

电子束控制放电 CO₂-N₂ 激光器中 电子能量分布函数的计算

霍芸生 包智香 郑承恩

(中国科学院上海光机所)

提 要

用“稳态解法”对差分形式的电子能量分布的玻尔兹曼输运方程进行数值求解。与“舍时解法”^[2,3,4]相比,计算得到了较大的简化。

一、引 言

电激励 CO₂ 激光器中, 气体通常是弱电离的, 平均电子能量一般不大于 5 电子伏, 电子能量分布是非麦克斯韦型的, 且迄今尚无很好的方法直接测量。由于电子与气体分子的碰撞截面一般随电子能量而变化, 为求得电子对激光能级的激发速率等输运系数, 必须对具有各种能量的电子进行平均。因此, 电子能量分布函数的数值计算是研究 CO₂ 等电激励气体激光器的激光动力学和放电物理学的一项基础工作。国外在这方面做了很多工作^[1~4]。本文主要根据文献[2, 3]中所提出的差分形式的空间均匀、稳定电场的玻尔兹曼输运方程, 针对电子束控制放电大气压 CO₂ 激光器的某些实验条件, 进行数值求解。与文献[2, 3]中多次迭代的“舍时解法”不同, 我们采用了只须进行一次迭代的“稳态解法”, 使计算得到了较大的简化。

二、电子能量分布的玻尔兹曼 方程及其数值解

在弱电离等离子体中, 在忽略了超弹性

碰撞及电子—电子相互作用情况下的玻尔兹曼输运方程为:^[2,3]

$$\frac{\partial n(\epsilon)}{\partial t} = -\frac{\partial T_f}{\partial \epsilon} - \frac{\partial T_{el}}{\partial \epsilon} + \sum_{s,j} N_s [R_{sj}(\epsilon + \epsilon_{sj}^*) \cdot n(\epsilon + \epsilon_{sj}^*) - R_{sj}(\epsilon) n(\epsilon)] \quad (1)$$

$n(\epsilon)$ 满足归一化条件 $\int_0^\infty n(\epsilon) d\epsilon = 1$ 。

$$T_f = \frac{2Ne^2(E/N)^2 \epsilon}{3m(\nu/N)} \left(\frac{n}{2\epsilon} - \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \right)$$

$$\nu/N = \left(\frac{2\epsilon}{m} \right)^{1/2} \sum_s q_s \sigma_s(\epsilon)$$

其中 N 是气体分子数密度, E 是电场强度, q_s 是第 s 种气体的比分, $\sigma_s(\epsilon)$ 是能量为 ϵ 的电子与第 s 种气体分子碰撞的动量转移截面。

$$T_{el} = \bar{\nu} \left[n \left(\frac{KT}{2} - \epsilon \right) - KT \epsilon \frac{\partial n}{\partial \epsilon} \right]$$

$$\bar{\nu} = 2mN \left(\frac{2\epsilon}{m} \right)^{1/2} \sum_s q_s \sigma_s(\epsilon) / M_s$$

$$R_{sj} = \sigma_{sj}(\epsilon) \sqrt{\frac{2\epsilon}{m}} \quad (3)$$

其中 M_s 是第 s 种分子的质量, $\sigma_{sj}(\epsilon)$ 是能量为 ϵ 的电子把第 s 种分子从基态激发到第 j 个能级的碰撞激发截面。方程(1)右边第一

收稿日期 1978 年 10 月 19 日。

项描述了外加电场 E 所驱动的电子在能量轴上的通量; 第二项、第三项分别代表弹性及非弹性碰撞对电子能量分布的影响。

现将电子能量轴分成 L 个宽度为 $\Delta\epsilon$ 的单元, 通过有限差分将方程 (1) 变换成由 L 个方程所组成的常微分方程组^[2, 3]:

$$\begin{aligned} \dot{n}_k = & a_{k-1} n_{k-1} + b_{k+1} n_{k+1} - (a_k + b_k) n_k \\ & + \sum_{s,j} N_s [R_{sj, k+m_{sj}} n_{k+m_{sj}} - R_{sj, k} n_k] \end{aligned} \quad (4)$$

$$k=2, 3, \dots, L-2, L-1.$$

其中:

$$\begin{aligned} a_k = & \frac{2Ne^2}{3m} (E/N)^2 \frac{1}{\nu_k^+/N} \left(\frac{1}{\Delta\epsilon} \right)^2 \left(\epsilon_k^+ + \frac{\Delta\epsilon}{4} \right) \\ & + \frac{\bar{\nu}_k}{2\Delta\epsilon} \left(\frac{KT}{2} - \epsilon_k^+ + \frac{2KT}{\Delta\epsilon} \epsilon_k^+ \right) \\ b_{k+1} = & \frac{2Ne^2}{3m} (E/N)^2 \\ & \times \frac{1}{\nu_k^+/N} \left(\frac{1}{\Delta\epsilon} \right)^2 \left(\epsilon_k^+ - \frac{\Delta\epsilon}{4} \right) \\ & + \frac{\bar{\nu}_k}{2\Delta\epsilon} \left(\epsilon_k^+ - \frac{KT}{2} + \frac{2KT}{\Delta\epsilon} \epsilon_k^+ \right) \\ \epsilon_k^+ = & (\epsilon_k + \epsilon_{k+1})/2 \end{aligned}$$

ν_k^+ 是在 ϵ_k^+ 处的 ν_k 的值。

对于能量轴边界上的两点 $k=1$ 及 $k=L$ 有:

$$\begin{aligned} \dot{n}_1 = & b_2 n_2 - a_1 n_1 + \sum_{s,j} N_s R_{sj, 1+m_{sj}} n_{1+m_{sj}} \\ \dot{n}_L = & a_{L-1} n_{L-1} - b_L n_L - \sum_{s,j} N_s R_{sj, L} n_L \end{aligned}$$

它与文献[2]中所给边界条件等价, 但这种形式便于使用且有明确的物理意义。

方程(4)也可用矩阵形式表示为:

$$\dot{\vec{n}}_k = \sum_{i=1}^L C_{ki} n_i \quad (k=1, 2, \dots, L) \quad (5)$$

为求得稳态电子分布, 在文献[2-4]中采用了“含时解法”即假定 $t=0$ 时在能量轴的 L 个格点上的一组电子能量分布 $\vec{n}(0)$, 运用(5)推得的方程

$$(I - Ch) \cdot \vec{n}(t+h) = n(t)$$

经过多次迭代(一般约数百次)^[4], 收敛到一组稳态解。

与上述“含时解法”不同, 我们采用了“稳态解法”。因为既然所求的是稳态电子能量分布, 既然“含时解法”无非就是经过多次迭代, 找到一组分布函数, 使得在所有的格点上满足 $\dot{n}_k=0$ 。则我们可直接令 $\dot{n}_k=0$, (5)式所表示的微分方程组即变为一线性代数方程组:

$$\sum_{i=1}^L C_{ki} n_i = 0 \quad (k=1, 2, \dots, L) \quad (6)$$

矩阵 C 具有 Upper Hessenberg 形式^[2], 在其主对角线下方, 只有第一条对角线上有非 0 元素, 其余矩阵元均为 0。则从方程组(6)中的第 L 个方程向上, 可依次写出下列方程:

$$\left. \begin{aligned} C_{L, L-1} n_{L-1} + C_{L, L} n_L &= 0 \\ C_{L-1, L-2} n_{L-2} + C_{L-1, L-1} n_{L-1} \\ &+ C_{L-1, L} n_L = 0 \\ C_{L-2, L-3} n_{L-3} + C_{L-2, L-2} n_{L-2} \\ &+ C_{L-2, L-1} n_{L-1} + C_{L-2, L} n_L = 0 \\ &\dots\dots\dots \\ C_{k, k-1} n_{k-1} + C_{k, k} n_k + C_{k, k+1} n_{k+1} \\ &+ \dots\dots + C_{k, L} n_L = 0 \\ &\dots\dots\dots \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

任意假定在最后一个格点 L 上的 n_L 的值(例如令 $n_L=10^{-8}$), 则由(7)中的第一个方程可求出 n_{L-1} , 依此类推, 可依次求得 n_{L-2} , $n_{L-3}, \dots, n_k, \dots, n_2, n_1$ 。再用归一化条件 $\sum_{k=1}^L n_k = 1$ 进行求和归一, 即得到一组归一化的稳态电子能量分布。

一旦求得了电子能量分布函数, 即可算出电子漂移速度 V_d 、电子对第 s 种气体分子的第 j 个能级的激发速率 ν_{sj} 等输运系数。对于一组 E/N 及气体比份 ψ_s , 在 TQ-16 计算机上, 4 分钟可以算出一组电子能量分布及各种输运系数。与含时解法的多次迭代相比, 所需机时约降低了一个数量级。

对于 $\text{CO}_2\text{-N}_2\text{-He}$ 气体混合物, 我们求解玻尔兹曼输运方程时所用的电子碰撞截面数据取自文献[6]。它包括了电子对 CO_2 分子

的 12 个非弹性碰撞过程, 对 N_2 的 15 个非弹性碰撞过程, 对 He 的电离过程及到 2^3s 态的激发过程以及电子与 CO_2 、 N_2 、He 的弹性碰撞过程。

对于文献[1]中所给出的电子能量分布及输运系数值, 用现在的稳态解法进行计算, 结果符合得很好。

根据实验工作及对激光动力学过程进行计算机模拟的需要, 着重计算了在 CO_2-N_2 及 CO_2-N_2-He 混合物中, 当气体比分变化时, 电子能量分布及输运系数的变化。

三、结果与讨论

在图 1 中绘出了当 E/N 值变化时, $CO_2:N_2=1:4$ 混合物中, 电子能量分布函数的变化。当 E/N 增大时, 电子将从外电场得到较多的能量, 因此高能电子增多, 电子能量分布向高能方向移动。

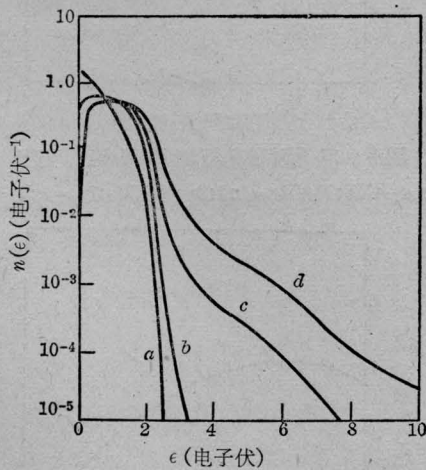


图 1 CO_2-N_2 混合物对各种 E/N 值的电子能量分布函数

$CO_2:N_2=1:4$, $a-E/N=1 \times 10^{-16}$ 伏·厘米²;
 $b-E/N=1.75 \times 10^{-16}$ 伏·厘米²; $c-E/N=3 \times 10^{-16}$ 伏·厘米²; $d-E/N=4 \times 10^{-16}$ 伏·厘米²

在图 2、图 3 中绘出了对于固定的 E/N , 当在 CO_2-N_2 混合物中的含氮量及在 CO_2-N_2-He 混合物中 CO_2-N_2 固定为 3:2, He 的含量变化时, 电子能量分布函数的变化。

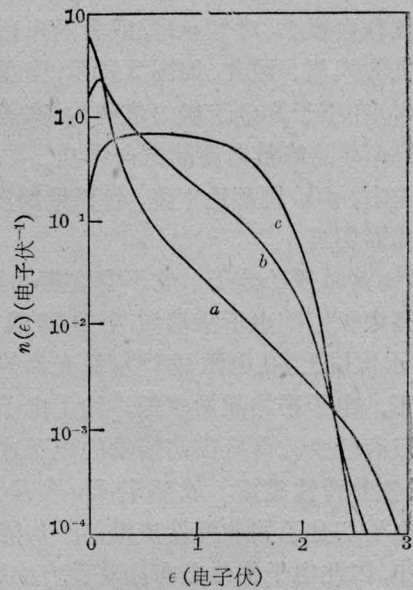


图 2 CO_2 及 N_2 的混合物对各种含 N_2 量的电子能量分布函数

$E/N=1.33 \times 10^{-16}$ 伏·厘米², a —纯 CO_2 ;
 $b-CO_2:N_2=1:1$; $c-CO_2:N_2=1:9$

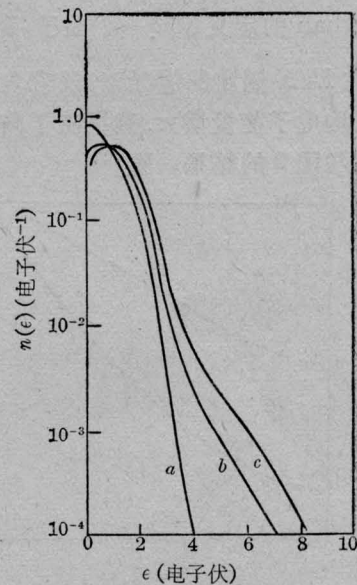


图 3 CO_2-N_2-He 混合物对各种含 He 量的电子能量分布函数

$E/N=2 \times 10^{-16}$ 伏·厘米². $a-CO_2:N_2:He=3:2:1$;
 $b-CO_2:N_2:He=3:2:6$; $c-CO_2:N_2:He=3:2:8$

电子对 N_2 的基电子态的 $V=1 \sim 5$ 振动能级的碰撞激发截面, 在 2 电子伏左右, 有较大的值。而在低于 1.8 电子伏的范围内, 或

者激发截面很小(对 $V=1$), 或者尚未达到振动激发的阈值。因此, 如图 2 所示, 当含氮量增加时, 在小于 2 电子伏的范围内, 高能电子增多, $n(\epsilon)$ 的峰值向高能方向移动。在 2 电子伏左右, $n(\epsilon)$ 剧烈地下降, 含氮量越多, 这种现象越明显。

He 是单原子分子, 它不存在振动能级, 对其高电子态的电子碰撞激发的阈值均在 19 电子伏以上。在电激励 CO_2 激光器的典型条件下, 电子平均能量较低, 约 1 电子伏左右, 只有极少数具有很高能量的电子才能与 He 发生非弹性碰撞。故随着 He 含量的增多, 电子与分子的非弹性碰撞的平均能量损耗减小, 因此电子能量分布向高能方向移动。

在图 4 中绘出了平均电子能量 u_r 随含氮量的变化。定义平均电子能量为

$$u_r = \int_0^{\infty} \epsilon n(\epsilon) d\epsilon$$

它与 Nighan 的定义相差一个因子 $\frac{2}{3}$ 。如图所示, 在 E/N 固定的情况下, 随着含氮量的增多, 平均电子能量增大, 这反映了高能电子的增多, 与图 2 的结果一致。

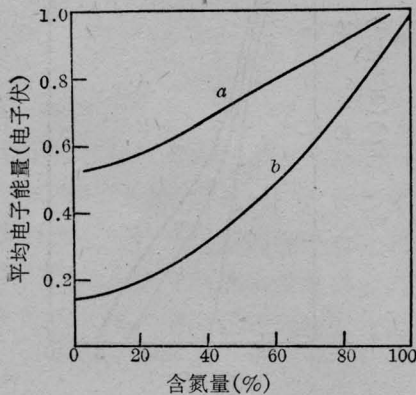


图 4 $\text{CO}_2\text{-N}_2$ 混合物平均电子能量 u_r 随 N_2 含量的变化

$$u_r = \int_0^{\infty} \epsilon n(\epsilon) d\epsilon. \quad a - E/N = 2 \times 10^{-16} \text{ 伏} \cdot \text{厘米}^2; \\ b - E/N = 1.33 \times 10^{-16} \text{ 伏} \cdot \text{厘米}^2$$

从图 5 可以看到, 当气体比分给定时, 随着 E/N 的增大, 电子所受外电场沿场方向的加速作用增强, 故电子漂移速度 V_d 增大。

但 V_d 与 E/N 不是线性关系, 迁移率是随着 E/N 变化的。

在图 6 中可看到, 当 E/N 给定时, 在 $\text{CO}_2\text{-N}_2$ 混合物中, 随着含氮量的增大, 漂移速度 V_d 先是增大, 在达到一个峰值后又下降。在我们进行实验研究的电子束控制放电 $\text{CO}_2\text{-N}_2$ 激光器中, 含氮量一般大于 50%, 故 V_d 随 N_2 含量的增加而下降。可是从实验中发现, 在电子束束流密度一定的情况下, 随着含氮量的增加, 主放电电流密度 j 增大。由

$$j = en_e V_d$$

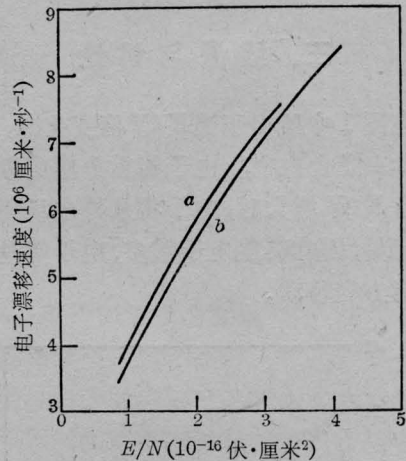


图 5 电子漂移速度随 E/N 值的变化
a— $\text{CO}_2:\text{N}_2:\text{He}=1:2:3$; b— $\text{CO}_2:\text{N}_2=1:4$

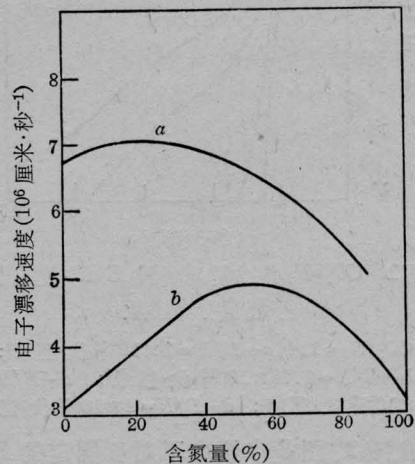


图 6 $\text{CO}_2\text{-N}_2$ 混合物电子漂移速度随含氮量的变化

$$a - E/N = 2 \times 10^{-16} \text{ 伏} \cdot \text{厘米}^2; \quad b - E/N = 1.33 \times 10^{-16} \text{ 伏} \cdot \text{厘米}^2$$

可推知, 电子密度 n_e 随着含氮量的增加而增大。

在图 7 中绘出了电子对 N_2 及 CO_2 的各个振动模的有效电子振动激发速率 ν_{eff}/N_j 与含氮量的关系, 其中有效振动激发速率按照 Nighan 的定义^[1] 为:

$$\frac{\nu_{eff}}{N_j} = \sum_k \frac{u_{jk}}{u_{j1}} \frac{\nu_{jk}}{N_j}$$

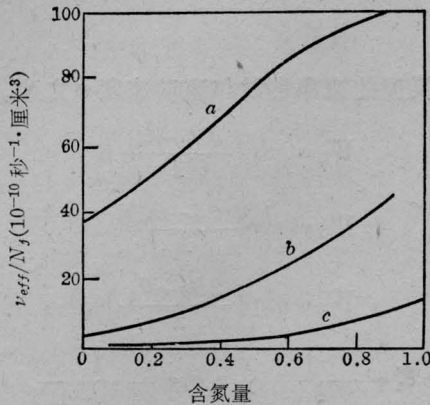


图 7 CO_2-N_2 混合物的有效电子振动激发速率
 $E/N=1.33 \times 10^{-16}$ 伏·厘米²。a— $CO_2(\nu_1, \nu_2)$ 模;
b— $CO_2(\nu_3)$ 模, c— N_2 振动模

从图中可看到, 当含氮量从 40% 增大到 80% 时, 电子对 N_2 的激发速率增大了 3 倍。这是由于如前所述当含氮量增多时, 在 CO_2-N_2 混合物中 2 电子伏附近的高能电子增多, 这些电子对 N_2 振动能级的碰撞激发截面较大; 同时也由于当含氮量增多时, 电子平均能量增大, 亦即电子平均热运动的速率增大。而定性有激发速率 $\frac{\nu_{jk}}{N_j} \propto \bar{Q}_{jk} \bar{v}$, 故随含氮量而增大。

在图 8、图 9 中分别给出了在 CO_2-N_2 及 CO_2-N_2-He 混合物中, 功率输运比随 N_2 或 He 含量的变化。当在这两种混合物中, 分别增加 N_2 或 He 含量时, 输运到 CO_2 的 $\nu_1 \cdot \nu_2$ 模中的功率与电子从电场汲取的功率之比下降, 而输运到 CO_2 的 ν_3 模及 N_2 的振动模也即输运到 CO_2 激光上能级的功率比上升。

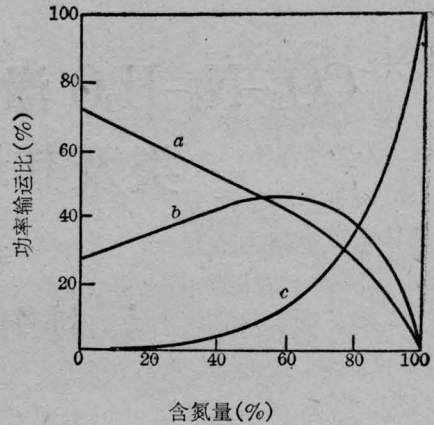


图 8 CO_2-N_2 混合物中电子功率输运比
 $E/N=1.33 \times 10^{-16}$ 伏·厘米² a— $CO_2(\nu_1, \nu_2)$ 模;
b— $CO_2(\nu_3)$ 模; c— N_2 振动模

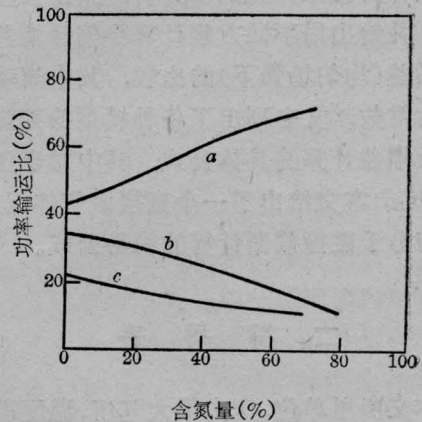


图 9 CO_2-N_2-He 混合物中电子功率输运
比随 He 含量的变化
 $CO_2:N_2=1:2$; $E/N=2 \times 10^{-16}$ 伏·厘米²
a— N_2 振动模; b— $CO_2(\nu_3)$ 模; c— $CO_2(\nu_1, \nu_2)$ 模

参 考 文 献

- [1] W. L. Nighan; *Phys. Rev. A*, 1970, **2**, 1989.
- [2] S. D. Rockwood; *Phys. Rev. A*, 1973, **8**, 2348.
- [3] S. D. Rockwood; *IEEE J. Quant. Electr.*, 1973, **QE-9**, 120.
- [4] A. N. Labanav; *Soviet J. Quant. Electr.*, 1975, **4**, 843.
- [5] J. J. Lowke; *J. Appl. Phys.*, 1973, **44**, 4664.
- [6] LA-4823, "Numerical Solution of Boltzman equation for energy dischibution of electronce with inelastic scattering on molecular".