Modellierung von dielektrisch behinderten Atmosphärendruckentladungen in Argon und Ar-HMDSO-Gasgemischen



5. März 2015

DFG







Inhalt







- 3 Asymmetrische DBE in Argon
- 4 Symmetrische DBE mit Beimischungen von HMDSO
- 5 Zusammenfassung



Motivation





- Dielektrisch behinderte Entladungen (DBE) werden in vielen technischen Anwendungen genutzt, z. B.
 - Oberflächenbehandlung
 - Ozonerzeugung
- Verständnis grundlegender Prozesse und Einflussfaktoren ermöglicht Optimierung von Plasmaquellen.
- Fluid-Modellierung hat sich als nützliches Werkzeug zur theoretischen Analyse von Barrierenentladungen bewährt.





Zeitabhängige, räumlich eindimensionale Beschreibung von Barrierenentladungen [1]



- umfassendes reaktionskinetisches Argonmodell mit 15 Spezies und 110 Reaktionen [1]
- vereinfachte Beschreibung von Hexamethyldisiloxan (HMDSO) Beimischungen

[1] M. M. Becker et al., Journal of Physics D: Applied Physics 46 (2013) 355203



Reaktionskinetisches Argonmodell



Spezies:

- Ar[1p₀] und 11 angeregte Zustände
- Ar⁺- und Ar $_2^+$ -Ionen sowie Elektronen





Anwendungen

- Herstellung siliziumhaltiger Funktionsschichten mittels Plasmapolymerisation (PE-CVD)
- Lösungsmittel mit niedriger Oberflächenspannung

Eigenschaften

- Flüchtige farblose Flüssigkeit mit charakteristischem Geruch
- Strukturformel: $(CH_3)_3SiOSi(CH_3)_3$
- Aggregatzustand: flüssig
- Masse: 162.38 u
- Dichte: 0.76 g/cm³
- Dampfdruck: 42 hPa @ 293 K



Molekülstruktur von HMDSO mit Bindungsenergien in eV



Beschreibung geringer HMDSO-Beimischungen





$$\label{eq:electronenstobionisation} \begin{split} \text{Elektronenstobionisation} \\ \text{HMDSO} + e^- \rightarrow \text{PMDSI}(147)^+ + \text{CH}_3 + 2e^- \end{split}$$

$$\label{eq:Elektron-Ion-Rekombination} \begin{split} \mathsf{PMDSI}(147)^+ + \mathsf{e}^- \to \mathsf{TMSoxy}(89) + \mathsf{DMSIen}(58) \end{split}$$

 $\begin{array}{l} \textit{lonen-Molekül-Reaktionen} \\ Ar^+ + \mathsf{HMDSO} \rightarrow \mathsf{PMDSI}(147)^+ + \mathsf{CH}_3 + \mathsf{Ar} \\ Ar_2^+ + \mathsf{HMDSO} \rightarrow \mathsf{PMDSI}(147)^+ + \mathsf{CH}_3 + 2\mathsf{Ar} \end{array}$

 $\begin{array}{l} \textit{Neutralteilchenkinetik (inklusive Penning-Ionisation)} \\ Ar^* + HMDSO \rightarrow PMDSI(147)^+ + CH_3 + Ar + e^- & (10\,\%) \\ Ar^* + HMDSO \rightarrow TMSoxy(89) + TMSI(73) + Ar & (90\,\%) \\ Ar_2^* + HMDSO \rightarrow TMSoxy(89) + TMSI(73) + 2Ar \end{array}$





Kontinuitätsgleichungen

$$\partial_t n_j + \partial_x \Gamma_j = S_j$$

Energiebilanzgleichung für die Elektronen

$$\partial_t w_{\rm e} + \partial_x Q_{\rm e} = -e_0 \Gamma_{\rm e} E + \tilde{S}_{\rm e} \,, \quad w_{\rm e} = \bar{\varepsilon} n_{\rm e}$$

Poisson-Gleichung für das elektrische Potenzial

$$-\varepsilon_0 \partial_x^2 \Phi = \sum_j q_j n_j \,, \quad E = -\partial_x \Phi$$

Akkumulation von Oberflächenladungen

$$\partial_t \sigma = \sum_j q_j \Gamma_j \cdot \vec{\nu}_j$$



Drift-Diffusionsnäherung für Stromdichten Γ_j und Q_e



Stromdichte der Schwerteilchen

$$\Gamma_j = -\partial_x (D_j n_j) + \operatorname{sgn}(q_j) b_j E n_j$$

 Neuartige Drift-Diffusionsnäherung für Teilchen- und Energiestromdichte der Elektronen abgeleitet aus 4-Momenten-Modell [1,2]

$$\begin{split} \Gamma_{\rm e} &= -\frac{1}{\nu_{\rm e}} \partial_x \left(\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{3m_{\rm e}} + \hat{\xi}_2 \right) n_{\rm e} \right) - \frac{e_0}{m_{\rm e}\nu_{\rm e}} E n_{\rm e} \\ Q_{\rm e} &= -\frac{1}{\tilde{\nu}_{\rm e}} \partial_x \left((\tilde{\xi}_0 + \tilde{\xi}_2) n_{\rm e} \right) - \frac{e_0}{\tilde{\nu}_{\rm e}} \left(\frac{5}{3} \frac{\bar{\varepsilon}}{m_{\rm e}} + \hat{\xi}_2 \right) E n_{\rm e} \end{split}$$

M. M. Becker und D. Loffhagen, *AIP Advances* 3 (2013) 012108
 M. M. Becker und D. Loffhagen, *Adv. Pure Math.* 3 (2013) 343–352



Asymmetrische DBE in Argon



- Gas: Argon, Gasdruck p = 1 atm
- Gastemperatur $T_{\rm gas} = 300 \, {\rm K}$
- Spaltbreite $d = 1.5 \,\mathrm{mm}$
- \blacksquare Dielektrikum: Al_2O_3, $\varepsilon_{\rm r}=$ 10, Dicke $\Delta=$ 0.5 mm
- Sinusförmige Versorgungsspannung mit Frequenz $f = 60 \, \text{kHz}$







ICCD-Bilder einzelner Entladungsereignisse

- Entladungen mit homogenem und mit geschichtetem Entladungskanal werden beobachtet.
- T. Hoder et al., *Phys. Rev. E* 84 (2011) 46404
 M. Becker et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.* 46 (2013) 355203



Vergleich von Modell und Experiment





- Deutliche Änderung des Stromverlaufs bei $V_0 = 2 \text{ kV}$.
- Gute Übereinstimmung zwischen gemessenem und berechnetem Entladungsstrom.



Einfluss der Spannungsamplitude





 Modenübergang bei 1.5–2 kV maßgeblich mitbeeinflusst durch steigenden Beitrag von Chemo-Ionisationsprozessen.







 Zum Zeitpunkt des maximalen Stroms zeigen mittlere Elektronenenergie und elektrisches Feld deutliche Inhomogenitäten im Entladungskanal.



Entladungsverhalten bei $V_0 = 2.5 \text{ kV}$ (II)





 Inhomogenitäten im Entladungskanal werden verursacht durch Ungleichgewicht der unterschiedlichen Ionisationsprozesse.



Symm. DBE mit Beimischungen von HMDSO

- Spaltbreite $d = 1 \,\mathrm{mm}$
- Dielektrika: Glas, $\varepsilon_{\rm r}=$ 4.6, Dicke $\Delta=$ 2 mm

Sinusförmige Versorgungsspannung:

- Amplitude $V_0 = 4 \, \text{kV}$
- Frequenz $f = 87 \, \text{kHz}$
- Gasmischung:
 - Argon + 0... 220 ppm HMDSO
 - Gasdruck $p = 1 \operatorname{atm}$
- Gastemperatur $T_{\rm gas} = 300 \, {\rm K}$



Untersuchungen in Kooperation mit Prof. C.-P. Klages, TU Braunschweig



Entladungsstrom und Spannung





■ Schwach ausgeprägte Stromspitzen mit zeitlich ausgedehntem Stromfluss ⇒ glow/Townsend-artiger Entladungsmodus



Entladungsstrom und Spannung





 Signifikanter Einfluss geringer Beimischungen von HMDSO auf Verlauf von Entladungsstrom und -spannung.



Entladungsstrom und Spannung





 Signifikanter Einfluss geringer Beimischungen von HMDSO auf Verlauf von Entladungsstrom und -spannung.







- Unmittelbare Beeinflussung der Ionisationsprozesse durch Beimischung von HMDSO von wenigen ppm.
- Penning-Ionisation von HMDSO dominiert bei HMDSO-Gehalt > 10 ppm.

Entladungsverhalten bei 110 ppm HMDSO









Zusammenfassung & Ausblick



- Fluid-Modellierung und Analyse zweier DBE-Konfigurationen in Argon und Ar-HMDSO-Gasmischungen durchgeführt.
- Beobachteter Modenübergang mit steigender Spannungsamplitude in asymmetrischer DBE in Argon kann durch zunehmenden Einfluss von Chemo-Ionisationsprozessen erklärt werden.
- Geringe Beimischungen von HMDSO in symmetrischer Argon-DBE verursachen Änderung der Entladungscharakteristik, bedingt durch Beitrag von Penning-Ionisationsprozessen.
- Entwickeltes 1D-t Fluid-Tool vielfältig einsetzbar:
 - DBE in CO₂ für Solarkraftstoffe
 - DBE in $N_2\mathchar`-O_2$ für Ozonerzeugung und Schadstoffabbau
- Erweiterung auf 2D zur weiteren Untersuchung der Schichtstrukturen erforderlich

. . .

Kontakt







EUROPA DEUTSCHLAND MECKLENBURG VORPOMMERN GREIFSWALD

Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V. Adresse: Felix-Hausdorff-Str. 2, 17489 Greifswald Telefon: +49 - 3834 - 554 300, Fax: +49 - 3834 - 554 301 E-mail: welcome@inp-greifswald.de, Web: www.inp-greifswald.de

