

低气压容性放电流体模拟的数值稳定和可靠性研究^{*}

姜森钟^{1) #} 李靖宇^{1) #} 张逸凡²⁾ 宋远红²⁾ 贾文柱^{1) †}

1) (西南大学, 人工智能学院, 重庆 400700)

2) (大连理工大学物理学院, 大连 116024)

流体模型是一类广泛用于低温气体放电宏观模拟的连续介质方法, 能够以较低计算成本描述射频容性耦合等离子体 (RF-CCP) 中的密度分布、鞘层运动、电子加热和电离过程。然而, 作为在时间和空间上离散求解的数值模型, 其稳定性和物理准确性依赖于空间分辨率和界面通量构造方式。本文以一维 13.56 MHz 氩气 RF-CCP 放电为对象, 选取 1 Torr / 40 V 和 2 Torr / 200 V 两组工况, 探讨了空间网格和通量构造方式对电子通量、鞘层结构、功率吸收、电离源项、电子密度以及电流密度的影响。结果表明, 电子通量在粗网格条件下首先受到界面通量构造方式的影响, 并表现出不同的空间输运强度。电子通量差异会进一步改变鞘层厚度、电子吸收功率, 并通过平均电子温度和电离速率系数反馈到电离源项, 最终影响电子密度分布, 此外, 总功率密度和总电流密度的幅值也受到界面通量构造方式的影响, 因此, 在本文所考察的一维低气压氩气 RF-CCP 流体模拟中, 数值收敛并不意味着所得物理量已经准确可靠, 应结合电子通量、鞘层演化、电子吸收功率、电离源项以及电流密度评估收敛解的可信性。

关键词: 射频容性耦合等离子体; 流体模型; 鞘层; 电离源项

1 引言

射频容性耦合等离子体 (radio-frequency capacitively coupled plasma, RF-CCP) 广泛应用于等离子体刻蚀、薄膜沉积、表面改性和材料处理等低温等离子体工艺中^[1]。由于放电结构简单、频率和电压易

同等贡献作者。

† 通信作者. E-mail: jiawenzhu@swu.edu.cn (通信作者)

第一作者. E-mail: cheemscn@gmail.com (第一作者)

* 国家重点研发计划 (编号: 2025YFF0512000); 国家自然科学基金 (编号: 12475202)

于调控, RF-CCP 也是研究低温等离子体鞘层动力学、电子加热、电离维持和等离子体-表面相互作用的重要模型体系。对于这类放电, 电子密度分布、鞘层的扩张与塌缩、电子功率吸收以及电离源项共同决定了放电维持方式和离子通量等关键工艺参数。因此, 建立能够可靠预测这些物理量的数值模型, 是理解 RF-CCP 放电过程和开展反应器优化设计的重要基础。

低温等离子体的数值模拟方法主要包括动理学模型和流体模型。粒子网格/蒙特卡罗碰撞 (particle-in-cell/Monte Carlo collision, PIC/MCC) 方法能够在粒子层面描述电子能量分布函数、非局域电子动力学、碰撞过程和鞘层附近的非线性响应^[2], 已成为低气压 RF-CCP 机理研究和基准计算的重要工具。Turner 等针对低气压容性耦合放电建立了 PIC/MCC benchmark, 强调基准模拟需要明确全部物理参数和数值参数, 并通过多代码比较来评估数值结果的可信性^[3]。Vass 等进一步指出, 即使对于一维静电显式 PIC/MCC 模型, 时间步长、空间网格、超粒子权重以及等离子体-表面相互作用参数的选择也会显著影响等离子体密度和电子能量概率函数, 并明确区分了数值稳定性条件和数值准确性条件^[4]。这些工作表明, 低温等离子体数值模拟中的可稳定运行并不必然等同于物理量预测准确。

与 PIC/MCC 相比, 流体模型通过求解带电粒子连续性方程、漂移-扩散通量方程、电子能量方程和 Poisson 方程描述放电的宏观演化, 具有计算效率高、易于多维扩展和便于耦合复杂化学反应的优势。早期 Graves 对 13.56 MHz 射频放电的流体模拟表明, 流体模型可以给出电子碰撞激发速率等宏观量的时空演化特征^[5]。Boeuf 等相继发展了自洽 RF 放电流体模型, 系统讨论了矩方程闭合、电子能量方程、漂移-扩散近似和空间电荷电场耦合等问题^[6,7]。Passchier 等进一步将二维流体模型用于氩气 RF 放电和 GEC 参考腔体模拟, 并与实验结果进行比较^[8,9]。Alves 和 Marques 对容性耦合射频放电流体建模进行了综述, 指出流体模型在一定压力、电压和频率范围内仍是研究 RF 放电宏观行为的重要工具^[10]。

然而, 流体模型的适用性并不是无条件的。低压 RF-CCP 中电子平均自由程较长, 电子能量输运具有非局域性, 电子能量分布函数也可能明显偏离局域平衡^[11]。在这些条件下, PIC/MCC 等动理学方法通常更适合描述微观电子动力学^[12]。Becker 等通过流体模型与 PIC/MCC 的比较表明, 改进的漂移-扩散近似可以在一定范围内提高流体模型对宏观放电性质的预测能力, 但经典漂移-扩散模型在某些低气压条件下会失效^[13]。因此, 本文不将流体模型视为低气压 RF-CCP 动理学描述的替代方案, 而是在流体模型已经被用于宏观趋势预测、参数扫描、多维模拟或工程建模的前提下, 考察其数值参数和界面通量构造方式是否会引入收敛但不准确的物理解。

在流体模型求解中, 时间推进和空间离散都会影响结果的稳定性和准确性。时间推进方面, 在采用半

隐式方法处理带电粒子输运与空间电荷电场的耦合从而克服介电弛豫约束后，电子能量源项的显式处理成为新的限制，Hagelaar 和 Kroesen 针对这一瓶颈提出了电子能量源项的隐式线性化处理，以提高时间推进效率和稳定性^[14]。空间离散方面，电子和离子的漂移-扩散通量如何在网格界面上构造，是决定密度梯度、鞘层边缘输运和电离源项反馈的重要环节。Scharfetter-Gummel (SG) 指数格式最初用于半导体漂移-扩散方程，其后被广泛引入等离子体流体模拟以处理强漂移和扩散并存的输运问题^[15]。一阶迎风格式稳定性较好，但人工耗散较强；中心差分格式形式精度较高，但在强梯度区域容易产生非物理振荡；总变差不增 (total variation diminishing, TVD) 类通量限制格式则通过限制器在梯度保持和振荡抑制之间折中^[16]。

已有研究已经从数值方法角度注意到 RF 放电流体模型中空间离散的重要性。Barnes 等建立了低气压 RF 辉光放电输运方程的交错网格有限差分方法，讨论了数值求解稳定性与输运离散问题^[17]。Hammond 等针对 RF 等离子体放电提出守恒型数值方法，并指出低阶迎风和 SG 等常用通量离散在粗网格下可能带来明显误差^[18]。Lin 和 Adomaitis 采用谱配置方法和模型降阶方法研究 RF 辉光放电模型，体现了高空间分辨率方法在放电模拟中的重要性^[19]。Davoudabadi 等进一步比较了高阶有限体积方法在局域平均能量等离子体模型中的精度和性能，说明空间离散精度会直接影响非热等离子体流体模型的数值解^[20]。这些研究为放电流体模型的高效求解提供了重要基础，但多数工作更侧重数值算法本身的精度、稳定性和计算效率，而对“数值格式误差如何转化为放电物理误判”的讨论仍不充分。

对于 RF-CCP 流体模拟而言，界面通量构造方式并不是单纯的数值技巧。电子通量 (Γ_e) 通过通量散度项进入电子连续性方程，并与电场共同决定电子功率吸收；电子能量通量则通过电子能量方程影响电子平均能量，进而影响依赖于电子平均能量的电离速率系数和电离源项。与此同时，电子和离子密度又通过 Poisson 方程影响空间电荷与电场分布，鞘层结构则是密度和电场响应的表征。因此，空间网格和通量构造引入的误差是通过电子连续性方程、Poisson 方程和电子能量方程的耦合，在电子输运、鞘层结构、功率吸收、电离源项和电子密度等多个物理量中共同体现。若只根据计算是否发散或是否达到周期稳态判断模拟结果的可靠性，就可能把数值耗散、数值振荡或粗网格通量误差误认为真实的电子加热增强、鞘层压缩或电离机制变化。

基于上述认识，本文建立一维 13.56 MHz 氩气 RF-CCP 漂移-扩散流体模型，在统一物理模型、边界条件和时间推进设置下，比较 SG 指数通量、一阶迎风通量、中心差分通量和 van Leer TVD 通量限制格式对关键放电物理量的影响。本文选取两种典型放电状态：一种为低气压低电压条件下（低压条件）电子

密度呈近似抛物线型分布的情况，另一种为较高气压和电压下（高压条件）等离子体主体区密度较平坦、鞘层附近梯度较陡的情况。研究重点不是提出新的空间离散算法，而是分析在粗空间网格条件下，不同通量构造方式虽然都可能得到周期收敛解，但是否会导致电子密度、电子通量、鞘层厚度、功率吸收、电流、电子平均温度和电离源项的系统性偏差。通过这种方式，本文试图将 RF-CCP 流体模拟中的空间离散问题从“数值格式比较”推进到“物理量预测可信性评估”，并为粗网格、多维模拟和参数扫描中模型参数及通量构造方式的合理选择提供参考。需要说明的是，本文所讨论的“物理量预测可信性”并非指计算结果已经等同于实验或 PIC/MCC 所代表的绝对物理真值。本文首先通过已有文献结果的对比，检验所采用流体模型、参数设置和基本放电状态的合理性；在此基础上，将固定模型、输运参数和边界条件下经网格加密后基本不再变化的高分辨率结果作为参考解。某一空间离散格式所得周期稳态解在电子密度、电子通量、鞘层厚度、电子温度、功率吸收、电离源项和电流响应等关键物理量的幅值及时空分布上与该参考解的偏差越小，且该偏差随网格加密总体减小，则认为其在当前流体模型框架内具有更高的物理量预测可信性。本文的结构安排如下：第 2 节介绍模型；第 3 节正文讨论；第 4 节给出全文结论。

2 模型

本文考虑一维无限平行板氩气 RF-CCP 放电，极板间距为 L ，射频电压施加在右电极，左电极接地。模型求解的主要变量包括电子密度 n_e 、离子密度 n_i 、电子能量密度 ω_e 、电势 ϕ 以及由电势得到的电场 E 。流体方程组包括电子和离子连续性方程、电子能量平衡方程和泊松方程：

$$\frac{\partial n_{i,e}}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_{i,e} = S_{i,e}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \omega_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_{\omega e} = S_{\omega e}, \quad (2)$$

$$\nabla^2 \phi = -\frac{e}{\varepsilon_0}(n_i - n_e), \quad (3)$$

$$\Gamma_i = \mu_i E n_i - D_i \nabla n_i, \quad (4)$$

$$\Gamma_e = -\mu_e E n_e - D_e \nabla n_e. \quad (5)$$

$$\Gamma_{\omega e} = -\frac{5}{3}\mu_e E \omega_e - \frac{5}{3}D_e \nabla \omega_e. \quad (6)$$

$$S_i = S_e = k_i(\bar{\varepsilon}_e)n_e n_n, \quad (7)$$

$$S_{\omega e} = -e\Gamma_e \cdot E - k_i n_e n_n H_i. \quad (8)$$

其中 n_n 为中性气体密度, k_i 为电离速率系数。在该模型下, 电子密度并不是单独由电离源项决定, 而是由通量散度和源项共同决定。因此, 界面通量离散方式的误差会直接改变电子输运; 同时, Γ_e 、 Γ_{ω_e} 和 $\bar{\epsilon}_e$ 的误差又会通过 $k_i(\bar{\epsilon}_e)$ 影响电离源项。此外, 需要指出本文流体模型涉及的反应系数和电子能量方程遵循麦克斯韦分布函数的物理假设。

本文比较四种界面通量构造方式。SG 通量基于常系数漂移-扩散方程的局部解析解, 适合处理漂移和扩散同时存在的强梯度输运问题。一阶迎风通量按照漂移速度方向选取上游密度, 具有较强数值稳定性, 但会引入明显人工耗散。中心差分通量在光滑区域具有较高形式精度, 但在鞘层附近强梯度和电子密度接近零的区域容易产生非物理振荡。TVD 通量通过 van Leer 限制器在低阶稳定性和高阶分辨率之间切换, 试图在抑制振荡的同时保持对陡峭梯度的分辨能力。

本文采用准中性偏离准则定义瞬态鞘层边界, 即从电极向体区搜索, 当首次满足 $\frac{n_e}{n_i} = 0.9$ 的位置定义为鞘层边缘, 并由此得到瞬态鞘层厚度 ($d_s(t)$)。该定义能够直接反映鞘层中空间电荷区向准中性体区的过渡, 比单纯用电场强度阈值更适合进行不同通量构造方式之间的定量比较。为分析不同通量构造方式导致的物理差异, 本文还讨论了总电流密度, 平均电子吸收功率密度以及总功率密度, 公式如下:

$$J(t) = e(\Gamma_i - \Gamma_e) + \epsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t}. \quad (9)$$

$$\langle P_e(x) \rangle_T = \frac{1}{T} \int_0^T -e\Gamma_e(x, t) \cdot E(x, t) dt. \quad (10)$$

$$P_{\text{tot}} = \frac{1}{T} \int_0^T \int_0^L J(x, t) E(x, t) dx dt. \quad (11)$$

本文采用一维有限体积法和交错网格进行离散。标量变量定义在网格中心, 通量和电场定义在网格界面。时间推进采用隐式格式, 并保持射频周期内时间步数 ($spc = 1000$) 不变。各粒子连续性方程及电子能量平衡方程在每个时间步均可统一离散为标准的三对角代数系统, 并采用 Thomas 算法依次对泊松方程, 电子密度方程, 离子密度方程和电子能量密度方程进行高效求解。模型收敛判据设置为当所有物理量的相对容差在连续两个射频周期内低于 5×10^{-6} 时收敛, 相对容差具体定义如下:

$$\epsilon_u^{(m)} = \left[\frac{1}{N_x N_t} \sum_{l=1}^{N_t} \sum_{i=1}^{N_x} \left(\frac{u_{i,l}^{(m)}}{\overline{|u|}^{(m)}} - \frac{u_{i,l}^{(m-1)}}{\overline{|u|}^{(m-1)}} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (12)$$

其中, u 表示 n_e 、 n_i 、 ϕ 或 T_e ; m 表示射频周期数; N_x 和 N_t 分别为空间网格数和射频周期的时间步数; $\overline{|u|}^{(m)}$ 表示物理量 u 在第 m 个射频周期内绝对值的时空平均。由于本文关注的是粗空间分辨率下通量离散对物理量预测的影响, 后续分析主要改变空间网格数 (n_x), 而不讨论时间步长对结果的影响。这样可以

突出空间准确性条件，即在时间推进已经足够稳定的情况下，空间网格和通量构造是否仍会产生收敛但不可信的物理解。

3 结果与讨论

首先采用 SG 通量在高空间分辨率条件 ($n_x = 1000$) 下计算 1 Torr / 40 V 氩气 RF-CCP 放电，并在相同放电条件及模型参数下与已有高精度文献结果^[20] 进行比较验证。图 1 给出了离子密度、电子温度分布。可以看到，本文模型所得离子密度剖面与参考结果基本一致；在两个典型射频相位下，电子温度分布也能较好再现文献结果。这说明在足够细的空间网格和时间分辨率下，本文流体模型、边界条件和输运参数设置能够给出合理的 RF-CCP 放电宏观特征。需要强调的是，本文后续所称“基准解”并不代表实验真值，也不意味着流体模型在低气压条件下可以完全描述真实电子动力学。基准解仅指在同一流体模型、同一输运参数和同一边界条件下，采用较高空间分辨率所得的充分分辨数值解。其作用是为比较粗网格下不同通量构造方式的可信性提供统一参照。这样的处理能够排除模型假设差异和输运数据差异，把讨论集中到空间网格和通量离散对物理量预测的影响上。

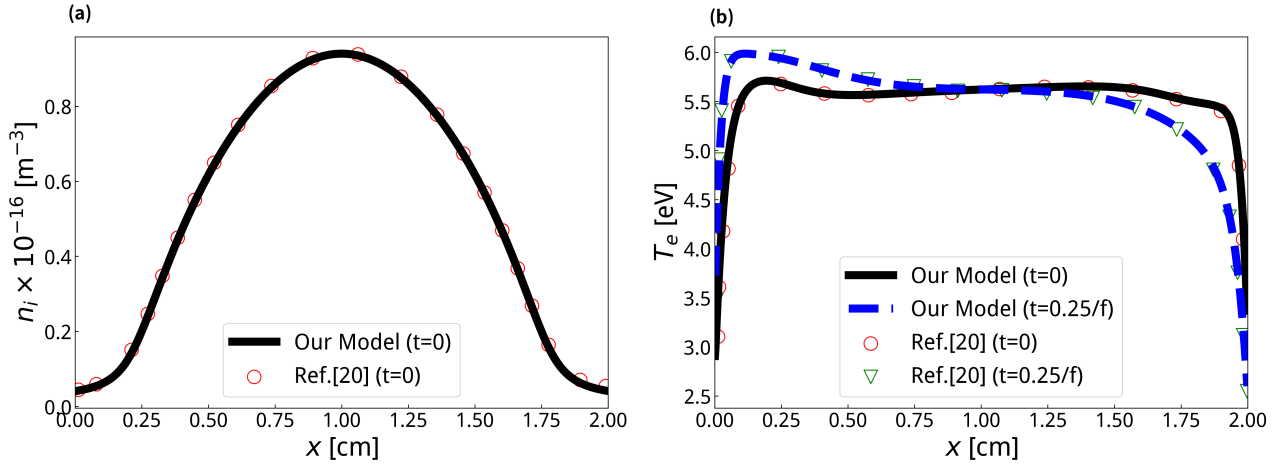


图 1 离子密度和电子温度分布。模型采用 SG 格式，空间网格数设为 $n_x = 1000$ ，射频周期时间步数设为 $spc = 1000$ ，模拟放电参数为 $V_{\text{rf}} = 40$ V、 $P = 1$ Torr。

Fig. 1. Spatial distributions of ion density and electron temperature. The simulations are performed using the SG scheme with 1000 spatial grids and 1000 time steps per RF cycle. The discharge conditions are an RF voltage amplitude of 40 V and a pressure of 1 Torr.

图2给出了固定时间步长 ($spc = 1000$) 时，不同空间网格数下周期平均电子密度分布的变化。为比较不同空间梯度结构下网格分辨率和通量构造方式的影响，本文选取两组具有明显不同密度分布特征的放电

工况。对于 1 Torr/40 V 工况，电子密度呈近似抛物线型分布，体区密度由放电中心向两侧连续、平缓下降；对 2Torr/200 V 工况，电子密度在等离子体主体区较为平坦，而主要空间变化集中在靠近两侧鞘层的较窄区域。前者代表空间梯度相对平缓的体区连续变化型分布，后者代表鞘层边缘梯度较陡的边界层型分布。选取这两组工况的目的，是在相同物理模型和数值框架下考察同一通量格式在平缓梯度和陡峭梯度条件下的稳定性及可信性，而非覆盖全部压强—电压参数组合。本文压强范围高于 Becker 等^[13] 针对氩气考察的 20–80 Pa 范围，且工况未处于平均自由程与整个放电间隙同量级的典型稀薄极限，后续分析围绕这两组典型工况展开。

在粗网格 ($n_x = 64$) 条件下，虽然多数通量构造方式都可以达到周期稳态，但其所获得电子密度剖面差异显著。低气压低电压下，SG 通量所得密度接近基准解，而一阶迎风和 TVD 通量均低估体区电子密度。中心差分通量在该工况下虽然可以给出周期稳态解，但其密度峰值和边界附近结构明显偏离基准解。较高气压和电压下，中心差分通量直接发散，SG 通量显著高估主体区密度，而一阶迎风通量低估密度，TVD 通量相对更接近基准解。上述结果表明，周期稳态收敛只是稳定性条件，并不是可信条件。在工程建模中，如果某一通量构造方式一旦确定后便被用于不同气压、电压或几何条件，则可能在某些工况中给出看似稳定但物理含义错误的密度分布。此外，图2(d) 和 (h) 分别给出了两种工况下放电中心周期平均电子密度相对于高分辨率基准解的相对误差随网格数的变化规律，从图中可以更清晰地看到，随着网格数增加，SG 格式、中心差分格式以及 TVD 格式等高阶格式计算的电子密度偏差快速下降，而一阶精度的迎风格式计算的误差下降很慢，并且在高分辨率下，由于强烈的人工耗散导致相对误差一直偏高。

电子密度的瞬态变化由 $(-\nabla \cdot \Gamma_e)$ 和 (S_e) 共同决定，因此不同通量构造方式首先会通过电子通量的时空分布直接影响密度平衡。图 3 展示了 ($n_x = 64$) 条件下一个射频周期内电子通量 $(\Gamma_e(x, t))$ 的时空分布。该图可以被理解为粗网格下不同通量构造方式对“电子流动图像”的重构结果。在 1 Torr / 40 V 条件下，基准解显示电子通量在一个射频周期内随鞘层扩张和塌缩交替变化。电子在两侧鞘层附近受到瞬态电场调制，通量方向和强度随相位改变，并向等离子体主体区传递。SG 通量在该条件下较好保持了这种通量结构，因此其周期平均电子密度接近基准解。一阶迎风通量由于人工耗散较强，会削弱通量幅值并抹平鞘层边缘附近的通量梯度，造成由电离区域向体区补给的电子通量不足，最终导致体区周期平均电子密度偏低。TVD 通量虽然通过限制器抑制了非物理振荡，但在粗网格下仍会在局部强梯度区域退化为更耗散的通量形式，因此低压工况下也出现一定密度低估。在 2 Torr / 200 V 条件下，主体区密度较平坦，电子密度和电场的主要变化集中在鞘层附近的较窄区域。此时粗网格对鞘层边缘和体区边界层的分辨不足会显

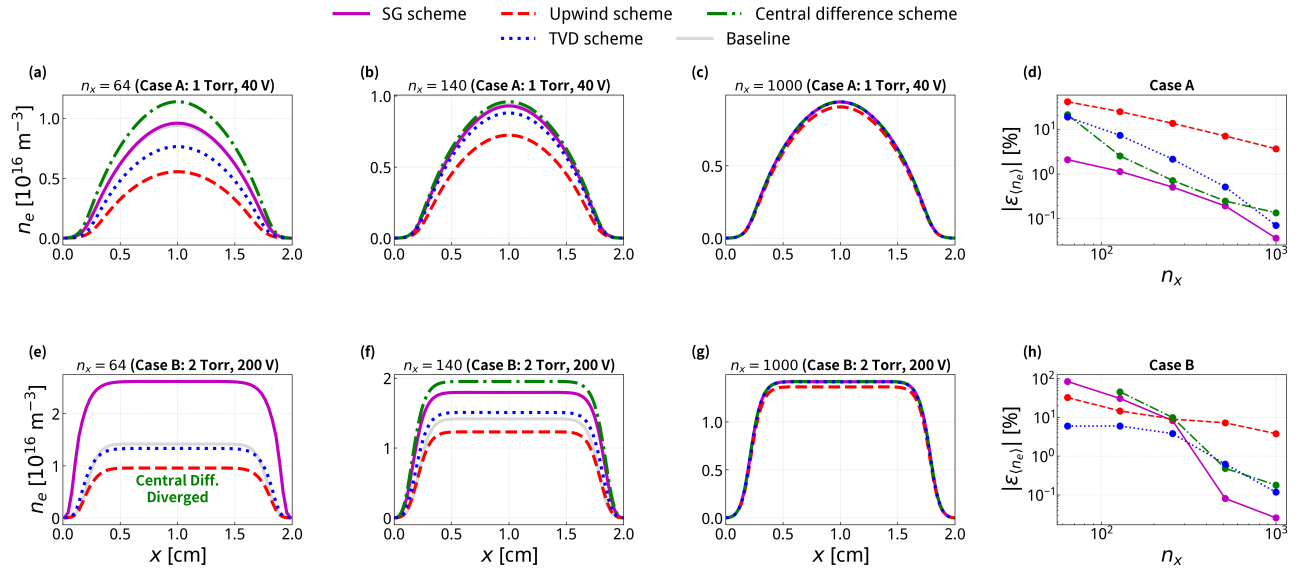


图 2 不同对流格式下周期平均电子密度 $\langle n_e \rangle$ 的空间剖面分布及放电中心 $\langle n_e \rangle$ 相对于高分辨率基准解的相对误差随网格数 $n_x = 64, 128, 256, 512, 1000$ 的变化。(a)–(d) 和 (e)–(h) 分别为低压工况 (Case A: 1 Torr, 40 V) 和较高压工况 (Case B: 2 Torr, 200 V); 灰色粗线表示基准解 (Baseline)。注: 中心差分格式网格数为 64 的高压工况中因计算发散未展示有效数据。射频周期时间步数固定为 $spc = 1000$ 。

Fig. 2. Spatial profiles of the period-averaged electron density $\langle n_e \rangle$ obtained with different convection schemes, together with the relative error of $\langle n_e \rangle$ at the discharge center with respect to the high-resolution baseline as a function of the spatial grid number $n_x = 64, 128, 256, 512$, and 1000. (a)–(d) and (e)–(h) correspond to the low-pressure case (Case A: 1 Torr, 40 V) and the relatively high-pressure case (Case B: 2 Torr, 200 V), respectively. The thick gray line denotes the baseline. Note that the central difference scheme diverges in Case B. The number of time steps per RF cycle is fixed at $spc = 1000$.

著放大通量离散误差。中心差分通量由于缺乏耗散, 在强梯度区域产生非物理振荡并最终发散。SG 通量虽然在漂移-扩散问题中具有良好稳定性, 但 SG 通量在向等离子体体区运输的电子通量幅值高于基准解, 从而导致图 2 中其主体区密度显著偏高。TVD 通量通过限制器抑制了强梯度处的振荡, 并避免了 SG 通量在该工况下的过强运输, 因此在粗网格下给出较稳健的密度预测。由此可见, 图 2 中的密度差异并不是孤立的数值偏差, 而是不同通量构造方式改变电子流动图像后的结果。换言之, 所谓“格式差异”在等离子体物理上表现为电子从鞘层边缘到主体区、从主体区到壁面的输运通道强弱不同。

RF-CCP 放电中, 鞘层不是静态边界层, 而是在射频周期内随外加电压周期性扩张和塌缩。鞘层运动直接影响瞬态电场、电子加热、离子加速以及非线性电流响应。因此, 通量离散误差若改变电子密度分布, 必然会进一步影响鞘层厚度演化。图 4 给出了粗网格 $n_x = 64$ 条件下不同通量构造方式所得瞬态鞘层厚度 $d_s(t)$ 。在 1 Torr / 40 V 条件下, 基准解的左右鞘层厚度随射频相位交替变化, 体现了两侧电极鞘层扩

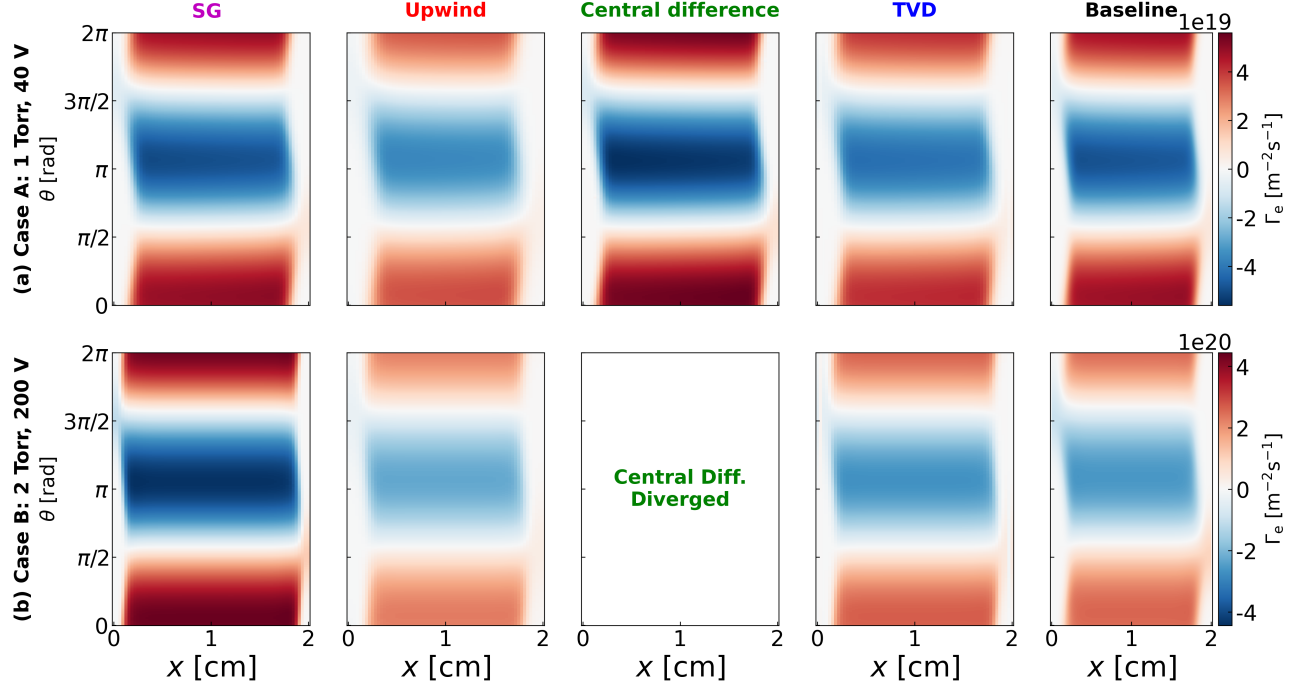


图 3 不同对流格式下电子通量 Γ_e 在一个射频周期内的时空分布情况（空间网格数 $n_x = 64$ ）：(a) 为低压工况（Case A: 1 Torr, 40 V）；(b) 为较高压工况（Case B: 2 Torr, 200 V）。图中自左向右各列依次为 SG 格式、一阶迎风格式、中心差分格式、TVD 格式以及高分辨率基准解（Baseline）。注：中心差分格式在 Case B 中因计算发散未展示有效数据。射频周期时间步数固定为 $spc = 1000$ 。

Fig. 3. Spatiotemporal distribution of electron flux Γ_e over one RF cycle obtained with different convection schemes ($n_x = 64$): (a) corresponds to the low-pressure case (Case A: 1 Torr, 40 V); (b) corresponds to the relatively high-pressure case (Case B: 2 Torr, 200 V). The columns from left to right represent the SG scheme, Upwind scheme, Central difference scheme, TVD scheme, and the high-resolution baseline respectively. Note that the central difference scheme diverges in Case B. The number of time steps per RF cycle is fixed at $spc = 1000$.

张和塌缩的反相运动。一阶迎风通量显著高估鞘层厚度，周期平均鞘层厚度约为 3.271 mm，而基准解约为 2.468 mm，高出约 32.5%，如表1所示。这与其低估体区电子密度的结果一致：当电子密度被低估时，准中性体区向中心收缩，为满足空间电荷平衡，鞘层边界被推向等离子体主体区，表现为鞘层增厚。TVD 通量在低压粗网格下也存在一定密度低估，因此其鞘层厚度也较基准解偏大。中心差分通量在该工况下所得鞘层厚度偏小，但结合后续电子温度结果可以看到，这种偏小并不代表更准确的鞘层物理，而是与边界附近的数值振荡有关。在 2 Torr / 200 V 条件下，SG 通量给出的周期平均鞘层厚度仅约 1.489 mm，而基准解约为 2.484 mm，低估约 40.1%。这与 SG 通量在该工况下高估电子密度相对应。这一现象可以从 SG

界面通量的局部解析近似加以理解：其解析构造基于相邻网格节点之间电场和粒子通量为常量的假设。在高压强电场工况下，鞘层空间电荷区被压缩，电场和密度空间梯度急剧增大；当粗网格难以充分分辨局部梯度变化时，该局部近似的适用性下降，可能导致界面漂移输运偏强，进而引发模型内部“高通量—高功率—高电离—高密度”的正反馈。此外一阶迎风通量则略微高估鞘层厚度，而 TVD 通量所得鞘层厚度更接近基准解。

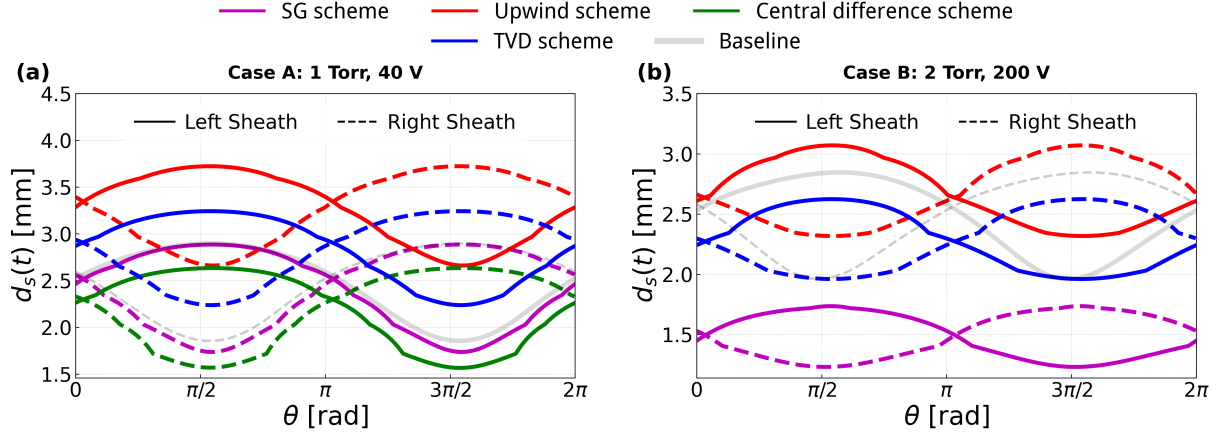


图 4 不同对流格式下瞬态鞘层厚度 $d_s(t)$ 在一个射频周期内的演化情况（空间网格数 $n_x = 64$ ）：(a) 为低压工况（Case A: 1 Torr, 40 V）；(b) 为较高压工况（Case B: 2 Torr, 200 V）。图中实线代表左极板鞘层，虚线代表右极板鞘层，灰色粗线表示高分辨率基准解（Baseline）。注：中心差分格式在 Case B 中因计算发散未展示有效数据。射频周期时间步数固定为 $spc = 1000$ 。

Fig. 4. Evolution of transient sheath thickness $d_s(t)$ over one RF cycle obtained with different convection schemes ($n_x = 64$): (a) corresponds to the low-pressure case (Case A: 1 Torr, 40 V); (b) corresponds to the relatively high-pressure case (Case B: 2 Torr, 200 V). Solid lines represent the left sheath, and dashed lines represent the right sheath. The thick gray line denotes the high-resolution baseline. Note that the central difference scheme diverges in Case B. The number of time steps per RF cycle is fixed at $spc = 1000$.

鞘层厚度误差的物理后果比密度峰值误差更直接。RF-CCP 中许多电子加热过程发生在鞘层边缘或与鞘层运动密切相关，包括鞘层扩张加热、随机加热、欧姆加热的局域增强以及鞘层非线性激发等。如果粗网格通量离散导致鞘层厚度被人为放大或压缩，就会改变电压降分布、电场峰值位置以及电子与运动鞘层相互作用的相位关系。这样得到的“加热区域变宽”“近壁强场增强”或“鞘层响应提前/滞后”等结论，可能并不对应真实放电机理，而是空间准确性不足造成的物理误判。

图5给出了粗网格 ($n_x = 64$) 下周期平均电子吸收功率的空间分布。电子吸收功率由 $P_e = -e\Gamma_e \cdot E$ 决

表 1 不同工况与对流格式下的周期平均鞘层厚度对比

Table 1. Comparison of period-averaged sheath thicknesses under different cases and convection schemes.

工况	数值格式	$d_{s,\text{left}}/\text{mm}$	$d_{s,\text{right}}/\text{mm}$
Case A (1 Torr, 40 V)	Baseline	2.468	2.468
	SG scheme	2.411	2.411
	Upwind scheme	3.271	3.271
	Central difference scheme	2.195	2.196
	TVD scheme	2.823	2.823
Case B (2 Torr, 200 V)	Baseline	2.484	2.484
	SG scheme	1.489	1.489
	Upwind scheme	2.680	2.680
	TVD scheme	2.284	2.283

定。因此，功率吸收误差同时来自两个方面：一是电子通量 (Γ_e) 的误差，二是电场 (E) 的误差。前者由通量离散直接决定，后者又通过密度分布和泊松方程受到影响。在 1 Torr / 40 V 条件下，不同通量构造方式均能给出鞘层附近吸收功率增强的基本特征，但峰值大小和空间位置存在差异。一阶迎风通量由于低估电子通量并放大鞘层厚度，使得加热区域向主体区方向偏移，同时局域峰值被削弱。中心差分通量在低压工况下的吸收功率曲线接近基准解，但其后续电子温度结果显示鞘层边缘存在强烈非物理振荡。TVD 格式在鞘层区域显示吸收功率出现一个小峰值，而该峰值在物理上并不能解释为新的物理现象。在 2 Torr / 200 V 条件下，SG 通量计算的吸收功率在鞘层区域表现出更强的吸收功率。这是由于 SG 通量在该工况下压缩鞘层，大部分射频电压降集中在更窄的空间范围内，导致近电极区域局域电场增强。同时，图 3 已显示 SG 通量在该区域高估电子通量。由于 (P_e) 同时正比于电子通量和电场，两者误差叠加后，会导致近电极区域吸收功率显著偏大。仅从图 5 出发，可能会误判为较高气压条件下存在更强的近壁电子加热机制，但在这里，更合理的解释是粗网格下 SG 通量改变了鞘层电场和电子通量的幅值，从而产生了非物理的吸收功率增强。TVD 格式计算的吸收功率和低气压类似，在鞘层区域出现了非物理的吸收加热峰值；迎风格式计算的吸收功率分布在数值更接近基准解。

图 6 给出了粗网格 ($n_x = 64$) 条件下周期平均电子温度的空间分布。平均电子温度是连接电子输运与电离源项的关键变量，因为电离速率系数 (k_i) 对平均电子温度高度敏感。即使电子密度误差并不大，平均

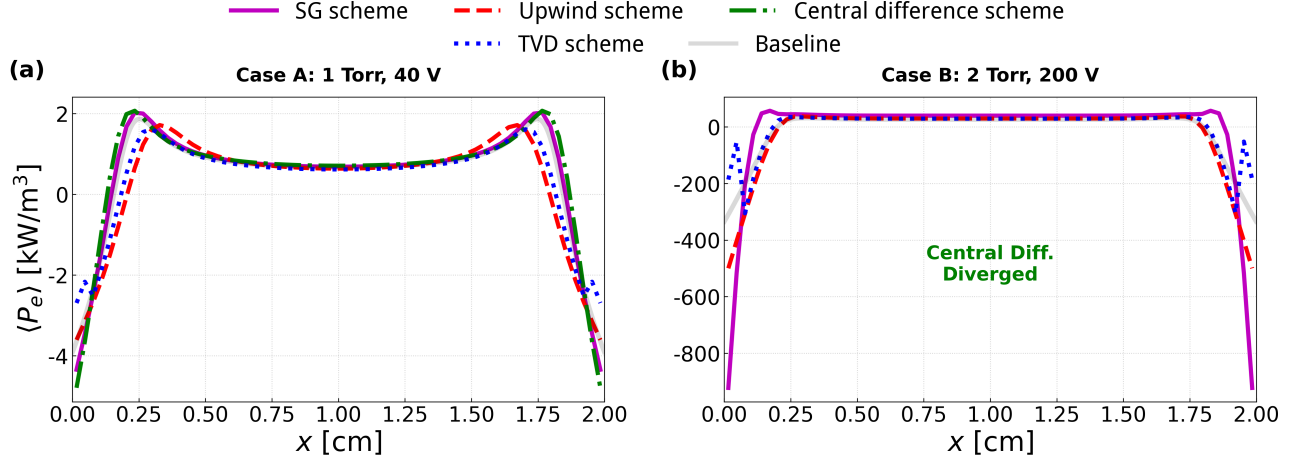


图 5 不同对流格式下周期平均电子吸收功率密度 $\langle P_e \rangle$ 的空间剖面分布（空间网格数 $n_x = 64$ ）：(a) 为低压工况（Case A: 1 Torr, 40 V）；(b) 为较高压工况（Case B: 2 Torr, 200 V）。灰色粗线表示高分辨率基准解（Baseline）。注：中心差分格式在 Case B 中因计算发散未展示有效数据。射频周期时间步数固定为 $s_{pc} = 1000$ 。

Fig. 5. Spatial profiles of the period-averaged electron absorbed power density $\langle P_e \rangle$ obtained with different convection schemes ($n_x = 64$): (a) corresponds to the low-pressure case (Case A: 1 Torr, 40 V); (b) corresponds to the relatively high-pressure case (Case B: 2 Torr, 200 V). The thick gray line denotes the high-resolution baseline. Note that the central difference scheme diverges in Case B. The number of time steps per RF cycle is fixed at $s_{pc} = 1000$.

电子温度的局部偏差也可能通过 $(k_i(\bar{\varepsilon}_e))$ 放大为明显的电离源项误差。在 1 Torr / 40 V 条件下，SG、一阶迎风 and TVD 通量在主体区平均电子温度上总体接近基准解，但在鞘层附近存在差异。一阶迎风通量在近鞘层区域低估电子平均温度约 0.5–1.0 eV，这与其削弱鞘层边缘电子通量和电子吸收功率的趋势一致。这种看似不大的平均温度低估会降低局域电离源项，从而与密度低估形成反馈。中心差分通量在低压工况下出现最明显的问题是在两侧鞘层边缘附近激发出超过 16 eV 的尖峰式振荡。这种高电子温度结构不应被解释为真实的鞘层电子加热增强。这种峰值空间位置靠近强梯度区域，且幅值远超其他通量构造方式和基准解，说明它主要是中心差分在粗网格下缺乏耗散、无法稳定处理鞘层边缘强梯度而产生的数值振荡。如果将这种振荡当作物理加热峰，则会错误推断出强烈的边界电子加热和局域电离增强。在 2 Torr / 200 V 条件下，中心差分通量无法得到稳定解。SG 通量则出现全局电子平均温度偏高，约比基准解高 0.5–1.0 eV，而迎风格式展示的电子温度偏低。TVD 通量计算出电子温度整体更接近基准解。

图 7 给出了粗网格下周期平均电离源项的空间分布。在 1 Torr / 40 V 条件下，基准解显示电离源项在主体区分布较宽，并在靠近两侧鞘层边缘附近增强。这与低压 RF-CCP 中电子能够在较大空间范围内

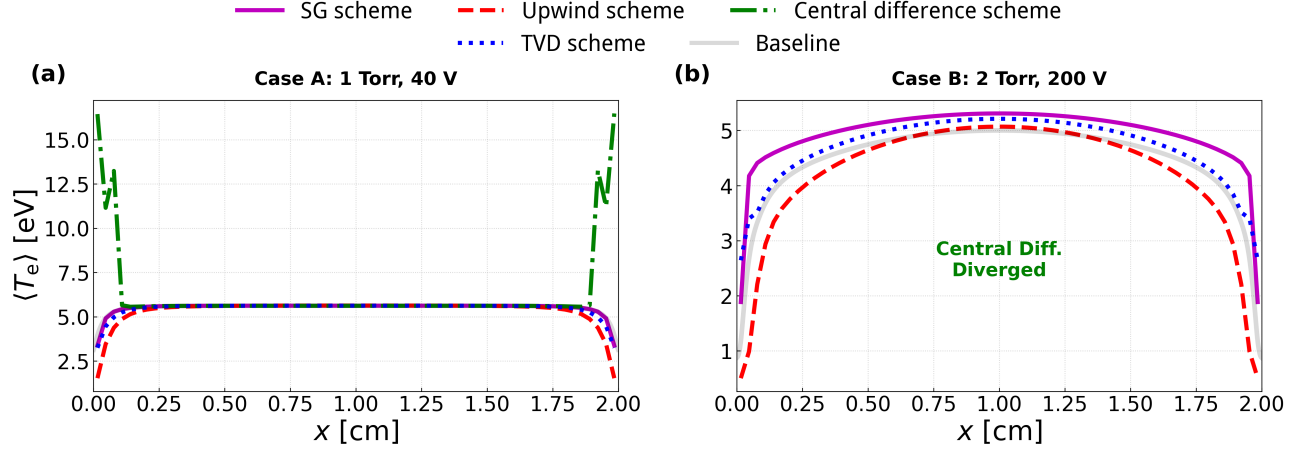


图 6 不同对流格式下周期平均电子温度 $\langle T_e \rangle$ 的空间剖面分布（空间网格数 $n_x = 64$ ）：(a) 为低压工况（Case A: 1 Torr, 40 V）；(b) 为较高压工况（Case B: 2 Torr, 200 V）。灰色粗线表示高分辨率基准解（Baseline）。注：中心差分格式在 Case B 中因计算发散未展示有效数据。射频周期时间步数固定为 $spc = 1000$ 。

Fig. 6. Spatial profiles of the period-averaged electron temperature $\langle T_e \rangle$ obtained with different convection schemes ($n_x = 64$): (a) corresponds to the low-pressure case (Case A: 1 Torr, 40 V); (b) corresponds to the relatively high-pressure case (Case B: 2 Torr, 200 V). The thick gray line denotes the high-resolution baseline. Note that the central difference scheme diverges in Case B. The number of time steps per RF cycle is fixed at $spc = 1000$.

获得能量并产生电离的特征一致。SG 通量较好再现了这一分布。一阶迎风通量由于低估电子密度和近鞘层平均电子温度，使得电离源项整体偏低。TVD 通量也存在一定低估，中心差分通量在靠近电极处出现虚假的局域电离峰，这与图 6 中鞘层边缘周期平均电子温度的非物理振荡直接相关。因此，该局域峰不应被解释为真实的电离增强，而是由粗网格中心差分振荡通过 $(k_i(\bar{\epsilon}_e))$ 放大后形成的数值伪影。在 2 Torr / 200 V 条件下，通量构造方式对电离源项的影响更加显著。SG 通量的电离源项峰值明显高于基准解，并且向电极方向偏移。这一结果可以解释为 SG 通量在粗网格下高估近鞘层电子通量和电子密度，压缩鞘层厚度，使电场和电子吸收功率集中在更靠近电极的区域，同时电子平均温度整体偏高，最终导致电离源项在近壁区域被明显放大。由于电离源项反过来又增加电子产生率，该误差会进一步维持偏高的电子密度分布。一阶迎风通量和 TVD 通量在较高压工况下的电离源项峰值低于基准解，约为基准解的一半量级。这说明粗网格下即使密度结构看似合理，源项强度也可能存在显著误差。

上述结果表明，不同通量构造方式并不存在对所有工况都最优的简单结论。一阶迎风通量的主要优势

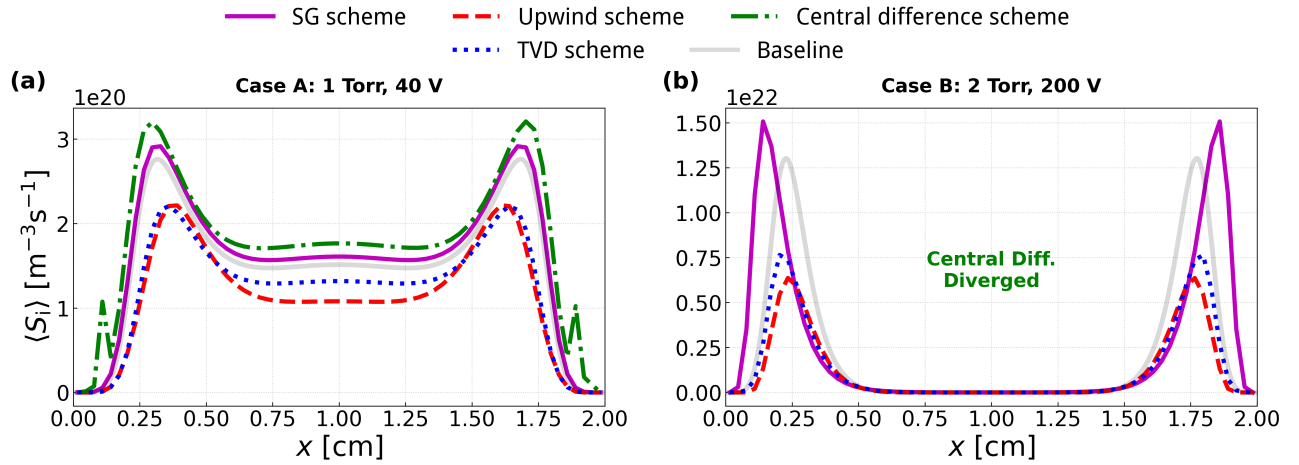


图 7 不同对流格式下周期平均电离源项 $\langle S_i \rangle$ 的空间剖面分布（空间网格数 $n_x = 64$ ）：(a) 为低压工况（Case A: 1 Torr, 40 V）；(b) 为较高压工况（Case B: 2 Torr, 200 V）。灰色粗线表示高分辨率基准解（Baseline）。注：中心差分格式在 Case B 中因计算发散未展示有效数据。射频周期时间步数固定为

$$spc = 1000。$$

Fig. 7. Spatial profiles of the period-averaged ionization source term $\langle S_i \rangle$ obtained with different convection schemes ($n_x = 64$): (a) corresponds to the low-pressure case (Case A: 1 Torr, 40 V); (b) corresponds to the relatively high-pressure case (Case B: 2 Torr, 200 V). The thick gray line denotes the high-resolution baseline. Note that the central difference scheme diverges in Case B. The number of time steps per RF cycle is fixed at $spc = 1000$.

是稳定性强，不易产生负密度或发散，因此可用于初始测试和获得稳态初值。但其人工耗散会在粗网格下削弱电子通量和局域功率吸收，导致电子密度、电离源项和鞘层厚度出现系统性偏差。因此，在需要定量预测密度、功率或电离位置时，不宜仅依赖粗网格迎风结果。中心差分通量在光滑区域具有较高形式精度，但在 RF-CCP 的鞘层边缘、电子密度陡降区和强场区，粗网格下容易产生非物理振荡。该振荡会通过平均电子温度和电离速率系数被进一步放大，表现为虚假的电子温度峰和电离源峰。因此，中心差分通量只有在空间网格足够细、能够分辨鞘层边缘梯度时才适合用于定量分析。SG 通量在低压 1 Torr / 40 V 条件下表现良好，能够在粗网格下较准确地再现电子密度和电子通量结构，但在 2 Torr / 200 V 较高压粗网格条件下，SG 通量明显高估电子密度、压缩鞘层并增强近电子吸收功率和电离源项。这提示 SG 通量虽具有良好稳定性，但仍需要进行网格收敛和物理量交叉检查。TVD 通量通过限制器在稳定性和分辨率之间折中，在两种工况下整体表现较稳健，尤其能够避免中心差分的强振荡和 SG 通量在较高压粗网格下的严重高估。然而，TVD 通量在强梯度区域可能局部退化并引入一定耗散，因此在低压粗网格下仍可能低估电子密度和电离源项。对于多维模拟或大规模参数扫描，TVD 通量可作为较稳健的默认选择，但仍不

能替代网格收敛分析。

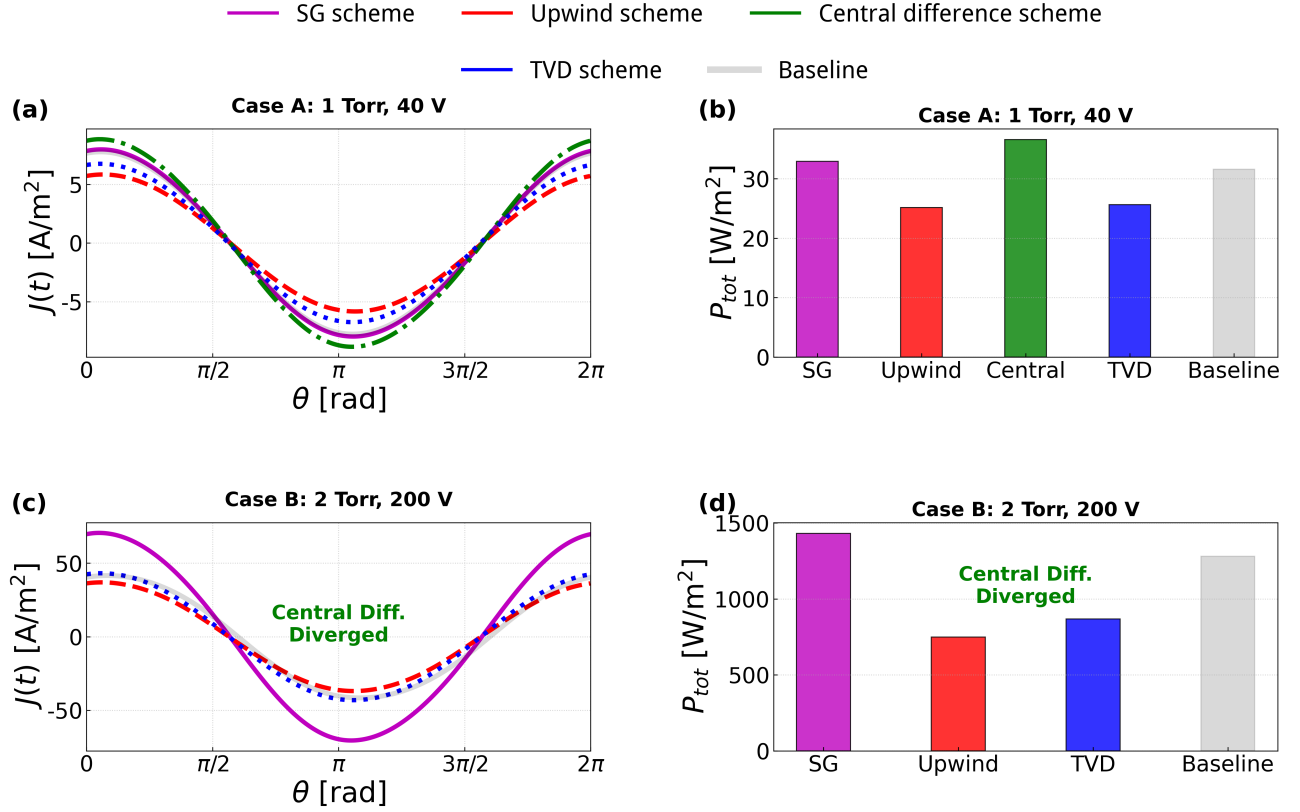


图 8 不同对流格式下电流密度 $J(t)$ 的含时演化及总功率密度 P_{tot} 对比 (空间网格数 $n_x = 64$): (a) 与 (b) 分别为低压工况 (Case A: 1 Torr, 40 V) 下的 $J(t)$ 含时演化与 P_{tot} 柱状图; (c) 与 (d) 分别为较高压工况 (Case B: 2 Torr, 200 V) 下的 $J(t)$ 含时演化与 P_{tot} 柱状图。图中灰色粗线及灰色柱体表示高分辨率基准解 (Baseline)。注: 中心差分格式在 Case B 中因计算发散未展示有效数据。射频周期时间步数固定为 $spc = 1000$ 。

Fig. 8. Time evolution of the current density $J(t)$ and bar charts of the period-averaged total power density P_{tot} obtained with different convection schemes ($n_x = 64$): (a) and (b) correspond to $J(t)$ and P_{tot} for the low-pressure case (Case A: 1 Torr, 40 V); (c) and (d) correspond to $J(t)$ and P_{tot} for the relatively high-pressure case (Case B: 2 Torr, 200 V). The thick gray lines and gray bars denote the high-resolution baseline. Note that the central difference scheme diverges in Case B. The number of time steps per RF cycle is fixed at $spc = 1000$.

图 8 给出了不同通量构造方式下总电流密度 ($J(t)$) 的含时演化以及系统总功率密度 (P_{tot})。总电流是 RF-CCP 实验中较容易获得的宏观诊断量之一, 总功率密度则直接关系到放电维持和工艺参数匹配。因此, 如果粗网格通量离散导致总电流和功率密度预测偏差, 即使电子密度剖面看似合理, 也会影响模拟结果与实验测量之间的比较。在 1 Torr / 40 V 条件下, 各通量构造方式所得 ($J(t)$) 含时演化和 (P_{tot}) 整体接近基准解, 说明低气压低电压工况下, 系统宏观电流响应对通量离散的敏感性相对较弱。在 2 Torr /

200 V 条件下, 通量构造方式对电流和功率的影响明显放大。SG 通量所得 (P_{tot}) 约为 $1400\text{W}/\text{m}^2$, 高于基准解约 12%, 且 ($J(t)$) 峰值明显偏高。这与前文 SG 通量高估电子密度、压缩鞘层并增强近电子吸收功率的结果一致。较高的系统吸收功率意味着模型中有更多能量输入电子群体, 从而可以支撑更强电离源项和更高等离子体密度。换言之, SG 通量在该工况下形成了“高通量—高功率—高电离—高密度”的正反馈式数值偏差。一阶迎风通量和 TVD 通量在该工况下所得 ($J(t)$) 含时演化与基准解较为接近, 但 (P_{tot}) 明显低于基准解。这说明仅比较电流含时演化仍不足以判断模拟是否可信。

综上所述, 在 RF-CCP 流体模拟的可靠性评估中, 必须严格区分数值层面的稳定性条件与物理层面的准确性条件。前者仅代表微分方程的求解在时间演化上达到了周期性稳态 (表现为残差收敛或相邻周期高度重复); 而后者则要求该收敛解必须忠实地反映真实的底层放电物理机制。本文的对比结果表明, 在粗网格分辨率下, 空间离散差异引入的误差往往不会导致计算直接发散, 而是在各个耦合的物理参数上引发系统性差异, 最终导致模型虽然收敛至稳态, 但是在该稳态下反映的物理状态并不真实可靠。因此, 仅将周期稳态收敛作为流体模拟可靠性的充要标准, 存在着将数值误差误判为真实物理效应的显著风险。为确保模型的物理保真, 需要基于多参量全面验证评估。在检查周期平均密度剖面的同时, 需系统性地追溯电子通量的时空演化、鞘层厚度的动态扩张与塌缩、局域功率吸收、电子温度剖面以及终端电流含时演化与电离源项分布。只有综合校验这些核心物理参量, 深入追溯其背后细致的放电力学演化, 才能在整体上排除数值伪影的干扰, 确保 RF-CCP 流体模拟反映出真实的放电过程。

4 结 论

本文针对一维 13.56 MHz 氩气 RF-CCP 放电, 建立了基于有限体积法和交错网格的漂移-扩散流体模型, 在统一物理模型、边界条件和时间推进设置下, 比较了 SG 指数通量、一阶迎风通量、中心差分通量和 Van Leer TVD 通量限制格式对放电物理量预测可信性的影响。通过 1 Torr / 40 V (低压) 和 2 Torr / 200 V (高压) 两组典型工况的计算表明, 在粗网格条件下, 数值解达到周期稳态并不意味着所得结果具有物理可信性; 不同通量构造方式会显著改变电子密度、电子通量、鞘层厚度、电子吸收功率、平均电子温度和电流演变及电离源项分布。一阶迎风通量由于人工耗散较强, 会削弱鞘层边缘附近的电子输运和电子吸收功率, 使电子密度和电离源项偏低。中心差分通量在粗网格强梯度鞘层区域容易产生非物理振荡, 其在低压工况下形成的局域平均电子温度峰和电离源峰应理解为数值伪影, 而在较高压工况下则无法获得稳定解。SG 通量在粗网格低压条件下能够较好再现基准解, 但在高压工况粗网格条件下会给出偏强的电子

通量和偏高的电子密度，使鞘层边界向电极方向移动，周期平均鞘层厚度较基准解降低约 40.1%，并进一步增强近电极区域的电子吸收功率和电离源项。TVD 通量整体表现较稳健，能够抑制中心差分振荡并避免 SG 通量在较高压粗网格下的明显高估，但在强梯度区域仍可能因限制器耗散而低估部分密度和源项。上述结果表明，RF-CCP 流体模拟中的空间网格和界面通量构造方式不应被视为单纯的数值实现细节。在粗网格条件下，通量离散误差可通过电子连续性方程、Poisson 方程和电子能量方程中的耦合关系，引起电子输运、空间电荷与电场、鞘层结构、功率吸收、电子平均能量、电离源项和电子密度等多个物理量的相关偏差。因此，达到周期稳态只能说明数值解在时间演化上已经收敛，不能单独保证其相对于充分分辨基准解的准确性。还应结合网格收敛性，并综合比较电子通量、鞘层演化、功率吸收、电流和电离源项等物理量，以避免将空间离散误差误判为放电物理机制的变化。需要说明的是，本文各通量格式的定量偏差及其优劣比较主要针对本文所考察的一维 13.56 MHz 氩气的上述两类典型放电状态，在其他气体或放电参数条件下，各格式的误差幅度、偏差方向及相对表现可能有所不同。

附录 A 界面通量离散格式的数学定义

本附录详述了正文中提到的四种数值离散格式。对于一维离散体系，定义网格节点 i 与 $i+1$ 界面处的粒子通量为 $\Gamma_{i+1/2}$ ，界面处的迁移率为 $\mu_{i+1/2}$ ，电场为 $E_{i+1/2}$ ，网格步长为 Δx 。

A.1 Scharfetter–Gummel (SG) 指数格式

该格式引入两个辅助函数对相邻网格节点的密度进行加权，界面处的通量表达为：

$$\Gamma_{i+1/2} = -\frac{D_{i+1/2}}{\Delta x} [f_1(z_{i+1/2})n_{i+1} - f_2(z_{i+1/2})n_i], \quad (\text{A1})$$

其中， $z_{i+1/2}$ 定义为：

$$z_{i+1/2} = \text{sgn}(q) \frac{\mu_{i+1/2} E_{i+1/2} \Delta x}{D_{i+1/2}}. \quad (\text{A2})$$

辅助函数 $f_1(z)$ 和 $f_2(z)$ 分别定义为：

$$f_1(z) = \frac{z}{\exp(z) - 1}, \quad f_2(z) = \frac{z \exp(z)}{\exp(z) - 1}. \quad (\text{A3})$$

A.2 一阶迎风格式

一阶迎风格式根据界面处粒子漂移速度的符号选择上游节点的密度，界面通量写为：

$$\Gamma_{i+1/2} = \text{sgn}(q)\mu_{i+1/2}E_{i+1/2} \begin{cases} n_i, & \text{sgn}(q)\mu_{i+1/2}E_{i+1/2} \geq 0 \\ n_{i+1}, & \text{sgn}(q)\mu_{i+1/2}E_{i+1/2} < 0 \end{cases} - D_{i+1/2} \frac{n_{i+1} - n_i}{\Delta x} \quad (\text{A4})$$

A.3 中心差分格式

中心差分格式对界面对流项进行算术平均：

$$\Gamma_{i+1/2} = \text{sgn}(q)\mu_{i+1/2}E_{i+1/2} \frac{n_i + n_{i+1}}{2} - D_{i+1/2} \frac{n_{i+1} - n_i}{\Delta x} \quad (\text{A5})$$

A.4 TVD 格式 (van Leer 限制器)

TVD 格式通过引入通量限制器 $\varphi(r)$ 对界面对流密度进行非线性重构。本文采用 van Leer 限制器：

$$\varphi(r) = \frac{r + |r|}{1 + |r|} \quad (\text{A6})$$

梯度比 $r_{i+1/2}$ 的定义取决于界面处的流向：

$$r_{i+1/2} = \begin{cases} \frac{n_i - n_{i-1}}{n_{i+1} - n_i}, & \text{sgn}(q)\mu_{i+1/2}E_{i+1/2} \geq 0 \\ \frac{n_{i+2} - n_{i+1}}{n_{i+1} - n_i}, & \text{sgn}(q)\mu_{i+1/2}E_{i+1/2} < 0 \end{cases} \quad (\text{A7})$$

最后界面通量写为一阶迎风密度值 (n^{low}) 与二阶中心差分密度值 (n^{high}) 的非线性组合：

$$\Gamma_{i+1/2} = \text{sgn}(q)\mu_{i+1/2}E_{i+1/2} \left[(1 - \varphi_{i+1/2})n_{i+1/2}^{low} + \varphi_{i+1/2}n_{i+1/2}^{high} \right] - D_{i+1/2} \frac{n_{i+1} - n_i}{\Delta x} \quad (\text{A8})$$

参考文献

- [1] Lieberman M A, Lichtenberg A J 2005 *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing* 2nd ed. (Hoboken, NJ: Wiley-Interscience) pp1-22
- [2] Surendra M, Graves D B 1991 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **19** 144
- [3] Turner M M, Derzsi A, Donkó Z, Eremin D, Kelly S J, Lafleur T, Mussenbrock T 2013 *Phys. Plasmas* **20** 013507

- [4] Vass M, Palla P, Hartmann P 2022 *Plasma Sources Sci. Technol.* **31** 064001
- [5] Graves D B 1987 *J. Appl. Phys.* **62** 88
- [6] Boeuf J P 1987 *Phys. Rev. A* **36** 2782
- [7] Gogolides E, Sawin H H 1992 *J. Appl. Phys.* **72** 3971
- [8] Passchier J D P, Goedheer W J 1993 *J. Appl. Phys.* **74** 3744
- [9] Boeuf J P, Pitchford L C 1995 *Phys. Rev. E* **51** 1376
- [10] Alves L L, Marques L 2012 *Plasma Phys. Control. Fusion* **54** 124012
- [11] Tsendin L D 1995 *Plasma Sources Sci. Technol.* **4** 200
- [12] Donkó Z 2011 *Plasma Sources Sci. Technol.* **20** 024001
- [13] Becker M M, Kählert H, Sun A, Bonitz M, Loffhagen D 2017 *Plasma Sources Sci. Technol.* **26** 044001
- [14] Hagelaar G J M, Kroesen G M W 2000 *J. Comput. Phys.* **159** 1
- [15] Scharfetter D L, Gummel H K 1969 *IEEE Trans. Electron Devices* **16** 64
- [16] van Leer B 1979 *J. Comput. Phys.* **32** 101
- [17] Barnes M S, Cotler T J, Elta M E 1988 *J. Comput. Phys.* **77** 53
- [18] Hammond E P, Mahesh K, Moin P 2002 *J. Comput. Phys.* **176** 402
- [19] Lin Y H, Adomaitis R A 2001 *J. Comput. Phys.* **171** 731
- [20] Davoudabadi M, Shrimpton J S, Mashayek F 2009 *J. Comput. Phys.* **228** 2468

Numerical Stability and Reliability Study of Fluid Simulations for Low-Pressure Capacitively Coupled Discharges*

JIANG Senzhong¹⁾# LI Jingyu¹⁾# ZHANG Yifan²⁾ SONG Yuanhong²⁾
JIA Wenzhu¹⁾†

1) (*College of Artificial Intelligence, Southwest University, Chongqing, 400715, China*)

2) (*Department of Physics, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China.*)

Abstract

Fluid models are widely used in macroscopic simulations of low-temperature gas discharges because they can describe plasma density, sheath motion, electron heating, ionization, and current response at a relatively low computational cost. However, in radio-frequency capacitively coupled plasmas (RF-CCPs), steep gradients in electron density and electric field, together with strong variations in charged-particle fluxes, occur near the oscillating sheath edges. Therefore, a numerically converged periodic solution does not necessarily guarantee physically reliable predictions. This work investigates how spatial resolution and interfacial flux discretization affect the predicted discharge behavior in a one-dimensional 13.56 MHz argon RF-CCP. A drift-diffusion fluid model based on the finite-volume method and a staggered grid is employed. The same governing equations, boundary conditions, transport and reaction data, and time-advancement strategy are used in all simulations so that the observed differences can be attributed to

* This work was supported by the National Key R&D Program of China (Grant No. 2025YFF0512000), the National Natural Science Foundation of China under (Grant No. 12475202)

These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: jiawenzhu@swu.edu.cn

The First Author. E-mail: cheemscn@gmail.com

the spatial discretization of charged-particle transport. Two representative discharge conditions are considered: 1 Torr/40 V and 2 Torr/200 V. Four commonly used interfacial flux treatments are compared, namely the Scharfetter–Gummel exponential flux, the first-order upwind flux, the central-difference flux, and the van Leer total-variation-diminishing flux-limiter scheme. The analysis focuses on their physical consequences for electron flux, sheath thickness, electron power absorption, mean electron temperature, ionization source term, electron density, and current density. The results show that, under coarse-grid conditions, the influence of the interfacial flux treatment is first manifested in the electron-flux distribution. Through the coupling among the electron continuity equation, the Poisson equation, and the electron energy equation, flux-discretization errors produce correlated deviations in electron transport, space charge and electric field, sheath structure, electron power absorption, mean electron temperature, ionization source term, and electron density. Different flux treatments introduce distinct systematic biases into the predicted physical quantities. The first-order upwind flux introduces strong numerical dissipation, which weakens electron transport near the sheath edges and leads to underestimation of electron power absorption, ionization source term, and electron density. The central-difference flux is prone to nonphysical oscillations in steep-gradient sheath regions; in the 1 Torr/40 V case, it produces artificial peaks in the mean electron temperature and ionization source term, whereas in the 2 Torr/200 V case, the simulation fails to reach a stable periodic state. The Scharfetter–Gummel flux performs reasonably well on the coarse grid in the 1 Torr/40 V case, but in the 2 Torr/200 V case, it overestimates the electron flux and electron density, shifts the sheath boundary toward the electrode, and reduces the cycle-averaged sheath thickness by approximately 40.1% relative to the reference solution. This sheath compression further enhances near-electrode electron power absorption and local ionization. The van Leer TVD flux exhibits comparatively robust behavior by suppressing central-difference oscillations and avoiding the strong overestimation produced by the Scharfetter–Gummel flux, although limiter-induced dissipation may still lead to underestimation of the electron density and ionization source term in steep-gradient regions. These findings demonstrate that spatial grid resolution and interfacial flux discretization should not be regarded as minor implementation details in RF-CCP fluid simulations. For coarse-grid simulations, multidimensional modeling, and large-scale parameter scans, the reliability of a fluid solution should be assessed by

jointly examining electron flux, sheath evolution, electron power absorption, mean electron temperature, ionization source term, electron density, and current density.

Keywords: Radio-frequency capacitively coupled plasma; Fluid model; Sheath; Ionization source term

录用稿件，非最终出版稿