
Моделирование лавинно-стримерного перехода в пакете Comsol

Автор:
Пек Борис

Постановка задачи

- Создать модель для расчета лавинно-стримерного перехода в пакете Comsol, используя дрейфово-диффузионное приближение.

Общие цели работы

- Сравнить результаты моделирования с более строгими моделями, рассчитанными ранее в пакете CFD-ACE.
- Если результаты будут совпадать с достаточной точностью, то использовать модели в Comsol для дальнейшего расчета и изучения стримерных процессов. Например:
 - Рассчитать наконец-то осесимметричную модель длинного стримера, которую не удалось решить в предыдущих более строгих моделях из-за ограничений на компьютерные ресурсы.
 - Рассчитать распространение стримера в присутствии диэлектрического изолятора.

Дрейфово-диффузионное приближение

- Модель не учитывает:
 - распределение электронов по энергии
 - процессы, связанные с изменением энергии частиц без изменения заряда, например: возбуждение электронно-колебательных уровней, диссоциация молекул.
- Концентрации всех заряженных частиц (электронов и ионов) описываются уравнением Нернста-Планка.
- Реакции ионизации и рекомбинации задаются через функцию источника.
- Интенсивность ионизации зависит только от поля и концентрации электронов, коэффициент ионизации взят для фиксированного давления и не меняется.

Система уравнений (начало)

Уравнение Нернста-Планка без электронейтральности для положительных ионов (1)

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (-D \nabla c - z u_m F c \nabla V) = R - \mathbf{u} \cdot \nabla c \quad R = p A e^{\frac{pB}{E}} b_e E c_2 - \alpha c c_2$$

$D = D$	коэффициент диффузии (изотропный) [м ² /с]
$R = (t>0) \cdot \text{ioniz} \cdot b_e \cdot \text{norm} E_{es} \cdot c^2 - \alpha \cdot c \cdot c_2$	скорость реакции [моль/(м ³ с)]
$u_m = b_e / 1e5$	подвижность [с моль/кг]
$Z = 1$	заряд частиц (относительно заряда электрона)
$u=0, v=0$	компоненты вектора \mathbf{u} [м/с]
$V = V$	потенциал [В] (рассчитывается в третьем уравнении)
$b = 1.5e-4$	подвижность ионов [м ² /В·с]
$b_e = 4.3e-2$	подвижность электронов [м ² /В·с]

Система уравнений (продолжение)

Уравнение Нернста-Планка без электронейтральности для электронов (2)

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} + \nabla \cdot (-D \nabla c_2 - z u_m F c_2 \nabla V) = R - \mathbf{u} \cdot \nabla c_2$$

$$R = \left[p A e^{\frac{pB}{E}} \right] b_e E c_2 - \alpha c c_2$$

Первый таунсендовский коэффициент ионизации^[1] Коэффициент объемной рекомбинации^[2]

$D = De$	коэффициент диффузии (изотропный) [м ² /с]
$R = (t>0) \cdot \text{ioniz} \cdot b_e \cdot \text{normE_es} \cdot c_2 - \alpha \cdot c \cdot c_2$	скорость реакции [моль/(м ³ с)]
$u_m = b_e / 1e5$	подвижность [с моль/кг]
$Z = -1$	заряд частиц (относительно заряда электрона)
$u=0, v=0$	компоненты вектора \mathbf{u} [м/с]
$V = V$	потенциал [В] (рассчитывается в третьем уравнении)
$\alpha = 1e-13$	коэффициент объемной рекомбинации [м ³ /моль с] (из эксперимента ^[2])

Уравнение Пуассона (модуль электростатики) (3)

$$-\nabla \cdot \varepsilon_0 \varepsilon \nabla V = \rho \quad \rho = F (z_1 c + z_2 c_2) \quad \text{Постоянная Фарадея: } F = e N_a \approx 96485 \text{ [Кл/моль]}$$

$$\varepsilon = 1 \quad \text{диэлектрическая проницаемость}$$

$$\rho = \text{electr} \cdot (c - c_2) \quad \text{объемная плотность заряда [Кл/м³]}$$

Constants:
 $b = 1.5e-4$
 $D = 25e-3 \cdot b \cdot 100$
 $\alpha = 1e-13$
 $\text{electr} = 1.6e-19$
 $b_e = 4.3e-2$
 $De = 0.35$
 $qq0 = 1e16$
 $V0 = 1e4$

Global expressions:

$$\text{ioniz} = 9.1e5 \cdot \exp(-1.37e7 / \text{normE_es})$$

$$R = \text{sqrt}(r^2 + z^2)$$

$$V_2 = -V0 \cdot (1 - (1e-3/R))$$

[1] Ю.П.Райзер "Физика газового разряда", Москва "Наука", 1992; с.43, таблица 41

[2] Ю.П.Райзер "Физика газового разряда", Москва "Наука", 1992; с.77

Граничные условия, начальные условия

Изоляция: $n \cdot N = 0$

Поток: $-n \cdot N = N_0$

$$N = -D \nabla c - z u_m F c \nabla V + c u$$

(1) $n \cdot N = 0$ (изоляция)

(2) $N_0 = -\text{ntflux_c_chekf2}$ (поток)

(3) $\varphi = 0$

ntflux_c_chekf – полный поток
Состоит из трех слагаемых:

- электрофоретическое
- диффузионное
- конвекционное

(1) $n \cdot N = 0$ (изоляция)

(2) $n \cdot N = 0$ (изоляция)

(3) $\varphi(x, y) = V_0 \cdot \left(\frac{R_1}{\sqrt{r^2 + z^2}} - 1 \right)$

Размеры:

$R_1 = 1 \text{ мм}$

$R_2 = 2.01 \text{ мм}$

Ось симметрии

Анод

Катод

$V_0 = 10 \text{ кВ}$

(1) $N_0 = -\text{ntflux_c_chekf}$ (поток)

(2) $n \cdot N = 0$ (изоляция)

(3) $\varphi = V_0 \cdot \left(\frac{R_1}{R_2} - 1 \right)$

Начальная концентрация электронов:

$qq0 = 1e16 \text{ моль/м}^3$

В остальной части модели начальная концентрация электронов нулевая.

Настройки решателя

Solver: Time dependent segregated

Times: [0:0.1e-9:2.6e-9,2.605e-9:0.01e-9:3.4e-9]

Relative tolerance: 1e-3

Absolute tolerance: c 1e12 c2 1e12 V 10

Порядок расчета переменных: V, c, c2

Linear solver: GMRES

Maximum number of iterations: 10000

Number of iterations before restart: 150

Preconditioner: SSOR

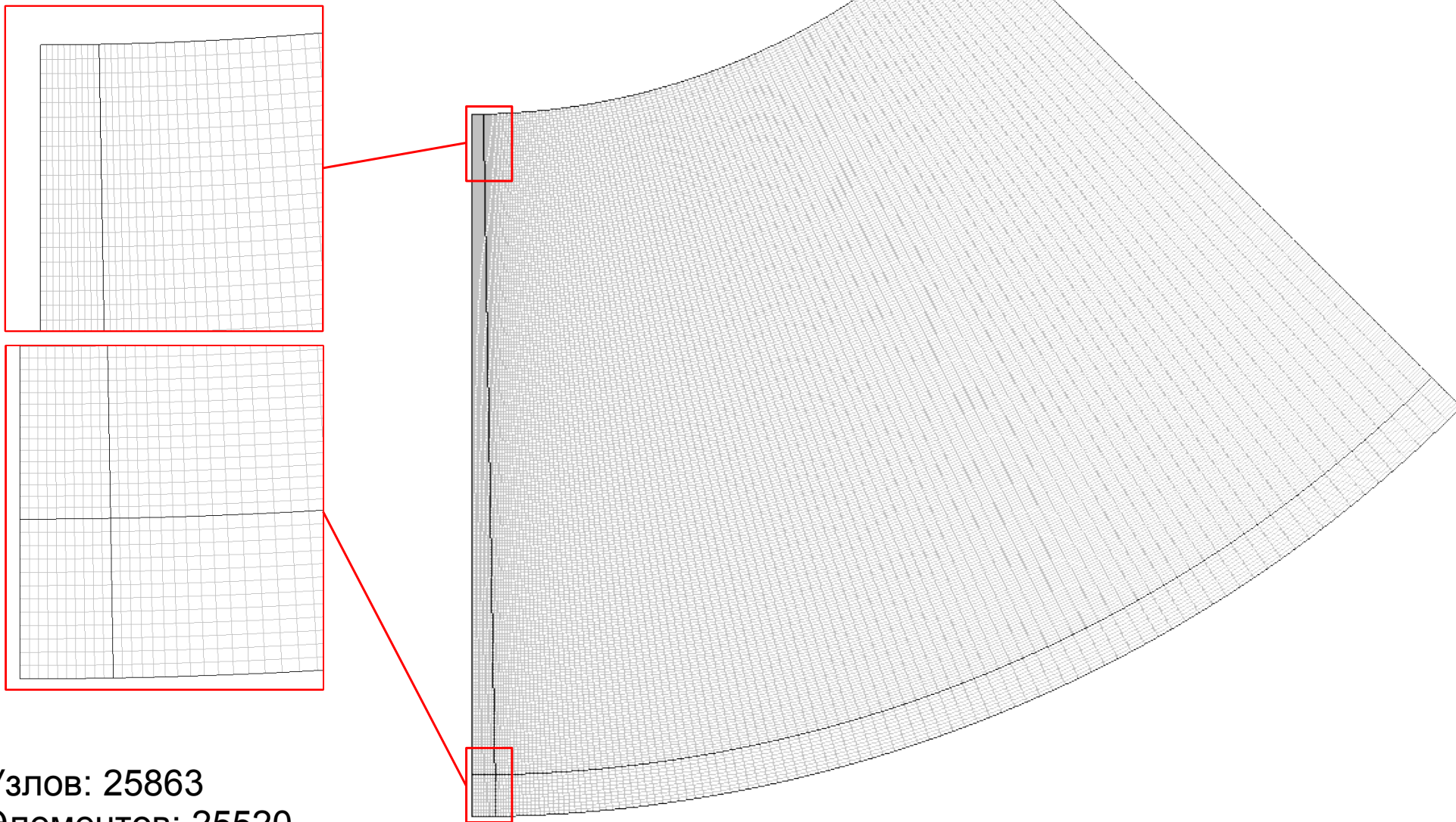
Number of iterations: 2

Time steps taken by solver: Intermediate

Maximum time step: 1e-11

В отличие от решателя UMFPACK, который используется по умолчанию, итерационный решатель требует меньше оперативной памяти при расчетах, что позволяет решать модели с большим количеством элементов.

Конечноэлементная сетка

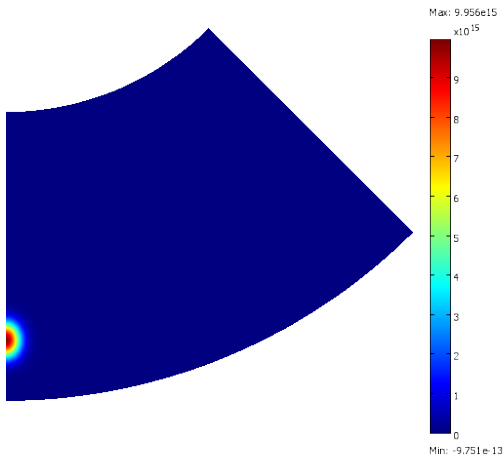


Узлов: 25863

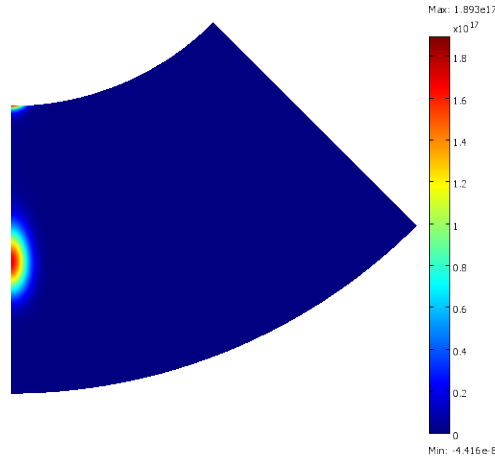
Элементов: 25520

Степеней свободы: 308295

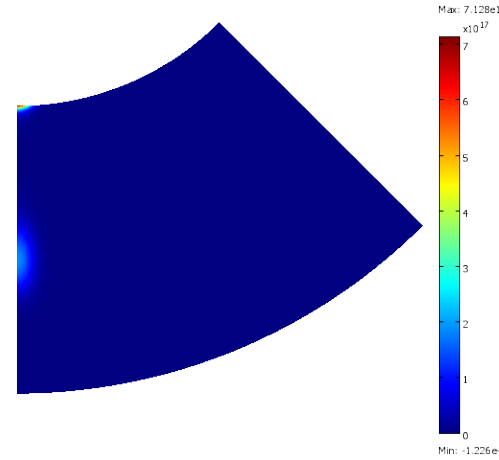
Концентрация электронов [1/м³]



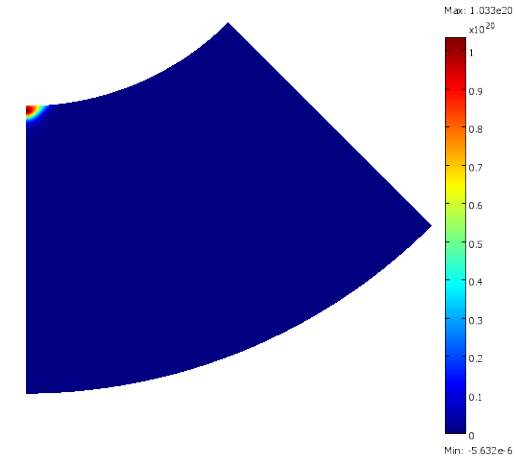
$\max \approx 10^{15} \text{ 1/м}^3$
 $t = 1.5 \text{ нс}$



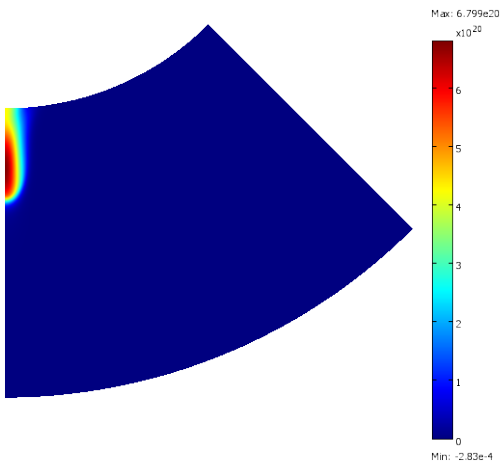
$\max \approx 1.89 \cdot 10^{17} \text{ 1/м}^3$
 $t = 2.705 \text{ нс}$



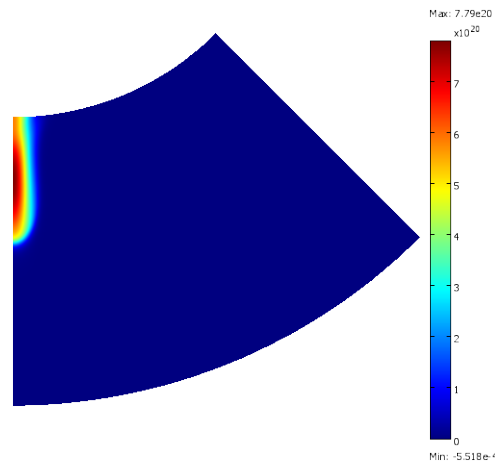
$\max \approx 7.13 \cdot 10^{17} \text{ 1/м}^3$
 $t = 2.725 \text{ нс}$



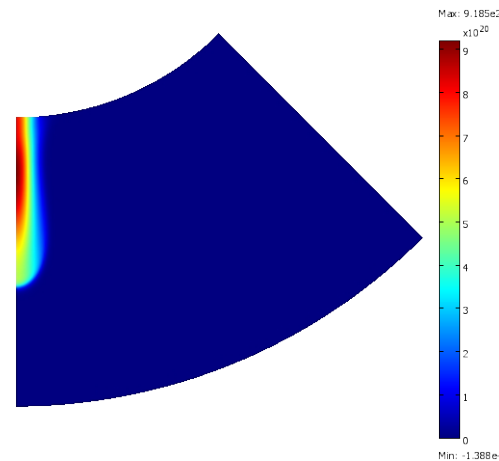
$\max \approx 1.03 \cdot 10^{20} \text{ 1/м}^3$
 $t = 2.835 \text{ нс}$



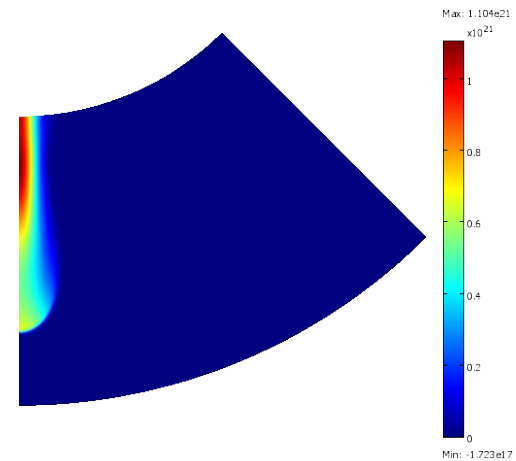
$\max \approx 6.8 \cdot 10^{20} \text{ 1/м}^3$
 $t = 2.985 \text{ нс}$



$\max \approx 7.79 \cdot 10^{20} \text{ 1/м}^3$
 $t = 3.025 \text{ нс}$

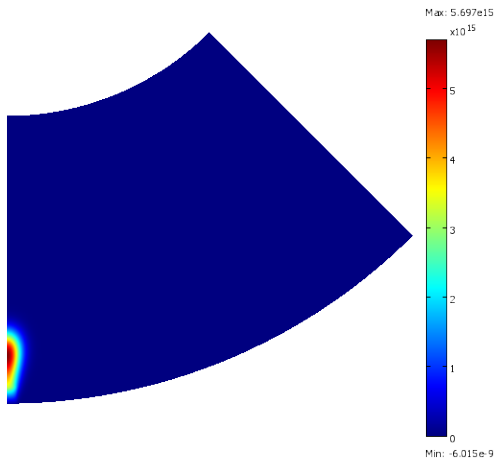


$\max \approx 9.19 \cdot 10^{20} \text{ 1/м}^3$
 $t = 3.085 \text{ нс}$

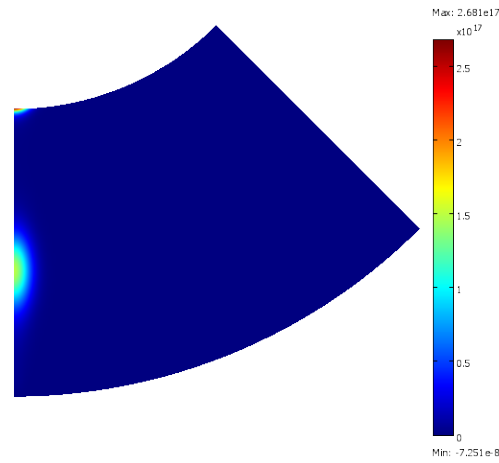


$\max \approx 1.1 \cdot 10^{21} \text{ 1/м}^3$
 $t = 3.185 \text{ нс}$

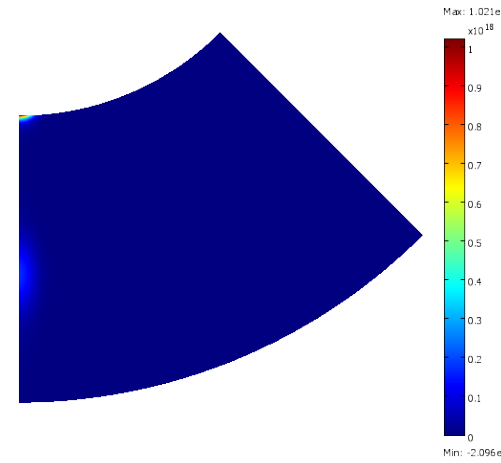
Концентрация положительных ионов [1/м³]



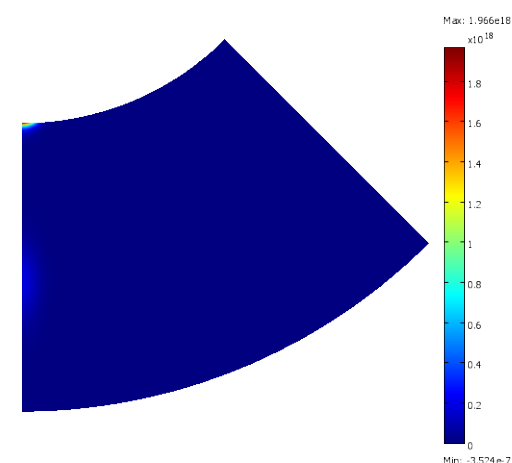
$\max \approx 5.7 \cdot 10^{15} \text{ 1/м}^3$
 $t = 1.5 \text{ нс}$



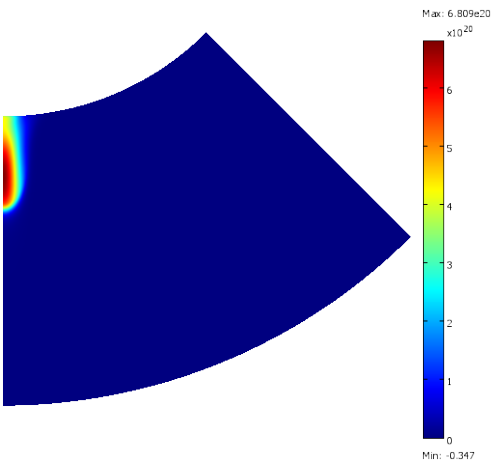
$\max \approx 2.68 \cdot 10^{17} \text{ 1/м}^3$
 $t = 2.705 \text{ нс}$



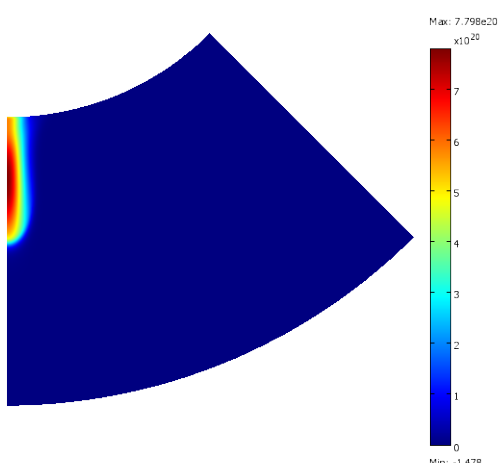
$\max \approx 1.02 \cdot 10^{18} \text{ 1/м}^3$
 $t = 2.725 \text{ нс}$



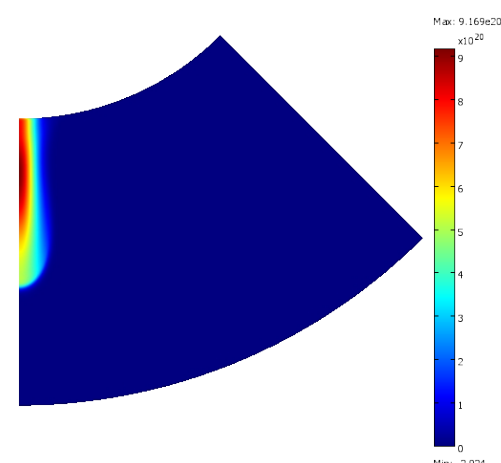
$\max \approx 1.14 \cdot 10^{20} \text{ 1/м}^3$
 $t = 2.835 \text{ нс}$



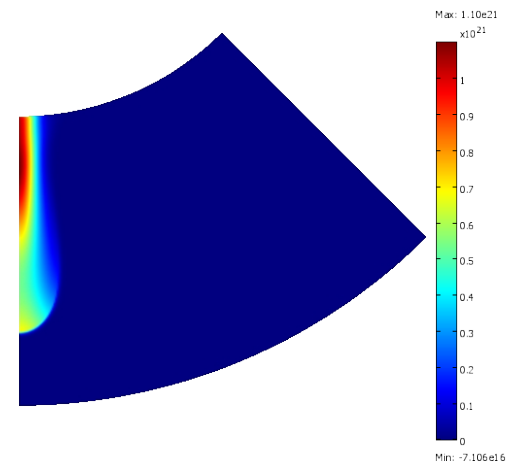
$\max \approx 6.81 \cdot 10^{20} \text{ 1/м}^3$
 $t = 2.985 \text{ нс}$



$\max \approx 7.8 \cdot 10^{20} \text{ 1/м}^3$
 $t = 3.025 \text{ нс}$

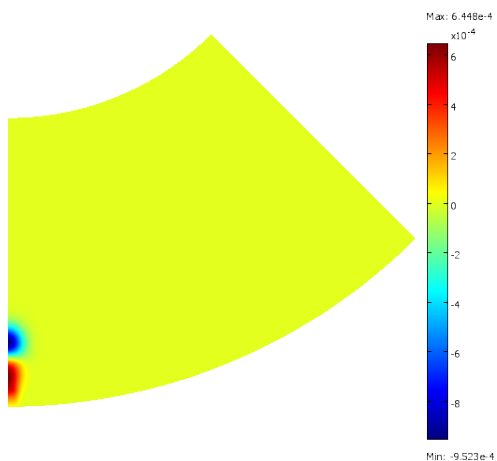


$\max \approx 9.17 \cdot 10^{20} \text{ 1/м}^3$
 $t = 3.085 \text{ нс}$

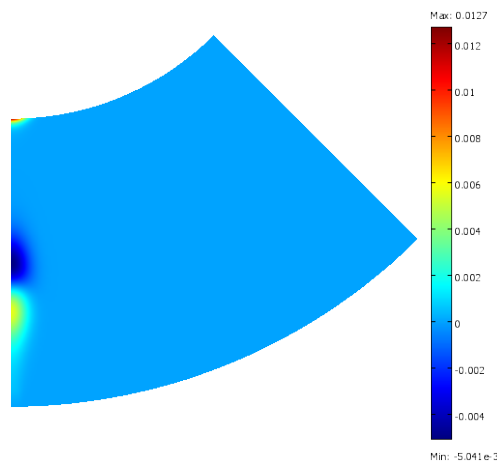


$\max \approx 1.1 \cdot 10^{21} \text{ 1/м}^3$
 $t = 3.185 \text{ нс}$

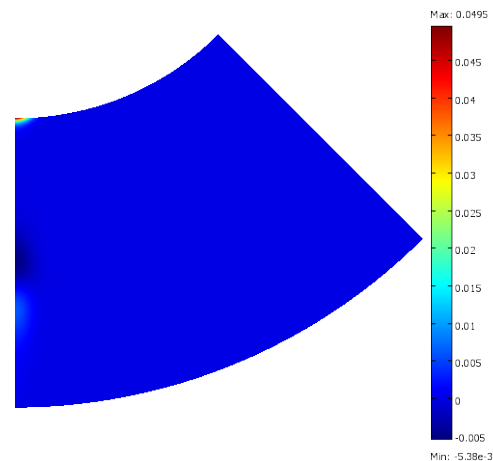
Объемная плотность заряда [Кл/м³]



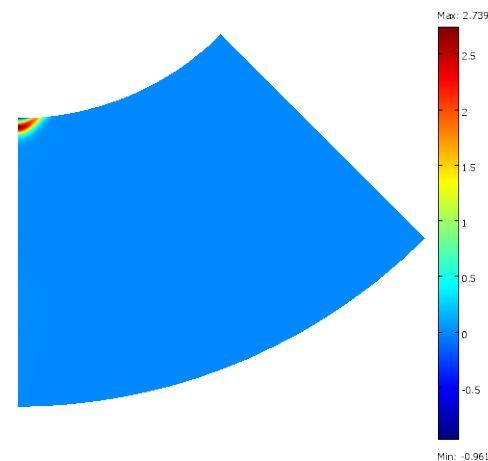
max $\approx 6.4 \cdot 10^{-4}$ Кл/м³
min $\approx -9.5 \cdot 10^{-4}$ Кл/м³
t = 1.5 нс



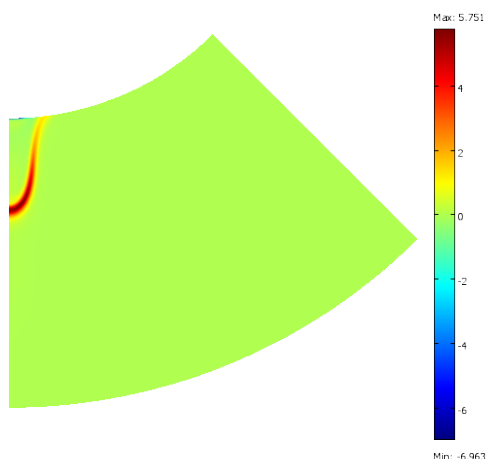
max ≈ 0.013 Кл/м³
min ≈ -0.005 Кл/м³
t = 2.705 нс



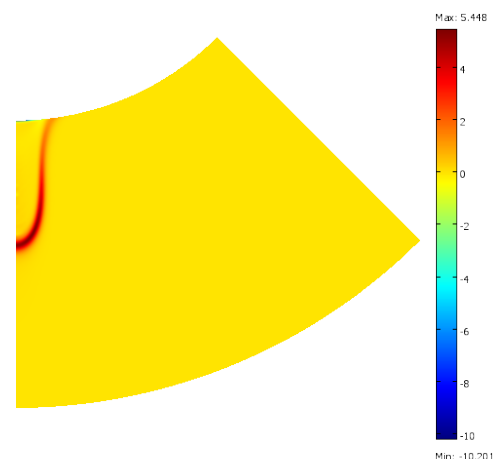
max ≈ 0.05 Кл/м³
min ≈ -0.0054 Кл/м³
t = 2.725 нс



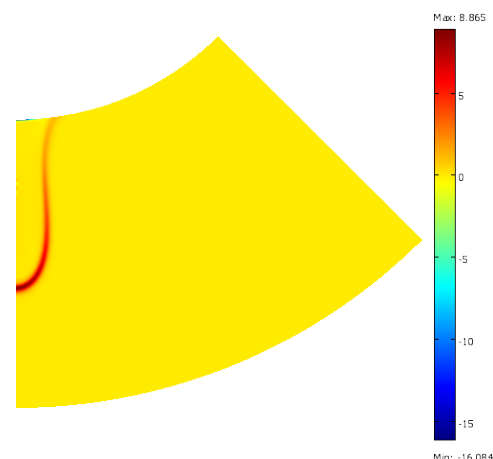
max ≈ 2.7 Кл/м³
min ≈ -0.96 Кл/м³
t = 2.835 нс



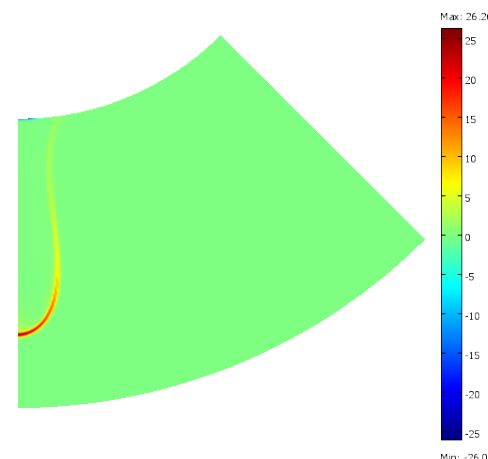
max ≈ 5.8 Кл/м³
min ≈ -7.0 Кл/м³
t = 2.985 нс



max ≈ 5.4 Кл/м³
min ≈ -10.2 Кл/м³
t = 3.025 нс

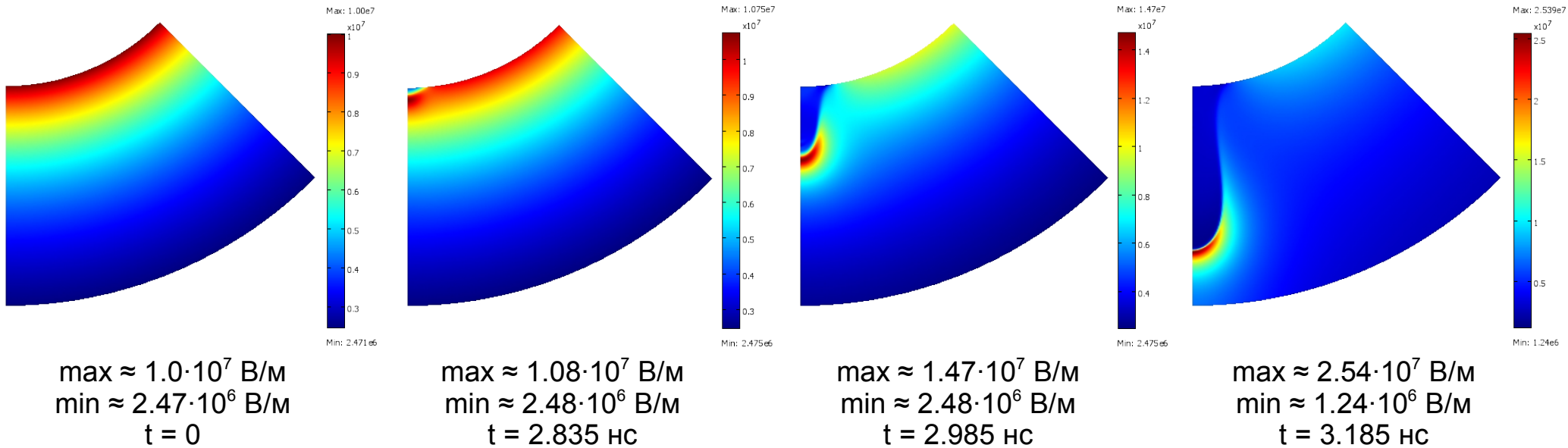


max ≈ 8.9 Кл/м³
min ≈ 16.1 Кл/м³
t = 3.085 нс

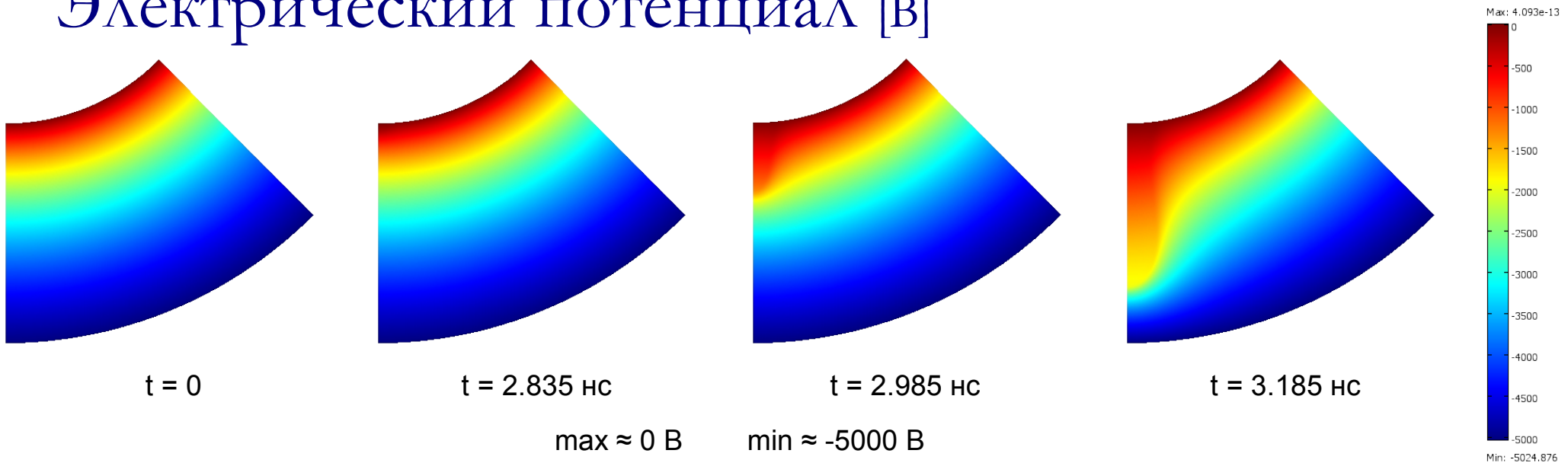


max ≈ 26.3 Кл/м³
min ≈ -26.0 Кл/м³
t = 3.185 нс

Напряженность электрического поля [В/м]

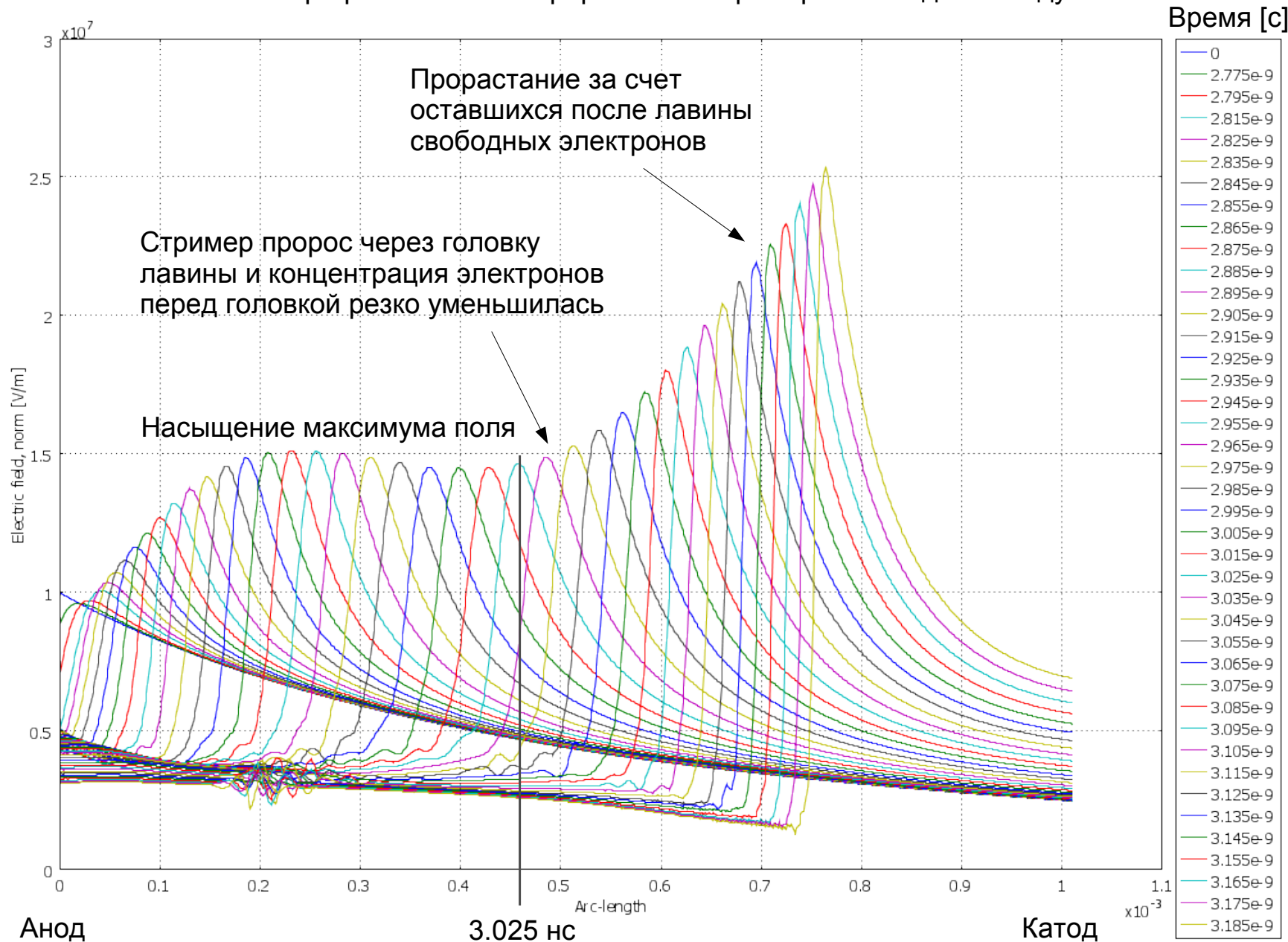


Электрический потенциал [В]



Напряженность электрического поля вдоль оси симметрии [В/м]

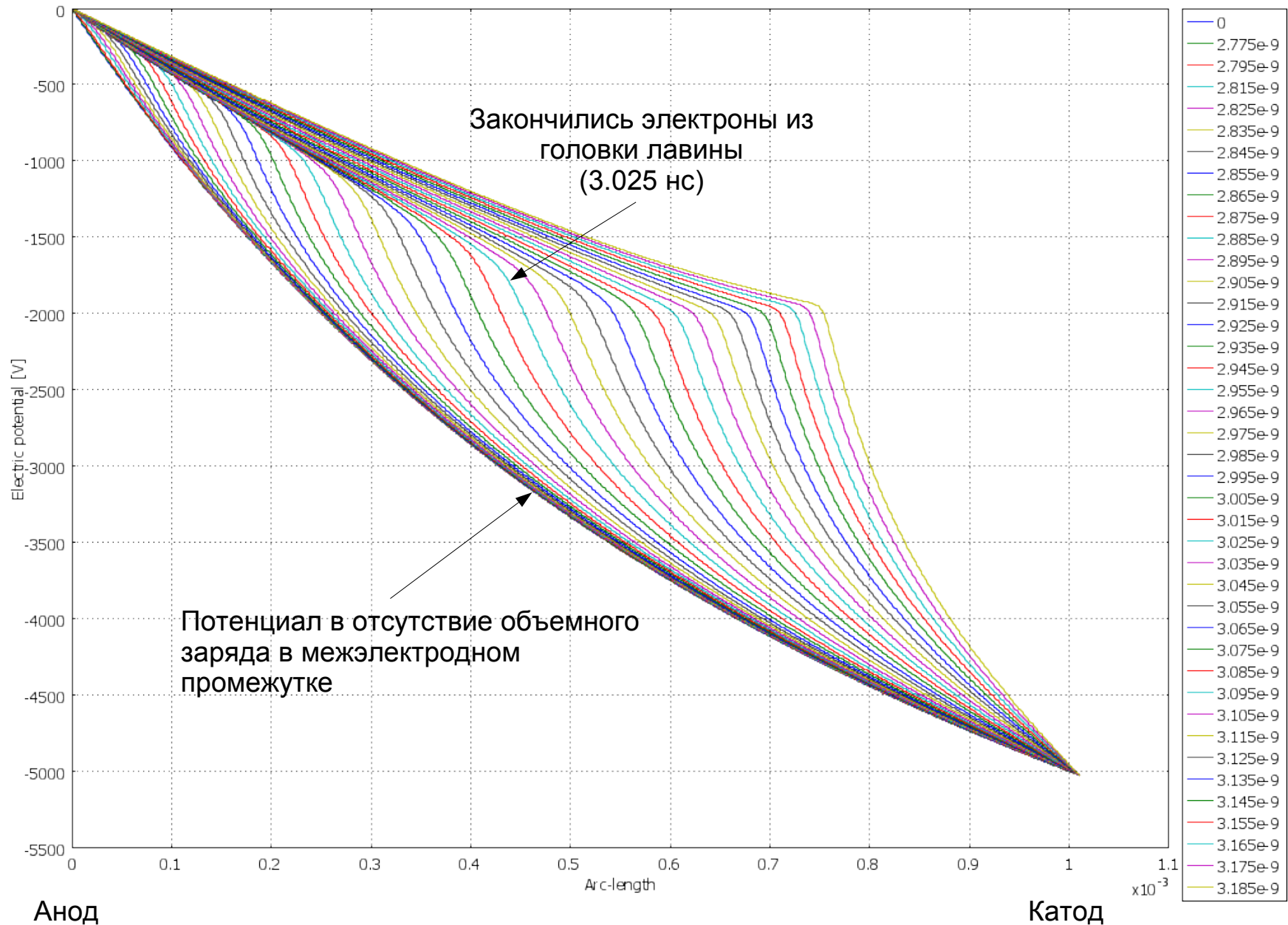
На графике показано прорастание стримера от анода к катоду.



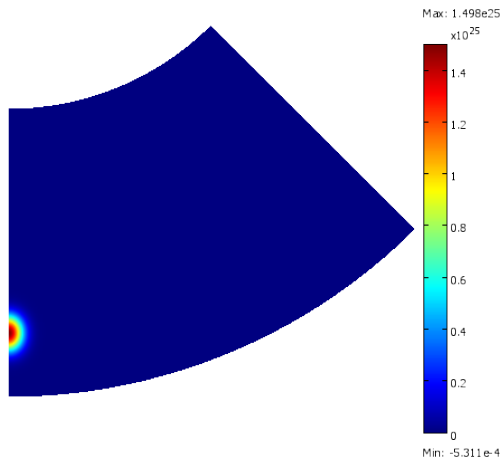
Электрический потенциал вдоль оси симметрии [В]

На графике показано проращение стримера от анода к катоду.

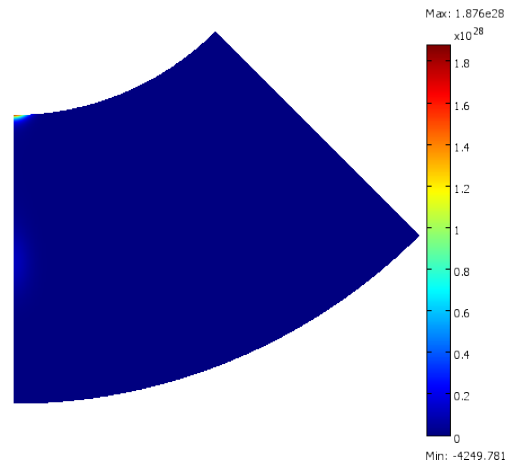
Время [с]



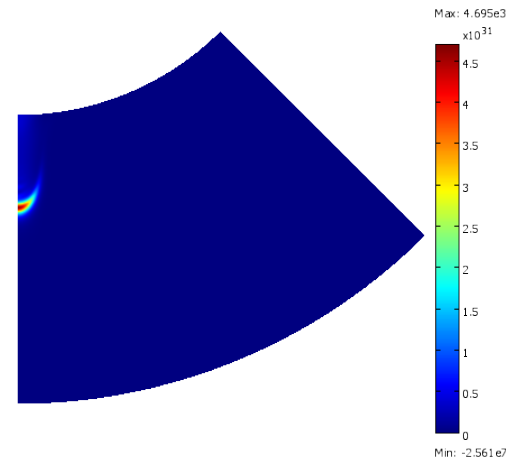
Интенсивность ионизации [1/м³с]



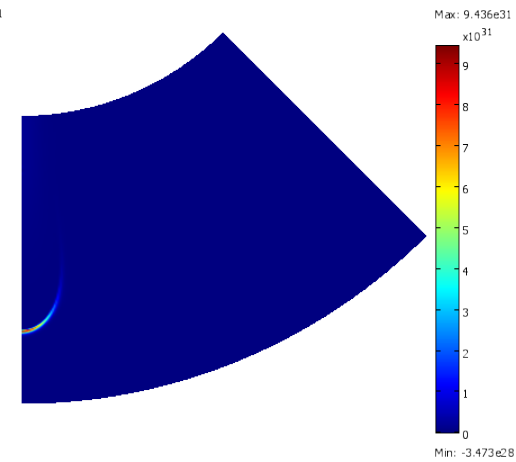
max $\approx 1.5 \cdot 10^{25}$ 1/м³ с
t = 1.5 нс



max $\approx 1.9 \cdot 10^{28}$ 1/м³ с
t = 2.705 нс

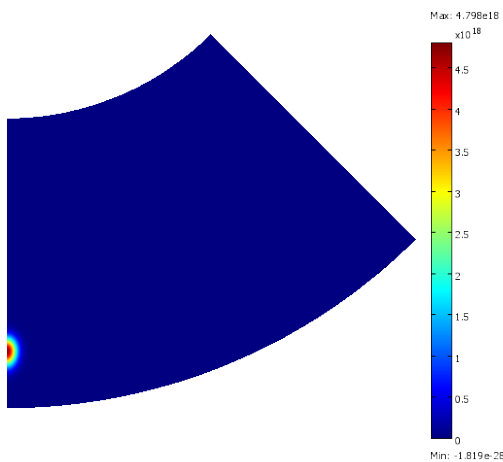


max $\approx 4.7 \cdot 10^{31}$ 1/м³ с
t = 2.985 нс

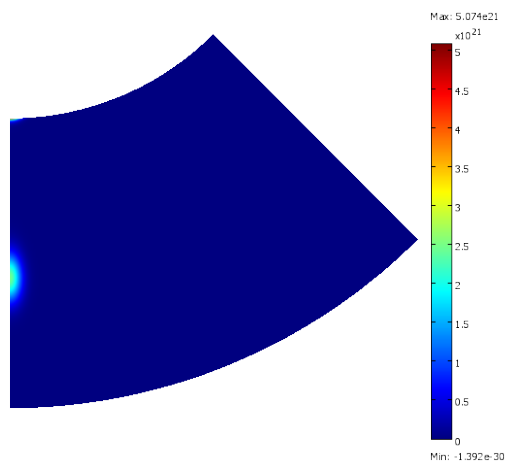


max $\approx 9.4 \cdot 10^{31}$ 1/м³ с
t = 3.185 нс

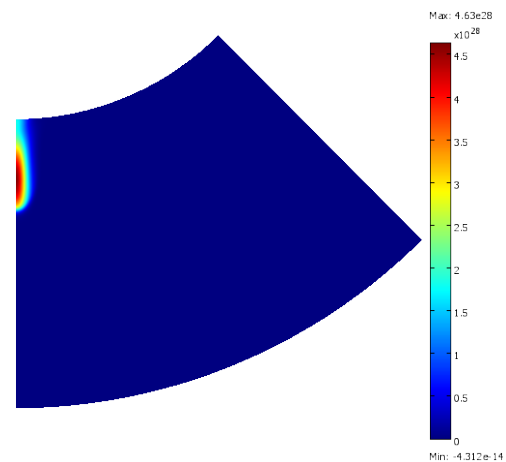
Интенсивность рекомбинации [1/м³с]



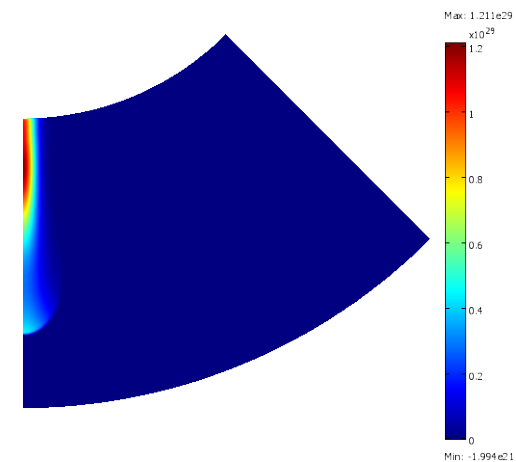
max $\approx 4.8 \cdot 10^{18}$ 1/м³ с
t = 1.5 нс



max $\approx 5.1 \cdot 10^{21}$ 1/м³ с
t = 2.705 нс



max $\approx 4.6 \cdot 10^{28}$ 1/м³ с
t = 2.985 нс



max $\approx 1.2 \cdot 10^{29}$ 1/м³ с
t = 3.185 нс

Проверка условия однородности структуры поля в плазме

Дебаевский радиус:

$$d = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k T_e}{e^2 n_e}}$$

В данной модели:

$$\frac{k T_e}{e} = 1 [B]$$

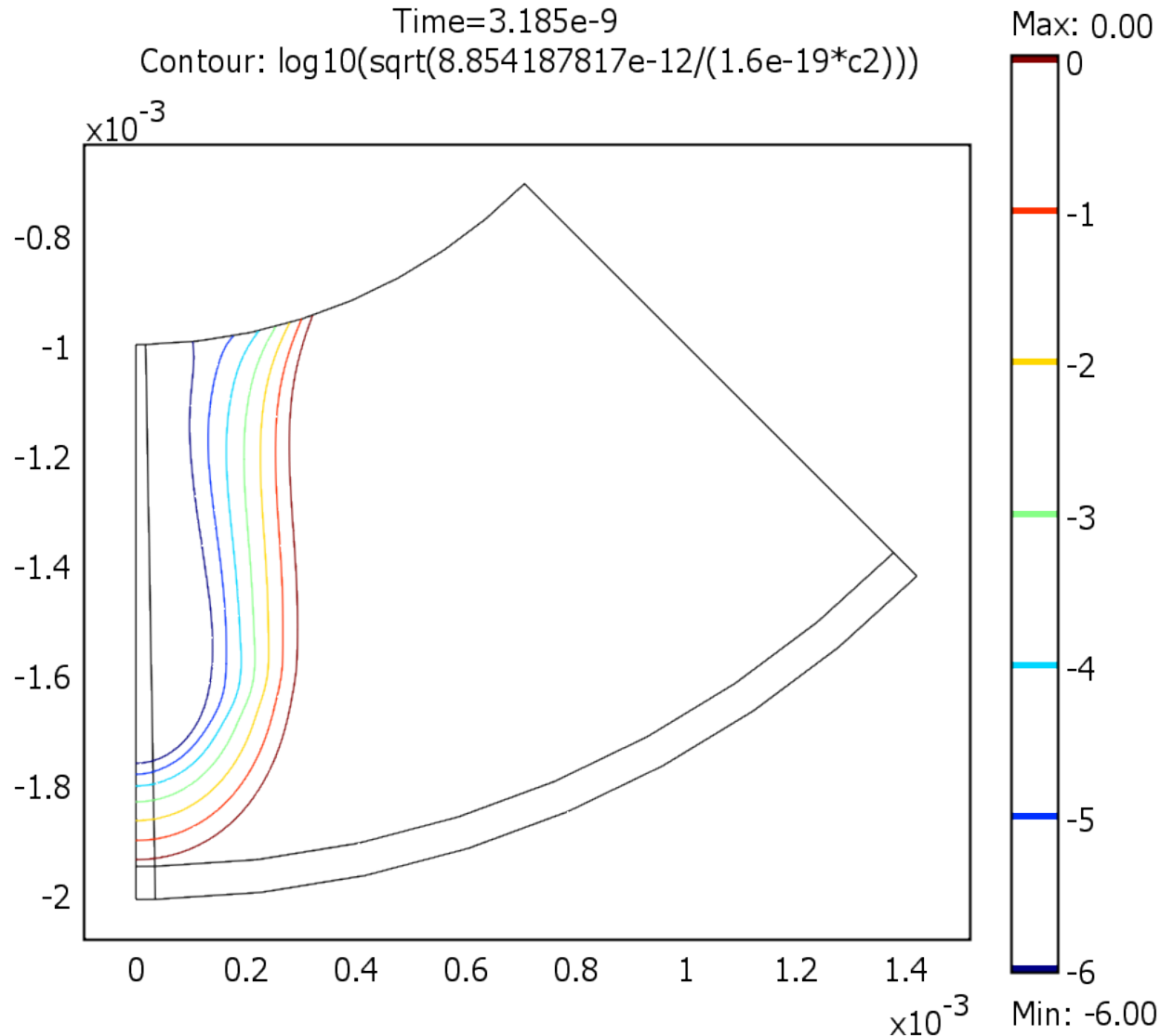
Условие:

Радиус Дебая (d) в плазменной области должен быть существенно меньше радиуса плазменного канала (R_p)

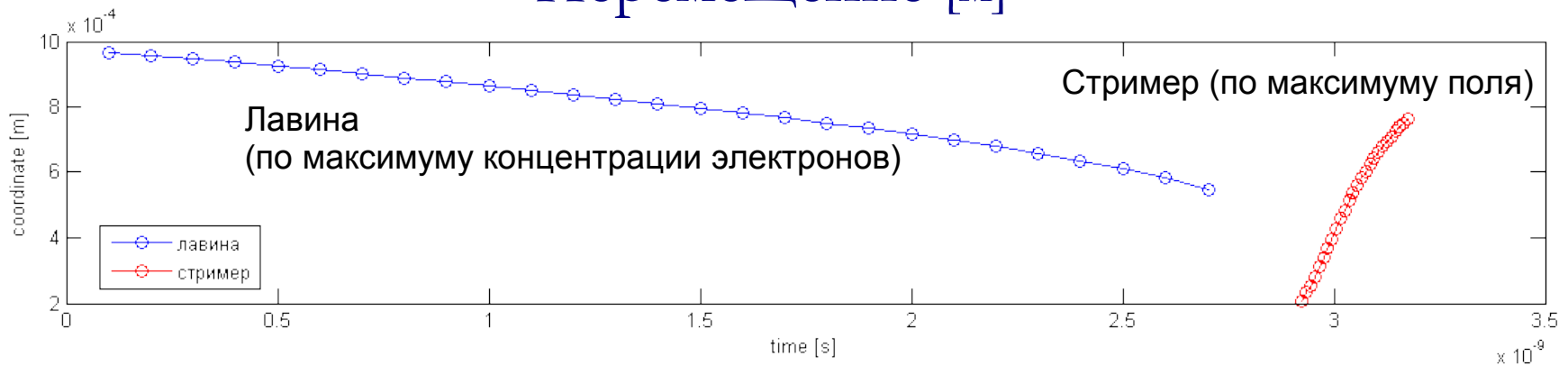
Итог:

$$d \leq 1 \text{ мкм}$$
$$R_p \approx 150 \text{ мкм}$$

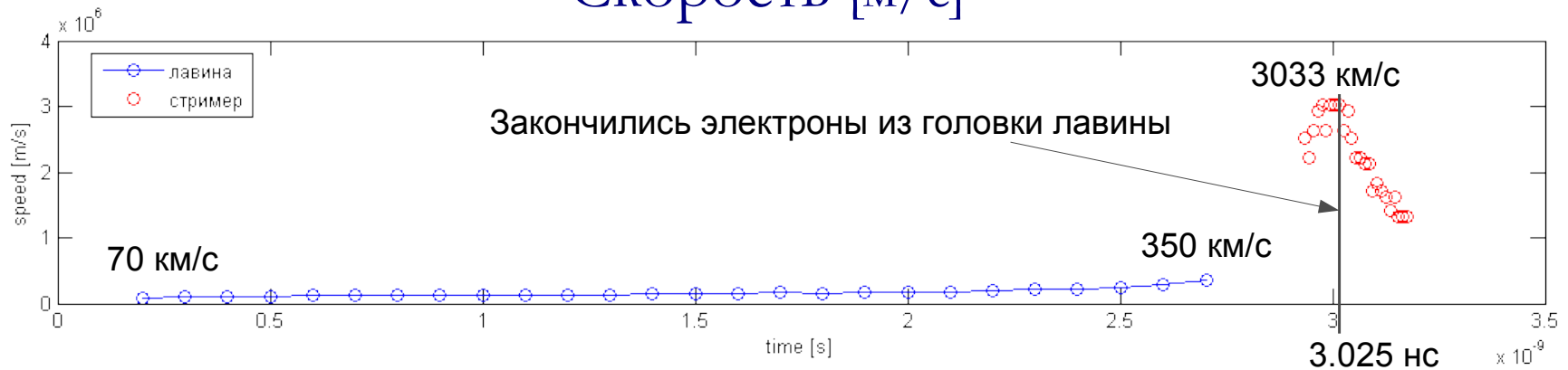
Контурный график десятичного логарифма от радиуса Дебая



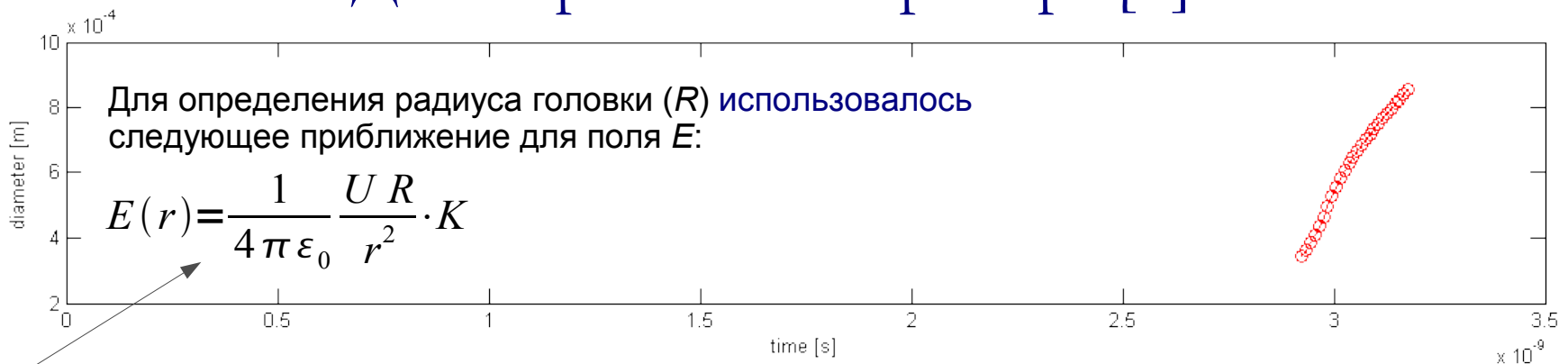
Перемещение [м]



Скорость [м/с]



Диаметр головки стримера [м]



Выводы

- В пакете Comsol создана простая модель, позволяющая рассчитать процесс лавинно-стримерного перехода. Для аргона общая расчетная система состоит всего из трех уравнений: уравнения Пуассона и двух транспортных уравнений (для электронов и положительных ионов).
- Основным достоинством данной модели является сокращение времени счета, благодаря уменьшению количества уравнений. Это так же позволяет решать модели с большим количеством элементов за разумное время. Для сравнения:
 - Для расчета 4.5 наносекунд строгой модели лавинно-стримерного перехода в воздухе (в пакете CFD-ACE) с грубой сеткой (1584 узла, 1491 элемент) требуется около двух суток процессорного времени.
 - Для расчета 3 наносекунд той же модели с хорошей сеткой (23217 узлов, 22896 элементов) требуется около четырех недель процессорного времени.
 - Для расчета 3 наносекунд модели в Comsol, использующей дрейфово-диффузионное приближение, для газа аргона с хорошей сеткой (25863 узла, 25520 элементов) потребовалось меньше суток.
- Еще большей экономии времени можно добиться, если получится использовать в Comsol решатель с адаптивной сеткой. Т.к. мелкая сетка нужна только в области больших градиентов, а в остальной части модели достаточно грубой сетки.
- Результаты расчета качественно согласуются с теоретическими данными и с результатами, полученными ранее при моделировании в других пакетах.
- В дальнейшем эта модель будет существенно усложнена. Будет рассчитан стример в воздухе (азот-кислородной смеси). Для этого надо добавить еще одно уравнение Нернста-Планка для отрицательных ионов и внести дополнительные слагаемые в функцию источника. Коэффициенты ионизации, прилипания, ион-электронной и ион-ионной рекомбинации будут взяты из экспериментальных данных, представленных в соответствующей литературе.
- Решение будет сравниваться с более строгой моделью в пакете CFD-ACE и с экспериментальными данными.