

电子束产生大尺度等离子体过程的数值模拟研究^{*}

李 弘 苏 铁 欧阳亮 王慧慧 白小燕 陈志鹏 刘万东[†]

(中国科学院基础等离子体物理重点实验室, 中国科学技术大学近代物理系, 合肥 230026)

(2005 年 9 月 18 日收到, 2005 年 11 月 14 日收到修改稿)

建立了一个四组分一维混合模型, 对电子束注入大气产生大尺度等离子体的过程进行了数值模拟. 结果表明了能量为 140keV、流强为 50mA/cm² 的注入电子束, 可以产生线度为 0.5m, 密度为 10¹²cm⁻³ 量级的大气环境下等离子体. 电子束所伴随的空间电荷效应由于等离子体的产生会很快消失, 不影响后续的等离子体产生过程. 电子束注入流强主要影响产生等离子体的密度, 而电子束能量则同时影响其空间线度和密度.

关键词: 电子束, 碰撞, 电离

PACC: 5265, 5240M, 5250

1. 引 言

高能电子束注入到背景中性气体中, 约有 30% 到 50% 的能量用于电离产生等离子体, 是一种非常有效的电离源^[1]. 电子束与气体的相互作用是一个相当复杂的问题, 包括了气体分子的激发与电离、自感应电磁场效应、电荷中和、电荷的积累与释放等过程. 为了有效地描述这些过程, 近似地给出定性定量分析, 我们建立了一个一维多组分的混合流体数值模拟程序. 数值模型中, 计及了电离、激发、复合、附着、脱附等多种反应过程, 对于注入的高能束电子成分采用玻尔兹曼动力学方程描述, 对于低能粒子(包括低能热电子、正负离子)则采用了流体描述.

关于电子束与气体相互作用的问题, 有过相当多的理论和实验工作, 最近普林斯顿大学针对于高压脉冲注入的情况也做过了相应的模拟, 其计算的注入束能量较低, 模拟过程相当细致^[1,2]. 对于背景

气压为大气压的条件下, 电子束注入能量较低时, 电子束所产生等离子体的空间范围被限制在很小的区域中. 在大气压情况下要产生较大尺度的等离子体, 必须提高入射电子束的能量, 因而其数值计算量也相应提高了很多. 本文在其模型的基础上, 做了一些近似处理, 优化了计算方法, 针对较高入射束能量的情况下进行了数值研究, 重点研究考察了等离子体分布与注入参数的关联, 以及电子束注入所必然出现的空间电荷效应以及可能引发的问题.

2. 基本模型

2.1. 高能电子束的注入

对于注入到气体介质中的电子束, 若考虑电子能量分布函数的演化方程, Boltzmann 动力学方程可以写成下面形式^[2]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_1}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_1}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left(-eE\Gamma_1 - \sum_s \frac{2m}{M_s} N_s \sigma_{s,m} \epsilon \Gamma_1 \right) &= \sum_s N_s \sigma_{s,c} \xi_s (\Gamma_2 - \Gamma_1) + Q(\Gamma_1), \\ \frac{\partial n_2}{\partial t} - \frac{\partial \Gamma_2}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left(eE\Gamma_2 - \sum_s \frac{2m}{M_s} N_s \sigma_{s,m} \epsilon \Gamma_2 \right) &= \sum_s N_s \sigma_{s,c} \xi_s (\Gamma_1 - \Gamma_2) + Q(\Gamma_2), \end{aligned} \quad (1)$$

^{*} 国家自然科学基金(No. 10275065, 10333030)资助的课题.

[†] E-mail: wdliau@ustc.edu.cn

这里 $I(x, \epsilon, t) = n(\epsilon, x, t) v$ 为电子通量的能谱密度, 下标 1, 2 分别表示向前、向后的两组不同方向运动的电子, v 为束电子的速度; $n(\epsilon, x, t)$ 为束电子数密度的能量分布函数; E 为电场强度; 其中 $\sum_s \frac{2m}{M_s} N_s \sigma_{s, m} \epsilon \Gamma_1$ 项表示电子与各种背景分子、原子的弹性碰撞过程中能量损失率, 事实上, 这一项相对于非弹性碰撞过程来说, 通常是可以忽略的, 只有在电子与质量较轻的单原子分子碰撞时才可能显得重要. 方程右边是碰撞项, $\sum_s N_s \sigma_{s, e} \xi_s (\Gamma_2 - \Gamma_1)$ 项对应着由于弹性碰撞导致背散射过程的贡献, $Q(\Gamma)$ 为非弹性碰撞项, 包括碰撞激发和碰撞电离过程, 可以写成如下形式:

$$Q(\Gamma) = - \sum_{n, k} N_k I(x, \epsilon) \sigma_k^n(\epsilon) + \sum_{n, k} N_k I(x, \epsilon + I_k^n) \sigma_k^n(\epsilon + I_k^n), \quad (2)$$

其中下标 n 在求和中既表示不同的激发态, 也表示电离态, 若单独表示电离态时, 为明确起见则用下标 i ; k 下标对应于不同气体组分; I_k^n 为 k 组分 n 态的激发或电离能, σ_k^n 为相应的反应截面, 其数据可由文献 [3—7] 获取.

由于束电子注入过程一定和等离子体产生过程相耦合, 加上此方程同时含有时间、空间、能量三个自由度, 完整的计算过程相当复杂, 为了减少计算量, 我们必须做一定的简化. 首先, 可以取“向前近似”, 忽略向后运动即发生背散射的一组电子, 只保留向前的一组, 这样方程组 (1) 就可简化成单一的方程. 其次, 为了解决电子束注入与等离子体的产生这两个过程之间相互耦合的困难, 考虑到两组电子运动过程在空间和时间尺度的差异, 可以取作“准稳态”的近似, 这样方程就减少了一个自由度. 至于随时间变化的电场, 我们仍然保留, 只是在计算时它只作为计算结果的一个修正. 对于高能电子束在气体中的传播电离气体的过程, 相对于弹性碰撞而言我们更关心直接有能量损失非弹性碰撞过程, 尤其是电离过程. 研究表明, 当电子束的能量 $\epsilon > 1\text{keV}$ 时, 非弹性碰撞截面就远远超过动量输运截面, 弹性碰撞引起的电子束能量损失的贡献可以忽略. 因此, 综合以上的讨论, 方程组 (1) 最终可以被简化为下面的形式:

$$\frac{\partial I(x, \epsilon)}{\partial x} - eE \frac{\partial I(x, \epsilon)}{\partial \epsilon} = - \sum_{n, k} N_k I(x, \epsilon) \sigma_k^n(\epsilon)$$

$$+ \sum_{n, k} N_k I(x, \epsilon + I_k^n) \sigma_k^n(\epsilon + I_k^n). \quad (3)$$

方程 (3) 是关于束电子通量谱密度的方程, 获得束电子通量谱后, 通过不同的积分可以得到其它宏观参数. 空间任意一点的束电子数密度、束电子总通量、束电子空间电离率分别为

$$n_b(x) = \int_{\min I_k}^{\infty} \frac{I(x, \epsilon) d\epsilon}{\sqrt{2\epsilon/m}},$$

$$I(x) = \int_{\min I_k}^{\infty} I(x, \epsilon) d\epsilon, \quad (4)$$

$$q(x) = \sum_k N_k \int_{I_k}^{\infty} I(x, \epsilon) \sigma_k^i(\epsilon) d\epsilon.$$

在电子碰撞电离过程中, 束电子能量通过碰撞电离、激发过程逐步损失其能量, 当能量减少到一定阈值时, 它将失去其电离、激发的功能, 成为与等离子体电子无明显差别的热电子. 描述高能束电子经过多次碰撞成为热电子的参数被称之为热化率, 可由下列等式表示:

$$\frac{\delta n_b}{\delta t} = \frac{d\Gamma_b}{dx} \approx \frac{\partial \Gamma}{\partial x}. \quad (5)$$

在电子束与气体的相互作用过程中有一个重要参数, 称之为“电离成本”, 它描述的是束电子与气体分子碰撞, 平均产生一对离子-电子所需要的能量. 当束电子速度足够高时, 电离成本与束电子的能量基本无关, 只与气体组分相关. 对于空气、氧气和氮气组分, 这个数值分别为 34eV 、 30.9eV 和 35eV ^[8]. 束电子速度降低时, 电离成本会缓慢上升. 如果不对激发、电离过程做详细的计算, 可以利用这个参数作为非弹性碰撞项截面的估算. 上面的积分中的参数 $\min I_k$ 是指激发、电离能的最小值, 在实际计算中, 我们把这个值取做空气的电离成本 34eV . 当束电子能量不足以直接电离气体时, 对我们所考虑的产生等离子体过程的贡献可以忽略, 可以将其归并到普通的热电子之中.

方程 (3) 的初始条件是初始电子通量谱分布, 一般可取为 δ 函数分布或者高斯分布, 通过求解方程可获得通量谱的空间分布, 进而由上面的各个公式可求得与束电子有关的其他参数.

2.2. 等离子体的产生与演化

我们采用流体的连续性方程描述束电子产生等离子体的过程. 电子、正离子和负离子的连续性方程分别为

$$\begin{aligned} & \frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_e}{\partial x} \\ &= q + \alpha | \Gamma_e | + k_d N n_- - \nu_a n_e \\ & \quad - \beta n_e n_+ - \frac{\delta n_b}{\delta t}, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial n_+}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_+}{\partial x} \\ &= q + \alpha | \Gamma_e | - \beta_{ii} n_- n_+ - \beta n_e n_+, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial n_-}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_-}{\partial x} \\ &= -k_d N n_- + \nu_a n_e - \beta_{ii} n_- n_+, \end{aligned} \quad (8)$$

其中, 电子、正离子和负离子的通量流由迁移、扩散等过程决定,

$$\begin{aligned} \Gamma_\alpha &= -\mu_\alpha n_\alpha E - D_\alpha \frac{\partial n_\alpha}{\partial x}, \\ (\alpha &= e, +, -). \end{aligned} \quad (9)$$

将方程组(6—9)与描述电势分布的 Poisson 方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} &= -\frac{e}{\epsilon_0} (n_+ - n_e - n_- - n_b), \\ E &= -\frac{\partial \varphi}{\partial x} \end{aligned} \quad (10)$$

进行耦合 就构成了描述电子、正离子和负离子密度以

及空间电势(n_e, n_+, n_-, φ)的完备方程组. 其中, $\mu_{e,+,-}$ 为迁移率, $D_{e,+,-}$ 为扩散系数, α 为汤森第一电离系数, k_d 是碰撞脱附系数, 它描述分子与负离子碰撞使电子“脱附”的过程, 从方程中可以看出, 在无外源维持等离子体的情形下, 它是唯一的电子产生源, 因此它对于等离子体的寿命具有很大的影响. ν_a 是电子与氧和氮分子的三体及二体附着复合系数; β 是电子-离子复合系数, β_{ii} 则是离子-离子复合系数.

方程组的初始条件取为: 区域中没有初始等离子体, 也不存在外加电场. 等离子体由电子束产生, 电场也由电子束及所产生的等离子体自洽产生. 在边界上, 我们取密度为连续的边界条件, 空间电势选择电子束出口处和远端均接地的边界条件.

3. 数值计算结果及分析

3.1. 束电子慢化及电离过程

在大多数计算中, 我们选取了入射电子束能量为 140keV, 背景气体为干燥的大气, 气压为一个标准大气压, 温度为室温(300K).

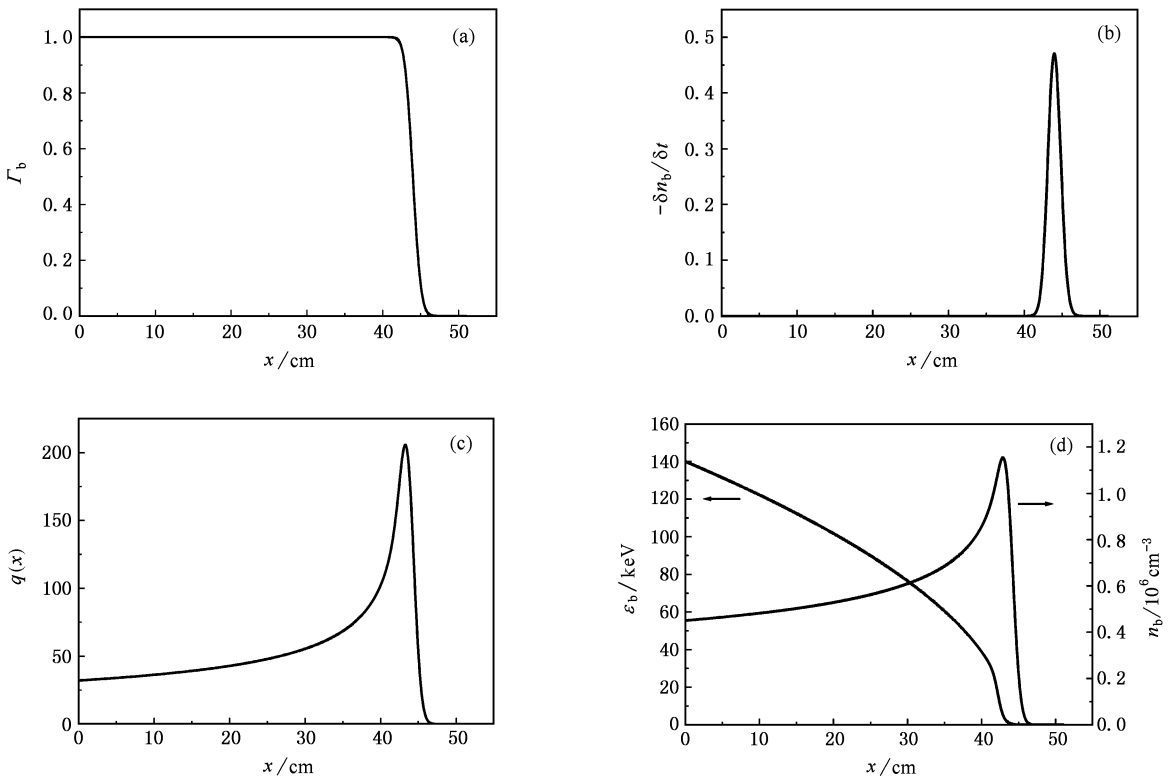


图1 能量为 140keV 电子束入射一标准大气压空气中 (a) 电子束通量分布 (b) 电子束热化率分布 (c) 电离率分布 (d) 电子束能量和密度空间分布

图 1 给出了电子束入射到标准大气压的空气背景中,涉及电离过程的几个主要物理量空间分布的数值模拟结果.电子束初始能量谱为高斯分布,中心能量为 140keV,能谱宽度 1keV.其中图(a—c)描述了束电子通量、归一化的束电子热化率和电离率的空间分布,(d)则是束电子的数密度和平均能量的空间变化曲线.

可以看出,能量为 140keV 的束电子在一个大气压的空气中,其射程大约为 46cm,这里射程定义为束电子通量减少到初始通量 1% 所经历的距离.在此射程内,束电子的能量逐渐减少,并且随着距离增加能量降低速率越来越大,最后束电子转化成热电子.相对于传输路径,束电子的热化区域较窄,约为 5cm.在束电子的热化区域内,束电子的电离率同样达到峰值,这与电子碰撞电离和激发截面的分布峰值在低能区(100eV 左右)是一致的.

3.2. 等离子体密度分布及演化

应用束电子计算所得到的电离率、热化率等结果,代入等离子体流体演化方程,可以得到等离子体的时间、空间演化的规律.

设电子束从初始时刻起,持续注入背景大气中,

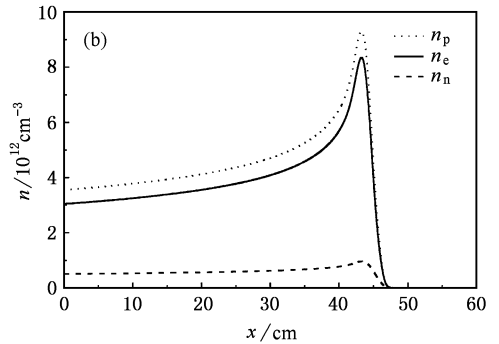
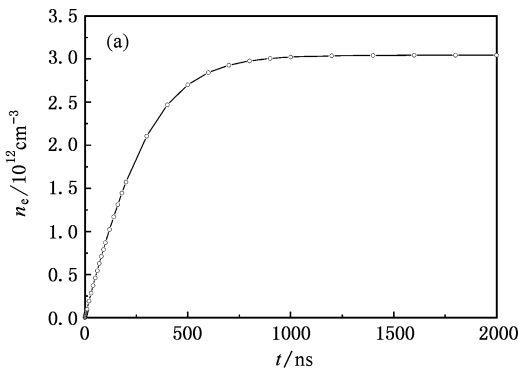


图 2 (a)持续注入下, $x=0$ 处产生等离子体电子密度随时间演化曲线(b) $t=2\mu\text{s}$ 时,电子、正离子以及负离子密度的空间分布

当系统达到稳态后停止束的注入,等离子体中电子密度将随指数规律衰减,其时间常数即为等效电子寿命.在上述参数下,我们得到等效的电子寿命为 350ns.

3.3. 空间电荷效应及电子回流效应

在背景气体压强为大气压的情况下,电子的扩散系数、迁移率在数值上都相对较小,迁移和扩散过程所引起的电子的输运相对于高能电子束的注入过程要缓慢得多.随着电子束的注入,必然会在空间

则在空间会不断电离产生等离子体,等离子体密度会持续增大,最后和各种损失过程平衡得到稳定的分布.等离子体电子密度的初始演化过程如图 2(a)所示,其注入电子束的流强为 $50\text{mA}/\text{cm}^2$.当持续注入时间足够大时,所产生的电子密度基本不再发生变化,可以达到 $3 \times 10^{12}\text{cm}^{-3}$,若按指数增长曲线进行,其特征时间常数为 270ns.图 2(b)给出了在持续注入 $2\mu\text{s}$ 时,系统达到稳定情况下,等离子体中的电子密度、正离子密度以及负离子密度的空间分布.可以看出,三种离子中,正离子密度最大,电子次之,负离子最小,加上束电子成分,整体上满足“准中性”条件.三种离子的空间分布的形状基本是一致的,从注入端开始,密度逐渐上升,在接近注入电子束射程终点位置达到峰值后迅速降低.这种分布与图 1 中所给出的电离率以及束电子密度的分布相似,这说明了电子束产生的等离子体电子和离子基本保持在原地,扩散效应作用不明显.由于等离子体各种电荷的数密度分布与空间电离率的分布相近,因此根据束电子方程求解所得空间电离率分布,就可以近似地给出产生等离子体的空间范围,甚至还可以粗略地估计产生等离子体的密度.能量为 140keV 的束电子射程约为 46cm,则所产生的等离子体区域同样为 46cm.

造成负电荷的积累产生空间电荷效应,从而在电子注入空间产生比较高负电势,对后续的电子束的注入产生影响,当局部电场强度很大时,甚至会产生放电击穿现象.

首先考察空间电势的演化及分布情况.当电子束开始注入时,空间电势迅速变负,在电子束注入的初始几个纳秒时负电位达到极值,然后负电位慢慢降低至很小,如图 3(a)所示.不同位置处电势达到峰值的时间略有变化,这里取接近热电子密度分布最大值的位置 $x=40\text{cm}$ 处的电势.图 3(b)给出了空

间电荷效应最大时,电势及电场强度的空间分布.为了比较,我们把电子密度的分布也加入了图中,因为它基本反映了所产生等离子体的各种电荷分布情况.很明显,整个空间的电势均为负值,其极值位置在电子密度最大值位置基本重合.在无电荷分布的区域,电势呈直线上升,保持电场强度不变.

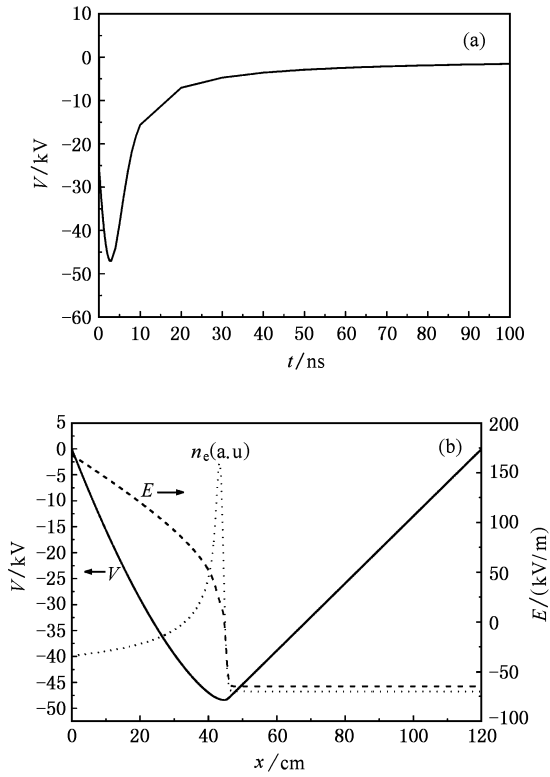


图 3 空间电荷效应的分析 (a) $x = 40\text{cm}$ 处空间电势演化 (b) 空间电荷效应最大时电势、电场强度的空间分布

从图中可以看到,最大的空间电势达 48keV ,它们对注入束电子的影响似乎是不可忽略的.为了考察其影响程度,我们把这里获得电场强度结果带入到束电子的方程重新求解,并作反复迭代.结果表明,自洽地考虑空间电势后,电势分布的趋势基本一致,但产生等离子体的空间尺度有所减小,同时稳定的空间电势的极值也相应减小.注意到以上的分析是空间电势最大时的情况,从图 3(a)可以看出,空间电势达到极值后,随着等离子体密度增加而降低,因此空间电势的影响也逐渐减弱,直至可以忽略.事实上,我们对 200ns 时刻电场情况进行了计算,其结果表明空间电势的影响完全可以忽略.因此,考虑空间电势的自洽变化会影响演化过程,但对演化后稳定的结果所产生的影响是很小的.

空间电势的降低必然伴随着所积累起来的空

间电荷的释放,即产生与注入电流方向相反的电流.通过分析等离子体中电荷的通量就可以得到由电荷输运而形成的电流.图 4(a)给出了准稳态下热电子输运电流的空间分布,很显然,热电子输运形成的电流与注入的束电流方向相反,大小相等 ($50\text{mA}/\text{cm}^2$).这种热电子电流我们称之为“回流”,回流的存在使得电子束注入的空间电荷效应变得不重要,这一结论对于无收集电极的电子束注入的实际应用具有重要的指导意义.

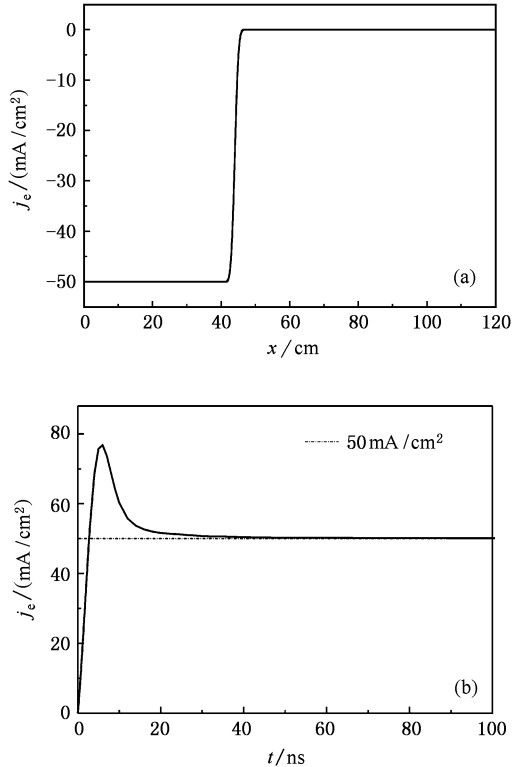


图 4 (a) 准稳态下热电子输运电流空间分布 (b) $x = 0$ 处热电子输运电流随时间的演化

图 4(b)给出了 $x = 0$ 处回流随时间的演化规律,其中虚线表示注入束电子的流强.从图中曲线的变化,可以给出空间电荷演化的三个过程:1)随着电子束的注入,一方面空间电荷开始逐渐积累,导致空间电场的增加,另一方面由于等离子体的产生,热电子的密度增大,等离子体的电导率增大,电场和电导率同时增大导致热电子的回流从零开始迅速增大.当回流与电子束的入射流第一次平衡时,空间电荷积累达到最大,整个等离子体空间呈现负电性,空间电荷积累过程完成.2)电场开始减小,但由于等离子体密度继续增大,回流进一步增大,超过注入电子束流,因此空间积累的负电荷开始释放,导致空间电势

下降,电场继续减小,直到电场减小与热电子的增长的效应相平衡时,回流达到最大值.3)空间电荷继续释放,电场减小的效应超过了热电子的增长的效应,回流开始下降,直到与入射束流平衡,系统进入稳定状态.

正负离子同样会产生回流效应,但相对于热电子而言其迁移率很低,回流的效果很小,完全可以忽略.值得注意的是,在我们的模拟情况中,电荷的释放唯一的通道是 $x = 0$ 位置,因为只有这里才是电荷与外界直接联系接触的区域.但是,若注入电子束的射程接近于右边界时,无电荷的空间就会被限制成很小的区域,因此就会产生数值很大的电场,可能产生局部的放电击穿.出现这种情况只能使问题更加复杂,我们在实验中应该尽量避免.

3.4. 不同参数对结果的影响

1)注入能量对束电子注入及产生等离子体的影响.显然,不同能量的电子束产生的等离子体区域一定会有所差别,注入的能量越大,束电子的射程就越远,所产生等离子体的区域会增大.图 5 给出了不同注入能量下的空间电离率的分布曲线,可以看出,尽管提高入射束电子的能量可以加大等离子体产生的区域,但导致了束电子分布空间扩展,其空间电离率有所下降,必然导致所产生的等离子体密度下降,如图 6 所示.注意到密度下降的相对值远小于等离子体区域增加的相对值,因此尽管产生等离子体的密度有所降低,对于产生大区域的等离子体,依靠提高注入能量来实现是一个有效的手段.

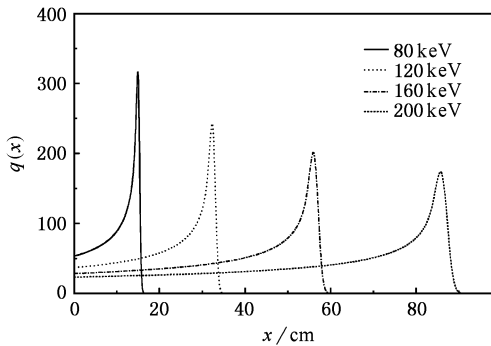


图 5 空间电离率随注入能量的变化

2)注入流强的影响.图 7 给出了不同注入流强所产生的等离子体电子密度在 $x = 0$ 处的时间演化规律.可以发现注入流强越大,产生等离子体的密度越高,但随着注入流强的增加,密度的增加幅度有所

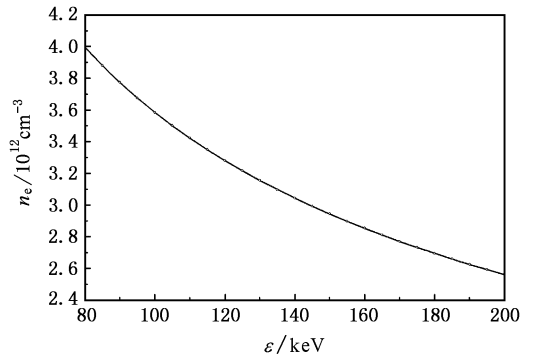


图 6 等离子体电子密度随注入能量的变化

减少.这是随着等离子体密度的增加,电荷间的复合将与等离子体密度的平方成正比,导致系统的电离效率降低.因此在一定的范围内增加注入流强是提高等离子体密度的重要手段,但在高密度的情况下其效率会有所下降.

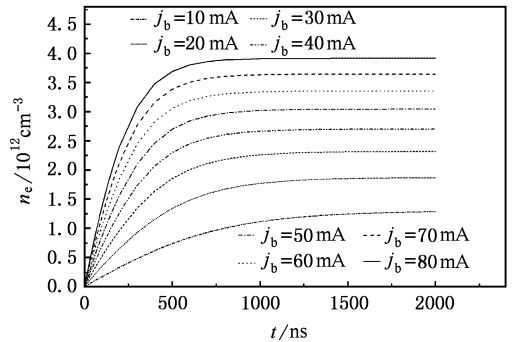


图 7 不同流强注入等离子体电子密度的演化

3)注入方式的影响.在平均功率不变的情况下,脉冲注入所产生的等离子体效率会大大提高.图 8 给出了相同注入流强 ($j_b = 50 \text{ mA/cm}^2$) 下,占比为 1:1 和 1:2 情况下周期脉冲注入的模拟结果.尽管在“空”的时间里,等离子体密度会迅速下降,但只要

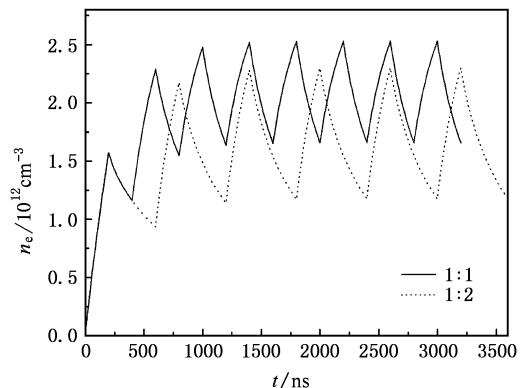


图 8 脉冲注入等离子体电子密度的演化

等离子体的密度还能保持足够高,就可以继续增加空闲时间,以获得高的能量利用效率.同时我们也可以看出,这种注入方式产生的等离子体随着时间的演化,也有个达到“准稳态”的过程,只是这里的“准稳”是密度在一定范围内的有规律连续变化的“稳态”.因此,这种注入方式产生的等离子体是密度在一定范围内波动的等离子体.

4. 结 论

我们建立了一个一维四组分的混合流体数值模

拟程序,对于电子束注入产生大尺度的等离子体的过程进行了模拟.结果表明了对流强为 $50\text{mA}/\text{cm}^2$ 的注入电子束,可以在大气环境下产生线度 0.5m ,密度 10^{12}cm^{-3} 量级的等离子体.电子束所伴随的空间电荷效应由于等离子体的产生会很快消失,不影响后续的等离子体产生过程.电子束所产生的等离子体受各种实验参数的影响,注入流强只影响产生等离子体的密度,而电子束能量等、背景气压、组分等则同时影响产生等离子体的空间尺度和密度.因此选择合适的参数,对于大尺度、高密度等离子体的产生具有很大的影响.

-
- [1] Macheret S O, Shneider M N, Miles R B 2001 *Phys. Plasmas* **8** 1518
- [2] Macheret S O, Shneider M N, Miles R B 2002 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **30** 1301
- [3] Electron-Impact Cross Sections for Ionization and Excitation (Http // www. NIST. gov)
- [4] Itikawa Y, Hayashi M, Ichimura A, Onda K, Sakimoto K, Takanayagi K, Nakamura M, Nishimura H, Takanayanagim T 1986 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **15** 985
- [5] Itikawa Y, Hayashi M, Ichimura A, Onda K, Sakimoto K, Takanayagi K, Hatano Y, Hayashi M, Nishimura H, Tsurubuchi S 1989 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **18** 22
- [6] Itikawa Y 1993“ Electron collisions with N, O, and O : What we do and do not know, ” ISAS Res. Note, p. 526.
- [7] Cartwright D C 1978 *J. Appl. Phys.* **49** 3855
- [8] Bychkov Yu I, Korolev Yu. D, Mesyats G A 1982 *Inzhetsionnaia Gazovaia Elektronika* (Nauka, Novosibirsk, 1982)

Numerical simulation of plasma of large-dimensions produced by injecting electron beam into air^{*}

Li Hong Su Tie Ouyang Liang Wang Hui-Hui Bai Xiao-Yan Chen Zhi-Peng Liu Wan-Dong[†]

(CAS Key Laboratory of Basic Plasma Physics and Department of Modern Physics , University of Science and Technology of China , Hefei 230026 , China)

(Received 18 September 2005 ; revised manuscript received 14 November 2005)

Abstract

A four-species 1-D hybrid numerical model was set up to simulate the process of formation of large-dimension plasma produced by injecting electron beams into air. It showed that plasma of the order of 0.5m in length and 10^{12} cm^{-3} in density can be produced by an electron beam with the energy of 140keV and flux of 50 mA/cm^2 . The effect of space charge associated with the beam on the beam propagation and related process vanishes soon after the plasma is produced. The beam flux is directly relevant to the plasma density, but the beam energy affects both the dimensions and the density of produced plasma.

Keywords : electron beam , collision , ionization

PACC : 5265 , 5240M , 5250

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10275065 , 10333030).

[†] E-mail : wdl Liu@ustc.edu.cn