

流体-亚稳态原子传输混合模型模拟空心 阴极放电特性*

何寿杰^{1)†} 哈静²⁾ 刘志强¹⁾ 欧阳吉庭³⁾ 何锋³⁾

1) (河北大学物理科学与技术学院, 保定 071002)

2) (河北农业大学理学院, 保定 071001)

3) (北京理工大学物理学院, 北京 100081)

(2012年10月9日收到; 2012年11月20日收到修改稿)

利用流体-亚稳态原子传输混合模型研究了氩气矩形空心阴极放电稳态时的参数. 数值计算得到了压强为 10 Torr 时的电势、电子、离子和亚稳态氩原子密度以及电子平均能量的分布. 结果表明电子和离子密度峰值为 $4.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, 亚稳态原子密度峰值为 $2.1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. 本文同时对流体-亚稳态原子传输混合模型和单一流体模型模拟得到的放电参数进行了比较. 结果表明, 分步电离是新电子产生的重要来源, 亚稳态原子对空心阴极放电特性有重要影响. 与单一流体模型相比, 混合模型计算得到的电子密度升高, 阴极鞘层宽度和电子平均能量降低.

关键词: 空心阴极放电, 流体-亚稳态原子传输模型, 电子密度, 分步电离

PACS: 52.30.Ex, 51.50.+v, 52.20.-j

DOI: 10.7498/aps.62.115203

1 引言

空心阴极放电由于具有高密度等离子体、高电流密度和低维持电压等特点在光源、光探测器、光谱分析、材料处理等领域具有广泛的应用前景^[1-3]. 但是空心阴极放电由于其特殊的空腔状结构, 特别是对于电极尺寸为微米量级的微空心阴极放电, 诸多等离子体诊断技术并不适用, 因此有必要借助于数值模拟的方法对其进行研究.

流体模型由于计算时间短, 同时能较好的反应空心阴极放电的特性, 已广泛应用于空心阴极放电的模拟研究中. Gu 等^[4]、施芸城等^[5]研究了管型空心阴极放电的放电特性. 夏广庆等^[6]、Wang 等^[7]对三明治结构空心阴极放电进行了模拟研究. 但是在以上的模拟研究中, 只考虑了电子和离子的分布特性, 并没有考虑亚稳态原子的时空演化特性. 而在很多利用流体-蒙特卡罗模型对空心阴极放电

进行的模拟研究中同样忽略了分步电离等对新电子产生的影响^[8,9]. 但是亚稳态原子是气体放电反应中一种重要的活性粒子, 为了能够更加准确的反应空心阴极放电的放电特性, 有必要在放电模型中加入亚稳态原子传输模型.

本文分别利用单一流体模型和流体-亚稳态原子传输混合模型模拟了矩形空心阴极的放电特性; 通过比较两种模型模拟得到的电子密度以及电离反应速率等, 研究了亚稳态原子对放电特性的影响.

2 放电结构和模型描述

2.1 放电结构

图 1 为空心阴极放电结构示意图. 放电单元由两相互平行的阴极和两相互平行的阳极构成阴极和阳极材料假设为铜. 相对阴极和相对阳极间距均为 0.1 cm. 模拟的气体环境为纯的氩气, 气压

* 国家自然科学基金 (批准号: 11205046; 11005009; 51077035), 河北省高等学校科学研究 (批准号: 2011166) 和河北省自然科学基金项目 (批准号: A2012201037) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: heshouj@hbu.edu.cn

$P = 10$ Torr ($1 \text{ Torr} = 1.33322 \times 10^2 \text{ Pa}$). 阴极电势假设为 0 V , 阳极电势假设为 200 V .

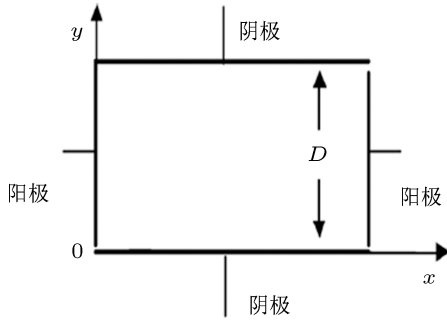


图1 矩形空心阴极放电单元截面图

2.2 气体放电模型

2.2.1 单一流体模型

流体模型方程组包括电子和离子连续性方程、电子平均能量方程和泊松方程.

电子的连续性方程为

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e = S_e. \quad (1)$$

离子的连续性方程为

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_p = S_p. \quad (2)$$

电子平均能量方程为

$$\frac{\partial n_e \epsilon_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_{\epsilon_e} = S_{\epsilon_e}. \quad (3)$$

其中 n_e , n_p 和 $n_e \epsilon_e$ 分别为电子密度、离子密度和电子平均能量密度, $\epsilon_e = 3/2k_B T$ 为电子平均能量, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为电子温度; S_e , S_p 和 S_{ϵ_e} 分别为电子、离子和电子平均能量的源项. Γ_e , Γ_p 和 Γ_{ϵ_e} 分别为电子流密度、离子流密度和电子平均能量流密度, 分别由迁移流和扩散流组成.

电子流密度表达式为

$$\Gamma_e = -\mu_e n_e \mathbf{E} - D_e \nabla n_e. \quad (4)$$

离子流密度表达式为

$$\Gamma_p = \mu_p n_p \mathbf{E} - D_p \nabla n_p. \quad (5)$$

电子平均能量流密度表达式为

$$\Gamma_{\epsilon_e} = -\frac{5}{3} \mu_e n_e \epsilon_e \mathbf{E} - \frac{5}{3} D_e \nabla (n_e \epsilon_e). \quad (6)$$

\mathbf{E} 为电场强度; μ_e , μ_p , D_e 和 D_p 分别为电子和离子的迁移系数和扩散系数; 其中电子的扩散系数通过爱因斯坦方程求得

$$D_e = k_B T \mu_e / q_e, \quad (7)$$

q_e 为基本电荷而 μ_e , μ_p 和 D_p 取自文献 [10]. 电场由泊松方程计算得到

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{q_e (n_p - n_e)}{\epsilon}, \quad (8)$$

其中 φ 为电势, ϵ 为氩气介电常数.

电子、离子和电子平均能量的源项为

$$S_{\epsilon_e} = -q_e \Gamma_e \cdot \mathbf{E} - K_{gi} n_e N U_i - K_{ex} n_e N U_{ex}, \quad (9)$$

$$S_e = S_p = K_{gi} N n_e, \quad (10)$$

其中 N 为基态 Ar 原子数密度, K_{gi} 为氩的基态直接电离速率系数, K_{ex} 为激发速率系数, U_i 和 U_{ex} 分别为基态电离能和激发能.

2.2.2 流体-亚稳态原子传输混合模型

混合模型除了描述电子和离子的传输方程 (1)–(10) 式, 还包括亚稳态原子传输方程.

亚稳态原子的连续性方程为

$$\frac{\partial n_m}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_m = S_m. \quad (11)$$

亚稳态原子流密度中迁移流假设为 0, 只由扩散流组成,

$$\Gamma_m = -D_m \nabla n_m, \quad (12)$$

其中 n_m 和 Γ_m 分别为亚稳态原子密度和亚稳态原子流密度; S_m 为亚稳态原子的源项; D_m 为亚稳态原子的扩散系数 [11].

对于混合模型, 电子和离子的源项为

$$S_e = S_p = K_{gi} N n_e + K_{si} n_m n_e + K_{pi} n_m^2, \quad (13)$$

其中 $K_{gi} N n_e = \text{Si}_{(h)}$, 为基态直接电离速率; $K_{si} n_m n_e = \text{Stepwise}_{(h)}$, 为分步电离速率; $K_{pi} n_m^2 = \text{Penning}_{(h)}$, 为潘宁电离速率.

亚稳态原子的源项为

$$S_{ex} = K_{ex} N n_e - K_{si} n_m n_e - 2K_{pi} n_m^2 - K_{2B} N n_m - K_{3B} N^2 n_m - K_d n_m n_e. \quad (14)$$

电子平均能量的源项为

$$S_{\epsilon_e} = -q_e \Gamma_e \cdot \mathbf{E} - K_{gi} n_e N U_i - K_{ex} n_e N U_{ex} - K_{si} n_e n_m, \quad (15)$$

其中 K_{si} 和 K_{pi} 分别为分步电离速率系数和潘宁电离速率系数; K_{2B} , K_{3B} 和 K_d 分别为两体碰撞速率系数、三体碰撞速率系数和解激发速率系数.

边界条件和数值计算方法见文献 [12].

2.3 放电的反应过程

表 1 为混合模型考虑的放电反应类型和相应的反应速率系数. 单一流体模型只考虑基态直接电离和直接激发过程. 对于 Ar, 典型的亚稳态能级包括 3P_2 和 3P_0 . 由于放电过程中 3P_0 能级亚稳态原子数密度远低于 3P_2 能级亚稳态原子数密度^[13], 因此

模拟中把这两个能级进行合并, 作为一个能级处理, 对应激发能为 11.6 eV. 氩的基态电离速率系数 K_{gi} 、激发速率系数 K_{ex} 和分步电离系数 K_{si} 为电子平均能量的函数^[14], 如图 2 所示, 潘宁电离速率系数、解激发速率系数、两体碰撞速率系数和三体碰撞速率系数假设为常数^[15].

表 1 放电反应类型及反应速率系数

	反应方程	反应类型	反应速率系数/ $\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$	能量阈值/eV
1	$\text{Ar} + \text{e} - \text{Ar}^+ + 2\text{e}$	基态电离	[14]	15.7
2	$\text{Ar} + \text{e} - \text{Ar}^m + \text{e}$	基态激发	[14]	11.6
3	$\text{Ar}^m + \text{e} - \text{Ar}^+ + 2\text{e}$	分步电离	[14]	4.1
4	$\text{Ar}^m + \text{Ar}^m - \text{Ar}^+ + \text{Ar} + \text{e}$	潘宁电离	$K_{pi} = 6.2 \times 10^{-10}$	
5	$\text{Ar}^m + \text{e} - \text{Ar} + h\nu + \text{e}$	解激发	$K_d = 2 \times 10^{-7}$	
6	$\text{Ar}^m + \text{Ar} - \text{Ar} + \text{Ar}$	两体碰撞	$K_{2B} = 3 \times 10^{-15}$	
7	$\text{Ar}^m + 2\text{Ar} - \text{Ar}_2 + \text{Ar}$	三体碰撞	$K_{3B} = 1.1 \times 10^{-31}$	

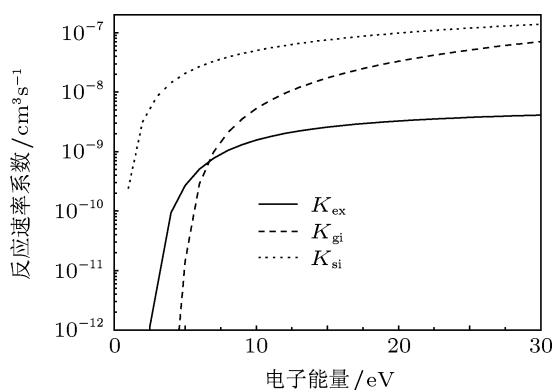


图 2 反应速率系数

鞘层区, 由阴极附近的 0 V 迅速上升到 200 V. 负辉区位于放电单元的中心区域, 电势降为 5 V. 从电势分布图可知, 放电单元中心有一明显的环状等势线, 即两个相对的阴极所形成的负辉区产生了重叠, 表明形成了空心阴极效应.

3 模拟结果和讨论

本节首先利用流体-亚稳态原子混合模型 (以下简称混合模型) 模拟得到了矩形空心阴极放电的放电参数; 然后对混合模型和单一流体模型模拟得到的放电特性进行了比较, 讨论了亚稳态原子对放电特性的影响.

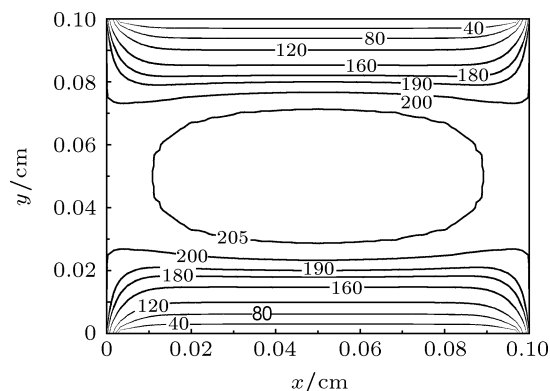


图 3 电势分布图

3.1 放电的基本特性

图 3 为阳极电压 200 V 时, 电势的二维分布图. 由图可知放电区域明显的分为两部分: 阴极鞘层区和负辉区. 其中阴极鞘层区位于两侧阴极附近, 宽度大约为 0.025 cm, 这与利用阴极鞘层理论计算公式^[16]得到的结果相符. 极间电压主要降落在阴极

图 4(a), (b) 和 (c) 为电子、离子和亚稳态原子密度二维分布图. 图 5 同时给出了 $x = 0.05 \text{ cm}$ 时, 电子和离子沿 y 轴方向一维分布图. 由图可知, 整个放电空间亚稳态原子密度要高于电子和离子密度. 其中电子、离子和亚稳态原子密度峰值均位于放电单元的中心区域. 电子和离子密度峰值相等, 为 $4.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, 亚稳态原子密度峰值为 $2.1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, 约为电子密度 4.5 倍. 而由图 5 可

知, 在阴极鞘层区离子密度远高于电子密度, 具有明显的阴极鞘层特性.

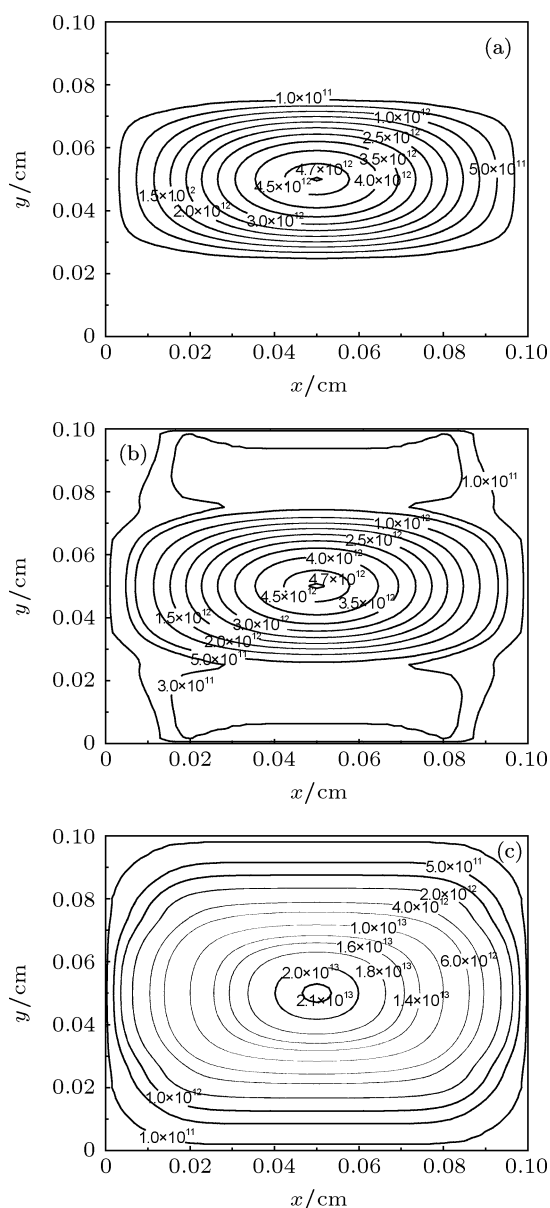


图4 (a) 电子 (b) 离子和 (c) 亚稳态原子密度分布图

图6为电子平均能量分布图. 由图可知, 阴极鞘层区和负辉区中的电子平均能量存在很大差别. 在阴极鞘层区, 电子平均能量很高, 达到20—32 eV. 但在负辉区, 电子平均能量很低, 只有2 eV左右.

3.2 混合模型和单一流体模型放电特性的比较

如上所述, 利用流体-亚稳态原子混合模型模拟得到的结果比较好的反映了空心阴极放电的基本特性, 与利用其他方法得到的数值模拟和实验结

果相符 [9,17]. 本文同时利用单一流体模型在与3.1相同的条件下对空心阴极放电进行了模拟研究. 并且对两种模型模拟得到的电子密度和电离速率等参量进行了比较, 讨论了亚稳态原子对放电特性的影响. 为了便于比较, 下面以 $x = 0.05 \text{ cm}$ 时各参量沿 y 轴方向一维分布为例.

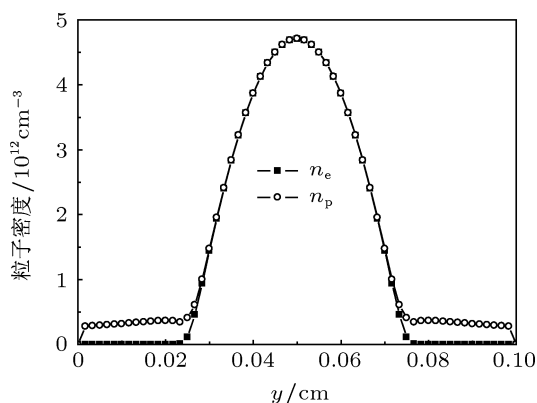


图5 电子和离子密度沿 y 轴分布图 ($x = 0.05 \text{ cm}$)

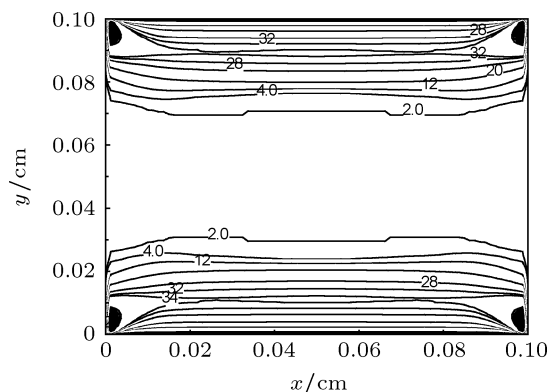


图6 电子平均能量分布图

图7(a), (b) 和 (c) 为两种模型模拟得到的 $x = 0.05 \text{ cm}$ 时, 沿 y 轴方向电子密度绝对值和电子密度比值分布图. $n_{e(f)}$ 和 $n_{e(h)}$ 分别表示单一流体模型和混合模型模拟得到的电子密度. 由图可知, 利用混合模型得到的电子密度要高于单一流体模型得到的结果, 且不同的放电区域电子密度差值不同. 其中, 阴极鞘层区差值为10%, 负辉区处为17%; 而最大差值出现在 $y = 0.025 \text{ cm}$ 和 $y = 0.075 \text{ cm}$ 处, 为52%. 另外, 由图7(b)可知, 混合模型模拟得到的阴极鞘层宽度与单一流体模型相比减小. 混合模型得到的电子密度要高于单一流体模型得到的结果是由于在电子的产生过程中考虑了分步电离和潘宁电离, 如图8所示.

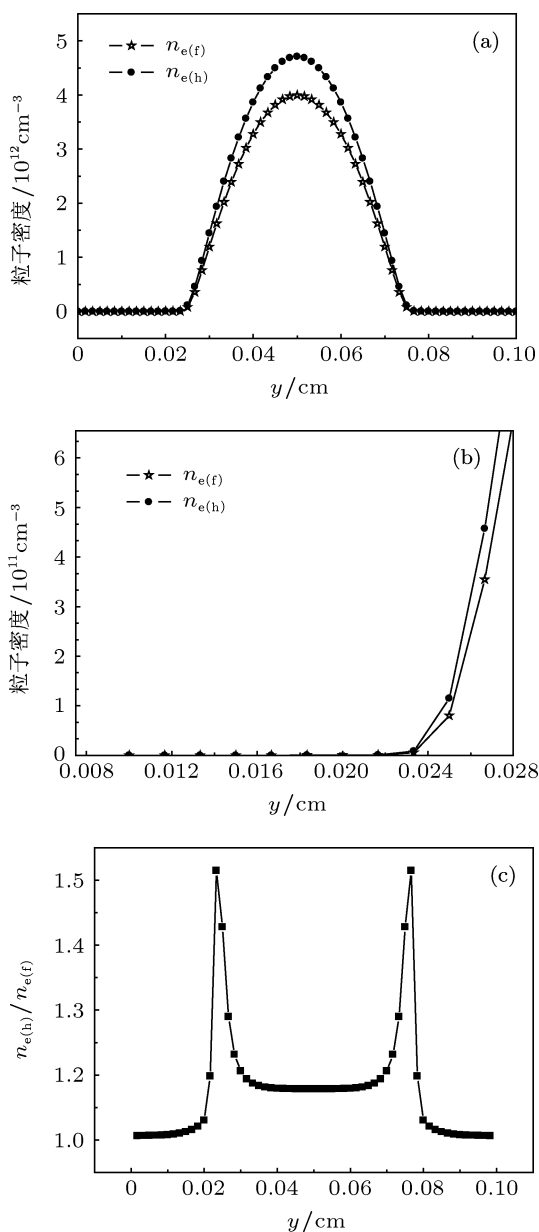


图7 两种模型得到的电子密度绝对值 (a) 整个放电区域; (b) 阴极鞘层区; (c) 电子密度比值分布图 ($x = 0.05 \text{ cm}$)

图 8 为混合模型得到的基态直接电离速率 $\text{Si}_{(h)}$ 、分步电离速率 $\text{Stepwise}_{(h)}$ 和潘宁电离速率 $\text{Penning}_{(h)}$ 沿 y 轴方向分布图. 由图可知, 在阴极鞘层区, 分步电离和潘宁电离速率远低于基态直接电离速率. 而由阴极鞘层区向负辉区方向, 分步电离和潘宁电离速率逐渐接近基态直接电离速率. 特别是在放电单元的中心区域, 分步电离速率与基态直接电离速率峰值已经处于同一量级, 为 $10^{18} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$, 二者比值大约为 2:3. 而潘宁电离速率也超过 $10^{17} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$. 因此分步电离和潘宁电离对于新电子的产生不可忽略.

图 9(a) 为混合模型和单一流体模型模拟得到

的总电离速率和基态直接电离速率分布图. 图 9(b) 为两种模型得到的总电离速率比值在阴极鞘层区的分布. 由 (10) 和 (13) 式可知, 对于单一流体模型, 总电离速率即基态直接电离速率 $\text{Si}_{(f)}$; 对于混合模型, 总电离速率 $\text{St}_{(h)}$ 为基态直接电离速率、分步电离速率和潘宁电离速率之和. 对总电离速率, 在阴极鞘层区, 混合模型得到的结果略高, 如图 9(b) 所示; 在负辉区, 混合模型的结果明显高于单一流体模型得到的结果. 特别是在放电的中心区域 $y = 0.05 \text{ cm}$ 时, $\text{St}_{(h)}$ 为 $2.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$, 而 $\text{Si}_{(f)}$ 只有 $1.6 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$. 因此如上所述, 混合模型模拟得到的电子密度要高于单一流体模型的结果. 但是对基态直接电离速率, 在放电的中心区域, 混合模型得到的值要小于流体模型的计算结果. 这是由于混合模型计算得到的平均电子能量要低于单一流体模型计算得到的结果, 如图 10 所示.

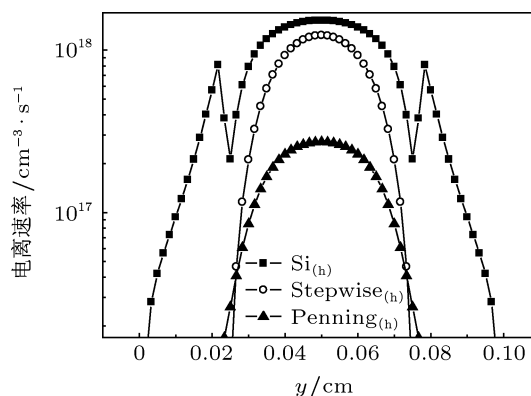


图 8 不同类型电离反应速率分布图 ($x = 0.05 \text{ cm}$)

图 10 为两种模型计算得到的电子平均能量比值分布图. 由图中可知, 在阴极鞘层区, 两种模型计算得到的电子平均能量基本相等; 而在负辉区内, 特别是负辉区和阴极位降区交汇处, 混合模型得到的电子平均能量明显要低. 由于在 2—5 eV 左右, 基态直接电离速率系数 K_{g1} 随着电子能量的降低呈指数衰减 [12], 因此负辉区内混合模型计算得到的直接电离速率要比流体模型计算结果低.

3.3 讨论

如上所述, 流体 - 亚稳态原子传输混合模型和单一流体模型模拟得到的电子密度和电离速率等存在明显的差别. 由 2.2 节可知, 两种模型的区别在于混合模型中考虑了亚稳态原子的时空分布特性, 因此亚稳态原子对于空心阴极放电参数具有重要影响.

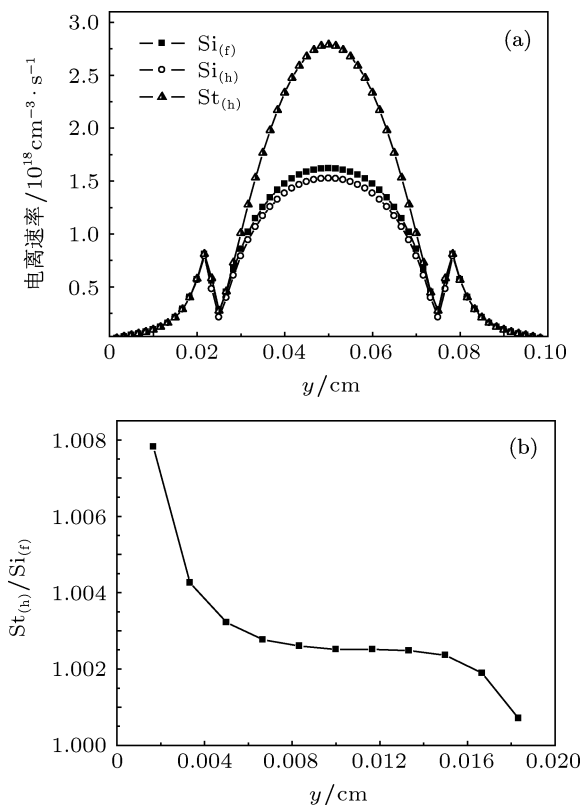


图9 $x = 0.05$ cm 时 (a) 总电离速率和基态直接电离速率和 (b) 鞘层区总电离速率比值分布图

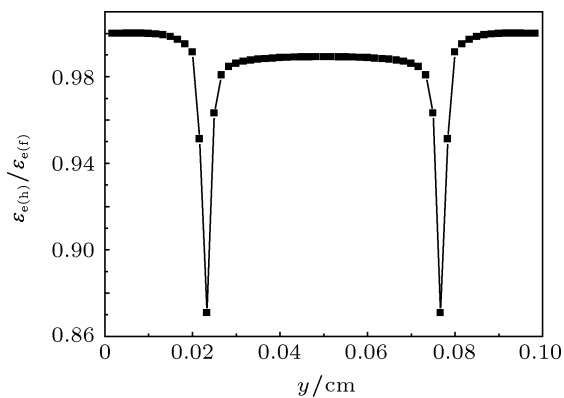


图10 混合模型和流体模型电子平均能量比值分布图 ($x = 0.05$ cm)

在阴极鞘层区,一方面亚稳态原子数密度 n_m 远低于基态氩原子数密度 N ; 另一方面该区域电子能量较高 (20—32 eV), 具有很高的基态电离速率反应系数 K_{gi} , 因此由 (13) 式可知分步电离和潘宁电

离速率远低于基态直接电离速率,如图8所示. 由于分步电离和潘宁电离在阴极鞘层区对总电离速率影响很小,因此对该区电子平均能量和电子密度影响较小,如图7和图10所示. 在负辉区,一方面亚稳态原子密度远高于鞘层区密度; 另一方面负辉区内电子平均能量较低 (2—3 eV), 而分步电离能量阈值要远低于直接电离和激发能量阈值. 这样负辉区内发生分步电离反应的概率远高于基态直接电离反应,分步电离速率对总电离速率影响较大. 同时由于分步电离会消耗部分电子能量,因此在混合模型中考虑分步电离反应时计算得到的电子平均能量要低于单一流体模型计算得到的电子平均能量.

另外,如上所述,混合模型计算得到的阴极鞘层宽度要略小于单一流体模型计算得到的结果. 这是由于虽然在靠近阴极边界区域,分步电离所占比重很小,但是总的电离速率还是要高于单一流体模型得到的结果. 因此在混合模型中,更容易在较短的距离内形成自持放电,鞘层宽度减小,负辉区宽度增加. 同时造成混合模型得到的结果与流体模型相比在 $x = 0.025$ 和 $x = 0.075$ cm 附近电子密度显著增加,电子平均能量显著减小.

4 结论

利用流体-亚稳态原子传输混合模型研究了矩形空心阴极放电的参数特性; 同时与单一流体模型计算得到的结果进行了比较.

1. 混合模型计算结果: 电势降主要发生在阴极鞘层区,负辉区位降仅为几伏; 亚稳态原子密度峰值远高于电子和离子密度峰值; 阴极鞘层区电子平均能量达到 20—32 eV, 而负辉区仅为几 eV.

2. 与单一流体模型计算结果相比,混合模型模拟得到的电子平均能量、基态直接电离速率和阴极鞘层宽度降低,总的电离速率和电子密度升高.

3. 分步电离速率和基态直接电离速率处于同一量级,对于新电子的产生具有重要贡献,不可忽略. 流体-亚稳态原子传输混合模型可以更好的反应空心阴极放电的特性.

[1] Weinstein V, Steers E B M, Smid P, Pickering J C, Mushtaq S 2010 *J. Anal. At. Spectrom* **25** 1283
 [2] Becker K H, Schoenbach K H, Eden J G 2006 *J. Phys. D* **39** R55
 [3] Lazzaroni C, Chabert P 2011 *J. Phys. D* **44** 445202

[4] Gu X W, Meng L, Yan Y, Sun Y Q 2009 *Contrib. Plasma. Phys.* **49** 40
 [5] Zou B, Shi Y C, Lu Y J 2009 *Journal of Donghua university (Natural Science)* **35** 114 (in Chinese) 邹彬, 施芸城, 陆彦钧 2009 东华大学学报 (自然科学版) **35** 114

- [6] Xia G Q, Xue W H, Chen M L, Zhu Y, Zhu G Q 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 015201 (in Chinese) [夏广庆, 薛伟华, 陈茂林, 朱雨, 朱国强 2011 物理学报 **60** 015201]
- [7] Zhang X L, Wang X B, Liu F J, Lu Y Z 2009 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **37** 2055
- [8] Donkó Z 1998 *Phys. Rev. E* **57** 7126
- [9] Kutasi K, Donkó Z 2000 *J. Phys. D* **33** 1081
- [10] Ward A L 1962 *J. Appl. Phys.* **33** 2789
- [11] A Bogaerts, R Gijbels. 1995 *Phys. Rev. A* **52** 3743
- [12] He S J, Ouyang J T, He F, Li S 2011 *Phys. Plasma.* **18** 032102
- [13] Sadeghi N, Cheaib M, Setser D W 1989 *J. Chem. Phys.* **90** 219
- [14] <http://www.siglo-kinema.com/bolsig.htm>
- [15] Lymberopoulos D P, Economou D J 1993 *J. Appl. Phys* **73** 3668
- [16] Carman R J. 1989 *J. Phys. D* **22** 55
- [17] Quitzau M, Kersten H 2012 *Eur. Phys. J. D* **66** 47

Simulation of hollow cathode discharge by combining the fluid model with a transport model for metastable Ar atoms*

He Shou-Jie^{1)†} Ha Jing²⁾ Liu Zhi-Qiang¹⁾ Ouyang Ji-Ting³⁾ He Feng³⁾

1) (College of Physics Science and Technology, Hebei University, Baoding 071002, China)

2) (Institute of Science, Hebei Agriculture University, Baoding 071001, China)

3) (School of Science, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

(Received 9 October 2012; revised manuscript received 20 November 2012)

Abstract

The characteristics of rectangular hollow cathode discharge are studied based on a fluid model combined with a transport model for metastable Ar atoms in argon. The distribution of potential, density of electrons and ions, and the density of metastable atoms are calculated at a pressure of 10 Torr. The peak density of electron and ion is $4.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, and the peak density of metastable atoms is $2.1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. Results obtained in terms of fluid-metastable hybrid model are compared with that in terms of the fluid model, which show that the electron produced by stepwise ionization is one of the important source of new electrons, and the metastable atoms have an obvious effect on the hollow cathode discharge. Compared with the results calculated in terms of fluid model, the density of electrons obtained in terms of hybrid model increases, and the depth of cathode sheath and the averaged electron energy decrease.

Keywords: hollow cathode discharge, fluid-metastable atoms transport model, density of electrons, stepwise ionization

PACS: 52.30.Ex, 51.50.+v, 52.20.-j

DOI: 10.7498/aps.62.115203

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11205046, 11005009, 51077035), the Science and Technology Research Projects of Colleges and Universities in Hebei Province (Grant No. 2011166), and the Science Foundation of Hebei province, China (Grant No. A2012201037).

† Corresponding author. E-mail: heshouj@hbu.edu.cn