

电致伸缩效应下水中电子输运特性*

李元† 李春鹏 李林波 袁磊 王亚桢 石亚轩 张冠军

(西安交通大学电气工程学院, 西安 710049)

(2023 年 12 月 4 日收到; 2023 年 12 月 28 日收到修改稿)

水中快脉冲(脉宽数 ns 甚至 ps 级)放电过程中, 快脉冲在电极附近引起电致伸缩效应导致电极附近形成空化区. 电子在空化区内积累能量并高速进入水体, 电子在水中的输运特性是水中脉冲放电起始与发展的关键因素. 本文构建了考虑弹性与非弹性碰撞截面的水中电子输运物理模型, 采用蒙特卡罗方法研究不同能量电子的透射与散射径迹结构特征, 研究了弹性碰撞、电离与激发碰撞频次随电子初始能量的变化以及水中电子能量损失特征. 结果表明, 较低能量的电子(约 20 eV)受水分子散射影响能量损失较大, 透射能力较弱, 随着电子初始能量的增高, 电子受水分子散射作用的影响逐渐减小, 具有更强的液体穿透能力; 弹性碰撞次数远大于激发与电离碰撞, 导致电子散射距离与透射深度相当, 电离碰撞和激发碰撞次数随电子能量升高显著增加; 电子入射能量越高, 其能损越大, 随运动距离增加, 能损急剧下降, 与电子的平均电离能量损失 W 变化趋势一致. 本研究可为探究快脉冲放电机理提供重要数据基础.

关键词: 电致伸缩, 水中电子输运, 透射与散射, 碰撞模式**PACS:** 47.40.-x, 52.27.Ny, 51.50.+v, 52.20.Fs**DOI:** 10.7498/aps.73.20231893

1 引言

水中快脉冲放电是指在完全浸没于水中两个金属电极间施加脉宽数 ns 甚至 ps 量级的高电压所引起的瞬时水中放电与击穿过程(或者现象)^[1,2]. 放电过程中伴随热、光、力、声学等物理化学效应, 这些效应常称为“液电效应”^[3,4]. 在电极之间施加快脉冲时电极附近的电场迅速增强, 导致水中出现有质动力(ponderomotive force)^[5]. 有质动力作用于水体导致水体拉伸形变, 这种效应称为电致伸缩(electrostriction effect)^[6,7]. 当电极附近的水体被拉伸到一定程度, 水体的连续性遭到破坏, 在电极附近形成大量纳米尺度的空腔, 即导致水中局部空化^[8].

水中局部空化形成的纳米尺度的空腔是在极短时间内由水体层撕裂所形成的, 与水受热气化产

生气泡机制不同, 空腔内部可近似为真空环境^[9]. 在电极附近强电场作用下, 空腔壁与电极上的水分子通过场致电离效应产生种子电子^[10]. 种子电子在空腔内强电场加速作用下获得较高能量, 入射到空腔壁并进入水体. 电子进入水中后与水分子发生弹性及非弹性碰撞(电离与激发), 如图 1 所示^[5]. 弹性碰撞影响电子运动方向, 引起电子散射; 电离碰撞产生二次电子, 引起电子倍增; 激发碰撞导致水分子中低能级电子跃迁到高能级. 入射电子在电离和激发碰撞过程中损失能量^[11], 当其能量不足以继续引发弹性或非弹性碰撞时, 被水分子吸附形成水合电子^[12,13].

显微与成像观测^[14-16]、散射试验^[17,18]、光电发射与能谱检测^[19,20]等精密检测技术可表征微观粒子与介质作用后的能量/动量、分子间作用力以及能带结构变化, 但无法追踪水中电子的输运过程. 近年来, 基于粒子和流体模型的数值仿真可以

* 国家自然科学基金(批准号: 52041702)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liyuan8490@xjtu.edu.cn

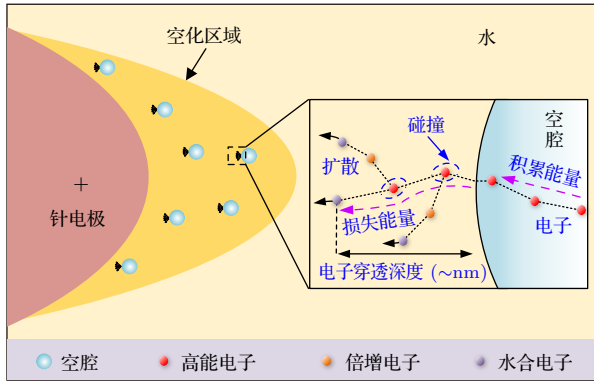

 图 1 电致伸缩作用下液态水空化及电子-水分子碰撞过程^[5]

Fig. 1. Cavitation of liquid water and electron-water collision process under electrostriction^[5].

从纳米尺度重构电荷输运特性, 为研究水中快脉冲放电微观过程提供了有效途径. Bousisi 等^[21]通过完善了电子-水分子碰撞截面数据, 使蒙特卡罗方法成为研究水中电子输运特性的可靠方法. Dingfelder 等^[22]开发 NOREC 和 PARTRAC 水中电子运动蒙特卡罗仿真程序, 获得了特定能量电子在水中的散射角度与运动距离. Bordage 等^[23]使用 Geant4-DNA 蒙特卡罗仿真程序对电子-水分子碰撞类型进行区分, 定量地分析了电子与水分子弹性碰撞、电离与激发碰撞次数. 关于水中快脉冲过程中电致伸缩空腔内产生的不同能量电子在水中的动力学过程几乎没有涉及, 值得深入研究.

本文采用蒙特卡罗仿真技术, 通过构建水中电子输运物理模型, 研究不同能量下电子透射与散射径迹结构特征、不同碰撞模式下电子平均自由程、电离与激发碰撞能损的空间分布等特性. 通过对水中电子输运特性的多维度参数定量表征, 认识电致伸缩效应下水中电子动力学行为, 为水中快脉冲放电机理研究提供基础数据.

2 水中电子输运物理模型

水中快脉冲过程中电致伸缩空腔内产生的不同能量种子电子. 种子电子经空腔壁入射水体, 与水分子发生弹性及非弹性碰撞. 本文对不同能量电子-水分子弹性/非弹性碰撞截面分别进行计算, 以此为基础采用蒙特卡罗法模拟研究电子在水中的输运特征.

2.1 电子-水分子弹性碰撞

由于电子质量远小于水分子, 电子-水分子的弹

性碰撞可以简化为电子的弹性散射. 电子散射过程中的轨迹偏折取决于散射角度, 可基于微分散射截面计算获得^[24]. 屏蔽效应校正后的 Rutheford 微分散射截面为^[25,26]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z(Z+1)r_e^2[(1-\beta^2)/\beta^4]}{(1-\cos\theta+2\eta)^2}. \quad (1)$$

对 (1) 式积分后可得到电子弹性散射总截面 σ_R ,

$$\sigma_R = \int_0^\pi 2\pi \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) \sin\theta d\theta, \quad (2)$$

式中, σ 为电子-水分子弹性碰撞截面; Z 为原子序数; r_e 为电子半径; θ 为电子弹性碰撞散射角, 随机分布于 $[0, 2\pi]$; η 和 β 为屏蔽系数, 表示为

$$\eta = \eta_c \frac{1.7 \times 10^{-5} Z^{2/3} m_0 c^2}{T(T/m_0 c^2 + 2)}, \quad (3)$$

$$\beta^2 = 1 - \frac{1}{(T/m_0 c^2 + 1)^2}, \quad (4)$$

其中 m_0 为电子质量; c 为光速; T 为电子能量; 当 $T < 50$ keV 时, η_c 取 1.198^[25].

弹性碰撞微分散射截面 $d\sigma/d\Omega$ 是散射角 θ 的函数, 本质上表示在空间某一特定角度探测到被散射粒子的概率. 因此基于 (1) 式, 可得电子弹性碰撞后散射角的随机抽样表达:

$$\cos\theta = 1 - \frac{2\eta R}{1 + \eta - R}, \quad (5)$$

$$\theta = \arccos \left(1 - \frac{2\eta R}{1 + \eta - R} \right), \quad (6)$$

其中 R 是 $(0, 1)$ 上均匀分布的随机数. 电子弹性碰撞后的径迹结构由散射电子在水中不同运动位置处的三维坐标统计得到.

2.2 电子-水分子非弹性碰撞

入射电子与水分子非弹性碰撞时, 水分子电离轨道与激发轨道中电子受入射电子势场扰动, 其电位移 D 遵循介电响应函数 $D = \varepsilon E$, $\varepsilon(E', M) = \varepsilon_1(E', M) + i\varepsilon_2(E', M)$, 其中 ε_1 与 ε_2 分别是介电响应参数的实部和虚部, E' 与 M 分别为入射电子向水分子传递的能量与动量^[27]. 碰撞时能量和动量的转移受电子-水分子碰撞模式决定. 涉及 5 种电离模式与 5 种激发模式: 电离轨道能级分别为 $1b_1$, $3a_1$, $1b_2$, $2a_1$, $1a_1$, 激发轨道能级为 A^1B_1 , B^1A_1 , Ryd A+B, Ryd C+D, Diffuse bands.

依据介电响应函数, 采用 Ochkur 交换效应校

表 1 电离能级与激发能级参数
Table 1. Ionization levels and excitation level parameters.

电离能级	$B_j (j = 1, 2, \dots, 5)/\text{eV}$	$U_j (j = 1, 2, \dots, 5)/\text{eV}$	激发能级	$E_j (j = 6, 7, \dots, 10)/\text{eV}$
1b ₁	10	30	A ¹ B ₁	8.40
3a ₁	13	40	B ¹ A ₁	10.10
1b ₂	17	50	Ryd A+B	11.26
2a ₁	32.2	60	Ryd C+D	11.93
1a ₁	539.7	700	Diffuse bands	14.10

正^[28]与低能微扰 Coulomb-field 校正^[29]的非弹性碰撞微分截面计算电子-水分子不同碰撞模式下传递的能量:

$$\frac{d\sigma_{\text{in}}}{dE'} = \sum_{j=1}^{10} \frac{d\sigma_{\text{in}}^{(j)}}{dE'}, \quad (7)$$

式中, σ_{in} 为电子-水分子非弹性碰撞截面; j 为电子-水分子不同碰撞模式, 对应 5 种电离模式 ($j = 1, 2, \dots, 5$) 与 5 种激发模式 ($j = 6, 7, \dots, 10$). (7) 式中 $\sigma_{\text{in}}^{(j)}$ 为碰撞模式 j 下的碰撞截面, 其微分形式为

$$\frac{d\sigma_{\text{in}}^{(j)}}{dE'} = \frac{1}{\pi N a_0 T'} \int_{u_-}^{u_+} \frac{\varepsilon_2^{(j)}}{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} \left(\frac{1}{u} - u + u^3 \right) du, \quad (8)$$

其中 E' 为电子转移能量; N 为液态水的分子密度; a_0 为玻尔半径; T' 为总能量, 对于电离碰撞 $T' = T + B_j + U_j$, 其中 B_j 及 U_j 为电离模式 j 中轨道电子的结合能与轨道电子动能; 对于激发碰撞 $T' = T + 2E_j$, E_j 为第 j 激发模式中的激发能. 各能级下 B_j , U_j 与 E_j 参数列于表 1.

(8) 式中 $u = M/\sqrt{2m_0 T'}$, $u_{\pm} = 1 \pm \sqrt{1 - \alpha}$, $\alpha = E'/T'$. 根据 Emfietzoglou 的研究结果^[30], 在长波长极限下 $M \rightarrow 0$, 满足

$$\varepsilon_1(E', 0) = 1 + E_p^2 \sum_j^{\text{ioniz}} \left[\frac{f_j(E_j^2 - E'^2)}{(E_j^2 - E'^2)^2 + (\gamma_j E')^2} \right] + E_p^2 \sum_j^{\text{excit}} \left\{ \frac{f_j(E_j^2 - E'^2) [(E_j^2 - E'^2)^2 + 3(\gamma_j E')^2]}{[(E_j^2 - E'^2)^2 + (\gamma_j E')^2]^2} \right\}, \quad (9)$$

$$\varepsilon_2(E', 0) = E_p^2 \sum_j^{\text{ioniz}} \left[\frac{f_j \gamma_j E'}{(E_j^2 - E'^2)^2 + (\gamma_j E')^2} \right] + E_p^2 \sum_j^{\text{excit}} \left[\frac{2f_j \gamma_j^3 E'^3}{[(E_j^2 - E'^2)^2 + (\gamma_j E')^2]^2} \right], \quad (10)$$

其中 E_p 是水的伪等离子能量 (约 21.46 eV)^[24]; f_j , γ_j 与 E_j 分别是碰撞模式 j 下的系数. 通过 D3 扩展,

可将 $\varepsilon_1(E', M)$ 及 $\varepsilon_2(E', M)$ 拓展到任意转移动量空间. 非弹性碰撞微分截面 $d\sigma_{\text{in}}^{(j)}/dE'$ 是电子转移能量 E' 的函数, 表示发生特定碰撞类型 j 的概率, 因此基于 (8) 式可得到入射电子与水分子不同碰撞模式的能量损失.

在电离碰撞过程中, 不仅需要计算电子能量损失, 还需确定电子电离碰撞散射角 θ_p ,

$$\theta_p = \arcsin \left[\frac{E_s/T}{(1 - E_s/T) \times T/2m_0 c^2 + 1} \right]^{1/2}, \quad (11)$$

式中, $E_s = E' - B_j$.

2.3 水中电子输运仿真流程

在 Geant4-DNA 开源平台上建模, 基于蒙特卡罗法研究水中快脉冲过程中电致伸缩空腔内产生的不同能量电子在水中的输运特性, 仿真流程如图 2 所示. 1) 仿真区域设定为 100 nm × 100 nm × 100 nm 的水体; 2) 在水体左侧中心区放置电子发射源, 可同时释放入射方向相同 (水平入射) 但能量不同 (10—10³ eV) 的电子, 如图 3 所示; 3) 依据 2.1—2.2 节所述电子-水分子弹性、非弹性碰撞截面模型, 编程驱动水中电子输运仿真模型; 4) 仿真计算并记录电子的位置坐标、碰撞次数以及能量变化等数据, 统计分析电子在水中的运动轨迹特征、碰撞特性以及能损等. 当电子能量低于水分子

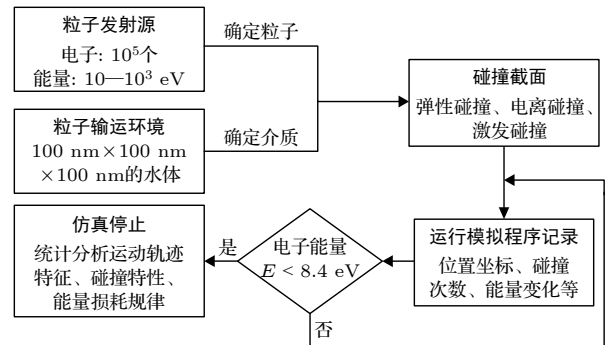


图 2 水中电子输运仿真流程

Fig. 2. Simulation flow chart of electronic transport in water.

最低激发能级 (8.4 eV^[31,32]) 时, 电子主要发生弹性散射, 其运动方向随机改变且运动距离极短, 追踪这些电子会耗费大量计算资源, 因此在实际计算时设定电子追踪的截止能量为 $E_{st} = 8.4$ eV.

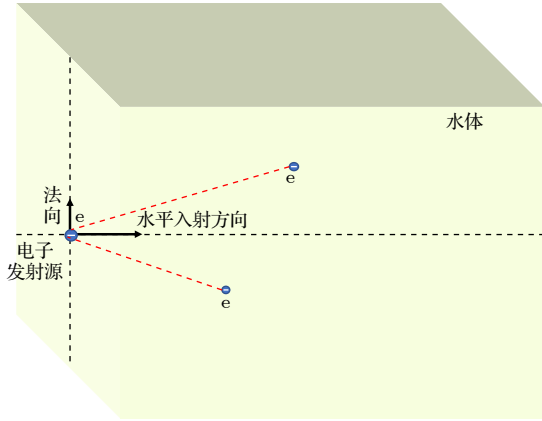


图3 电子入射水体过程示意

Fig. 3. Schematic diagram of electron ejection into water bulk.

3 结果与分析

3.1 水中电子径迹结构

本课题组的前期研究显示, 电致伸缩效应下由水体空化区域内射出电子的能量可达 100 eV^[5], 电子以此能量入射水中后的透射与散射径迹结构如图 4 所示. 为清晰展示水中电子轨迹特征, 图 4 忽略了两次非弹性碰撞之间由弹性碰撞引起的轨迹偏折, 而取两个非弹性碰撞节点之间的连线作为电子的运动路径.

由图 4 正视图 (垂直电子入射方向看), 尽管每个电子初始能量 (100 eV) 以及入射方向均相同, 但受水分子散射的影响, 电子偏折明显, 相对于入射方向的最大偏移角度 θ_{shift} 约 60°, 电子偏折距离

与水平透射深度相当, 在 6—8 nm 之间. 电子沿入射方向两侧基本对称分布, 轨迹区域整体呈束状锥形. 由左视图 (沿电子入射方向看), 由于电子-水分子碰撞具有随机性, 导致水中电子数密度分散性较大, 其中电子发射源附近的电子数密度较高, 而沿着沿垂直电子入射方向的散射距离增大, 电子密度逐渐稀疏, 整体呈星型分布.

通过统计与分析处理图 4 中电子径迹结构参数, 选取轨迹长度 l 、位移距离 r 和穿透深度 d 三个轨迹表征参数, 对电子在水中的空间分布特性进行描述. l 为电子在水中不同运动段的距离总和, r 为电子在开始和停止运动间的直线距离, d 为电子位移距离 r 在水平入射方向上的投影长度. 对 10^5 个初始能量均为 100 eV 的入射电子轨迹表征参数的概率分布及其累积概率进行统计, 如图 5(a), (b) 所示.

由图 5(a), 穿透深度 d 与位移距离 r 的概率分布较为集中, 二者概率峰值 p 分别为 17% ($d = 3$ nm) 与 14% ($r = 5$ nm); 轨迹长度 l 的概率分布较为分散, 其概率峰值为 7% ($l = 11$ nm). 根据图 5(b), 随着电子入射距离的增加, d 及 r 的累积概率增长迅速, 而 l 的累积概率增长缓慢, 其中绝大部分 (90%) 电子的 $d = 9$ nm, $r = 12$ nm 与 $l = 20$ nm.

入射电子能量受脉冲电压上升沿与幅值等影响, 电子能量可达 10^3 eV^[23]. 为充分考虑不同电子能量对电子径迹结构的影响, 进一步研究了 $10—10^3$ eV 能量下的水中电子轨迹表征参数, 如图 6 所示. 当电子能量小于 20 eV 时, l 与 r 有明显下降趋势且 d 变化平缓, 这是因为该能量区间内的电子-水分子电离与激发碰撞次数逐渐增加, 导致电子能量快速消耗, 限制了电子的运动能力. 当电子能量

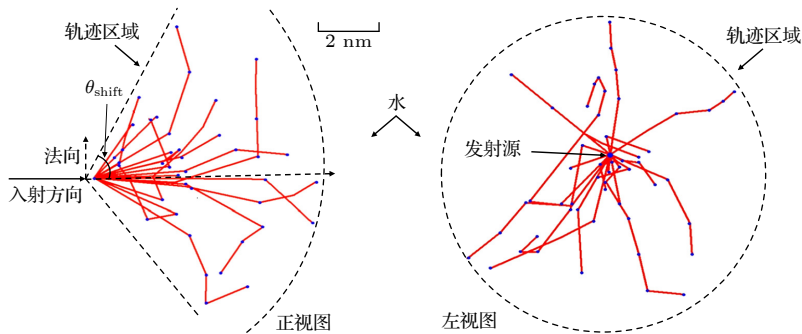


图4 水中电子运动轨迹的正视图及左视图 ($E = 100$ eV)

Fig. 4. Front and left views of electron trajectories in water ($E = 100$ eV).

大于 20 eV, 各轨迹表征参数随电子能量的升高呈增加趋势, 即电子能量越高, 其运动能力越强. 但电子能量的升高对水中电子的散射及透射效果影响不同, 可通过参数 $\cos\psi = d/r$ 反映, $\cos\psi$ 越大, 表明水中电子的透射作用越明显, 反之, 水分子对电子的散射影响越大. 图 6 中随着电子能量的增

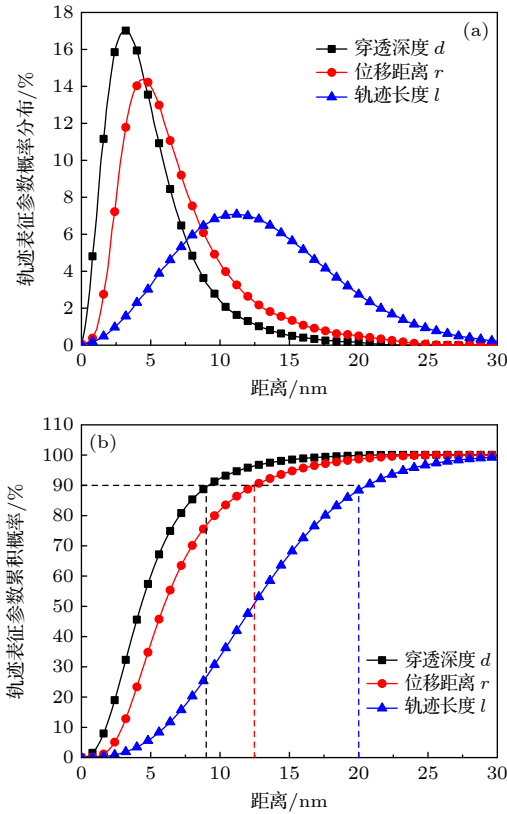


图 5 电子轨迹表征参数 l , r , d 的统计 (a) 概率分布; (b) 累积概率

Fig. 5. Statistics of electron trajectory characterization parameters l , r and d : (a) Probability distribution; (b) cumulative probability.

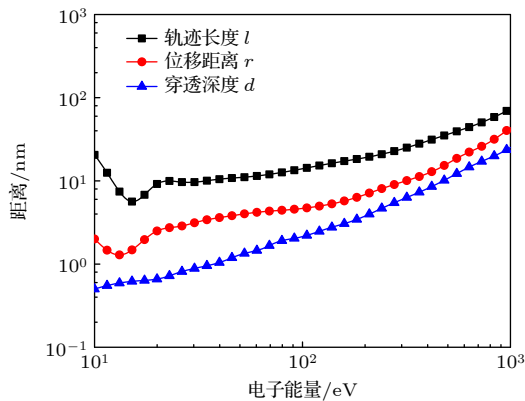


图 6 不同电子能量下的轨迹表征参数

Fig. 6. Trajectory characterization parameters under different electron energies.

加, $\cos\psi$ 由能量 50 eV 时的 0.25 增加到 500 eV 时的 0.62, 即更高能量的电子受水分子散射作用的影响在减小, 从而具有更强的水体穿透能力.

3.2 电子-水分子碰撞特性

电子-水分子相互作用类型影响水中碰撞发生的频度, 可通过电子平均自由程进行表征. 电子平均自由程是指电子与水分子相继发生两次碰撞事件时的平均运动距离, 平均自由程越短, 碰撞概率越高 [33,34]. 本文统计分析了不同入射能量下的总电子平均自由程与电子非弹性碰撞平均自由程, 如图 7 所示.

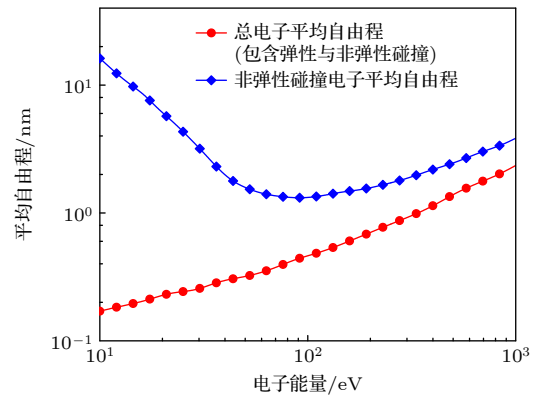


图 7 不同能量下的电子平均自由程

Fig. 7. Average free path of electrons at different energies.

由图 7 看出, 电子总平均自由程与电子入射能量基本呈线性正相关, 电子入射能量越高, 平均自由程越大, 即电子与水分子碰撞的概率越小. 非弹性碰撞电子平均自由程随电子能量的增加呈先下降后上升趋势, 100 eV 时电子平均自由程最小, 即该能量的电子在运动很短距离 (约 1 nm) 就持续发生电离或激发碰撞. 还需指出, 在考虑弹性碰撞后, 电子平均自由程由蓝色曲线下移到红色曲线, 即相较电离与激发碰撞, 弹性碰撞的电子平均自由程更短, 弹性碰撞更容易发生.

对 10—10³ eV 能量范围内电子-水分子弹性、激发与电离碰撞次数进行统计, 如图 8 所示. 在 10—10³ eV 能量范围内, 弹性碰撞次数占主导地位, 远大于激发与电离碰撞, 导致电子沿法向方向 (图 4) 有较大的散射偏移. 当电子能量约为 20 eV 时, 弹性碰撞和激发碰撞在减弱, 而电离碰撞逐渐增强; 当电子能量高于 30 eV, 弹性碰撞次数基本不受电子能量影响, 基本呈水平直线, 而电离碰撞

和激发碰撞次数显著增加. 这是因为入射电子能量越高, 水分子中的电子更容易因碰撞被激发发生能级跃迁或被电离生成二次电子. 此外, 相较弹性碰撞, 非弹性碰撞次数的增加有利于提高水中电子透射深度, 可解释 3.1 节所述 $\cos\psi$ 随电子能量增加而增大的现象.

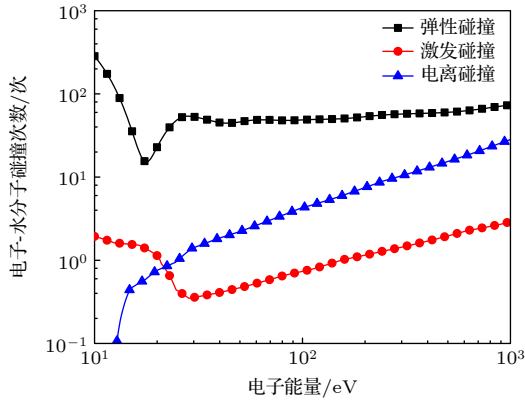


图 8 不同电子能量下的弹性碰撞、激发碰撞与电离碰撞次数

Fig. 8. Collision times of elasticity, excitation and ionization at different electron energies.

图 7 与图 8 所示的电子平均自由程与碰撞次数的变化主要源于电子-水分子碰撞截面的改变. 本文模型采用的碰撞截面数据如图 9 所示, 图中还包含了两种描述水中电子输运特性的 EmDNA 模型 [35] 和 CPA100 模型 [36] 碰撞截面数据. 通过分析三组模型碰撞截面, 计算电子平均电离能量损失值 W , 结合实验获得的 W 结果, 可评价验证各碰撞截面数据的合理性, 将在 3.3 节论述.

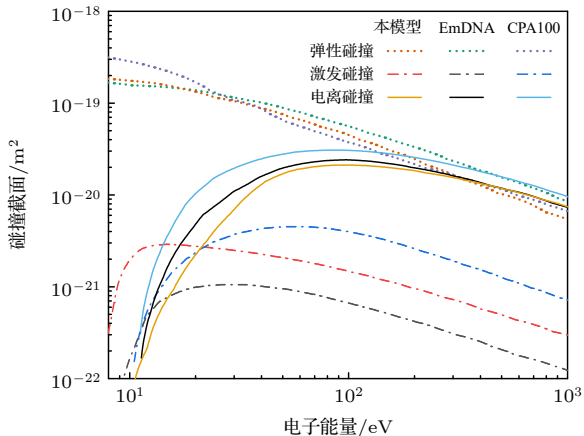


图 9 不同模型下电子-水分子弹性、电离与激发碰撞截面

Fig. 9. Cross sections of electron-water molecule due to elastic, ionization, and excitation collision derived by varying models.

图 9 所述各模型弹性碰撞截面、电离和激发碰撞截面随电子能量的变化趋势大致相同. 电子入射能量越高, 其弹性、电离和激发的碰撞截面显著下降, 电子-水分子碰撞概率下降, 即电子运动较长距离才与水分子发生碰撞; 针对非弹性碰撞 (激发与电离), 碰撞截面随电子能量先升高后下降, 相应电子平均自由程先下降后上升 (图 7). 在 10—10³ eV 能量范围内, 弹性碰撞截面基本都大于激发与电离碰撞截面, 因此弹性碰撞的次数高于其余两类碰撞; 对于激发与电离碰撞截面, 当能量高于 20 eV 时, 激发与电离碰撞截面的相对大小改变, 电离碰撞概率大于激发碰撞, 可解释图 8 中电离碰撞次数高于激发碰撞的原因.

理论上, 当入射电子与水分子碰撞转移的能量高于水分子最低电离能级 10 eV (表 1), 碰撞电离即可发生, 产生二次电子, 引起水体中的电子数密度增加. 由以上结果和分析可知, 除空腔壁和电极上水分子场致电离产生新电子外 [10], 入射电子进入水体后引起的碰撞电离也是二次电子来源, 共同影响后续放电的起始与发展.

3.3 水中的电子能损

电子与水分子不断发生电离碰撞和激发碰撞, 将能量不断消耗并转移至水体中. 不同入射能量电子 (50, 100 与 150 eV) 进入水体后的能损 (单位距离能量损失) 与剩余能量的空间分布如图 10 所示.

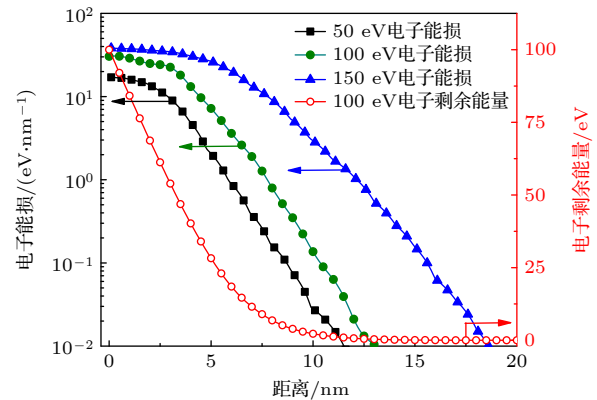


图 10 电子能损与电子剩余能量

Fig. 10. Energy consumption rate and residual energy of electron.

由图 10 可知, 电子入射能量越大, 其能损越高. 在运动相同距离 5 nm 后, 入射能量为 50 eV 的电子能损为 2 eV/nm, 而入射能量为 150 eV 的

电子能损高达 30 eV/nm. 这是因为较高入射能量的电子与水分子电离与激发碰撞的次数显著增加, 电子能量快速损耗. 随运动距离的增加, 电子能损急剧下降. 例如, 入射能量为 100 eV 的电子, 在运动距离 2.5 nm 内, 电子能损为 20—30 eV/nm, 而运动到 10 nm 处, 能损仅为 10^{-1} eV/nm. 电子剩余能量亦反映电子能损的非线性特征, 入射能量为 100 eV 的电子运动距离在前 6 nm 内其能量快速减小至 10 eV, 当电子继续运动至 10 nm, 能量才消耗殆尽.

基于电子能损的计算, 分别统计了电子-水分子电离碰撞与激发碰撞所消耗能量占电子总能量的比例, 以及两种碰撞的次数占非弹性碰撞的比例, 如图 11 所示. 两种碰撞消耗能量占比与碰撞次数占比的变化趋势基本相同, 但在不同电子能量下差异明显. 在 $10\text{--}10^3$ eV 范围内, 相同电子能量下电离碰撞消耗能量占比高于其碰撞次数占比, 这是因为在各碰撞类型中 (表 1), 水分子的电离能普遍高于激发能, 电离碰撞更容易消耗电子能量. 当电子能量约为 20 eV 时, 两种碰撞的次数与消耗能量占比均发生“逆转”, 电离碰撞损耗快速上升, 激发碰撞损耗急速下降. 当能量高于 100 eV 时, 电离及激发碰撞的能量损耗占比趋于稳定, 电子能量主要通过电离碰撞耗散.

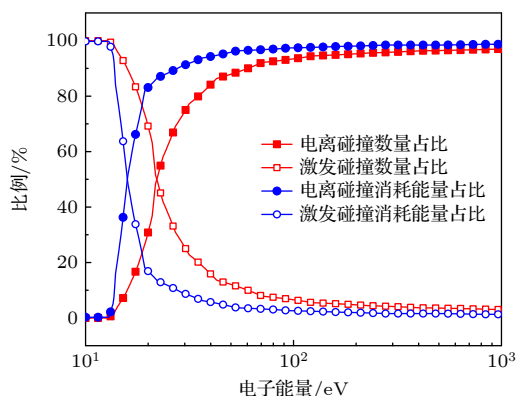


图 11 电子-水分子激发、电离碰撞数量占比及消耗能量占比

Fig. 11. Number proportion and energy consumption proportion of electron-water molecule excitation and ionization collision.

电子平均电离能量损失值 W 为入射电子能量与电离碰撞次数的比值, W 值越小表示电子在能量衰竭前能够完成多次电离碰撞, 即碰撞的效率越高 [33], 不同电子能量下的 W 值如图 12 所示. 电子

能量较低时 (如约 20 eV), 电子碰撞次数 (碰撞截面) 非常小, 导致电子平均电离能量损失很大; 当入射电子能量高于 100 eV, 电离碰撞次数显著增加, W 值降低, 维持在 20—30 eV. 这与较高能量下电子的电离碰撞数量与消耗能量占比快速上升趋势相符 (图 11).

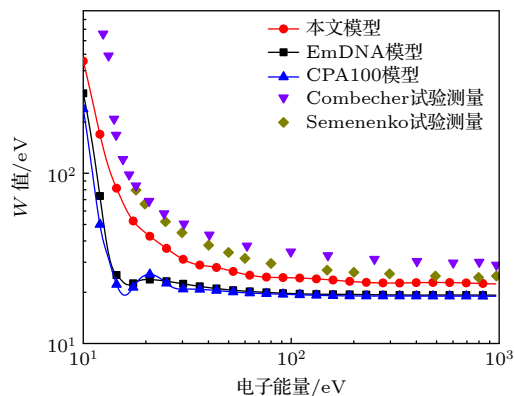


图 12 不同电子能量下的 W 值

Fig. 12. W values at different electron energies.

在 $10\text{--}1000$ eV 范围内, 本模型计算的 W 值高于 EmDNA 模型 [35] 和 CPA100 模型 [36] 结果. 造成差异的主要原因在于, 本模型中的电离碰撞截面更小 (图 9), 电子发生电离碰撞的概率偏低, 导致平均电离能量损失值更大. 本模型 W 值与 Combecher 和 Semenenko 等报道的实验结果 [22] 更为接近, 表明本模型采用的碰撞界面数据较为合理, 可为水中电子电离碰撞损耗计算提供数据参考.

4 结 论

本文建立水中电子输运物理模型, 对不同能量的入射电子在水中径迹结构、碰撞模式和能量转移耗散等动力学行为开展数值模拟, 定量描述电子加速进入水体后的迁移、扩散、碰撞与消散等物理过程和特性.

1) 水中入射电子运动呈束状锥形分布, 其散射偏移距离与透射深度相当, 约 6—8 nm, 最大偏移角度 θ_{shift} 约为 60° . 各轨迹表征参数概率峰值分别为 17% ($d = 3$ nm), 14% ($r = 5$ nm) 和 7% ($l = 11$ nm); 电子入射能量越高, 受水分子弹性散射的影响越小, 使入射电子具有更强的液体穿透能力.

2) 当电子能量超过约 50 eV 后电子与水分子的碰撞截面下降, 导致电子总平均自由程增加.

其中, 非弹性碰撞电子平均自由程先减小后增加, 电子能量为 100 eV 时, 非弹性碰撞电子平均自由程最小 (约 1 nm); 电子能量高于 30 eV, 电离碰撞与激发碰撞次数显著增多, 而弹性碰撞次数基本不变.

3) 电子入射能量越高, 其能损越大; 随着运动距离增加, 电子能损急剧下降. 较低能量 (约 20 eV) 电子的能量主要通过激发碰撞消耗, 较高能量 (约 100 eV) 电子的能量主要通过电离碰撞消耗. 针对电离碰撞, 平均电离能量损耗值 W 随电子能量升高快速降低, 最终维持在 20—30 eV, 与报道的实验结果相符.

参考文献

- [1] Zhao J L, Wang Z Q, Wang J J, Zhang D D, Li G F 2023 *High Power Laser Part. Beams* **35** 035005 (in Chinese) [赵景林, 王志强, 王进君, 张东东, 李国锋 2023 强激光与粒子束 **35** 035005]
- [2] Wang L R, Wen X Q, Yang Y T, Wang X 2023 *J. Appl. Phys.* **134** 013302
- [3] Li X D, Liu Y, Zhou G Y, Liu S W, Li Z Y, Lin F C, Pan Y 2018 *Proceeding of the CSEE* **38** 1562 (in Chinese) [李显东, 刘毅, 周古月, 刘思维, 李志远, 林福昌, 潘垣 2018 中国电机工程学报 **38** 1562]
- [4] Yutkin 1962 *Electro-hydraulic Effect* (Beijing: Science Press) pp45–50 (in Chinese) [尤特金 1962 液电效应 (北京: 科学出版社) 第 45—50 页]
- [5] Li Y, Li L B, Wen J Y, Ni Z Q, Zhang G J 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 024701 (in Chinese) [李元, 李林波, 温嘉烨, 倪正全, 张冠军 2021 物理学报 **70** 024701]
- [6] Seepersad Y, Pekker M, Shneider M N, Fridman A, Dobrynin D 2013 *J. Appl. Phys.* **46** 355201
- [7] Shneider M, Pekker M, Fridman A 2012 *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.* **19** 1579
- [8] Shneider M N, Pekker M 2013 *J. Appl. Phys.* **114** 214906
- [9] Pekker M, Shneider M N 2017 *Fluid Dyn. Res.* **49** 035503
- [10] Aghdam A C, Farouk T 2020 *Plasma Sources Sci. Technol.* **29** 025011
- [11] Tu J Y, Chen S, Wang F 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 095202 (in Chinese) [涂婧怡, 陈赦, 汪泓 2019 物理学报 **68** 095202]
- [12] Zhang J Q, Jiang X L, Chen Z G 2006 *High Power Laser Part. Beams* **18** 1053 (in Chinese) [张晋琪, 蒋兴良, 陈志刚 2006 强激光与粒子束 **18** 1053]
- [13] Li Y, Wen J Y, Li L B, Gao J, Shi Y X, Liu Z H Zhang G J 2021 *High Power Laser Part. Beams* **33** 065001 (in Chinese) [李元, 温嘉烨, 李林波, 郜晶, 石亚轩, 刘志濠, 张冠军 2021 强激光与粒子束 **33** 065001]
- [14] Chen X, Li, C, Ke K 2017 *Chin. Sci. Bull.* **62** 2866
- [15] Wen X Q, Zhou Y B, Xue X D, Yang Y T 2021 *Phys. Plasmas* **28** 013507
- [16] Yang Y T, Wen X Q, Wang L R, Wang X 2022 *Phys. Plasmas* **29** 093501
- [17] Yin H, Song T, Peng X G, Zhang P, Yu R S, Chen Z, Cao X Z, Wang B Y 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 114101 (in Chinese) [尹昊, 宋通, 彭雄刚, 张鹏, 于润升, 陈喆, 曹兴忠, 王宝义 2023 物理学报 **72** 114101]
- [18] Zhao Z, Lu Y, Zhang Z H, Sui M L 2019 *Acta Phys. -Chim. Sin.* **35** 539 (in Chinese) [赵喆, 卢岳, 张振华, 隋曼龄 2019 物理化学学报 **35** 539]
- [19] Damascelli A, Hussain Z, Shen Z X 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 473
- [20] Zhao L, Liu G D, Zhou X J 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 017406 (in Chinese) [赵林, 刘国东, 周兴江 2021 物理学报 **70** 017406]
- [21] Bousis C, Emfietzoglou D, Hadjidakis P, Nikjoo H, Pathak A 2008 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B* **266** 1185
- [22] Dingfelder M, Ritchie R H, Turner J E, Friedland W, Paretzke H G, Hamm R N 2008 *Radiat. Res.* **169** 584
- [23] Bordage M C, Bordes J, Edel S, Terrissol M, Franceries X, Bardies M, Lampe N, Incerti S 2016 *Physica Med.* **32** 1833
- [24] Tan Z Y, Zhang L M, Wang J, Gao H X, 2012 *Trans. Chin. Electrotech. Soc.* **27** 1 (in Chinese) [谭震宇, 张黎明, 王晶, 高洪霞 2012 电工技术学报 **27** 1]
- [25] Uehara S, Nikjoo H, Goodhead D T 1992 *Phys. Med. Biol.* **37** 1841
- [26] Emfietzoglou D, Papamichael G, Androulidaki I, Karava K, Kostarelos K, Pathak A, Moscovitch M 2005 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **228** 341
- [27] Dingfelder M, Hantke D, Inokuti M, Paretzke H G 1998 *Radiat. Phys. Chem.* **53** 1
- [28] Fernandez-Varea J M, Mayol R, Liljequist D, Salvat F 1993 *J. Phys. Condens. Matter* **5** 3593
- [29] Vriens L 1966 *Phys. Rev.* **141** 88
- [30] Emfietzoglou D, Nikjoo H A 2007 *Radiat. Res.* **167** 110
- [31] Choi E, Chon K S, Yoon M G 2020 *Radiat. Eff. Defects Solids* **175** 11
- [32] Incerti S, Kyriakou I, Tran H N 2017 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **397** 45
- [33] Li L B 2021 *M. S. Thesis* (Xi'an: Xi'an Jiaotong University) (in Chinese) [李林波 2021 硕士学位论文 (西安: 西安交通大学)]
- [34] Wang D, Namihiro T 2020 *Plasma Sources Sci. Technol.* **29** 023001
- [35] Emfietzoglou D 2003 *Radiat. Phys. Chem.* **66** 373
- [36] Combecher D 1980 *Radiat. Res.* **84** 189

Electron transport characteristics in water under electrostrictive effect^{*}

Li Yuan[†] Li Chun-Peng Li Lin-Bo Yuan Lei
Wang Ya-Zhen Shi Ya-Xuan Zhang Guan-Jun

(School of Electrical Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

(Received 4 December 2023; revised manuscript received 28 December 2023)

Abstract

The transport characteristics of electrons are crucial for the initiation and development of pulse discharge in water. In this work, we develop a physical model of electron transport that considers elastic and inelastic collision cross sections. The purpose of this study is to investigate frequency variations of elastic collisions, ionization and excitation collisions with different initial electron energy values, and to explore the characteristic of electron energy loss in water. The Monte Carlo method is employed to track structure characteristics of electron transmission and scattering under varying energy values. The results show that the electrons of lower energy (~ 20 eV) are significantly impacted by the water molecule scattering, hence their transmission capacities are weakened. When the incident energy of electron reaches 100 eV, the scattering deviation distance is roughly equivalent to the transmission depth, about 6–8 nm, and the maximum deviation angle $\theta_{\text{shift}} \sim 60^\circ$. When the electron incident energy is in a range of 10–1000 eV, the number of elastic collisions is much greater than the number of excitation and ionization collisions, and the number of ionization collisions and excitation collisions increases significantly with the increase of electron energy. The higher the electron incident energy, the greater the energy loss is. However, the energy loss decreases sharply with the extension of penetration distance. For the ionization collision, the average ionization energy loss, W , decreases rapidly with the increase of electron energy, and ultimately maintains at a level of 20–30 eV, which is consistent with the experimental results reported.

Keywords: electrostrictive effect, electron transport in water, transmission and scattering, collision type

PACS: 47.40.-x, 52.27.Ny, 51.50.+v, 52.20.Fs

DOI: [10.7498/aps.73.20231893](https://doi.org/10.7498/aps.73.20231893)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52041702).

[†] Corresponding author. E-mail: liyuan8490@xjtu.edu.cn



电致伸缩效应下水中电子输运特性

李元 李春鹏 李林波 袁磊 王亚桢 石亚轩 张冠军

Electron transport characteristics in water under electrostrictive effect

Li Yuan Li Chun-Peng Li Lin-Bo Yuan Lei Wang Ya-Zhen Shi Ya-Xuan Zhang Guan-Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 114701 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20231893

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231893>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于电致伸缩效应的水中纳秒脉冲放电起始机制

Initiation of nanosecond-pulsed discharge in water: Electrostriction effect

物理学报. 2021, 70(2): 024701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201048>

BaTiO₃基无铅陶瓷大电致伸缩系数

Large electrostrictive coefficients of BaTiO₃-based lead-free ceramics

物理学报. 2022, 71(16): 167701 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220451>

表面等离极化激元的散射及波前调控

Scatterings and wavefront manipulations of surface plasmon polaritons

物理学报. 2020, 69(15): 157804 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200614>

电子散射和能量分配方式对电子输运系数的影响

Influence of electron scattering and energy partition method on electron transport coefficient

物理学报. 2021, 70(13): 135101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202021>

非厄米Su-Schrieffer-Heeger链边缘态和趋肤效应依赖的电子输运特性

Edge states and skin effect dependent electron transport properties of non-Hermitian Su-Schrieffer-Heeger chain

物理学报. 2023, 72(24): 247301 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231286>

缺陷对铁单质薄膜磁致伸缩与磁矩演化的影响

Effect of defects on magnetostriction and magnetic moment evolution of iron thin films

物理学报. 2022, 71(1): 017502 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211177>