

微空心阴极放电的 Monte Carlo 模拟研究^{*}

姚细林 王新兵 赖建军

(华中科技大学激光技术国家重点实验室, 武汉 430074)

(2002 年 4 月 27 日收到, 2002 年 11 月 13 日收到修改稿)

基于 MATLAB 与 VC++ 混合语言, 采用 Monte Carlo 模拟对高压下亚毫米级微空心阴极放电(MHCD)中电子的运动过程进行了研究, 计算出不同气压下的稳态时场向电子密度分布, 电子能量分布以及对各种碰撞的统计等. 分析表明, 高压下微空心阴极放电更能反映空心阴极效应——“来回振荡”的本质. 通过模拟得到, 电子在阴极间来回振荡的过程中, 仍以前向散射为主. 随着气压的升高, 侧向散射效应逐渐体现出来.

关键词: 微空心阴极, Monte Carlo, 负辉区, 碰撞截面

PACC: 5280, 5265, 5255

1. 引言

高压下辉光放电技术广泛应用于电磁波的吸收、表面处理、薄膜沉积、平板等离子体显示器、新型气体激光器以及准分子紫外光源等领域中. 近年来, 国外对 Ar, Xe, Ne 等稀有气体亚毫米级微空心阴极放电(MHCD)进行了大量的实验研究^[1-3]. 高压下 MHCD 中, 负辉区(NG)充分重合, 阴极位降区中产生的大量高能电子在阴极间来回振荡, 大大增强了电子的碰撞机会, 从而激发和电离明显增加. 同时, 高压下形成准分子的三体碰撞显得突出, 这非常适合于做大体积高压辉光放电的电子发射器(代替阴极位降区的二次电子发射或电子碰撞电离的方法产生电子), 准分子光源等. 由于阴极位降区(CDS)是维持电子摆动的重要区域, 电子在其中的行为尤为重要. 但由于其结构太小, 以至于许多内在的物理特性不为实验所充分地反映出来. 因而, 数值模拟显得重要. 在理论模拟上一般采用求解 Boltzmann 方程法和 Monte Carlo 方法. 赖建军等^[4]做了 Ar 气三维 Monte Carlo 模拟, 模型结构为槽形(气压为 50—120 Pa, 阴极间距为 0.5 cm). 陈永洲等^[5]做了氙气的槽形三维 Monte Carlo 模拟. Seishiro 等^[6]则采用了三维速度空间分析了圆孔形 MHCD 的电子能量分布. 本文则是针对气压为 13300—66500 Pa, 阴极间

距为 0.1 mm 的微槽模型进行模拟. 在我们的分析中, 仍然认为电场是一维的, 但基于本模型的特点, 考虑了二次及高次电离, Ar 原子更高能级的激发和 L 层电离的情况. 同时, 还考虑了碰撞时的散射角, 初始电子的能量和发射角情况, 积分步长等因素. 模拟结果显示: 高压下 MHCD 有着新的微观特性, 并明显地表现出与气压的关系.

2. 模型及算法

2.1. 基本模型

本微空心阴极放电模型如图 1 所示. 由于本模型条件下实际放电电流较小(一般在 7 mA 左右), 气体温度变化不明显, 因而在模拟中, 可设温度为常量, 取 $T = 300$ K. 阴极间距 $L = 0.1$ mm. 假定电极纵向(垂直于电场方向)长度相当长. 另外, 我们还假设: 阳极到阴极的距离比两阴极的间距大得多. 从而, 微空心阴极放电的电场分布采用 K. Fujii 等给出的如下的简化形式^[7]:

$$E(z) = \begin{cases} \frac{2V}{d} \left(1 - \frac{z}{d}\right) & z \leq d, \\ 0 & d < z < L - d, \\ \frac{2V}{d} \left(1 + \frac{z}{d} - \frac{L}{d}\right) & z \geq L - d, \end{cases} \quad (1)$$

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 50007003)资助的课题.

式中 L 为阴极间距, z 为到阴极的距离, V 为阴极位降, d 为阴极位降区的厚度.

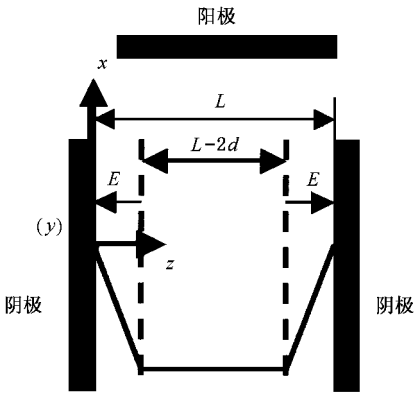


图 1 槽形微空心阴极放电模型

2.2. 算 法

我们用 4eV 来近似初始电子的能量分布, 电子从阴极表面发射 ($t = 0$; $x = y = z = 0$ 或 $x = y = 0, z = L$), 并假设电子初始角在 $0-\pi/2$ 各向同性^[8]. 我们选用的时间步长为 0.1ps, 小于最长的自由运动时间. 经历 10000 次后即终止对该电子的跟踪. 电子在两次碰撞之间的运动由下列表达式描述:

$$z = z_0 + v_{z_0} \Delta t + \frac{q}{2m} E(z_0) \Delta t^2,$$
$$dr = v_{r_0} \Delta t,$$
$$v_z = v_{z_0} + \frac{q}{m} E(z_0) \Delta t,$$
$$x = x_0 + dr \sin \phi,$$
$$y = y_0 + dr \cos \phi,$$

(2)

其中 $\phi = 2\pi RN$ (RN 是 $[0, 1]$ 间均匀分布的随机数), Δt 为时间步长, q 为电子电量, m 为电子质量, dr 为纵向(垂直于电场方向)位移, v_{z_0} 为电场方向的初速度, v_{r_0} 为纵向初速度.

在跟踪过程中, 每经历一个步长, 判断电子是否发生碰撞以及发生何种碰撞. 具体细节, 文献[8]中已有详细的描述. 碰撞后的新能量和方向决定于碰撞的类型.

1) 激发

$$E = E_0 - E_{\text{exc}},$$

(3)

E_{exc} 是电子激发阈值(这里取为 11.72eV).

2) 电离 散射电子和新电子的能量将由入射电子电离后的剩余能量随机分配.

$$E_{\text{prim}} = (E_0 - E_i) R_1,$$

$$E_{\text{sec}} = (E_0 - E_i)(1 - R_1),$$

(4)

E_i 是电离阈值, R_1 是 $[0, 1]$ 间均匀分布的随机数.

3) 弹性碰撞 经历了弹性碰撞后的电子能量

$$E = E_0[1 - 2(m_e/M)(1 - \cos \chi)],$$

(5)

m_e 为电子质量, M 为原子质量, χ 为电子的散射角.

各种碰撞后电子的散射角 χ 各向异性^[9], 电子碰撞后的新方向由下式决定:

$$\cos \theta_1 = \cos \theta \cos \chi + \sin \theta \sin \chi \cos \phi,$$

(6)

其中 θ_1, θ 分别表示碰撞前后电子运动方向与轴的夹角.

在电离的情况中, 如发生电离, 则先将原电子的所有信息放入一个堆栈中, 然后跟踪次级电子. 依次类推, 直到最次级的电子跟踪完毕, 然后返回到上一级……直到原电子也跟踪完毕, 下一个电子又从阴极开始被跟踪. 作者先用 VC++ 建立了一个类, 再将其改成 mex 文件, 从而为 MATLAB 语言所调用.

2.3. 数 据

阴极位降由实验所得. 由于阴极位降随气压变化不大, 本模拟中均取 $V = 210\text{V}$, 阴极位降区的厚度 d 取自文献[10]中(8)式计算所得. 总激发截面取自文献[11]. 电离截面取自文献[10], 弹性碰撞截面是通过对实验数据拟合取得, 取自 Ferreira 等人给出的拟合公式^[11]:

$$Q_e(\epsilon) = \begin{cases} a_c \frac{\epsilon}{U_c} & \epsilon \leq U_c, \\ a_c \left(\frac{\epsilon}{U_c} \right)^{-\frac{1}{2}} & \epsilon \geq U_c, \end{cases}$$

(7)

其中, $a_c = 1.59 \times 10^{-19} \text{m}^2$, $U_c (= 11.72\text{eV})$ 是 Ar 原子的第一激发阈值, ϵ 是电子的能量(eV).

3. 模拟结果与分析

模拟中, 发射源的初始电子数取为 1000 个(与电子数为 2000 个相比, 所得结果没有太大的差别, 只是统计涨落大小不同而已, 但限于 2000 个电子的计算量太大). 对每个电子跟踪完毕时, 记录下它们的位置, 能量, 发生各类碰撞的次数和电子第一次进入负辉区时的能量及之前的各类碰撞次数. 整个模拟过程在 Pentium 4 微机上完成, 前后大约需要 14 h.

表 1 各种碰撞次数的统计结果

气压 P/Pa	弹性碰撞的次数	激发碰撞的次数	电离碰撞的次数
13300	1844975 (28122)	19704 (3682)	16290 (3847)
33250	3966044 (23579)	22011 (3365)	18612 (3652)
66500	6663973 (15304)	27203 (2495)	25869 (3102)

注 :小括号内为电子第一次进负辉区前各类碰撞次数统计的情况.

电子的空间分布 图 2 给出了在不同气压下电场方向上稳态的电子空间分布.在 z 方向上,电子绝大部分集中于负辉区,且基本上是均匀分布的,电子在阴极间来回振荡的幅度随气压的升高而增大.这是因为,由于气压的显著升高,阴极位降区被进一步

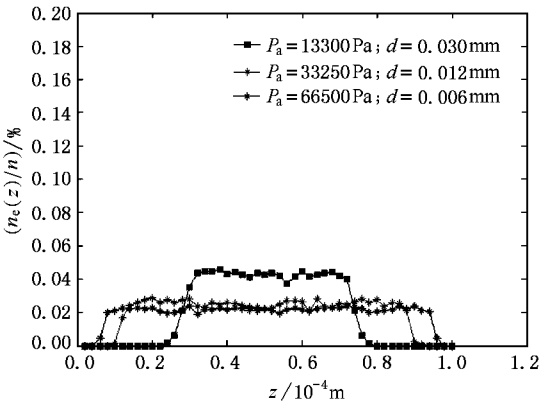


图 2 不同气压下电子沿 z 方向的相对密度分布

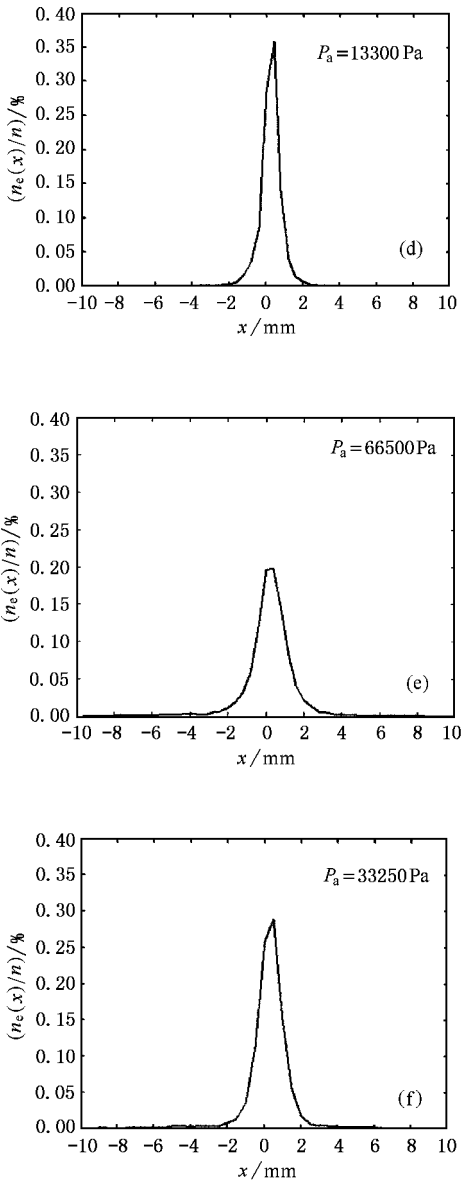
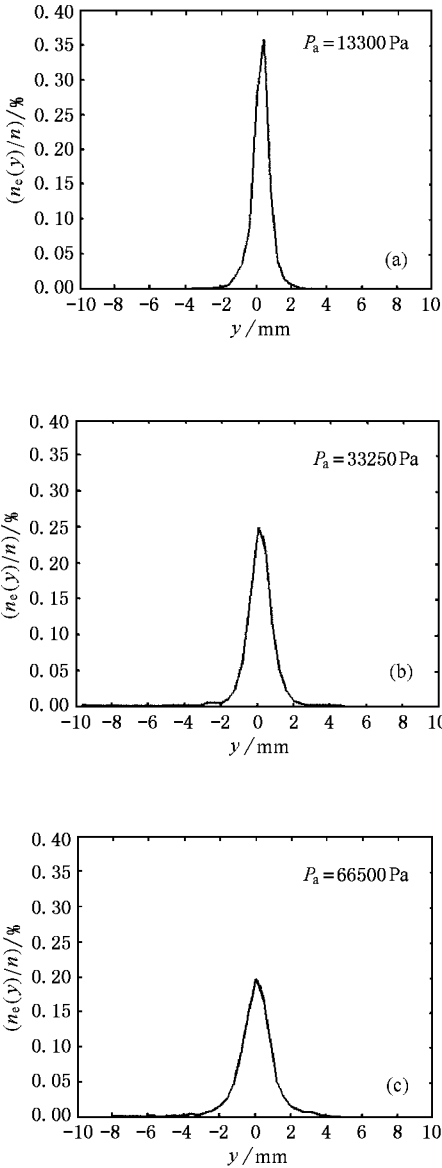


图 3 不同气压下电子沿 x, y 方向的空间分布 (a)(b)和(c)表示电子沿 y 方向的分布 (d)(e)和(f)表示电子沿 x 方向的分布.

的压缩,其电场强度 $E(z)$ 大大地增加,以致于电子进入阴极位降区的深度和停留时间明显减少,即对电子的‘反射’作用增强.负辉区越来越成为电子运动及发生各种碰撞的主要区域(表 1).而负辉区的电场为零(模型假设),以致于稳态时电子基本上是均匀分布的.

由图 3 可以看出,在 y 方向上,电子主要集中在零点附近.气压 $P = 13300\text{ Pa}$ 时(图 3(a)),电子最大漂移在 $y = \pm 3.5\text{ mm}$ 处,峰值大小为 0.35;气压 $P = 33250\text{ Pa}$ 时(图 3(b)),电子最大漂移在 $y = \pm 8.0\text{ mm}$ 处,峰值大小为 0.25;气压 $P = 66500\text{ Pa}$ 时(图 3(c)),电子最大位置在 $y = \pm 9.5\text{ mm}$ 处,峰值大小为 0.2.这是因为电子在碰撞中还是以前向散射为主,大部分电子纵向‘漂移’量集中在 2 mm 内.但随着气压的升高,电子的纵向‘漂移’量增大,峰值下降.这主要是因为,气压升高,首次进入负辉区的高能电子数增多,电子发生碰撞的次数明显增加(表 1),以至于各向异性的侧向散射效应渐渐体现出来.关于电子散射现象,在 Stark 等人的实验^[3]中已明显地表现出来.图 3 中 x 方向上的情况与 y 方向上的基本相同.

电子的能量分布 图 4 给出了电子的能量分布.由图可知:主要是低能电子,基本上没有较高能量电子(大于 11.72 eV);不同气压下电子稳态时的能量分布没有明显的差别.随气压升高,低能电子数目略有减少,并出现少数较高能电子.

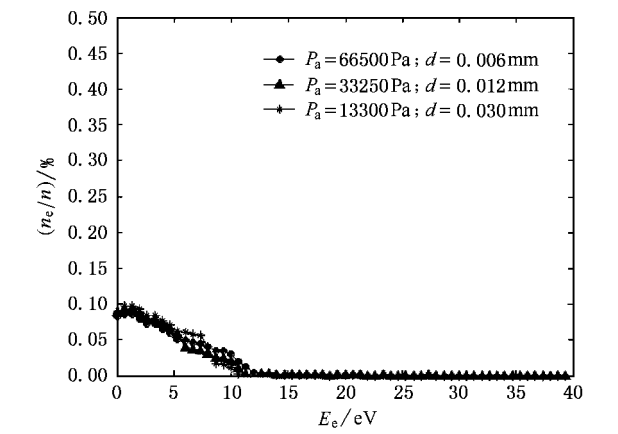


图 4 不同气压下电子稳态时的能量分布

电子第一次进入负辉区的能量分布 图 5 给出了电子第一次进入负辉区时的能量分布.由于空心阴极结构的特点,电子在对阴极间摆动,可能不只一次进入负辉区.但鉴于本模型中阴极位降区对电子的强烈‘反射’作用,我们只记录第一次时的情况.由图可知,随气压的升高,低能电子数目减小而高能电子数目明显增加.这是因为电子在高电场下被很快加速到高能态(阴极位降区大大被压缩)而碰撞明显减少(表 1),大量高能‘电子束’在阴极间(主要是负辉区)充分地振荡以致于达到稳态时各类碰撞的次数明显增加(表 1).其间,次级及高次级电子电离也越来越明显,从而产生大量低能电子和离子.

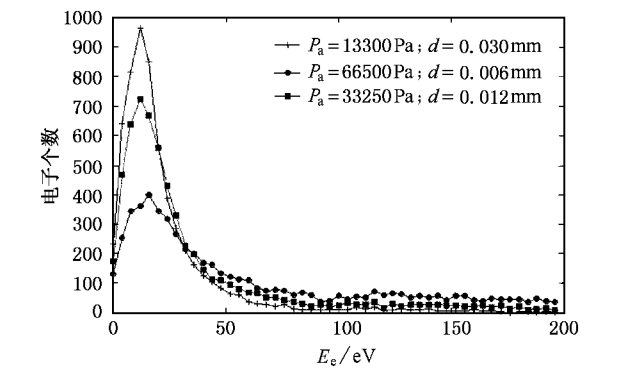


图 5 不同气压下电子第一次进入负辉区的电子能量分布

4. 结 论

1. 在高气压下亚毫米级微空心阴极放电(MH-CD)中,阴极位降区被大大地压缩.该区内,各类非弹性碰撞次数随气压升高而减少,从而能有效地加速更多电子到高能态,且由于其明显的‘反射’作用,大量高能‘电子束’在高度重合的负辉区充分地振荡,以致于电子发生各类碰撞的次数明显增加,同时产生了大量的次电子及离子;负辉区也越来越成为电子发生激发和电离碰撞的主要区域.高气压 MH-CD 更反映了空心阴极效应的‘振荡’本质.
2. 电子在空心阴极间来回振荡的过程中,仍以前向散射为主.随着气压的升高,侧向散射效应逐渐表现出来.

- [1] Schoenbach K H , Verhappen R and Tessnw T 1996 *Appl. Phys. Lett.* **68** 13
- [2] Ahmed El-Habachi and Schoenbach K H 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 22
- [3] Stark R H and Schoenbach K H 1998 *J. Appl. Phys.* **85** 2075
- [4] Lai J J , Yu J H , Huang J J and Wang X B 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1528 (in Chinese) 赖建军、余建华、黄建军、王新兵 2001 物理学报 **50** 1528]
- [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] Seishiro Hashiguchi and Mitugi Hasikuni 1998 *J. Appl. Phys.* **27** 1010
- [7] Fujii K , Miyazawa S , Takahashi T and Asami Y 1979 *IEEE J. Quant. Electr.* **QE-15** 35
- [8] Bogaerts A , van Straaten M and Gijbels R 1995 *Spectrachimica Acta . B* **50** 179
- [9] Bretagne J ,Callede G ,Legentil M and Puech V 1986 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **19** 761
- [10] Carman R J 1989 *J. Phys. D :Appl. Phys.* **22** 55
- [11] Ferreira C M and Richard A 1983 *J. Appl. Phys.* **54** 2261

Monte Carlo simulation of the electron motion in an Ar microhollow cathode discharge^{*}

Yao Xi-Lin Wang Xin-Bing Lai Jian-Jun

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

(Received 27 April 2002 ; revised manuscript received 13 November 2002)

Abstract

In this paper , the electron motion in a submillimeter level microhollow cathode discharge(MHCD) is investigated under high pressures by Monte Carlo simulation . Some swarm parameters have been obtained such as the electron density distribution in the field direction for a steady state , the energy and spatial distribution under different pressures . The result shows that MHCD under high pressures can reflect in more detail the essence of the 'oscillating ' effect of the hollow cathode discharge . When electrons oscillate in MHC , most of them are scattered still forward . With increasing pressure , the effect of lateral scattering will exhibit gradually .

Keywords : microhollow cathode discharge , Monte Carlo , negative glow space , cross section

PACC : 5280 , 5265 , 5255

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