

高功率微波介质窗气体侧击穿特性的 粒子-蒙特卡罗碰撞模拟*

舒盼盼¹⁾ 赵朋程^{2)†}

1) (西安理工大学理学院, 西安 710054)

2) (西安电子科技大学物理学院, 西安 710071)

(2024 年 8 月 26 日收到; 2024 年 10 月 9 日收到修改稿)

在高功率微波介质窗外表面周围, 气体击穿是限制功率容量提升的主要因素之一, 因此进行相应的模拟研究具有重要的意义. 本文通过粒子-蒙特卡罗碰撞模型对介质窗气体侧击穿特性进行了模拟研究. 将宏粒子合并方法引入该模型, 大大减少了跟踪的宏粒子数量, 以至于能够对整个击穿过程进行模拟与分析. 结果表明, 在宏粒子权重为变量下, 击穿的时空演化特性与宏粒子权重为常数下的结果符合得很好. 由于次级电子发射产额远小于 1, 所以气体电离是介质窗气体侧击穿的主导机理. 电子电离和扩散导致等离子体的密度和厚度随着时间显著增加. 电子密度的峰值未出现在介质表面处而是在距离介质表面 100—150 μm 的位置. 这是因为大量的电子沉积在介质表面上, 伴随产生的自组织法向电场驱使电子远离介质表面. 由于本文关注的背景气体压强高于最大电离率对应的临界压强 (约为 $1.33 \times 10^3 \text{ Pa}$), 所以电离率随着压强的增加而单调减小, 并导致击穿发展得更加缓慢. 通过比较击穿时间的模拟值与实验数据, 证实了粒子-蒙特卡罗碰撞模型的准确性.

关键词: 气体击穿, 介质表面, 高功率微波, 粒子-蒙特卡罗碰撞模型, 宏粒子合并方法

PACS: 51.50.+v, 52.80.Pi

DOI: 10.7498/aps.73.20241177

CSTR: 32037.14.aps.73.20241177

1 引言

目前, 高功率微波的输出功率已达到若干 GW, 极易引起击穿现象的发生^[1,2]. 由于高功率微波源系统内部为真空环境, 而产生的微波最终要传输到大气中, 所以需要介质窗密封微波源系统. 在介质窗气体侧, 背景气体压强通常在 50—760 Torr (1 Torr $\approx 133.322 \text{ Pa}$) 之间. 高功率微波在介质窗真空侧和气体侧都可能引发击穿现象^[3,4]. 若击穿现象发生, 则伴随产生的等离子体将严重影响微波的传输^[5,6]. 因此, 开展介质窗击穿特性研究对于了解和抑制击穿具有重要的实际意义.

高功率微波介质窗真空侧击穿已经引起很多学者的关注^[7–14]. 研究表明次级电子倍增是介质窗真空侧击穿的主导机理. 为了抑制介质窗真空侧击穿, 镀膜、周期性刻槽以及外加磁场或电场等方法被提出^[15–20]. 此外, Wen 等^[21]发现采用周期性的高斯型微波电场替代传统的正弦电场可以有效地抑制次级电子倍增. 相对于介质窗真空侧击穿的研究, 较少有报道涉及介质窗气体侧击穿^[22–24], 其研究难点主要体现在以下两个方面. 首先, 介质窗气体侧击穿的研究需要考虑多种反应过程, 如电子与中性气体之间的诸多碰撞反应、离子和电子的漂移和扩散、自组织电场形成等, 这些反应之间的相互作用和影响增加了研究的难度. 其次, 相对于介质

* 陕西省自然科学基金研究计划 (批准号: 2023-JC-YB-512, 2023-JC-YB-042) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: pczhao@xidian.edu.cn

窗真空侧击穿, 介质窗气体侧击穿的空间尺度以及带电粒子数量都变得更大, 这大大降低了计算的效率. Zhang 等^[22]利用粒子-蒙特卡罗碰撞模型研究了六氟化硫与氮气的混合气体中介质表面的击穿特性. Ford 等^[23]通过时域有限差分方法求解一维等离子体流体模型, 分析了气体压强对介质窗击穿特性的影响. 他们还将击穿时间的模拟值与实验数据进行了对比. 周前红等^[24]利用二维等离子体流体模型研究了介质表面附近气体击穿的时空演变特性, 重点考虑了击穿等离子体对微波电场的影响.

正如上文所述, 人们已经采用等离子体流体模型和粒子-蒙特卡罗碰撞模型对介质窗气体侧击穿进行了研究. 流体模型具有很高的计算效率, 但通常是基于准中性等离子体假设提出的^[23,24]. 在这种情况下, 流体模型仅包含电子密度连续性方程和电子动量传递方程, 未考虑离子的时空演化特性. 因此, 准中性的流体模型无法考虑由介质表面及其周围的电子和离子共同产生的自组织电场. 然而, 该自组织电场的模值在击穿的中后期阶段变得很大, 对等离子体的空间分布可能具有明显的影响. 若采用双流模型, 即包含关于电子和离子的密度、动量以及能量方程时, 可以实现自组织电场的计算. 尽管如此, 在微波击穿中, 等离子体在时间和空间上急剧地变化, 极易导致流体模型出现数值色散和不稳定性问题. 这给自组织电场的计算引入很大的误差. 相对于流体模型, 粒子-蒙特卡罗碰撞模型具有以下两个优势: 一是数值色散和不稳定性问题的影响不明显, 因此可更加自恰地计算自组织电场; 二是能够精确地描述微观物理过程, 例如带电粒子与中性气体的碰撞, 避免了流体模型中宏观平均的物理假设^[7]. 值得注意的是, 粒子-蒙特卡罗碰撞模型需要跟踪大量的带电粒子, 以致该模型的计算效率很低. 在整个击穿过程中, 等离子体密度能够增长 10^8 倍. 若宏粒子的权重保持不变, 则跟踪的宏粒子数量也大约增长 10^8 倍. 在这种情况下, 利用粒子-蒙特卡罗碰撞模型仿真整个击穿过程的效率很低且占用的计算机内存很大, 使该仿真很难实现.

对于击穿系统的宏观性质而言, 单个粒子的行为并不重要. 为减少计算机内存和提高计算效率, 宏粒子合并方法已被引入粒子-蒙特卡罗碰撞模拟中^[25]. 宏粒子合并方法涉及若干策略, 如二合一, 三合二以及四合二等. 三合二以及四合二方案虽然可以同时保持动量和能量守恒, 但并不一定具有更

好的效果. 此外, 这些方案在二维和三维情况中变得更加复杂. 尽管二合一方法不能同时保证粒子合并前后动量和能量守恒, 但与同时合并多个粒子的方法相比, 二合一方法具有以下两个优势. 首先, 它是一种更局部的操作, 因为只选择一对能量相近的邻居粒子, 这确保了粒子的分布特性不会发生很大的变化. 其次, 二合一方法涉及的自由度较少, 进而为新粒子设置属性更加简单.

本文在充分考虑微波介质窗气体侧击穿所涉及的诸多反应过程下, 采用粒子-蒙特卡罗碰撞模型对该击穿特性进行研究. 尽管宏粒子合并方法已经被应用到粒子-蒙特卡罗碰撞模拟中, 但就微波介质窗气体侧击穿而言, 之前的研究很少涉及该方法, 通常仅仅考虑等离子体密度增长 10^3 — 10^5 倍时的击穿演化特性^[7-9,12,22]. 本文将二合一的宏粒子合并方法引入粒子-蒙特卡罗碰撞模型^[25], 大大改进了计算效率, 从而对整个击穿过程中等离子体密度增长 10^8 倍的情况进行了模拟和分析. 为证实宏粒子合并方法的有效性, 将宏粒子权重为变量下的电子能量和密度与宏粒子权重为常数下的结果进行对比. 重点分析了整个击穿过程中介质表面周围自组织电场的形成及其对击穿演化特性的影响. 最后, 通过比较击穿时间的模拟值与实验数据, 对粒子-蒙特卡罗碰撞模型的准确性进行了验证.

2 粒子-蒙特卡罗碰撞模型

图 1 所示为高功率微波介质窗气体侧击穿的示意图. 假设均匀平面波沿 z 方向传播, 微波电场 E_{mw} 沿 x 方向, 微波磁场 H_{mw} 沿 y 方向. 微波电场 $E_{mw} = E_m \sin(2\pi ft)e_x$, 其中 E_m 为微波电场振幅, f 为微波频率, e_x 为 x 方向的单位矢量. 微波电场与磁场的振幅之比等于真空中的波阻抗 η_0 , 即 $\eta_0 \approx 377 \Omega$. 在高功率微波电场加速下, 电子获得较大的能量, 其与背景气体发生电离碰撞, 导致带电粒子数量急剧增加. 电子速度远大于带正电的离子的速度, 以至于到达介质表面的电子数量远大于离子的数量. 在高气压下, 次级电子发射产额通常小于 1, 即从介质表面发射的次级电子数量小于入射到介质表面的电子数量. 这导致越来越多的电子沉积在介质表面. 电子密度与离子密度在介质表面周围也存在着差异. 沉积在介质表面的电子与介质表面周围的净电荷共同产生了法向的自组织电场

E_n , 使得介质表面周围呈现非电中性. 该自组织电场将影响带电粒子的运动轨迹.

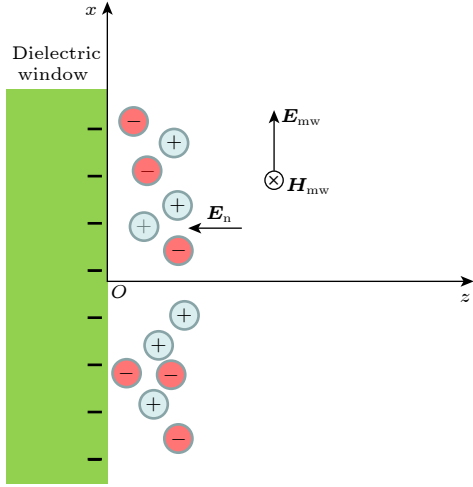


图 1 高功率微波作用下介质窗气体侧击穿的示意图
Fig. 1. Schematic diagram of breakdown on gas side of dielectric window of high power microwave.

粒子-蒙特卡罗碰撞模型是通过跟踪大量带电粒子的运动和碰撞而得到宏观物理特性的一种数值模型. 本文采用三维速度分布与一维空间分布的静电粒子-蒙特卡罗碰撞模型对介质窗气体侧击穿进行模拟^[5,7-10,14]. 通过该模型可以考虑带电粒子和自组织法向电场在介质表面法向 (z 轴) 上的时空演变特性. 介质窗气体侧击穿过程主要包含带电粒子的运动、自组织法向电场的形成、带电粒子与背景气体分子之间的碰撞反应以及介质表面次级电子发射. 另外, 为提高计算效率, 宏粒子合并方法被引入粒子-蒙特卡罗碰撞模型中.

在微波场和自组织法向电场的共同作用下, 带电粒子 (电子和离子) 的速度和位置满足如下关系:

$$\frac{d}{dt}m\mathbf{v} = q(E_n + E_{mw} + \mu_0\mathbf{v} \times H_{mw}), \quad (1)$$

$$\frac{dz}{dt} = v_z, \quad (2)$$

其中 m 和 q 分别表示带电粒子的质量和电量; $\mathbf{v}$ 是带电粒子的速度; v_z 是 $\mathbf{v}$ 在 z 轴上的分量; E_n 是自组织法向电场, E_n 与电位 ϕ 满足如下关系: $E_n = -\frac{\partial\phi}{\partial z}e_z$, 其中 e_z 是 z 轴方向上的单位矢量. 通过求解泊松方程可得到 ϕ , 该方程可写为

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (3)$$

其中, ρ 表示电荷密度, ϵ_0 为真空中的介电常数.

利用方程 (1) 和 (2) 可得到各个带电粒子的位置, 然后通过长度权重方法确定各个网格节点上的 ρ . 基于有限差分方法数值离散方程 (3), 导出的差分格式具有三对角矩阵的特点. 采用传统的追赶法快速求解该三对角矩阵, 就可以确定 ϕ 和 E_n .

带电粒子与背景气体的碰撞是有能量和动量交换的. 方程 (1) 和 (2) 仅仅表示带电粒子速度和位置随时间的变化. 其实, 我们是通过蒙特卡罗方法考虑带电粒子与中性气体之间的碰撞的^[7,8]. 为了专注击穿的基本物理特性, 避免了空气化学反应的复杂性, 因此假设背景气体为氩气. 如表 1 所列, 电子与氩气之间的碰撞仅仅涉及 3 种不同类型的反应, 即弹性散射、激发和电离反应. 对于离子与氩气原子之间的碰撞, 只考虑了电荷交换和弹性散射反应. 文献^[26]已经报道了带电粒子与氩气之间的碰撞截面. 在每个时间步长内, 利用蒙特卡罗方法判断带电粒子发生何种碰撞反应. 例如, 若电子与中性气体之间发生激发碰撞, 则碰撞之后的电子动能减小为 $E_k = E_{k0} - E_{exc}$, 其中 E_{k0} 为碰撞之前的电子动能, E_{exc} 为激发碰撞的反应阈值能量, 即 11.5 eV (见表 1). 根据碰撞之后的电子动能, 再结合弹性碰撞理论就可以更新电子速度^[8]. 尽管带电粒子在碰撞过程中会转移部分能量到中性气体中, 但是击穿时间很短且带电粒子密度相对于中性气体密度低若干个数量级. 因此忽略了带电粒子与中性气体的碰撞对中性气体温度的影响.

表 1 带电粒子与氩气之间的碰撞反应^[26]

Table 1. Collision reaction between charged particles and argon gas^[26].

类型	碰撞表达式	反应阈值/eV
弹性散射	$e + \text{Ar} \rightarrow e + \text{Ar}$	
激发	$e + \text{Ar} \rightarrow e + \text{Ar}^*$	11.5
电离	$e + \text{Ar} \rightarrow e + \text{Ar}^+ + e$	15.6
电荷交换	$\text{Ar} + \text{Ar}^+ \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar}$	
弹性散射	$\text{Ar} + \text{Ar}^+ \rightarrow \text{Ar} + \text{Ar}^+$	

模拟边界条件可能对计算结果具有很大的影响. 令介质窗表面位于左边界上, 即 $z = 0$ 处. 当 (初级) 电子与介质表面发生碰撞时, 该初级电子将沉积在介质表面上, 并且可能导致次级电子发射. 发射的次级电子数量与入射的初级电子数量之比被定义为次级电子发射产额. 当次级电子发射产额小于 1 时, 介质表面导致电子数量减少, 反之则导致电子数量增加. 次级电子发射产额依赖于电子的

入射角度和动能以及介质材料类型. 依据 Vaughan 的经验模型, 次级电子发射产额可表达为 [27]

$$\delta(\varepsilon_e, \theta) = \delta_{\max 0} (1 + \theta^2 / 2\pi) f(\varepsilon_e), \quad (4)$$

其中 ε_e 和 θ 表示初级电子的动能和入射角度, $\delta_{\max 0}$ 是电子垂直撞击介质窗时的最大次级电子发射产额, $f(\varepsilon_e)$ 是关于动能的依赖函数. 为了避免带电粒子的运动轨迹超越计算区域, 右边界被设置在远离介质表面的位置, 即 $z = 5 \text{ mm}$ 处.

在粒子-蒙特卡罗碰撞模拟中, 跟踪的带电粒子不是单个的电子或离子, 而是宏粒子. 宏粒子的权重通常取为 $10^6 - 10^{10}$ 之间的值, 即 1 个宏粒子代表 $10^6 - 10^{10}$ 个实际粒子的集合. 在介质窗气体侧击穿中, 带电粒子密度通常能够增长 10^8 倍. 若宏粒子的权重保持不变, 则宏粒子的数量大约也增长 10^8 倍. 在这种情况下, 很难模拟整个击穿过程. 因此, 本文引入了二合一的宏粒子合并方法. 值得注意的是, 当保证粒子合并前后动量守恒时, 两个粒子合并前后的动能存在差异, 可表示为 [25]

$$\Delta E_k = \frac{1}{2} m w_{\text{new}} (v_{\text{avg}}^2 - |\mathbf{v}_{\text{avg}}|^2), \quad (5)$$

其中, w_{new} 为新产生的宏粒子的权重, $\mathbf{v}_{\text{avg}}$ 为两个粒子合并前的平均速度, v_{avg}^2 为两个粒子合并前速率平方的平均值. 尽管如此, 下文证实了采用粒子合并方法 (变化的宏粒子权重) 得到的平均电子能量与不采用粒子合并方法 (固定的宏粒子权重) 得到的结果具有很小的差异.

实施宏粒子合并共分为以下五个步骤. 第一步, 设置宏粒子合并的临界粒子数量 N_c . 为了减小统计结果的起伏性, N_c 被取为一个较大的值, 即 $N_c = 300$. 第二步, 统计第 k 个网格内代表电子和离子的宏粒子数量 N_{ek} 和 N_{ik} , 其中空间网格编号 $k = 0, 1, 2, \dots, k_{\max}$. 第三步, 若 N_{ek} 或 N_{ik} 大于 N_c , 则进行宏粒子合并. 以第 k 个网格内的电子为例, 需要合并的宏粒子对数为 $N_{ek} - N_c$. 第四步, 对第 k 个网格内的宏粒子按照其速率大小进行排序, 相邻的宏粒子被视为邻居粒子. 第五步, 首先抽取 $N_{ek} - N_c$ 对相邻的宏粒子, 然后每两个邻居粒子合并为一个新的宏粒子, 而这两个旧的宏粒子则被删除. 新产生的宏粒子的权重、位置和速度分别为 [25]

$$w_{\text{new}} = w_i + w_j, \quad (6)$$

$$z_{\text{new}} = \frac{w_i z_i + w_j z_j}{w_i + w_j}, \quad (7)$$

$$\mathbf{v}_{\text{new}} = \frac{w_i \mathbf{v}_i + w_j \mathbf{v}_j}{w_i + w_j}, \quad (8)$$

其中, w_i 和 w_j 分别为第 i 和 j 个宏粒子的权重, z_i 和 z_j 分别为第 i 和 j 个宏粒子的位置, z_{new} 为新产生的宏粒子的位置, $\mathbf{v}_i$ 和 $\mathbf{v}_j$ 分别为第 i 和 j 个宏粒子的速度, $\mathbf{v}_{\text{new}}$ 为新产生的宏粒子的速度. 对所有空间网格执行第二到第五步的操作, 使得每个网格内代表电子或离子的宏粒子数量均小于 N_c . 由方程 (6)–(8) 可见, 宏粒子合并前后的动量是守恒的, 并且宏粒子的权重随时间不断增加.

3 模拟结果与分析

利用上述模型对微波介质窗气体侧击穿特性进行研究. 在计算中, 空间网格步长和时间步长分别取为 $1 \text{ } \mu\text{m}$ ($1 \text{ } \mu\text{m} = 10^{-6} \text{ m}$) 和 $1.67 \times 10^{-14} \text{ s}$. 模拟条件如下: 计算区域为 $0 \leq z \leq 5 \text{ mm}$, 介质窗表面位于 $z = 0$ 处, 微波电场的振幅和频率分别为 1 MV/m 和 2.85 GHz , 背景气体压强介于 $50 - 400 \text{ Torr}$ 之间, 种子电子均匀分布在 $0 \leq z \leq 50 \text{ } \mu\text{m}$ 之间, 密度为 $1 \times 10^{11} \text{ m}^{-3}$. 选取介质窗材料为聚四氟乙烯, 周围的气体种类为氩气. 由于击穿的空间尺度远小于微波的波长, 所以忽略了微波场随空间的变化, 仅仅考虑了微波场随时间的变化.

图 2 所示为背景气体压强为 100 Torr 下的微波电场、平均电子能量以及电子数量随时间的变化. 该图分别给出了宏粒子权重为变量和常数时的击穿演化结果. 在粒子-蒙特卡罗碰撞模拟中, 若采用宏粒子合并方法, 则宏粒子权重随时间不断增加, 即宏粒子权重为变量. 反之, 则宏粒子权重为常数. 在图 2(a) 中, 平均电子能量是指空间中所有电子的动能之和与电子数量的比值. 在压强为 100 Torr 下, 电子与气体之间发生频繁的碰撞, 导致电子损失很大的能量. 因此, 平均电子能量仅在 $6 - 9 \text{ eV}$ 之间振荡, 其频率是微波电场的 2 倍. 由于电子与气体之间发生链式电离反应, 导致电子数量近似成指数形式增加, 如图 2(b) 所示. 由图 2 还可以发现宏粒子权重为变量下的平均电子能量和电子数量均与宏粒子权重为常数下的结果符合得很好. 当时间 $t = 2.5 \text{ ns}$ 时, 宏粒子权重为变量下电子密度的空间分布与宏粒子权重为常数下的比较, 如图 3 所示. 该图的模拟条件与图 2 相同. 由

图3可见, 宏粒子权重为变量和常数下的电子密度分布匹配得很好. 除了压强为 100 Torr 的情况之外, 我们也确认了宏粒子合并方法在 50—400 Torr 的压强范围内是适用的. 平均电子能量与微波的等

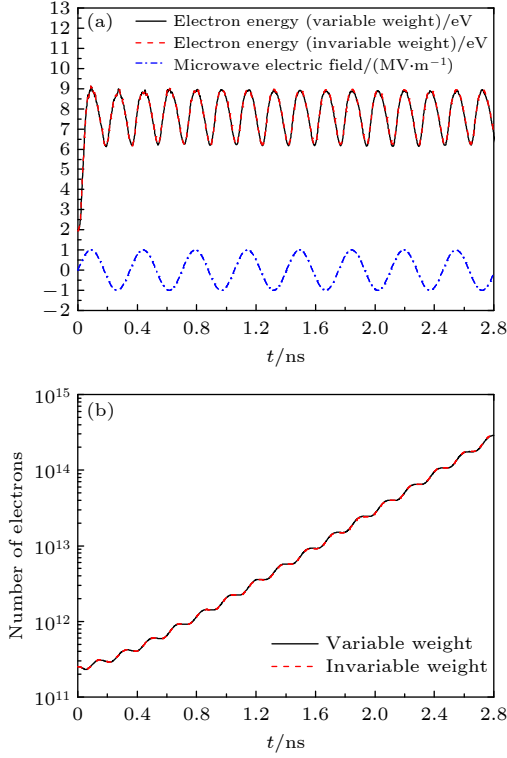


图2 在背景气体压强为 100 Torr 和宏粒子权重分别为变量与常数下, (a) 平均电子能量, 微波电场以及 (b) 电子数量随时间的变化

Fig. 2. The change of (a) mean electron energy, microwave electric field, and (b) number of electrons over time with the macro-particle weights as variables and constant, respectively. The background gas pressure is 100 Torr in this figure.

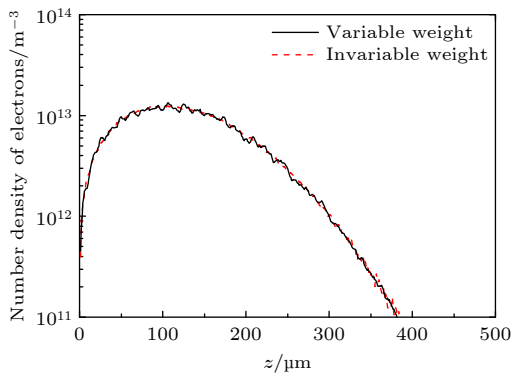


图3 在背景气体压强为 100 Torr 和宏粒子权重分别为变量与常数下, $t = 2.5$ ns 时的电子数密度随坐标 z 的变化

Fig. 3. The variation of electron number density with coordinate z at time $t = 2.5$ ns when the weights of macro-particles are variables and a constant, respectively. The background gas pressure is 100 Torr in this figure.

效电场有关, 该等效电场可写为^[7]

$$E_{\text{eff}} = \frac{E_m}{\sqrt{2}} \frac{\nu_m}{\sqrt{(2\pi f)^2 + \nu_m^2}}, \quad (9)$$

其中 E_m 和 f 分别为微波电场的振幅和频率, 电子与中性气体的碰撞率 ν_m 和压强 p 的关系可近似表达为 $\nu_m \approx 3.5 \times 10^9 p$. 在本文关注的模拟条件下, E_{eff}/p 在 $1.76 \times 10^3 - 1.41 \times 10^4$ V/(m·Torr) 范围内. 通过本文的研究, 可确定当 E_{eff}/p 在 $1.76 \times 10^3 - 1.41 \times 10^4$ V/(m·Torr) 之间时宏粒子合并方法是适用的.

图4所示为背景气体压强为 100 Torr 下宏粒子数量随时间的变化. 在宏粒子权重为常数下, 即不采用宏粒子合并方法时, 1 个宏粒子代表 10^8 个电子的集合. 在 0—2.8 ns 的时间段内, 宏粒子数量由 2500 急剧增长到 3×10^6 . 当宏粒子数量变得很大时, 相应的计算效率很低, 以致无法继续模拟带电粒子的时空演化特性. 将宏粒子合并方法引入模拟之后, 在 0—1.2 ns 的时间段内, 宏粒子数量由 2500 增长到 3.6×10^4 , 这与宏粒子权重为常数时的结果具有很小的差异. 尽管如此, 在 1.2 ns 之后, 由于部分网格内的宏粒子数量大于临界粒子数量 N_c , 所以不断地对一些宏粒子进行两两合并, 相应的宏粒子权重也逐渐增加. 这导致权重为变量时的宏粒子数量相对于权重为常数的情况增长得更加缓慢. 权重为变量时的宏粒子数量在 2.8 ns 时仅为 1.04×10^5 , 因此可以继续模拟带电粒子的时域演变特性. 在下文中, 都是基于宏粒子合并方法得到的结果.

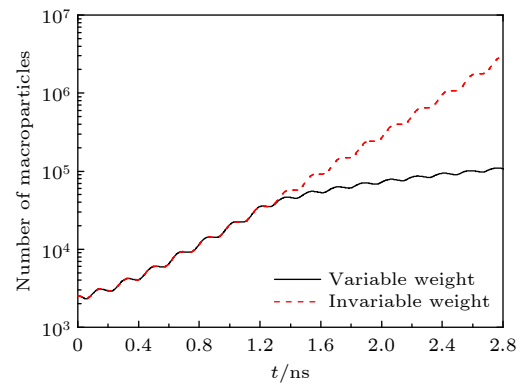


图4 在背景气体压强为 100 Torr 和宏粒子权重分别为变量与常数时, 代表电子的宏粒子数量随时间的变化

Fig. 4. The variation of the number of macro-particles representing electrons over time when the weights of macro-particles are variables and a constant, respectively. The background gas pressure is 100 Torr in this figure.

在背景气体压强为 100 Torr 下, 电子密度 n_d 的时空演化如图 5 所示. 图中, 横坐标表示时间, 纵坐标表示空间, 介质窗表面位于 $z = 0$ 处. 种子电子在初始时刻均匀地分布在 $0 < z < 50 \mu\text{m}$ 的狭窄区域, 密度仅为 $1 \times 10^{11} \text{ m}^{-3}$. 由于电子电离和扩散的作用, 电子的密度和分布宽度随时间显著增加. 在 0—7 ns 的时间段内, 电子密度大约升高了 10^8 倍, 分布宽度由 $50 \mu\text{m}$ 增长到 $1000 \mu\text{m}$. 在等离子体密度增长 10^8 倍之后, 该等离子体将吸收和反射微波电场, 导致等离子体下游区的微波电场与电离率变得很小 [5,24]. 因此, 击穿的空间尺度大致等于等离子体密度增长 10^8 倍时的分布宽度, 如图 5 所示的 100 Torr 的情况. 该图表明击穿的空间尺度大约为 $1000 \mu\text{m}$, 即毫米量级. 在文献 [23] 中, Ford 等通过实验发现击穿发光的厚度也在毫米量级. 这意味着本文模拟的击穿空间尺度与实验结果大致匹配.

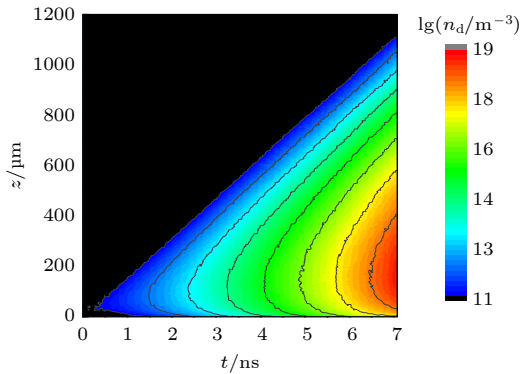


图 5 背景气体压强为 100 Torr 下电子密度 n_d 随时间和空间的变化

Fig. 5. The variation of electron density n_d with time and space under background gas pressure of 100 Torr.

通过模拟发现离子密度的时空演化与图 5 所示的电子密度相似. 离子密度在不同位置均接近电子密度, 如图 6 所示的 $t = 7 \text{ ns}$ 的情况. 该现象表明气体电离是介质窗气体侧击穿的主导机理. 尽管种子电子位于 $0 < z \leq 50 \mu\text{m}$ 的区域, 但是电子密度的峰值出现在 $100\text{—}150 \mu\text{m}$ 之间, 如图 5 和图 6 所示. 发生此现象的原因如下: 在压强为 100 Torr 时, 平均电子能量仅在 7 eV 附近振荡 (见图 2(a)), 对应的次级电子发射产额远小于 1. 在这种情况下, 从介质表面发射的次级电子数量小于入射到表面的初级电子数量, 以致介质表面上沉积越来越多的电子. 这些电子在介质表面周围形成负 z 方向的自

组织法向电场, 如图 6 所示的 $t = 7 \text{ ns}$ 的情况. 该自组织法向电场将驱使电子远离介质表面, 导致介质表面附近的电子密度较低. 然而, 在距离介质表面较远的位置, 由于缺乏足够的种子电子, 所以电子密度也很低. 因此, 电子密度的峰值没有出现在介质表面处而是出现在距离介质表面 $100\text{—}150 \mu\text{m}$ 之间的区域. 在 $t = 7 \text{ ns}$ 时, 等离子体密度接近 $1 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$, 相应的自组织法向电场在介质表面处已达到 -0.3 MV/m , 其大小与微波电场处于相同的量级. 整个击穿系统呈现电中性, 以至于自组织法向电场在远离介质表面的区域 ($z > 600 \mu\text{m}$) 接近零.

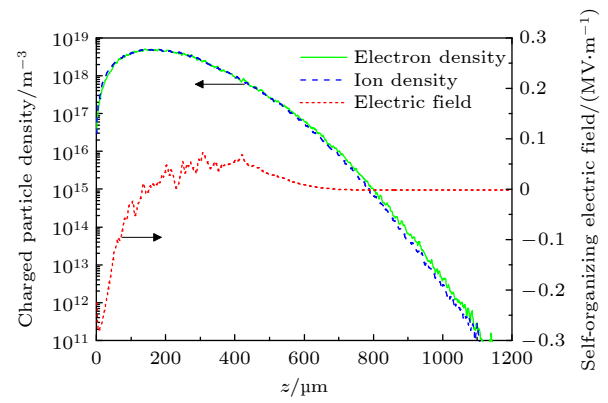


图 6 背景气体压强为 100 Torr 下带电粒子密度和自组织法向电场 E_n 在 $t = 7 \text{ ns}$ 时的空间分布

Fig. 6. Spatial profiles of charged particle density and self-organizing normal electric field E_n at time $t = 7 \text{ ns}$ under background gas pressure of 100 Torr.

本文也考虑了除 100 Torr 之外的其他压强下的击穿特性. 相应的等离子体密度和自组织电场的时空演化与图 5 和图 6 相似. 尽管如此, 随着压强的升高, 等离子体增长得更加缓慢, 如图 7 所示的 50, 100 和 200 Torr 的情况. 这是因为电子与气体之间的碰撞随着压强的增加而变得更加频繁, 以致平均电子能量和对应的电离率变得更低. 通过计算发现, 电离产生的电子数量远大于沉积在介质表面上的电子数量, 因而电子数量随着时间大致成指数形式增长了 10^8 倍, 如图 7 所示. 在这种情况下, 电子数量随时间的变化可近似表达为 $N_e(t) = N_{e0} \exp(\nu_{av}t)$, 其中 N_{e0} 为初始时刻的种子电子数量, ν_{av} 为电离率关于时间的平均值.

电离率和次级电子发射产额在一个微波周期内的统计平均值 ν_{av} 和 δ_{av} 如图 8 所示. 对于单一类型的气体, 电离率可表达为 [28]

$$\begin{aligned}\nu_{av} &= n_g \sigma_i v_e \\ &= 3.22 \times 10^9 \text{ s}^{-1} \left(\frac{p}{1 \text{ Torr}} \right) \left(\frac{\sigma_i v_e}{10^{-13} \text{ m}^3/\text{s}} \right),\end{aligned}\quad (10)$$

其中, n_g 为中性气体密度, σ_i 为电离截面, v_e 为电子速度, p 为压强. 随着压强 p 的增加, 电子与中性气体之间发生更加频繁的碰撞, 导致平均电子能量和对应的 $\sigma_i v_e$ 减小. 因此, 电离率随着压强先增加后减小, 对应最大电离率的临界压强通常在 10 Torr 附近^[28]. 本文关注 50—400 Torr 范围内的击穿特性, 即为高于该临界压强的情况, 以致相应的电离率由 $6 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 单调地减小到 $1.8 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$. 背景气体压强越高, 入射到介质表面上的电子能量越低. 因此, 平均二次电子发射产额 δ_{av} 随着压强的增加而减小. 当背景气体压强位于 50—400 Torr 之间时, δ_{av} 明显小于 1, 即发射的次级电子数量远

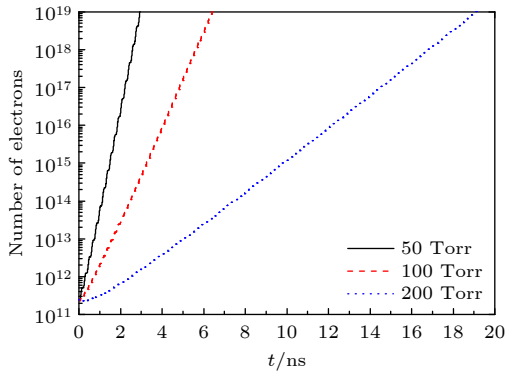


图 7 背景气体压强分别为 50, 100 和 200 Torr 时电子数量随时间的变化

Fig. 7. Change in the number of electrons over time under background gas pressures of 50, 100 and 200 Torr.

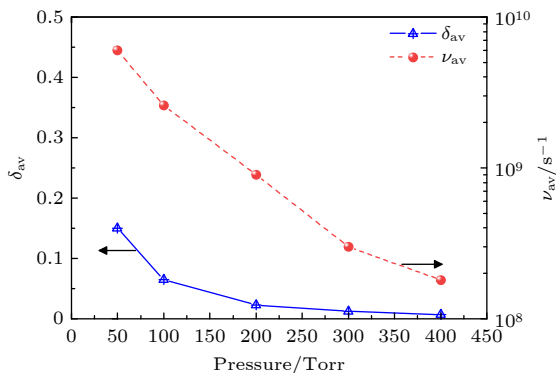


图 8 电离率与次级电子发射产额关于时间的平均值 ν_{av} 和 δ_{av} 随背景气体压强的变化

Fig. 8. The average values ν_{av} and δ_{av} of ionization rate and secondary electron emission yield with respect to time as a function of background gas pressure.

小于入射到介质表面上的电子数量. 综上所述, 电子数量的增长归因于气体电离, 而电子与介质表面的碰撞则引起电子数量的损失.

利用粒子-蒙特卡罗碰撞模型预测了不同背景气体压强下的介质表面击穿时间, 并与 Ford 等^[23]的实验数据进行了对比, 如图 9 所示. 该击穿时间被定义为电子密度增长 10^8 倍所需要的时间^[7]. 图 9 中的种子电子分布、背景气体种类、介质窗材料以及微波频率均与图 2—图 8 的模拟条件一致. 尽管如此, 为了能够与实验数据进行直接对比, 令图 9 中的微波电场振幅在 0—50 ns 之间从 0 线性地增加到 $1 \text{ MV} \cdot \text{m}^{-1}$, 而在 50 ns 之后该振幅一直被取为 $1 \text{ MV} \cdot \text{m}^{-1}$, 即微波电场含有 50 ns 的上升沿, 这与图 2—图 8 中恒定的微波电场振幅不同. 由图 9 可见, 击穿时间随着压强的升高而增加. 这是因为当压强升高时, 电离率变得更小 (见图 8). 击穿时间的模拟值在不同压强下均接近实验数据, 两者的差异可能归因于以下两个因素. 一是种子电子在模拟中被假设均匀地分布在介质窗附近, 这与实际中随机的种子电子分布不同. 二是击穿时间在模拟中的定义和实验诊断存在差异.

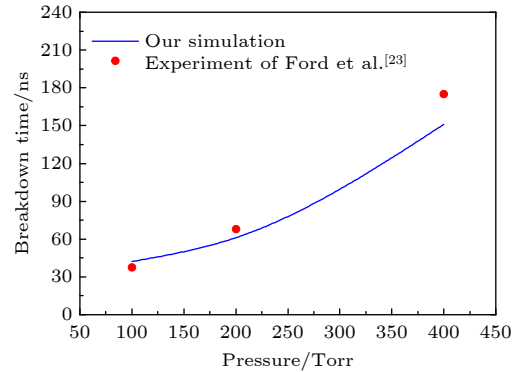


图 9 介质表面击穿时间的模拟值与实验数据^[23]的对比

Fig. 9. Comparison between simulated values of dielectric surface breakdown time and experimental data^[23].

4 结 论

在实际放电中, 等离子体密度在介质表面法向上的梯度远大于介质表面切向上的情况. 鉴于该原因, 本文采用一维粒子-蒙特卡罗碰撞模型对介质表面法向上等离子体和自组织电场的时空演化特性进行了模拟研究. 关注了背景气体压强大于 50 Torr 时介质表面击穿的时空演化特性. 将宏粒

子合并方法引入粒子-蒙特卡罗碰撞模型, 通过不断调节宏粒子权重, 大大降低了跟踪的宏粒子数量, 以至于能够考虑等离子体密度增长 10^8 倍时的整个击穿过程. 结果表明, 宏粒子权重为变量时的电子能量和密度均与宏粒子权重为常数时的结果符合得很好. 这证实了宏粒子合并方法的可行性. 本文关注的背景气体压强高于最大电离率对应的临界压强 (约为 10 Torr), 以致电离率随着压强的增加而单调地减小, 并使得击穿发展得更加缓慢. 击穿时间的模拟值在不同压强下均接近相应的实验数据, 从而证实了粒子-蒙特卡罗碰撞模型的准确性. 因此, 基于该模型可以相对快速且准确地预测击穿时间, 进而为实际应用中预测和控制击穿提供了重要的参考依据.

模拟结果还表明, 在介质窗气体侧击穿过程中, 次级电子发射产额远小于 1, 气体电离是击穿的主导机理. 由于电子电离和扩散的作用, 电子密度和分布宽度随时间显著增加. 当等离子体密度增长 10^8 倍时, 等离子体的厚度达到毫米量级, 与实验观察的空间尺度大致匹配. 电子密度的空间分布与离子密度相似. 等离子体密度的峰值未出现在介质表面处而是在距离介质表面 100—150 μm 的位置. 综上所述, 本文研究了等离子体和自组织电场的时空演化特性, 探明了介质窗气体侧击穿的时间和空间尺度, 这为实际中诊断击穿现象奠定了理论基础. 值得注意的是, 由于本文假设介质窗表面上的微波电场是均匀的, 所以采用一维模型仅仅考虑了介质窗法向上的击穿演变过程. 若考虑实际中的非均匀微波电场导致的沿面击穿过程, 则不得不采用二维或三维模型. 因此, 我们下一步将采用二维或三维模型对沿面击穿过程进行研究.

参考文献

- [1] Schaub S C, Shapiro M A, Temkin R J 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 175001
- [2] Yang H, Huang N C, Liu X C, Zheng Q L, Bao X Y, Yan E Y 2024 *High Power Laser and Particle Beams* **36** 043031 (in Chinese) [杨浩, 黄诺慈, 刘星辰, 郑强林, 鲍向阳, 闫二艳 2024
- [3] Wen D Q, Zhang P, Krek J, Fu Y, Verboncoeur J P 2022 *Phys. Rev. Lett.* **129** 045001
- [4] Chang C, Fang J Y, Zhang Z Q, Chen C, Tang C, Jin Q 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 141501
- [5] Zhao P, Wang R, Guo L 2022 *Plasma Sources Sci. Technol.* **31** 095005
- [6] Wang H, Liu L, Liu D, Meng L 2022 *IEEE Trans. Electron Dev.* **69** 4598
- [7] Kim H C, Verboncoeur J P 2006 *Phys. Plasmas* **13** 123506
- [8] Cai L B, Wang J G 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 1143 (in Chinese) [蔡利兵, 王建国 2010 物理学报 **59** 1143]
- [9] Dong Y, Dong Z W, Zhou Q H, Yang W Y, Zhou H J 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 067901 (in Chinese) [董烨, 董志伟, 周前红, 杨温渊, 周海京 2014 物理学报 **63** 067901]
- [10] Chang C 2018 *Chin. Sci. Bull.* **63** 1391 (in Chinese) [常超 2018 科学通报 **63** 1391]
- [11] Zuo C Y, Gao F, Dai Z L, Wang Y N 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 225201 (in Chinese) [左春彦, 高飞, 戴忠玲, 王友年 2018 物理学报 **67** 225201]
- [12] Shu P P, Zhao P C, Wang R 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 095202 (in Chinese) [舒盼盼, 赵朋程, 王瑞 2023 物理学报 **72** 095202]
- [13] Iqbal A, Wen D Q, Verboncoeur J, Zhang P 2023 *High Voltage* **8** 1095
- [14] Zhao P, Liu Z, Wang R, Shu P, Guo L, Cao X 2024 *Plasma Sci. Technol.* **26** 045401
- [15] Meng X C, Wang D, Cai Y H, Ye Z, He Y N, Xu Y N 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 107901 (in Chinese) [孟祥琛, 王丹, 蔡亚辉, 叶振, 贺永宁, 徐亚男 2023 物理学报 **72** 107901]
- [16] Hu T, Zhu S, Zhao Y, Sun X, Yang J, He Y, Wang X, Bai C, Bai H, Wei H, Cao M, Hu Z, Liu M, Cui W 2022 *Chin. Phys. B* **31** 047901
- [17] Chang C, Liu G, Tang C, Chen C, Fang J 2011 *Phys. Plasmas* **18** 055702
- [18] Chang C, Liu Y S, Verboncoeur J, Chen C H, Guo L T, Li S, Wu X L 2015 *Appl. Phys. Lett.* **106** 014102
- [19] Langellotti S V, Brusstar A, Jordan N M, Lau Y Y, Gilgenbach R M 2023 *IEEE Trans. Electron Dev.* **70** 5871
- [20] Zuo C Y, Gao F, Dai Z L, Wang Y N 2023 *Phys. Plasmas* **30** 062101
- [21] Wen D Q, Iqbal A, Zhang P, Verboncoeur J P 2022 *Appl. Phys. Lett.* **121** 164103
- [22] Zhang J, Jiang M, Luo W, Wang H, Li Y, Liu C 2020 *J. Appl. Phys.* **128** 143301
- [23] Ford P J, Beeson S R, Krompholz H G, Neuber A A 2012 *Phys. Plasmas* **19** 073503
- [24] Zhou Q H, Dong Y, Dong Z W, Zhou H J 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 085201 (in Chinese) [周前红, 董烨, 董志伟, 周海京 2015 物理学报 **64** 085201]
- [25] Teunissen J, Ebert U 2014 *J. Comput. Phys.* **259** 318
- [26] Peterson L R, Allen J E 1972 *J. Chem. Phys.* **56** 6068
- [27] Vaughan J R M 1989 *IEEE Trans. Electron Devices* **36** 1963
- [28] Lau Y Y, Verboncoeur J P, Kim H C 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 261501

Particle-in-cell-Monte Carlo collision simulation study on gas side breakdown characteristics of high-power microwave dielectric window^{*}

Shu Pan-Pan¹⁾ Zhao Peng-Cheng^{2)†}

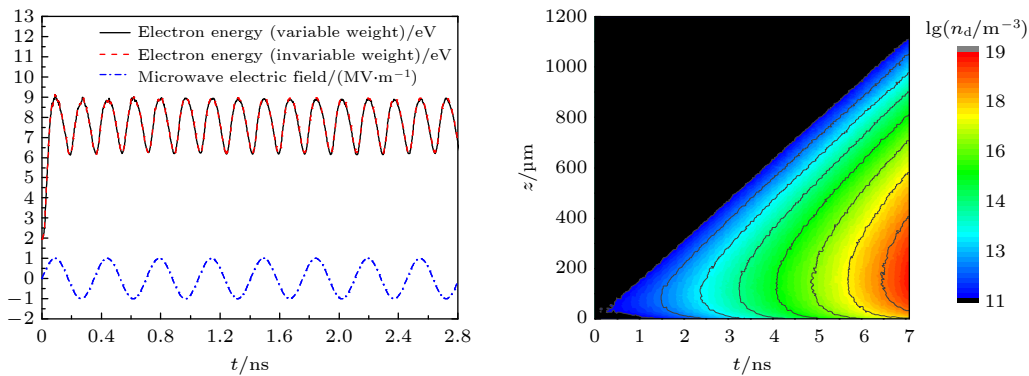
1) (*School of Science, Xi'an University of Technology, Xi'an 710054, China*)

2) (*School of Physics, Xidian University, Xi'an 710071, China*)

(Received 26 August 2024; revised manuscript received 9 October 2024)

Abstract

Gas breakdown is one of the key factors limiting the increase of power capacity of the outer surface of high-power microwave dielectric window. It is of great significance to conduct corresponding simulation studies. Compared with the fluid model, the particle-in-cell-Monte Carlo collision model has two advantages. One is that the influence of numerical dispersion and instability problems is insignificant, and the other is that it can accurately describe microphysical processes. Therefore, the breakdown characteristics on the gas side of dielectric window are simulated by using the particle-in-cell-Monte Carlo collision model. The two-in-one macro-particle merging method is introduced into the model, thereby greatly reducing the number of macro-particles tracked. Therefore, the whole breakdown process can be simulated and analyzed. The results show that the spatial and temporal evolution of breakdown under the variable macro-particle weight is in good agreement with that under the constant macro-particle weight. This suggests that the two-in-one macro-particle merging method is applicable under the simulation conditions of interest in this paper, i.e., when the ratio of the effective electric field of microwaves to the pressure is between 1.76×10^3 and 1.41×10^4 V/(m·Torr). Since the yield of the secondary electron emission is much less than 1, gas ionization is the dominant mechanism of breakdown on the gas side of dielectric window. Electron ionization and electron diffusion lead the density and thickness of the plasma to significantly increase over time. The peak of electron density does not appear at the dielectric surface, but at a position of 100–150 μm away from the dielectric surface. This is because a large number of electrons are deposited on the dielectric surface, and the accompanying self-organized normal electric field drives the electrons away from the dielectric surface. Because the pressure of background gas of interest in



^{*} Project supported by the Natural Science Basic Research Program of Shaanxi Province, China (Grant Nos. 2023-JC-YB-512, 2023-JC-YB-042).

[†] Corresponding author. E-mail: pczhao@xidian.edu.cn

this work is higher than the critical pressure corresponding to the maximum ionization rate (about 10 Torr), the ionization rate decreases monotonically with pressure increasing, resulting in a slower development of breakdown. The accuracy of the particle-in-cell-Monte Carlo collision model is confirmed by comparing the simulated values of breakdown time with experimental data. This work provides an important theoretical basis for understanding and controlling the breakdown on the gas side of dielectric window. The following figure (a) shows that the mean electron energy under the variable macro-particle weight agrees well with that under the constant macro-particle weight at about 100 Torr. The following figure (b) shows that when the plasma density is increased by a factor of 10^8 , the breakdown process can be considered by using the particle-in-cell-Monte Carlo collision model and a two-in-one macro-particle merging method.

Keywords: gas breakdown, dielectric surface, high-power microwave, particle-in-cell-Monte Carlo collision model, macro-particle merging method

PACS: 51.50.+v, 52.80.Pi

DOI: [10.7498/aps.73.20241177](https://doi.org/10.7498/aps.73.20241177)

CSTR: [32037.14.aps.73.20241177](https://cstr.net.cn/detail/32037.14.aps.73.20241177)

高功率微波介质窗气体侧击穿特性的粒子-蒙特卡罗碰撞模拟

舒盼盼 赵朋程

Particle-in-cell-Monte Carlo collision simulation study on gas side breakdown characteristics of high-power microwave dielectric window

Shu Pan-Pan Zhao Peng-Cheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 235101 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20241177

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241177>

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

110 GHz微波输出窗内表面次级电子倍增特性的电磁粒子模拟

Electromagnetic particle simulation of secondary electron multipactor characteristics in inner surface of 110 GHz microwave output window

物理学报. 2023, 72(9): 095202 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222235>

面向复杂求解域的高效粒子网格/蒙特卡罗模型与阳极层离子源仿真

High-efficient particle-in-cell/Monte Carlo model for complex solution domain and simulation of anode layer ion source

物理学报. 2023, 72(8): 085202 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222394>

基于T形四周期谐振慢波结构的X波段高功率微波产生技术的理论与仿真

Analysis and simulation of X-band high-power microwave generation based on T-shaped four-period slow-wave structure

物理学报. 2024, 73(9): 094101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231921>

高功率GaN 微波器件大信号缩放模型

A large-signal scaling model of high-power GaN microwave device

物理学报. 2023, 72(14): 147103 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230440>

基于蒙特卡罗原理的混合颗粒三相体系声衰减计算模型研究

Ultrasonic attenuation model of mixed particle three-phase system based on Monte Carlo method

物理学报. 2022, 71(7): 074303 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211869>

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>