

# 微空心阴极放电的计算机模拟

顾小卫, 蒙林, 李家胤, 孙宜琴, 于新华

(电子科技大学物理电子学院 成都 610054)

**【摘要】**给出了圆筒形微空心阴极氦气放电的三维、时域、自洽流体方程组(粒子连续性方程、电子能量平衡方程和泊松方程)及其稳态的差分方程组和合理的边界条件, 并利用计算机模拟计算, 得出了放电稳态时形成的粒子密度、电子平均能量、电位等值线和电场分布图。结果表明在放电过程中存在明显的阴极位降区和负辉区, 空心阴极效应明显, 存在高能电子以及放电空间中以径向电场为主。并对计算结果进行讨论, 为微空心阴极放电器件提供了理论依据。

**关键词** 边界条件; 计算机模拟; 流体模型; 微空心阴极

中图分类号 O53

文献标识码 A

doi: 10.3969/j.issn.1001-0548.2009.02.19

## Computer Simulation of Microhollow Cathode Discharge

GU Xiao-wei, MENG Lin, LI Jia-yin, SUN Yi-qin, and YU Xin-hua

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

**Abstract** A three-dimensional, time-dependent, and self-consistent fluid model is developed to simulate the helium plasma in a cylindrical microhollow cathode (MHCD) with reasonable boundary conditions. The particle density, electric potential, electron energy, and the distribution of the electric field are calculated. The results show that there exist the cathode dark space region and negative glow region, and the hollow cathode effect is in evidence. The results presented in this paper provide an understanding of the basic mechanisms governing the MHCD devices.

**Key words** boundary condition; computer simulation; fluid model; microhollow cathode

德国物理学家Paschen于1916年首次报道了空心阴极放电由于存在空心阴极效应, 产生稠密等离子体的现象。由于圆筒微空心阴极放电比普通辉光放电具有一些独特的电光学特性, 广泛运用于等离子体加工(离子蚀刻、薄膜沉积、表面处理)、气体激光、电子枪、光谱分析和半导体薄膜的制备等科学研究及应用领域。由于放电结构很微小, 很难精确地通过实验来观测, 为了得到较直观可靠的数据, 只有通过计算模型来研究, 主要方法有kinetic model、PIC、MCC、PIC-MCC<sup>[1-8]</sup>、fluid model和hybrid model<sup>[9-11]</sup>。目前所采用的主要模型把放电形成的等离子体看成连续的流体, 用流体力学的理论来处理。该方法优点是计算量很小, 能够提供放电形成等离子体的基本特征, 并能够在较大的范围提供足够精度的解。本文采用流体模型对圆筒形空心阴极建立了放电结构的三维模型进行研究, 考虑了稳定性算法, 各种粒子的激发、电离和复合过程以及极板的

实际物理边界条件(包括二次电子发射)等因素(以往模型中没有考虑的), 模拟了接近实际的圆筒形微空心阴极放电现象。

### 1 物理模型

考虑由两平行阳极和圆筒形阴极构成的空心阴极放电系统, 如图1所示, 放电空间是圆柱体区域, 呈轴对称, 为节省计算机资源, 取任一通过圆心的矩形截面来反映整个放电现象。本文采用Boltzman方程的简化形式, 即粒子的连续性方程、动量守恒方程、电子的能量守恒方程以及Poisson方程:

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} - \nabla \cdot \Gamma_p = S_p \quad (1)$$

$$\Gamma_p = \text{sgn}(q_p) \mu_p E n_p - D_p \nabla n_p \quad (2)$$

$$S_p = \sum_r c_{p,r} R_r \quad (3)$$

$$D_p = \frac{k_B T u_p}{e} \quad (4)$$

收稿日期: 2008-05-23; 修回日期: 2008-11-17

基金项目: 国家自然科学基金(60571018)

作者简介: 顾小卫(1980-), 男, 博士生, 主要从事低温等离子体放电和高功率微波等方面的研究。

$$\Gamma_\varepsilon = -\frac{5}{3}\mu_e \mathbf{E} n_\varepsilon - \frac{5}{3}D_e \nabla n_\varepsilon \quad (5)$$

$$S_\varepsilon = -e\Gamma_e \cdot \mathbf{E} - n_e \sum_r \bar{\varepsilon}_r k_r n_r \quad (6)$$

$$\nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{E}) = -\nabla \cdot (\varepsilon \nabla V) = \rho \quad (7)$$

式中  $n_p$  为粒子密度;  $\Gamma_p$  为流量密度;  $S_p$  为单位时间单位体积内产生的源项, 下标  $p$  可以表示电子、离子、中性粒子;  $\mathbf{E}$  为电场;  $q_p$  为粒子电荷;  $u_p$ 、 $D_p$  分别为粒子的迁移系数和扩散系数(其中中性粒子没有迁移系数);  $c_{p,r}$  为反应产生粒子的净数目(包括粒子产生和消失),  $r$  为反应类型;  $\Gamma_\varepsilon$  为电子能量流密度;  $n_\varepsilon$  为电子平均能量密度;  $S_\varepsilon$  为电子的能量源项,  $\bar{\varepsilon}_r$  为电离和激发能量阈值。

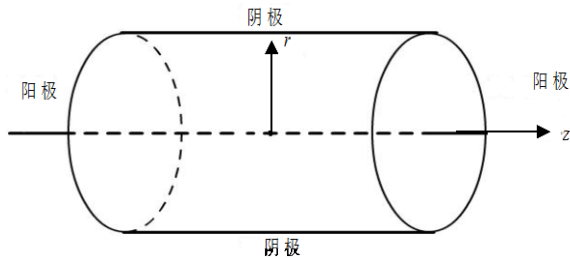


图1 微空心阴极放电腔

## 2 数值方法

### 2.1 算法

为了克服介电弛豫时间的限制, 本文所作的处理是采用对电场的变化进行预估, 以解除连续性方程和泊松方程之间的耦合(节省巨大计算量, 多维问题)。对电场用半隐式格式, 同样可以保证计算的稳定性为  $\nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{E}^{k+1}) = \sum_p q_p n_p^{k+1}$ 。由于  $n$  在  $t^{k+1}$  时刻是未知的, 用  $n^k$  来代替  $n^{k+1}$ 。考虑到在一个时间步长内,  $S_p$  项产生的正负电荷相等,  $n^{k+1}$  可以由下式求得:

$$n_p^{k+1} = n_p^k + \Delta t \nabla \cdot \Gamma_p(n_p^k, \mathbf{E}^{k+1}, \mu_p^k, D_p^k) \quad (8)$$

对于迁移系数  $\mu_p$ 、扩散系数  $D_p$ , 一般都采用显示格式, 因此可得时间步长上粒子守恒方程和泊松方程的离散形式为:

$$\frac{n_p^{k+1} - n_p^k}{\Delta t} - \nabla \Gamma_p(n_p^{k+1}, \mathbf{E}^{k+1}, \mu_p^k, D_p^k) = S_p^k \quad (9)$$

$$\nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{E}^{k+1}) = \sum_k q_p (n_p^k + \Delta t \nabla \cdot \Gamma_p(n_p^k, \mathbf{E}^{k+1}, \mu_p^k, D_p^k)) \quad (10)$$

下面对上述方程进行离散化处理, 从计算流体力学可以知道, 粒子连续性方程的不同空间离散格式影响到计算的稳定性, 本文采用广泛使用的 Scharfetter-Gummel 方法来处理, 粒子连续性方程为:

$$\frac{\partial n_{i,j}}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_z}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial (r \Gamma_r)}{\partial r} = S_{i,j} \quad (11)$$

式中 源项  $S_p$  和  $S_\varepsilon$  的具体处理见文献[12]。利用指数差分格式对上式进行差分后整理可得:

$$a_{i,j}^E n_{i+1,j} + a_{i,j}^W n_{i-1,j} + a_{i,j}^N n_{i,j+1} + a_{i,j}^S n_{i,j-1} + a_{i,j}^C n_{i,j} = A_{i,j} \quad (12)$$

式中  $a_{i,j}^E$ 、 $a_{i,j}^W$ 、 $a_{i,j}^N$ 、 $a_{i,j}^S$  为该点和与该点邻近的正东、正西、正北、正南点的粒子(电子、离子)迁移率、扩散系数、电场函数;  $a_{i,j}^C$  为该点及周围4点的粒子迁移率、扩散系数和电场函数。电子平均能量有相似形式也类似处理。

对于泊松方程离散有:

$$\frac{\varepsilon_{i,j+1/2} E_{z,i,j+1/2} - \varepsilon_{i,j-1/2} E_{z,i,j-1/2}}{\Delta z} + \frac{1}{r_{i,j}} \frac{r_{i+1/2,j} \varepsilon_{i+1/2,j} E_{r,i+1/2,j} - r_{i-1/2,j} \varepsilon_{i-1/2,j} E_{r,i-1/2,j}}{\Delta r} = \sum_p q_p n_p^k + \sum_p q_p \Delta t \left( \frac{\Gamma_{z,i,j+1/2} - \Gamma_{z,i,j-1/2}}{\Delta z} + \frac{1}{r_{i,j}} \frac{r_{i,j+1/2} \Gamma_{r,i+1/2,j} - r_{i,j-1/2} \Gamma_{r,i-1/2,j}}{\Delta r} \right)$$

对式中的粒子通量用式(2)代入, 经整理可得:

$$a_{i,j}^E V_{i+1,j} + a_{i,j}^W V_{i-1,j} + a_{i,j}^N V_{i,j+1} + a_{i,j-1}^S V_{i,j-1} + a_{i,j}^C V_{i,j} = A_{i,j} \quad (13)$$

### 2.2 合理边界条件

边界条件正确与否直接关系到上述方程得出的数值结果, 像早期的简化边界条件  $n=0$  或者  $\nabla n \cdot \mathbf{n} = 0$  被广泛使用, 这不符合物理过程。实际上在极板表面流密度是存在的, 而且极板的二次电子发射在整个放电过程中也起了很大的作用。研究者改进了边界条件, 考虑了二次电子发射。本文采用 G.J.M.Hagelaar 改进的边界条件: 假设气体离子在阴极表面引起的二次电子发射主要由气体正离子的碰撞引起, 二次发射系数  $\gamma$  为 0.2, 电子分为来自放电空间的  $\alpha$  电子和来自极板表面的  $\gamma$  电子<sup>[13]</sup>。

## 3 数值实验

本文建立的模型所采用的放电气体为惰性气体 He 气, 计算所用的输运参数如粒子的迁移率、扩散系数和反应系数由 BOLSIG 所提供的数据, 放电电压为 300 V、气压为 100 Torr、阳极半径为 150  $\mu\text{m}$ 、阴极长为 200  $\mu\text{m}$  条件下得出了电子密度、离子密度、电子平均能量。图2给出了圆筒形阴极三维电子和离子密度空间分布, 靠近两侧阴极密度较高, 而在放电中心出现极小值, 表明在这个微小放电空间中, 存在明显的靠近阴极板对称的两个阴极位降区和还

没有重合的中心负辉区。

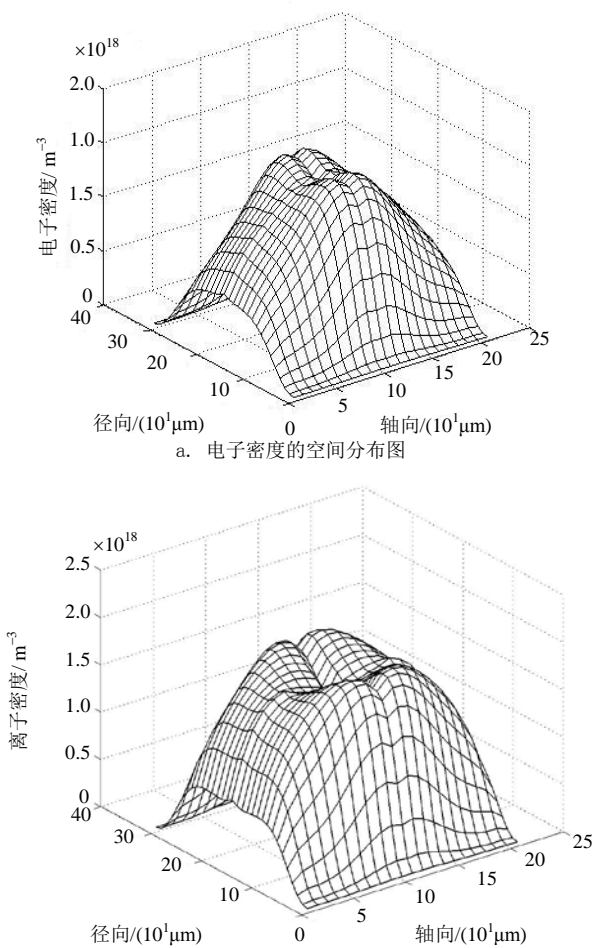


图2 电子的平均能量分布

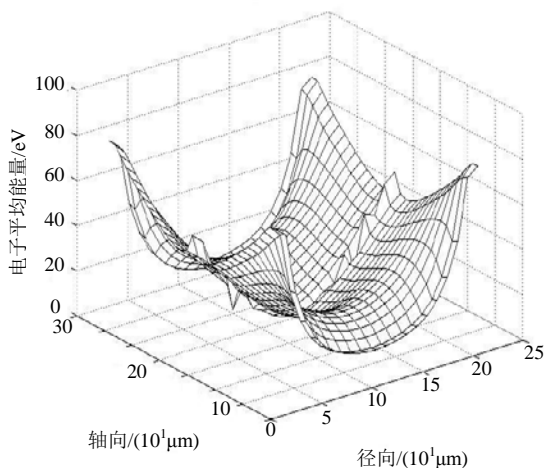


图3 电子平均能量等位图

图3给出了电子的平均能量分布，由图3可知，大量的高能粒子产生在两侧的阴极位降区。而低能电子产生在负辉区，形成波谷。由于空心阴极结构的特点，阴极位降区对电子的强烈“发射”作用，导致电子在阴极间摆动，大量的位于阴极位降区的

高能电子在阴极间充分地震荡，以至于达到稳态时各类粒子浓度明显增加，由空心阴极效应确定。

电场分布如图4所示，放电空间为径向电场场值数量级 $1 \times 10^7$  V/m，轴向电场数量级 $1 \times 10^6$  V/m，因此以径向电场为主，轴向电场较弱。这样有利于电子在径向来回的振荡，加速电子的碰撞机会，从而激发和电离，复合明显增加。

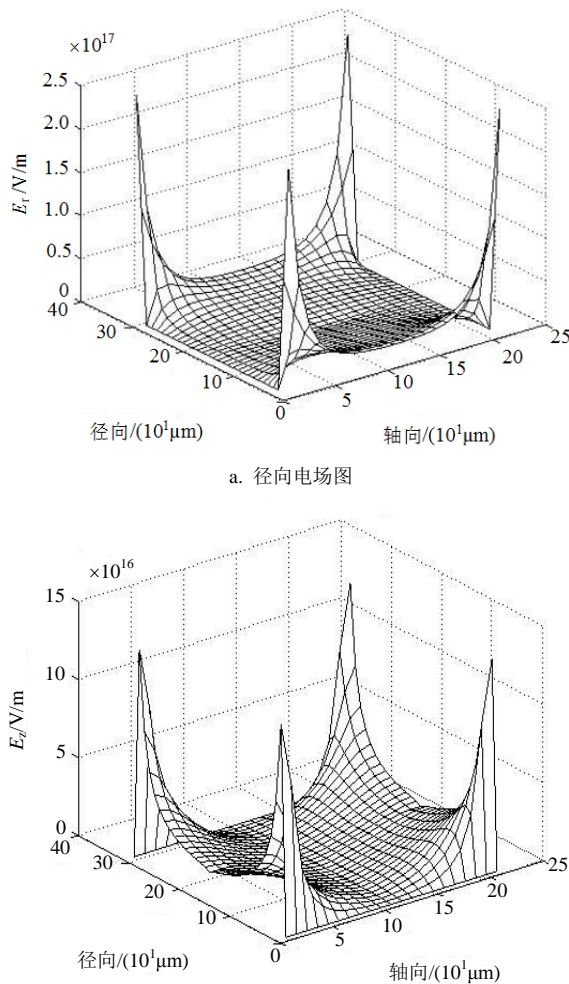


图4 电场分布

### 4 结论

本文分析了圆筒形空心阴极放电流体模型的三维方程的建立和符合实际物理过程的极板边界条件。模拟研究了气压在100 Torr，电压为300 V的He气微空心阴极放电特性。在所研究的条件下，空心阴极存在明显的阴极位降区和负辉区，大量的高能电子形成于电场比较强的阴极位降区，最终形成两个波峰，此时负辉区还没有重合。空间电场以径向电场为主，轴向电场较小，电子在阴极板之间做反复摆动，形成稠密等离子体。

## 参 考 文 献

- [1] 余建华, 赖建军, 黄建军, 等. 槽型空心阴极放电中槽底阴极面的电子发射对放电的影响[J]. 物理学报, 2002, 51(9): 2080-2085.  
YU Jian-hua, LAI Jian-jun, Huang Jian-jun, et al. Influence of electron emission from the bottom cathode on the characteristics of a slotted hollow cathode discharge[J]. Acta Phys Sin, 2002, 51(9): 2080-2085.
- [2] 姚细林, 王新兵, 赖建军. 微空心阴极放电的Monte Carlo模拟研究[J]. 物理学报, 2003, 52(6): 1450-1454.  
YAO Xi-lin, WANG Xin-bing, LAI Jian-jun. Monte Carlo simulation of the electron motion in an Ar microhollow cathode discharge[J]. Acta Phys Sin, 2003, 52(6): 1450-1454.
- [3] WANG Ying-jun, WANG Bing-zhong, SHAO Wei. Theoretical proof of unconditional stability of the 3-D ADI-FDTD method[J]. Journal of Electronic Science and Technology of China, 2003, 1(1): 1-5.
- [4] ZHECHEV D, ZHEMENIK V I, TILEVA S, et al. A hollow cathode discharge modification as a source of sputtered atoms and their ions[J]. Nucl Instrum Metha, 2003, B(204): 387-391.
- [5] DANIEL S, HANA B, LADISLAV B. On dimensions of atmospheric-pressure hollow cathodes[J]. IEEE T Plasma Sci, 2007, 35(3): 522-526.
- [6] TUREK M, DROZDZIEL A, PYSZNIAK K, et al. Extraction of the ion beam from hollow cathode ion source, Experiment and computer simulation[J]. Vacuum, 2005, 78(2): 649-654.
- [7] ANNERNIE B, ANDRIY O, NEYDA B, et al. Hollow cathode discharges with gas flow: numerical modelling for the effect on the sputtered atoms and the deposition flux[J]. Plasma Sources Sci T, 2005, 14(6): 191-200.
- [8] RANDELL L M. Observation of extreme ultraviolet emission from hydrogen-KI plasmas produced by a hollow cathode discharge[J]. Int J Hydrogen Energ, 2001, 26(1): 579-592.
- [9] JUN C, FELIPE I, JAE K L, et al. Electron and ion kinetics in a DC microplasma at atmospheric pressure[J]. IEEE T Plasma Sci, 2007, 35(5):1274-1278.
- [10] ZHECHEV D, BUNDALESKA N, COSTELLO J T. Instrumental contributions to the time-resolved optogalvanic signal in a hollow cathode discharge[J]. J Phys D Appl Phys, 2005, 38(1): 2237-2243.
- [11] BAGUER N, BOGAERTS A, GIJBELS R. Hollow cathode glow discharge in He: Monte Carlo-Fluid model combined with a transport model for the metastable atoms[J]. J Appl Phys, 2003, 93(1): 47-56.
- [12] HAGELAAR G J M, KROESEN G M W. Speeding up fluid models for gas discharges by implicit treatment of the electron energy source term[J]. J Comp Phys, 2000, 59(3): 1-12.
- [13] HAGELAAR G J M, HONG F J D, KROESEN G M W. Boundary conditions in fluid models of gas discharges[J]. Phys Rev E, 2006, 2(1): 1452-1454.

编辑 黄 莘

· 我校科研成果专利介绍 ·

## TIP电路故障检测仪

TIP电路故障检测仪采用红外焦平面热成像、计算机图像处理和图像匹配等高新技术, 可实现对电路板有功元件和单元电路级故障的快速非接触无损诊断。该检测仪能够迅速(一次诊断可以在几十秒甚至几秒内完成)准确地判定电路中有故障的电流回路或元器件, 而且不会影响电路的频率特性, 不需要对具体电路原理的分析、理解, 也不需要相关的详细维修资料就可以进行检测。

TIP电路故障检测仪适用性强、通用性高, 尤其适合复杂和高频大型电子系统的检测和维修。与国内外同类检测仪相比, 它具有以下特点:

- (1) 故障检出率高于国内外已报道的水平;
- (2) 温度图像信号采集时的自动调焦;
- (3) 文本式标准数据的直接输入和异地资源共享;
- (4) 热图像拼接和配准精度高。

TIP检测仪提高了电子设备的维护修理检测能力, 可对军民用高端复杂电路有功元件和单元电路级故障进行非接触无损诊断。