

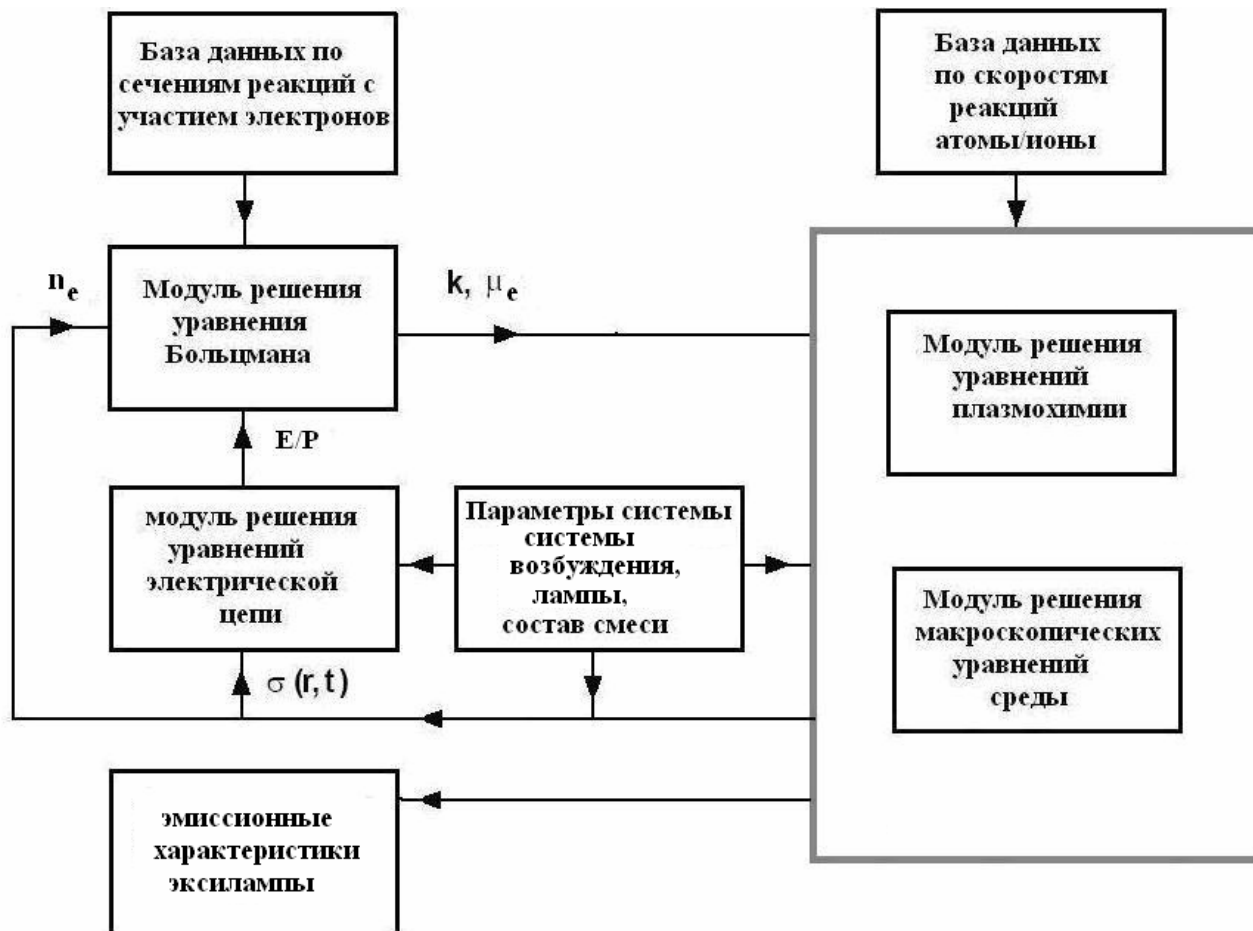
Моделирование активной среды ХеСІ-эксилламп с учетом процесса регенерации доноров галогена

- С.С.Ануфрик, А.П.Володенков; К.Ф.Зноско,
- *Гродненский государственный университет
им.Я.Купалы, ул.Ожешко,22,*
 - *230023 Гродно, Беларусь*
 - *a.volodenkov@grsu.by*

Цель работы

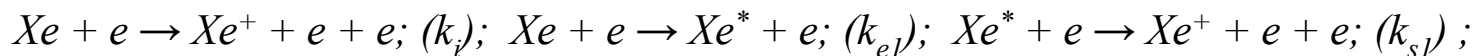
- 1. Разработка упрощенной методики моделирования ХеСl-эксилламп, которая учитывает процесс регенерации доноров галогена (НСl, Сl₂)**
- 2. Определение характерных времен восстановления смеси в зависимости от состава и давления**

1.1 Разработка упрощенной методики моделирования лазера



1.2.1 Основные плазмохимические реакции

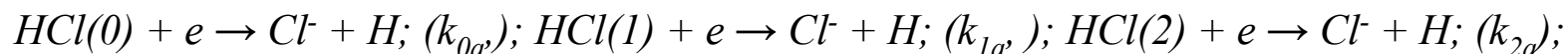
Ионизация и возбуждение



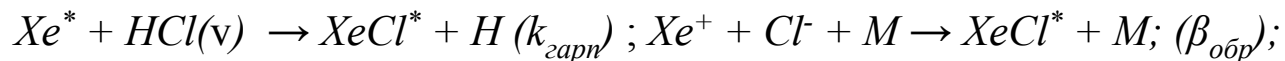
Колебательное возбуждение HCl



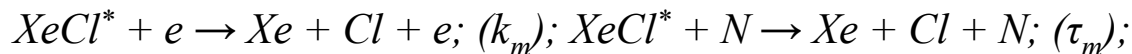
Диссоциативное прилипание



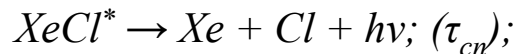
Образование ХеСл-молекул



Тушение ХеСл-молекул



Излучение ХеСл-молекул



1.2.2 Каналы образования ХеСl-молекул

- **Гарпунный механизм**
- $He^* + HCl(v) \rightarrow HeCl^* + H$ ($k_{гарп}$)
- **Ион-ионная рекомбинация**
- $He^+ + Cl^- + M \rightarrow HeCl^* + M$; ($\beta_{обр}$)

1.2.3 Процессы регенерации молекул HCl

- **Каналы образования HCl**

- 1. $\text{H} + \text{Cl} + \text{Ne} = \text{HCl} + \text{Ne}$ ($k_{r1} = 1,1 \cdot 10^{-39} \text{ см}^6/\text{с}$)
- 2. $\text{H} + \text{Cl}_2 = \text{HCl} + \text{Cl}$ ($k_{r2} = 1,45 \cdot 10^{-10} \exp(-590/T) \text{ см}^3/\text{с}$)
- 3. $\text{H}_2 + \text{Cl} = \text{HCl} + \text{H}$ ($k_{r3} = 3,5 \cdot 10^{-11} \exp(-2290/T) \text{ см}^3/\text{с}$)

- **Каналы образования Cl_2 и H_2**

- $2\text{Cl} + \text{Ne} = \text{Cl}_2 + \text{Ne}$ ($k_{\text{Cl}_2} = 5 \cdot 10^{-33} \text{ см}^6/\text{с}$)
- $2\text{H} + \text{Ne} = \text{H}_2 + \text{Ne}$ ($k_{\text{H}_2} = 3 \cdot 10^{-33} \text{ см}^6/\text{с}$)

1.3 Модуль решения уравнения Больцмана для функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ).

- Этот модуль по составу смеси, по величине степени ионизации и заданному E/N (E – напряженность электрического поля в межэлектродном промежутке; N – полная концентрация частиц) позволяет найти ФРЭЭ и соответственно определить скорости плазмохимических реакций с участием электронов, а также определить их подвижность.
- Скоростные коэффициенты реакций с участием электронов получаются путем усреднения по ФРЭЭ выражений типа

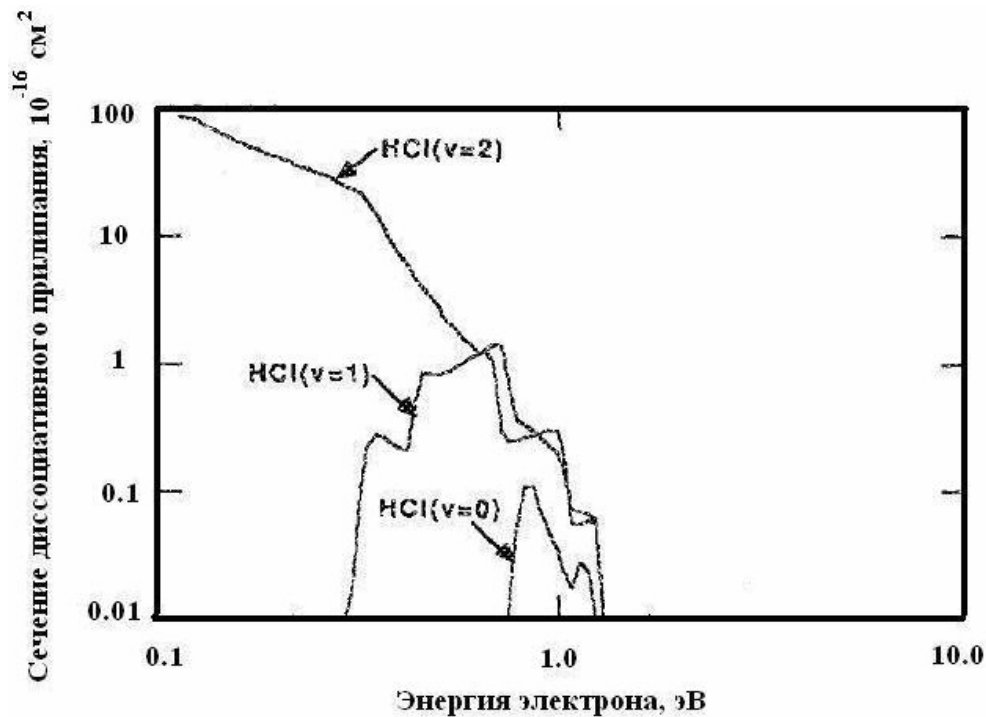
$$k = \left\langle \sigma(\varepsilon) \cdot \sqrt{2\varepsilon / m} \right\rangle$$

- Для решения использована готовая программа **Bolsig+** [1], которая
- автоматически вычисляет скоростные коэффициенты.
- 1. G. J. M. Hagelaar, L. C. Pitchford . *Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models* // Plasma Sources Sci. Technol.- 2005.- Vol.14, №1.- p.1-12.

1.4 Базы данных по сечениям и скоростным коэффициентам реакций.

- Программа **Bolsig+**
<http://www.codiciel.fr/plateforme/plasma/bolsig/bolsig.php>
- имеет отдельный файл с базой данных по сечениям реакций с участием электронов в зависимости от их энергии (**Siglo.sec**). Этот файл содержит сечения для **15** газовых компонент: N₂, O₂, H₂, Cl₂, F₂, HCl, CF₄, SiH₄, CH₄, SF₆, He, Ne, Ar, Kr, Xe.
- Так как файл написан в текстовом формате, то это позволяет пользователю легко самостоятельно пополнять базу данных по сечениям дополнительных компонент.
- Например, мы добавили данные по сечению реакции диссоциативного прилипания электронов к HCl(2), на основе анализа литературного обзора.

1.4.1 Пополнение базы данных.

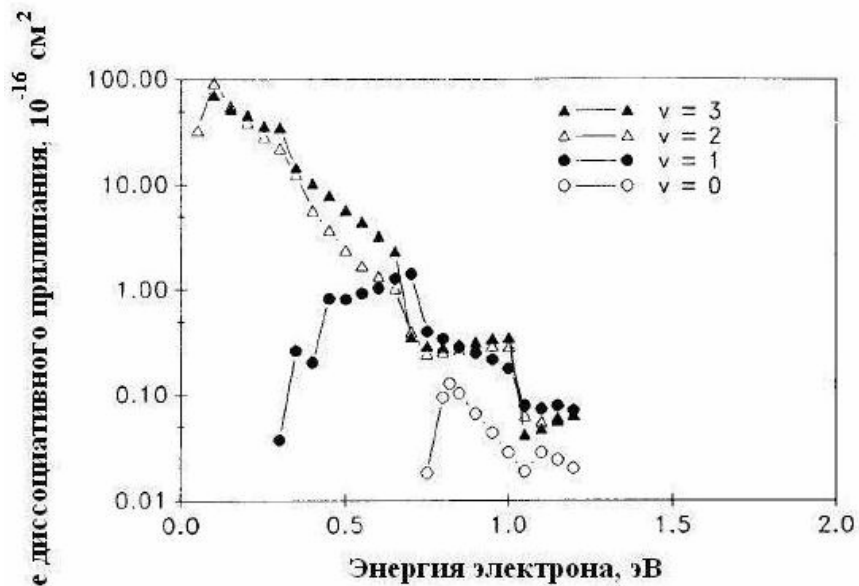


Timothy J. Sommerer and Mark J. Kushner

Monte Carlo-fluid model of chlorine atom production in Cl_2 , HCl, and CCl_4 radio-frequency discharges for plasma etching

J. Vac. Sci. Technol. B 10(5), Sep/Oct 1992

1.4.1 Пополнение базы данных.



W. L. Morgan

A Critical Evaluation of Low-Energy Electron Impact
Cross Sections for Plasma Processing Modeling.

I: Cl_2 , F_2 , and HCl

Plasma Chemistry and Plasma Processing, Vol. 12, No. 4, 1992

2. Исследование процесса регенерации молекул HCl

$$\frac{d[HCl]}{dt} = kr1 \cdot [Ne] \cdot [H] \cdot [Cl] + kr2 \cdot [H] \cdot [Cl_2] + kr3 \cdot [H_2] \cdot [Cl]$$

$$\frac{d[Cl_2]}{dt} = kCl_2 \cdot [Ne] \cdot [Cl] \cdot [Cl] - kr2 \cdot [H] \cdot [Cl_2]$$

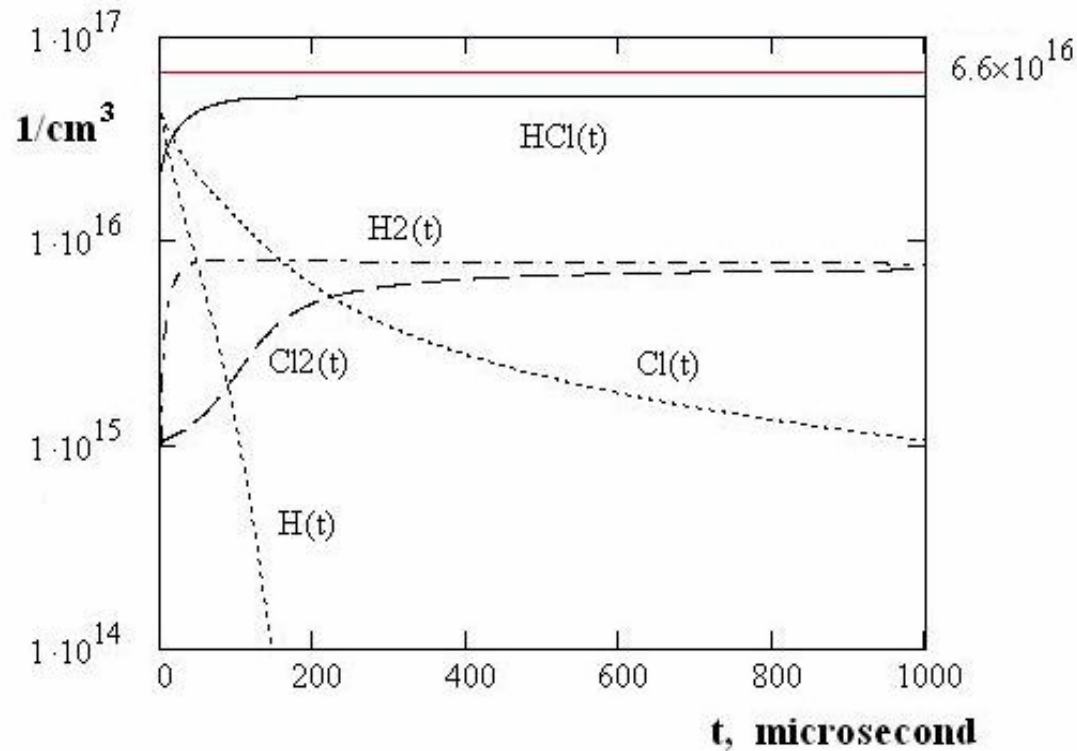
$$\frac{d[H_2]}{dt} = kH_2 \cdot [Ne] \cdot [H] \cdot [H] - kr3 \cdot [H_2] \cdot [Cl]$$

$$\frac{d[Cl]}{dt} = -kr1[Ne] \cdot [H] \cdot [Cl] + kr2 \cdot [H] \cdot [Cl_2] - kr3[H_2] \cdot [Cl] - 2kCl_2[Ne] \cdot [Cl] \cdot [Cl]$$

$$\frac{d[H]}{dt} = -kr1[Ne] \cdot [H] \cdot [Cl] - kr2[H] \cdot [Cl_2] + kr3[H_2] \cdot [Cl] - 2kH_2[Ne] \cdot [H] \cdot [H]$$

- В начальный момент времени 50 % HCl молекул диссоциировано

2.1 Расчетные зависимости для лазерной смеси (HCl:Xe:Ne=2:30:3008 (общее давление 4 атм))

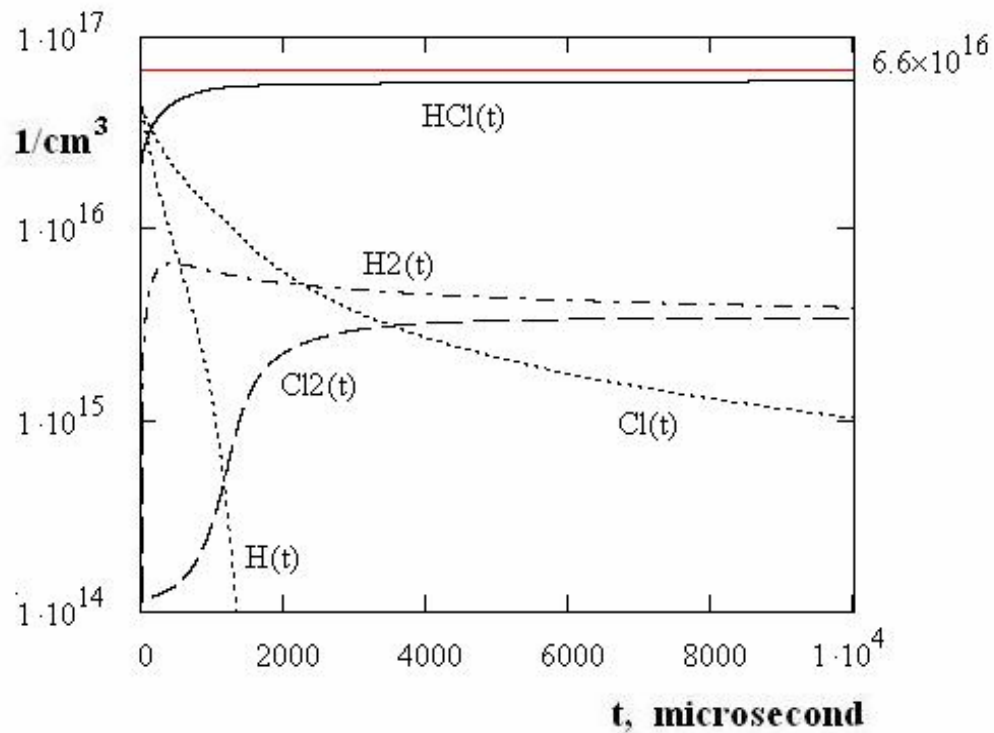


- Нет выхода HCl на начальную концентрацию

2.1 Расчетные зависимости для лазерной смеси (HCl:He:Ne=2:30:3008 (общее давление 4 атм) с добавкой водорода

- **Добавлено 2 Торр водорода**
- **$\text{H}_2:\text{HCl}:\text{He}:\text{Ne}=2:2:30:3028$ (общее давление 4 атм)**
- **Происходит выход HCl на начальную концентрацию**
- **Характерное время регенерации 100 мкс**

2.1 Расчетные зависимости для ламповой смеси (HCl:Xe:Ne=2:30:308 (общее давление 320 Торр))



- **Характерное время регенерации 1000 мкс**

3 Выводы

- **1. Получается соответствие с экспериментальными данными.**
- **Добавка водорода действительно улучшает генерационные характеристики лазеров**
- **2. Можно оценить максимально возможную частоту работы эксилампы ил лазера в зависимости от давления и состава смеси**