

ПЛАЗМЕННО-ПУЧКОВЫЙ РАЗРЯД, ГАЗОВЫЙ РАЗРЯД И ПЛАЗМОХИМИЯ

УДК 533.9

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО СТРИМЕРА В АЗОТЕ

*В.И. Голота, Ю.В. Доценко, В.И. Карась, О.В. Мануйленко¹, А.С. Письменецкий
Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,
Харьков, Украина*

¹*E-mail: ovm@kipt.kharkov.ua*

Приведены результаты численного моделирования распространения отрицательного стримера в азоте методом конечных элементов. Показано, что использование слабой численной диффузии, прямо пропорциональной размеру элемента сетки, для стабилизации классического метода Галеркина позволяет адекватно описать отрицательный стример в азоте на грубых сетках.

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время существуют три подхода для численного моделирования плазмы и плазменно-химических реакторов: кинетический, при котором численно решаются уравнения Больцмана либо напрямую, либо с использованием метода макрочастиц с учетом столкновений по методу Монте-Карло [1-6], гидродинамический, при котором численно решаются уравнения для нескольких первых моментов уравнения Больцмана [6,7], и гибридные методы [8]. Выбор модели определяется длиной свободного пробега для каждого сорта частиц. Гидродинамическое описание требует, чтобы характерные масштабы неоднородностей разряда значительно превосходили соответствующие длины свободных пробегов частиц. Если это не так, то следует использовать кинетический подход. Гидродинамические и гибридные модели широко применяются для моделирования различных типов плазменных реакторов – индуктивных и емкостных источников плазмы, плазменных источников света, плазменных панелей [6-8]. Для численного моделирования разрядов, при давлениях порядка атмосферного, обычно используются гидродинамические и гибридные модели. В основном – дрейфово-диффузионное приближение, которое включает в себя уравнения непрерывности для соответствующих сортов частиц с ненулевыми правыми частями, описывающими рождение и гибель частиц, а также уравнение Пуассона для электростатического потенциала. Исключение составляет небольшое количество работ, где был применен метод макрочастиц совместно с методом Монте Карло, для численного моделирования лавинно-стримерного перехода [9], плазменных панелей [10,11] и ВЧ-разряда атмосферного давления [12]. Численному моделированию распространения стримера в рамках дрейфово-диффузионного приближения посвящены работы [7, 13-23]. В этих

работах, за исключением [7, 22, 23], использованы регулярные неадаптируемые сетки для решения уравнений непрерывности и Пуассона. Так как стример представляет собой сильно нелинейную структуру с хорошо выраженным фронтом, то для ее разрешения в численном эксперименте используются либо экспоненциальное представление для плотности тока в дрейфово-диффузионном приближении – схема Шарфеттера-Гуммеля [24], либо численные схемы с коррекцией потоков [25]. В [22] для разрешения в численном моделировании отрицательно заряженной головки стримера использована регулярная адаптируемая сетка. В работах [7, 23] для моделирования стримера использован метод конечных элементов с коррекцией потоков.

В данной работе приведены результаты моделирования отрицательного стримера в азоте методом конечных элементов. Известно [26], что при решении скалярного конвективно-диффузионного уравнения

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla n - \nabla \cdot (D \nabla n) = F, \quad (1)$$

где n – объемная плотность; \vec{v} – конвективная скорость; D – коэффициент диффузии; F – источник частиц, классическим методом Галеркина необходимо удовлетворить критерий устойчивости

$$Pe = \frac{|\vec{v}| h}{2D} < 1, \quad (2)$$

где $h < 1$ – размер элемента сетки. Если (2) не выполнено, то на решении возникают численные флуктуации, которые в случае нелинейного конвективно-диффузионного уравнения могут нарастать. С другой стороны, если в (1) $D \neq 0$, то всегда можно их подавить, выбрав меньший размер элемента сетки. Однако на практике такой подход не используется, так как он ведет к неразумно плотным сеткам. Простейшей техникой стабилизации решения является введение в уравнение (1) численной диф-

физии $D_{nd} = \delta_{nd} h |\vec{v}|$, где $\delta_{nd} \leq 0.5$. В этом случае (2) принимает вид

$$Pe = \frac{|\vec{v}| h}{2D + 2\delta_{nd} h |\vec{v}|} < 1, \quad (3)$$

откуда видно, что при $\delta_{nd} = 0.5$ и $D \neq 0$ условие (3) удовлетворено всегда, независимо от значений h и $|\vec{v}|$.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Система уравнений, описывающая распространение отрицательного стримера в азоте, имеет вид:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} - \nabla \cdot (n_e \mu_e \vec{E} + D_e \nabla n_e) = S_{iz}; \quad (4)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot (n_i \mu_i \vec{E} - D_i \nabla n_i) = S_{iz}; \quad (5)$$

$$\nabla^2 V = \frac{e}{\epsilon_0} (n_e - n_i), \quad \vec{E} = -\nabla V, \quad (6)$$

где n_e, n_i – плотности электронов и ионов; μ_e, μ_i – подвижности электронов и ионов; D_e, D_i – коэффициенты диффузии электронов и ионов соответственно; V – электрический потенциал; e – абсолютная величина заряда электрона; ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума. Источники S_{iz} в правых частях уравнений (4), (5) описывают образование электронов и положительных ионов благодаря ионизации. Вследствие сохранения полного заряда в уравнениях (4) и (5) источники S_{iz} одинаковы. Они могут быть представлены в виде:

$$S_{iz} = n_e \mu_e |\vec{E}| \alpha(|\vec{E}|), \quad (7)$$

где $\alpha(|\vec{E}|) = \alpha_0 \exp(-E_0 / |\vec{E}|)$; α_0 – коэффициент ионизации; E_0 – пороговое поле. Мы не включили в правые части уравнений (4), (5) другие источники/стоки заряженных частиц, такие как, прилипание, фотоионизация и рекомбинация, так как в случае чистого азота на временах, рассматриваемых в данном моделировании, вклад таких источников/стоков пренебрежимо мал по сравнению с ионизацией. Выражение (7) для ионизации в таунсендовском приближении позволяет ввести ряд естественных внутренних масштабов, характеризующих задачу о распространении отрицательного стримера. А именно, характерный пространственный масштаб – $l_0 = 1/\alpha_0$; характерное электрическое поле – E_0 ; характерную дрейфовую скорость – $v_0 = \mu_e E_0$; характерное время – $t_0 = l_0/v_0$; характерный коэффициент диффузии – $D_0 = l_0^2/t_0$ и, наконец, характерную плотность – $n_0 = \epsilon_0 E_0 / (e \cdot l_0)$. Для азота при нормальных условиях ($T_0 = 300$ К, $p_0 = 760$ Торр) выражение для таунсендовского коэффициента ионизации имеет вид:

$$\alpha(|\vec{E}|) = 5.7 \cdot p \cdot \exp(-260 p / |\vec{E}|), \quad (8)$$

где α выражается в см^{-1} , p – в Торр, E – в В/см. Подвижность электронов в нужной нам области полей может быть аппроксимирована выражением:

$$\mu_e = 3.5 \cdot 10^5 / p, \quad (9)$$

где μ_e выражается в $\text{см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$, а p – в Торр. Из (8), (9) несложно получить следующие выражения для $E_0 = 197600$ В/см, $\alpha_0 = 4332$ см^{-1} и $\mu_{e0} = 460$ $\text{см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1}$. Переходя в (4)-(6) к безразмерным переменным $\tilde{r} = r/l_0$, $\tilde{t} = t/t_0$, $\tilde{n}_e = n_e/n_0$, $\tilde{n}_i = n_i/n_0$, получим:

$$\frac{\partial \tilde{n}_e}{\partial \tilde{t}} - \nabla \cdot (\tilde{n}_e \vec{\tilde{E}} + D \nabla \tilde{n}_e) = \tilde{n}_e |\vec{\tilde{E}}| \exp\left(\frac{-1}{|\vec{\tilde{E}}|}\right); \quad (10)$$

$$\frac{\partial \tilde{n}_i}{\partial \tilde{t}} = \tilde{n}_e |\vec{\tilde{E}}| \exp\left(\frac{-1}{|\vec{\tilde{E}}|}\right); \quad (11)$$

$$\nabla^2 V = \tilde{n}_e - \tilde{n}_i, \quad \vec{\tilde{E}} = -\nabla V, \quad (12)$$

где опущен знак «тильда» над безразмерными переменными. Ионы (11) далее полагаются неподвижными, так как их подвижность на несколько порядков меньше электронной, что позволяет на временах, рассматриваемых в данном моделировании, пренебречь их смещением.

На Рис.1 показаны геометрия расчетной области и граничные условия. В начальный момент времени электроны и ионы с одинаковой плотностью, имеющие гауссовское распределение в пространстве $n_{e,i} = 10^{-4} \cdot \exp(-\tilde{r}^2/100)$, помещены в область катода, $|\vec{\tilde{E}}(\tilde{r}, t=0)| = 0.5$.

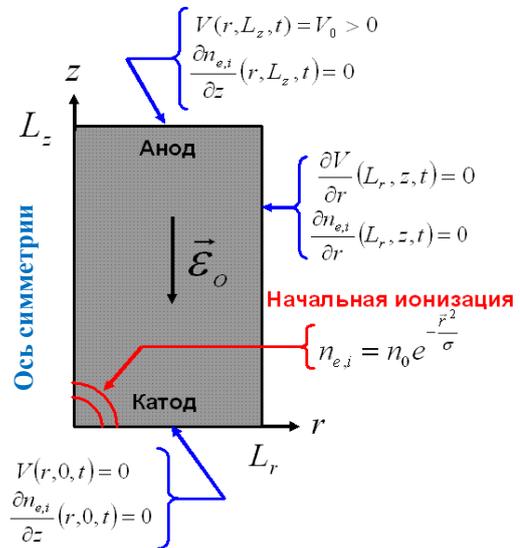


Рис.1. Геометрия расчетной области и граничные условия

На Рис.2 приведены результаты расчета динамика распределения электронной плотности в разрядном промежутке в различные моменты времени, а на Рис.3 – распределение объемной плотности заряда. Как видно из Рис.2, 3, электроны со временем движутся от катода к аноду, при этом вследствие ударной ионизации происходит наработка электронов и ионов. Стрелками на Рис.2, 3 изображена напряженность электрического поля. Как видно из Рис.2, оно начинает заметно отклоняться от начальной величины после $t=50$ (см. также Рис.5).

На Рис.4 приведено распределение объемной плотности заряда, а на Рис.5 – распределение z-компоненты электрического поля на оси разрядного промежутка в моменты времени $t=0, 25, 50, 75, 100, 125, 150, 165, 175, 190, 200$. Из Рис.2-4 хорошо видно, что наработка электронов в основном происходит в головке и в узкой области перед головкой стримера, где электрическое поле усилено.

Динамика распределения объемной плотности заряда и напряженности электрического поля в разрядном промежутке в процессе распространения отрицательного стримера (см. Рис.3-5) показывает, что за головкой стримера напряженность электрического поля понижена, т.е. наблюдается экранирование внешнего поля полем объемного заряда головки стримера.

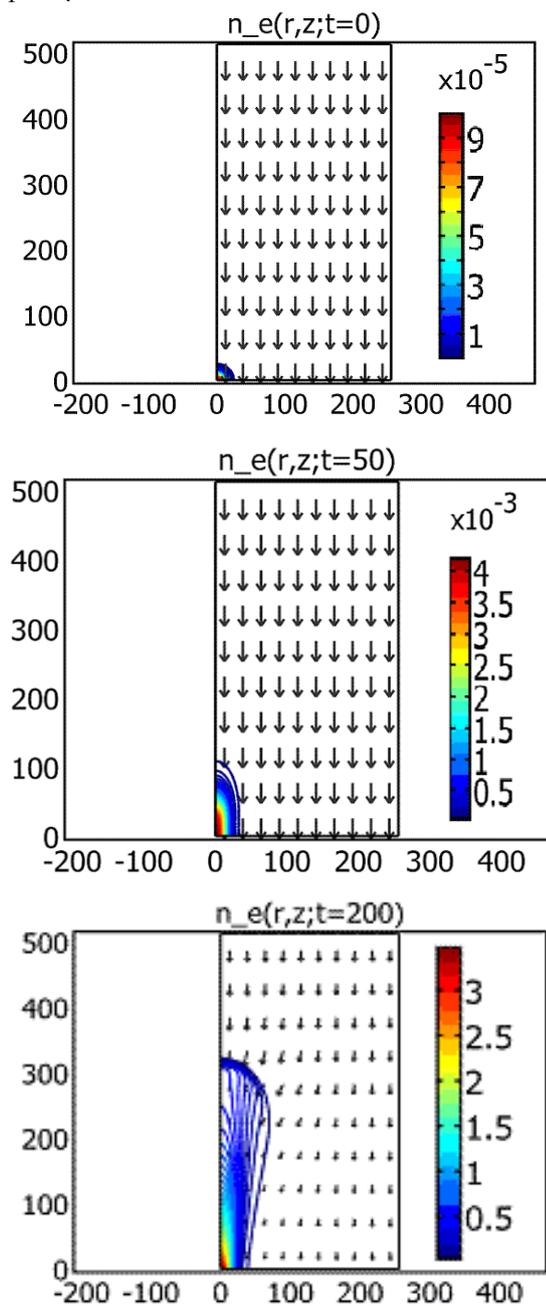


Рис.2. Распределение плотности электронов и напряженности электрического поля в моменты времени $t=0, 50, 200$

Как видно из Рис.2, 3, 5, в начальный момент времени безразмерное электрическое поле во всем разрядном промежутке, практически, однородно и составляет величину порядка 0.5, что соответствует полю, задаваемому потенциалом анода. Со временем, когда головка стримера сформирована, и стример движется к аноду, электрическое поле в разрядном промежутке становится сильно неоднородным, причем перед головкой стримера электрическое поле усилено, а за головкой – ослаблено. Так, в момент времени $t=175$ (см. Рис.5), максимальное значение z-компоненты электрического поля перед головкой стримера, практически, в два раза превосходит величину начального поля. Минимальное же значение электрического поля в этот момент времени достигается за головкой стримера,

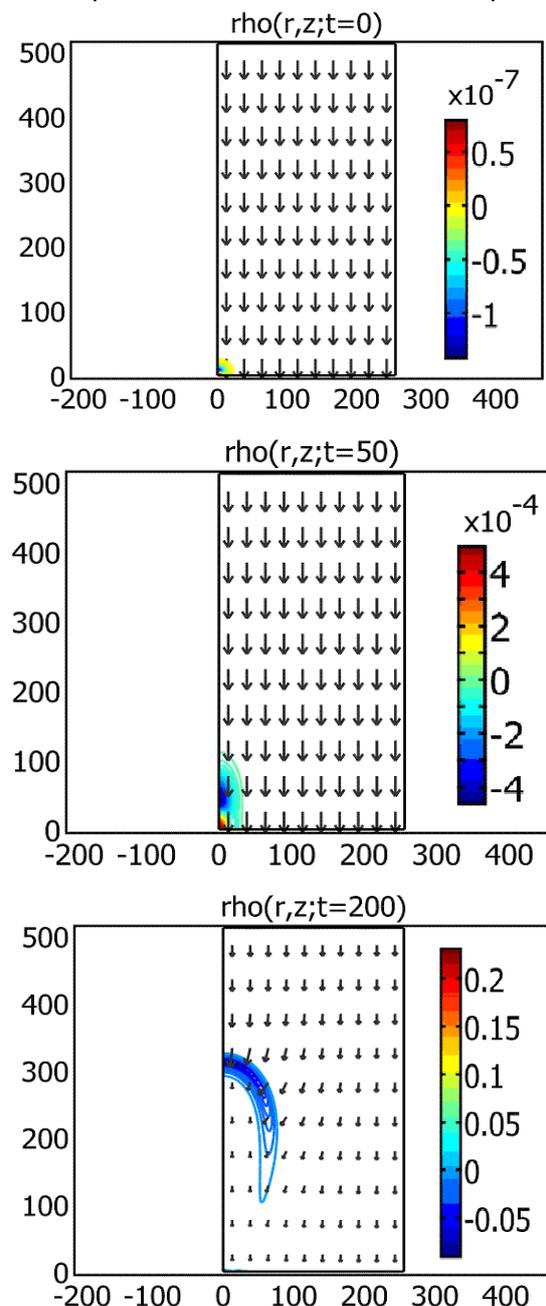


Рис.3. Распределение объемной плотности заряда и напряженности электрического поля в моменты времени $t=0, 50, 200$

оно в полтора раза меньше начального поля. Со временем, по мере распространения стримера к аноду, максимальное значение абсолютной величины электрического поля перед головкой стримера возрастает. По мере ухода стримера в металлическую границу – анод, максимальное значение абсолютной величины электрического поля в области анода понижается, а минимальное – подрастает.

После ухода стримера через анод, поле в разрядном промежутке восстанавливается, и опять создаются условия для формирования стримера.

Следует отметить, что область за головкой стримера остается, практически, квазинейтральной во время распространения стримера, что хорошо видно из Рис.3, 4.

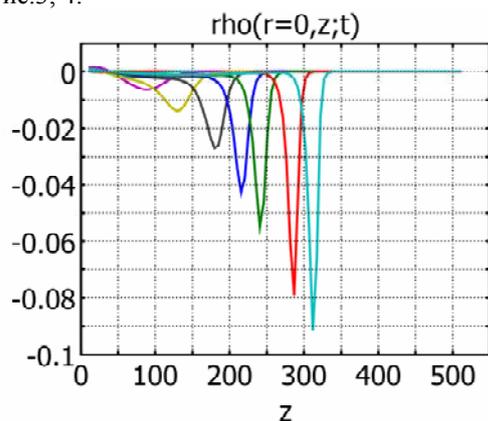


Рис.4. Распределение объемной плотности заряда на оси разрядного промежутка в различные моменты времени $t=0, 25, 50, 75, 100, 125, 150, 165, 175, 190, 200$

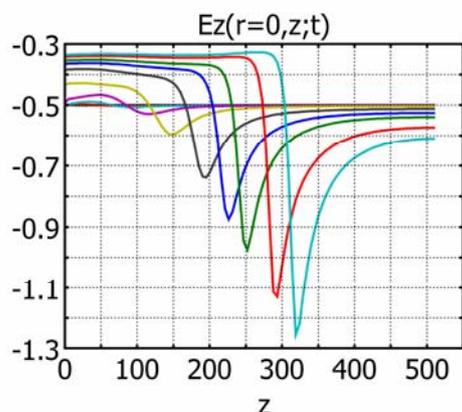


Рис.5. Распределение z-компоненты электрического поля на оси разрядного промежутка в различные моменты времени $t=0, 25, 50, 75, 100, 125, 150, 165, 175, 190, 200$

ВЫВОДЫ

В работе приведены результаты численного моделирования распространения отрицательного стримера в азоте методом конечных элементов. Показано, что использование слабой численной диффузии для стабилизации классического метода Галеркина позволяет физически адекватно описать отрицательный стример в азоте на не очень подробных сетках. Следует отметить, однако, что использованная в работе изотропная численная диффузия – самый простой метод стабилизации неустойчивого

решения на грубых нерегулярных сетках. Существуют другие методы решения нелинейных конвективно-диффузионных уравнений на грубых сетках, использующие как различные техники стабилизации [27-29] на неадаптируемых нерегулярных сетках, так и методы перекрывающихся и адаптируемых сеток [30,31].

ЛИТЕРАТУРА

1. C.K. Birdsall. Particle-in-Cell charged-particle simulations, plus Monte Carlo collisions with neutral atoms: PIC-MCC // *IEEE Trans. Plasma Sci.* 1991, v.19, p.65-85.
2. J.K. Lee, N.Y. Babaeva, O.V. Manuilenko, H.C. Kim, J.W. Shon. Simulation of capacitively coupled single and dual frequency RF discharges // *IEEE Trans. Plasma Sci.* 2004, v.32, p.47-53.
3. J.K. Lee, O.V. Manuilenko, N.Y. Babaeva, H.C. Kim, J.W. Shon. Ion energy distribution control in single and dual frequency capacitive plasma sources // *Plasma Sources Sci. Technol.* 2005, v.14, p.89-97.
4. O.V. Manuilenko, K.M. Minaeva. Ion energy and angular distributions in RF capacitively coupled plasma sources // *Problems Atomic Science and Technology. Series «Plasma Electronics and New Methods of Acceleration»*. 2006, №5, p.116-121.
5. O.V. Manuilenko, K.M. Minaeva, V.I. Golota. Ion energy and ion angular distributions in RF capacitively coupled plasma sources: pure argon and argon-oxygen mixtures // *Problems Atomic Science and Technology. Series «Plasma Electronics and New Methods of Acceleration»*. 2006, №6, p.228-230.
6. H.C. Kim, F. Iza, S.S. Yang, M. Radmilovic-Radjenovic, J.K. Lee. Particle and fluid simulations of low-temperature plasma discharges: benchmarks and kinetic effects // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2005, v.38, p.R283-R301.
7. G.E. Georghiou, A.P. Papadakis, R. Morrow, A.C. Metaxas. Numerical modelling of atmospheric pressure gas discharges leading to plasma production // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2005, v.38, p.R303-R328.
8. M.J. Kushner. Modelling of microdischarge devices: plasma and gas dynamics // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2005, v.38, p.1633-1643.
9. C. Li, U. Ebert, W.J.M. Brok. Avalanche-to-Streamer Transition in Particle Simulations // *IEEE Trans. Plasma Sci.* 2008, v.36, p.910-911.
10. Y.K. Shin, J.K. Lee, C.H. Shon, W. Kim. Ion energy distribution in alternating-current PDP cell // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1999, v.38, p.L174-L177.
11. C.H. Shon, J.K. Lee. Striation phenomenon in the plasma display panel // *Phys. of Plasmas*. 2001, v.8, p.1070-1080.
12. F. Iza, J.K. Lee, M.G. Kong. Electron kinetics in RF atmospheric-pressure microplasmas // *Phys. Rev. Lett.* 2007, v.99, p.075004.
13. A.A. Kulikovskiy. The structure of streamers in N₂. I. fast method of space-charge dominated plasma simulation // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 1994, v.27, p.2556-2563.

14. A.A. Kulikovskiy. The structure of streamers in N₂. II. Two-dimensional simulation // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 1994, v.27, p.2564-2569.
15. A.A. Kulikovskiy. Two-dimensional simulation of the positive streamer in N₂ between parallel-plate electrodes // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 1995, v.28, p.2483-2493.
16. A.A. Kulikovskiy. Positive streamer in a weak field in air: A moving avalanche-to-streamer transition // *Phys. Rev.* 1998, v.57, p.7066-7074.
17. A.A. Kulikovskiy. The role of photoionization in positive streamer dynamics // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2000, v.33, p.1514-1524.
18. M. Arrayás, U. Ebert, W. Hundsdorfer. Spontaneous branching of anode-directed streamers between planar electrodes // *Phys. Rev. Lett.* 2002, v.88, p.174502-174505.
19. A. Luque, V. Ratushnaya, U. Ebert. Positive and negative streamers in ambient air: modeling evolution and velocities // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2008, v.41, p.234005-234017.
20. C. Li, U. Ebert, W. Hundsdorfer. Spatially hybrid computations for streamer discharges with generic features of pulled fronts: I. Planar fronts // *J. Comput. Phys.* 2010, v.229, p.200-220.
21. N.Y. Babaeva, G.V. Naidis. Two-dimensional modelling of positive streamer dynamics in non-uniform electric fields in air // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 1996, v.29, p.2423-2431.
22. C. Montijn, W. Hundsdorfer, U. Ebert. An adaptive grid refinement strategy for the simulation of negative streamers // *J. Comp. Phys.* 2006, v.219, p.801-835.
23. G.E. Georghiou, R. Morrow, A.C. Metaxas. Two-dimensional simulation of streamers using the FE-FCT algorithm // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2000, v.33, p.L27-L32.
24. A.A. Kulikovskiy. A more accurate Scharfetter-Gummel algorithm of electron transport for semiconductor and gas discharge simulation // *J. Comp. Phys.* 1994, v.119, p.149-155.
25. J.P. Boris, D.L. Book. Solution of continuity equations by the method of flux-corrected transport // *Methods in computational physics.* 1976, v.16, p.85-129.
26. O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, P. Nithiarasu. *The finite element method for fluid dynamics.* Elsevier, 2005.
27. R. Cordina. Comparison of some finite element methods for solving the diffusion-convection-reaction equation // *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.* 1998, v.156, p.185-210.
28. C. Johnson. *Numerical solution of PDE by FEM.* Cambridge Univ. Press, 1987.
29. V. John, P. Knobloch. On spurious oscillations at layers diminishing (SOLD) methods for convection-diffusion equations: Part I – a review // *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.* 2007, v.196, p.2197-2215.
30. W. Bangerth, R. Rannacher. *Adaptive FEM for differential equations.* Birkhauser Verlag, 2000.
31. A. Schmidt, K.G. Siebert. *Design of Adaptive Finite Element Software.* Springer, 2000.

Статья поступила в редакцию 01.06.2010 г.

SIMULATION OF NEGATIVE STREAMER IN NITROGEN

V.I. Golota, Yu.V. Dotsenko, V.I. Karas', O.V. Manuilenko, A.S. Pismenetskii

The results of simulation of negative streamer propagation in nitrogen by a finite element method are presented. It is shown that the use of weak numerical diffusion, directly proportional to the size of a grid element, for stabilization of a Galerkin's classical method allows to describe adequately a negative streamer in nitrogen on rough grids.

ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ НЕГАТИВНОГО СТРИМЕРА В АЗОТІ

В.І. Голота, Ю.В. Доценко, В.І. Карась, О.В. Мануйленко, А.С. Письменецький

Наведено результати чисельного моделювання поширення негативного стримера в азоті методом кінцевих елементів. Показано, що використання слабкої чисельної дифузії, прямо пропорційної розміру елементу сітки, для стабілізації класичного методу Галеркіна дозволяє адекватно описати негативний стример в азоті на грубих сітках.