezt az egész szimuláció során ugyanúgy tegyünk.
3. Amennyiben nem verődik vissza az elektron, kiválthat másodlagos elektront. Ha a valódi másodlagos elektronemisszió együtthatója nagyobb, mint egy, akkor a beeső elektron az együttható egész részének megfelelő számú elektront biztosan kivált az elektróda felületéről. A törtrész még egy további elektron kiváltásának valószínűségét jelenti, aminek bekövetkeztéről ismét egy új véletlen számmal döntünk.

Ezekkel a lépésekkel az elektronnyalábok kísérleti vizsgálatából levezetett modellnek megfelelő elektronemissziót kapunk, részecskealapú megközelítéssel. A numerikus szimuláció rendelkezik azzal az előnnyel, hogy egyszerűen szétválaszthatók benne a különböző mechanizmusból származó másodlagos elektronok, így hordozhat többletinformációt a kísérlethez képest.

További lényeges pontja a modellnek a másodlagos elektronok energia és szög szerinti eloszlása. Az egyes visszaverődő részecskék energiája és szöge újabb véletlen számok generálásával határozható meg: a lényegi kérdés, hogy milyen eloszlásból vesszük a véletlen számot. Rugalmas reflexió esetén ez egyszerű: a sebesség nagysága változatlan, iránya pedig a tükörről történő visszaverődésnek megfelelően változik, így ez az egyetlen folyamat, amiben nincs véletlen tényező. A rugalmatlan reflexió szögeloszlását izotropnak vesszük, az energia pedig szintén



12. ábra. Az elektronok elektródával való kölcsönhatásának simulációs algoritmus [15].

egyenletes eloszlású a beeső elektron energiája és zérus között [15]. Disszipációs folyamat lévén, ez megalapozott megközelítés. A felületről újonnan kiváltott másodlagos elektronok esetében azzal a közelítéssel élünk, hogy a beeső elektron, energiájától függetlenül, 0 és 20 eV között egyenletes energiaeloszlással válthat ki valódi másodlagos elektront. A jelen esetben részleteiben nem vizsgált – konstans  $\gamma$  együtthatóval közelített – ion-elektroda kölcsönhatás során keletkező másodlagos elektronok energiáját 0 és 5 eV közötti egyenletes eloszlásból vesszük. Az elektródából kilépő elektronok szögeloszlását minden esetben izotropnak feltételezzük.

## 4. Szimulációs eredmények

Munkám során argongázban, szilícium-dioxid elektródák között kialakuló rádiófrekvenciás gáz-kisülések működését szimuláltam PIC/MCC módszerrel, az esetek többségében 0,5 Pa nyomáson. Ez a nyomás megfelel a plazma alapú porlasztásos rétegleválasztás körülményeinek. Ilyen körülmények között jól megfigyelhető az elektronok által keltett másodlagos elektronnyaláb plazmaparaméterekre gyakorolt hatása. Alacsony nyomáson a háttérgáz kis sűrűsége miatt az elektróda felületéről kilépő és a tértöltött rétegben felgyorsuló elektronoknak nagy az ütközési szabad úthosszuk, így jelentős részük ütközés nélkül jut át a középső kvázisemleges rétegen, és nagy energiával éri el a szemközti elektródát. Ennek eredményeképp nagy számban zajlanak le az elnyelődéstől különböző folyamatok.

A gerjesztő RF feszültség frekvenciája minden esetben 13,56 MHz, az elektródatávolság 6,7 cm volt. A feszültség amplitúdóját 100 V és 2000 V között változtattam. A háttérgáz hőmérsékletét 400 K-re állítottam be, ami rögzített bemeneti paramétere a szimulációnak. Kritikus paraméter még az elektródáknak ütköző ionok által indukált elektronkiváltás együtthatója: ezt a legtöbb esetben konstans  $\gamma = 0,4$ -nek vettem, ami  $\text{SiO}_2$  felületre jó közelítés [22].

Vizsgálataim során széles paramétertartományban hasonlítottam össze a kisülések jellemzőit: végeztem szimulációkat az elektron-elektroda kölcsönhatás Vaughan–Sydorenko-féle modelljével, illetve a szimulációs gyakorlatban széles körben elterjedt konstans  $\delta_e = 0,2$  rugalmas visszaverődési együtthatót implementálva [4], az egyéb folyamatokat elhanyagolva. A különböző elektron-elektroda folyamatok hatásának pontosabb megértése végett olyan (nem-realisztikus) szimulációkat is futtattam, amelyekben a különböző lehetséges elektron-elektroda folyamatok némelyike ki volt kapcsolva, azaz a rugalmas és rugalmatlan visszaverődés, illetve a valódi másodlagoselektron-emisszió együtthatója a Vaughan–Sydorenko féle modell alapján volt értelmezve, melyek közül azonban egy vagy több zérusra volt állítva. A szimulációs

eredmények áttekintéséhez a következő jelölési rendszert használom:

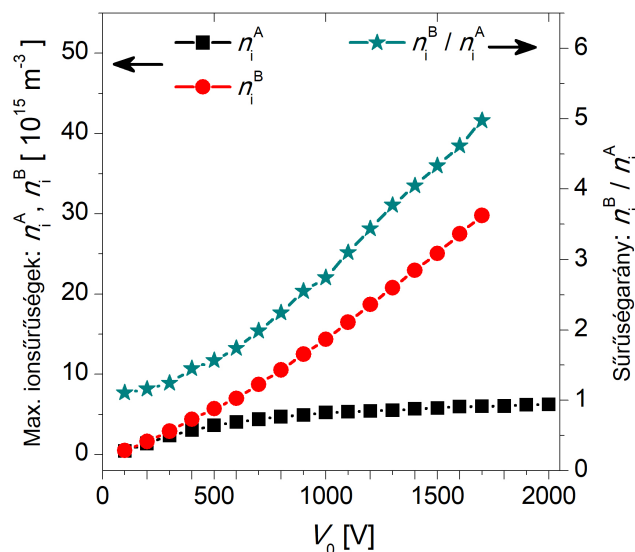
<b>A</b> modell:	a konstans $\delta_e = 0,2$ reflexióval számoló modell;
<b>B</b> modell:	a Vaughan–Sydorenko-féle teljes modell rugalmas visszaverődéssel, rugalmatlan visszaverődéssel és valódi másodlagoselektron-kiváltással.

Az eredményeim ismertetésénél túlnyomórészt egyetlen kiválasztott kisülési eset részletes vizsgálatán keresztül mutatom be a valódi másodlagos elektronok szerepét Ar gázban, SiO<sub>2</sub> elektródák között, alacsony nyomáson, nagy feszültségamplitúdó mellett üzemeltetett gázkisülésekben. Végeztem vizsgálatokat a feszültségamplitúdó és a nyomás változtatásának a kisülés működésére gyakorolt hatására is, azonban a dolgozat terjedelmi korlátai miatt ezeket itt nem ismertetem.

Az itt közölt eredmények mind szerepelnek egy publikálásra elfogadott cikkben [23].

#### 4.1. A plazmasűrűség vizsgálata

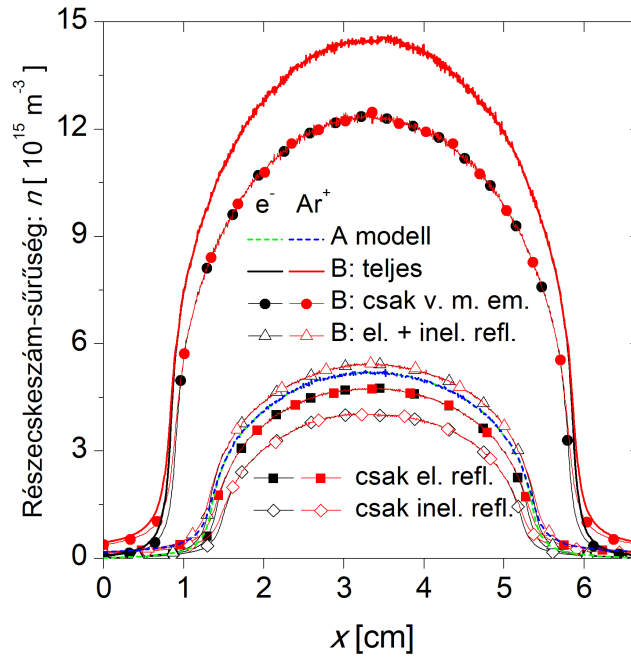
A 13. ábra az A és B modellel kapott ionsűrűségek értékeit és azok arányát mutatja az elektródák közti térrész közepén (ezek az RF periódusra időben átlagolt hely szerinti ionsűrűségeloszlások maximumai) a tápfeszültség amplitúdójának függvényében, 100–2000 V közötti tartományban. Az elektronsűrűség a kvázisemleges térrészben lényegében azonos az ionsűrűséggel, ezért ennek ábrázolásától eltekintettem. Fontos megemlíteni, hogy az A modellel ellentétben, a pontosabb B modell használatával 1800 V-os és annál magasabb feszültség mellett a szimulációban a részecskeszám már nem konvergált: ez a paraméterbeállítás a stabil működés tartományán kívül esik. Az ionsűrűség a töltött részecskék keletkezésének gyakoriságáról hordoz információt, legyen az akár ionizáció, akár felületi emisszió következménye (a két folyamat természetesen erősen összefügg egymással). Egyrészt azt tapasztaljuk, hogy **a feszültség növelésével monoton növekszik a plazmasűrűség, mindkét modellel számolva**; másrészt, az elektron-elektroda kölcsönhatást valóságghűen tárgyaló B modell minden esetben nagyobb sűrűséget ad, mint a csupán konstans rugalmas visszaverődéssel számoló A modell. Előbbi kézenfekvő, hiszen a nagyobb feszültségű táplálás révén az elektronok átlagosan nagyobb energiára tesznek szert, ami növeli az ionizáció gyakoriságát. Az, hogy a B modellel mindig nagyobb sűrűséget kapunk, a felületi folyamatok eredménye: látszik, hogy ezek megléte széles feszültségtartományban növeli a plazmasűrűséget. Szembetűnő, hogy, míg az A modellel adott



13. ábra. Az elektron-elektroda kölcsönhatást különbözőképpen leíró A és B modellek alkalmazásával kapott maximális ionsűrűségek és arányuk a tápfeszültség amplitúdójának függvényében. Kiszülési paraméterek: Ar gáz, SiO<sub>2</sub> elektródák;  $p = 0,5$  Pa;  $L = 6,7$  cm;  $f = 13,56$  MHz;  $\gamma = 0,4$ .

beállítások mellett 2000 V-on mintegy 14-szerese a plazmasűrűség a 100 V-on tapasztalható értéknek, addig a B modellel a plazmasűrűség csaknem 60-szorosára növekszik 100 V és 1700 V között. Ezzel összhangban a B modellel és az A modellel kapott sűrűség hányadosa (lásd: 13. ábra, jobb oldali tengely) a feszültség függvényében szintén monoton növekszik, a 100 V-on tapasztalt 10 %-os különbségről mintegy 5-szörös faktoral számszerűsíthető eltérésre 1700 V-on. Nagyobb feszültségen tehát megnövekszik a felületi folyamatok jelentősége a vizsgált rendszerben.

A 14. ábrán egy kiválasztott feszültségen, 1000 V-on mutatom be az A és B modellel kapott időátlagolt ion- és elektronsűrűség-profilokat. E két eset mellett olyan eredményeket is feltüntetek, amikor a B modell egyes folyamatai ki voltak kapcsolva a szimulációban. Ahogy az előző (13.) ábrán is láttuk, a maximális sűrűségek aránya ezen a feszültségen közelítőleg 2,75. A sűrűségprofilokat mutató 14. ábrán emellett a határréteg hosszának jelentős változása is látható: az elektron-elektroda folyamatok valóságos leírása a határréteg rövidülését eredményezi (B modell az A-hoz képest). Látható továbbá, hogy csak energiafüggő, rugalmas és rugalmatlan visszaverődéssel számolva alig tapasztalható eltérés az A modellhez képest (enyhe

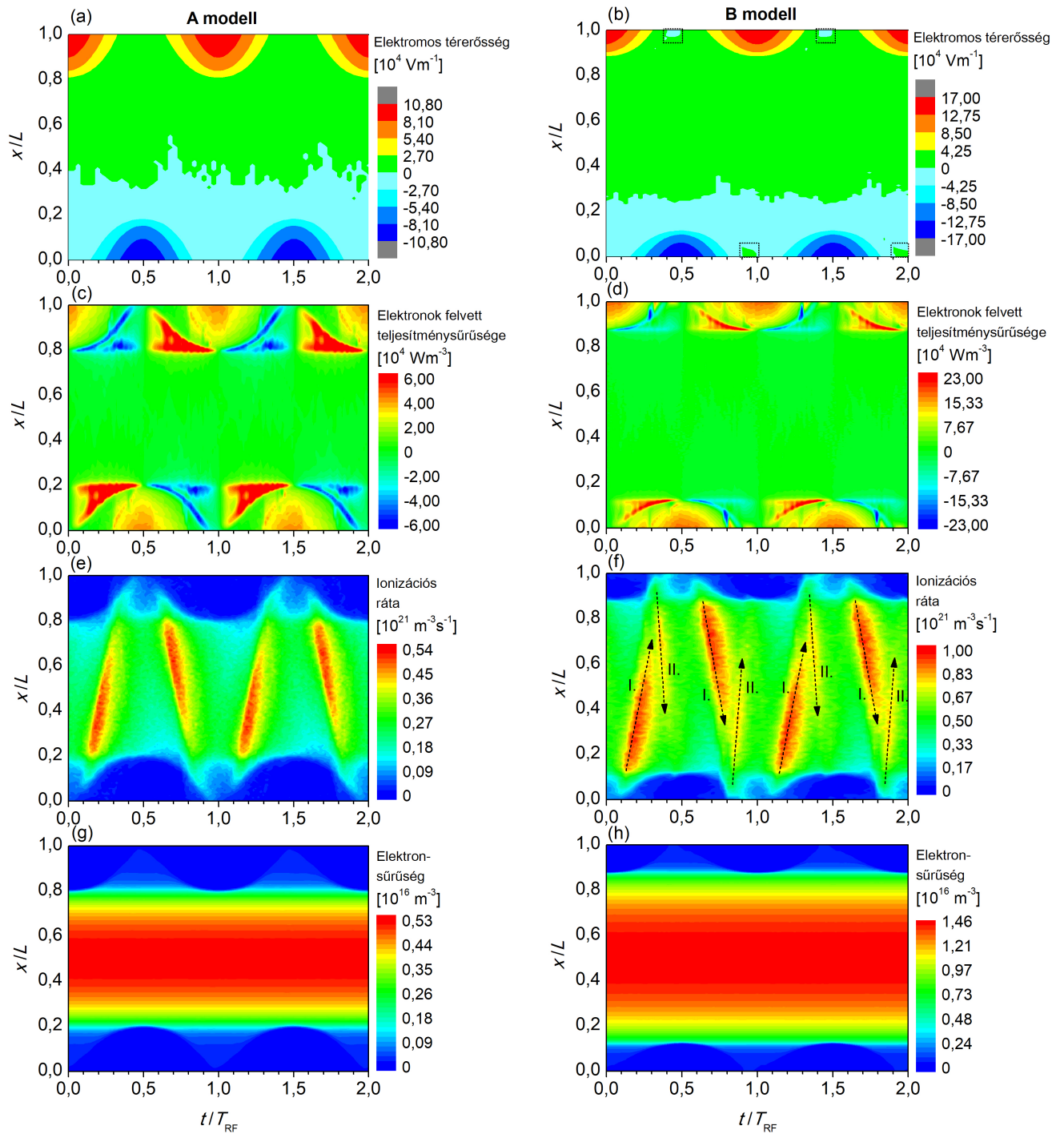


14. ábra. Az időátlagolt ion- és elektronsűrűség-profil változása az A és B modell alapján, illetve a B modell egyes folyamatainak kikapcsolásával. Kisülési paraméterek: Ar gáz, SiO<sub>2</sub> elektródák;  $p = 0,5$  Pa;  $L = 6,7$  cm;  $f = 13,56$  MHz;  $\gamma = 0,4$ ;  $V_0 = 1000$  V.

növekmény a sűrűségben), és csak energiafüggő rugalmas, illetve csak energiafüggő rugalmatlan visszaverődés esetén még kisebb is a sűrűség, mint a konstans rugalmas visszaverődést feltevő A modell esetén. Ezzel szemben, amikor a visszaverődést kapcsoljuk ki, és csak az energiafüggő valódi másodlagoselektron-kibocsátást vesszük figyelembe, mintegy 85 %-át kapjuk a teljes B modellel tapasztalt ionsűrűségnek. Ezek alapján elmondható, hogy **alacsony nyomáson és magas feszültségen az elektron-elektroda felületi folyamatok közül a valódi másodlagoselektron-kibocsátás játszik kulcsszerepet a plazmasűrűség B modellben tapasztalható, nagy mértékű megnövekedésében** (nagyobb feszültségre a különbségek még hangsúlyosabbak, ahogy azt a 13. ábrán is láttuk).

## 4.2. Plazmaparaméterek összehasonlítása a két modellben

Annak érdekében, hogy megértsük, miért növelik a valódi másodlagos elektronok a plazmasűrűséget alacsony nyomáson és nagy feszültségamplitúdó mellett működtetett kisülésekben, az imént tárgyalt esetet (1000 V feszültségamplitúdó) részletesen megvizsgálom. A 15. ábrán



15. ábra. Az elektromos térerősség, az elektronok által felvett teljesítménysűrűség, az idő- és térfogategységre jutó elektronütközéses ionizációk száma és az elektronsűrűség térbeli és időbeli eloszlása az A és B modellre. Kísülési paraméterek: Ar gáz, SiO<sub>2</sub> elektródák;  $\gamma = 0,4$ ;  $p = 0,5$  Pa;  $V_0 = 1000$  V;  $f = 13,56$  MHz;  $L = 6,7$  cm. A táplált elektróda helye  $x = 0$ , a földelt elektródáé  $x = L$  (a továbbiakban minden hasonló jellegű ábrán).



bemutatók néhány, a két különböző modellel számolt plazmajellemzőt: az ábrán az elektromos térerősség, az elektronok által felvett teljesítménysűrűség, az idő- és térfogategységre jutó ionizációk száma és az elektronsűrűség tér- és időbeli eloszlása látható, mind az A, mind a B modell alapján. Időben két rádiófrekvenciás periódusra átlagoltam a 10000 RF periódus hosszára futtatott szimuláció adatait. Az ábra utolsó sorában látható elektronsűrűség (15.(g, h)) közvetlenül mutatja a tértöltött határreteg szélességének a gerjesztő frekvenciát követő időbeli változását, illetve a valódi másodlagos elektronok hatását a tértöltött réteg hosszára (a B modellben kisebb a határreteg szélessége az A-hoz képest), amit az előző (14.) ábrán is megfigyelhettünk.

A konstans reflexióval számoló A modellt használva  $\alpha$  módban működő kisülést látunk: az elektronok elsősorban az elektródák menti határretegek kiterjedésekor nyernek energiát. Az ezzel a mechanizmussal gyorsított nyaláb erősen ionizál, ami az ábrán jól elkülöníthető maximumként jelenik meg (15.(e)). Jelen esetben az alacsony nyomásnak köszönhetően a felgyorsult elektronnyaláb hosszú hatótávolságban, a kvázisemleges térrész teljes hosszában képes intenzív ionizációt kelteni, hiszen a háttérgáz kis sűrűsége miatt nagy a töltéshordozók szabad úthossza. Ez a nyaláb eljut a szemközti elektródáig, az ottani határreteg visszahúzóadásának fázisában. A határretegekben nem látható jelentős ionizáció a háttérgáz alacsony nyomása miatt – nem jelenik meg a  $\gamma$ -módra jellemző mintázat –, annak ellenére, hogy az elektródákból kilépnek ionok által indukált másodlagos elektronok,  $\gamma = 0,4$  valószínűséggel. Az abszorbeált teljesítménysűrűség eloszlásában az A modell esetére (bal oldalt) jól kivehető a tértöltött réteg kiterjedésekor – az elektronok elektródától távolodó irányba gyorsítása révén – bekövetkező energiafelvétel – pozitív érték – és az ennél átlagban láthatóan alacsonyabb energialeadás, ami az elektronoknak a határreteg visszahúzóadásakor bekövetkező energiavesztesége. Emellett az elektródák közelében is jelentős energiafelvétel zajlik le, amikor az ionindukált másodlagos elektronokat a nagy elektromos tér a kvázisemleges réteg felé gyorsítja.

Az elektron-elektróda kölcsönhatás energiafüggő modellezésével, az elektródákból történő másodlagos elektronemisszió figyelembevételével (B modell) jelentős eltérés figyelhető meg az ionizációs dinamikában az A modellhez képest (15.(f)). Az egyik elektróda felől induló,  $\alpha$  módban intenzíven ionizáló elektronnyaláb (I) mellett megjelenik egy második erősen ionizáló nyaláb (II). Ennek az ionizációnak az intenzitása jóval kisebb ugyan az elsődleges nyalábénál, az ionizáció teljes tér- és időbeli eloszlásában viszont egyértelműen kiemelkedő érték. Lényeges az is, hogy az (I) jelű nyaláb is jóval erősebben ionizál a B modellben, mint az A-ban.

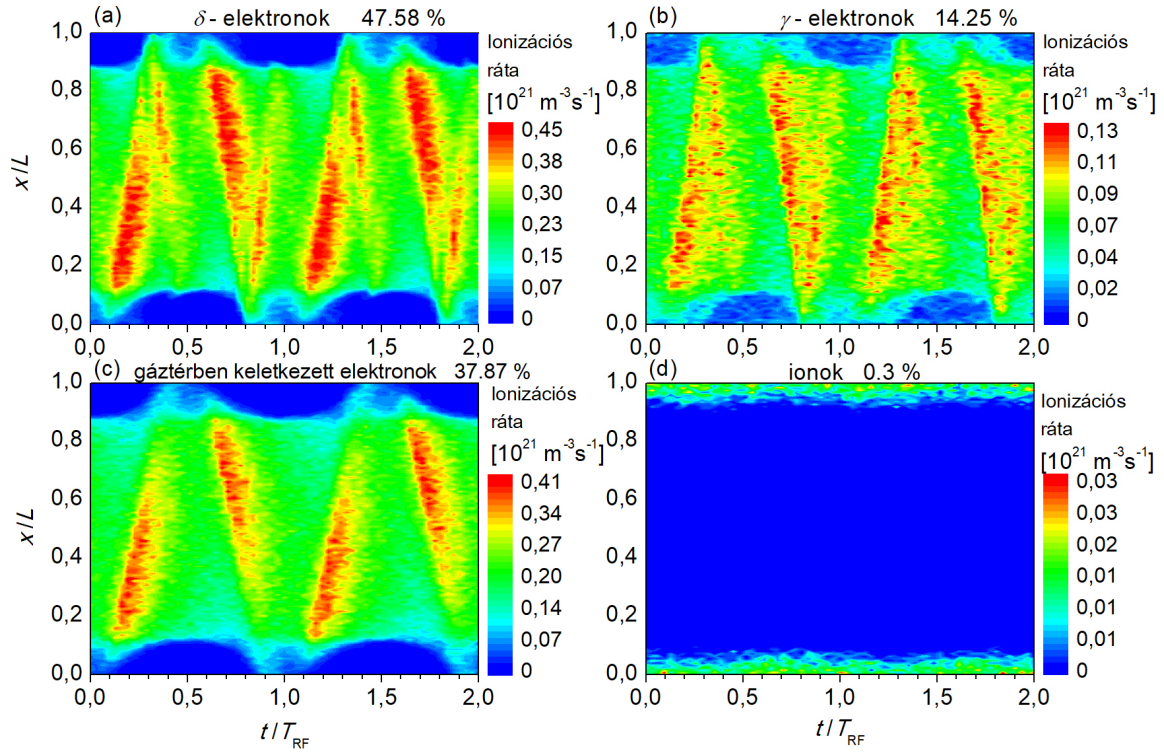
Szintén fontos jelenséget figyelhetünk meg az elektromos térerősség összehasonlításával

(15.(a, b)): a B modell esetén az elektródák közelében a határréteg minimális kiterjedésekor **"tér visszafordulás"** (az elektromos térerősség előjelváltása) következik be. A tér olyan irányúvá válik, ami az elektróda felé vonzza az elektronokat. Ez arra enged következtetni, hogy az elektródánál negatív az eredő fluxus, azaz nagyobb a kimenő nyaláb fluxusa, mint a beérkezőé. Ez úgy lehetséges, hogy a határréteg visszahúzódása miatti intenzív elektronbeesés eredményeképpen nagy számban keletkeznek valódi másodlagos elektronok, egy beeső elektron pedig akár több valódi másodlagos elektront is kiválthat. Az így létrejövő, az elektródákból kifelé irányuló eredő fluxust az elektronokat vonzó tér ellensúlyozni hívatott, ugyanis biztosítani kell, hogy egy RF periódusra átlagolva az egy elektródára érkező ionok és elektronok fluxusa megegyezzen.

### 4.3. Az ionizációs dinamika részletei

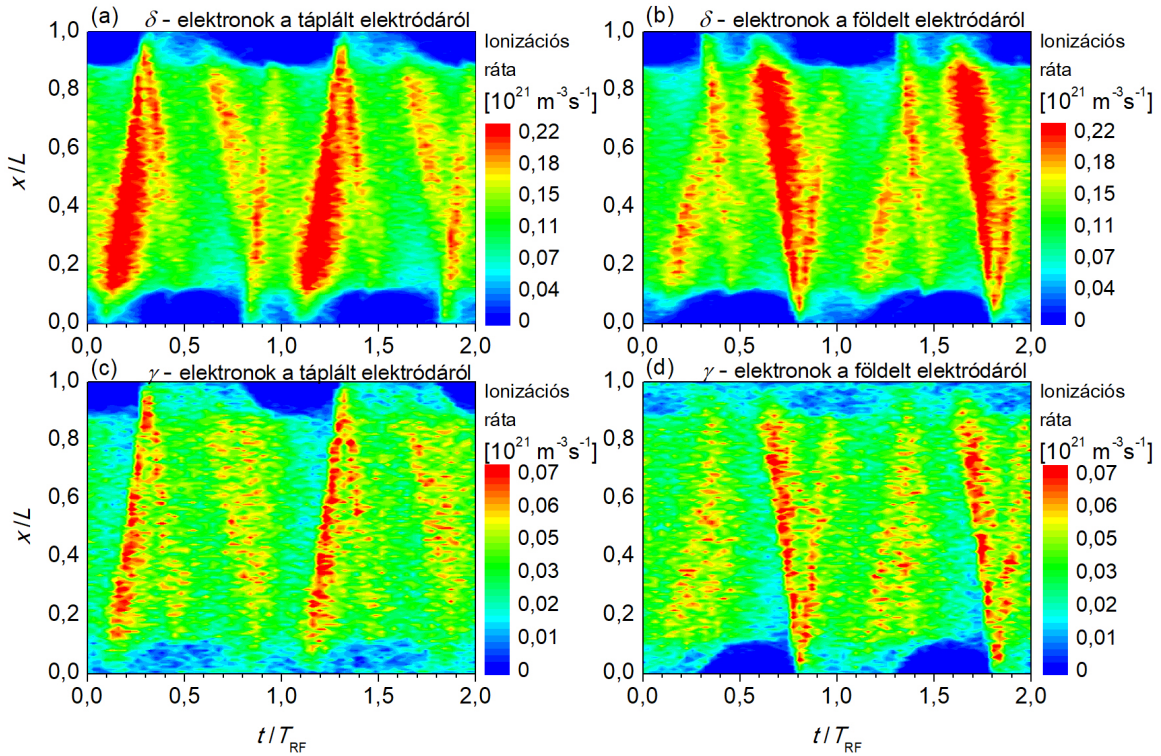
A 16. ábra a 15.(f) ábrán látható ionizációs rátát bontja összetevőire a szerint, hogy milyen típusú részecske okozta az ionizációt. Külön látjuk az elektródákból kilépő, elektronok által indukált  $\delta$ -elektronok, az ionindukált  $\gamma$ -elektronok, az ionizációval járó ütközés során a gáztérben keletkezett elektronok (minden nem  $\delta$ - és nem  $\gamma$ -elektron) és az ionok által keltett ionizáció mintázatát. Az ionok járuléka elenyésző (0,3 %) és lényegében stacionárius, az elektródák környezetére koncentrálódik. Kulcsjelentőségű azonban, hogy **az elektródákról elektronok által kiváltott  $\delta$ -elektronok önmagukban az összes végbemenő ionizációnak csaknem a feléért (47,6 %) felelősek** – közvetlenül az elektródáról származó  $\delta$ -elektronok keltik az ionizáció ezen részét, hiszen a nyaláb sokszorozódása révén létrejövő elektronokat már gáztérben keletkezett elektronként tartjuk számon. **A második legjelentősebb csoport nem meglepő módon a gáztérben keletkezett elektronoké (37,9 %), és a  $\gamma$  elektronok is közvetlenül felelősek az ionizáció 14,3%-áért.** A 16. ábra paneljeiről jól kivehető, hogy az (I) típusú nyaláb (15.(f)) elsősorban a benne található  $\delta$ -, kisebb mértékben a  $\gamma$ -elektronok miatt ionizál intenzívebben az A modellben látható erősen ionizáló nyalábhoz (15.(e)) képest – a  $\delta$ -elektronok járuléka az (I) nyalábban összemérhető a gáztérben keletkezett elektronokéval –, továbbá látszik, hogy a csak **a B modellben megjelenő (II) típusú nyalábot gyakorlatilag csak elektródáról származó ( $\delta$ - és  $\gamma$ -) elektronok alkotják.**

A 17. ábrán az imént látott ionizációs ábrákat (16.(a, b)) tovább bontjuk a  $\delta$ - (17. ábra, felső sor) és  $\gamma$ -elektronok (alsó sor) a szerinti megkülönböztetésével, hogy azok melyik elektródán keletkeztek. Ezáltal megfigyelhetjük többek között a (II) típusú nyaláb összetételét. Vegyük



16. ábra. A felületen keletkezett  $\delta$ - (a) és  $\gamma$ -elektronok (b) és a gáztérben keletkezett elektronok (c) hozzájárulása a 15.(f) ábrán látható teljes elektronütközéses ionizációs rátához, illetve az ionok (d) okozta ionizáció tér- és időbeli eloszlással és a teljes ionizációhoz viszonyuló arányszámmal szemlélítve. Kísülési paraméterek: Ar gáz, SiO<sub>2</sub> elektródák;  $\gamma = 0,4$ ;  $p = 0,5$  Pa;  $V_0 = 1000$  V;  $f = 13,56$  MHz;  $L = 6,7$  cm.

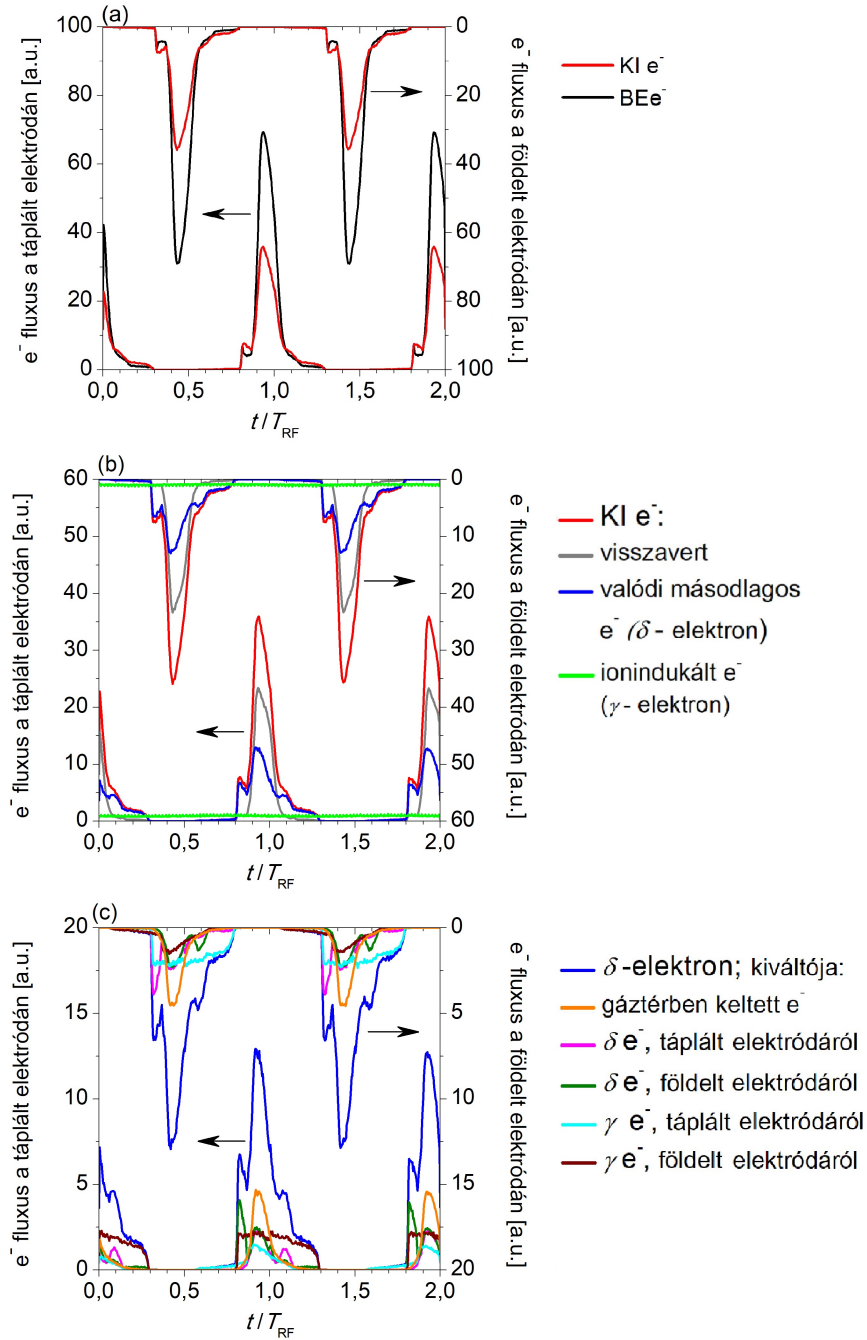
példának a táplált elektródáról (alul,  $x = 0$ ) a  $t/T_{RF} = 0,8$  időpontban induló nyalábot. Látunk egyrészt  $\delta$ -elektronokat, amelyek a táplált elektródán keletkeztek (17.(a) ábra), legnagyobb részben közvetlenül a nyaláb indulása előtt. Ezzel összemérhető, valamivel nagyobb járulékot adnak a szemközti, földelt elektródáról származó elektronindukált elektronok (17.(b) ábra), amelyek az erős (I) nyalábbal érkeztek és visszaverődtek. Végül, a szemközti elektródáról származó ionindukált elektronok (17.(d) ábra) járuléka is számottevő.



17. ábra. A táplált (a, c) és földelt (b, d) elektródán keletkezett  $\delta$ - (felső sor) és  $\gamma$ - (alsó sor) elektronok ionizációs rátájának tér- és időbeli eloszlása. Kisülési paraméterek: Ar gáz,  $\text{SiO}_2$  elektródák;  $\gamma = 0,4$ ;  $p = 0,5$  Pa;  $V_0 = 1000$  V;  $f = 13,56$  MHz;  $L = 6,7$  cm.

#### 4.4. Az ionizációs dinamika és az elektronkiváltás összetett mechanizmusa

Az előbbieken látott komplex ionizációs dinamika megértése végett érdemes részletesen megvizsgálni az elektródákról származó elektronok tulajdonságait. A 18. ábrán az elektródáknál kialakuló elektronfluxus változását vizsgálom két rádiófrekvenciás periódus alatt. Az alsó és a bal oldali tengelyek vonatkoznak a táplált, a felső és a jobb oldali tengelyek pedig a földelt elektródára. Az (a) ábrán együtt, egymással szemben ábrázolom a két elektródára érkező elsődleges és az ennek hatására kimenő másodlagos elektronfluxust, a (b) ábrán a kimenő elektronfluxus megoszlását a (rugalmas és rugalmatlan) visszaverődés és az elektron általi elektronkiváltás között, illetve az ionindukált elektronfluxust, a (c) ábrán pedig a keletkező  $\delta$ -elektronok kimenő fluxusát bontom fel a szerint, hogy a kilépő elektront milyen típusú elektron váltotta ki:  $\delta$ -,  $\gamma$ - vagy ionizációval járó ütközés során a gáztérben keletkezett elektron. A  $\delta$ - és  $\gamma$ - elektronokat



18. ábra. Az elsődleges és másodlagos elektronfluxus változása két RF ciklus alatt, önkényes egységekben. Alul a táplált, felül a földelt elektródánál lévő nyalábokat szemléltetjük. (a): A kimenő és beérkező elektronfluxus. (b): A kimenő nyaláb összetevői. (c): Az elektronindukált valódi másodlagos nyaláb felbontása az elektront keltő elsődleges (beeső) elektron típusa és keletkezési helye szerint. Kisülési paraméterek: Ar gáz,  $SiO_2$  elektródák;  $\gamma = 0,4$ ;  $p = 0,5$  Pa;  $V_0 = 1000$  V;  $f = 13,56$  MHz;  $L = 6,7$  cm.

elkülönítem aszerint is, hogy melyik elektródán keletkeztek.

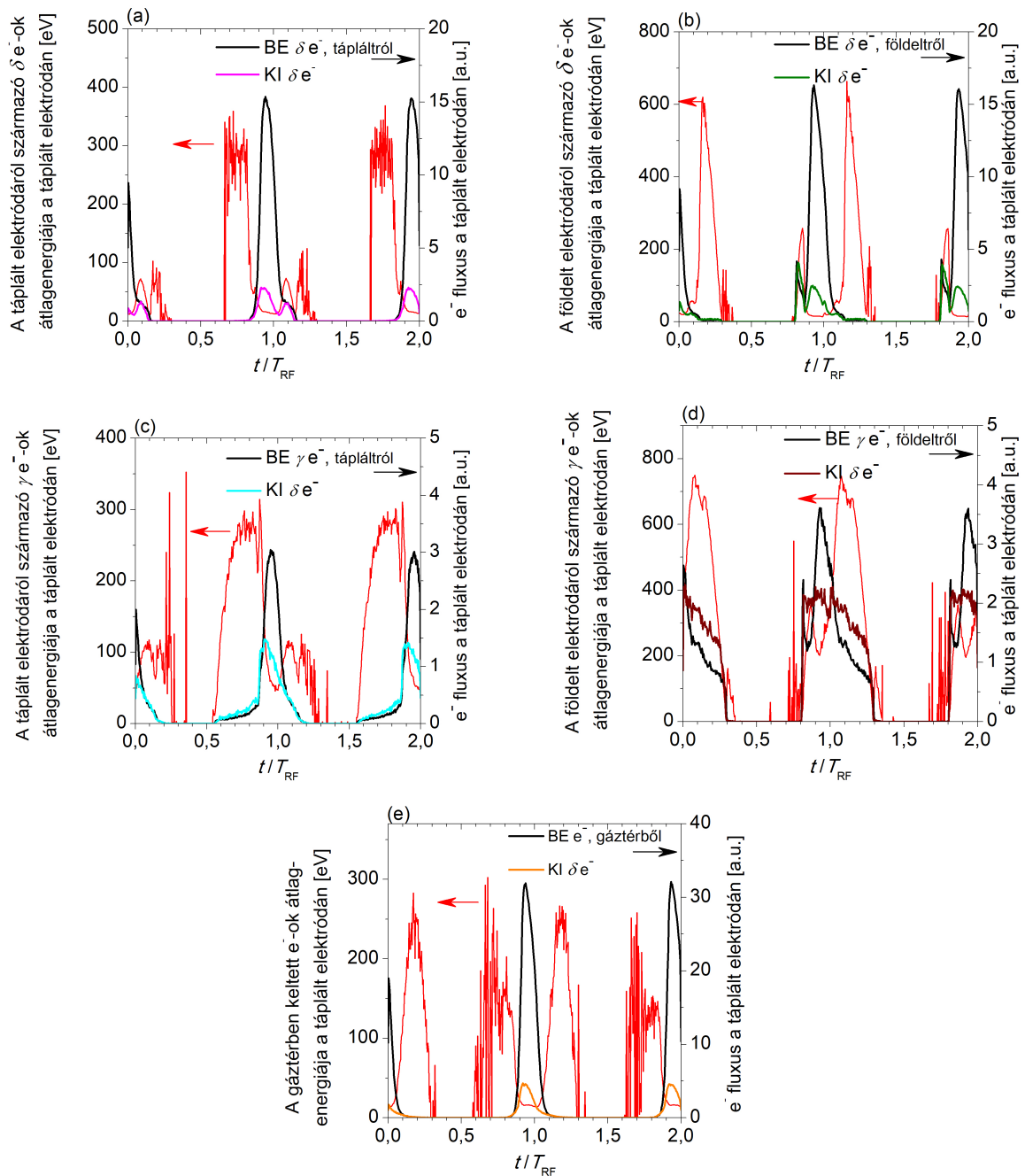
A 18.(a) ábrán látható, hogy az elektronfluxus az időtartománynak csak szűk részében jelentős, az RF gázkisülések működésénél elmondottakkal összhangban. Az elektronfluxus-impulzusok a két elektródán  $T_{RF}/2$  időkülönbséggel jelennek meg. **Az ionindukált elektronok stacionárius, alacsony fluxusjárulékot adnak** (lásd: 18.(b) ábra) – lévén, hogy az elektródákra stacionárius ionfluxus érkezik –, **a többi komponens viszont, mivel elektronok váltják ki, a tértöltött réteg visszahúzódtott állapotában válik jelentőssé.** Szembetűnő, hogy **a visszaverődő és valódi másodlagos elektronok jóval nagyobb számban indulnak ki az elektródákból, mint az ionindukáltak, azaz a  $\gamma$  elektronok kis hányadát képezik a kisülésben lévő töltéshordozóknak.**

Az elektródákon végbemenő elektronkiváltási folyamatok igen összetettek. A jelenség részletesebb megértésének érdekében felveszem a 19. ábrát, amely a 18.(c) ábrával azonos csoportosítás szerint mutatja az adott típusú beeső elektronok átlagenergiájának és fluxusának, illetve az általuk kiváltott másodlagoselektron-fluxusnak a változását két rádiófrekvenciás periódus alatt, a táplált elektródán. Vizsgáljuk meg először a táplált elektródáról a  $t/T_{RF} = 0,8 - 1,3$  időintervallumban kilépő valódi másodlagos elektronokat (lásd: a 18.(c) ábra alsó vízszintes tengelye és a 19.(a–e) ábrák). Fél periódussal később ugyanez a mechanizmus játszódik le a szemközti elektródánál. Ebben az intervallumban a határréteg teljes kiterjedéséhez képest fokozatosan visszahúzódik,  $t/T_{RF} = 1$ -nél gyakorlatilag eltűnik, majd újból kiterjed.

Mivel a határréteg kiterjedt állapotához képest ez idő alatt alacsonyabb a határréteg-potenciál, a szemközti (földelt) elektródáról jelentős számú nagy energiájú  $\gamma$ -elektron képes elérni a táplált elektródát és kiváltani onnan másodlagos elektronokat (lásd: 18.(c) és 19.(d) ábrák). Korábban láttuk (16. ábra), hogy **a  $\gamma$ -elektronok az ionizációban kevésbé hangsúlyosak, számuk jóval kisebb, mint a  $\delta$ - és gáztérben keletkezett elektronoké** (lásd: 18.(b) ábra), **ellenben az ionizációban kulcsszerepet játszó  $\delta$ -elektronok kiváltásában meghatározó szerepük van** (lásd: 18.(c) és 19.(d) ábrák).

Az ionizációs mintázaton (lásd: 16. ábra) jól kivehető, hogy **a  $\delta$ -elektronok két jól meghatározott esetben képesek hatékonyan gyorsulni:** egyrészt a fentebbi vizsgált intervallum ( $t/T_{RF} = 0,8 - 1,3$ ) elején, **amikor részlegesen van összehúzódtva a határréteg** – ilyenkor az úgynevezett maradó potenciál erősen gyorsítja az elektródából kilépő elektronokat. Így jön létre a (II) típusú nyaláb. A másik gyorsítási fázis az intervallum végén, a **határréteg újbóli kiterjedésekor** jelenik meg, ez az (I)-es típusú nyaláb.

A gáztérben keletkezett elektronok alacsony energiájuk révén csak a határréteg teljes vissza-



19. ábra. A különböző típusú beeső elektronok átlagenergiájának és fluxusának, illetve az általuk kiváltott valódi másodlagoselektron-fluxusnak a változása két rádiófrekvenciás periódus alatt, a táplált elektródán. Az energia a bal oldali, a fluxus a jobb oldali y tengelyen van feltüntetve. Kiszülési paraméterek: Ar gáz, SiO<sub>2</sub> elektródák;  $\gamma = 0,4$ ;  $p = 0,5$  Pa;  $V_0 = 1000$  V;  $f = 13,56$  MHz;  $L = 6,7$  cm.



húzódásakor, rövid ideig érik el az elektródát (lásd: 19.(e) ábra,  $t/T_{RF} = 1$  körül). Jelentős részük visszaverődik, kisebb részük pedig kivált valódi másodlagos elektronokat (lásd még: 18.(b,c) ábrák), amelyek jelentős komponensét képezik az elektródákból kilépő teljes valódi másodlagoselektron-fluxusnak. Azonban az így keletkező  $\delta$ -elektronok a minimális határréteg-potenciál miatt nem tudnak eltávolodni az elektróda környezetéből, és ott összegyűlve, a határréteg legközelebbi kiterjedésekor együtt gyorsulnak. Ez azt eredményezi, hogy az (I) típusú nyaláb jóval több elektront tartalmaz a (II) típusúnál, hiszen térvisszahúzódás, és nem maximális kiterjedés előzi meg a felgyorsulását; végeredményben hosszabb idő alatt, több beérkező elektronsoport hozza létre az (I)-es nyalábot. Legfőképpen ez az oka az (I)-es nyaláb (II)-eshez képesti erősebb ionizációjának.

Az egyik elektródán keletkező és **felgyorsuló  $\delta$ -elektronoknak** a szemközti elektródát megközelítve kétféle sorsa lehet: **vagy visszaverődnek** a kiterjedt határrétegről, **vagy** elérik az elektródát, ahonnan szintén visszaverődhetnek (rugalmasan vagy rugalmatlanul), illetve **kiválthatnak újabb  $\delta$ -elektronokat**. A visszaverődés elsősorban a (II)-es típusú nyalábra jellemző, a szemközti elektródát pedig elsősorban az (I)-es típusú nyaláb éri el (lásd: 16. ábra).

## 5. Következtetések

### 5.1. Összefoglalás

A dolgozatban ismertetett munkám célja az alacsony nyomású rádiófrekvenciás gázkisülésekben fellépő elektron-elektroda felületi folyamatok hatásának vizsgálata volt. Erre a célra a gázkisülések modellezésére jól bevált "Particle-in-Cell/Monte Carlo Collisions" numerikus eljárást használtam, nagy hangsúlyt fektetve az elektron-elektroda felületi folyamatok realisztikus leírására. A modellépítésnél a különböző felületek elektronokkal történő bombázása során keletkező másodlagos elektronnyaláb fluxusának kísérletileg tapasztalt energiafüggő voltából indultam ki: a mérési eredményeken alapuló, Vaughan [18, 19] és Sydorenko [15] által kidolgozott félempirikus modellt implementáltam a Monte Carlo módszerekre jellemző valószínűségi szemlélettel. A félempirikus modell paramétereit részben irodalmi adatokból, részben próbaszámítások és fizikai megfontolások alapján állítottam be úgy, hogy a modell minél jobban leírja a  $\text{SiO}_2$  elektródák viselkedését. Ezen valóság-hű modell szerint az elektródának ütköző elektron – energiájának és beesési szögének függvényében – visszaverődhet rugalmasan vagy rugalmatlanul, vagy kiválthat valódi másodlagos elektronokat.



Az ezzel a modellel (B) kapott eredményeket összehasonlítottam egy egyszerűbb, széles körben alkalmazott modell (A) használatával számított eredményekkel. Ez utóbbi modell csak a rugalmas visszaverődést veszi figyelembe mint lehetséges elektron-elektroda felszíni folyamatot, azt is csupán egy konstans 0,2 értékű együtthatóval, amely nem érzékeny a kisülésben lejátszódó dinamikus folyamatokra és az elektroda anyagára. A két modell használatával jelentősen eltérő ionizációs dinamikát és energiabetáplálási mechanizmust figyelhettünk meg. A realiztikus modell megmutatta, hogy az elektronok által indukált másodlagos elektronoknak kulcsszerepük van az ionizációs dinamikában, és nagy mértékben befolyásolják a plazmajellemzőket.

A különböző típusú ( $\delta$ -,  $\gamma$ - és gáztérben keletkezett) elektronok ionizációs mintázatának és az elektródákon jelentkező – bemenő és kimenő – fluxusának vizsgálata révén megfigyelhettük, hogy az egyik elektródán keletkező, ionok által keltett másodlagos ( $\gamma$ ) elektronok a közepső, tértöltött réteg felé hatékonyan gyorsulva nagy számban, huzamos ideig képesek elérni a szemközti elektródát a határréteg részlegesen és teljesen visszahúzódtott állapotában, amikor a határréteg-potenciál nem elegendően nagy a távoltagekhoz. Ezek az elektronok jelentős mennyiségű  $\delta$  elektron kiváltását eredményezik, amelyeket – keletkezési időponttól függően – a maradó vagy a határréteg kiterjedésekor megnövekvő határréteg-potenciál erőte-re a kvázisemleges régió felé gyorsít. Ezek a  $\delta$ -elektronok szintén keresztülrepülnek a cellán, miközben intenzív ionizációt keltenek. Az elektródát megközelítve, amennyiben "felülkerekednek" az ottani határréteg-potenciálon, újabb  $\delta$  elektronokat kelthetnek. Összefoglalva, a  $\delta$ - és  $\gamma$ -elektronok együtt egy komplex ionizációs és elektronkiváltási dinamikát hoznak létre, amely során a nagy energiájú elektronok többszöri visszaverődéssel többször keresztülrepülhetnek a kisülési téren, és a két elektródán fél periódusnyi időeltolódással rádiófrekvenciás periódusonként két-két nagy energiájú elektronnyaláb alakul ki, amelyek a határréteg kiterjedésének és részleges visszahúzódtásának fázisában rendre intenzív ionizációt keltenek. Míg az elektronindukált valódi másodlagos ( $\delta$ -) elektronok közvetlenül felelősek a kisülésben végbemenő ionizáció nagy hányadáért, az ionindukált ( $\gamma$ -) elektronok inkább a  $\delta$ -elektronok kiváltásában játszanak

kulcsszerepet<sup>3</sup>.

Az a tény, hogy minden esetben nagyobb sűrűséget kaptunk a B modellel az A-hoz képest, megfelel a kísérleti adatoknak: a mérésekre általában jellemző, hogy nagyobb plazmasűrűséget tapasztalunk, mint a szimulációkban. Ennek egyik magyarázata épp a felszíni folyamatoknak a szimulációs gyakorlatban elterjedt elnagyolt közelítése. A fenti vizsgálatok megmutatták, hogy az alacsony nyomáson, nagy feszültségamplitúdó mellett működtetett RF gázkisülések modellezésekor, amennyiben az ionok általi elektronkiváltás jelentős, fontos az elektron-elektroda kölcsönhatás realiztikus leírása.

## 5.2. Az eredmények hibája

A munkám során használt PIC/MCC szimulációs módszerrel a vizsgált gázkisülések kvantitatív jellemzőire kapunk eredményeket. Az eredmények pontossága egyrészt az alkalmazott modellek bemenő paraméterein, másrészt a PIC/MCC módszer alapvető közelítésein, végül pedig a numerikus módszerek hibáján múlik. A bemenő paramétereket illetően az ütközési hatáskeresztmetszetek pontossága és az elektron-elektroda kölcsönhatásra bevezetett realiztikus modell 10 paramétere a kritikus tényező. Utóbbiaknak egyes esetekben 20 % körüli hibája is lehet. Az elektron-elektroda kölcsönhatás modelljének az egyes paraméterek bizonytalanságából adódó eredő hibáját a paraméterekre külön-külön kiterjedő érzékenyséگانalízissel lehetne megbecsülni, ez azonban túlmutat jelen munkám keretein. A PIC/MCC módszer hibája a modell hibája mellett nem számottevő. Megjegyzendő, hogy a legtöbbet vizsgált esetben ( $\gamma = 0, 4, 1000$  V) a részecskék súlytényezőjét  $6,3 \cdot 10^5$ -re állítottam, a potenciál számításánál  $67 \mu\text{m}$  volt két rácspont távolsága, az időlépés pedig a rádiófrekvenciás periódus 16000-ed része,  $4,6$  ps volt. Ezek a beállítások a vizsgált kisülés leírására bőven a módszer stabilitási kritériumain belül voltak. A numerikus hibáknál a sok véletlen szám generálása kritikus tényező, illetve a mozgásegyenletek időlépésenkénti numerikus integrálása. Összességében mintegy 30 %-ra becsülhető a munkámban közölt numerikus eredmények bizonytalansága, elsősorban a modell

---

<sup>3</sup>Megjegyzés: végeztem szimulációkat olyan beállításokkal is, amikor az elektron-elektroda kölcsönhatást a  $\text{SiO}_2$  felület realiztikus modelljével vettem figyelembe, a  $\gamma$  ionindukált elektronkiváltási együtthatót pedig  $0,4$ -nél kisebb értékre (akár zérusra) állítottam be. A  $\gamma$  elektronok számának csökkenésével a fentiekben látott összetett mechanizmus – a (II)-es típusú nyalábbal együtt – egyre kevésbé volt megfigyelhető, zérus és  $0,1$ -es  $\gamma$  értékekre teljes mértékben eltűnt, csupán a sűrűség volt mindig nagyobb az A-modellben tapasztaltnál a  $\delta$  elektronok jelenléte miatt.  $\gamma = 0$  esetre a B modellel kapott sűrűség 30 %-kal volt magasabb az A modell által számolt értéknél.

hibájából adódóan. Mint láttuk, a két modell eredményei közti eltérések esetenként az 5-szörös faktort is elérik, a tendencia pedig még azokban az esetekben is egyértelmű, amikor csak 10 % nagyságrendű eltérést tapasztalunk. A rendszer kvalitatív viselkedését, a nyalábok keletkezését szintén megbízhatóan írja le a szimulációs módszer.

### 5.3. Kitekintés

Az új modell  $\text{SiO}_2$  elektródákra történő alkalmazása tehát rávilágított az elektronindukált másodlagos elektronok jelentős szerepére bizonyos kisülési feltételek mellett, azonban az is látszik, hogy számos nyitott kérdés maradt. Meg kell említeni, hogy az új modell több bemeneti paraméterére nem álltak rendelkezésre pontos adatok. A paraméterek pontosabb beállításához érdemes lenne laboratóriumi méréseket végezni. Ezenkívül hasznos és érdekes lenne kísérletileg tanulmányozni a dolgozatban szimulált gázkisüléseket, és összevetni a mérési eredményeket a számolási eredményekkel. A tapasztalatok egyelőre azt mutatják, hogy kísérletileg nem lehet elkülöníteni a két különböző típusú ionizáló elektronnyalábot (I, II), mert az azok által keltett gerjesztésekből származó optikai emisszió térben nem válik szét kellőképpen. A megfelelő kísérleti berendezés összeállítása a jövő feladata. Ezeken túlmenően a kisülésre az elektronok általi másodlagoselektron-kiváltáson keresztül igen jelentős hatással bíró ionok általi elektronkiváltás realiztikus modellezése szintén várat magára. Felmerülhet továbbá ugyanennek a modellnek másfajta kisülésekben való alkalmazása, például másféle gázban, más anyagú elektródákkal. Szélesebb nyomástartományban is érdemes megvizsgálni a másodlagos elektronok hatását a kisülésekre<sup>4</sup>.

## 6. Köszönetnyilvánítás

Szeretném megemlíteni azon személyek nevét, akik nélkül ez a dolgozat ilyen formában nem készülhetett volna el. Elsőként témavezetőmnek, Derzsi Arankának tartozom köszönettel a rengeteg útmutatásért, ötletért, végtelen türelméért és segítőkészségéért; azért, hogy mindig

---

<sup>4</sup>Részletes eredmények ugyan még nem állnak rendelkezésemre, azonban kezdeti vizsgálataim azt mutatják, hogy a hatékony – akár  $\gamma$ , akár  $\delta$  – elektronkiváltású  $\text{SiO}_2$  elektródák közötti kisüléseket nagy nyomáson és nagy feszültségamplitúdón az intenzív elektronsokszorozódás miatt nem lehet stabilizálni, illetve az is látszik, hogy a nyomás értéke kritikus a tárgyalt speciális  $\gamma$ - $\delta$  ionizációs és elektronkiváltási dinamika szempontjából: a nyomás növelésével a határrétegben megjelenő ionizáció miatt a kisülés  $\gamma$ -módban kezd működni, míg alacsonyabb nyomáson a csökkenő sűrűség miatt ritkul az ionizációk gyakorisága.

lehetett tőle kérdezni, és folyamatosan figyelemmel kísérte a munkámat. Köszönet illeti Donkó Zoltánt, akitől először tanultam plazmafizikát, aki lehetőséget adott számomra csatlakozni az MTA Wigner FK SZFI Elektromos Gázkisülések Kutatócsoportjához, és javaslataival nagyban hozzájárult a dolgozat minőségéhez. Köszönöm a kutatócsoport vezetőjének, Kutasi Kingának is a kutatómunkában való részvétel lehetőségét és a dolgozattal kapcsolatos meglátásait. Hálás vagyok Julian Schulzenak (Ruhr-Universität Bochum) a dolgozatom témájához adott inspirációért. Köszönöm továbbá Hartmann Péternek a *plasma* számítógépklaszter működtetését, amelyen a szimulációkat futtattam.

A kutatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) támogatta a 119357 számú projekt keretében.

## 7. Függelék

Az ismertett munka tudományos együttműködés keretében zajlott. Személyes feladatom egy már létező PIC/MCC kód kiegészítése volt az elektron-elektroda kölcsönhatás Vaughan–Sydorenko féle modelljének implementációjával (lásd a 12. számú folyamatábrát), illetve a modell paramétereinek beállítása  $\text{SiO}_2$  felületre, és szimulációk futtatása az így kiegészített és a korábbi kóddal, valamint részvétel az eredmények feldolgozásában és analízisében.

A kutatási eredmények a következő nemzetközi konferenciákon jelentek meg:

- Poszter formájában:
  - *"International School on Low Temperature Plasma Physics: Basics and Applications and its Master Class: New approaches for plasma/surface interaction studies"*, 2017. október 7-14., Bad Honnef, Németország  
Horváth B, Daksha M, Korolov I, Donkó Z, Derzsi A, Schulze J: *Improved model for electron-surface interactions in PIC/MCC simulations of capacitively coupled plasmas*
  - *6th Workshop on Radio Frequency Discharges*, 2017. május 21-23., Presqu'île de Giens, Franciaország  
Horváth B, Korolov I, Donkó Z, Schulze J, Derzsi A: *Improved model for electron-surface interactions in PIC/MCC simulations of capacitively coupled plasmas*

- Szóbeli előadás keretében:
  - *International Conference of Physics Students (ICPS)*, 2017. augusztus 7-14., Torinó, Olaszország  
Horváth B: *Improved model for electron-surface interactions in PIC/MCC simulations of capacitively coupled plasmas*
  - *"Workshop on Linking Theory and Experiment at the 70th Annual Gaseous Electronics Conference"*, 2017. november 6-10., Pittsburgh, Pennsylvania, Egyesült Államok – meghívott előadás  
Derzsi A, Horváth B, Daksha M, Berger B, Wilczek S, Trieschmann J, Mussenbrock T, Awakowicz P, Donkó Z, Schulze J : *The effects of elementary surface processes on the plasma parameters in capacitively coupled radiofrequency discharges*

A munka eredményeit leíró cikket a *Plasma Sources Science and Technology* IOP-folyóirat közölte:

- Horváth B, Daksha M, Korolov I, Derzsi A, Schulze J: *The role of electron induced secondary electron emission from SiO<sub>2</sub> surfaces in capacitively coupled radio frequency plasmas operated at low pressures* [23]

## Hivatkozások

- [1] Lieberman M A and Lichtenberg A J: Principles of Plasma Discharges and Materials Processing (Wiley-Interscience, New York, 2005)
- [2] Donkó Z: Alacsony nyomású gázkisülések és erősen csatolt plazmák számítógépes modellezése, MTA Doktori értekezés (MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet – Budapest, 2004) 9. o.
- [3] Schulze J, Derzsi A, Dittmann K, Hemke T, Meichsne and Donkó Z 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 275001
- [4] Kollath R: Encyclopedia of Physics Vol. XXI, ed. Flügge S (Berlin, Springer, 1956), 264. o.
- [5] Korolov I, Derzsi A, Donkó Z, Schüngel E, Schulze J 2016 *Plasma Sources Sci. Technol.* **25** 015024
- [6] Birdsall C K 1991 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **19** 65
- [7] Donkó Z 2011 *Plasma Sources Sci. Technol.* **20** 24001
- [8] Donkó Z, Schulze J, Czarnetzki U, Derzsi A, Hartmann P, Korolov I, Schuengel E 2012 *Plasma Phys. Control. Fusion* **54** 124003
- [9] Verboncoeur J P 2005 *Plasma Phys. Control. Fusion* **47** A231
- [10] Matyash K, Schneider R, Taccogna F, Hatayama A, Longo S, Capitelli M, Tskhakaya D and Bronold F X 2007 *Contrib. Plasma Phys.* **47** 595
- [11] Tskhakaya D, Matyash K, Schneider R and Taccogna F 2007 *Contrib. Plasma Phys.* **47** 563
- [12] Phelps A V [http://jilawww.colorado.edu/~avp/collision\\_data/](http://jilawww.colorado.edu/~avp/collision_data/) unpublished
- [13] Phelps A V 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 747
- [14] Phelps A V 1991 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **20** 557
- [15] D. Sydorenko: Particle-in-Cell Simulations of Electron Dynamics in Low Pressure Discharges with Magnetic Fields, PhD thesis (University of Saskatchewan, Saskatoon, Canada, 2006)

- [16] Seiler H 1983 *J. Appl. Phys.* **54** R1–R18
- [17] Gopinath V P, Verboncoeur J P, Birdsall C K 1998 *Phys. Plasmas* **5** 1535
- [18] Vaughan J R M 1989 *IEEE Transactions on Electron Devices* **36** 1963
- [19] Vaughan J R M 1993 *IEEE Transactions on Electron Devices* **40** 830
- [20] Bronshtein I M, Fraiman B S: Secondary Electron Emission (Moscow, Russia: Atomizdat, 1969)
- [21] Barral S, Makowski K, Peradzynsky Z 2003 *Phys. Plasmas* **10** 4137
- [22] Booth J P, Curley G, Maric D, Chabert P 2010 *Plasma Sources Sci. Technol.* **19** 015005
- [23] Horváth B, Daksha M, Korolov I, Derzsi A, Schulze J 2017 *Plasma Sources Sci. Technol.* **26** 124001 (URL: <https://doi.org/10.1088/1361-6595/aa963d>)