



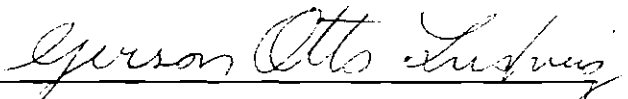
ACADEMIA DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO DE PESQUISAS ESPACIAIS

AUTORIZAÇÃO PARA PUBLICAÇÃO
AUTHORIZATION FOR PUBLICATION

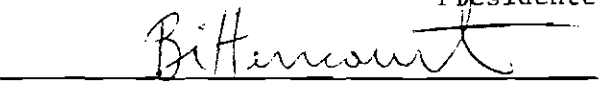
PALAVRAS CHAVES/KEY WORDS		AUTORIZADA POR/AUTHORIZED BY	
Simulação por partículas Descargas elétricas assimétricas Plasmas limitados		Ralf Gielow Coordenador Pós-Graduação	
AUTORES AUTHORS	AUTOR RESPONSÁVEL RESPONSIBLE AUTHOR	DISTRIBUIÇÃO/DISTRIBUTION	REVISADA POR / REVISED BY
	Maria Virgínia Alves	☐ INTERNA / INTERNAL ☒ EXTERNA / EXTERNAL ☐ RESTRITA / RESTRICTED	José Augusto Bittencourt
CDU/UDC		DATA / DATE	
533.9		Novembro/1990	
PUBLICAÇÃO Nº PUBLICATION NO		ORIGEM ORIGIN	
INPE-5198-TDL/427		PQUI/LAP	
TÍTULO/TITLE		PROJETO PROJECT	
ESTUDO DE DESCARGAS ELÉTRICAS ASSIMÉTRICAS USANDO SIMULAÇÃO POR PARTÍCULAS		CEA	
AUTORES/AUTHORSHIP		Nº DE PAG. NO OF PAGES	ULTIMA PAG. LAST PAGE
MARIA VIRGÍNIA ALVES		135	108
		VERSÃO VERSION	Nº DE MAPAS NO OF MAPS
RESUMO - NOTAS / ABSTRACT - NOTES			
Descargas elétricas assimétricas vêm sendo amplamente utilizadas dentro da indústria de microeletrônica. A assimetria nas áreas dos eletrodos determina a magnitude da voltagem de corrente contínua, V_a, induzida próxima ao eletrodo ao qual se aplica o potencial, que por sua vez determina a energia de bombardeamento dos íons, um parâmetro crítico para processamento por plasma. Dois códigos computacionais, usando simulação por partículas, chamamos PDC1 e PDS1 foram desenvolvidos. Estes códigos são eletrostáticos, unidimensionais (radial) e permitem simular um plasma limitado por dois cilindros infinitos ou duas esferas concêntricas, que podem ser conectados a um circuito RLC externo. Ambos permitem a construção de um modelo simples que leva em conta a desigualdade das áreas. A fim de simular descargas elétricas, processos colisionais entre elétrons e partículas neutras entre íons e partículas neutras foram introduzidos, usando um método de Monte-Carlo. Estes códigos foram utilizados para estudar a relação entre a razão entre as voltagens de corrente contínua através das bainhas, V_a/V_b, e a razão entre as áreas dos eletrodos, A_b/A_a. Os resultados obtidos estão de acordo com resultados experimentais, e também com aqueles obtidos usando um modelo analítico desenvolvido, que inclui a hipótese de ionização localizada nas regiões próximas aos eletrodos, observada na maioria das simulações.			
OBSERVAÇÕES/REMARKS			
Tese de Doutorado em Ciência Espacial / Geofísica Espacial, aprovada em 04/09/90.			

Aprovada pela Banca Examinadora
em cumprimento a requisito exigido
para a obtenção do Título de Doutor
em Geofísica Espacial

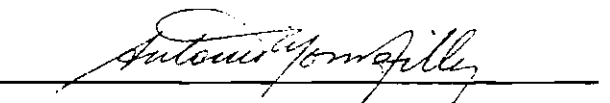
Dr. Gerson Otto Ludwig


Presidente

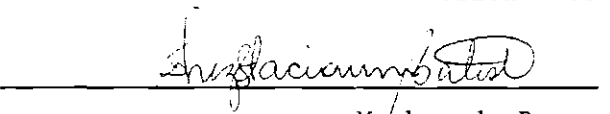
Dr. José Augusto Bittencourt


Orientador

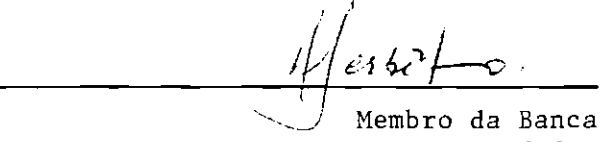
Dr. Antonio Montes Filho


Orientador

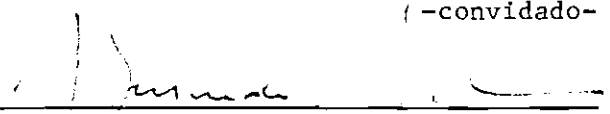
Dr^a Inez Staciarini Batista


Membro da Banca

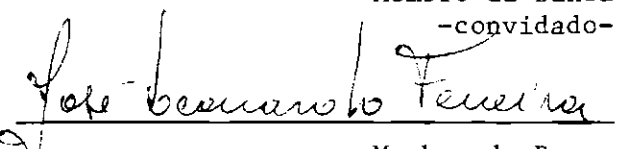
Dr. Antonio de Pádua Brito Serbêto


Membro da Banca
(-convidado-)

Dr. José Busnardo Neto


Membro da Banca
-convidado-

Dr. José Leonardo Ferreira


Membro da Banca

Candidata: Maria Virgínia Alves

São José dos Campos, 04 de setembro de 1990

Às minhas filhas Fabiana e Mariana
e aos meus pais Henrique e Deomar.

AGRADECIMENTOS

Ao Diretor do INPE, Eng. Márcio Nogueira Barbosa, pela franquia de todas as instalações e materiais do INPE/SCT para a execução deste trabalho.

Aos meus orientadores, Dr. José Augusto Bittencourt, chefe do Departamento de Aeronomia do INPE/SCT e Dr. Antonio Montes Filho, pela orientação e pelo incentivo prestados no desenvolvimento deste trabalho.

Especialmente ao Dr. Charles K. Birdsall, do Departamento de Engenharia Elétrica da Universidade da Califórnia em Berkeley, pela oportunidade de trabalhar junto ao seu grupo, pela sua orientação e pelo seu apoio. A convivência com este grupo foi extremamente valiosa, não só para o desenvolvimento deste trabalho, mas também para o meu crescimento profissional e pessoal.

Ao Dr. Mike A. Lieberman, do Departamento de Engenharia Elétrica da Universidade da Califórnia em Berkeley, pelas valiosas sugestões e discussões apresentadas.

À CAPES, pela bolsa e pelos auxílios concedidos durante a minha estada em Berkeley, no período de fevereiro de 1989 a junho de 1990.

Ao Dr. Gerson Otto Ludwig, chefe do Laboratório Associado de Plasmas, pelo apoio recebido durante o desenvolvimento deste trabalho.

Aos membros da Banca Examinadora pelos comentários e sugestões apresentadas.

Aos membros do Grupo de Simulação e Teoria de Plasmas (PTSG) do Departamento de Engenharia Elétrica da Universidade da Califórnia em Berkeley pela calorosa acolhida.

Agradeço de maneira especial aos Ms. Vahid Vahedi e John Verboncouer a paciência com que me introduziram na utilização aos microcomputadores do tipo PC e as valiosas discussões durante o desenvolvimento dos códigos computacionais, bem como aos Drs. Richard Procassini e Scott Parker as discussões no decorrer deste trabalho.

Agradeço aos meus amigos, as palavras de incentivo, o carinho e a compreensão. Cada um deles teve um papel especial. Nomeá-los a todos seria difícil e peço desculpas antecipadas se omitir algum nome. Cartas de incentivo foram escritas por Elaine, Padilha, Márcia, Ailton, Edith, Helena, Inez... A eles o meu muito obrigada. Saber que alguém cuidava dos meus interesse financeiros por aqui me deu a tranquilidade necessária para trabalhar, e agradeço ao Renato por isso. Agradeço a Sônia Kinrys a ajuda recebida nos meus primeiros dias em Berkeley, às palavras sempre encorajadoras de Marilyn Nyquist, e o bom humor do Carlos Kirjner.

Jamais encontrarei palavras para expressar o que significa para mim, o fato de meus pais, Deomar e Henrique, terem mudado totalmente suas vidas e assumido minhas filhas Fabiana e Mariana, durante o desenvolvimento deste trabalho. Elas por sua vez suportaram a distância e a saudade e torceram por mim o tempo todo. A eles a minha mais profunda gratidão.

Study of Asymmetrical Electric Discharges using Particle Simulation

ABSTRACT

*Asymmetrical electric discharges are been widely used in the microelectronic industry. The asymmetry in the electrode areas determines the magnitude of the plasma-to-electrode voltage, V_a , at the powered electrode, which determines the ion bombarding energy, a critical plasma processing parameter. Two many-particle simulation codes, called *PDC1* and *PDS1*, were developed. These codes are electrostatic, one-dimensional (radial) and model a bounded plasma between two infinite cylinders or two concentric spheres that can be connected to a RLC external circuit. Both codes consider asymmetrical electrode areas. In order to simulate electrical discharges, Monte-Carlo simulation of electron-neutral and ion-neutral collisions were included. These codes were used to study the relationship between the voltage area ratio across the sheaths, V_a/V_b , and the electrode area ratio A_b/A_a . Simulation results agree with experimental results and also with the analytical model that includes local ionization near the electrodes, observed to occur in almost all our simulations.*

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	<i>xi</i>
LISTA DE SÍMBOLOS	<i>xv</i>
 <u>CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO</u>	 1
 <u>CAPÍTULO 2 - O MÉTODO DE SIMULAÇÃO VIA PARTÍCULAS</u>	 7
2.1 - Conceitos Básicos	7
2.2 - Relação Entre as Grandezas Físicas de Partículas e as Grandezas na Grade Espacial	10
2.3 - Integração da Equação de Poisson	14
2.4 - Integração das Equações do Movimento	16
 <u>CAPÍTULO 3 - SIMULAÇÃO POR PARTÍCULAS PARA SISTEMAS LIMITADOS: MODELOS CILÍNDRICO E ESFÉRICO</u>	 19
3.1 - Introdução	19
3.2 - Equações do Movimento e Condições de Contorno	23
3.3 - Ponderação das Partículas nos Modelos Cilíndrico e Esférico	26
3.4 - Resolução das Equações para o Potencial e Campo Elétrico	34
3.5 - Inclusão das Equações para o Circuito Externo	39
 <u>CAPÍTULO 4 - MODELO COMPUTACIONAL DE COLISÕES PARA DESCARGAS ELÉTRICAS</u>	 45
4.1 - Introdução	45
4.2 - Colisões entre Elétrons e Partículas Neutras	50
4.3 - Colisões entre Ions e Partículas Neutras	54
4.4 - Modelos Utilizados para as Seções de Choque	57

<u>CAPÍTULO 5 - APLICAÇÃO DOS CÓDIGOS PDC1 E PDS1 AO ESTUDO</u> <u>DE DESCARGAS ELÉTRICAS ASSIMÉTRICAS</u>	61
5.1 - Introdução	61
5.2 - Modelo Analítico	64
5.3 - Resultados Obtidos para a Razão entre as Voltagens	74
5.3-1 - Ions Não Colisionais	77
5.3-2 - Ions Colisionais	84
5.4 - Resultados para a Razão de Voltagens de Polarização	91
5.5 - Comparação com Resultados Experimentais	94
<u>CAPÍTULO 6 - CONCLUSÕES</u>	97
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	101
APÊNDICE A - DEFINIÇÃO DOS PARÂMETROS DE ENTRADA DOS CÓDIGOS COMPUTACIONAIS PDC1 E PDS1	

LISTA DE FIGURAS

2.1 -	Esquema do ciclo básico de um modelo de simulação via partículas.	9
2.2 -	Grade espacial unidimensional (índice j).	11
2.3 -	Ponderação linear de cargas num sistema unidimensional cartesiano.	14
2.4 -	Esquema do método de integração "leap-frog".	17
3.1 -	Configuração básica dos modelos (a) planar e (b) cilíndrico e esférico, incluindo o circuito RLC externo.	21
3.2 -	Ponderação de partículas para os pontos da grade espacial radial r_j em geometrias cilíndrica e esférica.	28
3.3 -	Definição da grade espacial utilizada para ponderação e determinação da densidade.	30
3.4 -	(a) Espaço de fase no instante inicial e (b) correspondente variação espacial do potencial.	32
3.5 -	Função de distribuição de velocidades na direção r .	33
3.6 -	Espaço de fase num sistema cilíndrico no instante inicial, incluindo apenas velocidades positivas.	34
4.1 -	Sistema de referência para o cálculo das velocidades das partículas após colisões.	54
4.2 -	Forma geral das seções de choque para colisões entre elétrons e partículas neutras em função da energia E das partículas incidentes.	58
4.3 -	Forma geral das seções de choque para colisões entre íons e partículas neutras em função da raiz quadrada da energia E das partículas incidentes.	59

5.1 -	Voltagens, V_{RF} e V_p , numa descarga elétrica RF. (a) Sistema simétrico. (b) Sistema assimétrico.	62
5.2 -	Variação típica do potencial em função da posição durante um período de RF para uma descarga assimétrica.	66
5.3 -	(a) Variação espacial típica do valor médio, sobre um período de RF, da densidade de carga eletrônica. (b) Taxa de ionização, v_{iz} , para uma descarga assimétrica cilíndrica (acumulada durante toda a simulação).	71
5.4 -	Espaço de fase para íons e elétrons num plasma de hidrogênio.	74
5.5 -	Variação espacial do potencial em diferentes instantes num período de RF.	76
5.6 -	V_a/V_b em função de A_b/A_a para eletrodos cilíndricos, com hidrogênio (íons não colisionais) como gás neutro a uma pressão de 30 mTorr.	79
5.7 -	V_a/V_b em função de A_b/A_a para eletrodos cilíndricos, com argônio (íons não colisionais) como gás neutro a uma pressão de 30 mTorr.	80
5.8 -	V_a/V_b em função de A_b/A_a para eletrodos esféricos, com hidrogênio (íons não colisionais) como gás neutro a uma pressão de 30 mTorr.	81
5.9 -	(a) Variação espacial típica do valor médio, sobre um período de RF da densidade de carga eletrônica. (b) Taxa de ionização, v_{iz} , para uma descarga assimétrica esférica (acumulada durante toda a simulação).	83

5.10 -	$(n_{sa}V_b)/(n_{sb}V_a)$ em função de A_b/A_a , para eletrodos cilíndricos e esféricos.	84
5.11 -	V_a/V_b em função de A_b/A_a para eletrodos cilíndricos, com hidrogênio (íons colisionais) como gás neutro a uma pressão de 30 mTorr.	86
5.12 -	V_a/V_b em função de A_b/A_a para eletrodos cilíndricos, com argônio (íons colisionais) como gás neutro a uma pressão de 30 mTorr.	88
5.13 -	V_a/V_b em função de A_b/A_a para eletrodos esféricos, com hidrogênio (íons colisionais) como gás neutro a uma pressão de 30 mTorr.	90
5.14 -	$V_{polarização}$ em função de A_a/A_b para hidrogênio, usando eletrodos cilíndricos.	92
5.15 -	$V_{polarização}$ em função de A_a/A_b para argônio, usando eletrodos cilíndricos.	93
5.16 -	$V_{polarização}$ em função de A_a/A_b para hidrogênio, usando eletrodos esféricos.	94
5.17 -	$V_{polarização}$ em função de A_a/A_b para os resultados experimentais de Horwitz (1983).	95
A.1 -	Variação temporal do potencial aplicado, até que este atinja um valor constante. (a) Senoidal. (b) Inclinação constante.	A.3

LISTA DE SÍMBOLOS

$A_{a(b)}$	- Área do menor (maior) eletrodo.
Ar	- Argônio.
$\vec{B} \ (B)$	- Campo magnético (com sub-índice j indica o valor no ponto j da grade espacial).
C	- Capacitância do circuito externo.
CC	- Corrente contínua.
$\vec{E} \ (E)$	- Campo elétrico (com sub-índice j indica o valor no ponto j da grade espacial).
E_m	- Energia cinética da m -ésima partícula.
$\vec{F} \ (F_{i(j)})$	- Força (o sub-índice i indica o valor da força na posição da partícula enquanto o sub-índice j indica o valor no ponto j da grade espacial).
H	- Hidrogênio.
$I_{a(b)}$	- Corrente total de RF.
$I(t)$	- Corrente que passa pelo circuito externo.
$J_{a(b)}$	- Densidade de corrente de RF.
K_B	- Constante de Boltzman.

l	- Comprimento do sistema.
L	- Indutância do circuito externo.
m	- Massa do elétron.
M	- Massa do íon.
N	- Número de partículas usado na simulação.
NC	- Número de células na grade espacial.
$n_{sa(b)}$	- Densidade na bainha próxima ao menor (maior) eletrodo.
p	- Pressão.
P_m	- Probabilidade de que a m-ésima partícula sofra colisão.
Q	- Carga no capacitor.
q	- Carga da partícula.
Q_{conv}	- Carga devida a corrente de convecção.
Q_j	- Carga designada ao ponto j da grade espacial.

R	- Número aleatório entre 0 e 1.
R	- Resistência do circuito externo.
$r_{a(b)}$	- Raio do menor (maior) eletrodo.
RF	- Rádio-frequência.
$r_{sa(b)}$	- Posição da bainha próxima ao menor (maior) eletrodo.
$S_{a(b)}$	- Profundidade da bainha próxima ao menor (maior) eletrodo.
$T_{e(i)(n)}$	- Temperatura (eV) dos elétrons (íons) (gás neutro de fundo).
$\vec{v} \ (v)$	- Velocidade das partículas
$V_{a(b)}$	- Voltagem de corrente contínua através da bainha próxima ao menor (maior) eletrodo.
V_{bias}	- Potencial de polarização.
$V_{fa(b)}$	- Potencial flutuante. É a mínima diferença entre o potencial no eletrodo a (b) e no plasma.
V_j	- Volume da célula j .
V_{pp}	- Voltagem pico-a-pico.

V_{RF}	- Magnitude da voltagem aplicada em rádio frequência.
$V(t)$	- Voltagem aplicado.
$\vec{x}$ ou $\vec{r}$	- Posição (planar, esférico ou cilíndrico).
x_i ou r_i	- Posição das partículas.
x_j ou r_j	- Define a posição dos pontos na grade espacial planar (x), cilíndrico ou esférico (r).
Δt	- Intervalo de tempo usado na simulação.
λ	- Caminho livre médio.
λ_D	- Comprimento de Debye.
ρ	- Densidade de carga (com sub-índice j indica a densidade no ponto j da grade espacial
σ	- Seção de choque de colisão. O sub-índice especifica o tipo de colisão: T - total; ex - excitação; el - elástica (espalhamento); ion - ionização; tc - troca de carga.
$\sigma_{a(b)}$	- Densidade superficial de carga no menor (maior) eletrodo.
τ_{RF}	- Período de RF.

$\Phi_{(j)}$ - Potencial elétrico (o sub-índice indica o valor no ponto j da grade espacial).

χ - Ângulo de espalhamento.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Durante as últimas décadas um novo método para investigar o comportamento de sistemas físicos complexos tem sido desenvolvido graças ao advento dos computadores modernos de alta velocidade: o método de simulação computacional. Este método envolve o desenvolvimento de um modelo numérico do sistema ou teoria a ser investigado, o qual é transformado num código computacional que permite que o sistema evolua no tempo a partir de alguma condição inicial de interesse e de acordo com as leis físicas relevantes. Os resultados podem ser comparados com previsões teóricas baseadas em modelos analíticos simplificados e com observações experimentais de fenômenos naturais ou produzidos em laboratório. Pode-se ainda utilizar os resultados da simulação para prever o comportamento de experimentos a serem realizados.

Dentro da física de plasmas a simulação computacional tem sido muito utilizada, abrangendo duas grandes áreas, baseadas nas descrições de fluido e cinética. Em particular, a descrição cinética envolvendo simulação via partículas, que teve seu início com John Dawson e Oscar Buneman no final da década de 50, início da de 60, tem demonstrado ser um método poderoso e eficiente na análise da evolução espacial e temporal de vários fenômenos em plasmas (veja, por ex., Dawson, 1983; Birdsall e Langdon, 1985). Este método explora com cuidado o fato que, na maioria dos problemas de interesse, o comportamento coletivo das partículas no plasma determina as características do sistema. Além disto,

inúmeras vezes, pode-se obter muitas informações úteis estudando o sistema em apenas uma ou duas dimensões, o que leva à necessidade de um número menor de partículas do que o que seria necessário em três dimensões. Estas considerações conduzem à introdução do conceito de "super-partícula" de forma que uma partícula na simulação pode representar muitas partículas do plasma real; alternativamente, pode-se considerar a simulação de apenas uma região pequena mas representativa do plasma (veja p. ex., Birdsall e Langdon, 1985; Dawson, 1983; Hockney e Eastwood, 1981). Considera-se então o movimento individual de um grande número de partículas na presença dos campos eletromagnéticos internos auto-consistentes e externamente aplicados. Embora este método pareça simples e direto, existem limitações computacionais práticas que requerem a utilização de técnicas sofisticadas, tais como a introdução de uma grade espacial macroscópica para o cálculo das interações partículas-campos e a introdução de partículas de tamanho finito. Entretanto, a limitação maior está relacionada com o número de partículas individuais que podem ser seguidas durante um tempo apreciável na simulação. Quando métodos apropriados são usados, sistemas relativamente pequenos de alguns milhares de partículas podem realmente simular de maneira precisa o comportamento coletivo de plasmas reais.

Nos últimos anos um número razoável de códigos computacionais utilizando partículas tem sido desenvolvido, incluindo modelos uni, bi e tri-dimensionais, eletrostáticos, magnetostáticos e eletromagnéticos, com o objetivo de estudar os mais diversos problemas. As aplicações têm sido as mais variadas possíveis, desde didáticas, com o objetivo de

esclarecer conceitos básicos em Física de Plasmas (por exemplo, o código ES1 ("Eletrostatic One-Dimensional") de Birdsall e Langdon (1985), passando por aplicações a fenômenos espaciais tais como formação de camadas duplas em turbulência acústico iônica (por ex. Kindel et al., 1981; Barnes et al., 1985; Sato e Okuda, 1980; Sato e Okuda, 1981) até aplicações para problemas de transporte em "tokamaks", usando novos conceitos tais como, escalas diferentes de tempo para avançar íons e elétrons, grade espacial variável e inclusão da bainha de plasma "artificialmente", quando não é importante saber detalhes a respeito da mesma (Parker, 1990; Procassini, 1990).

Apenas recentemente esta técnica tem sido utilizada para a simulação de descargas elétricas de RF e de corrente contínua (CC) (Morey, 1986; Morey e Boswell, 1988; Surendra et al., 1990). Estes trabalhos apresentam estudos a respeito de descargas elétricas simétricas, ou seja, os eletrodos têm a mesma área. Entretanto, dentro da indústria eletrônica, onde descargas elétricas RF vêm sendo amplamente utilizadas para processamento por plasmas, as descargas são, em geral, assimétricas, ou seja, os eletrodos têm áreas desiguais. Esta assimetria entre as áreas determina a magnitude da voltagem de CC, V_a , induzida próxima ao eletrodo ao qual se aplica o potencial, que por sua vez determina a energia de bombardeamento dos íons, um parâmetro crítico para processamento por plasma. Embora muitos fenômenos que ocorrem nestas descargas tenham sido estudados (Koenig e Maissel, 1970; Chapman, 1980), existem poucos estudos a respeito da assimetria da descarga (Pointu, 1987; Lieberman, 1989; Lieberman e Savas, 1990).

Com esta motivação desenvolveram-se dois códigos computacionais usando o método de simulação via partículas, **PDC1** ("Plasma Device Cylindrical One-dimensional") e **PDS1** ("Plasma Device Spherical One-dimensional"), que têm esferas ou cilindros infinitos como eletrodos. Estes dois modelos são geometricamente simples, e permitem não só especificar as dimensões do plasma, ou seja, a distância entre os eletrodos, mas também a razão entre as áreas, parâmetro que determina a magnitude dos potenciais de CC através das bainhas que se formam nas regiões próximas aos eletrodos. De modo a simular descargas elétricas adicionou-se à técnica convencional de simulação de partículas um método de Monte Carlo, que permite simular colisões entre partículas carregadas e partículas neutras. Os parâmetros que caracterizam a descarga, tais como frequência e amplitude da voltagem aplicada, o gás de fundo utilizado, sua densidade (pressão e temperatura), são especificados no início de cada simulação em computador. Deste modo, é possível analisar a influência de cada um destes parâmetros na condição final de equilíbrio. Estes dois códigos foram então utilizados para estudar estas descargas assimétricas, dentro de um intervalo de razão de áreas entre 1,3 e 15, a uma pressão de 30 mTorr, simulando dois tipos diferentes de gás, hidrogênio e argônio. A partir dos resultados obtidos, uma relação entre a razão dos potenciais de CC através das bainhas próximas aos eletrodos e a razão entre as áreas foi obtida.

Um modelo teórico analítico de descarga, supondo ions não colisionais e ionização uniforme ao longo do sistema prevê que a razão entre as voltagens de CC através das bainhas, V_a/V_b , varia com a quarta potência da razão entre as áreas,

A_b/A_a . Resultados experimentais, no entanto, mostram uma dependência muito menos severa com relação à razão de áreas, resultado este que também é obtido através das simulações. Sobre um intervalo limitado de razão de áreas, encontrou-se que a potência é da ordem de um, e não quatro como previsto anteriormente. Como a maioria das simulações indica uma ionização localizada na região próxima aos eletrodos, um modelo analítico que inclui esta condição foi desenvolvido. Os resultados obtidos analiticamente e por simulação foram comparados e apresentam uma boa concordância. Embora as condições experimentais sejam diferentes das que foram usadas para simulação, o comportamento geral dos parâmetros de interesse apresenta-se bastante similar.

O texto aqui apresentado está estruturalmente organizado como se segue. No Capítulo 2, são apresentados os conceitos básicos utilizados numa simulação por partículas. No Capítulo 3 são descritas as equações usadas no modelo computacional para resolver a equação do campo elétrico e do potencial para as duas diferentes geometrias e também o método para avançar as partículas em cada passo no tempo. O Capítulo 4 descreve, em linhas gerais, o modelo computacional de colisões entre elétrons e partículas neutras e entre íons e partículas neutras. No Capítulo 5 são apresentados os resultados que mostram a relação entre as voltagens de CC através das bainhas e a razão entre as áreas dos eletrodos. As conclusões relativas aos principais resultados obtidos são descritas no Capítulo 6, juntamente com sugestões quanto a trabalhos futuros e utilização da técnica desenvolvida.

CAPÍTULO 2

O MÉTODO DE SIMULAÇÃO VIA PARTÍCULAS

2.1 - CONCEITOS BÁSICOS

A teoria envolvida num modelo de simulação usando muitas partículas é apresentada em detalhes por Birdsall e Langdon (1985) e também por Hockney e Eastwood (1981). Considera-se, neste tipo de modelo, o movimento individual das partículas do plasma sob a ação dos campos eletromagnéticos internos auto-consistentes, resultantes da interação entre as partículas carregadas do plasma, e dos campos externamente aplicados. De uma maneira bastante simplificada, o ciclo geral básico consiste das seguintes etapas:

- a) A partir das posições ($\vec{x}$) e velocidades ($\vec{v}$) das partículas calculam-se as densidades de carga (ρ) e de corrente elétrica ($\vec{J}$) macroscópicas numa grade espacial previamente definida, utilizando um método de suavização espacial apropriado.
- b) Com estas densidades de carga e corrente elétrica macroscópicas calculam-se os campos elétrico ($\vec{E}$) e magnético ($\vec{B}$) auto-consistentes, através das equações de Maxwell.
- c) Utilizando os campos elétrico e magnético auto-consistentes e externamente aplicados calcula-se a

força que atua em cada partícula e atualizam-se as posições e velocidades, através das leis da dinâmica clássica.

A evolução do estado dinâmico das partículas obedece às equações do movimento de Newton-Lorentz

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (2.1)$$

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{v}, \quad (2.2)$$

onde q denota a carga e m a massa da partícula.

Os campos elétrico e magnético internos auto-consistentes são calculados a partir das distribuições de densidades de carga e de corrente elétricas usando-se as equações de Maxwell (por exemplo, Bittencourt, 1986) no sistema MKSA,

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.4)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.5)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \left(\vec{J} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right). \quad (2.6)$$

Este ciclo básico é transformado em um código computacional e repetido por vários passos de tempo de forma a se obter a evolução dinâmica do sistema ou fenômeno em estudo. A Figura 2.1 sintetiza este ciclo básico.

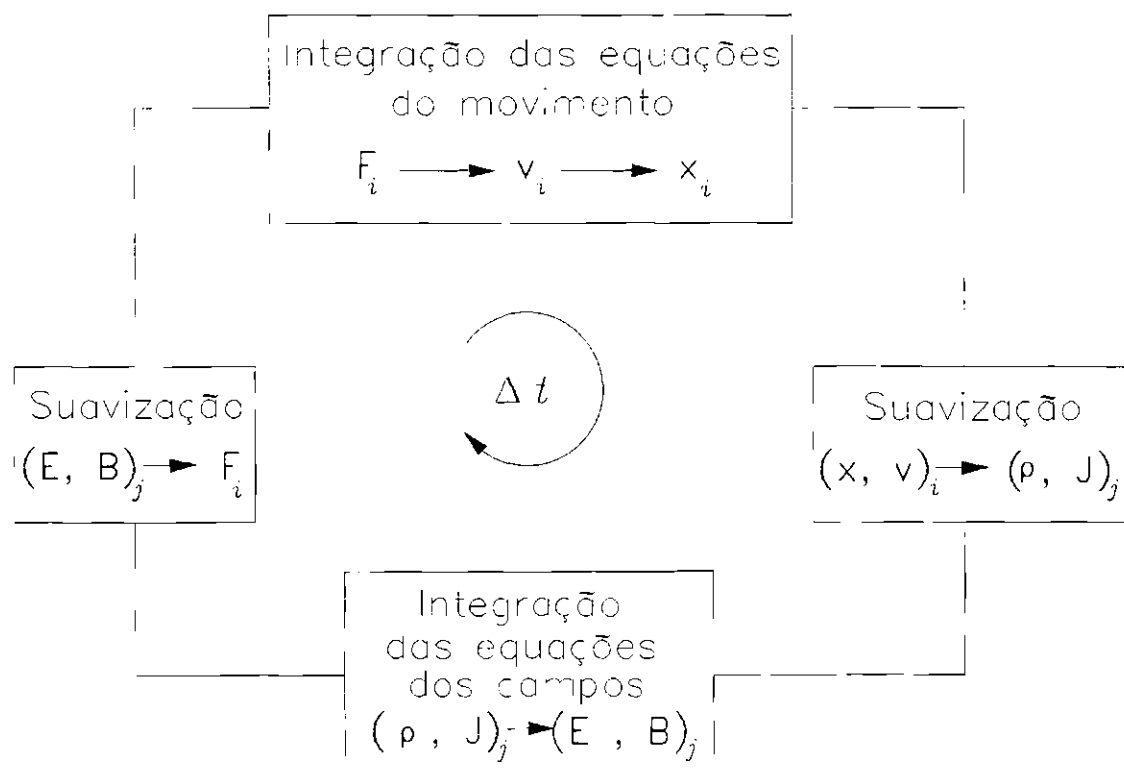


Fig. 2.1 - Esquema do ciclo básico de um modelo de simulação via partículas.

- O índice i denota as partículas e o índice j refere-se à grade espacial macroscópica, a qual constitui um artifício matemático introduzido apenas para resolver as equações dos campos eletromagnéticos.

2.2 - RELAÇÃO ENTRE AS GRANDEZAS FÍSICAS DE PARTÍCULAS E AS GRANDEZAS NA GRADE ESPACIAL

Para descrever o comportamento coletivo das partículas do plasma não é necessário conhecer os micro-campos flutuantes de pequena escala, internos, associados ao movimento individual das partículas, sendo suficiente apenas o conhecimento dos campos macroscópicos suavizados. Para especificar estes campos macroscópicos suavizados é necessário definir uma grade espacial (índice j). Seja l o comprimento do sistema e NC o número de intervalos ou células na grade espacial, conforme mostra a Figura 2.2. O espaçamento Δx entre pontos consecutivos da grade é dado por $\Delta x = l/(NC)$. Um espaçamento de grade da ordem do comprimento de Debye (λ_D) é usualmente escolhido para descrever o comportamento coletivo de plasmas com comprimento característico l bem maior que λ_D . Assim, os campos são representados numa grade espacial com um número de pontos suficientemente grande para descrever o comportamento coletivo e, ao mesmo tempo, pequeno o suficiente para que se ignore os micro-campos flutuantes. Este processo de suavização espacial dos campos e das densidades de carga espaciais associadas pode também ser visto como equivalente à utilização de partículas de tamanho finito δ (em geral $\delta \propto \Delta x$), ou "super partículas", em cada ponto da grade.

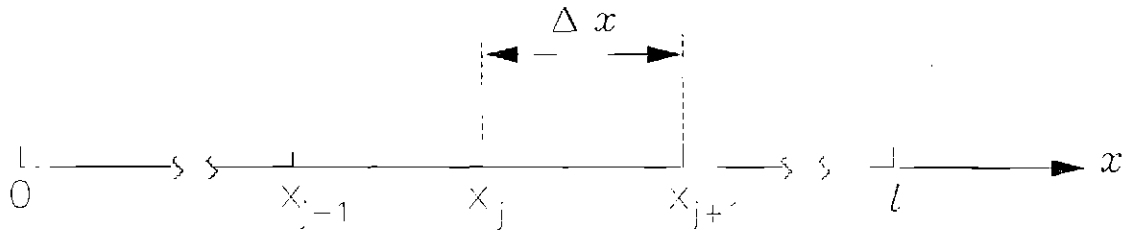


Fig. 2.2 - Grade espacial unidimensional (índice j).

- A grade é uniformemente espaçada, para cálculo das densidades de carga e corrente, e dos campos.

Há várias maneiras de se determinar a densidade de carga em cada ponto da grade a partir da distribuição espacial das partículas. Em geral, utiliza-se uma função de forma ou de ponderação que estabelece a fração de contribuição da carga de cada partícula à densidade de carga em cada ponto da grade. Esta função descreve alternativamente a "forma" de cada super-partícula na grade. A partir da carga e posição das partículas (índice i) obtém-se a densidade de carga nos pontos da grade (índice j) através da seguinte expressão

$$\rho_j \equiv \rho(x_j) = \sum_i q_i S(x_j - x_i), \quad (2.7)$$

onde $S(x_j - x_i)$ é a função de forma ou de ponderação que depende basicamente da distância da partícula ao ponto considerado na grade. A partir dos ρ_j 's obtém-se o campo elétrico E_j em cada ponto da grade, resolvendo a equação de Poisson

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}. \quad (2.8)$$

A força que atua sobre cada partícula é obtida a partir dos E_j 's, levando-se em conta a mesma função de forma anterior, ou seja,

$$F_i = q_i \Delta x \sum_j E_j S(x_j - x_i). \quad (2.9)$$

A função de forma S deve ser tal que a carga sobre a grade seja a mesma que a carga total das partículas, isto é, $\sum_i q_i = \Delta x \sum_j \rho_j$.

A diferença fundamental entre as várias funções de forma está na maneira de se acumular a carga espacial nos pontos da grade, a partir das posições das partículas. A maneira mais simples, conhecida como **NGP** ("**N**earest **G**rid **P**oint") ou "Ponto de Grade mais Próximo", pondera igualmente todas as partículas que se encontram a uma distância $\Delta x/2$ do ponto da grade considerado. Assim, neste esquema, todas as cargas contidas num intervalo Δx , em torno de $x_j = j\Delta x$, são acumuladas igualmente para se determinar ρ_j , independente da distância $|x_j - x_i|$. Este é um esquema de acumulação de ordem zero.

Um outro esquema é a função de ponderação de primeira ordem que pode ser interpretada de duas maneiras. A primeira é denominada **CIC** ("**C**loud in **C**ell") ou "Nuvem em Célula", e a outra é denominada **PIC** ("**P**article in **C**ell") ou "Partícula em Célula" (Birdsall e Fuss, 1969). Em ambos os casos considera-se que a partícula tem uma dimensão finita, da mesma ordem que a dimensão da célula. A diferença entre um e outro é que no primeiro caso a posição da partícula, x_i , determina o seu centro e a partícula vai de $x_i - \Delta x/2$ a $x_i + \Delta x/2$ enquanto que

no segundo caso a partícula é limitada pelas posições dos pontos de grade mais próximos, independente de sua localização na célula. No caso de "Nuvem em Célula" considera-se como peso para cada célula a intersecção entre a partícula e as células. No caso de "Partícula na Célula" pondera-se a carga de cada partícula conforme a distância $|x_j - x_i|$ ao ponto da grade. A Figura 2.3 ilustra as duas interpretações em coordenadas retangulares, que levam ao mesmo resultado com exceção dos pontos de grade 0 e NC. Este esquema resulta em flutuações (ou ruídos numéricos) na densidade de carga muito mais suaves do que no de ordem zero. Esquemas de ponderação de ordem superior podem também ser utilizados e mais informações a este respeito podem ser obtidas em Birdsall e Langdon (1985, Cáp. 8, 14, e referências ali contidas).

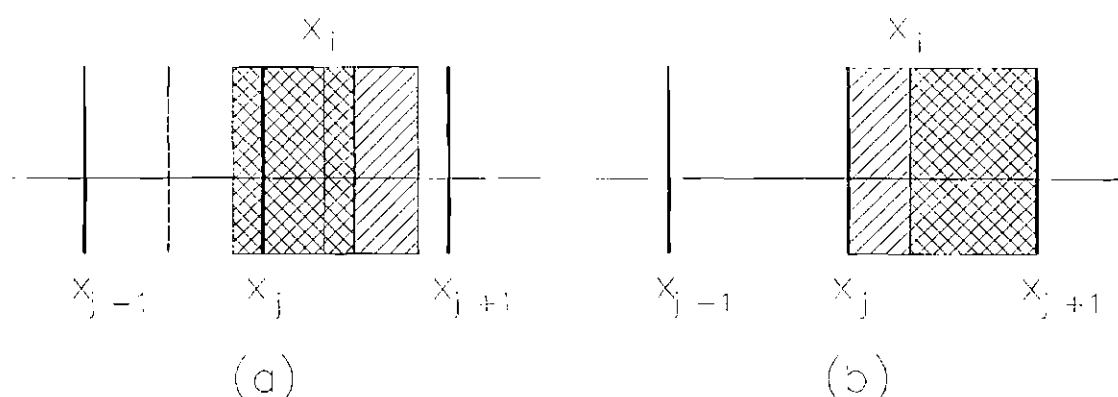


Fig. 2.3 - Ponderação linear de cargas num sistema unidimensional cartesiano.

- Observe-se que neste caso a interpretação de "Nuvem em Célula" (CIC) (a) ou a interpretação de "Partícula em Célula" (PIC) (b) levam ao mesmo resultado, o que não é válido para outros sistemas de coordenadas, como será visto no Capítulo 3. A distância representada pelo duplo hachurado é usada para determinar a densidade de carga no ponto j da grade, enquanto a distância representada pelo hachurado simples é usada para determinar a densidade de carga no ponto $j+1$.

2.3 - INTEGRAÇÃO DA EQUAÇÃO DE POISSON

Uma vez determinadas as densidades de carga elétrica ρ_j em cada ponto da grade espacial pode-se calcular o potencial elétrico Φ_j e conseqüentemente o campo elétrico E_j , através da equação de Poisson, que em coordenadas cartesianas, considerando-se apenas variações na direção x , é dada por

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (2.10)$$

Utilizando o método de diferenças finitas pode-se escrever a Equação (2.10) na seguinte forma

$$\frac{\Phi_{j-1} - 2\Phi_j + \Phi_{j+1}}{\Delta x^2} = -\frac{\rho_j}{\epsilon_0}, \quad (2.11)$$

e para o campo elétrico, considerando $\vec{E} = -\nabla\Phi$ (aproximação eletrostática) e apenas variações em x , tem-se que

$$E_j = -\frac{(\Phi_{j-1} - \Phi_{j+1})}{2\Delta x}. \quad (2.12)$$

Nas equações (2.11) e (2.12), o índice j varia de 1 a $NC-1$. As equações para $j=0$ e $j=NC$ dependem das condições de contorno a serem utilizadas. Desde que se conhecem os ρ_j 's, o número de equações será igual ao número de incógnitas e o problema tem solução única. Neste caso, obtém-se uma equação envolvendo uma matriz tridiagonal que pode ser resolvida, por exemplo, pelo método de eliminação de Gauss (Potter, 1973).

Há vários métodos que podem ser utilizados para resolver numericamente a equação de Poisson e as condições de contorno ocupam um papel importante na determinação do método a ser usado (Lawson, 1989). Para sistemas periódicos, por exemplo, a equação de Poisson pode ser resolvida utilizando-se transformadas de Fourier (Birdsall e Langdon, 1985).

2.4 - INTEGRAÇÃO DAS EQUAÇÕES DO MOVIMENTO

A evolução temporal do sistema, na simulação computacional, desenvolve-se de maneira discreta, a intervalos de tempo finitos. O intervalo Δt entre cada ciclo básico deve ser pequeno o suficiente para resolver períodos característicos do sistema, tais como períodos de plasma e ciclotrônicos para elétrons e íons. As grades espacial e temporal devem ser definidas de modo a se obter estabilidade numérica e precisão aceitáveis. Imprecisões sempre existirão e deve-se simplesmente torná-las tão pequenas quanto possível.

A escolha do método de integração leva em conta considerações de precisão, rapidez de cálculo e mínimo de informações necessárias (armazenamento na memória computacional). Um dos métodos de integração mais comumente usado é o método "leap-frog" (veja, por exemplo, Potter, 1973). O esquema deste método de integração é ilustrado na Figura 2.4, a qual mostra que o método é centrado no tempo. Posições e velocidades não são conhecidas no mesmo instante de tempo, mas defasadas de $\Delta t/2$, sendo ambas avançadas de um mesmo Δt em cada integração. Um cuidado especial deve ser tomado quanto às condições iniciais. Em geral são conhecidas a posição e a velocidade das partículas no instante $t=0$, mas, em princípio seria necessário o conhecimento das velocidades em $-\Delta t/2$ para a aplicação deste método. A idéia inicial seria calcular a força que atua nas partículas em $t=0$ e retroceder as partículas, usando esta força, para obter as velocidades em $-\Delta t/2$ (Birdsall e Langdon, 1985). Uma outra maneira de contornar o problema, que foi usada nos códigos apresentados neste trabalho, é, no primeiro passo no tempo, avançar as

velocidades em apenas $\Delta t/2$ e as posições em Δt . A partir daí aplica-se normalmente o método conforme o fluxo de tempo indicado na Figura 2.1. As equações do movimento (2.1) e (2.2) são substituídas por equações em forma de diferenças finitas

$$\frac{m(v^{t+\Delta t/2} - v^{t-\Delta t/2})}{\Delta t} = F(t) \quad (2.13)$$

$$\frac{x^{t+\Delta t} - x^t}{\Delta t} = v^{t+\Delta t/2} \quad (2.14)$$

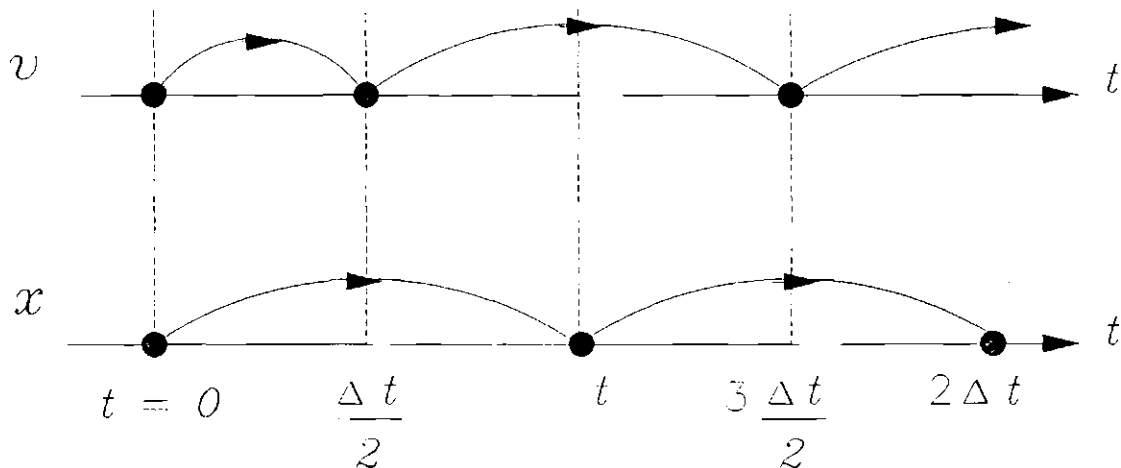


Fig. 2.4 - Esquema do método de integração "leap-frog".

Estas são as características básicas de um modelo para simulação usando muitas partículas, em uma única dimensão e usando coordenadas cartesianas. Um código computacional periódico, não limitado, que serve como exemplo para este método e é um excelente ponto de partida para o aprendizado

desta técnica é o código conhecido por **ES1** ("**E**lectro**s**tatic **O**ne-Dimensional"), descrito em detalhes por Birdsall e Langdon (1985).

CAPÍTULO 3

SIMULAÇÃO POR PARTÍCULAS PARA SISTEMAS LIMITADOS: MODELOS CILÍNDRICO E ESFÉRICO

3.1 - INTRODUÇÃO

Nos últimos anos muitos problemas de simulação em plasmas não periódicos espacialmente têm surgido. Estes problemas incluem:

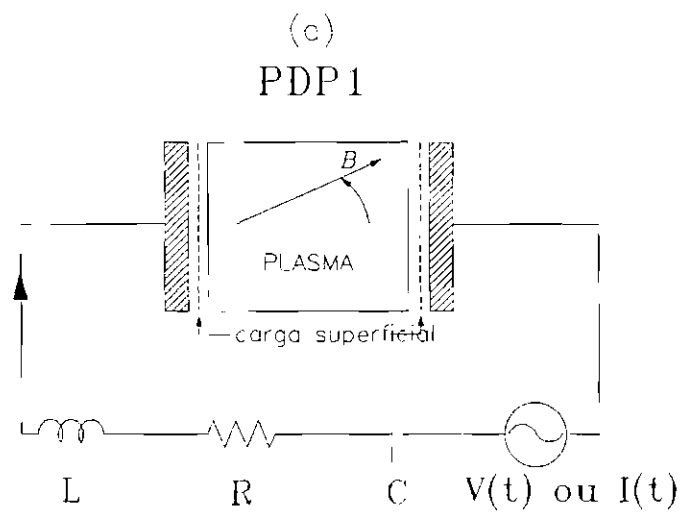
- a) arranjos experimentais tais como espelhos magnéticos, máquinas de plasma quiescente ("Q-machines") e máquinas de plasma duplo (Chen, 1974),
- b) efeitos espaciais tais como amortecimento de ondas e conversão de modos,
- c) contornos entre plasmas diferentes como em camadas duplas ("double-layers"), e
- d) problemas teóricos como o diodo de Pierce (Pierce, 1948).

No decorrer dos últimos 20 anos, muitas simulações têm sido desenvolvidas para tratar estes problemas (por exemplo, Birdsall e Bridges, 1966; Burger, 1964; Burger et al., 1965; Kuhn, 1981; Lawson, 1989).

Os conceitos de simulação via partículas foram utilizados para desenvolver dois códigos computacionais para

sistemas limitados, PDC1 ("Plasma Device Cylindrical One-Dimensional") e PDS1 ("Plasma Device Spherical One-Dimensional") (Alves et al., 1989a, 1989b, 1989c), que permitem simular plasmas contidos entre dois cilindros ou duas esferas concêntricas, respectivamente. Os contornos podem ser conectados entre si através de um circuito *RLC* externo. Estes códigos foram desenvolvidos tendo como ponto de partida o código PDP1 ("Plasma Device Planar One-Dimensional"), largamente usado pelo Grupo de Teoria e Simulação de Plasma do Laboratório de Pesquisas Elétricas da Universidade da Califórnia, Berkeley (PTSG - ERL - UC Berkeley) (Morey et al., 1989a, b, c). PDP1, por sua vez, teve sua origem em PDW1, que vem sendo utilizado com sucesso desde 1983 (Crystal e Kuhn, 1985; Gray et al., 1984; Kim e Crystal, 1984; Otani, 1984). PDW1 é um anacronismo para "1983 Plasma Device Workshop". O modelo planar é bem documentado (Lawson, 1989; Birdsall e Langdon, 1985) e não será tratado aqui, a não ser quando comparações entre os modelos sejam esclarecedoras. Os esquemas básicos dos modelos planar, cilíndrico e esférico são ilustrados na Figura 3.1.

A motivação para o desenvolvimento destes códigos veio do fato de que descargas elétricas capacitivas, em frequências de RF (rádio-frequência) têm sido largamente usadas para processamento de materiais na indústria eletrônica nos últimos anos. As descargas são geralmente assimétricas, ou seja, o eletrodo ao qual se aplica o potencial e o eletrodo aterrado, especificados aqui pelos sub-índices a e b , respectivamente, têm áreas diferentes, com A_a tipicamente menor que A_b . Embora muitos fenômenos que ocorrem nestas descargas tenham sido estudados nos últimos anos (Koenig e



(b)

PDC1 & PDS1

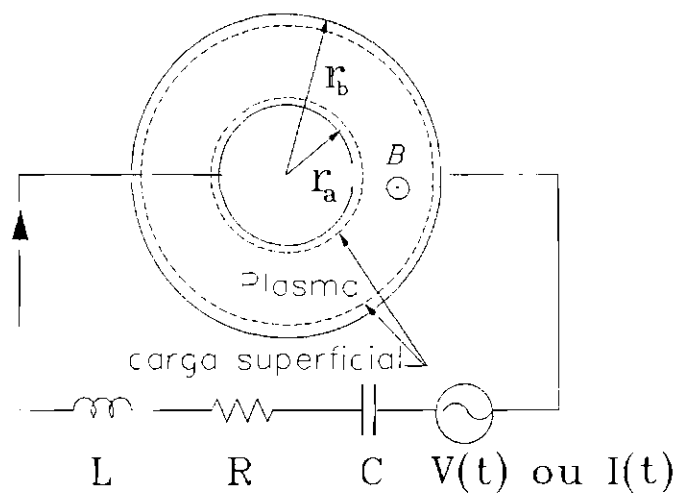


Fig. 3.1 - Configuração básica dos modelos (a) planar e (b) cilíndrico e esférico, incluindo o circuito RLC externo.

Maissel, 1970; Vossen, 1979; Godyac, 1976 e 1986; Chapman, 1980; Köhler et al., 1985), existem relativamente poucos estudos a respeito de descargas assimétricas. A assimetria determina a magnitude da voltagem de CC (V_a) induzida no eletrodo, que por sua vez determina a energia dos íons que bombardeiam a parede, um parâmetro crítico para a implantação de íons.

Um sistema esférico ou cilíndrico infinito permite a construção de um modelo simples que leva em conta a desigualdade das áreas. O eletrodo ao qual se aplica o potencial é a esfera ou cilindro interno tendo raio r_a e área A_a , e o eletrodo aterrado é a esfera ou cilindro externo tendo raio r_b e área A_b . Nestes modelos consideram-se apenas variações em r , ou seja, o modelo é unidimensional. A liberdade de escolha da distância entre os eletrodos, $l = r_b - r_a$, e também da razão entre as áreas dos eletrodos, r_a/r_b para o modelo cilíndrico e $(r_a/r_b)^2$ para o esférico, permite modelar uma descarga assimétrica.

Também é possível usar estes modelos para o estudo de implantação de íons por imersão em plasma (Alves et al., 1989b; Vahedi et al., 1990). A implantação é obtida através da aplicação de um potencial negativo no alvo imerso num plasma, inúmeras vezes. O alvo pode ter diferentes formas: cúbica, cilíndrica, esférica ou uma forma geométrica não definida. Os parâmetros importantes para o processamento são a distribuição de energia dos íons e o fluxo de íons por pulso.

Detalhes a respeito das aplicações e descrição dos processos serão dados quando da apresentação e comparação dos resultados com a literatura existente (Capítulo 5).

3.2 - EQUAÇÕES DO MOVIMENTO E CONDIÇÕES DE CONTORNO

O objetivo deste modelo é descrever a evolução temporal do plasma contido entre duas esferas ou dois cilindros. As condições de contorno são determinadas por

$$\oint_S \vec{E} \cdot d\vec{S} = \int_V \frac{\rho}{\epsilon} dV + \frac{A_a \sigma_a + A_b \sigma_b}{\epsilon} = 0, \quad (3.1)$$

onde a superfície S engloba o plasma e os contornos. A partir da Equação 3.1, que expressa a conservação de cargas no sistema, e considerando-se apenas variações em r , pode-se definir as densidades superficiais de carga

$$\sigma_a = \epsilon_0 E(r_a) \quad (3.2)$$

$$\sigma_b = -\epsilon_0 E(r_b). \quad (3.3)$$

Se os contornos representam paredes condutoras, as cargas superficiais correspondentes a σ_a e σ_b serão as superfícies de carga que estão fisicamente sobre as paredes. Se os contornos representam somente o fim da região de interesse, então as cargas superficiais representarão as cargas que estão além do contorno.

O movimento das partículas é determinado pela equação do movimento de Newton-Lorentz

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = \frac{q_i}{m_i} [\vec{E}(r_i) + \vec{v}_i \times \vec{B}] \quad (3.4)$$

Esta equação em coordenadas cilíndricas torna-se (por exemplo, Kibble, 1985)

$$m \frac{dv_r}{dt} = F_r + \frac{mv_\theta^2}{r} \quad (3.5)$$

$$m \frac{d(rv_\theta)}{dt} = rF_\theta \quad (3.6)$$

$$m \frac{dv_z}{dt} = F_z \quad (3.7)$$

$$\frac{dr}{dt} = v_r, \quad (3.8)$$

onde r , θ e z são as coordenadas cilíndricas usuais e $v_\theta = r\dot{\theta}$.

Na atual simulação 1d3v (1 dimensão radial e três dimensões em velocidade), $F_r = q(E_r + v_\theta B_z)$, $F_\theta = -qv_r B_z$ e $F_z = 0$. Quando um campo magnético B_z está presente, a equação para a componente θ torna-se

$$\frac{d}{dt} \left(rv_\theta + \frac{qB_z}{2m} r^2 \right) = 0. \quad (3.9)$$

As equações (3.5)-(3.9) são escritas em forma de diferenças finitas e implementadas em PDC1 na seguinte sequência:

$$v_r^{t+\frac{\Delta t}{2}} = v_r^{t-\frac{\Delta t}{2}} + \Delta t \frac{(v_\theta^t)^2}{r^t} + \frac{\Delta t}{m} F_r^t \quad (3.10)$$

$$r^{t+\Delta t} = r^t + \Delta t v_r^{t+\frac{\Delta t}{2}} \quad (3.11)$$

$$v_\theta^{t+\Delta t} = \frac{r^t v_\theta^t}{r^{t+\Delta t}} + \frac{1}{r^{t+\Delta t}} \frac{q}{2m} B_z ((r^t)^2 - (r^{t+\Delta t})^2). \quad (3.12)$$

Observe-se que a Equação (3.12), quando $F_\theta = 0$, garante a conservação do momentum angular. Se $F_z = F_\theta = 0$, as Equações (3.5) e (3.6) podem ser usadas para mostrar que a energia cinética é conservada. Numericamente, pode-se mostrar facilmente que a energia cinética relacionada com a velocidade na direção r é conservada, independente do intervalo de tempo escolhido. Já a energia cinética total será melhor conservada quanto menor for o intervalo de tempo escolhido.

A equação do movimento em coordenadas esféricas torna-se (por exemplo, Kibble, 1985)

$$m \frac{dv_r}{dt} = \frac{m(v_\theta^2 + v_\phi^2)}{r} + F_r \quad (3.13)$$

$$m \frac{d(rv_\theta)}{dt} = mr^2 \dot{\phi}^2 \sin \theta \cos \theta + r F_\theta \quad (3.14)$$

$$\frac{d(mr^2 \dot{\phi} \sin^2 \theta)}{dt} = r \sin \theta F_\phi, \quad (3.15)$$

onde r , θ e ϕ são as coordenadas esféricas usuais e $v_\phi = r \dot{\phi} \sin \theta$.

Em PDS1, $F_\theta = F_\phi = 0$, e $F_r = qE_r$. Se $\dot{\phi} = 0$ inicialmente, então ϕ será sempre zero. Neste caso o movimento se dá no plano $\phi = \text{constante}$, em torno do eixo polar, no qual r e θ fazem o papel de coordenadas polares. O momentum angular, $mr v_\theta$ é então uma constante. Com estas suposições, as equações (3.13) e (3.14) tornam-se iguais às equações (3.5) e (3.6) com $F_\theta = 0$. As equações implementadas em PDS1 são iguais às equações (3.10)-(3.12), com $B_z = 0$, uma vez que não se inclui o campo magnético neste caso. Em PDC1, o campo magnético é incluído no algoritmo implementado.

3.3 - PONDERAÇÃO DAS PARTÍCULAS NOS MODELOS CILÍNDRICO E ESFÉRICO

Em simulação por partículas, como foi dito anteriormente, o campo elétrico e o potencial são geralmente determinados sobre uma grade espacial usando-se uma aproximação por diferenças finitas da equação de Poisson. A grade espacial utilizada é similar à descrita no caso planar. A diferença está no fato de que aqui especificam-se r_a e r_b como parâmetros de entrada. A separação entre as grades, uniforme neste caso, é determinada por

$$\Delta r = \frac{r_b - r_a}{(NC)} . \quad (3.16)$$

A posição das partículas é então normalizada por Δr . Com estas definições, a posição dos pontos da grade é dada por

$$r_j = \frac{r_a}{\Delta r} + j \quad , \text{ onde } j = 0, 1, 2, \dots, NC . \quad (3.17)$$

Observe-se que $r_0 = r_a / \Delta r$ e $r_{NC} = r_b / \Delta r$.

A densidade de carga, ρ , deve ser conhecida sobre cada ponto da grade, ρ_j , e um algoritmo que designa as cargas das partículas para os pontos da grade deve ser especificado. Considera-se as partículas como cascas cilíndricas uniformes em z em PDC1 e cascas esféricas em PDS1. Supõe-se que as partículas têm densidade uniforme, o que permite usar a área dos anéis cilíndricos ou o volume das cascas esféricas para ponderar as cargas em PDC1 e PDS1 respectivamente. A Figura 3.2 (a) mostra como a ponderação é feita em ambos os códigos. O centro da célula está localizado em r_j e o da partícula em r_i ; ambas têm um tamanho finito, (Δr) . A intersecção entre a partícula finita e a célula determina a porção da área ou volume da partícula que será colocada naquela grade. Esta é a suavização de Nuvem-em-Célula, ligeiramente diferente da Partícula-em-Célula, mostrada na Figura 3.2 (b) e descrita em Birdsall e Langdon (1985) para geometria cilíndrica. Vale ressaltar que numa geometria planar, ambos os métodos levam ao mesmo resultado, como mostra a Figura 2.3.

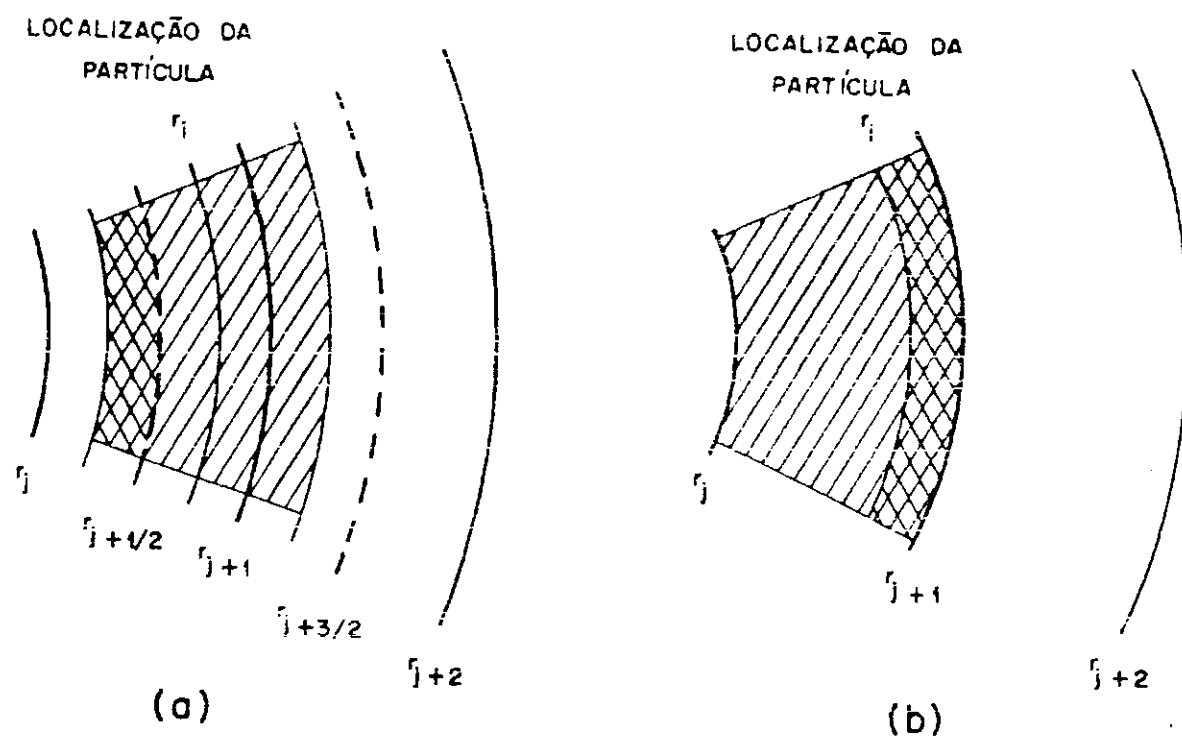


Fig. 3.2 - Ponderação de partículas para os pontos de grade espacial radial r_j em geometrias cilíndrica e esférica.

- Supõe-se que a partícula se encontra na posição r_i e tem dimensão Δr . A região com duplo hachurado é usada para determinar a fração da carga da partícula que será designada para o ponto j da grade e a com hachurado simples para o ponto $j+1$. Neste caso fica clara a distinção entre (a) Nuvem em Célula e (b) Partícula em Célula para geometrias diferentes da cartesiana.

As expressões para a função de forma em PDC1 são:

$$S_j = \frac{r_{j+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2}{r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2} \quad (3.18)$$

$$S_{j+1} = \frac{r_{i-1/2}^2 - r_{j+1/2}^2}{r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2} . \quad (3.19)$$

Em PDS1, os termos são elevados ao cubo, ao invés de ao quadrado. A posição do ponto j da grade é determinada truncando-se $r_i - r_0$. Em ambos, a interpretação utilizada para efeito de ponderação foi a de Nuvem em Célula.

Um cuidado especial deve ser tomado quando se analisam os contornos do plasma. O método implementado em PDC1 e PDS1 requer um ponto de grade em cada contorno, que representa a densidade de carga adjacente ao contorno e a carga superficial sobre o contorno. A carga acumulada sobre o ponto de grade nos contornos é apenas uma fração da que deveria ser acumulada num ponto de grade que não está sobre o contorno. Para compensar isto, uma vez determinada a carga total que deve ser posta no ponto da grade sobre o contorno, define-se a densidade de carga dividindo-se a carga total pelo volume de "meia célula". Isto fica claro quando se observa como os pontos da grade são definidos para efeito de ponderação, como mostra a Figura 3.3. A posição da grade r_j , é o centro da célula, que tem dimensão Δr . Comparando a Figura 3.3 com a Figura 3.2 (a) observa-se que para uma partícula que tenha posição $r_i < r_0 + \Delta r/2$, um cuidado especial

deve ser tomado, pois se considerar-se que a partícula também tem dimensão Δr , uma parte da partícula estará fora do sistema. Neste caso a função de forma utilizada será

$$s_1 = \frac{r_{i+1/2}^2 - r_{1/2}^2}{r_{i+1/2}^2 - r_0^2}.$$

$$s_0 = 1 - s_1.$$

O mesmo tipo de raciocínio se aplica ao outro contorno. As características importantes da função de forma, que são a continuidade e a conservação de carga são mantidas.

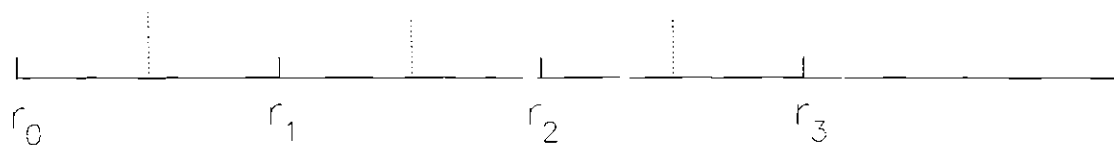


Fig. 3.3 - Definição da grade espacial utilizada para ponderação e determinação da densidade.

- A posição do ponto r_i determina o centro da célula, que tem dimensão Δr . A célula está limitada pelas linhas pontilhadas.

Uma vez estabelecido como ponderar as partículas para a grade, é preciso decidir como preencher o sistema, o que dependerá do problema a ser tratado. Atualmente em PDC1 e PDS1, tem-se duas alternativas: pode-se iniciar a simulação com o sistema vazio e ir injetando partículas de um ou ambos

os contornos ou preenche-se o sistema a partir de uma densidade inicial. No último caso, supõe-se que a densidade numérica é constante e é dada por

$$\frac{N}{\pi(r_b^2 - r_a^2)h} \quad (3.20)$$

no caso cilíndrico, ou por

$$\frac{3N}{4\pi(r_b^3 - r_a^3)} \quad (3.21)$$

no caso esférico, onde N é o número total de partículas a ser colocado no sistema. Como a densidade numérica é suposta constante em r , em cada posição r_i tem-se

$$r_i^2 - r_{i-1}^2 = \frac{r_{NC}^2 - r_0^2}{N} \quad (3.22)$$

no caso cilíndrico, ou

$$r_i^3 - r_{i-1}^3 = \frac{r_{NC}^3 - r_0^3}{N} \quad (3.23)$$

no caso esférico, onde r_{i-1} é a posição da partícula anterior. Para a primeira partícula, $r_{i-1} = r_0$.

A Figura 3.4 mostra como as partículas estão distribuídas inicialmente num sistema que tem 20 cm de distância entre os raios internos e externos e uma razão entre as áreas dos eletrodos igual a 5, numa geometria cilíndrica.

A densidade inicial vale 2×10^{12} e cada partícula na simulação representa, neste caso, 1×10^8 partículas reais. A relação entre o número de partículas reais e partículas a serem usadas na simulação é determinada pelo parâmetro de entrada $nc2p$, juntamente com o volume do sistema (veja Apêndice A).

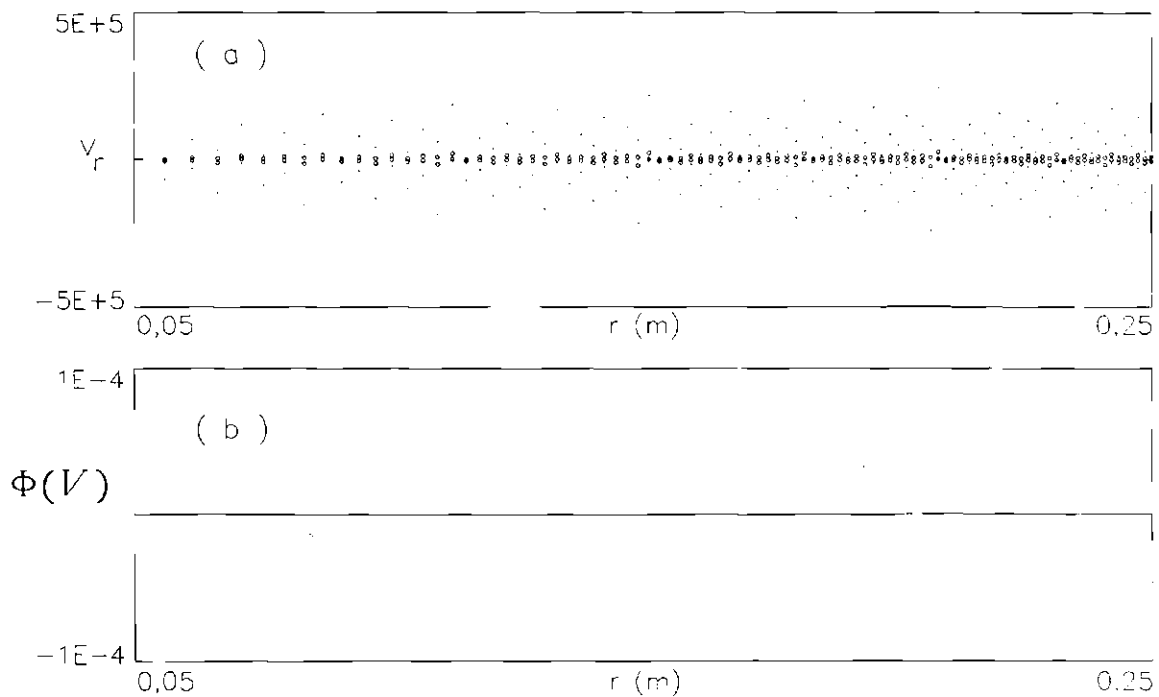


Fig. 3.4 - (a) Espaço de fase no instante inicial e (b) correspondente variação espacial do potencial.

- Neste caso é mostrada a distribuição inicial das partículas num sistema cilíndrico (v_r em função de r), de maneira a se ter um potencial nulo no instante inicial.

Observe-se na Figura 3.4 que existe uma distribuição de velocidades das partículas. Esta distribuição é determinada

pelos parâmetros de entrada $vtL(R)$, $vcL(R)$, e $vOR(L)$ como visto na Figura 3.5. As velocidades vtL e vtR são dadas pela magnitude da velocidade térmica das partículas, definida por $(eT/m)^{1/2}$, onde T é a temperatura em eV e m é a massa da partícula em kilogramas. Estas velocidades são usadas para definir tanto a distribuição inicial de velocidades das partículas como a distribuição de velocidades das partículas injetadas. Definindo-se apenas vtL , a distribuição será de "meia" gaussiana, somente com velocidades positivas, se as velocidades de deriva vOL ($v > 0$) e vOR ($v < 0$) são ambas nulas. Isto pode ser visto na Figura 3.6. Definindo-se apenas vtR , ter-se-á "meia" gaussiana somente com velocidades negativas. Especificando-se uma velocidade de corte, vcL ($v > 0$) ou vcR ($v < 0$), esta será a máxima velocidade, em magnitude, que uma partícula pode ter.

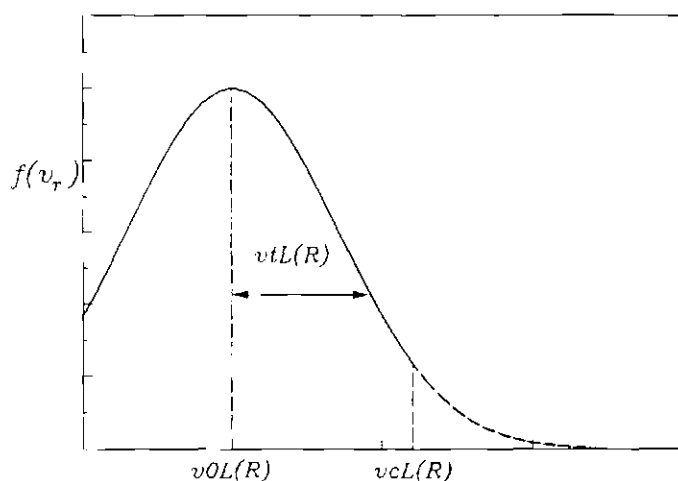


Fig. 3.5 - Função de distribuição de velocidades na direção r .

- A figura mostra as definições das variáveis $vtL(R)$, $vcL(R)$, e $vOR(L)$.

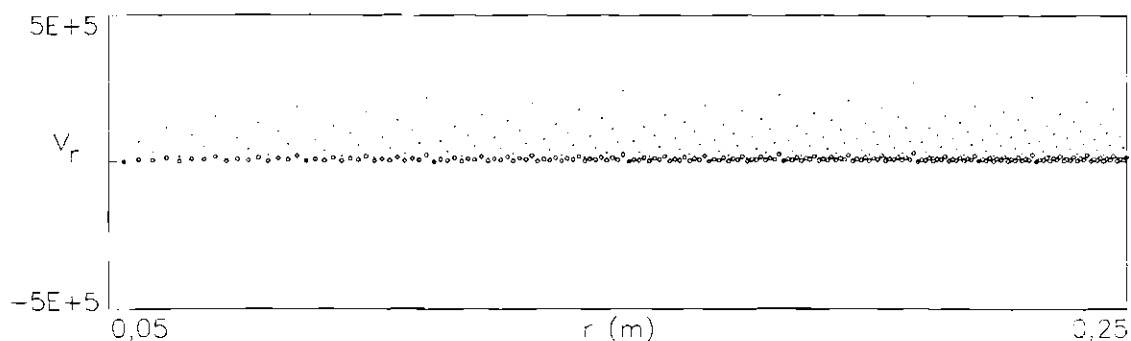


Fig. 3.6 - Espaço de fase num sistema cilíndrico no instante inicial, incluindo apenas velocidades positivas.

Outras maneiras de preencher o sistema podem ser utilizadas, dependendo do problema a ser estudado. Para isto é necessário alterar o código computacional.

3.4 - RESOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES PARA O POTENCIAL E CAMPO ELÉTRICO.

Uma vez conhecida a densidade de carga nos pontos da grade, esta é usada para resolver a equação de diferenças finitas envolvendo o potencial Φ e as densidades. Uma vez que se conheça o potencial, o campo elétrico pode ser determinado a partir de $\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi$. A equação de diferenças finitas envolvendo o potencial Φ e as densidades é obtida usando-se a lei de Gauss, de maneira a conservar o fluxo elétrico.

Considerando apenas variações em r , e aplicando a lei de Gauss à superfície cilíndrica $j+1/2$, obtém-se que (Birdsall e Langdon, 1985)

$$2\pi r_{j+1/2} \Delta r E_{j+1/2} - 2\pi r_{j-1/2} \Delta r E_{j-1/2} = \frac{Q_j}{h\epsilon_0}, \quad \text{onde } r_{j+1/2} = \frac{r_{j+1} + r_j}{2} \quad \text{e } j > 0. \quad (3.24)$$

$$2\pi r_{1/2} \Delta r E_{1/2} - 2\pi r_0 \Delta r E_0 = \frac{Q_0}{h\epsilon_0}, \quad j = 0 \quad \text{e} \quad (3.25)$$

$$2\pi r_{NC} \Delta r E_{NC} - 2\pi r_{NC-1/2} \Delta r E_{NC-1/2} = \frac{Q_{NC}}{h\epsilon_0}, \quad j = NC. \quad (3.26)$$

Para obter a equação que rege o potencial, usa-se $\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi$ em forma de diferenças finitas,

$$E_{j+1/2} = -\frac{\Phi_{j+1} - \Phi_j}{\Delta r_{j+1/2}}, \quad (3.27)$$

onde $\Delta r_{j+1/2} = (r_{j+1/2} - r_{j-1/2})$ e define-se a densidade de carga por

$$\rho_j = \frac{Q_j}{V_j}, \quad (3.28)$$

onde $V_j = \pi h (\Delta r^2)_j$ e

$$(\Delta r^2)_j = (r_{j+1/2}^2 - r_{j-1/2}^2) (\Delta r)^2 = 2r_j (\Delta r)^2, \quad j > 0, \quad (3.29)$$

$$(\Delta r^2)_0 = (r_{1/2}^2 - r_0^2) (\Delta r)^2 = (r_0 + 0,25) (\Delta r)^2, \quad j = 0, \quad \text{e} \quad (3.30)$$

$$(\Delta r^2)_{NC} = (r_{NC}^2 - r_{NC-1/2}^2) (\Delta r)^2 = (r_{NC} - 0,25) (\Delta r)^2, \quad j = NC. \quad (3.31)$$

Usando (3.27)-(3.31) em (3.24)-(3.25) obtém-se a equação em forma de diferenças finitas para o potencial

$$(r_j - 0,5)\Phi_{j-1} - 2r_j\Phi_j + (r_j + 0,5)\Phi_{j+1} = \frac{-r_j\Delta r^2\rho_j}{\epsilon_0}, \quad j > 0 \quad \text{e} \quad (3.32)$$

$$\Phi_0 - \Phi_1 = \Delta r \frac{(r_0 + 0,25)\Delta r\rho_0/2 + r_0\sigma_a}{(r_0 + 0,5)\epsilon_0} \quad (3.33)$$

Para obter a equação (3.33), usou-se (3.2) em (3.25). Esta equação representa umas das condições de contorno; a outra é obtida fazendo $\Phi_{NC} = 0$, o que define um potencial de referência. A altura do cilindro, h , que aparece nas equações é usada no modelo computacional para determinar a carga por unidade de comprimento e também para determinar a relação entre o número real de partículas e o número de partículas a ser usado na simulação. De fato, cada partícula na simulação pode representar um grande número de partículas reais ("super-partícula"). Para a solução da equação do potencial os cilindros são considerados infinitos.

Para obter a equação de diferenças finitas para o potencial em coordenadas esféricas, o procedimento é análogo. Aplicando a lei de Gauss à superfície esférica $j+1/2$ obtém-se

$$4\pi r_{j+1/2}^2(\Delta r)^2 E_{j+1/2} - 4\pi r_{j-1/2}^2(\Delta r)^2 E_{j-1/2} = \frac{Q_j}{\epsilon_0}, \quad j > 0, \quad (3.34)$$

$$4\pi r_{1/2}^2(\Delta r)^2 E_{1/2} - 4\pi r_0^2(\Delta r)^2 E_0 = \frac{Q_0}{\epsilon_0}, \quad j = 0 \quad \text{e} \quad (3.35)$$

$$4\pi r_{NC}^2(\Delta r)^2 E_{NC} - 4\pi r_{NC-1/2}^2(\Delta r)^2 E_{NC-1/2} = \frac{Q_{NC}}{\epsilon_0}, \quad j = NC. \quad (3.36)$$

Neste caso o volume de cada célula é $V_j = \frac{4}{3}\pi(\Delta r^3)_j$, onde

$$(\Delta r^3)_j = (r_{j+1/2}^3 - r_{j-1/2}^3)(\Delta r)^3 = (3r_j^2 + 0,25)(\Delta r)^3, \quad j > 0, \quad (3.37)$$

$$(\Delta r^3)_0 = (r_{1/2}^3 - r_0^3)(\Delta r)^3, \quad j = 0 \quad e \quad (3.38)$$

$$(\Delta r^3)_{NC} = (r_{NC}^3 - r_{NC-1/2}^3)(\Delta r)^3, \quad j = NC. \quad (3.39)$$

Usando (3.37)-(3.39) e (3.27) em (3.34)-(3.36) obtém-se a equação de diferenças finitas de três pontos para o potencial em coordenadas esféricas

$$r_{j-1/2}^2 \Phi_{j-1} - (r_{j+1/2}^2 + r_{j-1/2}^2) \Phi_j + r_{j+1/2}^2 \Phi_{j+1} = -(r_{j+1/2}^3 - r_{j-1/2}^3) \frac{\Delta r^2 \rho_j}{3\epsilon_0}, \quad j > 0, \quad e \quad (3.40)$$

$$\Phi_0 - \Phi_1 = \Delta r \frac{(r_{1/2}^3 - r_0^3) \Delta r \rho_0 / 3 + r_0^2 \sigma_a}{r_{1/2}^2 \epsilon_0}, \quad j = 0. \quad (3.41)$$

Novamente, para obter a Equação (3.41) usou-se (3.2) em (3.38) que juntamente com $\Phi_{NC} = 0$ são as condições de contorno necessárias para resolver a equação para o potencial. As equações (3.32)-(3.33) e (3.40)-(3.41) são equivalentes à equação de Poisson em forma de diferenças finitas em coordenadas cilíndricas e esféricas respectivamente, com as correspondentes condições de contorno. Estas equações podem ser escritas na seguinte forma matricial

$$\begin{pmatrix} b_0 & c_0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_1 & b_1 & c_1 & 0 & & \\ 0 & a_2 & b_2 & c_2 & 0 & \\ \cdot & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & & & & \cdot & \cdot \\ & & & & & \cdot \\ & & & & & a_{NC-2} & b_{NC-2} & c_{NC-2} \\ & & & & & a_{NC-1} & b_{NC-1} & c_{NC-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_0 \\ \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \Phi_{NC-2} \\ \Phi_{NC-1} \end{pmatrix}^t = \begin{pmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ d_{NC-2} \\ d_{NC-1} \end{pmatrix}^t$$

ESFÉRICA

$$a_j = r_{j-1/2}^2$$

$$b_j = -(r_{j+1/2}^2 + r_{j-1/2}^2)$$

$$C_j = r_{j+1/2}^2$$

$$d_j = -(r_{j+1/2}^3 - r_{j-1/2}^3) \Delta r^2 \frac{\rho_j}{3\epsilon_0} \quad j > 0$$

$$d_0 = \Delta r \frac{(r_{1/2}^3 - r_0^3) \Delta r \rho_0 / 3 + r_0^2 \sigma_a}{r_{1/2}^2 \epsilon_0}$$

$$b_0 = 1 \quad \text{e} \quad c_0 = -1 \quad \text{para ambas.}$$

A equação acima envolve uma matriz tridiagonal e consequentemente pode ser resolvida com relativa facilidade (veja por exemplo Press et al., 1988). Esta não é ainda a equação matricial que é resolvida em PDC1 ou PDS1. A estas equações para o potencial é necessário acrescentar as equações que incluem o circuito externo, que por sua vez dependem do potencial nos eletrodos.

3.5 - INCLUSÃO DAS EQUAÇÕES PARA O CIRCUITO EXTERNO.

Uma vez que os eletrodos podem ser acoplados a um circuito externo, deve-se incluir a equação para o mesmo, dada por

$$L\ddot{Q} + R\dot{Q} + \frac{Q}{C} = V(t) - \Phi_0 + \Phi_{NC} \quad (3.42)$$

onde L, R, C , e Q são os parâmetros usuais de um circuito e $V(t)$ é o potencial aplicado. A relação entre o plasma e o circuito é dada por

$$A_\alpha \Delta \sigma_\alpha = Q_{conv} + \Delta Q \quad (3.43)$$

onde Q_{conv} é devida à corrente de convecção (partículas) e ΔQ é devida à corrente no circuito externo.

Existem quatro maneiras diferentes de resolver o circuito em PDP1, PDC1 e PDS1 (Verboncoeur et al, 1990a), que serão descritas a seguir.

1- Caso geral: voltagem aplicada e um circuito RLC externo.

Neste caso a equação geral do circuito, Equação (3.42), é usada para avançar no tempo a carga no capacitor Q .

2- Circuito aberto.

Quando $C \rightarrow 0$ os potenciais sobre os contornos do plasma são flutuantes. Neste caso não é necessário resolver o circuito externo, já que não existe corrente fluindo através do circuito. A carga superficial sobre os

eletrodos é ainda levada em conta na determinação do potencial, mas os eletrodos não podem trocar cargas via circuito externo.

3- Curto circuito.

Quando $R = L = 0$ e $C \rightarrow \infty$, diz-se que o circuito externo está em curto. Neste caso a Equação (3.42) torna-se simplesmente $\Phi_0 - \Phi_{NC} = V(t)$. Esta solução é usada quando $(C \ln(r_b/r_a))/(2\pi\epsilon h) > 10^5$ em PDC1 e quando $(C(r_b - r_a))/(4\pi r_a r_b \epsilon_0) > 10^5$ em PDS1.

4- Fonte de corrente.

Neste caso supõe-se que uma fonte ideal de corrente induz uma corrente específica $I = I(t)$, independente dos outros parâmetros do circuito.

No caso geral, obtém-se a equação de diferenças finitas para a Equação (3.42) usando a representação retroativa de segunda ordem de Euler para a primeira derivada de Q com relação ao tempo como segue,

$$\dot{Q}^t = \frac{3Q^t - 4Q^{t-\Delta t} + Q^{t-2\Delta t}}{2\Delta t}, \quad (3.44)$$

e a segunda derivada é dada por

$$\begin{aligned} \ddot{Q}^t &= \frac{3\dot{Q}^t - 4\dot{Q}^{t-\Delta t} + \dot{Q}^{t-2\Delta t}}{2\Delta t} \\ &= \frac{9Q^t - 24Q^{t-\Delta t} + 22Q^{t-2\Delta t} - 8Q^{t-3\Delta t} + Q^{t-4\Delta t}}{4\Delta t^2}, \end{aligned} \quad (3.45)$$

onde a última equação foi obtida aplicando-se (3.44) à primeira derivada de Q .

A Equação (3.43) representa a conservação de cargas e pode ser escrita da seguinte maneira,

$$\sigma_{\alpha}^t = \sigma_{\alpha}^{t-\Delta t} + \frac{Q_{conv}^t + Q^t - Q^{t-\Delta t}}{A_{\alpha}}. \quad (3.46)$$

A equação 3.46 deve ser usada para substituir σ_{α}^t em d_0 que aparece na equação matricial mostrada anteriormente. A carga sobre o capacitor não é conhecida no instante de tempo t , mas pode ser escrita em função da carga em instantes de tempo anteriores

$$Q^t = \frac{V(t) - \Phi_0^t - K}{\alpha_0}, \quad (3.47)$$

onde

$$K = \alpha_1 Q^{t-\Delta t} + \alpha_2 Q^{t-2\Delta t} + \alpha_3 Q^{t-3\Delta t} + \alpha_4 Q^{t-4\Delta t},$$

$$\alpha_0 = \frac{9}{4} \frac{L}{\Delta t^2} + \frac{3}{2} \frac{R}{\Delta t} + \frac{1}{C},$$

$$\alpha_1 = -6 \frac{L}{\Delta t^2} - 2 \frac{R}{\Delta t},$$

$$\alpha_2 = \frac{11}{2} \frac{L}{\Delta t^2} + \frac{1}{2} \frac{R}{\Delta t},$$

$$\alpha_3 = -2 \frac{L}{\Delta t^2}, \text{ e}$$

$$\alpha_4 = \frac{1}{4} \frac{L}{\Delta t^2}.$$

(3.48)

Uma vez que Q^t depende de Φ_0^t , torna-se necessário rearranjar a equação matricial, de modo que Φ_0^t não apareça na matriz do lado esquerdo. Após um pouco de algébra obtém-se uma nova equação matricial que inclui o circuito externo e tem a mesma forma anterior, mas com valores de b_0 e d_0 modificados. Estes novos valores são, para geometria cilíndrica,

$$b_0 = 1 + \frac{r_0 \Delta r}{A_a(r_0 + 0,5) \epsilon \alpha_0}$$

$$d_0 = \frac{\Delta r}{(r_0 + 0,5) \epsilon} \left((r_0 + 0,25) \Delta r \rho_0^t / 2 + r_0 (\sigma_a^{t-\Delta t} + J_p \Delta t) + \frac{r_0}{A_a} \left(\frac{V_{ext}^t - K}{\alpha_0} - Q^{t-\Delta t} \right) \right)$$

e para geometria esférica,

$$b_0 = 1 + \frac{r_0^2 \Delta r}{r_{1/2}^2 A_a \epsilon \alpha_0}$$

$$d_0 = \frac{\Delta r}{r_{1/2}^2 \epsilon} \left((r_{1/2}^3 - r_0^3) \Delta r \rho_0^i / 3 + r_0^2 (v^{t-\Delta t} + J_p \Delta t) + \frac{r_0^2}{A_a} \left(\frac{V(t) - K}{\alpha_0} - Q^{t-\Delta t} \right) \right) .$$

Esta equação matricial é resolvida em PDC1 e PDS1 a cada passo no tempo a fim de se obter a variação espacial do potencial e, consistentemente, resolver a equação geral do circuito. A matriz é resolvida usando um algoritmo otimizado (Press et al., 1988).

Uma vez que se conhece o potencial nos pontos da grade, o campo elétrico, que é usado para avançar as partículas, é obtido usando a equação $\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi$ na forma de diferenças finitas

$$E_j = -\frac{(\Phi_{j+1} - \Phi_{j-1})}{2\Delta r}, \quad j = 1, 2, \dots, NC - 1. \quad (3.49)$$

O valor do campo elétrico nos contornos é definido separadamente, de acordo com as condições de contorno. Este é dado por

$$E_0 = \frac{1}{r_0} \left(r_{1/2} \frac{(\Phi_0 - \Phi_1)}{\Delta r} - (r_0 + 0,25) \frac{\Delta r \rho_0}{2 \epsilon_0} \right), \quad (3.50)$$

$$E_{NC} = \frac{1}{r_{NC}} \left(r_{NC-1/2} \frac{(\Phi_{NC-1} - \Phi_{NC})}{\Delta r} + (r_{NC} - 0,25) \frac{\Delta r \rho_{NC}}{2 \epsilon_0} \right) \quad (3.51)$$

para geometria cilíndrica, e por

$$E_0 = \frac{1}{r_0^2} \left(r_{1/2}^2 \frac{(\Phi_0 - \Phi_1)}{\Delta r} - (r_{1/2}^3 - r_0^3) \frac{\Delta r \rho_0}{3 \epsilon_0} \right), \quad (3.52)$$

$$E_{NC} = \frac{1}{r_{NC}^2} \left(r_{NC-1/2}^2 \frac{(\Phi_{NC-1} - \Phi_{NC})}{\Delta r} + (r_{NC}^3 - r_{NC-1/2}^3) \frac{\Delta r \rho_{NC}}{3 \epsilon_0} \right) \quad (3.53)$$

para geometria esférica.

Sabendo-se os valores dos campos elétricos, é possível avançar a posição das partículas, como descrito anteriormente.

CAPÍTULO 4

MODELO COMPUTACIONAL DE COLISÕES PARA DESCARGAS ELÉTRICAS

4.1 - INTRODUÇÃO

Como foi dito anteriormente, descargas elétricas de rádio-frequência (RF) vêm sendo largamente utilizadas para processamento de materiais, dentro da indústria eletrônica, nos últimos anos. Alguns parâmetros típicos para estas descargas são: pressão $p \approx 10 - 300$ mTorr, $\omega/2\pi \approx 13.56$ MHz, voltagem aplicada $V_{RF} \approx 50 - 1000$ V, e espaçamento entre os eletrodos $l \approx 3 - 10$ cm (Lieberman, 1989). Infelizmente, as descargas elétricas constituem um meio extremamente complexo e um modelo que inclua todos os fenômenos presentes está longe de ser alcançado. A produção e a manutenção de um plasma são dois processos distintos unidos por alguns processos básicos: ionização e recombinação, transporte de plasma e interação plasma-superfície; estes processos, por sua vez, estão interligados, de tal maneira que um alimenta o outro.

Para ter um idéia inicial do princípio de funcionamento de uma descarga elétrica (veja por exemplo Chapman, 1980 e Manos e Flamm, 1989 entre outros) considere-se um tubo de vidro, dentro do qual se fez vácuo, com duas placas metálicas internas separadas por uma distância l . O campo elétrico entre as placas é aproximadamente uniforme, exceto nas regiões próximas às placas. Preencha-se a câmara com um gás a baixa pressão. Suponha-se que uma partícula carregada, por exemplo um elétron, possa ser liberada próximo ao eletrodo negativamente carregado (catodo), não sendo muito importante

neste ponto que tipo de mecanismo gera o elétron. O elétron encontra-se agora sob a ação de um campo elétrico e começa a ser acelerado em direção ao eletrodo positivamente carregado (anodo). Se a pressão do gás é suficientemente baixa, o elétron não sofrerá colisões, atingirá o anodo, e possivelmente, dependendo de sua energia, gerará um elétron secundário. Entretanto, se este elétron é gerado muito próximo ao anodo, ele simplesmente retornará ao mesmo, sendo absorvido e não haverá cargas livres dentro do experimento.

Suponha-se agora que a pressão é suficientemente alta para que o elétron colida com os átomos neutros em seu caminho. Se o campo elétrico é baixo, o elétron não ganhará energia suficiente para ionizar os átomos neutros e seu movimento simplesmente sofrerá uma deriva, determinada pela sua mobilidade. Ou ainda se o gás neutro é suficientemente eletronegativo, o elétron será capturado. Estes íons negativos terão uma mobilidade sensivelmente mais baixa.

O próximo passo é considerar que o campo elétrico é grande o bastante para que o elétron adquira energia suficiente, entre uma colisão e outra, para ionizar o gás por impacto. Neste caso um par de íons (negativo e positivo) é criado. O íon positivo será atraído para o catodo, enquanto o elétron (ou íon negativo) será atraído para o anodo. Elétrons secundários podem então ser emitidos por ambos os eletrodos.

Quando um gás altamente ionizado, isto é, um plasma, é colocado entre os eletrodos, o campo elétrico entre as

placas se altera drasticamente. Uma bainha de plasma existe próxima ao catodo que acelera os íons positivos em direção ao catodo e os elétrons secundários em direção ao plasma.

Até este ponto considerou-se que o campo elétrico entre as placas é constante no tempo, o que caracteriza uma descarga elétrica contínua. Suponha-se agora que um potencial da forma $V_{RF} \sin \omega t$ é aplicado entre os eletrodos internos. O regime de trabalho da descarga dependerá da frequência angular ω . Se esta é variada continuamente começando por zero, primeiro observa-se um regime para o qual a descarga se comporta como uma descarga contínua, mas que reverte a posição do catodo e anodo a cada meio período. Quando se aumenta a frequência, o sistema passa gradualmente para uma situação em que as partículas carregadas não mais se movem de um eletrodo a outro, uma vez que seu percurso no campo elétrico é menor que a distância entre os eletrodos. A idéia de anodo e catodo não mais existe e a maioria dos elétrons oscila entre um eletrodo e outro sem ser absorvida e a descarga é sustentada cumulativamente pelos elétrons que adquirem energia cinética necessária para ionização, entre colisões sucessivas com os átomos neutros. A amplitude do campo elétrico alternante no plasma é o parâmetro que determina a temperatura do plasma de tal maneira que ionização (produção) e perdas devido a recombinação no plasma e perdas para as paredes que limitam o plasma são mantidas em equilíbrio. A frequência com que as colisões ocorrem depende da pressão e densidade presentes. Desprezando o efeito da gravidade e dos campos elétricos pode-se considerar que o movimento das partículas entre uma colisão e outra é uma reta. A distância que uma partícula percorre entre uma colisão e outra é chamada de caminho livre

e este conceito foi introduzido pela primeira vez por Rudolf Clausius, na Alemanha, no final do século 19 (Nasser, 1971). É claro que o caminho livre é uma quantidade aleatória cujo valor médio, chamado caminho livre médio (λ) é a quantidade significativa e depende da concentração do gás.

O plasma contido pelos eletrodos contém elétrons, vários tipos de íons, átomos e moléculas neutras e fótons. Em princípio deveríamos considerar colisões entre todas as possíveis combinações de pares. Felizmente algumas colisões são mais importantes do que outras, dependendo do regime de interesse, e não é necessário incluir todas as colisões possíveis. Colisões envolvendo elétrons são dominantes na determinação do comportamento macroscópico do plasma enquanto que colisões envolvendo íons e partículas neutras são importantes na determinação da função de distribuição de energia das partículas envolvidas.

Incluir colisões em códigos computacionais usando muitas partículas é algo relativamente recente. Métodos de Monte Carlo têm sido utilizados em simulações para avalanches de elétrons (por ex. Den Hartog et al., 1988). Em muitos esquemas de Monte Carlo, o tempo (ou a distância) entre as colisões para cada partícula é calculado a partir de um número aleatório. Esta técnica, entretanto, não é compatível com o método de simulação de partículas em célula (PIC), uma vez que as trajetórias das partículas são integradas simultaneamente no tempo. Assim, a probabilidade de colisão, numa simulação PIC, é calculada baseada na distância percorrida pela partícula num determinado intervalo de tempo ($v_m \Delta t$), onde v_m é a velocidade da m -ésima partícula. A combinação

de simulação PIC com método de Monte Carlo para colisões, chamada de método PIC-MC, vem sendo utilizada com sucesso para simular descargas elétricas simétricas (p.ex., Morey, 1986; Vender e Boswell, 1988; Surendra et al., 1990).

Dentro do regime de interesse para descargas elétricas de RF, alguns processos de colisões são indispensáveis: colisões elásticas, de excitação e ionização entre elétrons e partículas neutras e colisões de espalhamento e troca de carga para íons e partículas neutras. Estes são os processos implementados nos códigos PDP1, PDC1 e PDS1 (Morey et al., 1990b; Alves et al., 1989b). Embora a simulação considere apenas variações em uma direção (x ou r), os processos de colisão têm um caráter tridimensional, no sentido em que se leva em conta as três componentes da velocidade. O modelo inclui seções de choque de laboratório, seções de choque diferenciais angulares e seções de choque diferenciais em energia para ionização a fim de determinar a partição de energia entre o elétron espalhado e o par íon-elétron que é criado. Supõe-se que o gás neutro tem densidade constante e uniforme no espaço. Considera-se que o gás neutro está à temperatura ambiente ($\approx 0.026\text{eV}$) e é regido pela lei dos gases perfeitos

$$p = n_n K_B T_n, \quad (4.1)$$

onde n_n é a densidade do gás, K_B é a constante de Boltzman, p é a pressão e T_n é a temperatura do gás em graus Kelvin. Dá-se como parâmetros de entrada p e T_n , e usa-se a equação

(4.1) para se obter a densidade do gás neutro que por sua vez é utilizada para determinar a probabilidade de haver ou não colisão, como ficará claro a seguir.

4.2 - COLISÕES ENTRE ELÉTRONS E PARTÍCULAS NEUTRAS

Quando uma partícula de massa m (elétron, íon ou átomo neutro) está se movendo com uma velocidade v e colide com um átomo de massa M , a energia cinética das partículas envolvidas se altera. Se não existe excitação ou ionização, a colisão é chamada de colisão *elástica*. A colisão é dita *inelástica* se o átomo torna-se excitado ou ionizado por adquirir energia da partícula incidente. De uma maneira geral pode-se dizer que uma colisão é inelástica quando existe conversão de energia cinética em potencial ou vice-versa. As leis de conservação de energia e momentum podem ser aplicadas para encontrar a energia e velocidade das partículas após a colisão se as condições antes da colisão são conhecidas. Quando um elétron se move num campo elétrico, colisões elásticas têm o efeito de tornar o movimento na direção do campo preferencial. O átomo envolvido na colisão praticamente não é afetado. Colisões de ionização têm o efeito de "sustentar" a descarga. Neste tipo de colisão, um elétron primário remove um elétron de um átomo produzindo um íon positivo e dois elétrons, que por sua vez podem ser acelerados pelo campo elétrico até terem energia suficiente para também produzirem ionização. Este processo de multiplicação mantém a descarga. Durante uma colisão de excitação a energia envolvida não é suficiente para remover um elétron do átomo, mas é suficiente para fazê-lo passar a um nível mais alto de energia, através da absorção

de energia. Neste processo de colisão o elétron primário perde energia cinética em valor igual ao do potencial de excitação e pode também sofrer deflexão.

Durante a simulação, a energia cinética do m -ésimo elétron é dada pela equação

$$E_m = \frac{1}{2} m_e v_m^2 = \frac{1}{2} m_e (v_{r_m}^2 + v_{\theta_m}^2 + v_{z_m}^2), \quad (4.2)$$

em PDC1 e em PDS1 v_{z_m} é substituída por v_{ϕ_m} . A probabilidade, P_m , de que o m -ésimo elétron tenha uma colisão com uma partícula neutra é dada por (Nasser, 1971)

$$P_m = 1 - e^{-n_n \sigma_T(E_m) v_m \Delta t}, \quad (4.3)$$

onde σ_T é a seção de choque total dada por

$$\sigma_T(E) = \sigma_{el}(E) + \sigma_{ex}(E) + \sigma_{ion}(E), \quad (4.4)$$

que é a soma das seções de choque para colisões elásticas, σ_{el} , colisões de excitação, σ_{ex} , e colisões de ionização, σ_{ion} .

Uma colisão ocorre se um número aleatório R ($R \in [0, 1]$), menor do que P_m , é gerado. Um outro número aleatório é então gerado para determinar que tipo de colisão ocorre, baseado nos seguintes critérios:

se $R \leq \frac{\sigma_{el}(E)}{\sigma_T(E)}$, a colisão será elástica;

se $\frac{\sigma_{el}(E)}{\sigma_T(E)} < R \leq \frac{(\sigma_{el}(E) + \sigma_{ex}(E))}{\sigma_T(E)}$, será de excitação e

se $\frac{(\sigma_{el}(E) + \sigma_{ex}(E))}{\sigma_T(E)} < R \leq P_m$, será de ionização.

Numa colisão elástica entre elétron e partícula neutra, o elétron incidente é apenas espalhado, mantendo sua energia. Numa colisão de excitação, a energia do elétron espalhado é dada por

$$E_{\text{espalhado}} = E_{\text{incidente}} - E_{\text{excitação}} . \quad (4.5)$$

Após uma colisão de ionização, a equação de balanço da energia é dada por

$$E_{\text{espalhado}} + E_{\text{ecriado}} + E_{\text{icriado}} = E_{\text{eincidente}} + E_{\text{neutra}} - E_{\text{ionização}} . \quad (4.6)$$

A energia do elétron espalhado é obtida usando a seção de choque diferencial de ionização na seguinte forma (a partir de uma forma simplificada da seção de choque usada por Peterson e Allen (1972))

$$E_{\text{espalhado}} = B(E) \tan \left(R \tan^{-1} \left(\frac{E_{\text{incidente}} + E_{\text{neutra}} - E_{\text{ionização}}}{2B(E)} \right) \right) , \quad (4.7)$$

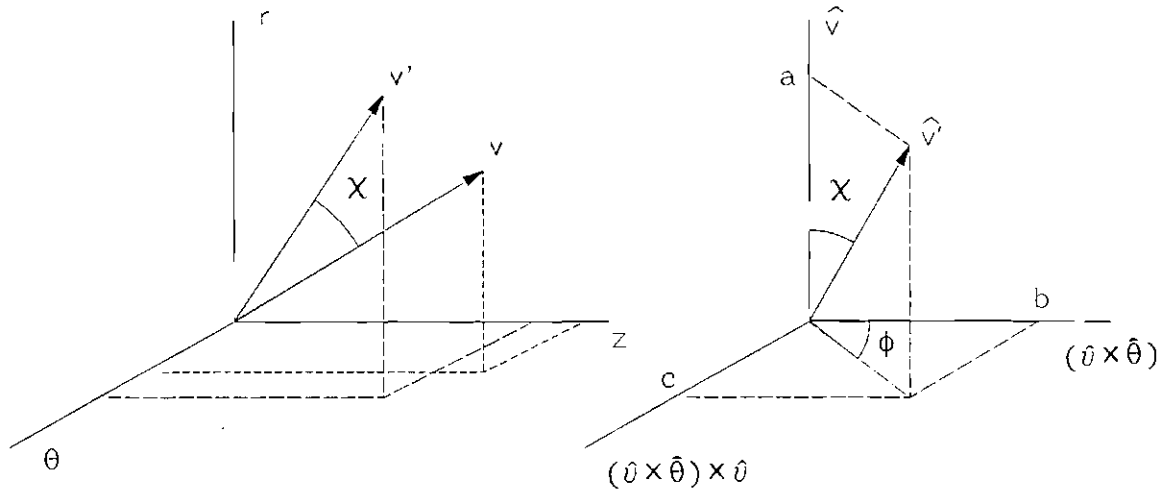
onde R é um número aleatório, já definido anteriormente e $B(E)$ é suposto ser 10 eV neste caso (Surendra et al., 1990). A energia do elétron criado é calculada por

$$E_{\text{criado}} = \frac{m_i}{m_i + m_e} (E_{\text{incidente}} + E_{\text{neutra}} - E_{\text{ionização}} - E_{\text{espalhado}}). \quad (4.8)$$

Finalmente, a energia do íon criado pode ser obtida a partir da equação do balanço de energia (4.6). Uma vez que a energia das partículas é determinada, as novas componentes da velocidade podem ser determinadas usando a seguinte seção de choque diferencial de colisão (Den Hartog et al., 1988)

$$\cos \chi = \frac{2 + E - 2(1 + E)^R}{E}, \quad (4.9)$$

onde χ é o ângulo entre as velocidades de incidência e de espalhamento, E é a energia da partícula espalhada, e R é um número aleatório tal que $R \in [0, 1]$. A Figura 4.1 mostra a geometria das velocidades incidente (v) e espalhada (v'), o ângulo entre elas (χ) e o sistema de referência usado para obter as componentes da velocidade após a colisão. O ângulo ϕ é escolhido aleatoriamente, tal que $\phi \in [0, 2\pi]$.



$$v_r' = |v'| (\hat{v}_r \cos \chi - \hat{v}_z \sin \chi \cos \phi - \hat{v}_r \hat{v}_\theta \sin \chi \sin \phi)$$

$$v_\theta' = |v'| (\hat{v}_\theta \cos \chi + (\hat{v}_r^2 \hat{v}_z^2) \sin \chi \sin \phi)$$

$$v_z' = |v'| (\hat{v}_z \cos \chi + \hat{v}_r \sin \chi \cos \phi - \hat{v}_\theta \hat{v}_z \sin \chi \sin \phi)$$

$$a = \cos \chi$$

$$b = \sin \chi \cos \phi$$

$$c = \sin \chi \sin \phi$$

Fig. 4.1 - Sistema de referência para o cálculo das velocidades das partículas após colisão.

4.3 - COLISÕES ENTRE ÍONS E PARTÍCULAS NEUTRAS

Assim como elétrons podem colidir com partículas neutras, íons e partículas neutras podem colidir entre si elástica ou inelasticamente por troca de cargas ou ionização. Existem dois tipos de troca de cargas. O primeiro é chamado de transfêrencia (ou troca) ressonante simétrica de carga ,

e é a troca de cargas entre um ion atômico e o seu parente neutro. A reação pode ser esquematizada da seguinte maneira: $A + A^+ \rightarrow A^+ + A$. O segundo ocorre entre ions moleculares e gases moleculares. Neste caso a troca de cargas ocorre entre sistemas diferentes, exemplificada com a seguinte reação $B^- + C \rightarrow B + C^+$ e é chamada de transfêrencia assimétrica de carga. Embora transferência simétrica de cargas seja apenas um processo de troca de momentum na região de luminescência, que tem campo elétrico praticamente nulo, esta torna-se importante na região da bainha de plasma por alterar a distribuição de energia de ions e partículas neutras. Uma vez que o segundo processo é menos eficiente (Chapman, 1980, pág.39), apenas o primeiro tipo de troca de cargas foi introduzido no modelo computacional. As leis de conservação de energia e momentum são aplicadas para determinar as velocidades das partículas após a colisão a partir das condições antes da colisão. No modelo computacional consideram-se dois tipos possíveis de colisões entre ions e partículas neutras: espalhamento (elástica) e troca de cargas.

Na simulação, a energia cinética do m -ésimo ion é dada por

$$E_m = \frac{1}{2} m_i v_m^2 = \frac{1}{2} m_i (v_{r_m}^2 + v_{\theta_m}^2 + v_{z_m}^2) . \quad (4.10)$$

Em PDC1 e em PDS1 v_{z_m} é substituída por v_{ϕ_m} .

A probabilidade P_m , de que o m -ésimo ion sofra uma colisão com uma partícula neutra é dada por

$$P_m = 1 - e^{-n_n \sigma_T(E_m) v_m \Delta t} \quad (4.11)$$

onde σ_T é a seção de choque total dada pela soma das seções de choque para troca de carga e espalhamento (colisões elásticas), ou seja,

$$\sigma_T = \sigma_{el}(E) + \sigma_{tc}(E). \quad (4.12)$$

Novamente uma colisão ocorre quando um número aleatório R ($R \in [0, 1]$) é menor que P_m . Um outro número aleatório é gerado para determinar que tipo de colisão ocorre, baseado no seguinte critério:

se $R \leq \frac{\sigma_{el}(E)}{\sigma_T(E)}$, a colisão será elástica e

se $\frac{\sigma_{el}(E)}{\sigma_T(E)} < R \leq P_m$, será de troca de carga.

Supõe-se que as colisões elásticas entre íons e partículas neutras são isotrópicas, isto é, não existe uma direção preferencial de espalhamento e que íons e partículas neutras têm massas iguais. Com estas suposições a energia do íon espalhado é dada por

$$E_{\text{espalhado}} = E_{\text{incidente}} \cos^2 \chi$$

onde χ é o ângulo entre as velocidades do íon incidente e do íon espalhado, e $\chi \in [0, \pi]$, conforme mostra a Figura 4.1.

No caso de uma colisão entre íon e partícula neutra do tipo transferência de carga, uma partícula neutra é escolhida aleatoriamente e é ionizada. Supõe-se para a partícula neutra uma distribuição Gaussiana das velocidades e uma dada temperatura. Após calcular-se a energia do íon, uma direção aleatória é escolhida de maneira a determinar as novas componentes da velocidade.

4.4 - MODELOS UTILIZADOS PARA AS SEÇÕES DE CHOQUE

O conceito de seção de choque de colisão é usado neste modelo para determinar a probabilidade de ocorrer uma colisão ou não. As seções de choque usadas no código computacional são obtidas através de um ajuste para os dados obtidos experimentalmente (por ex. Brown, 1967).

A forma geral das seções de choque para todos os processos de colisões entre elétrons e partículas neutras é mostrada na Figura 4.2 e uma expressão genérica é dada por

$$\sigma(E) = 0 \quad \text{para } E < E_0, \quad (4.13)$$

$$\sigma(E) \propto E \quad \text{para } E_0 < E < E_1, \quad (4.14)$$

$$\sigma(E) = \sigma_{\max} \quad \text{para } E_1 < E < E_2 \text{ e} \quad (4.15)$$

$$\sigma(E) \propto \frac{\ln(E)}{E} \quad \text{para } E_2 \leq E. \quad (4.16)$$

onde E_0 é a energia mínima necessária para que o processo de colisão ocorra, E_1 , E_2 e E_3 são fornecidos como parâmetros de entrada e dependem do gás que se deseja simular.

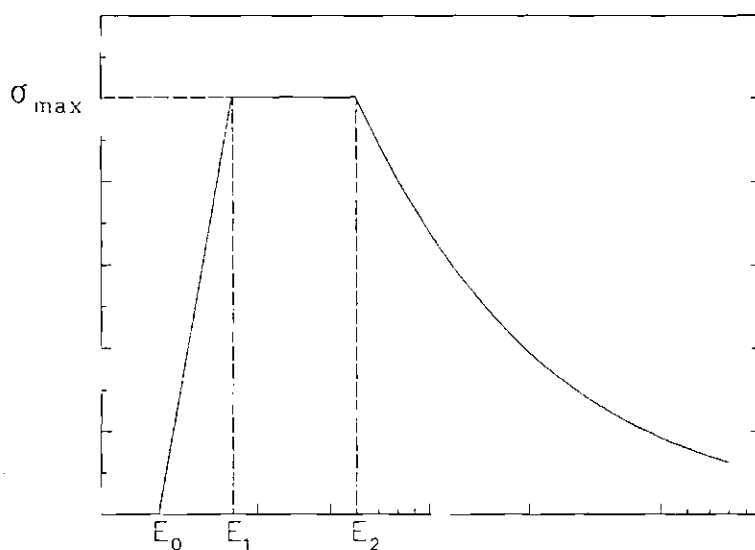


Fig. 4.2 - Forma geral das seções de choque para colisões entre elétrons e partículas neutras em função da energia E das partículas incidentes.

Supõe-se que as seções de choque para colisões entre íons e partículas neutras é da forma $\sigma = a + b/\sqrt{E}$, como mostrado na Figura 4.3, onde a e b são determinados a partir de um ajuste para os dados experimentais. Este ajuste empírico parece modelar bem as seções de choque experimentais para hélio, argônio e neônio.

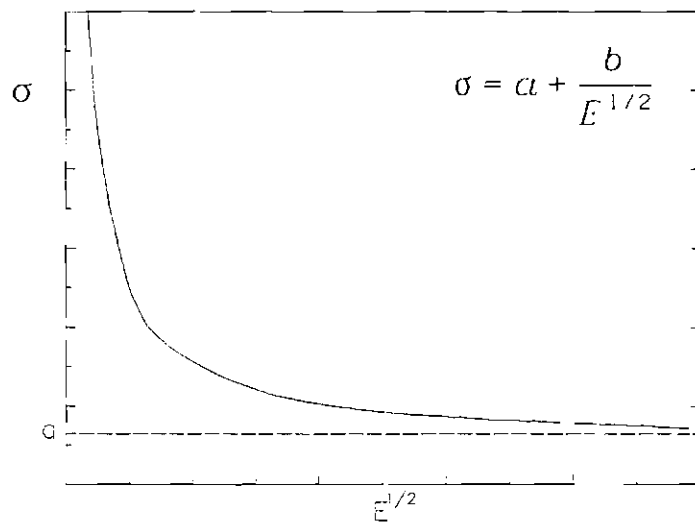


Fig. 4.3 - Forma geral das seções de choque para colisões entre íons e partículas neutras em função da raiz quadrada da energia E das partículas incidentes.

CAPÍTULO 5

APLICAÇÃO DOS CÓDIGOS PDC1 E PDS1 AO ESTUDO DE DESCARGAS ELÉTRICAS ASSIMÉTRICAS

5.1 - INTRODUÇÃO

Descargas elétricas capacitivas têm sido largamente usadas nos últimos anos para o processamento de materiais na indústria eletrônica. As descargas são geralmente assimétricas, ou seja, o eletrodo ao qual se aplica um potencial, V_{RF} , que varia no tempo com uma frequência dentro do intervalo de rádio-frequência, e o eletrodo aterrado têm áreas diferentes, A_a e A_b respectivamente, com A_a tipicamente menor que A_b . Quando o sistema se torna assimétrico, V_{RF} torna-se também assimétrico, como se pode ver na Figura 5.1. Esta assimetria determina a magnitude da voltagem V_a (a energia de bombardeamento do íon) no eletrodo ao qual se aplica o potencial, a qual é um parâmetro crítico para o processamento de materiais. A voltagem V_a é a diferença entre os valores médios num período de RF do potencial no eletrodo carregado ("powered") e do potencial no plasma, V_p . Esta diferença no eletrodo aterrado é designada por V_b .

Um modelo simples, supondo uma descarga onde os íons são não colisionais, leva à seguinte relação entre as razões de voltagem e as áreas dos eletrodos (Chapman, 1980)

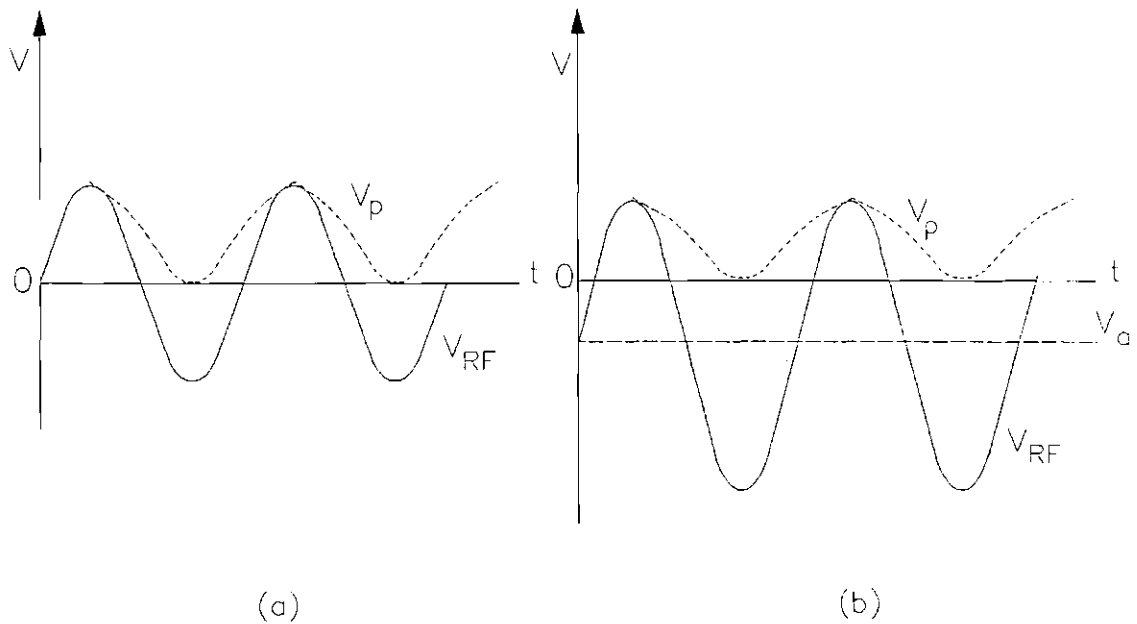


Fig. 5.1 - Voltagens, V_{RF} e V_p , numa descarga elétrica RF:
(a) Sistema simétrico, (b) Sistema assimétrico.

$$V_a/V_b = (A_b/A_a)^4. \quad (5.1)$$

Medidas experimentais, no entanto, indicam uma dependência muito mais suave entre V_a/V_b e a razão entre as áreas (Horwitz, 1983; Köhler et al., 1985).

Nos últimos anos, alguns modelos analíticos têm sido desenvolvidos para determinar a razão entre as voltagens através das bainhas, V_a/V_b , em função da razão entre as áreas dos eletrodos. Pointu (1987) desenvolveu um modelo baseado em teoria de sondas que inclui o potencial flutuante e obteve

resultados que estão de acordo com alguns resultados experimentais. Neste modelo supõe-se que os íons são não colisionais na região das bainhas e que as densidades de corrente dos íons são iguais nos dois eletrodos.

Uma vez que no intervalo de pressão de interesse, $p \approx 10-300$ mTorr, o caminho livre médio para colisões entre íons e partículas neutras, λ_i , pode ser pequeno comparado com as dimensões da bainha, estas colisões devem ser incluídas nos modelos. Lieberman desenvolveu dois modelos unidimensionais para descargas elétricas assimétricas: o primeiro deles usa cascas esféricas concêntricas como eletrodos (Lieberman, 1989) e o outro considera diferentes arranjos envolvendo cilindros finitos (Lieberman e Savas, 1990), baseados em arranjos experimentais. Estes modelos incorporam várias suposições a respeito dos processos físicos na bainha e na região de luminescência e produzem resultados que estão de acordo com alguns resultados experimentais.

Neste capítulo são apresentados os resultados sobre a dependência da razão entre as voltagens através das bainhas, V_a/V_b , com relação à razão entre as áreas dos eletrodos, obtidos com os códigos PDC1 e PDS1 descritos nos capítulos anteriores. Estes resultados são também comparados com um modelo analítico desenvolvido, que inclui a hipótese de ionização localizada, observada na maioria das simulações (Alves et al., 1990).

5.2 - MODELO ANALÍTICO

Nos modelos citados anteriormente, supõe-se que a maior parte da diferença de voltagem aparece entre regiões tênues próximas aos eletrodos, denominadas bainhas, com espessuras s_a e s_b . Esta suposição é válida para descargas ditas capacitivas, ou seja, as bainhas são primariamente capacitivas, devido à carga espacial dos íons nas bainhas e à carga superficial negativa que se acumula nas paredes adjacentes. O capacitor externo, C_B , em geral, tem uma impedância que é desprezível no intervalo da frequência acionadora, quando comparada com a impedância das bainhas.

Supõe-se ainda que entre as bainhas existe um plasma térmico com temperatura T_e uniforme (ou a região de luminescência), com uma espessura $d \geq s$, que serve para manter a descarga através da produção de íons, que contrabalança a perda de partículas para os eletrodos. Estes processos de produção e perdas determinam o perfil de densidade do plasma, e em particular, as densidades n_{sa} e n_{sb} na região das bainhas, que não são iguais como muitas vezes se supõe. Estas densidades, por sua vez, determinam a espessura das bainhas e as voltagens V_a e V_b .

A separação entre bainhas e a região de luminescência é de algum modo arbitrária. O critério mais comumente usado é o critério da velocidade de Bohm, $u > u_b$ (Bittencourt, 1986), onde $u = (eT_e/M)^{1/2}$ é a velocidade de Bohm (ou velocidade acústico iônica), e/M é a razão carga-massa para o íon, e T_e é dado em eV. A posição da bainha é assim a superfície próxima às paredes onde $u = u_b$. Este é um diagnóstico que não

se obtém computacionalmente. A posição da bainha, $r_{sa(b)}$, é obtida a partir da variação espacial e temporal do potencial, como mostra a Figura 5.2. Considera-se a posição da bainha aquela onde o potencial passa a ser aproximadamente constante no espaço. Esta definição baseia-se no fato de que a região de luminescência não pode suportar uma diferença de potencial maior do que algumas vezes a temperatura do plasma, T_e , devido a sua alta condutividade.

A relação entre a amplitude da voltagem de RF, $\tilde{V}_a$, e a diferença de voltagem de CC, V_a , não é simples (Godyac, 1986). Se a voltagem através da bainha é da forma $V = V_{cc} + V_0 \sin \omega t$, e os elétrons têm uma distribuição maxweliana de velocidades (Keller e Pennebaker, 1979), pode-se escrever (Garscadden e Emeleus, 1962)

$$V_a = T_e \ln(I_0(\tilde{V}_a/T_e)) + \frac{T_e}{2} \ln(M/2\pi m), \quad (5.2)$$

onde I_0 é a função modificada de Bessel. Usando-se o fato de que $\tilde{V}_{a(b)} \gg T_e$, pode-se obter a seguinte relação (Lieberman e Savas, 1990)

$$\tilde{V}_{a(b)} = V_{a(b)} - V_{fa(b)} \quad (5.3)$$

onde

$$V_{fa(b)} = \frac{T_e}{2} \ln \left(\frac{MT_e}{4\pi^2 m \tilde{V}_{a(b)}} \right) \quad (5.4)$$

é o potencial flutuante (ou potencial do plasma). A Figura 5.2 mostra a variação típica do potencial em função da posição durante um ciclo de RF, para eletrodos infinitos cilindricos e mostra como as definições usadas neste trabalho são obtidas a partir dos resultados computacionais.

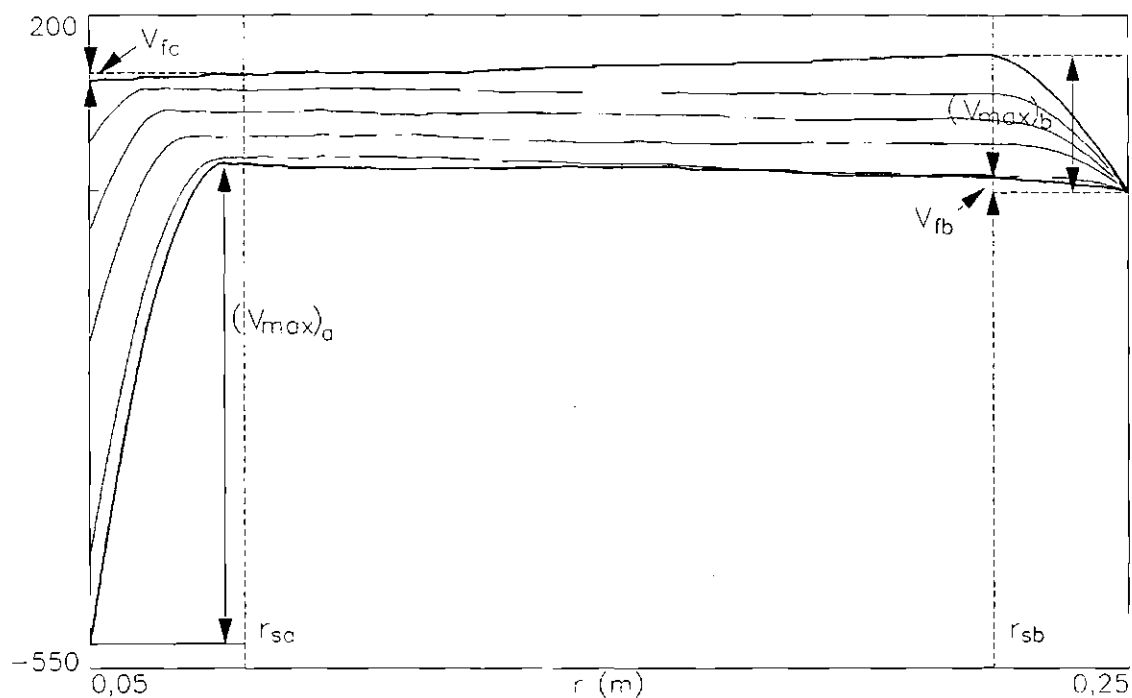


Fig. 5.2 - Variação típica do potencial em função da posição durante um periodo de RF para uma descarga assimétrica.

- Este resultado, em particular, foi obtido com PDC1, usando argônio como gás neutro de fundo a uma pressão de 30 mTorr e $A_b/A_a=5$. A Figura ilustra como os valores de $V_{fa(b)}$ e $V_{a(b)} = ((V_{max})_{a(b)} - V_{fa(b)})/2$ são obtidos a partir das simulações.

Os potenciais $(V_{\max})_{a(b)}$ são obtidos tendo como referência o potencial de plasma, $(V_{\max})_{a(b)} = \Phi_{a(b)} - \Phi_p$, como mostra a Figura 5.2. Φ_a é o potencial no eletrodo interno no instante $3\tau_{RF}/4$ e Φ_b é o potencial no eletrodo externo no instante $\tau_{RF}/4$ supondo-se que a voltagem de RF aplicada é proporcional a $\sin \omega_0 t$, onde $\tau_{RF} = 2\pi/\omega_0$. O potencial flutuante é a diferença entre o potencial no eletrodo a ou b , e o potencial no contorno plasma-bainha, indicado na Figura 5.2 por $V_{sa(b)}$, nos instantes iguais a $\tau_{RF}/4$ e $3\tau_{RF}/4$, respectivamente. Os potenciais $V_{a(b)}$ são finalmente obtidos por

$$V_{a(b)} = \frac{(V_{\max})_{a(b)} - V_{sa(b)}}{2}. \quad (5.5)$$

De um modo geral, para bainhas capacitivas a altas voltagens, pode-se supor que $\tilde{V}_{fa(b)} \ll V_a$ e $\tilde{V}_a \approx V_a$. Neste limite pode-se supor que a densidade de corrente de RF, J , relaciona-se com a voltagem de CC e a profundidade da bainha por uma escala capacitiva dada por:

$$J_{a(b)}(\bar{x}) \propto \frac{V_{a(b)}}{S_{a(b)}(\bar{x})}. \quad (5.6)$$

onde $\bar{x}$ especifica a posição na superfície do eletrodo e supõe-se que a voltagem é independente da posição (Lieberman e Savas, 1990). A corrente total de RF fluindo através do eletrodo ao qual se aplica o potencial é dada por

$$I_a \propto \int_{A_a} J_a(\bar{x}) d^2x. \quad (5.7)$$

A relação entre a densidade $n_{sa(b)}(\bar{x})$ na região que limita o plasma e a bainha, a diferença de voltagem de CC entre o plasma e o eletrodo, $V_{a(b)}$, e a profundidade da bainha, $s_{a(b)} = |r_{sa(b)} - r_{a(b)}|$, é determinada pela dinâmica dos íons. Se a pressão é baixa o suficiente para que o caminho livre médio entre íons e partículas neutras seja maior que a profundidade da bainha, pode-se dizer que os íons são não colisionais e neste caso pode-se usar a lei de Child-Langmuir (por exemplo Chen, 1965)

$$n_{sa(b)}(\bar{x}) \propto \frac{V_{a(b)}^{3/2}}{s_{a(b)}^2(\bar{x})}. \quad (5.8)$$

Lieberman (1989), supondo que processos de transferência ressonante de cargas (veja Capítulo 4) são predominantes com relação a outros processos colisionais para os íons, obteve a seguinte relação

$$n_{sa(b)}(\bar{x}) \propto \frac{V_{a(b)}^{3/2}}{s_{a(b)}^{5/2}(\bar{x})}. \quad (5.9)$$

Cobine (1941), supondo que os íons têm uma mobilidade constante, o que significa supor que o tempo médio entre colisões é constante (apenas colisões elásticas são consideradas, ou seja, há apenas espalhamento), obteve

$$n_{sa(b)}(\bar{x}) \propto \frac{V_{a(b)}^2}{s_{a(b)}^3(\bar{x})}. \quad (5.10)$$

A partir dos modelos de colisionalidade da bainha, obtém-se uma expressão para $s_{a(b)}$ em função da densidade de

corrente de RF e o potencial de CC. Esta expressão é introduzida na Equação 5.6. Devido à continuidade da corrente total de RF, pode-se escrever que $I_a = I_b$ e obter

$$\left(\frac{V_a}{V_b}\right)_0 = \left(\frac{\int_{A_b} n_{sb}^p(\bar{x}) d^2x}{\int_{A_a} n_{sa}^p(\bar{x}) d^2x}\right)^q \quad (5.11)$$

Para grandes razões de área, o potencial através da bainha próxima ao maior eletrodo é baixo e o potencial flutuante não pode ser negligenciado. Neste caso, $V_{a(b)}$, nas equações (5.6), (5.9) e (5.10), devem ser substituídos por $\tilde{V}_{a(b)}$. Seguindo o mesmo raciocínio anterior, obtém-se

$$\frac{V_a}{V_b} = \left(\frac{1 - V_{fb}/V_b}{1 - V_{fa}/V_a}\right)^q \left(\frac{V_a}{V_b}\right)_0 \quad (5.12)$$

onde

V_a e V_b relacionam-se com a voltagem pico a pico $\tilde{V}_{pp}$ aplicada a descarga por

$$V_a + V_b = V_{fa} + V_{fb} + \tilde{V}_{pp}/2 \quad (5.13)$$

e p e q dependem do modelo utilizado para descrever o comportamento dos íons, conforme mostra a Tabela 1.

Tabela 5.1

Valores numéricos de p e q , de acordo com o modelo de colisão para os íons.

Modelo para os íons	p	q	$\frac{q}{1+p+q}$
Não colisionais	1/2	4	8/11 (0,7273)
Espalhamento elástico	1/3	3	9/13 (0,6923)
Troca ressonante de carga	2/5	5/2	25/39 (0,641)

- Expoentes relacionados com os vários modelos para a colisionalidade dos íons na bainha e com a relação de ordem zero entre a razão das voltagens, $(V_a/V_b)_0$, e a razão das áreas.

A maioria dos resultados obtidos por simulação indicam que a taxa de ionização é mais alta próxima a região das bainhas. Este resultado é mostrado na Figura 5.3(b) para uma simulação usando eletrodos cilíndricos infinitos, argônio como gás de fundo a uma pressão de 30 mTorr. Esta ionização localizada é devida ao aquecimento dos elétrons produzido pela oscilação das bainhas e ocorre quando o caminho livre médio para ionização por elétrons é menor que o comprimento da descarga. A Figura 5.3(a) mostra o valor médio da densidade de carga sobre um período de RF para os elétrons ao longo do sistema, $\overline{qn_a}$. O número de ionizações ocorrendo numa célula

da grade espacial por intervalo de tempo é então dada por $\overline{n_e} v_{iz} V_j$, onde V_j é o volume da célula j e v_{iz} é a taxa de ionização mostrada na Figura 5.3(b). Esta taxa é obtida cumulativamente, durante o tempo da simulação (aproximadamente 100 períodos de RF, τ_{RF}).

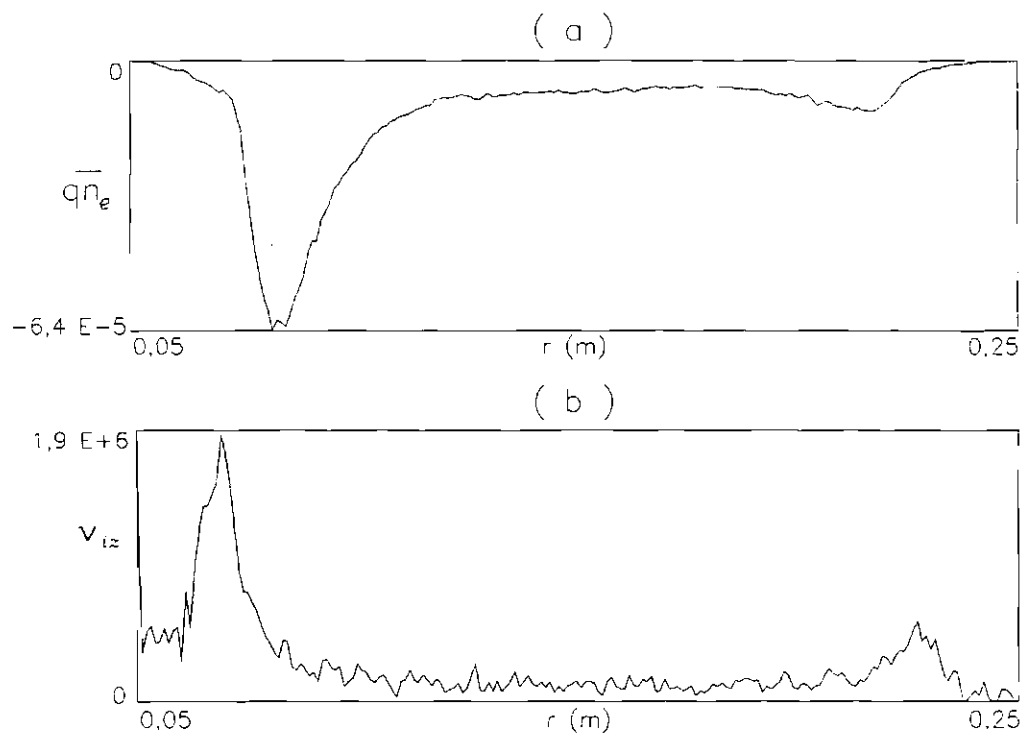


Fig. 5.3 - (a) Variação espacial típica do valor médio, sobre um período de RF, da densidade de carga eletrônica. (b) Taxa de ionização, v_{iz} , para uma descarga assimétrica cilíndrica (acumulada durante toda a rodada).

- Estes resultados foram obtidos usando argônio como gás neutro de fundo (íons colisionais) a uma pressão de 30 mTorr e $A_b / A_a = 5$.

Supondo que a ionização localizada nas regiões das bainhas é dominante com relação a ionização em todo o sistema, obtém-se que (Lieberman, 1989)

$$\frac{n_{sa}}{n_{sb}} = \frac{V_a}{V_b} \quad (5.14)$$

A Equação (5.14) fornece uma variação da densidade na bainha em função do potencial de CC. Esta expressão pode ser introduzida na Equação (5.11) e fornecer uma relação de ordem zero entre a razão dos potenciais de CC e a razão entre as áreas dos eletrodos dada por

$$\left(\frac{V_a}{V_b} \right)_0 = \left(\frac{A_b}{A_a} \right)^{\frac{q}{1+p+q}} \quad (5.15)$$

A Tabela 1 mostra também os valores do expoente na Equação (5.15), $q/(1+p+q)$, para os diversos modelos para os íons na bainha.

A partir das Equações (5.12), (5.13) e (5.15) obtém-se uma equação para V_a , em função da razão de áreas, do potencial flutuante (T_e e m/M) e do potencial pico-a-pico que é resolvida numericamente. Obtém-se, assim, valores de V_a/V_b em função de A_b/A_a . Esta equação é resolvida para cada uma das razões de área utilizadas, considerando-se a temperatura para obter os potenciais flutuantes a que é obtida a partir das simulações e levando-se em conta o regime colisional dos íons através dos parâmetros p e q . Os resultados obtidos encontram-se na seção seguinte.

O valor de T_e é obtido a partir das simulações, usando a distribuição de velocidades dos elétrons. A Figura 5.4 mostra o espaço de fase para os ions e elétrons, após aproximadamente 100 períodos de RF, para uma descarga elétrica assimétrica, esférica, com razão entre as áreas igual a 1,3, tendo como gás de fundo hidrogênio, supondo ions não colisionais. A partir do espaço de fase para os elétrons, supõe-se que a diferença entre a máxima e a mínima velocidade, incluindo sinais, é da ordem de $3v_i$, onde $v_i = (eT_e/m)^{1/2}$. Uma vez estabelecido o valor de $3v_i$ obtém-se T_e .

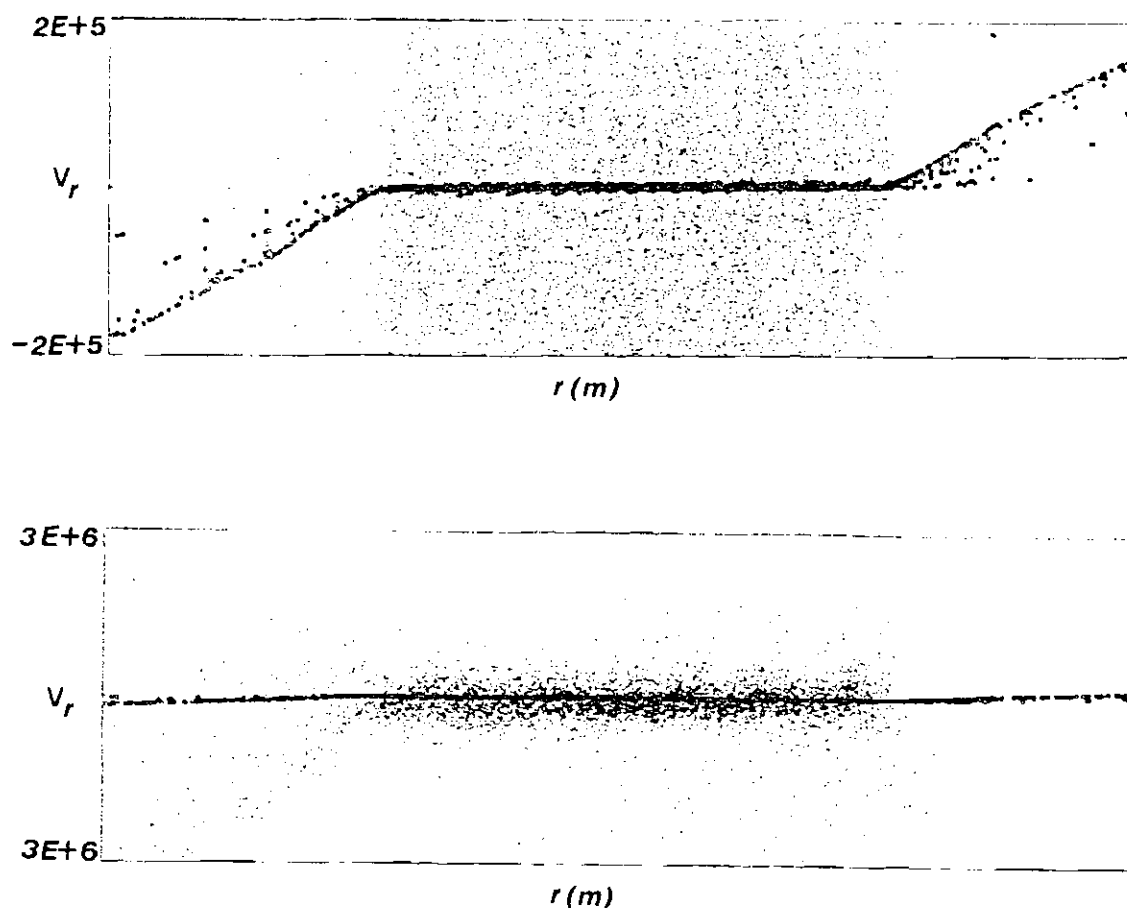


Fig. 5.4 - Espaço de fase para íons e elétrons num plasma de hidrogênio.

- Nesta simulação os íons foram considerados não colisionais, numa descarga elétrica assimétrica (esférica), com razão entre as áreas igual a 1,3.

5.3 - RESULTADOS OBTIDOS PARA A RAZÃO ENTRE AS VOLTAGENS.

Diversas simulações foram feitas usando PDC1 e PDS1 para diferentes razões de áreas, usando dois tipos de gás

neutro de fundo (argônio e hidrogênio) a uma pressão de 30 mTorr, incluindo ou não colisões entre íons e partículas neutras. A razão entre as áreas, definida por A_b/A_a , varia entre 1,3 e 15. Os raios dos eletrodos interno e externo foram escolhidos de maneira a manter o mesmo comprimento de plasma, l , na direção radial, onde $l = r_b - r_a$ (20 cm) para todas as razões de área. A escolha do valor de l baseia-se em experimentos e em resultados prévios de simulação. O comprimento do sistema deve ser o de alguns caminhos livre médios para colisões entre elétrons e partículas neutras, de modo a sustentar a descarga. A capacitância externa foi escolhida de tal maneira a ter uma impedância, à frequência acionadora de RF, desprezível quando comparada à capacitância de vácuo da descarga.

Para a simulação usou-se um potencial aplicado de 500 V, uma frequência de RF igual a 1×10^7 Hertz e uma pressão de 30 mTorr. Como foi dito anteriormente, a pressão e a temperatura do gás neutro são usadas para determinar sua densidade, que por sua vez é usada para determinar a probabilidade que uma partícula sofra colisão. Considera-se que a densidade das partículas neutras é uniforme no espaço e constante no tempo. A temperatura eletrônica final depende apenas do gás usado e pressão, independentemente da temperatura inicial utilizada para o plasma.

As Figuras 5.2 e 5.5 mostram variações típicas do potencial, Φ , em função da posição e em diferentes instantes dentro de um período de RF para eletrodos cilíndricos (argônio) e esféricos (hidrogênio), respectivamente. Observe-se que o potencial no eletrodo externo é o potencial de referência e

é, portanto, sempre nulo. Nos resultados apresentados neste trabalho, colisões de espalhamento, excitação e ionização entre elétrons e partículas neutras estão sempre presentes na simulação, embora colisões entre íons e partículas neutras nem sempre estejam presentes. As características do plasma serão determinadas pelo regime de colisionalidade nas bainhas.

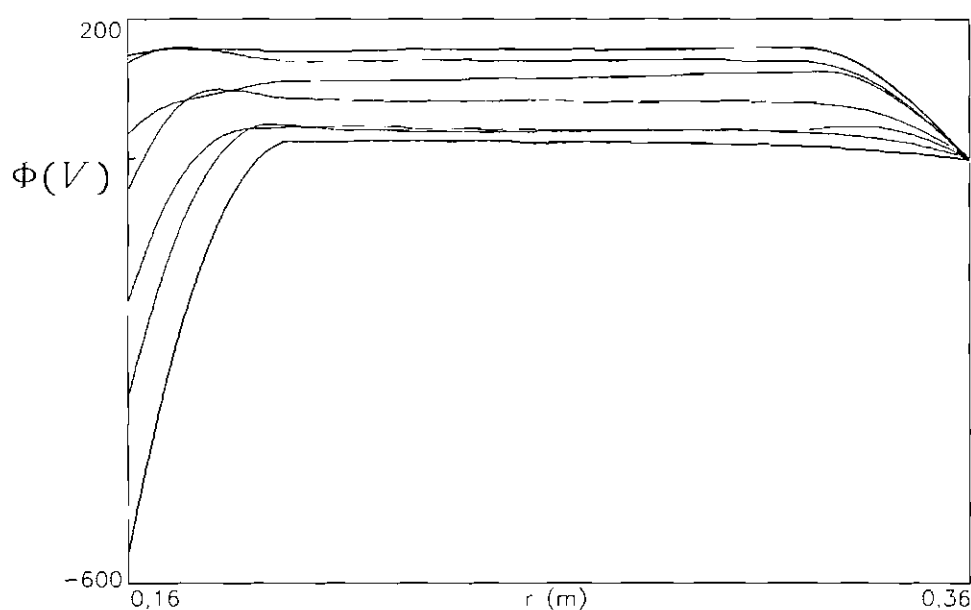


Fig. 5.5 - Variação espacial do potencial em diferentes instantes num período de RF.

- Este resultado foi obtido usando PDS1 e tendo hidrogênio (íons não colisionais) como gás neutro de fundo a uma pressão de 30 mTorr e $A_b/A_a = 5$.

5.3.1 - ÍONS NAO COLISIONAIS

Diversas simulações foram feitas, para diferentes razões de áreas, usando dois tipos de gás neutro de fundo (argônio e hidrogênio) a uma pressão de 30 mTorr, não incluindo colisões entre íons e partículas neutras.

As Figuras 5.6 e 5.7 mostram V_a/V_b para diversos valores de A_b/A_a obtidos a partir destas simulações usando PDC1. Estas figuras mostram também os resultados obtidos com o modelo analítico supondo ionização localizada. Os pontos para o modelo analítico foram obtidos resolvendo as Equações (5.12), (5.13) e (5.15) numericamente, supondo que os íons na bainha são não colisionais, o que leva a $p=1/2$ e $q=4$. As curvas mostradas no gráfico são as que melhor se ajustam aos pontos e são dadas pelas seguintes equações

$$\frac{V_a}{V_b} = 1,1045 \left(\frac{A_b}{A_a} \right)^{0.7022}, \quad (5.17)$$

para a simulação usando hidrogênio, e

$$\frac{V_a}{V_b} = 1,0005 \left(\frac{A_b}{A_a} \right)^{0.7281}, \quad (5.18)$$

para os pontos teóricos. Usando íons de argônio não colisionais, obtém-se para a simulação

$$\frac{V_a}{V_b} = 1,0234 \left(\frac{A_b}{A_a} \right)^{0.7113}, \quad (5.19)$$

e para os pontos teóricos,

$$\frac{V_a}{V_b} = 1,0051 \left(\frac{A_b}{A_a} \right)^{0,7058} . \quad (5.20)$$

Observe-se que as Equações (5.18) e (5.20) diferem ligeiramente da Equação (5.15) com o expoente dado na Tabela 1. A diferença é devida à inclusão do potencial flutuante (não incluído em 5.15) nos cálculos analíticos numéricos. Observe-se também que a diferença é maior para o argônio, uma vez que a temperatura eletrônica é maior para este do que para o hidrogênio. As simulações mostram que $T_e \approx 0.4 - 0.6 \text{ eV}$ para hidrogênio e $T_e \approx 2 - 3 \text{ eV}$ para argônio.

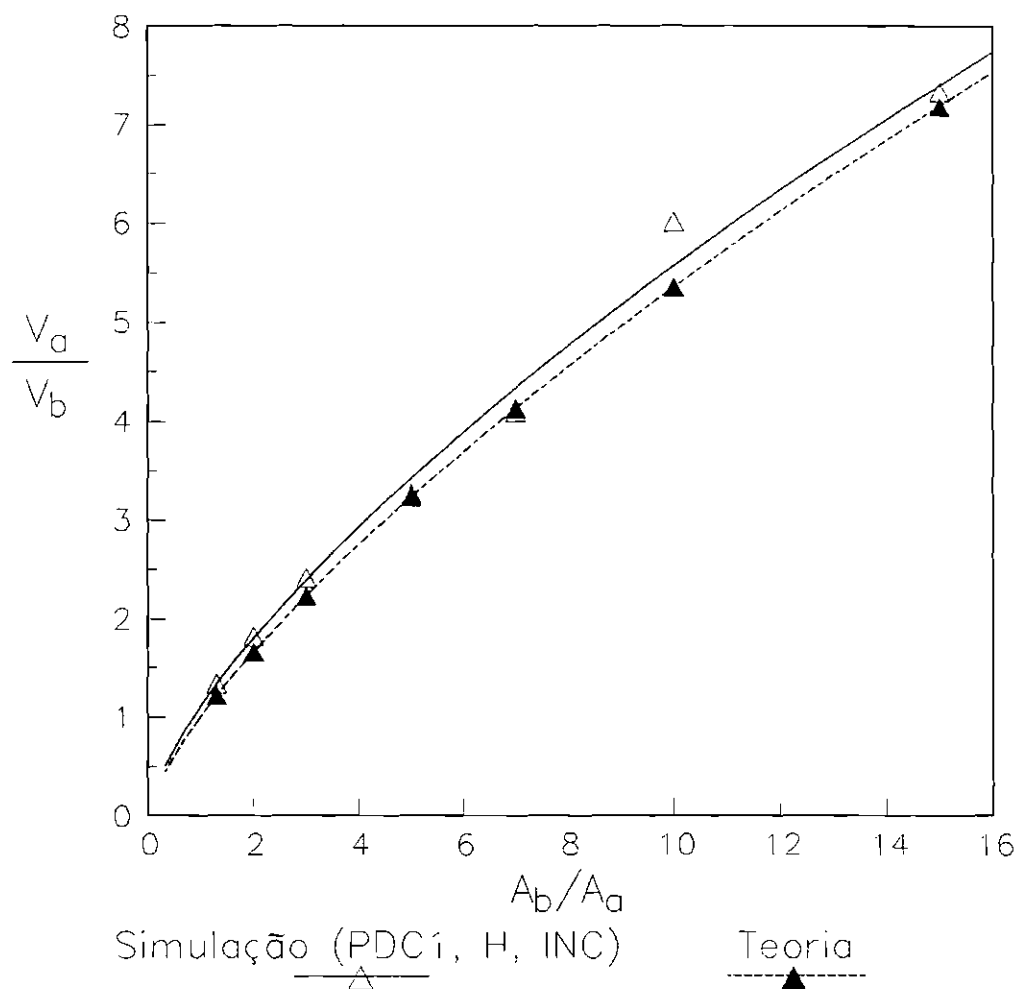


Fig. 5.6 - V_a/V_b em função de A_b/A_a para eletrodos cilíndricos, com hidrogênio (íons não colisionais) como gás neutro a uma pressão de 30 mTorr. - Para se obter os pontos teóricos supõe-se uma lei de bainha com íons não colisionais. As curvas representam o melhor ajuste para os pontos.

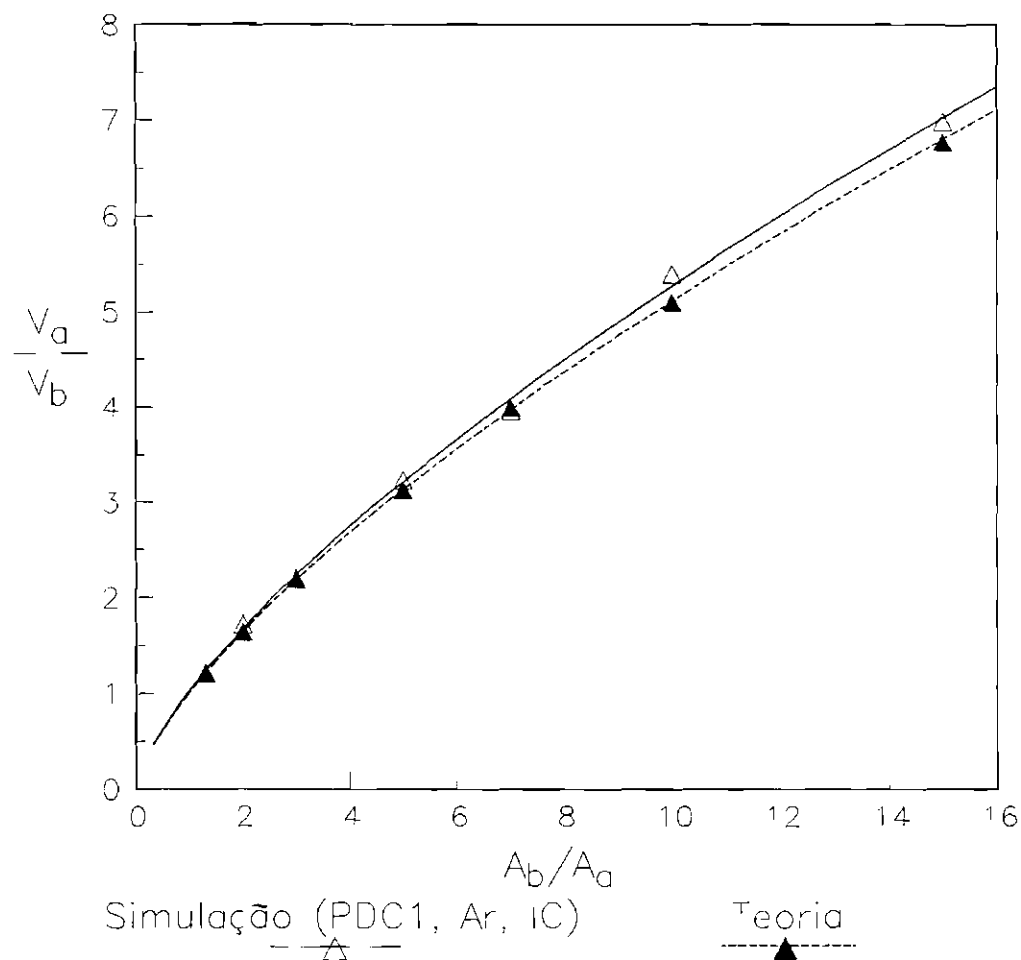


Fig. 5.7 - V_a/V_b em função de A_b/A_a para eletrodos cilíndricos, com argônio (íons não colisionais) como gás neutro a uma pressão de 30 mTorr.

- Para se obter os pontos teóricos supõe-se uma lei de bainha com íons não colisionais. As curvas representam o melhor ajuste para os pontos.

A Figura 5.8 mostra V_a/V_b para diversos valores de A_b/A_a , obtidos a partir de simulações utilizando PDS1, com

hidrogênio como gás de fundo a uma pressão de 30 mTorr. Esta figura mostra também os resultados obtidos com o modelo analítico supondo ionização localizada. Os pontos para o modelo analítico foram obtidos resolvendo as Equações (5.12), (5.13) e (5.15) numericamente, supondo que os íons na bainha são não colisionais, o que leva a $p=1/2$ e $q=4$. A curva que melhor ajusta os pontos obtidos por simulação é dada por

$$\frac{V_a}{V_b} = 0,7623 \left(\frac{A_b}{A_a} \right)^{1,2623} \quad (5.21)$$

A curva teórica é dada pela Equação 5.15 com $p=1/2$ e $q=4$.

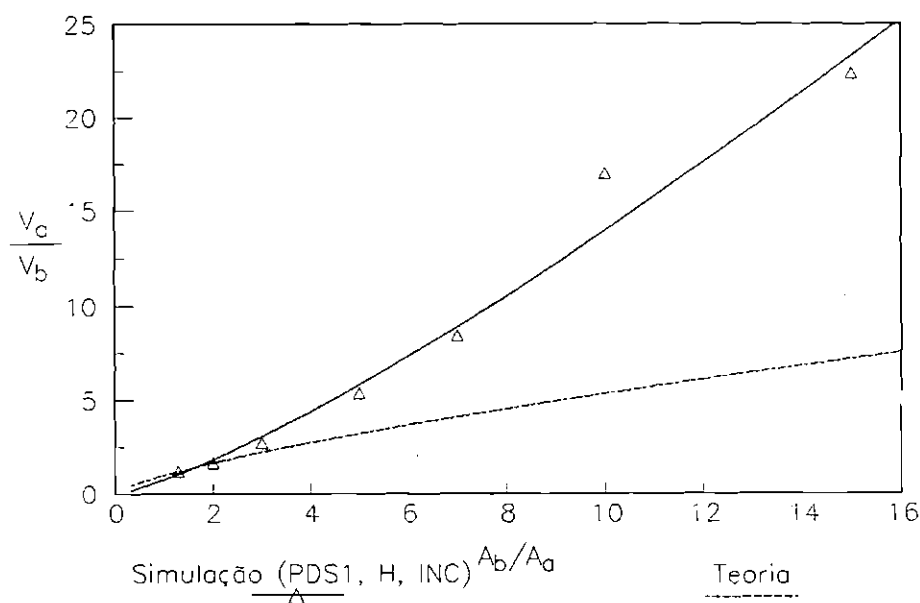


Fig. 5.8 - V_a/V_b em função de A_b/A_a para eletrodos esféricos, com hidrogênio (íons não colisionais) como gás neutro a uma pressão de 30 mTorr.

Observe-se que a derivação da Equação (5.14) não considera nenhuma geometria em particular para os eletrodos, desde que a condição $s_a \ll r_0$ seja satisfeita. Entretanto, a Figura 5.8, obtida usando PDS1, não apresenta os mesmos resultados que a Figura 5.6, obtida usando PDC1. Embora a simulação ainda evidencie uma ionização localizada próxima ao eletrodo carregado, como se observa na Figura 5.9, a relação entre densidades nas bainhas e voltagens, dada pela Equação (5.14), não mais se verifica. A Figura 5.11 mostra $(n_{sa}V_b)/(n_{sb}V_a)$, obtido a partir de simulações, em função de A_b/A_a para eletrodos cilíndricos e esféricos. Observe-se que para eletrodos cilíndricos, $(n_{sa}V_b)/(n_{sb}V_a)$ é muito próximo a um, como esperado a partir da Equação (5.14), até razões de área da ordem de 10. Para eletrodos esféricos, entretanto, a relação de ionização localizada é violada para razões de área maiores do que aproximadamente 3. Assim, a discrepância na escala de V_a/V_b com a razão de áreas observada para eletrodos esféricos, é devida ao fato que o modelo de ionização localizada não é mais válido, e a densidade n_{sb} próxima ao eletrodo externo será determinada pela difusão do plasma gerado próximo ao eletrodo interno, e não pela ionização devida ao aquecimento dos elétrons que ocorre próxima ao eletrodo externo. Para pequenas razões de área, $A_b/A_a < 3$, a relação (5.14) é aproximadamente válida e pode-se observar uma razoável concordância entre os resultados de simulação e teoria.

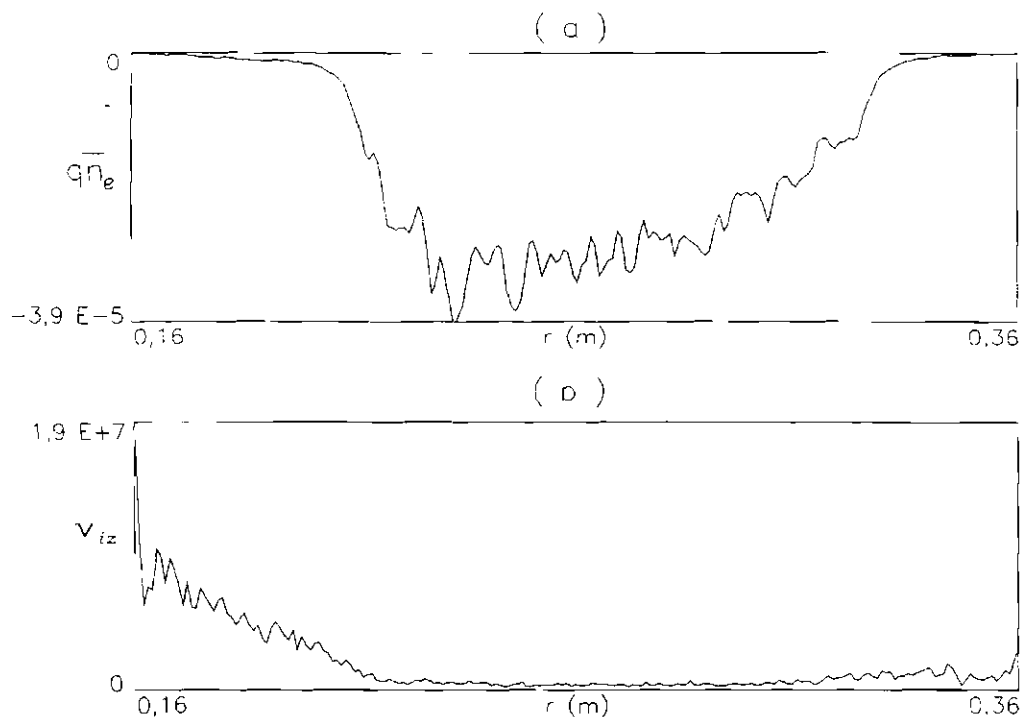


Fig. 5.9 - (a) Variação espacial típica do valor médio, sobre um período de RF da densidade de carga eletrônica. (b) Taxa de ionização, v_{iz} , para uma descarga assimétrica esférica (acumulada durante toda a simulação).

- Estes resultados foram obtidos usando hidrogênio como gás neutro de fundo (íons colisionais) a uma pressão de 30 mTorr e $A_b/A_a = 5$.

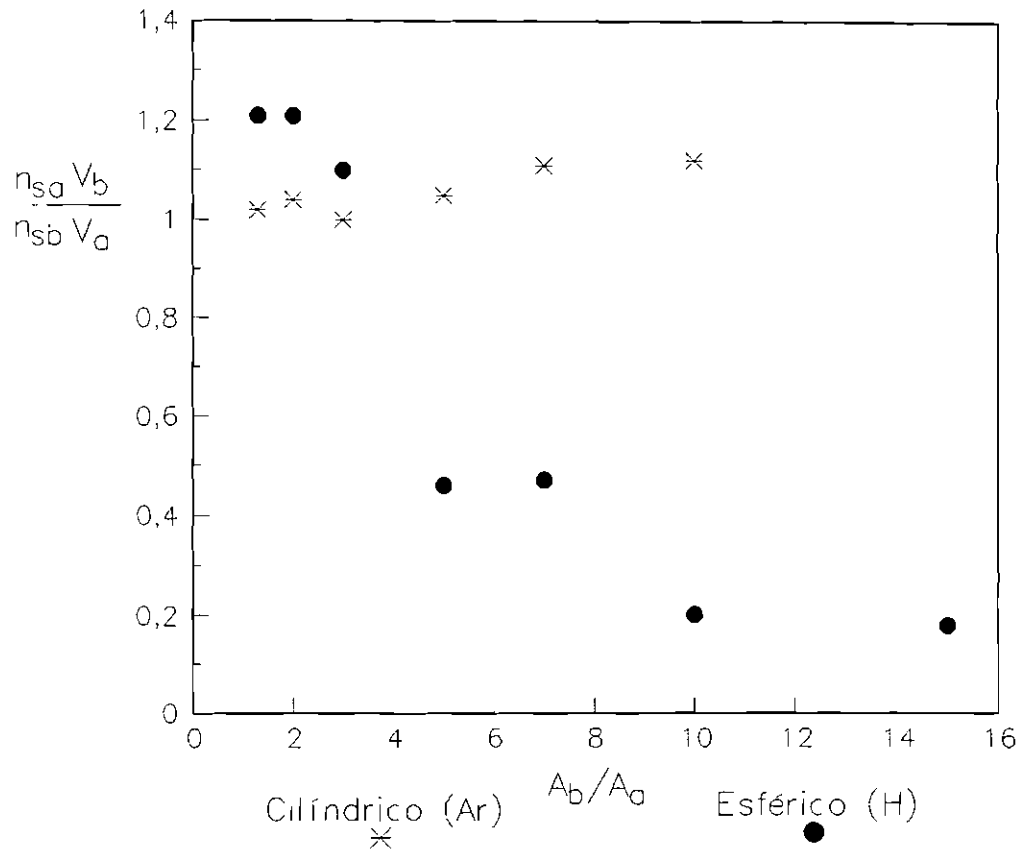


Fig. 5.10 - $(n_{sa} V_b) / (n_{sb} V_a)$ em função de A_b / A_a , para eletrodos cilíndricos e esféricos.

5.3.2 - IONS COLISIONAIS

Diversas simulações foram feitas, para diferentes razões de áreas, usando dois tipos de gás neutro de fundo (argônio e hidrogênio) a uma pressão de 30 mTorr, incluindo colisões entre íons e partículas neutras.

As Figuras 5.11 e 5.12 mostram V_a / V_b para diversos valores de A_b / A_a obtidos a partir destas simulações usando

PDC1. Estas figuras mostram também os resultados obtidos com o modelo analítico supondo ionização localizada e os três modelos de colisionalidade nas bainhas. Os pontos para o modelo analítico foram obtidos resolvendo as Equações (5.11), (5.13) e (5.15) numericamente, para os três valores do par p e q . As curvas mostradas no gráfico são as que melhor se ajustam aos pontos. Para a simulação usando hidrogênio obtém-se

$$\frac{V_a}{V_b} = 1,1717 \left(\frac{A_b}{A_a} \right)^{0,6974}, \quad (5.22)$$

Para os pontos teóricos obtidos supondo íons não colisionais ($p=1/2$ e $q=4$) tem-se

$$\frac{V_a}{V_b} = 1,0025 \left(\frac{A_b}{A_a} \right)^{0,7268}. \quad (5.23)$$

Para os pontos teóricos obtidos supondo apenas colisões elásticas de espalhamento entre íons e partículas neutras ($p=1/3$ e $q=3$), tem-se

$$\frac{V_a}{V_b} = 1,0023 \left(\frac{A_b}{A_a} \right)^{0,6919}, \quad (5.24)$$

e para os pontos teóricos obtidos supondo apenas colisões de troca de carga entre íons e partículas neutras ($p=2/5$ e $q=5/2$) tem-se

$$\frac{V_a}{V_b} = 1,0019 \left(\frac{A_b}{A_a} \right)^{0,6408}. \quad (5.25)$$

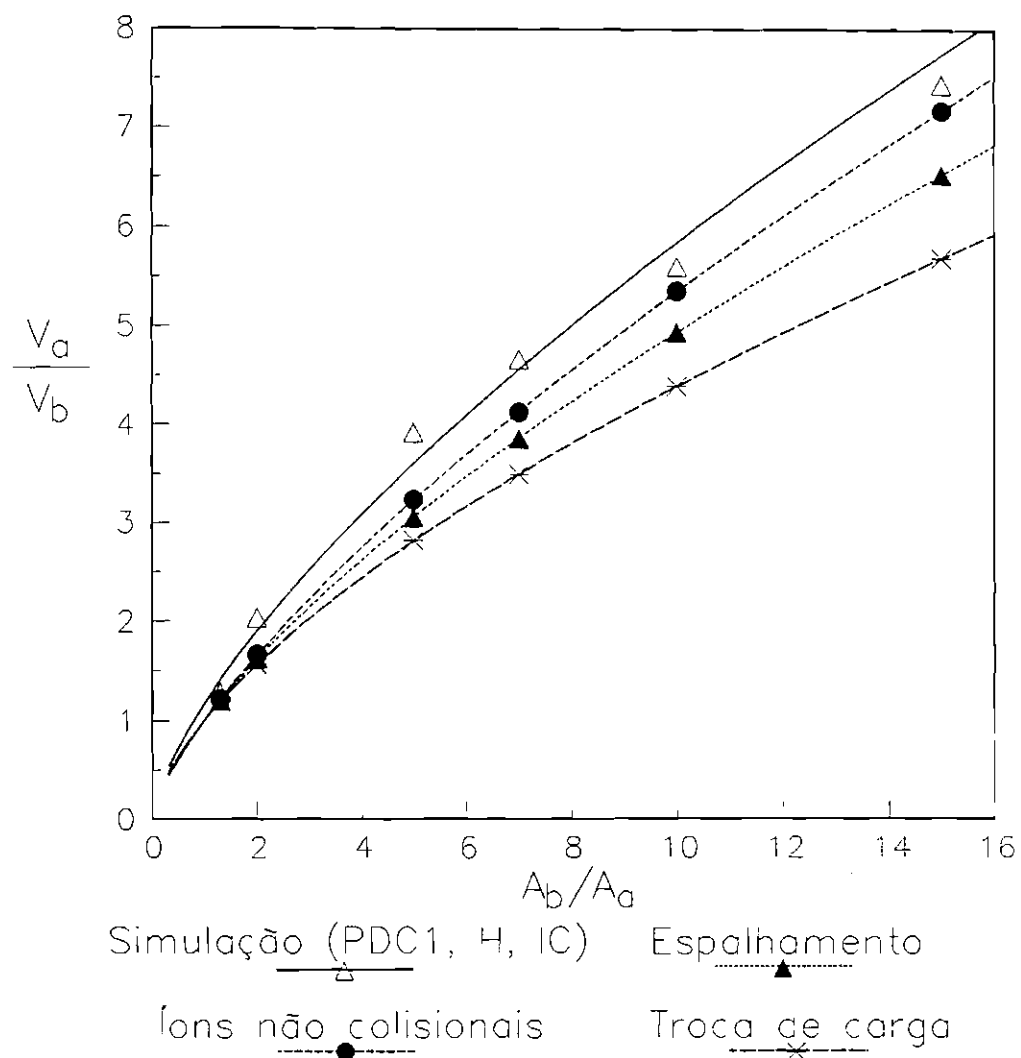


Fig. 5.11 - V_a/V_b em função de A_b/A_a para eletrodos cilíndricos, com hidrogênio (ions colisionais) como gás neutro a uma pressão de 30 mTorr.
 - As curvas representam o melhor ajuste para os pontos. As três curvas teóricas representam os três modelos diferentes relativos aos processos colisionais na bainha.

Para a simulação usando argônio obtém-se

$$\frac{V_a}{V_b} = 1,0306 \left(\frac{A_b}{A_a} \right)^{0,7116} . \quad (5.26)$$

Para os pontos obtidos supondo íons não colisionais ($p=1/2$ e $q=4$) tem-se

$$\frac{V_a}{V_b} = 1,0066 \left(\frac{A_b}{A_a} \right)^{0,6988} . \quad (5.27)$$

Para os pontos teóricos obtidos supondo apenas colisões elásticas de espalhamento entre íons e partículas neutras ($p=1/3$ e $q=3$) tem-se

$$\frac{V_a}{V_b} = 1,0052 \left(\frac{A_b}{A_a} \right)^{0,6745} , \quad (5.28)$$

e para os pontos teóricos obtidos supondo apenas colisões de troca de carga entre íons e partículas neutras ($p=2/5$ e $q=5/2$) tem-se

$$\frac{V_a}{V_b} = 1,0169 \left(\frac{A_b}{A_a} \right)^{0,6035} . \quad (5.29)$$

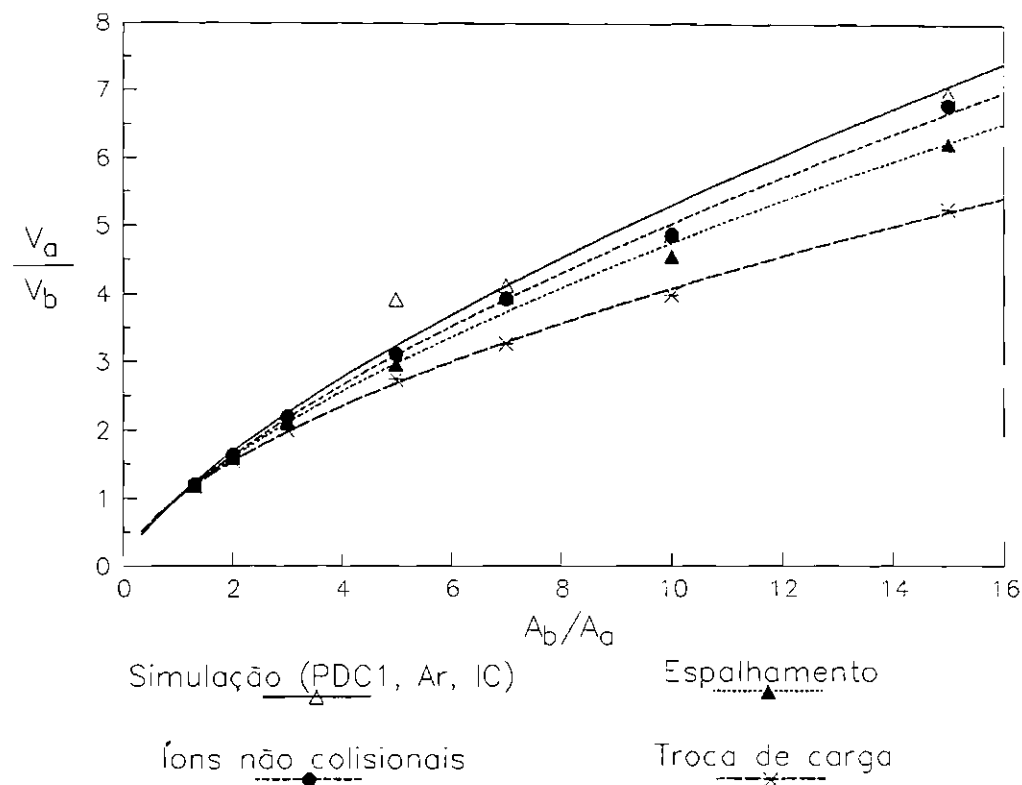


Fig. 5.12 - V_a/V_b em função de A_b/A_a para eletrodos cilíndricos, com argônio (íons colisionais) como gás neutro a uma pressão de 30 mTorr.

- As curvas representam o melhor ajuste para os pontos. As três curvas teóricas referem-se aos três modelos diferentes relativos aos processos colisionais na bainha.

Pode-se ver que mesmo neste caso o resultado que melhor se ajusta à simulação é dado pelos pontos obtidos supondo uma bainha com íons não colisionais, embora a profundidade da bainha próxima ao eletrodo interno obtida a partir das simulações seja de alguns caminhos livre médios

para colisões entre íons e partículas neutras: $s_a \approx 10 \sim 15 \lambda_i$. Pode-se também observar que para hidrogênio, se não se considera o fator multiplicativo que envolve o potencial flutuante, a melhor concordância é dada pelo modelo colisional na bainha que considera colisões de espalhamento. A razão pode ser devido ao fato que no modelo supõe-se que $\tilde{V}_{ja(b)} \ll V_a$, o que nem sempre é observado nas simulações.

A Figura 5.13 mostra V_a/V_b para diversos valores de A_b/A_a obtidos a partir destas simulações usando PDS1, tendo hidrogênio como gás de fundo, juntamente com a curva que melhor ajusta estes pontos dada por

$$\frac{V_a}{V_b} = 1,086 \left(\frac{A_b}{A_a} \right)^{0,7836}, \quad (5.30)$$

Estas figuras mostram também as curvas teóricas dadas pela Equação (5.15) para os três valores do par p e q .

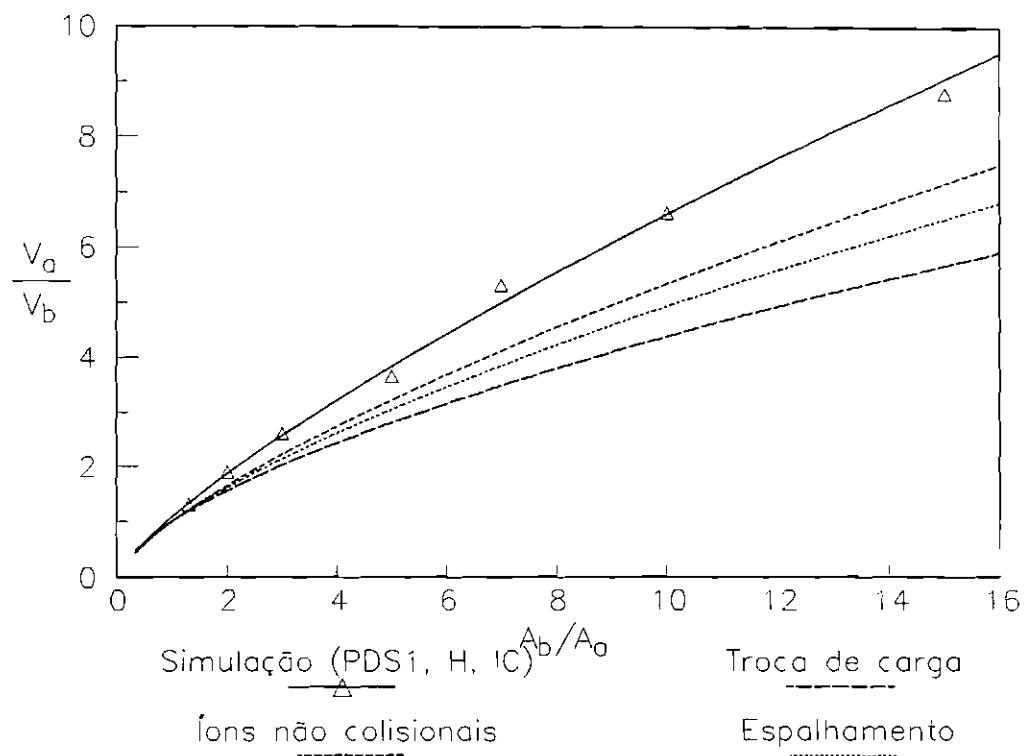


Fig. 5.13 - V_a/V_b em função de A_b/A_a para eletrodos esféricos, com hidrogênio (íons colisionais) como gás neutro a uma pressão de 30 mTorr.

- As curvas representam o melhor ajuste para os pontos. As três curvas teóricas representam os três modelos diferentes relativos aos processos colisionais na bainha e são dadas pela Equação (5.14) com os expoentes da Tabela 1.

Neste caso observa-se também que a concordância não é tão boa quanto a apresentada pelos resultados obtidos usando PDC1. A justificativa pode ser a mesma que aquela usada para o caso dos íons não colisionais. Um modelo que inclua a transição de um regime de ionização localizada para

um de ionização praticamente uniforme (Figura 5.10) e que considere difusão como o mecanismo responsável para a determinação das densidades nas bainhas talvez forneçam resultados que melhor concordem com os de simulação.

Se a curvatura dos eletrodos é levada em conta, o que se torna necessário quando $s_a \geq r_a$, resultados diferentes podem ser obtidos. Isto porque a lei de Child-Langmuir para eletrodos cilíndricos e esféricos torna-se diferente da Equação (5.8) (Langmuir e Blodgett, 1923 e Langmuir e Blodgett, 1924) e as Equações (5.9) e (5.10) foram obtidas supondo $s_a \ll r_a$. Uma relação mais geral entre a densidade na região da bainha, potencial através da mesma e sua profundidade foi desenvolvida para o estudo de implantação de íons por imersão em plasma (Vahedi et al., 1990). Esta relação geral foi aplicada a um alvo esférico e os resultados obtidos analiticamente apresentam uma boa concordância com aqueles obtidos usando o código computacional PDS1. Incluir a curvatura dos eletrodos no modelo teórico pode ser um trabalho para o futuro.

5.4 - RESULTADOS PARA A RAZÃO DE VOLTAGENS DE POLARIZAÇÃO

Na maioria dos experimentos não se mede a razão entre as voltagens V_a/V_b , mas sim uma quantidade chamada razão de voltagem de polarização ("bias") que é definida por $V_{polarização} = -(V_a + V_b)$, normalizada pela voltagem de RF pico a pico, V_{pp} . Em vista disto, apresentam-se os resultados obtidos com as diversas simulações usando PDC1 e PDS1 para esta quantidade em função da razão inversa das áreas, nas Figuras 5.14 a 5.16.

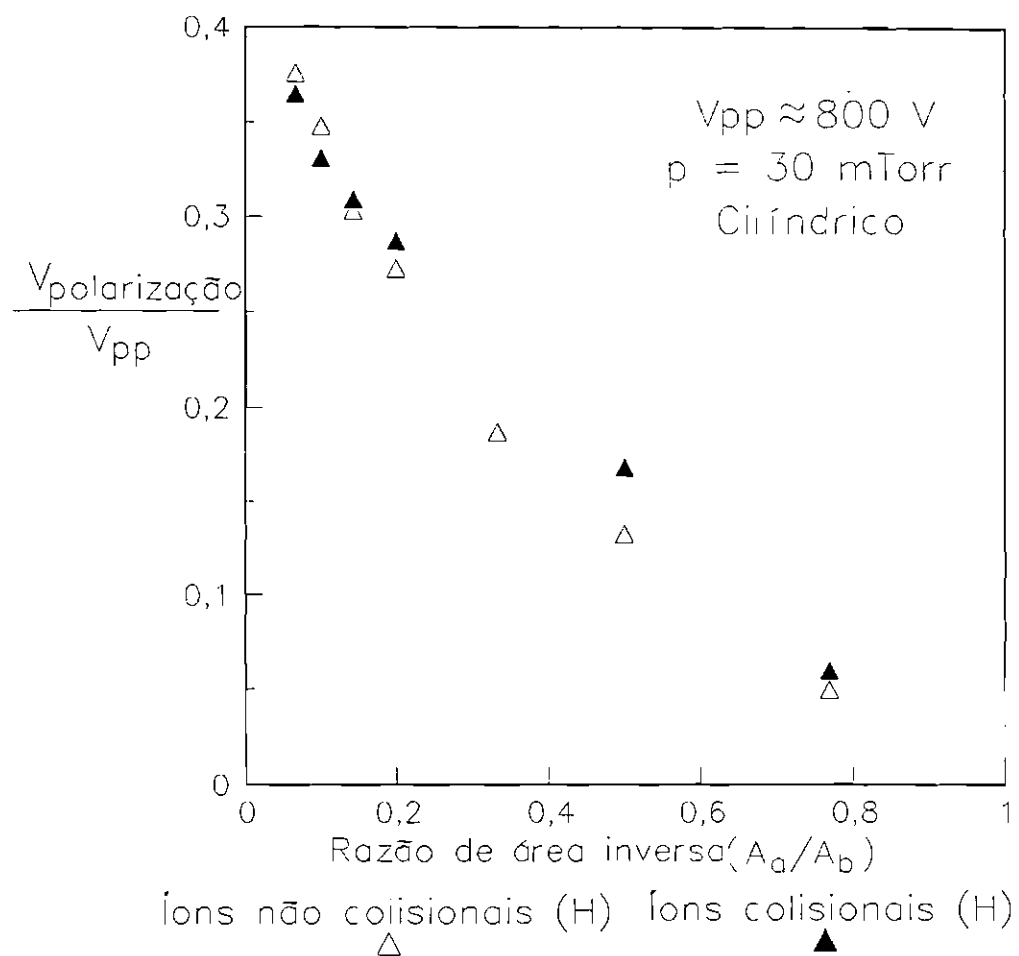


Fig. 5.14 - $V_{\text{polarização}}$ em função de A_a/A_b para hidrogênio, usando eletrodos cilíndricos.

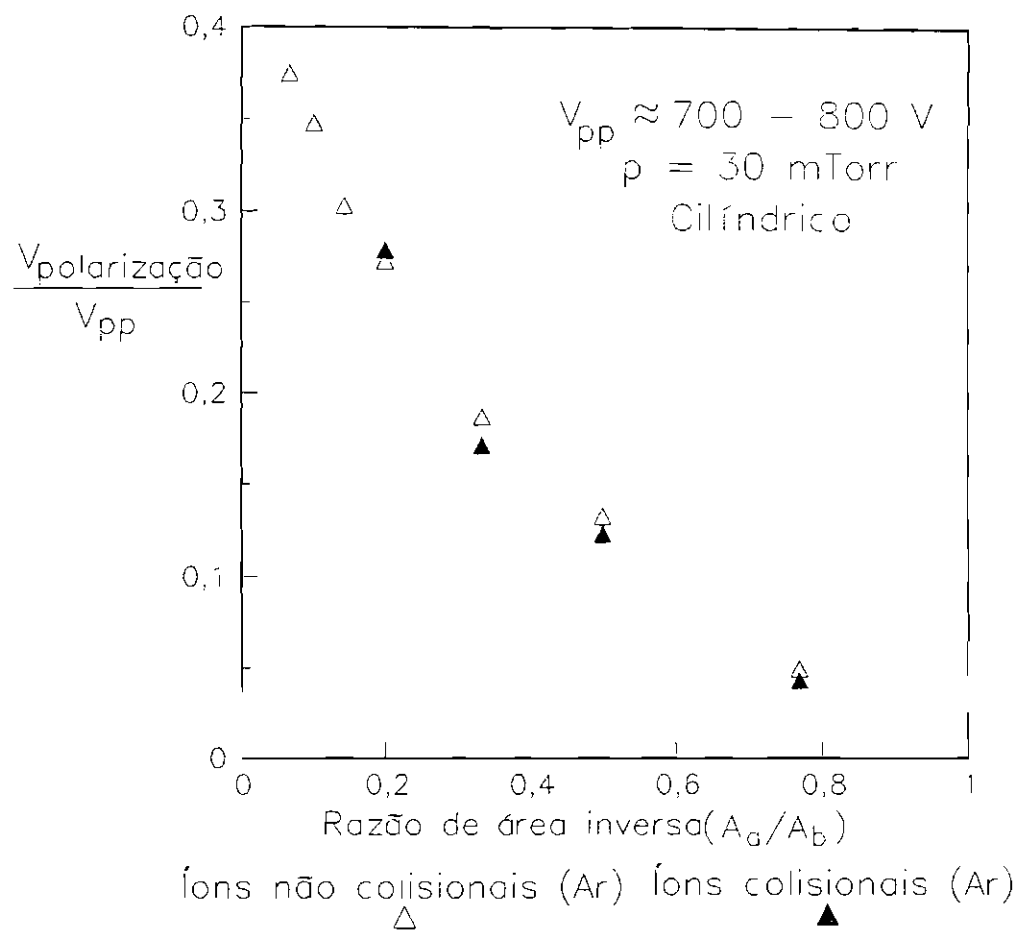


Fig. 5.15 - $V_{polarização}$ em função de A_a/A_b para argônio, usando eletrodos cilíndricos.

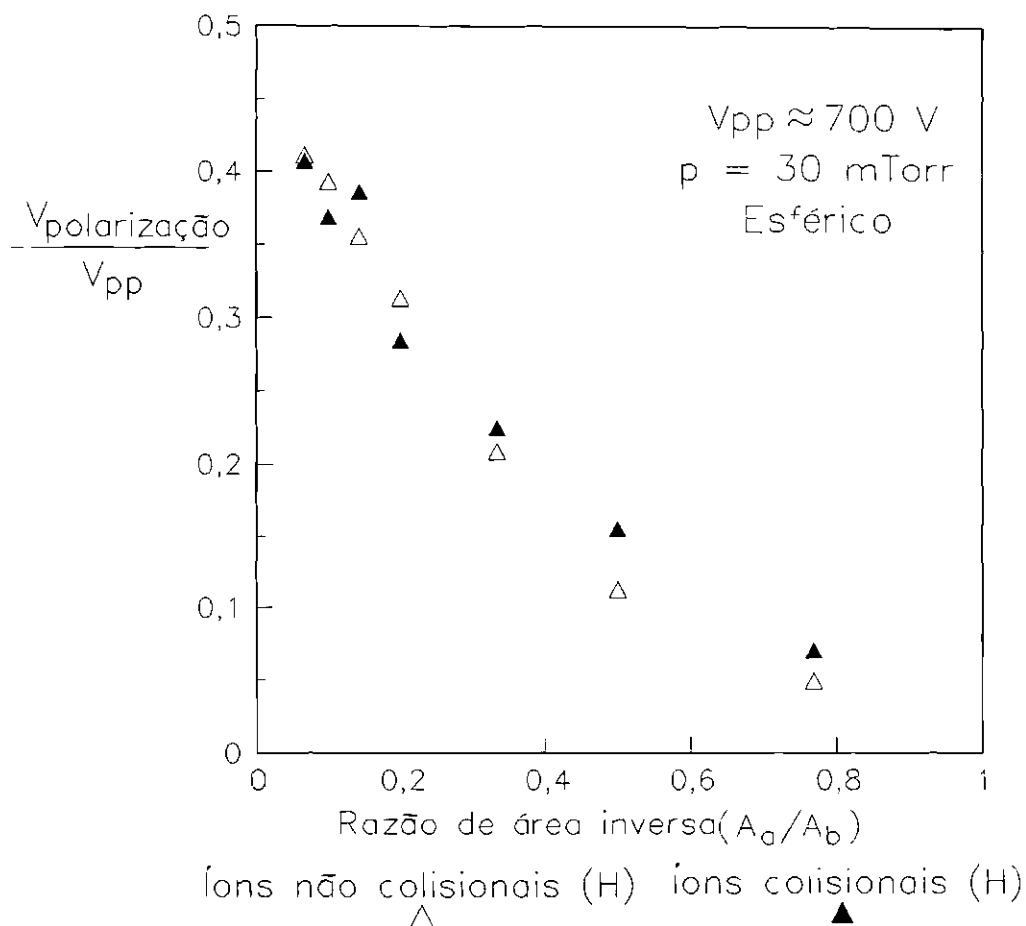


Fig. 5.16 - $V_{polarização}$ em função de A_a/A_b para hidrogênio, usando eletrodos esféricos.

5.5 - COMPARAÇÃO COM RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Como foi dito anteriormente, na maioria dos experimentos mede-se a razão de voltagem de polarização e não a razão entre as voltagens de CC através das bainhas. Horwitz (1983) apresenta resultados para esta quantidade para razões inversas de área que variam no intervalo de 0,278 a 0,95.

Seus resultados são mostrados na Figura 5.17. Embora a comparação não possa ser feita rigorosamente, uma vez que as condições experimentais são diferentes das condições usadas para a simulação (geometria, pressão e gases utilizados), pode-se observar que o comportamento geral da variação da voltagem polarizada em função da razão inversa das áreas é mantido, incluindo as ordens de grandeza.

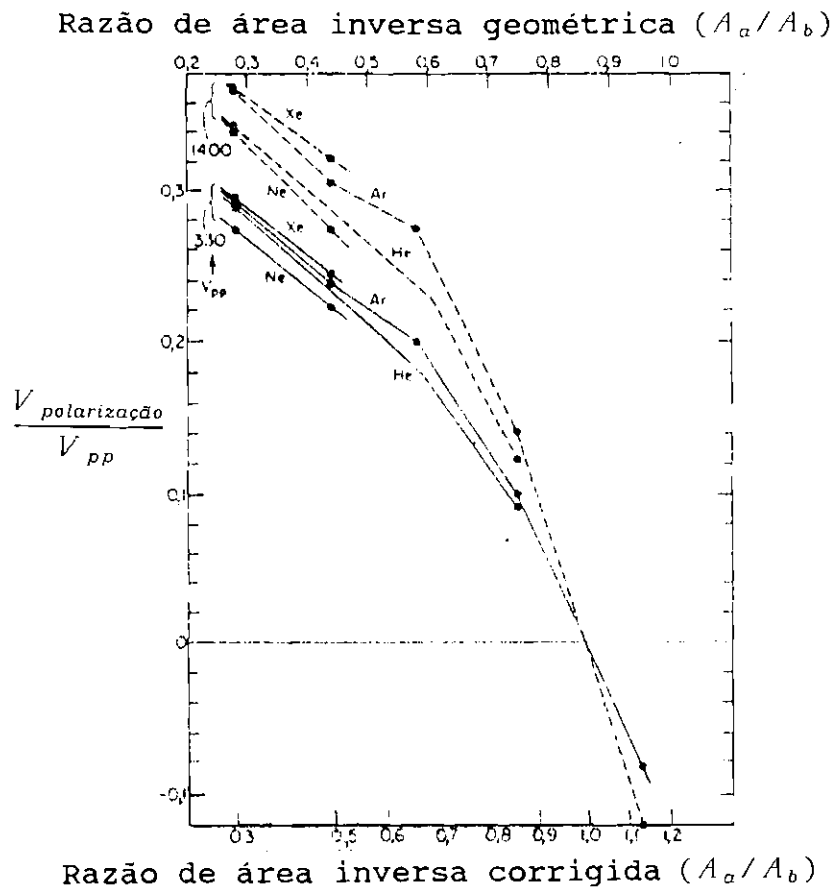


Fig. 5.17 - $V_{polarização}$ em função de A_a/A_b para os resultados experimentais de Horwitz (1983).

FONTE: Horwitz (1983), p. 66.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES

Dois códigos computacionais eletrostáticos, unidimensionais e usando simulação via partículas foram desenvolvidos, para geometrias cilíndrica e esférica. Estes códigos permitem simular um plasma limitado por dois cilindros infinitos concêntricos ou duas esferas concêntricas, os quais podem estar conectados entre si através de um circuito RLC externo. Ao método convencional de simulação por partículas adicionou-se um modelo de Monte Carlo, que permite simular colisões entre partículas carregadas (íons ou elétrons) e partículas neutras. Apesar do código ter sido desenvolvido para plasmas limitados, mudando-se alguns parâmetros de entrada é possível simular um plasma semi-infinito. Os códigos apresentam uma grande variedade de diagnósticos, e a possibilidade de executá-los num microcomputador tipo PC, torna-os atrativos para a melhor visualização de fenômenos físicos em plasmas.

Estes códigos foram utilizados para o estudo de descargas elétricas assimétricas de baixa densidade em rádio-frequência, as quais têm sido largamente utilizadas para processamento de materiais dentro da indústria eletrônica. A assimetria da descarga determina a energia de bombardeamento dos íons, um parâmetro importante para processamento por plasmas. Um modelo teórico analítico da descarga, supondo íons não colisionais e ionização uniforme ao longo do sistema prevê que a razão entre as voltagens de CC através das bainhas, V_a/V_b , varia com a quarta potência

da razão entre as áreas, A_b/A_a . Resultados experimentais, no entanto, mostram uma dependência muito menos severa com relação a razão de áreas, resultado este que também é obtido através das simulações. Sobre um intervalo limitado de razão das áreas, encontrou-se que a potência é da ordem de um, e não quatro como previsto anteriormente.

A maioria dos resultados de simulação indicam que existe uma região de ionização localizada, próxima aos eletrodos. Esta localização da ionização está relacionada com o aquecimento dos elétrons, que ocorre quando o caminho livre médio para colisões entre elétrons e partículas neutras é menor que as dimensões da descarga. Desenvolveu-se então um modelo analítico que inclui esta condição e considera três modelos diferentes para a colisionalidade dos íons na bainha. Os resultados obtidos analiticamente e via simulação foram comparados. A concordância é boa para razões de área onde a ionização localizada é observada nas simulações. A concordância é melhor para pequenas razões de área, $A_b/A_a < 3$, independentemente da geometria utilizada. Observa-se neste caso que o modelo de colisões para os íons não exerce um papel primordial. A transição para um modelo em que a ionização não é localizada deve ser estudada analiticamente de modo a se comparar as simulações neste regime. Simulações adicionais tornam-se necessárias a diferentes pressões, de maneira a testar a validade do modelo analítico.

A utilização destes dois códigos para descargas elétricas assimétricas mostrou-se bastante simples e eficiente. Seria interessante, no futuro, acrescentar-se uma outra dimensão aos códigos desenvolvidos (variações na direção

z , ou θ , dependendo do problema de interesse). Para isto seria necessário um computador com maior capacidade de memória, uma vez que a introdução de uma nova dimensão aumenta o número de pontos na grade, e torna necessário aumentar o número de partículas utilizado na simulação, de modo a manter um número de partículas por célula que seja representativo.

O código PDS1 também pode ser usado como ponto de partida para o estudo de "partículas grandes" ("particulates") (Selwyn et al., 1989) que têm sido observadas em descargas elétricas. Com este código pode-se determinar, levando em conta as dimensões da "partícula grande", qual será a carga acumulada sobre esta. Numa segunda etapa, pode-se incluir o movimento desta partícula e analisar as alterações por ela provocadas. Este problema já está sendo analisado teoricamente (Trulsen, 1990) e o código PDS1 está sendo adaptado para complementar a análise deste problema. Algumas dificuldades devem ainda ser superadas, principalmente o pequeno número de partículas que ficam próximas ao raio da partícula (a esfera interna, na geometria de PDS1), não permitindo que a densidade de carga definida nas grades seja precisa o suficiente para resolver a equação do potencial. Uma alternativa pode ser usar uma grade espacial para a qual o tamanho das células seja variável, uma sofisticação que já foi utilizada com sucesso, para tratar outros problemas.

Quanto a problemas a serem tratados no futuro pode-se salientar os seguintes:

- a) Os códigos foram desenvolvidos de modo a serem versáteis. Assim, mudando apenas alguns parâmetros de

entrada é possível simular um plasma semi-infinito, tornando possível um estudo sobre sondas de plasma de forma cilíndrica e esférica. Embora o problema de sondas não seja novo, é sempre interessante e útil.

- b) Num futuro próximo, grandes estruturas espaciais com fontes de alta potência estarão orbitando em torno da Terra a altitudes ionosféricas. Voltagens sobre qualquer parte da estrutura causarão um fluxo de corrente entre o plasma e o objeto exposto ao plasma (Ma e Schunk, 1989). Com os códigos PDC1 e PDS1 é possível simular estruturas cilíndrica e esférica imersas num plasma, às quais pode-se ou não aplicar um potencial, e estudar a resposta do plasma a estes objetos.
- c) O código PDP1 vem sendo utilizado para o estudo do problema de difusão de elétrons através de um campo magnético. Espera-se comparar os resultados obtidos via simulação com aqueles obtidos experimentalmente usando a máquina de plasma quiescente (PQUI) do Laboratório Associado de Plasma-INPE (Ferreira, et al., 1989).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALVES, M. V.; M. A. LIEBERMAN; VAHEDI, V.; BIRDSALL, C. K.
Sheath voltage ratio for asymmetric RF discharges.
Accepted for publication in **J. Appl. Phys.**, Jun. 1990.
(Memorandum No. UCB/ERL M90/56, Jun. 1990)
- ALVES, M. V.; VAHEDI, V.; BIRDSALL, C. K. PDC1: One dimensional
radial code for a cylindrical plasma device with an
external RLC circuit. Conference on the Numerical
Simulation of Plasmas, 13., Santa Fe, NM, Sep. 17-20,
1989. **Proceedings**. PW11, 1989a.
- Cylindrical simulations of RF plasma discharges and
plasma immersion ion implantation. Annual Gaseous
Electronics Conference, 42. Palo Alto, CA, Oct. 17-20
1989, **Abstracts**, p. 61, 1989b.
- RF plasma processes in cylindrical models and plasma
immersion ion implantation. Annual Meeting - American
Physical Society- Division of Plasma Physics, 31. Anaheim,
CA, Nov. 13-17 1989. **Bulletin of the American Physical
Society**, 34(9):2028, Oct. 1989c. (Abstract).
- BARNES, C.; HUDSON, M. K.; LOTKO, W. Weak double layers in
ion-acoustic turbulence. **Phys, Fluids**, 28(4):1055-1062,
Apr. 1985.
- BIRDSALL, C. K.; BRIDGES, W. B. **Electron dynamics of diode
regions**. New York, Academic, 1966.
- BIRDSALL, C. K.; FUSS D. Clouds-in-clouds, clouds-in-cells
physics for many-body simulation, **J. Comp. Phys.**, 3:
494-511, Apr. 1969.

- BIRDSALL, C. K.; LANGDON, A. B. **Plasma physics via computer simulation**. New York, MacGraw-Hill, 1985.
- BITTENCOURT, J. A. **Fundamentals of plasma physics**. Oxford, Pergamon, 1986.
- BROWN, S. C. **Basic data of plasma physics**. Cambridge, MIT, 1967.
- BURGER, P. Nonexistence of DC states in low-pressure thermionic convertors. **J. Appl. Phys.**, 35(10):3048-3049, Oct. 1964.
- BURGER, P.; DUNN, D. A.; HALSTED, A. S. Computer experiments on the randomization of electrons in a collisionless plasma. **Phys. Fluids**, 8(12):2263-2272, Dec. 1965.
- CHAPMAN, B. **Glow discharge processes**. New York, John Wiley & Sons, 1980.
- CHEN, F. F. Electric Probes, In: **Plasma diagnostic techniques**. ed. Huddestone, R. H.; Leonard, S. L. New York, Academic, 1965. p. 113-200.
- CHEN, F. F. **Plasma physics and controlled fusion**. New York, Plenum, 1974.
- COBINE, J. D. **Gaseous conductor**. Dover, New York, 1941. p. 128.
- CRYSTAL, T. L.; KUHN, S. Particle simulation of the low- α Pierce diodo. **Phys. Fluids**, 28(7):2116-2124, Jul. 1985.
- DAWSON, J. J. Particle simulation of plasmas. **Rev. Mod. Phys.**, 55:403-447, Apr. 1983

- DEN HARTOG, E. A.; DOUGHTY, D. A.; LAWLER, J. E. Laser optogalvanic and fluorescence studies of the cathode region of a glow discharge. **Phys. Rev. A**, **38**: 2471-2491, Sep. 1988.
- FERREIRA, J. L.; LUDWIG, G. O.; FERREIRA, J. G.; MONTES, A. Anomalous particle diffusion through a magnetic picket fence. In: Symposim on Small Scale Laboratory Plasma Experiments of the Spring College on Plasma Physics of the I.C.T.P. Trieste, Italy, May-June 1989. **Proceedings**. (No prelo).
- GARSCADDEN A.; EMELEUS. K. G. Notes on the effect of noise on Langmuir probe characteristics. **Proc. Phys. Soc. (London)**, **79**: 535-541, 1962.
- GRAY, P. G.; KUHN, S.; CRYSTAL. T. L.; BIRDSALL, C. K.; Particle simulation of the unstable states of a collisionless sigle-ended plasma device. In: Symposium on Plasma Double Layers and Related Topics, 2. Innsbruck, Austria, 5-6 July, 1984, **Proceedings**, ed. Schrittwieser, R. e Eder Medienenhaber, G. Innsbruck, Austria, Univ. Innsbruck, 1984. p. 266-271.
- GODYAK, V. A. Steady-state low-pressure RF discharge. **Sov. J. Plasma Phys.** **2**(1):78-84, Jan. - Feb. 1986.
- GODYAK, V. A. **Soviet radio frequency discharge research**. Falls Church, VA, Delphic Associates, 1986, p. 110-113.
- HOCKNEY, R. W.; EASTWOOD, J. W. **Computer simulation using particles**. New York, MacGraw-Hill, 1981.
- HORWITZ, C.M. RF sputtering-voltage division between two electrodes. **J. Vac. Sci. Technol. A**, **1**(1): 60-68, Jan.-Mar. 1983.

- KELLER, J. H.; PENNEBAKER, W. B. Electrical properties of RF sputtering systems. **IBM J. Res. Develop.**, **23**(1): 3-15, Jan. 1979.
- KIBBLE, T. W. B. **Classical mechanics**. 3. ed., London, Longman, 1985.
- KIM, K. Y.; CRYSTAL T. L. Theory and simulation of ion acoustic double layers. In: Symposium on Plasma Double Layers and Related Topics, 2. Innsbruck, Austria, 5-6 July, 1984, **Proceedings**, ed. Schrittwieser, R. e Eder Medienenhaber, G. Innsbruck, Austria, Univ. Innsbruck, 1984. p. 290-301.
- KINDEL, J. M.; BARNES, C.; FORSLUND, D. W. Anomalous DC resistivity and double layers in the auroral ionosphere. **Phys. of Auroral Arc Formation**, **25**: 296-303, 1981.
- KOENIG, H. R.; MAISSEL, L. I. Application of RF discharges to sputtering. **IBM J. Res. Dev.**, **14**: 168-171, Mar. 1970.
- KÖHLER, K.; COBURN, J. W.; HORNE, D. E.; KAY, E.; KELLER, J. H. Plasma potentials of 13.56-MHz RF argon glow discharges in a planar system. **J. Appl. Phys.**, **57**(1): 59-66, 1985.
- KUHN, S. Axial Equilibria, Disruptive effects, and Buneman instability in collisionless single-ended Q-machines. **Plasma Physics**, **23** (10): 881-902, 1981.
- LANGMUIR, I.; BOLDGETT, K. B. Currents limited by space charge between coaxial cylinders. **Phys. Rev.**, **22**: 347-356, Oct. 1923
- LANGMUIR, I.; BOLDGETT, K. B. Currents limited by space charge between coaxial spheres. **Phys. Rev.**, **24**: 49-59, Jul. 1924

- LAWSON, W. S. Particle simulation of bounded 1D plasma system. **J. Comp. Phys.**, **80**(2): 253-276, Feb. 1989.
- LIEBERMAN, M. A. Spherical shell model of an asymmetric RF discharge. **J. Appl. Phys.**, **65**(11): 4186-4191, Jun. 1989.
- LIEBERMAN, M. A.; SAVAS, S. E. Bias voltage in finite length, cylindrical and coaxial RF discharges. Accepted for publication in **J. Vac. Sci. Technol. A**, 1990. (Memorandum No. UCB/ERL M89/121, Oct. 1989)
- MA, T.-Z; SCHUNK, R. W.; A fluid model of high voltage spheres in an unmagnetized plasma. **Plasma Physics and Controlled Fusion**, **31** (3): 399-421, 1989.
- MANOS, D. M.; FLAMN, D. L. **Plasma etching: An introduction**. New York, Academic, 1989.
- MOREY, I. J. **Particle-in-cell simulation of a beam-plasma discharge**. (Doctoral Dissertation) - Australian National University, Sep. 1986.
- MOREY, I. J.; BOSWELL, R. W. Evolution of bounded beam-plasma interactions in a one-dimensional particle simulation. **Phys. Fluids B**, **1**(7):1502-1510, 1988.
- MOREY, I. J.; VERBONCOEUR, J. P.; VAHEDI, V. Bounded plasma device simulation with PDW1, including: external RLC circuit, DC and RF drive, and collisional processes. In: Conference on the Numerical Simulation of Plasmas, 13., Santa Fe, NM, Sep. 17-20, 1989. **Proceedings**. PMB-11, 1989a.
- MOREY, I. J.; VAHEDI, V.; VERBONCOEUR, J. P.; LIEBERMAN, M. A. Particle simulation for modeling processing plasmas. In: Annual Gaseous Electronics Conference, 42. Palo Alto, CA, Oct. 17-20 1989, **Abstracts**, p. 61.

- MOREY, I. J.; VAHEDI, V.; VERBONCOEUR, J. P. Particle simulation code for modeling processing plasmas. In: Annual Meeting - American Physical Society- Division of Plasma Physics, 31. Anaheim, CA, Nov. 13-17 1989. **Bulletin of the American Physical Society**, 34(9):2028, Oct. 1989c. (Abstract).
- NASSER, E. **Fundamentals of gaseous ionization and plasma electronics**. New York, Wiley-Interscience, 1971.
- OTANI, N. F. Evolution of ion holes and large potential structures in simulations of bounded current-driven magnetized plasma systems. In: Symposium on Plasma Double Layers and Related Topics, 2. Innsbruck, Austria, 5-6 July, 1984, **Proceedings**, ed. Schrittwieser, R. e Eder Medienenhaber, G. Innsbruck, Austria, Univ. Innsbruck, 1984. p. 296-301.
- PARKER, S. E. **Particle simulation of bounded plasmas with a wide range of time and space scales**. (Doctoral Dissertation) - Univ. of California, Berkeley, Mar. 1990.
- PETERSON, L. R.; ALLEN Jr., J. E. Electron impact cross sections for argon. **J. Chem. Phys.**, 56 (12):6068-6076, Jun. 1972.
- PIERCE, J. R. Possible fluctuations in electron streams due to ions. **J. Appl. Phys.** 19:231-236, 1948
- POINTU, A. M. Model of RF discharges at frequencies greater than the ionic plasma. **Appl. Phys. Lett.**, 50: 1047-1049, Apr. 1987
- POTTER, C. **Computational physics**. London, Wiley, 1973.

- PRESS, W. H.; FLANNERY, B. P.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T. **Numerical recipes in C**. Cambridge, Cambridge Univ., 1988.
- PROCASSINI, R. J. **Kinetic particle-in-cell simulations of transport in a tokamak scrape-off layer**. (Doctoral Dissertation) - Univ. of California, Berkeley, Mar. 1990.
- SATO, T.; OKUDA, H. Ion-acoustic double layers. **Phys. Rev. Lett.**, **44**(11): 740-743, Mar. 1980.
- SATO, T.; OKUDA, H. Numerical simulation on ion acoustic double layers. **J. Geophys. Res.**, **86**(A5): 3357-3368, 1981.
- SELWYN, G. S.; SINGH, J.; BENNETT, R. S. In situ laser diagnostic studies of plasma-generated particulate contamination. **J. Vac. Sci. Technol. A**, **7**(4): 2758-2765, Aug. 1989.
- SURENDRA, M.; GRAVES, D. B; MOREY, I. J. Electron heating in low-pressure RF glow discharges. **Appl. Phys. Lett.**, **56**(11): 1022-1024, Mar. 1990.
- TRULSEN, J. **Using PDS1 to study charge deposition at particulates**. Berkeley, Jun. 1990. Comunicação Pessoal, 1990.
- VAHEDI, V.; LIEBERMAN, M. A.; ALVES, M. V.; VEBONCOEUR, J. P.; BIRDSALL, C. K. A one-dimensional collisional model for plasma immersion ion implantation. Accepted for publication in **J. Appl. Phys.**, 1990. (Memorandum No. UCB/ERL M90/60, Jul. 1990)
- VENDER, D.; e BOSWELL, R. W. **Numerical modelling of low pressure RF plasmas**. Plasma Research Laboratory, Australian National University, Canberra, Australia, 1988. (Report Number ANU-PRL-PP88/8).

- VERBONCOEUR, J. P.; ALVES, M. V.; VAHEDI, V. Simultaneous potential and circuit solution for bounded plasma particle simulation codes. Submitted to **J. Comp. Phys.**, 1990a.
- VERBONCOEUR, J. P.; VAHEDI, V.; ALVES, M. V. **PDP1, PDC1, PDS1: Plasma Device 1 Dimensional Bounded Electrostatic Codes - Reference Manual.** Não publicado, 1990b.
- VOSSEN, J. L. Glow discharge phenomena in plasma etching and plasma deposition. **J. Electrochem. Soc.**, **126**(2): 319-324, 1979.

APÊNDICE A

DEFINIÇÃO DOS PARÂMETROS DE ENTRADA PARA OS CÓDIGOS COMPUTACIONAIS PDC1 E PDS1

Neste apêndice apresenta-se a definição dos parâmetros de entrada para os códigos computacionais PDC1 e PDS1, juntamente com uma listagem de um conjunto típico de dados de entrada. A não ser quando especificado, as unidades das quantidades estão no sistema MKS.

A.1 - PARÂMETROS GLOBAIS

nsp - Especifica o número de espécies de partículas que se deseja simular. Em geral igual a dois: ions e elétrons.

nc - Especifica o número de pontos da grade espacial.

nc2p - Especifica a relação entre número real de partículas e o número de partículas a ser usado na simulação. Quando se determina uma densidade inicial (*initn*), e se deseja ter um número *X* de partículas na simulação, nc2p é obtido da seguinte maneira:

$$nc2p = \frac{(initn) \times (Volume \text{ do sistema})}{X}$$

dt - Especifica o passo de tempo a ser usado.

r0	- Raio do eletrodo interno.
r1	- Raio do eletrodo externo.
height	- Altura do cilindro (só utilizada em PDC1). Determina o volume do sistema, usado para determinar o número de partículas a ser usado na simulação.
epsilon _r	- Constante dielétrica relativa do sistema. Se igual a um, a constante dielétrica será a do espaço livre.
B _z	- Campo magnético aplicado, suposto constante. Não presente em PDS1.
rhoback	- Densidade de carga de fundo fixada (pode ser usada para simular íons pesados, considerados em repouso, quando comparada a escala de tempo de seu movimento com relação a outras espécies presentes).
backj	- Densidade de corrente de fundo.
dde	- Perturbação senoidal da densidade de carga.
extR	- Resistência do circuito externo.
extL	- Indutância do circuito externo.
extC	- Capacitância do circuito externo.

q0

- carga inicial no capacitor.

A.2 - PARÂMETROS RELACIONADOS COM AS FONTES DE VOLTAGEM E DE CORRENTE.

Quando a variável $dcramp=0$, a forma geral da fonte aplicada, $S(t)$, que pode ser uma fonte de corrente ou de voltagem, é

$$S(t) = DC + Ramp.t + AC.\sin(2\pi f_0 t + \theta_0).$$

Quando uma função passo ("step function") é desejada $dcramp=1$. A variável $Ramp$ define como será a variação temporal do potencial, até que atinja o valor constante desejado. O tempo de crescimento do sinal aplicado é igual a $1/2f_0$, no caso em que o crescimento é senoidal ou $DC/Ramp$ se o sinal cresce com uma inclinação linear constante. A Figura A.1 mostra os dois casos.

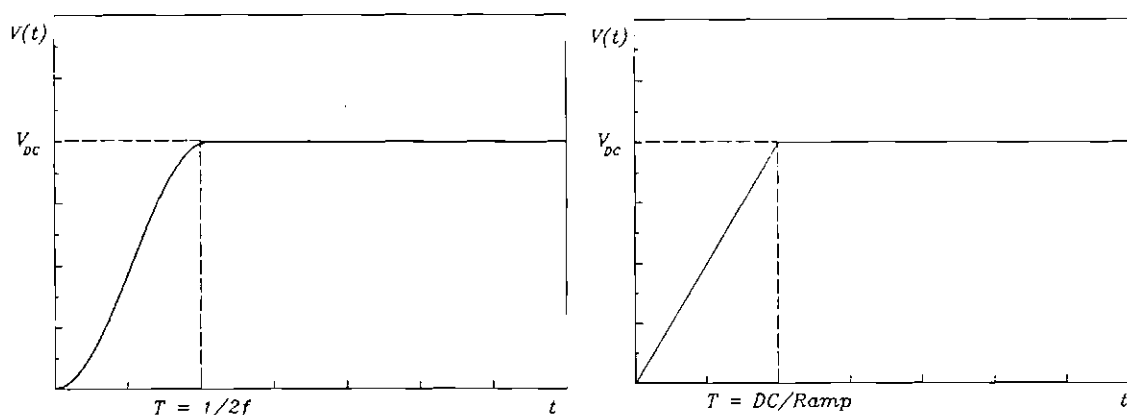


Fig. A.1 - Variação temporal do potencial aplicado, até que este atinja um valor constante. (a) Senoidal. (b) Inclinação constante.

- dcramped - Especifica se a fonte externa será aplicada de modo a atingir um valor de CC constante após um tempo de crescimento (=1), ou não (=0).
- source - Especifica o tipo de fonte: v=voltagem e i=corrente.
- DC - Indica o valor da componente constante da fonte.
- Ramp - Taxa de crescimento para a fonte de voltagem ou corrente.
- AC - Magnitude da voltagem ou corrente alternada. Se nula, ignora os valores de f_0 e θ_0 .
- f_0 - Frequência da fonte alternada.
- θ_0 - Fase inicial da fonte alternada (graus).

A.3 - PARÂMETROS QUE INDICAM A PRESENÇA OU NÃO DE ALGUNS PROCESSOS FÍSICOS ("flags")

- secondary - Emissão de elétrons secundários pelas paredes. Se = 0, não há emissão. Se igual a 1, a espécie 1 será a responsável pela emissão de elétrons secundários e assim por diante.

e_collisional - Se igual a zero, não há colisões do tipo ionização, elástica ou de excitação entre elétrons e partículas neutras. O número designado deve corresponder à espécie que deve sofrer colisões.

i_collisional - Se igual a zero, não há colisões do tipo espalhamento ou troca de cargas entre íons e partículas neutras. O número designado deve corresponder à espécie que deve sofrer colisões.

reflux - Se = 1, as partículas que atingem a parede do lado direito serão refletidas e não absorvidas (reflux = 0).

nfft - Deve ser uma potência de dois. Número de amostras a serem consideradas para uma análise de Transformada de Fourier Rápida. Se igual a zero, não faz análise de Fourier.

A.4 - PARÂMETROS QUE CARACTERIZAM O GÁS NEUTRO E COEFICIENTES DE EMISSÃO DAS PAREDES.

seec(electron) - Coeficiente de emissão secundária devida a elétrons (espécie 1). Se igual a 0.1, em cada dez elétrons que atingem a parede, um elétron secundário será emitido.

seec(ions) - Como a anterior para a espécie dois.

- ion species - Indica o tipo de ion que será criado por processos colisionais de ionização. Se = 2, os íons criados serão como aqueles especificados como espécie dois. Também especifica o tipo de gás neutro.
- Gpressure - Pressão do gás neutro de fundo (Torr).
- Gtemp - Temperatura térmica do gás neutro de fundo (eV).

A.5 - PARÂMETROS PARA OS PROCESSOS COLISIONAIS.

- selmax - Máxima seção de choque para colisões elásticas entre elétrons e partículas neutras.
- elsengy0 - Energia mínima necessária para colisões elásticas.
- elsengy1 - Energia inferior do patamar para colisões elásticas (ver Figura 4.2).
- elsengy2 - Energia superior do patamar para colisões elásticas (ver Figura 4.2).
- sextmax - Máxima seção de choque para colisões de excitação entre elétrons e partículas neutras (ver Figura 4.2).

extengy0	- Energia mínima necessária para colisões de excitação (ver Figura 4.2).
extengy1	- Energia inferior do patamar para colisões de excitação (ver Figura 4.2).
extengy2	- Energia superior do patamar para colisões de excitação (ver Figura 4.2).
sionmax	- Máxima seção de choque para colisões de ionização entre elétrons e partículas neutras (ver Figura 4.2).
ionengy0	- Energia mínima necessária para colisões de ionização (ver Figura 4.2).
ionengy1	- Energia inferior do patamar para colisões de ionização (ver Figura 4.2).
ionengy2	- Energia superior do patamar para colisões de ionização (ver Figura 4.2).
achrgx	- Parâmetro a de ajuste para seção de choque de troca de carga entre íons e partículas neutras [m^2] (ver Figura 4.3).
bchrgx	- Parâmetro b de ajuste para seção de choque de troca de carga entre íons e partículas neutras [$m^2\sqrt{eVoll}$] (ver Figura 4.3).

ascat - Parâmetro **a** de ajuste para seção de choque de espalhamento entre íons e partículas neutras [$m^2\sqrt{eVolt}$] (ver Figura 4.3).

bscat - Parâmetro **b** de ajuste para seção de choque de espalhamento entre íons e partículas neutras [$m^2\sqrt{eVolt}$] (ver Figura 4.3).

A.6 - PARÂMETROS QUE CARACTERIZAM AS ESPÉCIES.

q - Carga por partícula física.

m - Massa por partícula física.

j0L - Magnitude da densidade de corrente injetada a partir do eletrodo do lado esquerdo.

j0R - Magnitude da densidade de corrente injetada do eletrodo a partir do lado direito.

initin - Densidade inicial da espécie no sistema.

vr0L - Velocidade de deriva para $v>0$ (ver Figura 3.5).

vr0R - Velocidade de deriva para $v<0$ (ver Figura 3.5).

vrtL - Velocidade térmica para $v>0$ (ver Figura 3.5).

vrtR	- Velocidade térmica para $v < 0$ (ver Figura 3.5).
vrcL	- Velocidade de corte para $v > 0$ (ver Figura 3.5).
vrcR	- Velocidade de corte para $v < 0$ (ver Figura 3.5).
vtperp	- Velocidade térmica na direção perpendicular a r.
nbin	- Número de feixes para obter o diagnóstico função de distribuição de energia dos íons que atingem o eletrodo esquerdo.
Emin	- Energia mínima considerada para obter a função de distribuição de energia dos íons que atingem o eletrodo esquerdo.
Emax	- Energia máxima considerada para obter a função de distribuição de energia dos íons que atingem o eletrodo esquerdo.

RF DISCHARGE (MKS) (A1/A0 = 15.)

Argon Plasma

-nsp-	-nc-	-nc2p-	-dt[s]-	-r0[m]-	-r1[m]-	height[m]	-epsilon-	-Bz[Tesla]-
2	200	3e8	7.8125e-10	0.0143	0.2143	0.1	1.00	0.0
-rhoback[C/m^3]-	-backj[Amp/m^2]-	-dde-	-extR[Ohm]-	-extL[H]-	-extC[F]-	-q0[C]-		
0.0		0.0	0.0	0.0	0.0	2e-11	0.0	
-dcramped-	-source-	-dc[V/Amp]-	-ramp[(V Amp)/s]-	-ac[V Amp]-	-f0[Hz]-	theta0[D]		
0	v	0.0	0.0	500.0	1e7	0.0		
-secondary-	-e_collisional-	-i_collisional-	-reflux-	-nfft-				
0	1	2	0	412				
-seec(electrons)-	-seec(ions)-	-ion species-	-Gpressure{Torr}-	-GTemp[eV]-				
0.0	0.2	2	3e-2	0.026				

ELECTRON-NEUTRAL COLLISIONAL PARAMETERS

-selsmax[m^2]-	-elsengy0[eV]-	-clsengy1[eV]-	-elsengy2[eV]-
1.2e-19	0.3	15.0	20.0
-sextmax[m^2]-	-extengy0[eV]-	-extengy1[eV]-	-extengy2[eV]-
7.0e-21	11.55	30.0	100.00
-sionmax[m^2]-	-ionengy0[eV]-	-ionengy1[eV]-	-ionengy2[eV]-
3.0e-20	15.76	30.0	100.00

ION=NEUTRAL COLLISIONAL PARAMETERS

-achrgx[M^2]-	-bchrgx[m^2/V^1/2]-	-ascat[m^2]-	-bscat[m^2/V^1/2]-
2.0e-19	5.5e-19	1.8e-19	4.0e-19

SPECIES 1

-q0[C]-	-m[Kg]-	-j0L[Amp/m^2]-	-j0R[Amp/m^2]-	-initn[m^-3]-		
-1.602e-19	9.11e-31	0.0	0.0	2e12		
-v0L[m/s]-	-v0R[m/s]-	-vtL[m/s]-	-vtR[m/s]-	-vcL[m/s]-	-vcR[m/s]-	-vtperp[m/s]-
0.0	0.0	1e5	1e5	0.0	0.0	1e5
-nbin-	-Emin[eV]-	-Emax[eV]-				
50	0	100				

SPECIES 2

-q0[C]-	-m[Kg]-	-j0L[Amp/m^2]-	-j0R[Amp/m^2]-	-initn[m^-3]-		
1.602e-19	6.68e-28	0.0	0.0	2e12		
-v0L[m/s]-	-v0R[m/s]-	-vtL[m/s]-	-vtR[m/s]-	-vcL[m/s]-	-vcR[m/s]-	-vtperp[m/s]-
0.0	0.0	1e4	1e4	0.0	0.0	1e4
-nbin-	-Emin[eV]-	-Emax[eV]-				
50	0	100				