



## 氧气空心阴极放电模拟

赵立芬 哈静 王非凡 李庆 何寿杰

### Simulation of hollow cathode discharge in oxygen

Zhao Li-Fen Ha Jing Wang Fei-Fan Li Qing He Shou-Jie

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 025201 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20211150

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211150>

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

#### 氩气空心阴极放电复杂动力学过程的模拟研究

Simulation on complex dynamics of hollow cathode discharge in argon

物理学报. 2019, 68(21): 215101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190734>

#### 大气压甲烷针-板放电等离子体中粒子密度和反应路径的数值模拟

Numerical simulation on particle density and reaction pathways in methane needle-plane discharge plasma at atmospheric pressure

物理学报. 2018, 67(8): 085202 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172192>

#### 不同缓冲气体中ArF准分子激光系统放电特性分析

Analysis of ArF excimer laser system discharge characteristics in different buffer gases

物理学报. 2020, 69(17): 174207 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200087>

#### 基于流体模型的碳纳米管电离式传感器的结构优化方法

Structure optimization of carbon nanotube ionization sensor based on fluid model

物理学报. 2021, 70(9): 090701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201828>

#### 混合手征活性粒子在时间延迟反馈下的扩散和分离

Diffusion and separation of binary mixtures of chiral active particles driven by time-delayed feedback

物理学报. 2020, 69(22): 220501 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200505>

#### 圆形复合式磁控溅射阴极设计及其放电特性模拟研究

Design of circular composite sputtering cathode and simulation of its discharge characteristics

物理学报. 2018, 67(7): 070703 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172576>

# 氧气空心阴极放电模拟\*

赵立芬<sup>1)</sup> 哈静<sup>2)</sup> 王非凡<sup>1)</sup> 李庆<sup>1)3)</sup> 何寿杰<sup>1)†</sup>

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 071002)

3) (河北大学静电技术研究所, 保定 071002)

(2021年6月18日收到; 2021年9月12日收到修改稿)

本文利用流体模型对气压为 266 Pa 的氧气环境下空心阴极放电的放电特性及不同粒子的生成损耗机制进行了模拟研究. 模型中包含 11 种粒子和 48 个反应. 在该模拟条件下, 周围阴极所对应的负辉区产生重叠, 表明放电中存在较强的空心阴极效应. 计算得到了不同带电粒子与活性粒子的密度分布. 带电粒子密度主要位于放电单元中心区域, 电子和负氧离子  $O^-$  是放电体系中主要的负电荷, 其密度峰值分别达到  $5.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$  和  $1.6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ ;  $O_2^+$  是放电体系中主要的正电荷, 其密度峰值为  $6.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ . 放电体系中同时存在丰富的活性氧粒子, 并且其密度远高于带电粒子, 按其密度高低依次为基态氧原子  $O$ 、单重激发态氧分子  $O_2(a^1\Delta_g)$ 、激发态氧原子  $O(^1D)$ 、臭氧分子  $O_3$ . 对电子、 $O^-$  和  $O_2^+$  的生成和损耗的反应动力学过程进行了深入分析, 同时给出了不同活性氧粒子的生成损耗路径概要图. 结果表明各粒子之间存在一个复杂的相互耦合的过程, 每一个反应在生成某种粒子的同时也在消耗相应的其他粒子, 最终各种粒子密度达到一个动态平衡.

**关键词:** 空心阴极放电, 氧气, 流体模型, 活性粒子, 生成损耗机制

**PACS:** 52.20.-j, 52.65.-y

**DOI:** 10.7498/aps.71.20211150

## 1 引言

氧气环境放电由于在放电过程中可以产生多种活性粒子, 在空气净化、表面改性、光刻胶灰化、去除聚合物薄膜等领域具有广阔的应用前景<sup>[1-3]</sup>. 特别是氧气放电中由于含有多种活性粒子, 可以有效地杀死对抗生素有抵抗力的细菌、真菌以及孢子在内的多种微生物, 使其成为一种清洁高效的杀菌技术, 在等离子体医学领域也受到越来越多的关注<sup>[4]</sup>. 另外, 气体放电也是产生臭氧的一种常用方法, 可以用于对饮用水进行消毒<sup>[5]</sup>.

空心阴极放电是一种常用的气体放电结构. 空心阴极放电中存在一种特殊的效应, 即空心阴极效

应 (HCE). 在一定条件下, 当电子的平均自由程小于空心阴极的内半径时, 负辉光区相互重叠, 阴极内部放电增强. 因此, HCE 可以在较低的电压下, 增强放电, 提高放电空间的电子密度<sup>[6-8]</sup>. 除了进行详尽的实验研究外, 特别是由于其特殊的空腔状结构, 数值模拟成为揭示空心阴极放电机理和特性的必要手段. Boeuf 课题组<sup>[9]</sup> 较早地对氩和氙等惰性气体环境下的空心阴极放电进行了模拟研究. Fu 等<sup>[10]</sup> 基于二维流体模型研究了氩中压强对串联空心阴极放电参数的影响. Cong 等<sup>[11]</sup> 模拟研究了弧光放电模式下空心阴极在不同半径、厚度和表面发射率下, 电子密度和温度、气体温度和阴极壁温的空间变化. Jiang 等<sup>[12]</sup> 研究了射频空心阴极放电中电子能量增益和维持放电的机制. Xia 等<sup>[13]</sup>

\* 国家自然科学基金 (批准号: 51777051)、河北省高等学校科学研究项目 (批准号: ZD2020197) 和河北省自然科学基金 (批准号: E2021201037) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: heshouj@hbu.edu.cn

则研究了氩气环境下三明治型微空心阴极的放电特性. Wei 等<sup>[14]</sup>研究了脉冲电源激励模式下的大气压氩气微空心阴极放电的特性. Hou 等<sup>[15]</sup>则重点研究了空心阴极位降区随参数的变化规律. 本课题组<sup>[16]</sup>在前期工作中也对氩气和氦气环境下的空心阴极放电进行了研究. 关于氧气或含氧环境下的空心阴极放电也进行了一定的实验研究<sup>[17–21]</sup>. 与其他放电形式相比, 利用空心阴极结构可以在较低的能耗下获得更高密度的活性粒子<sup>[17]</sup>. Bazhenov 等<sup>[18]</sup>在低气压氧气环境下对柱型空心阴极放电的放电模式转换进行了研究. Yamatake 等<sup>[19]</sup>则将微空心阴极放电作为臭氧发生器, 发现利用此装置可以得到较高的臭氧浓度和转化效率. Qin 等<sup>[20]</sup>对空气环境下空心阴极放电中的不稳定性进行了研究.

阴极溅射是空心放电中一种常见的现象, 特别是在高压高电流密度下比较明显. 这种现象对于电极会产生一定的腐蚀. 研究发现通过水冷、流动气体降温 and 选择合适的阴极材料可以有效地降低这种溅射和腐蚀. 例如, Matsui 等<sup>[21]</sup>利用铱作为空心阴极材料在氧气环境下进行了电弧空心阴极放电的实验研究. 在放电电流为几十安培, 气体温度高于 1000 K 的实验条件下, 稳定放电的时间可以达到 3 h 以上.

总之, 对空心阴极放电的模拟研究主要集中在惰性气体工作介质下. 对于分子气体, 特别是电负性气体空心阴极放电, 虽然实验中已有涉及, 但是由于内部化学反应比较复杂, 目前研究较少. 特别是对氧气环境下的空心阴极放电的模拟研究未见报道. 本文利用流体模型模拟研究了氧气空心阴极放电的放电特性, 得到了电势、电场和粒子密度的空间分布以及放电空间中带电粒子和活性氧粒子的生成损耗机制.

## 2 放电结构和放电模型

### 2.1 放电的单元结构

图 1 为空心阴极放电结构示意图. 阴极为一金属圆筒, 长度  $D_1 = 1.0$  cm, 内直径  $D_2 = 1.0$  cm. 阳极是两个圆盘, 直径也为 1.0 cm. 阴极边缘和阳极面之间的间距  $d = 0.05$  cm. 气体环境假设为纯氧气, 气压为 266 Pa, 阳极电压为 500 V, 阴极电压为 0 V. 本模型假设外部电路电阻为 0  $\Omega$ . 由于

放电结构具有轴对称性, 所以模拟中可以将上述三维放电结构简化为二维结构, 建立  $r, z$  坐标如图 1 所示.

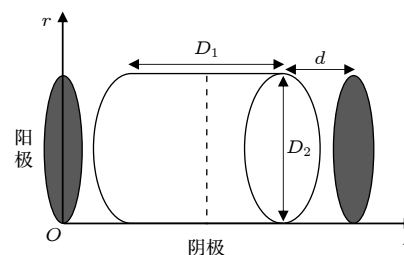


图 1 圆柱形空心阴极放电单元截面图 (虚线  $z = 5.5$  mm)

Fig. 1. Cross section of cylindrical hollow cathode discharge (dashed line  $z = 5.5$  mm).

低气压氧气放电主要用于表面改性和材料制备领域, 高压甚至大气压氧气放电更适合用于杀菌及医疗领域. 本文重点研究内容为放电空间内各种粒子的分布特性及其动力学过程. 本模型包含 11 种粒子, 48 种反应, 同时空心阴极放电结构相较于其他放电形式具有更加强烈的放电. 因此当气压较高时有可能出现计算不稳定和计算时间太长等问题. 本课题组已有研究结果也证明了在与图 1 相近的放电结构下模型的可靠性<sup>[22]</sup>. 同时, 本课题组预备在后期对此结构下氧气环境下的空心阴极放电进行实验研究. 因此本模型假设在以上所述较大尺寸和低气压氧气环境下进行模拟研究. 模拟结果也表明在此参数条件下可以产生明显的空心阴极效应. 同时由气体放电的相似性可知, 等离子体参量与放电电极尺寸和气压呈一定比例关系, 因此本模型所计算得到的结果对于较高气压下的空心阴极放电也具有参考价值.

### 2.2 放电过程的主要反应

本模型考虑的放电反应粒子包括: 基态氧分子  $O_2$ 、电子  $e$ 、负氧原子离子  $O^-$ 、正氧分子离子  $O_2^+$ 、负氧分子离子  $O_2^-$  和  $O_3^-$ 、氧四分子离子  $O_4^+$ 、基态氧原子  $O$ 、激发态氧原子  $O(^1D)$ 、单重激发态氧分子  $O_2(a^1\Delta_g)$  和臭氧分子  $O_3$ . 氧气放电中的粒子反应可以达到近百种. 参考其他形式氧气放电的数值模拟结果, 本模型选择了其中较为重要的 48 种反应过程, 包括直接电离、基态激发、两体碰撞、三体碰撞、解激发等反应. 表 1 中给出了放电模型中考虑的粒子间的反应, 反应系数取自每个反应右上角所标文献.

表 1 放电反应类型  
Table 1. Discharge reactions in the model.

反应标号	反应方程	反应标号	反应方程
G1	$e + O_2 \rightarrow 2O + e^{[23]}$	G25	$O_3 + O(^1D) \rightarrow O_2 + 2O^{[26]}$
G2	$e + O_2 \rightarrow O_2^+ + 2e^{[23]}$	G26	$O_3 + O(^1D) \rightarrow 2O_2^{[26]}$
G3	$e + O \rightarrow O + 2e^{[23]}$	G27	$O_2^+ + O_2 + O_2 \rightarrow O_4^+ + O_2^{[29]}$
G4	$e + O_2 \rightarrow O + O(^1D) + e^{[23]}$	G28	$O_4^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + O_2 + O_2^{[30]}$
G5	$e + O \rightarrow O(^1D) + e^{[23]}$	G29	$O_4^+ + O \rightarrow O_2^+ + O_3^{[29]}$
G6	$e + O_2(a^1\Delta_g) \rightarrow 2O + e^{[24]}$	G30	$e + O(^1D) \rightarrow O + e^{[23]}$
G7	$e + O_2 \rightarrow O^- + O^{[23]}$	G31	$O_3 + O_2 \rightarrow 2O_2 + O^{[25]}$
G8	$e + O_3 \rightarrow O_2^- + O^{[23]}$	G32	$O^- + O_2(a^1\Delta_g) \rightarrow O_3 + e^{[23]}$
G9	$e + O_2^+ \rightarrow 2O^{[25]}$	G33	$O^- + O_2(a^1\Delta_g) \rightarrow O_2^- + O^{[23]}$
G10	$O^- + O_2^+ \rightarrow 3O^{[25]}$	G34	$O_3 + O \rightarrow O_2(a^1\Delta_g) + O_2^{[31]}$
G11	$O^- + O \rightarrow e + O_2^{[25]}$	G35	$O_3 + O(^1D) \rightarrow O_2(a^1\Delta_g) + O_2^{[32]}$
G12	$O^- + O_2 \rightarrow O_3 + e^{[25]}$	G36	$O_3 + O(^1D) \rightarrow 2O_2(a^1\Delta_g)^{[32]}$
G13	$O_2^+ + O_2^- \rightarrow 2O_2^{[26]}$	G37	$O_4^+ + O_3^- \rightarrow 3O_2 + O^{[33]}$
G14	$O_3 + O \rightarrow 2O_2^{[25]}$	G38	$O_4^+ + O \rightarrow O_2 + O_3^{[33]}$
G15	$O_3 + O_2^- \rightarrow O_3^- + O_2^{[26]}$	G39	$O_4^+ + O_2(a^1\Delta_g) \rightarrow O_2^+ + O_2 + O_2^{[29]}$
G16	$O^- + O_3 \rightarrow O_3^- + O^{[26]}$	G40	$e + O_4^+ \rightarrow O_2 + O_2^{[34]}$
G17	$O_3^- + O \rightarrow O_2^- + O_2^{[27]}$	G41	$O_4^+ + O_2^- \rightarrow 3O_2^{[33]}$
G18	$O_3^- + O_2^+ \rightarrow O_3 + 2O^{[28]}$	G42	$O_4^+ + O \rightarrow O + O_2 + O_2^{[35]}$
G19	$O_2(a^1\Delta_g) + O_2 \rightarrow 2O_2^{[25]}$	G43	$O_4^+ + O_2^- \rightarrow O + O + O_2 + O_2^{[35]}$
G20	$O_2(a^1\Delta_g) + O \rightarrow O + O_2^{[25]}$	G44	$O_4^+ + O_3^- \rightarrow O_3 + O_2 + O_2^{[35]}$
G21	$O(^1D) + O \rightarrow 2O^{[23]}$	G45	$O_2^- + O \rightarrow O^- + O_2^{[32]}$
G22	$O(^1D) + O_2 \rightarrow O + O_2^{[26]}$	G46	$O + O + O_2 \rightarrow O + O_3^{[36]}$
G23	$O(^1D) + O_2 \rightarrow O + O_2(a^1\Delta_g)^{[26]}$	G47	$O + O_2 + O_2 \rightarrow O_2 + O_3^{[36]}$
G24	$O_3 + O_2(a^1\Delta_g) \rightarrow 2O_2 + O^{[25]}$	G48	$O + O_2 + O_3 \rightarrow O_3 + O_3^{[36]}$

### 2.3 流体模型

本文采用气体放电中应用较广的迁移-扩散近似流体模型进行数值模拟. 该流体模型方程组包括粒子和电子能量的连续性方程、输运方程以及泊松方程. 在低温等离子体的放电研究中, 离子和中性气体的温度远小于电子温度, 可采用冷离子近似, 即离子温度和中性气体温度相同. 但是当放电处于较高电流密度时气体温度将会达到几百甚至上千开尔文, 对放电特性将会产生较为明显的影响. 但是由已有空心阴极放电的数值模拟研究表明, 当电流密度较低时 ( $I \approx 1 \text{ mA/cm}^2$ ), 气体温度没有明显上升, 可以将离子和中性气体温度假设为室温<sup>[10,37]</sup>. 另外, 在其他放电结构氧气环境放电实验中, 即使气压较高时, 一般也将气体温度设为一个与室温接近的定值, 模拟结果也可以比较好地反映其放电特性<sup>[38,39]</sup>. 本文放电模型模拟得到的放电电流密度为  $0.42 \text{ mA/cm}^2$ . 因此本模型将气体温度

假设为 300 K. 同时也假设在气体温度为 600 K 的条件下进行模拟研究. 模拟结果表明 300 K 和 600 K 气体温度下模拟得到的电势、电场、粒子密度分布等参数分布特性基本相同. 而从定量角度, 对于电场强度、电负度、电子、 $O^-$ 、 $O_2^+$ 、 $O_2^-$  和  $O_3^-$ 、 $O_4^+$ 、 $O$  和  $O(^1D)$  密度的影响不超过 1%; 对于臭氧分子  $O_3$  密度的影响约为 5%. 因此本文将气体温度假设为常温定值不会对本文的核心内容产生明显影响.

粒子连续性方程:

$$\frac{\partial n_j}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_j = S_j, \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_e \varepsilon_e}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_{e\varepsilon} = S_\varepsilon, \quad (2)$$

其中,  $n_j$  为粒子密度,  $j = e, p, n$  和  $m$  时分别表示电子、正离子 ( $O_2^+$ ,  $O_4^+$ )、负离子 ( $O^-$ ,  $O_2^-$  和  $O_3^-$ ) 和中性粒子 ( $O$ ,  $O(^1D)$ ,  $O_2(a^1\Delta_g)$ ,  $O_3$ );  $n_e \varepsilon_e$  代表

电子能量密度;  $\varepsilon_e$  是平均电子能量,  $\varepsilon_e = \frac{3}{2}k_B T_e$ , 式中  $k_B$  为玻尔兹曼常数,  $T_e$  为电子温度;  $S_j$  和  $S_e$  分别为不同粒子和电子能量的净产生项.  $J_j$  和  $J_{ee}$  分别代表粒子流和电子能量流密度.

$J_j$  和  $J_{ee}$  的表达式分别为

$$J_j = \alpha\mu_j n_j E - D_j \nabla n_j, \quad (3)$$

$$J_{ee} = -\frac{5}{3}\mu_e(n_e \varepsilon_e) E - \frac{5}{3}D_e \nabla(n_e \varepsilon_e), \quad (4)$$

式中,  $u_j$  和  $D_j$  分别为粒子的迁移率和扩散系数<sup>[40]</sup>,  $E$  为电场. 对于负粒子、正粒子和中性粒子  $\alpha$  分别为  $-1$ ,  $1$  和  $0$ . 电子迁移率与扩散系数之间的关系遵循爱因斯坦方程:

$$u_e/D_e = kT/q_e, \quad (5)$$

(5) 式中  $q_e$  为基本电荷量.

电势通过泊松方程计算得到:

$$\nabla^2 \varphi = -q_e(n_p - n_e - n_n)/\varepsilon, \quad (6)$$

其中  $\varphi$  为电势,  $\varepsilon$  为介电常数.

本模型边界条件如下所述<sup>[41]</sup>. 电极边界处电子流密度为

$$J_e = \frac{1}{4}\nu_{th}^e n_e \hat{n} + (W-1)\mu_e n_e E - \frac{1}{2}D_e \nabla n_e - \sum_j W\gamma_j J_j. \quad (7)$$

电极边界处离子流密度为

$$J_j = \frac{1}{4}\nu_{th}^j n_j \hat{n} + (W-1)\mu_j n_j E - \frac{1}{2}D_j \nabla n_j, \quad (8)$$

其中,  $\nu_{th}^j = [8kT_j/(\pi m_j)]^{1/2}$  为热速度,  $\hat{n}$  为指向电极表面的单位矢量,  $W$  为常数. 当电场方向指向电极表面时  $W = 1$ ; 否则  $W = -1$ .  $\gamma_j$  为粒子  $j$  撞击电极表面的二次电子发射系数.

在气体开放边界处, 利用对称性边界条件. 假设粒子流密度和电场强度的垂直于边界的分量为  $0$ , 即

$$J_j \cdot \hat{n} = 0, \quad E \cdot \hat{n} = 0. \quad (9)$$

本模型通过 Shcatter-Gummel 有限差分法对连续性方程进行联立求解, 并使用半隐式格式对泊松方程和电场强度进行计算.

### 3 模拟结果

#### 3.1 放电的基本特性

图 2(a) 是放电空间的电势分布图. 由等势线分布的疏密程度可知, 放电空间可分为两个部分,

即放电单元中心处的负辉区和阴极两侧附近的阴极位降区. 阴极位降区厚度约为  $2.8$  mm, 极间电压降主要位于阴极位降区. 随着向负辉区的靠近, 电势由两侧阴极电极处的  $0$  V 迅速上升到约  $489$  V, 因此径向电场在该区域很强, 其峰值达到约  $3.0$  kV/cm, 如图 2(b) 所示. 而在放电单元的中心区域, 即负辉区, 电势降很低, 约为  $16$  V, 因此该区域电场强度很低, 只有  $0.16$ — $25$  V/cm, 与 Laca 等<sup>[42]</sup> 测量得到的实验结果相符. 另外, 由图可知, 在放电单元的中心区域存在一明显的环状等势线. 这表明, 周围阴极所对应的负辉区已产生重叠, 表明该条件下存在较强的空心阴极效应.

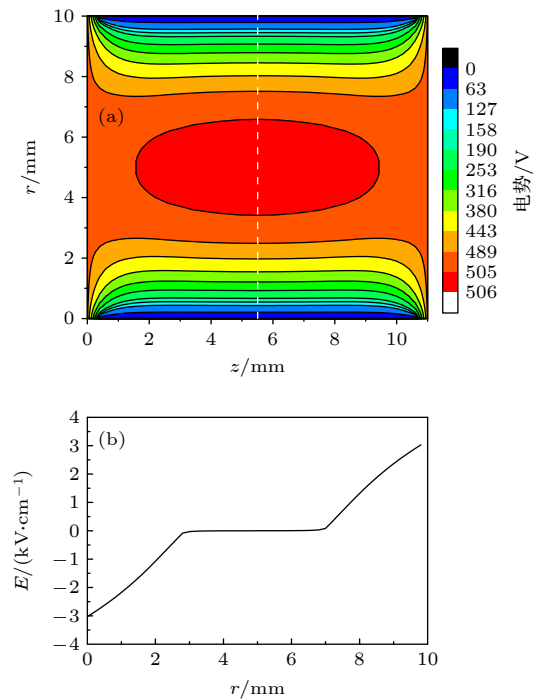


图 2 (a) 电势二维分布图; (b)  $z = 5.5$  mm (图 (a) 虚线) 处径向电场分布图

Fig. 2. (a) Two dimensional potential distribution; (b) radial electric field distribution at  $z = 5.5$  mm (dashed line in (a)).

图 3 为放电体系中电子、O 和  $O_2^+$  二维空间密度分布图, 图中白色虚线表示  $z = 5.5$  mm 位置. 图 4(a) 同时给出了  $z = 5.5$  mm 时, 带电粒子密度一维径向分布图. 对于所有带电粒子而言, 其在放电空间具有相似分布特性. 靠近阴极处粒子密度较低, 随着向放电中心处的靠近, 带电粒子密度逐渐升高, 粒子密度峰值均出现在放电单元中心处. 在所有负电荷中, 电子所占比重最高, 密度峰值达到为  $5.0 \times 10^{11}$  cm<sup>-3</sup>. O 离子在整个放电空间内也具有较高的密度分布, 其密度峰值达到  $1.6 \times 10^{11}$  cm<sup>-3</sup>.

除了电子和  $O^-$  离子外, 放电空间内还包含  $O_2^-$  和  $O_3^-$  两种负离子, 但是其密度远低于电子和  $O^-$  离子密度, 这与 Zhou<sup>[43]</sup> 在其他放电形式下得到的研究结果相似.

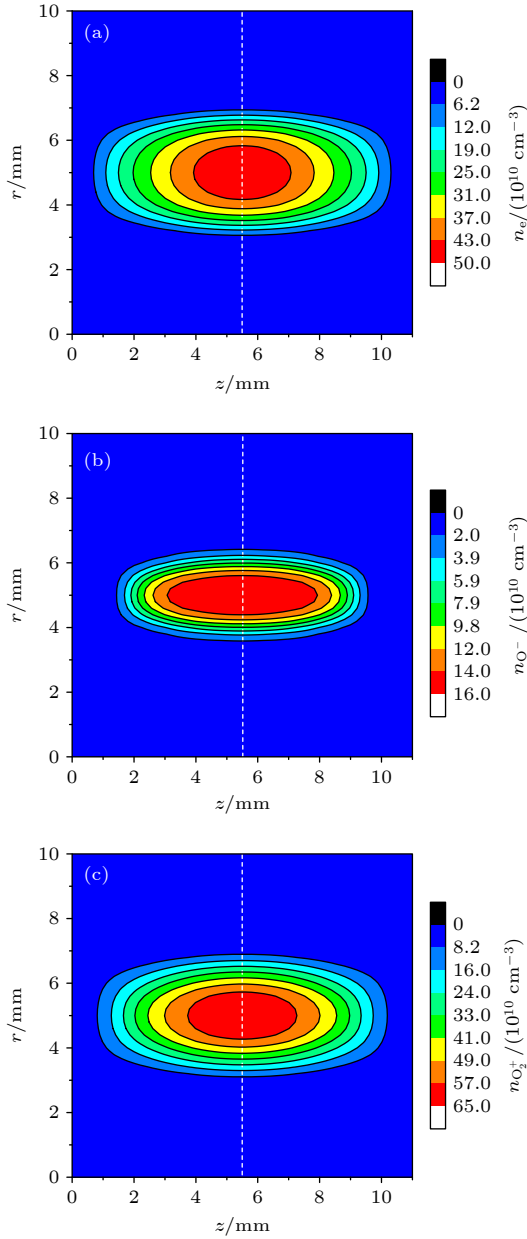


图3 二维空间粒子密度分布图 (a) 电子; (b)  $O^-$ ; (c)  $O_2^+$   
 Fig. 3. Two dimensional particles density distribution: (a) Electron; (b)  $O^-$ ; (c)  $O_2^+$ .

正离子包括  $O_2^+$  和  $O_4^+$ , 其中  $O_2^+$  离子密度在整个放电空间内要高于  $O_4^+$  离子密度约 3 个数量级, 是放电空间主要的正离子. 另外, 由图 4(a) 可以发现, 阴极位降区  $O_2^+$  离子的密度远高于电子密度和  $O^-$  离子密度. 而在放电单元中心区域正电荷和负电荷密度基本相等. 因此由泊松方程可得, 靠近阴极

附近的阴极位降区存在很强的电场强度分布, 而负辉区区域电场强度很小, 与图 2(b) 径向电场分布特性相符. 在相近的气压条件下, 本文计算得到的带电粒子密度要高于平行板直流放电中得到的结果<sup>[42]</sup>.

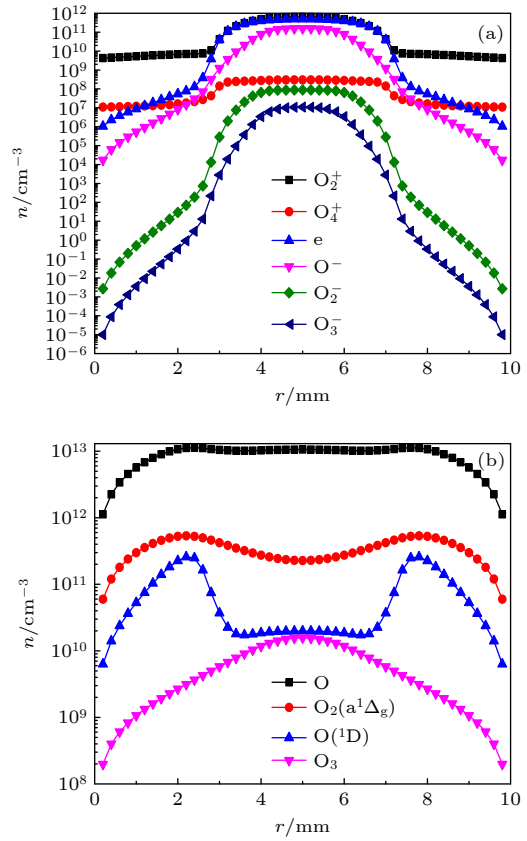


图4  $z = 5.5$  mm 时, 粒子密度径向分布图 (a) 带电粒子; (b) 活性氧粒子  
 Fig. 4. Radial distribution of particle density when  $z = 5.5$  mm: (a) Charged particles; (b) reactive oxygen species.

氧气环境下放电的特性之一是放电过程中可以产生大量的活性粒子. 图 5 给出了  $O$  和  $O_2(a^1\Delta_g)$  二维空间密度分布图, 图中白色虚线为  $z = 5.5$  mm 位置. 图 4(b) 同时给出了  $z = 5.5$  mm 时, 不同种类活性氧粒子密度一维径向分布图. 4 种活性粒子中, 基态氧原子  $O$  在放电空间的密度最高, 这与其他放电形式中得到的结果类似<sup>[44]</sup>. 由图 5(a) 可以看出基态氧原子密度呈“哑铃型”分布, 密度由阴极附近向鞘层边界逐渐增大, 达到峰值密度后, 在负辉区区域保持相对稳定, 这与 Yang 等<sup>[45]</sup> 计算得到的粒子密度分布轮廓相似. 整个放电空间内氧原子密度几乎都超过了  $1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ , 其密度峰值达到  $1.1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ , 是其他三种活性粒子密度峰

值的几十至几百倍. 激发态氧分子  $O_2(a^1\Delta_g)$  在放电空间中也具有较高的粒子密度, 其峰值为  $5.4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ .  $O_2(a^1\Delta_g)$  与  $O(^1D)$  均呈双驼峰分布,  $O(^1D)$  在鞘层更陡.  $O_3$  密度在整个放电空间内最低. 这是由于臭氧碰撞面积较大, 更容易发生碰撞分解, 因此在空间不容易积累, 造成密度会比其他中性粒子低.

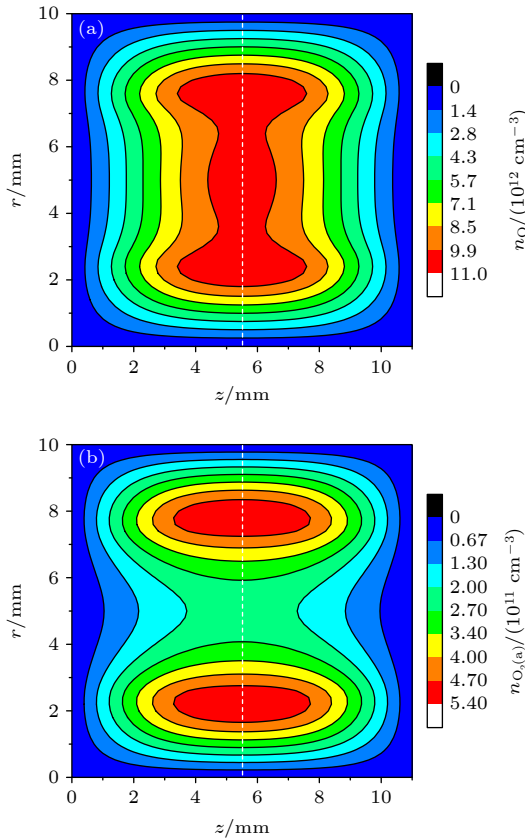


图 5 二维粒子密度分布图 (a) O; (b)  $O_2(a^1\Delta_g)$

Fig. 5. Two dimensional particles density distribution: (a) O; (b)  $O_2(a^1\Delta_g)$ .

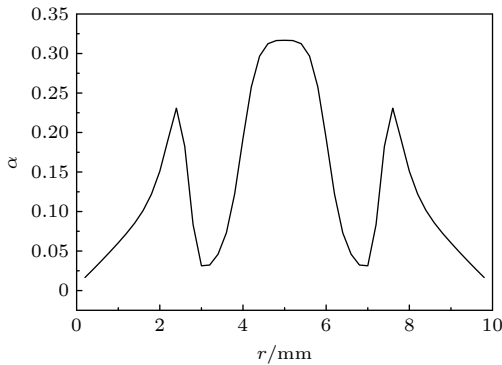


图 6  $z = 5.5 \text{ mm}$  处, 电负度  $\alpha$  径向分布图

Fig. 6. Radial distribution of electronegativity at  $z = 5.5 \text{ mm}$ .

氧气属于电负性气体, 电负性等离子体的电负性程度可通过电负度即负离子密度与电子密度的比值  $\alpha = n_-/n_e$  衡量. 图 6 给出了  $z = 5.5 \text{ mm}$  时, 电负度的径向分布图, 由图 6 可知  $\alpha$  由两侧阴极电极先逐渐增大, 在鞘层边界附近达到一个较高值后又快速降低, 到达负辉区后又逐渐上升并达到最大值约 0.32. 因此在本模型条件下放电处于弱电负性, 这与 Hong 等<sup>[46]</sup> 所得研究结果一致.

### 3.2 气体反应的动力学过程

模拟结果表明, 粒子的反应速率较高值主要分布在轴向放电单元中心的区域, 因此下面关于粒子的生成和消耗的反应速率只给出了  $z = 5.5 \text{ mm}$  处径向反应速率的一维分布图. 另外, 为比较不同反应对不同粒子产生和消耗的相应贡献, 计算得到了相应反应在放电空间内生成或消耗某种粒子总的反应速率占全部反应生成或消耗该粒子的反应速率的百分比.

#### 3.2.1 电子生成与损耗的主要反应机制

图 7 为  $z = 5.5 \text{ mm}$  处, 电子生成与消耗反应速率的径向分布图. 表 2 为不同反应在整个放电空间内对电子生成或消耗的贡献比例. 显然, 不同反应过程对新电子产生与损耗的贡献有很大不同. 由图 7(a) 可知, 在整个放电空间内电子与基态氧分子的碰撞产生的直接电离反应 G2 反应速率远高于其他反应对应的电子产生速率, 是产生电子的主要过程, 占电子产生总量的 99.875%. 在阴极位降区和负辉区区域, 基态直接电离反应速率较高, 而在阴极位降区和负辉区交汇处, 基态直接电离速率相对较低. 这种分布状态与电子能量和电子密度分布特性有关. 直接电离速率  $S_e = n_e N r_e$ , 在基态氧分子密度  $N$  一定的情况下, 直接电离速率由电子密度  $n_e$  和直接电离速率系数  $r_e$  决定. 图 8 为  $z = 5.5 \text{ mm}$  处, 平均电子能量和电子密度的径向分布图. 负辉区平均电子能量约为 0.70—0.78 eV, 对应的电离反应速率系数约为  $10^{-12} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ , 但是该区域存在很高的电子密度. 而在阴极位降区, 虽然电子密度较低, 但是由于存在很强的径向电场, 电子被加速获得能量, 使得该区域产生大量高能电子, 平均电子能量约为 10—47 eV, 对应电离反应速率系数为  $10^{-9} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ , 因此也存在较高的电离速率. 而在阴极位降和负辉区交汇区域, 与阴极位降区相比电子

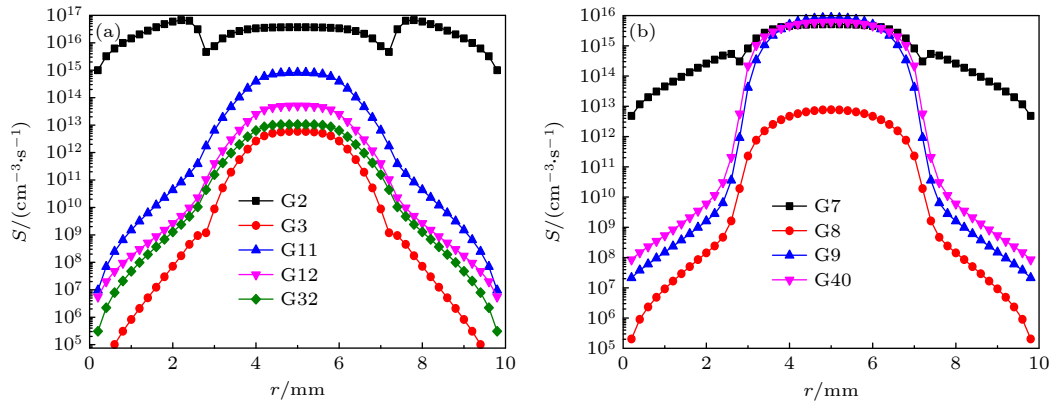


图 7  $z = 5.5$  mm 处, 电子 (a) 生成与 (b) 消耗反应速率的径向分布图

Fig. 7. Radial distribution of reaction rates of (a) generation and (b) consumption of electronics at  $z = 5.5$  mm.

表 2 电子生成与消耗反应的相应贡献

Table 2. The ratio of electron generation and consumption for different reactions.

电子生成反应	贡献/%	电子消耗反应	贡献/%
G2: $e + O_2 \rightarrow O_2^+ + 2e$	99.875	G7: $e + O_2 \rightarrow O^- + O$	42.418
G11: $O^- + O \rightarrow e + O_2$	0.114	G40: $e + O_4^+ \rightarrow O_2 + O_2$	31.748
G12: $O^- + O_2 \rightarrow O_3 + e$	0.008	G9: $e + O_2^+ \rightarrow 2O$	25.808
G32: $O^- + O_2(a^1\Delta_g) \rightarrow O_3 + e$	0.002	G8: $e + O_3 \rightarrow O_2^- + O$	0.026
G3: $e + O^- \rightarrow O + 2e$	$7.0 \times 10^{-4}$		

能量出现迅速降低, 而电子密度却并未达到一个较高值, 造成该区域直接电离速率出现较低值. 其他产生电子的反应包括 O 离子参与的两体碰撞反应 G11, G12, G32 和 G3, 它们对电子产生的贡献相比于反应 G2 是可忽略的.

由图 7(b) 可知, 电子附着反应 G7, G9 和 G40 是电子消耗的主要反应机制, 分别占电子损失的 42.418%, 25.808%, 31.748%. G7 反应速率由阴极

附近逐渐增大, 在阴极位降区与负辉区交汇处略有降低, 之后继续增大, 在放电中心处达到最大值, 与 G2 直接电离反应相似, 最大反应速率值为  $5.2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ . G9, G40 具有相同的分布特性, 负辉区的电离速率远大于阴极位降区, 反应速率最大值位于放电单元中心处, 分别为  $8.5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ ,  $6.2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ . 电子与臭氧分子的基态电离反应 G8 反应速率很低, 对电子消耗的作用可忽略不计.

### 3.2.2 O<sup>-</sup> 离子生成与损耗的主要反应机制

由以上分析可知, O<sup>-</sup> 离子是放电空间内主要的负离子. 图 9 给出了  $z = 5.5$  mm 处, O<sup>-</sup> 离子生成与消耗反应速率的径向分布图. 表 3 为整个放电空间内不同反应所占 O<sup>-</sup> 离子总的生成或消耗速率的比例. 本模型 O<sup>-</sup> 离子的生成源于 G7 和 G45 两个反应, 其中电子与基态氧分子的碰撞解离反应 G7 对 O<sup>-</sup> 离子生成的贡献为 99.998%, 反应 G45 的贡献仅为 0.002%. 负辉区的 G7 反应速率显著高于阴极位降区, 说明 O<sup>-</sup> 离子的产生主要来源于负辉区域.

放电单元内 O<sub>2</sub><sup>+</sup> 与 O<sup>-</sup> 离子密度丰富, 易发生复合. 由图 9(b) 可知, 正负离子复合反应 G10 是 O<sup>-</sup>

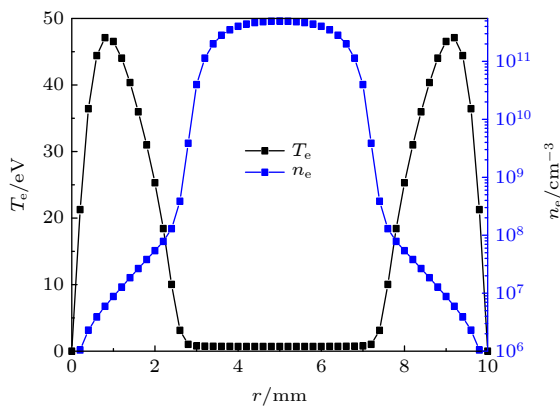


图 8  $z = 5.5$  mm 处, 平均电子能量和电子密度一维径向分布图

Fig. 8. One dimensional radial distribution of average electron energy and electron density at  $z = 5.5$  mm.



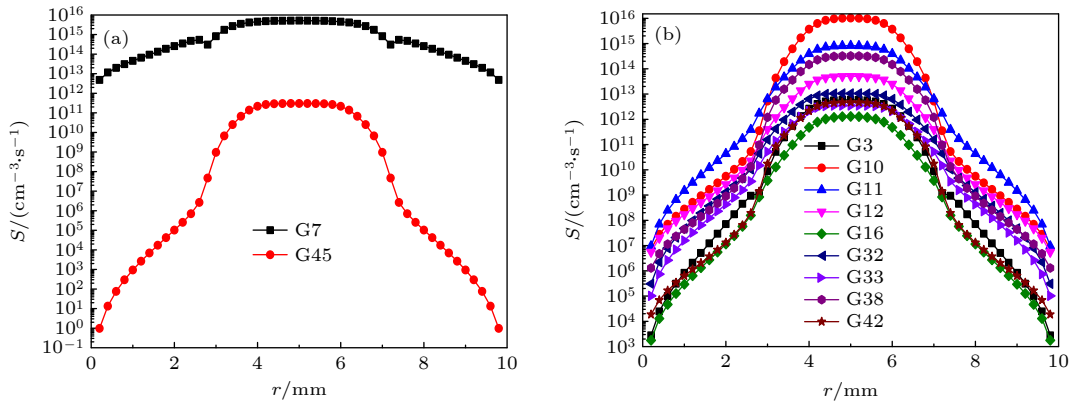


图 9  $z = 5.5$  mm 处,  $O^-$  离子 (a) 生成与 (b) 消耗反应速率的径向分布图

Fig. 9. Radial distribution of reaction rates of (a) formation and (b) consumption of  $O^-$  at  $z = 5.5$  mm.

表 3  $O^-$  生成与消耗反应的相应贡献

Table 3. Ratio of  $O^-$  generation and consumption for different reactions.

$O^-$ 生成反应	贡献/%	$O^-$ 消耗反应	贡献/%
G7: $e + O_2 \rightarrow O^- + O$	99.998	G10: $O^- + O_2^+ \rightarrow 3O$	86.712
G45: $O_2^- + O \rightarrow O^- + O_2$	0.002	G11: $O^- + O \rightarrow e + O_2$	8.548
		G38: $O_4^+ + O^- \rightarrow O_2 + O_3$	3.809
		G12: $O^- + O_2 \rightarrow O_3 + e$	0.631
		G32: $O^- + O_2(a^1\Delta_g) \rightarrow O_3 + e$	0.135
		G42: $O_4^+ + O^- \rightarrow O + O_2 + O_2$	0.055
		G3: $e + O^- \rightarrow O + 2e$	0.055
		G33: $O^- + O_2(a^1\Delta_g) \rightarrow O_2^- + O$	0.045
		G16: $O^- + O_3 \rightarrow O_3^- + O$	0.011

离子消耗的最主要途径, 占  $O^-$  离子损失的 86.712%. 反应速率由阴极附近逐渐增大, 在负辉区达到最大值, 最大反应速率值为  $1.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ . 其他消耗  $O^-$  离子的反应包括电子脱离反应 G11 和复合反应 G38, 它们与反应 G10 具有相同的分布特性, 对  $O^-$  离子损失也起到一定的作用, 分别占  $O^-$  离子损失的 8.548% 和 3.809%. 其他反应对  $O^-$  离子损失起到的贡献极小, 比例之和不超过 1%. 这与 Laca 等<sup>[42]</sup> 的研究结果相符.

### 3.2.3 $O_2^+$ 离子生成与损耗的主要反应机制

$O_2^+$  离子是放电空间内主要的正离子. 图 10 为  $z = 5.5$  mm 处,  $O_2^+$  离子生成与消耗反应速率的径向分布图. 表 4 为整个放电空间内涉及  $O_2^+$  离子生成与消耗反应的相应贡献. 基态电离反应 G2 是产生  $O_2^+$  离子的主要途径, 几乎为  $O_2^+$  离子的全部来源. 其他产生  $O_2^+$  离子的 3 种反应对  $O_2^+$  离子产生的贡献之和只有 0.007% 左右. 三体碰撞反应 G27, 电子附着反应 G9,  $O^-$  与  $O_2^+$  的复合反应 G10 是

$O_2^+$  离子消耗的主要反应, 分别占  $O_2^+$  离子损失的 44.657%, 30.675%, 24.634%. G27 反应的产物  $O_4^+$  可促进  $O_2^+$  离子生成反应 G28, G29, G39 的进行. G10, G9 反应的产物  $O$  同样促进  $O_2^+$  离子生成反应 G29 的进行. 这从另一方面又促进了  $O_2^+$  离子的产生. 所以各类粒子之间是一个相互耦合的过程. 正负离子复合反应 G18 和 G13 对  $O_2^+$  离子损耗的作用很小.

### 3.2.4 活性粒子生成与损耗的反应机制

本模型中的活性粒子包括  $O$ ,  $O(^1D)$ ,  $O_2(a^1\Delta_g)$  和  $O_3$ . 由上面结果可知, 氧原子是密度最高的活性粒子. 图 11 给出了  $z = 5.5$  mm 处,  $O$  生成与消耗反应速率的径向分布图, 表 5 给出了不同反应对  $O$  生成与消耗反应的相应贡献比例. 由图 11(a) 可知, 电子与基态氧分子的碰撞激发反应 G4 和退激发反应 G22 是生成氧原子的主要反应, 二者产生氧原子的比例之和达到 84.472%, 这与介质阻挡放电中的结果类似<sup>[47]</sup>. 另外, 电子碰撞解离反应 G1

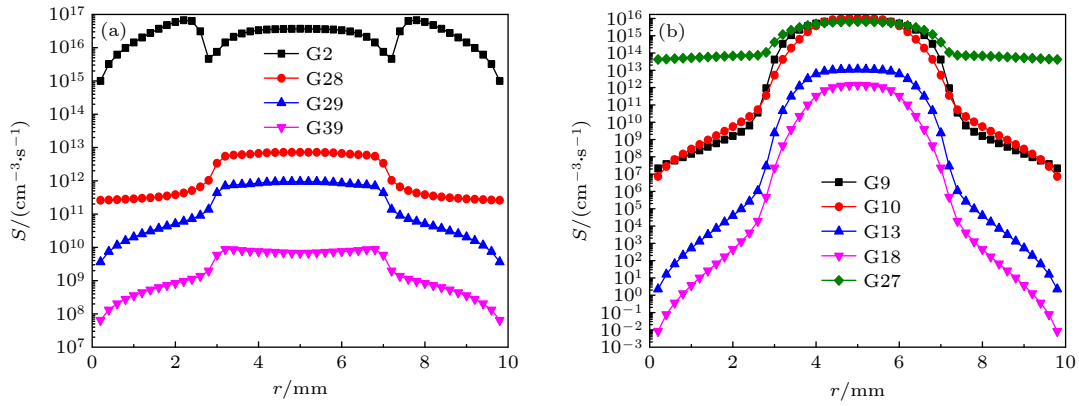


图 10  $z = 5.5$  mm 处,  $O_2^+$  离子 (a) 生成与 (b) 消耗反应速率的径向分布图

Fig. 10. Radial distribution of reaction rates of (a) formation and (b) consumption of  $O_2^+$  at  $z = 5.5$  mm.

表 4  $O_2^+$  生成与消耗反应的相应贡献

Table 4. The ratio of  $O_2^+$  generation and consumption for different reactions.

$O_2^+$ 生成反应	贡献/%	$O_2^+$ 消耗反应	贡献/%
G2: $e + O_2 \rightarrow O_2^+ + 2e$	99.993	G27: $O_2^+ + O_2 + O_2 \rightarrow O_4^+ + O_2$	44.657
G28: $O_4^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + O_2 + O_2$	0.007	G9: $e + O_2^+ \rightarrow 2O$	30.675
G29: $O_4^+ + O \rightarrow O_2^+ + O_3$	$5.8 \times 10^{-4}$	G10: $O + O_2^+ \rightarrow 3O$	24.634
G39: $O_4^+ + O_2(a^1\Delta_g) \rightarrow O_2^+ + O_2 + O_2$	$6.9 \times 10^{-6}$	G13: $O_2^+ + O_2^- \rightarrow 2O_2$	0.032
		G18: $O_3^- + O_2^+ \rightarrow O_3 + 2O$	0.002

和两体碰撞反应 G23 对氧原子的生成也具有一定作用, 两种反应在氧原子的生成中所占比例分别为 8.725%, 5.602%. 而且上述四种反应分布特性类似. 直接电离反应 G7, 电子附着反应 G9, 复合反应 G10 对氧原子生成的贡献较小, 三种反应之和仅占氧原子生成总量的 1.189%.

由图 11(b) 可知, 基态激发反应 G5、电子脱离反应 G11 和三体碰撞反应 G47 是 O 消耗的主要反应机制, 分别占氧原子损失的 56.855%, 26.231%, 16.765%. 剩余的 7 种反应对 O 损耗之和不超过 0.15%.

活性粒子中除了氧原子之外, 还包括  $O_2(a^1\Delta_g)$ ,  $O(^1D)$  和  $O_3$ . 图 12 为 O,  $O_2(a^1\Delta_g)$ ,  $O(^1D)$  和  $O_3$  生成损耗路径概要图. 激发态氧分子  $O_2(a^1\Delta_g)$  的最主要生成路径为两体碰撞反应 G23:  $O(^1D) + O_2 \rightarrow O + O_2(a^1\Delta_g)$ , 生成了 99.998% 的  $O_2(a^1\Delta_g)$ . 反应 G23 同时损耗了 12.497% 的激发态氧原子, 生成了 5.602% 的氧原子. 其他生成  $O_2(a^1\Delta_g)$  的反应还包括反应 G35 和 G36, 但是仅占  $O_2(a^1\Delta_g)$  生成总数的 0.001% 和 0.001%. 激发态氧分子主要的损耗路径为氧负离子与激发态氧分子的碰撞反应 G32:  $O^- + O_2(a^1\Delta_g) \rightarrow O_3 + e$  与 G33:  $O + O_2(a^1\Delta_g) \rightarrow O_2^- +$

O, 分别损耗了 69.076% 和 23.025% 的  $O_2(a^1\Delta_g)$ . 反应 G32 同时生成了 1.338% 的臭氧. 退激发反应 G19:  $O_2(a^1\Delta_g) + O_2 \rightarrow 2O_2$  损耗了 7.376% 的  $O_2(a^1\Delta_g)$ . 激发态氧原子  $O(^1D)$  最主要的生成路径为电子与基态氧分子的碰撞激发反应 G4:  $e + O_2 \rightarrow O + O(^1D) + e$ , 生成了 99.869% 的  $O(^1D)$ . 基态激发反应 G5:  $e + O \rightarrow O(^1D) + e$  仅生成了 0.131% 的  $O(^1D)$ . 激发态氧原子的最主要损耗路径为退激发反应 G22:  $O(^1D) + O_2 \rightarrow O + O_2$ , 损耗了 87.478% 的  $O(^1D)$ . 臭氧的主要生成路径为三体碰撞反应 G47:  $O_2 + O_2 + O \rightarrow O_2 + O_3$  和正负离子复合反应 G38:  $O_4^+ + O^- \rightarrow O_2 + O_3$ , 分别生成了 54.191%, 37.777% 的臭氧. 臭氧最主要的损耗路径为直接电离反应 G8:  $e + O_3 \rightarrow O_2 + O$ , 损耗了 68.976% 的臭氧. 臭氧与激发态氧原子的碰撞反应 G35:  $O_3 + O(^1D) \rightarrow O_2(a^1\Delta_g) + O_2$ , G36:  $O_3 + O(^1D) \rightarrow 2O_2(a^1\Delta_g)$  和电荷转移反应 G16:  $O + O_3 \rightarrow O_3^- + O$  分别损耗了 10.048%, 9.304%, 7.09% 的臭氧. 通过以上研究可以发现, 各粒子之间存在一个复杂的相互耦合的过程, 每一个反应在生成某种粒子的同时也在消耗相应的其他粒子, 最终各种粒子密度达到一个动态平衡.

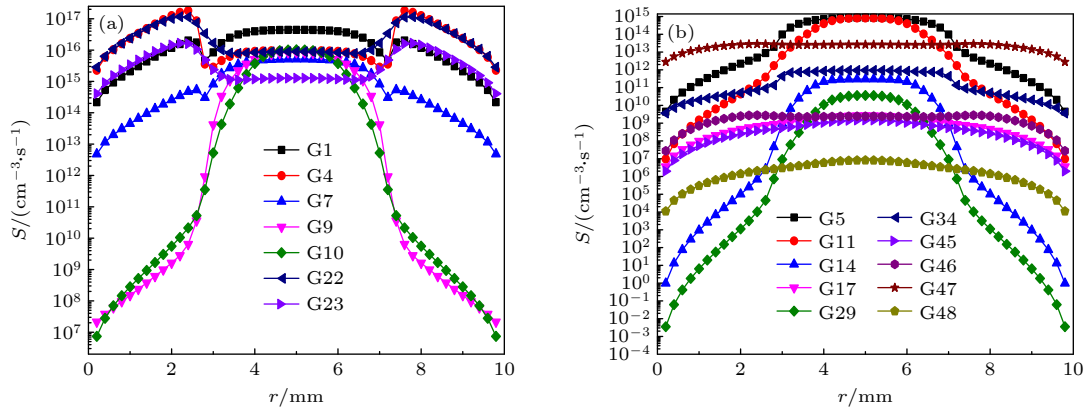


图 11  $z = 5.5$  mm 处, 氧原子 (a) 生成与 (b) 消耗反应速率的径向分布图

Fig. 11. Radial distribution of reaction rates of (a) formation and (b) consumption of oxygen atom O at  $z = 5.5$  mm.

表 5 O 生成与消耗反应的相应贡献

Table 5. Ratio of O generation and consumption for different reactions.

O生成反应	贡献/%	O消耗反应	贡献/%
G4: $e + O_2 \rightarrow O + O(^1D) + e$	45.255	G5: $e + O \rightarrow O(^1D) + e$	56.855
G22: $O(^1D) + O_2 \rightarrow O + O_2$	39.217	G11: $O^- + O \rightarrow e + O_2$	26.231
G1: $e + O_2 \rightarrow 2O + e$	8.725	G47: $O_2 + O_2 + O \rightarrow O_2 + O_3$	16.765
G23: $O(^1D) + O_2 \rightarrow O + O_2(a^1\Delta_g)$	5.602	G29: $O_4^+ + O \rightarrow O_2^+ + O_3$	0.135
G7: $e + O_2 \rightarrow O^- + O$	0.567	G45: $O_2^- + O \rightarrow O^- + O_2$	0.012
G9: $e + O_2^+ \rightarrow 2O$	0.345	G46: $O + O + O_2 \rightarrow O + O_3$	0.001
G10: $O^- + O_2^+ \rightarrow 3O$	0.277	G17: $O_3^- + O \rightarrow O_2^- + O_2$	$7.7 \times 10^{-4}$
其他	0.012	G14: $O_3 + O \rightarrow 2O_2$	$3.4 \times 10^{-4}$
		G34: $O_3 + O \rightarrow O_2(a^1\Delta_g) + O_2$	$1.9 \times 10^{-4}$
		G48: $O + O_2 + O_3 \rightarrow O_3 + O_3$	$6.0 \times 10^{-7}$

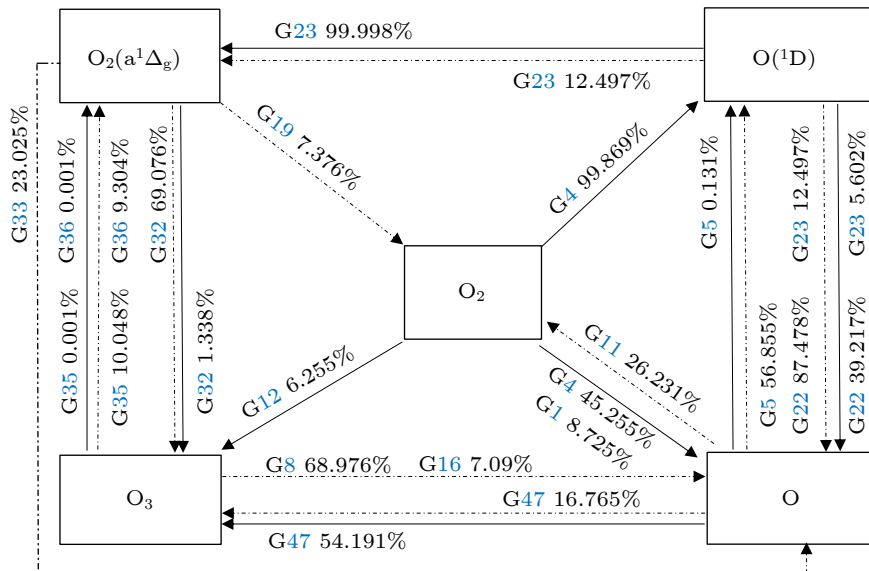


图 12 活性粒子生成、损耗路径概要图 (实线箭头所指方向为生成粒子, 虚线箭头离开方向为损耗粒子)

Fig. 12. Outline of active particle generation and consumption path (the direction indicated by the solid line arrow is the generated particle, and the direction left by the dotted line arrow is the loss particle).

## 4 结 论

1) 在本模拟条件下, 空心阴极放电存在较强的空心阴极效应. 带电粒子密度主要位于放电单元中心区域, 电子和  $O^-$  是放电体系中主要的负电荷;  $O_2^+$  是放电体系中主要的正电荷. 放电氧等离子体处于电负度小于 0.32 的弱电负性放电.

2) 放电体系中同时存在丰富的活性氧粒子, 其密度要远高于带电粒子密度值. 4 种活性氧粒子密度的大小关系为  $O > O_2(a^1\Delta_g) > O(^1D) > O_3$ .

3) 各粒子之间存在一个复杂的相互耦合的过程, 每一个反应在生成某种粒子的同时也在消耗相应的其他粒子, 最终各种粒子密度达到一个动态平衡. 电子与基态氧分子的碰撞电离反应 G2 是产生电子的主要过程, 该反应也是产生  $O_2^+$  离子的主要反应. 直接电离反应 G7, 电子附着反应 G9, G40 是电子消耗的主要反应机制. 电子与基态氧分子的碰撞激发反应 G4 和退激发反应 G22 是生成氧原子的主要反应. 基态激发反应 G5、电子脱离反应 G11 和三体碰撞反应 G47 是  $O$  消耗的主要反应机制.

## 参考文献

- [1] Nakagawa Y, Kawakita T, Uchida S, Tochikubo F 2020 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **53** 135201
- [2] Babu S K, Kelly S, Kechkar S, Swift P, Daniels S, Turner M M 2019 *Plasma Sources Sci. Technol.* **28** 115008
- [3] Vagin N P, Ionin A A, Kochetov I V, Napartovich A P, Sinitsyn D V, Yuryshv N N 2017 *Plasma Phys. Rep.* **43** 330
- [4] Chen W, Huang J, Li H, Lv G H, Wang X Q, Zhang G Q, Wang P Y, Yang S Z 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 185203 (in Chinese) [陈维, 黄骏, 李辉, 吕国华, 王兴权, 张国权, 王鹏业, 杨思泽 2012 物理学报 **61** 185203]
- [5] Ouyang J T, Zhang C Y, Zhang Y, Liu S H, Miao J S 2020 *J. B. Inst. Technol.* **40** 908 (in Chinese) [欧阳吉庭, 张晨阳, 张宇, 刘思含, 缪劲松 2020 北京理工大学学报 **40** 908]
- [6] Bakeev I Y, Klimov A S, Oks E M, Zenin A A 2021 *Vacuum* **187** 110161
- [7] Hou X Y, Zou X B, Li Y T, Zhang L W, Wang X X 2019 *High Volt.* **4** 217
- [8] Korolev Y D, Koval N N 2018 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **51** 323001
- [9] Boeuf J P, Pitchford L C 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 071501
- [10] Fu Y Y, Verboncoeur J P, Christlieb A J 2017 *Phys. Plasmas* **24** 103514
- [11] Cong S Y, Wu R H, Mu L, Sun J Z, Wang D Z 2019 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **52** 045205
- [12] Jiang X X, He F, Chen Q, Ge T, Ouyang J T 2014 *Phys. Plasmas* **21** 033508
- [13] 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]
- [14] Wei H C, Wang N, Duan Z C, He F 2018 *Phys. Plasmas* **25** 123513
- [15] Hou X Y, Fu Y Y, Wang H, Zou X B, Luo H Y, Wang X X 2017 *Phys. Plasmas* **24** 083506
- [16] He S J, Zhang Zhao, Zhao X N, Li Q 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 055101 (in Chinese) [何寿杰, 张钊, 赵雪娜, 李庆 2017 物理学报 **66** 055101]
- [17] Lavrukevich Y, Ryabtsev A, Tsiolko V 2017 *Probl. At. Sci. Technol.* **107** 215
- [18] Bazhenov V Y, Matsevich S V, Piun V M, Tsiolko V V 2015 *Probl. At. Sci. Technol.* **98** 177
- [19] Yamatake A, Yasuoka K, Ishii S 2004 *Jpn. J. Appl. Phys.* **43** 6381
- [20] Qin Y, He F, Jiang X X, Xie K, Ouyang J T 2014 *Phys. Plasmas* **21** 073501
- [21] Matsui M, Ikemoto T, Takayanagi H, Komurasaki K, Arakawa Y 2006 *Vacuum* **80** 1161
- [22] He S J, Ha J, Liu S M, Ouyang J T 2013 *Phys. Plasmas* **20** 123504
- [23] He J, Zhang Y T T 2012 *Plasma Processes Polym.* **9** 919
- [24] Hsu C C, Nierode M A, Coburn J W, Graves D B 2006 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39** 3272
- [25] Park G, Lee H, Kim G, Lee J K 2008 *Plasma Processes Polym.* **5** 569
- [26] Sakiyama Y, Graves D B, Chang H W, Shimizu T, Morfill G E 2012 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **45** 425201
- [27] Baulch D L, Cox R A, Crutzen P J, Hampson R F, Kerr J A, Troe J, Watson R T 1982 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **11** 327
- [28] Stafford D S, Kushner M J 2004 *J. Appl. Phys.* **96** 2451
- [29] Feng J 2018 *M. S. Dissertation* (Dalian: Dalian University of Technology) (in Chinese) [冯静 2018 硕士学位论文 (大连: 大连理工大学)]
- [30] Kossyi I A, Kostinsky A Y, Matveyev A A 1992 *Plasma Sources Sci. Technol.* **1** 207
- [31] Yanallah K, Pontiga F, Fernández-Rueda A, Castellanos A, Belasri A 2008 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** 195206
- [32] Soria C, Pontiga F, Castellanos A 2004 *Plasma Sources Sci. Technol.* **13** 95
- [33] Bogdanov E A, Kudryavtsev A A, Tsendin L D, Arslanbekov R R, Kolobov V I, Kudryavtsev V V 2003 *Tech. Phys.* **48** 983
- [34] Xu J Z, Zhong P, Li J L, Lin J, Diao Y, Zhang J 2010 *Plasma Sci. Technol.* **12** 601
- [35] Gaens W V, Bogaerts A 2013 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **46** 275201
- [36] Lazzaroni C, Chabert P 2016 *Plasma Sources Sci. Technol.* **25** 065015
- [37] Donkó Z 1998 *Phys. Rev. E* **57** 7126
- [38] Wei L S, Peng B F, Li M, Zhang Y F 2016 *Vacuum* **125** 123
- [39] Pan G S, Tan Z Y, Pan J, Wang X L, Shan C H 2016 *Phys. Plasmas* **23** 043508
- [40] Duran-Olivencia F J, Pontiga F, Castellanos A 2014 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47** 415203
- [41] Hagelaar G J, Hoog F J, Kroesen G M 2000 *Phys. Rev. E* **62** 1452
- [42] Laca M, Morávek M J, Schmiedt, Luká, Hrachová V, Kaňka A 2017 *Contrib. Plasma Phys.* **57** 336
- [43] Zhou Z X 2020 *M. S. Dissertation* (Baoding: Hebei University) (in Chinese) [周志向 2020 硕士学位论文 (保定: 河北大学)]
- [44] Costin C, Minea T M, Popa G, Gousset G 2010 *J. Vac. Sci. Technol. A* **28** 322
- [45] Yang A J, Wang X H, Rong M Z, Liu D X, Iza F, Kong M G 2011 *Phys. Plasmas* **18** 113503
- [46] Hong B S, Yuan T, Zou S, Tang Z H, Xu D S, Yu Y Q, Wang X S, Xin Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 115202 (in Chinese) [洪布双, 苑涛, 邹帅, 唐中华, 徐东升, 虞一青, 王栩生, 辛煜 2013 物理学报 **62** 115202]
- [47] Wang X L, Tan Z Y, Pan G S, Shan C H 2018 *High Volt. Engineer.* **44** 904 (in Chinese) [王晓龙, 谭震宇, 潘光胜, 单春虹 2018 高电压技术 **44** 904]

# Simulation of hollow cathode discharge in oxygen\*

Zhao Li-Fen<sup>1)</sup> Ha Jing<sup>2)</sup> Wang Fei-Fan<sup>1)</sup> Li Qing<sup>1)3)</sup> He Shou-Jie<sup>1)†</sup>

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

2) (*College of Science, Hebei Agricultural University, Baoding 071002, China*)

3) (*Institute of Electrostatic Technology, Hebei University, Baoding 071002, China*)

( Received 18 June 2021; revised manuscript received 12 September 2021 )

## Abstract

The characteristics, the formations and loss mechanisms of different particles of hollow cathode discharge in oxygen at 266 Pa are investigated by using the fluid model. The model contains 11 kinds of particles and 48 reactions. Under this simulation condition, the negative glow regions corresponding to the surrounding cathodes overlap. The results show that there is a strong hollow cathode effect. The density distributions of different charged and active particles are calculated. The charged particle density is located mainly in the central region of the discharge cell. Electrons and  $O^-$  are the main ingredients of negative charges in the discharge system, and their density peaks are  $5.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$  and  $1.6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ , respectively and  $O_2^+$  is a main composition of positive charge in the discharge system with a peak density of  $6.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ . Abundant active oxygen particles exist in the discharge system, and their density is much higher than those of other charged particles. According to the densities of active particles, their magnitudes are ranked in the small-to-large order as O,  $O_2(a^1\Delta_g)$ ,  $O(^1D)$  and  $O_3$ . Furthermore, the generation and consumption mechanism of electrons,  $O^-$  and  $O_2^+$  are calculated in detail, and the generation and consumption paths of different active oxygen particles are also given. The results show that there is a complex coupling process among these particles. Each reaction generates a certain number of particles and consumes other particles at the same time, resulting in a dynamic balance among these particles.

**Keywords:** hollow cathode discharge, oxygen, fluid model, active particles, generation and consumption mechanism

**PACS:** 52.20.-j, 52.65.-y

**DOI:** [10.7498/aps.71.20211150](https://doi.org/10.7498/aps.71.20211150)

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51777051), the Science and Technology Research Projects of Colleges and Universities in Hebei Province, China (Grant No. ZD2020197), and the Science Foundation of Hebei Province, China (Grant No. E2021201037).

† Corresponding author. E-mail: [heshouj@hbu.edu.cn](mailto:heshouj@hbu.edu.cn)