

电子回旋共振放电中电子与微波互作用特性的 粒子模拟和蒙特卡罗碰撞模拟^{*}

金晓林[†] 黄 桃 廖 平 杨中海

(电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

(2008 年 3 月 31 日收到, 2008 年 12 月 11 日收到修改稿)

对电子回旋共振 (ECR) 放电电离过程中的电子与微波互作用特性进行了理论分析与数值模拟. 采用粒子模拟 (PIC) 方法描述带电粒子与微波的互作用, 采用蒙特卡罗碰撞 (MCC) 方法描述粒子间碰撞过程及带电粒子与边界的相互作用. 编写了准三维的 PIC/MCC 数值模拟程序, 并对放电过程中电子能量与微波场随时间、空间的演化进行了数值诊断.

关键词: 电子回旋共振放电, 粒子模拟, 蒙特卡罗方法, 电离

PACC: 5265, 5280P, 5250

1. 引 言

电子回旋共振 (ECR) 等离子体源由于具有高密度、高电离度、低运行气压、大体积、均匀、无电极污染、可产生高密度高电荷态离子束^[1]等优点而十分引人注目, 它被广泛地应用于微电子工业^[2-5]、原子物理、核物理、高能物理及有关的工业领域. 由于 ECR 等离子体源的广泛应用, 对其需求与日剧增, 因此对 ECR 放电及其生成等离子体源特性的研究有着非常重要的意义.

在实验方面, 人们已经可以通过 Langmuir 探针^[6]、Doppler-Shifted 激光感应荧光计^[7]、激光 Thomson 散射^[8]、激光消融技术^[9]、微波干涉仪^[10]、能量分析仪^[11]、激光光谱^[12]等来进行诊断. 但由于 ECR 放电过程复杂、瞬态变化极快、控制参数繁多等因素, 使得仅仅利用实验是无法深刻理解其物理机制和瞬态过程的; 而且诸如 ECR 加热、粒子的输运过程、带电粒子分布等微观和瞬态特征, 在实际应用中又至关重要. 这些都需要对 ECR 放电进行深入细致的理论、计算机模拟研究. 但是至今为止, 理论和计算机模拟工作相对较少, 且其中绝大多数的工

作集中于对 ECR 源稳态的描述, 而对 ECR 放电的瞬态变化过程、特别是电离过程研究很少. Muta 等^[13]采用一维流体模型、Yasaka 等^[14]采用三维流体模型模拟了低温 ECR 等离子体的产生机制. Niimura 等^[15]以交换不稳定性 (ICI) 理论为基础, 采用流体模型模拟了热电子密度和电势阱随时间的演化. Kawai 等^[16]结合实验和理论模拟, 采用一维流体模型研究了外加静磁场形态对产生等离子体的特性的影响, 但由于采用流体模型而无法给出 ECR 放电的细节. Koh 等^[17]采用一维粒子模拟 (PIC) 和蒙特卡罗碰撞 (MCC) 方法对 ECR 放电过程进行了模拟, 探讨了部分电离特性, 但是由于 ECR 放电中电子回旋共振的特征, 只有二维甚至是三维的模拟才较符合实际的物理过程. Jin 等^[18]采用准三维 PIC/MCC 方法并应用电磁模型, 对 ECR 放电过程进行了模拟, 得出电离过程中微波场形态和带电粒子相空间分布等微观和瞬态特性, 探讨了 ECR 加热的细节. 但各种放电参数对 ECR 放电及其生成等离子体特性的影响还有待深入研究.

本文在对 ECR 放电进行物理建模、理论分析的基础上, 对 ECR 放电从放电初期至放电稳态生成 ECR 等离子体的电离过程进行了准三维的 PIC/MCC

^{*} 高等学校博士学科点专项科研基金 (200806141034)、国家自然科学基金 (批准号: 10876005) 和电子科技大学青年科技基金 (批准号: JX0730) 资助的课题.

[†] E-mail: jinxiaolin@uestc.edu.cn

模拟与诊断.

2. 理论分析

我们以如图 1 所示 ECR 放电系统为基础,研究 ECR 放电的电离特性.

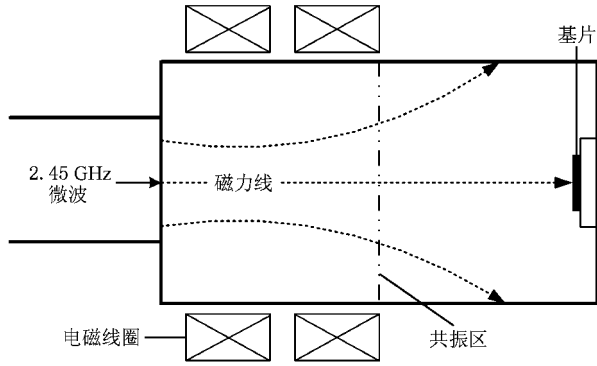


图 1 ECR 放电系统

微波通过 ECR 放电系统左端的微波窗注入圆柱形放电室,外加电磁线圈在放电系统内部产生轴向静磁场.放电室中充入工作气体.自然界中经常有高能宇宙射线、放射线、紫外线等,它们入射到放电

系统中会引起电离从而产生电子和离子,这种偶然产生的电子和离子成为启动放电的种子粒子.放电系统中的带电粒子会与微波发生自洽的相互作用(电磁场会对带电粒子产生作用,同时带电粒子作为电荷源和电流源又会激发电磁场),同时粒子之间以及粒子与各种放电系统边界之间会发生碰撞.当电子的能量超过中性粒子激发或电离阈值时,碰撞将使中性粒子激发或电离,电离碰撞不断发生会导致带电粒子数不断增加、发生雪崩,最后逐渐生成等离子体.

理论分析过程可以分成电磁场求解、源的求解、推动粒子运动、带电粒子与边界的相互作用和归一化五个部分.为了理论分析及计算机模拟的方便,在不同的理论公式及模拟算法中采用了不同坐标系(包括直角坐标系和圆柱坐标系),其中选定 z 轴为系统的纵向方向.

3. 数值模拟

根据上述的数理模型,采用如图 2 所示的模拟流程.

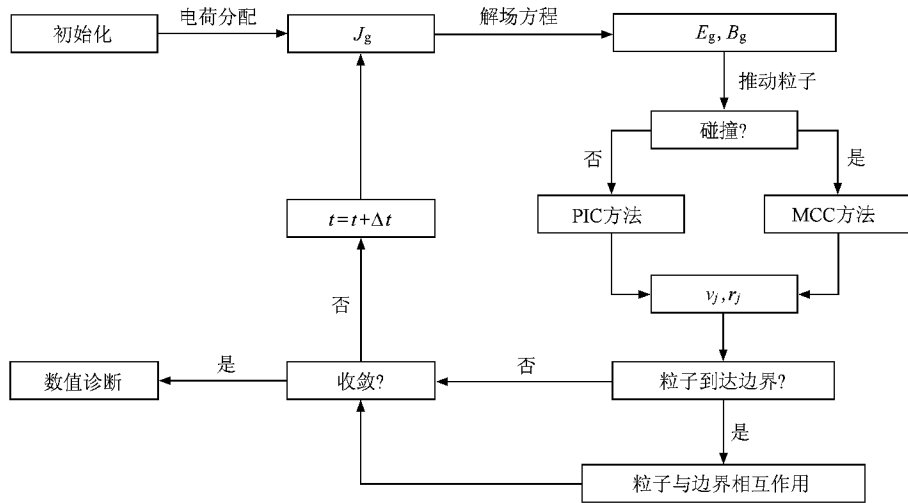


图 2 PIC/MCC 模拟流程图

模拟中考虑了等离子体的集体运动、粒子间的碰撞、带电粒子与边界的相互作用和微波场的传播.同时还考虑了电子与中性粒子的弹性、激发、电离碰撞,离子与中性粒子的弹性和电荷交换碰撞,碰撞截面均随能量而变化.总结和发展了适用于 ECR 放电(可应用在气体放电)计算机模拟的二次电子发射模型^[19].模拟了电子到达边界后被边界吸收、反射、产

生真二次电子的三种情形,且具体发生过程依赖于边界材料属性和电子的入射能量及入射角度.

编制了 ECR 放电电离过程的准三维 PIC/MCC 模拟程序.采用时域有限差分(FDTD)方法并结合总场/散射场体系激励源、吸收边界条件求解自洽微波场.模拟了微波在 ECR 放电系统中注入、传播、被边界吸收的全过程.采用 PIC 方法中的电磁模型描述

带电粒子与微波自洽的相互作用, MCC 方法描述粒子之间的碰撞过程及带电粒子与边界的相互作用, 从而将 PIC 方法与 MCC 方法相结合使得 PIC 模拟处理集体相互作用和 MCC 处理粒子碰撞优势得以兼顾.

4. 模拟结果与讨论

ECR 放电系统长为 0.245 m, 半径为 0.065 m. 工作气体为 Ar 气, 中性气压为 1.67 Pa. 频率为 2.45×10^9 Hz, 功率为 1.5×10^3 W, TE22 模式的微波由放电系统左端微波窗注入至放电系统内部. 模拟的 ECR 放电系统如图 1 所示, 其中外加静磁场形态如图 3 所示.

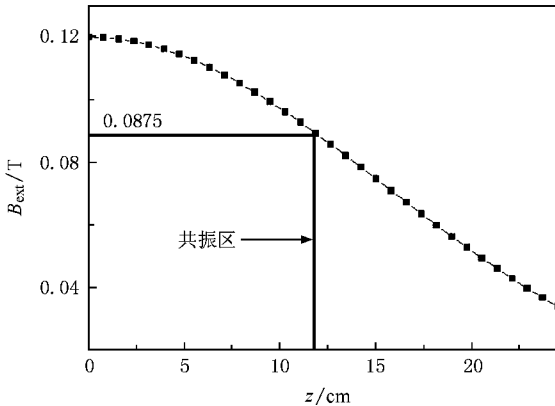


图 3 外加静磁场沿 z 轴的分布

模拟中为了减轻因离子与电子运动不同步所造成的计算负担, 在对离子循环跟踪过程中包含对电子跟踪的子循环, 电子时间步长 $\Delta t = 1.5 \times 10^{-12}$ s, 离子时间步长取为 3.0×10^{-10} s, 空间步长统一取为 2.395×10^{-4} m. 在如上的各种参数设定下, 模拟至时刻 $t = 750000\Delta t$ 时, 电磁场和动态带电粒子数收敛, 而且考察的带电粒子的各种统计分布也达到了稳定, 因此可认为此时放电模拟达到了稳态.

由于采用 PIC/MCC 方法来模拟 ECR 放电过程, 可以记录所有跟踪粒子从放电开始至放电稳态的微观运动状态. 由这些大量带电粒子相空间分布随时间和空间的演化, 可以直观清晰地看到 ECR 放电中电离、雪崩直至稳态生成的物理变化过程. 本文仅给出此过程中若干具有代表性的电子能量相空间分布及对应的微波场分布演化来描述 ECR 放电的电离特性.

4.1. 电子 ε - z 相空间分布

在磁化的电离气体或等离子体中, 带电粒子会在磁场的作用下作拉莫尔回旋运动, 对应的回旋频率为

$$\omega_c = \frac{qB}{m_0\gamma}, \quad (1)$$

式中 q 和 m_0 为带电粒子的电量和静止质量; $\gamma = [1 - (v/c)^2]^{-1/2}$ 为带电粒子的相对论因子, 其中 v 为带电粒子的速率, c 为光速; B 为带电粒子所在处的磁场幅值.

下面以电子为例进行讨论. 如果从外部施加某一频率的微波, 则做回旋运动的电子会与微波相互作用. 如果电子处于加速区, 微波会将能量传递给电子. 如果电子处于减速区, 电子会将能量传递给微波. 从 (1) 式知, 在考虑相对论效应的情况下, 当电子与场交换能量时, 由波场获得能量的电子, 其回旋频率减小, 而将能量传递给波场的电子, 其回旋频率增大.

由图 3 可以看出, 在 z 轴中心处外加静磁场为 8.75×10^{-2} T, 则此处电子的拉莫尔回旋频率 ω_{ce} 约等于入射微波的频率 (2.45×10^9 Hz), 即满足 $\omega \approx \omega_{ce}$. 这意味着电子的回旋运动与微波的周期性变化发生了共振 (因此该区域称为 ECR 区域, 此时对应于 z 轴中心附近的区域), 这使得位于加速区的电子被“直流式”地持续加速, 直到发生以下两种情况: 第一种情况是电子与其他粒子碰撞之后, 电子的运动方向发生改变. 如果这种改变导致电子的相位与微波的相位反向, 电子便进入减速区. 第二种情况是被持续加速的电子能量逐渐增大, 使得其回旋频率逐渐减小, 不再满足 $\omega \approx \omega_{ce}$, 即电子的回旋运动不再与微波的周期性变化共振, 终究会使电子的相位与微波的相位反向.

相反, 位于减速区被持续减速的电子也会在碰撞和回旋频率变化的情况下由减速区进入加速区. 由此可以得到, ECR 放电中的电子回旋共振加热伴有一定的随机性 (因为碰撞过程是随机的), 但由于放电空间充满了电子, 所以从统计意义上看, 只要存在 ECR 区域, 就一定会有一些电子被加速, 这可以从图 4 显示的放电初期 ($t = 2500\Delta t$) 电子能量 ε - z 相空间分布观察得出. 在 ECR 区域的电子能量有较大的增长, 相对其他区域有更多的高能电子.

从图 4 还可以看到, 电子 ε - z 相空间分布出现

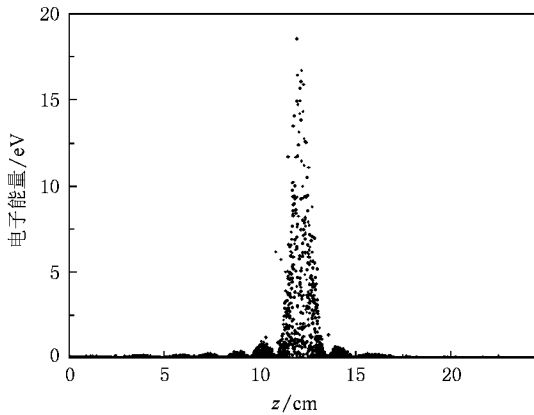


图4 电子 ε - z 相空间分布 $t = 2500\Delta t$, 微波功率为 1.5×10^3 W, 中性气压为 1.67 Pa

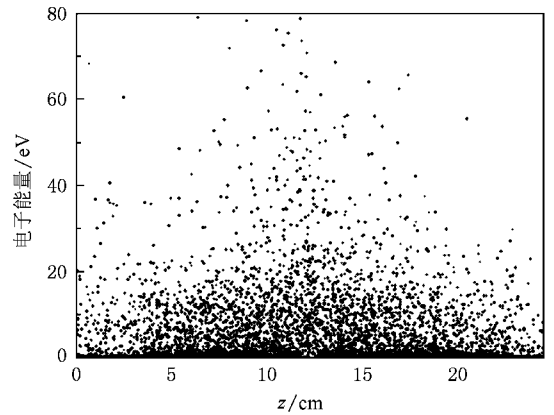


图6 电子 ε - z 相空间分布 $t = 100000\Delta t$, 微波功率为 1.5×10^3 W, 中性气压为 1.67 Pa

近似周期性的调制. 由(1)式知, 电子的回旋频率与它所在位置处的磁场幅值有关, 而该磁场幅值是由外加静磁场、微波场以及带电粒子激发场共同决定. 外加静磁场比微波场和激发场约大三个数量级, 所以 ECR 区域的位置取决于外加静磁场, 这可以从图 4 中 z 轴中心处电子能量增长看出. 不过尽管微波场和带电粒子激发场的幅值相对较小, 但在 ECR 区域的附近, 将它们带来的扰动叠加到外加静磁场之后, 就会形成一个窄的电子回旋共振区域. 由于微波场和激发场随时间在振荡, 所以它们对外加静磁场的扰动并不固定. 因此, 在 ECR 区域两端会出现一些较窄的且随时间变化的电子能量增长区域, 这种能量增长相对 ECR 区域要小得多.

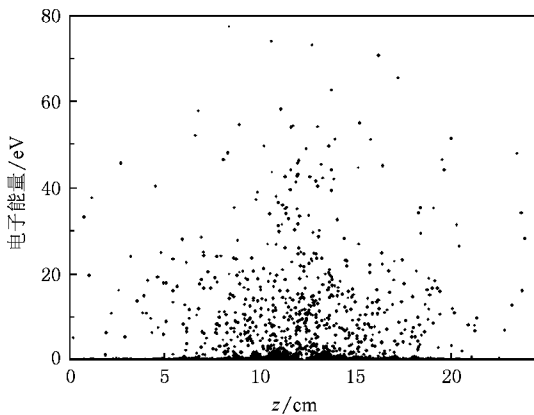


图5 电子 ε - z 相空间分布 $t = 25000\Delta t$, 微波功率为 1.5×10^3 W, 中性气压为 1.67 Pa

随着放电的进行, 因 ECR 机制获得加速的电子逐渐增多, 当其能量超过中性粒子激发或电离阈值时, 电子与中性粒子的碰撞就有可能使中性粒子激

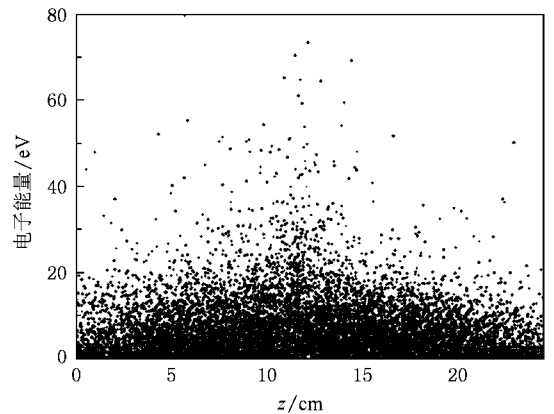


图7 电子 ε - z 相空间分布 $t = 750000\Delta t$, 微波功率为 1.5×10^3 W, 中性气压为 1.67 Pa

发或电离, 从而导致电子数逐渐增多. 与此同时, 起初仅位于 ECR 区域的高能电子会逐渐扩散至放电系统的整个区域. 这一演化过程可由图 5—图 7 中电子 ε - z 相空间分布看出.

4.2. 横向电场 E_t - z 分布

在一些具有代表性时刻($t = 2500\Delta t$, $25000\Delta t$, $100000\Delta t$, $750000\Delta t$) 横向电场 E_t 沿 z 轴的分布如图 8—图 11 所示.

由于在 ECR 放电的过程中, 一定波导模式(这里是圆柱波导 TE₂₂ 模式)的微波会持续地从放电系统左端的微波窗注入进放电系统, 并向放电系统右边界传播. 由于 ECR 放电的特性, 注入微波的能量经过带电粒子的吸收、系统壁的损耗以及微波辐射等等, 当其传播至放电系统右边界时幅值几乎为零, 而不存在反射. 所以, ECR 放电系统中的场会沿着

系统的纵向随时间作振荡,这可以由图 8—图 11 看出.不过由于模拟中并未考虑微波能量在系统壁的损耗以及微波辐射等因素,所以得到的系统右边界处的场幅值不为零,但由于模拟中在右边界处应用了吸收边界条件,所以此处的微波不会被右边界反射回放电系统.

在 ECR 区域,由于电子回旋共振机制加热的电子从微波获得了能量,使得该区域的微波能量有所衰减,所以经此区域之后的场振荡幅度会变小.这可以从图 8 和图 9 看出.随着放电的进行,大量电子不断产生,在 ECR 区域,参与电子回旋共振加热的电子不断增多,这导致 ECR 区域处的微波能量衰减越来越强,经此区域之后的场振荡幅度也会越来越小.

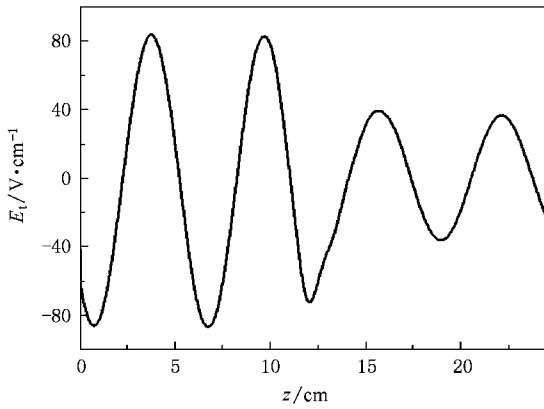


图 8 E_1 沿 z 轴的分布 $t = 2500\Delta t$, 微波功率为 1.5×10^3 W, 中性气压为 1.67 Pa

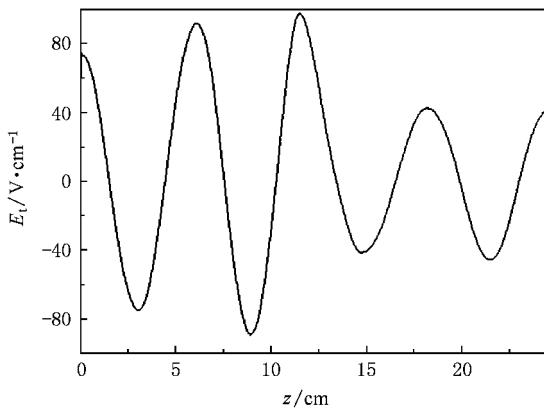


图 9 E_1 沿 z 轴的分布 $t = 25000\Delta t$, 微波功率为 1.5×10^3 W, 中性气压为 1.67 Pa

图 10 显示,至 $t = 100000\Delta t$ 时刻微波能量几乎全部耦合给电子,但之后随着带电粒子不断增加和扩散,放电后期(如 $t = 750000\Delta t$ 时刻,图 11 所示),带电粒子又会在 ECR 区域之后激发起场.

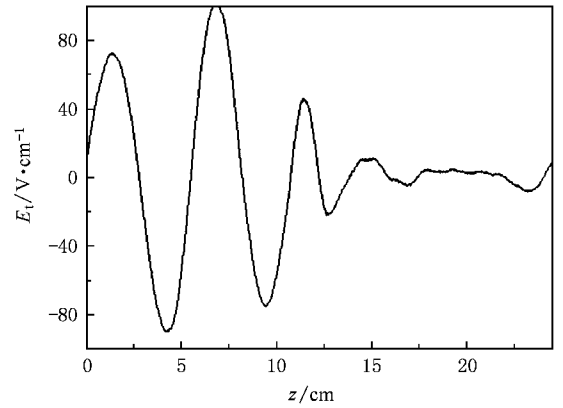


图 10 E_1 沿 z 轴的分布 $t = 100000\Delta t$, 微波功率为 1.5×10^3 W, 中性气压为 1.67 Pa

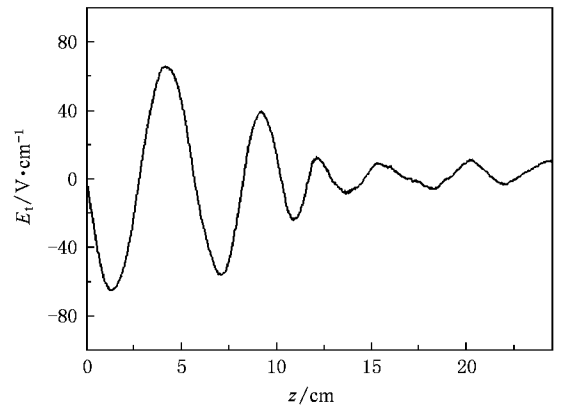


图 11 E_1 沿 z 轴的分布 $t = 750000\Delta t$, 微波功率为 1.5×10^3 W, 中性气压为 1.67 Pa

5. 结 论

通过对 ECR 放电的 PIC/MCC 模拟,得到了大量的从放电初期至放电稳态过程中的关于带电粒子运动与微波场的微观信息.同时展现了放电过程中电子能量与微波场随时间、空间的演化,给出了 ECR 放电电离过程中的电子能量分布特性、电子与微波能量交换机制、微波传播特性.

- [1] Girard A , Hitz D , Melin G , Serebrennikov K 2004 *Rev. Sci. Instrum.* **75** 1381
- [2] Lu Y F , Sun J , Yu D , Shi L Q , Dong Z B , Wu J D 2006 *J. Vac. Sci. Technol. A* **24** 413
- [3] Ding W Y , Xu J , Li Y Q , Piao Y , Gao P , Deng X L , Dong C 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1363 (in Chinese) [丁万昱、徐军、李艳琴、朴勇、高鹏、邓新绿、董闯 2006 物理学报 **55** 1363]
- [4] Wang Y A , Qin F W , Wu D J , Wu A M , Xu Y , Gu B 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 508 (in Chinese) [王叶安、秦福文、吴东江、吴爱民、徐茵、顾彪 2008 物理学报 **57** 508]
- [5] Wu Z Y , Yang Y T , Wang J Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2572 (in Chinese) [吴振宇、杨银堂、汪家友 2006 物理学报 **55** 2572]
- [6] Yadav V K , Sathyanarayana K , Purohit D , Bora D 2007 *Rev. Sci. Instrum.* **78** 023503
- [7] Decker J , Ram A K 2006 *Phys. Plasmas* **13** 112503
- [8] Tartari U , Grosso G , Granucci G , Lubyako L V , Shalashov A G , Suvorov E V , Orsitto F P , Simonetto A , Nowak S , Volpe F , Bruschi A , Gandini F , Muzzini V , Garavaglia S , Grossetti G 2006 *Nucl. Fusion* **46** 928
- [9] Nakagawa T , Higurashi Y , Kidera M , Aihara T , Kase M , Goto A , Yano Y 2006 *Rev. Sci. Instrum.* **77** 03A304
- [10] Shindo M , Ueda Y , Kawakami S , Ishii N , Kawai Y 2000 *Vacuum* **59** 708
- [11] Holber W M , Forster J 1990 *J. Vac. Sci. Technol. A* **8** 3720
- [12] Gong Z S , Sun J , Xu N , Ying Z F , Lu Y F , Yu D , Wu J D 2007 *Diam. Relat. Mater.* **16** 124
- [13] Muta H , Itagaki N , Koga M , Kawai Y 2003 *Surf. Coat. Technol.* **174—175** 152
- [14] Yasaka Y , Uda N 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 3594
- [15] Niimura M , Lamoureux M , Goto A , Yano Y 2000 *Rev. Sci. Instrum.* **71** 846
- [16] Kawai Y , Itagaki N , Koga M , Muta H 2005 *Surf. Coat. Technol.* **193** 11
- [17] Koh W H , Choi N H , Choi D I , Oh Y H 1993 *J. Appl. Phys.* **73** 4205
- [18] Jin X L , Yang Z H , Huang T 2007 *Phys. Plasmas* **14** 113505
- [19] Jin X L , Huang T , Yang Z H 2008 *IEEE. Trans. Plasma Sci.* **36** 1574

The particle-in-cell simulation and Monte Carlo collision simulation of the interaction between electrons and microwave in electron cyclotron resonance discharge *

Jin Xiao-Lin[†] Huang Tao Liao Ping Yang Zhong-Hai

(College of Physical Electronics , University of Electronic Science and Technology of China , Chengdu 610054 , China)

(Received 31 March 2008 ; revised manuscript received 11 December 2008)

Abstract

The theoretical and computational model is presented to study the interaction between electrons and microwave in electron cyclotron resonance discharge. The interaction between charged particles and microwave is described by particle-in-cell method, the collisions and the interaction between charged particles and boundaries of system are described by Monte Carlo collision method. The quasi-three-dimensional simulation code is original. And the spatio-temporal evolvments of electron energy and microwave field in ECR discharge is diagnosed.

Keywords : electron cyclotron resonance discharge , particle-in-cell , Monte Carlo method , ionization

PACC : 5265 , 5280P , 5250

* Project supported by the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education Institutions , China (Grant No. 200806141034) , the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10876005) and the Youth Science and Technology Foundation of University of Electronic Science and Technology of China (Grant No. JX0730).

[†] E-mail : jinxiaolin@neste.edu.cn