

Численное моделирование кинетики формирования ФРЭЭ в высоковольтном импульсном разряде с протяженным полым катодом в аргоне методом Монте-Карло

Н.А. Ашурбеков^{1,}, М.З. Закарьяева^{1,3}, К.О. Иминов¹, К.М. Рабаданов^{1,2}, Г.Ш. Шахсинов¹,
А.А. Муртазаева^{1,3}*

¹Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

²Харбинский политехнический университет, Харбин, Китай

³Институт физика ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

*nashurb@mail.ru

Аннотация. В данной работе проведены исследования по расчету функции распределения электронов по энергиям в плазменном столбе наносекундного разряда в аргоне с протяженным полым катодом методом Монте-Карло. Описана методика расчета ФРЭЭ в импульсном разряде методом Монте-Карло. Приведены результаты расчетов ФРЭЭ для разных стадий развития разряда при давлении газа 10 Торр на различных расстояниях от дна полости в катоде. Анализ полученных результатов показывает формирование высокоэнергичных электронов в разрядной области с энергией электронов выше 500 эВ.

Ключевые слова: полый катод, наносекундный разряд, ФРЭЭ, метод Монте-Карло, аргон.

1. Введение

В неравновесной плазме электронная компонента в большей степени определяет свойства всей плазмы в целом [1, 2], поэтому вопросу формирования функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ) уделяется особое внимание. Этот вопрос имеет ключевое значение при исследовании таких типов разряда, где явным образом в плазме образуются различные группы электронов и проявляется нелокальные свойства электронов: например, прикатодные области разряда, разряд с полым катодом и т.д. [3–6]. Электроны играют важную роль в газоразрядной плазме, поскольку от вида ФРЭЭ зависят константы скорости реакций и транспортные коэффициенты, которые являются необходимыми при проведении численных расчетов. Поэтому, точное описание электронной кинетики необходимо для более точного моделирования плазмы.

Кинетика электронов в плазме может быть описана при помощи функции распределения электронов решением дифференциального уравнения Больцмана или отслеживанием стохастического движения группы электронов с использованием методов Монте-Карло (МК). В последние десятилетия были разработаны различные программы и коды моделирования, основанные на обоих подходах, такие как BOLSIG+ [7], EEDF [8], BOLOS [9], LoKI-B [10], MultiBolt [11], METHES [12], Magboltz [13], Betaboltz [14] и LoKI-MC [15]. BOLSIG+, EEDF, BOLOS и LoKI-B основаны на двучленном приближении с низкой анизотропией при решении уравнения Больцмана [7], которое может быть неточным при доминировании упругих столкновений или при сильном электрическом поле [16]. В серии наших предыдущих работ [17, 18] нами были инициированы исследования по моделированию полого катода, где для описания кинетики электронов использовалась программа LoKI-B [10]. Однако данная программа не может быть использована при расчете кинетики электронов, когда в плазме проявляются нелокальные свойства электронов. В этом случае может быть использован метод отслеживания стохастического движения группы электронов с использованием методов Монте-Карло. Все перечисленные выше программы METHES, Magboltz, Betaboltz и LoKI-MC используют методы МК. Для расчета кинетики электронов в нашей работе мы использовали программу LisbOn KInetics Monte Carlo (LoKI-MC) [15]. LoKI-MC это инструмент моделирования с открытым исходным кодом, который позволяет исследовать кинетику электронов низкотемпературной плазмы в переменных/постоянных электрических и

магнитных полях, с использованием методов МК. Выбор данной программы LoKI-MS среди множества других подобных программ (METHES, Betaboltz, Magboltz) для исследования электронной кинетики связан с тем, что, во-первых, эта программа с открытым исходным кодом, которая находится в свободном доступе. Это дает возможность вносить изменения в код, чем мы и воспользовались при решении нашей задачи; во-вторых, данную программу можно использовать в связке с другой программой, которая решает гидродинамическую модель плазмы; в-третьих, возможность описания анизотропного рассеяния при любом виде столкновений, в-четвертых, учет теплового движения молекул газа, позволяющий корректно описать кинетику скопления электронов при низких значениях E/N , и в-пятых, расчет баланса энергии электронов в различных каналах столкновения.

Данная работа является продолжением наших предыдущих исследований [17, 18] и посвящена исследованию роли нелокальных свойств электронов в формировании ФРЭЭ в области фронта ионизационной волны в наносекундном разряде с протяженным щелевым катодом в аргоне [6].

2. Методика расчета

Для проведения численных экспериментов была разработана самосогласованная вычислительная модель, состоящая из гидродинамического плазменного модуля программы COMSOL Multiphysics [19] и модуля программы LoKI-MS. Интеграция этих двух самосогласованных моделей проводилась по методике, аналогичной методике, описанной в наших предыдущих работах [17, 18]. Методика расчета в LoKI-MS подробно описана в работе [15]. Здесь мы обозначим лишь основные шаги по моделированию эволюции каждого электрона в ансамбле и расчет кинетики электронов. Кинетика электронов определяется путем отслеживания стохастической траектории представленного ансамбля электронов под воздействием электрического поля. Электроны совершают серию свободных движений, прерываемых упругими, неупругими или сверхупругими столкновениями с молекулами/атомами газа. Временной интервал, после которого произойдет следующее столкновение t_c , вычисляется путем преобразования однородного случайного числа p_t в диапазоне $[0, 1]$ в распределение Пуассона: $t_c = -\ln p_t / \nu$, где ν – это частота столкновений. Изменение положения электрона r и скорости v за время t_c рассчитываются путем аналитического интегрирования уравнений движения Ньютона под воздействием электрического поля E :

$$m_e \frac{dv}{dt} = -eE \quad \text{и} \quad \frac{dr}{dt} = v,$$

где e и m_e заряд и масса электрона.

Случайная скорость V молекулы или атома рассматриваемого газа определяется из распределения Максвелла-Больцмана при заданной температуре газа. Зная v и V , вероятность К-типа столкновения P_K вычисляются следующим образом:

$$P_K = \frac{n_K^s \sigma_K(v_r) v_r}{\nu},$$

где n_K^s – плотность частицы вида s , $\sigma_K(v_r)$ – сечение столкновения, а v_r – относительная скорость между электроном и молекулой газа $v_r = |v - V|$. В зависимости от типа столкновения изменение вектора скорости рассчитывается на основе генерации случайных чисел и законов сохранения энергии и импульса. Все эти шаги повторяются многократно для каждого электрона, пока моделирование не завершится.

Одной из наиболее важных величин, получаемых из моделирования методом Монте-Карло, является ФРЭЭ. ФРЭЭ вычисляется путем усреднения по всем электронам и всем точкам интегрирования (1):

$$f_0(E_m) = \frac{\sum_{\alpha=1}^{N_{int}} \sum_{\beta=1}^{N_e} \delta(\varepsilon_{\alpha\beta})}{N_{int} N_e \sqrt{E_m} \Delta_E} \quad (1)$$

$$\text{где } \delta(\varepsilon_{\alpha\beta}) = \begin{cases} 1, & \text{если } E_m - \frac{\Delta_E}{2} \leq \varepsilon_{\alpha\beta} < E_m + \frac{\Delta_E}{2} \\ 0, & \text{если } E_m - \frac{\Delta_E}{2} > \varepsilon_{\alpha\beta} \geq E_m + \frac{\Delta_E}{2} \end{cases}.$$

Шкала энергии разбита на мелкие N_E ячейки с энергиями $\{E_1, \dots, E_m, \dots, E_{N_E}\}$ с постоянным шагом по энергии $\Delta_E = E_{m+1} - E_m$. В нашей работе шкала энергии разбивается на $N_E = 1000$ ячеек. ФРЭЭ нормирована таким образом, чтобы удовлетворять условию:

$$\sum_{m=1}^{N_E} f_0(E_m) \sqrt{E_m} \Delta_E = 1.$$

Программа LOKI-MS позволяет вычислить не только изотропную часть ФРЭ $f_0(1)$, но и анизотропную часть функции распределения электронов, после ее обычного разложения в ряд полиномов Лежандра $P_l(\cos \theta)$ с $l = 0, 1, \dots$, где θ это угол между \mathbf{v} и направлением анизотропии (в данном случае определяется исключительно электрическим полем). Чтобы получить анизотропии более высокого порядка, сначала вычисляется функция углового распределения электронов $f_0(E_m, \cos \theta_n)$, которая требует дискретизации по углам: $\{\cos \theta_1, \dots, \cos \theta_n, \dots, \cos \theta_{N_\theta}\}$, с постоянным шагом $\Delta_\theta = \cos \theta_{n+1} - \cos \theta_n$. Функция углового распределения дискретизируется следующим образом (2):

$$f_0(E_m, \cos \theta_n) = \frac{2 \sum_{\alpha=1}^{N_{int}} \sum_{\beta=1}^{N_e} \delta(\varepsilon_{\alpha\beta, \cos \theta_n})}{N_{int} N_e \sqrt{E_m} \Delta_E \Delta_\theta}, \quad (2)$$

$$\text{где } \delta(\varepsilon_{\alpha\beta, \cos \theta_n}) = \begin{cases} 1, & \text{если } E_m - \frac{\Delta_E}{2} \leq \varepsilon_{\alpha\beta} < E_m + \frac{\Delta_E}{2} \text{ и} \\ & \cos \theta_n - \frac{\Delta_\theta}{2} \leq \cos \theta_{\alpha\beta} < \cos \theta_n + \frac{\Delta_\theta}{2}; \\ 0, & \text{если } E_m + \frac{\Delta_E}{2} \leq \varepsilon_{\alpha\beta} < E_m - \frac{\Delta_E}{2} \text{ и} \\ & \cos \theta_n + \frac{\Delta_\theta}{2} \leq \cos \theta_{\alpha\beta} < \cos \theta_n - \frac{\Delta_\theta}{2} \end{cases}.$$

Функция углового распределения (2) нормирована следующим образом:

$$\frac{1}{2} \sum_{m=1}^{N_E} \sum_{n=1}^{N_\theta} f_0(E_m, \cos \theta_n) \sqrt{E_m} \Delta_E \Delta_\theta = 1.$$

Затем анизотропия $f_l(E_m)$ определяется из [15]

$$f_l(E_m) = \frac{2^{l+1}}{2} \sum_{n=1}^{N_\theta} P_l(\cos \theta_n) f_0(E_m, \cos \theta_n) \Delta_\theta$$

Средняя энергия $\langle \varepsilon \rangle$ вычисляется путем усреднения кинетических энергий электронов $\varepsilon_{\alpha\beta}$ в точках интегрирования N_{int}

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{N_{int} N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_{int}} \sum_{\beta=1}^{N_e} \varepsilon_{\alpha\beta}$$

Константы скорости реакций электронного удара k определяются на основе свертки ФРЭ с сечением столкновения:

$$k_k = \sqrt{\frac{2e}{m_e}} \int_0^\infty \sigma_k(\varepsilon) \varepsilon f_0(\varepsilon) d\varepsilon.$$

Данная методика по расчету ФРЭ, кинетических и транспортных характеристик плазмы по технической реализации и по вычислительным ресурсам является довольно трудозатратной задачей. Поэтому при проведении расчетов мы использовали процессор AMD Ryzen Threadripper 3990X 64-Core, оперативная память 128 ГБ, 64 ядра. Время расчета одного запуска составлял 20–25 часов в зависимости от количества частиц и точек разбиения шкалы энергии.

3. Результаты расчетов

В данной работе исследован наносекундный импульсно-периодический разряд с щелевым катодом с частотой повторения импульсов 50 Гц, который зажигается в разрядной камере, представляющей собой кварцевую трубку диаметром 5 см, внутри которой установлена электродная система из алюминиевых электродов, расположенных на расстоянии 0.6 см друг от друга. Анод представляет собой плоскую пластину длиной 5 см, шириной 2 см и толщиной 0.5 см. Катод имеет форму цилиндрического стержня длиной 5 см и диаметром 1.2 см, вдоль которого прорезана полость в виде щели шириной 0.2 см и глубиной 0.6 см. Геометрия моделируемой области соответствовала реальным размерам электродной системы. Область моделирования имеет прямоугольную форму (длина 1.2 см, ширина 0.2 см) [6, 17]. Расчеты были проведены в условиях, аналогичных условиям работ [6, 17, 18], но для давлений газа 10 Торр, частоте повторения импульса 50 Гц и амплитуде напряжения 1.2 кВ [18]. Экспериментальные результаты исследования данного типа разряда подробно описаны в нашей предыдущей работе [6].

На Рис. 1 приведены результаты расчетов ФРЭЭ f_0 , полученные в точке, расположенной внутри разрядной области на расстоянии 0.9 см от основания щели в полном катоде вдоль центра газоразрядной трубки. Данная точка расположена ближе к аноду [18]. Момент времени 90 нс соответствует времени, когда фронт волны ионизации доходит до данной точки. Как видно из рисунка, в момент времени, когда фронт волны ионизации доходит до данной точки ФРЭЭ становится немного пологой, затем она быстро спадает (95 нс). Также из данного рисунка видно, что в данной области электроны не успевают набрать большую энергию и быстрых электронов в данной области нет.

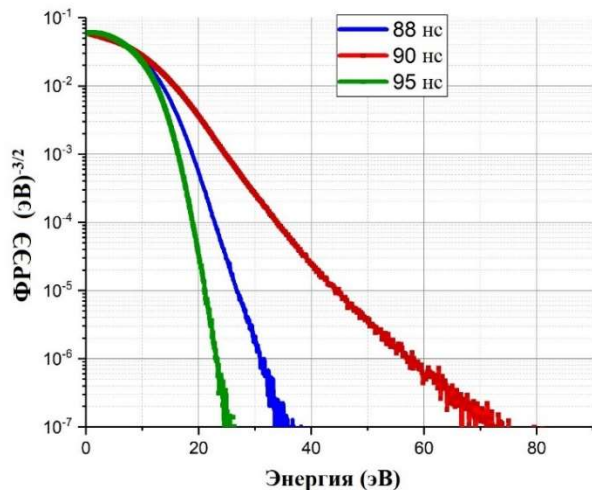


Рис. 1. ФРЭЭ f_0 полученная в точке, расположенной на расстоянии 0.9 см от дна полости с полым катодом, при давлении 10 Торр.

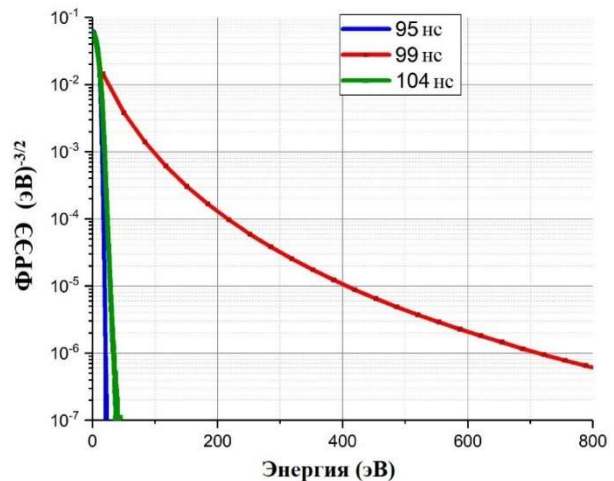


Рис. 2. ФРЭЭ f_0 полученная в точке, расположенной на расстоянии 0.6 см от дна полости с полым катодом, при давлении 10 Торр.

На Рис. 2 приведены результаты расчетов ФРЭЭ $(\text{эВ})^{-3/2} f_0$ полученные в точке, расположенной внутри полого катода на расстоянии 0.6 см от нижней границы полого катода вдоль центра газоразрядной трубки.

Данная точка расположена вблизи входа в полость катода [18]. Фронт волны ионизации, где локализованы высокие значения приведенного электрического поля E/p , доходит до данной точки в момент времени 99 нс. Из Рис. 2 видно, что в этот момент времени ФРЭЭ становится сильно пологой, поскольку электроны успевают набрать большую энергию в области усиленного электрического поля на фронте волны ионизации. Также из данного рисунка видно, что в данной области формируется достаточно большое количество быстрых электронов, которые имеют энергию больше 500 эВ.

4. Заключение

Таким образом, в данной работе проведены исследования по расчету ФРЭЭ методом Монте-Карло в высоковольтном наносекундном разряде с протяженным полым катодом с учетом нелокальной кинетики электронов. Данный метод позволяет получить результаты электронной кинетики в разрядах с сильной анизотропией ФРЭЭ. Анализ результатов численного эксперимента показывает, что ФРЭЭ различается в разных точках плазменного столба. В промежутке между электродами ФРЭЭ формируется плазменными электронами и электронами, ускоренными на фронте волны ионизации, которые имеют энергию больше 500 эВ. Результаты расчетов подтверждают формирование высокоэнергичных электронов в наносекундных разрядах с протяженным полым катодом и показывает эффективность данной методики для расчета ФРЭЭ в подобных типах газовых разрядов.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания, проект № FZNZ-2020-0002.

5. Список литературы

- [1] M. Lieberman and A. Lichtenberg, *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing*. New York: Wiley, 2005.
- [2] Yu.P. Raizer, *Gas Discharge Physics*. Berlin: Springer-Verlag, 1991.
- [3] L.D. Tsengin, Electron kinetics in non-uniform glow discharge plasmas, *Plasma Sources Science and Technology*, vol. **4**, 200, 1995, doi: 10.1088/0963-0252/4/2/004
- [4] U. Kortshagen, C. Busch, and L. D. Tsengin, On simplifying approaches to the solution of the Boltzmann equation in spatially inhomogeneous plasmas, *Plasma Sources Science and Technology*, vol. **5**, 1, 1996, doi: 10.1088/0963-0252/5/1/001
- [5] Р.Р. Арсланбеков, А.А. Кудрявцев, И.А. Мовчан, Функция распределения медленных электронов в разряде с цилиндрическим полым катодом, *ЖТФ*, Т. **62**, 6, 1992.
- [6] N.A. Ashurbekov and K.O. Iminov, Generation of high-energy electrons in the nanosecond gas discharges with a hollow cathode, In *Generation of Runaway Electron Beams and X-Rays in High Pressure Gases. Volume 1, V.F. Tarasenko (ed.)*. New York: Nova Publishers, 2016.
- [7] G.J.M. Hagelaar and L.C. Pitchford, Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models, *Plasma Sources Science and Technology*, vol. **14**, 722, 2005, doi: 10.1088/0963-0252/14/4/011
- [8] N. Dyatko, I. Kochetov, A. Napartovich and A. Sukharev, *EEDF: the software package for calculations of electron energy distribution function* [online], 2015, <http://www.lxcat.net/software/EEDF/>
- [9] A. Luque, *BOLOS* [online], 2014; <https://github.com/aluque/bolos>

- [10] A. Tejero-del-Caz et al., The LisbOn KInetics Boltzmann solver, *Plasma Sources Science and Technology*, vol. **28**, 043001, 2019, doi: 10.1088/1361-6595/ab0537
- [11] J. Stephens, A multi-term Boltzmann equation benchmark of electron-argon cross-sections for use in low temperature plasma models, *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. **51**, 125203, 2018, doi: 10.1088/1361-6463/aaaf8b
- [12] M. Rabie, and C. M. Franck, METHES: A Monte Carlo collision code for the simulation of electron transport in low temperature plasmas, *Computer Physics Communications*, vol. **203**, 268, 2016; doi: 10.1016/j.cpc.2016.02.022
- [13] S.F. Biagi, Monte Carlo simulation of electron drift and diffusion in counting gases under the influence of electric and magnetic fields, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. **421**, 234, 1999, doi: 10.1016/s0168-9002(98)01233-9
- [14] M. Renda, D.A. Ciubotaru, and C.I. Banu, Betaboltz: A Monte-Carlo simulation tool for gas scattering processes, *Computer Physics Communications*, vol. **267**, 108057, 2021, doi: 10.1016/j.cpc.2021.108057
- [15] T.C. Dias, A. Tejero-del-Caz, L.L. Alves, and V. Guerra, The LisbOn KInetics Monte Carlo solver, *Computer Physics Communications*, vol. **282**, 108554, 2023, doi: 10.1016/j.cpc.2022.108554
- [16] R.D. White, R.E. Robson, B. Schmidt, and M.A. Morrison, Is the classical two-term approximation of electron kinetic theory satisfactory for swarms and plasmas?, *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. **36**, 3125, 2003, doi: 10.1088/0022-3727/36/24/006
- [17] N.A. Ashurbekov, M.Z. Zakaryaeva, K.M. Rabadanov, K.O. Iminov, M.B. Kurbandazhieva, and A.A. Kudryavtsev, Numerical simulation of a partially anisotropic electron distribution function in a pulsed discharge with a hollow cathode, *Physics of Plasmas*, vol. **29**, 123905, 2022, doi: 10.1063/5.0122364
- [18] N.A. Ashurbekov, K.O. Iminov, K.M. Rabadanov, G.S. Shakhsinov, M.Z. Zakaryaeva, and M.B. Kurbandazhieva, Simulation of the spatio-temporal evolution of the electron energy distribution function in a pulsed hollow-cathode discharge, *Plasma Science and Technology*, vol. **25**, 035405, 2023, doi: 10.1088/2058-6272/ac9aa8
- [19] *COMSOL Multiphysics Reference Manual, version 5.5*, COMSOL, Inc, [online]; <https://www.comsol.com>