

螺旋波等离子体放电三维直接数值模拟

杨雄 程谋森 王墨戈 李小康

Three-dimensional direct numerical simulation of helicon discharge

Yang Xiong Cheng Mou-Sen Wang Mo-Ge Li Xiao-Kang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, **66**, 025201 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.025201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.025201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I2>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

磁场对螺旋波等离子体波和能量吸收影响的数值研究

Numerical study on the effects of magnetic field on helicon plasma waves and energy absorption

物理学报.2014, 63(3): 035203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.035203>

基于光栅结构的远场时间反演亚波长源成像

Far-field time reversal subwavelength imaging of sources based on grating structure

物理学报.2017, 66(4): 044101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.044101>

插值小波尺度法探地雷达数值模拟及四阶 Runge Kutta 辅助微分方程吸收边界条件

Ground penetrating radar numerical simulation with interpolating wavelet scales method and research on fourth-order Runge-Kutta auxiliary differential equation perfectly matched layer

物理学报.2016, 65(23): 234102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.234102>

大地土壤表面与浅埋多目标宽带复合电磁散射研究

Wide-band composite electromagnetic scattering from the earth soil surface and multiple targets shallowly buried

物理学报.2016, 65(20): 204101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.204101>

基于反演场扩散消除的时间反演多目标成像技术

Time reversal multi-target imaging technique based on eliminating the diffusion of the time reversal field

物理学报.2016, 65(20): 204102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.204102>

螺旋波等离子体放电三维直接数值模拟*

杨雄† 程谋森 王墨戈 李小康

(国防科学技术大学航天科学与工程学院, 长沙 410073)

(2016年5月10日收到; 2016年11月1日收到修改稿)

在详细考虑电化学反应和粒子碰撞关系的基础上, 建立了螺旋波放电三维直接数值计算模型, 舍弃以往模型小扰动假设, 对 Maxwell 方程组直接求解以计算电磁场能量沉积份额, 扩展了螺旋波等离子体计算模型的精度和适用范围. 以 Ar 为工质气体的仿真结果显示: 密度跃升效应和电子温度与放电压力的关系与 Toki 等和 Chen 的实验结果符合较好; 与经典鞘层理论对比, 在粒子数密度、德拜长度、电势以及电子温度的分布上取得高度一致, 验证了模型的有效性和精度. 利用本文模型研究了低场螺旋波放电过程中的磁场峰值现象, 验证了放电室端面的波干涉机理, 并发现波干涉的本质是螺旋波分量与其端面回波叠加形成的驻波.

关键词: 等离子体, 螺旋波, 直接数值模拟, 波干涉

PACS: 52.50.Qt, 41.20.Jb, 52.70.Ds, 02.60.-x

DOI: 10.7498/aps.66.025201

1 引言

螺旋波等离子体具有电离效率高、无电极腐蚀的优点, 在半导体制造以及空间推进等领域有着广泛的应用前景. 螺旋波电离过程中涉及的复杂电磁-粒子相互作用并没有被完全地理解. 早期的研究中, 朗道阻尼^[1]或者螺旋波被认为是螺旋波电离的主要能量沉积方式, 但随着研究的深入, 越来越多的研究认为 TG (Trivelpiece-Gould) 波可能才是能量传递的主要因素^[2-5].

近些年, 对螺旋波等离子体源的放电模拟取得了长足进展, 促进了对螺旋波放电机理的认识. Arnush 编写了螺旋波放电一维 HELIC 代码, 通过电磁场理论解析地计算螺旋波和 TG 波能量沉积, 但是并没有考虑等离子体的电离和输运过程; Chen^[6]运用均匀放电模型, 计算了均匀参数下螺旋波等离子体源在放电过程中的能量损失特征; Curreli 和 Chen^[7,8]发展了径向非均匀螺旋波放电模型, 迭代得到等离子体的径向分布参数, 并合理解释了等离子体径向分布的原因; Ahedo^[9]

在考虑等离子体质量和动量守恒的基础上提出了径向密度和速度分布的计算方法, 随后 Ahedo 和 Jaume^[10]将其扩充为二维算法, 但是其计算中并未计算能量沉积过程; 国内方面, 成玉国等^[11,12]采用与 Chen 相似的方法计算了一维电子温度非均匀的螺旋波放电过程, 对磁场在螺旋波放电过程的作用进行了研究.

完善的螺旋波放电仿真应包含对能量沉积和碰撞电离过程的模拟两部分. 对于能量沉积的模拟, 前人的研究几乎都是在线性小扰动的假设下推导出磁化冷等离子体中螺旋波和 TG 波的解析解, 进而方便地计算电磁波能量沉积. 这种方法仅适用于中低射频能量密度和磁场强度的电离过程, 其本质上不是完全的直接数值模拟, 计算精度受到限制. 对于碰撞电离的输运过程模拟, 目前的研究最多涉及二维或准二维模型, 且对于等离子体生成的复杂电化学反应过程考虑较少, 因此计算结果与实际放电状态存在差异. 本文建立了三维条件下直接数值模拟的螺旋波放电模型, 在充分考虑电离过程中的粒子碰撞和电化学反应因素的基础上, 通过漂移-扩散输运方程计算等离子体各粒子密度和电子

* 国家自然科学基金 (批准号: 11305265) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yx12321@126.com

温度, 通过实时解算的麦克斯韦方程组计算能量沉积份额, 利用 COMSOL MultiphysicsTM 所提供的高效有限元 PDE 求解器进行全耦合求解.

在本文中, 首先对三维螺旋波放电模型作了详细的介绍, 然后将模型计算结果与实验结果和经典理论进行了对比, 最后利用该模型研究了有限空间螺旋波等离子体放电过程中的波干涉现象.

2 计算模型

本文以国防科技大学束能与电磁推进实验室小型螺旋波等离子体源 (SHPS@BEEMP) 为研究对象, 建立了三维条件下直接数值模拟的螺旋波放电计算模型, 如图 1 所示. 本文计算了几种不同射频天线的电离过程, 在第三节的验证算例中分别重构了名古屋 III 型天线 (Nagoya III, $m = \pm 1$) 和三匝环形天线 ($m = 0$), 在第四节波干涉研究中采用 Shoji 型 (双臂半波长螺旋形, $m = +1$) 天线, 背景磁场和气体压力为均匀分布. 除非特别说明, 本文所采用的放电参数分别为: 射频频率 $f = 13.56$ MHz, 放电压力 $P_0 = 10$ mTorr (1 Torr = 133.322 Pa), 气体温度 $T_g = 300$ K, 天线长度 $L_a = 124$ mm, 放电室长度 $L_d = 350$ mm, 放电室半径 $r_d = 16$ mm.

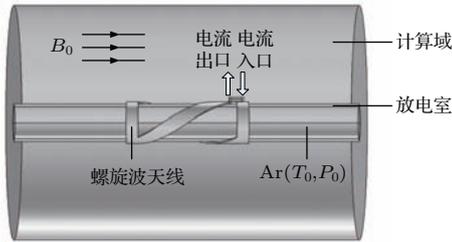


图 1 仿真模型示意图

Fig. 1. Schematic diagram of the helicon discharge simulation.

在本节中, 分别从电磁场方程、电子输运方程、重粒子守恒方程、电化学反应、边界条件以及求解处理等方面对模型进行具体介绍.

2.1 电磁场方程

螺旋波放电过程中的电磁场可以分为两部分, 一部分是以天线为源的交变电磁场 (包括诱导电流感生的电磁场), 另一部分是由等离子体双极扩散形成的静电场. 在本文中, 对于交变电磁场部分在

频域下以磁矢势为变量计算安培定律, 对静电场部分以电势为变量计算泊松方程. 将安培定律在频域下改写可得

$$(j\omega\sigma - \omega^2\varepsilon_0)\mathbf{A} + \nabla \times (\mu_0^{-1}\nabla \times \mathbf{A}) = 0, \quad (1)$$

其中 j 为虚数单位, ω 为射频角频率, \mathbf{A} 为磁矢势, σ 为电导率, ε_0 为真空介电常数, μ_0 为真空磁导率. 电导率在等离子体以外的计算域为常值, 在磁化等离子体中可表示为张量形式:

$$\sigma = \begin{bmatrix} \frac{m_e(\nu_e + j\omega)}{n_e e^2} & -B_z & B_y \\ B_z & \frac{m_e(\nu_e + j\omega)}{n_e e^2} & -B_x \\ -B_y & B_x & \frac{m_e(\nu_e + j\omega)}{n_e e^2} \end{bmatrix}^{-1}, \quad (2)$$

其中电子碰撞频率 ν_e 是电子温度、电子数密度以及中性粒子数密度的函数, 具体表达式参见本文附录, B_x , B_y 以及 B_z 为背景磁场的三个分量, n_e 为电子数密度, e 为电荷元量.

等离子体电势按照稳态条件下的泊松方程来描述:

$$-\nabla \cdot \varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla V = \rho_v, \quad (3)$$

其中 V 为等离子体电势, ρ_v 为等离子体电荷密度.

方程 (1) 和 (3) 描述了等离子体中的电磁场关系, 电磁波在等离子体中传播存在阻性损耗, 表征了放电过程中从电磁波沉积到等离子体中的能量为

$$Q_{rh} = \frac{1}{2} \text{real}(\mathbf{J} * \mathbf{E}_{mf}), \quad (4)$$

其中 $*$ 为共轭相乘, \mathbf{J} 为等离子体电流, 包括感生电流和位移电流两部分:

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}_{mf} + j\omega \mathbf{E}_{mf}, \quad (5)$$

\mathbf{E}_{mf} 为电场的交变分量,

$$\mathbf{E}_{mf} = -j\omega \mathbf{A}. \quad (6)$$

2.2 电子输运方程

严格的电子输运过程应该使用相空间 (\mathbf{r} , \mathbf{v}) 的动力学玻尔兹曼方程来描述:

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{u}_e \cdot \nabla f_e + \frac{e}{m_e} (\mathbf{E} + \mathbf{u}_e \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial f_e}{\partial t} \right)_c, \quad (7)$$

其中 f_e 为电子相空间分布函数, \mathbf{u}_e 为电子漂移速度, 等式右边为碰撞项. 方程 (7) 是含有非线性碰撞项的积分——微分方程, 通常难以直接求解. 尽管螺旋波等离子体具有较高的电离效率, 但其仍然属于非热力学平衡的冷等离子体范畴, 大量实验和理论研究都表明, 除非极端的放电条件^[13](放电电压约 1 mTorr 且同时射频功率不低于数 kW/cm²), 在绝大多数情况下螺旋波等离子体中的中性离子数密度要比电子高约 1—2 个数量级以上^[14–16], 因此可以按照弱电离等离子体处理, 在此基础上可对碰撞项线性化, 并将动力学方程在速度空间进行积分为流体方程, 从而在时域下的三维空间进行高效率求解. 忽略放电室中流场的整体运动, 电子的粒子数守恒可以写成如下形式:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_e = R_e, \quad (8)$$

其中 R_e 为电子生成源项, $\mathbf{\Gamma}_e$ 为电子密度通量矢,

$$\mathbf{\Gamma}_e = -(\mu_e \cdot \mathbf{E})n_e - D_e \nabla n_e, \quad (9)$$

其中 \mathbf{E} 为静态电场, 是等离子体电势的空间梯度, μ_e 为电子迁移率, D_e 为电子扩散率. 假设电子偏离麦克斯韦分布不远, 将 (7) 式碰撞项线性化后可以导出:

$$\mu_e = \frac{\langle \mathbf{u}_e \rangle}{\mathbf{E}} = \begin{bmatrix} \frac{m_e \nu_e}{e} & -B_z & B_y \\ B_z & \frac{m_e \nu_e}{e} & -B_x \\ -B_y & B_x & \frac{m_e \nu_e}{e} \end{bmatrix}^{-1}, \quad (10)$$

其中 $\langle \mathbf{u}_e \rangle$ 是指对 \mathbf{u}_e 在电子分布函数的速度空间内做积分, 下同.

$$D_e = \frac{n_e \langle \mathbf{u}_e \rangle}{\nabla n_e} = \frac{e T_e}{m_e \nu_e}, \quad (11)$$

其中 T_e 为电子温度, 在本文中以 V 为计量单位.

假设有 M 个反应净生成电子, 电子生成源项 R_e 与化学反应速率 r_k 的关系为:

$$R_e = N_A \sum_{k=1}^M r_k, \quad r_k = k_{f,k} \prod_{j=1}^N c_j, \quad (12)$$

其中 N_A 为阿伏伽德罗常数, c_j 为反应式中 j 组分摩尔浓度, $k_{f,k}$ 为化学反应速率系数, 由反应的碰撞截面定义:

$$k_{f,k} = \sqrt{2e/m_e} \int_0^\infty \varepsilon \sigma_k(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (13)$$

其中 m_e 为电子质量, $\sigma_k(\varepsilon)$ 为化学反应碰撞截面, 它是电子能量的函数, 其离散的数据可以通过查询

得到, $f(\varepsilon)$ 为电子能量分布函数 (EEDF), 本文以麦克斯韦分布进行计算.

电子平均能量守恒式可以写成:

$$\frac{\partial n_\varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_\varepsilon + \mathbf{E} \cdot \mathbf{\Gamma}_\varepsilon = S_{en} + Q_{dep}/e, \quad (14)$$

其中 n_ε 为平均电子能量密度, $\mathbf{\Gamma}_\varepsilon$ 为电子能量通量矢, S_{en} 为碰撞造成的能量损失 (包括能弹性碰撞和非弹性碰撞), Q_{dep} 为电磁波沉积到等离子体中的能量: $Q_{dep} = Q_{rh}$. 电子能量通量矢采用与电子密度通量矢相似的定义:

$$\mathbf{\Gamma}_\varepsilon = -(\mu_\varepsilon \cdot \mathbf{E})n_\varepsilon - D_\varepsilon \nabla n_\varepsilon, \quad (15)$$

其中 μ_ε 为电子能量迁移率, D_ε 为电子能量扩散率. 当 EEDF 符合麦克斯韦分布时, 通过玻尔兹曼方程的积分推导可以证明输运系数之间满足相互关系^[17]: $\mu_\varepsilon = 5\mu_e/3$, $D_\varepsilon = 5D_e/3$.

由碰撞导致的能量交换 S_{en} 考虑全部化学反应过程, 包含弹性和非弹性碰撞:

$$S_{en} = F \cdot \sum_{j=1}^k r_k d_{ek}, \quad (16)$$

其中 F 为法拉第常数, d_{ek} 为能量变化值. 电子在弹性碰撞过程中交换的能量为

$$d_{ek} = \frac{3}{2} \frac{m_e}{m_{Ar}} \left(T_e - \frac{k_B T_g}{e} \right), \quad (17)$$

上式中 m_{Ar} 为 Ar 的原子质量, 弹性碰撞过程中交换能量 d_{ek} 的单位以伏特计. 对于非弹性碰撞, 能量的损失等于具体的化学反应中能量的变化, 详见 2.5 节.

2.3 重粒子守恒方程

在等离子体中除电子外还存在基态原子、激发态原子、离子等重粒子, 假设由 N 个反应式生成 Q 种重粒子, 那么存在 $Q - 1$ 个相互独立的粒子守恒方程:

$$\rho \frac{\partial w_k}{\partial t} = \nabla \cdot \mathbf{j}_k + R_k, \quad (18)$$

其中 w_k 为 k 粒子的质量分数, \mathbf{j}_k 为重粒子扩散通量矢, R_k 为 k 粒子生成速率源项. 螺旋波放电是一种非热平衡电离过程, 重粒子的温度通常在放电过程中的变化较小, 忽略重粒子的热扩散效应, 则 k 组分粒子扩散通量矢为

$$\mathbf{j}_k = \rho w_k \left(D_{k,f} \frac{\nabla w_k}{w_k} - z_k \mu_{k,f} \mathbf{E} \right), \quad (19)$$

其中括号里第一项为浓度扩散项, 第二项为电场迁移项. $D_{k,f}$ 为 k 组分粒子扩散系数, z_k 为 k 组分电荷量, $\mu_{k,f}$ 为 k 组分迁移率:

$$\mu_{k,f} = \frac{z_k D_{k,f}}{k_B T_g}. \quad (20)$$

重粒子生成源项由化学反应决定:

$$R_k = M_k \sum_{j=1}^N v_{k,j} r_j, \quad (21)$$

$v_{k,j}$ 为化学反应计量系数, r_j 为 j 反应的反应速率, M_k 为重粒子摩尔质量.

方程 (18) 由 $Q-1$ 个相互独立的粒子守恒方程构成, 加上质量守恒约束关系式, 形成对所有重粒子的完整描述:

$$\sum_{k=1}^Q w_k = 1. \quad (22)$$

2.4 边界条件

为了对全部计算域等离子体形成统一的解析, 本文推导了各态粒子的固壁通量边界条件. 电子在等离子体的边界上通过热扩散造成巨大损失, 当不考虑电子撞击壁面形成的反射时, 壁面处垂直向外的电子通量矢为

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Gamma}_e = n_e \langle v_n \rangle = \frac{1}{4} v_{e,th} n_e, \quad (23)$$

其中 \mathbf{n} 为法向量, v_n 为电子运动速度垂直壁面的分量, $v_{e,th}$ 为电子热速度. 壁面处损失电子能量通量矢为

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Gamma}_\varepsilon = n_e \left\langle \frac{1}{2} m_e v^2 v_n \right\rangle = \frac{1}{2} e T_e \cdot v_{e,th} n_e. \quad (24)$$

对于重粒子, 其粒子数的变化不是由于热运动速度导致, 而是受到表面化学反应或壁面处的电场控制, 因此其壁面处的扩散通量矢可以定义为

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{j}_k = M_k r_{surf,k} + M_k c_k \mu_{m,k} z_k (\mathbf{n} \cdot \mathbf{E}), \quad [(z_k \mathbf{n} \cdot \mathbf{E}) > 0], \quad (25)$$

其中 M_k , $r_{surf,k}$, c_k , $\mu_{m,k}$ 分别为 k 组分质量、表面化学反应速率、摩尔浓度以及扩散系数. 等式右边第一项为化学反应作用, 第二项为电场迁移作用, 当重粒子为中性粒子时, 只受到第一项的作用; 当重粒子为离子时, 还要受到第二项的控制. 括号里为方向控制, 保证当电场与壁面垂直时, 由于迁移的作用粒子流向外出.

除通量边界条件外, 在本算例中计算了导电边界条件下的电离, 放电室壁面电势 $V = 0$, 在端面上则应用了悬浮电势的边界条件:

$$\begin{cases} -\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = 0, \\ -\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Gamma}_e = 0, \\ -\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Gamma}_\varepsilon = 0, \end{cases} \quad (26)$$

其中 \mathbf{D} 为位移电场, 以上条件形成了位移电场不能穿透的绝缘边界.

2.5 化学反应

螺旋波电离是一种非热力学平衡的感应电离过程, 其中涉及的二级电离可以忽略不计, 在本文算例中考虑了 Ar 一级电离过程中所发生的 7 组反应, 涉及基态 Ar 原子、激发态 Ar 原子 (Ars) 以及 Ar 离子 (Ar^+) 三种重粒子, 化学反应表达式如表 1 所示, 其中反应 5 对于低气压的放电维持的等离子体具有最重要的作用. 此外, 在等离子体的边界上还考虑了激发态 Ar 原子和 Ar 离子的复合反应 (反应 I 和 II).

表 1 化学反应关系式

Table 1. Collisions and chemical reactions.

反应序号	反应关系式	反应类型	能量变化 $\Delta\varepsilon/\text{eV}$
1	$e + \text{Ar} \Rightarrow e + \text{Ar}$	弹性碰撞	0
2	$e + \text{Ar} \Rightarrow e + \text{Ars}$	基态激发	11.5
3	$e + \text{Ars} \Rightarrow e + \text{Ar}$	超弹性碰撞	-11.5
4	$e + \text{Ar} \Rightarrow 2e + \text{Ar}^+$	基态电离	15.8
5	$e + \text{Ars} \Rightarrow 2e + \text{Ar}^+$	步进电离	4.24
6	$\text{Ars} + \text{Ars} \Rightarrow e + \text{Ar} + \text{Ar}^+$	潘宁电离	—
7	$\text{Ars} + \text{Ar} \Rightarrow \text{Ar} + \text{Ar}$	亚稳态猝灭	—
I	$\text{Ars} \Rightarrow \text{Ar}$	表面复合反应	—
II	$e + \text{Ar}^+ \Rightarrow \text{Ar}$	表面复合反应	—

注: 反应 2—7 来自文献 [18].

2.6 求解处理

2.6.1 阻抗边界条件

当射功率源频率为 13.56 MHz 时, 电流在铜质天线中的趋肤深度为 17.94 μm . 对于 3D 模型, 过于细化的网格会呈级数增加 PDEs 的自由度, 由于实际计算资源的限制, 要划分出能解析高频电流

的网格通常很困难. 在本文模型的计算中, 采用阻抗边界条件定义射频天线的激励方式, 只计算天线表面的电流和电场而不对天线划分三维网格, 这种处理方式并不影响实际电磁场分布和天线能量损耗, 但能极大简化计算过程. 阻抗边界条件下由电流源激发的电磁场可以写成如下形式:

$$\sqrt{\frac{\mu_0 \mu_r}{\varepsilon_0 \varepsilon_r - j\sigma/\omega}} \cdot \mathbf{J}_a + \mathbf{E}_{mf} - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{E}_{mf}) \mathbf{n} = 0, \quad (27)$$

其中 ε_r , μ_r 以及 σ 分别为天线材料的相对介电常数、相对磁导率以及电导率, \mathbf{J}_a 为天线表面电流密度 (注: 此处单位为 A/m).

2.6.2 对数稳定求解

由于漂移-扩散输运方程本身具有高度的非线性, 尤其是在等离子体鞘层中, 等离子体的电子密度、电子平均能量密度等参数具有极大的空间梯度. 为了解决这一点给数值计算上带来的困难, 在实际的计算中以电子密度、电子平均能量密度和重粒子质量分数的对数为自变量来求解输运控制方程, 令 $N_e = \ln n_e$, $E_n = \ln e_n$, $W_k = \ln w_k$ 重新改写输运方程:

$$n_e \frac{\partial N_e}{\partial t} + \nabla \cdot [-n_e (\mu_e \cdot \mathbf{E}) - n_e D_e \nabla N_e] = R_e, \quad (28)$$

$$n_e \frac{\partial E_n}{\partial t} + \nabla \cdot [-n_e (\mu_e \cdot \mathbf{E}) - n_e D_e \nabla E_n] + \mathbf{E} \cdot \mathbf{I}_e = R_e, \quad (29)$$

$$\rho w_k \frac{\partial W_k}{\partial t} = \nabla \cdot \mathbf{j}_k + R_k. \quad (30)$$

(1) 式、(3) 式, (22) 式, (28) 式—(30) 式包含 7 组方程以及 7 个因变量: 磁矢势 \mathbf{A} 、电势 V 、电子数密度对数 N_e 、电子平均能量对数 E_n , 以及重粒子质量分数对数 W_{Ar} , W_{Ars} , W_{Ar+} , 这 7 组方程以及所述边界条件构成封闭的 PDEs, 但要对其进行求解还应包括合适的初始条件: $n_{e0} = 1 \times 10^{14} \text{ m}^{-3}$, $T_e = 0 \text{ V}$, $\mathbf{A} = [0 \ 0 \ 0] \text{ Wb/m}$, $V = 0 \text{ V}$, $w_{Ar} = 1$, $w_{Ars} = w_{Ar+} = 0$ 以及初始电中性限制条件 $n_e = n_i$.

在空间网格方面, 求解域的主体采用四面体网格, 由于等离子体参数在鞘层内变化剧烈, 在放电室的壁面处采用了六面体边界层网格, 边界层网络的厚度呈等比数列, 比例系数为 1.4, 共 6 层, 其中第一层的厚度为 0.08 mm, 小于当地等离子体 Debye

长度 (参照图 5), 对空间网格点采用线性函数的有限元格式进行离散. 时间离散为向后差分格式, 具体采用了 COMSOL MultiphysicsTM 求解器的自适应时间步长技术, 初始时间步长为 $1 \times 10^{-14} \text{ s}$.

3 计算结果与分析

3.1 实验算例验证

Toki 等^[14] 开展了小型螺旋波 Ar 等离子体源实验探索, 放电腔直径 2.5 cm, 放电天线为 Nagoya III 型, 利用射频补偿的朗缪尔双探针研究了不同射频频率、射频功率、气压等参数下等离子体特性的变化趋势. Chen^[15,19] 设计并实验测量了三匝环形天线螺旋波 Ar 等离子体源的放电特性, 放电室直径和长度均为 5.0 cm, 天线靠近放电室一侧放置. 为验证模型的可靠性, 本文针对上述两种等离子体源分别重构了验证算例进行计算, 图 2 分别显示了

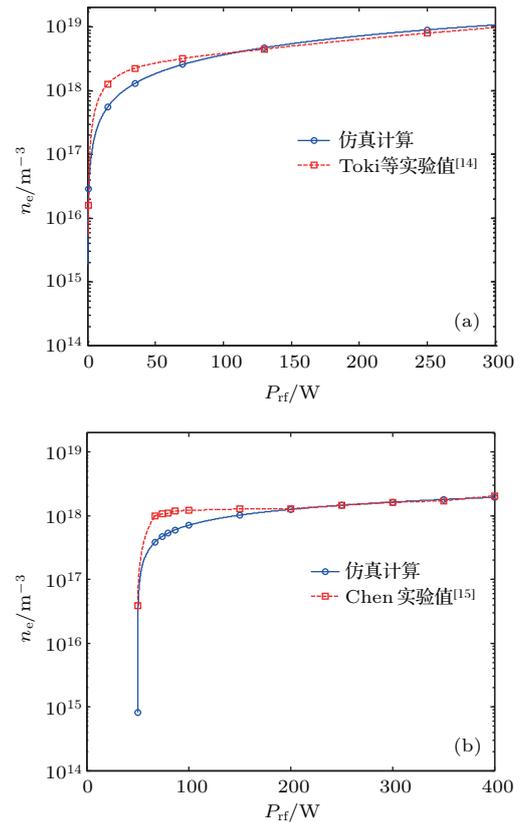


图 2 等离子体源实验平均电子密度与计算值对比 (a) Toki^[14] 实验值 ($B_0 = 45 \text{ G}$, $p_0 = 50 \text{ mTorr}$, $f = 67.8 \text{ MHz}$); (b) Chen^[15] 实验值 ($B_0 = 80 \text{ G}$, $p_0 = 20 \text{ mTorr}$, $f = 13.56 \text{ MHz}$)

Fig. 2. The average electron density of simulation vs. experimental results: (a) Experiment by Toki^[14] ($B_0 = 45 \text{ G}$, $p_0 = 50 \text{ mTorr}$, $f = 67.8 \text{ MHz}$); (b) by Chen^[15] ($B_0 = 80 \text{ G}$, $p_0 = 20 \text{ mTorr}$, $f = 13.56 \text{ MHz}$).

模型的仿真计算值与两种等离子体源实验值随射频功率的变化曲线(注:图2(b)中实验记录的功率值为射频电源输出值,因此在计算的过程中考虑了外电路的损耗,外电路电阻值采用Chen建议的 $1\ \Omega$ ^[15]).

在螺旋波电离中存在所谓的“密度跃升效应”,即等离子体密度随着射频功率的增加存在突然增加的阶段,Chen^[15]利用螺旋波等离子体放电电阻的非单调变化对这一现象进行了解释.图2显示了仿真计算与实验结果不仅在数值上相接近,并且密度跃升区间也保持了较好的符合,验证了仿真计算的准确性.

在螺旋波放电中,电子温度随着气体压力的升高而下降,这是由于随着气体压力的升高,放电室中的中性粒子数增加,电子与中性粒子间因碰撞导致的能量交换更加频繁,最终导致电子能量下降.图3显示了电子温度与气体放电压力的对应关系,仿真计算的结果与实验值保持相同的变化趋势,但电子温度的绝对值略高.

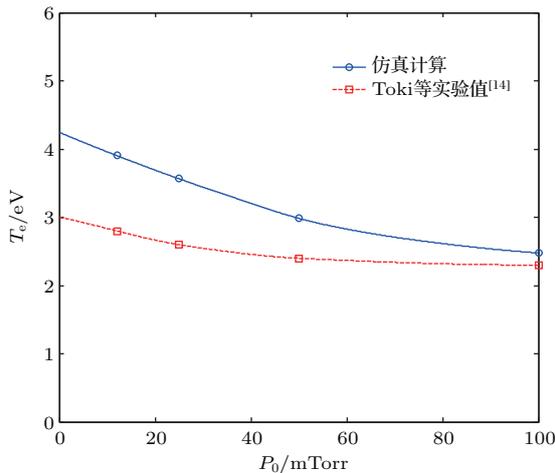


图3 Toki^[14]等离子体源实验电子温度与计算值对比 ($B_0 = 45\text{ G}$, $P_{rf} = 3\text{--}12\text{ W}$, $f = 67.8\text{ MHz}$)
 Fig. 3. The electron temperature of simulation vs. experimental results by Toki^[14] ($B_0 = 45\text{ G}$, $P_{rf} = 3\text{--}12\text{ W}$, $f = 67.8\text{ MHz}$).

3.2 等离子体鞘层理论验证

有界等离子体边缘存在等离子体鞘层,具有滞留带电粒子使等离子体保持稳定的作用.鞘层内并不满足准中性条件,电势和电子密度发生急剧变化,并且这种变化的空间尺度极小,一般仅为数个德拜长度.因此要精确解析鞘层内部结构往往存在数值处理上的困难,在Chen^[6]以及Ahedo和

Jaume^[10]以往螺旋波模型中,采取了一种近似化解决方案:以离子速度达到Bohm声速为边界条件进行计算.这种方法下只解析了等离子体从主体到预鞘层区域的特性,对于鞘层的特性是未知的.在本文的计算模型中,通过控制实际固壁边界的通量条件可以解析真实鞘层的详细结构.

根据等离子体静电鞘层理论,离子从等离子体主体向壁面进行漂移扩散,漂移速度随着电势的下降而逐步增加,当离子速度满足Bohm判据时达到预鞘层,由于质量惯性的影响,等离子体开始出现电荷分离,电子密度与离子密度出现显著差异.从图4可以看出电子密度与离子密度都随着与壁面距离减小而下降,其中电子密度在最后的薄层内下降尤为明显.

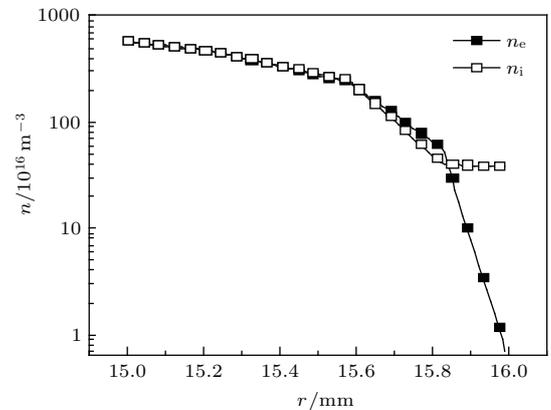


图4 鞘层内电子与离子密度径向分布
 Fig. 4. Distribution of electron and ion density in the sheath.

图5显示了离子漂移速度、当地Bohm速度和Debye长度随半径的变化曲线.从图中可以看出,离子漂移速度在离壁面约0.4 mm处达到Bohm速度,约为数个当地德拜长度,与经典鞘层理论相符.

图6分别显示了天线电流为11 A时电子温度和电势在放电室中达到稳态时的分布.电子温度分布相对较为均匀,但在靠近天线壁面的区域内较高,对应此处的能量沉积较多,电子被加热到更高温度.等离子体电势在放电室呈现中间高边缘低的分布,符合由鞘层稳定的等离子体电势特性.

根据静电鞘层理论,Ar等离子体在预鞘层损失的电势为 $0.5T_e$,在鞘层势降为 $4.7T_e$,这两部分构成等离子体的完整势降.图7显示了等离子体平均电子温度与电势随半径的变化曲线,从图中可以看出,等离子体电势随着半径的增大而减小,在临近壁面的鞘层区域内迅速降低;电子温度随着半

径的增大出现非单调的变化, 在靠近壁面处取值较大. 电子温度在鞘层内约为 2.7 V, 在预鞘层内约为 2.0 V, 而等离子体总势降为 13.65 V, 与理论达到高度的匹配, 证明了本文模型计算的精确度.

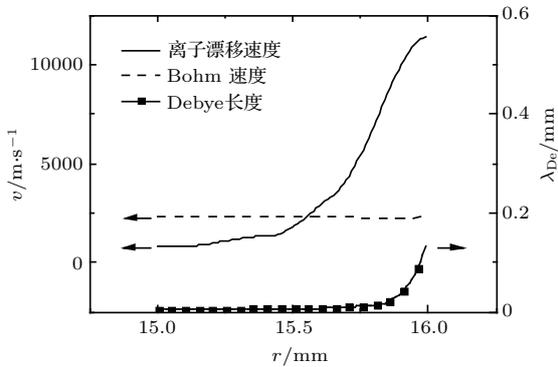


图5 离子漂移速度和当地 Bohm 速度径向分布以及 Debye 长度径向分布

Fig. 5. The radial distribution of ion diffusion velocity and the local Bohm velocity, and the distribution of the local Debye length.

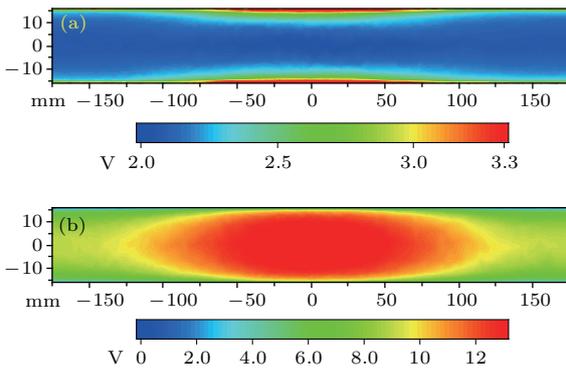


图6 (网刊彩色) 等离子体参数分布云图 (a) 电子温度; (b) 等离子体电势

Fig. 6. (color online) Contour of plasma parameters: (a) Electron temperature; (b) electric potential.

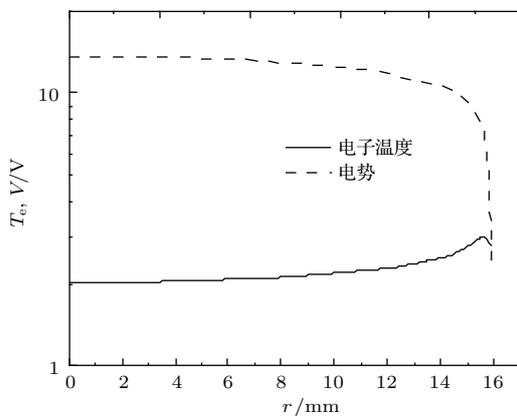


图7 电子温度和等离子体电势径向分布

Fig. 7. The radial distribution of electron temperature and electric potential.

4 螺旋波等离子体放电的波干涉

Chen 等^[20]在 1989—1992 年间的多次实验中发现了低场螺旋波放电的磁场峰值现象: 当射频放电的能量不太高时, 电子密度随着磁场的增加存在峰值, 当射频能量较高磁场密度峰值现象消失, 如图 8 所示. 这一结果后来被实际应用于等离子体的发生: 由于不需要维持像电子回旋共振等离子体那样高的磁场, 低场螺旋波等离子体能以较低的成本获得良好的等离子体发生收益. 但是, 在随后相当长的时间内对于低场放电磁场峰值形成的机理一直缺乏合理的解释. 2003 年, Chen^[21]用端面干涉机理对这种现象做了解释, 认为是电磁波在有限长的等离子体放电室端面上形成干涉, 最终导致磁场峰值现象的形成.

在本文的计算模型下, 同样观察到了低场放电的磁场峰值现象, 图 9 显示了等离子体密度随磁场变化关系. 当输入电流不高于 5.5 A (射频功率约 100 W) 时, 发现峰值磁场随着射频输入能量的增加而升高. 当射频输入电流达到 7.7 A (射频功率约 300 W) 时, 磁场峰值现象消失, 等离子体密度随磁场增加而单调升高, 但在磁场强度约为 100 G 时出现了微弱的波动, 这种分布与前面所述因端面干涉所造成的低场放电磁场峰值现象表现出不同的特征, 其峰值磁场和峰值等离子体密度都要明显低于前者. Arnush 和 Chen^[4,22]研究了磁等离子体中的螺旋波和 TG 波, 发现在磁场很低时两者表现出了非常类似的波系结构并容易相互作用, 因此此处的弱波动很有可能是螺旋波和 TG 波的共振造成的.

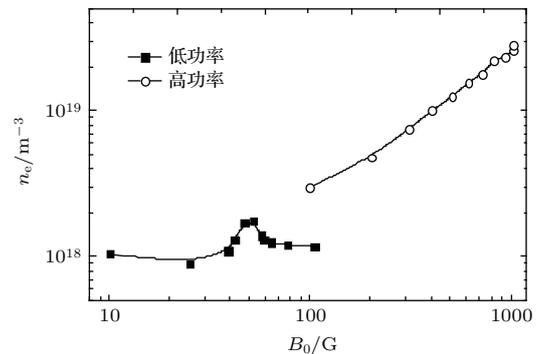


图8 电子密度随磁场变化曲线 ($R_d = 4$ cm, 均匀磁场, Chen 实验数据)

Fig. 8. Electron density vs. magnetic field strength ($R_d = 4$ cm, uniform magnetic field, by Chen's experimental results).

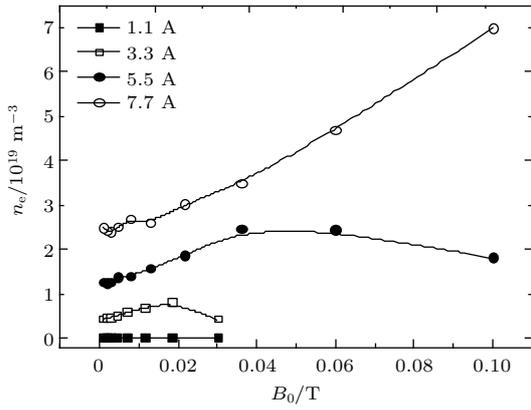


图9 电子密度随磁场变化曲线 ($R_d = 1.6$ cm, 均匀磁场, 仿真结果)

Fig. 9. Electron density vs. magnetic field strength ($R_d = 1.6$ cm, uniform magnetic field, by simulation results).

为了对低场放电磁场峰值现象的端面干涉机理进行验证, 本文设计了验证算例: 计算天线电流为 3.3 A, 放电室分别为 200, 350 以及 500 mm 时电

子密度与磁场强度对应关系. 假设端面干涉是低场放电磁场峰值现象形成的主要机理, 那么当放电室的长度越大时, 干涉的现象越不明显, 所导致的磁场峰值应该越小. 计算结果如图 10 所示, 可以看出放电室长度对磁场峰值的影响与假设高度符合.

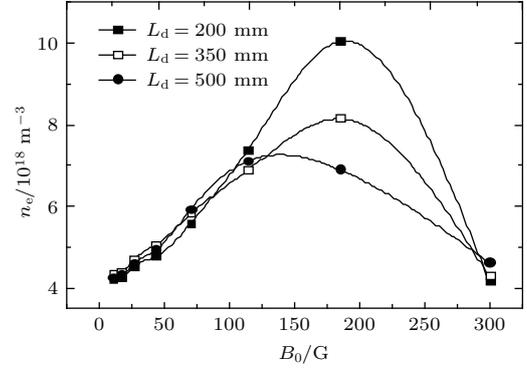


图 10 不同放电室长度下电子密度随磁场变化曲线

Fig. 10. Electron density vs. magnetic field strength at different-length discharge tube.

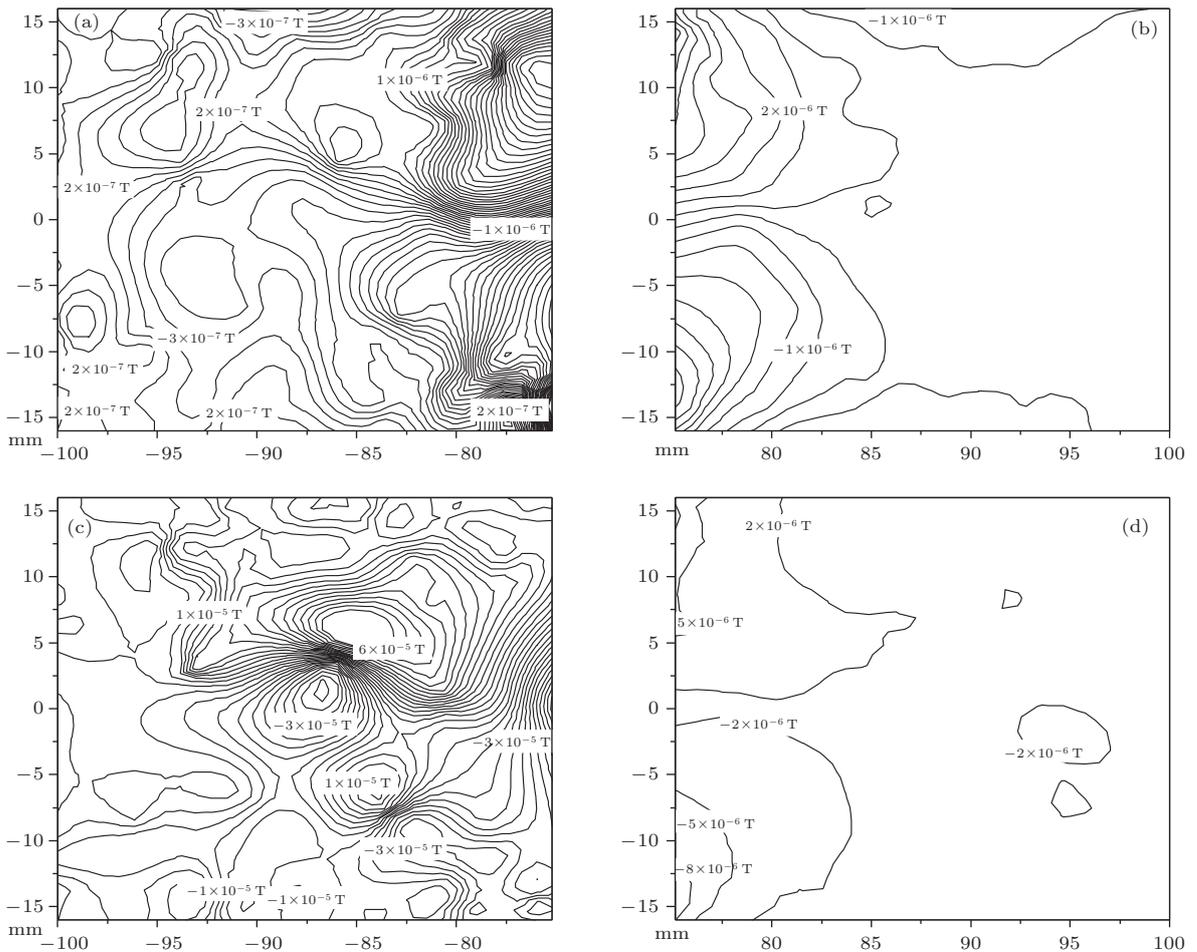


图 11 轴向射频磁场等高线图 (a) $B_0 = 300$ G 左端面; (b) $B_0 = 300$ G 右端面; (c) $B_0 = 185$ G 左端面; (d) $B_0 = 185$ G 右端面

Fig. 11. Contour line of axial RF magnetic field: (a) Left endplate at $B_0 = 300$ G; (b) right endplate at $B_0 = 300$ G; (c) left endplate at $B_0 = 185$ G; (d) right endplate at $B_0 = 185$ G.

一维计算程序^[21]无法对波干涉的具体结构进行解析,利用本文的计算模型,可以更加直观地研究螺旋波等离子体放电过程中波干涉的详细结构.图11显示了不同稳态磁场条件下放电室端面附近由天线激发出来的轴向射频磁场等值线图.对于开放端面的放电过程,天线激发的磁场应该随着远离天线中心而快速衰减,但从图中可以看出,在靠近左端面处出现了明显的磁场峰值,即射频天线发出的电磁波在端面处发射后与回波形成了干涉叠加.由于双臂半波长螺旋形天线激发 $m = +1$ 模电磁波,在计算域中向右传导的能量远小于向左传导的能量,因此在右端面的干涉效应也远小于左端面.

为了进一步研究电磁波在轴向上的干涉结构,图12和图13分别显示了 $L_d = 200$ mm 和 $L_d = 350$ mm 条件下时间平均的磁场能量密度随轴向位置的变化关系,可以看出当 $B_0 = 185$ G 时干涉现象最为严重,此时干涉的区域包含了整个放电室轴向范围,且在干涉区域中出现了数个磁场能量密度的峰值.

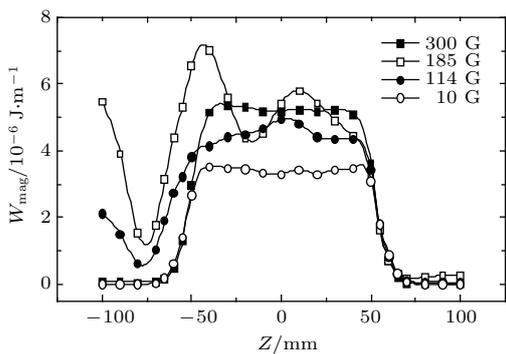


图12 时间平均的磁场能量密度沿轴向分布, $L_d = 200$ mm

Fig. 12. The axial distribution of the magnetic energy density averaged by time at $L_d = 200$ mm.

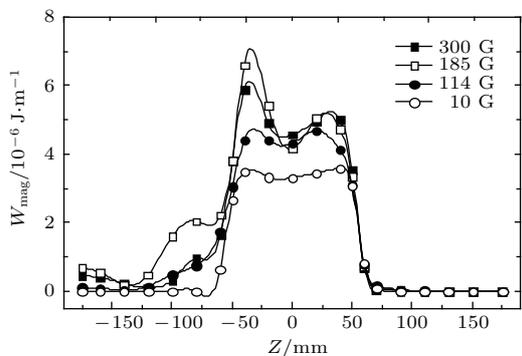


图13 时间平均的磁场能量密度沿轴向分布, $L_d = 350$ mm

Fig. 13. The axial distribution of the magnetic energy density averaged by time at $L_d = 350$ mm.

根据成玉国^[16]提供的一维无阻尼条件下TG波和螺旋波传导公式,计算了在 $B_0 = 185$ G, 电子密度为 $2 \times 18 \text{ m}^{-3}$ 时自由传播的TG波和螺旋波 B_z 幅值(如图14所示),可以看出此时两种波表现出不同的传播特性,螺旋波的波长远大于TG波.特别地,螺旋波的波长约等于图12和图13中磁场能量的峰峰值距离的2倍,证明端面干涉的本质实际上是螺旋波分量与其端面回波叠加形成了驻波.

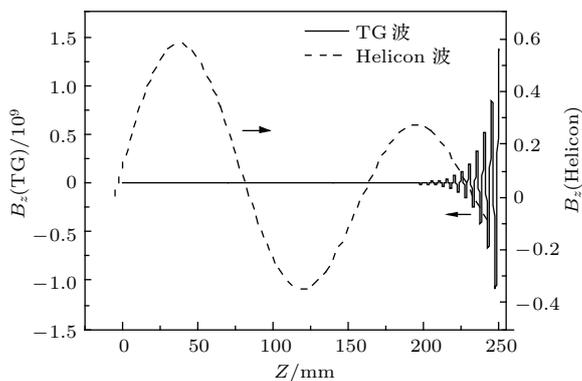


图14 一维无阻尼等离子体中螺旋波和TG波磁场无量纲幅值比较

Fig. 14. Dimensionless amplitude of helicon wave and TG wave with one-dimensional undamped condition.

5 结论

本文基于碰撞动力学模型简化建立了直接数值模拟的螺旋波三维瞬态放电模型,利用该模型对经典螺旋波放电实验进行了重构计算,二者的电子温度和电子密度达到较为准确的符合;将仿真结果与经典鞘层理论进行了对比,发现电子温度、等离子体电势等参数符合鞘层稳定的等离子体特性,证明该模型能够正确解析等离子体鞘层结构.进一步地,在本文中利用该模型研究了Shoji型天线低场放电的磁场峰值现象,通过设计算例验证了导致该现象的电磁波端面干涉机理,并发现波干涉的本质是螺旋波分量与其端面回波叠加形成了驻波,这一结论对于发展局部等离子体增强技术具有指导意义.同时由于本文计算模型具有较高的精度,可以用于设计改进螺旋波等离子体源.

感谢 COMSOL 公司 Dr. Kevin 以及王刚博士提供的求解器算法技术支持.

附录A 电子碰撞关系

电子碰撞频率是复杂的电子密度、电子温度函数,对于气体电离过程起着决定性的作用.电子的碰撞包含了电

子与离子碰撞和电子与中性粒子碰撞两部分:

$$\nu_e = \nu_{ei} + \nu_{en}.$$

电子与离子的库仑碰撞频率可以表示为 $\nu_{ei} = K_{ei}n_e$, 库仑碰撞速率系数为

$$K_{ei} = \frac{e^4}{4\pi\epsilon_0^2 m_e v_{e,th}^3} \ln \Lambda = T_e^{-\frac{3}{2}} \cdot 2.689 \times 10^{-12} \cdot \ln \Lambda,$$

其中 $\ln \Lambda$ 为等离子体库仑对数,

$$\ln \Lambda = \ln \left[4\pi n_e \left(\frac{\epsilon_0 k_B T_e}{e^2 n_e} \right)^{3/2} \right].$$

电子与中性粒子碰撞考虑电离碰撞与弹性碰撞两种情形:

$$\nu_{en} = n_n (K_{ion} + K_{en}).$$

其中电离碰撞和弹性碰撞的速率常数分别写成如下形式:

$$K_{ion} = V_{th} \sigma_{ion} \left[1 + \frac{T_e E_{ion}}{(T_e + E_{ion})^2} \right] \exp \left(-\frac{E_{ion}}{T_e} \right),$$

$$K_{en} = v_{e,th} \sigma_{en}.$$

在本文的计算中采用文献 [10] 的截面数据: 电离截面 $\sigma_{ion} = 2.8 \times 10^{-20} \text{ m}^2$, 电子-中性粒子碰撞截面 $\sigma_{en} = 15 \times 10^{-20}$, Ar 的一级电离能 $E_{ion} = 15.76 \text{ eV}$.

参考文献

[1] Chen F F 1991 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **33** 339

[2] Suwon C 1996 *Phys. Plasmas* **3** 4268
 [3] Suwon C 1997 *Phys. Plasmas* **4** 4167
 [4] Arnush D, Chen F F 1998 *Phys. Plasmas* **5** 1239
 [5] Arnush D 2000 *Phys. Plasmas* **7** 3042
 [6] Chen F F 2008 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **36** 2095
 [7] Curreli D, Chen F F 2011 *Phys. Plasmas* **18** 113501
 [8] Chen F F, Curreli D 2013 *Phys. Plasmas* **20** 057102
 [9] Ahedo E 2009 *Phys. Plasmas* **16** 113503
 [10] Ahedo E, Jaume N C 2013 *Phys. Plasmas* **20** 043512
 [11] Cheng Y G, Cheng M S, Wang M G, Li X K 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 035203 (in Chinese) [成玉国, 程谋森, 王墨戈, 李小康 2014 物理学报 **63** 035203]
 [12] Cheng Y G, Cheng M S, Wang M G, Li X K, Yang X 2014 *Plasma Sources Sci. Technol.* **16** 1111
 [13] Boswell R W 1984 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **26** 1147
 [14] Toki K, Shinohara S, Tanikawa T, Shamrai K P 2006 *Thin Solid Films* **506–507** 597
 [15] Chen F F 2007 *Plasma Sources Sci. Technol.* **16** 593
 [16] Cheng Y G 2015 *Ph. D. Dissertation* (Changsha: National University of Defense Technology) (in Chinese) [成玉国 2015 博士学位论文 (长沙: 国防科技大学)]
 [17] Hagelaar G J M, Pitchford L C 2005 *Plasma Sources Sci. Technol.* **14** 722
 [18] Dimitris P L, Demetre J E 1995 *J. Res. Nat. Inst. Stand. Technol.* **100** 473
 [19] Chen F F, Torreblanca H 2007 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **49** 81
 [20] Chen F F 1992 *J. Vac. Sci. Technol. A* **10** 1389
 [21] Chen F F 2003 *Phys. Plasmas* **10** 2586
 [22] Chen F F, Arnush D 1997 *Phys. Plasmas* **4** 3411

Three-dimensional direct numerical simulation of helicon discharge*

Yang Xiong[†] Cheng Mou-Sen Wang Mo-Ge Li Xiao-Kang

(College of Aerospace Science and Engineering, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

(Received 10 May 2016; revised manuscript received 1 November 2016)

Abstract

With the detailed consideration of electrochemical reactions and collision relations, a direct numerical simulation model of helicon plasma discharge with three-dimensional fluid-dynamic equations is proposed in the present work. It can improve the precision of results and widen the model applicability by discarding the small perturbation theory in previous helicon models which are partially analytical in essence. Under the assumption of weak ionization, the Maxwell equations coupled with the plasma parameters are directly solved in the whole computational domain. Thus the energy deposited from electromagnetic wave to plasma can be then easily calculated. The values of plasma parameters which include electron density, mean electron energy and heavy species density are obtained by solving a set of drift-diffusion equations. Meanwhile, seven kinds of chemical reactions in the plasma and two kinds of surface reactions on the wall are taken into account. All of the partial differential equations are solved by the finite element solver of COMSOL MultiphysicsTM with the full coupled method.

The results of numerical cases employing argon as the working medium show that there exists a sharp density jump from a low to high value as the radiofrequency power is raised. The density jump phenomenon is in accordance with the experimental results of Toki (Toki K, Shinohara S, Tanikawa T, Shamrai K P 2006 *Thin Solid Films* **506–507** 597) and Chen (Chen F F 2007 *Plasma Sources Sci. Technol.* **16** 593). The electron temperature decreases with an increase of the gas pressure, which is similar to Toki's (Toki K, Shinohara S, Tanikawa T, Shamrai K P 2006 *Thin Solid Films* **506–507** 597) measurement by a RF compensation probe. In comparison with the classical sheath theory, the simulation result demonstrates that the distribution of parameters such as particle number density, the Deby length, electric potential and electron temperature can be solved exactly. In addition, the phenomenon of low-field density peak in helicon discharge was studied in the work. Previous research by Chen (Chen F F 2003 *Phys. Plasmas* **10** 2586) suggests that this peak is caused by constructive interference from the reflected wave. The effect of length of the discharge chamber on the relation of electron density and background magnetic field is investigated numerically. The results validate the mechanism of wave interference reflected by endplates of the discharge chamber. Furthermore, the time-averaged magnetic energy density has more than one peak on the axial direction. Comparing the distribution of the magnetic energy density to that of the dimensionless amplitude of the helicon wave and the TG wave in the one-dimensional undamped condition, it found that the length of peak to peak of the helicon wave is just as twice as that of the magnetic energy density, which indicates that the substance of wave interference is involved in the standing wave generated by the helicon wave and its reflected wave from endplates.

Keywords: plasma, helicon wave, direct numerical simulation, wave interference

PACS: 52.50.Qt, 41.20.Jb, 52.70.Ds, 02.60.-x

DOI: 10.7498/aps.66.025201

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11305265).

† Corresponding author. E-mail: yx12321@126.com