

氩气微腔放电中特性参数的数值模拟研究*

夏广庆^{1)†} 薛伟华¹⁾ 陈茂林²⁾ 朱雨³⁾ 朱国强³⁾

1)(大连理工大学工业装备结构分析国家重点实验室, 航空航天学院, 大连 116024)

2)(西北工业大学航天学院, 西安 710072)

3)(保尔·萨巴蒂埃大学等离子体与能量转换实验室, 法国图卢兹 31062)

(2010年5月11日收到;2010年7月31日收到修改稿)

本文采用二维自洽完全流体模型, 针对阳极为通孔的高气压微腔放电结构, 研究了微腔放电的参数特性. 数值计算得到了氩气压强为 100 Torr, 放电稳态时的电势分布、电子数密度分布和电子温度分布等重要参数. 模拟结果表明放电区存在显著的阴极鞘层结构, 电子数密度的峰值达到 10^{20} m^{-3} , 电子温度的量级为几个 eV 至十几 eV, 该结论与实验结果相一致. 数值模拟合理的解释了微腔放电的基本原理.

关键词: 微腔放电, 等离子体模拟, 流体模型

PACS: 52.50.Dg, 51.50.+v, 52.30.Ex, 52.75.Di

1. 引言

微腔放电(MCD)由阴极-电介质-阳极组成, 厚度为几百微米, 三明治的结构中使用激光束制成直径为几十至几百微米的放电腔, 微腔内可产生稳定的高气压辉光等离子体. MCD的研究始于20世纪末, 随着微电子技术的迅速发展和大气压放电的深入研究, MCD受到了等离子体届的广泛关注. 由于微腔放电的实验研究受到了其自身小尺寸结构的制约, 诸多等离子体诊断技术并不适用, 因此, 数值模拟成为研究MCD原理和参数特性的重要手段. Kothnur等提出了氩气中MCD的一维计算研究结果^[1], 然后提出了二维流体计算模型, 研究了氩气中不同压强下平面阳极结构的微放电现象^[2]. Kushner发表了氩气中使用锥形阴极结构的二维计算研究, 表明重要的击穿特性与帕邢定律相似^[3]. Miclea等以氩气和氦气为放电气体, 在高气压下对MCD进行了诊断^[4]. Munoz-Serrano等数值研究了氩气中压强为100 Torr ($1 \text{ Torr} = 1.33322 \times 10^2 \text{ Pa}$)时MCD的放电特性^[5]. Deconinck等数值研究了氩气中MCD工作模式转换特征^[6]. 王新兵等采用蒙特卡洛模拟了高气压下MCD中电子的运动过程^[7],

采用流体模型初步研究了氩气中圆筒形阴极结构的微放电特点^[8]. 本文针对阳极为通孔的实际放电结构, 采用二维流体模型数值模拟了MCD的参数特性, 得到了电势分布、电子和离子数密度分布以及电子温度分布等重要参数.

2. 计算模型

对于高气压(几千帕到一个大气压)和放电尺寸约为几百微米的微腔放电, 粒子的平均自由程小于放电的特征长度, 故可采用完全流体模型的方法开展微腔放电的研究工作. 漂移扩散近似模型是近年来发展起来的一种等离子体数值模型. 该模型中, 动量方程采用漂移扩散近似处理, 近似认为等离子体的速度在每个时间步长上是不变的, 且速度梯度可以忽略, 该模型可较好的应用于各种非平衡冷等离子体的激发和输运过程数值研究, 如MCD, DBD, RF放电等^[6, 9].

2.1. 控制方程

模型基于下列方程^[9-11]

电子的连续性方程

* 中央高校基本科研业务费专项资金资助(批准号:3014-893309), 国家建设高水平大学公派研究生项目(批准号:[2006]3074, [2008]3039), 中国博士后科学基金(批准号:20100471633)和辽宁省博士科研启动基金(批准号:20101020)资助的课题.

† E-mail: gq.xia@dlut.edu.cn

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e = S_e; \quad (1)$$

离子的连续性方程

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_i = S_i; \quad (2)$$

泊松方程

$$\nabla^2 V = -\frac{e}{\epsilon_0}(n_i - n_e); \quad (3)$$

电子平均能量方程

$$\frac{\partial n_e \epsilon_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_{\epsilon_e} = S_{\epsilon_e}. \quad (4)$$

这里, n_e 和 n_i 分别表示电子和离子数密度, Γ_e, Γ_i 和 Γ_{ϵ_e} 分别表示电子、离子通量以及电子能量通量, V 为电势, S_e, S_i 和 S_{ϵ_e} 分别表示电子、离子源项以及能量源项, e 为电子所带电荷, ϵ_0 是真空介电常数, ϵ_e 为电子平均能量, $n_e \epsilon_e$ 表示电子能量密度.

电子平均能量假定为电子任意运动的结果, 满足关系式

$$\epsilon_e = \frac{3}{2} k_B T_e. \quad (5)$$

带电粒子通量和电子能量通量可由漂移-扩散方程近似描述为^[12]

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

$$\Gamma_i = n_i \mu_i E - D_i \nabla n_i, \quad (7)$$

$$\Gamma_{\epsilon_e} = -\frac{5}{3} n_e \epsilon_e \mu_e E - \frac{5}{3} D_e \nabla (n_e \epsilon_e). \quad (8)$$

这里, 右端第一项表示由于电场漂移引起的通量, 右端第二项表示由于密度梯度扩散引起的通量. $\mu_{e,i}$ 和 $D_{e,i}$ 分别为电子和离子的迁移率和扩散系数. E 为带电粒子产生的静电场, 满足方程

$$\nabla \cdot E = \frac{e}{\epsilon_0}(n_i - n_e). \quad (9)$$

电场强度 E 可以用电势的负梯度表示

$$E = -\nabla V. \quad (10)$$

模型中假定大部分的电离由基态原子与电子碰撞的直接电离积累而成, 则方程(1), (2) 和(4) 中的源项可以表达为

$$S_e = S_i = S = k_i n_e N, \quad (11)$$

$$S_{\epsilon_e} = -e \Gamma_e \cdot E - n_e E_i k_i N. \quad (12)$$

这里, N 是原子数密度, k_i 为电离率. 方程(12) 中, 右端第一项为电场加热, 右端第二项代表碰撞中的能量损失. E_i 为氩的电离能.

原子数密度与压强的关系由理想气体的状态方程给出

$$p = N k_B T_g. \quad (13)$$

这里, p 为压强, k_B 为玻尔兹曼常数, T_g 为气体温度.

求解上述方程需要知道电离率 k_i , 输运系数 $\mu_{e,i}$ 和 $D_{e,i}$. 该系数与气体种类有关, 计算中选用氩气的相关参数^[13].

对于离子

$$\mu_i = \frac{0.12 \text{ m}^2 \cdot \text{Torr}}{p \text{ V} \cdot \text{s}}. \quad (14)$$

对于非热平衡等离子体电子温度远远高于离子温度, 所以取 $D_i = 0.001 D_e$.

对于电子

$$\mu_e = \frac{33 \text{ m}^2 \cdot \text{Torr}}{p \text{ V} \cdot \text{s}}. \quad (15)$$

带电粒子输运系数遵从爱因斯坦关系式

$$\frac{D}{\mu} = \frac{k_B T}{e}. \quad (16)$$

电离率可以表示为^[14]

$$k_i = k_i(\epsilon_e) = \begin{cases} 0, & \epsilon_e < 5.3, \\ 8.7 \times 10^{-15} (\epsilon_e - 5.3) \exp[-4.9 / \sqrt{\epsilon_e - 5.3}], & \epsilon_e \geq 5.3, \end{cases} \quad (17)$$

其中, k_i 的单位为 m^3/s , ϵ_e 的单位是 eV.

2.2. 边界条件

1) 电子和离子连续性方程边界条件: 对于电子, 在不考虑二次电子发射时, 垂直固体壁面(电极或者电介质)处的通量边界条件为^[9]

$$\Gamma_{e,n} = \pm a n_e \mu_e E + \frac{1}{4} n_e v_{e,th}. \quad (18)$$

这里, $v_{e,th}$ 为电子的热速度, 若粒子漂移速度直接朝向壁面, 则 a 为 1, 其他情况下, a 为 0.

对于离子, 垂直固体壁面(电极或者电介质)处的通量边界条件为

$$\Gamma_{i,n} = n_i \mu_i E. \quad (19)$$

2) 电子平均能量方程的边界条件: 假定固体壁面处的电子温度为恒定值 0.5 eV.

3) 泊松方程的边界条件: 阴极电势为 -200 V,

阳极电势为零.

电介质表面的电势通过累积在电介质表面上的全部面电荷而确定. 电介质表面上的电势由介质中的高斯定律计算如下^[2]:

$$V_{di} = \left[V_{pi} + \frac{\Delta x}{\epsilon_0} \left(\rho_s + \frac{\epsilon_d}{d} V_s \right) \right] / \left(1 + \frac{\epsilon_d \Delta x}{d \epsilon_0} \right), \quad (20)$$

这里, V_{pi} 为等离子体中垂直电介质表面距离为 Δx 处的电势, ϵ_d 为电介质的介电常数, ϵ_0 是真空介电常数, d 为电介质的厚度, V_s 为电极间的电压. 计算中电势 V_{pi} 取为靠近边界的内节点值, Δx 为内节点到边界的距离.

面电荷密度 ρ_s 的守恒方程为

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} - e(\Gamma_e + \Gamma_i) = 0. \quad (21)$$

其他边界条件为法向电场等于零.

2.3. 数值方法

图1所示为MCD的放电结构和计算区域, 计算中使用非均匀的分区网格, 针对不同的区域使用不同的网格密度, 物理量随空间变化较大的区域使用较密的网格, 以确保合理的计算精度和效率. 孔内计算网格采用密度较大的均匀网格, 沿半径方向有51个网格点, 沿轴线方向有226个网格点, 即孔内网格径向间距为 $1 \mu\text{m}$, 轴向间距为 $2 \mu\text{m}$. 孔外计算网格采用非均匀网格, 沿半径方向有101个网格点, 沿轴向有55个网格点. 控制方程使用有限体积法进行空间离散. 对于通量项 $\mathbf{\Gamma}$, 采用幂指数格式进行离散^[15], 求解输运方程的特征步长使用 Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) 条件^[16].

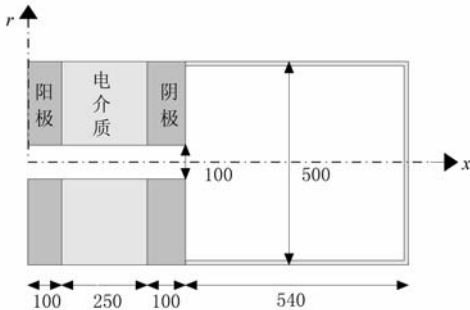


图1 MCD的放电结构和计算区域(单位: μm)

3. 模拟结果与分析

计算过程中采用的基本条件为: 纯氩气, 压强为 100 Torr. MCD 的几何结构为: 微腔孔直径为 100

μm , 电介质的厚度为 $250 \mu\text{m}$, 两个电极的厚度均为 $100 \mu\text{m}$.

3.1. 电势

图2所示为放电不同时刻的电势分布图, 可以看出在放电的初始阶段, 从阴极到阳极, 电势在放电的大部分区域逐渐增大, 在阴极区存在一个微小的凸起部分, 随着时间的推移, 电势在阴极区的突起部分愈加明显, 在阴极附近形成了环形鞘层结构, 放电初始阶段主要为轴向电场, 放电稳态时由于阴极鞘层的形成表现出显著的径向电场, 此时阳极、电介质和阴极孔中心区域的电势基本为零, 电势降发生在阴极鞘层区. MCD 的电势分布与其他低气压辉光放电相似, 在总体等离子体区中具有相对均匀的分布, 通过阴极鞘层发生突然下降^[17]. 从电势分布图还可以看出, MCD 的重要特性为鞘层的存在占据了放电体积的很大部分, 阴极鞘层厚度约为 $10 \mu\text{m}$, 这不同于传统的低气压、大体积辉光放电中鞘层仅占据放电体积的很小部分.

3.2. 电子数密度

如图3所示为电子数密度空间分布, 阴极鞘层附近的径向电场使得电子在阴极鞘层间来回振荡, 大大增加了电离效率和电子数密度, 电子数密度峰值位于孔中心线上的阴极区域, 达到 10^{20}m^{-3} . 在相同压强下 (100 Torr), 氩气中 MCD 实验测量的孔中心区电子数密度峰值量级亦为 10^{20}m^{-3} , 与实验结果相一致^[18].

3.3. 离子数密度

由于放电稳定时, 除了鞘层区域内, 电子和离子的数密度分布较大外, 在自洽电场的作用下, 电子和离子在其他区域的分布均会非常相近. 离子数密度的峰值位于孔中心线上的阴极区域, 达到 10^{20}m^{-3} .

3.4. 径向电场

图4所示为径向电场分布图. 径向电场占据了整个阴极区域的 20%, 量级大小为 $10^6 - 10^7 \text{V/m}$, 径向电场加速电子在阴极区中的来回运动, 增强了电离过程, 使电子数密度比其它的高气压辉光放电至少大一个数量级.

3.5. 电子温度

图5所示为电子温度分布图. 电子温度在孔内

环形阴极鞘层区域最高, 其峰值量级为十几 eV. 而在总体等离子体区域, 电子温度相对较低, 总体等离子体电子温度约为几个 eV.

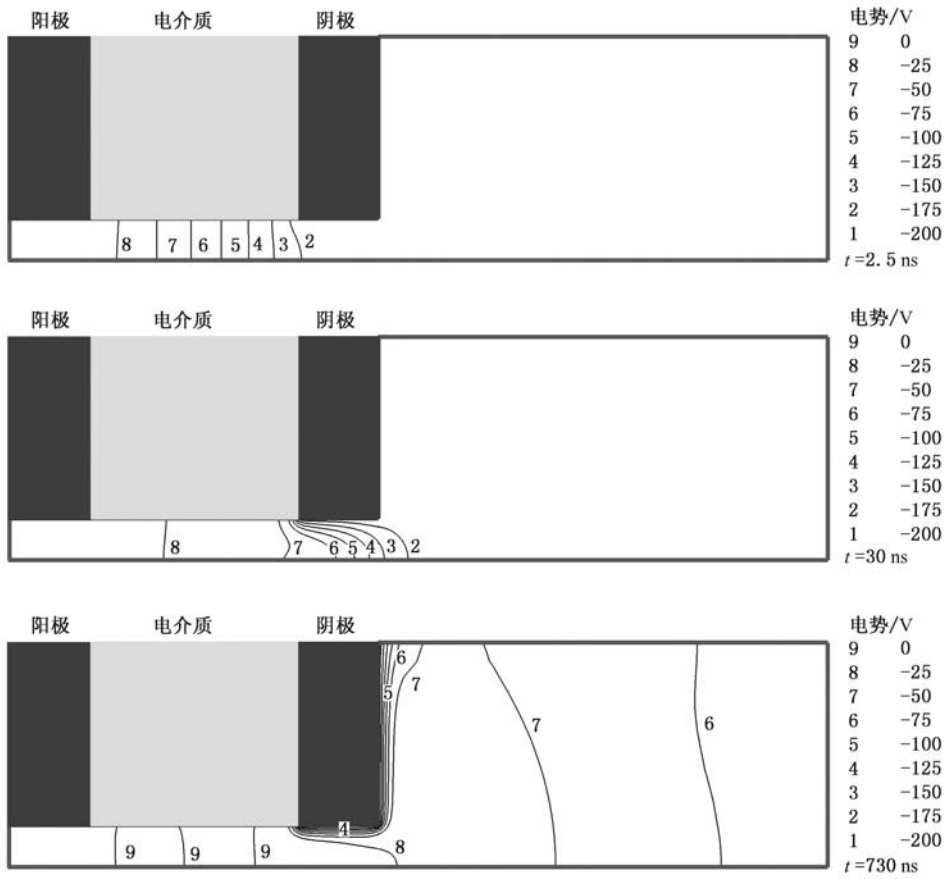


图2 不同时刻的电势分布图

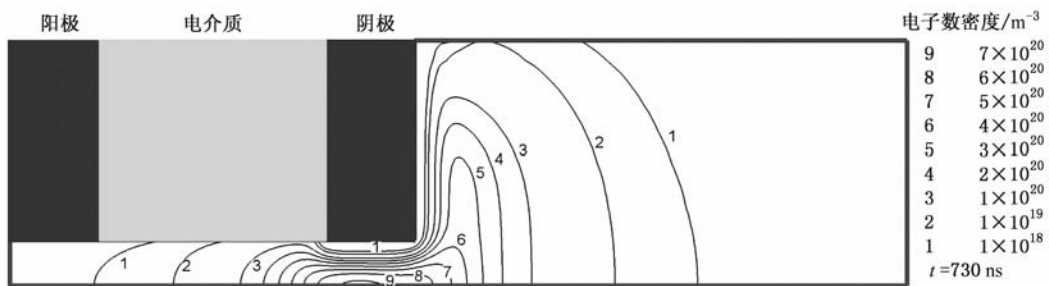


图3 电子数密度分布

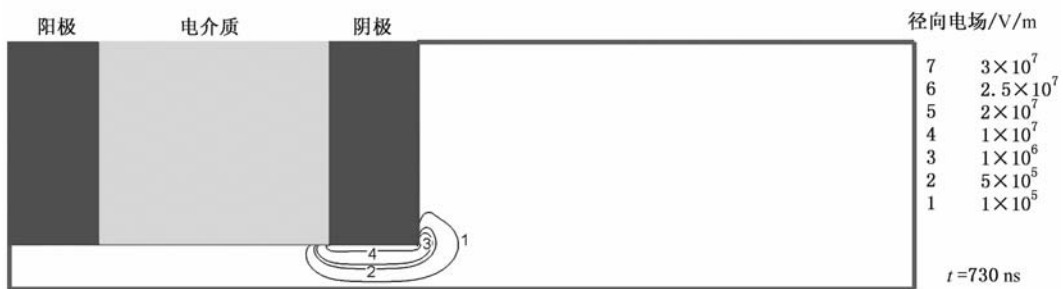


图4 径向电场分布

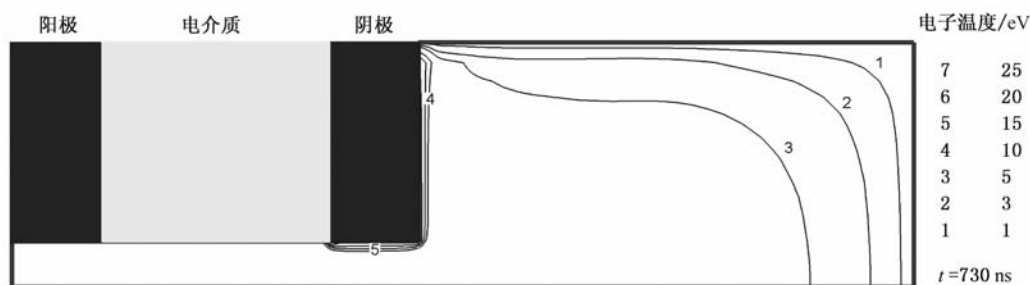


图5 电子温度分布

4. 结 论

基于求解漂移-扩散近似的电子和离子的输运方程,再与包括空间电荷在内的电场的泊松方程相耦合,给出了放电的二维自洽流体模型,针对阳极通孔的实际放电结构,在放电气体选用氩气,压强为 100 Torr 的条件下,通过数值计算研究了 MCD 稳态时的重要放电参数特性. 从电势分布图中可以明显看到由于阴极鞘层形成的径向电场,径向电场加速孔内电子在阴极鞘层间的来回运动,增大了电

离过程. 电子数密度和离子数密度分布规律相似,峰值位于孔中心线上的阴极区域,峰值密度达到 10^{20} m^{-3} . 电子温度在孔内环形阴极鞘层区域最高,其峰值量级为十几 eV,而在总体等离子体区域,电子温度相对较低,总体等离子体电子温度约为几个 eV. 数值模拟给出了实验研究中难以观测到的放电分布形态,合理的解释了 MCD 的基本原理,为 MCD 的广泛应用提供了技术支持和可行的计算方法.

感谢法国约瑟夫·傅里叶大学 Nader Sadeghi 研究员的建议讨论.

- [1] Kothnur P S, Yuan X, Raja L L 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 529
- [2] Kothnur P S, Raja L L 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 043305
- [3] Kushner M J 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 846
- [4] Miclea M, Kunze K, Heitmann U, Florek S, Franzke J, Niemax K 2005 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **38** 1709
- [5] Munoz-Serrano E, Hagelaar G, Callegari T, Boeuf J P, Pitchford L C 2006 *Plasma Phys. Control. Fusion* **48** 391
- [6] Deconinck T, Raja L L 2009 *Plasma Process. Polym.* **6** 335
- [7] Yao X L, Wang X B, Lai J J 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1450 (in Chinese) [姚细林、王新兵、赖建军 2003 物理学报 **52** 1450]
- [8] Zhou L N, Wang X B 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3440 (in Chinese) [周俐娜、王新兵 2004 物理学报 **53** 3440]
- [9] Boeuf J P, Pitchford L C 1995 *Phys. Rev. E* **51** 1376
- [10] Zhang H Y, Wang D Z, Wang X G 2007 *Chin. Phys.* **16** 1089
- [11] Li Y X, Ma Y, Shao X J, Zhang G J 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 8747 (in Chinese) [李娅西、马跃、邵先军、张冠军 2010 物理学报 **59** 8747]
- [12] Ouyang J M, Shao F Q, Wang L, Fang T Z, Liu J Q 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4974 (in Chinese) [欧阳建明、邵福球、王龙、房同珍、刘建全 2006 物理学报 **55** 4974]
- [13] Brown S C 1966 *Basic Data of Plasma Physics* (Massachusetts: Massachusetts Institute of Technology Press) p182
- [14] Passchier J D P, Goedheer W J J 1993 *J. Appl. Phys.* **74** 3744
- [15] Zhao Y L 2008 *MS Thesis* (Dalian: Dalian University of Technology) (in Chinese) [赵永莉 2008 硕士学位论文 (大连:大连理工大学)]
- [16] Barnes M S, Colter T J, Elta M E 1986 *J. Appl. Phys.* **61** 81
- [17] Qiu L, Meng Y D, Ren Z X 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5872 (in Chinese) [裘亮、孟月东、任兆杏 2006 物理学报 **55** 5872]
- [18] Xia G Q, Sadeghi N 2009 *29th International Conference on Phenomena in Ionized Gases*, Cancún, México, July 12—17, 2009, p10

Numerical simulation study on characteristic parameters of microcavity discharge in argon*

Xia Guang-Qing^{1)†} Xue Wei-Hua¹⁾ Chen Mao-Lin²⁾ Zhu Yu³⁾ Zhu Guo-Qiang³⁾

1) (School of Aeronautics and Astronautics, State Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

2) (School of Astronautics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

3) (Laboratory on Plasma and Conversion of Energy(LAPLACE), Paul Sabatier University, Toulouse 31062, France)

(Received 11 May 2010; revised manuscript received 31 July 2010)

Abstract

The two-dimensional numerical model used is based on solutions of fluid equations in the drift-diffusion approximation for the electron and ion transport coupled with Poisson's equation for electric field to simulate microcavity discharge qualities. The computation results show the potential profile, electron density distribution, ion density distribution, and electron temperature spatial distribution at the argon pressure of 100 Torr. The potential contour shows that the radial component of the electric field becomes very important as the forming of the cathode sheath. The results indicate the peak electron density is 10^{20} m^{-3} , and the electron temperature is on the order of several to tens of eV.

Keywords: microcavity discharge(MCD), plasma simulation, fluid model

PACS: 52.50.Dg, 51.50.+v, 52.30.Ex, 52.75.Di

* Project supported by the Fundamental Research Funds for the Central Universities (Grant No. 3014-893309), the State Sponsored Graduate Scholarship Program for Building High-level Universities (Grant Nos. [2006]3074, [2008]3039), the China Postdoctoral Science Foundation (Grant No. 20100471633) and the Doctoral Scientific Research Starting Foundation of Liaoning Province (Grant No. 20101020).

† E-mail: gq.xia@dlut.edu.cn