

气体放电空心阴极鞘层氩离子的 蒙特-卡罗模拟研究^{*}

韩俊波 王德真 马腾才

(大连理工大学物理系, 三束材料改性国家重点实验室, 大连 116023)

(1995年1月23日收到)

建立了气体放电空心圆筒阴极鞘层离子的自洽蒙特-卡罗模拟模型, 对鞘层区内离子的输运过程进行了研究. 考虑了离子与中性原子的电荷交换碰撞和弹性散射, 用到了精确依赖于离子能量的电荷交换和动量输运截面. 模拟了氩离子在空心阴极鞘层中的运动, 得到了不同放电条件下自洽电场分布, 离子的能量分布, 角分布以及电子密度分布和离子密度分布. 计算结果表明: 离子在由鞘层边界向阴极运动过程中, 离子能量分布的高能部分逐渐增大, 角分布向小角度部分压缩, 鞘层中的强电场对离子起加速和聚焦作用; 在鞘层内离子密度分布比较均匀, 只是在鞘层边界附近变化急剧, 电子密度在鞘层内几乎为零. 在阴极鞘层内电场分布是非线性的.

PACC: 5240K; 5265; 5280

1 引 言

低气压空心阴极放电广泛应用于气体激光系统、光源、光谱分析和薄膜制备等领域. 阴极鞘层是应用中最重要区域, 鞘层内电场分布, 离子密度分布和能量分布, 长期以来一直是气体放电等离子体的一个基础研究课题. 当离子的平均自由程大于鞘层厚度时, 可以忽略离子的碰撞效应, Child-Langmuir 定律^[1-3]给出了无碰撞鞘层的完整描述. 当离子的平均自由程小于鞘层厚度时, 需要考虑离子的碰撞效应. 近年来, 人们^[4-6]用蒙特-卡罗方法模拟离子在平板阴极鞘层中的运动, 这种方法可以深入细致地描述离子的碰撞效应. Farouki 等^[7]给出了一个平板阴极鞘层离子的自洽蒙特-卡罗模拟模型, 能自洽地算出鞘层内的电场分布, 该模型假设弹性散射碰撞截面和电荷交换碰撞截面均是常量, 而实验测得的碰撞截面是依赖于入射离子能量的. 魏合林、刘祖黎等^[8]对空心阴极鞘层中电子的输运过程进行了研究. 本文建立了空心圆筒阴极鞘层离子的自洽蒙特-卡罗模型, 考虑了离子与中性原子的电荷交换碰撞和弹性散射, 用到了精确依赖于离子能量的电荷交换和动量输运截面. 模拟了离子在鞘层中的输运过程, 研究了空心圆筒阴极的鞘层结构.

^{*} 国家自然科学基金资助的课题.

2 自洽蒙特-卡罗模拟

2.1 初始电场分布

考虑空心圆筒阴极, 气体沿柱轴方向均匀放电, 并处于稳定状态, 假设鞘层区内离子密度为常数, 电子密度为零, 则泊松方程为

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr}(rE) = ne/\epsilon_0. \quad (1)$$

利用边界条件

$$E_r(r_s) = 0, \Phi(r_s) = 0 \text{ 和 } \Phi(r_0) = -U_0, \quad (2)$$

可得到初始电场分布

$$E_r(r) = k(r^2 - r_s^2)/r, \quad (3)$$

其中

$$k = \frac{2U_0}{-U_0(r_0^2 - r_s^2) + 2r_s^2 \ln(r/r_s)}, \quad (4)$$

U_0 是阴极电位降; r_s 是空心阴极轴线到鞘层边界的距离; r_0 是空心阴极半径; r 是空心阴极鞘层内某点的径向坐标; 电场方向指向空心阴极.

2.2 离子的蒙特-卡罗模拟过程

在鞘层内, 用蒙特-卡罗方法模拟离子的运动. 设离子初始位于阴极鞘层边界处 ($r = r_s$), 因为在这个位置附近, 放电具有最大电离率, 离子速度遵守麦克斯韦分布. 由该分布抽样选取初始速度. 离子在电场加速下向阴极运动的过程中, 受到多次碰撞, 每次碰撞离子的动能及运动方向都要发生改变, 最后离子撞击阴极消失, 重复模拟多个离子. 在鞘层区内平均分为若干层, 步长为 Δr . Δr 的取值要小于离子平均自由程的二十分之一. 离子在定步长 Δr 内发生碰撞的概率为

$$P = nQ(\epsilon'_i)\Delta l, \quad (5)$$

其中

$$\Delta l = \Delta r / \sin\theta |\cos\varphi|, \quad (6)$$

n 是气体密度; θ 是速度 v 与柱轴方向的夹角; φ 是速度 v 在垂直于空心柱轴平面上的投影与径向的夹角; $Q(\epsilon'_i)$ 是离子与中性粒子的碰撞截面总和. 根据碰撞截面数据比较, 可只考虑两种碰撞截面, 即离子与中性粒子的弹性散射截面 $Q_m(\epsilon'_i)$ 和电荷交换碰撞截面 $Q_{CT}(\epsilon'_i)$, 则

$$Q(\epsilon'_i) = Q_m(\epsilon'_i) + Q_{CT}(\epsilon'_i), \quad (7)$$

两种碰撞截面均与入射离子能量有关, (ϵ'_i) 为 $r'_i = r_i - \Delta r/2$ 处的能量.

取 ξ_1 为 $[0, 1]$ 区间上均匀分布的随机数, 如果

$$P < \xi_1, \quad (8)$$

则离子不与中性粒子发生碰撞,否则当

$$P \geq \xi_1 \quad (9)$$

时,离子与中性粒子发生碰撞.

若离子不发生碰撞,则离子的新位置 r_{i+1} 和新能量 ϵ_{i+1} 由下式给出:

$$r_{i+1} = r_i + \Delta r, \quad (10)$$

$$\epsilon_{i+1} = \epsilon_i + e[E_r(r_i) + E_r(r_{i+1})]\Delta r/2. \quad (11)$$

在垂直于空心圆柱轴线的平面上,离子的角动量守恒,即

$$mv_{i+1}r_{i+1}\sin\theta_{i+1}\sin\varphi_{i+1} = mv_i r_i \sin\theta_i \sin\varphi_i, \quad (12)$$

其中

$$v_{i+1} = (2\epsilon_{i+1}m^{-1})^{1/2}, v_i = (2\epsilon_i m^{-1})^{1/2}, \quad (13)$$

其中 m 是离子的质量.

在柱轴方向上离子的动量守恒,即满足

$$mv_{i+1}\cos\theta_{i+1} = mv_i \cos\theta_i, \quad (14)$$

则离子新的速度方向角度可由(12)-(14)式确定.

若离子在 Δr 距离内与中性粒子发生碰撞,由概率

$$Q_m(\epsilon'_i)/Q(\epsilon'_i), Q_{CT}(\epsilon'_i)/Q(\epsilon'_i) \quad (15)$$

确定发生碰撞类型.

对于离子与中性原子的弹性碰撞,这里采用了等质量刚球模型.碰撞后离子的能量 ϵ'_i 为

$$\epsilon'_i = \epsilon_i \cos^2 \chi, \quad (16)$$

散射角和方位角由下式确定:

$$\cos\chi = (1 - \xi_2)^{1/2}, \quad (17)$$

$$\psi = 2\pi\xi_3, \quad (18)$$

其中 ξ_2, ξ_3 是 $[0,1]$ 间均匀分布的随机数.

对于电荷交换碰撞,新产生离子的能量由具有中性气体温度的麦克斯韦分布选取,散射角相对原离子的人射方向各向同性.散射角和方位角由下式确定:

$$\chi = \pi\xi_4, \quad (19)$$

$$\psi = 2\pi\xi_5, \quad (20)$$

其中 ξ_4, ξ_5 是 $[0,1]$ 间均匀分布的随机数.

碰撞后离子速度方向由球面三角公式确定^[9]

$$\cos\theta_{i+1} = \cos\theta_i \cos\chi + \sin\theta_i \sin\chi \cos\psi, \quad (21)$$

$$\sin(\varphi_{i+1} - \varphi_i) = \sin\psi \sin\chi / \sin\theta_{i+1}, \quad (22)$$

$$\cos(\varphi_{i+1} - \varphi_i) = (\cos\chi - \cos\theta_i \cos\theta_{i+1}) / \sin\theta_i \sin\theta_{i+1}. \quad (23)$$

从等离子体鞘层边界出发跟踪离子,直到在阴极被吸收为止.记录在鞘层内不同位置离子的能量值 ϵ_i ,计算出径向分速度

$$u_i = (2\epsilon_i/m)^{1/2} \sin\theta_i |\cos\varphi_i|. \quad (24)$$

通过模拟大量离子, 求出鞘层内不同位置离子的平均径向速度 $\bar{u}_i$.

2.3 碰撞截面

根据文献[10]给出的氩离子 Ar^+ 与氩原子 Ar 的碰撞截面的数据表, 发现离子与中性原子的电荷交换碰撞截面和弹性散射截面远远大于其它类型的碰撞截面, 所以可以忽略其它几种碰撞类型, 而只考虑离子与中性原子的电荷交换碰撞和弹性散射. 拟合碰撞截面数据^[10], 得到氩离子 Ar^+ 与氩原子 Ar 的动量输运截面和电荷交换截面的解析表达式

$$Q_{\text{CT}} = (59.21 - 4.61 \ln \epsilon) \times 10^{-16} \text{cm}^2, \quad (25)$$

$$Q_{\text{m}} = (118.90 - 9.85 \ln \epsilon) \times 10^{-16} \text{cm}^2. \quad (26)$$

对于 $\epsilon < 0.1 \text{ eV}$ 时, 取: $Q_{\text{CT}} = 69.82 \times 10^{-16} \text{cm}^2$, $Q_{\text{m}} = 157.00 \times 10^{-16} \text{cm}^2$. 这里离子能量 ϵ 以 eV 为单位. 我们把经拟合得出的曲线与实验测得的数据曲线进行对照比较发现它们符合得很好.

2.4 自治电场

初始电场是在简化条件下得出的近似电场, 需要逐次迭代逼近以达到自治. 在迭代过程中考虑离子密度 n_i 在鞘层内是有一定分布的. 假设电子在鞘层内遵守玻耳兹曼分布

$$n_e = n_0 e^{-\Phi/kT_e}, \quad (27)$$

其中 n_0 是等离子体密度, Φ 是鞘层电势, T_e 是电子温度.

由离子电流的连续性方程可以求出不同层面上的离子数密度

$$n_i = \frac{I}{2\pi r e \bar{u}}, \quad (28)$$

其中离子电流强度 I 是待定量.

对泊松方程积分, 求出阴极鞘层电场分布

$$E(r) = \frac{e}{\epsilon_0 r} \int_{r_s}^r (n_i - n_e) dr_1, \quad (29)$$

电场分布要求满足关系式

$$\int_{r_s}^{r_0} E(r_1) dr_1 = U_0, \quad (30)$$

即可以确定离子电流强度 I , 求出新的电场分布.

在新的电场作用下, 重新模拟离子的运动, 如前所述, 得到新的电场分布和新的离子电流强度. 重复这个过程, 直到求出的电场达到收敛, 即是自治电场; 同时, 离子电流强度也逼近它的真实值. 最后, 在自治电场作用下, 模拟大量离子的运动, 记录下鞘层内不同层面上离子密度、电子密度、离子的能量和方向角度, 相应地计算出不同层面上离子的能量分布、角度分布, 以及鞘层内电子密度分布和离子密度分布.

3 模拟结果与讨论

图 1 给出了空心圆筒阴极鞘层内电场分布的收敛过程. 可以看出, 只需重复进行三次模拟, 电场分布就达到了收敛. 所以采用这种自治蒙特-卡罗方法能很快地得到自治电场分布.

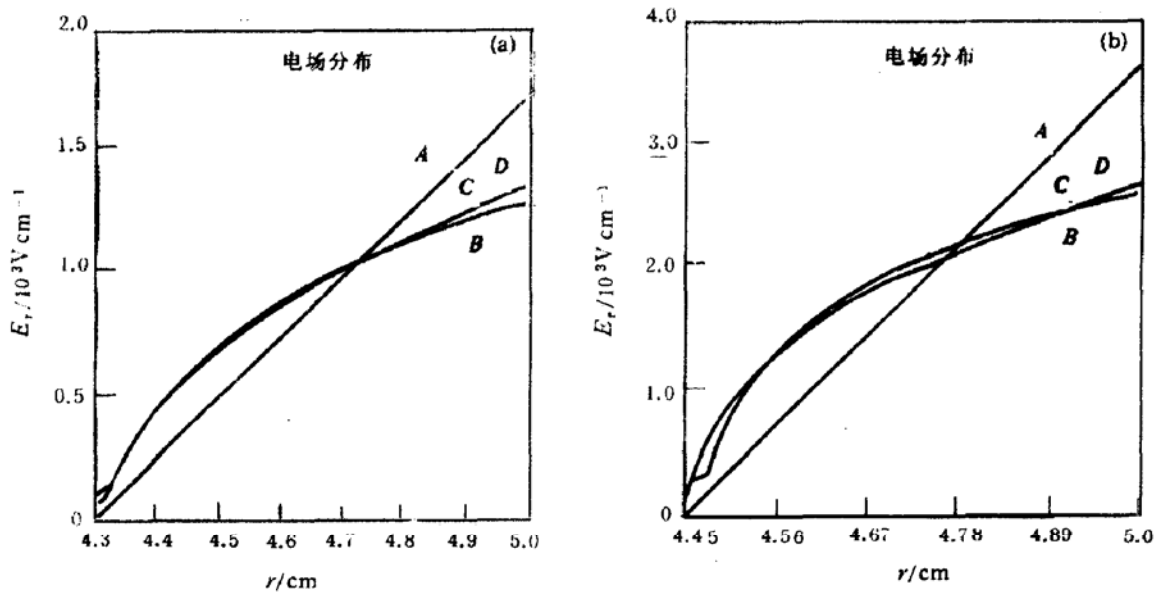


图1 空心圆筒阴极鞘层两种放电条件下的自洽电场分布 (a)气压为 $P = 13.33$ Pa, 阴极电位降为 $U_0 = 600$ V, 鞘层厚度为 $d = 0.70$ cm; (b)气压为 $P = 6.665$ Pa, 阴极电位降为 $U_0 = 1000$ V, 鞘层厚度为 $d = 0.55$ cm; A 为初始电场分布; B 为第一次模拟结果; C 为第二次模拟结果; D 为第三次模拟结果

图2和图3分别给出了不同气体放电条件下,离子在空心阴极鞘层里的能量、角度分布,以及电子密度分布和离子密度分布.由能量分布可以看出,离子由鞘层边界向阴极运动过程中,分布函数尾部逐渐增大,即高能离子的数量增加.这是由于离子在电场中加速,随着电场的增强,离子在一个平均自由程内可以从电场获得更多的能量.由不同位置离子的角分布可以看出,离子向阴极运动过程中受到散射,而电场起聚焦作用;随着电场的增强,离子的散射角逐渐变小,大部分离子几乎垂直入射阴极.由离子密度分布和电子密度分布可看出,离子密度在阴极鞘层区内分布很均匀,在鞘层边界附近急剧增大;电子在鞘层内分布几乎为零,基本上集中在鞘层边界附近.比较图2与图3可以看出,随着气压降低、鞘层变薄、电压增强,高能离子的数量明显增加,这是由于离子在向阴极运动过程中与中性原子的碰撞次数下降,损失能量减小,同时电场提供的能量增加的缘故.

4 结 论

本文建立了一个空心圆筒阴极鞘层内离子输运的自洽蒙特-卡罗模型,模拟了不同放电条件下氩离子在阴极鞘层中的运动过程.模拟过程表明该模型收敛快效率高.最终得到了空心圆筒阴极鞘层的自洽电场分布、离子的能量分布、角分布以及电子密分布和离子密度分布.由模拟结果可以归纳出以下几点结论:

- (1) 自洽电场分布是非线性的.
- (2) 离子由鞘层边界向阴极运动过程中,受到鞘层电场的加速和聚焦.

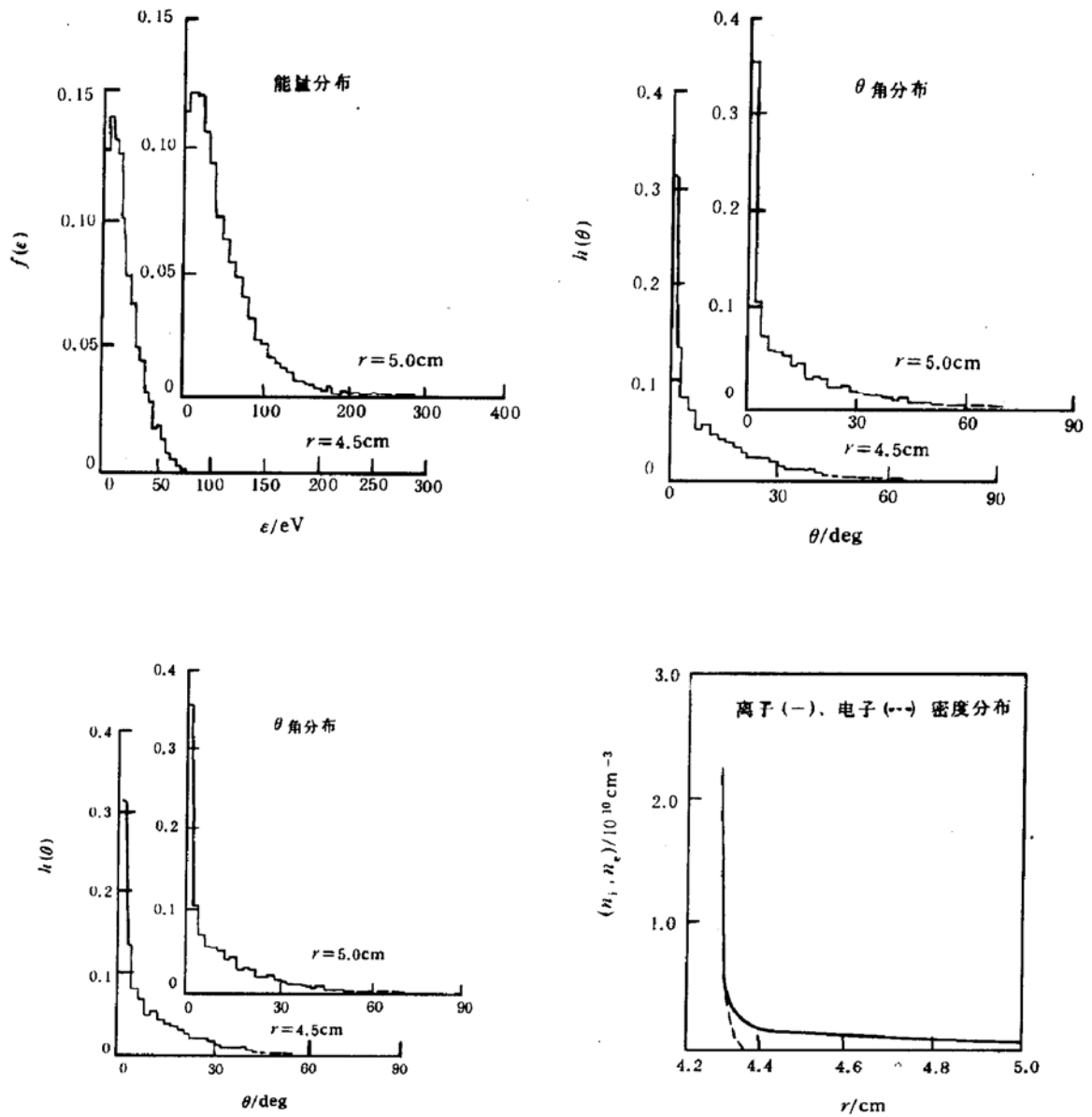


图2 氩离子 Ar^+ 的能量分布、角度分布和离子、电子密度分布 气压为 $P = 13.33\text{ Pa}$; 阴极电位降为 $U_0 = 600\text{ V}$; 鞘层厚度为 $d = 0.70\text{ cm}$

(3) 随着压强的下降、鞘层的变薄和电压的增强, 离子能量分布的高能部分增大, 角分布向小角度压缩.

(4) 在鞘层区内, 离子密度分布较均匀, 电子密度几乎为零. 在鞘层边界附近, 离子和电子密度急剧增大, 电子主要集中在鞘层边界附近.

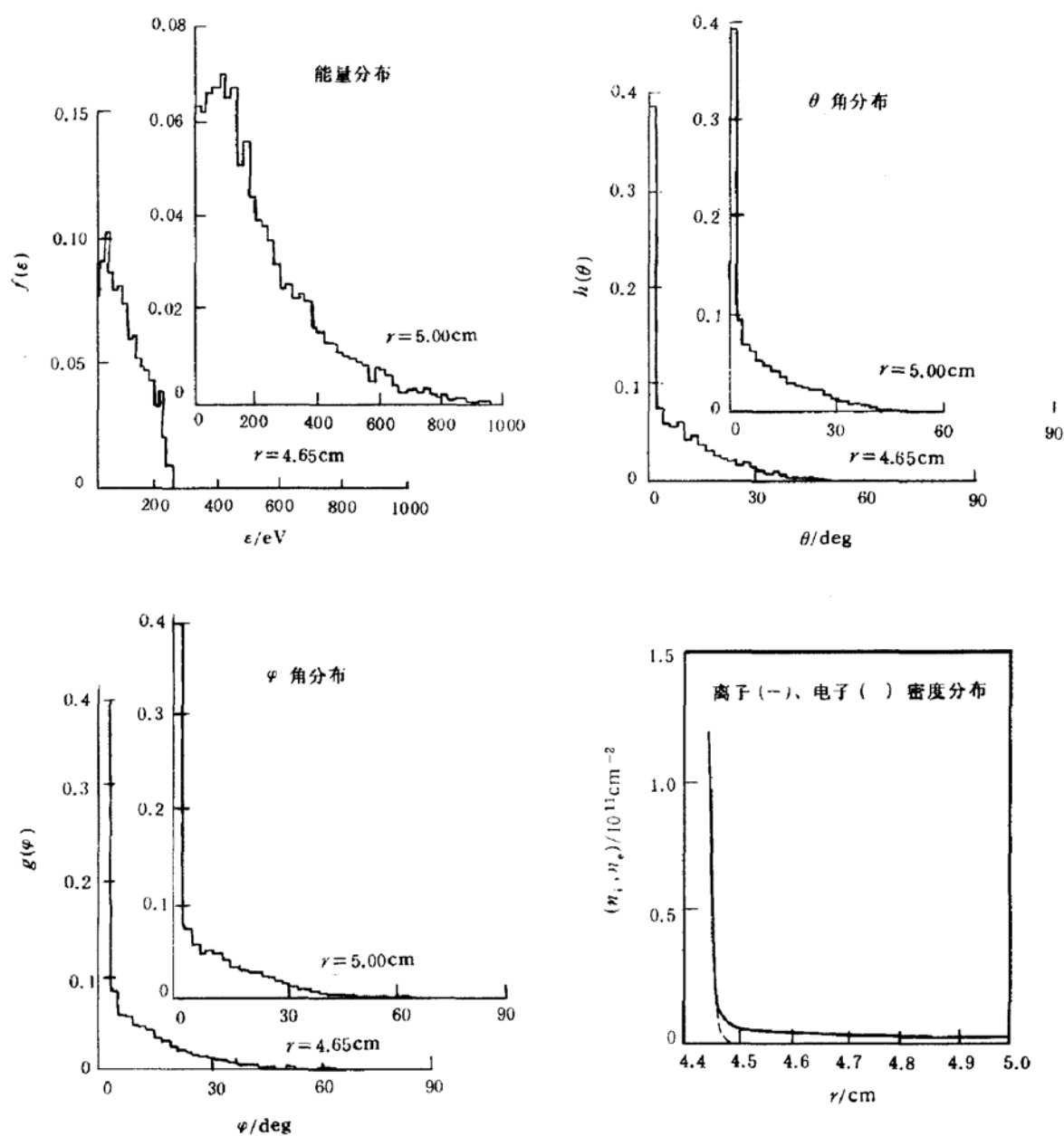


图3 氩离子 Ar^+ 的能量分布、角度分布和离子、电子密度分布 气压为 $P = 6.665 \text{ Pa}$, 阴极电位降为 $U_0 = 1000 \text{ V}$, 鞘层厚度为 $d = 0.55 \text{ cm}$

- [1] I. Langmuir, *Phys. Rev.*, **21**(1923), 4.
- [2] I. Langmuir and K. Blodgett, *Phys. Rev.*, **22**(1923), 347.
- [3] I. Langmuir and K. Blodgett, *Phys. Rev.*, **24**(1924), 49.
- [4] W. D. Danis and T. A. Vanderslice, *Phys. Rev.*, **131**(1963), 219.
- [5] 王德真、宫野、马腾才, 计算物理, **10**(1993), 215.
- [6] I. Wronski, *Vacuum*, **42**(1991), 635.
- [7] R. T. Farouki, Satoshi Harnaguchi and Manoj Dalvic, *Phys. Rev.*, **A44**(1991), 2664.
- [8] 魏合林、刘祖黎, 物理学报, **43**(1994), 950.

- [9] 裴鹿成, 张孝泽, 蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用(科学出版社, 北京, 1980), 第 168; 532 页.
[10] A. V. Phelps, *J. Phys. Chem. Ref. Data.*, **20**(1991), 568.

A SELF-CONSISTENT MONTE CARLO SIMULATION OF IONS IN HOLLOW-CATHODE SHEATH OF ARGON GAS DISCHARGES

HAN JUN-BO WANG DE-ZHEN MA TENG-CAI

(*State Key Laboratory for Material Modification by Laser, Ion and Electron Beams, Department of Physics, Dalian University of Technology, Dalian 116023*)

(Received 23 January 1995)

ABSTRACT

In this paper, a self-consistent Monte Carlo simulation method including charge exchange and elastic scattering is developed, and the method is used to calculate the energy and angle distributions of ions, the density distributions of ions and electron in hollow-cathode sheath of a DC argon gas discharge for the different discharge conditions. Cross sections of the charge exchange and the momentum transfer that depend on the ion energy are taken into account precisely. It is found that, as the ions move towards the cathode, the high energy portions of ion energy distributions are enhanced gradually and the small angle portions of the angle distribution increase. A strong field accelerates the ions to higher speed and ensures more ions to move along the lines of force.

PACC: 5240K; 5265; 5280