

建立低温等离子体理论模型的数学方法^{*}

郭小明 白秀庭

(清华大学电机工程与应用电子技术系, 北京 100084)

(1994年3月17日收到)

对如何求解描述低气压低温等离子体的基本方程提出详尽的叙述, 并对某些读者提出的问题作了具体的解释. 这个方法, 在数学和物理上, 可能具有重要的意义.

PACC: 5220; 5200; 5280

1 引 言

近期我们完成一个解析式辉光放电理论模型^[1]. 该模型是由一组完全自洽的解析表达式组成. 由于求解这些表达式的数学过程很繁复, 在文章中对它只作了简要的叙述. 因此, 有些读者对该模型提出异议, 认为文中所采用的解析表达式不正确^[2]. 本文的目的是: (1) 针对某些读者所提出的问题作具体解释; (2) 对于求解各表达式的数学过程提出详尽的叙述. 这样可使有疑问的读者消除疑问, 同时对其他读者亦可提供一些有用的参考. 因为所求解的方程均为描述低气压低温等离子体的基本方程. 探讨如何求解这些方程, 不仅在数学上, 而且在物理上, 也具有重要的意义. 特别是对正在从事这方面理论研究的工作者.

从1910年起, 不少学者曾试图从上述的方程中求得解析表达式, 但由于非线性原因, 均未获得完全成功^[3-7]. 因此, 有人认为求解此类方程是不可能的^[8,9]. 近期人们大都采用数值模拟法, 但由于人为边界条件问题, 由数值模拟法计算所得结果不能自洽^[10].

2 描述等离子体的基本方程

我们研究的对象是直流、平板电极条件下的辉光放电等离子体. 描述它的基本方程包括电子、离子的连续方程; 泊松方程(瞬态); 麦克斯韦方程和电子、离子的流量方程. 具体表达式描述如下:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \Gamma_- = f N_0 n, \quad (1)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \nabla \Gamma_+ = f N_0 n, \quad (2)$$

^{*} 国家自然科学基金资助的课题.

1) 刘祖黎教授的个人书信(1993年11月14日).

$$\nabla^2 V - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 V}{\partial t^2} = \frac{e}{\epsilon_0} (n - N), \quad (3)$$

$$\nabla E = \frac{e}{\epsilon_0} (N - n), \quad (4)$$

$$\Gamma_- = -unE - D\nabla n, \quad (5)$$

$$\Gamma_+ = u'NE - D\nabla N. \quad (6)$$

上面各式中符号的意义详见文献[1]. 在文献[1]中的假设条件下, 方程(1)–(6)可简化为

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_T \left(\frac{\partial^2 n}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial n}{\partial r} \right) + D_l \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} + u \left(E_z \frac{\partial n}{\partial z} + n \frac{\partial E_z}{\partial z} \right) + fN_0 n, \quad (7)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D_T' \left(\frac{\partial^2 N}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial N}{\partial r} \right) + D_l' \frac{\partial^2 N}{\partial z^2} - u' \left(E_z \frac{\partial N}{\partial z} + N \frac{\partial E_z}{\partial z} \right) + fN_0 n, \quad (8)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 V}{\partial t^2} = \frac{e}{\epsilon_0} (n - N), \quad (9)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial z} = \frac{e}{\epsilon_0} (N - n), \quad (10)$$

$$\Gamma_- = - \left(unE_z + D_l \frac{\partial n}{\partial z} \right) e_z - D_T \frac{\partial n}{\partial r} e_r, \quad (11)$$

$$\Gamma_+ = \left(u'NE_z - D_l' \frac{\partial N}{\partial z} \right) e_z - D_T' \frac{\partial N}{\partial r} e_r. \quad (12)$$

下一节将叙述如何从方程(7)–(12)中, 求得一组表达 n, N, V, E_z, Γ_- 和 Γ_+ 的三维解析式. 这些表达式必须完全满足方程(7)–(12)和实际的边界条件. 在下面三种情况下分别进行了求解.

1) 稳态: $\frac{\partial V}{\partial t} = 0$ 且 $\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial N}{\partial t} = 0$;

2) 亚稳态: $\frac{\partial V}{\partial t} = 0$ 且 $\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial N}{\partial t} \neq 0$;

3) 瞬态: $\frac{\partial V}{\partial t} \neq 0$ 且 $\frac{\partial n}{\partial t} \neq \frac{\partial N}{\partial t} \neq 0$.

3 求解基本方程的过程

在求解过程中主要以分离变量法为起点, 同时以我们新创的数学方法为依据, 完成全部过程. 下面是在亚稳态情况下进行求解的过程, 稳态解只须将亚稳态解中的时间 t 用 t_s 代替即可得到, t_s 表示从亚稳态到达稳态的时间, 详细的物理意义请参考文献[1, 11]. 在瞬态情况下, 只求得了部分解. 因此, 在本文及前面文章中均未提出报道.

首先依据分离变量法, 令

$$n(r, z, t) = P(r)S(z)T(t), \quad (13)$$

同时将 fN_0 用另外四个未知常数代替, 即

$$fN_0 = a + b + c + d, \quad (14)$$

然后将(13)和(14)式代入(7)式,并将等号两边同除以 $P(r)S(z)T(t)$ 可得到

$$\left[\frac{1}{T} \frac{dT}{dt} - a \right] - \left[\frac{D_T}{P} \left(\frac{d^2 P}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dP}{dr} \right) + b \right] - \left[\frac{D_I}{S} \frac{d^2 S}{dz^2} + c \right] - \left[u \left(\frac{\partial E_z}{\partial z} + \frac{E_z}{n} \frac{\partial n}{\partial z} \right) + d \right] = 0. \quad (15)$$

在(15)式等号左端第一个大括号中,它们只是 t 的函数;第二个大括号中,它们只是 r 的函数;第三个大括号中,它们只是 z 的函数;而第四个大括号中,它们是 r, z, t 的函数,因为 E_z 在一般情况下是 r, z, t 的函数。因此,(15)式必须分成(16)和(19)式四个独立的方程,否则(15)式在一般情况下是不可能成立的。到此我们已将一个原为非线性的方程(7)分解为如下四个线性方程:

$$\frac{dT}{dt} - aT = 0, \quad (16)$$

$$\frac{1}{P} \left(\frac{d^2 P}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dP}{dr} \right) + \frac{b}{D_T} = 0, \quad (17)$$

$$\frac{d^2 S}{dz^2} + \frac{c}{D_I} S = 0, \quad (18)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial z} + \frac{E_z}{n} \frac{\partial n}{\partial z} + \frac{d}{u} = 0. \quad (19)$$

有些读者提出疑问,认为(15)式不能分解为四个方程,而应该是三个如下方程式:

$$\frac{dT}{dt} - aT = 0, \quad (20)$$

$$\frac{1}{P} \left(\frac{d^2 P}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dP}{dr} \right) + \frac{b}{D_T} = 0, \quad (21)$$

$$\frac{D_I}{S} \frac{d^2 S}{dz^2} + \frac{u E_z}{S} \frac{dS}{dz} + u \frac{\partial E_z}{\partial z} + c + d = 0. \quad (22)$$

解答这个问题,需回到(7)式。由于(7)式含有三个独立变量 r, z, t , 因此,在一般情况下,应变量 n, E_z 都是 r, z 和 t 的函数(在特殊情况下, E_z 可以是少于三个独立变量的函数)。不然,这将暗示(7)式不适用于三维和瞬态的情况,那显然是不合理的。既然 E_z 可以是 r, z 和 t 的函数,(22)式在一般情况下显然不能成立,因为该式等号左端第一项 $\frac{D_I}{S} \frac{d^2 S}{dz^2}$ 只含独立变量 z 。因此,在一般情况下,(15)式只能分解成四个方程,即(16)–(19)式。

由于(16)–(19)式都是线性方程,可直接求得 S, P, T 和 E_z 的解析表达式,即

$$S = C \left(\cos \sqrt{\frac{c}{D_I}} z + F \sin \sqrt{\frac{c}{D_I}} z \right), \quad (23)$$

$$P = B J_0 \left(\sqrt{\frac{b}{D_T}} r \right), \quad (24)$$

$$T = A \exp(at), \quad (25)$$

$$E_z = \left\{ H + \frac{d}{um} (F \cos mz - \sin mz) \right\} (\cos mz + F \sin mz)^{-1}, \quad (26)$$

式中 A, B, C 和 F 均为待定常数, H 为含有 r 和 t 的待定常数。从而可得

$$n = G \left(\cos \sqrt{\frac{c}{D_i}} z + F \sin \sqrt{\frac{c}{D_i}} z \right) J_0 \left(\sqrt{\frac{b}{D_T}} r \right) \exp(at). \quad (27)$$

此时,有读者提出如下疑问,既然(16)~(19)式是从(7)式所得,那就意味着(26)和(27)式是由(7)式所得,如何能从一个方程式(7)求得两个变量 n 和 E_z ? 这里需要注意的是(26)和(27)式给出的 n 和 E_z 表达式中都含有若干个待定常数,如 G, H 等. 因此,它们目前的形式代表的只是两个数学上的通解,那些常数确定后,才具有明确的物理意义. 在数学上,从一个方程中,总是可以求得一个以上通解的. 例如,从方程式 $x^2 + y^2 = R^2$ 中可求得两个通解

$$x = c, y = \pm(R^2 - c^2)^{1/2},$$

其中 c 为未定常数. 因此,从(7)式求得(26)和(27)两式是完全可能和正确的.

从(23)式看, S 只与电子扩散系数 D_i 有关,与电子和离子的迁移率 μ, μ' 无关,难道电子在轴向的分布完全由扩散机制决定的吗? 探讨这个问题,需仔细观察(23)~(25)式,即(27)式. (27)式中含有几个待定常数,例如 c 和 a ,正是通过这些常数,电子和离子的迁移机制与 n 得到联系的. 利用实际的边界条件可以定出(27)式中的待定常数如下:

$$c = D_i m^2,$$

$$\text{其中 } m = \frac{1}{l} \arccos \left\{ \frac{\lambda}{1 + F^2} \pm \sqrt{1 + F^2 - \frac{F^2 \lambda^2}{(1 + F^2)^2}} \right\},$$

$$\lambda = \beta^2 \exp \left(-\frac{\mu' V_s}{K D_i} \right), b = (2.405/R)^2 D_T,$$

$$a = \{N_0 - (2.405/R)^2 D_T - m^2 D_i + K \mu m^2 D_i / \mu'\}, G = n_0. \quad (28)$$

推导(28)式的详细过程,请参阅文献[1]和[11]. 这样(27)式可写为

$$n = n_0 \beta^{-\gamma} (\cos mz + F \sin mz) J_0 \left(\frac{2.405}{R} r \right) \exp \left(\frac{\mu' V_s}{K D_i} + at \right). \quad (29)$$

从(29)式可知 n 和 μ 及 μ' 是有直接关联的,亦即电子的分布是与电子、离子的迁移机制有密切关系的. 在(29)式中,除参数 n_0 须由实验结果决定外,其余参数全为已知,即都可用已知参数表示. 因此,在应用时,不需引进任何人为的假设边界条件. n_0 表示在 $t=0$ (代表亚稳态开始)时, $r=0$ 处,阴极表面的电子密度值.

上述的数学推导以及文献[1]和[11]中的全部数学推导过程,都是严密、自洽的,中间没有引进任何假设或近似的条件. 因此,所得的全部解析式都完全满足方程(7)~(12)和实际的边界条件. 事实上,消除对这个问题疑问的最简便、可靠的方法是将文中给出的 n, N, V, E_z, Γ_- 和 Γ_+ 表达式代入原方程(7)~(12),检验它们是否满足原方程和实际边界条件,如果是,则它们必然是正确的. 因为不正确的结果,不可能完全满足如此众多和繁复的关系式和边界条件.

4 结 论

偏微分方程的求解,本身是一个数学问题. 原则上,求解偏微分方程,尤其是非线性偏微分方程,在方法上并没有固定的模式,只要能求出它的解就可以. 至于正确与否,只

要代入原偏微分方程和边界条件进行检验即可。当然,现在我们讨论的问题,不纯粹是数学问题,还应满足物理事实。

我们对辉光放电等离子体进行了深入广泛的研究,完成一套数学解法,得出了一套完整的、自洽的、解析式的理论模型。从解析解数学上的严密性可知,既然它们是原偏微分方程的解,当然能反应原偏微分方程所描述的物理事实,在这里即辉光放电。至于理论与实验之间存在一定的差别,这主要是由于基本假设(电离速率 f 假设为常数)不尽接近事实,但文献[1]中的求解和对有关物理现象的解释及对变化趋势的预示都是正确的,而且部分已得到了实验的验证^[11]。

- [1] S. T. Pai, *J. Appl. Phys.*, **71**(1992), 5820;
S. T. Pai and X. M. Guo, *J. Appl. Phys.*, **71**(1992), 5826.
- [2] J. S. Townsend, *The Theory of Ionization of Gases by Collision* (Constable, London, 1910).
- [3] W. Schottky, *Physik. Zeis.*, **25**(1924), 635.
- [4] I. Langmuir, *Phys. Rev.*, **34**(1929), 876.
- [5] H. Raether, *Electron Avalanches and Breakdown in Gases* (London, Butterworth, 1964).
- [6] A. B. Wardlaw and I. M. Cohen, *Phys. Fluid.*, **16**(1973), 637.
- [7] R. N. Franklin, *Plasma Phenomena in Gas Discharge*(Clarendon, Oxford, 1976).
- [8] D. B. Graves, *American Institute of Chemical Engineering Journal*, **35**(1989), 1.
- [9] M. Meyyappan & J. P. Kreskovsky, *J. Appl. Phys.*, **68**(1990), 1506.
- [10] 白秀庭、周庭东,物理学报, **42**(1993), 1463.
- [11] 郭小明,辉光放电等离子体的理论和实验研究,清华大学博士论文(北京,1993).

A MATHEMATICAL PROCEDURE FOR MODELLING LOW TEMPERATURE PLASMA

GUO XIAO-MING S.T.PAI

(Department of Electrical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084)

(Received 17 March 1994)

ABSTRACT

A detailed mathematical procedure for solving the governing equations of partially ionized low temperature plasma is presented. Specific responses to certain relevant questions raised by some readers are also discussed and explained in detail. It is believed that the presentation of this paper can provide useful information to this field in terms of both mathematical procedure and physical interpretation.

PACC: 5220; 5200; 5280