

## Cálculo de la función de distribución en energía por el método de Monte Carlo para descargas de cátodo hueco en Neón

### The electron function distribution in hollow cathode discharge in Neon computed by the Monte Carlo method

D'Accurso V. , Manzano F. A.

CEntro de Investigaciones en Láseres y APlicaciones (CEILAP),  
 Instituto de Investigaciones Científicas y Técnicas para la Defensa (CITEDEF) – CONICET  
 J.B. La Salle 4397 (1603) Villa Martelli, Pcia. de Buenos Aires  
*e-mail: fmanzano@citefa.gov.ar*

Para describir descargas de luminiscencia negativa en cátodo hueco cilíndrico es necesario conocer la función de distribución en energía de los electrones. Con esta finalidad, se realizó el cálculo de la misma por el método de Monte Carlo suponiendo que el campo eléctrico en la caída catódica es radial y varía linealmente, mientras que en la zona de luminiscencia negativa, el mismo es débil, en dirección axial y prácticamente constante. Se consideraron los procesos de colisiones elásticas átomo-electrón, de ionización y de excitación electrónica desde el estado fundamental para el átomo de Neón. Para distintas condiciones de cálculo (presión del gas y espesor de caída catódica), la función de distribución obtenida en la zona de luminiscencia negativa esta compuesta por electrones de muy alta energía y dos maxwellianas de temperaturas del orden de 4.000 K y 50.000 K cuyas proporciones varían con las condiciones de cálculo pero resultan independientes de la posición radial. También se obtuvo de dicho modelo el número de ionizaciones por electrón eyectado desde el cátodo y la variación de la densidad de electrones en función del radio así como la velocidad de arrastre de los electrones. Los resultados son comparados con los obtenidos por otros autores observándose una buena concordancia.

*Palabras claves: Descargas eléctricas.*

Describing negative-glow discharges in cylindrical hollow cathodes requires knowing the electron function distribution. We obtained it by means of the Monte Carlo method, assuming the electric field, within the cathode fall, points radially and varies linearly, whilst, in the glow zone, its modulus is small, points axially and is almost constant. We took into account elastic electron-atom collisions, ionization and excitation from the ground states of the Neon atom. The electron distribution functions, calculated at different pressures and cathode fall thickness, can be approximately described as the sum of two maxwellian distributions, whose temperatures are about 4000 K and 5000 K, plus rather constant term associated with high-energy electrons. The relative weight of each of these functions depends on the above mentioned parameters but is the same at each radial coordinate. From the model we also obtained the average number of ionizations by an electron that leaves the cathode, the drift velocity and the electron distribution as a function of position. The results compare favorably with figures reported by other authors.

*Keywords: Electrical discharges.*

#### Introducción

Las descargas luminiscentes están formadas por varias zonas entre las cuales se encuentran dos fundamentales para su autosostenimiento, la zona de caída catódica (CC) y la de luminiscencia negativa (GN). La caída catódica es una zona angosta y oscura en contacto directo con el cátodo, caracterizada por un intenso campo eléctrico el cual entrega a los electrones liberados del cátodo suficiente energía como para producir varias ionizaciones. La luminiscencia negativa es la zona muy luminosa contigua a la CC caracterizada por un campo eléctrico débil y un relativamente elevado número de electrones proveniente de ionizaciones.

El objetivo de este trabajo es calcular la función de distribución en energía de los electrones presentes en una descarga de luminiscencia negativa en cátodo hueco en Neón con el fin de completar los estudios ya realizados por nosotros <sup>[1]</sup>.

Existen varios modelos que describen este tipo de descarga. El modelo de fluidos, donde cada especie es considerada como un continuo en equilibrio con el campo

eléctrico y cuyos resultados son aproximados debido a que el intenso campo eléctrico de la caída catódica no permite el equilibrio térmico entre los electrones y los átomos del gas. Otro modelo está basado en la ecuación cinética de Boltzmann la cual es de difícil resolución a causa de la compleja expresión del término colisional que contiene la función de distribución. También existen los métodos estadísticos basados en el seguimiento de las partículas presentes en la descarga. Entre estos últimos, el ampliamente usado método de Monte Carlo realiza el cálculo de las trayectorias de las partículas cargadas en el campo eléctrico y simula la probabilidad de ocurrencia de los distintos procesos de colisión por medio de la generación de números aleatorios.

Dentro del método de Monte Carlo existen muchas variantes. En la utilizada aquí, los cálculos son realizados con pasos ajustables, de acuerdo con la intensidad local del campo eléctrico de manera de tener un error de cálculo aceptablemente bajo, y sólo después de que la partícula ha recorrido un camino libre medio se determina la ocurrencia de colisión mediante la generación de

números aleatorios. Este método es utilizado para el seguimiento en tres dimensiones de los electrones emitidos desde el interior del cátodo hueco y los creados por ionización atómica a través del gas de átomos neutros.

A continuación se describe en detalle el método, las consideraciones y suposiciones realizadas en este trabajo.

### Método de Monte Carlo

El método de Monte Carlo requiere el conocimiento del campo eléctrico en función de la posición el cual depende de la geometría de los electrodos. El cátodo que sostiene la descarga aquí modelada es un cilindro hueco de 0,35 cm de diámetro y 1,5 cm de largo. En sus extremos, a una distancia de 0,2 cm, se hallan dos ánodos con forma de anillo de 1,5 cm de diámetro ubicados de manera tal de tener simetría cilíndrica. Para el rango de presiones y corriente utilizado, tanto la zona de CC como la de GN se encuentran ubicadas en el interior del cilindro. Por las dimensiones del cátodo se supone que el campo eléctrico en la zona de CC catódica es radial ( $E_{CC}=E_r$ ). Como es bien conocido, prácticamente toda la tensión aplicada a la descarga ( $\Delta V$ ) se encuentra en dicha zona con lo que resulta:

$$\Delta V \cong -\int_0^{r_c} E_r dr \quad (1)$$

donde  $r_c$  es el radio interno del cátodo. A su vez, las medidas de varios autores [2] determinaron que el campo eléctrico varía linealmente con la distancia a la superficie del cátodo. Por este motivo y, para evitar discontinuidad en su derivada, suponemos que:

$$\frac{dE_r}{dr} = \frac{a}{1 + \exp\left(\frac{r - r_L}{0,02}\right)} \quad (2)$$

donde  $a$  es una constante que satisface la Ec.1 y  $r_L$  es el radio en el que se encuentra el límite entre la caída catódica y la luminiscencia negativa. En la figura 1 se muestra la intensidad del campo eléctrico para una tensión típica aplicada a la descarga de 200 V y para distintos espesores de caída catódica. En ella se representa con trazos gruesos verticales las paredes del cátodo hueco y con línea punteada se indica el límite  $r_L$ .

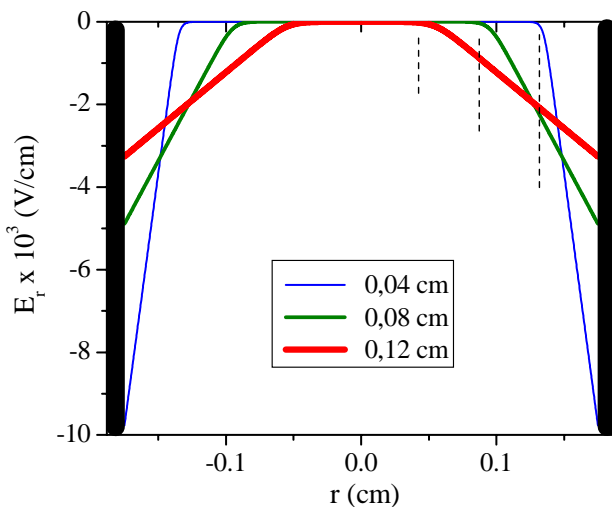


Figura.1. Campo eléctrico radial para distintos espesores de CC.

Por otro lado se supone que en la zona de GN, ubicada alrededor del eje del cilindro, el campo eléctrico es principalmente axial ( $E_{GN}=E_z$ ) y prácticamente constante debido a la condición de neutralidad de cargas típica de dicha región.

Con el valor del campo eléctrico en función de la posición se calcula la trayectoria de un electrón tras otro hasta completar una cantidad suficientemente grande como para poder realizar una estadística satisfactoria de distintos parámetros. Este cálculo se realiza para los dos tipos de electrones presentes en la descarga, los provenientes de la liberación de la superficie catódica y los de ionización de los átomos del gas.

Dado que los electrones liberados de la superficie catódica por impacto de iones son eyectados con una energía en el rango de 0 a 12 eV y una distribución aproximadamente cuadrada [3], se genera un número al azar dentro de una distribución con esas características para establecer la energía de salida del electrón. Por otro lado, suponiendo que la probabilidad de emisión de los electrones desde la superficie del cátodo es independiente de la posición, se generan otros dos números al azar homogéneamente distribuidos entre 0 a  $2\pi$  y entre  $-z_c$  y  $z_c$  ( $2z_c$  = longitud del cátodo) para determinar la posición de salida. Los datos de posición de partida,  $t=0$  y energía de eyección son almacenados en un vector PTE para su posterior utilización en cálculos estadísticos.

Una vez en la zona de caída catódica dicho electrón es acelerado por el campo eléctrico y su trayectoria y velocidad se obtiene mediante la integración de la ecuación de Newton. Para un paso de tiempo  $\Delta t$  suficientemente chico es posible calcular, dentro de errores aceptable, la posición y la velocidad final utilizando la aproximación trapezoidal:

$$v_x = v_{x0} + \frac{q E_r(r_0) \cos(\phi)}{m_e} \Delta t + \frac{q}{2 m_e} \frac{dE_r}{dr} \Big|_{r_0} v_r(r_0) \cos(\phi) \Delta t^2$$

$$v_y = v_{y0} + \frac{q E_r(r_0) \sin(\phi)}{m_e} \Delta t + \frac{q}{2 m_e} \frac{dE_r}{dr} \Big|_{r_0} v_r(r_0) \sin(\phi) \Delta t^2$$

$$v_z = v_{z0} + \frac{q E_z(z_0)}{m_e} \Delta t \quad (3)$$

$$\vec{r} = \vec{r}_0 + \frac{(\vec{v}_0 + \vec{v})}{2} \Delta t$$

donde  $q$  y  $m_e$  son la carga y la masa del electrón,  $\vec{r}_0$  y  $\vec{v}_0$  son los vectores de posición y velocidad iniciales,  $v_x$ ,  $v_y$ ,  $v_z$  son las componentes en coordenadas cartesianas del vector velocidad,  $v_r(r_0)$  es la velocidad radial inicial del electrón y  $\phi$  es el ángulo azimutal. Para obtener la evolución de  $\vec{r}(t)$  y  $\vec{v}(t)$  se repiten estos cálculos redefiniendo las variables finales de un paso como variables iniciales para el siguiente paso y ajustando  $\Delta t$  a partir del camino libre medio (CLM) y el cambio relativo de velocidad:

$$\Delta t_{\max} = \frac{CLM}{|\vec{v}| + 10^8 \text{ cm/s}}$$

$$\Delta t = \min \left[ \Delta t_{\max}, \Delta t \left( \frac{\delta \cdot \max \left[ \frac{|\vec{v}|}{|\vec{v} - \vec{v}_0|}, 1 \text{ cm/s} \right]}{|\vec{v} - \vec{v}_0|} \right)^{0.2} \right] \quad (4)$$

donde  $\Delta t_{\max}$  es el paso temporal máximo el cual garantiza pasos espaciales de a lo sumo el  $CLM$  y  $\delta$  es la variación relativa de velocidad admitida para minimizar error de cálculo. En cada paso  $\Delta t$  se va agregando la posición ( $\vec{r}$ ), el tiempo transcurrido ( $t = t_0 + \Delta t$ ) y energía ( $\varepsilon = m_e v^2 / 2$ ) al vector  $PTE$ .

Una vez recorrido una distancia aproximadamente igual al  $CLM$  se calcula la probabilidad de colisión. En la Fig.2 se puede observar varias de las secciones eficaces en función de la energía para el átomo de Neón. Dado que la densidad de átomos excitados es aproximadamente 5 órdenes de magnitud menor que la de átomos en estado fundamental, no se considera el proceso de excitación ni ionización por impacto electrónico desde estos niveles. Además, de todos los procesos de colisión de electrones con átomos en estado fundamental sólo se considera los procesos más importantes: scattering [4], ionización [5] y excitación a las dos primeras configuraciones excitadas [6]. Por otro lado, como se trata de una descarga con una densidad electrónica del orden de  $10^{12} \text{ cm}^{-3}$ , tampoco es considerado el proceso de colisión electrón-electrón.

La probabilidad de ocurrencia de una colisión del tipo  $k$  entre el electrón con energía  $\varepsilon$  y el átomo en estado fundamental es:

$$P_k = 1 - \exp(-\Delta d \sigma_k(\varepsilon) N_g) \quad (5)$$

donde  $\Delta d$  es la distancia recorrida por el electrón entre átomos,  $\sigma_k(\varepsilon)$  es la sección eficaz de colisión del proceso  $k$  y  $N_g$  es la densidad de átomos en estado fundamental. La probabilidad de no ocurrencia de colisión es:

$$P = 1 - (P_{scat} + P_{ion} + P_{exc}) \quad (6)$$

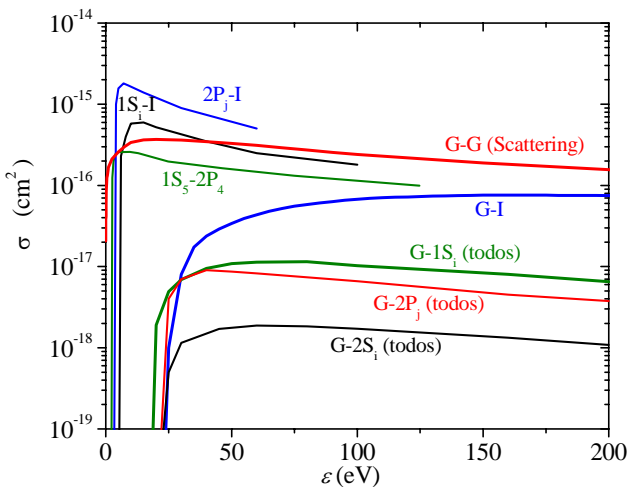


Figura.2. Secciones eficaces de colisión electrón-átomo. X-Y: Estado inicial-final del átomo. G: Estado fundamental.  $1S_i$ ,  $2P_j$  y  $2S_i$ : Estados excitados (notación de Paschen). I: átomo ionizado.

La determinación del tipo de proceso que ocurre se obtiene de la comparación entre estos valores de probabilidad y un número  $n_a$  generado al azar y homogéneamente distribuidos en el intervalo entre 0 y 1. Si el número  $n_a$  es menor que  $P$  se establece que no hay colisión, si está entre  $P$  y  $P_{scat}$  la colisión es de scattering, si está entre  $P + P_{scat}$  y  $P + P_{scat} + P_{ion}$  la colisión es ionizante y si está entre  $P + P_{scat} + P_{ion}$  y 1 la colisión es de excitación.

En el caso de no producirse colisión se continúa calculando la trayectoria del electrón mediante las ec. 3 y 4 hasta recorrer otro  $CLM$  y luego se repite el procedimiento de determinación de colisión recién descrito.

En el caso de scattering se establece la nueva dirección de propagación mediante la generación de otros dos números al azar. Con uno, homogéneamente distribuido en el intervalo entre 0 y  $2\pi$ , se obtiene el ángulo azimutal. Con el otro ( $n_\psi$ ), se establece el ángulo de scattering  $\psi$  mediante la resolución de la siguiente igualdad:

$$n_\psi = \frac{2\pi}{\sigma_{scat}(\varepsilon)} \int_0^\psi \sigma_{scat}(\psi', \varepsilon) \sin(\psi') d\psi' \quad (7)$$

donde  $\sigma_{scat}(\psi', \varepsilon)$  es la sección eficaz de scattering diferencial [4] y  $\sigma_{scat}(\varepsilon)$  es la sección eficaz de scattering total ( $\sigma_{scat}(\varepsilon) = 2\pi \int_0^\pi \sigma_{scat}(\psi', \varepsilon) \sin(\psi') d\psi'$ ). La energía final del electrón luego de esta colisión binaria se supone igual a la obtenida de la suposición de esferas duras:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \left( 1 - \frac{2m_e}{m_{Ne}} (1 - \cos(\psi)) \right) \quad (8)$$

donde  $\varepsilon_0$  es la energía del electrón antes de la colisión y  $m_{Ne}$  es la masa del átomo de Neón.

En los casos de colisión ionizantes [5] o de excitación [6] se supone que el electrón no se desvía de su trayectoria y la energía final es:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 - \varepsilon_c \quad (9)$$

donde  $\varepsilon_c$  es igual a la energía de ionización o de excitación del átomo fundamental.

En cualquier de estos casos se agrega al vector  $PTE$  la posición, el tiempo transcurrido y la energía final del electrón.

Una vez producido el encuentro con el átomo se continúa el cálculo de la trayectoria del electrón mediante las ec. 3 y 4 hasta recorrer otra vez un  $CLM$  y se realiza nuevamente la determinación del proceso de colisión. Este procedimiento se repite hasta que el electrón incide en el ánodo. En la Figura 3 se muestra una trayectoria típica para un electrón emitido desde la superficie del cátodo hueco con 5 Torr de Neón y un espesor de caída catódica de 0,08 cm. Como era de esperar, se puede apreciarse que la mayor parte de la trayectoria del electrón tiene lugar en la región de GN debido a que después de varios choques inelásticos le es imposible volver a entrar en la zona de CC.

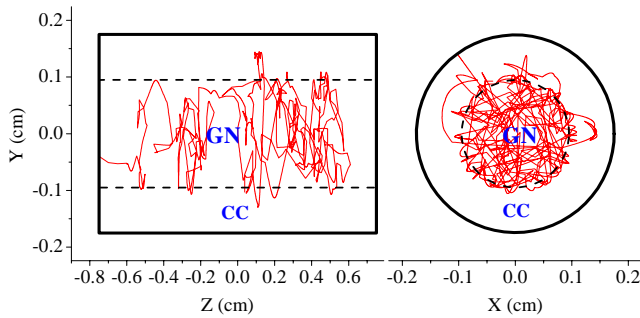


Figura.3. Vista en el plano ZY y XY de la trayectoria de un electrón emitido desde la superficie del cátodo. Línea de trazos es el límite entre CC y GN

Todos los pasos descritos arriba son aplicados también a los electrones liberados en las ionizaciones de átomos por el impacto del electrón recién mencionado y luego se repite el procedimiento con la liberación de nuevos electrones desde la superficie del cátodo hasta completar un número suficientemente grande.

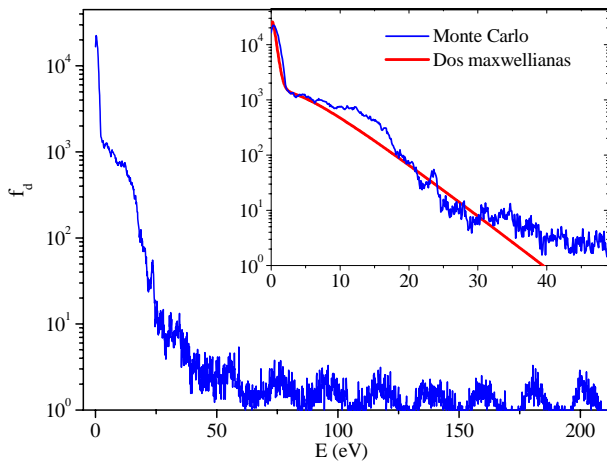


Figura.4. Distribución en energía de los electrones en la zona de GN.

Con los vectores *PTE* obtenidos durante toda la trayectoria de cada electrón se determinan las energías de los electrones y los tiempos de permanencia entre  $r$  y  $r+\Delta r$  a partir de los cuales se establece la función distribución en energía y la densidad de cargas en función del radio. Del análisis de los datos se verificó que ambas distribuciones son primordialmente independientes de la posición dentro de la región de luminiscencia negativa. En la Fig.4 se muestra la función de distribución en energía de los electrones en la zona de GN obtenida para 5 Torr de presión y un ancho de caída catódica de 0,08 cm. Como se puede observar existen tres conjuntos de electrones con distintas densidades agrupadas en los rangos de energía baja, media y alta. El conjunto de electrones de alta energía y con muy baja densidad muestra una periodicidad atribuida a grupos de electrones que realizaron distinto número de choques inelásticos entre los cuales también se encuentran los electrones sin ninguna pérdida de energía. Los otros dos grupos son los mayores contribuyentes a la corriente y están constituidos por electrones creados en el GN donde sólo se puede ganar energía del campo axial débil y por electrones

emitidos del cátodo que tuvieron el número máximo de colisiones inelásticas. Este resultado coincide razonablemente bien con las medidas y cálculos hechos para descargas luminiscentes realizadas para otro tipo de electrodos y gas [7]. También se muestra en la Fig.4 una vista ampliada de estos dos últimos grupos junto con la función de distribución comúnmente utilizada como aproximación en este tipo de descargas conformada por la suma de dos maxwellianas a temperaturas de 4.000 K y 50.000 K. Como se puede observar, la aproximación coincide aceptablemente para energías por debajo de 40 eV pero no contempla la existencia de los electrones de alta energía.

Estas características en la función de distribución en energía se mantienen al variar el espesor de la CC y la presión (Fig. 5 y 6). Por otro lado, también se puede observar un incremento en las densidades de electrones con energía baja y media al aumentar la presión o el espesor de la CC debido a que se producen un mayor número de colisiones ionizantes en la CC asociado con el aumento en la densidad de átomos o en el camino recorrido dentro de la CC.

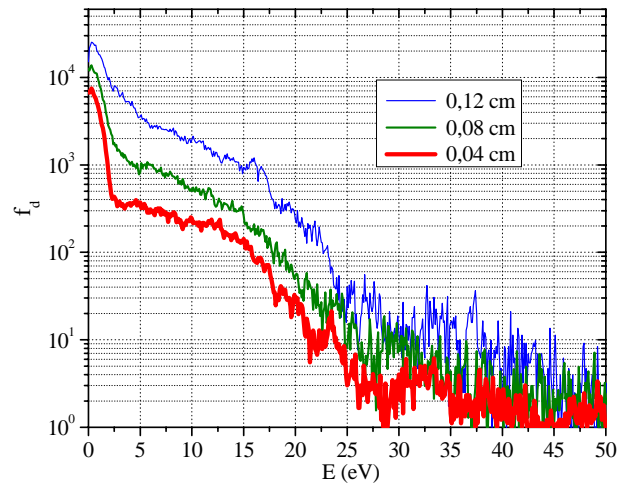


Figura.5. Distribución en energía de los electrones en la zona de GN para distintos espesores de CC.

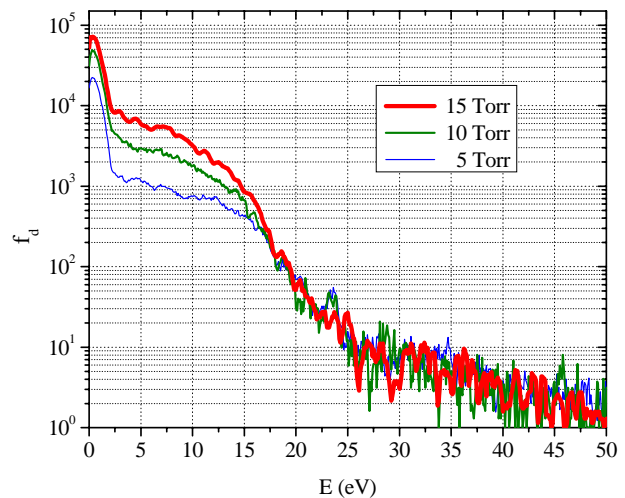


Figura.6. Distribución en energía de los electrones en la zona de GN para distintas presiones de Neón.

En las Figuras 7 y 8 se muestran las distribuciones de densidades electrónicas para distintos espesores de CC y

presión del gas. En ellas se puede apreciar una gran diferencia de concentración entre las zonas de CC y GN debido a la variación de la tasa de generación de electrones libres y especialmente de velocidad de arrastre producido por el campo.

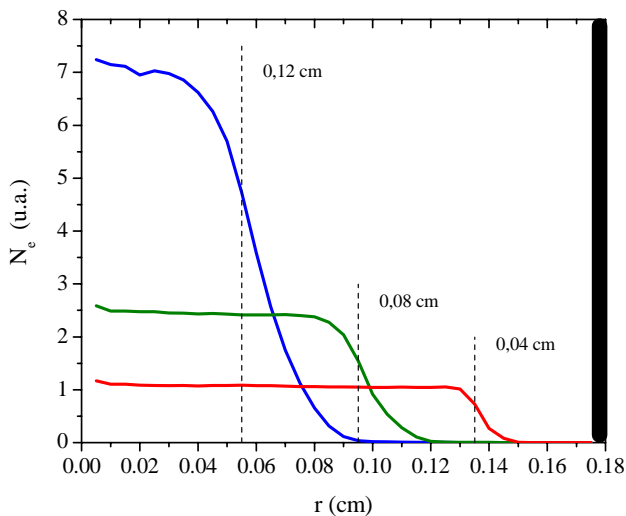


Figura.7. Distribución de densidad de los electrones en función del radio para distintos espesores de CC.

Por otro lado, con los datos almacenados durante la aplicación del método de Monte Carlo también fue posible obtener la cantidad promedio de electrones ionizados por electrón eyectado de la superficie catódica (factor de multiplicación). Esta cantidad, relacionada principalmente con el número de colisiones dentro de la CC, es función del producto  $p r_L$ , donde  $p$  es la presión del gas y  $r_L$  es el espesor de la CC. El factor de multiplicación obtenido en nuestras condiciones resultó entre 7 y 9 para valores de  $p r_L$  entre 0,2 cm Torr y 0,6 cm Torr respectivamente.

A su vez, el registro de los tiempos de tránsito permitió calcular una velocidad de arrastre de los electrones hacia el ánodo el cual resultó ser de aproximadamente  $1,5 \cdot 10^7$  cm/s para un campo eléctrico de 2 V/cm y una presión de 5 Torr. Este valor es mayor que el encontrado en la literatura [8] debido a que en las condiciones de cálculo (pequeña separación entre electrodos y relativamente baja presión) no se producen un número suficiente de colisiones como para alcanzar la velocidad límite. Aplicando el método descrito arriba a la misma presión y con una mayor separación entre electrodos, se verificó que la velocidad de arrastre tiende al valor esperado.

### Conclusiones

La función distribución en energía de los electrones dentro del GN presenta tres grupos bien definidos.

Existe muy poca variación en la distribución en energía de cada grupo ante cambios de presión y espesor de la CC observándose diferentes relaciones entre ellos.

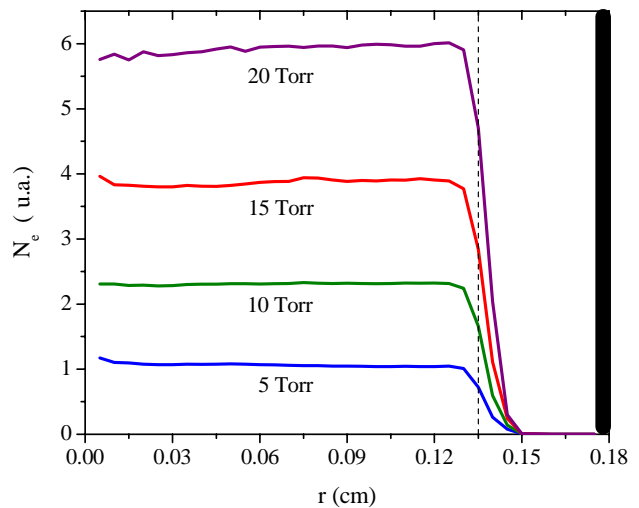


Figura.8. Distribución de densidad de los electrones en función del radio para distintas presiones de Neón.

Los grupos de baja y media energía se pueden representar aproximadamente por la suma de dos maxwellianas a temperatura de 4.000 K y 50.000 K.

La densidad de electrones en el GN así como el factor de multiplicación se incrementan con la presión y el espesor de CC debido al aumento de colisiones ionizantes en la CC.

La velocidad de arrastre de los electrones en descargas de luminiscencia negativa en cátodo hueco, que operan a baja presión y con una separación entre electrodos pequeña, presenta valores superiores a los esperados debido a que no se alcanza la velocidad límite.

### Referencias:

- 1 - V.B. Slezak, V. D'Accurso y F.A. Manzano J. Opt. Soc. Am. B, **13** (1996) 2701-2707.
- 2 - E.A. Den Hartog, D.A. Doughty and J.E. Lawler, Phys. Rev. A **38** (1988) 2471-2491.
- 3 - "Collision phenomena in ionized gases" Earl W. McDaniel. Ed. John Wiley & Sons Inc. 1964. Capítulo 13. Página 646.
- 4 - Mehrdad Adibzadeh, Constantine E. Theodosiou, Atomic Data and Nuclear Data Tables **91** (2005) 8-76
- 5 - E. Krishnakumar and S. K. Srivastava, J. Phys. B **21** (1988) 1055-1082.
- 6 - D.F. Register, S. Trajmar and G. Steffensen, Phys. Rev. A **29** (1984) 1793-1810.
- 7 - B. Shi, G.J. Fetzer, Z. Yu, J.D. Meyer and G.J. Collins, IEEE Journal of Quantum Electronics **25** (1989) 948-954.
- 8 - "Collision phenomena in ionized gases" Earl W. McDaniel. Ed. John Wiley & Sons Inc. 1964. Capítulo 11. Página 540.