

微波器件微放电阈值计算的快速单粒子蒙特卡罗方法*

李永东[†] 闫杨娇 林舒 王洪广 刘纯亮

(西安交通大学, 电子物理与器件教育部重点实验室, 西安 710049)

(2013年8月29日收到; 2013年10月30日收到修改稿)

为了计算微波器件的微放电阈值, 提出了一种快速单粒子蒙特卡罗方法. 该方法对二次电子出射能量、出射角度和相位等参数进行随机处理, 结合四阶龙格库塔法和Furman模型模拟了电子运动和二次电子发射系数, 并以多次连续碰撞的二次电子发射系数的算数平均值作为微放电效应发生的判据. 以平板传输线横电磁模式为研究对象, 分别采用快速单粒子蒙特卡罗方法、统计模型、传统蒙特卡罗方法以及粒子模拟方法计算其微放电阈值和敏感区域. 计算结果表明, 该方法不仅具有与统计模型和粒子模拟方法相当的计算精度, 而且比统计模型方法的适应性更强, 比传统蒙特卡罗方法的稳定性更好, 比粒子模拟方法的计算效率高几十倍以上.

关键词: 微放电, 单粒子蒙特卡罗方法, 平板传输线, 敏感区域

PACS: 79.20.Hx, 73.43.Cd

DOI: 10.7498/aps.63.047902

1 引言

微放电效应^[1,2]是一种可能出现在真空(或者 10^2 Pa量级以下的低气压)条件下, 高功率微波器件和大功率微波器件中的非线性谐振现象, 其实质是二次电子的雪崩过程, 它会对器件中的信号造成干扰甚至使器件损毁. 因此, 准确地预测微放电阈值对器件的设计十分必要. 对微放电效应的研究方法主要有经典理论模型^[3]、统计模型^[4,5]、蒙特卡罗方法^[6,7]和粒子模拟^[8]. 经典理论模型没有考虑二次电子出射的随机性, 误差较大. Anza等^[5]提出的统计模型与实际情况更加接近, 它假定二次电子出射速度满足麦克斯韦分布. 虽然统计模型可以计算平板传输线在横向电磁场(TEM)模式条件下微放电的情况, 并得到了与实验结果基本相符的微放电阈值, 但是它是建立在对电子运动进行动力学理论分析的基础上, 需要首先获得电子运动的轨迹表达式. 对于复杂的结构(如矩形^[9]、同轴结构^[10])或者较复杂的电磁波模式, 电子运动的轨迹表达式的

求解变得非常困难, 统计模型难以适用于此情况. Kishek和Lau^[7]在传统蒙特卡罗方法的基础上将单个宏粒子代表的实际电荷数变化作为是否发生微放电的判据, 电荷数变化的实质是多次连续碰撞产生的二次电子发射系数的几何平均数的变化^[11], 但是几何平均数容易受到极端小数据的影响, 导致结果发生较大偏差. 粒子模拟方法相对于蒙特卡罗方法则费时得多.

在复杂器件结构和复杂电磁模式条件下, 考虑二次电子初始能量、相位和出射角度等变量的随机性, 本文以微放电阈值的高效准确计算为目的, 提出了一种单粒子蒙特卡罗方法. 为了验证该方法的可行性, 选取平板传输线作为模拟对象, 将本文计算结果与统计模型结果、传统蒙特卡罗方法结果以及粒子模拟结果进行比较.

2 单粒子蒙特卡罗方法

单粒子蒙特卡罗方法是一种考虑二次电子发射随机性, 模拟单个电子从金属表面出射、碰撞后

* 国家自然科学基金(批准号: 50977076)资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: leyond@mail.xjtu.edu.cn

再次出射、再次碰撞这一循环过程的方法. 模拟过程中, 把电子的初始能量、出射角度和相位作为随机变量^[12], 采用四阶龙格库塔法^[13]对电子在每个时间步长内的运动进行求解, 并根据末位置是否超出边界来判断电子是否与器壁发生碰撞. 例如, 在平板传输线中, 即判断宏粒子位置是否满足 $x > d$ (d 为极板间距) 或 $x < 0$ 条件, 若不发生碰撞, 则继续推进, 直至与器壁发生碰撞; 若发生碰撞, 则停止推进, 记录该时刻宏粒子的碰撞能量和角度, 然后根据材料(本文选用 Ag)的二次电子发射系数曲线计算该次碰撞的二次电子发射系数, 并记录下来. 然后进入下一循环, 并将上一循环中碰撞随机产生的出射能量和出射角度作为该次循环中电子运动的初始条件. 图 1 为单粒子蒙特卡罗方法的流程图. 使电子连续碰撞 n 次, 取这 n 次碰撞的二次电子发射系数的算数平均值作为有效二次电子发射系数 σ_{eff} , $\sigma_{\text{eff}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sigma_i$.

将 σ_{eff} 作为微放电能否发生的判据. $\sigma_{\text{eff}} > 1$ 表示可以发生微放电; $\sigma_{\text{eff}} < 1$ 表示不能发生微放电; 当 $\sigma_{\text{eff}} \approx 1$ 时, 相应的微波输入功率或等效电压即为微放电阈值.

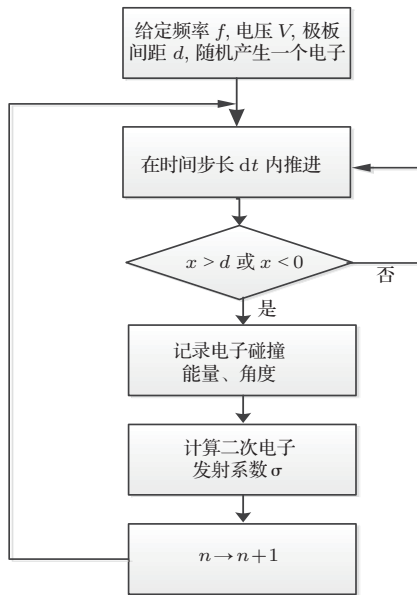


图 1 快速单粒子蒙特卡罗方法的流程图

需要说明的是, 在本文提出的蒙特卡罗方法中, 对二次电子出射能量、角度和相位等变量的初始化以及轨迹跟踪等都是针对单个电子而言, 通过对多次连续碰撞的计算, 产生具备统计意义的随机性. 因此, 本模拟过程可以表征二次电子倍增过程的一般性.

2.1 初始化

二次电子出射能量 E_0 满足正态分布:

$$f(E_0) = \frac{1}{\delta\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(E_0-\mu)^2}{2\delta^2}}, \quad (1)$$

其中, 均值 μ 取为 5 eV, 标准差 δ 取为 3 eV.

电子的出射角度 θ 满足余弦分布:

$$f_\theta(\theta) = \cos \theta, \quad (2)$$

出射角在 $0-\theta$ 间的概率 $p = \int_0^\theta \cos \theta d\theta$, 因而出射角

$$\theta = \arcsin p, \quad (3)$$

进而由出射能量得到电子的出射速度 v_0 (为了简化, 只考虑 x 方向的速度和 y 方向的速度),

$$v_0 = \left(\sqrt{2E_0/m} \cos \theta, \sqrt{2E_0/m} \sin \theta, 0 \right). \quad (4)$$

电子的初始相位 φ_0 在 $[0, 2\pi]$ 范围内满足均匀随机分布.

2.2 电子的推进

完成出射电子的初始化后, 设定时间步长为 dt , 电子在 dt 时间内推进, 将电子的运动方程按坐标分量展开, 即

$$\begin{aligned} \dot{x} &= v_x, \\ \dot{y} &= v_y, \\ \dot{z} &= v_z, \\ \ddot{x} &= -\frac{e}{m}(E_x + v_y H_z - v_z H_y), \\ \ddot{y} &= -\frac{e}{m}(E_y + v_z H_x - v_x H_z), \\ \ddot{z} &= -\frac{e}{m}(E_z + v_x H_y - v_y H_x). \end{aligned} \quad (5)$$

使用四阶龙格库塔法求解方程组 (5), 得到经此时间步长后电子的末位置, 并判断该位置是否超出边界. 若未超出, 则继续推进电子; 若已超出, 则表示发生碰撞.

2.3 平板传输线计算模型

本文使用平板传输线 TEM 模式条件下的微放电作为模型验证的计算对象, 其横截面的二维几何结构和电磁场分布如图 2 所示.

TEM 模式下电磁场表达式(高斯单位制)如下:

$$\begin{aligned} E_x &= E_0 \sin(\omega t - \beta z), \\ H_y &= E_0 \sin(\omega t - \beta z), \end{aligned} \quad (6)$$

其中, ω 为角频率, β 为传播常数. 其他方向的电磁场分量为零. 由于电场只有 x 方向的分量, 且平行平板为无限大, 因而只考虑在 x 方向上电子的运动. 这样电子的受力方程可以简化为

$$m\ddot{x}(t) = eE_0 \sin(\omega t), \quad (7)$$

其中 m 为电子质量.

目前应用较广的二次电子发射模型主要有 Vaughan 模型 [14] 和 Furman 模型 [15], 本文采用 Furman 模型. 这是因为 Furman 模型按照真实的物理过程将二次电子分为反射电子、散射电子和真二次电子, 并分别建立了不同的数学模型. 相比而言, 该模型能更准确地描述二次电子发射系数.

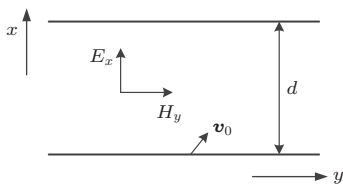


图2 平板传输线二维几何结构和 TEM 模式的电磁场分布

根据 Ag 材料二次电子发射特性绘制的二次电子发射曲线如图 3 所示. 这里 Furman 模型中的最优参数根据文献 [15] 确定, 结果列于表 1. 其中, 参数 $s, t_1-t_4, W_e, p, e_1, e_2, E_r, r, r_1$ 和 r_2 为 Furman 模型中由实验结果拟合得到的经验参数; $\hat{\delta}_{ts}$ 为电子垂直入射时真二次电子发射系数的峰值; \hat{E}_{ts} 为电子垂直入射时真二次电子发射系数峰值对应的入射电子能量; $P_{1,e}(\infty)$ 为电子垂直入射条件下, 入射电子能量趋于无穷大时的反射系数; $\hat{P}_{1,e}$ 为电子垂直入射时反射系数的峰值; $P_{1,r}(\infty)$ 为电子垂直入射条件下, 入射电子能量趋于无穷大时的散射系数.

3 单粒子蒙特卡罗方法准确性的验证

应用单粒子蒙特卡罗方法计算平板传输线 TEM 模式中频率 f 与间隙宽度 d 乘积 (fd 值) 所对

应的微放电阈值电压, 并分别与统计模型 [5] 计算结果和传统蒙特卡罗方法 [6,7] 计算结果进行对比, 结果列于表 2.

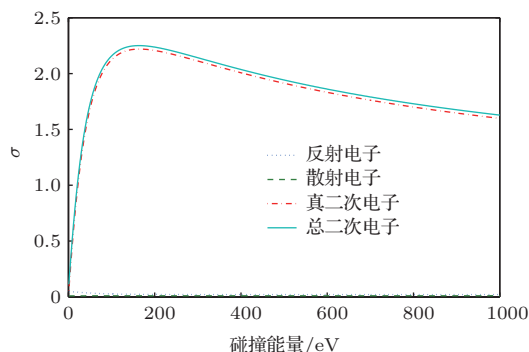


图3 Ag 材料二次电子发射的 Furman 模型

表1 Ag 材料 Furman 模型的主要参量取值

参量	取值	参量	取值
s	1.32	W_e	60.86
t_1	0.66	p	1.00
t_2	0.80	e_1	0.26
t_3	0.70	e_2	2.00
t_4	1.00	$P_{1,r}(\infty)$	0.01
$\hat{\delta}_{ts}$	2.22	E_r	0.041
\hat{E}_{ts}	165	r	0.104
$P_{1,e}(\infty)$	0.02	r_1	0.26
$\hat{P}_{1,e}$	0.05	r_2	2.00

虽然统计模型的适用性有一定的局限性, 但其对简单结构计算的准确性在文献 [5] 中得到了充分的验证, 它不仅能够真实地反映二次电子发射的随机性, 并与实验结果符合较好, 因此本文将计算结果作为比对的参考依据. 从表 2 可以看出, 与统计模型相比, 单粒子蒙特卡罗方法计算得到的微放电阈值误差较小且稳定性好, 而对于不同 fd 值, 传统蒙特卡罗方法计算得到的微放电阈值的准确性不稳定, 个别情况的相对误差甚至超过 90%.

表2 采用单粒子蒙特卡罗方法、传统蒙特卡罗方法和统计模型计算得到的微放电阈值电压 (单位: V)

$fd/\text{GHz}\cdot\text{mm}$	统计模型	单粒子蒙特卡罗方法	传统蒙特卡罗方法	单粒子蒙特卡罗方法相对误差/%	传统蒙特卡罗方法相对误差/%
1.06	47	43	45.5	-12.20	3.19
2.14	169	163	174.5	-3.55	-3.25
3.71	235	250	450.0	6.38	-91.50
5.33	388	390	421.0	0.52	-8.51
7.97	555	570	650.0	2.70	-17.10

因此, 进一步应用单粒子蒙特卡罗方法计算了平板传输线 TEM 模式的微放电敏感区域, 结果如图 4 所示. 图 4 横坐标 fd 的取值范围为 0.5—50 GHz·mm, 纵坐标电压 V 的取值范围为 10—5000 V, 边界上 $\sigma_{\text{eff}} \approx 1$, 这表明对于给定的 fd 值, 其对应的电压为微放电发生的阈值. 图 4 的敏感区域与文献 [5] 中用统计模型获得的敏感区域基本一致. 同时, 将单粒子蒙特卡罗方法计算得到的微放电阈值电压与粒子模拟计算结果进行对比, 选取图 4 中的 5 个 fd 值, 采用 VORPAL^[16] 软件进行粒子模拟, 两种方法得到的微放电阈值电压列于表 3. 从表 3 可以直观地看出, 单粒子蒙特卡罗方法得到的微放电阈值与粒子模拟方法得到的微放电阈值也相差很小.

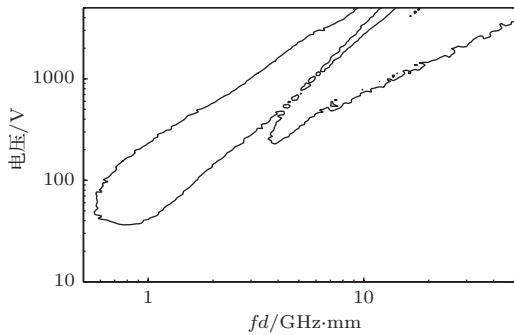


图 4 单粒子蒙特卡罗方法计算得到的平板传输线 TEM 模式下微放电敏感区域

表 3 采用单粒子蒙特卡罗方法和粒子模拟方法计算得到的微放电阈值电压 (单位: V)

$fd/\text{GHz}\cdot\text{mm}$	单粒子蒙特卡罗方法	粒子模拟方法	相对误差/%
1.06	43	41.3	4.12
2.14	163	145.0	12.41
3.71	250	232.0	7.76
5.33	390	382.0	2.09
7.97	570	607.0	-6.10

4 单粒子蒙特卡罗方法计算高效性的验证

除具有与统计模型和粒子模拟相近的计算精度这一优点外, 单粒子蒙特卡罗方法还具有较快的计算效率. 对采用单粒子蒙特卡罗方法、传统蒙特卡罗方法和粒子模拟方法计算微放电阈值的具体运算时间进行了比较, 结果列于表 4. 对于单粒子

蒙特卡罗方法和传统蒙特卡罗方法, 表 4 列出的是碰撞次数相同且计算的微放电阈值基本达到稳定时的计算时间. 从表 4 可以明显地看出, 粒子模拟方法的计算耗时是单粒子蒙特卡罗方法计算时间的几十倍, 且 fd 值越大, 计算效率提高越显著. 综合而言, 本文提出的单粒子蒙特卡罗方法可以用于微波器件中微放电阈值的快速计算.

表 4 采用单粒子蒙特卡罗方法、传统蒙特卡罗方法和粒子模拟方法计算微放电阈值的运算时间

$fd/\text{GHz}\cdot\text{mm}$	单粒子蒙特卡罗方法计算时间/s	传统蒙特卡罗方法计算时间/s	粒子模拟计算时间/s
1.06	39.7	38.5	918
2.14	69.9	65.6	1037
3.71	98.0	127.3	3270
5.33	180.6	171.2	4737
7.97	216.6	241.5	16624

5 结 论

本文提出了一种快速的单粒子蒙特卡罗方法, 可用于计算微波器件的微放电阈值, 它考虑了二次电子出射能量、相位和角度等变量的随机性. 应用该方法对平板传输线 TEM 模式的微放电阈值和敏感区域进行了计算, 并将其计算结果与统计模型、传统蒙特卡罗方法和粒子模拟方法的计算结果进行了比较. 结果表明, 单粒子蒙特卡罗方法不仅能快速准确地计算出微放电阈值, 而且比统计模型具有更广泛的适用性, 因为它不需要得到复杂电磁场中电子运动轨迹的解析表达式, 可以适用于复杂的电磁波模式或复杂的器件结构. 同时, 与传统蒙特卡罗方法相比, 单粒子蒙特卡罗方法的计算准确性更加稳定. 此外, 与粒子模拟方法相比, 单粒子蒙特卡罗方法能有效地缩短计算时间, 显著提高计算效率.

参考文献

- [1] Farnsworth P 1934 *J. Franklin Inst.* **218** 411
- [2] Vaughan J 1988 *IEEE Trans. Electron Dev.* **35** 1172
- [3] Gill E W B, Engel A V 1948 *Proc. Roy. Soc. London A* **192** 446
- [4] Vdovicheva N K, Sazontov A G, Semenov V E 2004 *Radiophys. Quantum Electron.* **47** 580
- [5] Anza S, Vicente C, Gil J, Boria V E, Gimeno B, Raboso D 2010 *Phys. Plasmas* **17** 062110

- [6] Lau Y Y, Kishkek R A, Gilgenbach R M 1988 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **26** 290
- [7] Kishkek R A, Lau Y Y 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 193
- [8] Nieter C, Stoltz P H, Roark C, Mahalingam S 2010 *AIP Conf. Proc.* **1299** 399
- [9] Sazontov A G, Sazontov V A, Vdovicheva N K 2008 *Contrib. Plasma Phys.* **48** 331
- [10] Udiljak R, Anderson D, Lisak M, Semenov V E, Puech J 2007 *Phys. Plasmas* **14** 033508
- [11] Zhu F, Zhang Z C, Dai S, Luo J R 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 084103 (in Chinese)[朱方, 张兆传, 戴舜, 罗积润 2011 物理学报 **60** 084103]
- [12] Dong Y, Dong Z W, Yang W Y 2011 *High Power Laser Particle Beams* **23** 454 (in Chinese) [董焯, 董志伟, 杨温渊 2011 强激光与粒子束 **23** 454]
- [13] Li X Y, Chen C M 2008 *Math. Theory Appl.* **28** 62 (in Chinese)[李夏云, 陈传淼 2008 数学理论与应用 **28** 62]
- [14] Rodney J, Vaughan M 1989 *IEEE Trans. Electron Dev.* **36** 1963
- [15] Li Y D, Yang W J, Zhang N, Cui W Z, Liu C L 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 077901 (in Chinese)[李永东, 杨文晋, 张娜, 崔万照, 刘纯亮 2013 物理学报 **62** 077901]
- [16] Nieter C, Cary J R 2004 *J. Comput. Phys.* **196** 448

A fast single particle Monte-Carlo method of computing the breakdown threshold of multipactor in microwave device*

Li Yong-Dong[†] Yan Yang-Jiao Lin Shu Wang Hong-Guang Liu Chun-Liang

(Key Laboratory for Physical Electronics and Devices of Ministry of Education, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

(Received 29 August 2013; revised manuscript received 30 October 2013)

Abstract

To compute the breakdown thresholds of multipactor in microwave devices, a fast single particle Monte-Carlo (SP-MC) method is presented, which considers the random nature of secondary electrons and their initial energies, phases and angles. With Runge-Kutta method and Furman model, the motion of the electron and the secondary electron yield (SEY) of the wall of the device are computed. An effective SEY is regarded as a criterion to estimate whether multipactor occurs, which is computed by averaging the SEYs for all impacts. As an example, the multipactor in a transmission line composed of parallel plates is investigated with the presented SP-MC method, traditional Monte-Carlo method, statistical theory method and particle-in-cell method separately. The results obtained from the SP-MC method accord well with those from the statistical theory method and particle-in-cell method, including the results of the susceptibility zones, break thresholds on specific products of frequency and gap space. Moreover, the SP-MC method is more adaptive than the statistical theory method, more stable than the traditional Monte-Carlo method and much more efficient than the particle-in-cell method.

Keywords: multipactor, single particle Monte-Carlo method, parallel plates transmission line, susceptibility zone

PACS: 79.20.Hx, 73.43.Cd

DOI: 10.7498/aps.63.047902

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50977076).

[†] Corresponding author. E-mail: leyond@mail.xjtu.edu.cn