

文章编号: 1001-4322(2009)01-0092-05

微空心阴极放电的 3 维数值模拟*

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的 3 维流体方程组及其稳态的差分方程和合理的边界条件, 并利用计算机模拟计算, 得出了 He 放电形成的粒子密度、电子能量、电场及电势分布。讨论了在阴极孔径为 240~360 μm , 气压 6 666.1~13 332.2 Pa 的范围内放电参量的变化规律: 固定电压和气压时, 阴极孔径减小, 负辉区重合越多; 固定阴极孔径和气压时, 气压升高, 带电粒子密度随着气压增加而增加。结果表明放电参量强烈依赖阴极孔径和气压。

关键词: 气体放电; 微空心阴极; 流体模型; 数值模拟; 阴极位降区; 负辉区

中图分类号: O53 **文献标志码:** A

由于圆筒微空心阴极放电比普通辉光放电具有更独特的电光学特性, 现已广泛应用于等离子体加工(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技术应用领域。近 15 年来, 在理论和实验上对其进行了大量的研究^[1-8]。由于放电结构很微小, 很难精确的通过实验来观测, 为了得到比较直观可靠的数据, 可以通过计算模型来研究, 主要方法有 kinetic model, fluid model, PIC, MCC, PIC-MCC 和 hybrid model。但由于粒子之间的相互作用极其复杂, 尚没有完整的理论对其进行描述。目前所采用的主要模型, 是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较小, 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内提供足够精度的解。本文采用流体模型对圆筒形微空心阴极建立了放电结构的 3 维模型, 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(以往模型中没有考虑的^[1-3])等因素, 模拟了实际的圆筒型微空心阴极放电现象。

1 微空心阴极放电物理模型描述

考虑由两平行阳极和圆筒阴极构成的微空心阴极放电(MHCD)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 Boltzmann 方程的简化形式、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 方程如下

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

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

$$S_p = \sum C_{p,r} R_r \quad (3)$$

$$D = k_B T u_p / e \quad (4)$$

$$\mathbf{\Gamma}_e = -\frac{5}{3} \mu_e \mathbf{E} n_e - \frac{5}{3} D_e \nabla n_e \quad (5)$$

$$S_e = -e \mathbf{\Gamma}_e \cdot \mathbf{E} - n_e \sum \bar{\epsilon}_r k_r n_r \quad (6)$$

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

式中: n_p 是粒子密度; $\mathbf{\Gamma}_p$ 为粒子流量密度; 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、

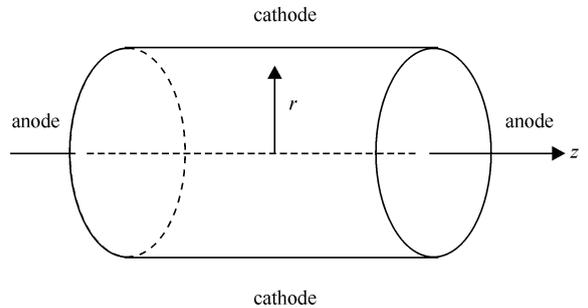


Fig. 1 Microhollow cathode discharge (MHCD)

图 1 微空心阴极放电腔

* 收稿日期: 2008-10-16; 修订日期: 2008-11-14

基金项目: 国家自然科学基金项目(60571018); 国家高技术发展计划强辐射重点实验室基金资助课题

作者简介: 顾小卫(1980—), 男, 江苏如东人, 博士研究生, 主要从事气体放电和高功率微波研究; guxiaowei1981@yahoo. cn.

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 为反应产生粒子的净数目, 包括粒子产生和消失(即复合); R 为反应系数; Γ_e 为电子能量流密度; n_e 为电子平均能量密度; S_e 为电子的能量源项; $\bar{\epsilon}_r$ 表示电离和激发能量阈值。

2 数值方法

2.1 方程推导

为了克服介电弛豫时间的限制, 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

$$\nabla \cdot (\epsilon \mathbf{E}^{k+1}) = \sum_p q_p n_p^{k+1} \quad (8)$$

由于 n 在 t^{k+1} 时刻是未知的, 用 n^k 代替 n^{k+1} , 考虑到在一个时间步长内, 式中 S_p 产生的正负电荷相等, n^{k+1} 可由下式求得

$$n_p^{k+1} = n_p^k + \Delta t \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_p(n_p^k, \mathbf{E}^{k+1}, \mu_p^k, D_p^k) \quad (9)$$

对于迁移系数 μ_p , 扩散系数 D_p , 反应系数 k_p , 一般都采用显示格式。综上可以得到时间步长上粒子守恒方程和泊松方程的离散形式为

$$\frac{n_p^{k+1} - n_p^k}{\Delta t} - \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_e(n_e^{k+1}, \mathbf{E}^{k+1}, \mu_e^k, D_e^k) = S_e^k \quad (10)$$

$$\nabla \cdot (\epsilon \mathbf{E}^{k+1}) = \sum_p q_p (n_p^k + \Delta t \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_p(n_p^k, \mathbf{E}^{k+1}, \mu_p^k, D_p^k)) \quad (11)$$

下面对上述方程进行离散化处理, 从计算流体力学可知, 粒子连续性方程的不同空间离散格式直接影响到计算的稳定性, 在这里采用广泛使用的 Scharfetter-Gummel 方法来处理, 以下以径向分量为例进行推导

$$\Gamma_r = \text{sgn}(q_e) \mu E_r n - D \frac{dn}{dr} = \text{sgn}(q_n) \mu E_r n_i - \text{sgn}(q_p) \mu E_r (n_{i+1} - n_i) \frac{1}{\exp[\text{sgn}(q_p) \mu E_r \Delta r / D] - 1} \quad (12)$$

令 $Z_x = \text{sgn}(q_p) \mu E_r \Delta r / D$, 上式就可简化为

$$\Gamma_r = -\frac{1}{\Delta r} D (f_1(Z_x) n_{i+1} - f_2(Z_x) n_i)$$

$$\text{式中: } f_1(Z_x) = \frac{Z_x}{\exp(Z_x) - 1}; f_2(Z_x) = \frac{Z_x \exp(Z_x)}{\exp(Z_x) - 1} = f_1(Z_x) - Z_x$$

粒子连续性方程为

$$\frac{\partial n_{i,j}}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_z}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial (r \Gamma_r)}{\partial r} = S_{i,j} \quad (13)$$

利用指数差分格式对式(13)进行差分后整理可得

$$\alpha_{i,j}^E n_{i+1,j} + \alpha_{i,j}^W n_{i-1,j} + \alpha_{i,j}^N n_{i,j+1} + \alpha_{i,j}^S n_{i,j-1} + \alpha_{i,j}^C n_{i,j} = A_{i,j} \quad (14)$$

式中: $\alpha_{i,j}^E, \alpha_{i,j}^W, \alpha_{i,j}^N, \alpha_{i,j}^S$ 是该点和与该点邻近的正东、正西、正北、正南方向的粒子(电子、离子)迁移率、扩散系数、电场的函数; $\alpha_{i,j}^C$ 是该点及周围四点的粒子迁移率、扩散系数和电场函数。电子平均能量和离子连续性方程有相似形式也类似处理。对于泊松方程离散

$$\frac{\epsilon_{z,i,j+1/2} E_{z,i,j+1/2} - \epsilon_{z,i,j-1/2} E_{z,i,j-1/2}}{\Delta z} + \frac{1}{r_{i,j}} \frac{r_{i+1/2,j} \epsilon_{r,i+1/2,j} E_{r,i+1/2,j} - r_{i-1/2,j} \epsilon_{r,i-1/2,j} E_{r,i-1/2,j}}{\Delta r} = \sum_p q_p n_p^k + \sum_p q_p \Delta t \left(\frac{\Gamma_{z,i,j+1/2} - \Gamma_{z,i,j-1/2}}{\Delta z} + \frac{1}{r_{i,j}} \frac{r_{i,j+1/2} \Gamma_{r,i+1/2,j} - r_{i,j-1/2} \Gamma_{r,i-1/2,j}}{\Delta r} \right) \quad (15)$$

把粒子通量式代入式(15), 经整理可得

$$\alpha_{i,j}^E V_{i+1,j} + \alpha_{i,j}^W V_{i-1,j} + \alpha_{i,j}^N V_{i,j+1} + \alpha_{i,j}^S V_{i,j-1} + \alpha_{i,j}^C V_{i,j} = A_{i,j} \quad (16)$$

2.2 合理的边界条件

边界条件的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^[1-5], 但是那些不符合物理过程。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, 后来学者们都改进了边界条件, 将二次电子发射考虑进去。在本文中我们采用 G. J. M. Hagelaar^[8] 改进的边界条件(α 电子来自放电空间)

$$\mathbf{\Gamma}_\alpha \cdot \mathbf{n} = \frac{1-r_e}{1+r_e} \left[-(2\alpha_e - 1)u_e \mathbf{E} \cdot m_\alpha + \frac{1}{2}v_{th,e}n_\alpha \right] \quad (17)$$

$\mathbf{\Gamma}_\alpha$ 和 n_α 分别表示 α 电子流密度和电子密度,当带电粒子运动方向朝向极板时 α 取 1,反之取 0; $v_{th,e}$ 为电子的热运动速度,有 $v_{th,e} = \sqrt{8k_B T_e / (\pi M_e)}$,其中, M_e 为电子质量。

电子(γ 电子来自极板表面)

$$\mathbf{\Gamma}_\gamma \cdot \mathbf{n} = -(1 - \alpha_e) \sum_p \gamma_p \mathbf{\Gamma}_p \cdot \mathbf{n} \quad (18)$$

式中: $\mathbf{\Gamma}_\gamma$ 为 γ 电子流密度; γ_p 为各种粒子的二次发射系数; $\mathbf{\Gamma}_p$ 为各种粒子流密度。

$$\text{最后总的电子密度} \quad n_e = n_\gamma + n_\alpha \quad (19)$$

而离子的边界条件

$$\mathbf{\Gamma}_i \cdot \mathbf{n} = au_i \mathbf{E} \cdot m_i + \frac{1}{4}v_{th,i}n_i - \frac{1}{2}D_i \nabla n_i \cdot \mathbf{n} \quad (20)$$

α 的取值同电子;其中 $v_{th,i}$ 为离子的热速度, $v_{th,i} = \sqrt{8k_B T_i / (\pi M_i)}$, M_i 为离子质量。

这样,式(17)、式(18)、式(19)、式(20)就构成了极板边界完整的电子和离子的边界条件。

3 数值实验

适当选取两空心阴极放电间距和气压的乘积,可以使放电仅出现阴极暗区和重叠的负辉区(NG),出现空心阴极效应。模拟所采用的放电气体为 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。阴极电压为 300 V,阳极接地,气体温度设为恒量 300 K,气压为 6 666.1~13 332.2 Pa,阳极半径为 240~360 μm ,阴极筒长 240 μm 条件下得出。反应模型中,主要考察了孔径和气压对放电参量特性的影响。

3.1 孔径变化对放电特征的影响

在给定的压强下,空心阴极放电只会发生在特定的放电结构中。从大量的实验中发现,空心阴极放电机理是空心阴极效应,主要由放电腔结构(阴极孔径)和放电气体气压所决定。下面把放电电压固定在 300 V,气压定在 9 332.54 Pa,通过改变阴极孔径从 240~360 μm 来研究放电的微观特性。从图 2 电子的三维密度分布可以明显看出整个放电区由两个不同的区域组成。在阴极附近区域为阴极暗区,而中心部分区域为负辉区,且相对的两阴极面的阴极负辉区部分重叠(甚至完全重合)在一起,大量高能电子在重合的负辉区充分地震荡,反映了空心阴极效应的本质特征。随着阴极孔径的由小到大,电子数密度逐渐从中心扩展到两个峰值,负辉区不再重合。而且,电子数密度也随着阴极孔径变大而逐渐减小。离子数密度分布也有同样的规律,这里不再给出。

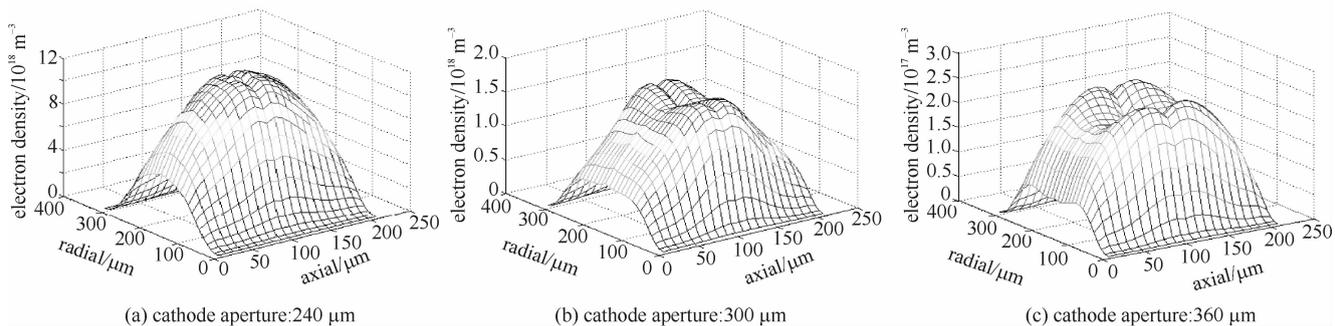


Fig. 2 Spatial distributions of electron density with different cathode aperture

图 2 不同的阴极孔径下电子数密度的空间分布图

3.2 气压变化对放电特性的影响

当阴极孔径定为 300 μm ,放电电压为 300 V 时,通过改变气压来研究放电的微观特性。图 3 给出了不同气压下电子密度的空间分布,可以看到,随着气压的升高,峰值区域逐渐向两电极靠近,即在负辉区中心出现波谷。此外,电子密度随着气压的增加而增加,那是因为压强增加时,空心阴极位降区变的越来越薄,其中的电场强度越来越强,导致电子停留时间剧减,从而增强了电子的电离能力。

以上两个方面证实:放电特性与气压和放电阴极孔径密切相关。

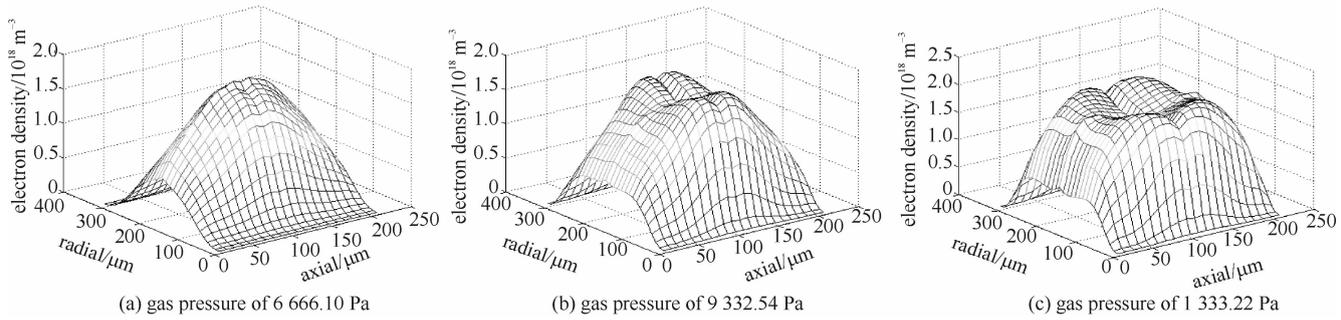


Fig. 3 Spatial distributions of electron density with different gas pressure

图 3 不同气压下的电子数密度的空间分布图

3.3 数值模拟得出的一些重要放电参量特征

从图 4(a)和(b)可以看出,放电空间上基本上轴向电场比径向电场小很多,并且电场基本都集中在阴极位降区中,一部分自由电子和离子由于强电场而加速双极扩散运动,进而和中性粒子碰撞形成离解粒子,因此在阴极位降区形成大量带电粒子,并形成了最大值。该结论为利用 Monte Carlo 模型必须建立既定的假设电场分布提供理论依据,同时映证了 K. Fujii 等人对微空心阴极放电的简化电场分布形式,即在空心阴极位降区电场线性减小,而负辉区电场值为 0。从图 5 所示的与圆柱微空心阴极两底面平行的中截面上的电子和离子密度分布可见,在中轴附近区域,电子和粒子数密度相当,为放电的等离子体区。

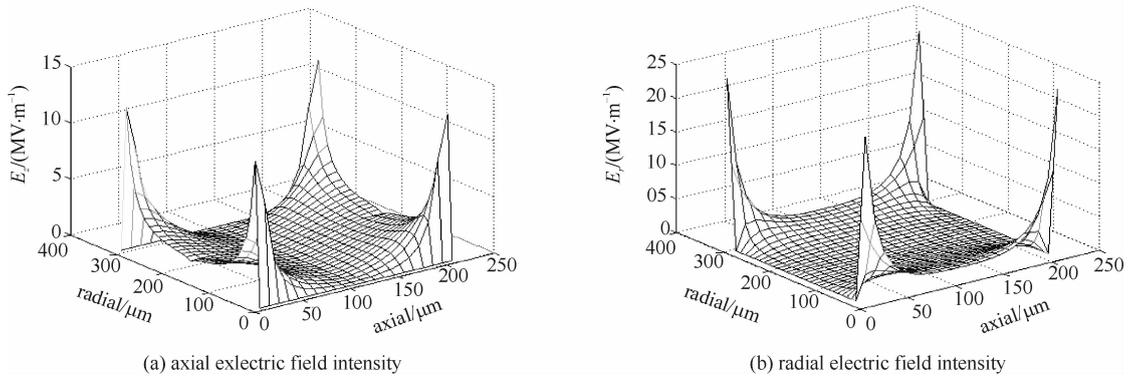


Fig. 4 Axial and radial electric field intensities in the MHCD

图 4 微空心阴极中径向和轴向电场强度

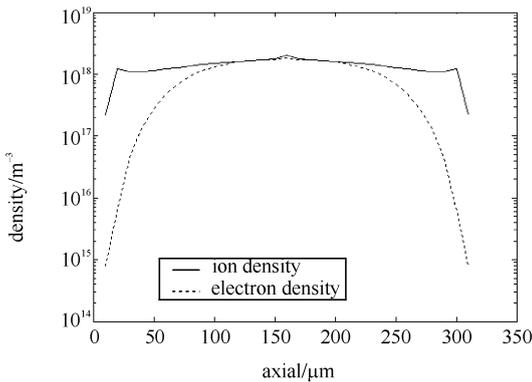


Fig. 5 Electron and ion density distribution at the section of cathode centre

图 5 与圆柱微空心阴极两底面平行的中截面上的电子和离子数密度分布

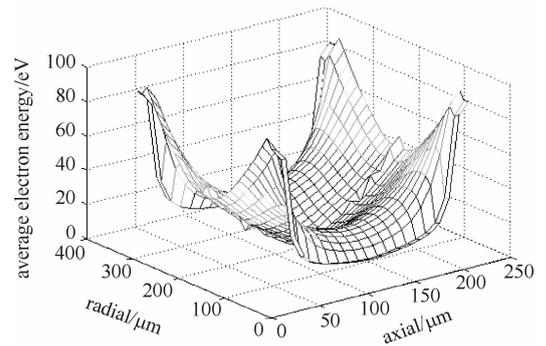


Fig. 6 Average electron energy contours in the MHCD

图 6 微空心阴极中电子平均能量等位图

图 6 给出了电子的平均能量分布图,从中可以看出阴极位降区存在大量的高能电子,而低能电子处在负辉区。在阴极位降区的大量高能电子利用自身的能量去碰撞气体原子,产生离解和激发以及对阴极材料的溅射。此外,还有一部分电子能够到达对面阴极位降区,形成“震荡电子”并在运动路径上进行碰撞电离,导致电离率和激发率大大增加,从而产生大量带电粒子。放电腔中的 2 维电势分布如图 7 所示,电压降主要集中在阴极附近的阴极位降区,电势呈对称状分布。这是由对称结构决定的。

4 结 论

本文分析了圆筒型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 6 666.1~13 332.2 Pa, 阴极孔径为 240~360 μm 的 He 气微空心阴极放电特性。研究表明, 空心阴极存在明显的阴极位降区和负辉区。固定电压和气压时, 阴极孔径减小, 负辉区重合的越多, 最终只有一个峰值。固定阴极孔径和气压时, 气压升高, 带电粒子密度随着气压增加而增加。该结论证实了空心阴极效应与气压和阴极孔径密切相关, 同时得到的电场分布也给 Monte Carlo 模型预设电场提供了理论依据。

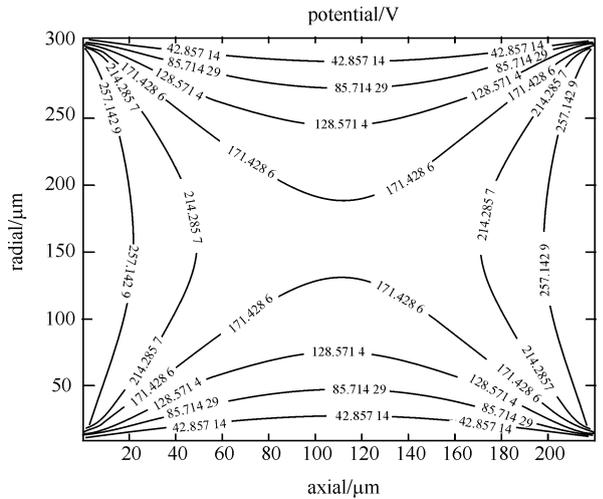


Fig. 7 Plasma potential contours in the MHCD

图 7 微空心阴极中电势等位图

参考文献:

- [1] 赖建军, 黄建军, 王新兵, 等. 空心阴极直流放电的二维自治模型描述和阴极溅射分析[J]. 物理学报, 2001, **50**(8): 1528-1533. (Lai Jianjun, Huang Jianjun, Wang Xinbing, et al. Self-consistent description of a DC hollow cathode discharge and analysis of cathode sputtering. *Acta Physica Sinica*, 2001, **50**(8): 1528-1533)
- [2] 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 Jianhua, Lai Jianjun, Huang Jianjun, et al. Influence of electron emission from the bottom cathode on the characteristics of a slotted hollow cathode discharge. *Acta Physica Sinica*, 2002, **51**(9): 2080-2085)
- [3] 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 Xilin, Wang Xinbing, Lai Jianjun. Monte Carlo simulation of the electron motion in an Ar microhollow cathode discharge. *Acta Physica Sinica*, 2003, **52**(6): 1450-1454)
- [4] 周俐娜, 王新兵. 微空心阴极放电的流体模型模拟[J]. 物理学报, 2004, **53**(10): 3340-3346. (Zhou Lina, Wang Xinbing. A fluid model for the simulation of discharges in microhollow cathode. *Acta Physica Sinica*, 2004, **53**(10): 3340-3346)
- [5] Bager 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.
- [6] Zhechev D, Zhemenuk V I, Tileva S, et al. A hollow cathode discharge modification as a source of sputtered atoms and their ions[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 2003, **204**: 387-391.
- [7] Dan M G, Kristina K J, Ron M W, et al. Hollow cathode theory and experiment. 1. Plasma characterization using fast miniature scanning probes[J]. *J Appl Phys*, 2005, **98**: 113302.
- [8] Hagelaar G J M, de Hoog F J, Kroesen G M W. Boundary conditions in fluid models of gas discharges[J]. *Phys Rev E*, 2000, **62**(1): 1452-1454.

Three-dimensional numerical simulation of microhollow cathode discharge model

Gu Xiaowei, Meng Lin, Li Jiayin, Sun Yiqin, Yu Xinhua

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

Abstract: Three-dimensional fluid equations, steady-state differential equation and reasonable boundary conditions of cylindrical hollow cathode are presented, some parameters have been calculated such as particle density distribution, electron energy and the distribution of electric field. Under the pressure of 6 666.1~13 332.2 Pa and the voltage of 150~300 V discharge, it is found that reducing the dimension of the cathode can enhance the negative glow space, and increasing pressure will enhance the electron density. The simulated results show that the discharge parameters are strongly dependent on voltage and pressure of the microhollow cathode.

Key words: gas discharge; microhollow cathode; fluid model; cathode dark space; negative glow space