

空心阴极类火花放电初始电离过程的 PIC/MCC 模拟

郑飞腾[†] 杨中海 金晓林

(电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

(2007 年 5 月 8 日收到, 2007 年 5 月 15 日收到修改稿)

采用粒子模拟与蒙特卡罗相结合(PIC/MCC)的方法,应用静电模型,编写了准三维的模拟程序.该程序能够较好地描述空心阴极类火花放电初始电离过程的演化步骤.通过研究电离过程的细节,可以认为该阶段电离过程是空心阴极效应和局部强电场共同作用的结果.从起始电离到空心阴极初始阶段,局部强电场在电离过程中起到了支配作用,随后空心阴极效应占据主导地位.

关键词: 粒子模拟, 蒙特卡罗, 空心阴极, 类火花放电

PACC: 5265, 5275, 5280

1. 引 言

空心阴极放电效应由于具有一些独特的电光学特性,能产生锐线光谱、大电流电子束、离子溅射作用强、高能电子束多等而被广泛地应用于光谱分析、真空镀膜、表面处理、气体激光器等领域.在整个空心阴极放电过程中,其初始阶段占有十分重要的地位,它直接关系到放电电流的稳定性、脉宽、幅值和开关时间等重要参数.研究该阶段电离过程的细节,对于探索放电的物理本质,改进放电的物理特性有非常重要的意义.但是由于该阶段时间极短,物理参量不易捕捉,使得深入研究放电过程不易.目前对虚阳极从形成到扩展至阴极的电离过程还不是很清楚,并且阴阳极间隙中的物理过程在电离增长中的作用也一直没有统一的结论^[1].

现有的研究多采用实验方法^[1-7],总结出空心阴极类火花放电基本过程的电离特性.但是由于实验中诊断上的困难,只能测量出其电流、电势和光谱等信号,难以给出粒子速度、轨迹等方面的微观信息.

Ioannis 等人^[8]、Donko 等人^[9]、祝大军等人^[10]、赖建军等人^[11]采用流体模型研究过空心阴极放电的电离特性,但没有给出放电演化的细节过程.Boeuf 等人^[12]采用混合模型,用蒙特卡罗方法表述电离源,连续性方程结合泊松方程表述电子和离子

的输运过程.该模型采用局部场近似,即电子、离子速度与 α 系数仅是局部场 $E(r, t) \rho$ 的函数.但是类火花放电是低气压放电,在低压放电中,粒子分布函数会极大地偏离热平衡,不再满足所谓的局部场近似条件,所以应用流体动力学描述空心阴极类火花初始放电过程不是太合适.

为深入研究空心阴极内的类火花放电的初始过程,探究其电离本质,有必要获得大量微观粒子的全面信息,包括其能量、密度、运动轨迹等.因此,采用粒子模型的方法更合适.姚细林等人^[13]采用粒子模型结合蒙特卡罗(PIC/MCC)的方法模拟了微空心阴极放电特性.但一方面其电场分布采用近似模型,得到的只是近似解;另一方面他仍然只给出了稳态结果,并未研究放电的演化细节.

本文采用准三维 PIC/MCC 方法,应用静电模型,以带电粒子和电场的相互作用和粒子间的碰撞为主体,详细描述了空心阴极类火花放电初始过程的演化步骤,并初步探讨了该过程中的一些本质机理.

2. PIC/MCC 物理模型和模拟流程

2.1. 物理模型

物理模型如图 1 所示,其主要物理化学过程见文献[14].最右边的阳极产生轴向递减的静电场,电

[†] E-mail: zhengfeiteng@tom.com

子从静电场中获得能量,与中性粒子碰撞,当电子的能量超过中性粒子激发或电离阈值,碰撞将使中性粒子激发或电离,逐渐生成等离子体。

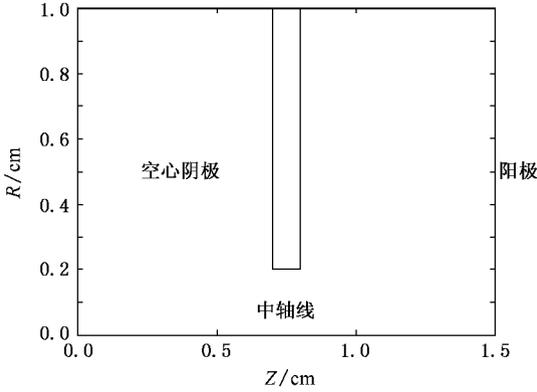


图1 类火花放电模型

2.2. 模拟流程

采用 PIC/MCC 的方法,这种方法兼顾了 PIC 处理集体相互作用和 MCC 处理粒子碰撞的优势。模拟流程如图 2 所示。

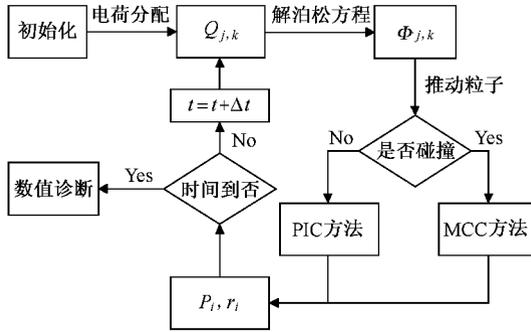


图2 PIC/MCC 模拟流程图

2.2.1. 初始化

使每一个被跟踪计算的带电粒子都具有初始位置、初始能量、初始运动方向。在本系统中,初始位置和初始运动方向随机分布,初始能量由麦克斯韦分布取样。

2.2.2. 电荷分配

由带电粒子的位置,将有限大小粒子按通常情况取球形分布(均匀分布)在网格点上。

2.2.3. 求解泊松方程

将圆柱坐标系中的泊松方程(1)式差分得(2)式和(3)式,再由 2.2.2 中求出的网格点上的电荷,从(2)式和(3)式求得空间网格点上的电势分布:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = -\frac{\rho}{\epsilon}, \quad (1)$$

在中轴线上($j=0$ 处),有

$$\phi_{0,k} = \left[\frac{4Q_{0,k}}{\pi \Delta r^2 \Delta z \epsilon} + \frac{4\phi_{1,k}}{\Delta r^2} + \frac{1}{\Delta z^2} (\phi_{0,k+1} + \phi_{0,k-1}) \right] / \left(\frac{4}{\Delta r^2} + \frac{2}{\Delta z^2} \right), \quad (2)$$

$j > 0$ 处,有

$$\phi_{j,k} = \left[\frac{Q_{j,k}}{\pi (\Delta r^2)_j \Delta z \epsilon} + \frac{\chi_{j+0.5} \phi_{j+1,k} + \chi_{j-0.5} \phi_{j-1,k}}{2j \Delta r^2} + \frac{1}{\Delta z^2} (\phi_{j,k+1} + \phi_{j,k-1}) \right] / \left(\frac{2}{\Delta r^2} + \frac{2}{\Delta z^2} \right) \quad (3)$$

2.2.4. 推进粒子运动

应用 PIC 方法描述带电粒子与静电场的相互作用;MCC 方法描述粒子间的碰撞。

每一个时间步长 Δt 内带电粒子发生碰撞的概率为

$$P_c = 1 - \exp[-N\sigma(\epsilon)v\Delta t], \quad (4)$$

其中 N 为中性粒子的密度; ϵ , v 和 σ_i 分别为带电粒子的能量、速率和总碰撞截面。

考虑电子与中性粒子的弹性、激发、电离碰撞;离子与中性粒子的弹性、电荷交换碰撞。其中所采用的碰撞截面均依赖于带电粒子的能量而变化^[15-17]。

产生一个 $[0, 1]$ 均匀分布的随机数 R_1 与 P_c 比较,如果 $R_1 \leq P_c$, 则粒子发生碰撞,由 MCC 法处理;如果 $R_1 > P_c$, 则粒子不发生碰撞,由 PIC 法处理。

1) MCC 部分

发生何种碰撞由分概率来确定。电子的分概率为 $\sigma_{\text{elastic } e}/\sigma_{t,e}$, $\sigma_{\text{excitation } e}/\sigma_{t,e}$, $\sigma_{\text{ionization } e}/\sigma_{t,e}$; 离子的分概率为 $\sigma_{\text{elastic } i}/\sigma_{t,i}$, $\sigma_{\text{exchange } i}/\sigma_{t,i}$ 。碰撞后粒子的新状态依具体碰撞类型决定^[18]。

2) PIC 部分

如果不碰撞,利用 PIC 方法来更新粒子的能量和速度方向。首先通过线性插值法求得带电粒子在其所在位置处的场,然后利用下式更新粒子的动量。

$$\mathbf{P}_i^{n+1} = \mathbf{P}_i^n + q_i^{n+1/2} \mathbf{E}_i^{n+1/2} \Delta t, \quad (5)$$

最后由下式更新带电粒子的位置。

$$\mathbf{r}_i^{n+3/2} = \mathbf{r}_i^{n+1/2} + \Delta t \mathbf{P}_i^{n+1} / m_i^{n+1}, \quad (6)$$

其中 m_i 是粒子的相对论质量。

2.2.5. 计算是否结束判断

比较该时间步长计算前后的电磁场分布,如果场满足收敛条件,则计算结束,进行数值诊断;如果

不满足收敛条件,重复计算 2.2.2—2.2.5.

3. 模拟结果与讨论

空心阴极的尺寸已在图 1 中给出,其内径 2 cm,深 0.7 cm,小孔直径 0.4 cm,隔板厚 0.1 cm. 阳极电

压 2000 V,距阴极 0.7 cm. 阴极接地,工作气体为氩气,气压 66.66 Pa. 假定空心阴极腔中初始时刻均匀分布有 $1.0 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$ 的电子和离子,离子为 Ar^+ ,阴阳极之间没有初始分布的电子和离子. 模拟结果表明,类火花放电电离过程大致可分为五个阶段,图 3 是这五个阶段的电势等位线图:

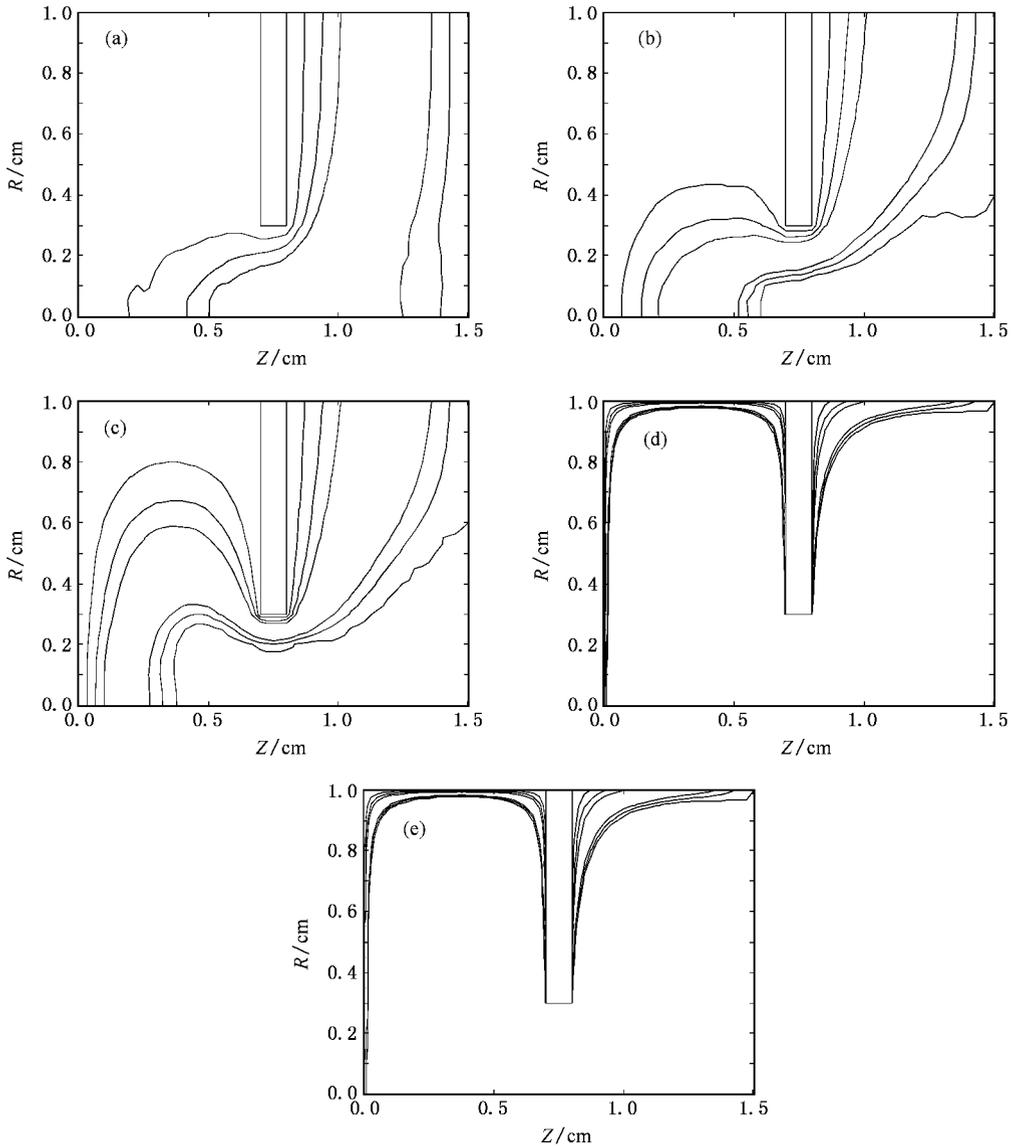


图 3 电势等位线图. 相邻的两条等位线代表 200 V (a) $t = 0.3 \text{ ns}$ (汤生放电) (b) $t = 4.2 \text{ ns}$ (虚阳极在阴阳极间隙中扩展) (c) $t = 6.6 \text{ ns}$ (空心阴极效应初始阶段) (d) $t = 24.4 \text{ ns}$ (虚阳极充满整个空心阴极内部) (e) $t = 24.6 \text{ ns}$ (阴极场致电子发射引发主放电)

3.1. 起始电离至虚阳极形成

在起始阶段,虚阳极还未形成. 由于电子和离子

的浓度都还很小,所以局部空间电荷对电场影响很小. 此时粒子间的作用是由外加电场主导的, α 电离倍增系数主要由外加电场决定. 由图 4(a)可知,此时阴阳极间的电场几乎是匀强电场.

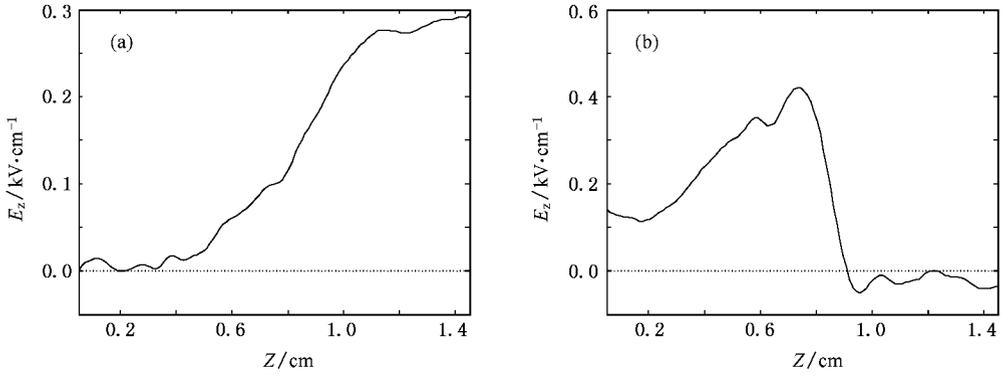


图 4 轴向电场沿中轴线分布图 (a) $t = 0.3 \text{ ns}$; (b) $t = 3.3 \text{ ns}$

3.2. 虚阳极在阴阳极间隙中的扩展

3.2.1. 虚阳极形成

观察此时的电子、离子相空间图发现,空心阴极内的电子经电场作用,从阴极孔飞向阳极,在阴阳极间隙中不断发生电离倍增,由此形成的电子崩向阳极一侧推进,位于前面的电子行进速度非常快(本模型的计算结果是 10^6 m/s 数量级),而电离产生的离子较重,基本处于静止状态.电子接触到阳极后被吸收,正离子滞留下来,使靠近阴极一侧的电场增强,靠近阳极一侧的电场减弱,直至变为负场,如图4(b)所示.这样,电子在负场作用下开始减速并停滞下来,与离子一同形成一与阳极等电势的等离子区,称为虚阳极.这个结果与 Lucas 模型^[19]是一致的.

3.2.2. 等离子体在阴阳极间隙中的扩展

阴阳极间隙中电子与中性粒子的碰撞,不断产生大量新的电子和离子.新产生的正离子扩展了负场的区域,而新产生的电子进入负场后又大部滞留下来.这样,由于电离碰撞提供了大量的电子和离子,使得虚阳极尖端不断向阴极扩展.

由图 5 所示,虚阳极靠近阴极时,移动速度减慢,这与文献 [1, 19] 中实验观察到的现象一致.这是因为随着虚阳极朝阴极不断运动,变相减小了阴阳极间的距离,也就减小了电离后新电子从外加电场获得能量的机会,于是新产生的电子很难引发下一次碰撞电离,电离倍增效应也就减弱了.

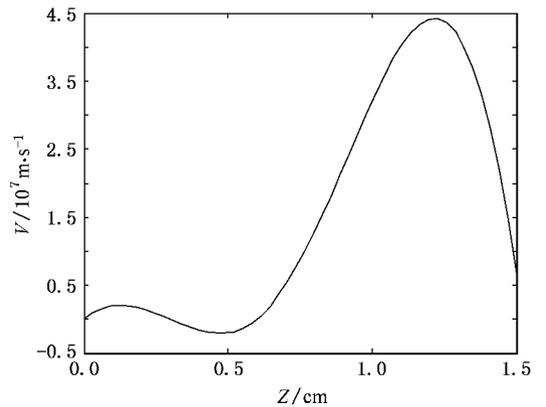


图 5 $t = 3 \text{ ns}$ 时虚阳极移动速度随位置变化图

可以观察到,主放电将在一到两个电子渡越时间内发生,而这段时间内离子几乎不动,这与文献

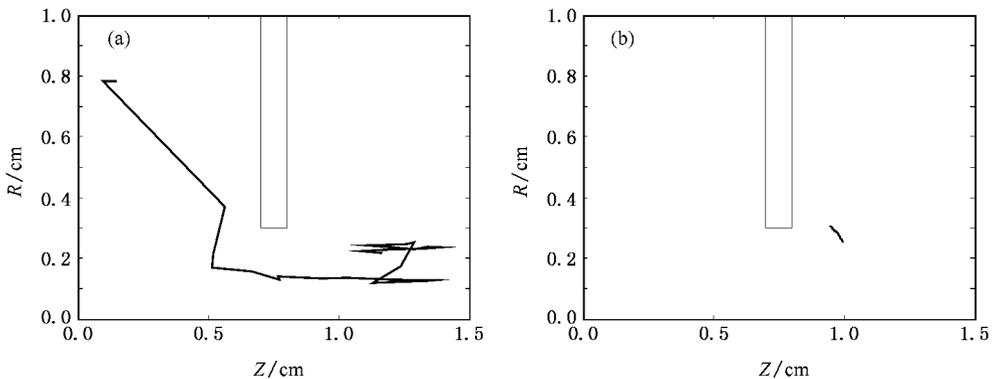
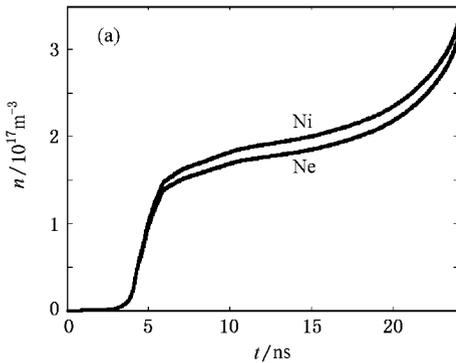


图 6 具有代表性的粒子轨迹图 (a) 电子 (b) 离子

[1] 中实验观察到的放电时间一致. 但这一结论以前一直没有直接的证据. 粒子模拟的优势在于它可以跟踪单个粒子的运动. 本文随机选取了大量电子和离子, 跟踪了它们的运动轨迹, 证实了这一结论. 如图 6 所示, 这是一对具有代表性的电子和离子的运动轨迹.

3.3. 空心阴极效应初始阶段

由于空心阴极内部电场沿中轴线呈轴对称分布. 电子在轴线一侧经电场加速后, 必在另一侧被对称的电场减速. 于是电子沿轴线上上下下振动, 这种现象称为电子的摆动. 电子在摆动过程中与气体原子不断发生电离和激发碰撞, 由此引发剧烈的电离作用^[19].



由于空心阴极内强烈的电离作用, 随着虚阳极在空心阴极内部的扩展, 电离效率应该增加. 但是, 由图 7(a) 所示, 电离率(曲线切线的斜率)在这个阶段反而下降了. 这个现象在文献[15]中的实验里得到了验证. 分析认为, 此时的电离过程, 是空心阴极效应和局部强电场 α 电离倍增效应共同作用的结果. 一开始, 虽然空心阴极效应不强, 但是在鞘层内电离出的二次电子可以从鞘层中获得足够的能量(其内存在很大的电势差), 从而引发下一次电离碰撞. 随着鞘层收缩, 电子还来不及在鞘层内发生碰撞, 就进入虚阳极, 因此新产生的电子很难从鞘层获得能量, 以引发下一次碰撞. 所以电离率在这个阶段反而降低了.

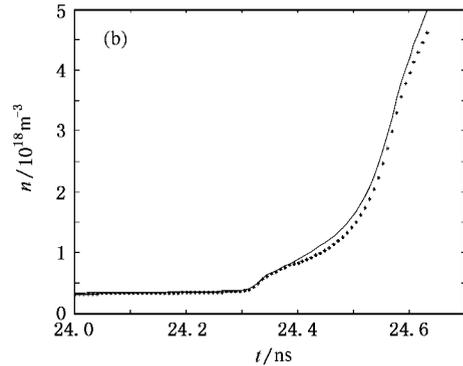


图 7 粒子数量随时间变化图

3.4. 虚阳极充满整个空心阴极内部

此时空心阴极效应占据主导地位, 电离率重新快速升高, 如图 7(b) 所示. 虚阳极则迅速扩展. 随后有一部分离子开始轰击阴极, 产生二次电子, 即通常所述 γ 作用. γ 作用进一步加速电离率, 24.3 ns 后电离率雪崩式增长, 24.6 ns 时已增至 $5 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$.

3.5. 阴极场致电子发射引发主放电

至 24.6 ns, 虚阳极充满整个空心阴极内部. 此时鞘层很薄, 在阴极表面形成很强的电场, 引起场致电子发射, 主放电发生. 此后的放电过程不在本文讨论范围之内.

4. 结 论

本文采用准三维 PIC/MCC 的方法, 应用静电模型, 模拟了空心阴极中类火花放电现象初始阶段的演化过程. 得出以下结论: 该阶段电离过程是空心阴极效应和局部强电场共同作用的结果. 从起始电离到空心阴极初始阶段, 局部强电场在电离过程中起到了支配作用. 随后空心阴极效应占据主导地位.

本文采用的阴极二次电子发射模型是简化模型, 而且没有考虑热电离, 场致电离与光电离现象, 它得到的结果不是完全准确的. 但它可以完整地给出类火花放电初始各个阶段电离增长的基本特性. 我们将在进一步工作中完善二次电子发射模型, 并添加光电离等模块.

- [1] Favre M , Choi P , Chuaqui H , Kaufman Y , Moreno J , Wyndham E , Zambra M 1995 *IEEE Trans . Plasma Sci .* **23** 212
- [2] Zambra M , Favre M , Moreno J , Chuaqui H , Wyndham E , Choi P 1999 *IEEE Trans . Plasma Sci .* **27** 746
- [3] Choi P , Chuaqui H , Favre M , Colas V 1995 *IEEE Trans . Plasma Sci .* **23** 221
- [4] Zambra M , Moreno J , Inostroza J , Araneda J C 2004 *IEEE Trans . Plasma Sci .* **32** 221
- [5] Favre M , Choi P , Zambra M , Moreno J , Chuaqui H , Wyndham E 1998 *Proc . IEE Symp . Pulsed Power* **22** 1
- [6] Moreno J , Zambra M , Favre M 2002 *IEEE Trans . Plasma Sci .* **30** 417
- [7] Choi P , Chuaqui H , Lunney J , Reichle R , Davies A J , Mittag K 1994 *IEEE Trans . Plasma Sci .* **17** 770
- [8] Ioannis G M , Ira K , Dan M G , James E P 2005 *J . Appl . Phys .* **98** 113303
- [9] Donko Z , Ioannis G M 1998 *Phys . Rev .* **57** 6
- [10] Zhu D J , Liu S G , Shi J S , He Y , Dai G S , Deng J J 1996 *High Power Laser and Particle Beams* **8** 123 (in Chinese) [祝大军、刘盛刚、石金水、何毅、戴光森、邓建军 1996 强激光与粒子束 **8** 123]
- [11] Lai J J , Yu J H , Huang J J , 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]
- [12] Boeuf J P , Pitchford L 1991 *IEEE Trans . Plasma Sci .* **19** 286
- [13] Yao X L , Wang X B , Lai J J 2002 *Acta Phys . Sin .* **52** 1450 (in Chinese) [姚细林、王新兵、赖建军 2003 物理学报 **52** 1450]
- [14] Ramaswamy K , Destler W W , Rodgers J 1996 *J . Appl . Phys .* **80** 4887
- [15] Braun C G 1987 *Phys . Fluids* **30** 499
- [16] Phelps A V 1991 *J . Phys . Chem . Ref . Data* **20** 557
- [17] Wang D Z 1994 *J . Appl . Phys .* **75** 1335
- [18] Birsall C K 1991 *IEEE Trans . Plasma Sci .* **19** 65
- [19] Lucas J 1961 *Proc . 5th Inf . Conf . Phenomena in Ionized Gases* 693

The initiation phase of pseudospark discharge in a hollow cathode via PIC/MCC simulation

Zheng Fei-Teng[†] Yang Zhong-Hai Jin Xiao-Lin

(College of Physical Electronics , University of Electronic Science and Technology of China , Chengdu 610054 , China)

(Received 8 May 2007 ; revised manuscript received 15 May 2007)

Abstract

We have developed a theoretical and computational model to study the initiation phase of pseudospark discharges in a hollow cathode via a quasi-three-dimensional electrostatic particle-in-cell plus Monte Carlo collision (PIC/MCC) method. The numerical results clearly identified different processes of ionization growth. It has been found that the ionization processes are determined by hollow cathode effect and local electric field. The growth is dependent on α ionization multiplication due to local space charge in the stage from initial ionization growth to the onset of the hollow cathode effect , and then the hollow cathode effect becomes the leading factor.

Keywords : particle-in-cell , Monte Carlo methods , hollow cathode , pseudospark discharge

PACC : 5265 , 5275 , 5280

[†] E-mail : zhengfeiteng@tom.com