

低能离子束在高纵横比矩形通道内中性化过程模拟研究*

张湧颀^{1,6)} 蓝朝晖^{2,3,4†)} 卿绍伟^{5†)} 凌文斌^{3,4)} 史贵恩⁷⁾ 董云宁⁶⁾ 卢

耀文⁶⁾ 鄂鹏^{2,3,4)}

1) (哈尔滨工业大学, 电气工程及自动化学院, 哈尔滨 150001)

2) (哈尔滨工业大学, 能源科学与工程学院, 哈尔滨 150001)

3) (哈尔滨工业大学, 空间环境与物质科学研究院, 哈尔滨 150001)

4) (哈尔滨工业大学, 空间环境与物质相互作用全国重点实验室, 哈尔滨 150001)

5) (广州航海学院, 广州交通大学(筹), 海洋装备工程学院, 广州 510725)

6) (北京东方计量测试研究所, 北京 100029)

7) (伦敦大学学院, 电气与电子工程系, 伦敦 WC1E 6BT)

摘要

为获得高品质且具备宽参数调节范围的快中性原子束, 本文提出一种基于高纵横比矩形通道的低能离子束中性化方案, 采用 PIC 方法建立 He^+ 束流在通道内输运与中性化的 2D3V 模型, 系统研究了入射离子漂移能量、通道长度及掠射角对中性化效率与出射束流特性的影响。结果表明, 在本研究参数范围内, 中性化效率随漂移能量增大呈非线性下降, 随中性化通道长度和掠射角增加逐渐升高并趋于饱和, 这是因为漂移能量增大缩短离子在通道内的滞留时间, 同时提高了束流的准直性, 使得碰撞次数减小; 而通道长度和掠射角增大则增多了碰撞次数。未中和离子的出射角分布仅取决于通道长度, 通道越长, 几何约束越强, 出射散角越小; 出射原子的角分布和速度分布完全继承自入射离子。特别地, 出射原子角分布的展宽及峰数均随掠射角增大而增大, 这是由反射路径的空间叠加所致。本研究揭示了低能离子束在高纵横比通道内中性化的关键物理机制, 为快中性束源的设计与优化提供了理论依据。

关键词：低能离子束，表面中性化，Particle-in-Cell (PIC)，高纵横比通道

PACS： 52.65.Rr; 52.40.Mj; 52.75.-d

基金：国家自然科学基金青年科学基金(批准号：12305219, 12275060)；国家重点研发计划（批准号：2022YFA1604600）；教育部空间环境与物质作用前沿科学中心项目资助（批准号：AUEA5740400825）

† 通信作者.E-mail: lanchaohui@hit.edu.cn; qshaowei@gzmtu.edu.cn

第一作者.E-mail: 21B906046@stu.hit.edu.cn

1 引言

低能离子束表面中性化技术可用于产生高速、准直的快原子束，具有中性化效率高、结构简单、易于调控及可定量化等优点^[1,2]，在空间吸气式电推进系统测试^[3,4]、空间定向分子流环境地面模拟^[5-7]、微纳电子器件加工 ss 制造^[8-10]等领域具有广阔的应用前景。然而，这些应用要求束流能量需要覆盖空间环境或材料加工所要求的低能范围（通常低于百 eV），且束流发散角小，同时中性化效率需足够高以保证束流纯净。因此，快原子束源的设计必须兼顾低能、小发散角与高中性化效率三大目标。

当前，基于低能离子束表面中性化产生快原子束已发展出两类主要技术方案。第一类可以称为“一步法”，多用于中性束加工。其采用高纵横比微孔金属栅极作为提取电极，直接从等离子体中引出离子。离子在穿越细长孔道时，以掠射角撞击孔道内壁，在孔内直接完成中性化^[11,12]。但是，该方法严重依赖于“等离子体成形效应（plasma modeling）”。即当等离子体与带孔道的栅极接触时，等离子体-鞘层界面因孔道的存在而发生畸变^[13]，畸变程度主要由鞘层厚度（ L_{sh} ）与孔道直径（ D ）之比决定。该界面的畸变程度进一步决定了离子入射进孔道的角度，通常需满足 $L_{sh} \approx D$ ，使鞘层界面呈适度弯曲，离子以较小的掠射角撞击侧壁，

从而在中性化率与束流品质之间取得平衡^[14]。Nam 等人通过粒子模拟 (Particle-in-Cell, PIC) 研究了等离子体成形效应对快原子束品质的影响^[15]。结果表明, 在孔道顶部区域通常会由于等离子体成形效应显著导致离子入射角较大, 形成能量较低、发散度高的“劣质”中性束, 在很大程度上限制了快原子束的参数调节范围。此外, 孔道壁面粗糙度亦会对快原子束的品质产生显著的影响, 而高纵横比微孔金属栅板孔道的内表面难以进行抛光加工处理, 表面粗糙度难以满足高品质束流的要求。

第二类可称为“两步法”。该方法先产生离子束, 再使其掠射至原子级平坦的金属表面, 以实现高效的中性化, 典型的应用为瑞士伯尔尼大学的 MEFISTO 装置。该装置首先通过电子回旋共振离子源 (ECR-IS) 及离子光学系统产生单组分、单能的准直低能离子束。随后使离子束以极小掠射角 (1° – 5°) 入射至一块原子级平坦的金属 W 表面, 利用俄歇中性化 (Auger neutralization) 主导的电荷交换机制实现高效中性化^[16,17]。该装置已成功产生能量覆盖 10–1000 eV 的 H、D、He、O、Ne 等多种中性原子束, 具备优良的定量标定能力, 已广泛应用于空间能量中性原子 (Energetic neutral atoms, ENAs) 探测器的地面标定^[18]。可以看出, 在两步法中, 参与中性化的离子束的参数和品质完全由前端离子源及其离子光学系统决定, 不受等离子体成形效应的限制, 因此赋予了快原子束较宽的参数调节窗口, 具有较高的可控性和灵活性。该方案采用单平板金属进行中性化, 虽然避免了高纵横比微孔金属栅板孔道内表面难以抛光加工的问题, 但因离子仅与壁面发生单次碰撞, 中性化效率可能较低; 同时, 出射快原子束在空间上呈狭长分布, y 向均匀性差, 整体束流品质受限。

针对上述两种方法存在的局限性, 本文提出一种用于“两步法”的、基于高纵横比矩形通道的低能离子束中性化方案, 旨在结合两种方法的优势, 实现高品质、

参数调节范围宽的快原子束制备。在该方案中，出射束流的特性必然会受到入射离子的特征参数及中性化通道的几何的影响。然而，目前低能离子表面中性化的研究多集中于电荷交换过程的微观机理，且大多为单离子与半无限平坦表面的相互作用模型——通常假设离子速度单一，且入射离子能量较大^[19,20]。针对低能离子束在中性化通道内的集体行为及其影响机制尚缺乏系统研究。PIC方法中，空间维度与速度维度的选择根据物理问题确定，其中2D3V模型（二维空间、三维速度）已广泛应用于束流输运和等离子体-壁面相互作用模拟^[21,22]。因此，本文拟采用PIC方法，建立高纵横比矩形中性化通道的2D3V模型，研究低能离子束在通道内的中性化过程，重点讨论入射离子束的漂移能量、中性化通道的长度（纵横比）以及入射离子束轴线与中性化通道轴线夹角（掠射角）对中性化效率与出射粒子特征参数的影响，以期为高品质、具备宽参数调节范围的快原子束源的设计与优化提供理论依据。

本文的结构安排如下：第2节介绍基于高纵横比通道的离子束中性化方案，第3节介绍PIC算法与模型参数设置，第4节给出模拟结果及讨论，第5节总结全文并展望后续工作。

2 高纵横比矩形通道离子束中性化方案

本文提出的基于高纵横比矩形通道的低能离子束中性化方案由掩板、绝缘隔离片和中性化电极三部分组成，如图1所示。掩板和中性化电极上分别开有直径为 $\Phi_0 = 10\text{mm}$ 和 $\Phi_1 = 20\text{mm}$ 的小孔（ $\Phi_0 < \Phi_1$ 即可），二者通过绝缘片隔离。掩板小孔用于限制参与中性化的离子束通量，起到“束流阑”的作用。中性化电极采用“百叶窗”式结构：金属支架上开有平行槽道，嵌装电极片形成一系列独立的高纵横比矩形通道，实现对入射离子的几何约束与导向作用。电极片材料宜选用导电性良好、低功函数且表面稳定的金属（如W、Ag、Cu），并经由机械抛光与离子束

抛光复合工艺处理加工至原子级平整度，确保离子与壁面相互作用以镜面反射为主，从而抑制表面粗糙度引起的漫散射，维持离子运动轨迹的确定性。

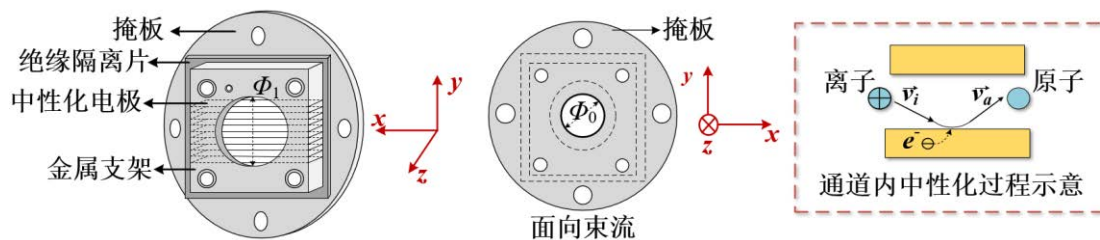


图 1 离子束中性化方案示意图

Fig.1. Schematic diagram of the ion beam neutralization scheme.

“百叶窗”式的设计在物理上隔离了各通道内的离子，不仅可以有效抑制中性化过程中自洽电场干扰、削弱空间电荷效应对离子轨迹的影响，还能使各通道出射的原子在空间上叠加，从而在较短传输距离内实现良好的束流均匀性。高纵横比通道的设计增加了离子与壁面的碰撞次数，提高了中性化效率。另外，电极片可独立加工，具备较好的工程可实现性。

3 PIC 数值模型与计算方法

3.1 物理模型与基本假设

鉴于“百叶窗”式中性化电极在结构上具有周期性与对称性，为简化计算并突出物理本质，本研究选取单个通道作为典型代表建立2D3V模型，如图2所示。

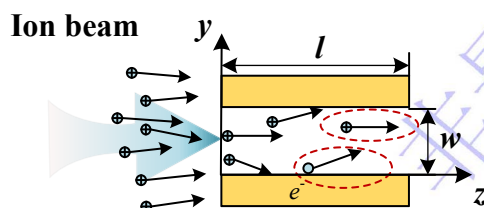


图 2 物理模型几何结构图

Fig.2. Geometry of the physical model.

计算域为 $0 \leq z \leq l$, $0 \leq y \leq w$ 的区域， l 为通道的长度， w 为通道的宽度，覆盖从中性化通道入口至出口的完整运动空间。上下边界 ($y=0$ 与 $y=w$) 对应于电极片表面，被视为理想光滑的金属壁面。左右边界分别对应通道入口 ($z=0$) 与

出口 ($z=l$)，其中入口设为离子注入边界，出口设为自由流出边界。

选择 He^+ 作为模拟粒子，中性化通道壁面材料选择金属 W。模拟过程中采取以下基本假设：

- (1) **入射离子假设：** 单个通道的宽度较小，可认为入射离子束是准直的，且其数密度在束流径向（束流径向 $\neq y$ 向）上不变。假设入射离子的速度符合漂移麦克斯韦速度分布定律，其符合 2D3V 模型的具体表达式为^[4]：

$$f(v_x, v_y, v_z) = \left(\frac{m_i}{2\pi kT_i} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{m_i (v_{x,i}^2 + v_{y,i}^2 + (v_{z,i} - u_{z,i})^2)}{2kT_i} \right) \quad (1)$$

其中， $v_{z,i}$ 是 z 向速度分量 (z 向)； $v_{y,i}$ 是 y 向速度分量 (y 向)； $u_{z,i}$ 是离子束沿 z 向的漂移速度 ($u_z = \sqrt{2E_d/m_i}$ ， E_d 为漂移能量)； m_i 为离子质量， kT_i 为离子的热运动能量。

- (2) **粒子-粒子碰撞假设：** 在本研究所涉及的低能离子束流条件下（流强密度约 $0.1\text{--}1.5 \text{ mA/cm}^2$ ），离子数密度较低，离子-离子碰撞效应可忽略，离子间的相互作用由空间电荷效应主导^[23]。
- (3) **镜面反射假设：** 用于离子中性化的金属壁面经抛光处理后可达原子级平整，表面粗糙度对离子轨迹的影响可忽略。同时，离子以小角度掠射（入射角接近 90° ），可认为离子与壁面的散射过程近似为镜面反射。
- (4) **碰撞能量损失假设：** 由于入射离子 (He^+) 质量远小于壁面原子 (W) 质量，且入射能量为百 eV 以下，弹性碰撞在散射过程中占主导，则入射离子的速度 v_0 和散射后的速度 v_1 服从的关系如下^[24]：

$$\frac{v_1}{v_0} = \frac{m_i \cos \theta + (m_a^2 - m_i^2 \sin^2 \theta)^{1/2}}{m_a + m_i} \quad (2)$$

其中， m_i 是入射离子的质量， m_a 为壁面靶原子的质量， θ 是入射速度和散射速度之间的夹角。容易看出，上式约等于 1，即离子-壁面碰撞过程中的速度损失可忽略不计。

- (5) **中性化概率假设：**低能惰性气体在金属表面掠射时，俄歇跃迁是主要的电荷交换机制。基于 Hagstrum 理论并结合表面电子结构修正，中性化概率可表示为^[25,26]：

$$P_{AN} = 1 - \exp\left(-\frac{v_c}{v_{\perp}}\right) \times f_{surface} \quad (3)$$

其中， P_{AN} 表示中性化概率， v_{\perp} 为入射离子速度垂直表面分量， v_c 为材料特征速度， $f_{surface}$ 为不同晶面电子态密度差异导致的中性化率修正因子。基于对上式的分析以及相关文献参考^[27]，低能 He^+ 的掠射中性化概率可达 98% 以上，因此在模拟时直接取 $P_{AN}=98\%$ 。

- (6) **宏粒子假设：**为降低计算复杂度，同时不改变束流的宏观集体行为，引入宏粒子假设。每个宏粒子代表大量真实物理离子的集合，其荷质比与真实离子相同。

3.2 PIC算法与关键参数设置

PIC 数值模拟初始化时，在计算域内按设定密度随机布置离子与中性原子，并根据漂移麦克斯韦速度分布赋予各粒子初始速度。随后求解运动方程，推进粒子运动，判断离子是否与壁面碰撞，并按给定中性化概率判定是否发生电荷交换。同时，从左边界注入新离子以维持束流密度。将粒子电荷分配至网格节点，求解泊松方程获得电势，进而计算电场并更新粒子受力与运动状态。上述过程循环迭代，直至结果达到收敛。

为保证计算的高效性和结果的可靠性，对空间步长、时间步长、宏粒子数等基础参数进行统一设定。空间步长的选取兼顾计算精度与网格分辨率对自洽电场

分布的影响；时间步长则依据Courant稳定性条件确定，确保粒子在一个时间步内运动不超过单个网格单元；宏粒子数需保证统计噪声足够小，在满足模拟精度的前提下保证计算效率。上述基础参数汇总于表1。

表 1. 模拟参数设置表

Table 1. Simulation parameters.

参数类别	取值/范围	备注
网格尺寸	$\Delta z=0.02$ mm; $\Delta y=0.005$ mm	计算精度保证
时间步长	$\Delta t=5\times 10^{-11}$ s	CFL 条件保证
宏粒子数	$c=4260$	计算精度保证
中性化概率	$P=0.98$	——
边界条件	上下边界: Dirichlet 边界条件	上下边界: $\varphi=0$ (接地)
	左右边界: Neumann 边界条件	左右边界: $\partial\varphi/\partial z=0$

3.3 模拟算例

本文针对入射离子的漂移能量 E_d 、中性化通道的长度 l 和掠射角 θ_{ion} 设计了许多组算例，以考察各参数对中性化效率与出射束流品质的影响。参考常规低能 ECR 离子源的性能，设定入射离子束流强 $J = 1.5\text{mA}/\text{cm}^2$) [28]。各算例的具体参数详见表 2。所有算例均基于表 1 的统一模拟参数框架执行，以保证不同算例之间结果的可比性。

表 2. 束流参数与通道几何参数算例规划

Table 2. Case setup for beam parameters and channel geometry.

参数名称	范围/间隔	固定条件
漂移能量 E_d	10eV-100eV, 10eV	$E_{th}=0.03$ eV, $\theta_c=0^\circ$, $l=5$ mm, $w=0.1$ mm, $J=1.5\text{mA}/\text{cm}^2$

通道长度 l 6 mm-30 mm, 2mm

$w=0.1\text{mm}$, $\theta_c=0^\circ$,
 $E_d=10\text{ eV}$, $E_{th}=0.03\text{ eV}$, $J=1.5\text{mA/cm}^2$

通道倾角 θ_{ion} 0.0°-5.0°, 0.5°

$E_d=10\text{ eV}$, $E_{th}=0.03\text{ eV}$,
 $J=1.5\text{mA/cm}^2$, $l=5\text{mm}$, $w=0.1\text{mm}$

3.4 计算收敛性验证

为验证所建模型的数值收敛性与计算稳定性, 本文选取典型工况 ($E_d=10\text{ eV}$, $E_{th}=0.03\text{ eV}$, $w=0.1\text{ mm}$, $l=5\text{ mm}$, $J=1.5\text{ mA/cm}^2$, 背景真空度 $P_1 \leq 1 \times 10^{-5}\text{ Pa}$) 进行收敛性检验, 以计算域出口处的粒子数计数率 R_{out} (即单位时间内通过出口的粒子个数) 随计算步数的演化曲线作为判据。

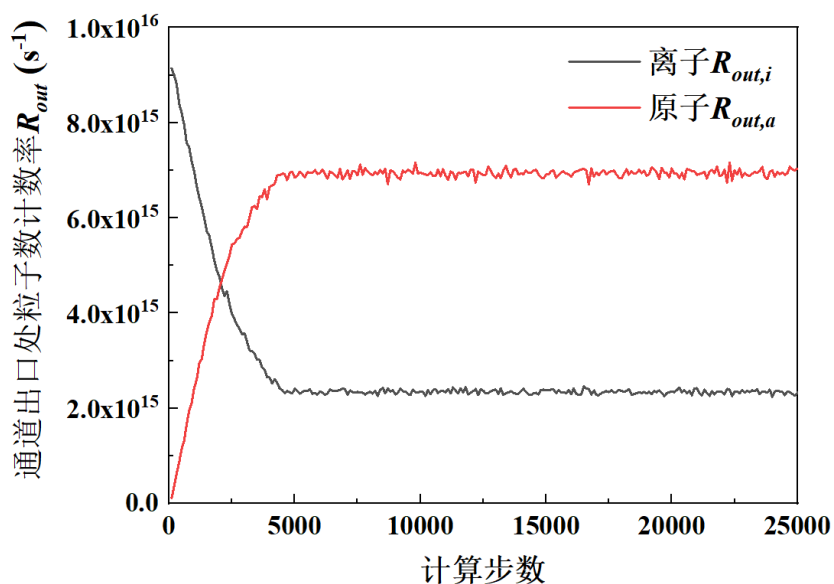


图3 计算域出口处的粒子数计数率随计算推进的变化趋势

Fig.3. Trend of the particle count rate at the outlet of the computational domain as the computation progresses.

如图3所示, 初始时刻通道出口处原子的粒子数计数率 $R_{out,a}=0$ 。随着计算推进, 出口处离子的粒子数计数率 $R_{out,i}$ 持续减小; $R_{out,a}$ 因离子与壁面碰撞发生电荷交换而逐渐增大。当计算步数超过5000后, $R_{out,a}$ 与 $R_{out,i}$ 均趋于稳定, 表明系统已达到动态平衡。后续统计结果均基于稳态后的计算数据进行处理。

4 结果与讨论

4.1 漂移能量 E_d 对中性化过程的影响

图 4 给出了中性化通道出口处离子粒子数计数率 $R_{out,i}$ 和原子粒子数计数率 $R_{out,a}$ 以及中性化效率 η ($\eta=R_{out,a}/(R_{out,i}+R_{out,a})$) 随 E_d 的变化规律。由图可知, 当 E_d 从 10 eV 增至 100 eV 时, $R_{out,i}$ 从 $4.12\times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ 非线性增长至 $1.07\times 10^{16} \text{ s}^{-1}$, $R_{out,a}$ 从 $1.47\times 10^{16} \text{ s}^{-1}$ 非线性下降至 $8.05\times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ 。 η 由 0.78 降至 0.43, 降幅达 44.9%。这主要是由于 E_d 直接决定离子 z 向速度, 增大 E_d 会显著缩短离子在通道内的滞留时间, 降低离子与壁面的碰撞频率, 从而减小电荷交换概率, 导致中性化效率大幅下降。

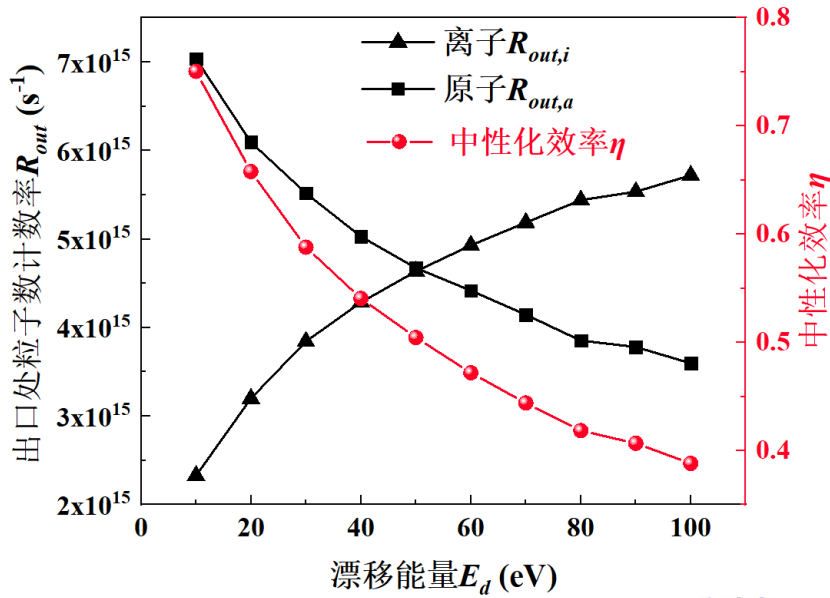


图 4 出口处粒子计数率 R_{out} 和中性化效率 η 随 E_d 的变化

Fig.4. Variation of the outlet particle count rate R_{out} and neutralization efficiency η with E_d .

针对不同的 E_d , 图 5 选取了 4 组对比明显的通道内离子密度 N_i 的二维分布云图。整体而言, N_i 沿 z 向呈现衰减趋势, 入口处最大, 出口处最小; 沿 y 向呈对称分布, 通道中心区域离子密度相对较高。随着 E_d 的增大, N_i 的幅值显著降低, 且 N_i 沿 z 向的衰减速率减缓。该现象可从两个层面解释: 其一, 恒定流强密度 $J=1.5\text{mA}/\text{cm}^2$ 条件下, E_d 增大意味着离子 z 向速度提高, 由 $J=N_i \cdot v_{z,i}$ 可知, 离

子数密度 N_i 与 z 向速度呈反比，因此 N_i 的整体幅值随 E_d 增大而降低。其二，离子 z 向速度的增大显著缩短了离子在通道内的滞留时间，离子与壁面的碰撞频率随之下降，电荷交换概率减小，导致离子沿 z 向的损失速率降低，从而使得 N_i 沿 z 向的衰减趋于平缓。上述机制共同决定了 E_d 对通道内离子密度分布的关键调控作用。

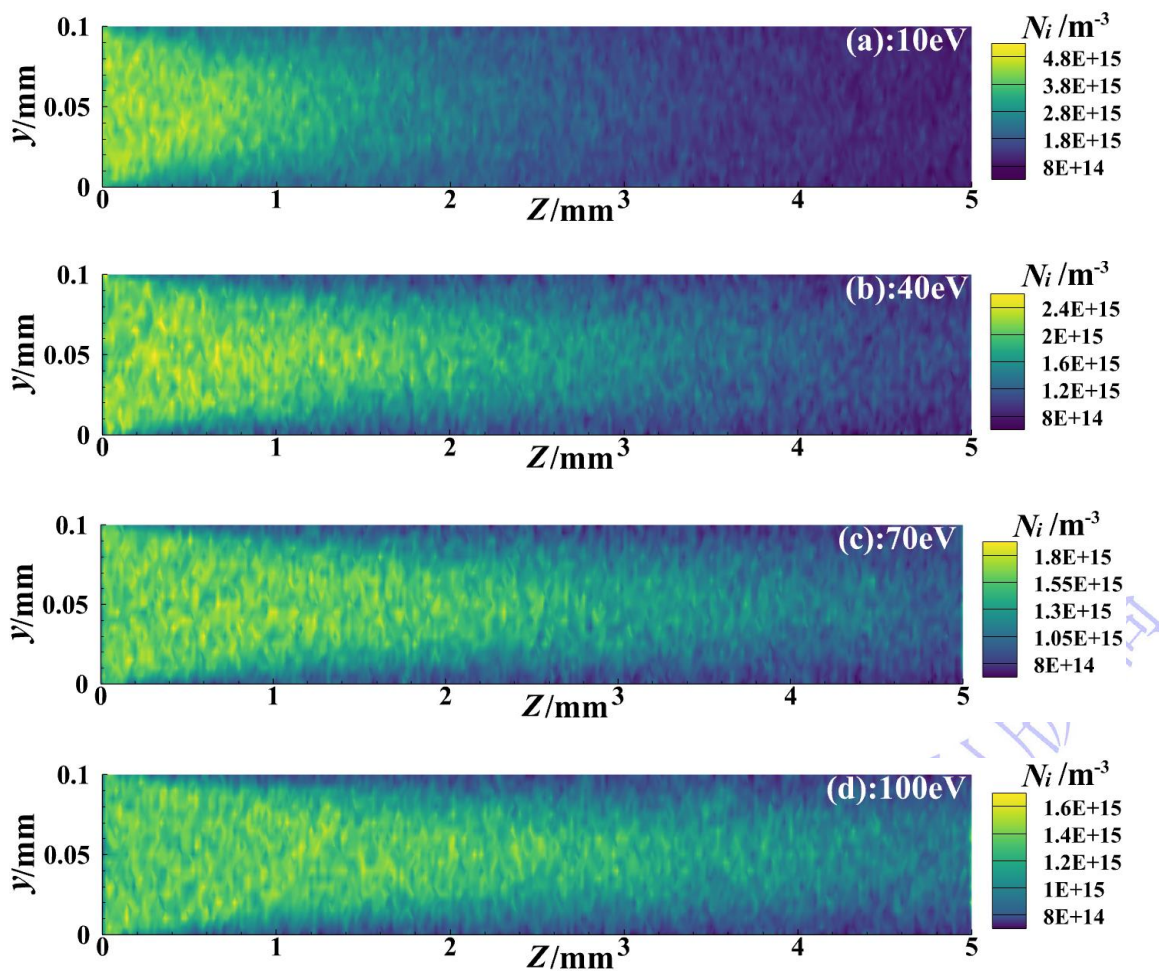


图5 不同 E_d 对应的通道内离子密度 N_i 的二维分布云图: (a) $E_d = 10$ eV; (b) $E_d = 40$ eV; (c) $E_d = 70$ eV; (d) $E_d = 100$ eV

Fig.5. Two-dimensional contour plots of ions density N_i in the channel for different E_d :

(a) $E_d = 10$ eV; (b) $E_d = 40$ eV; (c) $E_d = 70$ eV; (d) $E_d = 100$ eV.

图6给出了离子入射角 $\theta_{in,i}$ 、出射角 $\theta_{out,i}$ 与原子出射角 $\theta_{out,a}$ 的概率密度分布随 E_d 的变化。总体而言， $f(\theta_{out,a})$ 的展宽基本由 $f(\theta_{in,i})$ 决定，而 $f(\theta_{out,i})$ 与 E_d 无关，当 E_d 由 10 eV 增至 100 eV 时，出射原子束的发散角由 12° 收窄至 2° 。其物理机

制在于：离子入射角 $\theta_{in,i} = \arctan(v_{y,i}/v_{z,i})$ ，当 E_d 增大时，z 向速度 $v_{z,i}$ 增大，而 y 向热运动速度 $v_{y,i}$ 基本不变（由 T_i 决定）， $\arctan(v_{y,i}/v_{z,i})$ 减小，离子入射角分布收窄。原子由离子在壁面碰撞时中性化产生，其出射角 $\theta_{out,a}$ 在镜面反射近似下等于 $\theta_{in,i}$ ，这也反映出通道内空间电荷效应对离子运动轨迹几乎没有影响。

另外，由图 6 (c) 可以看出， $f(\theta_{out,a})$ 分布具有双峰结构。这一特征可归因于通道的几何结构与散射动力学的共同作用。离子在通道内与壁面发生多次碰撞，散射角的概率密度呈高斯分布；同时，部分离子会经历较小的 y 向偏转，沿轴线直接穿过通道，二者叠加导致出射原子分布呈现双峰形态。从图 6 (b) 和图 6 (c) 的对比也可以看出， $f(\theta_{out,i})$ 的展宽恰好覆盖 $f(\theta_{out,a})$ 双峰之间的谷区范围。

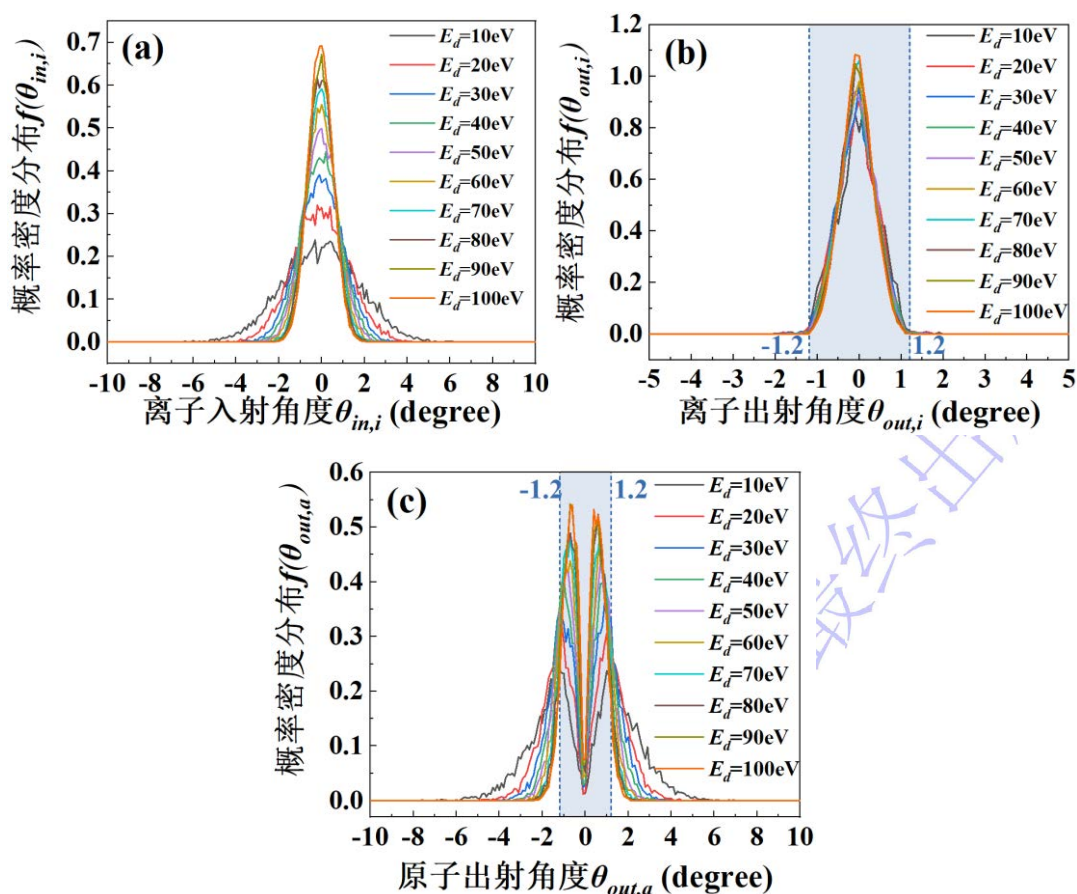


图 6 不同漂移能量 E_d 对应的：(a) 入射离子的角度概率密度分布；(b) 出射离子的角度概率密度分布；(c) 出射原子的角度概率密度分布

Fig.6. For different drift energies E_d : (a) Probability density distribution of ion incident angle; (b) Probability density distribution of ion exit angle; (c) Probability

density distribution of atom exit angle.

图 7 给出了不同 E_d 对应的入射离子 z 向速度分量 $v_{zin,i}$ 和出射原子 z 向速度分量 $v_{zout,a}$ 的概率密度分布。可以看出，随着 E_d 的增加， $f(v_{zin,i})$ 和 $f(v_{zout,a})$ 的最概然速度均向高速（曲线右侧）发生偏移。在相同的 E_d 条件下， $f(v_{zin,i})$ 和 $f(v_{zout,a})$ 的展宽和最概然速度均无明显差别，这一结果直观体现出原子出射速度的 z 向分布直接继承自入射离子速度，证实了入射离子速度是决定出射原子动能的核心因素。

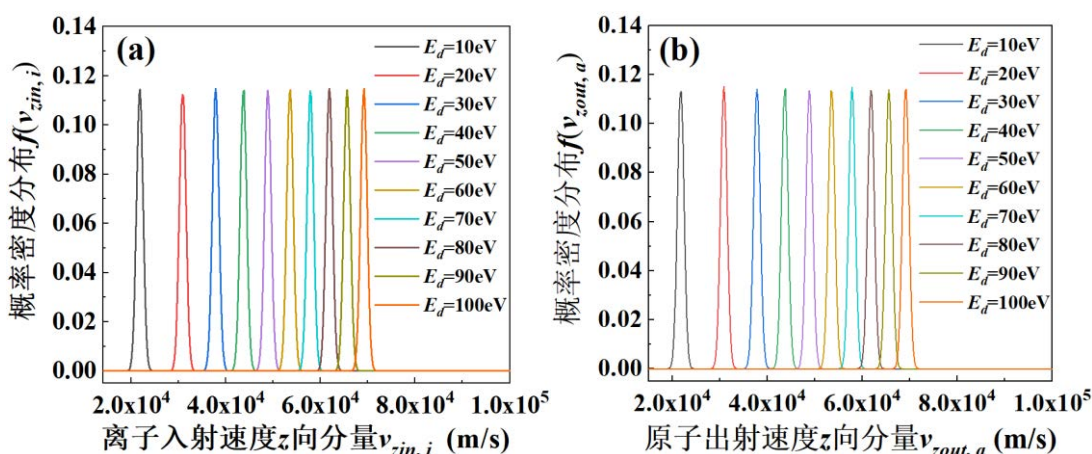


图 7 不同漂移能量 E_d 对应的: (a) 入射离子 z 向速度分量概率密度分布; (b) 出射原子 z 向速度分量概率密度分布

Fig.7. For different drift energies E_d : (a) Probability density distribution of the z -component of ion incident velocity; (b) Probability density distribution of the z -component of atom exit velocity.

4.2 中性化通道长度 l 对中性化过程的影响

图 8 给出了通道出口处粒子计数率 R_{out} 和中性化效率 η 随中性化长度 l 的变化趋势。由图可知，当 l 由 6mm 增加到 30mm 时，通道纵横比提升了 5 倍， $R_{out,i}$ 由 $1.87 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ 降至 $2.64 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ ； $R_{out,a}$ 由 $7.02 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ 升至 $8.30 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ ； η 则从 0.80 逐渐提高至 0.96 并逐渐趋于饱和。 l 的增加提高了离子与通道壁面的碰撞频率，使得电荷交换概率随之上升， η 显著提高。但需要强调的是，过长的中性化通道会加剧离子-壁面碰撞导致的能量损失与表面粗糙度引起的束流散射，因此需

在中性化效率、束流发散角与能量损失之间寻求最优平衡。

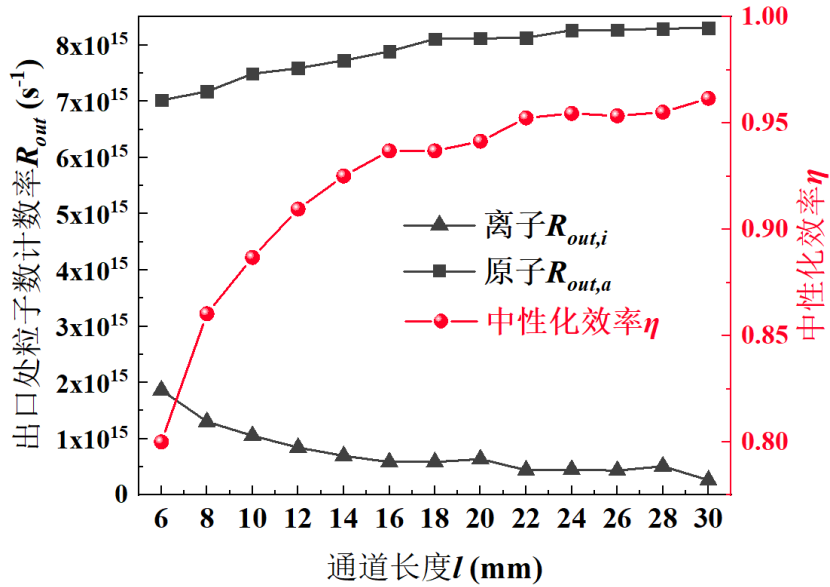


图 8 出口处粒子计数率 R_{out} 和中性化效率 η 随中性化通道长度 l 的变化

Fig.8. Variations of outlet particle count rate R_{out} and neutralization efficiency η with channel length l .

为进一步探究 l 对 η 的影响机制，图 9 给出了不同长度下 y 向平均离子数密度 ρ_y 沿 z 向的分布。当 $l > 16$ mm 时， ρ_y 的衰减速率显著降低，表明离子-壁面的碰撞趋于充分，中性化进程逐渐饱和。其机制在于：中性化通道入口处离子密度高，碰撞频繁， η 随长度增加迅速提升；随着离子沿 z 向不断被中性化，剩余离子密度降低，新增长度对总碰撞次数的贡献边际递减， η 增长趋缓。上述结果表明中性化过程存在特征弛豫纵横比 s_r ，其会随漂移能量和通道宽度的增大而增大。该阈值可为后续工程设计中通道长度的优化设计提供明确的物理依据与参数参考。

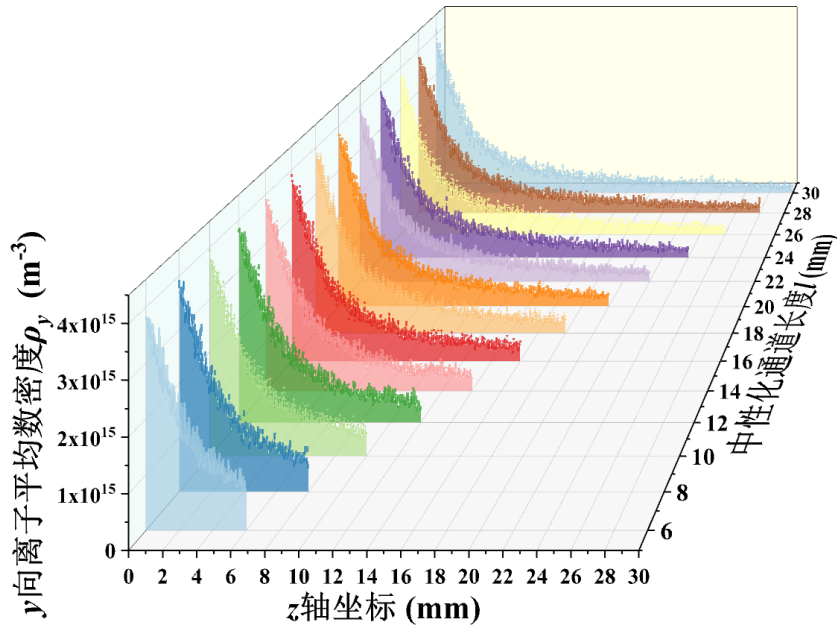
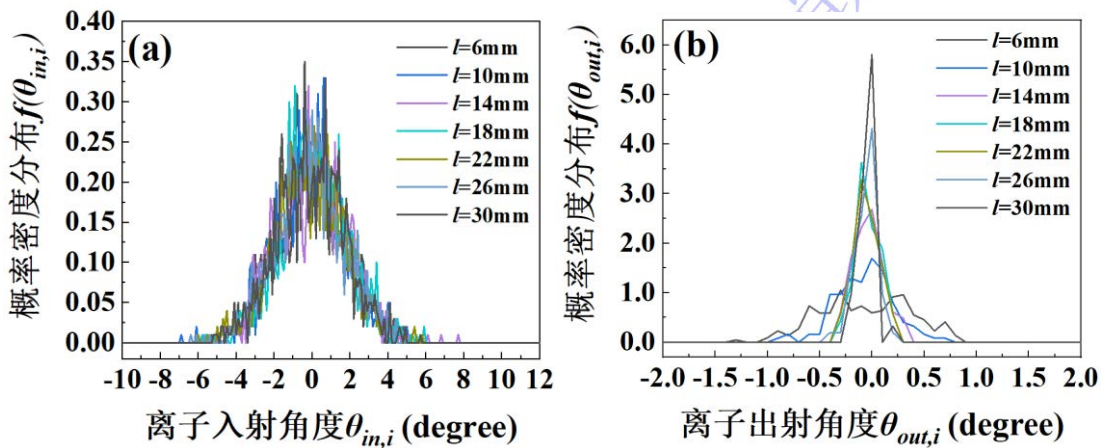


图 9 不同长度的中性化通道内部 y 向的离子平均数密度随 z 坐标的变化

Fig.9. Variation of transversely averaged ion number density along the z -coordinate for different channel lengths.

图 10 给出了 7 组不同 l 下离子入射角 $\theta_{in,i}$ 、离子出射角 $\theta_{out,i}$ 以及原子出射角 $\theta_{out,a}$ 的概率密度分布。与前述规律一致， $f(\theta_{out,a})$ 的展宽由 $f(\theta_{in,i})$ 决定，与 l 无关。相比之下， $f(\theta_{out,i})$ 受 l 显著调控： l 越大， $f(\theta_{out,i})$ 的展宽越小，出射离子束流散角越小。这是因为中性化通道长度的增加显著强化了对离子运动的几何约束作用，能够有效筛选出小角度入射的离子，抑制大角度入射离子的传输与出射，从而减小了离子出射角度的分布展宽。



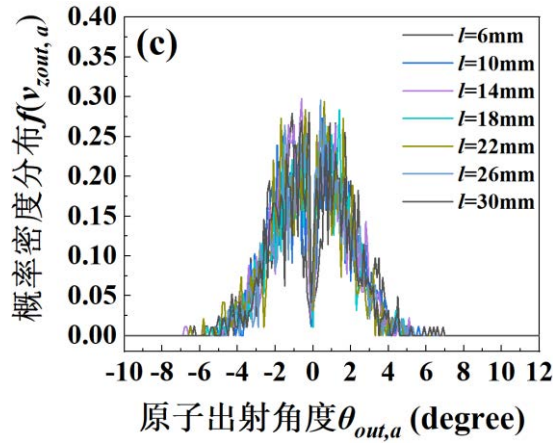


图 10 不同中性化通道长度 l 对应的：(a) 入射离子的角度概率密度分布；(b) 出射离子的角度概率密度分布；(c) 出射原子的角度概率密度分布

Fig.10. For different channel lengths l : (a) Probability density distribution of ion incident angle; (b) Probability density distribution of ion exit angle; (c) Probability density distribution of atom exit angle.

图 11 给出了 7 组不同 l 下离子入射速度 z 向分量 $v_{zin,i}$ 和原子出射速度 z 分量 $v_{zout,a}$ 的概率密度分布。可见， l 对 $f(v_{zout,a})$ 无显著影响，其分布主要由 $f(v_{zin,i})$ 决定。这是因为离子中性化过程的本质是入射离子与通道壁面的碰撞电荷交换，原子的出射动能主要继承自入射离子的初始动能，而中性化通道长度的改变仅会对离子与壁面的碰撞频率、离子传输过程中的几何约束效果产生影响，并不会改变入射离子的速度特性。因此，原子出射速度分布与 l 无关，这进一步验证了入射离子速度的主导作用。

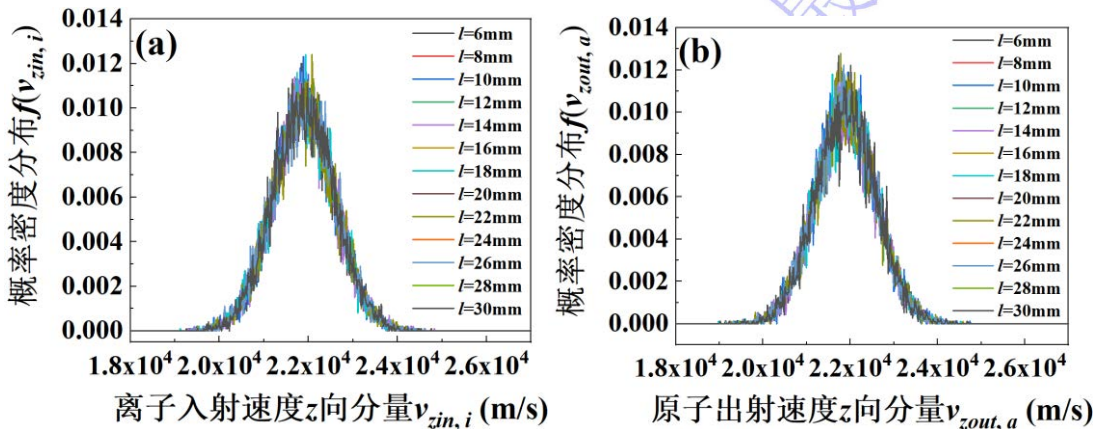


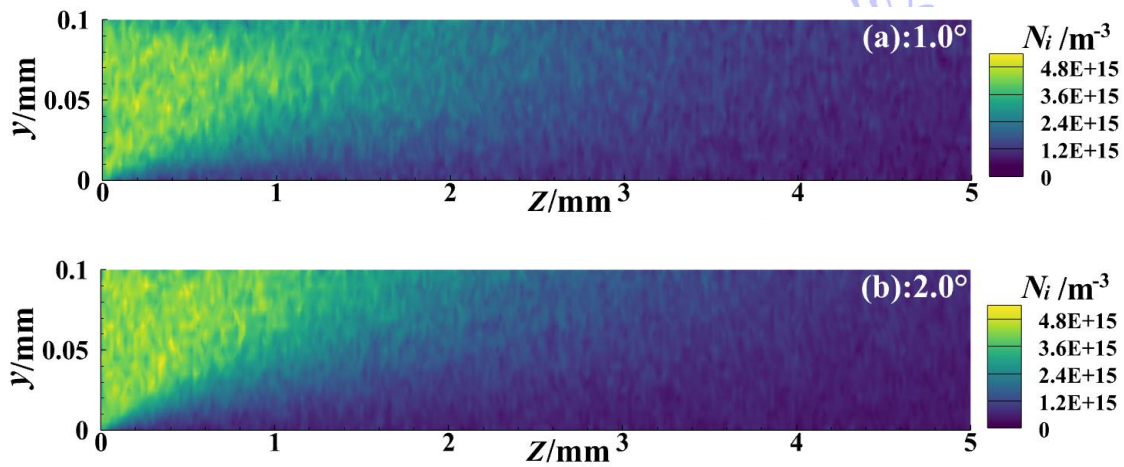
图 11 不同中性化通道长度 l 对应的：(a) 入射离子 z 向速度分量概率密度分布；(b) 出射原子 z 向速度分量概率密度分布

Fig.11. For different channel lengths l : (a) Probability density distribution of the z -component of ion incident velocity; (b) Probability density distribution of the z -component of atom exit velocity.

4.3 入射离子束掠射角 θ_{ion} 对中性化过程的影响

如前所述，多通道中性化电极可以在离子束径向上将其分割成若干子束。对于具有散角的离子束来说，不同径向位置的子束相对于通道壁面的掠射角存在差异。若离子束为准直束且与通道同轴，则离子与壁面的碰撞概率较低，中性化效率受限。通过适当设置通道轴线与入射离子束轴线之间的夹角 θ_{ion} （即掠射角），可有效增强离子与壁面的碰撞频率，从而提高中性化效率。基于此，本节旨在探究掠射角 θ_{ion} 对中性化过程的影响。

图 12 给出了 5 组不同掠射角 θ_{ion} 对应的通道内离子密度 N_i 的二维分布云图。当掠射角 $\theta_{ion} \geq 4^\circ$ 时，中性化通道出口附近几乎没有未中和的离子，表明离子已基本完全中性化。图 13 进一步显示， $\theta_{ion} \geq 4^\circ$ 时中性化效率 $\eta \geq 0.97$ 。上述结果表明，增大掠射角增大可显著增加离子与壁面的碰撞频率，从而有效提升中性化效率。



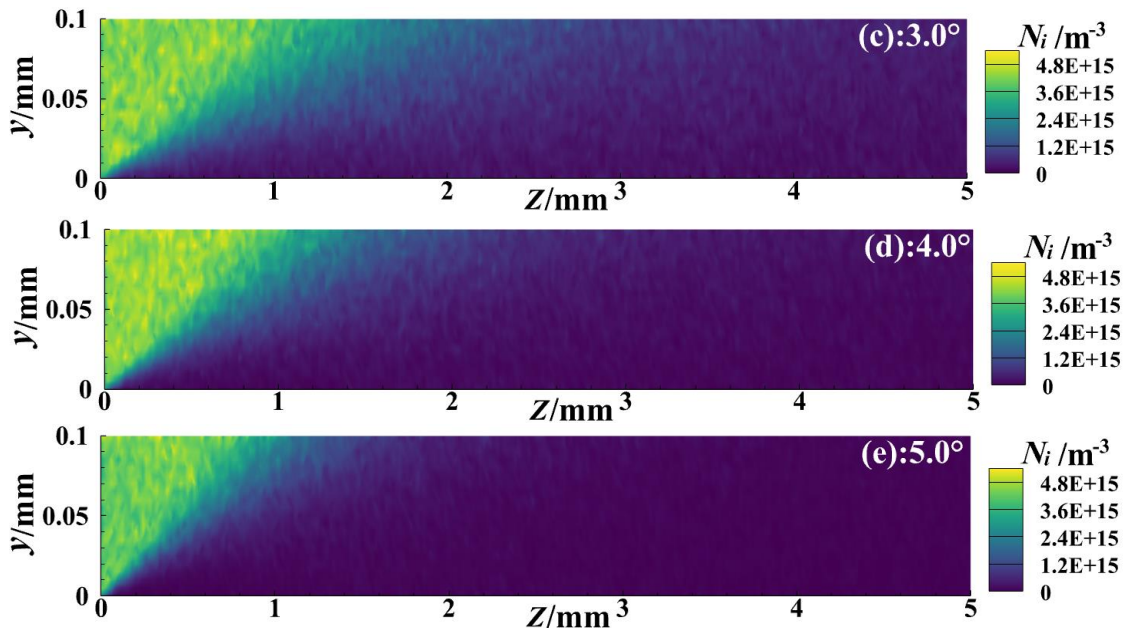


图 12 不同 θ_{ion} 对应的通道内离子密度 N_i 的二维分布云图: (a) $\theta_{ion} = 1.0^\circ$; (b) $\theta_{ion} = 2.0^\circ$; (c) $\theta_{ion} = 3.0^\circ$; (d) $\theta_{ion} = 4.0^\circ$; (e) $\theta_{ion} = 5.0^\circ$

Fig.12. Two-dimensional contour plots of ions density N_i in the channel for different θ_{ion} : (a) $\theta_{ion} = 1.0^\circ$; (b) $\theta_{ion} = 2.0^\circ$; (c) $\theta_{ion} = 3.0^\circ$; (d) $\theta_{ion} = 4.0^\circ$; (e) $\theta_{ion} = 5.0^\circ$.

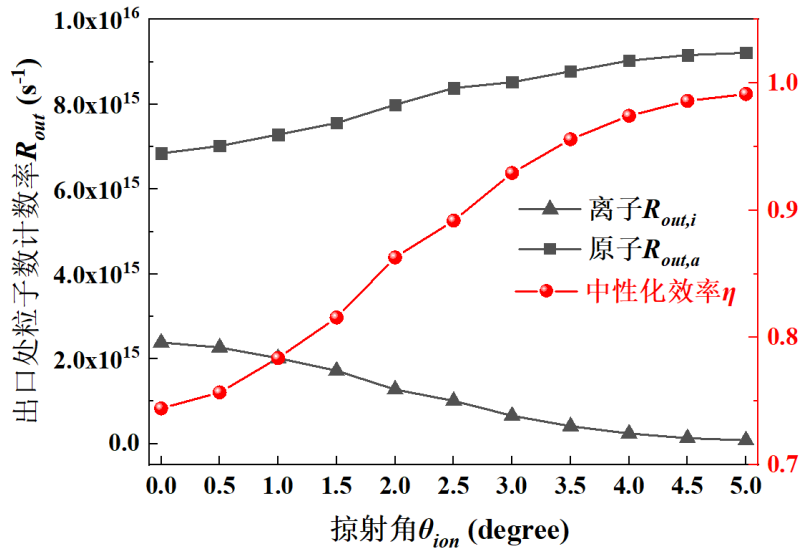


图 13 出口处粒子计数率 R_{out} 和中性化效率 η 随 θ_{ion} 的变化

Fig.13. Variation of the outlet particle count rate R_{out} and neutralization efficiency η with θ_{ion} .

图 14 给出了入射离子与出射原子的角度概率密度分布随掠射角 θ_{ion} 的变化情况。图 14 (a) 中, 随着 θ_{ion} 的增大, 入射离子角度概率密度分布 $f(\theta_{in,i})$ 的展宽无明显变化, 但整体向右偏移, 最概然角度逐渐增大。这是因为 θ_{ion} 决定了离子进

入通道时的 y 向速度分量 $v_{y,i} = v_i \cdot \cos\theta_{ion}$ 。 θ_{ion} 增大使得所有离子的 $v_{y,i}$ 整体增加，而 z 向速度分量 $v_{z,i}$ 基本不变，故分布整体右移，热运动引起的速度分散不随 θ_{ion} 变化，因此分布曲线的展宽保持不变。

图 14 (b) 中，随 θ_{ion} 的增大，原子出射角度分布 $f(\theta_{out,a})$ 的展宽显著增大，且从双峰演变为多峰结构。展宽增大的原因是离子入射角分布右移导致离子以更大角度撞击壁面，反射中性化后出射角增大。多峰结构源于离子在通道内经历不同次数的反射，各反射路径分支在角度空间叠加形成多峰，这与掠射条件下的半沟道效应一致^[29]。

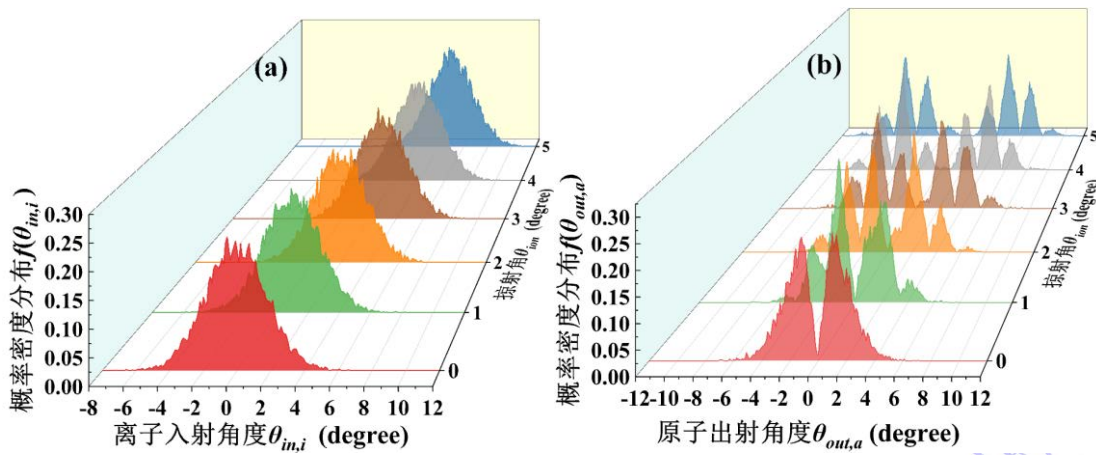


图 14 不同掠射角 θ_{ion} 对应的：(a) 入射离子的角度概率密度分布；(b) 出射原子的角度概率密度分布

Fig.14. For different grazing angles θ_{ion} : (a) Probability density distribution of ion incident angle; (b) Probability density distribution of ion exit angle.

掠射角 θ_{ion} 对出射原子束速度分布的影响几乎可以忽略不计。例如，束流以 10eV 的漂移能量射入中性化通道时，掠射角为 5° 和 0° 的入射离子的 z 向最概然速度差别小于 0.5%。另外，如前所述，出射原子束的速度分布由入射离子束决定。因此，随着掠射角的增大，出射原子的 z 向速度分布几乎不会产生变化。

5 结论

本文建立了低能离子束在高纵横比矩形通道内中性化过程的 2D3V PIC 模型，系统地研究了入射离子的漂移能量、中性化通道长度以及掠射角对中性化效率、出射粒子角度及速度分布的影响，主要结论如下：

1. 中性化效率受离子-壁面碰撞频率主导：随漂移能量增大呈非线性下降，随通道长度和掠射角增加逐渐升高并趋于饱和。
2. 未中和离子的出射角分布仅由通道几何决定，通道越长，几何约束越强，出射散角越小；原子出射角分布展宽基本继承自入射离子，并且随掠射角增大，因反射路径分岔，角分布呈现多峰结构。
3. 出射原子速度分布仅取决于入射离子速度分布：漂移能量增大使速度分布向高速区偏移，而通道长度和掠射角的影响可忽略。

综上，本研究揭示了高纵横比矩形通道内低能离子中性化过程的参数调控规律，为高品质、具备宽参数调节范围的快中性束源的设计与优化提供了理论依据。后续，将进一步考虑离子-壁面碰撞能量损失、二次电子发射及三维几何效应，并开展实验进行对比验证。

参考文献

- [1] Wüest M, Evans D, von Steiger R 2007 *Calibration of particle instruments in space physics* (ESA Publications Division) p256
- [2] Närmann A, Heiland W, Monreal R, Flores F, Echenique P M 1991 *Phys. Rev. B* **44** 2003
- [3] Romano F, Espinosa-Orozco J, Pfeiffer M, Herdrich G, Crisp N H, Roberts P C E, Holmes B E A, Edmondson S, Haigh S, Livadiotti S, Macario-Rojas A, Oiko V T A, Sinpetru L A, Smith K, Becedas J, Sullioti-Linner V, Bisgaard M, Christensen

- S, Hanessian V, Jensen T K, Nielsen J, Chan Y A, Fasoulas S, Traub C, García-Almiñana D, Rodríguez-Donaire S, Sureda M, Kataria D, Belkouchi B, Conte A, Seminari S, Villain R 2021 *Acta Astronaut.* **187** 225
- [4] Woodley A, Horstman E, Keidar M, Underwood T C 2024 *J. Electr. Propuls.* **3** 34
- [5] Zhang Y Q, E P, Chen Q R, Song C Y, Wang H 2025 *Chinese Journal of Vacuum Science and Technology* **45** 853 (in Chinese) [张湧颀, 鄂鹏, 陈千睿, 宋春尧, 王欢 2025 真空科学与技术学报 **45** 853]
- [6] Da D A, Yang Y T 2012 *Cosmic vacuum* (Beijing: Chemical Industry Press) p85 (in Chinese) [达道安, 杨亚天 2012 宇宙真空学 (北京: 化学工业出版社) 第85页]
- [7] Schroeder J 2025 *Ph. D. Dissertation* (The University of Texas at San Antonio)
- [8] Ayilaran A 2018 *Ph. D. Dissertation* (The Open University)
- [9] Kudrya V P, Maishev Yu P 2018 *Russ. Microelectron.* **47** 332
- [10] Grigoriev S, Melnik Y, Metel A 2002 *Surf. Coat. Tech.* **156** 44
- [11] Economou D J 2009 *Plasma Processes Polym.* **6** 308
- [12] Economou D J 2008 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** 024001
- [13] Kim D, Economou D J, Woodworth J R, Miller P A, Shul R J, Aragon B P, Hamilton T W, Willison C G 2003 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **31** 691
- [14] Nam S K, Economou D J, Donnelly V M 2006 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39** 3994
- [15] Nam S K, Economou D J, Donnelly V M 2007 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **35** 1370
- [16] Wieser M, Wurz P 2005 *Meas. Sci. Technol.* **16** 2511
- [17] Gasser J, Galli A, Wurz P 2023 *Rev. Sci. Instrum.* **94** 053302

- [18] Kong L, Zhang A, Tian Z, Zheng X, Wang W, Liu B, Wurz P, Piazza D, Etter A, Su B, An Y, Ding J, Li W, Liu Y, Li L, Li Y, Tan X, Sun Y 2020 *Earth Planet. Phys.* **4** 1
- [19] Wei M, Wang X, Guo X, Liu P, Ding B, Shi Y, Song X, Wang L, Liu X, Yin L, Zhang Z, Chen X, Guo Y, Chen L 2020 *Nucl. Instrum. Meth. B* **478** 239
- [20] Bandurin Yu, Esaulov V A, Guillemot L, Monreal R C 2004 *Physica Status Solidi (b)* **241** 2367
- [21] Xu H, Chang W W, Yin Y, Zhuo H B 2004, *Acta Phys. Sin.* **53** 818 (in Chinese)
[徐涵, 常文蔚, 银燕, 卓红斌 2004 物理学报 **53** 818]
- [22] Qing S W, E P, Duan P 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 205202 (in Chinese) [卿绍伟, 鄂鹏, 段萍 2012 物理学报 **61** 205202]
- [23] Zhang Y, Ling W, Lan C, Huang W, Lu Y, Wang H, E P 2026 *J. Vac. Sci. Technol. B* **44** 014202
- [24] Ranjan A, Donnelly V M, Economou D J 2006 *J. Vac. Sci. Technol. A* **24** 1839
- [25] Khalal-Kouache K, Bruckner B, Roth D, Goebel D, Bauer P 2016 *Nucl. Instrum. Meth. B* **382** 11
- [26] Wethekam S, Winter H 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 207601
- [27] Wethekam S, Mertens A, Winter H 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 037602
- [28] Itoi S, Fujita H, Sakai S 2022 *MRS Adv.* **7** 1504
- [29] D.M Danailov, R Pfandzelter, T Igel, H Winter 2000 *Nucl. Instrum. Meth. B* **164** 583

Simulation Study on the Neutralization Process of Low-Energy Ion Beams in High-Aspect-Ratio Rectangular Channels*

ZHANG Yongqi¹⁾⁶⁾ LAN Chaohui^{2)3)4)†} QING Shaowei^{5)†} LING Wenbin³⁾⁴⁾ SHI Guien⁷⁾

DONG Yunning⁶⁾ LU Yaowen⁶⁾ E Peng²⁾³⁾⁴⁾

1) (School of Electrical Engineering and Automation, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

2) (School of Energy Science and Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

3) (Laboratory for Space Environment and Physical Sciences, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

4) (State Key Laboratory of Space Environment Interaction with Matters, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

5) (School of Marine Equipment Engineering, Guangzhou Maritime University, Guangzhou Jiaotong University (preparation), Guangzhou 510725, China)

6) (Beijing Orient Institute of Measurement and Test, Beijing 100029, China)

7) (Department of Electronic and Electrical Engineering, University College London, London WC1E 6BT, United Kingdom)

Fast neutral atom beams show significant application potential in fields such as space environment simulation and micro-nano device processing. To obtain high-quality fast neutral atom beams with a wide tunable parameter range, this paper proposes a low-energy ion beam neutralization scheme based on high-aspect-ratio rectangular channels. A two-dimensional-in-space and three-dimensional-in-velocity (2D3V) particle-in-cell (PIC) model is established to simulate the transport and neutralization processes of a He⁺ beam inside a rectangular channel with atomically flat metal walls. The effects of three key parameters—incident ion drift energy (10–100 eV), channel length (6–30 mm, aspect ratio up to 300), and grazing angle (0°–5°)—on neutralization efficiency and outgoing beam characteristics are systematically investigated. The simulation results reveal that the neutralization efficiency is governed

primarily by the number of collisions. It decreases nonlinearly from 0.78 to 0.43 as the drift energy increases from 10 eV to 100 eV, because higher drift energy shortens the ion residence time in the channel and improves beam collimation, thereby reducing the number of collisions. In contrast, increasing the channel length from 6 mm to 30 mm raises the neutralization efficiency from 0.80 to 0.96 and tends to saturate, as more collisions occur. Similarly, increasing the grazing angle from 0° to 5° enhances the number of collisions and achieves a neutralization efficiency above 0.97 when the angle exceeds 4°.

Regarding the beam quality, the exit angular distribution of non-neutralized ions depends only on the channel length: longer channels impose stronger geometric constraints and produce smaller divergence angles. The angular and velocity distributions of the outgoing neutral atoms are directly inherited from the incident ions. Notably, as the grazing angle increases, the angular distribution of the outgoing atoms broadens and develops multiple peaks due to the spatial superposition of different reflection paths, while the velocity distribution remains almost unchanged. Furthermore, the velocity distribution of the outgoing atoms shifts toward higher speeds with increasing drift energy but is unaffected by channel length or grazing angle.

This study reveals the key physical mechanisms governing low-energy ion beam neutralization in high-aspect-ratio rectangular channels. It also provides quantitative parameter-regulation rules for the design and optimization of fast neutral beam sources with high efficiency, low divergence, and wide tunability. Future work will incorporate energy loss, secondary electron emission, and three-dimensional geometric effects, along with experimental validation.

Keywords: Low-energy ion beam, Surface neutralization, Particle-in-Cell (PIC),

High-aspect-ratio channel

* Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12305219, 12275060), the National Key Research and Development Program of China (Grant No. 2022YFA1604600) and the Frontier Science Center for Space Environment and Matter Interactions (Grant No. AUEA5740400825).

† Corresponding author. E-mail: lanchaohui@hit.edu.cn; qshaowei@gzmtu.edu.cn
The first author. E-mail: 21B906046@stu.hit.edu.cn

录用稿件，非最终出版稿