

电子散射和能量分配方式对电子输运系数的影响

宋萌萌 周前红 孙强 张含天 杨薇 董烨

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

Song Meng-Meng Zhou Qian-Hong Sun Qiang Zhang Han-Tian Yang Wei Dong Ye

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 135101 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20202021

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202021>

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

流注放电低温等离子体中电子输运系数计算的蒙特卡罗模型

Monte Carlo simulations of electron transport coefficients in low temperature streamer discharge plasmas

物理学报. 2017, 66(19): 195101 <https://doi.org/10.7498/aps.66.195101>

运用R矩阵方法研究低能电子与NO₂分子的散射

Electron scattering studies of NO₂ radical using R-matrix method

物理学报. 2017, 66(24): 243401 <https://doi.org/10.7498/aps.66.243401>

光子与相对论麦克斯韦分布电子散射截面的蒙特卡罗计算方法

Monte Carlo method for computing relativistic photon-Maxwellian electron scattering cross sections

物理学报. 2018, 67(21): 215201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180932>

光子与相对论麦克斯韦分布电子散射的能谱角度谱研究

Photon spectrum and angle distribution for photon scattering with relativistic Maxwellian electrons

物理学报. 2019, 68(1): 015201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181796>

热辐射输运问题的高效蒙特卡罗模拟方法

An efficient Monte Carlo simulation method for thermal radiation transport

物理学报. 2020, 69(2): 029501 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191315>

高功率微波输出窗内侧击穿动力学的PIC/MCC模拟研究

PIC/MCC simulation of breakdown dynamics inside high power microwave output window

物理学报. 2018, 67(22): 225201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181260>

电子散射和能量分配方式对电子输运系数的影响*

宋萌萌¹⁾²⁾ 周前红^{1)†} 孙强¹⁾ 张含天¹⁾ 杨薇¹⁾ 董烨¹⁾

1) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

2) (中国工程物理研究院研究生院, 北京 100088)

(2020年11月30日收到; 2021年1月31日收到修改稿)

电子输运系数是确保低温等离子体建模准确性的关键因素, 通过模拟电子的输运过程可对其数值求解. 在模拟电子输运时, 电子和中性粒子碰撞后的散射和能量分配方式有多种处理方法. 为了研究不同处理方法对电子输运系数的影响, 本文基于蒙特卡罗碰撞方法, 建立了电子输运系数的计算模型, 模拟约化电场 10—1000 Td ($1 \text{ Td} = 10^{-21} \text{ V}\cdot\text{m}^2$) 氢原子气中的电子输运过程. 计算结果表明, 各向同性假设对电子输运系数的影响随电场强度增加而增加, 但即使对于较低的约化电场 (10 Td), 各向异性散射假设下电子的平均能量、通量迁移率和通量扩散系数也分别比各向同性假设下的值高 38.34%, 17.38% 和 119.18%. 不同的能量分配方式对中高电场强度下 ($> 200 \text{ Td}$) 的电子输运系数影响较为显著. 在高电场时, 均分法计算得出的电子平均能量、通量迁移率和通量扩散系数均小于零分法对应的值, 汤森电离系数则相反. Opal 法得出的电子输运系数介于均分法和零分法之间. 此外, 考虑各向异性散射时, 不同能量分配方式对输运系数的影响高于各向同性. 本研究表明, 在计算电子输运系数时需要考虑各向异性的电子散射, 高电场条件下尤其要注意能量分配方式的选择.

关键词: 电子散射, 能量分配, 电子输运系数, 蒙特卡罗碰撞

PACS: 51.10.+y, 51.50.+v, 52.65.Pp

DOI: 10.7498/aps.70.20202021

1 引言

外加电场作用下, 非平衡等离子体中的电子输运在低温等离子体领域应用广泛^[1]. 研究电子的输运特性对理解汤森、辉光以及流注等放电过程至关重要^[2], 而精确的电子输运系数对控制等离子体刻蚀、离子源和电推进中放电参数的设置及进一步优化有深远的意义^[3], 同时也是保证低温等离子体建模准确性的关键因素^[4]. 目前, 获取电子输运系数的方式通常有三种: 一是实验测量法^[5]; 二是基于球谐展开的两项近似直接求解电子玻尔兹曼方程^[6](两项近似法); 三是跟踪电子运动及其与中性

粒子碰撞的蒙特卡罗法^[7] (MCC法). 已有的实验测量数据主要在较低电场条件下获得^[8], 使用中有一定的局限性. 两项近似法具有计算效率高的优点, 但需要假设电子速度分布满足各向同性^[6], 当高电场导致电子速度分布呈各向异性时, 该方法计算得到的电子输运系数有较大的误差^[9]. MCC法由于需要模拟大量粒子, 计算效率相对较低, 但是无需对电子速度分布做限制, 能较为真实地反映电子的输运过程^[10], 在高电场强度下求解电子输运系数时有精度高的优势.

在研究低温等离子体中的电子输运时, 电子和中性粒子碰撞后的散射有各向同性和各向异性两种计算方式. 当电子能量较低时, 往往直接将其散

* 国家自然科学基金 (批准号: 12005023, 11775032, 11875094) 和中国工程物理研究院院长基金 (批准号: YZJLX2019013) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhou_qianhong@qq.com

射近似为各向同性^[11–14],但随着电子能量增高,各向异性散射的影响逐渐增强. Phelps等^[15]研究了氮气中电子各向异性散射对输运系数的影响,发现当约化电场大于 500 Td ($1 \text{ Td} = 10^{-21} \text{ V}\cdot\text{m}^2$) 时,各向异性散射会导致输运系数的值约有 10% 的差异. Janssen等^[16]和 Yang等^[17]基于 MCC法,求解约化电场 1000 Td 时氩气中的电子输运系数,结果表明在电子-氩原子的弹性碰撞中考虑各向异性的电子散射会使电子输运系数高于各向同性条件下的值,但他们的工作中均未涉及电离碰撞中电子各向异性散射影响的研究.

除了电子散射,电离碰撞后二次电子和散射电子间的能量分配也会对电子输运系数带来影响. 能量分配方式主要有均分法、零分法(二次电子能量为 0)^[6,7]和 Opal法^[18]. 不同的分配方式不但决定了电子能量的大小,而且当电子散射为各向异性时也会改变其散射角^[19]. 孙安邦等^[14]在约化电场 0.1–500 Td 内,使用均分法和 Opal法计算氮气中的电子输运系数,发现两种分配方式下的结果相差不大. 然而 Yoshida等^[20]以及 Tzeng和 Kunhardt^[21]在较高的约化电场内(分别为 100–3000 Td 和 300–1500 Td),研究了能量分配方式对氮气中电子输运系数的影响,均表明不同能量分配方式下计算出的电子输运系数有较大的差异.

针对上述电子输运系数计算工作中的不足,特别是考虑不同电子散射以及能量分配方式相关研究的缺失甚至矛盾,本文基于 MCC方法建立了电子输运系数的计算模型,获得了约化电场强度 10–1000 Td 条件下氢原子气体中的电子能量分布函数(EEDF),通量迁移率(μ_f)、通量扩散系数(D_f)和汤森电离系数(α). 分别比较了电子散射和能量分配方式对电子输运系数的影响.

2 计算模型

2.1 电子运动

电子在电场中的运动遵循牛顿方程,在时间步长 Δt 内,其位置和速度变化满足以下关系:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{k+1} &= \mathbf{r}_k + \mathbf{v}_k \Delta t - 0.5e\mathbf{E}/(m_e \Delta t^2), \\ \mathbf{v}_{k+1} &= \mathbf{v}_k - e\mathbf{E}/(m_e \Delta t), \end{aligned} \quad (1)$$

式中 \mathbf{r}_k 和 \mathbf{v}_k 分别代表电子运动 k 个时间步后的位置和速度, e 为电子电荷, m_e 为电子质量, \mathbf{E} 为电场.

2.2 电子和中性粒子的碰撞

在等离子体中,电子和中性粒子间相互作用时,主要发生弹性、激发和电离三种类型的碰撞. 根据蒙特卡罗碰撞模型^[19],两粒子发生碰撞的概率 P 可表示为:

$$P = 1 - \exp(-\nu \Delta t) = 1 - \exp(-\sigma n_0 u \Delta t) \approx \sigma n_0 u \Delta t, \quad (2)$$

其中 ν 为碰撞频率, σ 为碰撞截面, n_0 为中性粒子的密度, u 为电子和中性粒子的相对速度,时间步长 Δt 满足 $\nu \Delta t < 0.1$. 给定随机数 $R_1 \in [0, 1]$, 当 $R_1 < P$ 时碰撞发生.

作为非守恒碰撞,激发和电离过程中的能量损失有相似的特性,这里忽略激发碰撞的因素,只考虑电子和氢原子的弹性及电离两种碰撞.

2.2.1 弹性碰撞

对于电子和中性粒子的弹性碰撞,碰撞后电子的能量损失 $\Delta \varepsilon$ 可表示为^[22]

$$\Delta \varepsilon = \frac{2m_e}{M}(1 - \cos \chi)\varepsilon, \quad (3)$$

式中 M 为中性粒子的质量, ε 为入射电子的能量. 由于 $m_e \ll M$, 计算时可以认为电子是理想弹性碰撞,即碰撞前后能量保持不变,只是方向发生变化.

根据对称性,碰撞后电子的方位角 ϕ 均匀分布于 $[0, 2\pi]$, 可通过 $[0, 1]$ 内的随机数 R_2 表示:

$$\phi = 2\pi R_2. \quad (4)$$

而电子的散射角 χ 依赖于微分碰撞截面 $I(\varepsilon, \chi)$ 的大小. 根据库仑屏蔽势形式的相似性, $I(\varepsilon, \chi)$ 近似满足以下关系^[23]:

$$\frac{I(\varepsilon, \chi)}{\sigma} = \frac{\varepsilon}{4\pi [1 + \varepsilon \sin^2(\chi/2)] \ln(1 + \varepsilon)}, \quad (5)$$

式中 ε 的单位为 eV.

电子散射角为 χ 时的碰撞截面 $\sigma_\chi(\varepsilon)$ 通过以下公式表示:

$$\sigma_\chi(\varepsilon) = \int_0^{2\pi} \int_0^\chi I(\varepsilon, \chi') \sin \chi' d\chi' d\phi, \quad (6)$$

该碰撞截面与总碰撞截面 σ 的关系可通过 $[0, 1]$ 内均匀分布的随机数 R_3 表示^[23]:

$$R_3 = \frac{\sigma_\chi(\varepsilon)}{\sigma} = 2\pi \int_0^\chi \frac{I(\varepsilon, \chi')}{\sigma(\varepsilon)} \sin \chi' d\chi'. \quad (7)$$

将 (5) 式代入 (7) 式中,得到电子的散射角满足以下关系^[19]:

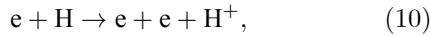
$$\cos \chi = [2 + \varepsilon - 2(1 + \varepsilon)^{R_3}] / \varepsilon. \quad (8)$$

若假定电子散射为各向同性, (5) 式变为 $I(\varepsilon, \chi) / \sigma = 1 / (4\pi)$, 将其代入 (7) 式中便得到各向同性时的散射角:

$$\cos \chi = 1 - 2R_3. \quad (9)$$

2.2.2 电离碰撞

电子在电场中运动并获得能量, 当其能量大于中性粒子的电离能时有一定的概率发生电离碰撞, 并产生二次电子:



电离碰撞中的能量满足以下守恒关系:

$$\varepsilon_{\text{scat}} + \varepsilon_{\text{ej}} + \varepsilon_{\text{i}} = \varepsilon_{\text{inc}} + \varepsilon_{\text{n}} - \varepsilon_{\text{ion}}, \quad (11)$$

式中 $\varepsilon_{\text{scat}}$ 、 ε_{ej} 和 ε_{inc} 分别代表散射电子、二次电子以及入射电子的能量, ε_{n} 和 ε_{i} 分别代表中性粒子和电离所产生离子的能量, ε_{ion} 为电离能.

考虑到电子质量远小于离子和中性粒子, 电离碰撞中产生的离子与中性粒子的能量近似相等, 因此 (11) 式可以简化为

$$\varepsilon_{\text{scat}} + \varepsilon_{\text{ej}} = \varepsilon_{\text{inc}} - \varepsilon_{\text{ion}}. \quad (12)$$

当发生电离碰撞时, 系统损失的能量等于中性粒子的电离能. 电离后剩余的能量在二次电子和散射电子间的分配方式通常有三种方法, 第一种是散射电子能量和二次电子能量平均分配电离后剩余的能量 (均分法):

$$\varepsilon_{\text{ej}} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{\text{inc}} - \varepsilon_{\text{ion}}). \quad (13)$$

第二种将电离后剩余的能量全部分配给散射电子, 而二次电子的能量为 0 (零分法). 第三种根据 Opal^[18] 中的计算关系求得 (Opal 法), 即二次电子能量满足:

$$\varepsilon_{\text{ej}} = B(\varepsilon_{\text{inc}}) \tan \left[R_4 \arctan \left(\frac{\varepsilon_{\text{inc}} - \varepsilon_{\text{ion}}}{2B(\varepsilon_{\text{inc}})} \right) \right], \quad (14)$$

式中 $B(\varepsilon_{\text{inc}})$ 为能量分配系数, R_4 为 [0, 1] 内的随机数.

电离碰撞后电子的散射角可通过 (5) 式进行求解^[23], 方位角仍用 (4) 式表示.

2.3 电子输运系数计算

EEDF 决定了电子输运系数的值, 在研究电子输运特性中有重要作用^[24], 其值可通过以下关系求得:

$$f(\varepsilon) = \varepsilon^{-1/2} p(\varepsilon), \quad (15)$$

式中 $f(\varepsilon)$ 为 EEDF, $p(\varepsilon)$ 为电子能量概率函数 (EEDF), 由 $d\varepsilon$ 内电子数 dN_e 和总电子数 N_e 之比确定:

$$p(\varepsilon) = dN_e / (N_e d\varepsilon). \quad (16)$$

电子的平均能量、迁移率、扩散系数以及汤森电离系数由稳态后电子的位置、速度和电子个数共同决定.

电子的平均能量为

$$\langle \varepsilon \rangle = \sum_{k=1}^{N_e} \frac{m_e}{2} |\mathbf{v}_k(t)|^2, \quad (17)$$

电子的体迁移率可通过电子群质心位置随时间的变化表示:

$$\mu_b = \frac{d\langle r \rangle}{E dt}, \quad (18)$$

式中 E 为外加电场的大小, 其方向固定.

体扩散系数为

$$D_b = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle (r - \langle r \rangle)^2 \rangle. \quad (19)$$

类似地, 电子的通量迁移率及其扩散系数分别为

$$\mu_f = \frac{1}{E} \left\langle \frac{dr}{dt} \right\rangle = \frac{\langle v_i \rangle}{E}, \quad (20)$$

$$D_f = \langle rv \rangle - \langle r \rangle \langle v \rangle, \quad (21)$$

式中 r 和 v 为电子沿电场方向的位置和速度.

电子的体迁移率表示在外部电场作用下, 电子群平均位置的变化. 而通量迁移率则表示电子质心位置随时间的变化率, 二者满足以下关系:

$$\mu_b = \mu_f - S_1, \quad D_b = D_f - S_2, \quad (22)$$

式中 S_1 和 S_2 为非守恒碰撞效应. 在非守恒碰撞效应比较弱时, 体输运系数和通量输运系数具有相似的值. 但在高电场下, 当电离碰撞等其他非守恒碰撞占优时, 两者有较大的区别^[17].

汤森电离系数由空间电子个数随时间的变化计算求得, 有非固定电子个数和固定电子数两种方法^[7].

对于非固定电子数的方法, 电离系数可直接由电子个数的增长率得到:

$$\alpha = \frac{1}{\mu E} \frac{\ln N_e(t_2) - \ln N_e(t_1)}{t_2 - t_1}, \quad (23)$$

式中 $N_e(t_1)$ 和 $N_e(t_2)$ 分别代表 t_1 , t_2 时刻的电子数目.

固定电子数法以电离碰撞中随机注入一个电

子, 而吸附碰撞中随机移除一个电子的方式来维持模拟中电子总数目的恒定. 此时电离系数可通过平均电离频率和吸附频率计算求得:

$$\alpha = (\bar{\nu}_{\text{ion}} - \bar{\nu}_{\text{atta}}) / (\mu E), \quad (24)$$

式中 $\bar{\nu}_{\text{ion}}$ 和 $\bar{\nu}_{\text{atta}}$ 分别代表 t 时刻的电离频率和吸附频率. 两种方法对电离系数的计算结果影响不大 [7].

MCC 方法模拟中由于模拟粒子数有限等原因存在一定的噪声, 稳态后电子输运系数的值会在各自的平衡位置附近波动. 本文系统达稳态的判断是当电子的平均能量梯度没有明显变化且小数点后两位保持不变 [7,25].

2.4 模拟参数设置

设置背景氢原子气体的压强为 10^5 Pa, 温度为 293.15 K. 忽略空间电荷对场的影响, 约化电场 (E/n_0 , n_0 为氢原子气体密度) 范围为 10—1000 Td. 模拟时间步长 $\Delta t = 5 \times 10^{-14}$ s, 电子初始能量为 1 eV, 速度满足麦克斯韦分布. 使用非固定电子个数的方法, 初始时刻模拟电子个数为 50000. 电子散射有各向同性和各向异性两种, 能量分配有均分法、零分法和 Opal 法三种, 其中 Opal 法中的能量分配系数近似取 $B = 8$ eV [26]. 电子和氢原子弹性和电离碰撞中电子散射采用相同方式, 碰撞的截面数据从 IAEA 数据库 [27] 中获得, 如图 1 所示.

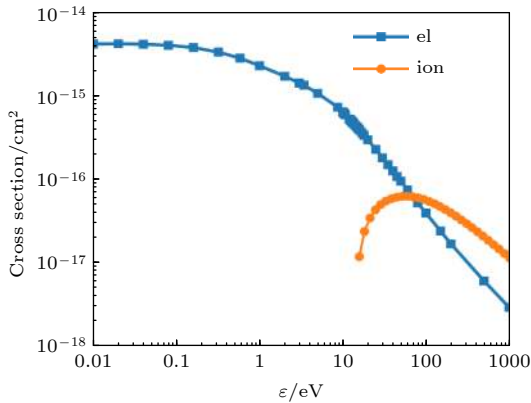


图 1 电子与氢原子弹性和电离碰撞的截面数据

Fig. 1. Elastic and ionization cross sections between electron and hydrogen atoms.

3 模拟结果分析

3.1 MCC 模型和 BOLSIG+ 软件结果对比

BOLSIG+ 软件 [28] 基于两项近似法求解电子玻尔兹曼方程, 是一种广泛使用的电子输运系数求

解工具. 在 MCC 模型中设置电子散射为各向同性, 并在 BOLSIG+ 软件使用与之相同的截面数据和能量分配方式 (均分法). 对比二者计算得出的电子能量分布函数及输运系数, 来检验本模型的准确性.

本模型和 BOLSIG+ 软件在约化电场为 10, 100, 500 和 1000 Td 时的电子能量分布函数如图 2 所示. 随着电场增大, 高能电子的概率随之增加, 曲线整体向右平移. 在约化电场为 10 和 100 Td 时, 二者得到的电子能量分布函数整体符合, 当约化电场增大到 500 Td 后, 则呈现出较大差异. 在 高能尾部, 本模型对应的 EEDF 有一定的波动, 这是 MCC 方法模拟中粒子数目有限, 对高能电子取样不足所致. 由于波动出现在 EEDF 量级很小的地方, 因此对电子输运系数的计算影响不大.

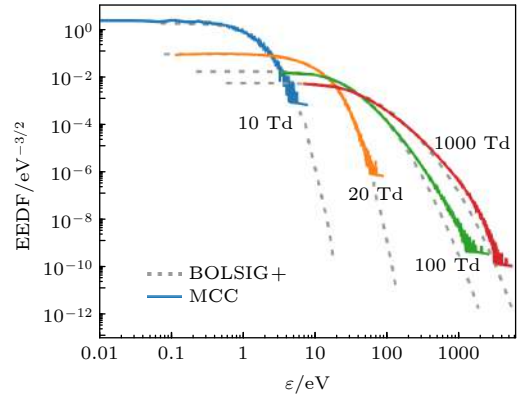


图 2 MCC 模型和 BOLSIG+ 软件在约化电场为 10, 20, 100 和 1000 Td 计算出的 EEDF 对比 (电子散射各向同性, 能量均分). 实线和虚线分别代表 MCC 模型和 BOLSIG+ 软件的计算结果

Fig. 2. Comparison of EEDF calculated by MCC model and BOLSIG+ software with isotropic scattering and equally energy partition under the reduced fields of 10, 20, 100 and 1000 Td. Dashed lines from MCC, and solid lines from BOLSIG+ software.

电子平均能量、电离系数、通量迁移率和通量扩散系数如图 3 所示. 可以看出, 电子的平均能量、通量迁移率和通量扩散系数与电场正相关, 而电离系数随着电场增加, 呈先增后减的变化趋势. 原因是当电场增强时, 电子获得更多能量, 沿电场方向速度增加, 迁移率和扩散系数变大. 而当电子能量很大时, 电离碰撞截面变小 (如图 1), 导致电离碰撞概率降低, 因此在高电场下电离系数减小. 对比图 2 在约化电场小于 200 Td 时, 两种方法的计算结果相符合. 随着电场增加, 二者差距逐渐增

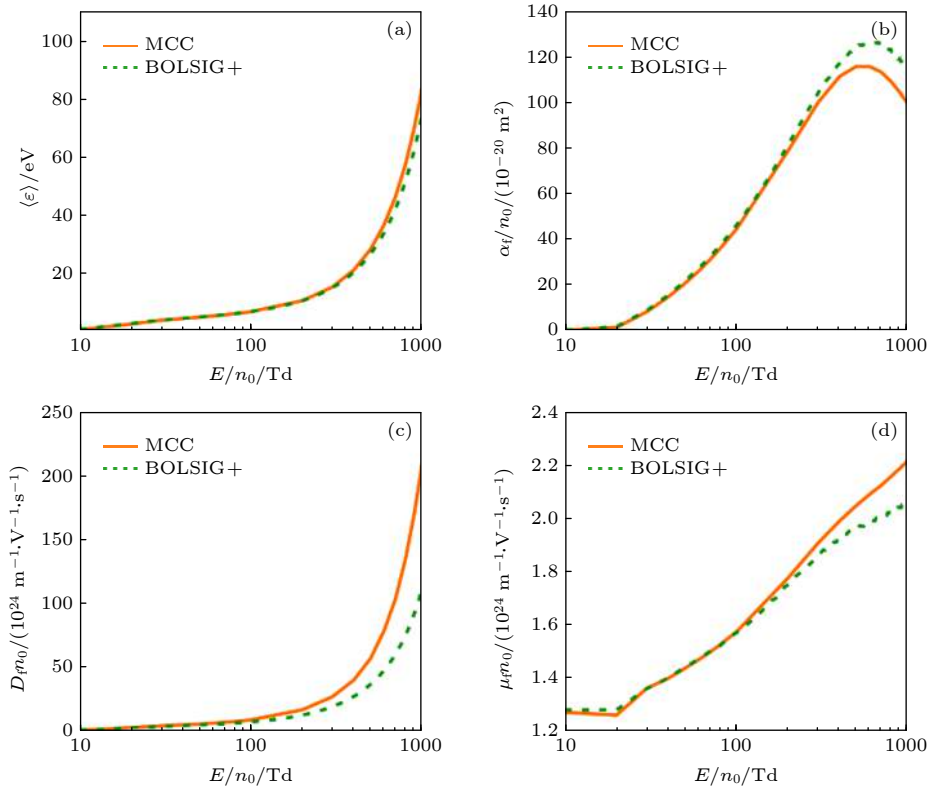


图3 MCC模型和BOLSIG+软件计算出的电子输运系数对比(电子散射各向同性,均分法)(a)电子平均能量;(b)电离系数;(c)横向扩散系数;(d)迁移系数.橙色实线和绿色虚线分别为使用BOLSIG+软件和MCC法计算的结果

Fig. 3. Comparison of electron transport coefficients calculated by MCC model and BOLSIG+ software with isotropic scattering and equally energy partition: (a) Mean energy; (b) Townsend ionization coefficients; (c) flux diffusion coefficients; (d) flux mobility. Dashed-orange lines from MCC, and solid-green lines from BOLSIG+ software.

大.当约化电场为1000 Td时,本模型计算的汤森电离系数比BOLSIG+软件计算的结果低12.83%,而通量迁移率、电子平均能量和扩散系数则分别高7.57%,12.28%和86.04%.高电场下的差异是由于电子速度分布呈强烈的各向异性,两项近似的有效性不再满足,导致BOLSIG+软件的计算结果有很大误差^[9].文献[4]中,当约化电场大于200 Td后,也表明两项近似计算得到的电子通量迁移率和通量扩散系数偏小,与图3(b)和图3(d)显示的结果一致.

3.2 电子散射对输运系数的影响

当电子能量很高时其散射呈强烈的各向异性,随着电子能量降低逐渐趋于各向同性^[23].为了研究不同电子散射对电子输运系数的影响,根据2.4节的模拟参数,采用Opal分配方式,依次设置电子散射为各向同性和各向异性,模拟电子的输运过程.

统计约化电场10,20和100 Td时的EEDF和电子沿电场方向速度(v_z)的概率函数(EVPF),由 dv_z 内的电子个数 dN_z 和总电子数 N_e 之比

$dN_z / (N_e dv_z)$ 来确定),如图4所示.图4(a)是两种散射方式下的EEDF,对高能量区域的电子,在10,20和100 Td时,各向异性散射条件下的EEDF均高于各向同性.图4(b)是电子沿电场方向速度的概率分布函数,近似满足高斯分布.对比同电场下不同散射方式的EVPF,可以发现考虑各向异性散射在高电子速度的概率更大.在约化电场为100 Td时,EVPF已开始偏离高斯分布,因而此时的电子速度分布函数不再满足各向同性,这也说明了两项近似法仅适用低电场的求解.

由图4可知,即使在低电场下,不同电子散射方式对电子能量分布函数和速度概率函数均有一定的影响,因此各向同性的假设会造成电子输运系数的计算误差.

不同散射下的电子平均能量、通量扩散系数、电离系数和通量迁移率随约化电场变化的关系如图5所示.图5(a),和图5(c)分别为电子的平均能量和通量扩散系数,二者具有相似的变化趋势.在各向异性散射下,电子以前向散射为主^[23],

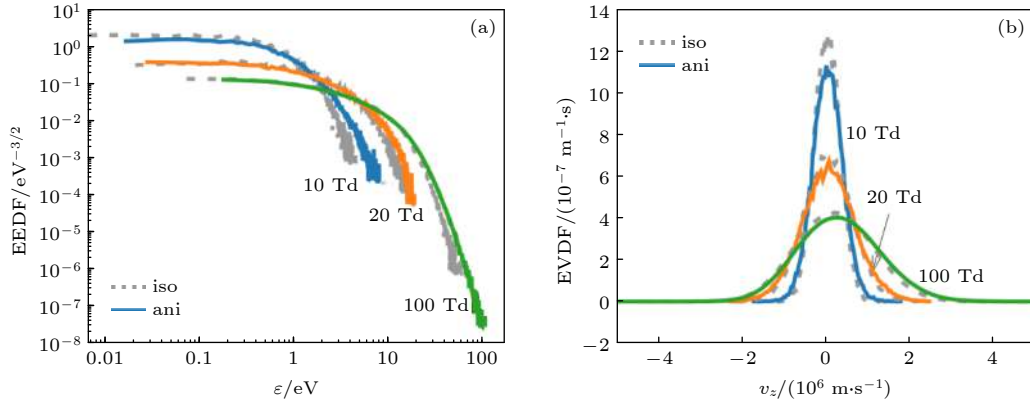


图 4 不同散射条件下电子能量分布函数和沿电场方向的速度概率函数在约化电场为 10, 20 和 100 Td 时的值 (a) 电子能量分布函数; (b) 沿电场方向电子速度概率函数. 图中实线为各向异性散射, 虚线为各向同性散射

Fig. 4. (a) Electron energy distribution function and (b) the probability function of velocity along the electric field direction with different scattering for reduced fields 10, 20 and 100 Td. Dashed lines from isotropic scattering, and solid lines from anisotropic scattering.

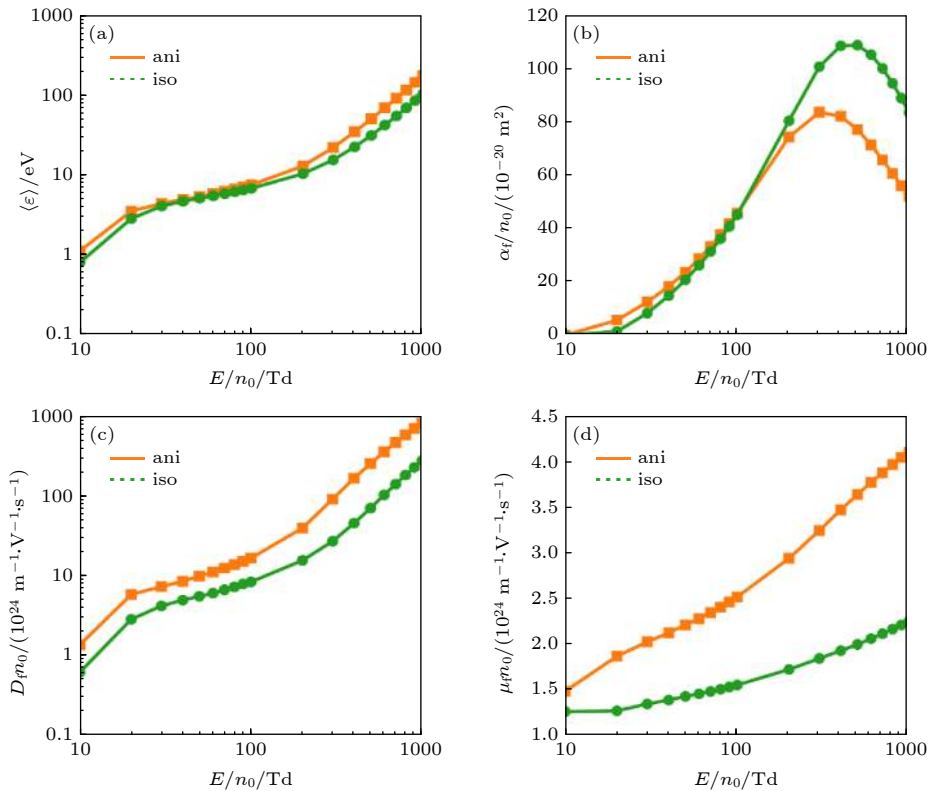


图 5 电子散射各向同性和各向异性条件下电子运输系数和平均能量的计算结果对比 (a) 电子平均能量; (b) 电离系数; (c) 横向扩散系数; (d) 迁移系数. 图中方块代表各向异性, 圆点代表各向同性

Fig. 5. Comparison of electron transport coefficients calculated assuming isotropic and anisotropic scattering: (a) Mean energy; (b) townsend ionization coefficients; (c) flux diffusion coefficients; (d) flux mobility. The orange rectangle and green circle represent the results assuming the anisotropic and isotropic scattering, respectively.

相比各向同性可以从电场中获得更多的能量, 即 $\langle \epsilon \rangle_{\text{ani}} > \langle \epsilon \rangle_{\text{iso}}$. 由于电子通量扩散系数的值随电子平均能量的增加而增大^[25], 因此电子散射各向异性时扩散系数比各向同性时大. 根据图 4(a) 中两种散射方式在 10 和 20 Td 的 EEDF, 各向异性散

射的高能电子更多, 所以低电场时, 各向异性散射仍有较大的平均电子能量和通量扩散系数.

图 5(b) 是电离系数, 可以看出, 不同电子散射下的电离系数数值的高低随电场呈交替变化. 当约化电场小于 100 Td 时, 各向异性散射的电离系数大

于各向同性, 在高电场时则相反. 对于 100 Td 内的约化电场, 平均电子能量较小, 此时电子以弹性碰撞为主. 根据图 5(a) 中约化电场 20 Td 时的 EEDF, 当电子能量大于电离能时, 有 $EEDF_{ani} > EEDF_{iso}$, 因此电子各向异性散射时发生电离碰撞的概率更大, 从而 $\alpha_{ani} > \alpha_{iso}$. 随着电场增强, 不同散射条件下的电子均从电场获得了较多能量, 高能电子增多, 导致电离碰撞的概率大大增加. 与各向异性散射的电子相比, 各向同性散射导致电子有更剧烈的无规行走, 从而增加了电子总的路径长度, 与背景气体发生电离碰撞的几率增多^[29], 所以在高电场时各向同性有更大的电离系数.

图 5(d) 为电子通量迁移率, 各向异性散射的值整体上高于各向同性. 在约化电场为 10 Td 时, 各向异性散射条件下得到的通量迁移率比各向同性高 17.51%, 到 1000 Td 时, 则高 81.67%. 考虑到电子散射角各向同性时, 仅有半数的电子会沿电场方向加速运动, 而其余的则会逆着电场方向减速运动. 在各向异性条件下, 电子呈前向散射, 碰撞后大多数会沿电场方向加速运动, 因此电子各向异性散射带来更大的迁移率. 根据 (20) 式通量迁移率的计算方法, μ_r 由沿电场方向的电子速度确定. 根据图 4(b) 中的 EVPF, 各向异性散射在电子速度高时有更大的概率, 所在低电场时, 各向异性散射也有较大的通量迁移率.

因此不同的电子散射会影响电子的输运过程, 即使低电场时也会造成电子输运系数的计算差异.

3.3 能量分配对电子输运系数的影响

修改 2.4 节模拟参数中电子能量为 25 eV, 速

度沿电场方向. 在模型中仅执行一次电离碰撞. 由于垂直电场方向速度均匀分布 ((4) 式), 这里仅给出电子的二维速度, 用 (v_z, v_x) 表示, 其中 v_x 为电子沿 x 方向的速度, 得到如图 6 所示的速度相图. 图 6(a) 为均分法, 此时二次电子与散射电子具有相同的能量, 在相空间上分布相似. 图 6(b) 对应 Opal 法, 二次电子能量较小, 其分布近似趋于各向同性, 而散射电子保留了碰撞后的大部分能量, 因此比均分法的散射电子有更强的各向异性. 图 6(c) 代表零分法, 散射电子获得电离碰撞后的全部能量, 速度分布呈现出强烈的各向异性. 相比均分法和零分法两种能量分配的极端情况, Opal 法中的二次电子分得的能量更适中, 三者满足 $\varepsilon_{ej, equal} > \varepsilon_{ej, Opal} > \varepsilon_{ej, zero}$. 考虑到电子的散射角可通过 $\tan\chi = v_x/v_z$ 表示, 因此不同分配方式间电子速度相图的差异说明了能量分配方式不仅决定了电离碰撞后电子的能量, 而且对其散射角的大小也有影响.

根据 2.4 节的模拟参数, 计算不同能量分配模式下的电子输运系数, 得到如图 7 所示的结果. 可以看出, 不同的能量分配关系对电子平均能量、电离系数、通量迁移率和通量扩散系数的影响主要体现在中高电场区域.

图 7(a) 为电子平均能量. 在高电场时, 能量均分的模式对应较低平均能量. 而在中间部分电场, 不同分配模式下的电子平均能量值的高低呈交替变化. 这主要是电子的碰撞类型由弹性碰撞向电离碰撞转变造成的^[14]. 以各向异性散射为例, 在约化电场为 1000 Td 时, 零分法计算出的电子平均能量比均分法高 45.76%. 这是因为均分法给了二次电子最大的能量值^[20], 在高电场下碰撞后的两个

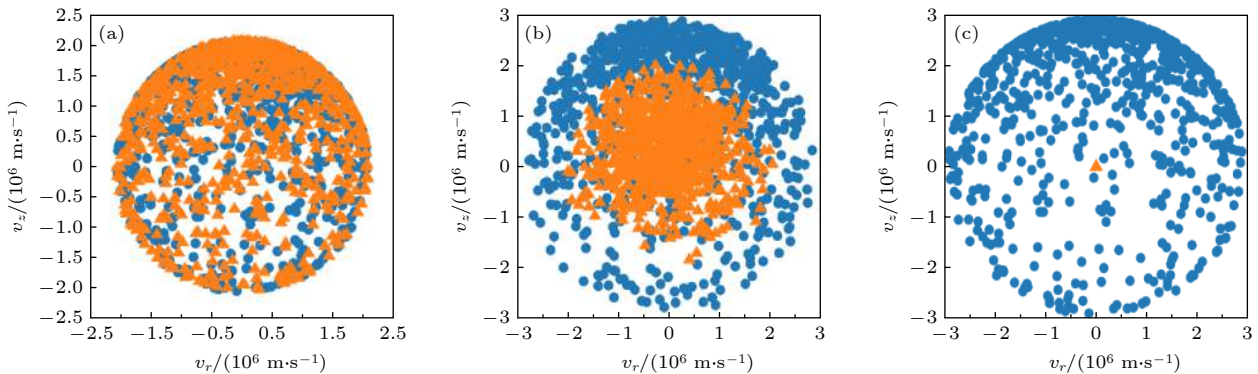


图 6 不同能量分配下电子的速度相图 (a) 均分法; (b) Opal 法; (c) 零分法. 图中圆点代表散射电子, 三角形代表二次电子
Fig. 6. The velocity phase diagram of electrons using different energy partitioning methods: (a) Equal-division method; (b) opal method; (c) zero-division method. Blue dots represent the primary electrons, and orange triangles represent secondary electrons.

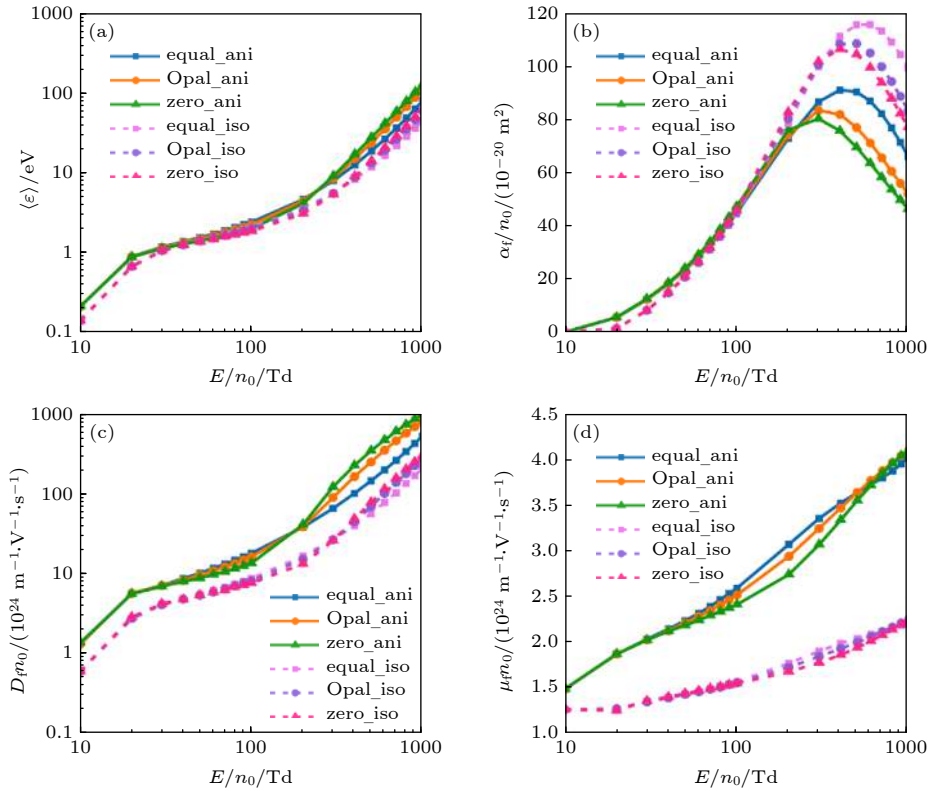


图 7 不同散射和能量分配方式下电子运输系数和平均能量的计算结果对比 (a) 电子平均能量; (b) 电离系数; (c) 横向扩散系数; (d) 迁移系数. 图中方块、圆点和三角依次代表均分、Opal 和零分法, 实线和虚线分别代表各向异性和各向同性散射

Fig. 7. Comparison of electron transport coefficients calculated with different scattering and energy partition methods: (a) Mean energy; (b) Townsend ionization coefficients; (c) flux diffusion coefficients; (d) flux mobility. The rectangle, circle, and triangles represent the calculation results using the equal-division, Opal and zero-division method, respectively. Dashed/solid lines are the results assuming the isotropic/anisotropic scattering.

电子均可继续发生电离碰撞, 导致系统有 $2\varepsilon_{\text{ion}}$ 的能量损失, 而零分法中只有散射电子能发生电离碰撞, 其能量损失为 ε_{ion} . 对于 Opal 法, 仅部分二次电子满足电离碰撞的条件, 系统的能量损失位于零分法和均分法之间, 因此 $\langle \varepsilon \rangle_{\text{zero}} > \langle \varepsilon \rangle_{\text{Opal}} > \langle \varepsilon \rangle_{\text{equal}}$. 在电场 50—200 Td, 由于电子能量比较低, 均分法中二次电子和散射电子的能量均较小, 而零分法中的散射电子由于保留了电离后的全部能量, 发生电离碰撞的概率大于均分法和 Opal 法, 导致其能量损失最大, 因而 $\langle \varepsilon \rangle_{\text{equal}} > \langle \varepsilon \rangle_{\text{Opal}} > \langle \varepsilon \rangle_{\text{zero}}$. 图 7(c) 为通量扩散系数, 与电子平均能量变化趋势相似^[25].

图 7(b) 为电离系数, 能量分配对高电场的电离系数影响更显著. 由图 7(a) 可知高电场下的电子平均能量高于 100 eV. 采用均分法时, 散射电子和二次电子的能量仍大于电离阈值, 两电子均可发生电离碰撞. 而 Opal 法中的二次电子, 只有部分能发生电离碰撞, 导致其电离系数小于均分法. 至于零分法, 仅有散射电子能发生电离碰撞, 导致电

离系数最小. 因此高电场下电离系数满足 $\alpha_{\text{equal}} > \alpha_{\text{Opal}} > \alpha_{\text{zero}}$.

图 7(d) 为通量迁移率. 在约化电场为 1000 Td 时, 零分法和 Opal 法的通量迁移率近似相等, 比均分法高 20.75% 左右, 而 200 Td 时, 三种模式的通量迁移率之差最大, 其中均分法比零分法高 49.58%. 这是因为电子的速度与能量的均方根成正比, 对于相同的电子能量, 均分法对应的电子速度大约是零分法的 $\sqrt{2}$ 倍. 当电场小于 200 Td 时, 由图 7(a) 中两种分配方式的平均电子能量近似相等, 且与电场正相关, 因此通量迁移率之间的差值也随电场的增加而逐渐变大. 当大于 200 Td 后, 零分法的平均电子能量逐渐高于均分法, 二者的通量迁移率之差变小. 最后在高电场强度下, 零分法的平均电子能量最高, 因此通量迁移率也最大.

对比图 7 中电子散射各向同性和各向异性的曲线, 可以发现电子散射为各向异性时, 能量分配对电子运输系数的影响比各向同性更大. 表 1 给出

了电场为 1000 Td 时, 均分法和零分法在不同电子散射下电子输运系数的差值. 可以看出, 两种分配方式在各向异性散射下对电离系数和通量迁移率的影响更为显著. 根据 3.2 节的模拟结果和上文电子速度相图的分析, 能量分配导致电离碰撞后电子散射角有一定的差异, 进而影响了电子输运系数的值.

表 1 约化电场为 1000 Td 时, 均分法和零分法在不同电子散射下电子输运系数的差异

Table 1. Difference between the electron transport coefficients using the equal and zero-division method, assuming anisotropic and isotropic scattering, respectively.

电子散射	$\langle \epsilon \rangle$	α	μ_r	D_r
各向同性	20.92%	28.67%	0.76%	30.50%
各项异性	29.22%	42.60%	20.75%	45.06%

注: 计算方法为 $(A_{\text{equal}} - A_{\text{zero}})/A_{\text{zero}}$, A 代表电子平均能量和输运系数的值.

4 结 论

本文建立了基于 MCC 方法的电子输运系数计算模型, 研究了不同电子散射和能量分配方式对电子输运系数的影响. 结果表明, 不同的电子散射和能量分配方式对电子输运系数有较大的影响, 对不同的电子散射, 即使在低电场条件下, 电子通量迁移率和通量扩散系数在各向异性散射下的值也高于各向同性. 在约化电场 10—100 Td 内, 电子各向异性散射的电离系数大于各向同性, 而当约化电场大于 100 Td 时则相反. 在不同的能量分配方式下, 电子平均能量和扩散系数的相对大小随电场交替变化. 在高电场时, 均分法有最大的电离系数和最小的通量迁移率, 而中等电场时情况则相反. 另外, 各向异性散射下能量分配对输运系数的影响高于各向同性. 因此模拟中需要考虑各向异性电子散射的影响, 而且在计算较高电场条件下的电子输

运系数时尤其要注意能量分配方式的选择.

参考文献

- [1] Samukawa S, Hori M, Rauf S, Tachibana K, Bruggeman P, Kroesen G, Whitehead J C, Murphy A B, Gutsol A F, Starikovskaia S 2012 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **45** 253001
- [2] Petrović Z L, Dujko S, Marić D, Malović G, Nikitović Ž, Šašić O, Jovanović J, Stojanović V, Radmilović-Radenović M 2009 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42** 194002
- [3] Kononov D A, Cocks D G, White R D 2017 *Eur. Phys. J. D* **71** 258
- [4] Stephens J 2018 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **51** 125203
- [5] Dutton J 1975 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **4** 577
- [6] Hagelaar G, Pitchford L 2005 *Plasma Sources Sci. Technol.* **14** 722
- [7] Rabie M, Franck C M 2016 *Comput. Phys. Commun.* **203** 268
- [8] Gallagher J, Beaty E, Dutton J, Pitchford L 1983 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **12** 109
- [9] Banković A, Dujko S, White R D, Buckman S, Petrović Z L 2012 *Eur. Phys. J. D* **66** 174
- [10] Kortshagen U, Parker G, Lawler J 1996 *Phys. Rev. E* **54** 6746
- [11] Yousfi M, Hennad A, Alkaa A 1994 *Phys. Rev. E* **49** 3264
- [12] Longo S 2000 *Plasma Sources Sci. Technol.* **9** 468
- [13] Dujko S, White R D, Petrović Z L 2008 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** 245205
- [14] Sun A B, Li H W, Xu P, Zhang G J 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 195101 (in Chinese) [孙安邦, 李晗蔚, 许鹏, 张冠军 2017 物理学报 **66** 195101]
- [15] Phelps A, Pitchford L 1985 *Phys. Rev. A* **31** 2932
- [16] Janssen J, Pitchford L, Hagelaar G, van Dijk 2016 *Plasma Sources Sci. Technol.* **25** 055026
- [17] Yang W, Meng X, Zhou Q, Dong Z 2019 *AIP Adv.* **9** 035041
- [18] Opal C, Peterson W, Beaty E 1971 *J. Chem. Phys.* **55** 4100
- [19] Vahedi V, Surendra M 1995 *Comput. Phys. Commun.* **87** 179
- [20] Yoshida S, Phelps A, Pitchford L 1983 *Phys. Rev. A* **27** 2858
- [21] Tzeng Y, Kunhardt E 1986 *Phys. Rev. A* **34** 2148
- [22] Zhou Q H, Dong Z W, Jian G Z, Zhou H J 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 205206 (in Chinese) [周前红, 董志伟, 简贵胃, 周海京 2015 物理学报 **64** 205206]
- [23] Surendra M, Graves D, Jellum G 1990 *Phys. Rev. A* **41** 1112
- [24] Jiang P, Economou D J 1993 *J. Appl. Phys.* **73** 8151
- [25] Nolan A, Brennan M J, Ness K, Wedding A 1997 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **30** 2865
- [26] Dalgarno A, Yan M, Liu W 1999 *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **125** 237
- [27] Janev R K, Smith J J <http://www-amdis.iaea.org> [2021-2-7]
- [28] Hagelaar G <http://www.bolsig.laplace.univ-tlse.fr/> [2021-2-7]
- [29] Belenguer P, Pitchford L 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 4780

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

Song Meng-Meng¹⁾²⁾ Zhou Qian-Hong^{1)†} Sun Qiang¹⁾ Zhang Han-Tian¹⁾
Yang Wei¹⁾ Dong Ye¹⁾

1) (*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China*)

2) (*Graduate School of China Academy of Engineering Physics, Beijing 100088, China*)

(Received 30 November 2020; revised manuscript received 31 January 2021)

Abstract

The veracity of a low temperature plasma model is limited by the accuracy of the electron transport coefficient, which can be solved by simulating the electron transport process. When simulating the transport properties of electrons, there are a variety of approaches to dealing with the scattering of electrons and energy partition between the primary-electrons and secondary-electrons after electron-neutral particles' collision. In this paper used is a model based on the Monte Carlo collision method to investigate the influence of scattering method and energy partition method on the electron transport coefficient. The electron energy distribution function, electron mean energy, flux mobility and diffusion coefficients, as well as the Townsend ionization coefficients are calculated in the hydrogen atom gas under a reduced electric field from 10 to 1000 Td. The calculation results show that the influence of the isotropic scattering assumption on the electron transport coefficients increases with reduced electric field increasing. However, even under a relatively low reduced electric field (10 Td), the calculated mean energy, flux mobility, and flux diffusion coefficient of electrons under the assumption of anisotropic scattering are 39.68%, 17.38% and 119.18% higher than those under the assumption of the isotropic scattering. The different energy partition methods have a significant influence on the electron transport coefficient under a medium-to-high reduced electric field (> 200 Td). Under a high electric field, the mean energy, flux mobility and flux diffusion coefficient calculated by the equal-partition method (the primary and secondary electrons equally share the available energy) are all less than the values from the zero-partition method (the energy of secondary-electrons is assigned to zero). While the change of Townsend ionization coefficient with reduced electric fields shows a different trend. The electron transport coefficient obtained by the Opal method lies between the values from the equal-partition method and the zero-partition method. In addition, considering the anisotropic scattering, the influence of energy partition method on the transport coefficient is higher than that under the assumption of isotropic scattering. This study shows the necessity of considering the anisotropic electron scattering for calculating the electron transport coefficient, and special attention should be paid to the choice of energy partition method under a high reduced electric field.

Keywords: electron scattering, energy partition, transport coefficient, Monte Carlo collision

PACS: 51.10.+y, 51.50.+v, 52.65.Pp

DOI: [10.7498/aps.70.20202021](https://doi.org/10.7498/aps.70.20202021)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12005023, 11775032, 11875094) and the Foundation of President of China Academy of Engineering Physics (Grant No. YZJLX2019013).

† Corresponding author. E-mail: zhou_qianhong@qq.com