



UESC

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE SANTA CRUZ
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia
PPGMC

THIAGO SOUZA PAIM

**SIMULAÇÕES DE MEDIDAS ELETRICAS DE DENSIDADE ELETRONICA NO
PLASMA DE ARGÔNIO POR MEIO DO SOFTWARE COMSOL MULTIPHYSICS**

ILHÉUS – BAHIA

2016

THIAGO SOUZA PAIM

**SIMULAÇÕES DE MEDIDAS ELETRICAS DE DENSIDADE ELETRONICA NO
PLASMA DE ARGÔNIO POR MEIO DO SOFTWARE COMSOL MULTIPHYSICS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia, para obtenção do título de Mestre modelagem computacional.

Orientador: Prof. Dr. Gesil Sampaio Amarante Segundo.

ILHÉUS – BAHIA

2016

P142 Paim, Thiago Souza

Simulações de medidas elétricas de densidade eletrônica no plasma de argônio por meio do software COMSOL Multiphysics / Thiago Souza Paim. – Ilhéus, BA: UESC, 2016.

xvii, 45 f.: il.

Orientador: Gesil Sampaio Amarante Segundo.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual de Santa Cruz. Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia.

Inclui referências bibliográficas.

1. Filmes finos. 2. Física dos plasmas. 3. Argônio. 4. Física dos plasmas – Simulação por computador. 5. Medidas elétricas. 6. Físico-química. I. Título.

CDD 541

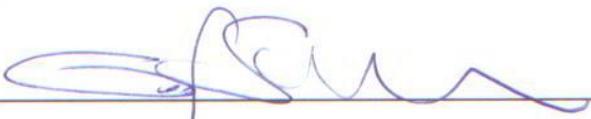
THIAGO SOUZA PAIM

**SIMULAÇÕES DE MEDIDAS ELETRICAS DE DENSIDADE ELETRONICA NO
PLASMA DE ARGÔNIO POR MEIO DO SOFTWARE COMSOL MULTIPHYSICS**

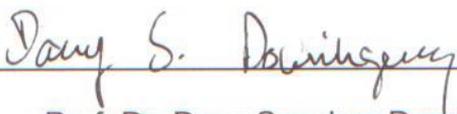
DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO PROGRAMA DE
PÓSGRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL EM CIÊNCIAS E
TECNOLOGIA DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE SANTA CRUZ COMO PARTE
DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE
EM MODELAGEM COMPUTACIONAL.

Ilhéus-BA, 19/07/2016.

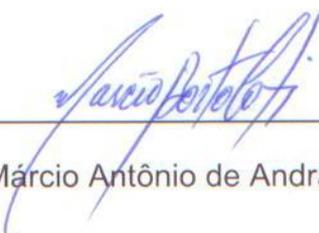
Aprovada por:



Prof. Dr. Gesil Sampaio Amarante Segundo (UESC)



Prof. Dr. Dany Sanchez Dominguez (UESC)



Prof. Dr. Márcio Antônio de Andrade Bortoloti (UESB)



Prof. Dr. Marcelo Bento Pisani (UESC)

Dedico este trabalho a duas pessoas que passaram comigo todas as contingências que a vida nos proporcionou durante esta jornada, dedico a minha querida mãe Joselinda Dias Souza e ao meu maravilhoso filho Enzo Gabriel de Souza Paim.

AGRADECIMENTOS:

Venho agradecer a Deus, na pessoa de Cristo Jesus, que é a plenitude de todo conhecimento, verdade minha, fundamento de minha fé e razão de minha esperança. Agradeço a Ele pela oportunidade desta realização e pelos imensuráveis milagres que me trouxeram até aqui.

Ao meu orientador prof. Dr. Gesil Sampaio Amarante Segundo, por toda a dedicação, apoio, paciência, disposição e orientação durante este período. Por ter sido mais que um orientador, foi acima de tudo amigo, que atento a minhas dificuldades, não me permitiu esmorecer.

Ao meu também orientador Dr. Marcelo Bento Pisani, por toda boa correção e principalmente, pelo olhar de ternura e esperança, mesmo em momentos vacilantes.

Ao professor Dr. Dany Sanchez Dominguez pelo exemplo de excelência em tudo.

Ao professor Dr. Francisco Bruno Souza Oliveira pela dedicação e empenho a orientar todos os discentes e empenhar-se de forma evidente pelo programa.

Aos queridos amigos da turma, principalmente ao Murilo Silva Santana e Luenne Nailam Sousa Nascimento que me acompanharam desde os primeiros dias.

Aos meus pais, meus irmãos, sobrinhos e a meu filho pelo estímulo, carinho e compreensão que foram imprescindíveis para conclusão de mais este percurso.

SIMULAÇÕES DE MEDIDAS ELETRICAS DE DENSIDADE ELETRONICA NO PLASMA DE ARGÔNIO POR MEIO DO SOFTWARE COMSOL MULTIPHYSICS

RESUMO

Neste trabalho de dissertação, é apresentada a avaliação de perfil modelado computacionalmente para medidas elétricas de RF para densidade de elétrons em um plasma acoplado capacitivamente (CCP). Foi realizado um estudo sobre simulação de plasma tratado como fluido, bem como a teoria para interface de difusão provocada por deriva. Como em um reator de CCP, não há correntes de indução. Então, o mesmo é sustentado pela aplicação de um potencial eletrostático sinusoidal por um pequeno espaço preenchido com baixa pressão de gás. O processo utilizado foi realizado com argônio pois possui uma química mais simplificada. Como o potencial eletrostático não pode ser resolvido para o domínio da frequência, pois o mecanismo de deposição e alimentação do reator é altamente não linear e ocorrem em várias frequências diferentes, o modelo foi implementado de forma transiente, deixando atingir um estado de equilíbrio em solução periódica, o que é alcançado depois de uma determinada quantidade de ciclos de RF. Para validação do modelo foram utilizados os resultados de Lieberman(1988) e Cirino (1998). Além da fundamentação de todo o processo pelo método de elementos finitos, os resultados obtidos foram compatíveis com a literatura, o que permite verificação em modelos com geometrias mais complexas além de incrementação de outras medidas que completam uma descrição melhor do plasma em perfis ainda mais específicos.

Palavras-chave: sonda eletrostática; modelagem computacional; elementos finitos; plasma frio.

ELECTRICAL MEASURES SIMULATION OF ELETRONIC DENSITY PLASMA IN SOFTWARE COMSOL MULTIPHYSICS

ABSTRACT

In this dissertation, shows the profile evaluation modeled computationally for RF power measurements for electron density in a capacitively coupled plasma (CCP). A study was performed on plasma treated as fluid simulation and theory for the drift diffusion interface. As in a PCC reactor, no induction current. Then, the same is supported by applying a sinusoidal electrostatic potential by a small space filled with low pressure gas. The process used was carried out with argon as it has a simpler chemical. As the electrostatic potential can not be resolved to the frequency domain because the reactor deposition and feeding mechanism is highly nonlinear and occur in several different frequencies, the model was implemented transiently, leaving reach a steady state solution periodic, which is reached after a certain amount of RF cycles. Model validation was performed using the results of Lieberman (1988) and Cirino (1998). In addition to the reasons of the process by the finite element method, the results were consistent with the literature, which allows verification models with more complex geometries besides incrementing other measures to complete a better description of the plasma profiles further specific.

Keywords: Electrostatic probe; computational modeling; finite elements; cold plasma.

LISTA DE FIGURAS

<u>FIGURA 1 – Representação esquemática de reator de placas paralelas</u>	2
<u>FIGURA 2 – Classificação dos modelos de simulação computacional para plasma</u>	5
<u>FIGURA 3 – Geometria 1D para o reator com 85mm</u>	21
<u>FIGURA 4 – Densidade eletrônica em relação a posição</u>	21
<u>FIGURA 5 – Estrutura da bainha na descarga de plasma capacitivo RF</u>	22
<u>FIGURA 6 – Gráfico da densidade gerado analiticamente sobrescrito no gráfico obtido por meio da simulação. (Reator 60mm)</u>	22
<u>FIGURA 7 – Gráfico da densidade gerado analiticamente sobrescrito no gráfico obtido por meio da simulação. (Reator 85mm)</u>	24
<u>FIGURA 8 – Gráfico de densidade eletrônica para pressão de 10mTorr</u>	24
<u>FIGURA 9 – Gráfico de densidade eletrônica para pressão de 20mTorr</u>	25
<u>FIGURA 10 – Gráfico de densidade eletrônica para pressão de 50mTorr</u>	25
<u>FIGURA 11 – Gráfico de densidade eletrônica para pressão de 100mTorr</u>	26
<u>FIGURA 12 – Gráfico de densidade eletrônica no plasma de argônio para pressão de 10mtorr</u>	26
<u>FIGURA 13 – Gráfico de densidade eletrônica no plasma de argônio para pressão de 20mtorr</u>	27
<u>FIGURA 14 – Gráfico de densidade eletrônica no plasma de argônio para pressão de 50mtorr</u>	28
<u>FIGURA 15 – Gráfico de densidade eletrônica no plasma de argônio para pressão de 100mtorr</u>	28

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – Modelo de colisão e reação	18
TABELA 2 – Reações de superfície	19
TABELA 3 – Comparativo percentual da simulação em contraste com o experimento para a pressão de 10mTorr	26
TABELA 4 – Comparativo percentual da simulação em contraste com o experimento para a pressão de 20mTorr	27
TABELA 5 – Comparativo percentual da simulação em contraste com o experimento para a pressão de 50mTorr	27
TABELA 6 – Comparativo percentual da simulação em contraste com o experimento para a pressão de 100mTorr	28

LISTA DE SÍMBOLOS

V_B	Diferença de Potencial
V_{SP}	Queda de Potencial
V_P	Potencial da superfície
V_f	Potencial flutuante
I_{ES}	Corrente de saturação
n_e	Densidade de elétrons
I_{e0}	Constante
k	Constante de Boltzmann
A_{sda}	Área da sonda
m_e	Massa do elétron
l_{sda}	Comprimento da sonda
n_α	Densidade da carga
q_α	Carga
\bar{v}_α	Velocidade média da espécie α
$f_\alpha(\bar{v})$	É a função distribuição de velocidade de α
Subescrito α	Relativo a partícula α
V	Velocidade
Subescrito x	Relativo a direção da sonda
ω_p	Frequência local do plasma
Δt	Variação temporal

Δx	Variação do espaço x
t	Tempo
N_{total}	Número máximo de partículas do sistema
P_{total}	Número de pontos da grade espacial
Δ (na seção 3.1)	Operador laplaciano
u (na seção 3.1)	Uma função
Ω	Representa o aberto limitado
V (na seção 3.1)	Espaço de funções
v (na seção 3.1)	Função contínua
ϕ	Função discretizada
λ	Debye
τ_e	O vetor de fluxo de elétrons
R_e	É uma fonte ou uma “pia” de elétrons
Subscrito e	Relativo ao elétron
D	Difusividade
p	Pressão
R_e	Perda de energia devido as colisões inelástica R_ε
N_n	Número total de densidade neutra
$\Delta\varepsilon_j$	Perda de energia a partir da reação
σ_k	É a secção transversal de colisão
j_k	O fluxo do vetor difusivo

ϵ_0

A permissividade do vácuo

ϵ_r

Relativo a argônio

SUMÁRIO

RESUMO	VII
ABSTRACT	VIII
1 INTRODUÇÃO	1
1.1. Motivação	4
1.2. Objetivos.....	4
1.3. Organização do trabalho	4
2 SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL	5
2.1 Modelo numérico	6
2.2 Discretização do espaço.....	13
2.3 Condição de contorno	17
2.4 Química do plasma	18
3 RESULTADOS	20
3.1. Comportamento da simulação em contraste com o modelo analítico.....	20
3.2. Comportamento da simulação em contraste com o modelo experimental.....	23
4 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS.....	29
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	30
ANEXO A	33

1 INTRODUÇÃO

Tomando um conceito mais simples, plasmas são constituídos por portadores de carga positivos e negativos, cujas concentrações são, a priori, iguais. Esta é a condição de neutralidade da descarga. Elétrons são espécies muito móveis se comparados aos íons e, sob a ação de campos elétricos, são prontamente acelerados (AMADO, 2013). Colisões inelásticas entre elétrons e moléculas ou átomos dos gases presentes são os principais responsáveis pela geração e manutenção da descarga. Assim, a variação na densidade e/ou energia média destas espécies na descarga influenciam processos como a deposição de filmes, limpeza de superfícies ou tratamentos a plasma. Desta forma, o conhecimento de como condições externas do processo afetam os parâmetros intrínsecos do plasma permite um melhor entendimento dos mecanismos envolvidos no processo e, conseqüentemente, determinar as melhores condições experimentais.

Os processos a plasma possuem um caráter relativamente complexo do ponto de vista físico e químico, e uma melhor compreensão sobre o mesmo envolve muitas técnicas de diagnóstico que têm sido estudadas e aprimoradas em conjunto com a própria utilização destes plasmas em processos de microeletrônica. (D'AGOSTINO,1990)

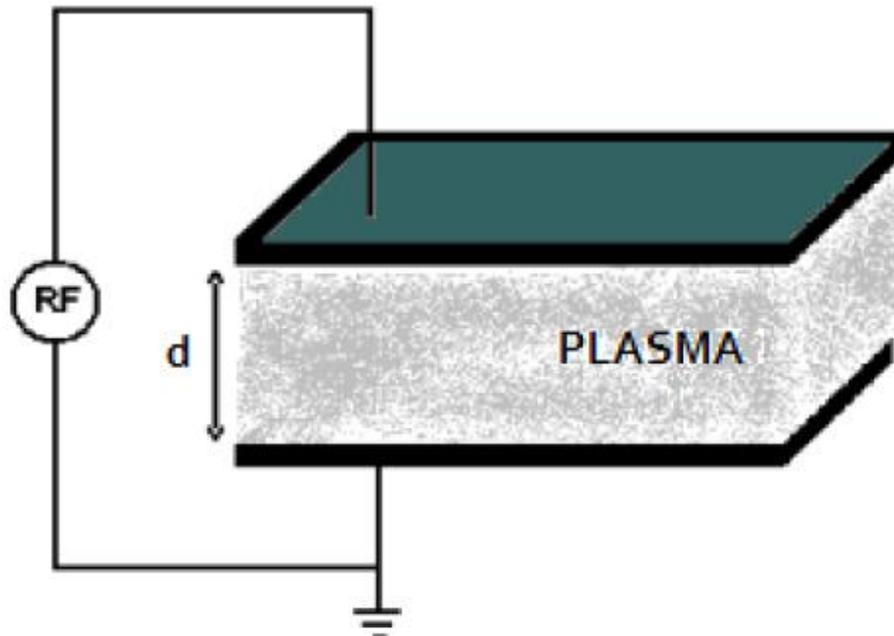
Plasmas têm sido usados para corrosão de traços finos em circuitos integrados desde a década de 1970. Sem essa tecnologia, estaríamos com dificuldades, isto porque, notebooks cada vez mais leves e celulares cada vez mais rápidos, seriam apenas um bom enredo em filmes futuristas. Contudo, tomamos tudo isso, hoje, como realidade. Entre tantos avanços importantes, necessários para que isto fosse possível, a corrosão por plasma tornou os padrões de circuitos algo, não barato e nem simples, mas possível. (DONNELLY,2013)

As principais aplicações são em processos de deposição de filmes finos, corrosão seca, dopagem e de espirramento catódico (OEHRLEIN,1989), (WASA,1992)(KAWAMURA,2008) (REIF,1989). Estes campos de aplicação se utilizam de um plasma com um grau de ionização relativamente baixo (algo da ordem de, no máximo, 1% das moléculas), que por isso é chamado de plasma frio. (LIEBERMAN,1994)

Há várias maneiras de se gerar a descarga de plasma, assim como suas aplicações. Os tipos de plasma que são gerados dependem do tipo de fonte de excitação, seja descarga contínua (DC), ou uma fonte de rádio frequência RF. Os tipos de plasmas são específicos a considerar a temperatura, densidade eletrônica e aplicação. No acoplamento capacitivo Figura1, utilizando uma fonte de potência RF, o plasma é sustentado entre placas paralelas, cuja potência é entregue aos elétrons do plasma por correntes de deslocamento que é aquecido por dissipação ôhmica. Grande parte dos reatores capacitivos industriais ou de pesquisa utilizam RF como

fonte de energia, e são operados com frequências entre 1 a 100 MHz, abaixo da frequência dos elétrons no plasma, onde estes elétrons respondem individualmente ao campo eletromagnético (ISOLDI, 2013).

Figura 1 - Representação esquemática de reator de placas paralelas



Fonte: ISOLDI(2013)

A corrosão por plasma (ou seca) tem aplicação na implementação tanto de microcircuitos quanto de microssistemas eletromecânicos (MEMS). Nas pesquisas em física de plasma voltadas para tais aplicações tecnológicas, a interação entre o plasma gasoso e a superfície do material sob processamento tem uma relevância importante. Pois indica, por exemplo, a qualidade do filme fino produzido nele.

Este trabalho é voltado para a investigação, por meio de simulação de plasmas aplicados ao processamento de semicondutores, em particular à corrosão por plasma.

Os plasmas ditos “plasmas frios”, utilizados para tais corrosões na indústria de microeletrônica e microssistemas (MEMS), são gerados por descarga elétrica à baixa pressão, tipicamente de 0,01 a 1 Torr, excitadas por fontes de tensão DC (Corrente contínua) e/ou RF (Radio frequência), ou na faixa de microondas (0,9 ou 2,45 GHz, tipicamente). (CIRINO, 1998)

Os resultados apresentados neste estudo foram obtidos em reatores onde a descarga é gerada e mantida por gerador de tensão RF operando a 13,56 MHz. A escolha por esta

frequência específica se dá pela mais popular tensão utilizada e não implica em mudanças significativas para geração do plasma.

A escolha do gás, neste caso o Argônio, bem como o tipo de reator simulado, se deu pelo contexto de possíveis simulações experimentais visadas na própria instituição, em específico, o Laboratório de Filmes Finos (LFF)/UESC, que usa o processo físico de *sputtering*, também conhecido por deposição por pulverização catódica, é a deposição de partículas vaporizadas a partir de um alvo (material a ser depositado).

O plasma usado em *sputtering* pode ser confinado perto da superfície do alvo ou pode preencher a região entre o alvo e o substrato. O material a ser depositado pode ser um elemento, liga, mistura, ou um composto, e pode ser evaporado em qualquer direção. A presença do plasma "ativa" o gás tornando-o mais reativo quimicamente. O gás, geralmente pesado e inerte (Ar), é acelerado em direção ao alvo através de um campo elétrico (MATTOX, 1998).

Os estudos de grande parte dos fenômenos físicos comportam uma modelagem matemática, para fins de obter uma solução fundamentada em modelos analíticos, que por vezes são inviáveis. Possibilitando o enfrentamento do problema por meio de um estudo numérico bem fundamentado. (MAGALHÃES, 2014)(WANG, 2011)

A interface de plasma acoplados capacitivamente devem ser utilizadas para estudar as descargas que são sustentadas por um campo eletrostático variável no tempo. Os plasmas acoplados capacitivamente são muito complexos de modelar, porque eles têm de ser resolvidos no tempo do domínio. O modelo demora milhares ou dezenas de milhares de ciclos de RF antes do plasma atingir a sua solução periódica em estado estacionário. Neste ponto, as características no plasma não mudam de um ciclo para o outro e a partir desta verificação pode-se expressar os resultados.

O ambiente computacional utilizado para simulação foi o COMSOL Multiphysics, um dos softwares de análise por elementos finitos para várias físicas.

Esta dissertação versa sobre a avaliação de desempenho da simulação executada, no ambiente computacional, sob o crivo do analítico proposto por Michael A. Lieberman e experimental, construído por Giuseppe Antonio Cirino. É bem verdade que no ambiente COMSOL Multiphysics, podem-se construir modelos 1D, 2D ou 3D, contudo neste trabalho nossa análise foi feita com base modelo 1D.

1.1 Motivação

A motivação deste trabalho veio pelo desafio proposto no programa de pós-graduação, pelo meu orientador, de trabalhar em simulações a plasma, área que goza de poucas publicações e, portanto, uma boa oportunidade de contribuição. E também a fim de colaboração com/em trabalhos em simulação de plasma em reatores RF Sputtering, como é o caso do presente no Laboratório de Filmes Finos (LFF)/UESC.

1.2 Objetivos

Construir, calibrar e caracterizar um sistema que simula medidas de parâmetros elétricos de densidade eletrônica em reatores utilizando plasmas de RF aplicados à microeletrônica (especificamente a 13,56 MHz). Este sistema deve ser capaz de extrair medidas elétricas de densidade fundamentais para o estudo, caracterização e desenvolvimento de processos a plasma;

1.3 Organização do trabalho

Este trabalho está organizado da seguinte forma:

No capítulo 1 é apresentada a introdução, motivação e objetivos do trabalho.

No capítulo 2 é apresentada a revisão bibliográfica sobre os aspectos relevantes para simulação. Também são descritas as equações do método, bem como sua construção, o problema, sua discretização e as condições de contorno.

No Capítulo 4 são apresentados os resultados obtidos da execução da aplicação.

Ao final, são mostradas as principais conclusões relativas aos resultados obtidos e apresentadas propostas para trabalhos futuros.

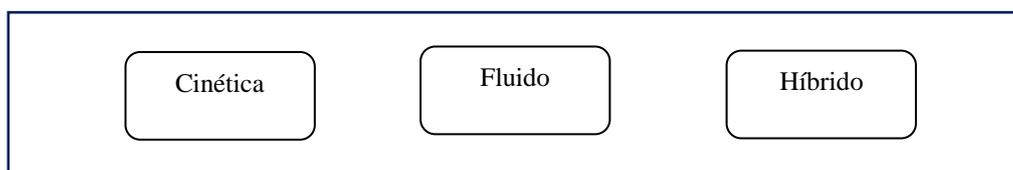
2 SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

É muito comum nos dias de hoje, que os trabalhos acadêmicos tracem paralelos entre os experimentos e teorias construídas analiticamente. (SIMÕES, 2011)

A simulação computacional surgiu para suavizar a distância entre a teoria e os experimentos. De forma mais simples podemos entender a simulação computacional, como uma forma controlada de vislumbrar o fenômeno físico, resolvendo um conjunto de equações matemáticas, onde se baseia o modelo teórico. Neste aporte, temos a condição de obter informações detalhadas do sistema; os diagnósticos não o perturbam; pode-se considerar ou não algum efeito físico específico e principalmente, pode-se os experimentos podem ser reproduzidos em condições semelhantes sem a influência de agentes externos. (ALVES,1999)

Existem normalmente três métodos que são utilizados para modelar os plasmas. Todos os métodos envolvem essencialmente a resolução de uma equação de transporte conveniente, juntamente com equações de Maxwell. (CHEN,1984)(EVANGELISTA, 2016)

Figura 2 - **Classificação dos modelos de simulação computacional para plasma**



Fonte: Adaptado Simões, 2011

A abordagem cinética resolve a função de distribuição para os íons e elétrons em um plasma resolvendo a equação de Boltzmann, ou uma aproximação, ou também a equação de Fokker-Planck. Já a função de distribuição também pode ser calculada usando uma abordagem de Lagrange, onde é comum o uso de equações diferenciais para a posição de elétrons e velocidade, como é o caso em códigos de partículas-em-Cell (PIC). A vantagem desta abordagem é que permite a função de distribuição de energia de elétrons para tomar uma forma arbitrária no espaço de energia e também pode mostrar efeitos que não são capturados por modelos de fluido. Desvantagens incluem dificuldades associadas a implementação químicas de plasma e alto custo computacional. (LYMBEROPOLOUS,1995)

A abordagem por fluido descreve o plasma, em termos macroscópicos. As velocidades de momento são obtidas pela equação de Boltzmann. Isto resulta num conjunto de equações diferenciais parciais acopladas que podem ser resolvidos usando o método de elementos finitos.

(LYMBEROPOLOUS,1995) O ambiente computacional utilizado neste trabalho vale-se desta abordagem. Vantagens da aproximação de fluido é que ele é eficiente para resolver as equações e considerando as complexidades químicas do plasma. Também é fácil de acoplar a dinâmica de elétrons para os campos eletromagnéticos, que também são calculados usando o método de elementos finitos.

As abordagens híbridas tratam alguns dos componentes de um plasma como um fluido e outros cinéticos. Normalmente, os elétrons são tratados cineticamente resolvendo a equação de Fokker-Planck ou usando um método de Monte Carlo, e os íons e outras espécies de radicais são calculados utilizando um modelo de fluido. Neste sentido, híbridos oferecem um compromisso entre a fidelidade de modelos cinéticos e a velocidade e conveniência de modelos de fluidos. (LYMBEROPOLOUS,1995)

2.1 Modelo Numérico

O modelo numérico foi construído de forma unidimensional respeitando as dimensões do reator que será descrito posteriormente. O software utilizado para a simulação foi COMSOL Multiphysics na versão 5.1, software que trabalha utilizando métodos de elementos finitos. O computador utilizado para simulação foi um notebook com processador Intel Core i7 4500U com dois núcleos, num SO Windows 10 pro 64 e com 8GB de memória RAM.

O COMSOL, ambiente que utilizamos neste trabalho, faz uso das equações de Boltzmann para obter os coeficientes de transporte de elétrons e coeficientes de taxa para o modelo de fluido.

A equação de Boltzmann para um conjunto de elétrons de gás ionizado é

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f - \frac{e}{m} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = C[f]_{colisões}(1)$$

onde f é a distribuição de elétrons nas dimensões do espaço, \mathbf{v} são as coordenadas de velocidade, e é a carga elementar, m é a massa de elétrons, \mathbf{E} é o campo eléctrico, $\nabla_{\mathbf{v}}$ é o operador de gradiente de velocidade e C representa a taxa de variação em f devido às colisões.

Para resolver a equação de Boltzmann, faremos algumas simplificações. Para tanto, nós limitamos ao caso onde o campo elétrico e as probabilidades de colisão são todas espacialmente uniforme, pelo menos, na escala do livre caminho médio. A distribuição de elétrons f é então simétrico no espaço de velocidades em volta da direção do campo elétrico. A posição f no espaço pode variar apenas ao longo da direção do campo e utilizando coordenadas esféricas no espaço das velocidades, temos:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cos \theta \frac{\partial f}{\partial z} - \frac{e}{m} E \left(\cos \theta \frac{\partial f}{\partial v} + \frac{\sin^2 \theta}{v} \frac{\partial f}{\partial \cos \theta} \right) = C[f] \quad (2)$$

onde v é a magnitude da velocidade, θ é ângulo entre a velocidade e a direção do campo elétrico e z a posição ao longo deste sentido.

Para resolver a equação (2) iremos ampliar f em termos dos polinômios de Legendre para em seguida determinar um conjunto de equações para os coeficientes de expansão. Em 1946 T. Holstein discute a possibilidade de utilização apenas de dois termos deste polinômio, que nos renderá resultados úteis. (HAGLAAR,2005) Assim expandiremos f para o segundo termo do polinômio e teremos:

$$f(v, \cos \theta, z, t) = f_0(v, z, t) + f_1(v, z, t) \cos \theta \quad (3)$$

com f_0 sendo a parte isotrópica de f e f_1 a parte anisotrópica da perturbação. É importante perceber que f_1 é negativo por conta do campo de direção. Utilizando a normalização de f como

$$\iiint f d^3 v = 4\pi \int_0^\infty f_0 v^2 dv = n$$

onde n é o número da densidade eletrônica.

Para se determinar as equações para f_1 e f_0 é suficiente substituir a equação (3) na equação (2), multiplicando pelo polinômio de Legendre e integrando sobre o $\cos \theta$:

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \frac{\gamma}{3} \varepsilon^2 \frac{\partial f_1}{\partial z} - \frac{\gamma}{3} \varepsilon^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial (\varepsilon E f_1)}{\partial \varepsilon} = C_0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \gamma \varepsilon^2 \frac{\partial f_0}{\partial z} - E \gamma \varepsilon^2 \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -N \sigma_m \gamma \varepsilon^2 f_1 \quad (6)$$

onde $\gamma = \sqrt{\frac{2e}{m}}$ é uma constante e $\varepsilon = \sqrt{\frac{v}{\gamma}}$ é a energia eletrônica. O lado direito da equação (6) contém o impulso de transferência de momento na seção transversal σ_m consistindo por k processos de colisões entre as partículas de gás

$$\sigma_m = \sum_k x_k \sigma_k (7)$$

onde x_k é a fração molar da espécie alvo no processo de colisão. Observando-se que o gás é uma mistura de diferentes espécies, incluindo estado animados (INGOLD, 1989). Para colisões elásticas, σ_k é a efetiva transferência de momento na seção transversal representando possível anisotropia da dispersão elástica. Para colisões inelásticas σ_k é toda a seção transversal, assumindo que a velocidade de elétrons restante após a colisão é dispersa isotropicamente. É importante ressaltar que omitir as contribuições das colisões inelásticas mudam os resultados, contudo a literatura não é clara quanto a esta conclusão.

Por meio do uso de algumas técnicas podemos simplificar as equações (5) e (6), fazendo suposições acerca da dependência temporal e espacial de f_0 e f_1 . Como alguns processos de colisão não conservam o número total de elétrons, não podemos considerar f constante no tempo e no espaço. Assim, tomando como suporte os trabalhos (HOLSTEN, 1946) e (PHELPS, 1985) vamos separar a dependência energética de f de sua dependência do tempo assumindo que o espaço

$$f_{0,1}(\varepsilon, z, t) = \frac{1}{2\pi\gamma^3} \gamma F_{0,1}(\varepsilon) n(z, t) \quad (8)$$

como sendo a distribuição de energia do tempo e espaço constantes em $F_{0,1}$ e normalizando-a

$$\int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} F_0 d\varepsilon = 1. \quad (9)$$

A dependência do tempo e do espaço para a densidade eletrônica n , agora é relacionada a taxa líquida de produção eletrônica. Para isso, consideramos dois casos simples que representam a uma boa parte dos experimentos. (HAGLAAR, 2005) A maioria das descargas assemelham-se a pelo menos um destes dois casos:

- Este primeiro se baseia no *Townsend* pulsada (TAGASHIRA, 1977). Onde a taxa de crescimento temporal da densidade eletrônica é igual frequência de produção \bar{v}_i :

$$\frac{1}{n_e} \frac{\partial n_e}{\partial t} = \bar{v}_l \equiv N\gamma \int_0^\infty (\sum_{k=\text{ionização}} x_k \sigma_k - \sum_{k=\text{ligação}} x_k \sigma_k) \times \varepsilon F_0 d\varepsilon \quad (10)$$

onde a soma é sobre os processos de ionização e de ligação e x_k é a fracção molar da espécie alvo de processo de colisão k .

Retornando a equação (6) temos

$$F_1 = \frac{E}{N} \frac{1}{\tilde{\sigma}_m} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \quad (11)$$

onde

$$\tilde{\sigma}_m = \sigma_m + \frac{\bar{v}_l}{N\gamma\sqrt{\varepsilon}}. \quad (12)$$

Substituindo na equação (5), encontramos

$$-\frac{\gamma}{3} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\left(\frac{E}{N} \right)^2 \frac{\varepsilon}{\tilde{\sigma}_m} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right) = \tilde{C}_0 + \tilde{R} \quad (13)$$

onde o termo de colisão é

$$\tilde{C}_0 = 2\pi\gamma^3 \sqrt{\varepsilon} \frac{C_0}{Nn} \quad (14)$$

que dividido pela densidade do gás N e a densidade eletrônica n , com respeito ao termo de colisão C_0 na equação (5), o que o torna independente dessas densidades. O termo

$$\tilde{R} = -\frac{\bar{v}_l}{N} \sqrt{\varepsilon} F_0 \quad (15)$$

garante que F_0 permaneça normalizado para a unidade no caso da produção de elétrons.

- Este segundo baseia-se no *Townsend* estável (TAGASHIRA,1977). Enquanto os elétrons derivam do campo eléctrico contra o seu fluxo e a densidade crescer exponencialmente com um crescimento espacial com taxa constante, que está relacionado com a rede produção de elétrons por

$$\alpha \equiv -\frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial z} = -\frac{\bar{v}_l}{w}, \quad (16)$$

onde a velocidade média w é determinada por F_1 , constante no espaço e negativo.

Usando a definição de α , a equação (6) fica

$$F_1 = \frac{1}{\sigma_m} \left(\frac{E}{N} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} + \frac{\alpha}{N} F_0 \right) \quad (17)$$

e a equação (5) pode ser escrita da forma

$$-\frac{\gamma}{3} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\left(\frac{E}{N} \right)^2 \frac{\varepsilon}{\tilde{\sigma}_m} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right) = \tilde{C}_0 + \tilde{R} \quad (18)$$

onde o desta vez, $\tilde{\sigma}_m = \sigma_m$ e a renormalização do crescimento fica

$$\tilde{R} = \frac{\alpha \gamma}{N^3} \left[\frac{\varepsilon}{\sigma_m} \left(2 \frac{E}{N} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} + \frac{\alpha}{N} F_0 \right) + \frac{E}{N} F_0 \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\frac{\varepsilon}{\sigma_m} \right) \right]. \quad (19)$$

O valor de α vem da combinação das equações (16) e (17), assim

$$w = \frac{1}{3} \gamma \int_0^\infty F_1 \varepsilon d\varepsilon \equiv -\mu E + \alpha D = -\frac{\bar{v}_l}{\alpha} \quad (20)$$

e

$$\alpha = \frac{1}{2D} (\mu E - \sqrt{(\mu E)^2 - 4D\bar{v}_l}) \quad (21)$$

com μ sendo o mobilidade eletrônica e D o coeficiente de difusão.

Podemos também usar, para alta frequência em campos oscilantes, a seguinte abordagem para o campo elétrico (HAGELAAR,2005):

$$E(t) = E_0 e^{i\omega t}. \quad (22)$$

Utilizando outro termo de aproximação, temos:

$$f(v, \cos \theta, z, t) = f_0(v, z, t) + f_1(v, z, t) \cos \theta e^{i\omega t} \quad (23)$$

em que o tempo de variação f_0 e f_1 é lento em relação a oscilação, f_1 pode ser complexa para ter em conta desvios de fase no que diz respeito ao campo elétrico. Para frequências de campo intermediárias, onde a transferência de energia por ciclo é nem completa nem insignificante, se faz necessário o uso de outra abordagem. Usando a equação (23), procedemos como antes,

somente o modelo de crescimento temporal, faz sentido, porque a alta campo de frequência não leva em conta o tempo médio de transporte, assim obtemos

$$F_1 = \frac{E_0}{N} \frac{\tilde{\sigma}_m - iq}{\tilde{\sigma}_m^2 + q^2} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \quad (24)$$

onde $\tilde{\sigma}_m = \sigma_m + \frac{\bar{v}_i}{N\gamma\sqrt{\varepsilon}}$ e $q = \frac{\omega}{N\gamma\sqrt{\varepsilon}}$. Substituindo na equação para F_0 e a média da absorção de energia ao longo do ciclo de campo, obtemos finalmente

$$-\frac{\gamma}{3} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\left(\frac{E_0}{N} \right)^2 \frac{\tilde{\sigma}_m \varepsilon}{2(\tilde{\sigma}_m^2 + q^2)} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right) = \tilde{C}_0 + \tilde{R}. \quad (25)$$

Para clarificar a compreensão dos termos de colisão, presentes nas equações (13), (18) e (25), faremos o detalhamento a seguir:

Colisões elásticas. Os efeitos destas colisões podem ser descritos por (ALLIS,1956)

$$\tilde{C}_{0,k=elástico} = \gamma x_k \frac{2m}{M_k} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\varepsilon^2 \sigma_k \left(F_0 + \frac{k_B T}{e} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right) \right), \quad (27)$$

onde M_k é a massa das partículas alvo e T sua temperatura. O primeiro termo representa a energia cinética perdida das partículas alvo e o segundo termo é a energia adquirida a partir das partículas alvo, assumindo que estes são Maxwelliana, este termo só é importante quando $\frac{E}{N}$ for muito baixo.

Excitação / desexcitação. Os efeitos destas colisões podem ser vistos em (HOLSTEIN,1946):

$$\tilde{C}_{0,k=ineslástico} = -\gamma x_k [\varepsilon \sigma_k(\varepsilon) F_0(\varepsilon) - (\varepsilon + u_k) \sigma_k(\varepsilon + u_k) F_0(\varepsilon + u_k)], \quad (28)$$

onde u_k é a energia limiar da colisão e é negativo na desexcitação.

Ionização. Os efeitos destas colisões podem ser vistos em (OPAL,1971):

$$\tilde{C}_{0,k=ionização} = -\gamma x_k [\varepsilon \sigma_k(\varepsilon) F_0(\varepsilon) - 2(2\varepsilon + u_k) \sigma_k(2\varepsilon + u_k) F_0(2\varepsilon + u_k)] \quad (29)$$

em que o fator 2 no termo de dispersão representa o elétrons secundários a serem inseridos na mesma energia que a elétrons primários. No caso do elétron primário levar todo remanescente de energia.

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{0,k=ionização} = & -\gamma x_k [\varepsilon \sigma_k(\varepsilon) F_0(\varepsilon) - (\varepsilon + u_k) \sigma_k(\varepsilon + u_k) F_0(\varepsilon + u_k)] + \\ & \delta(\varepsilon) \gamma x_k \int_0^\infty u \sigma_k(u) F_0(u) du \end{aligned} \quad (30)$$

onde δ é a função delta de Dirac. O último termo denota os elétrons secundários que são inseridos quando houver zero de energia.

Ligação. A ligação faz apenas a remoção dos elétrons na distribuição de energia.

$$\tilde{C}_{0,k=ligação} = -\gamma x_k \varepsilon \sigma_k(\varepsilon) F_0(\varepsilon) \quad (31)$$

Elétron-Elétron colisões. Os efeitos dessa colisão podem ser vistos em (ROCKWOOD, 1973).

$$\tilde{C}_{0,e} = a \frac{n}{N} \left[3\sqrt{\varepsilon} F_0^2 + 2\varepsilon^{\frac{3}{2}} \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\sqrt{\varepsilon} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right) + \psi \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right], \quad (32)$$

onde

$$\psi = 3A_1 - \frac{A_2}{\varepsilon} + 2\sqrt{\varepsilon} A_3 \quad (33)$$

$$A_1 = \int_0^\varepsilon \sqrt{u} F_0(u) du \quad (34)$$

$$A_2 = \int_0^\varepsilon u^{\frac{3}{2}} F_0(u) du \quad (35)$$

$$A_3 = \int_\varepsilon^\infty F_0(u) du \quad (36)$$

$$a = \frac{e^2 \gamma}{24\pi \varepsilon_0^2} \ln \Lambda, \quad \Lambda = \frac{12\pi(\varepsilon_0 k_B T_e)^{\frac{3}{2}}}{e^3 \sqrt{n}}, \quad k_B T_e = \frac{2}{3} e A_2(\infty) \quad (37)$$

Manipulando estas grandezas e constantes, temos

$$\tilde{C}_{0,e} = a \frac{n}{N} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[3A_1 F_0 + 2(A_2 + \varepsilon^{\frac{3}{2}} A_3) \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right], \quad (38)$$

que expressa o termo de colisão elétron-elétron como a divergência do fluxo de elétrons no espaço de energia. O primeiro termo da equação simula refrigeração por colisões com elétrons frios, A_1 é dado para fração elétrons abaixo de ε e o segundo termo representa o aquecimento, para energias mais altas.

Seguindo a mesma construção e com base em combinações das equações já declaradas anteriormente, temos a apresentação da equação de continuidade convecção-difusão no espaço de energia para F_0 .

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\tilde{w} F_0 - \tilde{D} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right) = \tilde{S} \quad (39)$$

onde

$$\tilde{w} = -\gamma \varepsilon^2 \sigma_\varepsilon - 3a \frac{n}{N} A_1, \quad (40)$$

$$\tilde{D} = \frac{\gamma}{3} \left(\frac{E}{N} \right)^2 \frac{\varepsilon}{\tilde{\sigma}_m} + \frac{\gamma k_B T}{e} \varepsilon^2 \sigma_\varepsilon + 2a \frac{n}{N} (A_2 + \varepsilon^2 A_3), \quad (41)$$

$$\sigma_\varepsilon = \sum_{k=\text{elástico}} \frac{2m}{M_k} x_k \sigma_k, \quad (42)$$

$$\tilde{S} = \sum_{k=\text{inelástico}} \tilde{C}_{0,k} + G. \quad (43)$$

É importante interpretar o lado esquerdo da equação (39) como a divergência do fluxo de elétrons no espaço de energia. E em seguida este fluxo tem a parte de convecção com uma velocidade \tilde{w} de fluxo negativo, representando a redução por colisões elásticas com partículas menos energéticas (neutros ou elétrons), e também uma parte difusora com coeficiente de difusão \tilde{D} , que representa o aquecimento pelo campo e pela colisões elásticas com partículas mais energéticas. É importante ressaltar o termo fonte \tilde{S} no lado direito da equação (39), que tem a propriedade especial que é não-local. Isto significa que a equação não é tipo comum de equação diferencial e resolvê-lo requer alguns cuidados especiais.

2.2 Discretização do espaço

A discretização é feita por meio da equação (39) em uma grade no espaço de energia, que consistem em uma serie de intervalos, chamados de células da grade, numeradas $i = 1, 2, \dots$ onde o subscrito acena ao centro da célula da grelha i e o índice $i + \frac{1}{2}$ são fronteiras entre as células i e $i + 1$. Em F_0 a distribuição de energia é definido nos centros das células. Para cada

valor de i temos uma equação linear que relaciona o valor $F_{0,i}$ local, para valores $F_{0,j}$ em outras células, obtém-se integrando a equação diferencial:

$$\left[\tilde{w}F_0 - \tilde{D} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right]_{i+\frac{1}{2}} - \left[\tilde{w}F_0 - \tilde{D} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right]_{i-\frac{1}{2}} = \int_{\varepsilon_{i-\frac{1}{2}}}^{\varepsilon_{i+\frac{1}{2}}} \tilde{S} d\varepsilon \quad (44)$$

e em seguida a discretização dos outros termos.

O segundo termo da equação pode ser discretizado pelo esquema exponencial encontrado em (SCHARFETTER,1969). Comumente usado para problemas de difusão-convecção:

$$\left[\tilde{w}F_0 - \tilde{D} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} \right]_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\tilde{w}_{i+\frac{1}{2}} F_{0,i}}{1 - \exp\left[-z_{i+\frac{1}{2}}\right]} + \frac{\tilde{w}_{i+\frac{1}{2}} F_{0,i+1}}{1 - \exp\left[z_{i+\frac{1}{2}}\right]}, \quad (45)$$

onde $z_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\tilde{w}_{i+\frac{1}{2}}(\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i)}{\tilde{D}_{i+\frac{1}{2}}}$ (número de Peclet). Quando as colisões inelásticas não desempenham um papel importante, este sistema é bastante preciso. Os termos de colisão elétron-elétron em \tilde{w} e \tilde{D} dependem de F_0 e requerem iteração. Para acelerar a convergência estes termos são corrigidos de maneira implícita. Além disso, começamos a método de iteração por uma função de distribuição de Maxwell em uma temperatura deduzida a partir do balanço de energia global dos elétrons.

Podemos ver o lado direito da equação, os termos de colisão são não-local em energia, mas linear em F_0 e são avaliados totalmente de forma implícita, o qual envolve a inversão de uma matriz direta que é relativamente esparsa, dependendo do limiar diferente de energias das colisões. A discretização se segue:

$$\int_{\varepsilon_{i-\frac{1}{2}}}^{\varepsilon_{i+\frac{1}{2}}} \tilde{S} d\varepsilon \equiv -P_i F_{0,i} + \sum_j Q_{i,j} F_{0,j} \quad (46)$$

onde os dois termos representam o espalhamento de saída e espalhamento de entrada:

$$P_i = \sum_{inelástico} \gamma x_k \int_{\varepsilon_{i-\frac{1}{2}}}^{\varepsilon_{i+\frac{1}{2}}} \varepsilon \sigma_k \exp[(\varepsilon_i - \varepsilon)g_i] d\varepsilon, \quad (47)$$

$$Q_{i,j} = \sum_{inelástico} \gamma x_k \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \varepsilon \sigma_k \exp[(\varepsilon_j - \varepsilon)g_j] d\varepsilon \quad (48)$$

onde o intervalo $[\varepsilon_1, \varepsilon_2]$ é a sobreposição das células j e a i é deslocada pela energia u_k :

$$\varepsilon_1 = \min \left(\max \left(\varepsilon_{i-\frac{1}{2}} + u_k, \varepsilon_{j-\frac{1}{2}} \right), \varepsilon_{j+\frac{1}{2}} \right) \quad (49)$$

$$\varepsilon_2 = \min \left(\max \left(\varepsilon_{i+\frac{1}{2}} + u_k, \varepsilon_{j-\frac{1}{2}} \right), \varepsilon_{j+\frac{1}{2}} \right). \quad (50)$$

Os fatores exponenciais em P_i e os integrais em Q_i assumem a distribuição exponencial por partes em F_0 , com uma inclinação logarítmica estimada como

$$g_i = \frac{1}{\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_{i-1}} \ln \left(\frac{F_{0,i+1}}{F_{0,i-1}} \right). \quad (51)$$

Apesar desta técnica requerer iteração, sua convergência é extremamente rápida. A P e Q integrais são calculadas de maneira exata assumindo que as seções transversais sejam lineares entre os pontos especificados pelo usuário em uma tabela de seção transversal contra energia. Se faz necessário impor condições de contorno onde não haja fluxo de energia no espaço até que a energia seja zero, além adicionar condições de normalização.

A equação de continuidade pode ser obtida por meio da equação (5), quando multiplicamos por $\sqrt{\varepsilon}$ e integrando todas as que dependem de energia, teremos:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma}{\partial z} = S, \quad (52)$$

onde S é termo relativo a fonte de elétrons e o fluxo de elétrons é determinado por

$$\Gamma = nw = n \frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \varepsilon F_1 d\varepsilon. \quad (53)$$

Utilizando a esta equação junta a equação (6), encontramos a conhecida equação de difusão provocada por deriva

$$\Gamma = -\mu E n - \frac{\partial(Dn)}{\partial z}, \quad (54)$$

onde a mobilidade e coeficiente de difusão são

$$\mu N = -\frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{\tilde{\sigma}_m} \frac{\partial F_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon, \quad (55)$$

$$DN = \frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{\tilde{\sigma}_m} F_0 d\varepsilon. \quad (56)$$

A efetiva transferência de momento na seção transversal $\tilde{\sigma}_m$ inclui o efeito de um eventual crescimento temporal dada pela equação (12). Apesar da energia de distribuição normalizada, F_0 assume como sendo independentes do espaço onde as equações de fluídos resolvem as equações de Boltzmann. Os coeficientes de difusão na equação (54) aparecem dentro do divergente como é feito na lei de Flick.

Vários coeficientes podem ser definidos para o cálculo das taxas de reações, o solver do ambiente utilizado faz uso do cálculo das taxas de coeficientes em unidades de volume por unidade de tempo como:

$$k_k = \gamma \int_0^{\infty} \varepsilon \sigma_k F_0 d\varepsilon, \quad (57)$$

a partir da qual a velocidade de reação para a colisão dos processos k é obtida pela multiplicação da densidade dos elétrons nas espécies-alvo:

$$R_x = k_k x_k N n. \quad (58)$$

Podemos também definir Townsend coeficientes (α_k (em unidades de comprimento) de forma inversa

$$R_k = \alpha_k x_k |\Gamma|. \quad (59)$$

Para os casos de crescimento temporal e espacial discutidos anteriormente, estes coeficientes de Townsend são, então, dado por

$$\frac{\alpha_k}{N} = \frac{k_k \alpha}{\bar{v}_i} \quad (60)$$

e

$$\frac{\alpha_k}{N} = \frac{k_k}{\mu E}. \quad (61)$$

Usando coeficientes de Townsend, as taxas de reação são calculadas a partir do fluxo de elétrons, em vez de ser a partir da densidade eletrônica. É recomendável utilizar coeficientes de taxa em situações em que os elétrons se difundem contra a força elétrica e os coeficientes de Townsend em situações onde o fluxo é conduzido pelo campo. A utilização de coeficientes é

Townsend especialmente recomendado para modelar a região do cátodo em descargas DC, onde são pobres a realidade física para difusão provocada por deriva e leva a grandes erros na densidade de elétrons, mas praticamente não afetam o fluxo de elétrons nos modelos sem equação de energia e não pode mesmo ter uma solução quando coeficientes de taxa são utilizados próximos do cátodo.

2.3 Condição de contorno

Elétrons são perdidos para a parede devido ao movimento aleatório dentro de alguns livres caminhos médios, devido aos efeitos secundários de emissão, resultando na seguinte condição de contorno para o fluxo de elétrons:

$$-\mathbf{n} \cdot \Gamma_e = \left(\frac{1}{2} v_e t h^{n_e} \right) - \sum_p \gamma_p (\Gamma_p \cdot \mathbf{n}) \quad (62)$$

e o fluxo de energia do elétron:

$$-\mathbf{n} \Gamma_e = \left(\frac{5}{6} v_e t h^{n_e} \right) - \sum_p \varepsilon_p \gamma_p (\Gamma_p \cdot \mathbf{n}) \quad (63)$$

O ganho de elétrons é o segundo termo do lado direito de (62) e é devido a efeitos das emissões secundárias, sendo γ_p o coeficiente de emissão secundária. O segundo termo em (63) é o fluxo de energia emissão secundária, sendo ε_p a energia média dos elétrons secundários. Para as espécies pesados, íons são perdidos para a parede, devido a reações de superfície e o fato de o campo eléctrico ser dirigido para a parede:

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{j}_k = M_w R_k + M_w c_k Z \mu_k (\mathbf{E} \cdot \mathbf{n}) \text{ onde } Z \mu_k (\mathbf{E} \cdot \mathbf{n}) > 0 \quad (64)$$

A acumulação de carga de superfície é adicionada à superfície de dieléctrico por meio da seguinte condição de contorno:

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_2) = \rho_s \quad (65)$$

onde ρ_s é a densidade de carga de superfície, que é calculada através da resolução da seguinte equação diferencial ordinária (EDO) nas superfícies:

$$\frac{d\rho_s}{dt} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}_i + \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}_e \quad (66)$$

onde $\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}_i$ é a componente normal da densidade de corrente iónica total a nível da parede, e $\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}_e$ é a componente normal da densidade de corrente de electrões total no muro. A descarga é acionada por um potencial eléctrico sinusoidal aplicado ao exterior limite da placa dieléctrica:

$$V = v_o \sin(\omega t) \quad (67)$$

onde o pico de tensão aplicada, V_0 é 300 V ea frequência angular, a RF frequência sendo 13,56 MHz. O contorno exterior da outra placa dieléctrica é aterrada. O limite esquerdo está ligado à terra.

2.4 Química do Plasma

Nesta seção apresentaremos a tabela utilizada pelo ambiente computacional COMSOL Multiphysics, esta tabela pode ser encontrada no manual do próprio ambiente.

A escolha do argônio se deu por dois motivos, primeiro é um dos gases mais simples de implementar a baixas pressões e muito utilizado, inclusive aqui na instituição, para geração de descargas de plasma. Eletronicamente os estados excitados podem ser aglomerados para uma única espécie que resulta num mecanismo químico que consiste de apenas 3 espécies e 7 reações: (ROBERTO; SMITH; VERBONCOEUR, 2003; CIZZOTO et al., 2002)

Tabela 1- **Modelo de colisão e reação**

Reação	Fórmula	Tipo	$\Delta\varepsilon(eV)$
1	$e + Ar \rightarrow e + Ar$	Elástica	0
2	$e + Ar \rightarrow e + Ar_s$	Excitação	11,5

3	$e + Ars \rightarrow e + Ar$	Superelastica	-11,5
4	$e + Ar \rightarrow 2e + Ar^+$	Ionização	15,8
5	$e + Ars \rightarrow 2e + Ar^+$	Ionização	4,24
6	$Ars + Ars \rightarrow e + Ar + Ar^+$	Ionização de escrita	-
7	$Ars + Ar \rightarrow Ar + Ar$	Esfriamento Metaelastico	-

Fonte: Manual COMSOL

Em um reator capacitivo a densidade de elétrons e densidade de espécies excitadas é relativamente baixa, no intervalo entre 10^9 e 10^{15}cm^{-3} , a ionização gradual não é tão importante quanto nas descargas de alta densidade. Além de reações volumétricas, as seguintes reações são executadas na superfície: (HAGELAAR,2005)

Tabela 2 - **Reações de superfície**

Reação	Fórmula	Coefficiente de fixação
1	$Ars \rightarrow Ar$	1
2	$Ar^+ \rightarrow Ar$	1

Fonte: Manual COMSOL

Quando um átomo de argônio metaestável faz contato com a parede, haverá uma boa probabilidade de reverter para um átomo de argônio no estado fundamental. (HAGELAAR,2005)

3 RESULTADOS

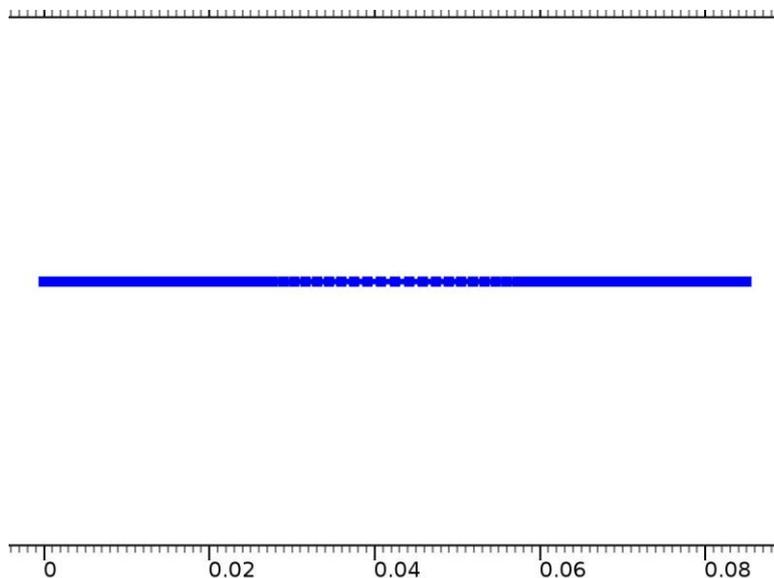
Neste capítulo são apresentados os resultados das simulações de parâmetros elétricos no plasma, a saber, densidade eletrônica. É importante ressaltar que as comparações destas simulações foram feitas a medida dos resultados experimentais analíticos por Lieberman(1988) e experimentais por Cirino(1998).

3.1 Comportamento da simulação em contraste com o modelo analítico

Para realização desta validação foram utilizadas duas geometrias unidimensionais para um reator de plasmas com acoplamento capacitivo, a primeira tendo o comprimento de 60 mm e a última com comprimento de 85mm, Figura 3.

Na construção do modelo, é levado em consideração a formação da bainha, que fica situada próximo ao limite no eixo das abscissas.

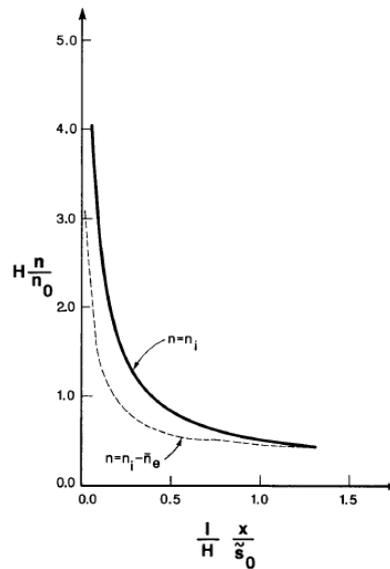
Figura 2 – Geometria 1D para o reator com 85mm



Para apreciação correta da simulação, foi levada em consideração o intervalo cuja a resolução analítica foi executada (bainha). Neste contexto, temos a pressão do gás argônio

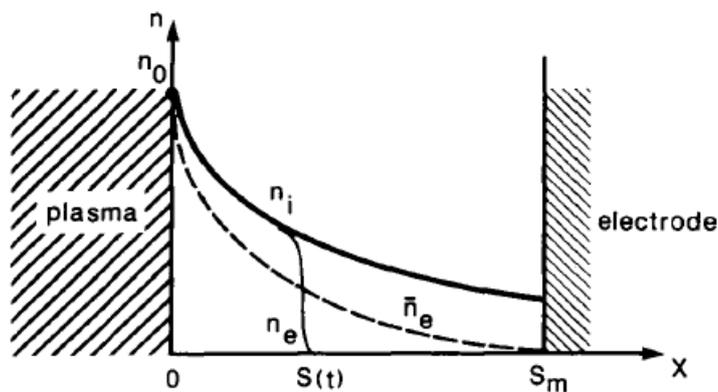
variando de 10 a 300mtorr, ao mesmo tempo que a tensão varia entre 50-500V. Lieberman, em sua construção analítica do comportamento do plasma na bacia, normalizou a grandeza de nosso interesse em relação a distância do eletrodo ao plasma, deste modo a qualidade da simulação foi avaliada no seu contexto comportamental. Antes podemos perceber, Figura 4, que o autor estabelece a normalização onde $H = \frac{1}{\pi} \frac{s_0^2}{\sqrt{\frac{\epsilon_0 T_e}{en_0}}}$, que nos comunica a altura da descarga em relação a posição n_0 , Figura 5.

Figura 3 - Densidade eletrônica em relação a posição



Fonte: Lieberman 1988

Figura 4 – Estrutura da bacia na descarga de plasma capacitivo RF



Fonte: Lieberman 1988

Ao sobrescrever o gráfico estabelecido por Lieberman no gerado na simulação feita no ambiente computacional, COMSOL Multiphysics, Figura 6 e Figura 7, torna-se simples a verificação de um erro entre o que foi simulado e o que, analiticamente foi construído. Este erro sinaliza um caminho para o refinamento da simulação, haja vista que nosso modelo é uma redução da realidade, seja por causa das aproximações feitas e/ou pela dimensão proposta para simulação.

Figura 5 – Gráfico da densidade gerado analiticamente sobrescrito no gráfico obtido por meio da simulação. (Reator 60mm)

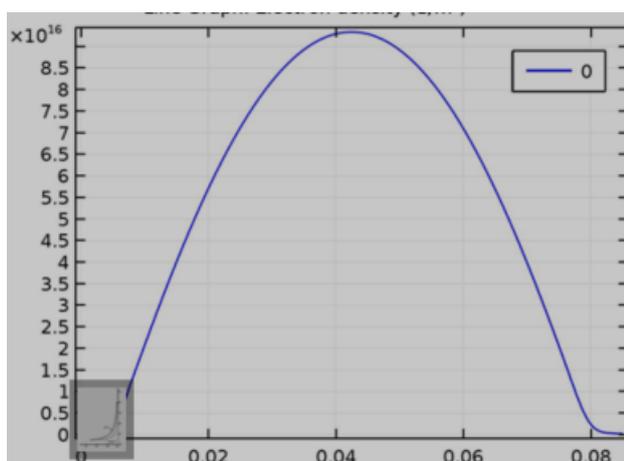
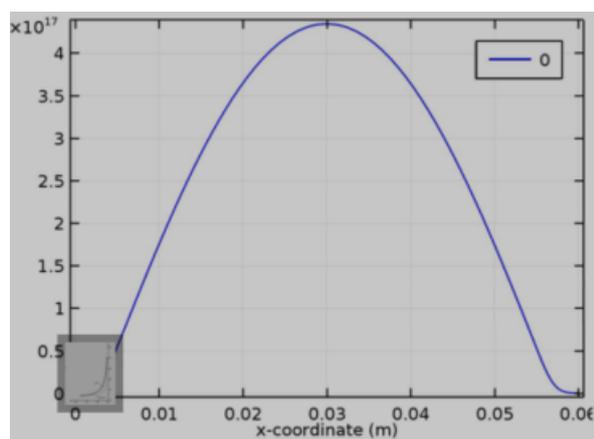


Figura 6 - Gráfico da densidade gerado analiticamente sobrescrito no gráfico obtido por meio da simulação. (Reator 60mm)



O comprimento do reator influencia o tempo de execução da simulação e aumenta o domínio onde ocorrerão choques entre as espécies. Porém não se nota a necessidade de grandes distâncias entre os eletrodos para a geração do plasma. Por isso em nossa abordagem utilizamos as geometrias que atendem tanto o reator existente no LFF/UESC quanto o reator utilizado na caracterização construída por Cirino, em seu trabalho experimental.

Quantitativamente não foi possível mensurar o erro oriundo da simulação, contudo percebeu-se que a medida que a pressão aumenta juntamente com o aumento da voltagem, o erro aumenta e/ou existe problemas de convergência para o modelo. Os problemas para convergência, são em sua maioria provenientes da quantidade de ciclos cuja a variação deve ser mínima para se estabelecer convergência, em nosso caso 505 ciclos. Estes ciclos respondem apenas ao tempo médio do campo elétrico. Quando se diminui a pressão aumentando a voltagem, as colisões elétron-elétron aumentam fortemente as taxas de colisões inelásticas, visto que o mecanismo de transferência de energia a partir dos campos para os elétrons é um processo altamente não linear, essa grande oscilação nas demais espécies não permite a verificação estabelecida pelo solver do ambiente computacional e, portanto, o erro. Assim se faz necessário o aporte experimental para melhorar a análise acerca de nossa medida de interesse e, portanto, trataremos deste aporte na seção seguinte.

3.2 Comportamento da simulação em contraste com o modelo experimental

Para realização deste comparativo foi tomado como referência o reator de 85mm, é bem verdade que o reator utilizado por Cirino é um reator do tipo Etcher. Cirino, utilizou a técnica da sonda de Langmuir para aferir medidas de tensão e corrente afim de, sob uso destas medidas, construir a curva característica do plasma, curva esta que possibilita a determinação de medidas, como o nosso caso, de densidade eletrônica (CIRINO, 1998). Contudo a configuração do reator não implica preocupação para o tipo de grandeza que comparamos.

De acordo com o trabalho, equivalente, produzido por (YAMAMOTO,1992) temos que as medidas de densidade eletrônica estão de acordo com o experimento no intervalo $10^9 \leq n_e \leq 10^{15} cm^{-3}$. É importante frisar que para a caracterização mais completa do plasma, no referido trabalho, foram tomadas outras medidas, como, por exemplo, temperatura. Contudo, neste nos atemos apenas as de nosso interesse.

Abaixo estão os resultados para densidade eletrônica, Figura 8, Figura 9, Figura 10 e Figura 11. Todos estão dispostos no intervalo coerente com que foi utilizado por (YAMAMOTO,1992) e nas Figuras 12, 13, 14 e 15, comparamos a distância entre o resultado simulado computacionalmente com o determinado experimentalmente por Cirino (1998),

devidamente parametrizado. Ao mesmo tempo que qualificamos percentualmente esta distância nas tabelas 3, 4, 5 e 6.

Figura 7 - Gráfico de densidade eletrônica para pressão de 10mTorr

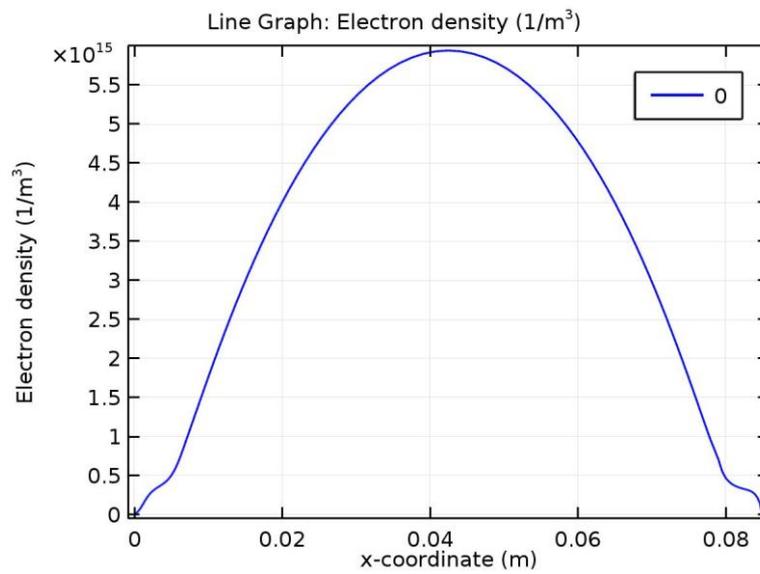


Figura 8 - Gráfico de densidade eletrônica para pressão de 20mTorr

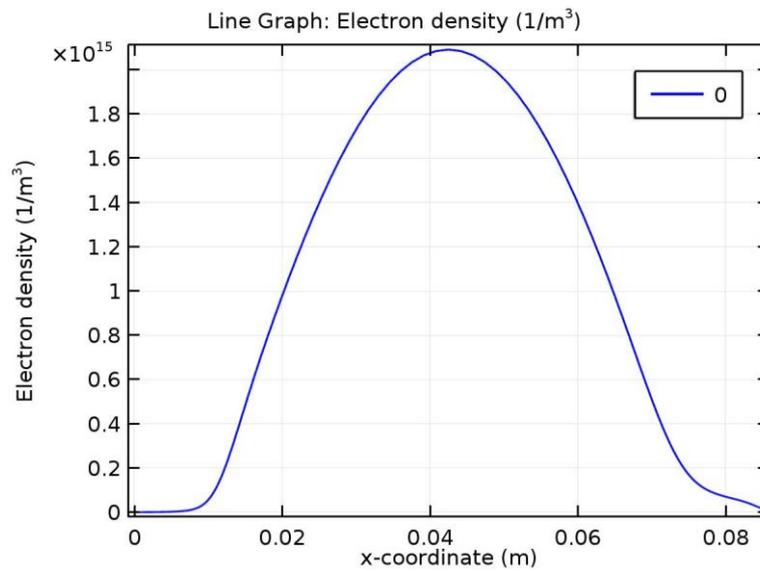


Figura 9 - Gráfico de densidade eletrônica para pressão de 50mTorr

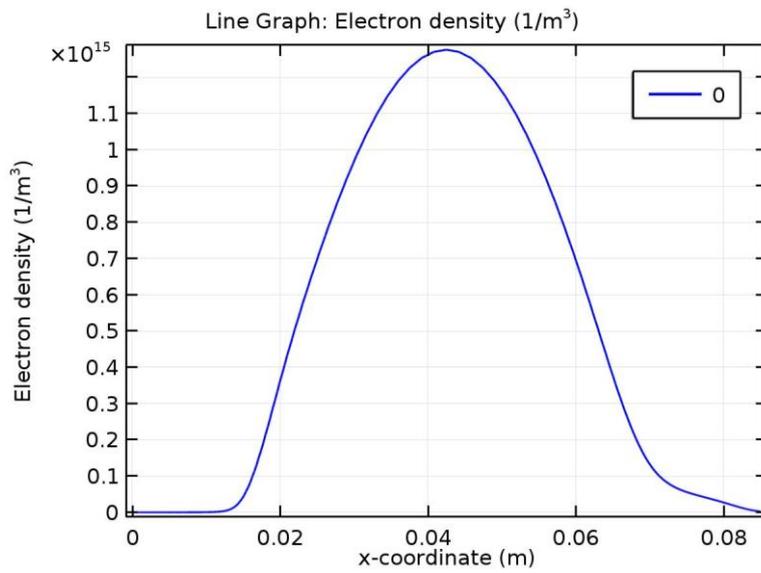


Figura 10 - Gráfico de densidade eletrônica para pressão de 100mTorr

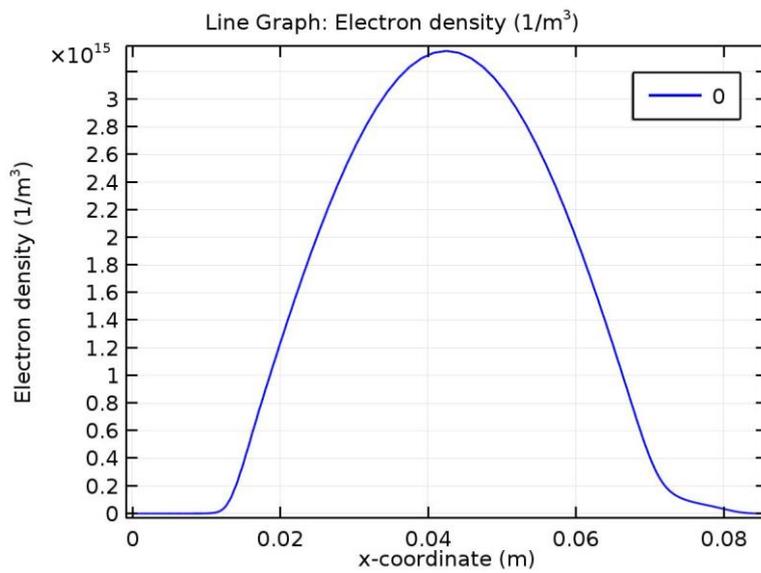


Figura 11 – Gráfico de densidade eletrônica no plasma de argônio para pressão de 10mtorr

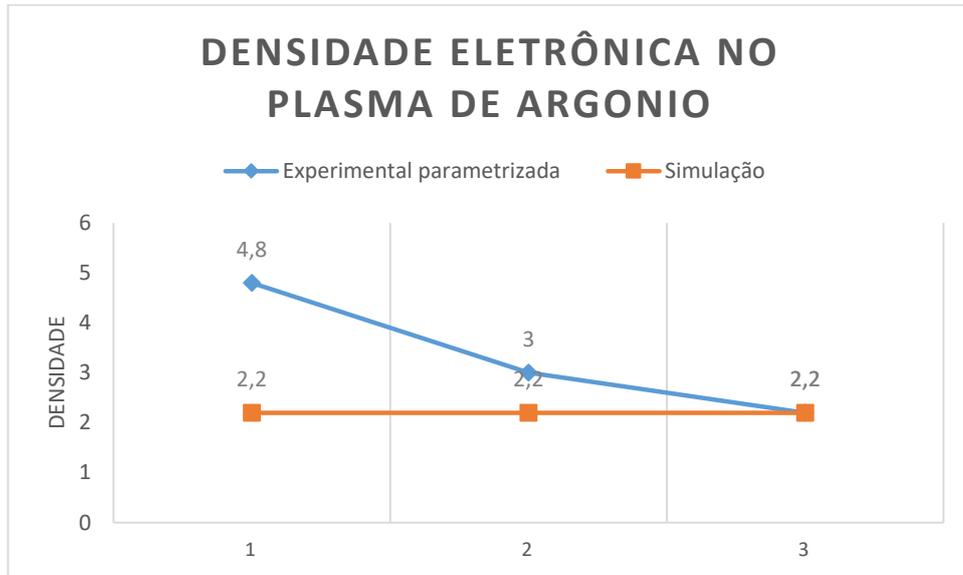


Tabela 3 – Comparativo percentual da simulação em contraste com o experimento para a pressão de 10mTorr

Densidade Eletrônica	Distância percentual em relação ao valor experimental
Parametrizada para potência de 25 W	31,82%
Parametrizada para potência de 50 W	52,63%
Parametrizada para potência de 100 W	141,67%
Média geral	64,15%

Figura 12 - Gráfico de densidade eletrônica no plasma de argônio para pressão de 20mtorr

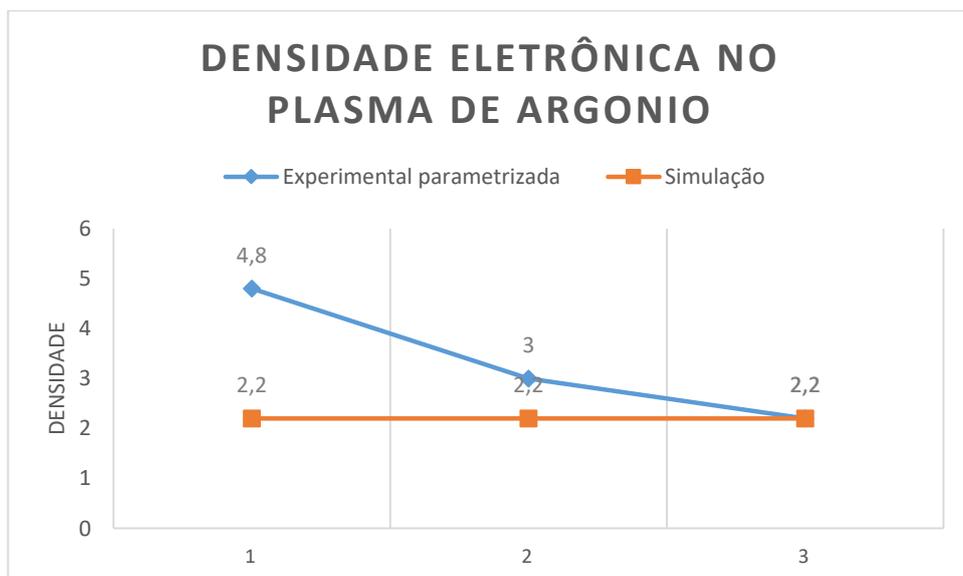


Tabela 4 - Comparativo percentual da simulação em contraste com o experimento para a pressão de 20mTorr

Densidade Eletrônica	Distância percentual em relação ao valor experimental
Parametrizada para potência de 25 W	54,17%
Parametrizada para potência de 50 W	26,67%
Parametrizada para potência de 100 W	0,00%
Média geral	34,00%

Figura 13 - Gráfico de densidade eletrônica no plasma de argônio para pressão de 50mtorr

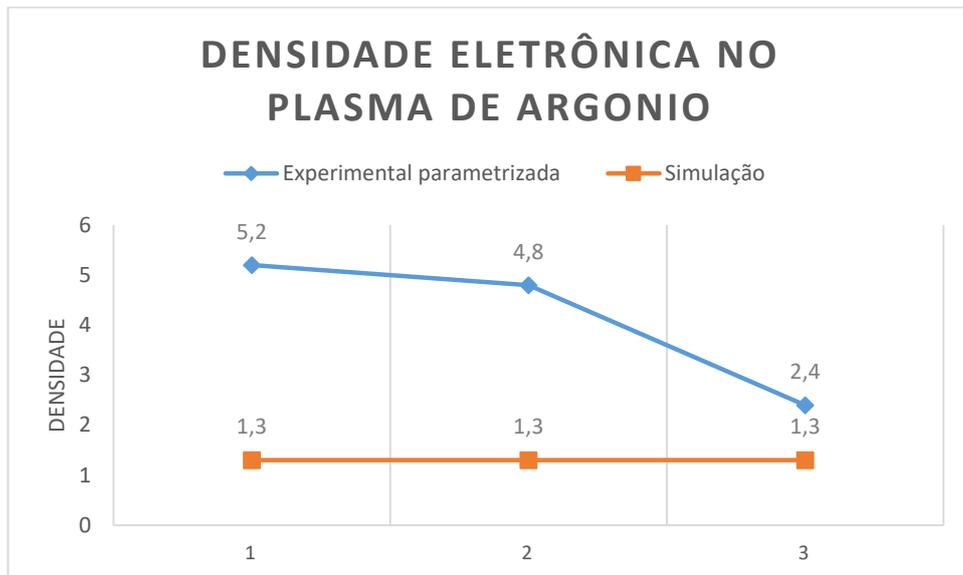


Tabela 5 - Comparativo percentual da simulação em contraste com o experimento para a pressão de 50mTorr

Densidade Eletrônica	Distância percentual em relação ao valor experimental
Parametrizada para potência de 25 W	75,00%
Parametrizada para potência de 50 W	72,92%
Parametrizada para potência de 100 W	45,83%
Média geral	68,55%

Figura 14 - Gráfico de densidade eletrônica no plasma de argônio para pressão de 100mtorr

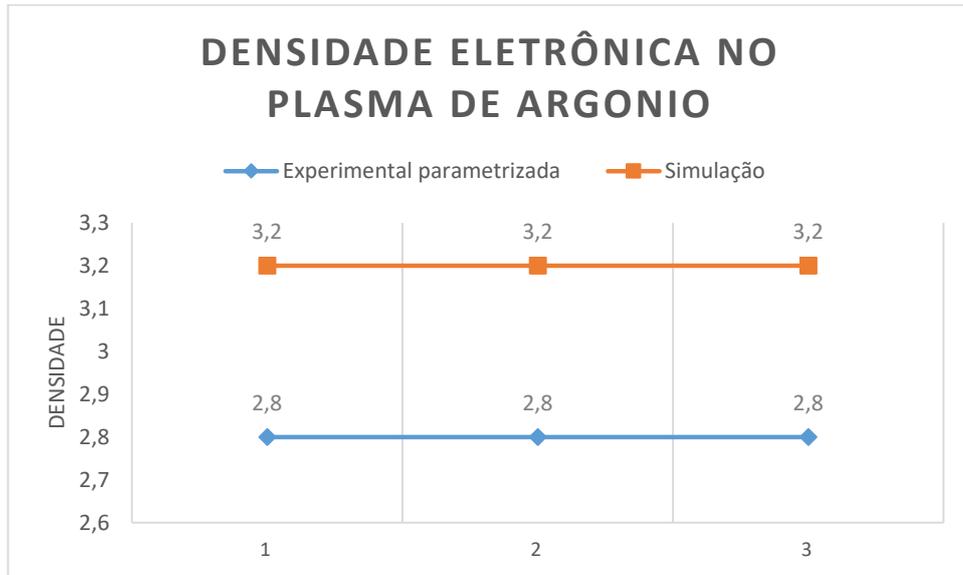


Tabela 6 - Comparativo percentual da simulação em contraste com o experimento para a pressão de 100mTorr

Densidade Eletrônica	Distância percentual em relação ao valor experimental
Parametrizada para potência de 25 W	14,29%
Parametrizada para potência de 50 W	14,29%
Parametrizada para potência de 100 W	14,29%
Média geral	14,29%

4 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho foi feito o estudo comparativo acerca da simulação produzida no software COMSOL Multiphysics. A avaliação da simulação foi feita em duas vertentes, a primeira por meio da avaliação qualitativa do comportamento da grandeza de densidade eletrônica na bacia e a segunda através da comparativo experimental.

A avaliação qualitativa usou como parâmetro a produção analítica de (LIEBERMAN,1988), de acordo com executado no ambiente computacional temos uma equivalência no comportamento da medida de densidade ao longo da bacia. É verdade que existe um erro na inclinação da curva, contudo este erro é provocado pela limitação dimensional da simulação. O que pretendemos sanar em simulações posteriores.

Já a avaliação quantitativa que usou o parâmetro do experimento construído por (CIRINO,1998) foi percebido um equivalência razoável para pressões 10mTorr e 50mTorr e boa equivalência para pressões 20mTorr e 100mTorr. É importante ressaltar que mesmo não sendo tão exatos os resultados obtivos, eles estão de acordo com o que a literatura determina e ainda podemos perceber que o próprio Cirino encontrou dificuldades nas medições para pressões menores que 100mTorr, tornado assim uma condição ainda mais favorável de análise da simulação proposta neste trabalho. Ainda assim, entendemos que uma construção mais elaborada, principalmente no que diz respeito a dimensão, tende a melhorar os resultados e uma comparação com experimentos realizados na própria instituição (UESC) seguirá sendo outro objetivo para posteriores trabalhos.

A literatura nos indica que o comportamento para teoria de difusão por deriva funciona bem para outros gases e esta análise será igualmente levada em consideração para trabalhos futuros. (HAGELAAR,2005)

Para a replicação destes resultados, o leitor deve seguir conforme o descrito no anexo A.

Por fim iremos continuar na busca do entendimento melhor da simulação “multifísica”, qualificando esta simulação, inserindo no modelo medidas de indutância e capacitância, além de caracterizar o plasma também pela temperatura e propor um perfil bidimensional tanto para melhorar o modelo quanto validá-lo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALVES M.V., *Kinetic Simulation in Plasmas: A General View and Some Application* INP-7171-PRE/3096(1999).
- ALLIS W, P, 1956 *Handbuch der Physik* ed S Flugge (Berlin:Springer) p 383
- AMADO, José Alberto Dias, **Otimização do sistema de supervisão e controle de uma planta de tratamento de resíduos utilizando plasma térmico**[tese],UFRN, Natal, dez.2013
- BOHM D. ; E. P. Gross. **Theory of Plasma Oscillations. A. Origin of Medium Like Behavior.** Department of Physics, Princeton University, Princeton, New Jersey, 1949.
- CALDERÓN, Giovanni, GALLO Rodolfo, **Introducción al Método de los Elementos Finitos: um enfoque matemático.** Caracas: Ediciones IVIC, 2011.
- CHAPMAN, B. **Glow discharges processes: sputtering and plasma etching.**New York, John Wiley, 1980.
- CHEN, F.F., *Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion* (Plenum Press, New York, 1984), v. I.
- CIRINO, Giuseppe Antonio. **CARACTERIZAÇÃO DE PLASMAS EMPREGANDO A TÉCNICA DE SONDA ELETROSTÁTICA.** Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Universidade de São Paulo, São Paulo, 1998.
- D'AGOSTINO, R. **Plasma deposition, treatment and etching of polymers.** Academic Press, 1990.
- DONNELLY, Vincent M.; KORNBLIT, Avinoam. **Plasma etching: Yesterday, today, and tomorrow.** Department of Chemical and Biomolecular Engineering, University of Houston, Houston, Texas, 2013.
- EVANGELISTA, E. F. D., DOMINGUES, Margarete, JÚNIOR, O. M., MIRANDA, O. D. **Simulações de problemas em magneto-hidrodinâmica usando o código FLASH,** Proceeding Series of the Brazilian Society of Applied and Computational Mathematics, Vol. 4, N. 1, 2016
- FENG, B. et al. EMI Modeling and Simulation of High Voltage Planar Transformer. In: **INTERNATIONAL CONFERENCE ON POWER ELECTRONICS, DRIVES AND ENERGY SYSTEMS,** 2006, Nova Déli, Índia. Proceedings... Nova Déli, 2006. p. 1–4. Disponível em: <http://ieeexplore.ieee.org/xpl/articleDetails.jsp?arnumber=4147833>
- FREDERICK J. Milford John R. Reitz and Robert W. Christy. **Fundamentos da Teoria Eletromagnética.** Editora Campus, 7 Edição
- HAGELAAR, G.J.M. and L.C. Pitchford, **Solving the Boltzmann Equation to Obtain Electron Transport Coefficients and Rate Coefficients for Fluid Models,** *Plasma Sources Sci. Technol*, vol. 14, 722–733, 2005.
- HOLSTEIN, T, 1946, *Phys. Rev.* **70** 367
- HEGELE, Luiz A. Jr. **Lattice Boltzmann models for thermal flows.** PhD thesis, Universidade Federal de Santa Catarina, 2010.
- HERSHKOWITZ N., **How Langmuir Probes Work,** Chap. 3 in “Plasma Diagnostics”, Vol. 1, ed. by O. Auciello and D.L. Flamm (Academic Press, Boston, 1989).
- INGOLD, J H 1989, *Phys. Rev. A* **40** 3855–63

- KAWAMURA E, Lieberman M A, Lichtenberg, **Secondary electrons in rf and dc/rf capacitive discharges**, Plasma Sources Sci. Technol. **17** (2008)
- LAFRAMBOISE J.G., Univ. Toronto Inst. Aerospace Studies Rept. 100 (June, 1966), unpublished.
- LIEBERMAN, A.M.; LICHTENBERG, A.J. **Principles of plasma discharges and materials processing**. 1.ed. New York, John Wiley & Sons, Inc., 1994, p.327- 411.
- LIEBERMAN M. A., **Analytical Solution for Capacitive RF Sheath**, iee transactions on plasma science, vol. **16**, no. 6, (1988).
- MAGALHÃES, F. T.C. B., PINTO, P. V. F., CORREIA, D. G., et al, **Simulação numérica da propagação de um pulso quasisoliton sob a ação de GVD por meio do método das diferenças finitas no domínio do tempo**, IFCE, Rev. Tecnol. Fortaleza,v. 35, n. 1 e 2, p. 45-54, dez. 2014
- MATTOX, Donald M. **Handbook of physical vapor deposition (PVD) processing: film formation, adhesion, surface preparation and contamination control**. Westwood, New Jersey: Noyes, 1998.
- OEHRLEIN, G. S. Reactive plasma processes - reactive ion etching. In: ROSSNAGEL, S. M.; CUOMO, J. J.; WESTWOOD, W. D., ed. **Handbook of plasma processing technology**. Westwood (New Jersey, USA), Noyes Publications,1989, p. 196-232.
- PAUL G. Slade, editor. **Electrical Contacts**. Marcel Dekker, 1999
- PHELPS, A V, PITCHFORD, L C 1985 *Phys. Rev. A* **31** 2932–49
- OPAL, C B, PETERSON ,W K and BEATY, E C, 1971 *J. Chem. Phys.***55** 4100
- ORTIZ, Carlos Enrique Pico. **Aplicação das Formas Discretas da Equação de Boltzmann à Termo-hidrodinâmica de Misturas**. PhD thesis, Universidade Federal de Santa Catarina, 2007.
- POTTER, D. E. (1973). “**Computational Physics**.” Wiley, New York. Potter, D. E., and Tuttle, G. H. (1973). Proc. Eur. Conf. Control. Fusion Plasma Phys., 6th, 1973
- REIF, R. Plasma enhanced chemical vapor deposition of thin films for microelectronics. In: ROSSNAGEL, S. M.; CUOMO, J. J.; WESTWOOD, W. D., ed. **Handbook of plasma processing technology**. Westwood (New Jersey, USA), Noyes Publications, 1989, p. 260-307.
- ROCKWOOD, S D, 1973 *Phys. Rev. A* **40** 399
- ROMAN, Daiane. **SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS DE ZrN DEPOSITADOS EM DIFERENTES TEMPERATURAS** Dissertação (Mestrado em Materiais) – Universidade de Caxias do Sul, Caxias do Sul, 2010.
- SIEBERT, Diogo Nardelli. **Análise de formas discretas da equação de boltzmann para problemas térmicos bi-dimensionais**. Master’s thesis, Universidade Federal de Santa Catarina, 2007.
- ROTH, J. R. **Industrial plasma engineering**, v.1: Prinples, Institute of Physics 1,Philadelphia: Publishing Bristol, 1995.
- SCHARFETTER, D L and GUMMEL H K 1969 *IEEE Trans. Electron.Devices* **16** 64
- SIMEON F., in A Discussion on “**The Making of Reflecting Surfaces**” (The Fleetway, Imperial College of Science and Technology, South Kensington, S.W.7, 1920), pp. 26.

SIMÕES Jr., F. J. R.; COSTA Jr., E.; ALVES, M. V.; CARDOSO, F. R. **Física de plasma espacial utilizando simulação computacional de partículas**. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 33, n.1, 1310-1–1310-14p , 2011.

SURENDRA M., “**Radiofrequency discharge benchmark model comparison,**” *Plasma Sources Sci. Technol*, vol. 4, pp 56–73, 1995.

TAGASHIRA H, SAKAI, Y and SAKAMOTO, S 1977 *J. Phys. D: Appl.Phys.* **10** 1051–63

TENTARDINI, Eduardo Kirinus. **OBTENÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS DE (Ti,Al)N DO TIPO MULTICAMADAS PARA APLICAÇÃO EM MATRIZES**. Dissertação (Mestrado em Engenharia) – Escola de Engenharia da UFRGS, Porto Alegre, 2004.

WASA, K.; HAYAKAWA, S. **Handbook of sputter deposition technology: Principles, technology and applications**. Park Ridge (New Jersey, USA), Noyes Publications, 1992.

WINSKE, D; N. Omid: '**Híbrido Codes**'. In: Computer Simulation of Space Plasma, ed. by H. Matsumoto, Y. Omura, Terra Scientific, Tokyo 1996.

VAHEDI, V.; DiPESO, G.; BIRDSALI, C. K.; LIEBERMAN, M. A.; ROGNLIEN, T. D. **Capacitive RF discharges modelled by particle-in-cell Monte Carlo simulation. I: analysis of numerical techniques**. *Plasma Sources Sci. Technol.* 1993

WANG, R., LEI, Y., SHI, Y. **Numerical simulation of transient temperature field during laser keyhole welding of 304 stainless steel sheet**. *Optics & Laser Technology*, Elsevier Science Ltd., v.43, pp. 870-873, 2011

XUE-FENG Yuan Xiaowen Shan and Hudong Chen. **Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the navier-stokes equation**. *J. Fluid Mech*, 550:413– 441, 2006

YAMAMOTO, R.K. “**Estudo e Caracterização da Corrosão de Silício com Plasma de CBrF₃ e Medidas de Propriedades de Plasma com Sondas de Langmuir**”, São Paulo, 1992, 170p, Dissertação de Mestrado, Escola Politécnica, Universidade de São Paulo.

ANEXO A

Instruções de modelagem para software COMSOL:

A partir do menu Arquivo, selecione Novo.

Novo

1 - Na nova janela, clique Assistente de modelo

Assistente de modelo

1 - Na janela do Assistente de modelo, clique em 1D.

2 - Na aba de seleção da física, selecione Plasma > capacitivamente acoplados Plasma (CCP).

3 - Clique em Adicionar.

4 - Clique em Estudo.

5 - Na aba de seleção do estudo, selecione estudos pré-definidos > dependente do tempo.

6 - Clique em Concluído.

Definição

variáveis 1

A entradas abaixo serão para resolução das equações

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e = R_e - (\mathbf{u} \cdot \nabla) n_e$$

$$\Gamma_e = -(\mu_e \cdot E) n_e - D_e \cdot \nabla n_e$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e + E \cdot \Gamma_e = S_{en} - (\mathbf{u} \cdot \nabla) n_e + \frac{Q + Q_{en}}{q}$$

$$\Gamma_e = -(\mu_{en} \cdot E) n_e - D_{en} \cdot \nabla n_e$$

$$E = -\nabla V$$

$$\nabla \cdot (\epsilon_0 \epsilon_r E) = \rho_v$$

- 1- Na barra de ferramentas Modelo, clique em Variáveis e escolha Variáveis locais.
- 2- Na janela de configurações de variáveis, localize a seção Variáveis.
- 3- Na tabela, introduza as seguintes definições:

Name	Expression	Unit	Description
V0	300[V]	V	Applied voltage
freq	13.56[MHz]	Hz	RF Frequency
omega	2*pi*freq	Hz	Angular frequency
p0	[torr]	Pa	Gas pressure
T0	300[K]	K	Gas temperature
mueN	4E24[1/(V*m*s)]	1/(V*m*s)	Reduced electron mobility

Geometria 1

Intervalo 1 (E1)

- 1- Na barra de ferramentas geometria, clique em Intervalo.
- 2- Na janela de configurações de intervalo, localize a seção Intervalo.
- 3- No campo de texto final direito, digite 0.084.

Intervalo de 2 (i2)

- 1- Na barra de ferramentas geometria, clique em Intervalo.
- 2- Na janela de configurações de intervalo, localize a seção Intervalo.

3- No campo de texto o ponto final esquerdo, digite 0.084.

4- No campo de texto ponto final direito, digite 0,085.

5 Clique no botão Zoom extensão na barra de ferramentas gráficas.

Plasma acoplado capacitivamente (CCP)

Importando o Corte Transversal 1

1- Na barra de ferramentas Física, clique em Global e escolher importação transversal.

2- Na janela de configurações de seção importação transversal, localize a seção importação transversal.

3- Clique em Procurar.

4- Navegue até a pasta Modelo Biblioteca do modelo e clique duas vezes no arquivo Ar_xsecs.txt.

5- Na janela modelo construtor, clique plasma acoplado capacitivamente (CCP).

6- Na janela de configurações de plasma acoplado capacitivamente, localize o Plasma na seção de propriedades.

7- Marque a caixa de seleção usar reduzida propriedades de transporte de elétrons.

Reação 1

1- Na barra de ferramentas Física, clique em Domínios e escolha reação.

2- Na janela de configurações de reação, localize a seção Fórmula reação.

3- No campo de texto Fórmula, digite $\text{Ar} + \text{Ar} \Rightarrow \text{e} + \text{Ar} + \text{Ar} +$.

4- Localize a seção Cinética Expressões. No campo de texto kf, digite 3.734E8.

Reação 2

1- Na barra de ferramentas Física, clique em Domínios e escolha reação.

2- Na janela de configurações de reação, localize a seção Fórmula reação.

3- No campo de texto Fórmula, digite $\text{Ar} + \text{Ar} \Rightarrow \text{Ar} + \text{Ar}$.

4- Localize a seção Cinética Expressões. No campo de texto kf, digite 1807.

Reação 1 superfície

1- Na barra de ferramentas Física, clique em Limites e escolha reação de superfície.

2- Na janela de configurações de reação de superfície, localize a seção Fórmula reação.

3- No campo de texto Fórmula, tipo de $\text{Ar} + \Rightarrow \text{Ar}$.

4- Selecione Limites 1 e 2 apenas.

Reação 2 Superfície

1- Na barra de ferramentas Física, clique em Limites e escolha reação de superfície.

2- Na janela de configurações de reação de superfície, localize a seção Fórmula Reação.

3- No campo de texto Fórmula, digite $\text{Ar} \Rightarrow \text{Ar}$.

4- Selecione Limites 1 e 2 apenas.

Espécie: Ar

1- Na janela modelo construtor, sob o Componente 1 (comp1)> Plasma acoplados capacitivamente (CCP) clique Espécie: Ar.

2- Na janela de configurações de Espécies, localize a seção Fórmula Espécies.

3- Marque a caixa de verificação da restrição massa.

Espécie: Ar +

1- Na janela Model Builder, sob o Componente 1 (comp1)> Plasma acoplados capacitivamente(CCP) clique Espécie: Ar +.

2- Na janela de configurações de Espécies, localize a seção Fórmula Espécies.

3- Selecione o valor inicial na caixa de seleção eletro neutralidade.

Plasma Modelo 1

1- Na janela modelo construtor, sob o Componente 1 (comp1)> Plasma acoplados capacitivamente (CCP) clique Plasma Modelo 1.

2- Na janela de configurações de Plasma Modelo, localize a seção de modelo de Entradas.

3- No campo de texto T, tipo T0.

4- No campo de texto pA, tipo p0.

5- Localize a densidade de elétrons e seção de Energia. No campo de texto μeN_n , digite Muen.

Carga Conservação 1

1- Na barra de ferramentas Física, clique em Domínios e escolha Conservação de Carga.

2- Selecionar domínio 2 apenas.

Parede 1

1- Na barra de ferramentas Física, clique em Limites e escolha Wall.

2- Selecione Limites 1 e 2 apenas.

Os modelos de acumulação de carga de superfície o efeito de partícula carregada construir em

superfícies dielétricas. Isto protege o campo elétrico a partir do plasma.

Superfície de carga Acumulação 1

1- Na barra de ferramentas Física, clique em Limites e escolha superfície de carga de Capitalização.

2- Selecione fronteira 2 apenas.

Terra 1

1- Na barra de ferramentas Física, clique em Limites e escolha chão.

Selecione fronteira 1 somente.

O recurso de terminal é utilizado para conduzir o CCP com uma tensão sinusoidal. Nesse caso a tensão é de 300 volts e a pressão é de 1 torr. Se a relação entre a tensão à pressão é mais elevada, podem ocorrer instabilidades numéricas. Nestes casos, a malha refinamento pode ser necessário.

Terminal 1

1- Na barra de ferramentas Física, clique em Limites e escolha Terminal.

2- Na janela de configurações de Terminal, localize a seção Terminal.

3- No campo de texto Nome do Terminal, digite placa.

4- Selecione fronteira 3 apenas.

5- Na lista Tipo de Terminal, escolha de tensão.

6- No campo de texto V0, tipo $V0 * \sin(\omega * t)$.

Materiais

Material 1 (mat1)

1- Na janela modelo construtor, sob o Componente 1 (comp1). Clique com o botão direito Materiais e escolher o material em branco.

2- Selecionar domínio 2 apenas.

3- Na janela de configurações de Material, localize a seção de conteúdo material.

4- Na tabela, introduza as seguintes definições:

Propriedade	Nome	Valor	Unidade	Grupo de propriedades
-------------	------	-------	---------	-----------------------

Relative permittivity	Epsilon nr	4.7	I	Basic
-----------------------	------------	-----	---	-------

5- Com o botão direito Componente 1 (comp1)> Materiais> Material de 1 (mat1) e escolha Renomear.

6- No novo nome do Material na caixa de diálogo, no tipo dielétrica, no campo de texto rótulo Novo.

7- Clique em OK.

Malha1

Borda 1

1- Na janela modelo construtor, sob o Componente 1 (comp1) clique com o botão direito em Malha 1 e escolha Borda.

2- Na janela Configurações para Edge, localize a seção Seleção de Domínio.

3- Na lista nível da entidade geométrica, escolha Domínio.

4- Selecionar domínio 1 somente.

Distribuição 1

1- Com o botão direito Componente 1 (comp1)> Malha 1> Borda 1 e escolher Distribuição.

2- Na janela Configurações de Distribuição, localize a seção de Distribuição.

3- A partir da lista de propriedades de distribuição, escolher o tipo de distribuição predefinida.

4- No campo de texto o número de elementos, tipo 500.

5- No campo de texto a relação Elemento, digite 5.

6- Na lista Método de distribuição, escolha sequência geométrica.

7- Selecione a caixa de distribuição simétrica.

Borda 2

1- Na janela modelo construtor, clique com o botão direito em Malha 1 e escolha Borda.

2- Na janela Configurações para borda, localize a seção Seleção de Domínio.

3- Na lista nível da entidade geométrica, escolha Domínio.

4- Selecionar domínio 2 apenas.

Distribuição 1

1- Com o botão direito Componente 1 (comp1)> Malha 1> Borda 2 e escolha Distribuição.

2- Na janela Configurações de Distribuição, localize a seção de Distribuição.

3- A partir da lista de propriedades de distribuição, escolher o tipo de distribuição predefinida.

4- No campo de texto o número de elementos, tipo 50.

5- Na lista Método de distribuição, escolha sequência geométrica.

6- Selecione a caixa de distribuição simétrica.

7- Clique na Construção botão Todos.

Estudo 1

Passo 1: Tempo Dependente

1- Na janela modelo construtor, expanda o Estudo 1, em seguida, clique em Etapa 1: Tempo

Dependente.

2- Na janela de configurações para o período de Dependente, localize a seção Configurações de estudo.

3- Clique alcance.

4- Na caixa de diálogo Intervalo, digite 100 / 13.56E6 no campo de texto Parar.

5- No campo de intervalo do texto, tipo 2 / 13.56E6.

6- Clique em Substituir.

7- Na janela Configurações para o período de Dependente, localize a seção Configurações de estudo.

8- Clique intervalo.

9- No intervalo na caixa de diálogo, tipo 101 / 13.56E6 no campo de texto Iniciar.

10- No campo de texto Parar, digite 103 / 13.56E6.

11- No campo de texto passo, digite 0,25 / 13.56E6.

12- Clique em Adicionar.

13- Na barra de ferramentas Modelo, clique em Compute.