

微空心阴极放电的流体模型模拟^{*}

周俐娜[†] 王新兵

(华中科技大学激光技术国家重点实验室, 武汉 430074)

(2003 年 10 月 28 日收到, 2003 年 12 月 15 日收到修改稿)

采用流体模型研究了微空心阴极放电(MHCD)的特点,对放电中电场的形成,电子和离子的密度分布,电子能量分布进行了数值模拟.该计算是针对高气压,圆筒形阴极结构下的 He 放电.结果表明放电中存在空心阴极效应,从电子能量分布可以看出,放电中存在高能电子,放电空间的电场分布主要表现为径向电场.此外,通过改变气压,阴极孔径等参数计算出它们对放电的影响.分析表明减小小孔径有利于负辉区更充分的重合.提高气压将缩短阴极位降区.

关键词:微空心阴极放电,流体模型

PACC:5280,5265,5255

1. 引 言

低气压下空心阴极放电已广泛应用于光谱分析,真空镀膜,表面处理,气体激光器等领域^[1].如果将空心阴极作成微型结构(孔径为亚毫米量级)则可以在高气压(约 10kPa)下发生空心阴极效应,高气压下的空心阴极放电可应用在紫外光源,等离子体显示等领域.近年来,国外对此作了大量的实验研究^[2-4].本文对微空心阴极放电的基本特征作一些理论探讨.对发生空心阴极效应时电场的形成,带电粒子的浓度分布,电子能量分布作出数值模拟.

陈永洲等^[5]用 Monte Carlo 模型对 Ne 气在槽形空心阴极中的放电作了三维模拟,姚细林等^[6]用 Monte Carlo 模型对 Ar 气在槽形微空心阴极中的高气压放电作了三维模拟.但 Monte Carlo 模型必须建立在一个既定的假设电场的前提下,且只能得到电子能量,电子密度的统计分布(百分比分布).赖建军等^[7],余建华等^[8]用自洽模型(Monte Carlo 模型和流体模型的混合体)对 Ar 气在槽形空心阴极中的放电作了三维模拟,但他们只考虑了在较大尺寸电极中的低气压放电情况.本文则采用流体模型对 He 气在圆孔形微空心阴极中的高气压放电作三维模拟.

流体模型通过建立质量连续性方程,能量连续性方程及泊松方程的联立方程组,在时间轴上跟踪带电粒子群在电场中的迁移和扩散运动以及电离作用引起的空间电荷分布变化,而导致电场改变的过程,最后得到稳定放电时的电场和带电粒子密度分布.

2. 模型及算法

2.1. 基本模型

通过均质流体的物质守恒定理可以得到 Boltzman 方程组;通过高斯定理可以得到泊松方程^[9,10]

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_i = S_i, \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e = S_e, \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_\epsilon}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_\epsilon = S_\epsilon, \quad (3)$$

$$\nabla^2 \psi = -\frac{n_i - n_e}{\epsilon}, \quad (4)$$

其中

$$\Gamma_i = n_i u_i E - D_i \nabla n_i, \quad (5)$$

$$\Gamma_e = -n_e u_e E - D_e \nabla n_e, \quad (6)$$

^{*} 国家自然科学基金(批准号 50007003)资助的课题.

[†] E-mail: zln427@sohu.com, 电话: 02787556664(中国地质大学物理系, 武汉).

$$\Gamma_\epsilon = -\frac{5}{3} n_e u_e E - D_e \nabla n_e, \quad (7)$$

$$n_e = n_e \bar{\epsilon}, \quad (8)$$

$$S_e = S_i = K_i n_e N, \quad (9)$$

$$S_\epsilon = -e\Gamma_e \cdot E - K_i n_e \bar{\epsilon}_i - K_e n_e \bar{\epsilon}_e, \quad (10)$$

式中 n_e, n_i, N, m_e 分别为电子密度、正离子密度、中性粒子密度、电子平均能量密度, $\Gamma_e, \Gamma_i, \Gamma_\epsilon$ 分别为电子流密度、离子流密度、能量流密度, S_e, S_i, S_ϵ 分别为单位时间单位体积产生的电子数、离子数、能量大小, ψ 为电位, ϵ 为介电常数, u_e, u_i, D_e, D_i 分别为电子迁移率、离子迁移率、电子扩散系数、离子扩散系数, $\bar{\epsilon}$ 为电子平均能量, K_i, K_e 分别为电离反应速率系数、激发反应速率系数, $\bar{\epsilon}_i, \bar{\epsilon}_e$ 分别为发生电离反应和发生激发反应的能量阈值。(10)式中第一项为电子在电场中获得的能量,后两项为电子与其他粒子碰撞时损失掉的能量。

2.2. 算法

本文采用有限差分法来求解 Boltzman 方程和泊松方程的联立方程组,所考察的空间区域是一个圆柱体形的放电空间,阳极构成圆柱体的两个底面,阴极构成圆柱体的柱面。设轴向为 z 方向,径向为 r 方向。由于放电空间是轴对称的,取任一经过圆心的截

面进行分析就能反映整个放电空间的情况。首先对这样一个截面进行网格化,在 z 方向均匀的取 s 条网格线,在 r 方向均匀的取 k 条网格线,网格线之间的间距为 h 。上下的粗边界线表示阴极,两侧的粗边界线表示阳极。最中间一根线表示中轴线,如图 1 所示。

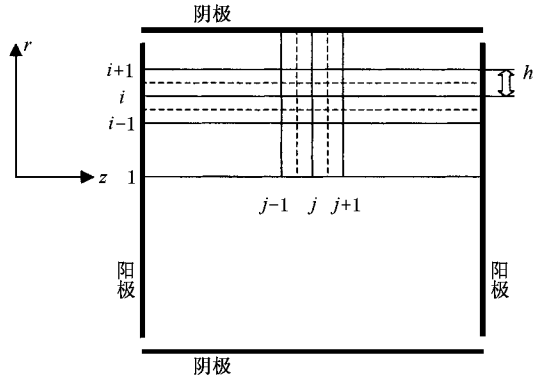


图 1 模拟电极结构以及网格划分示意图

对于 Boltzman 方程(1)–(3),其左边第二项 $\nabla \cdot \Gamma_\gamma$ (γ 可以表示电子,离子,电子平均能量)在径向对称的情况下可表示为^[11]

$$\nabla \cdot \Gamma_\gamma = \frac{\partial \Gamma_{\gamma r}}{\partial r} + \frac{\partial \Gamma_{\gamma z}}{\partial z} + \frac{\Gamma_{\gamma r}}{r}. \quad (11)$$

在图 1 所示的网格上进行差分逼近,可以得到

$$\nabla \cdot \Gamma_\gamma(i, j) = \frac{\Gamma_{\gamma r}(i + \frac{1}{2}, j) - \Gamma_{\gamma r}(i - \frac{1}{2}, j)}{h} + \frac{\Gamma_{\gamma z}(i, j + \frac{1}{2}) - \Gamma_{\gamma z}(i, j - \frac{1}{2})}{h} + \frac{\Gamma_{\gamma r}(i, j)}{(i - 1)h}, \quad (12)$$

而

$$\Gamma_{\gamma r}(i + \frac{1}{2}, j) = (\pm 1, -\frac{5}{3}) u_\gamma(i + \frac{1}{2}, j) E_r(i + \frac{1}{2}, j) n_\gamma(i + \frac{1}{2}, j) - D_\gamma(i + \frac{1}{2}, j) \frac{n_\gamma(i + 1, j) - n_\gamma(i, j)}{h}, \quad (13)$$

$$\Gamma_{\gamma r}(i - \frac{1}{2}, j) = (\pm 1, -\frac{5}{3}) u_\gamma(i - \frac{1}{2}, j) E_r(i - \frac{1}{2}, j) n_\gamma(i - \frac{1}{2}, j) - D_\gamma(i - \frac{1}{2}, j) \frac{n_\gamma(i, j) - n_\gamma(i - 1, j)}{h}, \quad (14)$$

$$\Gamma_{\gamma z}(i, j + \frac{1}{2}) = (\pm 1, -\frac{5}{3}) u_\gamma(i, j + \frac{1}{2}) E_z(i, j + \frac{1}{2}) n_\gamma(i, j + \frac{1}{2}) - D_\gamma(i, j + \frac{1}{2}) \frac{n_\gamma(i, j + 1) - n_\gamma(i, j)}{h}, \quad (15)$$

$$\Gamma_{\gamma z}(i, j - \frac{1}{2}) = (\pm 1, -\frac{5}{3}) u_\gamma(i, j - \frac{1}{2}) E_z(i, j - \frac{1}{2}) n_\gamma(i, j - \frac{1}{2}) - D_\gamma(i, j - \frac{1}{2}) \frac{n_\gamma(i, j) - n_\gamma(i, j - 1)}{h}, \quad (16)$$

(13)–(16)式中,根据 γ 取离子,电子,电子平均能

量,右式第一项的系数 $(\pm 1, -\frac{5}{3})$ 分别取 $+1, -1,$

$-\frac{5}{3}$. 在本文中, 设 ζ 为任一物理量. 令

$$\zeta\left(i + \frac{1}{2}, j\right) = \frac{1}{2}[\zeta(i, j) + \zeta(i + 1, j)] \quad (17)$$

$$\zeta\left(i, j + \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}[\zeta(i, j) + \zeta(i, j + 1)] \quad (18)$$

$$\zeta\left(i - \frac{1}{2}, j\right) = \frac{1}{2}[\zeta(i, j) + \zeta(i - 1, j)] \quad (19)$$

$$\zeta\left(i, j - \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}[\zeta(i, j) + \zeta(i, j - 1)]. \quad (20)$$

将(12)–(20)式分别代入(1)–(3)式, 即可得到 Boltzman 方程在时间轴和空间轴上的差分格式. 设时间步长为 dt , 相邻两个时刻的放电参数分别用 ξ^N 和 ξ^{N+1} 表示, ξ 可以为电子浓度, 离子浓度, 电子平均能量等. 如对于离子有

$$\begin{aligned} n_i^{N+1}(i, j) = & n_i^N(i, j) + dt [S_i(i, j) \\ & - AN(i, j)n_i^N(i + 1, j) \\ & - AS(i, j)n_i^N(i - 1, j) \\ & - AE(i, j)n_i^N(i, j + 1) \\ & - AW(i, j)n_i^N(i, j - 1) \\ & - AC(i, j)n_i^N(i, j)], \quad (21) \end{aligned}$$

$$S_i(i, j) = K_i(i, j)n_e^N(i, j)N, \quad (22)$$

其中 AN, AS, AE, AW 是该点和与该点邻接的正北方、正南方、正东方、正西方那一点的离子迁移率, 离子扩散系数, 径向、轴向电场 (AN, AS 只与径向电场有关, AE, AW 只与轴向电场有关) 的函数, AC 则与该点及周围四点的离子迁移率、离子扩散系数和电场均有关.

对于泊松方程, 同样可以得到在轴对称条件下的差分格式^[12]

$$\begin{aligned} \psi^{N+1}(i, j) = & \frac{1}{4} [\psi^N(i - 1, j) + \psi^N(i + 1, j) \\ & + \psi^N(i, j - 1) + \psi^N(i, j + 1) \\ & + \frac{1}{\chi(i - 1)} (\psi(i + 1, j) - \psi(i - 1, j))] \\ & + eh^2 \frac{n_i^{N+1}(i, j) - n_e^{N+1}(i, j)}{\epsilon}. \quad (23) \end{aligned}$$

2.3. 数据输入

求解 Boltzman 方程组时需要一系列的系数: 电子迁移率 u_e , 电子扩散系数 D_e , 离子迁移率 u_i , 离子扩散系数 D_i , 电离系数 K_i , 激发系数 K_e . 对于这些系数的获得, 国内外研究人员做过大量的研究, 本

文根据他们得到的曲线, 通过插值法得到所需要的数据作为方程的输入. 电子迁移率与电子平均能量的关系, 电离和激发系数与电子平均能量的关系, 离子迁移率与 E/p 值的关系均取自文献 [10]. 电子和离子的扩散系数通过爱因斯坦关系式^[13] $\frac{u_e}{D_e} = \frac{e}{kT_e}$ 及

$$\frac{u_i}{D_i} = \frac{e}{kT_i} \text{ 得出.}$$

2.4. 边界条件

根据电动力学原理, 电极边界上的垂直流向极板的带电粒子流密度应为^[10, 14]

$$\Gamma_\eta = (\pm)\alpha u_\eta E n_\eta + \frac{1}{4} V_{th\eta} n_\eta - \frac{1}{2} D_\eta \nabla n_\eta \quad (24)$$

E 为垂直朝向极板的电场强度, α 当带电粒子实际运动方向朝向极板时取 1, 背向极板时取 0. 带电粒子为电子时等式右边第一项取负号, 为离子时取正号. $V_{th\eta}$ 为热运动速度, 有

$$V_{th\eta} = \sqrt{\frac{8kT_\eta}{\pi M_\eta}}, \quad (25)$$

而同时, 带电粒子流密度在气体边界为

$$\Gamma_\eta = \pm u_\eta E n_\eta - D_\eta \nabla n_\eta, \quad (26)$$

对正离子, 不论在阴极边界或阳极边界 (24) 式和 (26) 式右部应相等. 即

$$\pm \alpha u_\eta E n_\eta + \frac{1}{4} V_{th\eta} n_\eta - \frac{1}{2} D_\eta \nabla n_\eta \quad (27)$$

$$= \pm u_\eta E n_\eta - D_\eta \nabla n_\eta.$$

这样就建立了边界点与邻接点上正离子密度之间的关系. 对于电子, 在阳极边界用同样的方法进行处理, 在阴极边界, 若考虑二次电子发射, 处理方法有所不同. 由于正离子打出来的 γ 电子出射方向背向阴极, 这部分电子基本上不流回阴极. 因此, 对于电子, 应将 α 电子和 γ 电子区别对待. 对 α 电子, 同样满足 (27) 式, 对于 γ 电子, 有

$$\Gamma_{\gamma r} = -\gamma \Gamma_{ir}, \quad (28)$$

即

$$-u_e E n_\gamma - D_e \nabla n_\gamma = -\gamma \Gamma_i. \quad (29)$$

由 (29) 式可以得到阴极边界点上 γ 电子密度与正离子密度之间的关系表达式, 由 (27) 式可以得到阴极边界点与邻接点上 α 电子密度的关系表达式. 而

$$n_e = n_\gamma + n_\alpha. \quad (30)$$

这样, 就可求得阴极边界点与临界点上电子密度之间的关系表达式.

3. 模拟结果

本节给出了部分模拟结果. 首先模拟了 He 在放电电压 300V, 气压 13300Pa, 阴极孔径 300 μm , 阴极筒长 200 μm 的放电条件下, 电子浓度、离子浓度、电

子平均能量、电场的空间分布. 然后研究气压和阴极孔径变化时的放电特性.

3.1. 微空心阴极放电的一般特性

图 2 的模拟条件为极间电压 300V, 气压 13300Pa, 阴极孔径 300 μm , 阴极筒长 200 μm .

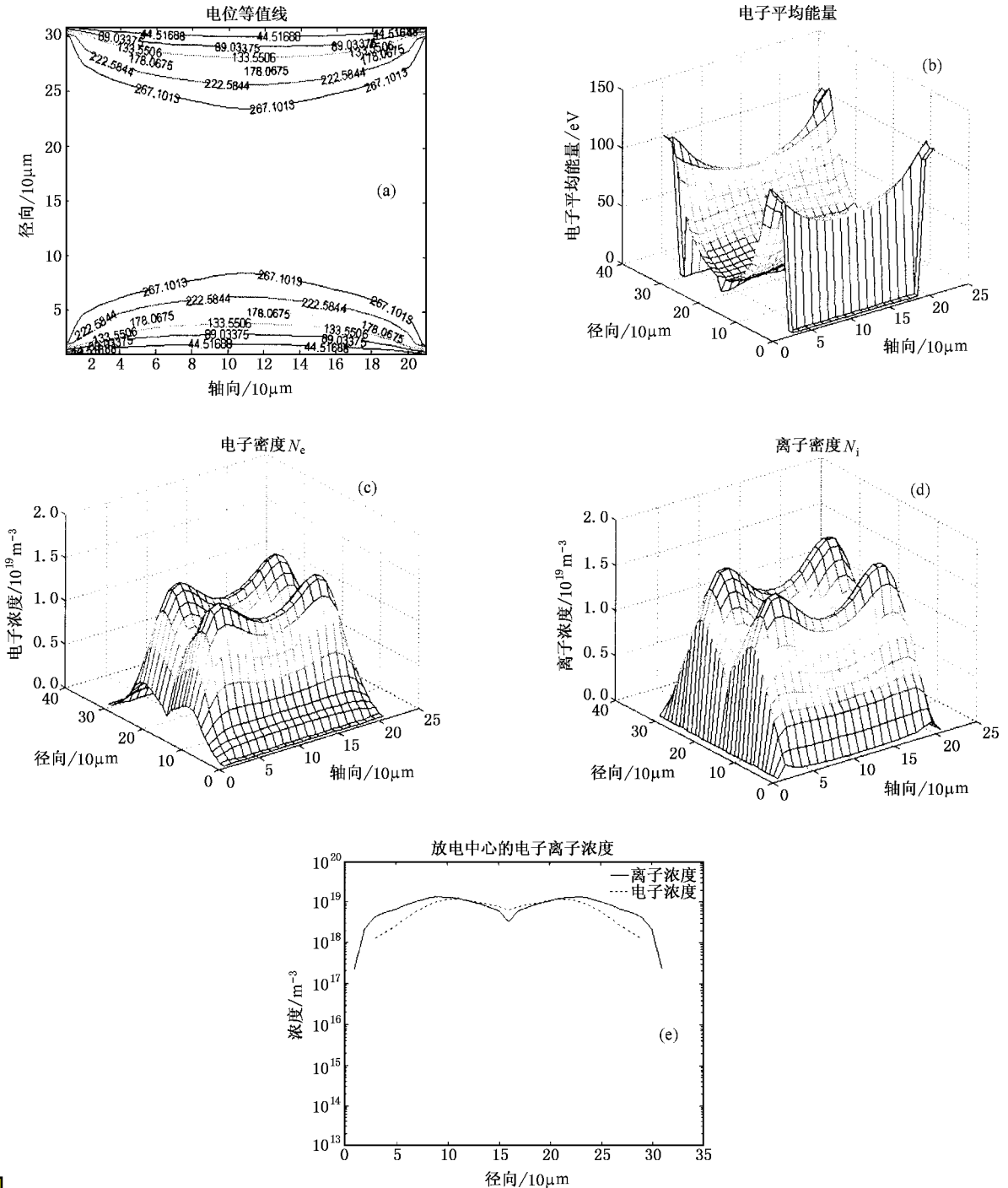


图 2 微空心阴极放电的一般特性 (a) 电位线 (b) 电子平均能量 (c) 电子浓度 (d) 离子浓度 (e) 平行于阳极且与两阳极等距的截面上沿径向的电子和离子浓度

由图 2(a)所示的电位分布可见,放电空间基本上为径向电场,轴向电场很弱.可以注意到在微空心阴极放电中,虽然阴极孔径很小,但在微空心阴极放电中存在两个明显的区域,即靠近阴极的阴极位降区,以及位于阴极中心的负辉区.从图 2(b)所示的电子平均能量分布也可以看出阴极位降区电子能量较高,在放电空间存在高能量电子和较低能量的电子.从放电的电子密度和离子密度的分布可以看出靠近阴极密度较高,而在阴极中心出现最小值,表明此时负辉区还没有完全重合.

3.2. 气压变化对微空心阴极放电特性的影响

图 3 为在气压 9310Pa 时的电子浓度、离子浓度、电位的空间分布.比较图 2(c)、图 2(d)和图 3(a)、图 3(b)可以发现,气压降低时,带电粒子浓度

降低,电子密度和离子密度沿径向出现极大值,说明此时放电的负辉区重合得更多.而气压较高时,带电粒子密度沿径向出现极小值,负辉区未充分重合.而比较图 2(a)和图 2(c)可见,放电空间的等电位线分布变疏,说明气压降低时,放电空间的电场减弱,这是由于带电离子浓度降低所造成的.

3.3. 阴极孔径变化对微空心阴极放电特性的影响

图 4 为阴极孔径分别为 240 μm 、360 μm 时电子浓度、电场的空间分布.

与图 2(c)比较,可以看出,孔径增加,电子密度降低,同时电子密度沿径向很明显出现极小值,这是由于负辉区未重合所造成的.同时还可以注意到孔径减小时,电子密度沿轴向的非均匀性增加,出现轴向电场,如图 4(c)所示.

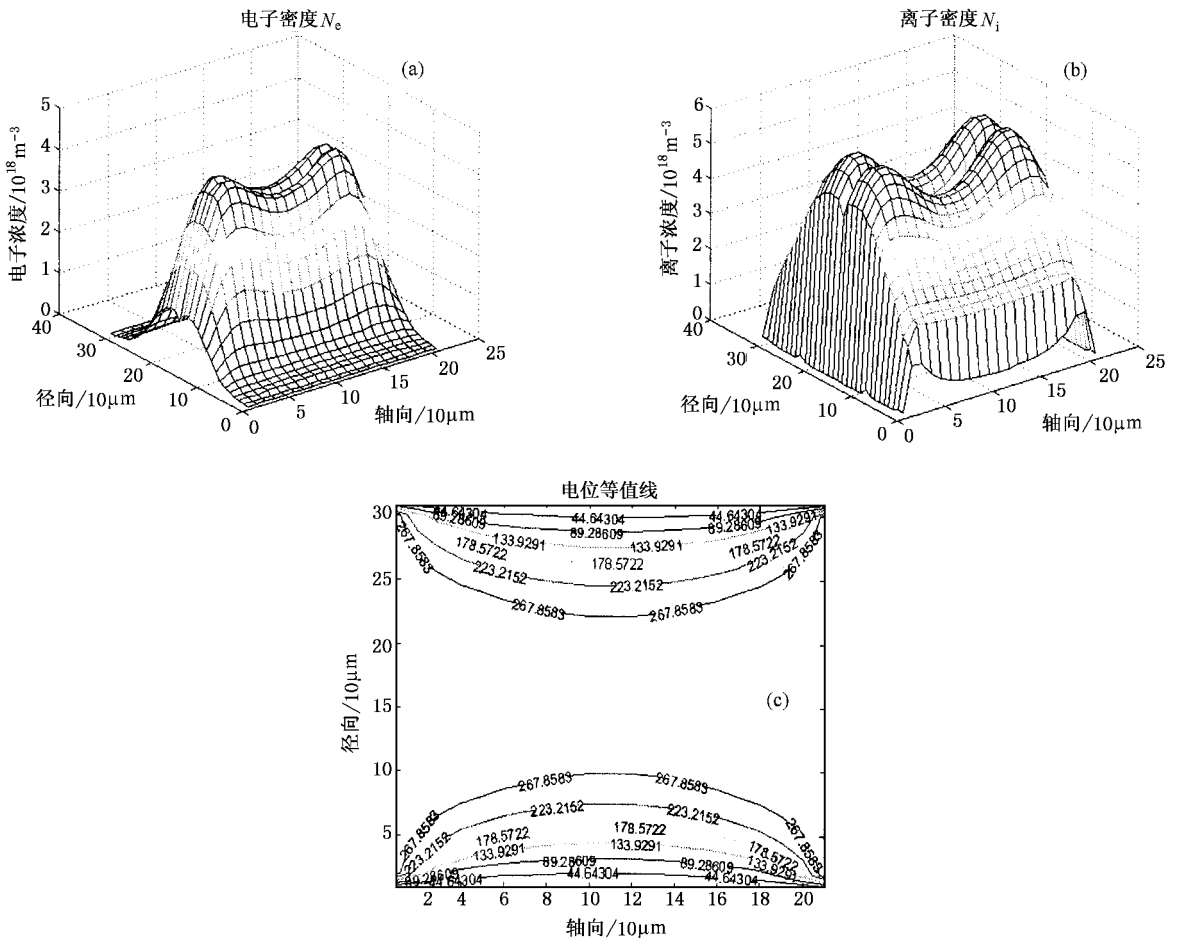


图 3 气压 9kPa 时电子浓度 (a) 离子浓度 (b) 电位 (c) 的空间分布



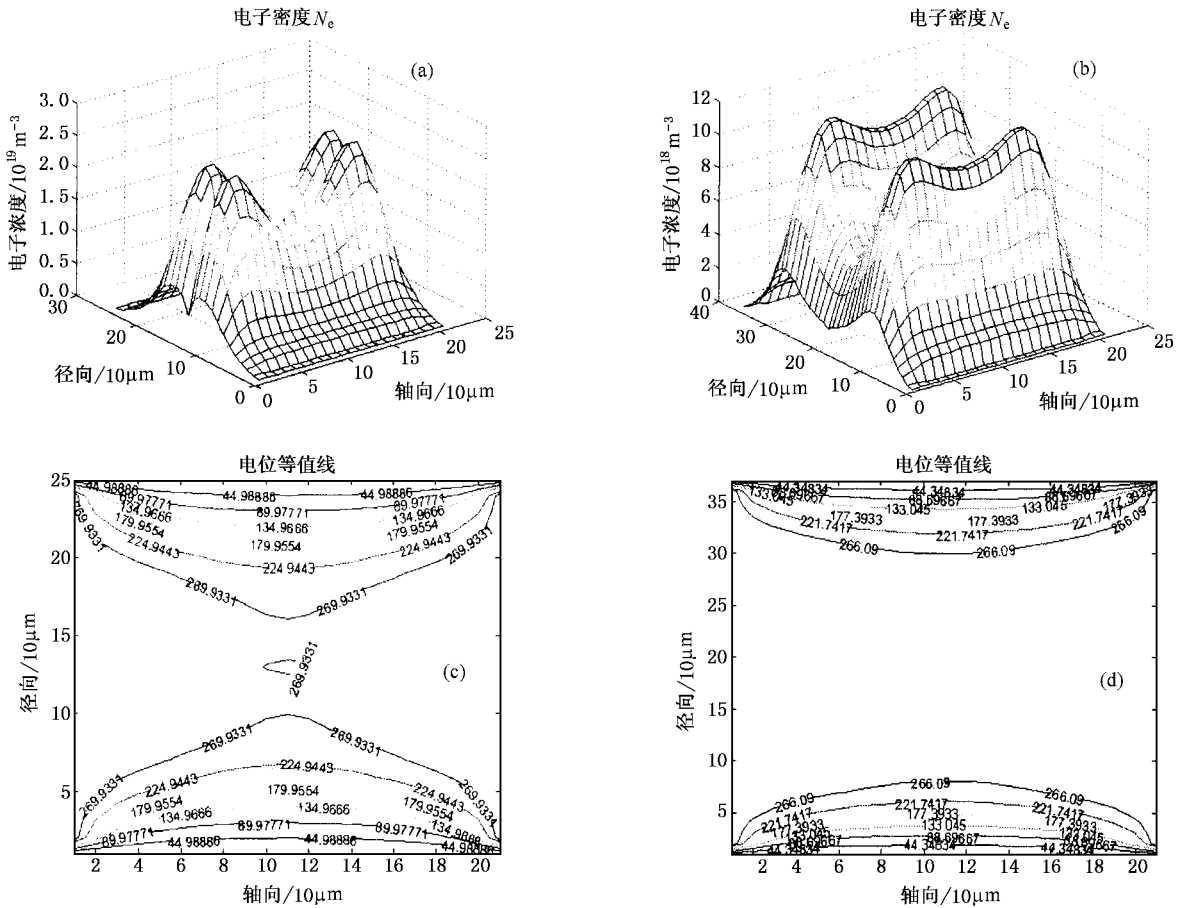


图 4 阴极孔径 240 μm 和 360 μm 时电子浓度 (a) 和 (b) 电位 (c) 和 (d) 的空间分布

4. 结 论

1. 放电达到稳定状态时,空心阴极内部的电场表现为径向电场,轴向电场非常小.电子能量沿径向增强,在负辉区电子能量在 10eV 左右,靠近阴极处达到近 100eV.电子和离子浓度分布呈抛物线状,靠近阴极时小,孔径内部大,但在气压较大或孔径较大时,会出现两个峰值,这时负辉区没有重合,空心阴

极效应的程度相对较弱,当减小气压或减小孔径时,双峰互相靠近,最终将重合.

2. 改变气压时,当气压减小时,等电位线相应变疏,反之变密.且电子和离子浓度在增加气压时得到增加.

3. 改变孔径时,对负辉区重合程度和带电粒子浓度均有影响.孔径越小,负辉区重合得越多,电子和离子浓度越大.孔径越大,负辉区重合得越少,电子和离子浓度越小.改变孔径对电场分布影响不大.

[1] Zhou K Y 1983 *Hollow cathode discharge and its applications Sichuan* (Vacuum Science and Technology Press) in Chinese [周开亿 1983 空心阴极放电及其应用 (四川真空科学与技术杂志社)]
 [2] Schoenbach K H , Verhappen R and Tessnow T 1996 *Appl. Phys. Lett.* **68** 13
 [3] Ahmed El-Habachi , Schoenbach K H 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 22
 [4] Ahmed El-Habachi , Schoenbach K H 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 885

[5] Chen Y Z , Chen Q M , Li J , Lai J J and Qiu J L 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 1665 (in Chinese) [陈永洲、陈清明、李军、赖建军、丘军林 1998 物理学报 **47** 1665]
 [6] Yao X L , Wang X B and Lai J J 2003 *Acta Phys. Sin.* **53** 1450 (in Chinese) [姚细林、王新兵、赖建军 2003 物理学报 **53** 1450]
 [7] Lai J J , Wang X B , Qiu J L , Yu J H and Huang J J 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1528 (in Chinese) [赖建军、王新兵、丘军林、余建华、黄建军 2001 物理学报 **50** 1528]

- [8] Yu J H ,Lai J J ,Huang J J ,Wang X B and Qiu J L 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2080 (in Chinese) [余建华、赖建军、黄建军、王新兵、丘军林 2002 物理学报 **51** 2080]
- [9] Meyyappan M and Kresovsky J P 1990 *J. Appl. Phys.* **68** 1506
- [10] Hagelaar G J M 2000 *Modeling of microdischarges for display technology* (Eindhoven : Technische Universiteit Eindhoven)
- [11] Daily J W and Harleman D R F 1981 *Fluid dynamics* (Beijing : People 's Education Press [in Chinese] [J. W. 戴莱 ,D. R. F. 哈里曼 1981 流体力学 (北京 : 人民教育出版社)]
- [12] Liu S M 1991 *Numerical calculus for electromagnetic field* (Wuhan : Huazhong University of Science and Technology Press [in Chinese] [刘圣民 1991 电磁场的数值方法 (武汉 : 华中理工大学出版社)]
- [13] Qiu J L 1999 *Gaseous electronics* (Wuhan : Huazhong University of Science and Technology Press [in Chinese] [丘军林 1999 气体电子学 (武汉 : 华中科技大学)]
- [14] Newton R R 1948 *Phys. Rev.* **73** 570

A fluid model for the simulation of discharges in microhollow cathode^{*}

Zhou Li-Na Wang Xin-Bing

(State Key Laboratory of Laser Technology ,Huazhong University ,Wuhan 430074 ,China)

(Received 28 October 2003 ; revised manuscript received 15 December 2003)

Abstract

A microhollow cathode discharge (MHCD) was investigated by means of a fluid model. A high-pressure He gas discharge for a cylindrical cathode was used in the model. The distribution of the electric field , electrons , ions and electron energy has been calculated. The results show that there exists a hollow cathode discharge effect in the discharge process. There existed electrons with high energy , and the electric field was mainly a radial field close to the cathode in the discharge area. The influences of gas pressure and dimension of the cathode on discharge characteristics were also investigated. We found that reducing the dimension of the cathode can enhance the hollow cathode effect , and increasing pressure will shorten the cathode fall.

Keywords : microhollow cathode discharge , fluid model

PACC : 5280 , 5265 , 5255

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50007003).