

UNIVERSIDAD DE SEVILLA
SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN

D.12.017

Queda registrada esta Tesis Doctoral
en el tomo 150 número 280 del Boletín
correspondiente.

Sevilla, 8 de febrero de 2002

El Jefe del Negociado de Tesis

Loa Maniz

T.S. 195

Modelos teóricos de plasmas de argón y oxígeno usados en la deposición de láminas delgadas

Alberto Palmero Acebedo

6 de febrero de 2002

[Signature]

Fdo: Directores de la tesis
José Carlos Bantelón

[Signature]

Fdo: El doctorando
Alberto Palmero Acebedo



UNIVERSIDAD DE SEVILLA



800065425

9 18868125

AGRADECIMIENTOS

Quisiera aquí recordar a todas las personas que han contribuido, de alguna u otra manera, a que este trabajo haya podido ser elaborado.

En primer lugar quiero agradecer al profesor José Cotrino su continuo apoyo en la investigación, y sin cuya experiencia esta tesis no se hubiese podido llevar a cabo.

También quiero agradecer a mis padres la comprensión, ayuda y apoyo que me han prestado durante todo este tiempo, y por inculcarme el interés por la ciencia y el análisis científico, así como a mi hermano Faustino por ayudarme a comprender la importancia de la física en la vida.

Por último, quiero especialmente agradecer a Guadalupe sus continuos ánimos durante estos años, y por estar siempre a mi lado, tanto en los momentos buenos como en los malos.



Índice General

1	Plasmas producidos a alta frecuencia	7
1.1	Introducción	7
1.2	Plasmas creados y mantenidos por la propagación de una onda	10
1.2.1	Producción y funcionamiento	10
1.2.2	Propiedades de los plasmas de onda de superficie en pequeños volúmenes	12
1.3	Nueva generación de descargas de alta frecuencia: grandes volúmenes	20
1.3.1	Necesidad de nuevos dispositivos	20
1.3.2	Nuevos dispositivos	21
1.4	Aplicaciones de las descargas generadas a alta frecuencia	23
1.5	Objetivo de esta memoria	24
2	Caracterización de un plasma de argón producido mediante un sistema surfatrón	31
2.1	Objetivo	31
2.2	Introducción	31
2.3	Modelo	32
2.3.1	Ecuación de Saha para un sistema de dos temperaturas	33
2.3.2	Modificación a la ecuación de Saha mediante un modelo cinético	36
2.4	Discusión y resultados	38
3	Caracterización de un plasma de argón producido mediante un sistema SLAN	45
3.1	Objetivo	45
3.2	Introducción	45
3.3	Modelo	47
3.4	Discusión y resultados	52
4	Modelo radial de un plasma de argón: influencia de la temperatura del gas y de los estados excitados	56
4.1	Objetivo	56
4.2	Introducción	57

4.3	Modelo	58
4.3.1	Balance de energía en el plasma	58
4.3.2	Modelo cinético	62
4.4	Resultados y discusión	63
4.4.1	Influencia de la temperatura del gas en los resultados	63
4.4.2	Simplificación de la ecuación de la temperatura del gas	65
4.4.3	Medición experimental de la temperatura del gas y comparación con el modelo	70
4.4.4	Resultados del modelo teórico	74
4.4.5	Comparación con datos experimentales	92
4.5	Resumen	94
5	Modelo global de un plasma de oxígeno orientado a la diagnosis mediante espectroscopía óptica de emisión	101
5.1	Objetivo	101
5.2	Introducción	101
5.3	Modelo	103
5.3.1	Absorción de potencia en el plasma de oxígeno	103
5.3.2	Modelo Global del plasma de oxígeno	108
5.4	Resultados y discusión	111
5.4.1	Influencia del coeficiente γ en el modelo	111
5.4.2	Comparación con resultados experimentales	117
5.4.3	Otros resultados del modelo	119
5.4.4	Aplicación del modelo para caracterizar el plasma mediante medidas experimentales	123
5.4.5	Aplicación experimental del método	129
5.5	Resumen	133
6	Resultados más importantes obtenidos	136

Índice de Figuras

1.1	Descarga típica de plasma a baja presión en condiciones DC.	9
1.2	Solución de la ecuación de Boltzmann, mediante la aproximación de dos términos, en condiciones típicas en un plasma de argón a baja presión, utilizando la densidad electrónica como parámetro. Se puede apreciar cómo la solución tiende hacia un perfil claramente maxwelliano a medida que aumenta la densidad electrónica.	17
1.3	Plasma producido en un dispositivo SLAN con ECR. Vista superior.	22
1.4	Fotografía de un sistema SLAN de producción de plasma. En la figura se puede apreciar una guía de onda rectangular acoplada al recinto, que se convierte en otra guía de onda anular que excita el plasma mediante un sistema de antenas.	22
1.5	Plasma producido en un recinto utilizando un dispositivo ECR. Al generarse el plasma, la forma que adopta es cilíndrica debido al fuerte campo magnético que lo confina.	23
1.6	Dispositivo utilizado para la deposición de capas finas mediante un plasma producido por onda de superficie. El plasma se produce mediante un surfatrón en un tubo fino, que se abre en forma de cono a la región donde se coloca el substrato.	24
2.1	Comportamiento típico de los estados excitados del argón a diferentes presiones.	33
2.2	Niveles energéticos del átomo de argón.	34
2.3	Resultados obtenidos del valor de la temperatura electrónica a diferentes presiones.	39
2.4	Función de distribución electrónica, calculada según la ecuación de Boltzmann, en condiciones típicas a una presión de 2.8 Torr.	40
2.5	Función de distribución electrónica, calculada según la ecuación de Boltzmann, en condiciones típicas a una presión de 0.2 Torr.	41
3.1	Resultados del cálculo de Fujimoto [7]. La línea vertical en la gráfica separa los niveles en balance corona y los que se encuentran en una situación de quasi-excitación-saturación-balance.	47

3.2	Resultado del modelo de Fujimoto [7]. Para diferentes densidades electrónicas, la cinética de los estados excitados está dominada por diferentes regímenes.	48
3.3	FDDE obtenidas en un sistema SLAN en condiciones típicas. Como se puede apreciar, en la zona alejada del sistema ECR se puede aceptar una descripción maxwelliana.	49
3.4	Resultados típicos del modelo de 3 niveles.	51
3.5	Resultados del cálculo de la temperatura electrónica en el sistema SLAN.	53
4.1	Esquema de los niveles de energía del átomo de argón incluidos en el modelo. La notación que se utilizará en el texto para los niveles 4S será la más usual, esto es, el nivel $4s[3/2]_2$ será llamado 3P_2 , el $4s[3/2]_1$ será el 3P_1 , el $4s'[1/2]_0$ será el 3P_0 , y el $4s'[1/2]_1$ el 1P_1	64
4.2	Perfil radial de la temperatura del gas en un recinto de radio interior de 4.5 mm a dos presiones diferentes: (a) $p = 1$ Torr, y (b) $p = 2$ Torr. En ambos casos la temperatura del recinto es $T_w = 300$ K.	66
4.3	Promedio radial de la temperatura del gas, en función de la densidad electrónica, a tres presiones diferentes 0.3, 1 y 3 Torr. El radio interior del recinto es 5 mm y $T_w = 300$ K en todos los casos. Las líneas sólidas representan la solución exacta, y las líneas discontinuas la solución aproximada (ver sección 4.4.2).	67
4.4	Montaje experimental empleado para medir la variación de la presión al apagar/encender el plasma.	71
4.5	Evolución temporal de la temperatura del gas al encender el plasma (trazo superior), y al apagarlo (trazo inferior), utilizando una potencia incidente de 125 W, y a una presión de 0.8 Torr.	72
4.6	Evolución temporal de la temperatura del gas al encender el plasma (trazo superior), y al apagarlo (trazo inferior), utilizando una potencia incidente de 200 W, y a una presión de 0.8 Torr.	73
4.7	Valores medios de la temperatura del gas en función del cociente entre la potencia incidente y la longitud del plasma, a diferentes presiones.	74
4.8	Valor de la temperatura del gas obtenida en función de la presión media, a dos potencias diferentes.	75
4.9	Temperatura electrónica y temperatura del gas promediada radialmente en función de la densidad electrónica, a una presión de 1 Torr y con un radio interno de 4.5 mm. Los valores de T_w son 400 K (líneas superiores), y 300 K (líneas inferiores).	77
4.10	Perfil radial de la temperatura electrónica a una presión de 1 Torr. El radio del recinto es de 4.5 mm y su temperatura 300 K.	78
4.11	Campo local efectivo calculado a través del valor de θ y la ec. (4.8). La presión es 1 Torr, $T_w = 300$ K, y el radio 4.5 mm.	79

4.12 Población de los estados excitados 4S según el modelo, a una presión de 1 Torr y a una temperatura en la pared de 300 K. El radio del recinto es 4.5 mm.	81
4.13 Población de los estados excitados 4S según el modelo, a una presión de 2 Torr y a una temperatura en la pared de 350 K. El radio del recinto es 4.5 mm.	82
4.14 Población de los estados excitados 4P según el modelo, a una presión de 1 Torr y a una temperatura en la pared de 300 K. El radio del recinto es 4.5 mm.	83
4.15 Población de los estados excitados 4P según el modelo, a una presión de 2 Torr y a una temperatura en la pared de 350 K. El radio del recinto es 4.5 mm.	84
4.16 Procesos más importantes de ganancias y pérdidas de los niveles 3P_2 y 3P_1 según el modelo a 1 Torr, $T_w = 300$ K y $R_{in} = 4.5$ mm.	85
4.17 Procesos más importantes de ganancias y pérdidas de los niveles 3P_0 y 1P_1 según el modelo a 1 Torr, $T_w = 300$ K y $R_{in} = 4.5$ mm.	86
4.18 Procesos de ganancias y pérdidas para los niveles $4p[1/2]_1$ y $4p'[1/2]_0$ según el modelo a una presión de 1 Torr, $T_w = 300$ K, y $R_{in} = 4.5$ mm.	87
4.19 Contribución a la ionización de los diferentes bloques de niveles según el modelo para una presión de 2 Torr, $T_w = 400$ K y $R_{in} = 4.5$ mm.	88
4.20 Contribución a la ionización de los diferentes bloques de niveles según el modelo para una presión de 2 Torr, $T_w = 350$ K y $R_{in} = 4.5$ mm.	89
4.21 Perfil radial de los estados excitados 3P_2 y $4p[1/2]_1$ para varios valores de la densidad electrónica media a 1 Torr, $T_w = 300$ K y $r = 4.5$ mm.	90
4.22 Perfil radial del estado excitado $4p[1/2]_1$ en función de la densidad electrónica. La presión es 1 Torr, $T_w = 300$ K y el radio 4.5 mm.	91
4.23 Resultados teóricos para la temperatura electrónica en los casos estudiados en el capítulo 2. Lo valores experimentales son aproximadamente, $T_e(0.8 \text{ Torr}) = 1.6$ eV, $T_e(1.1 \text{ Torr}) = 1.4$ eV, $T_e(1.8 \text{ Torr}) = 1.2$ eV y $T_e(2.8 \text{ Torr}) = 1.1$ eV.	93
4.24 Comparación entre los resultados del modelo y datos experimentales sobre los estados 4S, a una presión de 1.8 Torr, un radio de 4.5 mm, y una temperatura en la pared de 300 K.	95
4.25 Comparación entre los resultados del modelo y datos experimentales sobre los estados 4S, a una presión de 2.8 Torr, un radio de 4.5 mm, y una temperatura en la pared de 300 K.	96
4.26 Comparación entre los resultados del modelo y datos experimentales sobre los estados 4P, a las presiones de 1.8 y 2.8 Torr, en un recinto de radio 4.5 mm, y una temperatura en la pared de 300 K.	97

5.1	Estimación de la efectividad del proceso de absorción de potencia en condiciones ECR y sin ECR para un plasma de oxígeno.	105
5.2	Imágenes de la descarga de oxígeno en el sistema SLAN con ECR a diferentes presiones: (a) 760 Torr, (b) 0.04 Torr, (c) 0.004 Torr [11].	106
5.3	Perfiles radiales de la densidad electrónica a diferentes presiones en el sistema SLAN con ECR [11].	107
5.4	Valores obtenidos en la referencia [1] para la probabilidad de recombinación en la pared de un tubo de pyrex en función de la temperatura.	112
5.5	Resultado del modelo global a una presión de 0.001 Torr, y para un valor de γ de 0.01.	114
5.6	Resultado del modelo global a una presión de 0.001 Torr, y para un valor de γ de 0.1.	115
5.7	Resultado del modelo global a una presión de 0.1 Torr, y para un valor de γ de 0.01.	115
5.8	Resultado del modelo global a una presión de 0.1 Torr, y para un valor de γ de 0.1.	116
5.9	Valores de la temperatura electrónica para una presión de 0.001 Torr, y para $\gamma = 0.1$ y 0.01.	116
5.10	Valores de la temperatura electrónica para una presión de 0.1 Torr, y para $\gamma = 0.1$ y 0.01.	117
5.11	Resultados experimentales obtenidos en un sistema SLAN con ECR, utilizando 1000 W de potencia [19].	118
5.12	Valores obtenidos de la temperatura electrónica suponiendo una temperatura constante.	120
5.13	Valores obtenidos de la temperatura electrónica teniendo en cuenta el calentamiento del gas para presiones inferiores a 0.004 Torr. . .	121
5.14	Resultados del modelo en las condiciones donde se han obtenido los datos experimentales.	122
5.15	Esquema de los niveles excitados del oxígeno atómico. Señaladas aparecen las dos transiciones radiativas a estudiar, $\lambda = 777.3$ nm y $\lambda = 844.6$ nm.	124
5.16	Resultado del modelo de plasma de oxígeno altamente disociado. .	126
5.17	Secciones eficaces empleadas para el cálculo de los coeficientes de excitación y disociación [16].	128
5.18	Temperatura electrónica y valor de O/O_2 a partir de las intensidades de las líneas $\lambda = 777.4$ nm y $\lambda = 844.6$ nm.	131
5.19	Resultados del modelo a partir de las intensidades de línea. Los dos resultados obtenidos a cada presión corresponden al cálculo con cadauna de las líneas, $\lambda = 777.4$ nm y $\lambda = 844.6$ nm.	132

Capítulo 1

Plasmas producidos a alta frecuencia

1.1 Introducción

Un gas en equilibrio termodinámico mantiene un balance continuo entre las diferentes especies de partículas que lo forman, ya sean cargadas o neutras. Este balance se puede alterar si se aplica un campo eléctrico externo que acelere las partículas cargadas y haga aumentar su energía. Si esta perturbación es pequeña, el gas no modifica significativamente sus propiedades, es decir, los propios mecanismos de ganancias y pérdidas se compensan de nuevo. Sin embargo, si el valor del campo externo es lo suficientemente grande, se puede forzar al sistema a alejarse de la situación original, rompiéndose dicho balance y produciéndose un aumento apreciable de especies excitadas, iones y electrones. Ésta es la situación que vamos a estudiar en esta tesis.

El término plasma fue introducido en 1923 por Irving Langmuir para hacer referencia a un estado de la materia gaseosa caracterizado por un alto grado de ionización de las moléculas. En un principio, los estudios se centraron en los plasmas que se generaban de forma natural a presión atmosférica, aunque, a medida que se comenzaron a comprender los mecanismos de estas descargas, el interés se fue centrando paulatinamente en los plasmas producidos a presiones más bajas. Aparecieron así gran cantidad de propiedades experimentales de fácil aplicación, como técnicas para tratar materiales, producción de haces moleculares, láseres, etc... que han hecho que la física del plasma sea uno de los campos que más se han desarrollado en las últimas décadas.

Los primeros trabajos sobre plasmas producidos a baja presión se realizaron en descargas de columna positiva (DC), donde el gas se sometía a una diferencia de potencial constante. Sin embargo, este método acarreó problemas técnicos importantes ya que los electrodos necesitaban estar en contacto directo con el plasma y se desgastaban con bastante facilidad. El siguiente paso en la inves-

tigación fue el estudio de las descargas producidas en guías de ondas mediante antenas situadas fuera del plasma [1, 2]. De esta manera, se trabajaba en la zona de altas frecuencias (AF), ya sea en la zona de radio frecuencias (RF) o de microondas (μW), y, en general, se mejoraba la eficiencia y el coste del dispositivo. En otros casos, se inyectaba la potencia directamente al plasma, utilizando a éste y al recinto que lo rodeaba como único medio de propagación de la onda electromagnética, siendo esta forma de generar la descarga típica de los llamados plasmas de onda de superficie (OS) [3, 4, 5, 6].

En función de la manera de describir el plasma, se han distinguido dos categorías:

- plasmas térmicos: Son aquellos en los que la energía cinética media de los electrones se puede considerar igual a la de las partículas pesadas del plasma. En general, en este caso, se suele describir al plasma como un sistema de una sola temperatura.
- Plasmas no térmicos: En los que, a pesar de tener una situación estacionaria, la energía cinética media electrónica es mucho mayor que la de las partículas pesadas del plasma. De esta manera, la caracterización se hace más difícil que en el caso de plasmas térmicos, y resulta necesario recurrir a otras descripciones.

Los plasmas no térmicos son típicos de descargas a baja presión, en los que las colisiones entre partículas son poco frecuentes, e insuficientes para elevar la energía cinética media de las partículas neutras. Por otra parte, las especies cargadas van a tener un comportamiento muy diferente debido a la presencia del campo electromagnético que hace aumentar su energía. Se rompen así, por lo tanto, las relaciones típicas del equilibrio, y resulta bastante común hablar de energía cinética media de los neutros (relacionada con su temperatura T_g) y electrónica. También, resulta bastante frecuente la definición de una temperatura electrónica, $T_e = 2\varepsilon/3k_B$, donde ε es la energía cinética media electrónica y k_B la constante de Boltzmann. Esta definición surge, en un principio, debido al continuo uso de funciones de distribución electrónica (FDDE) correspondientes a situaciones de equilibrio termodinámico local, generalizándose su uso, incluso, en situaciones donde se ha demostrado que la FDDE se aleja bastante de dicho comportamiento.

Los plasmas térmicos se producen generalmente cuando se consiguen que los mecanismos de transferencia de energía entre partículas aumenten la energía de las especies neutras hasta un nivel similar al electrónico, pudiéndose tratar al plasma como un sistema de una única temperatura. Esta situación se da generalmente cuando se trabaja a presiones altas, del orden de la atmosférica, aunque también hay casos de plasmas no térmicos a estas presiones.

En los últimos años ha habido un progreso considerable en el desarrollo de nuevas fuentes de plasma que mantienen una alta densidad electrónica a pre-

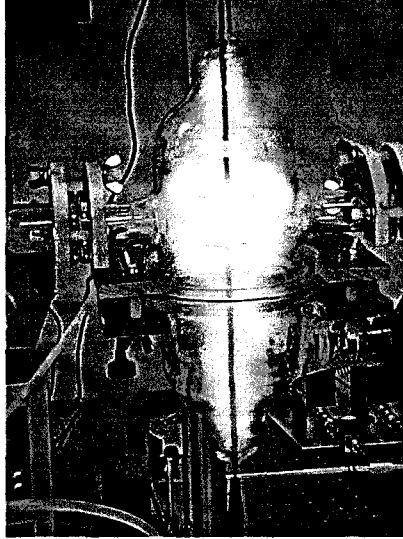


Figura 1.1: Descarga típica de plasma a baja presión en condiciones DC.

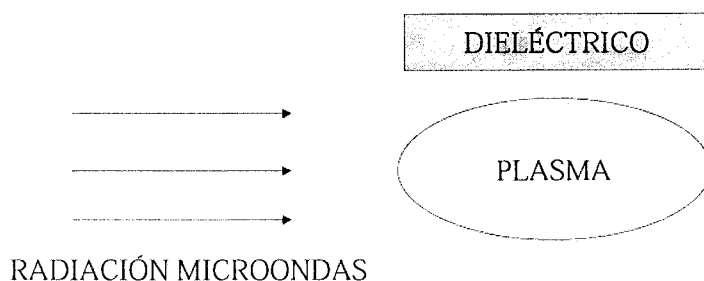
siones relativamente bajas. Estos plasmas han encontrado aplicación en diversos campos, como son la producción de circuitos integrados, la producción y modificación de materiales, técnicas de descontaminación, láseres, etc... Algunas de estas fuentes incluyen mecanismos de excitación mediante Resonancia Ciclotrónica Electrónica (ECR), ondas "helicon", excitación acoplada inductiva, o capacitivas (en descargas RF). Así mismo, estas fuentes presentan la ventaja de trabajar con una mayor limpieza y selectividad, así como de reducir el desgaste del reactor. Los resultados experimentales, en cada caso, son bastantes variados y dependen fuertemente de cómo se absorba la potencia por el plasma. Las presiones típicas de trabajo son de $10^{-2} - 2$ Torr en sistemas en los que no se aplica un campo magnético externo, y $10^{-5} - 10^{-3}$ Torr en sistemas en los que se aplica.

La descripción teórica de los plasmas RF y μW , sin campo magnético externo, está bastante elaborada en la actualidad, entendiéndose bastante bien los mecanismos de excitación e ionización, la forma de la FDDE, y la absorción de potencia en el plasma. Sin embargo, en los nuevos dispositivos, por ejemplo en las fuentes ECR, la teoría está menos desarrollada. Entender la física de un sistema de estas características implica poder explicar parámetros básicos como la energía cinética media electrónica, el potencial del plasma, la densidad de las diferentes especies, y usar estas propiedades de forma adecuada en diferentes aplicaciones. Esta tarea está aún abierta hoy en día, y supone uno de los retos principales en el desarrollo de la física del plasma.

1.2 Plasmas creados y mantenidos por la propagación de una onda

Dentro de los plasmas que se generan y se mantienen mediante una OS, los más comunes son los producidos en en tubos grandes¹ debido a la gran cantidad de aplicaciones científicas y tecnológicas que se han encontrado. En este caso, un tubo hueco dieléctrico rodea completamente al plasma en una configuración cerrada, apareciendo un máximo del campo eléctrico en las cercanías de la interfase plasma-dieléctrico (de ahí el nombre de plasma de onda de superficie). Por otra parte, tanto el plasma como el dieléctrico constituyen el único medio por el que se propaga la onda electromagnética, siendo ésta una de las principales características de las descargas de OS. Por otra parte, dependiendo de las dimensiones experimentales, se utiliza una terminología u otra: así se dice que es "largo" cuando la dimensión transversal es mucho menor que la longitud del tubo, y "corto" cuando ocurre todo lo contrario.²

Propiedades de las descargas OS Elementos Típicos



Elementos típicos en una descarga de plasma de onda de superficie.

1.2.1 Producción y funcionamiento

Las descargas de OS son las descargas de AF que más se utilizan hoy en día. Este uso tan extendido se debe principalmente a su gran versatilidad, ya que se pueden generar diferentes tipos de plasmas alterando la frecuencia de la onda electromagnética, la presión del gas, el diámetro del tubo, etc... Además, la posibilidad de utilizar un campo magnético externo axial uniforme amplía las condiciones de

¹no necesariamente cilíndricos.

²aunque dicha longitud depende fuertemente de la potencia que se haga incidir sobre el plasma.

trabajo, ya que, en este caso, se puede generar un plasma a presiones incluso inferiores al mTorr.

Las ondas de superficie se pueden propagar por el plasma con diferentes modos, caracterizado por un número entero, m , que aparece en el término de fase del campo, $\exp(im\varphi)$, correspondiente a la coordenada cilíndrica. En general, los modos de propagación permitidos vienen dado por la geometría del sistema; en columnas cilíndricas la onda se puede propagar únicamente con el modo simétrico acimutal ($m = 0$) si se cumple que el producto de la frecuencia por el radio interior del tubo, ωR , es menor que, aproximadamente, 12 GHz cm, en ausencia de campo magnético estático [7]. En este caso, el análisis resulta más sencillo ya que el sistema posee un único modo de propagación. Cuando el valor de ωR supera los 12 GHz cm, los modos $m = 1, 2$ y superiores son posibles en la propagación de la OS [8], no intercambiando energía entre sí.³

Por otra parte, el rango de frecuencias permitidas para generar y mantener un plasma de OS es bastante amplio. Una descarga de este tipo puede ser mantenida con frecuencias que van desde pocos MHz hasta 10 GHz sin problemas importantes de impedancias. También, la posibilidad de variar la frecuencia de la onda permite alterar muchas propiedades físicas de la descarga. Así, para frecuencias muy bajas, la función de distribución electrónica oscila con la onda electromagnética debido al gran número de colisiones que hay en cada oscilación [9], mientras que, para frecuencias suficientemente grandes, la FDDE resulta estacionaria ya que, en el tiempo típico en el que los electrones transmiten la energía por colisiones, el campo oscila muchas veces y las partículas del plasma sólo perciben un promedio. La frecuencia de la onda afecta también a la densidad electrónica, n_e , ya que impone un valor mínimo de ésta para que se pueda mantener la descarga, n_{\min} [1, 10]. Por lo que un aumento de la frecuencia conlleva un aumento de n_{\min} , alterándose todos los mecanismos cinéticos.

Una de las mayores ventajas de las descargas producidas por OS es que se pueden generar en un rango de presiones bastante amplio, desde presiones muy por encima de la atmosférica, hasta, incluso, presiones inferiores al mTorr. También, una característica importante de estos plasmas es que existe un valor mínimo de presión, por debajo del cual resulta imposible mantener la descarga. Dicho valor depende, en cada caso, del diámetro interno del tubo, frecuencia del campo y naturaleza del gas [11].

Las descargas de OS se han conseguido mantener tanto en recintos pequeños [12], como en recintos de grandes dimensiones [13]. Las configuraciones pueden ser muy variadas, y todo parece indicar que la geometría transversal puede ser casi arbitraria. Así mismo, el recinto de la descarga debe estar hecho de un material dieléctrico con un valor bajo de la constante dieléctrica relativa, ϵ , ya que un valor grande haría que se absorbiese parte de la potencia incidente de la

³ Este hecho contrasta con lo que ocurre en cavidades resonantes donde la onda puede pasar en muy poco tiempo de un modo a otro.

onda, restando efectividad al dispositivo. El cuarzo con $\varepsilon = 3.78$, es uno de los mejores materiales. También el óxido de aluminio (Al_2O_3), ya sea monocristalino o policristalino, con ε cercano a 9, se utiliza bastante debido a que puede soportar temperaturas más altas que el cuarzo, aunque produce más pérdidas.

Por último, otro problema importante a la hora de producir y mantener las descargas es el ajuste de impedancias entre la onda y el plasma. La impedancia en una descarga de OS depende de las características del plasma, y condiciona una mayor o menor absorción de potencia. La potencia reflejada es potencia malgastada, por lo que las condiciones ideales serían aquellas en las que no se reflejase nada. La estabilidad de la impedancia en descargas de OS puede conseguirse mediante un diseño adecuado del emisor que se adapte a los requerimientos de la descarga. La dependencia axial es diversa, aunque en las cercanías del generador puede permanecer casi constante si el cociente $n_e(z)/n_{\min}$ es al menos varias veces mayor que la unidad en cada posición. De esta manera, al variar la potencia incidente no se afecta el acoplo de impedancias.

1.2.2 Propiedades de los plasmas de onda de superficie en pequeños volúmenes

Los modelos teóricos que abordan la descripción de los plasmas de OS a baja presión, ya sea en condiciones de RF o de μW , necesitan tener en cuenta diferentes aspectos teóricos en la descripción, como son:

- la cinética electrónica.
- La descripción de la cinética de las partículas pesadas.
- La transferencia de energía entre la onda electromagnética y el plasma.
- Otros factores que puedan influir, como la geometría, condiciones de trabajo, etc.

Las ecuaciones asociadas a cada uno de estos aspectos de la descarga están fuertemente acopladas entre sí, teniéndose que resolver el problema de manera consistente. De todas maneras, existen situaciones donde el acoplamiento entre las ecuaciones se puede romper si lo que se busca no es una descripción global del sistema. Así, si se intenta conocer la dependencia de unas cantidades al variar otras, el estudio se simplifica bastante, siendo muy común la elaboración de modelos que permiten conocer, por ejemplo, la temperatura electrónica o las poblaciones de determinados estados excitados, a partir de un valor de la densidad electrónica o determinadas intensidades de línea previamente medidas en el laboratorio.

En los siguientes puntos pasamos a describir, en líneas generales, el planteamiento de las ecuaciones más importantes para caracterizar el plasma.

Descripción de la cinética electrónica

En general, al tratar con plasmas no térmicos, la descripción maxwelliana de equilibrio termodinámico no resulta válida. A pesar de ésto, en algunos casos en particular, se ha demostrado que el uso de funciones maxwellianas para describir el comportamiento electrónico puede ser válido, siendo necesario imponer una energía media electrónica muy superior a la de las partículas neutras.⁴

El tratamiento general que se hace para obtener el perfil de la FDDE conlleva, en una descripción teórica, la resolución de la ecuación de Boltzmann para los electrones en la aproximación de los dos términos [14]

$$\left(\frac{\partial F}{\partial t}\right) + \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{r}}\right) \vec{v} - \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{v}}\right) \frac{e \vec{E}}{m_e} = \left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)_c,$$

donde (\vec{r}, \vec{v}, t) son el vector posición, velocidad y el tiempo respectivamente, $\vec{E} = \vec{E}_s + \vec{E}_p \exp(i\omega t)$ representa el campo eléctrico que actúa sobre los electrones, donde \vec{E}_s es el campo de carga de espacio que surge como respuesta en el plasma, \vec{E}_p la amplitud del campo de microondas, ω su frecuencia, m_e y e la masa y carga de los electrones, y $(\partial F/\partial t)_c$ el operador de colisión electrónico.

La solución a esta ecuación se aborda haciendo un desarrollo de F en armónicos esféricos en la velocidad, y en una serie de Fourier en el tiempo

$$F = \sum_p \sum_l F_p^l P_l(\cos \Theta) \exp(ip\omega t).$$

Además, se realizan las siguientes suposiciones:

1. el recorrido libre medio electrón-neutro es mucho menor que cualquier dimensión del recipiente.
2. La energía ganada del campo eléctrico por un electrón promedio durante una colisión es muy pequeña comparada con la energía térmica de los electrones.
3. La amplitud de oscilación de los electrones bajo el efecto del campo es pequeña comparada con las dimensiones del recipiente.
4. $\omega \gg \tau_e^{-1}$, donde τ_e es el tiempo característico de relajación electrónico por colisiones.

Con estas suposiciones es suficiente escribir el desarrollo de la función de distribución como

$$F \simeq F_0^0 + \frac{\vec{v}}{v} \left[\vec{F}_0^1 + \vec{F}_1^1 \exp(i\omega t) \right],$$

⁴hablándose así de un plasma de varias temperaturas.



donde F_0^0 , \vec{F}_0^1 y \vec{F}_1^1 son funciones isótropas independientes del tiempo. De esta manera, escribiendo el operador de colisión en términos de la frecuencia de transferencia de cantidad de movimiento electrón-neutro, ν_c , y las frecuencias inelásticas de excitación al nivel j , ν_j , y de ionización, ν_i , se pueden deducir las ecuaciones

$$\frac{v}{3} \vec{\nabla}_r \vec{F}_0^1 - \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left\{ \left(\frac{ev^2}{6m_e} \right) \left[\text{Re} \left(\vec{E}_p \vec{F}_1^1 \right) + 2 \vec{E}_s \vec{F}_0^1 \right] + \frac{m_e}{M} \nu_c v^3 F_0^0 \right\} = (q - \nu_x - \nu_i) F_0^0,$$

$$\nu_c \vec{F}_0^1 = -v \vec{\nabla}_r F_0^0 + \frac{e}{m} \vec{E}_s \frac{\partial F_0^0}{\partial v}, \quad (1.1)$$

$$(\nu_c + i\omega) \vec{F}_1^1 = \frac{e \vec{E}_p}{m_e} \frac{\partial F_0^0}{\partial v}, \quad (1.2)$$

Donde Re significa " la parte real de", ν_x es $\sum_j \nu_j$ y q es un operador que representa la reintroducción de electrones después de una colisión inelástica, cumpliéndose

$$\int_0^\infty dv q F_0^0 4\pi v^2 = n_e (\langle \nu_x \rangle + 2 \langle \nu_i \rangle),$$

donde $\langle \rangle$ significa valor medio.

Operando con las ecuaciones (1.1), (1.2) y (1.3) se puede deducir la relación

$$\langle \nu_i \rangle n_e = \vec{\nabla}_r \left[-\vec{\nabla}_r (D_e n_e) - n_e \mu_e \vec{E}_s \right],$$

con

$$D_e = \frac{1}{n_e} \int_0^\infty dv \frac{v^2}{3\nu_c} F_0^0 4\pi v^2,$$

el coeficiente de difusión libre electrónico, y

$$\mu_e = -\frac{1}{n_e} \int_0^\infty dv \frac{ev}{3m_e \nu_c} \frac{\partial F_0^0}{\partial v} 4\pi v^2,$$

la movilidad electrónica. Así se establece un balance claro: los electrones netos que se producen por ionización se tienen que perder por difusión o por efectos del campo. También se puede evaluar la conductividad del plasma como

$$\sigma = -\frac{e^2}{m_e} \int_0^\infty dv \frac{\nu_c}{\nu_c + i\omega} \frac{\partial F_0^0}{\partial v} \frac{4\pi v^3}{3}. \quad (1.3)$$

Las ecuaciones (1.1), (1.2) y (1.3) son difíciles de resolver, e incluso no permiten obtener soluciones del tipo $F = n(\vec{r})f_0(v)$. Además, para evaluar el valor de \vec{E}_s de una manera autoconsistente, resulta necesario tener en cuenta el movimiento iónico, por lo que además se deberían acoplar nuevas ecuaciones al modelo.

Una aproximación razonable surge de despreciar los efectos del campo de carga de espacio (término de $2\vec{E}_s\vec{F}_0^1$ en la ec. (1.3)) respecto a la contribución del campo externo. Así, teniendo en cuenta la ec. (1.3) se puede llegar a

$$-\frac{v^2}{3\nu_c} \nabla_r^2 F_0^0 + \frac{ev}{3m_e\nu_c} \nabla_r \left(\vec{E}_s \frac{\partial F_0^0}{\partial v} \right) - \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left[v^2 \left(\frac{u_c\nu_c}{3m_e} \frac{\partial F_0^0}{\partial v} + \frac{m_e}{M} \nu_c v F_0^0 \right) \right] = (q - \nu_x - \nu_i) F_0^0,$$

donde se ha introducido la cantidad u_c , energía promedio ganada del campo por colisión, definida como

$$u_c = \frac{(e\vec{E}_p)^2}{2m_e(\nu_c^2 + \omega^2)}.$$

Además, el campo de carga de espacio se puede expresar como

$$\vec{E}_s = -u_s \frac{\nabla_r n_e}{n_e},$$

donde u_s sería una medida de la caída de potencial asociada con el campo de carga de espacio. De esta forma se puede encontrar una solución del tipo $F = n_e(\vec{r})f_0(v)$, que integrando en la velocidad proporciona la relación

$$\nabla_r^2 n_e = -n_e/\Lambda_e^2, \quad (1.4)$$

con $\Lambda_e = (D_s / \langle \nu_i \rangle)^{1/2}$, longitud característica de difusión, y $D_s = D_e - u_s \mu_e$, el coeficiente de difusión efectivo. Renormalizando la función de distribución de tal manera que $f_0 4\pi v^2 dv = f(u) \sqrt{u} du$ (con $\int_0^\infty f(u) \sqrt{u} du = 1$), se obtiene

$$\frac{2u}{3m\nu_c\Lambda_e^2} \left(f + eu_s \frac{df}{du} \right) - \frac{2}{3\sqrt{u}} \frac{d}{du} \left[u^{3/2} \nu_c \left(u_c \frac{df}{du} + \frac{3m_e}{M} f \right) \right] = (q - \nu_x - \nu_i) f.$$

Esta ecuación puede resolverse mediante técnicas numéricas, aunque se puede simplificar mucho más si se desprecia el término de difusión. Este término, comparado con el resto, es del orden $(N\Lambda_e)^{-2}$, N es la densidad del gas, por lo que, para presiones suficientemente elevadas, este término se puede despreciar. Así, la ecuación final a resolver será

$$-\frac{2}{3} \frac{d}{du} \left[u^{3/2} \nu_c \left(u_c \frac{df}{du} + \frac{3m_e}{M} f \right) \right] = (q - \nu_x - \nu_i) f \sqrt{u},$$

que si se tienen en cuenta las interacciones coulombianas electrón-electrón queda

$$-\frac{2}{3} \frac{d}{du} \left[u^{3/2} \nu_c \left(u_c \frac{df}{du} + \frac{3m_e}{M} f \right) \right] - 2\nu_{ee} u^{3/2} \left(I(u) f + J(u) \frac{df}{du} \right) = (q - \nu_x - \nu_i) f \sqrt{u},$$

donde $I(u) = \int_0^u du f \sqrt{u}$, $J(u) = \frac{2}{3} \left(\int_0^u f(u) u^{3/2} du + u^{3/2} \int_u^\infty du f(u) \right)$, y el valor de ν_{ee} es $\nu_{ee} = 4\pi \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e} \right)^2 \frac{\ln \Lambda_c}{v^3} n_e$, siendo $\ln \Lambda_c$ el logaritmo coulombiano, definido como $\Lambda_c = 12\pi n_e \lambda_D^3$, y λ_D la longitud de Debye del plasma. Las soluciones de esta ecuación⁵ son, en general, diferentes a la solución maxwelliana, aunque se ha demostrado que, a medida que aumenta la densidad electrónica, la solución se acerca cada vez más a este perfil. En la figura 1.2 se han mostrado las soluciones para un plasma de argón en condiciones típicas, tomando la densidad electrónica como parámetro. En dicha gráfica se estudia el efecto del valor de la densidad electrónica en el perfil de la función de distribución, y se puede apreciar la tendencia al perfil maxwelliano a medida que aumenta la densidad electrónica.

Cinética de las partículas pesadas del plasma

La cinética de las partículas pesadas se describe mediante ecuaciones de balance, teniendo en cuenta los procesos cinéticos de creación y destrucción. El problema principal de este punto reside en discriminar las especies más importantes del plasma, los niveles atómicos relevantes en la cinética, así como los procesos más importantes.

La caracterización de los estados excitados depende de la naturaleza del plasma que se esté tratando y de las diferentes evidencias que haya sobre la trascendencia de un determinado nivel o de un proceso en sí. Las ecuaciones vienen dadas por el momento de orden cero de la ecuación de Boltzmann para las partículas neutras

$$\frac{\partial n_{i,k}}{\partial t} - \nabla^2 (D_{i,k} n_{i,k}) = \frac{\delta n_{i,k}}{\delta t},$$

⁵Una vez conocidas las secciones eficaces de los procesos inelásticos correspondientes.

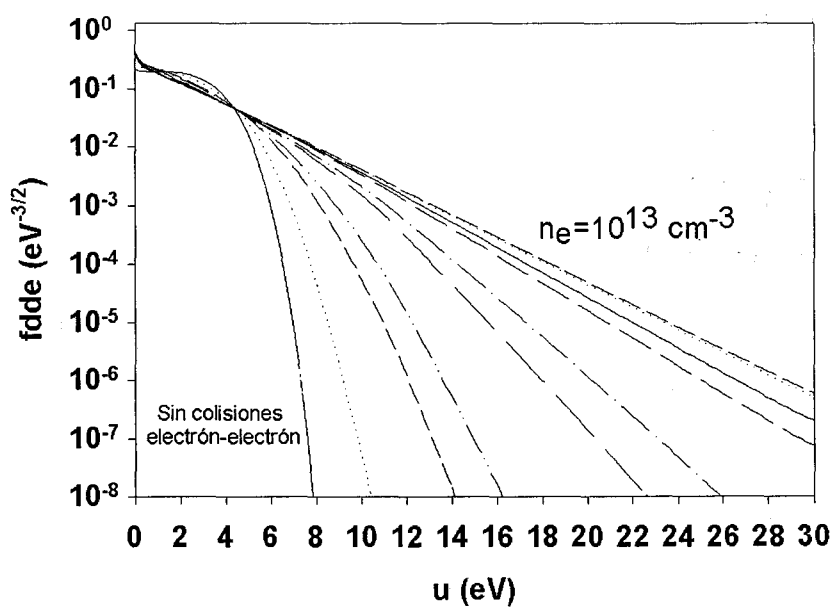


Figura 1.2: Solución de la ecuación de Boltzmann, mediante la aproximación de dos términos, en condiciones típicas en un plasma de argón a baja presión, utilizando la densidad electrónica como parámetro. Se puede apreciar cómo la solución tiende hacia un perfil claramente maxwelliano a medida que aumenta la densidad electrónica.

donde $n_{i,k}$ se refiere a la población de la especie i en el estado excitado k , $D_{i,k}$ su coeficiente de difusión, y el término $\delta n_{i,k}/\delta t$ tiene en cuenta las frecuencias de los procesos inelásticos de creación y destrucción.

En función de las condiciones del plasma se pueden obtener diferentes regímenes de excitación, en este trabajo vamos a estudiar dos muy importantes:

- Balance Corona: este balance se da cuando los procesos de excitación se deben fundamentalmente a procesos colisionales electrónicos desde el nivel fundamental, mientras que los de desexcitación se deben principalmente a caídas radiativas.
- Excitación-Saturación-Balance (ESB): en este caso, los mecanismos de excitación (y desexcitación) se producen mediante excitaciones (y desexcitaciones) progresivas a lo largo del espectro energético atómico, en un mecanismo conocido como "en escalera".

Por otra parte, también se pueden tener otros factores muy importantes, como la absorción de radiación, recombinación de electrones e iones para producir un estado excitado, efectos de la pared del dispositivo, etc...

Transferencia de energía de la onda electromagnética al plasma

El problema de la transferencia de la energía de la onda al plasma se aborda a partir de las ecuaciones de Maxwell. En el caso de un plasma producido en un tubo largo cilíndrico, se tendrá una onda TM que se propaga con un número de onda $k = \beta - i\alpha$ en el modo simétrico acimutal con componentes $E = (E_r, 0, E_z)$ y $H = (0, H_\varphi, 0)$, donde (r, φ, z) son las coordenadas cilíndricas [15].

Normalmente se supone un plasma poco colisional, de tal manera que el coeficiente de atenuación, α , es mucho menor que el valor de la constante de propagación β , por lo que la onda estará débilmente amortiguada.⁶ En este caso, la permitividad eléctrica relativa del plasma, ε_p , se puede escribir como

$$\varepsilon_p = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\nu_{ef})},$$

donde $\omega_p = \sqrt{e^2 n_{ef}/m}$ es la frecuencia angular del plasma, n_{ef} la densidad electrónica efectiva⁷ definida como

$$n_{ef} = -\frac{2}{3} (\nu_{ef}^2 + \omega^2) n_e \int_0^\infty du \frac{u^{3/2}}{\nu_c^2 + \omega^2} \frac{df}{du},$$

⁶esta condición resulta válida en condiciones de baja presión a lo largo de toda la columna de plasma exceptuando el final, donde la densidad electrónica es muy baja y ambas cantidades son del mismo orden

⁷Las cantidades efectivas se definen en el caso en que la frecuencia de transferencia de cantidad de movimiento, ν_c , dependa fuertemente de la energía.

y la frecuencia efectiva de transferencia de cantidad de movimiento electrón-neutro, ν_{ef} , tiene la forma⁸

$$\nu_{ef} = \frac{\int_0^{\infty} du \frac{\nu_c u^{3/2}}{\nu_c^2 + \omega^2} \frac{df}{du}}{\int_0^{\infty} du \frac{u^{3/2}}{\nu_c^2 + \omega^2} \frac{df}{du}}.$$

También, la conductividad del plasma se puede calcular mediante la ec. (1.3). De esta manera, las ecuaciones de Maxwell para la OS pueden ser escritas como

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial E_z}{\partial r} \right) + \frac{k^2}{\Gamma^2} \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \frac{\partial E_z}{\partial r} - \Gamma^2 E_z = 0,$$

$$E_r = i \frac{k}{\Gamma^2} \frac{\partial E_z}{\partial r},$$

$$H_\varphi = \frac{\omega \varepsilon_0 \varepsilon}{k} E_r,$$

donde ε_0 es la permitividad en el vacío y $\Gamma^2 = k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon$ (ε es la permitividad relativa de cada medio), y cuyas soluciones se pueden escribir en términos de las funciones de Hankel y de Bessel.

Relación entre la onda electromagnética y la cinética del plasma

La ec. (??), usada para calcular la FDDE, contiene mucha información sobre las características del plasma. Así, si multiplicamos dicha ecuación por la energía cinética electrónica y se integra en todo el rango de energías, se puede obtener la relación

$$\theta = \theta_L,$$

donde

$$\theta = \frac{\text{Re}(\sigma) E_p^2}{n_e 2},$$

potencia total absorbida del campo por electrón en el plasma, y

$$\theta_L = \frac{2m_e}{M} \langle u \nu_c \rangle + \sum_j V_j \langle \nu_j \rangle + V_i \langle \nu_i \rangle,$$

⁸La necesidad de introducir valores efectivos viene de realizar un paralelismo con las ecuaciones de una descarga DC. De esta manera, la descripción de una descarga AF es similar a la de otra DC utilizando valores efectivos de las variables.

donde V_j es la energía del nivel excitado j , y V_i la energía de ionización. La cantidad θ_L representa la potencia por electrón cedida a las partículas neutras en procesos elásticos e inelásticos.

En muchos modelos teóricos de plasmas generados en AF, así como en distintos desarrollos experimentales, se ha puesto de relieve el importante papel jugado por esta cantidad, θ , ya que, dado un valor de $P_g R$ (P_g es la presión del gas, y R el radio de la descarga), el valor de θ/P_g es siempre el mismo, independientemente del tipo de descarga AF [17, 16]. Así, la eficiencia intrínseca de todos los plasmas AF es siempre la misma, ya que los mecanismos de pérdidas de partículas cargadas dominan el balance de potencia a través de θ_L (potencia perdida por electrón), ajustándose el valor de θ a él, y por lo tanto el campo local en el plasma [18]. Esta condición permite, en algunas ocasiones, romper el acoplo entre las ecuaciones de Maxwell y las ecuaciones de la descarga del plasma. Por lo que, en muchos casos, el parámetro adecuado para caracterizar la descarga es θ y no el valor del campo eléctrico local.

Por otra parte, si tenemos en cuenta las leyes de semejanza entre θ/P_g y $P_g R$, que han sido demostradas y confirmadas experimentalmente [19], y la influencia de la frecuencia de la onda en la FDDE, se parece concluir que, operar con un bajo grado de ionización a baja frecuencia es menos eficiente (en términos de producción de partículas cargadas por Watio) que utilizando microondas con altos grados de ionización.

Otros factores

Dentro de estos factores se encuentran hoy los principales problemas en la descripción, junto a la elección de los niveles y especies descritas en el modelo. En primer lugar, la investigación se está centrando en el cálculo de la temperatura del gas en la zona donde reside el plasma, ya que puede influir en el cálculo de la potencia absorbida por electrón, y en otras cantidades importantes de la descarga. Esta influencia tiene su relativa importancia debido a que, realmente, no se conoce la elección correcta del espectro de niveles, especies y procesos cinéticos, por lo que una gran influencia de estos factores pueden llevar a conclusiones erróneas al atribuirle un determinado papel a una reacción o nivel excitado.

1.3 Nueva generación de descargas de alta frecuencia: grandes volúmenes

1.3.1 Necesidad de nuevos dispositivos

Los trabajos experimentales desarrollados durante los años 70s y 80s se limitaron a tubos cilíndricos dieléctricos huecos, cuya longitud era mucho mayor que el radio. Estas configuraciones, a pesar de ser interesantes desde el punto de vista

teórico y experimental, no resultaban apropiadas para determinadas aplicaciones, y se comenzaron a estudiar otros tipos de dispositivos donde se pudiesen conseguir grandes volúmenes de plasma.

Estos nuevos tipos de descargas se pueden clasificar en dos categorías en función del tipo de interfase entre el plasma y el dieléctrico que guía la OS: i) descargas planares, donde la onda se excita en una interfase plana⁹, y ii) descargas en tubos cortos, donde la onda se excita en una interfase con forma de circunferencia, y cuyo diámetro es mucho mayor que la longitud del plasma.

1.3.2 Nuevos dispositivos

Un tipo de descarga que se está desarrollando en la actualidad es la llamada descarga planar, donde el plasma se encuentra situado entre dos placas paralelas. En este caso, el recinto que rodea el plasma suele ser metálico, y se hace incidir una onda electromagnética a través de una ventana dieléctrica. A su vez, en el interior hay otro dieléctrico en contacto con el plasma que hace que se cree la onda de superficie. Así, se tienen descargas creadas al hacer incidir una onda electromagnética sobre el dieléctrico en contacto con el plasma [20, 21], al alimentar una ventana dieléctrica en forma de disco por el centro [22, 23] o por la circunferencia [24]. Así mismo, se están estudiando los plasmas que se producen en recintos completamente metálicos [25, 26].

Además de las descargas planares, las descargas producidas en tubos "cortos" representan una gran parte de esta nueva generación de descargas. En este caso, el plasma se produce en el interior de un tubo cilíndrico dieléctrico, al que se le inyecta la potencia por uno de sus extremos. En condiciones normales, la potencia absorbida por el plasma es tan pequeña, que la longitud de la columna es despreciable frente a su diámetro.¹⁰ En general podemos encontrar dos situaciones diferentes dependiendo de la potencia utilizada; si esta es pequeña, y por lo tanto no se alcanza la densidad electrónica mínima para que se propague la onda, la descarga sólo se produce en las inmediaciones del generador, mientras que si se utiliza una potencia mayor, y se alcanza dicha densidad mínima, se consigue que la onda se propague y que se genere una descarga de mayor longitud.

Dentro de esta categoría caben destacar las descargas producidas por generadores con rendijas, que hacen las veces de antenas que rodean el recinto dieléctrico que contiene el plasma¹¹ [27, 28, 29], y el sistema SLAN (Slot Antenna) (figura 1.3 y 1.4) [30], donde unas antenas colocadas alrededor de una guía de ondas cilíndrica se encarga de excitar el plasma.

⁹conocida como de geometría abierta.

¹⁰aunque también se puede aumentar su longitud mediante el uso de potencias incidentes mayores.

¹¹conocidas como gap-type.

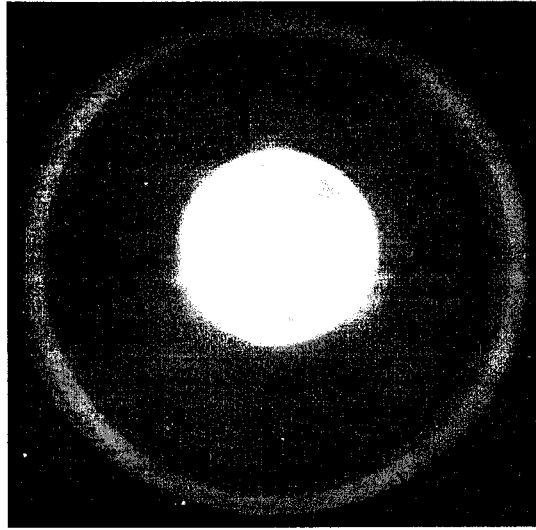


Figura 1.3: Plasma producido en un dispositivo SLAN con ECR. Vista superior.

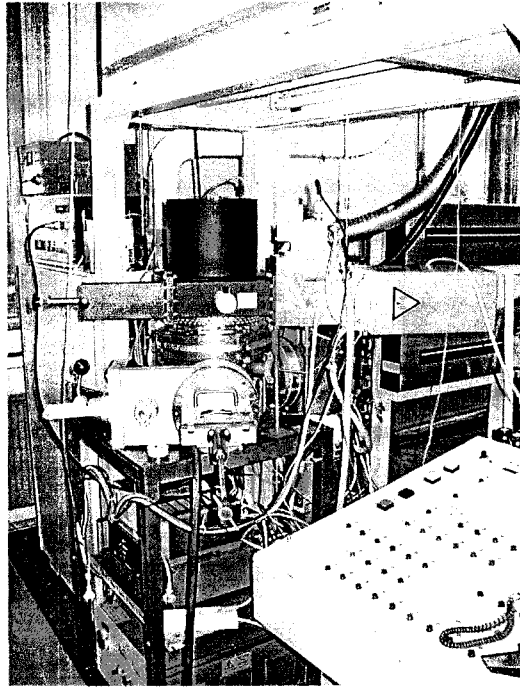


Figura 1.4: Fotografía de un sistema SLAN de producción de plasma. En la figura se puede apreciar una guía de onda rectangular acoplada al recinto, que se convierte en otra guía de onda anular que excita el plasma mediante un sistema de antenas.

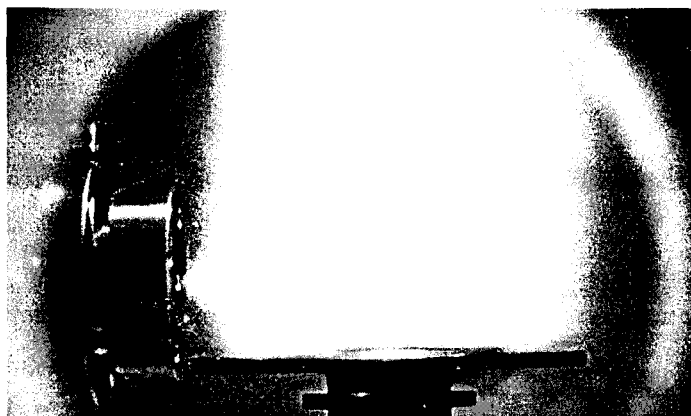


Figura 1.5: Plasma producido en un recinto utilizando un dispositivo ECR. Al generarse el plasma, la forma que adopta es cilíndrica debido al fuerte campo magnético que lo confina.

Efecto de un campo magnético estático en condiciones de resonancia (ECR)

En general, las propiedades de los plasmas producidos por descargas de AF se ven bastante modificadas al aplicar un campo magnético externo, B , en condiciones de resonancia ciclotrónica electrónica, $\omega = \omega_c$ ($\omega_c = eB/m_e$, representa la frecuencia angular ciclotrónica electrónica). Al aplicar un campo magnético estático, la potencia absorbida por electrón, θ , puede escribirse como

$$\theta \simeq \frac{e^2 E^2}{2m_e} \left[\frac{\nu_c}{\nu_c^2 + (\omega - \omega_c)^2} \right],$$

de tal manera que, en condiciones de resonancia, la potencia absorbida por electrón es máxima. Este sistema de aumentar la absorción de potencia en condiciones ECR¹², permite aumentar en gran medida el rango de presiones operativas así como los grados de ionización (figura 1.5).

1.4 Aplicaciones de las descargas generadas a alta frecuencia

Las aplicaciones de las descargas de alta frecuencia aumentan cada día a medida que se van diseñando y comprendiendo el funcionamiento de nuevos dispositivos. En la actualidad, las aplicaciones más importantes de estas descargas van desde meras fuentes de partículas (átomos de nitrógeno, hidrógeno [31, 32], átomos de

¹²electron cyclotron resonance.

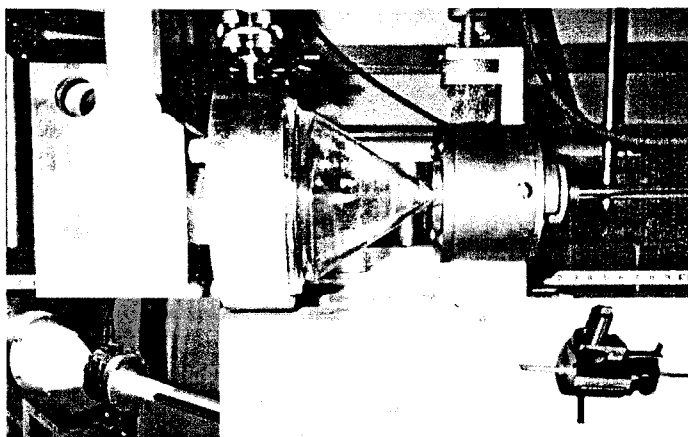


Figura 1.6: Dispositivo utilizado para la deposición de capas finas mediante un plasma producido por onda de superficie. El plasma se produce mediante un surfatrón en un tubo fino, que se abre en forma de cono a la región donde se coloca el substrato.

argón en estados excitados metaestables [33], fuente de iones [34, 35], ...), haces de partículas (oxígeno atómico [36, 37], argón y nitrógeno [38], ...), dispositivos de iluminación [39, 40, 41, 42], láser (argón [43], *FH*, ..), eliminación de gases nocivos para el medioambiente (SF_6 , C_2F_6 , ..) [44, 45, 46], deposición de capas finas (silicio amorfo hidrogenado [47, 2, 49], diamantes [48, 50, 51], polímeros [52, 53, 54, 55], grabado ("etching") y quemado ("ashing") de materiales (polímeros [56, 27], metales [57, 58, 59], limpieza de superficies [60], ...), etc...

1.5 Objetivo de esta memoria

En este primer capítulo hemos realizado una descripción de los plasmas generados a alta frecuencia y sus características, teniendo en cuenta que el desarrollo experimental en este campo ha sido muy superior a los avances teóricos, y que existen todavía muchos factores a tener en cuenta al realizar un modelo de la descarga.

El estudio de las descargas producidas a alta frecuencia se centra fundamentalmente en dos aspectos de la cinética del plasma: la caracterización de las propiedades electrónicas por un lado, y la de los estados excitados por otro. Se está interesado, por lo tanto, en conocer la densidad electrónica y la energía cinética media electrónica (temperatura electrónica), así como las poblaciones de los estados excitados y los mecanismos de excitación en el plasma. Normalmente, desde el punto de vista experimental, la medición directa de algunas cantidades resulta a veces muy complicada y difícil, mientras que existen otras cantidades de muy fácil acceso como son las líneas de emisión del plasma. Es por ésto que se sue-

len construir modelos teóricos para relacionar dichos datos experimentales, fáciles de obtener, con las cantidades que realmente se quieren conocer. El problema que nos planteamos en los capítulos 2 y 3 es éste, y consiste en conocer el valor de la temperatura electrónica a partir de las intensidades de diferentes líneas emitidas por el plasma. Este problema se ha resuelto en dos situaciones muy diferentes, una en un plasma producido en un tubo largo de pequeño diámetro (capítulo 2), y otra en una descarga de gran volumen producida en un sistema SLAN (capítulo 3).

La principal diferencia encontrada entre ambas descargas reside en la descripción de la cinética de los estados excitados; en una el sistema obedece un régimen ESB,¹³ mientras que en la otra, el plasma mantiene un balance típicamente corona. Del conocimiento de la cinética de los estados excitados, en cada caso, se ha calculado la temperatura electrónica por medio de modelos teóricos. También se ha encontrado que, en un determinado rango de presiones del gas, el perfil de la FDDE es típicamente maxwelliano, hecho que facilita en gran medida la descripción del plasma.

El capítulo 4 está dedicado al desarrollo de un modelo de argón que incluya la problemática del calentamiento del gas en una descarga de tubo largo. Generalmente, en muchos modelos teóricos esta cantidad se toma como un parámetro de ajuste a determinados datos experimentales, o bien únicamente se utiliza el valor de la temperatura ambiente. El efecto de la temperatura del gas es importante en los cálculos ya que puede afectar directamente el valor estimado del número total de partículas, y condicionar fuertemente los resultados teóricos. En este capítulo se ha relacionado la temperatura del gas con diferentes cantidades importantes del plasma, como la densidad electrónica y la potencia absorbida por electrón, mediante un modelo teórico sencillo que incluye un balance de energía en el plasma. Así mismo, se ha ideado un método para medir la temperatura del gas en el laboratorio, en una descarga de tubo largo, que reproduce los resultados teóricos predichos por el modelo. Por último se han comparado los resultados del modelo con las temperaturas electrónicas obtenidas en el capítulo 2, así como con diferentes medidas de los estados excitados.

En el capítulo 5 nos centramos en la caracterización de un plasma de oxígeno generado a baja presión en un recinto de cuarzo mediante un sistema SLAN con ECR. De esta manera se ha planteado un modelo global de la descarga donde aparecen las especies más representativas. Para resolver este modelo resulta necesario introducir el valor de una de las incógnitas como parámetro de entrada, y obtener así las poblaciones y energías del resto de las especies. Por lo tanto, se podrá resolver el modelo introduciendo como dato el valor experimental de la intensidad de una línea de emisión del oxígeno atómico, y con la cual se va a poder caracterizar el plasma. Así mismo, la relación entre la intensidad de la línea y las poblaciones del plasma va a estar directamente ligada al grado de disociación de

¹³Excitación-Saturación-Balance.

la molécula de oxígeno, que a su vez depende fuertemente del valor de la probabilidad de recombinación en la pared del oxígeno atómico. Así, una vez obtenida la dependencia de dicho coeficiente con la temperatura del recinto del plasma, se han calculado las poblaciones de todas las especies en las condiciones experimentales, y se ha acoplado el modelo global con un modelo colisional-radiativo del oxígeno atómico. De esta manera se han conseguido relacionar los resultados del modelo con el cociente de intensidades de líneas. Como conclusión parece que la contribución de la disociación del oxígeno molecular a los estados excitados del oxígeno atómico es muy importante, y resulta imprescindible introducir dichos procesos para una correcta descripción de la descarga.

Bibliografía

- [1] Z. Zakrzewski and M. Moisan, *Plasma Sources Sci. Technol.* **4**, 379-357 (1995).
- [2] R.G. Bosisio, C.F. Weissfloch and M.R. Wertheimer, *J Microwave Power* **7**, 325-346 (1972).
- [3] M. Moisan, C. Beaudry and P. Leprince, *Phys. Lett.* **50A** 125-126 (1974).
- [4] M. Moisan, P. Leprince, C. Beaudry and E. Bloyet, United States patent 4,043,940 issued Sept. 20, 1977.
- [5] M. Moisan, C. Beaudry and P. Leprince, *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **PS-3**, 55-59 (1975).
- [6] Z. Zakrzewski, M. Moisan, V.M.M. Glaude, C. Beaudry and P. Leprince, *Plasma Phys.* **19**, 77-83 (1977).
- [7] J. Margot-Chaker, M. Moisan, M. Chaker, V.M.M. Glaude, P. Lauque, J. Paraszczak and G. Sauve, *J. Appl Phys* **66**, 4134-4148 (1989).
- [8] I. Peres, A. Dallaire, P. Jones and J. Margot, *J Appl. Phys.* **82** 4211-4218 (1997).
- [9] R. Winkler, Collision dominated electron kinetics in low and high frequency fields, in micro-wave discharges: fundamentals and applications, C.M. Ferreira and M. Moisan (eds), Plenum, NATO ASI Series B: Physics vol. 302, 339-357 (1993).
- [10] A.W. Trivelpiece and R.W. Gould, *J. Appl. Phys.* **30**, 1784-1793 (1959).
- [11] J. Margot and M. Moisan, Surface-wave-sustained plasmas in static magnetic fields for the study of ECR discharge mechanisms, in *Microitave Excited Plasmas*, M. Moisan and J. Pelletier (eds), Elsevier. Chap.8 (1992).
- [12] I. Hubert, M. Moisan and A. Ricard, *Spectrochim. Acta* **33B**, I - IC (1979).
- [13] D. Korzec, F. Wenser, R. Winter and J. Engemann, *Plasma Sources Scm. Technol.* **5**, 2 16-234 (1996).

- [14] C M Ferreira *Nonequilibrium Processes in Partially Ionized Gasses*. Eds. M Capitelli and J N Bardsley. NATO ASI series B. Vol 220.
- [15] C M Ferreira *Microwave Discharges, Fundamentals and Applications*. Eds. C M Ferreira and M Moisan. NATO ASI series B. Vol. 302.
- [16] C.M. Ferreira and M. Moisan, *Physica Scripta* **38**, 382-399 (1988).
- [17] V.M.M. Glaude, M. Moisan, R. Pantel, P. Leprince and J. Marec, *J.Appl. Phys.* **51**, 5693-5698 (1980).
- [18] M. Moisan, C.M. Ferreira, J. Hubert, J. Margot and Z. Zakrzewski, Surface-wave sustained plasmas: toward a better understanding of RF and microwave discharges, in *AIP Conference Proceedings* 363, K.H. Becker, W.E. Can and E.E. Kunhardt (eds), America, Institute of Physics, pp. 25-40 (1996).
- [19] C.M. Ferreira and J. Loureiro, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **16**, 2471-2483 (1983).
- [20] K. Komachi and S. Kobayashi, *J. Microwave Power Electromagn. Energy* **24**, 140-149 (1989).
- [21] K. Komachi, *J. Vac. Sci. Technol.* **A12**, 769-771 (1994).
- [22] J. Bemard, french patent No 2694474 (1994).
- [23] O. Friquet, Etude et caracterisation d'un dispositif a plasma microonde entreteu par des ondes de surface excites le long dun dilectrique plan: application au depot d'oxycarbure de silicium, these de doctorat, Ecole Nationale Superieure de l'Aronautique et de l'Espace, Toulouse (1991).
- [24] T. Kimura, V. Yoshida and S.I. Nlizugtmchi, *J. Appl. Phys.* **34**, L1076-1078 (1995).
- [25] D.G. Cooperberg and C.K. Birdsall, *Plasma Sources Sci. Technol.* **7**, 41-53 (1998).
- [26] D.G. Cooperberg and C.K. Birdsall, Plasma at the edge Part I, Memorandum N°UCB/ERL M98/31, University of California at Berkley (1998).
- [27] M. Moisan and Z. Zakrzewski, *J. Phys. D. Appl. Phys.* **24**, 1025-1048 (1991).
- [28] Y. Okamoto, *Analytical Sciences* **7**, 283-288 (1991).
- [29] E. Kaneko, T. Okamoto, S. Watanabe and Y. Okamoto, *Jpn. J. Appl. Phys. Pt 2* **37**, L170-173 (1998).
- [30] Technical note (1994), Microwave plasma source SLAN: Principle of operation and technical description, JE PlasmaConsult GntbH, Mungstener St. 10, D-42285 Wuppertal.

- [31] O. Boero, W. Kubischta and P. Leprince, Nuclear instruments and Methods in Physics Research **A398**, 157-161 (1997).
- [32] P.F. Dalpiaz, W. Kubischta, F. Masoli, A. Reali and P. Slavich, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, **A402**. 171-176 (1998).
- [33] M.E. Bannister and J.L. Cecchi, J. Vac. Sci. Technol. **A12**, 106-113 (1994).
- [34] L. Pomathiod, J.L. Michau and M. Hamelin, Rev. Sci. Instrum. **59**, 2409-2417 (1998).
- [35] Y. Hajlaoui, L. Pomathiod, J. Margot and M. Moisan, Rev. Sci. Instrum, **62**, 2671-2678 (1991).
- [36] W.D. Morison, R.C. Tennyson, J.B. French, T. Braithwaite, M. Moisan, and J. Hubert, Atomic oxygen studies on polymers, Proc. Fourth Int. Conf. on Spacecraft Materials in Space Environment, Toulouse, France (1998)
- [37] W.D. Morison, R.C. Tennyson, J.B. French, T. Braithwaite, M. Moisan and J. Hubert, Atomic oxygen effects on materials, Proc. NASA 15th Space Simulation Conf. NASA CP 3015 (1988).
- [38] V. Lago, A. Scltonemann, A. Buuron, P. Lasgorceix and M. Dudeck, Supersonic plasma jets device for testing space craft materials, Second European Symposium on aerothermodynamics for space vehicles, ESTEC, Noordwyk, Holland (1994).
- [39] D.J. Levy and S.M. Berman, United States patent 4 792 725 (1986).
- [40] D. Levy, Surface wave discharges as fluorescent lamps, 43rd Annual Gaseous Electronics Conference, Urbana-Champaign, p 87 (1990).
- [41] A.T. Rowley and D.O. Wharmby, Power dissipation and light generation in surface wave discharges, 6th International Symposium on the Science and Technology of Light Sources, Budapest-Hungary, Technical University Budapest, pp. 329-331 (1992).
- [42] I. Margot, M. Moisan and A. Ricard, Appl. Spec. **45**, 260-271 (1991).
- [43] P. Leprince, I. Marec, S. Saada, E. Bloyet and J. Migne, European patent 0197843 (1985).
- [44] J. Arno, J.W. Bevan and M. Moisan, Environ. Sci. Technol., **29**, 1961-1965 (1995).
- [45] J. Arno, J.W. Bevan and M. Moisan, Environ. Sci. Technol., **30**, 2427-2431 (1996).

- [46] C.L. Hartz, J.W. Bevan, M.W. Jackson and B.A. Wofford, *Environ. Sci. Technol* , **32**, 682-687 (1998).
- [47] L. Paquin, D. Masson, M.R. Wertheimer and M. Moisan, *Can. J. Phys.* **63**, 83 1-837 (1985).
- [48] C.F.M. Borges, M. Moisan and A. Gicquel, *Diamond and Relat. Mater.* **4**, 149-154 (1995).
- [49] M. Moisan, Z. Zakrzewski and R. Pantel, *J Phys. D: Appl. Phys.* **12**, 219-237 (1979).
- [50] C.F.M. Borges, L. St-Onge, M. Moisan and A. Gicquel, *Thin Solid Films* **274**, 3-17 (1996).
- [51] C.F.M. Borges, V.T. Airoldi, E.J. Corat, M. Moisan, S. Schelz and D. Guay, *J. Appl. Phys.* **80**, 6013-6020 (1996).
- [52] R. Claude, M. Moisan and M.R. Wertheimer, *Appl. Phys.Lett.* **50**, 1797-1799 (1987).
- [53] R. Claude, M. Moisan, M.R. Wertheimer and Z. Zakrzewski, *Plasma Chem. Plasma Proc.* **7**, 451-464 (1987).
- [54] D. Korzec, K. Traub, F. Werner and J. Engemann, *Thin Solid Films* **281-282**, 143-145 (1996).
- [55] D. Korzec, D. Theirich, F. Werner, K. Traub and J. Engemann, *Surf Coat. Technol.* **74-75**, 67-74 (1995).
- [56] G. Sauv e, M. Moisan, Paraszczak and J. Heidenreich, *Appl. Phys. Lett.* **53**, 470-472 (1988).
- [57] F. Bounasri, M. Moisan, L. St-Onge, J. Margot, M. Chaker, J. Pelletier, A. El Khakani and E. Gat, *J. Appl. Phys.* **77**, 4030-4038 (1995).
- [58] J. Margot, M. Chaker, L. St-Onge, M. Tabbal, A. Aliouchouche, O. Pauna, C. Alinot and C. Kliagine, *J. Phys. IV France Colloque C4, Supplement au Journal de Physique III*, C4-295-305 (1997).
- [59] F. Bounasri, E. Gat, M. Chaker, M. Moisan, J. Margot and M.F. Ravet, *J. Appl. Phys.* **78**, 6780-6783 (1995).
- [60] B. Charlet and L. Peccoud, *Soc. Proc., Plasma Processing*, **51-1**, 227-234 (1985).

Capítulo 2

Caracterización de un plasma de argón producido mediante un sistema surfatrón

2.1 Objetivo

En este capítulo nos proponemos caracterizar un plasma de argón mantenido por una onda de superficie a baja presión en un tubo largo. En este caso nos encontramos con una cinética gobernada principalmente por colisiones entre electrones y partículas pesadas, como corresponde a una situación de baja presión, y resulta necesario conocer las propiedades electrónicas del plasma para comprender los mecanismos más importantes y su cinética.

Al abordar esta descripción nos vamos a encontrar que el plasma se encuentra en una situación alejada del equilibrio termodinámico, por lo que resulta necesario desarrollar un modelo que reproduzca el comportamiento del plasma en estas condiciones. Por otra parte, la densidad electrónica es lo suficientemente alta como para poder describir la interacción electrones-átomos pesados mediante un régimen de excitación-saturación-balance (ESB). Mediante esta suposición, que se verá corroborada por los resultados, se ha obtenido la temperatura electrónica para diferentes presiones a lo largo de la columna de plasma, a través del conocimiento experimental de las intensidades de las líneas de emisión del plasma.

2.2 Introducción

En una descripción completa de una descarga de AF a baja presión, todas las cantidades que caracterizan el plasma están ligadas entre sí: intensidad del campo eléctrico local, densidad electrónica, densidad de estados excitados, energía cinética electrónica, etc... En esta descripción, la importancia de caracterizar

adecuadamente la población electrónica es fundamental debido a que, normalmente, es la especie que absorbe casi toda la potencia incidente de la onda, y que después transmite al resto del plasma. Así mismo, los estados excitados juegan también un papel importante, no sólo porque sean responsables de un determinado proceso colisional, sino porque también emiten la radiación que escapa del plasma, fácilmente medible en un laboratorio.

La importancia de caracterizar correctamente los estados excitados es clara, y normalmente se intentan conocer propiedades electrónicas a partir de las intensidades de las líneas de emisión de diferentes caídas radiativas.¹ Así mismo, dependiendo de las condiciones de la descarga, la interacción electrón-estados excitados va a ser diferente; en determinados casos, el mecanismo fundamental de ionización será el llamado de "ionización directa", donde se crea un electrón desde un nivel excitado mediante una colisión electrónica, mientras que en otros casos, el mecanismo de ionización consiste en un proceso de excitaciones individuales a lo largo del espectro energético atómico, que implica varias colisiones electrónicas. A este último mecanismo de excitación se le conoce con el nombre de mecanismo de excitación "en escalera".

En particular, sería deseable que se cumpliesen las relaciones típicas del equilibrio, por lo que los estados excitados cumplirían la relación de Boltzmann

$$\frac{n(p)}{n(1)} = \frac{g_p}{g_1} e^{-\varepsilon_{1p}/k_B T},$$

donde $n(p)$ representa la población del estado caracterizado por el número cuántico principal p , g_p la degeneración cuántica del nivel, ε_{1p} la energía del nivel respecto al nivel fundamental, k_B la constante de Boltzmann, y T la temperatura del sistema. La figura 2.1 muestra las poblaciones de los estados excitados del átomo de argón en un plasma de estas características obtenidas en un sistema SLAN que se comentará en el capítulo 3.

La figura 2.1 muestra que el sistema se encuentra claramente fuera del equilibrio termodinámico, ya que se aleja bastante de la relación lineal que predeciría la relación de Boltzmann. Por lo tanto, para abordar la descripción en estas situaciones se necesitan abandonar las relaciones típicas del equilibrio y abordar la problemática mediante la elaboración de modelos cinéticos.

2.3 Modelo

El gas argón es muy utilizado en gran cantidad de aplicaciones tecnológicas a baja presión, y es por ello que se han desarrollado muchos modelos teóricos intentando describir su cinética en diferentes situaciones y configuraciones. Dentro de esta descripción, no sólo es importante determinar los mecanismos de excitación e

¹junto con las técnicas asociadas a sondas de Langmuir.

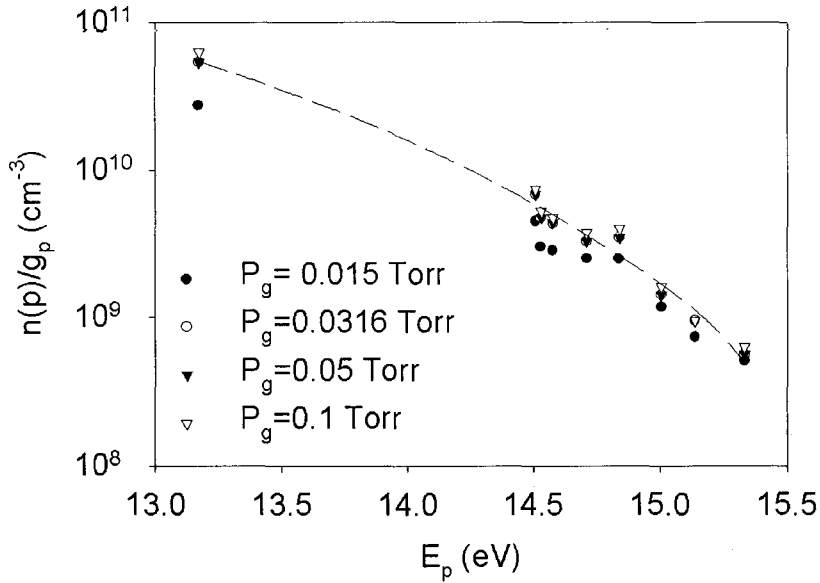


Figura 2.1: Comportamiento típico de los estados excitados del argón a diferentes presiones.

ionización, sino identificar correctamente la dependencia de la FDDE con las diferentes cantidades características del plasma, como el campo eléctrico local, frecuencia de la onda, densidad electrónica, etc... ya que el carácter maxwelliano se ha perdido en general. En la figura 2.2 aparece un esquema de los estados excitados del argón.

2.3.1 Ecuación de Saha para un sistema de dos temperaturas

Una forma sencilla de abordar la descripción del plasma, cuando la diferencia de energías cinéticas entre neutros y electrones es grande, es suponer que está compuesto por dos subsistemas en equilibrio pero a diferentes temperaturas. Así, se introduce una temperatura para las partículas pesadas, T_g , y otra para los electrones, T_e . Esta ruptura del plasma en dos subsistemas hace que se tengan que reformular todas las relaciones típicas del equilibrio, y especialmente la ecuación de Saha, que describe un equilibrio de ionización-recombinación entre los electrones y partículas neutras. En este caso, si consideramos la reacción $X^+ + e + e \leftrightarrow X_p + e$ (siendo p el numero cuántico principal efectivo), la condición de equilibrio químico lleva a la ecuación $\sum_i \nu_i \mu_i = 0$, donde ν_i es el coeficiente estequiométrico de la especie i y μ_i su potencial químico. Así se obtiene una ecuación que depende de ambas temperaturas. Sin embargo, esta manera

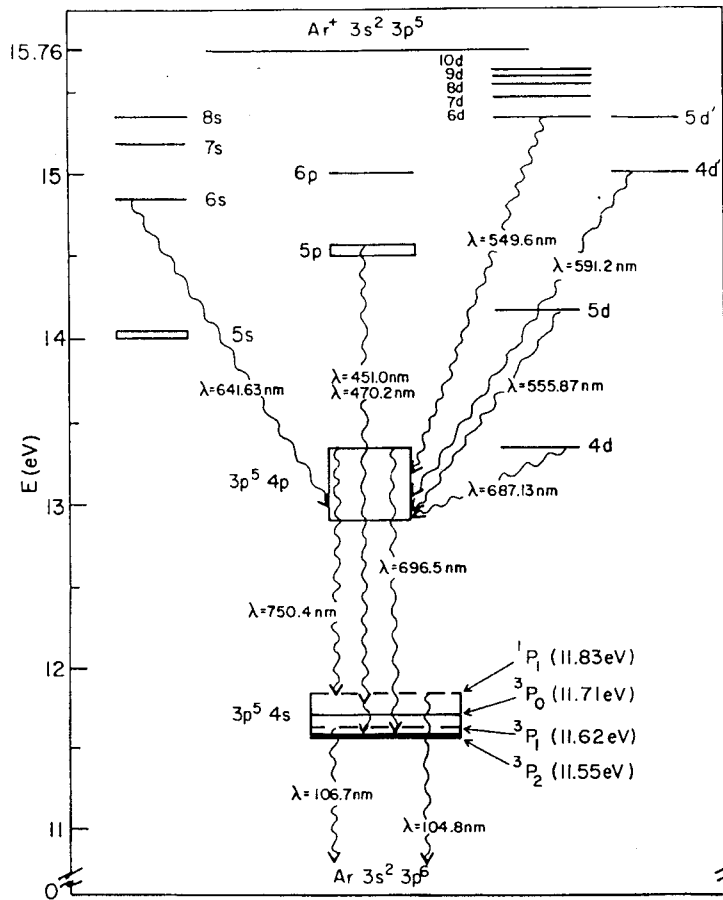


Figura 2.2: Niveles energéticos del átomo de argón.

de calcular la ecuación de Saha tiene varios problemas asociados a la condición de equilibrio químico: Richley y Tuma [1], desde un punto puramente cinético, mostraron que la definición usual de energía libre para sistemas en equilibrio no resultaba adecuada para describir un sistema de dos temperaturas. Esta tesis se vio corroborada algunos años después por Van der Sanden et al. que dedujeron una nueva expresión a partir de principios termodinámicos [2]. Esta descripción partía de la condición de máximo de entropía del sistema

$$dS = \sum_n dS_n \geq \sum_n \frac{\delta Q_n}{T_n}, \quad (2.1)$$

donde n denota a los subsistemas con diferentes temperaturas, y del primer principio de la termodinámica para cada subsistema $\delta Q_n = dU_n + \delta W_n = dU_n + p_n dV$. Así se obtiene

$$dS \geq \sum_n \left(\frac{dU_n}{T_n} + \frac{p_n dV}{T_n} \right),$$

y a T_n y V constante

$$(dF)_{T_n, V} \leq 0,$$

con $F = \sum_n \left(\frac{U_n}{T_n} - S_n \right)$, energía libre generalizada. El problema que plantea la definición más usual

$$(dF)_{T_n, V} \equiv \left(\sum_n dF_n \right)_{T_n, V} \leq 0$$

con $F_n = U_n - T_n S_n$, es que proviene de suponer la relación

$$\sum_n T_n dS_n \geq \sum_n \delta Q_n, \quad (2.2)$$

que está en clara contradicción con la ec. (2.1) para sistemas con varias temperaturas.

La definición de la energía libre generalizada $F = \sum_n \left(\frac{U_n}{T_n} - S_n \right)$ ha sido aceptada mayoritariamente para describir sistemas formados por otros a diferentes temperaturas. Ésto es debido a que la ec. (2.2) lleva a resultados sin sentido en estos casos. Por ejemplo, en el caso de dos subsistemas térmicamente aislados entre ellos, y con el exterior, a temperaturas T_1 y T_2 : a partir de la ec. (2.2) y la condición $S = S_1 + S_2$ se puede obtener $dS \geq \left(\frac{T_1 - T_2}{T_1} \right) dS_2$, y si $T_1 - T_2$ tiene signo contrario a dS_2 se tiene que la entropía del sistema total puede decrecer,

violando la condición $dS_1 \geq 0$ y $dS_2 \geq 0$. Por otra parte, la definición generalizada lleva directamente a la relación $dS \geq 0$, condición necesaria para una descripción correcta. Esta formulación generalizada fue aceptada desde entonces en la bibliografía [3, 4].

La nueva definición de energía libre proporciona una nueva condición de equilibrio químico $\sum_i \nu_i \mu_i / T_i = 0$ [5], y la ecuación de Saha para un plasma de dos temperaturas queda

$$\frac{n_e n_+}{n^s(p)} = \frac{g_e g_+}{g_p} \left[\frac{2\pi m_e k_B T_e}{h^2} \right]^{3/2} e^{-\frac{E_{p\lambda}}{k_B T_e}}, \quad (2.3)$$

donde g_e , g_+ y g_p son los pesos estadísticos de cada estado, y $E_{p\lambda}$ la energía de ionización desde el estado excitado. Un resultado importante en dicha ecuación es que la temperatura del gas no aparece en ella, y se puede desarrollar un método experimental para conocer T_e sin tener en cuenta la temperatura del gas.

La ecuación de Saha es de gran ayuda para comprender la relación entre densidad electrónica-energía electrónica-estados excitados, aunque, en condiciones generales, su validez es muy limitada ya que en los plasma de baja presión rara vez se llega a un equilibrio de ionización-recombinación. Por lo tanto, se ha de abandonar el uso de la ec. (2.3), y abordar la descripción mediante un estudio cinético del problema, y que permita introducir correcciones a dicha ecuación.

2.3.2 Modificación a la ecuación de Saha mediante un modelo cinético

Los modelos que describen las propiedades de un plasma de argón han sido estudiados en profundidad a lo largo de las últimas décadas, especialmente los producidos y mantenidos por la propagación de una OS en un tubo largo cilíndrico. En este caso, la densidad electrónica depende de muchos factores, como el radio del cilindro, potencia incidente de la onda, frecuencia, etc... estando el grado de ionización en estos dispositivos alrededor de 10^{-4} (referencia [6] y las incluidas en esta sección). Estos modelos tienen en cuenta la cinética del plasma y la propagación de la onda de superficie a lo largo de la columna. También incluyen la ecuación de transporte de Boltzmann, en la aproximación de dos términos, para calcular la FDDE, así como un balance de energía entre las partículas cargadas y las neutras. Las soluciones a estos modelos muestran que las cantidades más relevantes a la hora de describir la descarga² presentan una dependencia axial a lo largo de la columna [7].

A la hora de plantear un modelo de plasma, es necesario realizar una descripción detallada de los estados excitados para conocer la influencia de las temperaturas electrónica y del gas en sus propiedades. De hecho, la energía traslacional

²densidad electrónica, potencia absorbida por electrón, temperatura electrónica, etc...

de los átomos excitados está relacionada con la temperatura del gas, T_g , mientras que la población electrónica acotada en los estados excitados, al intercambiar energía constantemente con la población electrónica libre, contiene información sobre la temperatura electrónica, T_e . Por lo tanto, es posible desarrollar una técnica que, a partir de datos experimentales fáciles de medir sobre las poblaciones de los estados radiativos del plasma, permitan conocer propiedades electrónicas.

En un equilibrio ionización-recombinación sin transporte, la temperatura electrónica se puede evaluar mediante la ec. (2.3). Así, Van der Sijde y Van der Mullen propusieron un método para obtener la temperatura electrónica mediante un modelo maxwelliano que modificaba dicha ecuación [8], ampliando su rango de validez.

De esta manera, se introdujo un factor de corrección, $b(p)$, que marca la desviación de las poblaciones reales del plasma de las que se obtendrían en equilibrio [7]

$$n(p) = b(p)n^s(p),$$

donde $n^s(p)$ es la población que predeciría la ecuación de Saha, y que correspondería a una situación de equilibrio. Para obtener el valor de esta cantidad, $b(p)$, en cada caso, se requiere realizar un modelo de la descarga y relacionarlo con la cinética del plasma. En una situación ESB se ha demostrado, mediante una descripción maxwelliana de los electrones libres, que dicho factor tiene la forma [9]

$$b(p) \simeq b_0 p^{-m} + 1, \quad (2.4)$$

donde, b_0 es una constante y m un valor entre 5 y 6. Utilizando la relación de Boltzmann para descripciones en equilibrio

$$\frac{n^s(p)}{n_t} = \frac{n(p)}{b(p)n_t} = \frac{g_p \exp(-E_p/k_B T_e)}{Z(T_e)},$$

y la intensidad de radiación de una línea emitida desde el nivel p a otro q

$$I_{pq} = \frac{n(p)A_{pq}hc}{\lambda_{pq}4\pi},$$

donde n_t es la densidad total, $Z(T_e)$ la función de partición, E_p la energía del nivel p , g_p su peso estadístico, I_{pq} la intensidad medible de la línea de emisión por unidad de ángulo sólido para el decaimiento radiativo de un estado p a otro q , A_{pq} el coeficiente de Einstein para la transición, y hc/λ_{pq} la energía involucrada, se puede obtener

$$\ln \left(\frac{I_{pq}\lambda_{pq}}{A_{pq}g_p b(p)} \right) = \ln \left(\frac{n_t hc}{4\pi Z(T_e)} \right) - \frac{E_p}{k_B T_e}, \quad (2.5)$$

de tal manera que un diagrama Boltzmann de $\ln(I_{pq}\lambda_{pq}/A_{pq}g_p b(p))$ frente a la energía de excitación, E_p , permitiría saber el valor deseado de la temperatura.

2.4 Discusión y resultados

Hemos representado en la figura 2.3 el valor obtenido de la temperatura electrónica experimental en un cilindro de 4.5 mm de radio, obtenida a partir de las intensidades de líneas correspondientes a caídas radiativas en el plasma, suponiendo un factor de corrección a la ecuación de Saha dado por la ec. (2.4) [10]. En todos los casos, los valores obtenidos de m corroboran una situación ESB para el plasma, y parece que la suposición de temperatura electrónica constante a lo largo de la columna es adecuada en estas condiciones.

Aunque los valores obtenidos de T_e están, en general, de acuerdo con otras medidas en las mismas condiciones experimentales [11], el método empleado, basado en la caracterización de los estados excitados del plasma y en la introducción de un factor de corrección en la ecuación de Saha, necesita varias condiciones cuya validez se necesita probar.

En primer lugar, el orden de magnitud típico de la densidad electrónica a la presión correspondiente está de acuerdo con los resultados de otros trabajos [12]. Hace algunos años, Fujimoto probó que los mecanismos más importantes a la hora de describir la cinética de los estados excitados son los típicos de un balance corona si la densidad electrónica estaba por debajo de 10^{11} cm^{-3} [7]. Para densidades entre 10^{11} y 10^{15} cm^{-3} se mostró que el sistema permanecía en un balance de cuasi-saturación, donde los estados excitados cobraban un papel importante en la ionización, mientras que, para densidades electrónicas superiores a 10^{15} cm^{-3} , el sistema estaba en una fase de saturación completa, dominado por mecanismos "en escalera".³

Estos límites son importantes ya que los parámetros externos, como el radio del tubo, presión del gas, potencia incidente de la onda, etc... pueden alterar significativamente el valor de la densidad electrónica, y por lo tanto, los mecanismos de excitación. En este trabajo hemos encontrado un régimen ESB, coherente con las densidades típicas que se pueden encontrar en este dispositivo ($10^{11} - 10^{13} \text{ cm}^{-3}$).

El principal problema al aceptar este método de cálculo de la temperatura electrónica reside en suponer que la FDDE es maxwelliana a la hora de deducir el término de corrección a la ecuación de Saha, ya que sería necesario resolver la ecuación de transporte de Boltzmann en la aproximación de los dos términos en cada caso [13, 14, 15, 16, 11]. Por simplicidad, sería conveniente que la cinética electrónica se pudiese describir mediante funciones de distribución maxwellianas, aunque, estrictamente hablando, dicho perfil no se alcanza nunca en general [17]. De cualquier forma, se ha demostrado que, en algunas situaciones, el perfil maxwelliano se aproxima muchísimo al perfil predicho por la ecuación de Boltzmann, especialmente para valores altos de la densidad electrónica [14].

³ver gráficas 3.2 y 3.3 más adelante.

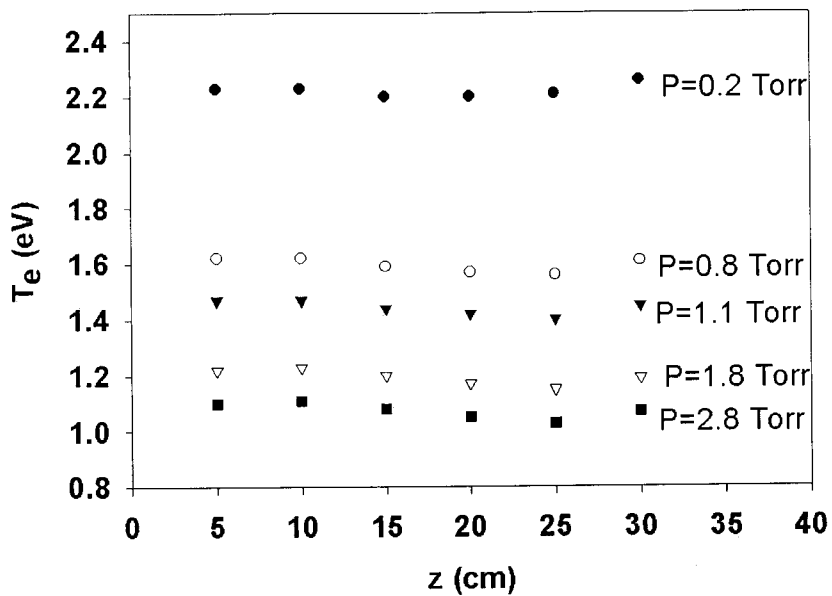
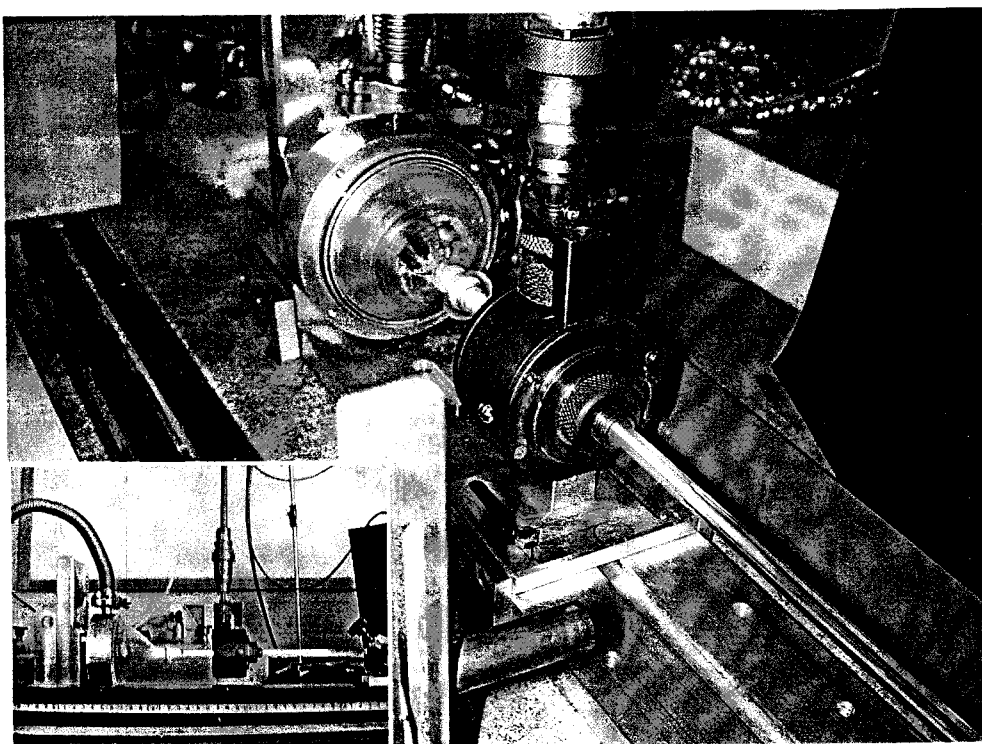


Figura 2.3: Resultados obtenidos del valor de la temperatura electrónica a diferentes presiones.



Sistema empleado para generar el plasma mediante un surfatrón en tubo largo. Este dispositivo es muy similar al utilizado en esta sección.

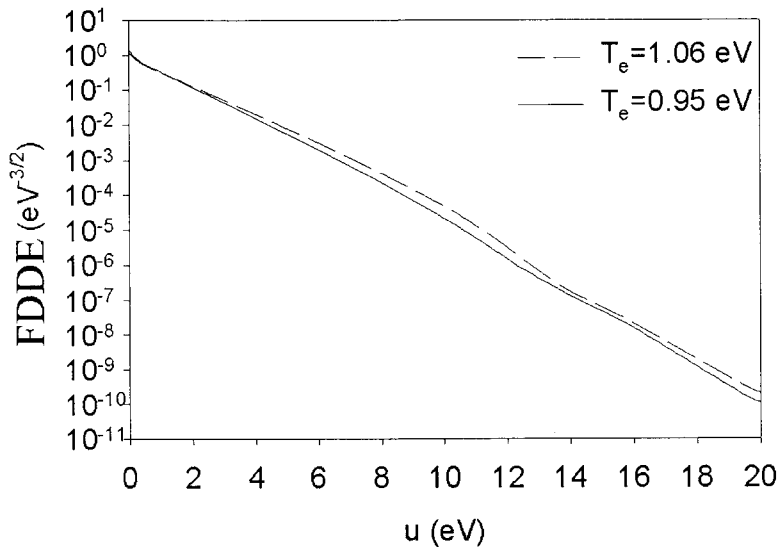


Figura 2.4: Función de distribución electrónica, calculada según la ecuación de Boltzmann, en condiciones típicas a una presión de 2.8 Torr.

Hemos resuelto la ecuación de Boltzmann en algunos casos típicos de intensidad de campo eléctrico local, densidad electrónica y temperatura en este tipo de plasmas a varias presiones utilizando el programa ELENDIF [18]. Este código puede tratar procesos inelásticos y superelásticos, interacciones electrón-electrón y electrón-ion, procesos fotón-electrón, de captura y de recombinación, de ionización e incluso incluyendo una fuente externa de electrones. Este código también calcula la energía media electrónica, la velocidad de deriva, coeficiente de difusión, frecuencias de procesos y flujos de energía.

En la figura 2.4 se han representado algunas FDDEs típicas a la presión de 2.8 Torr, en función de la energía cinética electrónica $u = mv^2/2$. Los parámetros de entrada en esta presión fueron $T_g \simeq 300$ K, $n_e \simeq 10^{12}$ cm $^{-3}$ y una población relativa de metaestables de $n_m/n_1 \simeq 10^{-5}$. Los valores de E/N (cociente entre el campo efectivo local y el número total de partículas) fueron elegidos con la condición de que se obtuviesen temperaturas electrónicas cercanas al valor medido: $E/N(T_e = 1.06$ eV) = 0.25 Td y $E/N(T_e = 0.95$ eV) = 0.1 Td. En estos casos se puede constatar cómo la aproximación maxwelliana se puede utilizar para describir las propiedades electrónicas. Esta situación se ha comprobado válida para los casos de 1.8 y 2.8 Torr, mientras que los casos de 0.8 y 1.1 Torr están en el límite de validez de la aproximación maxwelliana, por lo que deberían ser valores cercanos a los reales. En el caso de 0.2 Torr la aproximación maxwelliana no resulta válida en ningún caso.

En la figura 2.5 se ha representado la FDDE a una presión de 0.2 Torr. Los

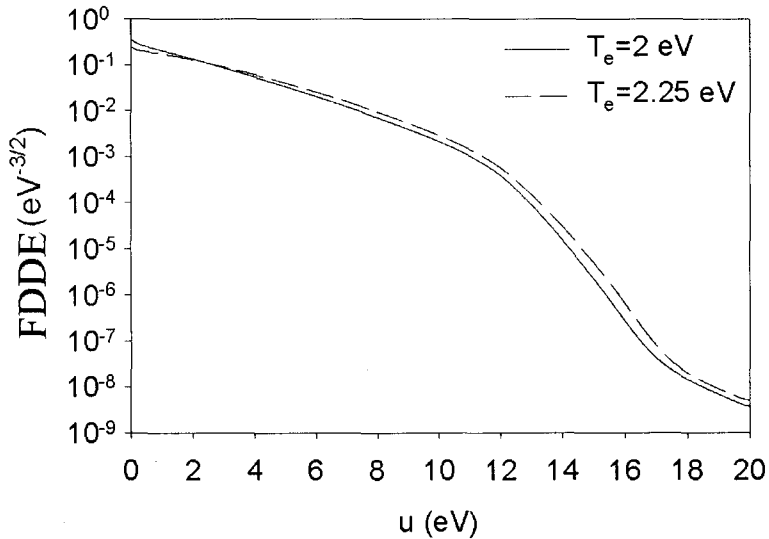


Figura 2.5: Función de distribución electrónica, calculada según la ecuación de Boltzmann, en condiciones típicas a una presión de 0.2 Torr.

parámetros de entrada fueron $T_g \simeq 300$ K, $n_e \simeq 10^{11}$ cm $^{-3}$, $n_m/n_1 \simeq 10^{-5}$. Los valores de E/N fueron $E/N(T_e = 2$ eV) = 2.5 Td y $E/N(T_e = 2.25$ eV) = 5 Td. En este caso, la aproximación maxwelliana no resulta apropiada, y por lo tanto, se necesita utilizar la solución de la ecuación de Boltzmann para esta presión.

Así, se puede asegurar que los valores de la temperatura electrónica obtenidos en este trabajo son una buena estimación del valor real, en los casos de 1.8 y 2.8 Torr, mientras que en los casos de 0.8 y 1.1 Torr, al estar al límite de la aproximación maxwelliana, representan un valor estimativo.

Por otra parte, aunque la incertidumbre experimental no permite determinar la temperatura electrónica axialmente con precisión, parece que existe una pequeña variación a lo largo de la columna de plasma. Este resultado ha sido obtenido utilizando técnicas de sondas de Langmuir en condiciones experimentales similares [19]. En dicho trabajo, la función de distribución se midió a lo largo de la columna de plasma, obteniéndose perfiles cuasi-maxwellianos, y se puso de manifiesto una pequeña variación axial de la temperatura electrónica. Por otra parte, han aparecido diferentes trabajos teóricos que han abordado el problema de la dependencia axial de la temperatura electrónica, y todo parece indicar que los mecanismos de excitación en escalera son los responsables de dicho comportamiento [20, 21].

La ventaja de utilizar el presente método para calcular la temperatura electrónica es, en primer lugar, la posibilidad de evitar el conocimiento de la temperatura del gas en los cálculos, cuyo valor cambia significativamente a lo largo de la columna de plasma [22], y en segundo lugar el uso de una técnica no intrusiva

en el plasma. De cualquier manera, la suposición de una temperatura electrónica constante a lo largo de la columna de plasma parece válida en este rango de presiones [23, 24].

Bibliografía

- [1] E. Richley and D.T. Tuma, *J. Appl. Phys.* **53**, 8537 (1982)
- [2] M.C.M van der Sanden, P.P.J.M. Schram, A.G. Peeters, J.A.M. van der Mullen, and G.M.W. Kroesen, *Phys. Rev. A* **40**, 5273 (1989)
- [3] Y. Tanaka, Y. Yokomizu, M. Ishikawa and T. Matsumura, *IEEE Trans Plasma Sci.* **25**, 991 (1997)
- [4] P. Han, X. Chen and H. P. Li, *Chinese Phys. Lett.* **16**, 193 (1999)
- [5] A. Gleizes, B. Chervy and J.J. González, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **32**, 2060 (1999)
- [6] E. Benova, Ts. Petrova, A. Blagoev and I. Zhelyazkov *J. Appl. Phys.* **84** 147 (1998)
- [7] E. Tatarova, F.M. Dias, C. M. Ferreira and A. Ricard, *J. Appl. Phys.* **85** 49 (1999)
- [8] B. van der Sijde and J.A.M. van der Mullen, *J. Quant. Radiat. Transfer* **44**, 39 (1990)
- [9] J.A.M. Van der Mullen, *Phys. Rep.* **191**, 109 (1990)
- [10] C. Lao, J. Cotrino, A. Palmero y A.R. González-Elipe, *Eur. Phys. J. D* **14**, 361-366 (2001)
- [11] U. Kortshagen, A. Shivarova, E. Tatarova and D. Zamfirov, *J. Phys. D: Appl Phys.* **27**, 301 (1994)
- [12] A. Gamero, J. Cotrino, A. Sola and V. Colomer, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **21**, 1275 (1988)
- [13] U. Kortshagen, H. Schlüter and A Shivarova, *J. Phys. D: Appl Phys.* **24**, 1571 (1991)
- [14] C. M. Ferreira and J Loureiro, *J. Phys. D: Appl Phys.* **17**, 1175 (1984)

- [15] U. Kortshagen and H. Schlüter, *J. Phys. D: Appl Phys.* **25**, 644 (1992)
- [16] P.A. Sá, J. Loureiro and C.M. Ferreira, *J. Phys. D: Appl Phys.* **25**, 960 (1992)
- [17] U. Kortshagen, *J. Phys. D: Appl Phys.* **26**, 1230 (1993)
- [18] ELENDF77, CPC Program Library, <http://www.cpc.cs.qmb.ac.uk>.
- [19] S. Grosse, H. Schlüter and E. Tatarova, *Phys. Scripta*, **50** (1994)
- [20] J. Cotrino and F.J. Gordillo-Vázquez, *J. Phys. D: Appl Phys.* **28**, 1888 (1995)
- [21] E. Benova, Ts. Petrova, A. Blagoev and I. Zhelyazkov, *J. Appl. Phys. Appl Phys.* **84**, 147 (1998)
- [22] A. Palmero, J. Cotrino, A. Barranco and A. G. Rodriguez-Elipe, *Phys. of Plasmas* **9**, 358-363 (2002)
- [23] V.M.M. Glaude, M. Moisan, R. Pantel, P. Leprince, and J. Marec, *J. Appl. Phys.* **51**, 5693 (1980)
- [24] I. Zhelyazkov and V. Atanassov, *Phys. Rep.* **25**, 79 (1995)

Capítulo 3

Caracterización de un plasma de argón producido mediante un sistema SLAN

3.1 Objetivo

En el capítulo anterior hemos obtenido la temperatura electrónica en un plasma producido en un volumen pequeño mediante una ecuación de Saha modificada de acuerdo con una situación de ESB. El problema de la caracterización de un plasma producido en un volumen grande es completamente diferente ya que, en este caso, las densidades electrónicas típicas que se encuentran no son lo suficientemente altas como para imponer una situación ESB, obteniéndose que el sistema se ajusta mejor a una cinética gobernada mediante un régimen corona.

De esta manera, la relación entre los estados excitados del plasma y las propiedades electrónicas es muy diferente a la obtenida en el capítulo anterior. En este capítulo vamos a desarrollar un modelo corona de la descarga y lo aplicaremos para obtener la temperatura electrónica a partir de las intensidades de las líneas correspondientes a las caídas radiativas de los estados excitados del argón. Así mismo se comprobará que los resultados obtenidos ajustan al modelo teórico de Uhm y Choi.

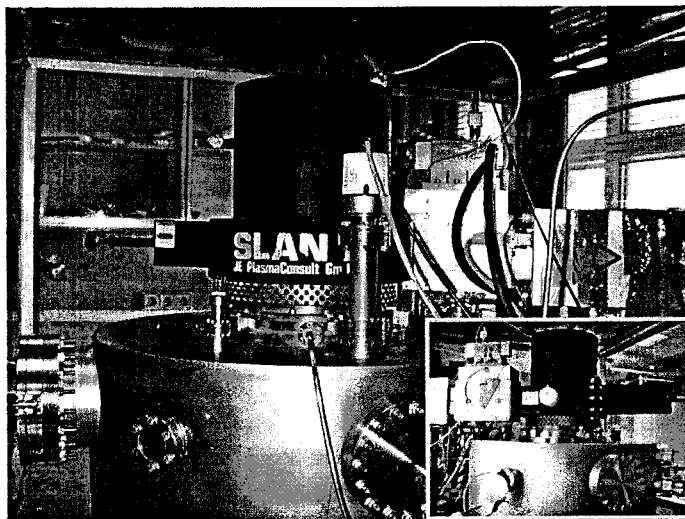
3.2 Introducción

Dentro de los plasmas generados a alta frecuencia, los dispositivos diseñados para producir grandes volúmenes se presentan como los más prometedores a la hora de encontrar aplicaciones tecnológicas e industriales. Las primeras aplicaciones surgieron en los años 70 (ver por ejemplo [1, 2]), y aún hoy se están diseñando nuevos prototipos basados en esta tecnología. Recientemente se ha desarrollado un dispositivo denominado SLAN que permite la generación de descargas en un

gran volumen con una frecuencia de microondas de 2.45 GHz¹ [3]. Debido a que su estructura está basada en una guía de ondas, el SLAN no muestra dependencia con el radio de la descarga (como en el caso de los anillos de Lisitano [4]). La combinación de esta propiedad junto a las características de la propagación de una OS, convierte este dispositivo en un buen candidato para diferentes aplicaciones.

El principio de calentamiento del plasma mediante ECR ha demostrado ser un método muy eficiente para ampliar el rango operativo hacia la zona de bajas presiones, llegando incluso a permitir trabajar a 10^{-5} Torr, y así mismo, seguir produciendo gran cantidad de electrones [5]. El campo magnético en la versión ECR del SLAN se produce por imanes de *SmCo*, colocados entre el generador de microondas y una campana de cuarzo para favorecer una estructura más compacta [6].

El potencial de las aplicaciones de las fuentes ECR de plasma han generado gran interés experimental para determinar cómo afectan los parámetros externos a las poblaciones de las diferentes especies excitadas. Para comprender dichos mecanismos resulta necesario conocer la energía media electrónica (temperatura de los electrones, T_e) y la densidad electrónica, n_e . Ambos parámetros han sido medidos anteriormente, ya sea radialmente o en el "afterglow", en una situación similar a la producida en el SLAN mediante técnicas de sonda [6]. Aquí presentamos un método diferente para la determinación de la temperatura electrónica, T_e , basado en la espectroscopía de emisión óptica y en un modelo colisional-radiativo para un gas de argón.



Sistema SLAN-ECR utilizado para generar el plasma que se va a estudiar en esta sección.

¹actualmente se está utilizando para la deposición de láminas finas de SiO_2 en el Instituto de Ciencias de los Materiales de Sevilla.

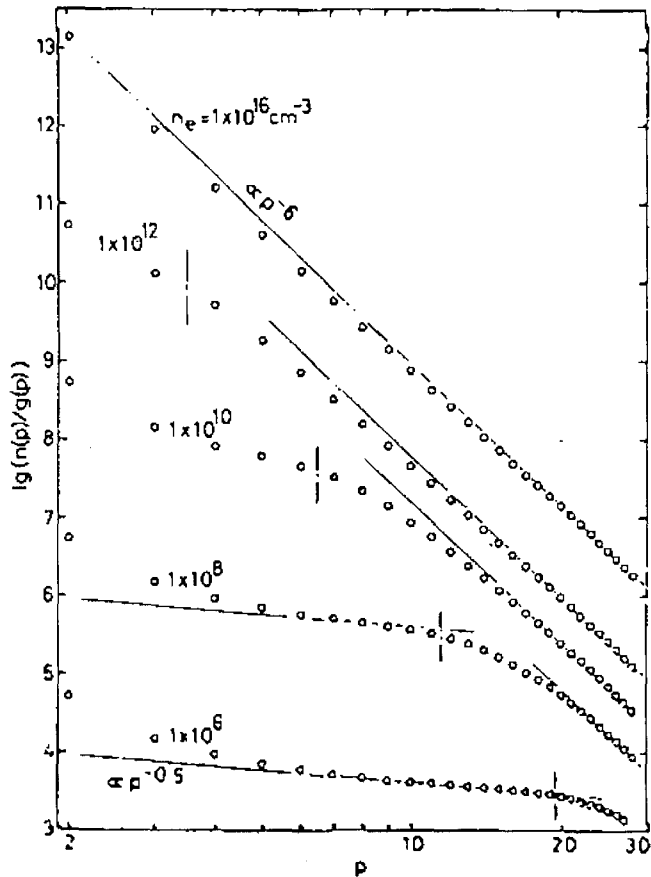


Figura 3.1: Resultados del cálculo de Fujimoto [7]. La línea vertical en la gráfica separa los niveles en balance corona y los que se encuentran en una situación de quasi-excitación-saturación-balance.

3.3 Modelo

Como corresponde a una situación de baja presión, el plasma producido en la descarga es no térmico y la población de estados excitados no está de acuerdo con la relación de Boltzmann. La demostración práctica de que el sistema se encuentra alejado del equilibrio se muestra al representar $\ln n(p)/g_p$ frente a ϵ_p y no obteniendo una dependencia lineal como resultado (figura 2.1). En nuestro caso se obtiene un comportamiento característico en este tipo de plasmas: al tener una población electrónica muy superior a la de equilibrio, las poblaciones de los estados excitados se van a modificar drásticamente, disminuyendo la de los estados más bajos, y aumentando la de los más altos.

De esta manera, al no disponer de relaciones de equilibrio, resulta necesario emplear modelos colisionales-radiativos para relacionar la temperatura electróni-

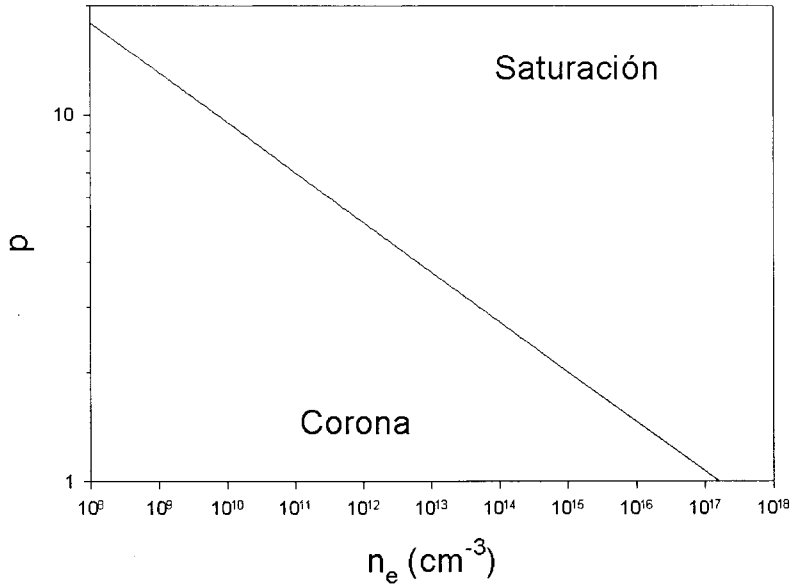


Figura 3.2: Resultado del modelo de Fujimoto [7]. Para diferentes densidades electrónicas, la cinética de los estados excitados está dominada por diferentes regímenes.

ca con las poblaciones de los estados excitados. En el rango de presiones de trabajo de este dispositivo, el orden de magnitud de la densidad electrónica está por debajo de 10^{12} cm^{-3} [6], y se ha demostrado que, para esos órdenes de magnitud, los estados excitados inferiores ($p \leq 7$) se encuentran en un balance corona, mientras que los superiores se encuentran en un régimen ESB (figuras 3.2 y 3.3) [7].

En nuestro caso, hemos medidos los niveles excitados $6S$, $6D$, $5P$, $5D$, $4D$ por lo que la caracterización de estos niveles vendrá determinada por un balance corona, en el que los mecanismos de población sean por colisiones electrónicas desde el nivel fundamental, y se despueblen mediante caídas radiativas a niveles inferiores. Así, para cada nivel se cumplirá la relación

$$c_{1p}n_en(1) - \sum_{l < p} A_{pl}n(p) = 0, \quad (3.1)$$

donde n_e es la densidad electrónica, c_{1p} el coeficiente cinético de excitación por impacto electrónico desde el nivel fundamental, y A_{pl} el coeficiente de caída radiativa del nivel p al l . De esta manera, el cálculo de la población de cualquier nivel excitado se puede desacoplar de la de otro nivel si se conoce la población del nivel fundamental y la de los electrones.

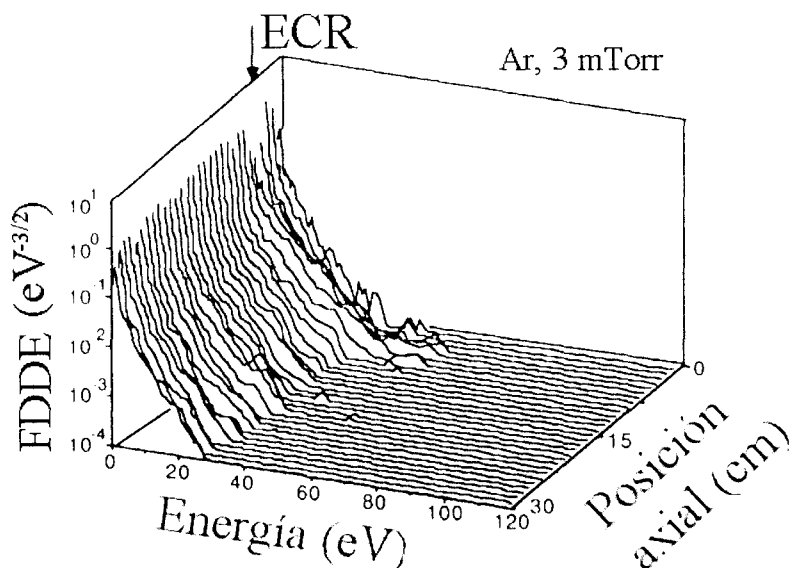


Figura 3.3: FDDE obtenidas en un sistema SLAN en condiciones típicas. Como se puede apreciar, en la zona alejada del sistema ECR se puede aceptar una descripción maxwelliana.

Por otra parte, medidas experimentales obtenidas de la FDDE indican un comportamiento maxwelliano en la zona del plasma más alejada del sistema ECR (figura 3.4). Estas medidas se realizaron mediante sondas de Langmuir, y es un resultado muy típico en este tipo de plasma. De esta manera, por simplicidad, las FDDEs del modelo corona se han descrito mediante funciones de distribución maxwellianas.

Las características de una situación corona permiten estudiar la descarga en dos partes diferenciadas. En la primera se intenta conocer la población electrónica en función de la presión del gas y de la temperatura electrónica, mientras que en la segunda, a partir de los resultados de la primera, se construye un modelo para cada estado excitado. Como resultado se obtiene un relación entre la densidad de los estados excitados, la presión del gas y la temperatura electrónica.

El cálculo de la población electrónica se puede abordar mediante un modelo simple de tres niveles (TLM) para un plasma de argón que ya ha sido utilizado anteriormente por otros autores [8, 9]. En él, sólo se tenía en cuenta el nivel fundamental (Ar), un nivel efectivo formado por los cuatro estados excitados $4S$ (radiativos y metaestables) ($Ar(4S)$), electrones (e) e iones (Ar^+). Para este estudio también se ha incluido la posibilidad de que existan iones moleculares de argón (Ar_2^+) en el plasma.

Los desarrollos numéricos del TLM representan uno de los tratamientos más simples de la descarga en estas condiciones, y resulta válido en situaciones donde

se puede obviar la cinética de los estados excitados en los mecanismos de ionización y recombinación. Así, además del nivel fundamental y el nivel no ligado, se incluye un nivel efectivo 4S como "test" de validez de dicho modelo. Así, si dicho nivel efectivo tiene una especial importancia en los resultados del modelo, significaría que la descripción es incompleta, y sería necesario recurrir a modelos más complejos para determinar las propiedades de la descarga. Los procesos considerados en el TLM vienen en la siguiente tabla:

c_{12}	$Ar + e \rightarrow Ar(4S) + e$
c_{21}	$Ar(4S) + e \rightarrow Ar + e$
c_{13}	$Ar + e \rightarrow Ar^+ + e + e$
c_{23}	$Ar(4S) + e \rightarrow Ar^+ + e + e$
A_{21}^{ef}	$Ar(4S) \rightarrow Ar + h\nu$
k	$Ar^+ + Ar + Ar \rightarrow Ar_2^+ + Ar$
α_d	$Ar_2^+ + e \rightarrow Ar(4S) + Ar$
D_a	difusión de e y Ar^+ .

Los coeficientes cinéticos de cada proceso se calculan mediante la expresión

$$c_{ij} = \sqrt{\frac{2}{m_e}} \int_{\Delta\varepsilon_{ij}}^{\infty} du f(u) u q_{ij}(u), \quad (3.2)$$

donde $q_{ij}(u)$ es la sección eficaz del proceso que involucra los niveles i y j , y $\Delta\varepsilon_{ij}$ es la energía umbral de dicho proceso. El transporte radiativo se ha simplificado utilizando el concepto de factor de escape calculado como

$$\Lambda = \Lambda_d e^{-\frac{\Lambda_{cd}}{\Lambda_d}} + \Lambda_c \operatorname{erf}\left(\frac{\Lambda_{cd}}{\Lambda_c}\right), \quad (3.3)$$

donde Λ_d y Λ_c son, respectivamente, los factores de escape de radiación Doppler y colisional puros y Λ_{cd} es el factor de escape de ambos efectos combinados. Así, el coeficiente efectivo de decaimiento radiativo desde el nivel 4S vendrá dado por $A_{21}^{ef} = \Lambda_{21} A_{21}$, donde A_{21} es el coeficiente de Einstein para la emisión espontánea de radiación, y los subíndices 1 y 2 se refieren al nivel fundamental y al grupo de niveles 4S respectivamente. Sabiendo que la densidad de neutros viene dada por

$$n(1) = \frac{P_g}{k_B T_g},$$

donde P_g y T_g son la presión y temperatura del gas, respectivamente, se puede obtener la densidad electrónica resolviendo la ecuación cuadrática

$$an_e^2 + bn_e + c = 0$$

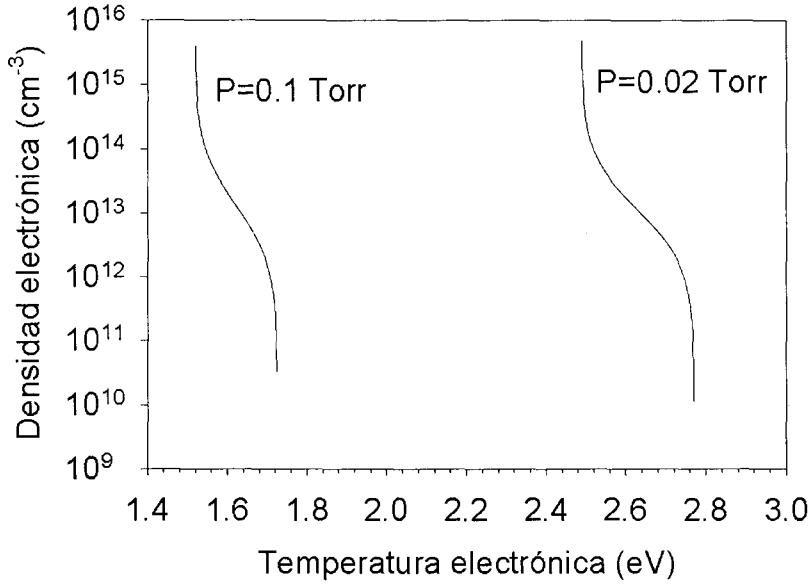


Figura 3.4: Resultados típicos del modelo de 3 niveles.

donde los diferentes coeficientes vienen dados por

$$a = c_{23}c_{12}n_1\alpha_d - \alpha_d(c_{21} + c_{23})(D_a - c_{13}n_1) - c_{21}\alpha_d n_1^2 k,$$

$$b = c_{23}c_{12}n_1^3 k - (c_{21} + c_{23})n_1^2(D_a - c_{13}n_1) - A_{21}^{ef}(D_a - c_{13}n_1)\alpha_d - A_{21}^{ef}\alpha_d n_1^2 k, \quad (3.4)$$

$$c = -A_{21}^{ef}(D_a - c_{13}n_1)n_1^2 k.$$

Los resultados típicos de este modelo se muestran en la figura 3.5. En ella se puede apreciar que existe un rango de temperaturas electrónicas donde el modelo tiene solución física. Este comportamiento es casi independiente de la presión del gas, variando únicamente el rango de temperaturas electrónicas en las que se obtiene solución. Además, en la zona donde se suelen encontrar los resultados experimentales existe una gran variación de la densidad electrónica en un rango pequeño de temperatura electrónica. Este motivo va a propiciar que el modelo no sea válido a la hora de predecir correctamente la densidad electrónica dada una temperatura electrónica experimental, pero que sí pueda obtener fácilmente el valor de la temperatura electrónica dada una densidad electrónica experimental.

Una vez que se obtiene la población electrónica (n_e) y la del nivel fundamental ($n(1)$) en función de la temperatura electrónica podemos calcular la población de los niveles excitados superiores, n_p , mediante el modelo corona

$$n(p) = \frac{c_{1p}(T_e)}{\sum_{l < p} A_{pl}^{ef}} n_e n(1).$$

El valor de $n(p)$ se obtiene mediante la ec. (3.2) y usando las secciones eficaces analíticas de Gryzinski para el proceso en cuestión [10]. La cantidad $A_{pl}^{ef} = \Lambda_{pl} A_{pl}$ tiene en cuenta la caída radiativa desde el nivel p al l (hemos supuesto un factor de escape $\Lambda_{pl} = 1$). Así, se puede conocer una relación entre la población de estados excitados y la temperatura electrónica, por lo que conociendo el valor experimental de la población de un nivel, p , se puede conocer la temperatura electrónica asociada.

3.4 Discusión y resultados

En los cálculos se ha supuesto que la temperatura del gas era 700 K, y se han utilizado las poblaciones de los estados excitados 6S, 6D, 5P, 5D, 4D medidas en el laboratorio [11]. Para cada estado se ha obtenido una temperatura electrónica diferente como muestra la figura 3.6, donde se han representado el valor medio y la dispersión de las diferentes temperaturas electrónicas para cada presión. Debido a las características del modelo de tres niveles, el error en la evaluación de la temperatura es pequeño, mientras que los posibles valores de la densidad electrónica asociados al error son grandes.

En todos estos casos, el TLM ha sido fundamental para evaluar la relación entre los estados excitados y la temperatura electrónica. Para comprobar la simplificación de los estados excitados que proponía dicho modelo, se ha comprobado que la contribución de los niveles 4S a la ionización es muy pequeña (por debajo del 10%) en todos los casos, y por lo tanto la estructura de niveles de este modelo es válida, y la relación densidad electrónica-temperatura electrónica es correcta.

Estos resultados tienen bastante relevancia debido a que en un sistema SLAN con ECR los mecanismos principales de absorción de potencia dependen fuertemente de las características del campo magnético y del modo del campo eléctrico. Por ejemplo, se ha demostrado que los modos circulares más bajos de propagación $TE(0, n)$ producen un mayor flujo iónico hacia un substrato situado bajo el plasma [6, 12]. Estos efectos hacen difícil desarrollar modelos teóricos para explicar la fenomenología en el interior de una descarga con ECR en general, y en este capítulo se ha desarrollado un método para obtener la temperatura electrónica del plasma.

Uhm y Choi [13] obtuvieron una expresión teórica para la temperatura electrónica, a partir de la evidencia experimental de existe una relación lineal entre

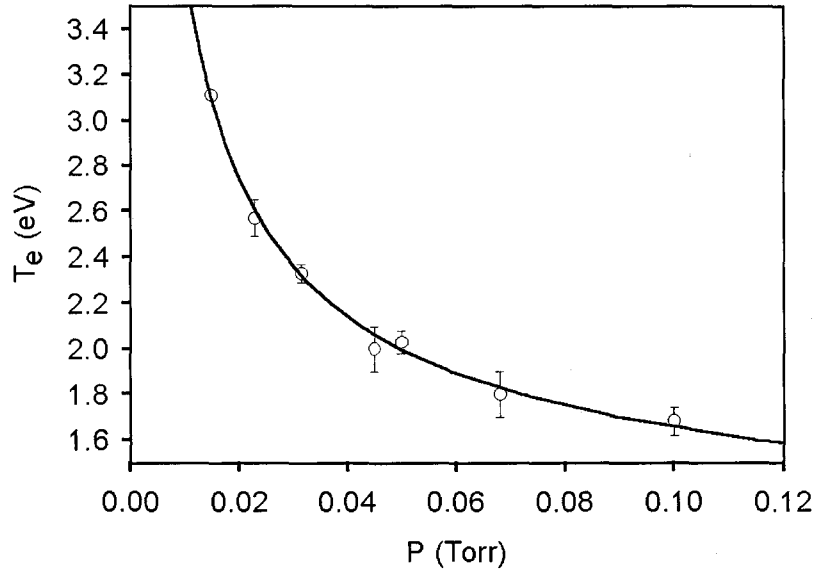


Figura 3.5: Resultados del cálculo de la temperatura electrónica en el sistema SLAN.

la temperatura electrónica y el cociente entre el campo eléctrico transversal incidente y la presión del gas, E_{\perp}/P_g

$$T_e = \alpha + \beta \frac{E_{\perp}}{P_g},$$

donde α y β son parámetros de ajuste según las condiciones experimentales. Dada una potencia de microondas absorbida por unidad de volumen, P_{μ} , el campo eléctrico transversal se puede escribir como

$$P_{\mu} = \sigma_{\perp} E_{\perp}^2,$$

donde $\sigma_{\perp} = \omega_p^2/4\pi\nu_c$ es la conductividad del plasma en condiciones ECR, y donde se ha introducido la frecuencia del plasma, $\omega_p = (4\pi n_e e^2/m_e)^{1/2}$ (donde e y m_e son la carga y la masa del electrón, respectivamente), y la frecuencia de transferencia de cantidad de movimiento entre electrones y partículas neutras por colisiones elásticas, ν_c . Los autores establecen que ν_c es una cantidad proporcional a la presión, P_g , y a la sección eficaz del proceso elástico, s , que una vez integrada para todas las energías, da un resultado proporcional a $T_e^{1/2}$. De esta manera, para un valor dado de P_{μ} , se puede escribir una relación del tipo

$$T_e = \kappa_0 + \kappa_1 T_e^{1/4} P_g^{-1/2}, \quad (3.5)$$

donde los coeficientes κ_0 y κ_1 son constantes que se deben determinar según las condiciones experimentales.

La figura 3.6 representa con una línea continua la curva de mejor ajuste a los datos según el modelo teórico de H.S. Uhm y E.H. Choi para un plasma ECR. El acuerdo de este modelo teórico para un plasma ECR de argón con nuestros datos es bastante bueno con un valor de $\kappa_0 = 0.94$ eV y $\kappa_1 = 0.199$ eV^{3/4}Torr^{1/2}.

El método teórico desarrollado en esta sección permite evaluar la temperatura electrónica conociendo las poblaciones de los estados excitados del argón, aportando una gran ventaja frente a otros que utilizan técnicas de sonda, ya que permite conocer la temperatura electrónica sin introducir elementos intrusivos en el interior del plasma. También, la aproximación maxwelliana en este caso parece ser una buena suposición, ya que en muchos casos la FDDE está entre el perfil maxwelliano y el de Druyvestein en la zona ECR y fuera del núcleo de la descarga (afterglow). El buen acuerdo entre la predicción del modelo de Uhm y Choi y los resultados de este trabajo pueden interpretarse como una prueba indirecta del carácter maxwelliano de la FDDE y de la situación corona en la que se encuentra el plasma.

También, las temperaturas electrónicas aquí obtenidas están de acuerdo con otras obtenidas previamente por otros autores [6], siendo el comportamiento típico el de una disminución a medida que la presión del gas crece. Para presiones altas, la frecuencia de las colisiones inelásticas aumentan y el electrón pierde su energía más rápidamente, y por lo tanto, su energía media será menor.

Bibliografía

- [1] D. R. Tuma, *Rev. Sci. Instrum.* **41**, 1519 (1970)
- [2] M. Moisan, C. Beaudry and P. Leprince, *Phys. Lett. A*, **50**, 125 (1974)
- [3] F. Werner, D. Korzec and J. Engemann, *Plasma Sources Sci. Technol.* **3**, 473 (1994)
- [4] G. Lisitano, *Proceedings of the Seventh International Conference on Phenomena in Ionized Gases*, Beograd, 1996 (unpublished) Vol. 1, pp. 464-467
- [5] J. Asmussen, *J. Vac. Sci. Technol. A*, **7**, 883 (1989)
- [6] J. Engemann, M. Schott, F. Werner and D. Korzed, *J. Vac. Sci. Technol. A*, **13**, 875 (1995)
- [7] T. Fujimoto, *J. Phys. Soc. Japan* **47**, 273 (1979)
- [8] C.G. Braun and J.A. Kunc, *Phys. Fluids* **31**, 671 (1988)
- [9] J. Cotrino and F.J. Gordillo-Vázquez, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **28**, 1888 (1995)
- [10] M. Gryzinski, *Classical Theory of Atomic Collisions, I. Theory of Inelastic Collisions. Phys. Rev. A*, **138**, 336 (1965)
- [11] J. Cotrino, A. Palmero, V. Rico, A. Barranco, J. P. Espinós and A. R. González-Elípe, *J. Vac. Sci. and Tech. B* **19** 2, 410-414 (2001).
- [12] R. L. Kinder, Thesis. University of Illinois at Urbana-Champaign, 1998
- [13] Han S. Uhm and Eun H. Choi, *Phys. Fluids B* **5**, 1902 (1993)

Capítulo 4

Modelo radial de un plasma de argón: influencia de la temperatura del gas y de los estados excitados

4.1 Objetivo

En los capítulos 2 y 3 se ha obtenido la temperatura electrónica a partir de las líneas de emisión de los estados superiores del átomo de argón. Sin embargo, el procedimiento teórico que se ha seguido implica conocer cuáles son los procesos más importantes de excitación e ionización en el plasma. Para obtener dicha información se ha recurrido a los resultados generales de diferentes modelos teóricos, que nos han proporcionado una descripción genérica de los procesos más importantes en el plasma. Sin embargo, en estos casos, lo ideal sería obtener teóricamente una información detallada sobre los procesos cinéticos y energías en el plasma para cada situación en particular. De esta manera, nos proponemos la realización de un modelo donde se incluyan los estados excitados más importantes, y que tenga en cuenta todos los fenómenos de transporte radiativo y difusivo.

Hoy en día, los desarrollos teóricos son cada vez más sofisticados e involucran gran cantidad de ecuaciones acopladas que permiten conocer con un alto grado de detalle las relaciones entre las diferentes especies. Así mismo, dentro de los factores que pueden influir en las propiedades de la descarga, el calentamiento del gas debido a la interacción con la población electrónica es uno de los problemas más importantes a la hora de realizar estos modelos teóricos.

En este capítulo nos proponemos abordar el problema del calentamiento del gas en una descarga producida por OS en un tubo largo cilíndrico en condiciones donde se permite simplificar la descripción, esto es, en el rango de presiones medias, donde la aproximación maxwelliana es válida y, por lo tanto, se pueden

desacoplar las ecuaciones de Maxwell y la ecuación de Boltzmann del modelo. De esta manera, se realizará así un modelo de un plasma de argón y se deducirá una ecuación diferencial para la temperatura del gas que se acoplará al resto de las ecuaciones del modelo, estudiando así sus soluciones. También, se ha ideado un procedimiento experimental para obtener el valor promedio axial de la temperatura del gas en la columna, que compararemos con los resultados teóricos obtenidos por el modelo. Finalmente, se han comparado los resultados sobre la temperatura electrónica y la población de los estados excitados con los resultados del capítulo 2 y con otras medidas experimentales en diferentes condiciones.

4.2 Introducción

En los últimos años han aparecido diferentes modelos teóricos describiendo las características principales de una descarga de OS en un tubo cilíndrico largo [1, 2, 3]. En todos estos modelos, la mayor dificultad consiste en describir correctamente el fuerte acoplo entre todas las variables del plasma, abordándose la descripción desde diferentes puntos de vista; se estudia así, en primer lugar, la propagación de la onda electromagnética, la absorción de potencia por parte de las partículas cargadas, y, por último, los propios mecanismos de transferencia de potencia entre las partículas del plasma, como ya se comentó en el capítulo 1.

La interacción partículas cargadas-gas neutro se puede estudiar mediante un balance de energía; así, lo más usual a bajas presiones es un transporte de energía basado en colisiones elásticas e inelásticas, donde variables tales como la potencia incidente de la onda al comienzo del plasma, la presión del gas, las dimensiones del recinto, etc. juegan un papel fundamental, no sólo en las propiedades del plasma, sino en la propia efectividad del dispositivo en cualquier aplicación [4, 5, 6, 7, 8]. En este balance, no sólo resulta importante conocer las propiedades cinéticas de las partículas cargadas, sino que el estudio de las propiedades de las partículas neutras también es relevante. Así, un calentamiento de estas partículas puede modificar significativamente las propiedades del plasma, como por ejemplo la interacción del gas con un determinado sustrato, los efectos de introducir otro gas precursor, etc... y en el aspecto teórico afecta directamente al valor estimado del número total de partículas en el plasma, $n_0 = P_g/k_B T_g$. Normalmente, este calentamiento de las partículas neutras se obvia, y se supone siempre que la temperatura del gas neutro es igual a la temperatura ambiente (300 K), o a un valor fijo estimado (como se ha hecho en el capítulo 3). Esta suposición puede llevar, en muchos casos, a interpretar erróneamente los resultados de los modelos, por lo que en los últimos años se le está prestando una especial atención.

En los últimos años, se han publicado varios trabajos que aborda la problemática de la distribución axial de las partículas cargadas y excitadas en una descarga inhomogénea de alta frecuencia a baja presión. Los resultados de estos trabajos indican que tanto la temperatura del gas como la electrónica varían a lo

largo de la columna de plasma, mostrando una fuerte dependencia con las condiciones experimentales. En estos trabajos se suponía que el principal mecanismo de pérdida de potencia por parte de las partículas neutras era la conducción térmica con el medio externo, por lo que el balance de potencia para estas partículas tiene la forma

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(\lambda_T r \frac{dT_g}{dr} \right) = Q(r) \quad (4.1)$$

donde r es la coordenada cilíndrica radial y λ_T la conductividad térmica del gas [9]. El término $Q(r)$ tiene en cuenta todos los mecanismos de ganancia de potencia en la interacción partículas cargadas-neutras, y, por lo tanto, requiere el uso de un modelo colisional-radiativo para evaluarlo.

Recientemente se ha publicado un trabajo donde se realiza un modelo autoconsistente de la descarga en el rango de presiones intermedias para el argón [2]. En este trabajo se calculó la temperatura del gas mediante la ec. (4.1) con $Q(r) = -\alpha n_e(r)$, donde $n_e(r)$ es la densidad electrónica y α una constante de ajuste determinada a partir del valor de la temperatura del gas al final de la columna de plasma. Esta ecuación se ha utilizado en muchos otros trabajos debido a que existe una relación directa entre la potencia cedida por las partículas cargadas a las neutras y la densidad electrónica, por lo que se supone en principio una relación lineal. El problema de usar esta relación es que no proviene de un balance de energía a partir de un modelo de la descarga, y sólo representa una visión aproximada a la hora de abordar la descripción teórica.

4.3 Modelo

4.3.1 Balance de energía en el plasma

A continuación vamos a desarrollar un modelo colisional-radiativo unidimensional para obtener la ecuación de la temperatura de las partículas pesadas en un plasma de argón producido por OS a baja presión. En general nos referiremos a situaciones estacionarias en el plasma, por lo que la evolución temporal no será objeto de estudio en este trabajo, y además, supondremos también que el transporte de partículas excitadas se puede despreciar.

Las características de la descarga serán las típicas de baja presión, por lo que los procesos cinéticos estarán dominados por colisiones entre electrones y partículas neutras, junto a un régimen ambipolar de difusión para los electrones e iones. Así mismo, cada elemento transversal de la columna se puede considerar equivalente a todos los demás, variando únicamente la potencia de la onda que incide sobre él. Por lo tanto, los gradientes axiales de partículas se pueden despreciar en la descripción teórica del problema, excepto en la propagación de la onda electromagnética. Respecto a la distribución radial de los electrones, se

ha demostrado en diversas situaciones que el perfil se ajusta bastante bien a la función J_0 de Bessel [10, 11, 12, 1]

$$n_e = \frac{R_{in}^2}{2} \frac{J_0\left(\frac{r}{R_{in}}\alpha_0\right)}{\int_0^R dr r J_0\left(\frac{r}{R_{in}}\alpha_0\right)} \langle n_e \rangle,$$

donde $\langle n_e \rangle$ es la densidad electrónica promedio transversal, r la coordenada radial, R_{in} el radio interior del recinto cilíndrico y α_0 el primer cero de la función J_0 .

La descripción de los niveles energéticos del átomo de argón la haremos mediante un modelos de N niveles ligados (con energía ε_i), y uno no ligado (con energía ε_λ). La cinética del plasma va a estar caracterizada por los procesos (ver por ejemplo la referencia [13]) que son típicos de situaciones de baja presión, y que, junto a la difusión electrónica e iónica, servirán para describir toda la cinética del plasma. En estos procesos únicamente hemos tenido en cuenta las poblaciones de las partículas neutras en el estado fundamental, partículas neutras excitadas, electrones e iones, y hemos eliminado de la descripción estados moleculares del argón, así como procesos característicos de presiones más elevadas.

Proceso	Coefficiente
$Ar(i) + e \rightarrow Ar(j) + e$	c_{ij}
$Ar(i) + e \rightarrow Ar^+ + e + e$	$c_{i\lambda}$
$Ar(i) \longleftrightarrow Ar(j) + h\nu \quad (j < i)$	A_{ij}^{ef}

Los coeficientes cinéticos de transporte de cada proceso pueden calcularse conociendo la función de distribución de energías de los electrones, y la sección eficaz correspondiente. También, el transporte radiativo se puede abordar mediante el concepto de factor de escape de Holstein, como ya hicimos en el capítulo 3 al abordar la descripción de un plasma producido en un sistema SLAN,

$$A_{ij}^{ef} = \Lambda A_{ij},$$

donde A_{ij} el coeficiente de Einstein de la transición, y Λ el factor de escape, cuyo valor estará siempre entre 0 (plasma ópticamente grueso) y 1 (plasma transparente).

En estas condiciones las ecuaciones cinéticas de transporte que describe la variación temporal de la población del nivel i es

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \sum_{j=1}^N c_{ji} n_j n_e - \sum_{j=1}^N c_{ij} n_i n_e - c_{i\lambda} n_i n_e - \sum_{j<i} A_{ij}^{ef} n_i + \sum_{j>i} A_{ji}^{ef} n_j \quad (i = 2, 3, \dots, N), \quad (4.2)$$

y para los electrones

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = \sum_{i=1}^N c_{i\lambda} n_i n_e + \vec{\nabla} \cdot (D \vec{\nabla} n_e), \quad (4.3)$$

con

$$n_{ion} = n_e, \quad (4.4)$$

y

$$\sum_{i=1}^N n_i + n_e = n_0, \quad (4.5)$$

donde n_i es la densidad de argón neutro excitado en el estado i , D el coeficiente de difusión electrónico, n_0 la densidad total de partículas en el plasma, y n_e y n_{ion} la población de electrones e iones respectivamente. Introducimos las cantidades

$$\theta_{el} = \frac{3m}{M} \nu_c k_B (T_e - T_g) \simeq \frac{3m}{M} \nu_c k_B T_e, \quad (4.6)$$

$$\theta_{in} = \sum_{i=1}^N \left[\sum_{j=1}^N c_{ij} n_i (\varepsilon_j - \varepsilon_i) + c_{i\lambda} n_i (\varepsilon_\lambda - \varepsilon_i) \right], \quad (4.7)$$

que son las contribuciones elásticas e inelásticas a θ_L , potencia total cedida por electrón a las partículas neutras. En las ec. (4.6), ν_c representa la frecuencia de transferencia de cantidad movimiento entre electrones y partículas neutras, T_e la temperatura electrónica, siendo m y M las masas del electrón y del átomo de argón respectivamente. Así, en la situación estacionaria, la potencia absorbida por los electrones de la onda será igual a la potencia que éstos ceden a las partículas pesadas, y se cumplirá

$$\sigma E_{ef}^2 = \theta n_e = \theta_L n_e = (\theta_{el} + \theta_{in}) n_e \quad (4.8)$$

donde, θ es la potencia absorbida por electrón, σ es la conductividad eléctrica, y E_{ef} el valor del campo local efectivo.

En primera aproximación, el plasma puede ser dividido en dos subsistemas: uno compuesto únicamente de electrones, y otro por las partículas pesadas. De esta manera, el subsistema electrónico absorbe energía de la onda electromagnética y la cede al subsistema de partículas pesadas mediante colisiones elásticas e inelásticas, mientras que el subsistema de partículas pesadas perderá dicha energía mediante el transporte radiativo, que hace que escape radiación del plasma, y por conducción térmica hacia el recinto exterior.

En una situación estacionaria toda la energía cedida al plasma debe ser igual a las pérdidas energéticas de éste; así consideraremos tres formas de perder energía por unidad de volumen: conducción térmica de las partículas neutras (L_h), pérdidas radiativas (L_r), y pérdidas asociadas al transporte difusivo electrónico (L_d). En condiciones estacionarias se tendrá

$$\sigma E_{ef}^2 - (L_h + L_r + L_d) = 0.$$

Las expresiones de L_h y L_r son

$$L_h = -\vec{\nabla} \cdot (\lambda_T \vec{\nabla} T_g) \simeq -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_T r \frac{\partial T_g}{\partial r} \right),$$

y

$$L_r = \sum_{i=1}^N \sum_{j<i} A_{ij}^{ef} n_i (\varepsilon_i - \varepsilon_j),$$

respectivamente, donde λ_T es la conductividad térmica del gas argón ($\lambda_T = 4.17 \cdot 10^{-4} T_g^{2/3} \text{ W m}^{-1}$) [15]. Para obtener una expresión de L_d se ha de tener en cuenta la energía de los electrones e iones que escapan de la unidad de volumen, y por unidad de tiempo, debido al transporte por difusión. De esta manera la expresión matemática de L_d será

$$L_d = -\vec{\nabla} \cdot (D \vec{\nabla} n_e) (\varepsilon_\lambda - \varepsilon_1),$$

y, por lo tanto, la ecuación de balance de energía para el plasma se escribe

$$\sigma E_{ef}^2 + \vec{\nabla} \cdot (\lambda_T \vec{\nabla} T_g) - \sum_{i=1}^N \sum_{j<i} A_{ij}^{ef} n_i (\varepsilon_i - \varepsilon_j) + \vec{\nabla} \cdot (D \vec{\nabla} n_e) (\varepsilon_\lambda - \varepsilon_1). \quad (4.9)$$

Por otra parte, utilizando las ecs. (4.2)–(4.5) se puede obtener

$$\theta_{in} n_e = \sum_{i=1}^N \sum_{j<i} A_{ij}^{ef} n_i (\varepsilon_i - \varepsilon_j) - \vec{\nabla} \cdot (D \vec{\nabla} n_e) (\varepsilon_\lambda - \varepsilon_1), \quad (4.10)$$

que será válida en la situación estacionaria (ver también la referencia [13]). Utilizando las ecs. (4.8) y (4.10), la ec. (4.9) finalmente queda

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_T r \frac{\partial T_g}{\partial r} \right) + \theta_{el} n_e = 0. \quad (4.11)$$

Como se puede comprobar, la ec. (4.11) es similar a la ec. (4.1), siendo la constante α reemplazada por el valor de θ_{el} . La ec. (4.11) puede ser resuelta

suponiendo un perfil radial Bessel, J_0 , para los electrones, y conociendo la dependencia de θ_{el} con las variables del plasma. Las condiciones de contorno serán

$$\frac{\partial T_g}{\partial r}(r = 0) = 0,$$

y

$$T_g(r = R_{in}) = T_w,$$

donde T_w es la temperatura en la cara interna de la pared del recinto.

4.3.2 Modelo cinético

La ec. (4.11) es una ecuación diferencial que permite acoplar la temperatura del gas con las variables típicas de la descarga. Este acoplo proviene por un lado del valor de la densidad electrónica, n_e , así como de la potencia cedida por los electrones a las partículas neutras mediante colisiones elásticas, θ_{el} . De esta manera, para evaluar correctamente la temperatura del gas, resulta necesario acoplar dicha ecuación con el modelo colisional-radiativo que se desarrolló en el apartado anterior. Así mismo, para abordar la descripción de las colisiones elásticas se necesita el valor de la frecuencia de transferencia de cantidad de movimiento por colisiones elásticas entre electrones y partículas neutras, ν_c , cuya expresión es

$$\nu_c = \frac{P}{k_B T_g} \sqrt{\frac{2}{m}} \int_0^\infty du f(u) \sigma_c(u) u,$$

donde σ_c es la sección eficaz de transferencia de cantidad de movimiento entre electrones y partículas neutras, y $f(u)$ la FDDE normalizada como $\int_0^\infty du f(u) \sqrt{u} = 1$.

Un método adecuado para evaluar la FDDE sería acoplar al modelo cinético la ecuación de Boltzmann de los electrones. De todas maneras, al igual que hicimos en el capítulo 2, optaremos por un método más simple, ésto es, la aproximación maxwelliana. La validez de esta aproximación viene dada por las características de la descarga, y en absoluto representará una aproximación válida en muchas situaciones [16]. Sin embargo, esta elección simplifica bastante el modelo y va a permitir estimar los comportamientos más importantes.

Eliminar la parte electromagnética de las ecuaciones junto a la aproximación maxwelliana, implica introducir una incognita en el modelo que tendrá que ser suministrada como un parámetro externo. De esta manera, utilizaremos la densidad electrónica media radial como parámetro de entrada, y obtendremos el comportamiento del resto de las variables en función de dicho valor.

A la hora de construir el modelo de la descarga se ha optado por una descripción de 11 niveles efectivos, que incluye el nivel fundamental, los cuatro estados

excitados 4S, y los estados excitados 4P (figura 4.1). Los niveles superiores no se han incluido en la descripción ya que, en general, permanecen en un equilibrio parcial Saha, y por lo tanto, el interés está centrado en los inferiores [17, 18]. Además, a presiones bajas, los mecanismos de excitación en escalera (típicos de situaciones ESB) todavía no son importantes y todos los mecanismos de ionización de más peso van a provenir de los niveles energéticos inferiores. Así, los coeficientes cinéticos de transporte se pueden calcular mediante la expresión

$$c_{ij} = \sqrt{\frac{2}{m_e}} \int_{\Delta\varepsilon_{ij}}^{\infty} du f(u, T_e) \sigma_{ij}(u) u,$$

donde $\Delta\varepsilon_{ij}$ es la energía umbral del proceso, y $\sigma_{ij}(u)$ la sección eficaz

$$\sigma_{ij}(u) = \sigma_{ij}^A(u) + \sigma_{ij}^S(u) + \sigma_{ij}^P(u),$$

donde $\sigma_{ij}^A(u)$ es la sección eficaz para transiciones ópticas permitidas, $\sigma_{ij}^S(u)$ la sección eficaz para las transiciones prohibidas de spin, y $\sigma_{ij}^P(u)$ para las transiciones prohibidas por paridad [19].

Por último, el factor de escape de las transiciones radiativas desde los niveles 4S al fundamental se ha calculado mediante la fórmula de Holstein [20, 21], y se ha supuesto, en principio, que no hay autoabsorción para las caídas entre los niveles 4P y 4S, esto es $\Lambda(4P \rightarrow 4S) = 1$ (más adelante se discutirá esta aproximación). Por lo tanto, introduciendo la densidad electrónica media radial como parámetro, y conociendo la presión del gas y la temperatura del recinto en su cara interior, el modelo puede ser resuelto. De esta manera, el modelo consiste en un conjunto de ecuaciones acopladas que involucra a los estados excitados, la temperatura electrónica y la temperatura del gas.

4.4 Resultados y discusión

4.4.1 Influencia de la temperatura del gas en los resultados

En la figura 4.2 se ha mostrado el perfil radial de la temperatura del gas en función del valor medio radial de la densidad electrónica para las presiones de 1 Torr y 2 Torr [14]. En ambos casos el radio interior de la descarga es 4.5 mm y la temperatura del recinto, T_w , es 300 K. El comportamiento típico que se ha encontrado es el de un incremento del gradiente de temperatura del gas a medida que aumenta la densidad electrónica y la presión, es decir, la diferencia de temperatura entre el centro de la descarga y la pared es cada vez más grande. Este comportamiento se debe a la gran diferencia que hay entre la población electrónica en el centro y en la pared, y rige el flujo de potencia elástica a las

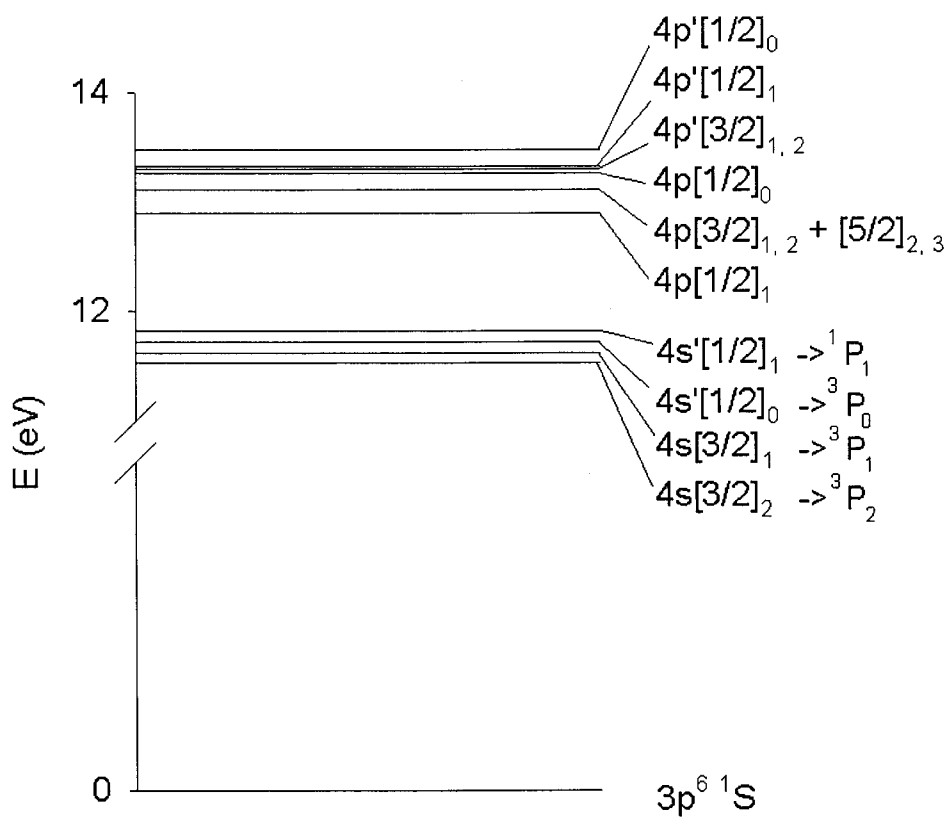


Figura 4.1: Esquema de los niveles de energía del átomo de argón incluidos en el modelo. La notación que se utilizará en el texto para los niveles 4S será la más usual, esto es, el nivel 4s[3/2]₂ será llamado ³P₂, el 4s[3/2]₁ será el ³P₁, el 4s'[1/2]₀ será el ³P₀, y el 4s'[1/2]₁ el ¹P₁.

partículas neutras. Como consecuencia de este aumento de la temperatura en el centro de la descarga se produce una disminución de neutros en dicha zona, quedando la población de partículas neutras máxima en la pared y mínima en el centro.

En la figura 4.3 se ha representado el promedio radial de la temperatura del gas en función del promedio radial de la densidad electrónica a varias presiones. Esta figura es muy similar a la obtenida en la referencia [2]. Así, para valores de densidad electrónica por debajo de 10^{18} m^{-3} , la temperatura del gas es casi constante e igual a la de la pared interna del tubo. Para densidades electrónicas mayores, la temperatura comienza a aumentar hasta alcanzar valores por encima de 500 K, siendo este incremento mayor a medida que aumenta la presión.

4.4.2 Simplificación de la ecuación de la temperatura del gas

Aunque la ec. (4.11) permite conocer la temperatura del gas en la descarga, el fuerte acoplo entre los diferentes parámetros del plasma hacen que el problema sea difícil de abordar, y que se tenga que acoplar a otras ecuaciones del modelo. Sería deseable obtener una relación analítica que ligue la temperatura del gas con el resto de los parámetros del plasma, aunque sea de una manera aproximada, y evitar de esta manera resolver la ec. (4.11). En este apartado vamos a realizar diferentes aproximaciones que van a permitir obtener una relación analítica entre la temperatura del gas y otros parámetros de la descarga.

Uno de los mayores problemas al resolver la ec. (4.11) es el cálculo de la potencia elástica debido al acoplo entre la temperatura del gas y la electrónica. Este problema se puede simplificar fácilmente debido a que, en el rango de bajas presiones, un cambio en la temperatura del gas produce únicamente un cambio bastante pequeño en la temperatura electrónica. De esta manera se pueden tratar ambas temperaturas como parámetros aproximadamente independientes entre sí. Así, se puede escribir

$$\nu_c(T_g, T_e) = \frac{P}{k_B T_g} \sqrt{\frac{2}{m}} \int_0^\infty du f(u, T_e) \sigma_c(u) u \simeq \frac{T_w}{T_g} \nu_c(T_w, T_e),$$

y por lo tanto

$$\theta_{el}(T_g, T_e) \simeq \frac{T_w}{T_g} \theta_{el}(T_w, T_e).$$

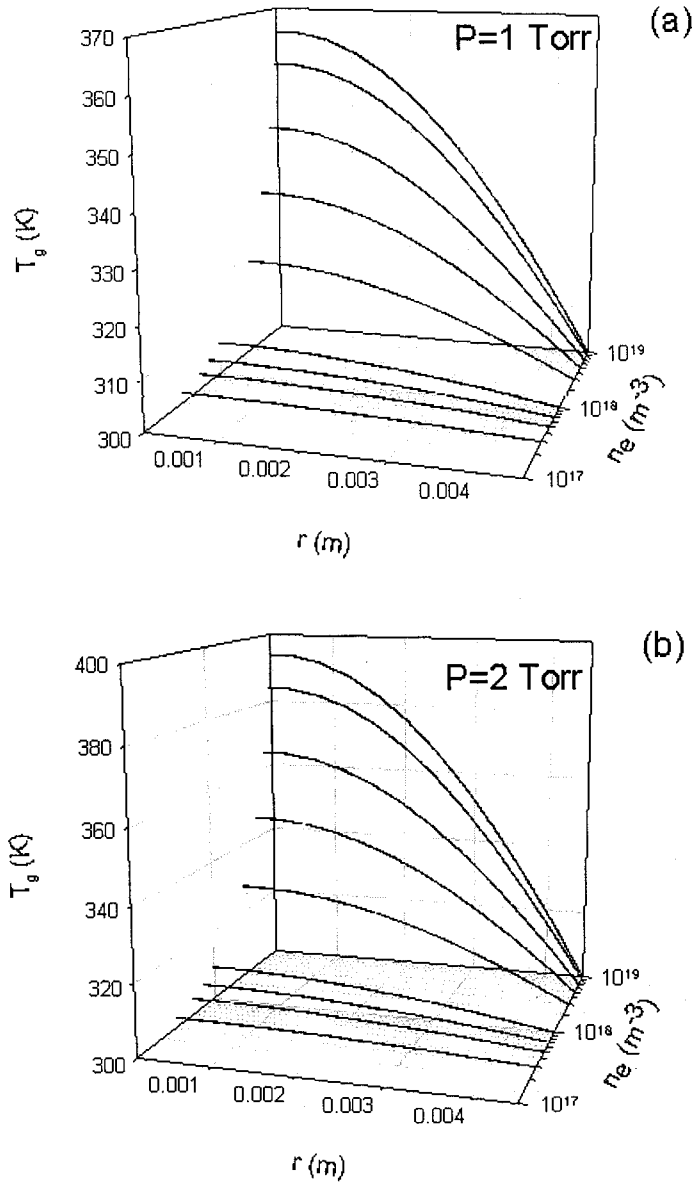


Figura 4.2: Perfil radial de la temperatura del gas en un recinto de radio interior de 4.5 mm a dos presiones diferentes: (a) $p = 1$ Torr, y (b) $p = 2$ Torr. En ambos casos la temperatura del recinto es $T_w = 300$ K.

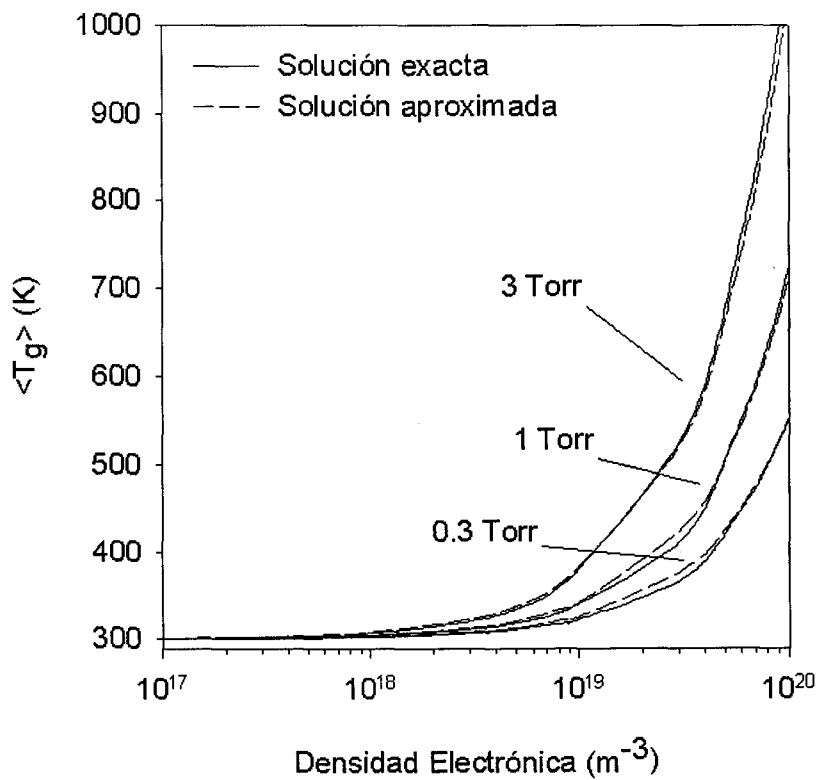


Figura 4.3: Promedio radial de la temperatura del gas, en función de la densidad electrónica, a tres presiones diferentes 0.3, 1 y 3 Torr. El radio interior del recinto es 5 mm y $T_w = 300$ K en todos los casos. Las líneas sólidas representan la solución exacta, y las líneas discontinuas la solución aproximada (ver sección 4.4.2).

De esta manera, la ec. (4.11) queda

$$T_g \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_T(T_g) r \frac{\partial T_g}{\partial r} \right) + T_w \theta_{el}(T_w, T_e) \frac{R_{in}^2}{2} \frac{J_0 \left(\frac{r}{R_{in}} \alpha_0 \right)}{\int_0^{R_{in}} dr r J_0 \left(\frac{r}{R_{in}} \alpha_0 \right)} \langle n_e \rangle = 0,$$

que multiplicando por $2r/R_{in}^2$, e integrando a lo largo del radio, se obtiene

$$\frac{2}{R_{in}} \langle T_g \rangle \left[\lambda_T(T_w) \frac{\partial T_g}{\partial r} (r = R_{in}) \right] + T_w \theta_{el}(T_w, T_e) \langle n_e \rangle = 0, \quad (4.12)$$

donde $\langle \rangle$ significa el promedio radial. La ec. (4.12) puede resolverse si se hace la aproximación $\partial T_g / \partial r (r = R_{in}) \simeq (T_w - \langle T_g \rangle) / R_{in}$, en la que se supone homogeneidad radial, obteniendo

$$\langle T_g \rangle \simeq \frac{T_w}{2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{2\theta_{el}(T_w, T_e) \langle n_e \rangle R_{in}^2}{\lambda_T(T_w) T_w}} \right]. \quad (4.13)$$

Así mismo, la ec. (4.13) se puede simplificar suponiendo que $2\theta_{el}(T_w, T_e) \langle n_e \rangle R_{in}^2 / \lambda_T(T_w) T_w \ll 1$, condición que se cumple en todos los casos que hemos estudiado, por lo que, finalmente, se obtiene la relación

$$\langle T_g \rangle = T_w + \frac{\theta_{el}(T_w, T_e) \langle n_e \rangle R_{in}^2}{2\lambda_T(T_w)}. \quad (4.14)$$

Esta ecuación relaciona de una manera aproximada y sencilla el promedio radial de la temperatura del gas con diferentes cantidades de la descarga, como son la densidad electrónica media radial, el radio interno y la temperatura del recinto, la conductividad térmica del gas, y la potencia que ceden los electrones a las partículas neutras mediante colisiones elásticas.

El la figura 4.3 hemos representado el promedio radial de la temperatura del gas obtenida mediante la ec. (4.11) (líneas sólidas), junto al valor aproximado dado por la ec. (4.14) (líneas discontinuas). En todos los casos la aproximación parece aceptable, teniendo en cuenta que la ec. (4.14) permite un estudio mucho más sencillo que el realizado a través de la ec. (4.11).

A partir de la ec. (4.14) se podría llegar a la conclusión errónea de que, a medida que el radio de la descarga se hace más pequeño, el valor de la temperatura del gas disminuye, hecho que, a todas luces, contradice las evidencias experimentales. Esta aparente contradicción puede ser explicada debido al fuerte acoplo de las variables del plasma; así una disminución del radio de la descarga, producirá una gran variación en la densidad electrónica, potencia elástica, y temperatura de la pared, por lo que una disminución del radio de la descarga no acarrea necesariamente una disminución de la temperatura del gas.

Por otra parte, la temperatura del recinto en la cara interna, T_w , es una cantidad muy difícil de medir, y sería de interés relacionar la temperatura del gas con la temperatura exterior del recinto. Así, se puede resolver la ecuación de transferencia de calor para el recinto cilíndrico ($\nabla^2 T = 0$), sabiendo que:

- 1. La temperatura del recinto en R_{ext} (radio externo del recinto cilíndrico) es T_w^{ext} , y
- 2. el flujo de calor entre el gas y el recinto debe ser una variable continua en R_{in} .

En este caso se puede obtener

$$T_w - T_w^{ext} = \frac{\theta_{el}(T_w, T_e) \langle n_e \rangle R_{in}^2}{2\lambda_T^v} \ln \left(\frac{R_{ext}}{R_{in}} \right),$$

donde λ_T^v es la conductividad térmica del recinto (que suponemos constante), por lo que finalmente podemos escribir

$$\langle T_g \rangle = T_w^{ext} + \frac{\theta_{el}(T_w, T_e) \langle n_e \rangle R_{in}^2}{2\lambda_T'}, \quad (4.15)$$

con

$$\frac{1}{\lambda_T'} = \frac{1}{\lambda_T(T_w)} + \frac{1}{\lambda_T^v} \ln \left(\frac{R_{ext}}{R_{in}} \right).$$

La ec. (4.15) es válida para cada posición axial de la columna de plasma y puede llevarnos a otra relación importante si calculamos el promedio axial de esta ecuación. Así, si multiplicamos por $1/l_p$ (donde l_p es la longitud de la columna de plasma) e integramos respecto a la variable z desde 0 a l_p (suponiendo que tanto T_w^{ext} como $\theta_{el}(T_w, T_e)/\lambda_T'$ no varían de una manera apreciable con z), se obtiene

$$\bar{T}_g = T_w^{ext} + \frac{\theta_{el}(T_w, T_e) N_e}{2\lambda_T' \pi l_p},$$

donde N_e es la cantidad total de electrones en la descarga y \bar{T}_g el promedio axial y radial de la temperatura del gas. Por otra parte, existe una relación entre la cantidad total de electrones en la descarga y la potencia incidente al comienzo de la columna

$$N_e = \frac{P_{inc}(0)}{\theta(T_w, T_e)}$$

donde se ha supuesto también, que θ es axialmente constante, y se puede llegar a la expresión

$$\bar{T}_g = T_w^{ext} + \frac{\theta_{el}(T_w, T_e)}{\theta(T_w, T_e)} \frac{1}{2\pi\lambda_T'} \frac{P_{inc}(0)}{l_p},$$

o lo que es lo mismo, si variamos la potencia incidente sobre el plasma (y por lo tanto variamos su longitud), el promedio radial y axial de la temperatura del gas debe cumplir la relación lineal

$$\bar{T}_g = a_0 + a_1 \frac{P_{inc}(0)}{l_p} \quad (4.16)$$

donde $a_0 = T_w^{ext}$ y $a_1 = \theta_{el}(T_w, T_e) / 2\pi \lambda'_r \theta(T_w, T_e)$.

4.4.3 Medición experimental de la temperatura del gas y comparación con el modelo

La temperatura del gas se puede determinar utilizando diferentes métodos, como el uso del diagramas Boltzmann de las intensidades de las líneas rotacionales y traslacionales que permite conocer la temperatura vibracional y rotacional. En particular, la temperatura rotacional es de esperar que sea muy cercana a la traslacional (esto es, la temperatura del gas, T_g) [23].

En el caso de un plasma producido por OS en un tubo largo, el gas no se suele encontrar en reposo sino que se impone un flujo externo que sirve para refrigerar el sistema. Dicho flujo no es muy alto, de tal manera que el transporte axial no varía sensiblemente las propiedades del plasma, y junto al tamaño típico del radio del tubo (de menos orden de milímetros) hace que podamos considerar el problema como el de un fluido viscoso en régimen laminar que fluye por un tubo de sección circular. Así, si se miden los valores de la presión del gas en dos puntos del tubo (figura 4.4) se puede escribir que el flujo másico antes de encender el plasma, F , es [24]

$$F = \frac{\pi \mu a^4}{16\eta(T_0)RT_0} \frac{p_1^2(0) - p_2^2(0)}{l_{tubo}}, \quad (4.17)$$

donde l_{tubo} es la distancia entre los dos medidores de presión, $p_1(0)$ y $p_2(0)$, $\eta(T_0)$ es la viscosidad del gas, μ el peso atómico, a el radio interior del tubo, T_0 la temperatura promedio del gas, y R es la constante universal de los gases.

Antes de que el plasma haya sido encendido, se midieron las presiones, siendo la temperatura del gas igual a la ambiente (300 K). Utilizando el hecho de que el flujo másico está impuesto externamente, y es el mismo cuando hay plasma que cuando no lo hay, al encender el plasma podemos escribir, usando la ec. (4.17),

$$1 = \frac{\eta(T_0)T_0}{\eta(\bar{T}_g)\bar{T}_g} \frac{p_1^2 - p_2^2}{p_1^2(0) - p_2^2(0)}, \quad (4.18)$$

donde \bar{T}_g es la nueva temperatura promedio, y p_1 y p_2 las nuevas presiones medidas con el plasma encendido. La ec. (4.18) se usa para calcular la temperatura

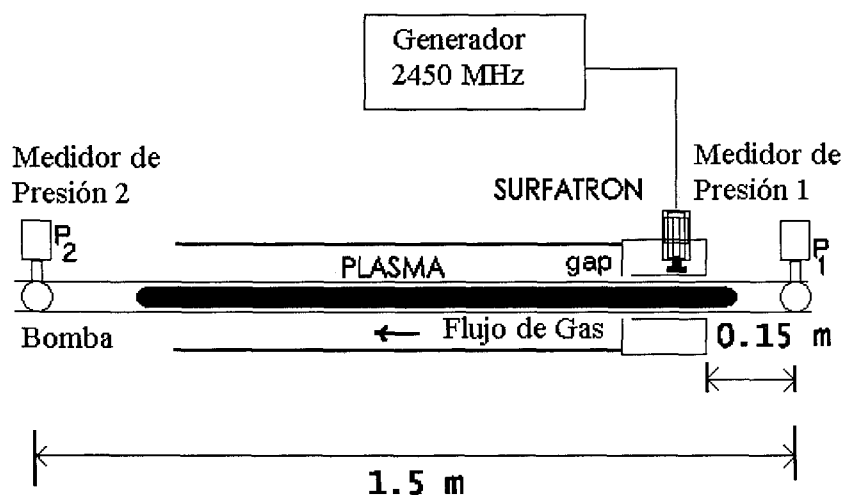


Figura 4.4: Montaje experimental empleado para medir la variación de la presión al apagar/encender el plasma.

del gas promedio, \bar{T}_g , en cada momento, después de encender el plasma. La expresión del coeficiente de viscosidad para el argón, η , para una temperatura T_g viene dada por [25]

$$\eta = \eta_0 \frac{1 + S/273}{1 + S/T_g} \sqrt{\frac{T_g}{273}}, \quad (4.19)$$

donde η_0 es el coeficiente de viscosidad a 273 K ($\eta_0 = 2.117 \times 10^{-4}$ dyna cm⁻²) y S la constante de Sutherland.¹

En esta sección vamos a considerar dos casos: (i) la presión del gas aumenta al encenderse el plasma como consecuencia del calentamiento del gas, y (ii) la temperatura del gas aumenta como consecuencia de aumentar la potencia incidente. También se ha medido la variación temporal de la presión del gas al apagar el plasma. En este caso, la presión del gas disminuye con el tiempo, y utilizando la ec. (4.18), se puede calcular el promedio axial de la temperatura de gas [27].

Los valores de temperatura del gas obtenidos son valores promedios axiales entre los dos medidores de presión, y no únicamente a lo largo de la columna de plasma. Este error se puede estimar suponiendo el plasma a una temperatura,

¹148 K

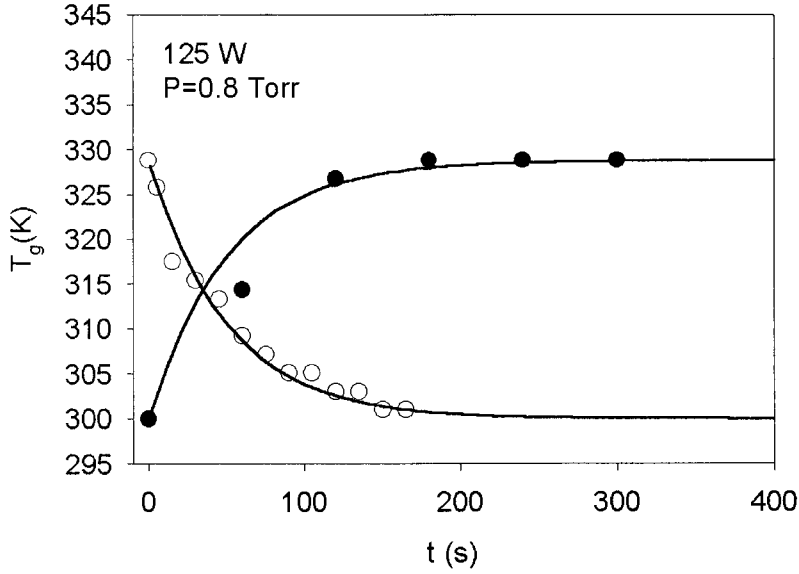


Figura 4.5: Evolución temporal de la temperatura del gas al encender el plasma (trazo superior), y al apagarlo (trazo inferior), utilizando una potencia incidente de 125 W, y a una presión de 0.8 Torr.

T_g^p , y el resto a temperatura ambiente, T_0 . Así, el valor promedio obtenido será

$$\bar{T}_g \simeq \frac{1}{\pi R^2 l_{tubo}} \int_0^R r dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{l_{tubo}} dz \langle T_g \rangle (z) \simeq \frac{l_p}{l_{tubo}} T_g^p + \frac{l_{tubo} - l_p}{l_{tubo}} T_0,$$

De esta manera, el error cometido se puede estimar como

$$|\bar{T}_g - T_g^p| = \left(1 - \frac{l_{tubo}}{l_p}\right) |\bar{T}_g - T_0|,$$

con lo que, a medida que la longitud del plasma se iguale con la distancia entre los medidores, el error será menor.

El valor de la temperatura del gas dependerá del grosor del tubo de Pyrex, potencia de microondas, presión del gas, etc... Hemos estudiado la variación de la temperatura del gas cuando el plasma se enciende y se apaga para dos potencias incidentes diferentes a la misma presión ($p = 0.8$ Torr). Los resultados aparecen en las figuras 4.5 y 4.6, donde podemos apreciar los dos procesos: las curvas superiores al encender el plasma y las inferiores al apagarlo.

El proceso transitorio mostrado en las figuras 4.5 y 4.6 puede ser explicado si se estudia la escala temporal de evolución del gas y del tubo de vidrio. Para este

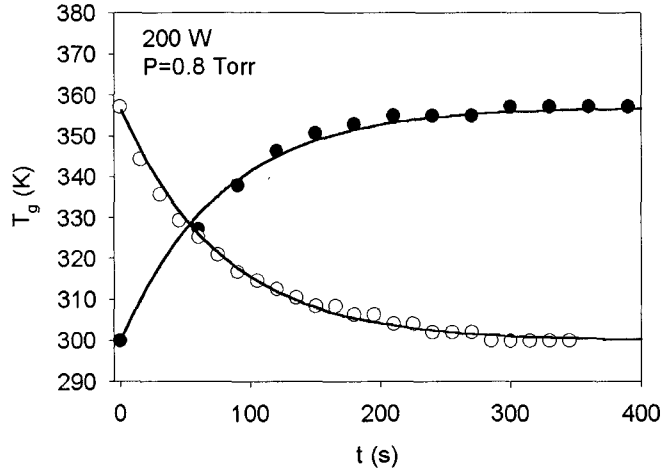


Figura 4.6: Evolución temporal de la temperatura del gas al encender el plasma (trazo superior), y al apagarlo (trazo inferior), utilizando una potencia incidente de 200 W, y a una presión de 0.8 Torr.

proceso se puede utilizar una ecuación de balance térmico cuando el plasma está apagado

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \lambda_T \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad (4.20)$$

donde, U es la energía interna por unidad de volumen y λ_T la conductividad térmica, que suponemos independiente de la temperatura. En primera aproximación se puede suponer $U = 3n_0k_B T/2$ para el gas (n_0 es la densidad numérica de átomos neutros), y $U = \rho C T$ para el tubo de vidrio (donde $\rho = 2.23 \cdot 10^6 \text{ g m}^{-3}$ es la densidad másica y $C = 0.78 \text{ J g}^{-1}\text{K}^{-1}$ la capacidad calorífica). La conductividad térmica, λ_T , es $4.17 \cdot 10^{-4} T^{2/3} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-5/3}$ (aproximadamente $0.02 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ en el rango de $300 - 500 \text{ K}$) para el gas neutro [28] y $1.25 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ para el tubo de vidrio. La solución temporal de la ec. (4.20) muestra la típica evolución exponencial $\exp(-t/\tau)$, con un tiempo característico que puede ser estimado aproximadamente como $\tau \simeq (3k_B n_0 R^2)/(2\alpha_0^2 \lambda_T) \simeq 10^{-5} \text{ s}$ para el gas, y $\tau \simeq (R_{out}^2 C \rho)/(\lambda_T \alpha_0^2) \simeq 10 \text{ s}$ para el tubo de vidrio (R_{out} es el radio externo del tubo y α_0 el primer cero de la función J_0 de Bessel). Aunque ambos valores son sólo estimaciones, la importancia de las dos escalas de tiempo es manifiesta, y muestran la evolución de la temperatura del gas en esas dos escalas: en la primera escala de tiempo, la temperatura del gas cambia rápidamente hasta llegar a la temperatura del vidrio en un tiempo típico de evolución de los parámetros del plasma, mientras que en la segunda escala el vidrio se va enfriando mucho más lentamente hasta llegar a una situación estacionaria. De esta manera, las figuras

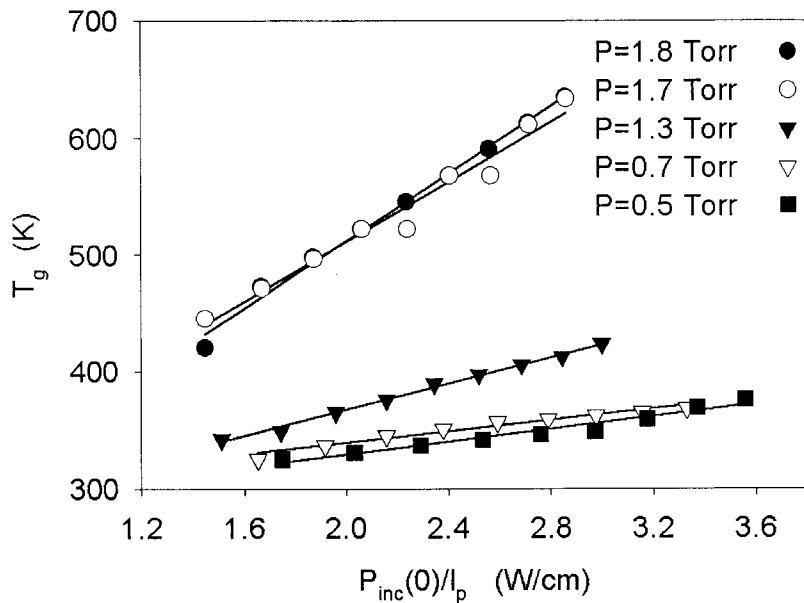


Figura 4.7: Valores medios de la temperatura del gas en función del cociente entre la potencia incidente y la longitud del plasma, a diferentes presiones.

4.5 y 4.6 muestran la evolución temporal de la temperatura del gas a medida que se enfría el vidrio.

La figura 4.7 muestra la relación lineal entre \bar{T}_g y $P_{inc}(0)/l_p$. En el ajuste lineal, los valores calculados de θ_{el}/θ están en el mismo orden que los obtenidos por diferentes modelos teóricos para este tipo de descargas, aunque debido al error en la medida de la temperatura del gas, no pueden tomarse como valores precisos. Así mismo la temperatura externa del vidrio se obtiene cercana a los 300 K en todos los casos.

La dependencia de la temperatura del gas con la presión también aparece en la ec. (4.16), los resultados experimentales los hemos representado en la figura 4.8. En este caso, la dependencia no es simple debido a que en dicha relación aparecen varias cantidades que dependen fuertemente de ella: θ , θ_{el} y l_p . De esta manera, la tendencia mostrada en la figura 4.8 sólo puede ser calculada resolviendo un modelo completo de la descarga.

4.4.4 Resultados del modelo teórico

Tomando la densidad electrónica como parámetro de entrada en el modelo, y a partir del conocimiento de la presión del gas y la temperatura del recinto, se pueden obtener el valor de la temperatura electrónica y las poblaciones de

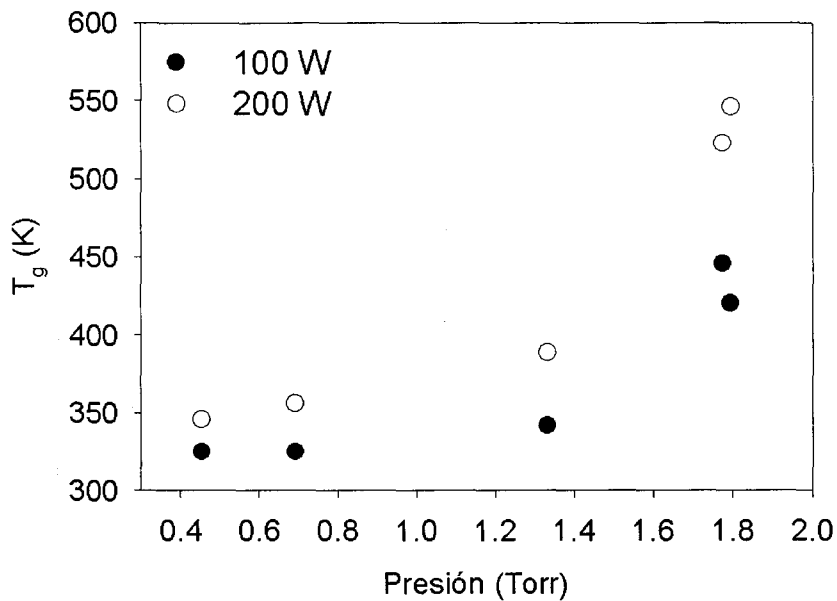


Figura 4.8: Valor de la temperatura del gas obtenida en función de la presión media, a dos potencias diferentes.

estados excitados en el plasma. Así mismo, tenemos que tener en cuenta que los resultados de este modelo para densidades electrónicas por debajo de 10^{18} m^3 deben tomarse como una estimación, ya que, en este caso, la FDDE no es maxwelliana en general, y es necesario resolver la ecuación de Boltzmann en la aproximación de los dos términos.

En la figura 4.9 se han representado el promedio radial de la temperatura electrónica y el de la temperatura del gas frente al promedio radial de la densidad electrónica a dos temperaturas del vidrio diferente, 300 K y 400 K. Como podemos apreciar, existen dos zonas muy diferentes en esta gráfica: una en la que la densidad electrónica no es suficiente para elevar la temperatura del gas, y por lo tanto la cinética es la misma que la de un modelo de temperatura constante, y otra zona, a densidades electrónicas más altas, donde el calentamiento del gas empieza a afectar a las propiedades del plasma.

La zona donde la temperatura del gas es constante muestra la tendencia típica decreciente de la temperatura electrónica con la densidad electrónica (como ocurría en el modelo de tres niveles utilizado en el capítulo 3), mientras que en la segunda, esta tendencia se invierte por la influencia de la temperatura del gas. De hecho, hay dos procesos fundamentales que imponen el valor de la temperatura electrónica en el plasma al subir la densidad electrónica: uno que tiende a aumentar la ionización al haber más electrones (y por lo tanto disminuir la temperatura electrónica necesaria para mantener la descarga), y otro que intenta

disminuir la ionización debido a la descenso del numero total de partículas, ya que aumenta la temperatura del gas. En la zona de densidades bajas, los efectos de la temperatura del gas son despreciables, y se obtiene un comportamiento decreciente con la densidad electrónica, mientras que en la zona de alta densidad los efectos del calentamiento del gas son los más importantes y se obtiene un comportamiento creciente.

En la figura 4.9 también encontramos la influencia de la temperatura del recinto en el modelo. Así, dicho valor condiciona la temperatura media del gas, e indirectamente el valor de la temperatura electrónica en la descarga. En la figura 4.10 hemos representado el perfil radial de la temperatura electrónica para diferentes densidades electrónicas, obteniendo el mismo comportamiento que en los casos promediados, ésto es, en el centro de la descarga, donde la densidad electrónica es alta y dominan los efectos del gas, la temperatura electrónica sigue a los electrones, y decrece con el radio. Esta tendencia continua hasta que nos acercamos a la pared, donde la densidad electrónica cae significativamente, haciendo despreciables la variación de la temperatura del gas, por lo que la temperatura electrónica ahora crece con el radio.

A pesar de los cambios de comportamiento de la temperatura electrónica al variar la densidad electrónica, el perfil radial del campo local tiene que ser creciente con el radio, y máximo en la pared del recinto (perfil característico de una onda de superficie). Este valor puede ser calculado a partir del modelo, utilizando el valor calculado de θ y la ec. (4.8). El resultado lo hemos representado en la figura 4.11, corroborándose en todos los casos la hipótesis de una onda de superficie, y por lo tanto, la validez del perfil J_0 de Bessel para describir a los electrones.

En las figuras 4.12-4.15 aparecen los valores medios radiales de las poblaciones de los estados excitados 4S y 4P del átomo de argón a una presión de 1 y 2 Torr en función de la densidad electrónica media. El primer hecho notable en estas gráficas es el cambio de tendencia de los estados excitados 4S según estemos en la zona de bajas o altas densidades electrónicas, mientras que los 4P siempre mantienen un comportamiento creciente. Estas tendencias se deben principalmente al fuerte acoplo que existe entre el grupo de niveles 4S y 4P; en las figuras 4.16 - 4.18 hemos representado los procesos más importantes de ganancia y pérdida a una presión de 1 Torr de los cuatro estados 4S, y los niveles $4p'[1/2]_1$ y $4p[1/2]_1$ correspondientes a los 4P. Como podemos apreciar, los niveles 4S prácticamente se pueblan por caídas radiativas de los 4P, y se despueblan mediante colisiones electrónicas de excitación a esos niveles. Así mismo, los 4P se pueblan mediante colisiones electrónicas desde los 4S, y se despueblan mediante caídas radiativas. Así, al incrementar la población electrónica, en el rango de bajas densidades, suben las poblaciones de ambos niveles, a costa de la población del nivel fundamental, debido al aumento de los procesos de excitación en el plasma. Por otra parte, en la zona de densidades más altas, existen dos factores que hacen disminuir la población de los 4S al aumentar la densidad electrónica: el descenso

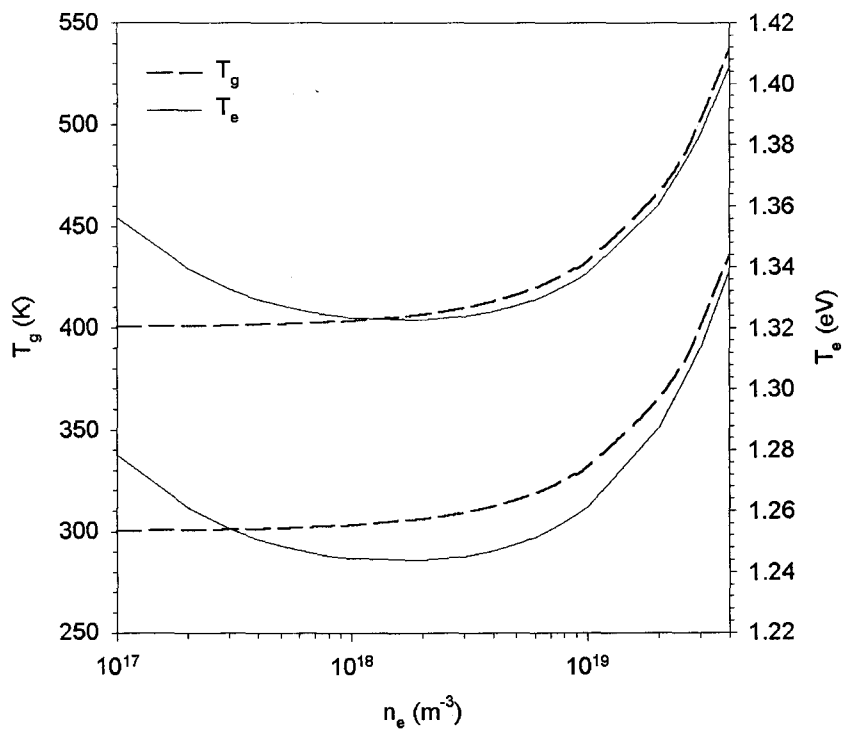


Figura 4.9: Temperatura electrónica y temperatura del gas promediada radialmente en función de la densidad electrónica, a una presión de 1 Torr y con un radio interno de 4.5 mm. Los valores de T_w son 400 K (líneas superiores), y 300 K (líneas inferiores).

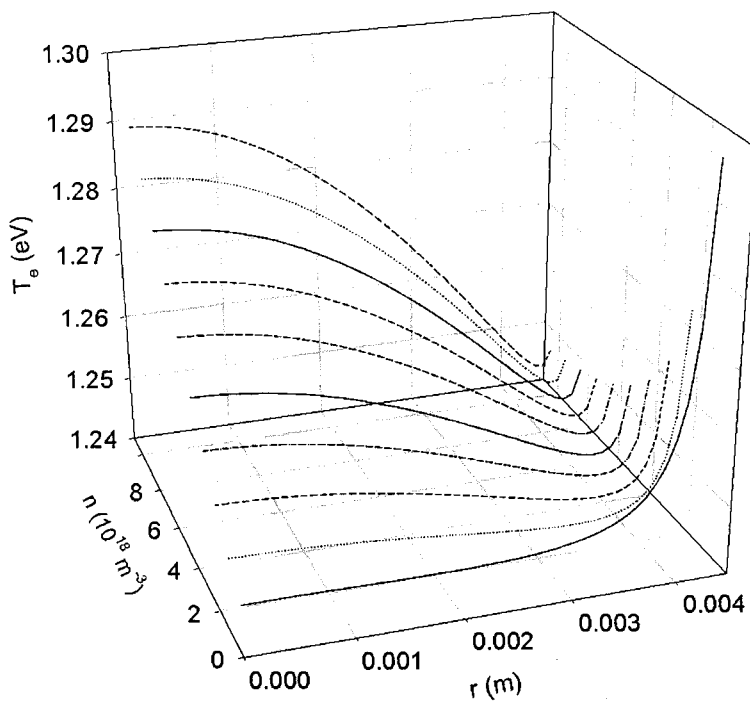


Figura 4.10: Perfil radial de la temperatura electrónica a una presión de 1 Torr. El radio del recinto es de 4.5 mm y su temperatura 300 K.

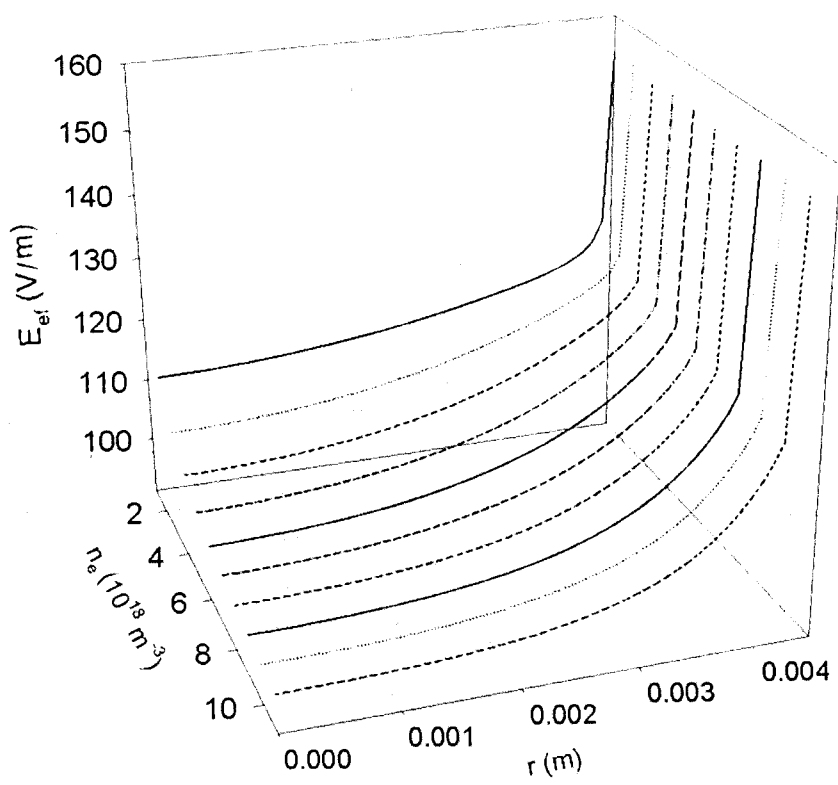


Figura 4.11: Campo local efectivo calculado a través del valor de θ y la ec. (4.8). La presión es 1 Torr, $T_w = 300$ K, y el radio 4.5 mm.

de la población total de partículas (por el aumento de la temperatura del gas), y el aumento de los procesos de excitación por colisión electrónica que despueblan estos niveles. Como consecuencia, las poblaciones de los niveles 4S disminuyen. Así mismo, los niveles 4P también se ven afectados por la disminución del número de partículas, pero en este caso, dicha disminución se compensa con el aumento de población debido a los procesos de excitación desde el 4S, y como consecuencia, su población crece.

El fuerte acoplo entre los bloques de estados 4S y 4P produce también una inversión de población en los estados 4S; el nivel energéticamente superior (y por lo tanto el más cercano a los 4P) es el 1P_1 , y, si utilizamos la relación de Boltzmann, debería ser el menos poblado; sin embargo, en la figuras 4.12 y 4.13 podemos apreciar que el menos poblado es el 3P_0 . Este hecho, comprobado experimentalmente (ver más adelante), supone una violación de las relaciones de equilibrio, siendo necesario recurrir a este tipo de modelos para reproducir estos resultados. Como podemos apreciar, este comportamiento también ocurre entre los niveles 4P.

Los resultados obtenidos sobre la cinética de los estados excitados ponen de manifiesto el rango de validez del modelo de tres niveles utilizado en el capítulo 3. En ese modelo, los niveles 4S se describían como un único bloque de niveles, y no se incluían en la descripción los niveles 4P. Así, estos niveles 4S estaban unidos cinéticamente al nivel fundamental, tanto en procesos de ganancia como de pérdida, hecho que se contradice con los resultados aquí obtenidos. De esta manera, al estar las poblaciones de los 4S mal estimadas en el modelo de tres niveles, todos los resultados que involucren una participación activa de estos estados van a llevar a resultados erróneos. De hecho, ése era el sentido de incluir dicho nivel efectivo en la descripción, es decir, era un nivel que proporcionaba una estimación de lo importante que eran los estados excitados en los procesos de ionización, por lo que, a medida que dicho nivel cobrase más peso en la cinética se indicaba la necesidad de una descripción más completa del esquema de niveles energéticos del argón.

También, una de las ventajas que ofrecía el modelo de tres niveles era la de calcular la relación entre la densidad electrónica y la temperatura electrónica de manera fácil y sencilla. Sin embargo, en el modelo completo, la importancia de los niveles 4S y 4P en la ionización es bastante alta (figuras 4.19 y 4.20), por lo que, en el rango en el que hemos resuelto este modelo no es aplicable el modelo de tres niveles.

Otro resultado que se pone de manifiesto en las figuras 4.19 y 4.20 es que el peso de la ionización cambia del nivel 4S al 4P a medida que se aumenta la densidad electrónica; en este caso, se confirman los resultados de Fujimoto que hemos utilizado en los capítulos 2 y 3 [26]. Así, en este rango de presiones nos encontramos con que la contribución del nivel fundamental a la ionización es despreciable, encontrándonos en una situación ESB donde los estados excitados juegan el papel dominante en la ionización, y que, a medida que aumenta la den-

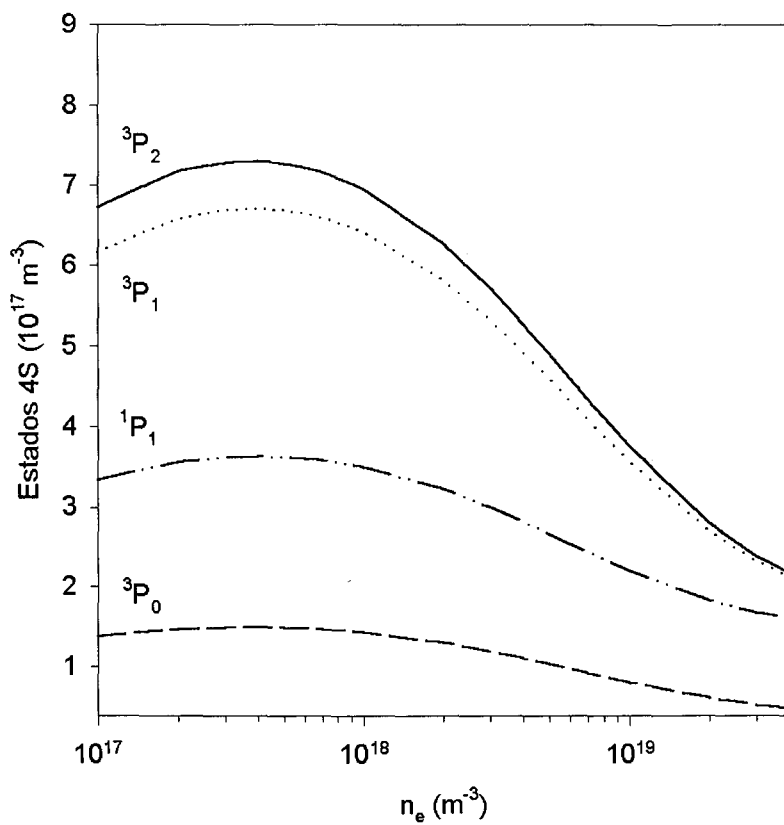


Figura 4.12: Población de los estados excitados 4S según el modelo, a una presión de 1 Torr y a una temperatura en la pared de 300 K. El radio del recinto es 4.5 mm.

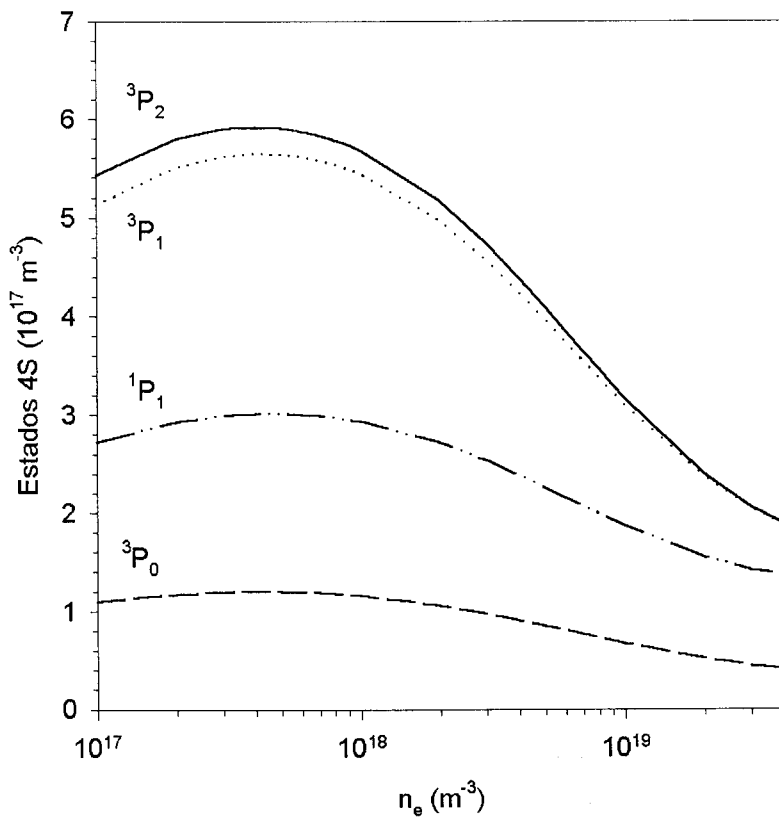


Figura 4.13: Población de los estados excitados 4S según el modelo, a una presión de 2 Torr y a una temperatura en la pared de 350 K. El radio del recinto es 4.5 mm.

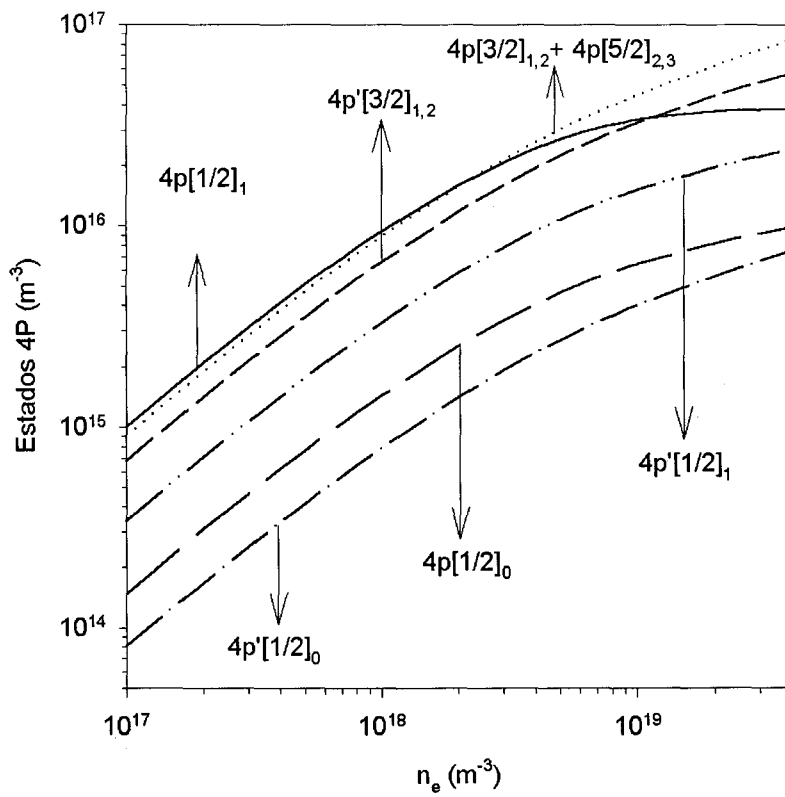


Figura 4.14: Población de los estados excitados 4P según el modelo, a una presión de 1 Torr y a una temperatura en la pared de 300 K. El radio del recinto es 4.5 mm.

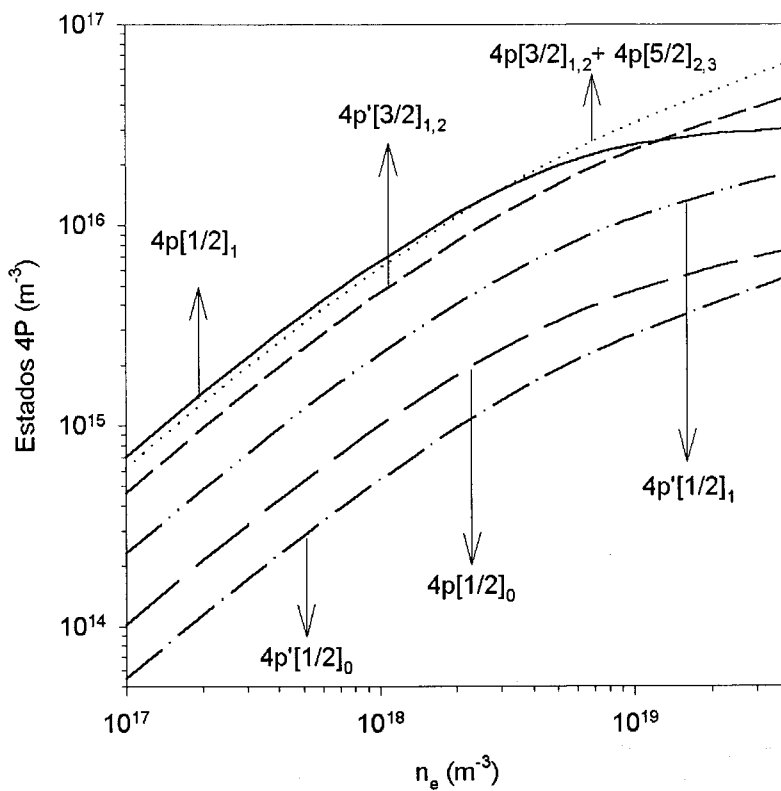


Figura 4.15: Población de los estados excitados 4P según el modelo, a una presión de 2 Torr y a una temperatura en la pared de 350 K. El radio del recinto es 4.5 mm.

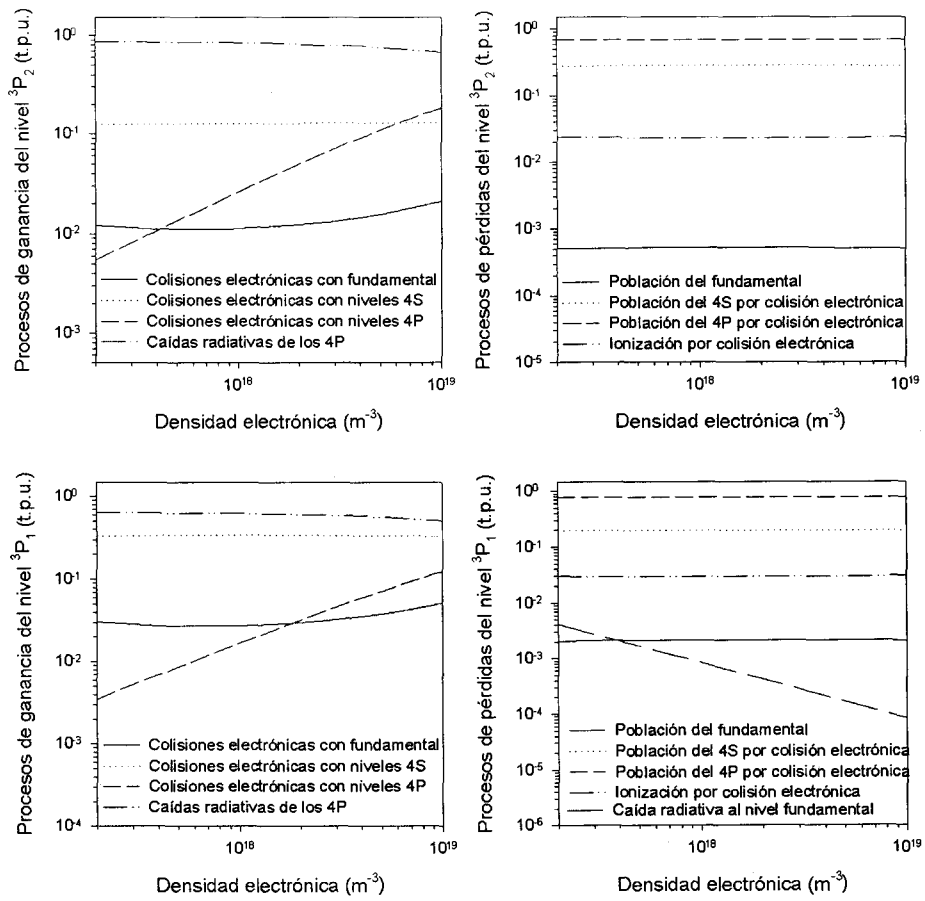


Figura 4.16: Procesos más importantes de ganancias y pérdidas de los niveles 3P_2 y 3P_1 según el modelo a 1 Torr, $T_w = 300 \text{ K}$ y $R_{in} = 4.5 \text{ mm}$.

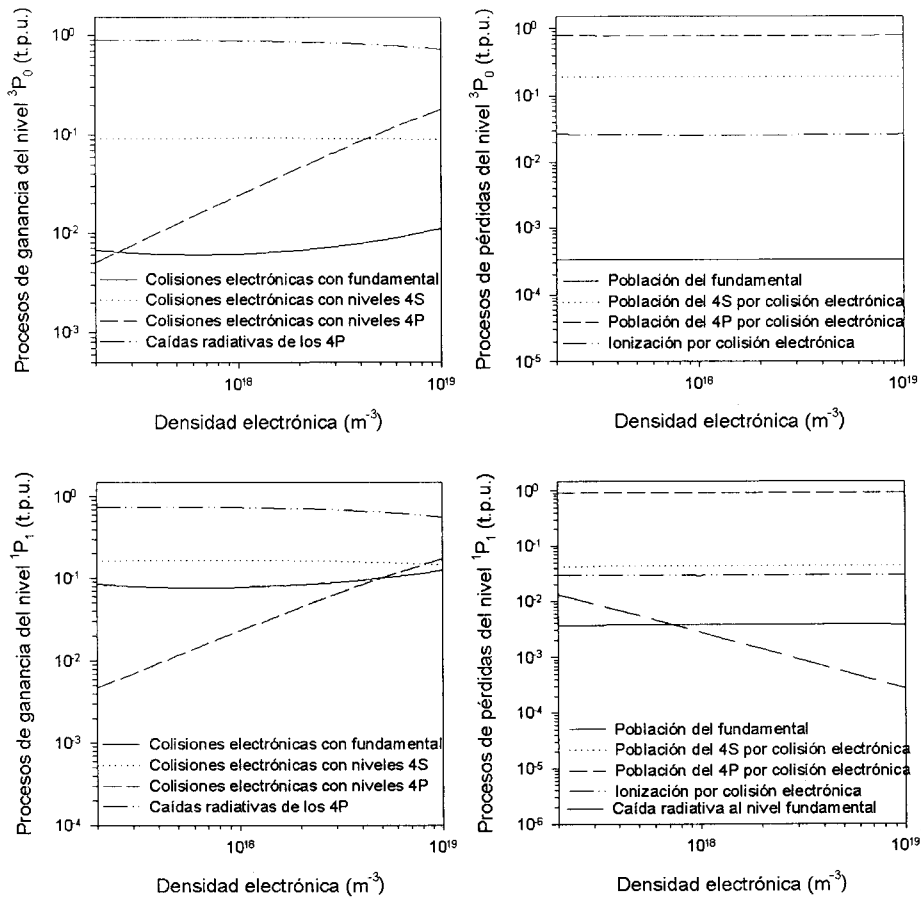


Figura 4.17: Procesos más importantes de ganancias y pérdidas de los niveles 3P_0 y 1P_1 según el modelo a 1 Torr, $T_w = 300$ K y $R_{in} = 4.5$ mm.

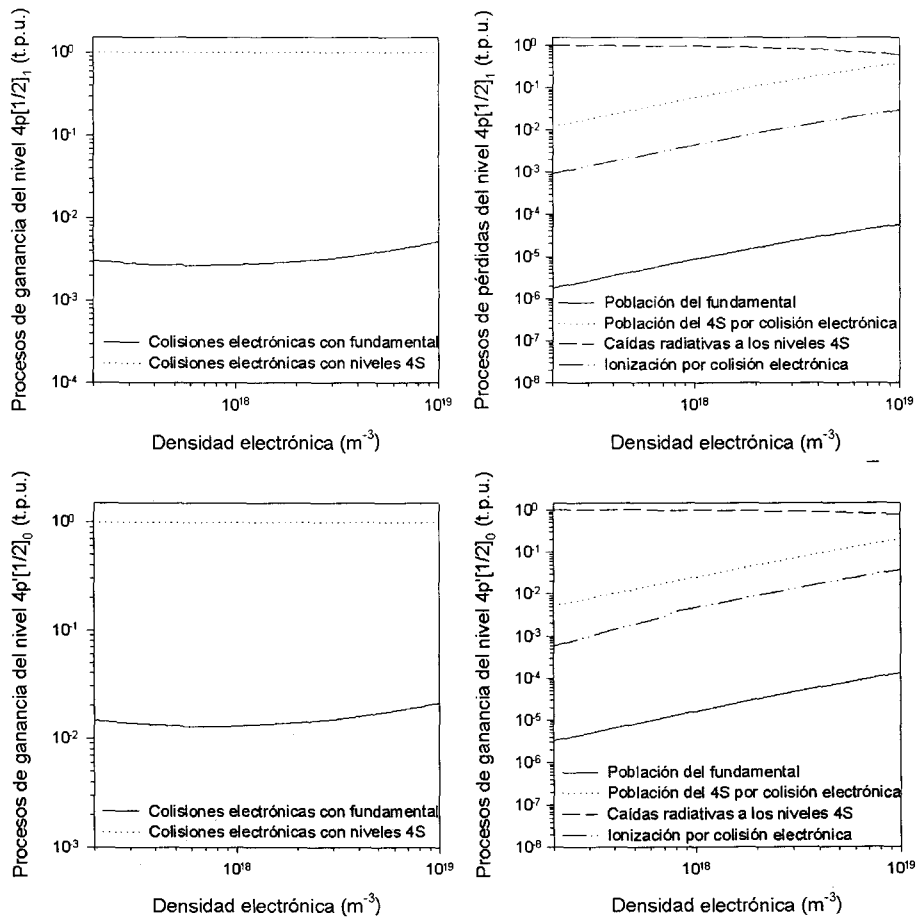


Figura 4.18: Procesos de ganancias y pérdidas para los niveles $4p[1/2]_1$ y $4p'[1/2]_0$ según el modelo a una presión de 1 Torr, $T_w = 300$ K, y $R_{in} = 4.5$ mm.

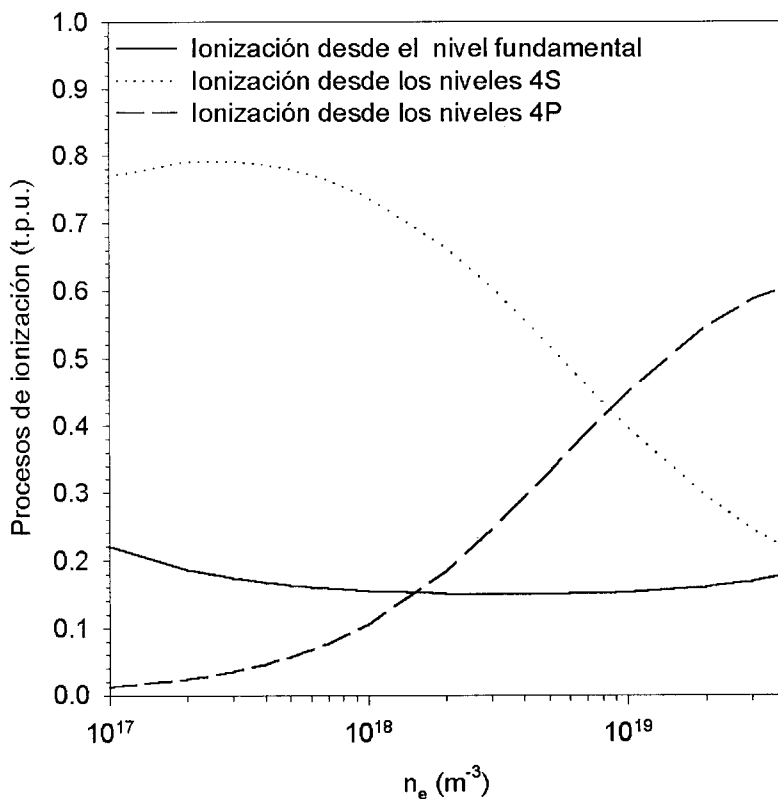


Figura 4.19: Contribución a la ionización de los diferentes bloques de niveles según el modelo para una presión de 2 Torr, $T_w = 400$ K y $R_{in} = 4.5$ mm.

sidad electrónica se pasa paulatinamente a otra situación de saturación completa, donde los mecanismos de ionización pasan por un trasiego 4S-4P y 4P-ionización, es decir, en el comienzo de un mecanismo de excitación "en escalera".

En las figuras 4.21 y 4.22 hemos representado el perfil radial típico que presentan los estados excitados 3P_2 y el $4p[1/2]_1$. El perfil que presenta el estado 3P_2 es el mismo que presentan el resto de los estados 4S, es decir, creciente con el radio (al contrario que la temperatura del gas), excepto en la zona cercana a la pared donde la densidad electrónica es tan pequeña que los efectos térmicos son despreciables. Así mismo, el perfil de los estados 4P es el mismo que el $4p[1/2]_1$, siguiendo a la densidad electrónica en un perfil decreciente con el radio. Obviamente todos los perfiles radiales que se obtienen en el modelo dependen fuertemente del perfil de densidad electrónica que se ha supuesto, por lo que este cálculo será válido mientras se cumpla que el perfil electrónico sea del tipo J_0 .

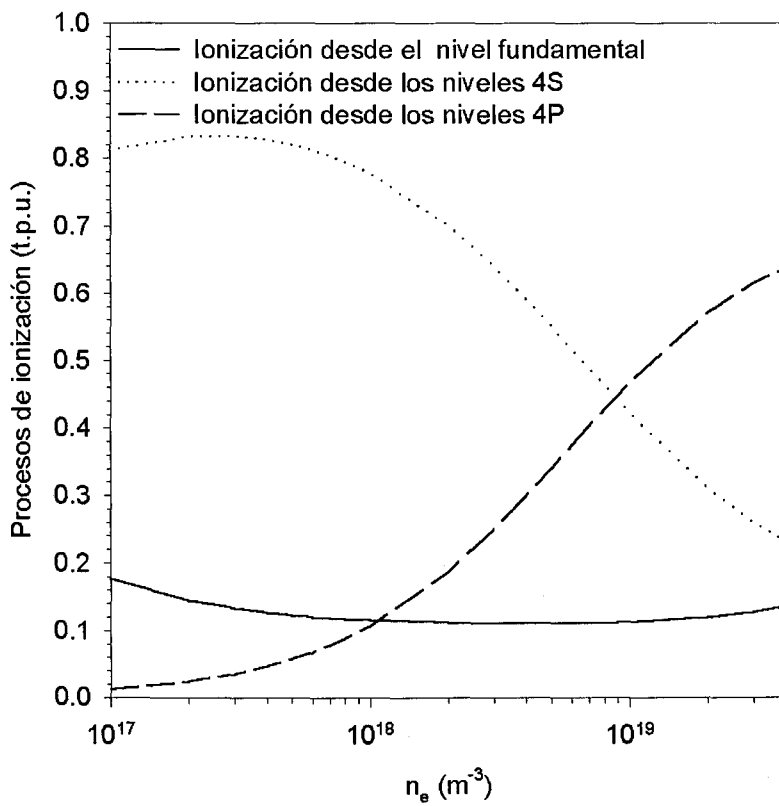


Figura 4.20: Contribución a la ionización de los diferentes bloques de niveles según el modelo para una presión de 2 Torr, $T_w = 350$ K y $R_{in} = 4.5$ mm.

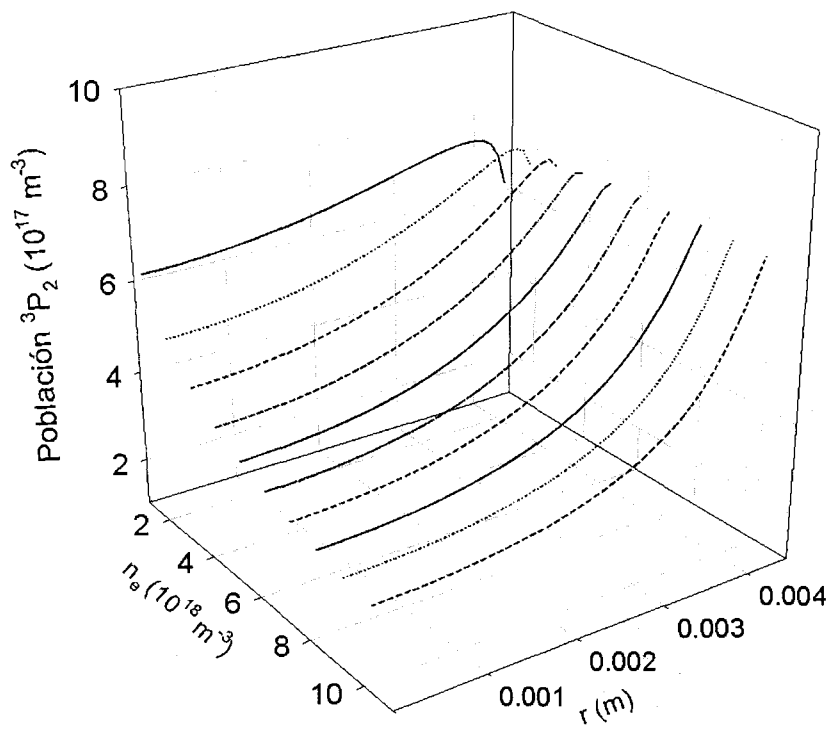


Figura 4.21: Perfil radial de los estados excitados 3P_2 y $4p[1/2]_1$ para varios valores de la densidad electrónica media a 1 Torr, $T_w = 300$ K y $r = 4.5$ mm.

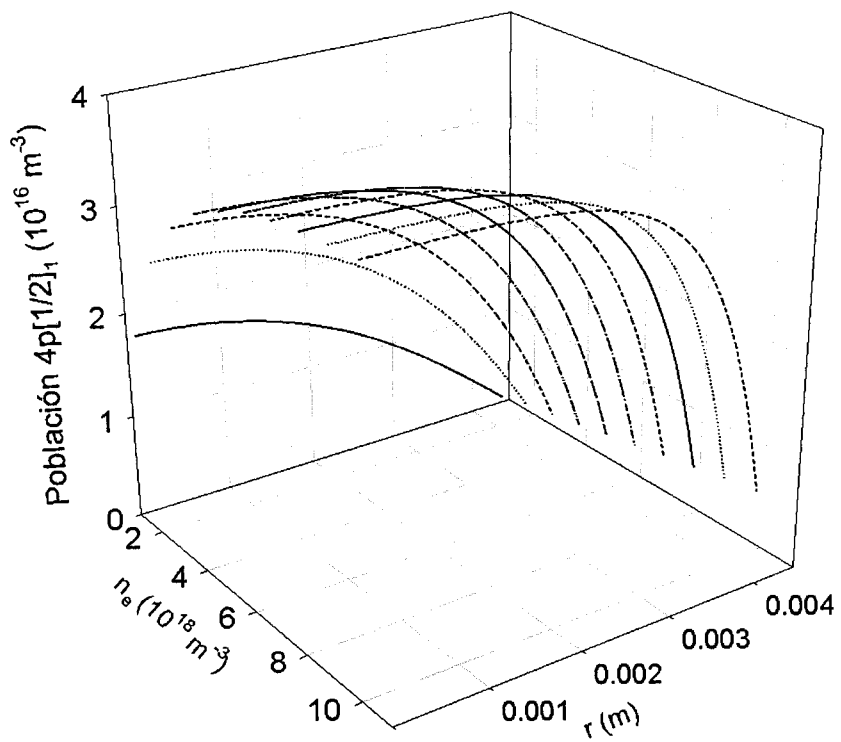


Figura 4.22: Perfil radial del estado excitado $4p[1/2]_1$ en función de la densidad electrónica. La presión es 1 Torr, $T_w = 300 \text{ K}$ y el radio 4.5 mm.

4.4.5 Comparación con datos experimentales

En capítulo 2 obtuvimos la temperatura electrónica a diferentes presiones, y se mostró que la cinética del plasma estaba en una situación ESB. En este capítulo se ha desarrollado un modelo de argón donde los estados excitados más importantes se han incluido en la descripción, por lo que dichos resultados deben corresponderse con los obtenidos por el modelo en el rango donde la aproximación maxwelliana sea válida. En la figura 4.23 hemos representado los resultados teóricos para un amplio rango de densidades electrónicas, las temperaturas del vidrio se han tomado 300 K para todos los casos (tal y como se obtuvo en las medidas experimentales de la temperatura del gas). Como podemos apreciar, los resultados obtenidos para los casos de 1.8 y 2.8 Torr (aproximadamente 1.2 y 1.1 eV respectivamente), son bastante cercanos a los experimentales, y además en el rango de densidades donde cabría esperar los resultados, mientras que en los casos de 0.8 y 1.1 Torr (1.6 y 1.4 eV, respectivamente) los resultados son peores aunque están dentro de la barra de error del 20%.

Respecto a los estados excitados, los resultados experimentales que se han encontrado en la bibliografía añaden un problema al modelo, y es que existe evidencia experimental de autoabsorción para las caídas radiativas de los niveles 4P a los 4S [30]. Ésto, en el modelo, se traduciría en que los factores de escape de cada transición 4P-4S han de ser menores que 1. La introducción de dichos factores modificaría las soluciones de las poblaciones de los estados excitados, aunque el fuerte acoplo colisional-radiativo entre ellos, haría que ese exceso-defecto de población se compensase de nuevo entre todos los niveles.

Hasta el momento, no se han encontrado referencias en la bibliografía que indiquen algún valor experimental de dichas transiciones en general, aunque sí para transiciones en particular (ver más adelante), añadiendo más complejidad al problema ya que los resultados indican que dichos factores de escape dependen de la presión y de la densidad electrónica.

En el terreno teórico, en la referencia [31] se aborda el problema de las caídas radiativas del 4P al 4S y se propone una ecuación para calcular su factor de escape. El problema de dicho trabajo es que todos esos coeficientes salen por encima de 0.97 (es decir, prácticamente sin autoabsorción), y contradice los resultados experimentales que se han obtenido hasta la fecha [30].

A continuación vamos a comparar los resultados del modelo con los valores experimentales de las poblaciones de los niveles 4S y 4P, suponiendo, en principio, un factor de escape de 1 para todas las transiciones, estudiando su posible influencia en los resultados.

En las figuras 4.24 y 4.25 hemos comparado los resultados experimentales con los datos teóricos para una presión de 1.8 y 2.8 Torr. Como podemos observar, los resultados teóricos se aproximan bastante bien al comportamiento experimental, teniendo en cuenta que el error de estos datos está sobre el 20%. Este acuerdo pone de manifiesto que, a pesar de existir autoabsorción en las transiciones 4P-4S,

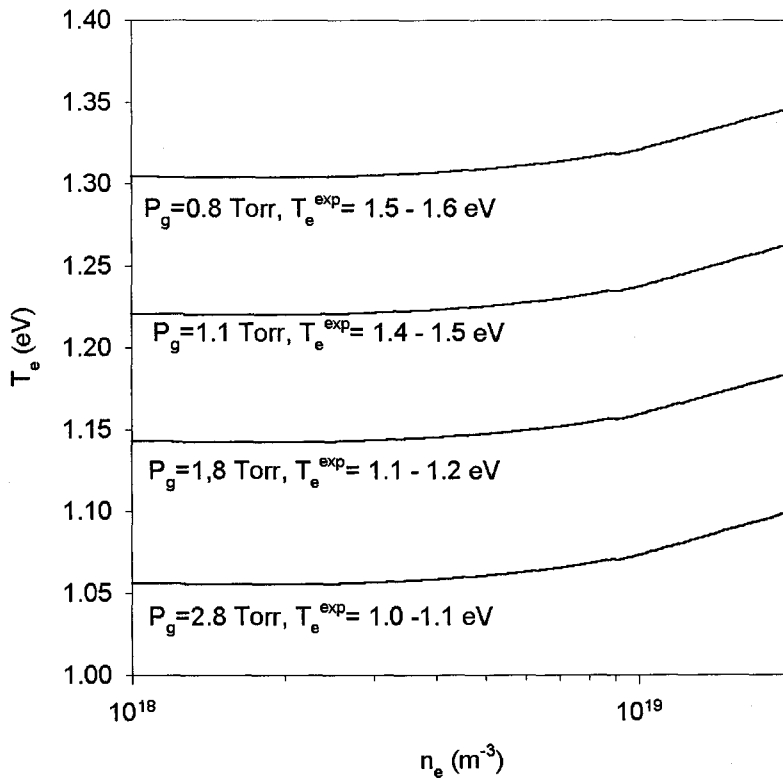


Figura 4.23: Resultados teóricos para la temperatura electrónica en los casos estudiados en el capítulo 2. Los valores experimentales son aproximadamente, $T_e(0.8 \text{ Torr}) = 1.6 \text{ eV}$, $T_e(1.1 \text{ Torr}) = 1.4 \text{ eV}$, $T_e(1.8 \text{ Torr}) = 1.2 \text{ eV}$ y $T_e(2.8 \text{ Torr}) = 1.1 \text{ eV}$.

el fuerte acoplo colisional con los 4P, y el que existe entre ellos mismos, reparte de nuevo esos electrones entre todos los niveles. También, existe una diferencia importante entre nuestros datos y los experimentales, y es que los estados 1P_1 y 3P_1 aparecen cambiados. Este desacuerdo es achacable a la autoabsorción, puesto que en el modelo, si se varían los factores de escape se puede reproducir dicho intercambio.

En la figura 4.26 hemos representado la población del nivel $4p'[3/2]$ por unidad de peso estadístico. Como podemos observar, los resultados se aproximan muy bien al comportamiento experimental, a pesar de no incluir la autoabsorción en nuestro modelo. La mayor discrepancia aparece en la zona de altas densidades donde parece que experimentalmente se llega a una saturación de los estados excitados, mientras que el modelo no predice esa comportamiento. Esta diferencia se puede achacar a dos efectos importantes, a que no se ha incluido la autoabsorción, y la existencia de niveles excitados superiores que contribuyen en los mecanismos de excitación en escalera, típicos de altas densidades electrónicas. Como veíamos en las figuras 4.19 y 4.20, a medida que aumentaba la densidad electrónica los estados 4P eran más importantes en los mecanismos de ionización. Es de esperar, por lo tanto que en el rango de densidades electrónicas altas, los niveles excitados superiores estén acoplados a los 4P, para producir los mecanismos típicos de excitación en escalera.

De esta manera, hemos constatado que en la zona donde la aproximación maxwelliana es válida, el modelo ajusta correctamente con los resultados experimentales, y se pone de manifiesto el importante papel que juega el calentamiento del gas en la cinética del plasma.

4.5 Resumen

En este capítulo hemos desarrollado un modelo colisional-radiativo unidimensional de once niveles de un plasma de argón mantenido por OS a baja presión, incluyendo una ecuación de balance de energía para el plasma que ha posibilitado conocer la temperatura del gas. En todos los casos estudiados nos hemos ceñido a las condiciones donde el modelo se simplifica, pudiendo utilizar funciones de distribución maxwellianas. De esta manera nos hemos ceñido a las condiciones del capítulo 2, donde se ha mostrado que esta aproximación es válida.

Así se ha encontrado que la temperatura del gas viene determinada por la densidad de electrones y por la potencia elástica que éstos ceden a las partículas neutras. Así, se ha mostrado que, a densidades electrónicas altas, sus efectos modifican los resultados del modelo, cambiando la tendencia de la temperatura electrónica al variar la densidad electrónica, y por lo tanto, alterando todas las propiedades de la descarga.

Los perfiles radiales se han calculado suponiendo un perfil Bessel, J_0 , de la densidad electrónica, que permite obtener la dependencia radial de todas las can-

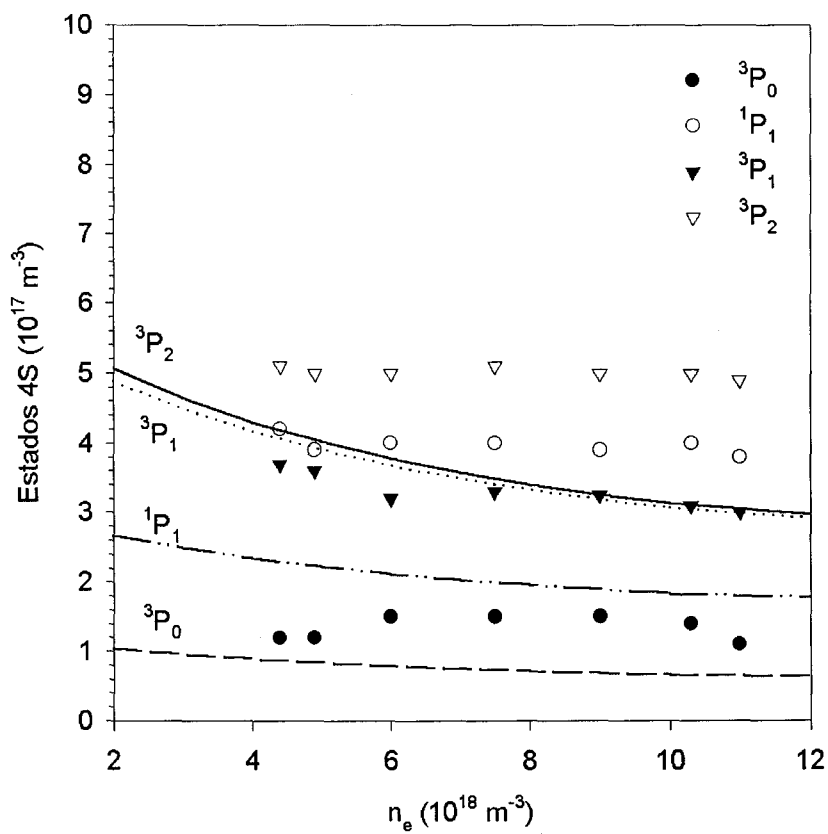


Figura 4.24: Comparación entre los resultados del modelo y datos experimentales sobre los estados 4S, a una presión de 1.8 Torr, un radio de 4.5 mm, y una temperatura en la pared de 300 K.

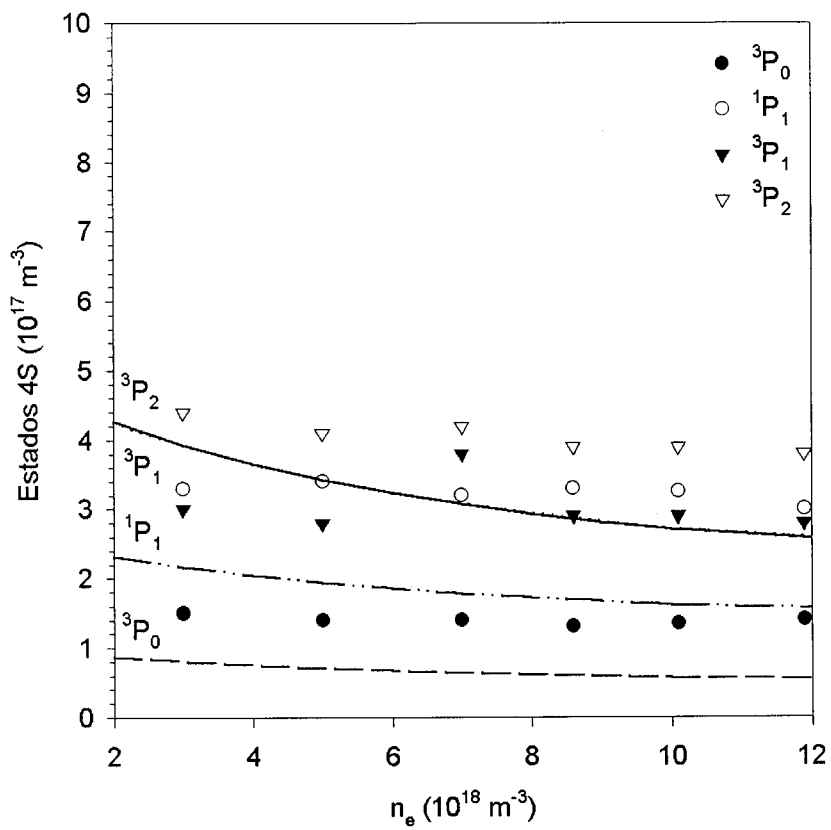


Figura 4.25: Comparación entre los resultados del modelo y datos experimentales sobre los estados 4S, a una presión de 2.8 Torr, un radio de 4.5 mm, y una temperatura en la pared de 300 K.

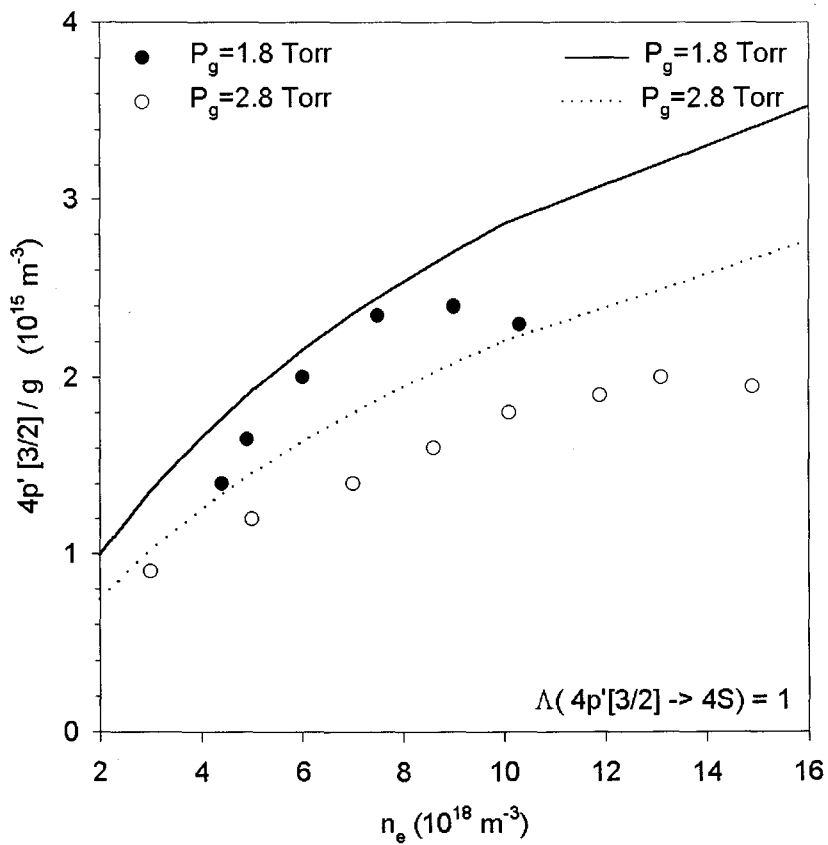


Figura 4.26: Comparación entre los resultados del modelo y datos experimentales sobre los estados $4P$, a las presiones de 1.8 y 2.8 Torr, en un recinto de radio 4.5 mm, y una temperatura en la pared de 300 K.

tidades características del plasma. Se ha encontrado que los estados excitados 4S se comportan como la densidad del gas neutro, excepto cuando la densidad electrónica es muy baja. Por otra parte, se ha encontrado que los niveles excitados 4P siguen el mismo comportamiento que la densidad electrónica. Estas dependencias con la densidad electrónica puede ser también extrapoladas axialmente en la descarga, por lo que los efectos del calentamiento del gas deben ser tenidos en cuenta en cualquier modelo, ya sea radial o axial.

Por otra parte, se ha obtenido una expresión lineal aproximada que relaciona la temperatura del gas con la temperatura del recinto que rodea al plasma y con el producto de la densidad electrónica y la potencia cedida en procesos elásticos entre electrones y neutros. Dicha expresión conduce a otra que permite utilizar cantidades que se pueden medir directamente en un laboratorio, como la longitud del plasma y la potencia incidente. De esta manera, se ha ideado un método experimental para estimar la temperatura media de la descarga, mediante la aproximación de un fluido en régimen laminar, y se ha comprobado la validez de dicha ecuación.

Por último, se han comparado los resultados del modelo con los resultados obtenidos en el capítulo 2 sobre la temperatura electrónica, y con otras mediciones sobre la población de los estados excitados 4S y 4P. Los resultados sobre la temperatura electrónica del modelo arrojan muy buenos resultados en los casos de presión 1.8 y 2.8 Torr, mientras que en los casos de 0.8 y 1.1 Torr, se cometía bastante error al estar en el límite de la aproximación maxwelliana. Respecto a la población de los estados excitados, existe una gran problemática debido a la evidencia experimental de la existencia de autoabsorción de las transiciones radiativas entre los niveles 4P y 4S. Al resolver el modelo sin incluir la autoabsorción se han obtenido buenos resultados, por lo que todo parece indicar que el fuerte acoplo colisional-radiativo entre los niveles 4S y 4P vuelve a distribuir esa carencia/exceso de electrones que produciría la introducción del transporte radiativo en las ecuaciones. De esta manera se han obtenido buenos ajustes entre los datos experimentales sobre la población de estos niveles, y los datos teóricos.

Bibliografía

- [1] E. Benova, Ts. Petrova, A. Blagoev and I. Zheliazkov, *J. Appl. Phys.* **59**, 1466 (1986).
- [2] Ts. Petrova, E. Benova, G. Petrov and I. Zheliazkov, *Phys. Rev. E* **60**, 875 (1999).
- [3] C. Lao, A. Gamero, A. Sola, Ts. Petrova, E. Benova, G. M. Petrov and I. Zheliazkov, *J. Appl. Phys.* **87**, 7652 (2000).
- [4] L. Paquin, D. Masson, M. R. Wertheimer and M. Moisan, *Can. J. Phys.* **63**, 831 (1985).
- [5] C. F. M. Borges, S. Schelz, L. Martin and M. Moisan, *Diamond and Relat. Matter* **4**, 149 (1995).
- [6] G. Sauvé, M. Moisan, J. Paraszczak and J. Heidenreich, *Appl. Phys. Lett.* **53**, 470 (1988).
- [7] R. Claude, M. Moisan and M. R. Wertheimer, *Appl. Phys. Lett.* **50**, 1797 (1987).
- [8] S. Moreau, M. Moisan, M. Tabrizian, J. Barbeau, J. Pelletier, A. Ricard and L. H. Yahia, *J. Appl. Phys.* **88** (2), 1166 (2000).
- [9] J. R. Welty, C. E. Wicks, R. E. Wilson and G. Rorrer, *Fundamentals of momentum, heat and mass transfer* (Wiley, New York, 2001), p. 219.
- [10] C. M. Ferreira, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **22**, 705 (1989).
- [11] Z. Zakrzewski, M. Moisan, V. M. M. Glaude, C. Beadry and P. Leprince, *Plasma Phys.* **19**, 77 (1977).
- [12] M. Böbe, G. Himmel, I. Koleva and M. Schlüter, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **32**, 2426 (1999).
- [13] M. Mitchner and Charles H. Kruger, *Partially ionized Gases* (Wiley, New York, 1973), p. 426.

- [14] A. Palmero, J. Cotrino, A. Barranco and A. G. Rodriguez-Elipe, *Phys. of Plasmas* **9**, 358-363 (2002)
- [15] Yu. B. Goluboskii, *Sov. Phys. Tech. Phys.* **24** (2), 173 (1979).
- [16] C. M. Ferreira and J. Loureiro, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **16**, 2471 (1983).
- [17] S. Nowak, J. A. M. van der Mullen, B. van der Sijde and D. C. Schram, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **41**, 177 (1989).
- [18] H. A. G. Fey, W. W. Stoffels, J. A. M. van der Mullen, B. van der Sijde, and D. C. Schram, *Spectrochim. Acta B* **46**, 885 (1991).
- [19] A. Bogaerts, R. Gijbels and J. Vlcek, *J. Appl. Phys.* **84**, 121 (1998).
- [20] T. Holstein, *Phys. Rev.* **72**, 1212 (1947); T. Holstein, *Phys. Rev.* **83**, 1159 (1951).
- [21] T. Fujimoto, *J. Quant. Spec. Rad. Trans.* **21**, 439 (1979).
- [22] Z. Zakrewski, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **16**, 171 (1983).
- [23] Cotrino J, Sáez M, Quintero M C, Menéndez A, Uria E S and Sanz-Medel A *Spectrochimica Acta B* **47** 425 (1992)
- [24] Landau L and Lifshitz. *Course of theoretical physics; Vol. 6: Fluid Mechanics*. Edt. Pergamon (1987).
- [25] Chapman S and Cowling T G *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases* (Cambridge University Press, Cambridge, 1970) p 228 and 233 (1970)
- [26] T. Fujimoto, *J. Phys. Soc. Japan* **47**, 273 (1979).
- [27] J. Cotrino, A. Palmero, A. Barranco and A. G. Rodriguez-Elipe, enviado a publicar.
- [28] Golubovskii Y and Sonneburg R. *Zh. Tekh. Fiz.* **49**, 295 (1979) [*Sov. Phys. Tech. Phys.* **24**, 173 (1979)] C M and Moisan M. NATO ASI series B. Vol. 302
- [29] G. M. Petrov and C.M. Ferreira, *Phys. Rev. E* **59**, 3571 (1999).
- [30] C. Lao, *Caracterización de plasmas de argón producidos por ondas de superficie de alta frecuencia a presiones medias*, Tesis Doctoral 1998, Universidad de Sevilla.
- [31] K. Kano, M. Suzuki and H Aakatsuka, *Plasma Sour. Sci. Tech.* **9**, 314-322 (2000).

Capítulo 5

Modelo global de un plasma de oxígeno orientado a la diagnosis mediante espectroscopía óptica de emisión

5.1 Objetivo

En este capítulo vamos a desarrollar un modelo de oxígeno que nos va a permitir conocer las poblaciones de las especies más importantes en una descarga a baja presión, y en donde las dimensiones del recinto permita una descripción espacialmente homogénea de las poblaciones. También, se va a mostrar la importancia del material que compone el recipiente del plasma, ya que su temperatura determina la probabilidad de recombinación en la pared del oxígeno atómico, cuyo valor es muy importante en las soluciones del modelo.

De esta manera, se han obtenido valores de γ en un recinto de cuarzo mediante datos experimentales, y se ha conseguido caracterizar una descarga producida a alta frecuencia en un sistema SLAN con ECR. Por último, hemos acoplado al modelo global otro colisional-radiativo sobre el oxígeno atómico, relacionando las soluciones de ambos modelos con las intensidades de las líneas $\lambda_{777} = 777.4$ nm y $\lambda_{844} = 844.6$ nm del oxígeno atómico.

5.2 Introducción

En los últimos años han aparecido un gran número de trabajos describiendo las propiedades de los plasmas de oxígeno producidos a baja presión [1, 2]. Este interés se debe principalmente al continuo desarrollo de aplicaciones industriales, como son el tratamiento de superficies, oxidaciones, grabado (etching) de polímeros, fuentes de iones, etc... [3, 4, 5] Así mismo, la demanda industrial so-

bre esta tecnología requiere trabajar con grandes volúmenes de plasma en los que domine una determinada especie, según la conveniencia, distribuida uniformemente en toda la descarga.

Hace algunos años, el rango de frecuencia de trabajo en condiciones experimentales era el de las radiofrecuencias (RF) [6, 7], sin embargo, hoy en día, el uso de fuentes de microondas resulta mucho más común debido a su bajo coste, y a que existen diferentes métodos industriales destinados a producir un alto grado de absorción de potencia en estas condiciones.

Dentro de los dispositivos que se han desarrollado para producir plasmas de gran volumen, el SLAN (slot-antenna) ha supuesto uno de los mayores avances a la hora de generar descargas a baja presión. Los beneficios que aporta este dispositivo provienen del hecho de que

- la potencia se inyecta mediante un grupo de antenas equidistantes perpendiculares al vector de propagación de la onda,
- se consigue repartir la potencia incidente alrededor de todo el plasma,
- aparece una onda de superficie, y
- se obtiene una gran eficiencia del dispositivo al poderse ajustar la impedancia fácilmente.

Además de las ventajas que presenta el dispositivo SLAN por su propio diseño, experimentalmente se puede conseguir ampliar el rango de presiones de trabajo del dispositivo mediante la incorporación de un sistema ECR (resonancia ciclotrónica electrónica), con el que se pueden generar plasmas a presiones inferiores a 10^{-5} Torr, manteniendo una cantidad bastante alta de iones y electrones [8].

Dependiendo de la aplicación en particular que se le dé a la descarga de oxígeno, la población de una especie en particular, o su energía, puede resultar determinante a la hora de evaluar la eficiencia de dicho plasma en una determinada aplicación. De esta manera, se han desarrollado diversas técnicas destinadas a medir las propiedades del plasma, ya sea en su interior o en zonas algo alejadas de él (downstream), mediante técnicas asociadas a sondas de Langmuir, espectrometría de masas, espectroscopía de emisión y técnicas de espectroscopía con laser. Sin embargo, en determinadas situaciones, la medición de todas las poblaciones de la descarga, así como sus energías, resulta muy difícil, mientras que existen cantidades que son, a su vez, relativamente fáciles de medir. De esta manera, en general, lo que se suele hacer en estos casos es construir modelos de la descarga que relacionen los datos difíciles de medir, con los que se pueden conocer fácilmente.

En este capítulo de la tesis vamos a desarrollar un modelo para obtener todas las poblaciones de las diferentes especies de la descarga, a partir del conocimiento

del cociente de dos líneas de emisión del oxígeno atómico. Así mismo, el estudio de la descarga lo haremos evitando en todo momento la descripción espacial, por lo que vamos a optar por un modelo global, promediando los perfiles radiales de las especies.

5.3 Modelo

5.3.1 Absorción de potencia en el plasma de oxígeno

Como se ha visto en el capítulo 3, el sistema SLAN inyecta la potencia al plasma mediante una serie de antenas colocadas alrededor de él, y dependiendo de cómo ésta se absorba nos encontraremos con diferentes comportamientos al variar la presión, la potencia, etc. De una forma aproximada, la potencia absorbida por el plasma se puede escribir como [9]

$$\langle P \rangle_{abs}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \frac{n_e(\vec{r}) e^2}{m_e \nu_c} |E_{ef}(\vec{r})|^2, \quad (5.1)$$

donde $\langle P \rangle_{abs}(\vec{r})$ es la densidad de potencia absorbida promediada en el tiempo, $E_{ef}(\vec{r})$ el campo local efectivo, $n_e(\vec{r})$ la densidad electrónica, ν_c la frecuencia elástica de transferencia de cantidad de movimiento de los electrones, e la carga del electrón y m_e su masa. Si se aplica un campo magnético externo constante, B , la expresión para el campo eléctrico efectivo es

$$|E_{ef}(\vec{r})|^2 = \frac{\nu_c^2}{2} \left(\frac{1}{\nu_c^2 + (\omega^2 - \omega_c^2)} + \frac{1}{\nu_c^2 + (\omega^2 + \omega_c^2)} \right) |E(\vec{r})|^2, \quad (5.2)$$

donde $E(\vec{r})$ es el campo eléctrico, ω su frecuencia, y $\omega_c = eB/m_e$ la frecuencia ciclotrónica electrónica.

Así, en condiciones ECR ($\omega = \omega_c$) se tiene que

$$|E_{ef}(\vec{r})|^2 = \left(\frac{\nu_c^2 + \omega_c^2}{\nu_c^2 + 2\omega_c^2} \right) |E(\vec{r})|^2, \quad (5.3)$$

y, por lo tanto, se dan tres zonas de presión características.

- Para presiones muy bajas ($\nu_c \ll \omega_c$) se cumplirá que la absorción de potencia se podrá escribir como

$$|E_{ef}(\vec{r})|^2 = \frac{1}{2} |E(\vec{r})|^2 \quad \nu_c \ll \omega_c,$$

mientras que si no hubiese sistema ECR, a partir de la ec. (5.2), se obtiene que la forma que tendría sería

$$|E_{ef}(\vec{r})|^2 = \frac{\nu_c^2}{\omega^2} |E(\vec{r})|^2 \quad \nu \ll \omega,$$

siendo ν_c^2/ω^2 mucho menor que $1/2$. De esta manera, se puede comprobar cómo, dada una densidad electrónica, el sistema ECR aumenta la efectividad de absorción de la potencia en el plasma, haciendo que los electrones absorban más potencia de la onda y, por lo tanto, cedan más potencia al resto de las partículas mediante procesos elásticos e inelásticos.

- Para presiones intermedias, donde se cumple la condición $\nu_c \simeq \omega_c$, la absorción de potencia vendrá dada por la ec. (5.3). Así cuando $\nu_c = \omega_c$ se cumple

$$|E_{ef}(\vec{r})|^2 = \frac{2}{3} |E(\vec{r})|^2 \quad \nu_c = \omega_c,$$

aumentando la efectividad del dispositivo respecto a la zona de baja presión. Si no hubiese ECR se tendría

$$|E_{ef}(\vec{r})|^2 = \frac{1}{2} |E(\vec{r})|^2 \quad \nu_c = \omega,$$

con lo que, para este rango de presiones, la eficiencia es mejor con el sistema ECR.

- Para la zona de altas presiones ($\nu_c \gg \omega_c$) se tiene que

$$|E_{ef}(\vec{r})|^2 = |E(\vec{r})|^2, \quad \nu_c \gg \omega_c, \omega$$

tanto si actúa el sistema ECR como si no. En esta zona de presiones se dice que el sistema ECR ha dejado de tener efecto sobre el plasma.

Como podemos comprobar, el sistema ECR es conveniente si se trabaja a presiones bajas ($\nu_c \ll \omega_c$), y medias ($\nu_c \simeq \omega_c$), y deja de tener efecto en la zona de presiones altas. La condición $\nu_c = \omega_c$ se cumple en el oxígeno cuando se llega a una presión de aproximadamente $3 \cdot 10^{-3}$ Torr (figura 5.1), y la ec. (5.1) tiene un máximo para ese valor [9].

Por otra parte, se ha medido la dependencia radial de las especies del plasma al variar la presión. Así, para presiones bajas se obtiene que éste ocupa casi todo el volumen (figura 5.2c), y, a medida que se aumenta la presión, manteniendo la potencia constante, se va concentrando cada vez más en las paredes (figuras 5.2b y c).

Así mismo, los perfiles radiales electrónicos se han conseguido medir en diferentes situaciones para el oxígeno y otros gases [10], y se obtienen desde perfiles prácticamente planos a perfiles máximos en la pared y mínimos en el centro, y viceversa. En la figura 5.3 hemos representado el perfil radial típico de la densidad electrónica en dos situaciones a una presión de 0.075 y 0.4 Torr, utilizando una potencia de 1.5 kW [11]. En el primer caso nos encontramos con un perfil

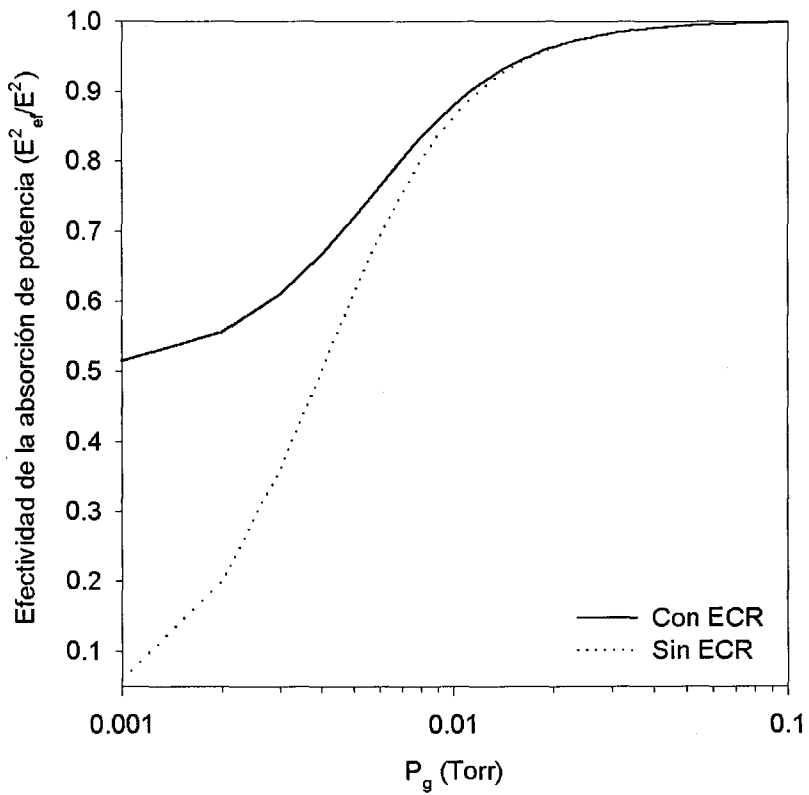


Figura 5.1: Estimación de la efectividad del proceso de absorción de potencia en condiciones ECR y sin ECR para un plasma de oxígeno.

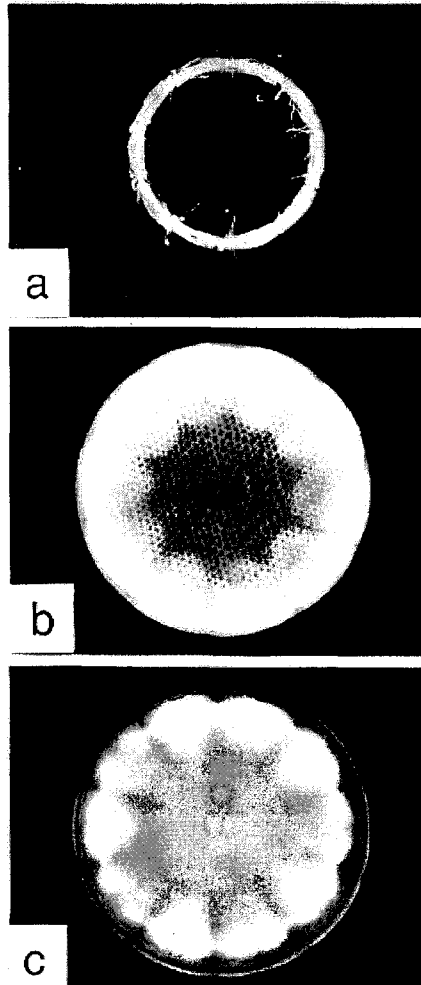


Figura 5.2: Imágenes de la descarga de oxígeno en el sistema SLAN con ECR a diferentes presiones: (a) 760 Torr, (b) 0.04 Torr, (c) 0.004 Torr [11].

plano con un pequeño máximo en el centro, mientras que en el caso correspondiente a la presión de 0.4 Torr encontramos otro perfil plano, aunque esta vez, con un mínimo en el centro.

En todos estos casos, la homogeneidad obtenida en la mayoría de las mediciones en estos dispositivos indican que una buena aproximación a la hora de abordar la descripción de este tipo de plasmas es mediante un modelo global, en el que únicamente se manejan cantidades promediadas radialmente [12]. En los casos donde el perfil no sea homogéneo, la utilización del modelo global es únicamente estimativa, siendo necesario un modelo más complejo.

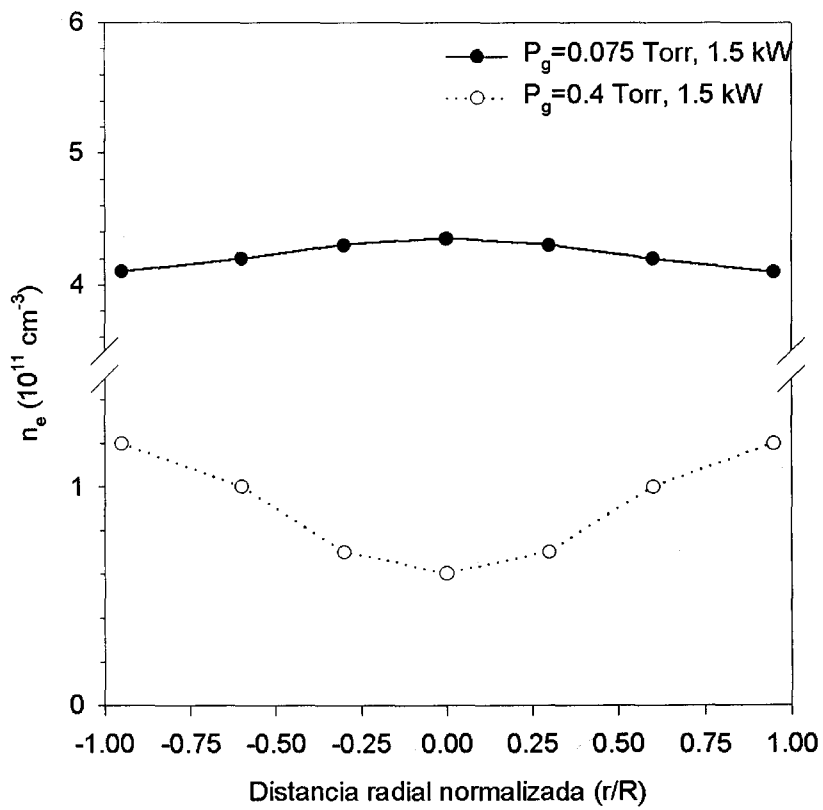


Figura 5.3: Perfiles radiales de la densidad electrónica a diferentes presiones en el sistema SLAN con ECR [11].

5.3.2 Modelo Global del plasma de oxígeno

Las especies que se consideran en el modelo son el oxígeno atómico, O , oxígeno molecular excitado en un estado metaestable, $O_2(^1\Delta_g)$, ion negativo, O^- , y el ion positivo, O_2^+ . También se han incluido otras especies como el ion molecular, O_2^- , oxígeno molecular, O_2 , oxígeno atómico excitado, $O(^1D)$, ion positivo de oxígeno atómico, O^+ , ozono, O_3 , y electrones, e . Las interacciones entre las especies vienen descritas por las reacciones que se presentan en la siguiente tabla

Reacción		Referencia
Nº	Ionización	
1	$e + O_2 \rightarrow O_2^+ + e + e$	[13]
2	$e + O \rightarrow O^+ + 2e$	[14]
	Ionización Disociativa	
3	$e + O_2 \rightarrow O^- + O^+ + e$	[14]
4	$e + O_2 \rightarrow O + O^+ + 2e$	[14]
	Captura Disociativa	
5	$e + O_2 \rightarrow O^- + O$	[13]
	Disociación	
6	$e + O_2 \rightarrow O + O + e$	[13]
7	$e + O_2 \rightarrow O + O(^1D) + e$	[13]
	Formación de Estado Metaestable y Desexcitación	
8	$e + O_2 \rightarrow O_2(^1\Delta_g) + e$	[7]
9	$e + O_2(^1\Delta_g) \rightarrow O_2 + e$	[13]
10	$O + O_2(^1\Delta_g) \rightarrow O_2 + O$	[13]
11	$O_2 + O_2(^1\Delta_g) \rightarrow 2O_2$	[13]
	Transferencia de Carga	
12	$O^- + O_2 \rightarrow O_2^- + O$	[7]
13	$O_2(^1\Delta_g) + O^- \rightarrow O_2^- + O$	[7]
14	$O_2^- + O \rightarrow O^- + O_2$	[7]
	Producción de Electrones	
15	$e + O^- \rightarrow O + e + e$	[13]
16	$O^- + O_2 \rightarrow O + O_2 + e$	[13]
17	$O^- + O \rightarrow O_2 + e$	[7]
18	$O_2^- + O_2 \rightarrow 2O_2 + e$	[13]
19	$O_2^- + O_2(^1\Delta_g) \rightarrow O_2 + O_2 + e$	[13]
20	$O^- + O_2(^1\Delta_g) \rightarrow O_3 + e$	[1]
21	$O_2^- + O \rightarrow O_3 + e$	[1]

	Recombinación Electrón-Ion	
22	$e + O_2^+ \rightarrow O + O(^1D)$	[13]
23	$e + O_2^+ \rightarrow 2O$	[13]
24	$e + O_2^+ + O_2 \rightarrow 2O_2$	[13]
25	$2e + O_2^+ \rightarrow O_2 + e$	[13]
	Recombinación Ion-Ion	
26	$O^- + O_2^+ \rightarrow O + O_2$	[7]
27	$O_2^- + O_2^+ \rightarrow O_2 + 2O$	[7]
28	$O_2^- + O_2^+ \rightarrow 2O_2$	[13]
29	$O_2^- + O_2^+ + O_2 \rightarrow 3O_2$	[13]
30	$O^- + O^+ \rightarrow 2O$	[1]
	Recombinación Atómica	
31	$O + O(^1D) + O_2 \rightarrow 2O_2$	[13]
32	$O + O_3 \rightarrow 2O_2$	[1]
	Captura Electrónica	
33	$e + O + O_2 \rightarrow O^- + O_2$	[7]
34	$e + 2O_2 \rightarrow O_2^- + O_2$	[13]
35	$e + O_2 + O \rightarrow O_2^- + O$	[13]
36	$e + O_2 + O_2(^1\Delta_g) \rightarrow O_2^- + O_2(^1\Delta_g)$	[13]
37	$e + O_2(^1\Delta_g) + O \rightarrow O_2^- + O$	[13]
38	$e + O_2(^1\Delta_g) + O_2 \rightarrow O_2^- + O_2$	[13]
39	$e + O_2(^1\Delta_g) + O_2(^1\Delta_g) \rightarrow O_2^- + O_2(^1\Delta_g)$	[13]
	Recombinación en la Pared	
40	$O + pared \rightarrow \frac{1}{2}O_2$	[1]
41	$O(^1D) + pared \rightarrow \frac{1}{2}O_2$	[1]

Si llamamos k_i al coeficiente cinético de la i -ésima reacción, las ecuaciones del modelo se pueden escribir mediante ecuaciones donde se tienen en cuenta procesos de ganancia y pérdida, tales como la conservación del número total de partículas

$$O_2^+ + O_2^- + O_2 + O_2(^1\Delta_g) + O + O^- + O^+ + O(^1D) + O_3 - \frac{P_g}{k_B T_g} = 0,$$

la conservación de la carga

$$e + O_2^- + O^- - O_2^+ - O^+ = 0,$$

balance para la especie, O_2^+

$$k_1 e O_2 - O_2^+ [(k_{22} + k_{23} + k_{24} O_2 + k_{25} e) e - k_{26} O^- - (k_{27} + k_{28} + k_{29} O_2) O_2^-] = 0,$$

para la especie O_2^-

$$O^- [k_{12}O_2 + k_{13}O_2(^1\Delta_g)] + O_2e [k_{34}O_2 + k_{35}O + (k_{36} + k_{38}) O_2(^1\Delta_g)] + \\ + O_2(^1\Delta_g) (k_{37}eO + k_{39}eO_2(^1\Delta_g)) - O_2^- [O (k_{14} + k_{21}) + k_{18}O_2 + k_{19}O_2(^1\Delta_g) + \\ + (k_{27} + k_{28} + k_{29}O_2) O_2^+] = 0,$$

para el oxígeno atómico, O

$$O^- [(k_{12} + k_{16}) O_2 + k_{13}O_2(^1\Delta_g) + k_{15}e + (k_{26} + 2k_{27}) O_2^+ + 2k_{30}O^+] + \\ + e [(k_4 + k_5 + 2k_6 + k_7) O_2 + (k_{22} + 2k_{23}) O_2^+] - O[(k_2 + k_{33}O_2) e + k_{10}O_2(^1\Delta_g) + \\ + (k_{14} + k_{21}) O_2^- + k_{17}O^- + k_{31}O(^1D)O_2 + k_{32}O_3 + k_{40}] = 0,$$

para el oxígeno molecular en el estado excitado metaestable, $O_2(^1\Delta_g)$

$$k_8eO_2 - O_2(^1\Delta_g)[(k_9 + k_{37}O + k_{38}O_2 + k_{39}O_2(^1\Delta_g)) e + k_{10}O + \\ + k_{11}O_2 + (k_{13} + k_{20}) O^- + k_{19}O_2^-] = 0,$$

para el O^-

$$(k_3 + k_5 + k_{33}O) eO_2 + k_{14}O_2^-O - O^- [(k_{12} + k_{16}) O_2 + (k_{13} + k_{20}) O_2(^1\Delta_g) + k_{15}e + \\ + k_{17}O + k_{26}O_2^+ + k_{30}O^+] = 0,$$

para el O^+

$$(k_2O + O_2 (k_3 + k_4)) e - k_{30}O^+O^- = 0,$$

para el $O(^1D)$

$$(k_7O_2 + k_{22}O_2^+) e - O(^1D) (k_{31}OO_2 - k_{41}) = 0,$$

y para el O_3

$$k_{20}O^-O_2(^1\Delta_g) + k_{21}O_2^-O - k_{32}OO_3 = 0.$$

De esta manera, conocidas la presión y temperatura del gas, el conjunto de las 10 ecuaciones del modelo contienen 11 incógnitas (todas las poblaciones y la temperatura electrónica), por lo que para obtener resultados es necesario introducir una de las incógnitas como parámetro de entrada en el modelo (que más adelante se relacionará con un dato experimental de fácil medición).

De todas las reacciones, el coeficiente que entraña más dificultad es el coeficiente de recombinación en la pared del oxígeno atómico (reacción 40). El problema que plantea esta reacción reside en que, dada una geometría de la descarga, existe una fuerte dependencia con la temperatura de la pared del recinto que rodea al plasma. Este coeficiente, k_{40} , se puede escribir como

$$k_{40} = \frac{\gamma \bar{v}}{2R},$$

donde \bar{v} es la velocidad media de los átomos de oxígeno, R el radio del recinto y γ un parámetro que mide la probabilidad de recombinación en la pared del oxígeno atómico. Diferentes autores han obtenido valores experimentales de γ en descargas DC que oscila entre $1 \cdot 10^{-4} - 9 \cdot 10^{-4}$ para el pyrex a 300 K. En la referencia [15] se ha realizado un modelo teórico sobre la recombinación del oxígeno atómico en la pared en una descarga DC. Estos resultados coinciden con los de [16], y se obtiene la expresión empírica

$$\gamma = \alpha \exp(\beta/T_w), \quad (5.4)$$

donde α y β son parámetros de ajuste, y T_w la temperatura de la pared.

El problema de la determinación del coeficiente γ se torna más complejo en las descargas de AF, ya que se alcanzan temperaturas en la pared muy por encima de 300 K, dependiendo de la potencia incidente, presión del gas, etc..., y todavía no han aparecido valores experimentales de esta cantidad en condiciones generales, aunque cada vez aparecen más trabajos sobre el tema [18]. Esta falta de datos experimentales ha motivado que la mayoría de trabajos teóricos tengan que realizar un ajuste de dicho parámetro a través de datos experimentales conocidos, extrapolando así su valor. En la referencia [1] esta cantidad se calculó en función de la temperatura de la pared del recinto, obteniendo los resultados representados en la figura 5.4. Como podemos apreciar, a medida que aumenta la temperatura en la pared dicho coeficiente puede alcanzar valores superiores a 0.1 (10 %), mientras que para valores de temperatura cercanos a 300 K se reproducen los resultados obtenidos en descargas DC [16].

5.4 Resultados y discusión

5.4.1 Influencia del coeficiente γ en el modelo

En este apartado vamos a estudiar las soluciones del modelo para los casos de $\gamma = 10^{-1}$ y $\gamma = 10^{-2}$. Para ello introduciremos la densidad electrónica como

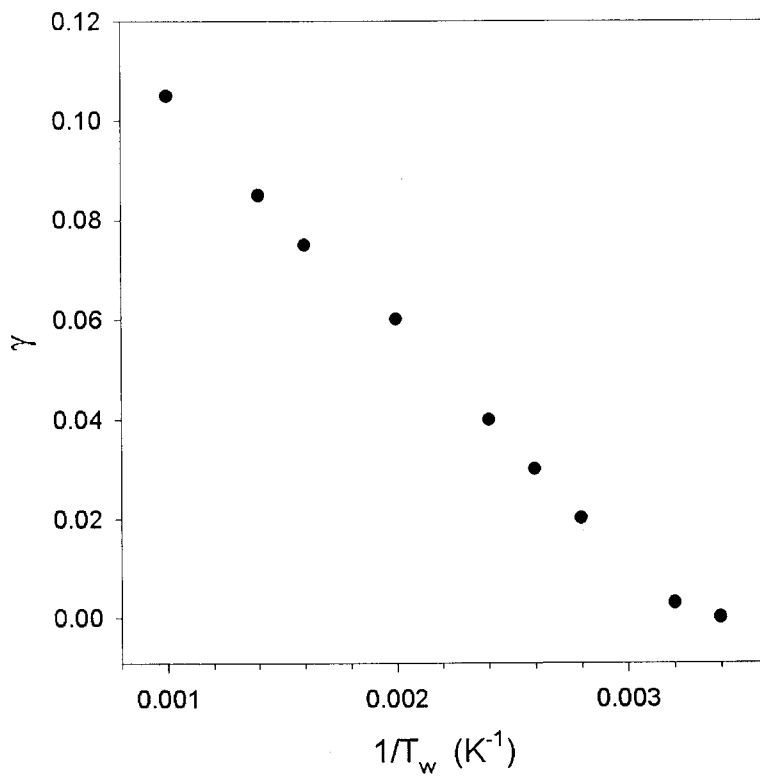


Figura 5.4: Valores obtenidos en la referencia [1] para la probabilidad de recombinación en la pared de un tubo de pyrex en función de la temperatura.

parámetro de entrada y compararemos los resultados que se obtengan a dos presiones diferentes: $1 \cdot 10^{-3}$ y $1 \cdot 10^{-1}$ Torr.

Para resolver el modelo se han introducido valores de la densidad electrónica que van desde 10^9 a 10^{12} cm^{-3} y una temperatura del gas media de $T_g = 600$ K. Las figuras 5.5 y 5.6 muestran las diferentes poblaciones de las especies del modelo a una presión de 10^{-3} Torr, para unos valores de $\gamma = 0.01$ y $\gamma = 0.1$, respectivamente. En ambas figuras aparecen claramente las especies dominantes en la descarga a esta presión y, en este caso, la población de O_2 y $O_2(^1\Delta_g)$ es independiente de la población electrónica y vienen determinadas por la presión del gas. Así mismo, las especies cargadas más importantes resultan ser la propia población electrónica, e , y la de O^+ , estando el resto de especies (O^- , O_2^- y O_2^+) muy por debajo de ellas. La diferencia esencial entre ambas gráficas reside en la cantidad de oxígeno atómico, O , que se puede encontrar en la descarga; en el caso de $\gamma = 0.01$ la cantidad de oxígeno es mucho mayor que la obtenida en el caso de $\gamma = 0.1$, por lo que es un factor decisivo a la hora de evaluar el cociente O/O_2 . Así mismo, la población de ozono, O_3 , disminuye un orden de magnitud al variar γ de 0.1 a 0.01.

Los resultados del modelo a una presión de 10^{-1} Torr se han presentado en las figuras 5.7 y 5.8. El comportamiento es similar al obtenido a una presión más baja, y aparecen las mismas tendencias. Así mismo, las especies cargadas más importantes siguen siendo la electrónica, e , y la de O^+ , mientras que las especies O_2 y $O_2(^1\Delta_g)$ siguen a la presión. También, la cantidad de oxígeno atómico, O , sigue dependiendo de la misma manera del valor de la probabilidad de recombinación en la pared, γ , es decir, a mayor valor de γ menor cantidad de O en la descarga.

Los procesos dominantes en la creación y destrucción de las diversas especies del modelo vienen en la siguiente tabla, donde se han incluido los resultados para dos presiones diferentes y un valor de $\gamma = 0.1$ (los resultados para $\gamma = 0.01$ son similares), los números que aparecen coinciden con el número de las reacciones tenidas en cuenta en el modelo, y que contribuyen en más de un 10% en las ganancias o en las pérdidas.

Especie/Presión	Procesos de ganancia		Procesos de pérdidas	
	10^{-3} Torr	10^{-1} Torr	10^{-3} Torr	10^{-1} Torr
e	2, 19	2, 19	5, 23	5, 23
O	6, 7	6	40	40
O^+	2, 4	2, 3, 4	30	30
O^-	5	5	20, 30	12, 20, 30
O_2^+	1	1	22, 23	22, 23
O_2^-	12, 13	12	19, 21, 28	19, 21
$O_2(^1\Delta_g)$	8	8	9	9
O_3	20, 21	20, 21	32	32



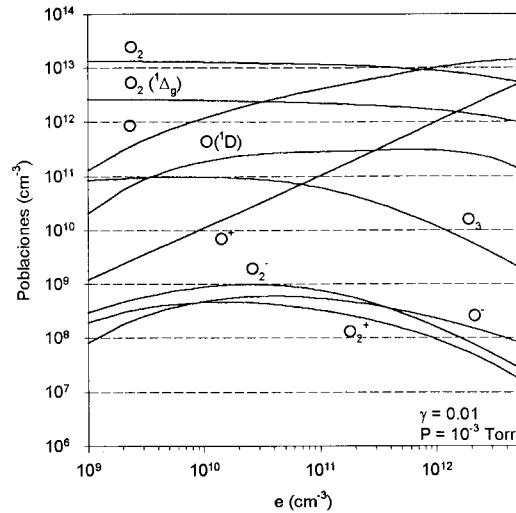


Figura 5.5: Resultado del modelo global a una presión de 0.001 Torr, y para un valor de γ de 0.01.

La figura 5.9 muestra la temperatura electrónica en función de la densidad electrónica a una presión del gas de $P = 10^{-3}$ Torr, para ambos valores de γ . La figura 5.7 muestra lo mismo, pero a una presión de 10^{-1} Torr. En ambos casos, nos encontramos con dos tendencias típicas, una creciente con la densidad electrónica, e , y otra decreciente. Este comportamiento se debe a un cambio en la cinética de los procesos de ganancia de los electrones; a bajas densidades electrónicas el proceso dominante es la reacción 19 ($O_2^- + O_2(^1\Delta_g) \rightarrow 2O_2 + e$), mientras que el cambio de tendencia sucede cuando existe el suficiente número de electrones para que el proceso dominante sea la reacción 2 ($e + O \rightarrow O^+ + 2e$). A la presión de 10^{-3} Torr, por lo tanto, el comportamiento genérico, en el rango de densidades electrónicas que se suelen encontrar, será el de una temperatura electrónica que se comporta inversamente a como lo hace la densidad electrónica, mientras que a la presión de 10^{-1} Torr la tendencia de ambas cantidades será la misma.

Como podemos comprobar, la influencia del valor de γ en el modelo es notoria, y ésto hace que cobren especial relevancia aspectos teóricos y experimentales. Así, la elección de un determinado material para el recinto del plasma influirá bastante en las propiedades de la descarga que se pretende producir, no sólo por la propia naturaleza dieléctrica del material, sino por las temperaturas que puede llegar a alcanzar en la descarga. Por otra parte, desde un punto de vista teórico, la importancia de este parámetro hace que sea imprescindible encontrar algún método para estimar su valor en las condiciones experimentales que se pretenden reproducir, para obtener resultados fiables del modelo.

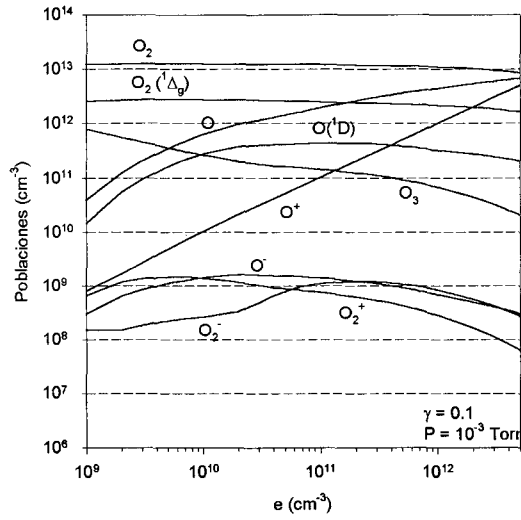


Figura 5.6: Resultado del modelo global a una presión de 0.001 Torr, y para un valor de γ de 0.1.

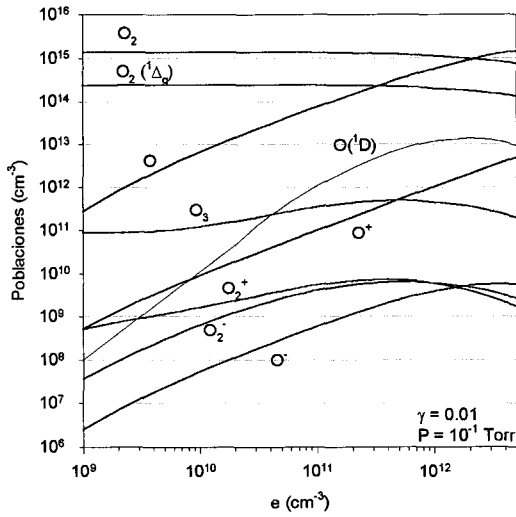


Figura 5.7: Resultado del modelo global a una presión de 0.1 Torr, y para un valor de γ de 0.01.

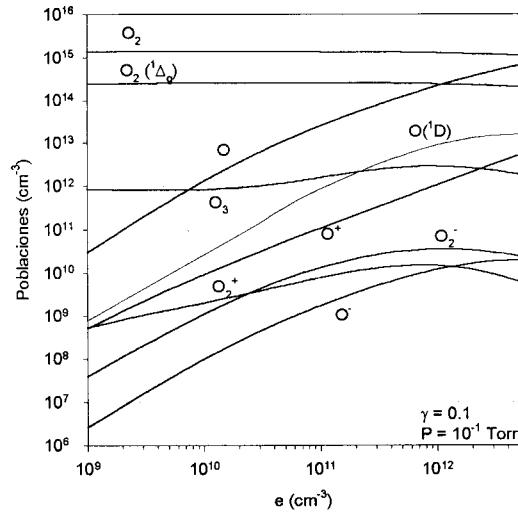


Figura 5.8: Resultado del modelo global a una presión de 0.1 Torr, y para un valor de γ de 0.1.

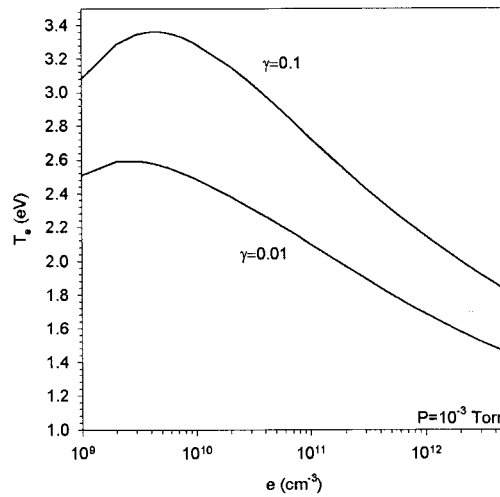


Figura 5.9: Valores de la temperatura electrónica para una presión de 0.001 Torr, y para $\gamma = 0.1$ y 0.01.

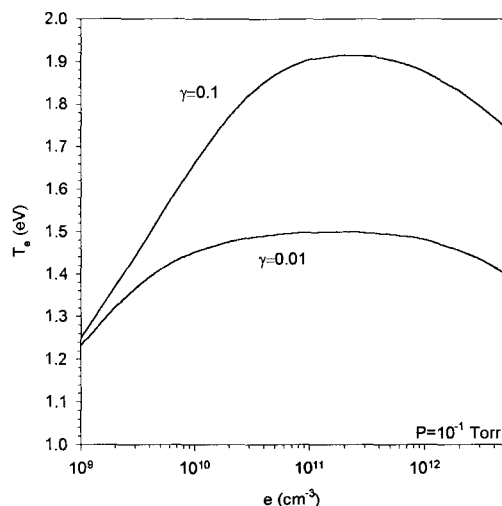


Figura 5.10: Valores de la temperatura electrónica para una presión de 0.1 Torr, y para $\gamma = 0.1$ y 0.01.

5.4.2 Comparación con resultados experimentales

Utilizando el modelo teórico que hemos desarrollado en la sección anterior se va a caracterizar un plasma de oxígeno producido en un dispositivo SLAN con ECR. Como ya hemos visto, la probabilidad de recombinación en la pared del oxígeno atómico, γ , juega un papel muy importante a la hora de caracterizar el plasma, y por lo tanto, resulta necesario como primer paso una estimación de su valor. Por otra parte, debido a que no se han encontrado valores experimentales de γ en nuestras condiciones, supondremos válidos los resultados de la figura 5.4, obtenidos en la referencia [1]. En este trabajo se realizó un modelo de plasma de oxígeno producido a alta frecuencia y a baja presión, y se dicho utilizó parámetro como una cantidad de ajuste para reproducir diferentes resultados experimentales, encontrando valores cercanos a los medidos en condiciones DC cuando la temperatura de la pared se acercaba a los 300 K.

Por otra parte, para utilizar dichos valores de γ en nuestro modelo, y al carecer de datos experimentales sobre la temperatura en la pared en el sistema SLAN con ECR, necesitamos una estimación cualitativa de dicha cantidad en nuestras condiciones. En nuestro caso, al tratarse de una descripción global promediada radialmente, dicha temperatura será igual a la temperatura de todo el gas, siendo esta descripción adecuada en las situaciones donde los perfiles radiales sean aproximadamente homogéneos, y por lo tanto, las situaciones más desfavorables serán las de muy baja presión (donde la onda se propaga por el plasma), y la zona de muy alta presión donde el plasma existe únicamente en las cercanías de la pared.

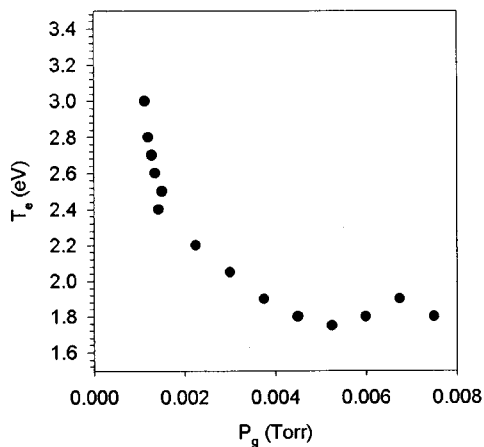
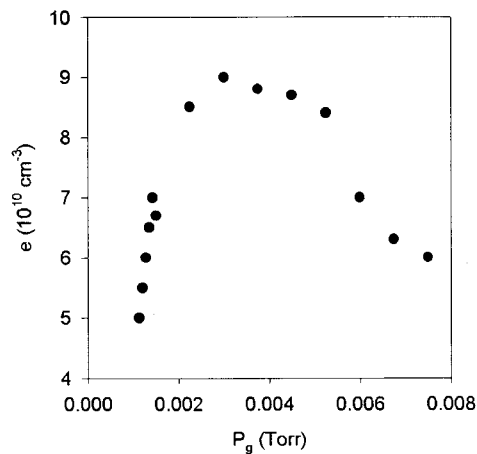


Figura 5.11: Resultados experimentales obtenidos en un sistema SLAN con ECR, utilizando 1000 W de potencia [19].

Compararemos los resultados del modelo con los resultados experimentales obtenidos por Engemann et al. en un sistema SLAN con ECR de radio 8 cm y una potencia de 1000 W [19]. Estos resultados aparecen en la figura 5.10. En ella podemos ver, en primer lugar, el comportamiento de la densidad electrónica con la presión, en la que se obtiene un comportamiento típico de los dispositivos con ECR, esto es, un comportamiento creciente de la densidad electrónica antes de los 0.003 Torr, y decreciente después. Este comportamiento está ligado al máximo de absorción de potencia cuando $\omega_c = \nu_c$, que ocurría a dicho valor de la presión [20]. El problema que tienen estos datos es que no se ha medido la temperatura del recinto, que sabemos que tiene una gran influencia en los resultados del modelo, expresable a través del parámetro γ .

En la figura 5.10 también aparece el comportamiento experimental de la tem-

peratura electrónica con la presión. En este caso, el comportamiento es claramente decreciente, y como ocurría en el capítulo 2, estos valores están de acuerdo con el modelo de Uhm y Choi [22], cumpliéndose

$$T_e = \kappa_0 + \kappa_1 T_e^{1/4} P_g^{-1/2},$$

con $\kappa_0 = 1.13$ eV y $\kappa_1 = 0.04$ eV^{3/4} Torr^{1/2}.

De esta manera, introduciremos estos datos de densidad electrónica en el modelo y compararemos los resultados de la temperatura electrónica con los datos experimentales. En la figura 5.11 hemos supuesto que la temperatura de la pared (y del gas) es constante con la presión, y hemos resuelto el modelo. Como podemos apreciar, se reproducen bastante bien los resultados experimentales, con excepción de la zona de presiones por debajo de 0.003 Torr. Los motivos por los que, en estos casos, el modelo no reproduce correctamente los resultados experimentales es que, para valores de presión por debajo de dicho valor, el efecto del ECR se ha demostrado que es muy importante, produciendo una alta absorción de potencia en la zona cercana a las paredes [11], y por lo tanto el gas se calienta muy por encima del valor que hemos estimado.

En la figura 5.12 hemos representado los resultados del modelo, junto con los datos experimentales, suponiendo una caída de la temperatura del gas desde 700 K hasta 320 K, donde hemos puesto un valor constante, reproduciendo en este caso los resultados experimentales. Aún así, estos valores de temperatura únicamente se pueden interpretar como valores de ajuste a dichas condiciones, ya que faltaría por conocer el valor experimental de la temperatura del recinto en ese rango de presiones.

5.4.3 Otros resultados del modelo

Una vez ajustado el coeficiente de recombinación en la pared, se pueden calcular el valor de todas las poblaciones en el plasma resolviendo el modelo. De esta manera introducimos los datos experimentales de la densidad electrónica y la presión para obtener el resto de poblaciones. Obviamente, los valores de la temperatura electrónica serán los mismos que los de la figura 5.10.

En la figura 5.13 hemos representado los resultados del modelo en las condiciones experimentales. Como cabe esperar, según los resultados obtenidos en la sección 5.4.1, la especie O^+ sigue a la densidad electrónica y tiene el mismo máximo alrededor de $P_g = 0.003$ Torr. Este comportamiento también lo posee el O_2^- aunque menos acusado, mientras que el O_2^+ tiene un mínimo en vez de un máximo. Por otra parte, el O^- tiene una tendencia generalmente decreciente para todo el rango de presiones.

Respecto a las especies neutras, la tendencia del O es típicamente creciente, mientras que la de $O(^1D)$ tiene un pequeño máximo en la zona de $P_g = 0.005$ Torr. Este pequeño máximo del primer estado excitado del O se puede explicar

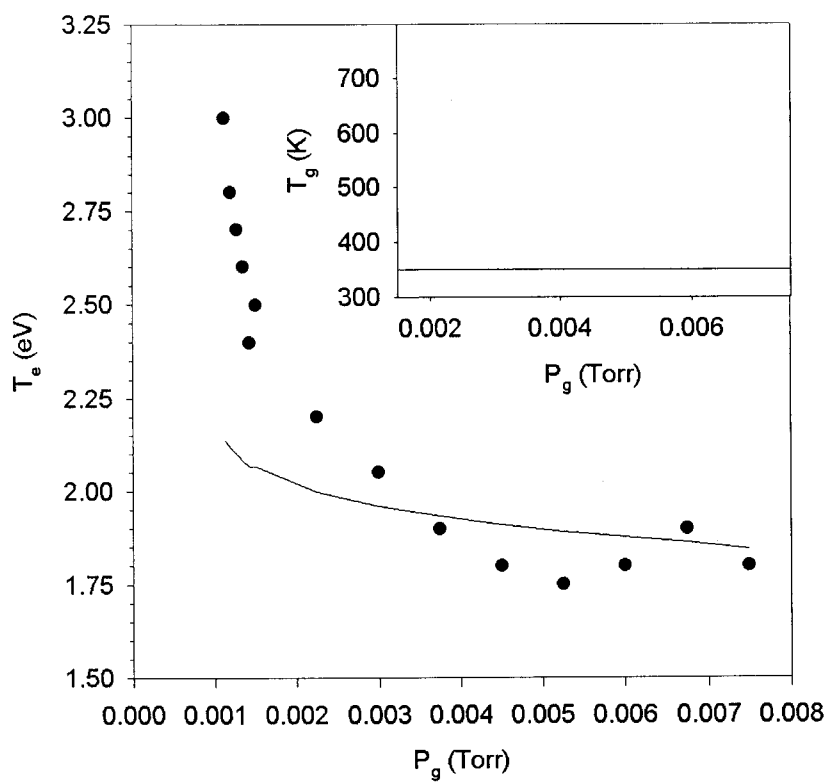


Figura 5.12: Valores obtenidos de la temperatura electrónica suponiendo una temperatura constante.

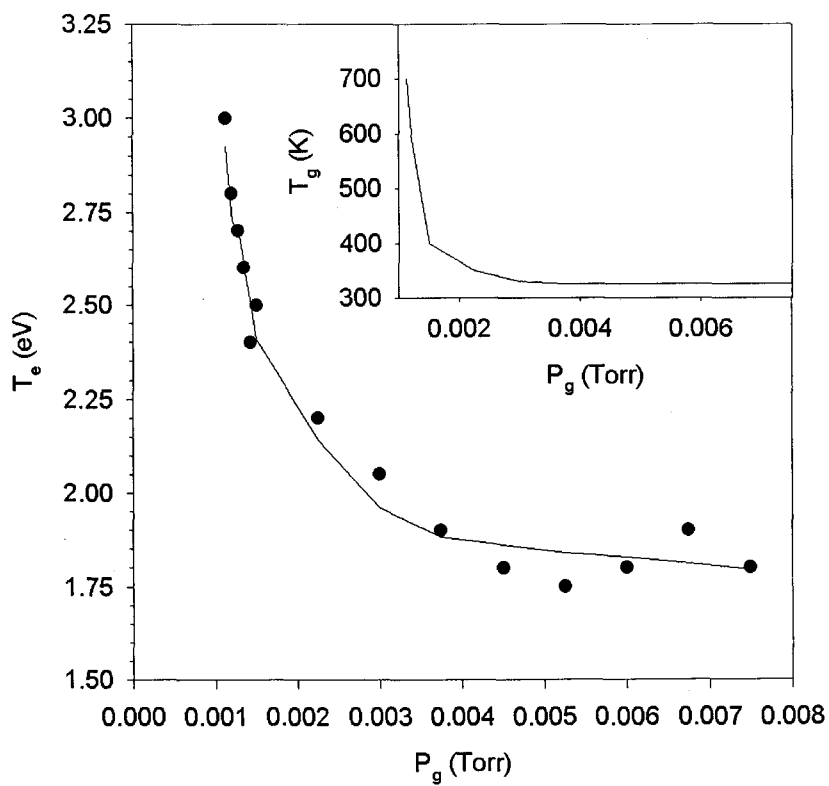


Figura 5.13: Valores obtenidos de la temperatura electrónica teniendo en cuenta el calentamiento del gas para presiones inferiores a 0.004 Torr.

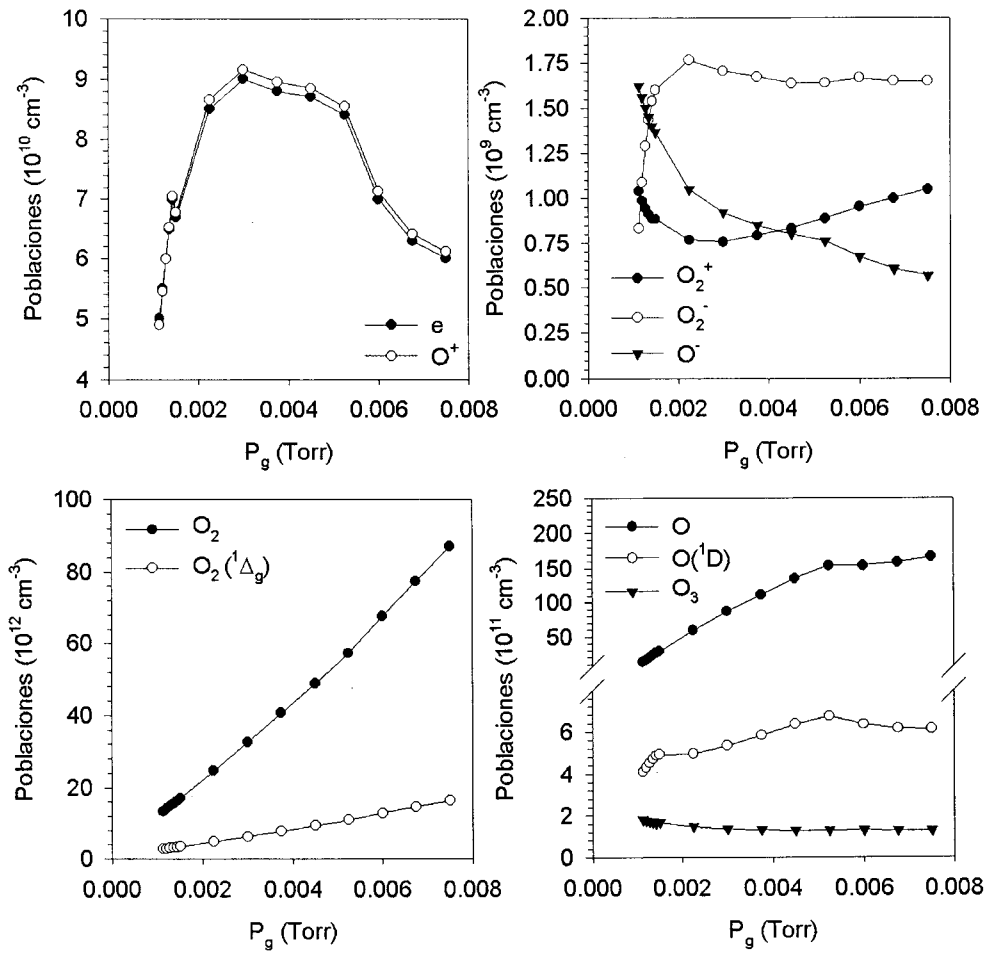


Figura 5.14: Resultados del modelo en las condiciones donde se han obtenido los datos experimentales.

debido a que, en el modelo, todo el oxígeno excitado, $O(^1D)$ se produce por disociación del O_2 mediante colisión electrónica, por lo que el número de electrones juega un papel importante. Por último, tanto la población de O_2 como la de $O_2(^1\Delta_g)$ siguen a la presión, mientras que el O_3 permanece prácticamente constante a lo largo de todo el rango estudiado.

Por otra parte en la referencia [21] se puede estimar la cantidad de O en las mismas condiciones experimentales que en este trabajo, obteniéndose un valor de aproximadamente $1 \cdot 10^{11} \pm 1 \text{ cm}^{-3}$, que coincide con la densidad de oxígeno atómico que predice el modelo. De esta manera, podemos asegurar que los resultados del modelo concuerdan bastante bien con los resultados experimentales, al menos, en lo que es la predicción de la temperatura electrónica y el cálculo de la población del oxígeno atómico.

5.4.4 Aplicación del modelo para caracterizar el plasma mediante medidas experimentales

En las situaciones donde el modelo es aplicable sería deseable un método que permitiese una diagnosis del plasma de oxígeno a partir de las líneas de emisión de los estados excitados. En la bibliografía han aparecido diferentes modelos con el fin de caracterizar el plasma a partir de la intensidad de línea de determinadas transiciones radiativas [16, 17]. Las líneas que más se utilizan son $\lambda_{777} = 777.4 \text{ nm}$ y $\lambda_{844} = 844.6 \text{ nm}$ (que corresponden, cada una, a un triplete) debido a que son normalmente las líneas de emisión más intensas del oxígeno atómico, y están ligadas a la transición entre los niveles $2p^33p^3P-2p^33s^3S^0$ y $2p^33p^5P-2p^33s^5S^0$. En la figura 5.14 hemos representado el esquema de los niveles excitados inferiores del átomo de oxígeno.

Modelo de Plasma completamente disociado

En muchos casos, a la hora de usar las líneas $\lambda_{777} = 777.4 \text{ nm}$ y $\lambda_{844} = 844.6 \text{ nm}$ para la diagnosis del plasma, se supone que la especie molecular del oxígeno, O_2 , está muy disociada, y no juega ningún papel a la hora de crear estados excitados de la especie O [23], y en condiciones donde la densidad electrónica es lo suficientemente alta como para suponer una FDDE maxwelliana.

De esta manera, para estudiar los estados excitados del oxígeno atómico, únicamente se consideran los procesos del tipo $O(i) + e \rightarrow O(j) + e$, donde los índices i y j indican los diferentes niveles energéticos. De esta manera, los coeficientes de reacción se pueden calcular mediante la expresión

$$c_{ij} = \sqrt{\frac{2}{m_e}} \int_{\Delta\varepsilon_{ij}}^{\infty} du f(u) u q_{ij}(u),$$

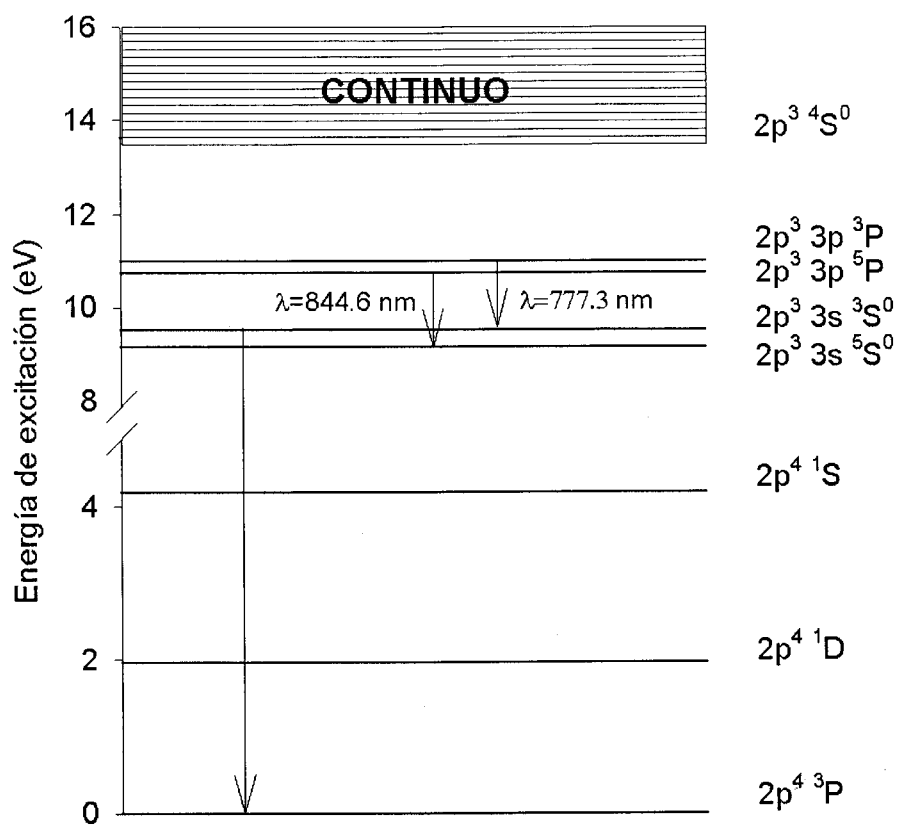


Figura 5.15: Esquema de los niveles excitados del oxígeno atómico. Señaladas aparecen las dos transiciones radiativas a estudiar, $\lambda = 777.3 \text{ nm}$ y $\lambda = 844.6 \text{ nm}$.

donde m_e es la masa del electrón, $q_{ij}(u)$ la sección eficaz del proceso, $\Delta\varepsilon_{1i}$ la energía umbral y $f(u)$ la FDDE. De esta manera, las intensidades de las líneas $\lambda = 777.4$ nm y $\lambda = 844.6$ nm son

$$I_{777} = \frac{K}{\lambda_{777}} \Lambda_{777} A_{777} O(^5P), \quad (5.5)$$

$$I_{844} = \frac{K}{\lambda_{844}} \Lambda_{844} A_{844} O(^3P), \quad (5.6)$$

donde los coeficientes Λ son los factores de escape de la radiación (introducidos anteriormente en los modelos de argón), A , los coeficientes de Einstein de la transición radiativa correspondiente, K una constante de proporcionalidad, y $O(^5P)$ y $O(^3P)$ las poblaciones de los niveles $2p^33p^5P$ y $2p^33p^3$, respectivamente.

El problema que plantean las ecs. (5.5) y (5.6) es que se necesitan conocer exáctamente los factores de escape de cada transición para saber el valor teórico de dichas intensidades, así como evaluar la constante de proporcionalidad. Sin embargo, se puede realizar una gran simplificación si se estudian los resultados de este modelo; así, de todos los mecanismos de población de los estados $2p^33p^5P$ y $2p^33p^3$, el proceso de excitación por impacto electrónico desde el nivel fundamental es siempre el más importante (por encima del 95% frente al resto), independientemente del valor de los factores de escape, en una situación típicamente corona (como encontramos en el capítulo 3). De esta manera, el modelo se puede simplificar bastante ya que se pueden eliminar de la descripción los estados excitados intermedios y superiores, y las ecuaciones de balance para cada nivel son simplemente

$$c_{16}(T_e)Oe - \Lambda_{844}A_{844}O(^3P) = 0,$$

$$c_{17}(T_e)Oe - \Lambda_{777}A_{777}O(^5P) = 0, \quad (5.7)$$

donde los coeficientes c_{16} y c_{17} se pueden calcular a partir de las secciones eficaces presentadas en la figura 5.17. De esta manera, las ecs. (5.5) y (5.6) quedan

$$I_{777} = \frac{K}{\lambda_{777}} c_{17}(T_e)Oe,$$

$$I_{844} = \frac{K}{\lambda_{844}} c_{16}(T_e)Oe,$$

donde K es una constante de proporcionalidad, por lo que dividiendo ambas cantidades se obtiene

$$\frac{I_{777}}{I_{844}} = \frac{\lambda_{844}}{\lambda_{777}} \frac{c_{17}(T_e)}{c_{16}(T_e)}, \quad (5.8)$$

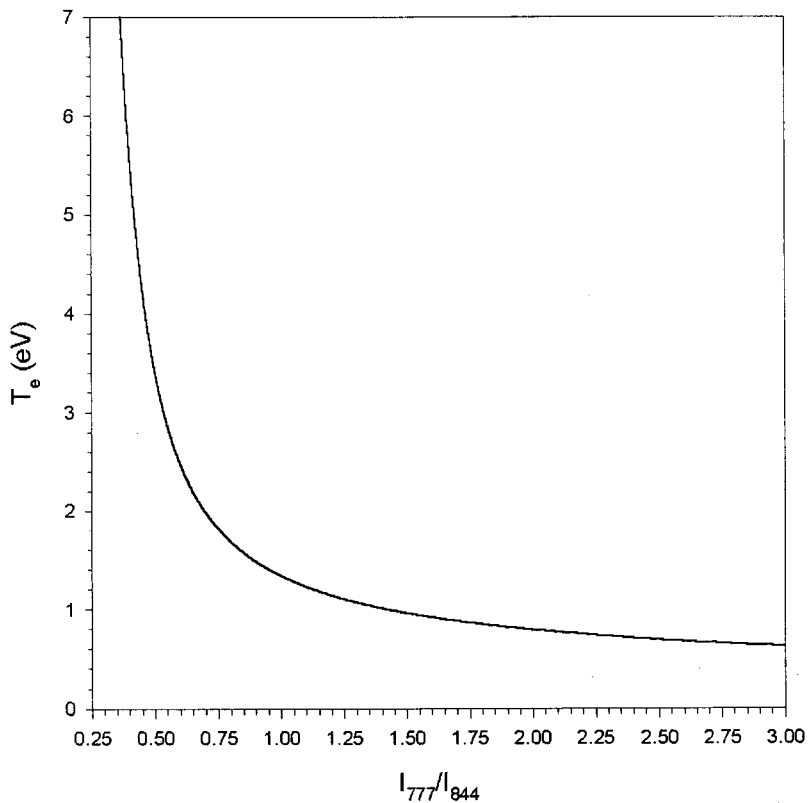


Figura 5.16: Resultado del modelo de plasma de oxígeno altamente disociado.

y se puede conocer la temperatura electrónica a partir de dicho cociente de líneas. La ventaja que tiene esta formulación es que la relación entre el cociente de líneas y la temperatura electrónica es universal para todas las presiones, siempre que los requisitos de este modelo se cumplan.

En la figura 5.15 hemos representado el valor del cociente de líneas y la temperatura electrónica que se obtiene de la ec. (5.8).

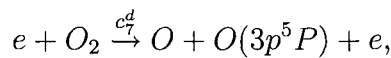
El procedimiento para diagnosticar el plasma sería a partir del conocimiento de la presión y temperatura del gas, así como del cociente de las líneas $\lambda = 777.4$ nm y $\lambda = 844.6$. Los pasos a seguir son:

1. A partir del valor del cociente I_{777}/I_{844} se determina la temperatura electrónica mediante la figura 5.15.
2. A partir de la presión y la temperatura del gas, se resuelve el modelo global propuesto en la sección anterior utilizando la temperatura electrónica como parámetro de entrada.

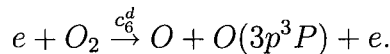
De esta manera, se pueden llegar a conocer la población de todas las especies del plasma incluidas en el modelo, siempre que la FDDE sea maxwelliana y el grado de disociación en el plasma suficientemente alto como para despreciar la contribución de las especies moleculares en los estados excitados del oxígeno atómico.

Plasma de oxígeno parcialmente disociado

El problema que plantea la ec. (5.8) es que todos los estados excitados de la especie O se generan mediante colisión electrónica desde otro estado excitado del oxígeno atómico, mientras que el plasma que queremos caracterizar contiene especies moleculares que pueden poblar estos estados al disociarse. Según la referencia [24], la presencia de O_2 puede modificar sustancialmente los resultados anteriores ya que el proceso de disociación por colisión electrónica puede producir estados excitados del O . En nuestro caso, la fracción de O/O_2 es del orden de 10^{-1} , por lo que resulta necesario tener en cuenta los procesos



y



Los coeficientes cinéticos c_7^d y c_6^d se pueden calcular mediante la expresión

$$c_i^d = \sqrt{\frac{2}{m_e}} \int_{\Delta\varepsilon}^{\infty} du f(u) u q_i^d(u) \quad (i = 6, 7),$$

donde $q_i^d(u)$ es la sección eficaz del proceso de disociación correspondiente (figura 5.16) [16].

De esta manera, las ecuaciones de balance para estos niveles quedan

$$c_{16}(T_e)Oe + c_6^d(T_e)O_2e - \Lambda_{844}A_{844}O(^3P) = 0, \quad (5.9)$$

$$c_{17}(T_e)Oe + c_7^d(T_e)O_2e - \Lambda_{777}A_{777}O(^5P) = 0, \quad (5.10)$$

donde hemos despreciado los mecanismos de colisión con las moléculas de oxígeno (quenching) $O(^3P) + O_2 \rightarrow O + O_2$ y $O(^5P) + O_2 \rightarrow O + O_2$, ya que su influencia es bastante pequeña. Esta simplificación se debe a que, como se muestra en la referencia [16], la frecuencia de dichas reacciones (f_{int}) comparadas con la de las caídas radiativas (f_{rad}) es

$$\frac{f_{int}}{f_{rad}} \sim \frac{10^7 P_g}{10^7} = P_g \text{ (Torr}^{-1}\text{)},$$

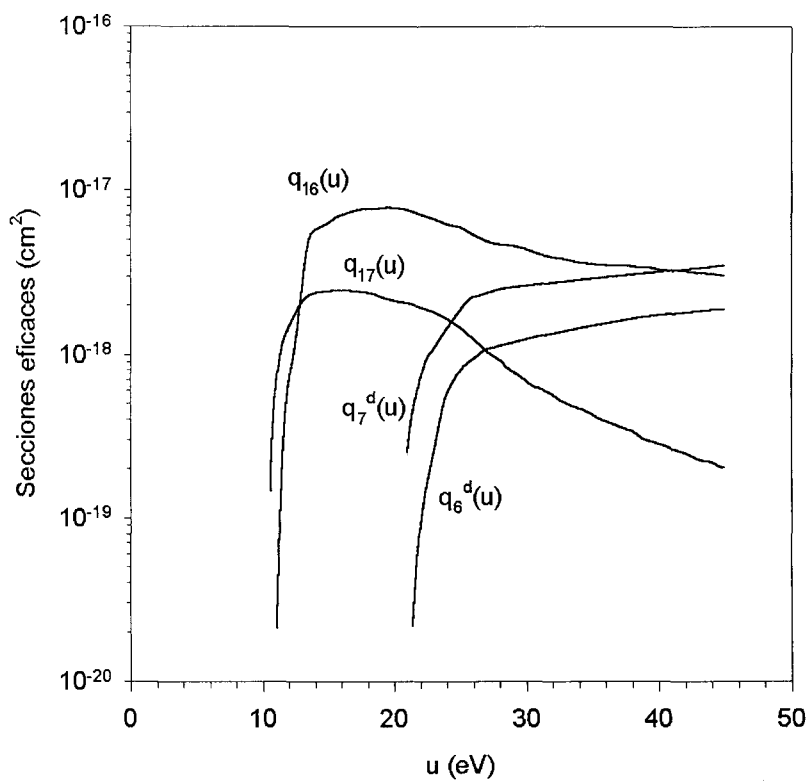


Figura 5.17: Secciones eficaces empleadas para el cálculo de los coeficientes de excitación y disociación [16].

por lo que en el rango de presiones de trabajo ($10^{-2} - 10^{-1}$ Torr), su influencia es inferior al 1%. Así, las intensidades de línea tendrán la forma

$$I_{777} = \frac{K}{\lambda_{777}} O_2 e \left[c_7^d(T_e) + c_{17}(T_e) \frac{O}{O_2} \right], \quad (5.11)$$

$$I_{844} = \frac{K}{\lambda_{844}} O_2 e \left[c_6^d(T_e) + c_{16}(T_e) \frac{O}{O_2} \right], \quad (5.12)$$

donde K es una constante de proporcionalidad, y por lo tanto, el cociente entre ellas

$$\frac{I_{777}}{I_{844}} = \frac{\lambda_{844}}{\lambda_{777}} \left[\frac{c_7^d(T_e) + c_{17}(T_e) \frac{O}{O_2}}{c_6^d(T_e) + c_{16}(T_e) \frac{O}{O_2}} \right]. \quad (5.13)$$

La ec. (5.13) relaciona la temperatura electrónica, T_e , y la fracción O/O_2 con el cociente entre las intensidades de línea. Una propiedad importante es que cuando hay muy poco oxígeno atómico comparado con el molecular, esto es $O \ll O_2$, el cociente adopta la forma

$$\frac{I_{777}}{I_{844}} = \frac{\lambda_{844}}{\lambda_{777}} \frac{c_7^d(T_e)}{c_6^d(T_e)} \quad \text{si} \quad \frac{O}{O_2} \ll,$$

es decir, su valor depende principalmente de los mecanismos de disociación del O_2 , mientras que, a medida que el grado de disociación se hace mayor se obtiene

$$\frac{I_{777}}{I_{844}} = \frac{\lambda_{844}}{\lambda_{777}} \frac{c_{17}(T_e)}{c_{16}(T_e)} \quad \text{si} \quad \frac{O}{O_2} \gg,$$

que coincide con la ec. (5.8).

Las ecs. (5.11) y (5.12) permiten utilizar el modelo global que hemos desarrollado en los apartados anteriores para caracterizar el plasma, ya que si acoplamos una de dichas ecuaciones a las del modelo, tenemos un sistema de 11 ecuaciones con 12 incógnitas, que se puede resolver introduciendo el valor de dicha intensidad, una vez calibrada la constante de proporcionalidad. Así, dadas unas condiciones de la descarga, y un valor experimental de la intensidad de la línea $\lambda = 777.4$ nm o $\lambda = 844.6$ nm, podemos obtener el valor de todas las poblaciones del plasma, así como la temperatura electrónica.

5.4.5 Aplicación experimental del método

En un plasma de oxígeno producido en un sistema SLAN similar al utilizado en las mediciones de la figura 5.10, se han medido las intensidades de las líneas $\lambda = 777.4$ nm y $\lambda = 844.6$ nm con una potencia incidente de 600 W a diferentes

presiones. Los resultados aparecen en la figura 5.17. Como podemos apreciar, la tendencia es netamente creciente hasta la presión de 0.02 Torr donde comienzan a caer las intensidades.

Estos datos se han introducido en el modelo, calibrando las intensidades a partir de los resultados obtenidos en las mismas condiciones que la figura 5.10, y se ha supuesto la misma temperatura del gas que se demostró válida para presiones superiores a 0.003 Torr en el apartado anterior. Los resultados aparecen en la figuras 5.18 y 5.19. Como podemos apreciar, según el modelo, la temperatura electrónica cae desde un valor de aproximadamente 1.7 eV hasta 1.44 eV, según la tendencia que marca el modelo de Uhm y Choi [22] con $\kappa_0 = 1.24$ eV y $\kappa_1 = 0.038$ eV^{3/4} Torr^{1/2}, cuyos valores son diferentes a los obtenidos anteriormente debido a la diferencia de potencia entre este caso y el otro. Así mismo, el cociente O/O_2 es decreciente con la presión, manteniéndose del orden de 10^{-2} , obteniendo, en este caso, que la producción de los estados excitados radiativos se debe en su mayoría a las excitaciones por impacto electrónico desde el nivel fundamental del oxígeno atómico.

En la figura 5.19 aparecen las poblaciones obtenidas según el modelo; el primer hecho a destacar es el máximo que presenta la densidad electrónica en torno a la presión de 10^{-2} Torr. Este máximo se debe principalmente a los resultados obtenidos en la figura 5.17, ya que las intensidades de ambas líneas son proporcionales a la población del oxígeno atómico excitado, y los mecanismos de producción de dichos estados son siempre mediante colisión electrónica. Por lo tanto, normalmente, las variaciones con las condiciones experimentales de los estados excitados del oxígeno atómico están directamente relacionadas con variaciones de la densidad electrónica.

Este doble comportamiento de la densidad electrónica con la presión, junto con la tendencia netamente creciente de las especies O_2 y $O_2(^1\Delta_g)$ van a producir diferentes comportamientos de las diferentes especies de la descarga frente a la presión; de esta manera, el oxígeno atómico se crea principalmente por la disociación del O_2 por impacto electrónico, y el decrecimiento de la densidad electrónica con la presión se compensa con el aumento de O_2 , con lo que prácticamente su población se mantiene constante por encima de los 0.02 Torr. De esta manera, también la población de O^+ sigue a la densidad electrónica, debido a que el proceso fundamental para su creación es mediante colisión electrónica con la especie O .

Por último, los iones O_2^+ , O_2^- y O^- presentan diferentes comportamientos con la presión: el O^- se produce principalmente por colisión electrónica con el O_2 , y junto al hecho de que la temperatura electrónica cae con la presión, dan lugar a que su población disminuya en el rango de presiones estudiado. Así mismo, el O_2^- se produce por impacto del O^- con el O_2 , y se mantiene constante para presiones inferiores a 0.02 Torr y decrece para las superiores. Respecto al O_2^+ , nos encontramos con que se produce por impacto electrónico con la especie O_2 y tiene un comportamiento similar al oxígeno atómico.

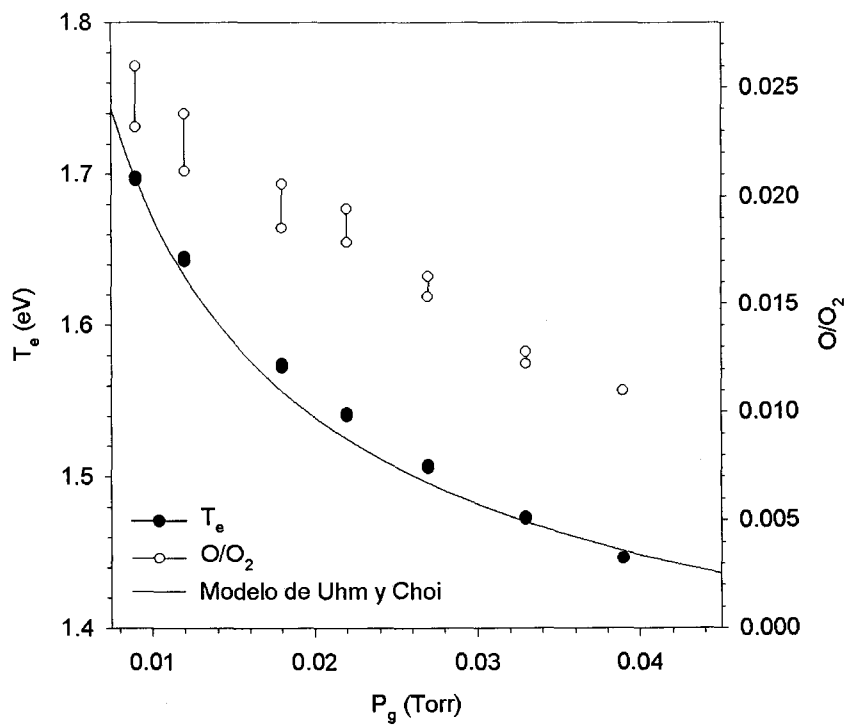


Figura 5.18: Temperatura electrónica y valor de O/O_2 a partir de las intensidades de las líneas $\lambda = 777.4$ nm y $\lambda = 844.6$ nm.

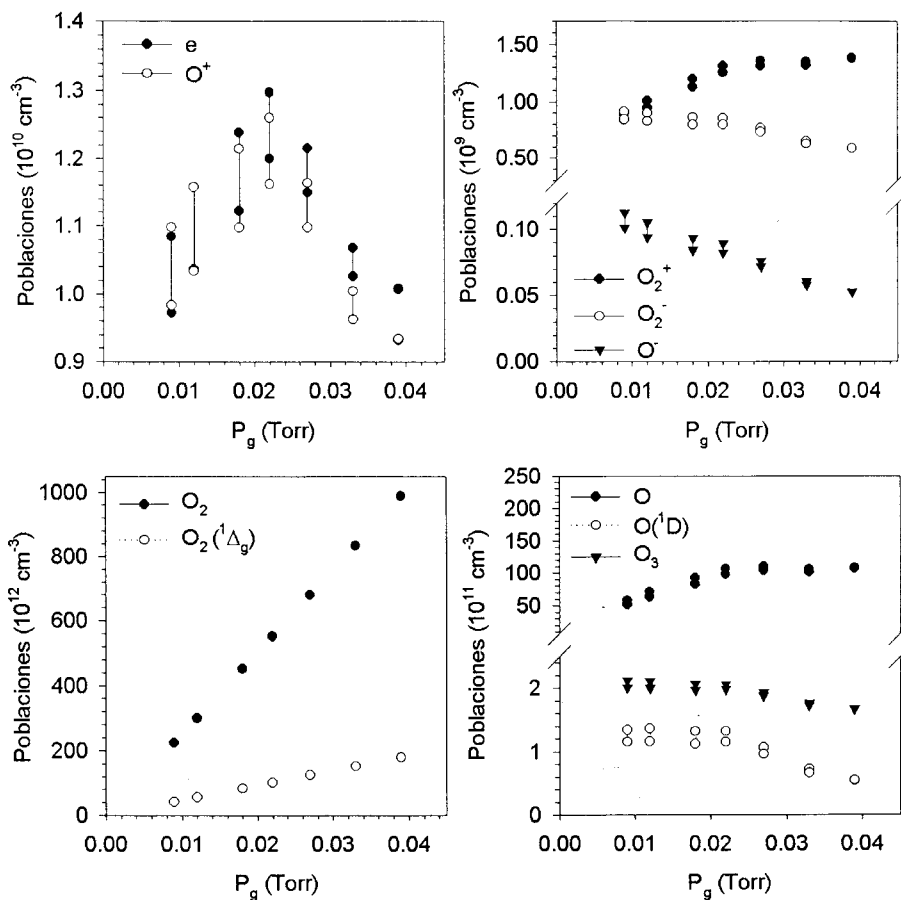


Figura 5.19: Resultados del modelo a partir de las intensidades de línea. Los dos resultados obtenidos a cada presión corresponden al cálculo con cadauna de las líneas, $\lambda = 777.4 \text{ nm}$ y $\lambda = 844.6 \text{ nm}$.

Respecto a los estados excitados del O caben esperar dos comportamientos: si son producidos mediante la disociación del O_2 se comportarán como la población del $O(^1D)$, cuya contribución sólo se ha calculado a partir de dicho proceso y no mediante el modelo colisional-radiativo. Por otra parte, los estados excitados que provengan de la excitación por impacto electrónico con el O , al no variar prácticamente su población con la presión, seguirán a la densidad electrónica.

La figura 5.19 también informa de la cantidad de oxígeno atómico, O , en la descarga que, según el modelo, está alrededor de $1 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. En la referencia [21] se ha medido la cantidad de oxígeno atómico en el rango de presiones de 0.037 Torr a 0.07 Torr, utilizando 1000 W de potencia, obteniéndose un valor aproximado de $1.5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3} \pm 1 \text{ cm}^{-3}$, y se estima que la variación de dicha cantidad al bajar a una potencia de 600 W disminuirá más de un 25% de su valor, por lo que estaría de acuerdo con la predicción del modelo.

5.5 Resumen

De esta manera, en este capítulo hemos desarrollado un modelo global de oxígeno que nos ha permitido conocer las poblaciones de las especies más importantes en una descarga a baja presión. Este modelo presenta la limitación de no obtener ninguna dependencia espacial, ya que trabaja siempre con valores espaciales promediados, por lo que los resultados hay que interpretarlos en este contexto, no permitiendo sacar ninguna conclusión sobre los perfiles radiales y axiales en el plasma. Por otra parte, se ha mostrado la importancia de la temperatura del recinto de la descarga, ya que determina la probabilidad de recombinación en la pared del oxígeno atómico, cuyo valor es determinante en el modelo.

Por último, hemos desarrollado un método maxwelliano de diagnosis mediante la intensidad de las líneas $\lambda_{777} = 777.4$ nm y $\lambda_{844} = 844.6$ nm, que incluye la creación de estados excitados mediante colisiones electrónicas con el oxígeno atómico, y mediante la disociación de la especie de oxígeno molecular.

La validez de los resultados obtenidos dependen del carácter maxwelliano de la FDDE, ya que todos los cálculos se han realizado bajo esa suposición. Esta premisa, en general, no es válida y resulta necesario obtener la FDDE mediante la ecuación de transporte de Boltzmann o a través de técnicas de simulación. En la bibliografía no se ha encontrado ningún perfil de la FDDE en condiciones ECR en un plasma de oxígeno en las condiciones experimentales de este capítulo, sin embargo, la existencia de un sistema ECR de confinamiento electrónico se sabe que contribuye maxwellianizando la FDDE, por lo que los resultados aquí obtenidos deberían acercarse bastante a los resultados experimentales.

Bibliografía

- [1] M. J. Pinheiro, G. Gousset, A. Granier and C. M. Ferreira, *Plasmas Sources Sci. Technol.* **7**, 524-536 (1998).
- [2] M. J. Pinheiro, B. F. Gordiets and C. M. Ferreira, *Plasma Sources Sci. Technol.* **8**, 31-36 (1999).
- [3] M. Saitoh, K. Kanazawa, T. Momose, H. Ishimaru, N. Ota and J. Uramoto, *J. Vac. Sci. Technol.* **11**, 2518 (1993).
- [4] S. Taylor, J.F. Zhang and W. Ecclestone, *Semicond. Sci. Technol.* **8**, 1426 (1993).
- [5] E. J. H. Collart, J. A. G. Baggermann, R. Visser, *J. Appl. Phys.* **78**, 47 (1995).
- [6] E. Stoffels, W. W. Stoffels, D. Vender, M. Kando, G.M.W. Kroesen, and F. J. de Hoog, *Phys. Rev. E* **51**, 2425 (1995).
- [7] V. A. Feoktiskov, A. V. Mukhovatova, A. M. Popov and T. V. Rakhimova, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **28**, 1346-1353 (1995).
- [8] D. Korzec, V. Raiko, J. Engemann, R. Günzel, J. Brutscher, W. Moller, *Surface and Coating Technology* **93**, 217-224 (1997)
- [9] Jes Asmussen, *J. Vac. Sci. Technol. A* **7**, 883-893 (1989)
- [10] O. A. Popov and H. Waldron, *J. Vac. Sci. Technol. A* **7**, 914-917 (1989)
- [11] D. Korzec, F. Werner, R. Winter and J. Engemann, *Plasma Sources Sci. Technol.* **5**, 126-234 (1996).
- [12] C. Lee, M. A. Lieberman, *J. Vac. Sci. Technol. A* **13**, 368-380 (1994).
- [13] B. Eliasson and U Kogelschatz, *Basic data for modelling of electrical discharges in gases: Oxygen*, 1986.
- [14] T. H. Chung, H. J. Yoon and D. C. Seo, *J Appl. Phys.* **86**, 3536 (1999)

- [15] B. Gordiets, C. M. Ferreira, J. Nahorny, D. Pagnon, M. Touzeau and M. Vialle, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **29**, 1021-1031 (1996).
- [16] D. Pagnon, J. Amorim, J. Nahorny, M. Touzeau and M. Vialle, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **28**, 1856-1868 (1995).
- [17] M. Lieberman and A. J. Lichtenberg, *Principles of plasma discharges and materials processing*, ed. John Willey and Sons, N. York 1994.
- [18] G. Cartry, L Magne and G. Cernogora, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **32** L53-L56 (1999).
- [19] J. Engemann, M Schott, F. Werner, and D. Korzec, *J. Vac. Sci. Technol. A* **13**, 875-882 (1995).
- [20] R. L. Kinder, *Consequences of mode structure of plasma parameters in electron cyclotron resonance sources used for materials processing*, University of Illinois, 1997.
- [21] St. Behle, A Georg, Y. Yuang, J. Engemann, A. Brockhaus. *Surf. and Coat. Tech.* **97**, 734-741 (1997)
- [22] H. S. Uhm and E. H. Choi, *Phys. Fluids B* **5**, 1902-1910 (1993).
- [23] F. J. Gordillo-Vazquez and J. Junc, *Phys. Rev. E* **51**, 6010-6015 (1995).
- [24] P. Booth, O. Joubert, J. Pelletier, *J. Appl. Phys.* **69**, 618-626 (1991).

Capítulo 6

Resultados más importantes obtenidos

A continuación vamos a comentar brevemente algunas de las principales conclusiones obtenidas en este trabajo:

- Se han caracterizado los estados excitados de dos plasmas de argón en condiciones muy diferentes: descarga en tubo largo y en un sistema SLAN. La cinética, en cada caso, resulta ser muy distinta según las condiciones. Se encuentran así dos regímenes, balance corona y excitación-saturación-balance, que han permitido relacionar la cinética de los estados excitados con las variables electrónicas. En el desarrollo teórico se ha mostrado que la aproximación maxwelliana resulta ser válida en ambos casos, y que, en una descarga de onda de superficie en un tubo largo, se puede evitar el conocimiento de la temperatura del gas para determinar la temperatura electrónica.
- Se ha desarrollado un modelo teórico simple para conocer la dependencia de la temperatura del gas respecto a diversas cantidades importantes de una descarga de argón, producida por onda de superficie en tubo largo cilíndrico. Así, se ha mostrado que existe una relación directa de la temperatura del gas con la densidad electrónica y el gasto de potencia en procesos elásticos. Así mismo, se ha encontrado que, en la zona de altas densidades electrónicas, el calentamiento que sufre el gas es un factor importante ya que puede cambiar las tendencias y los valores de todas las cantidades características del plasma. Por último, se ha obtenido que existe una relación lineal entre la temperatura del gas media en el plasma y el cociente entre la potencia incidente y la longitud de la columna.
- Se ha ideado un método para conocer el valor promedio de la temperatura del gas a lo largo de una columna de plasma de argón producido por onda de superficie, suponiendo un régimen viscoso laminar para el gas, y conociendo

las presiones en dos puntos del tubo, antes y después de encender el plasma. Este método se ha empleado en el laboratorio y se han conseguido conocer diferentes valores de la temperatura del gas que ajustan correctamente con las dependencias obtenidas en el modelo.

- Se ha puesto de manifiesto la existencia dos tiempos característicos en la evolución de la temperatura del gas, al calentarse o al enfriarse, uno asociado al propio gas, que está en el orden de los tiempos característicos con los que se alcanzan situaciones estacionarias en el plasma, y otro mucho mayor asociado al calentamiento/enfriamiento del recinto que rodea al plasma, medible fácilmente mediante la técnica experimental diseñada anteriormente.
- Se ha resuelto un modelo global de plasma de oxígeno generado a baja presión. En este modelo se han incluido las especies más importantes, y se ha puesto de manifiesto el papel que juega el coeficiente de recombinación en la pared del oxígeno atómico. Así, se han estudiado los resultados del modelo en función de dicho coeficiente, que está directamente relacionado con la temperatura del recinto del plasma.
- Se ha desarrollado una técnica de diagnóstico del plasma, relacionando las soluciones del modelo global con el cociente entre dos intensidades de caídas radiativas de los estados excitados del oxígeno atómico. Así, mediante la medición experimental de dichas intensidades se ha caracterizado al plasma, obteniéndose buenos ajustes entre los resultados del modelo y diferentes datos experimentales.

UNIVERSIDAD DE SEVILLA

Resolución de la Junta de Examinadores por los abajo firmantes
en el día de Mayo, año pasado de Noche Doctoral de
D. ALBERTO PALMERO ACEBEDO

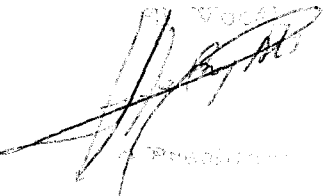
con el título "MODELOS TEÓRICOS DE PLASMAS DE ARGÓN y OXÍGENO
USADOS EN LA DEPOSICIÓN DE LÁMINAS DELGADAS"

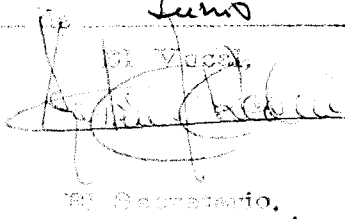
con el grado de Licenciado en Ciencias Sobresaliente cum laude
por unanimidad

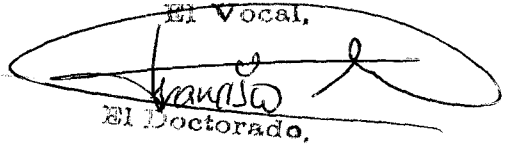
Sevilla 11

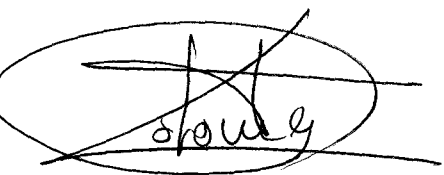
Junio

2002

El Vocal,

El Presidente

El Vocal,

El Secretario.

El Vocal,

El Doctorado.



Leí los A 