

直流空心阴极放电中鞘层区 电子的输运过程*

魏合林 刘祖黎

华中理工大学物理系, 武汉 430074;

中国科学院武汉物理研究所波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉 430071

1993年4月26日收到

采用蒙特-卡洛方法对空心阴极放电中鞘层区电子的输运过程进行了研究. 电子在鞘层区被非均匀电场加速, 两次碰撞之间的步长是由电子与中性粒子的碰撞频率确定. 模型中三种碰撞截面积是由实验和理论数据拟合而来. 研究了电子平均能量、电子密度和电离系数在径向的分布. 电子能量的空间分布结果与实验很好地符合.

PACC: 5265; 5280; 5240K; 5225F

一、引言

空心阴极放电是低气压放电的一种特殊形式. 这种放电具有良好的稳定性, 较高的激发频率和狭窄的谱线宽度, 因而广泛应用于激光、光源、光谱分析和半导体薄膜的制备中. 文献[1]对空心阴极放电的研究进行了总结, 提供了大量的实验数据和理论依据.

一般的平行板辉光放电中, 极间存在四个区(阴极区、负辉区、正柱区和阳极区). 如用一个空心电极代替阴极, 在一定的放电条件下, 原来的阴极区及负辉区全部移到空心阴极的内部. 如果是平极空心阴极, 则空心阴极中有三个区: 两个阴极区和一个负辉区. 如果是圆柱空心阴极, 则在阴极内只存在两个区: 阴极区和负辉区. 与平行板电极放电一样, 在空心阴极放电的阴极区, 电场高且变化快, 因而在这样的电场中, 电子的运动是非平衡的, 它们的行为已不能用局域电场和气体密度来确定. 用玻耳兹曼方程或蒙特-卡洛方法描述这些电子的运动较为合适. 近年来, 采用蒙特-卡洛方法研究直流和射频辉光放电的文献较多^[2-4], 对空心阴极的研究较少. Kagan^[5]利用蒙特-卡洛方法对空心阴极放电中阴极区电子密度和能量分布进行了研究. 在他的文献中, 电子与中性粒子的碰撞过程是用零碰撞技术处理的. 这种方法与以前传统的方法相比, 处理方法比较简单.

本文用蒙特-卡洛方法研究空心阴极放电中阴极鞘层中电子的输运过程. 电子与中性粒子的碰撞过程由电子与中性粒子的碰撞频率和碰撞截面积决定. 我们考虑了三种类型的碰撞: 弹性、激发和电离碰撞. 它们的截面积是由实验和理论数据拟合而来. 文中

* 国家自然科学基金资助的课题.

计算了电子的平均能量、电子密度、电离系数以及电子能量的空间分布。计算结果与实验基本符合。

二、蒙特-卡洛模型

从理论上讲,采用蒙特-卡洛方法研究放电区电子的行为,需要对所有的电子进行跟踪。但实际上是不可能的,因为在放电区电子的密度一般为 $10^9 \sim 10^{11}/\text{cm}^3$, 数量极大,要对所有的电子进行研究,需要大量的计算时间,所以我们只能选择一小部分电子作为研究对象。在空心阴极放电中电子的行为不同于正常的平行板放电。在空心阴极中电子的运动类似于一个摆^[6], 需要相当长的时间才能到达阴极(或跑出空心阴极区),所以我们对电子的运行时间进行限制。一般地从放电开始到稳态放电需要大约 $100 \sim 200\text{ns}$ 的时间,我们选取 $t = 100\text{ns}$ 作为电子运动的时间限制。

1. 电场和电子运动

圆柱体空心极放电区只有两个区: 阴极鞘层区和负辉区。假设在阴极鞘层区电场是空阴极径向的函数,而在负辉区电场为零,

$$E(r) = -2V_c(r - r_d)/(R - r_d)^2 \quad r_d \leq r \leq R, \quad (1)$$

$$E(r) = 0 \quad r < r_d, \quad (2)$$

其中 V_c 为阴极位降, r_d 为负辉区半径, R 为空心阴极内径。由牛顿定律可知:

$$dv_r/dt = qE(r)/m_e, \quad (3)$$

$$dv_\phi/dt = 0; dv_z/dt = 0, \quad (4)$$

其中 q 为电子电荷, m_e 为电子质量, v_r, v_ϕ 和 v_z 分别为电子在径向、切向(即垂直与半径方向),和轴向速度分量。由此可知电子在两次碰撞间受径向电场的作用,其径向速度发生改变,而其它两个速度分量保持不变。

2. 电子与中性粒子的碰撞过程

本文考虑了三种类型的碰撞,它们的截面积与电子能量的关系是由实验和理论数据拟合而来。

$$\text{弹性碰撞}^{[7]}: \sigma_{el}(\varepsilon) = A \cdot \exp(B \cdot \varepsilon) + C, \quad (5)$$

非弹性碰撞^[8,9]:

$$\text{激发碰撞: } \sigma_{ex}(\varepsilon) = D \cdot (\varepsilon - \varepsilon_{ex})/[E + (\varepsilon - \varepsilon_{ex})^2] + F, \quad (6)$$

$$\text{电离碰撞: } \sigma_i(\varepsilon) = G \cdot (\varepsilon - \varepsilon_i)/[H + (\varepsilon - \varepsilon_i)^2], \quad (7)$$

式中 $\sigma_{el}(\varepsilon), \sigma_{ex}(\varepsilon), \sigma_i(\varepsilon)$ 分别为电子与中性粒子的弹性、激发和电离截面积,其单位为 10^{-16}cm^2 。 ε 为电子能量, $\varepsilon_{ex}, \varepsilon_i$ 分别为氦原子的激发和电离电位, $A, B, \dots, G$ 和 H 为拟合常数,则总的碰撞截面积为

$$\sigma_t(\varepsilon) = \sigma_{el}(\varepsilon) + \sigma_{ex}(\varepsilon) + \sigma_i(\varepsilon). \quad (8)$$

如果碰撞发生了,那么需要确定碰撞类型。由(5)~(8)式可以每一种类型的碰撞所占的几率:

$$P_j = \sigma_j(\varepsilon)/\sigma_i(\varepsilon) \quad j = el, ex \text{ 和 } i, \quad (9)$$

而总的几率 $\sum P_j = 1$, 把 $[0, 1]$ 分成三个区域, 分别对应于三种碰撞, 然后取一个均匀分布在 $[0, 1]$ 上的随机数 δ 来确定碰撞类型。

当 $0 \leq \delta \leq P_{el}$, 则为弹性碰撞, 碰撞后电子的能量为

$$\varepsilon' = \varepsilon \cdot [1 - (2m_e/M) \cdot (1 - \cos \chi)], \quad (10)$$

式中 M 为氦原子质量, χ 为电子的散射角, 由下式确定:

$$\chi = \cos^{-1}(1 - 2 \cdot \delta_1), \quad (11)$$

式中 δ_1 为均匀分布在 $[0, 1]$ 上的随机数。本文中所用的随机数都用 $\delta_i (i = 1, 2, \dots)$ 表示。

当 $P_{el} < \delta \leq P_{el} + P_{ex}$ 时, 碰撞为激发碰撞, 电子在碰撞后的能量为

$$\varepsilon' = \varepsilon - \varepsilon_{ex}; \quad (12)$$

而散射角为

$$\chi = \pi \cdot \delta_2. \quad (13)$$

当 $P_{ex} + P_{el} < \delta \leq 1$ 时, 将发生电离碰撞。散射电子的能量与新产生的二次电子的能量将由原入射电子的剩余能量分配

$$\begin{aligned} \varepsilon'_1 &= (\varepsilon - \varepsilon_i) \cdot \delta_3, \\ \varepsilon'_2 &= (\varepsilon - \varepsilon_i) \cdot (1 - \delta_3), \end{aligned} \quad (14)$$

$\varepsilon'_1, \varepsilon'_2$ 分别为散射电子和二次电子的能量。它们的散射角分别为

$$\begin{aligned} \text{散射电子: } \chi_1 &= \cos^{-1}[\varepsilon'_1/(\varepsilon - \varepsilon_i)]^{1/2}, \\ \text{二次电子: } \chi_2 &= \cos^{-1}[\varepsilon'_2/(\varepsilon - \varepsilon_i)]^{1/2}. \end{aligned} \quad (15)$$

而碰撞后电子的方位角都由下式给出:

$$\gamma = 2\pi\delta_4. \quad (16)$$

当我们知道了碰撞电子的能量、散射角和方位角后, 即可计算电子碰撞后的三个速度分量 (v_r, v_φ, v_z) 。

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} v_r \\ v_\varphi \\ v_z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \sin \theta \sin \phi & \sin \theta \cos \phi & \cos \theta \\ \cos \varphi \cos \phi - \cos \theta \sin \varphi \sin \phi & -\cos \varphi \sin \phi - \cos \theta \sin \varphi \cos \phi & \sin \theta \sin \varphi \\ \sin \varphi \cos \phi + \cos \theta \cos \varphi \sin \phi & -\sin \varphi \sin \phi + \cos \theta \cos \varphi \cos \phi & -\sin \theta \sin \varphi \end{bmatrix} \\ &\cdot \begin{bmatrix} v_0 \cos \chi \\ v_0 \sin \chi \cos \gamma \\ v_0 \sin \chi \sin \gamma \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (17)$$

式中 v_0 为碰撞后电子的速度 ($v_0 = \sqrt{2\varepsilon'/m_e}$). 而 (θ, φ, ϕ) 为碰撞前电子的速度方向与径向、切向和轴向的夹角。

3. 电子在两次碰撞间的步长

前面已介绍过, Kagan^[9] 采用零碰撞技术确定电子的步长。这种方法比较麻烦, 需要大量的计算时间。本文采用一种较简单的方法, 即用电子与中性粒子的碰撞频率来确定步长。一般地, 它们的平均碰撞频率为

$$\gamma = N \cdot \sigma \cdot \bar{v}_e, \quad (18)$$

式中 N 为中性粒子的密度, $\sigma, \bar{v}_e$ 为电子碰撞截面和电子速率。由于 σ 与电子能量有关, 我们把(18)式改为

$$\gamma = N \cdot \sigma_e(\epsilon) \cdot v_e(\epsilon), \quad (19)$$

式中 $\sigma_e(\epsilon)$ 由(8)式给出。所以电子的运行步长为

$$\tau = (-1/\gamma) \cdot \ln(\delta_s). \quad (20)$$

在我们的工作中, 气压为 1 Torr, 气温为 300K, σ_e 约为 10^{-14}cm^2 , 可以估计出

$$\tau \approx 10^{-10} - 10^{-11} \text{s}.$$

4. 分布函数

如果要计算电子的平均参数或参数分布, 首先必须知道电子的分布函数。建立一个二维相空间 (r, ϵ) 。 $f(r, \epsilon)$ 表示电子在相空间的分布函数, 则在相空间点 (r, ϵ) 附近的一个体元 $\Delta r \Delta \epsilon$ 中的电子数为

$$\Delta n = f(r, \epsilon) \cdot \Delta r \Delta \epsilon. \quad (21)$$

若设 $P(r, \epsilon, t - t_0)$ 表示在 $t = t_0$ 时刻从阴极表面发射一个电子 (二次电子则从其产生位置出发), 而在 t 时刻在相空间点 (r, ϵ) 附近发现这个电子的几率, 则在 t 时刻在相点 (r, ϵ) 附近体元 $\Delta r \Delta \epsilon$ 中发现的电子数为

$$\delta_n = \Phi_0 \Delta t P(r, \epsilon, t - t_0) \Delta r \Delta \epsilon, \quad (22)$$

式中 Φ_0 为从阴极表面发射的电子通量。当放电稳定后 Φ_0 为一个常量, 此时在 (r, ϵ) 附近的体元 $\Delta r \Delta \epsilon$ 中的电子数应为从 $t = -\infty$ 到 t_0 时刻所有从阴极发射电子的总贡献:

$$\Delta n = \Phi_0 \Delta r \Delta \epsilon \int_{-\infty}^{t_0} P(r, \epsilon, t - t_0) dt, \quad (23)$$

变换后得

$$\Delta n = \Phi_0 \Delta r \Delta \epsilon \int_0^{\infty} P(r, \epsilon, t) dt. \quad (24)$$

三、结果分析

放电条件为氦气为放电气体, 气压为 1 Torr, 气温为 300K, 阴极位降 $V_c = 350 \text{V}$, 空心阴极半径为 $R = 0.8 \text{cm}$, 负辉区半径为 $r_d = 0.5 \text{cm}$, 模拟电子数为 4000 个, 电子的初始能量为 5eV 。

图 1 和图 2 分别为电子平均能量和平均迁移速率的分布。从图中可以清楚地看到在空心阴极放电的鞘层区, 电子处于非平衡状态中。在整个阴极鞘层区电子的平均能量一直保持上升趋势。这说明电子在非弹性碰撞中损失的能量小于从电场中所获得的能量。换言之在阴极鞘层区非弹性碰撞较少。这是因为在阴极附近, 电子能量较低, 从(6)和(7)式可知, 此时非弹性碰撞截面较小。随着距阴极表面的距离增加, 电子在电场中被加速, 能量增加, 非弹性碰撞次数增加。但相对而言电子损失的能仍然小于所获得的能量, 所以平均能量继续上升。在阴极与负辉区交界处, 电子平均能量达到最大, 此时非弹性碰

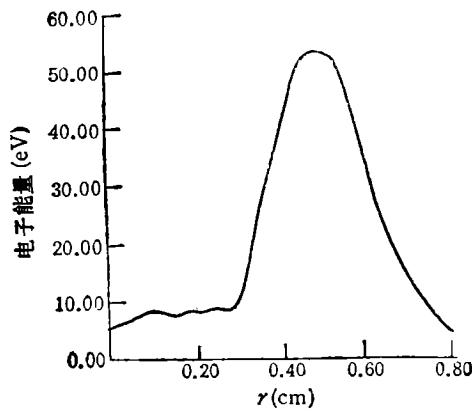


图1 电子平均能量沿径向分布

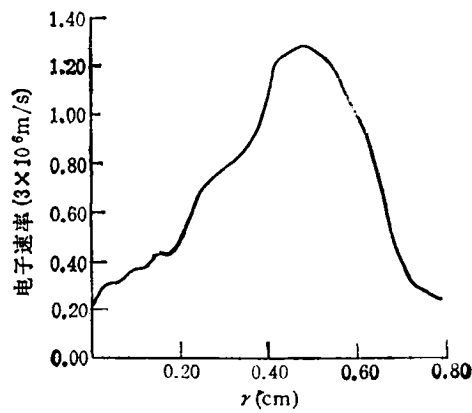


图2 电子径向迁移速率分布

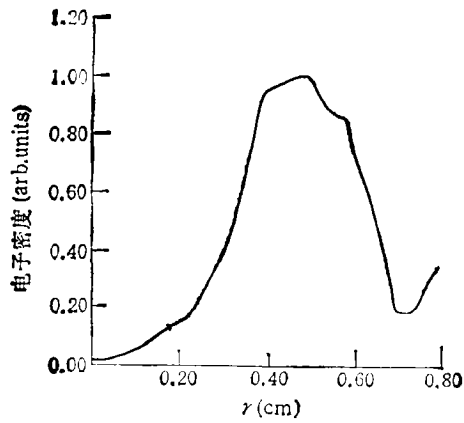


图3 电子密度沿径向分布

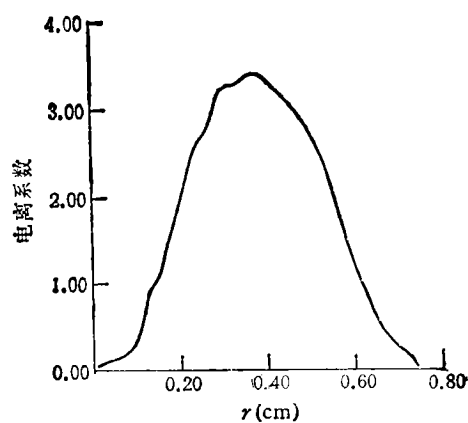


图4 电离系数沿径向分布

撞截面也近于最大,非弹性碰撞次数增加到最大,所以电子平均能量很快下降。当然平均能量下降的另一个原因是在负辉区中电场强度为零,损失了能量的电子无法补充能量,在负辉区,电子能量几乎不变,且处于较低的能量水平。由此可知,在空心阴极放电中的两个区内,电子分别处于两种运动状态:在阴极鞘层区电子为定向运动;而在负辉区电子处于热运动中。

图3为电子密度在 r 方向的分布。如果把整个截面上的电子密度分布画出,将是一个环状图。这个结果与文献[1]中所提供的结果一致。图4为电离系数的径向分布。这里采用以下公式计算电子的有效电离系数:

$$\alpha(r) = [1/M(r)] \cdot dM(r)/dr, \quad (25)$$

式中 $M(r)$ 为电子在 r 方向的增益,

$$M(r) = \Phi(r)/\Phi_0, \quad (26)$$

$\Phi_0, \Phi(r)$ 分别为阴极表面和 r 柱面上的电子通量, $\Phi(r)$ 由下式给出:

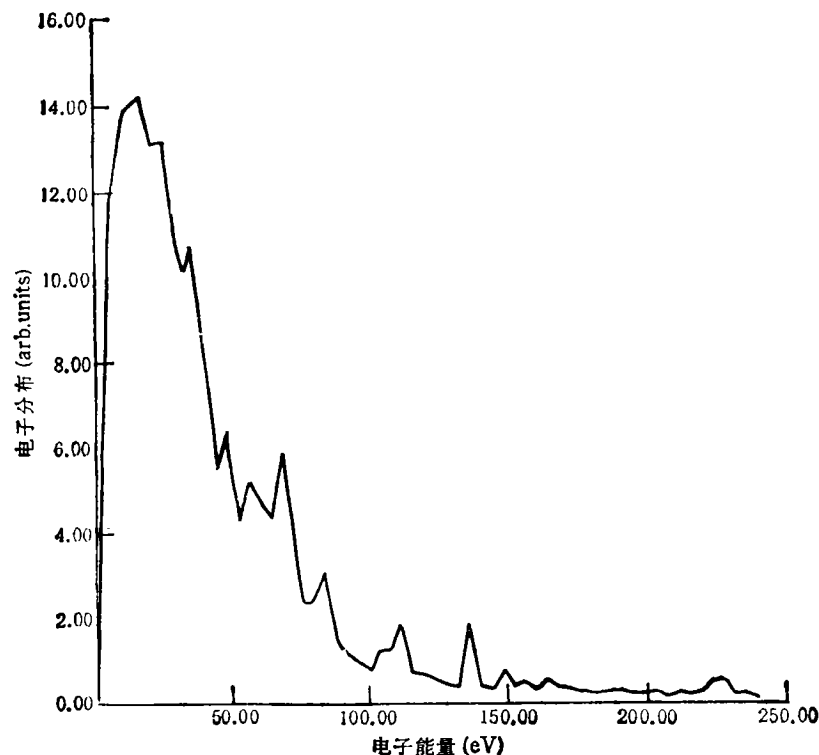


图5 放电区电子能量分布

$$\Phi(r) = f(r, \epsilon) \cdot v_r, \quad (27)$$

v_r 为径向速度分量。

从图中可以看出,在靠近阴极表面,电离系数等于零,然后随距离增加, $\alpha(r)$ 上升较快,到达负辉区时, $\alpha(r)$ 达到最大。比较图1、图3和图4可知,电子平均能量、电离系数和电子密度分布是相互关联的。平均能量下降,电离系数达到最大,而此时电子密度也是最大。

图5为电子能量分布。最大值在10—20eV之间,这样的分布不同于麦克斯韦分布。低能电子和快电子(高能电子)的比例加大了。快电子是由那些经历较少或未经非弹性碰撞的电子组成,而低能电子是那些经历较多非弹性碰撞的电子或电离产生的二次电子组成。这与文献[1]所提供的实验结果相符合。

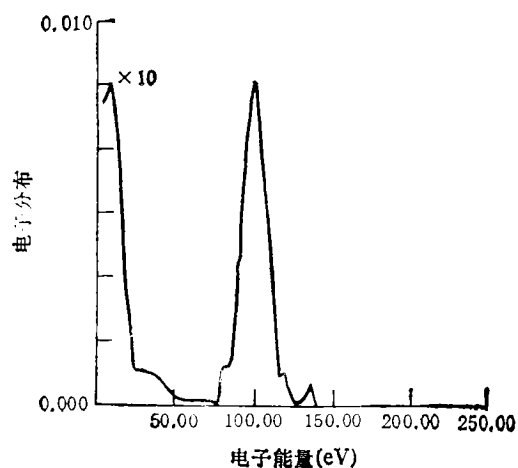


图6 电子能量分布 $r = 0.65\text{cm}$

图6至图8分别对应于三个不同柱面上电子能量的分布。从这三个分布图可以较清

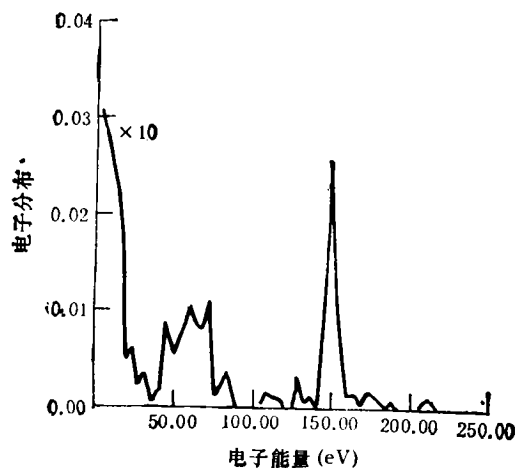


图7 电子能量分布 $r = 0.5\text{cm}$

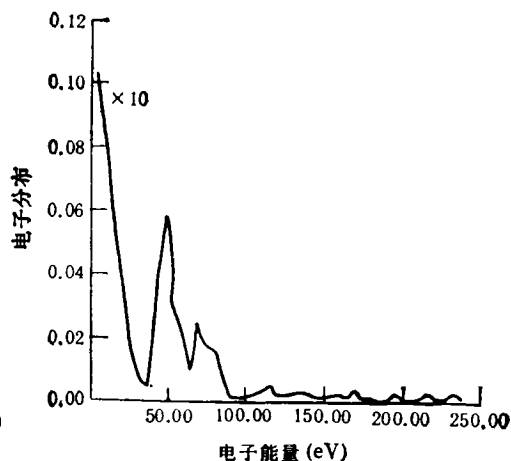


图8 电子能量分布 $r = 0.35\text{cm}$

楚地看到在空心阴极放电中电子能量分布的变化。在阴极鞘层区,有相当一部分电子处于高能状态。这些电子是由未经历碰撞的电子或经历较少碰撞的电子组成。而此处低能电子由两部分组成:一部分是经历较多碰撞的电子和电离产生的二次电子;另外一部分是由于电子的摆运动而处于摆的边缘的电子。从图7可知,有相当一部分电子未经历碰撞,以较高的能量进入负辉区,而且在50—100eV之间出现了另一部分电子。我们称它为中间能量电子。这些电子是由那些经历较少碰撞的电子组成。在负辉区中央电子的分布集中于0—100eV之间,同时有少量的高能电子存在(大于100eV)。这说明在负辉区,电子在非弹性碰撞中损失较多的能量,即非弹性碰撞较多,这就是为什么在负辉区中发光较强的原因。

关于高能电子的计算结果已在 Pringle^[10], Gill 和 Webb^[11] 的实验中发现。

四、结 论

本文采用蒙特-卡洛方法研究了氩直流空心阴极放电中电子的运动情况。电子在两次碰撞之间的步长由电子与中性粒子的碰撞频率决定。计算了电子平均能量、电离系数和电子密度的分布,发现这三个参量之间关系密切。另外还计算了电子能量分布及空间不同柱面上电子能量分布。发现电子的能量分布由三部分组成,对应于:低能电子;中间能量电子和高能电子。这一结果与实验结果^[10,11]符合。与零碰撞技术相比,这种方法简单,计算量小。

[1] M. E. Pillow, *Spectro. Acta*, **36B**(1981), 821.

[2] M. Yumoto, Y. Kuroda and T. Sakai, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **24**(1991), 1594.

[3] J. E. Lawler, E. A. DenHartog and W. N. G. Hitchon, *Phys. Rev.*, **A43**(1991), 4427.

[4] J. P. Boeuf and E. Marode, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **15**(1982), 2169.

- [5] Y. M. Kagan, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **18**(1985), 1113.
- [6] 周开亿, 空心阴极放电及其应用, 真空科学与技术杂志社, 北京, (1982), 第8页.
- [7] R. W. Labahn and J. Callaway, *Phys. Rev.*, **A12**(1970), 366.
- [8] T. Itoh and T. Musha, *J. Phys. Soc. Japan*, **15**(1960), 1675.
- [9] R. M. S. John, F. L. Miller and C. C. Lin, *Phys. Rev.*, **134**(1964), 888.
- [10] D. H. Pringle and W. E. D. Farvis, *Proc. Phys. soc.*, **B68**(1955), 836.
- [11] P. Gill and C. E. Webb, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **10**(1977), 299.

ELECTRON TRANSPORT PROCESS IN CATHODE SHEATH OF HELIUM dc HOLLOW CATHODE GLOW DISCHARGE PLASMA*

WEI HE-LIN LIU ZU-LI

Department of Physics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074;

State Key Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics,

Wuhan Institute of Physics, Academia Sinica, Wuhan 430071

(Received 26 April 1993)

ABSTRACT

In this paper, the electron transport process in cathode sheath of helium dc hollow cathode glow discharge is studied by using Monte Carlo simulation. The electron is accelerated between collisions by the non-uniform electric field of the hollow cathode sheath. The electron free flying time between collisions is determined by collision frequency of electron with neutral particle. The experimental data of collision cross section are fitted to semi-experience expressions. The electron mean energy and spatial energy distribution, and other parameters distribution are studied. The results are in good agreement with experimental ones.

PACC: 5265; 5280; 5240K; 5225F