

大面积表面波等离子体源微波功率吸收的数值模拟研究

蓝朝晖^{1)†} 胡希伟²⁾ 刘明海²⁾

1) (中国工程物理研究院流体物理研究所, 绵阳 621900)

2) (华中科技大学电气与电子工程学院, 武汉 430074)

(2009 年 10 月 28 日收到; 2010 年 5 月 3 日收到修改稿)

建立了大面积矩形表面波等离子体(SWP)源全尺寸的三维模型,用数值模拟的方法研究了 SWP 源基于碰撞的功率吸收问题,给出了随等离子体参数变化的微波反射率曲线,分析了不同天线对微波功率沉积的影响,并讨论了微波功率吸收和表面波的定性关系. 结果发现,均匀放电的 SWP 源功率沉积本质是由表面波等离子体的性质决定的,等离子体密度太大或太小都不利于功率吸收. 在正常工作气压下,SWP 源通过碰撞机理即可以实现微波功率的有效沉积,微波吸收率可达 80% 以上,与已有实验相符. 本研究同时发现,天线阵列激发的表面波模式越紧凑,强度越大,越有利于微波的吸收.

关键词: 时域有限差分法, 等离子体表面波, 功率吸收, 狭缝天线

PACS: 52. 50. Dg, 52. 65. Kj, 52. 40. Db

1. 引言

表面波等离子体(surface wave plasma, 简称 SWP)由沿着等离子体和介质交界面传播的表面波强电场激发生成,激发产生的等离子体高于电磁波对应截止密度. 和传统的微波等离子体源如电子回旋共振(ECR)源相比,SWP 源不需外加静态磁场,因此结构大为简化,更重要的是容易实现等离子体大面积化. 从 20 世纪 90 年代末以来,大规模集成电路、太阳能电池、平板显示器及材料表面改性等领域迅速发展,由于它们具有共同的平面型几何特征,迫切需要大面积(圆平面直径大于 30 cm)均匀、高密度(大于 10^{18} m^{-3})、高稳定性和高可重复性的新型等离子体源来进行工艺处理. 在这些微电子工业的引领下,SWP 源受到极大的关注,一些发达国家(如日本)为此进行了大量的研究工作,先后开发了多种不同的 SWP 源^[1-10]. 国内的中国科学技术大学、复旦大学等单位也进行了相关的研究^[11-13].

目前,已开展研究的 SWP 源多为圆形截面,矩形截面的相对较少. 相比较而言,矩形截面的 SWP 源在面积扩展性方面优势明显,且天线设计、开窗、

气路设计也较方便. 在文献[14—16]中,我们开发了一种矩形的大面积 SWP 源,并进行了相应的实验和数值模拟研究. 除了等离子体均匀性以及天线设计外,等离子体的功率吸收方面是我们关注的重点. SWP 源中含有多种已知的电子加热方式,包括欧姆加热、共振加热、随机加热等^[17]. 但是在不同的工作条件下,究竟哪个占主导依然不完全清楚. 此外,装置的微波功率沉积与天线及激发表面波的关系也未得到充分研究. 因此,本文将建立全尺寸的三维模型,用数值模拟的方法来研究上述问题. 重点关注碰撞机理的微波功率沉积及其变化规律,并研究天线对装置功率吸收的影响以及微波功率沉积与表面波模式及强度的关系.

2. 计算模型和方法

大面积 SWP 源装置结构如图 1 所示. 上面是一个 R22 波导管,工作模式为 TE_{10} ,横截面尺寸为 $10.9 \text{ cm} \times 5.5 \text{ cm}$;下面是矩形腔体,长宽高尺寸为 $44 \text{ cm} \times 22 \text{ cm} \times 15 \text{ cm}$. 矩形石英玻璃放在金属腔体和波导管之间,厚度为 14 mm,相对介电常数 $\epsilon = 3.78$. 狭缝天线阵列直接开在波导下表面. 频率为

† E-mail: lanchaohui@163.com

2.45 GHz 的微波从波导的一端注入,波导另一端短路,并通过活塞(图中未画出)控制短路位置. 反射回注入端的微波被水吸收. 腔体侧壁上开有观察窗口、诊断窗口以及冷却水路、气路等接口. 该装置具有结构简单、易于改进和扩充等优点. 电磁波从右端注入,经狭缝向下辐射电磁波并在正下方产生等离子体. 如果电磁波足够强,等离子体将沿着石英扩展开来,同时在等离子体和石英介质交界面产生表面波以维持稳态的均匀表面波等离子体.

装置的电磁波传播过程可用如下麦克斯韦方程组描述

$$\varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{H} - \mathbf{J}, \quad (1)$$

$$\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}, \quad (2)$$

其中 $\mathbf{E}$ 和 $\mathbf{H}$ 是电场和磁场矢量, ε_0, μ_0 是真空的介电常数和磁导率. 对于稳态工作的 SWP 源,等离子体密度不随时间变化,等离子体电子运动方程为

$$m_e \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -e\mathbf{E} - \nu_{en}\mathbf{u}, \quad (3)$$

式中 ν_{en} 是电子与中性粒子的碰撞频率,电磁波的能量损失是由电子和中性粒子碰撞引起的. $\mathbf{u}$ 是电子在外电场的作用下运动速度. 方程(3)的对流项($\mathbf{u} \cdot \nabla$) $\mathbf{u}$ 在高频电磁场中可被忽略. (1)式中由于电子运动形成的电流密度为

$$\mathbf{J} = -en_e\mathbf{u}, \quad (4)$$

其中 n_e 是电子密度, e 是单位电荷.

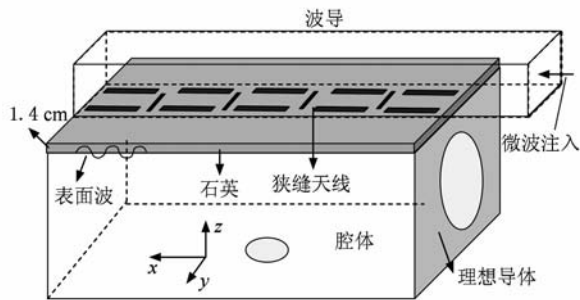


图1 数值模拟模型

麦克斯韦方程组的数值解采用时域有限差分(FDTD)方法,详细的离散化策略及迭代步骤见文献[18]. 麦克斯韦方程组的解法有多种,本文采用辅助方程方法^[19],也就是将(3)式直接离散为

$$u^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{(2 + \nu_{en}\Delta t)} \left[(2 - \nu_{en}\Delta t)u^{n-\frac{1}{2}} - \frac{2e\Delta t}{m_e} E^n \right], \quad (5)$$

然后与麦克斯韦方程组离散方程交互迭代计算,迭代顺序为 $\mathbf{E} \rightarrow \mathbf{u} \rightarrow \mathbf{J} \rightarrow \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{E}$. 空间离散网格尺寸 $\Delta h = 2 \text{ mm}$, 时间步长 $\Delta t = \Delta h / (2\sqrt{3}c)$, 其中 c 是真空光速, Courant 稳定性条件能够得到满足. 电子运动速度、电流、电场强度安排在相同的网格位置,整个三维计算空间离散成 $220 \times 110 \times 100$ 网格数,并在微波注入端设置 12 层完全匹配层(PML)以吸收反射的电磁波.

3. 天线的选择

如果不考虑开槽对波导内电磁场的影响,那么从辐射强度考虑应该把狭缝开在磁场最强的位置. 因为根据线电流密度公式 $\mathbf{J}_s = \mathbf{n} \times \mathbf{H}_t$, 波导壁的线电流密度在这些地方最大,而狭缝天线是靠切割面电流辐射电磁波的. 我们选择下面三种天线:图2所示的天线阵列 A 是在 H_x 最大的位置开槽,单元尺寸为 $3.6 \text{ cm} \times 8 \text{ mm}$; 天线阵列 B 是在 H_y 最大的位置开槽,单元尺寸为 $7.4 \text{ cm} \times 8 \text{ mm}$; 天线阵列 C 是同时在 H_x 和 H_y 最大位置开槽. 由解析计算可知,未开槽波导内 H_y 的幅值是 H_x 的 1.47 倍. 因此,在尺寸相同的情况下,在波导 H_y 峰值位置开槽比在 H_x 峰值位置开槽能辐射更大的功率. 尽管开槽会破坏波导内电磁场分布,使得实际的辐射强度变小,但是通过波导末端短路活塞的调节可以达到最大的辐射强度.

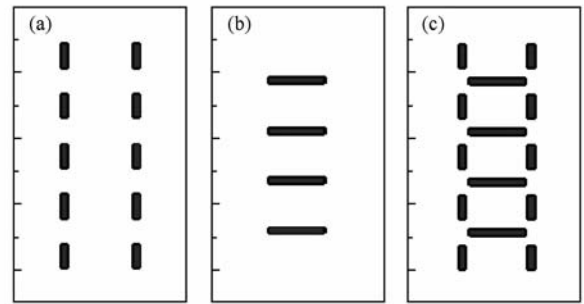


图2 三种不同类型的天线阵列 (a) 天线阵列 A, (b) 天线阵列 B, (c) 天线阵列 C

4. 数值模拟结果和讨论

4.1. 装置电磁场分布

为了验证程序的有效性,首先要计算整个空间

内的电磁场分布. 由于鞘层厚度远小于表面波在等离子体中的穿透深度, 因此, 我们可以忽略石英玻璃下面鞘层的厚度, 并认为在表面波激发区内等离子体密度是均匀的. 由于电磁波不会进入到等离子体内部, 所以可以设整个腔体内等离子体的密度分布均匀. 设等离子体密度为 $1.0 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$, 碰撞频率为 $3.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$, 并采用其中一个天线阵列 (如天线阵列 B) 作为算例. 图 3 给出了电场三个分量的装置 x - z 中截面分布图. 由于波导工作模式是 TE_{10} 模, 因此波导中只有 z 分量的电场, x 和 y 分量电场为 0. 另外图 2(a)–(c) 清楚地显示了石英和等离子体交界面的表面波. 按照相应边界条件, 表面波的水平分量 (x, y 分量) 在垂直方向 (z 方向) 是连续的, 而垂直分量 (z 分量) 在垂直方向不连续, 有间断. 图 3 的结果证明了计算的有效性, 本文的物理模型可以描述等离子体表面波的传播问题.

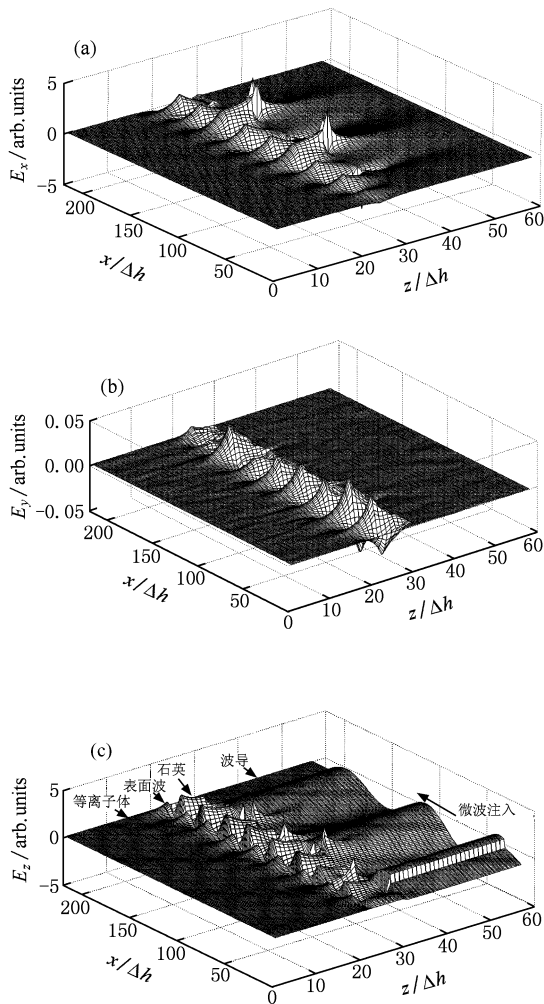


图 3 采用天线阵列 B 的 SWP 源装置各电场分量的 x - z 截面图
此算例腔体高度设为 4.6 cm. (a) E_x , (b) E_y , (c) E_z

4.2. 反射功率计算

设波导微波输入功率和反射功率分别为 P_{in} , P_{ref} , 不考虑装置 (如金属壁) 的功率损耗, 则等离子体总的沉积功率为

$$P_{\text{dep}} = P_{\text{in}} - P_{\text{ref}} = P_{\text{in}}(1 - R), \quad (6)$$

其中 $R = P_{\text{ref}}/P_{\text{in}}$ 是微波功率反射率. 图 4 给出了波导源端反射率随时间变化的曲线. 采用天线阵列 C, 等离子体密度为 $2.0 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$, 电子碰撞频率为 $3 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$. 在大约 1000 时间步会出现反射功率极大值, 这是由微波在波导末端反射传播到源端造成的. 随着时间的推移, 反射率有所增加 (其他情况也可能减小), 最后稳定到一个平台位置, 反射率不再大幅变化. 由此可见, 反射率幅值需要相当长的时间才能达到稳定. 在下面的计算中, 为使微波反射率能达到稳定, 总的时间步长取 22000.

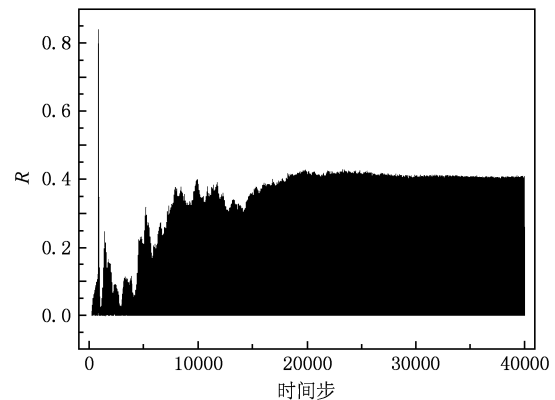


图 4 反射率随时间的变化

本文采用的模型中所有的微波功率吸收都是源自电子与中性原子的碰撞, 而此种能量吸收方式与多种因素有关, 如等离子体密度、气压、天线阵列结构等, 其中气压直接影响电子碰撞频率. 下面固定电子碰撞频率 ($\nu_{\text{en}} = 3 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$), 把等离子体密度和天线阵列作为变量来观察微波反射率的变化趋势, 如图 5 所示, 等离子体密度变化范围是 $10^{17} - 10^{19} \text{ m}^{-3}$.

整体上可以看出, 两个区域内微波反射率处于低谷, 一个是 $7 \times 10^{17} - 2 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$, 另一个是 $4 \times 10^{18} - 6 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$, 第一个区域大于第二个区域. 三种天线对应的低反射区域位置大致相同, 因此可以认为这是由表面波等离子体性质决定的. 之所以反射率低谷没有出现在等离子体变化范围的两端, 是因为等离子体密度太大或太小都不利于微波功率

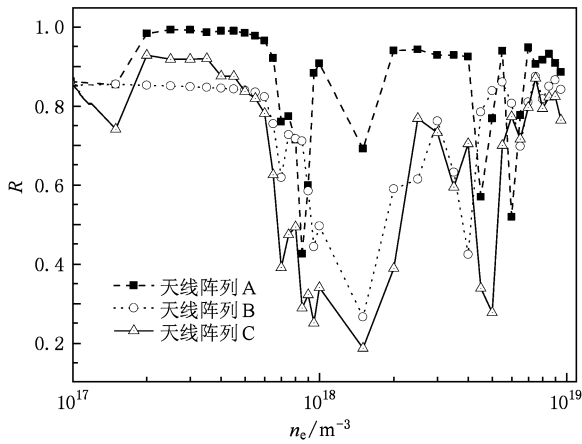


图5 微波反射率随等离子体密度变化($\nu_{en} = 3 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$)

的吸收. 当等离子体密度比较小时, 作为能量携带载体的电子与中性粒子碰撞次数少, 微波能量转换成电子热能的总量就减小; 当等离子体密度比较大时, 表面波穿透等离子体的深度会比较小, 在等离子体一侧表面波的强度也较弱, 导致等离子体对微波功率的吸收能力减弱. 综合这两方面的因素, 我们认为, 在密度范围中间区域必然会出现等离子体微波功率吸收峰值. 至于为什么出现第二个吸收峰值, 可能是天线各单元产生的表面波在该区域正好处于叠加增强的缘故.

从数值上看, 采用天线阵列 C 时, 在 10^{18} m^{-3} 等离子体密度附近的微波功率反射系数小于 20%, 亦即 80% 以上的微波功率通过碰撞机制沉积到等离子体中, 该结果和现有实验基本相符^[3]. 这可以解释为什么 SWP 源对微波功率有如此高效的吸收. SWP 装置工作气压为 10—120 Pa, 按照计算公式 $\nu_{en} = 1.52 \times 10^7 p / \sqrt{T_e}$ ^[17], 设电子温度是 2 eV, 则 14 Pa 气压对应的电子碰撞频率是 $3 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$, 表明正常工作的 SWP 源通过碰撞机制就可以实现微波的有效沉积.

从图 5 还可看出, 不同天线阵列对应的功率反射率有很大差别. 三者中天线阵列 A 反射率最大, 因此微波辐射能力最差; 天线阵列 B 和天线阵列 C 辐射能力较接近, 天线阵列 C 对应的反射率在绝大部分等离子体密度区域是最小的, 说明用天线阵列 C 激发的表面波最有利于等离子体对微波功率的吸收. 此外, 尽管天线阵列 C 是天线阵列 A 与 B 的叠加, 但是等离子体对微波功率的吸收并无叠加关系. 这主要基于两方面的原因: 一是不同开槽方式

对波导内电磁场影响不一样, 当使用天线阵列 C 时, 波导内电磁场状态与使用天线阵列 A 与 B 时不完全一样, 导致电磁波耦合效率不同; 二是等离子体沉积功率密度表达式是 $\mathbf{J} \cdot \mathbf{E}$, $\mathbf{J}$, $\mathbf{E}$ 和天线阵列都有关系且相互耦合, 可见等离子体吸收功率与天线阵列的关系是复杂的, 不是简单线性变化关系.

现固定天线阵列 C, 改变电子碰撞频率 (即改变气压), 图 6 给出了三个不同电子碰撞频率下, 微波功率反射率的变化趋势. 为减小计算量, 等离子体密度间隔取图 5 的两倍. 对于正常工作的 SWP 源, 电子碰撞频率小于 $3.0 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$. 对于不同的电子碰撞频率, 反射率低谷出现的密度区域没有发生改变. 除个别密度区域外, 基本上是随着电子碰撞频率的增大微波反射将减少, 最小值甚至低于 0.1. 实际装置则因为存在金属壁、石英玻璃等的能量损耗, 无法获得如此低的微波反射率.

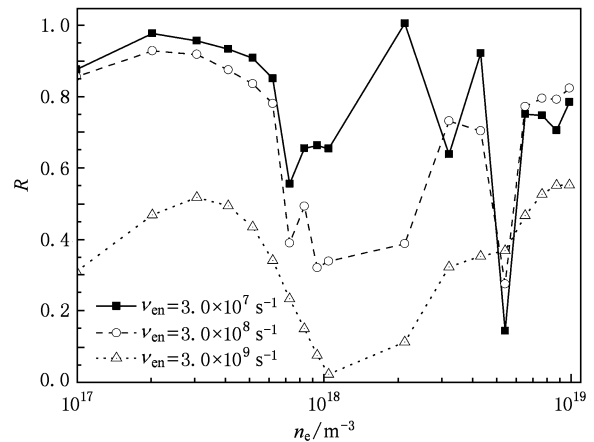


图6 不同碰撞频率对微波反射率随等离子体密度变化的影响 采用天线阵列 C

4.3. 功率沉积与表面波关系

4.2 节给出的微波反射率只反映总体能量吸收的变化规律, 要获得更多的功率沉积细节则需要察看天线激发的表面波状态. 以天线阵列 C 为例, 图 7 显示了不同等离子体密度下 SWP 源激发的表面波 E_z 场 x - y 平面分布, 时间记录点都是在第 22000 时间步, 数据采集位置是石英玻璃的水平中截面, 电子碰撞频率取 $3.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$. 当等离子体密度为 $5.0 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$ 时, 天线阵列 C 难以激发很强的表面波, 电磁能量主要在天线下方被吸收, 因此在图中可以明显看到天线留下的痕迹. 对于其他的等离子体密度, 天线阵列 C 都可以激发表面波, 并铺满整

个石英下表面. 天线阵列 C 形成的表面波模式并不单一,而是多种模式的叠加,因此显得杂乱无章.

比较图 7(b),(d),(f),三图的表面波最大,电场强度相当,但对应的微波功率沉积却有很大差别,如图 5 所示. 相比较而言,图 7(b)显示的表面波能更好地将微波功率沉积到等离子体中,这是因为图 7(b)的表面波模式更加紧凑. 当等离子体密度越大时,表面波的模数趋向减少^[17],而表面波的波长趋向增大. 在表面波强度相当的情况下,表面

波波长越小,模式越紧凑,沉积的功率密度越大.

当表面波波长接近时,强度的因素对功率沉积起到决定性作用. 比较图 7(e)和(f),二者波长接近,但对应的微波反射率分别是 0.3 和 0.7. 之所以出现这么大差别就是因为图 7(e)的表面波电场很强,使得等离子体的功率吸收特别有效. 纵观这六个不同等离子体密度的表面波图,图 7(c)和(e)对应的微波反射率最低,说明表面波越紧凑,强度越大,越有利于微波功率的沉积.

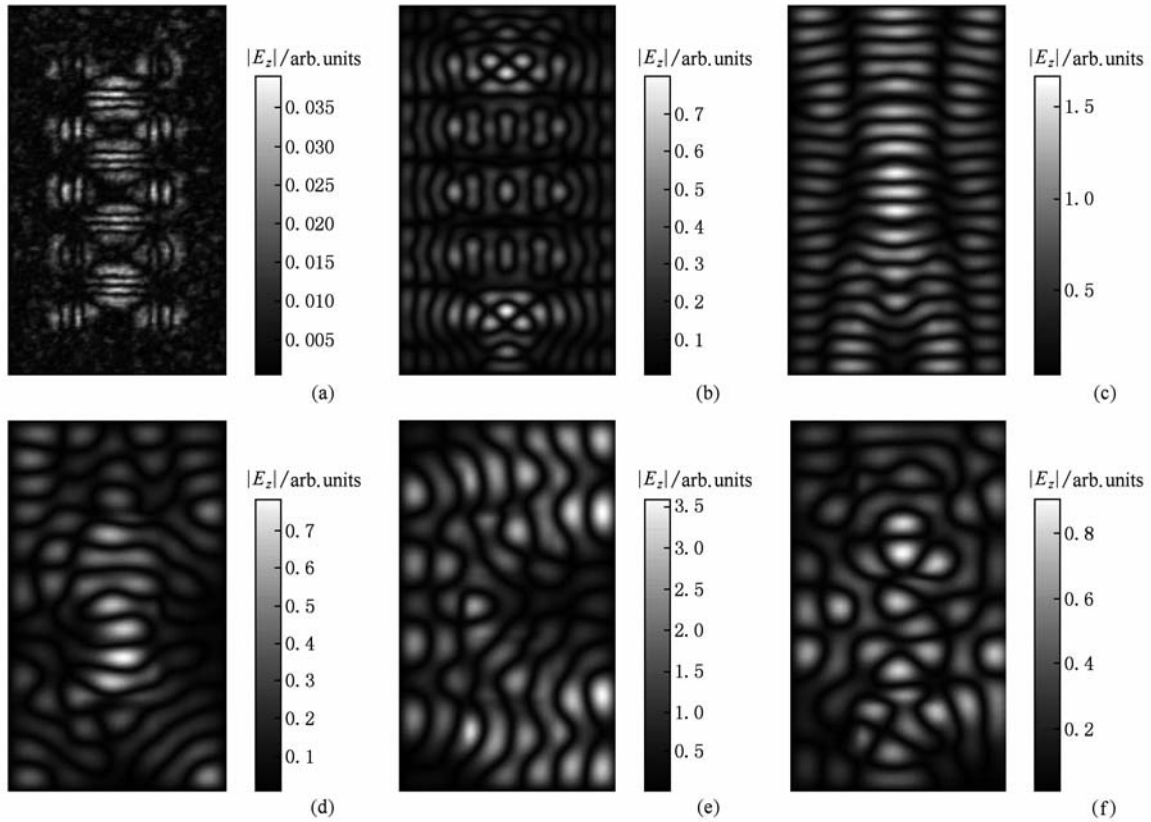


图 7 采用天线阵列 C,不同等离子体密度情况下的电场 E_z 分量 x - y 平面分布 (a) $5.0 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$, (b) $7.0 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$, (c) $1.0 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$, (d) $3.0 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$, (e) $5.0 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$, (f) $7.0 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$

5. 结 论

本文用时域有限差分法建立了矩形 SWP 源的三维数值模型,通过麦克斯韦方程组和等离子体流体方程耦合的方法研究了碰撞机制下 SWP 源的功率吸收问题,分析了三种不同天线对等离子体微波功率吸收的影响,给出了微波功率吸收与表面波模式和强度的定性关系. 研究结果显示,在正常工作气压下,SWP 源

通过碰撞机制即可以实现微波功率的有效沉积,微波吸收率可达 80% 以上. 文中给出的天线阵列 C 能获得最好的微波沉积效率. 尽管不同的天线阵列对应的沉积功率数值不同,但是沉积功率峰值对应的等离子体密度范围变化不大,说明稳态均匀放电的 SWP 源功率沉积本质是由表面波等离子体性质决定的. 等离子体密度太大或太小都不利于功率的吸收. 本研究同时发现,天线阵列激发的表面波模式越紧凑,强度越大,越有利于微波功率的沉积.

- [1] Sugai H, Ghanashev I, Nagatsu M 1998 *Plasma Sources Sci. Technol.* **7** 192
- [2] Ghanashev I, Nagatsu M, Morita S, Sugai H 1998 *J. Vac. Sci. Technol. A* **16** 1537
- [3] Nagatsu M, Morita S, Ghanashev I, Ito A, Toyoda N, Sugai H J 2000 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33** 1143
- [4] Ghanashev I, Sugai H 2000 *Phys. Plasmas* **7** 3051
- [5] Ganashev I, Nagatsu M, Sugai H 1997 *Jpn. J. Appl. Phys.* **36** 337
- [6] Wu T J, Guan W J, Tsai C M 2001 *Phys. Plasmas* **8** 3195
- [7] Nagatsu M, Ghanashev I, Sugai H 1998 *Plasma Sources Sci. Technol.* **7** 230
- [8] Nagatsu M, Naito K, Ogino A, Nanko S 2006 *Plasma Sources Sci. Technol.* **15** 37
- [9] Yasaka Y, Koga K 2002 *Phys. Plasmas* **9** 1029
- [10] Liu M H, Sugai H, Hu X W, Ishijima T, Jiang Z H, Li B, Dan M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5905 (in Chinese) [刘明海、菅井秀郎、胡希伟、石岛芳夫、江中和、李 斌、但 敏 2006 物理学报 **55** 5905]
- [11] Ou Q R, Liang R Q 2002 *Vacuum and Low Temperature* **8** 28 (in Chinese) [欧琼荣、梁荣庆 2002 真空与低温 **8** 28]
- [12] Zhan R J, Wu C F, Wen X H, Zhu X D, Zhou H Y 2001 *Vacuum Science and Technology* **21** 30 (in Chinese) [詹如娟、吴丛凤、温晓辉、朱晓东、周海洋 2001 真空科学与技术 **21** 30]
- [13] Liang Y Z, OU Q R, Liang B, Liang R Q 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 1761
- [14] Chen Z Q, Zhou P Q, Chen W, Lan C H, Liu M H, Hu X W 2008 *Plasma Science and Technology* **10** 655
- [15] Lan C H, Chen Z Q, Liu M H, Hu X W 2009 *Plasma Science and Technology* **11** 66
- [16] Lan C H, Hu X W, Liu M H 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 035204
- [17] Sugai H 2002 *Plasma Electronic Engineering* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [菅井秀郎 2002 等离子体电子工程学 (北京:科学出版社)]
- [18] Taflove A 1995 *Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time-Domain Method* (Boston: Artech House)
- [19] Chen Q, Aoyagi H P, Katsurai M 1999 *IEEE Trans. Plasma Science* **27** 164

Numerical simulation of microwave power absorption of large-scale surface-wave plasma source

Lan Chao-Hui^{1)†} Hu Xi-Wei²⁾ Liu Ming-Hai²⁾

1) (Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

2) (College of Electrical and Electronic Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

(Received 28 October 2009; revised manuscript received 3 May 2010)

Abstract

A full-size three-dimensional model of large-scale rectangular surface-wave plasma (SWP) source was built, the power deposition problems of SWP source based on collision mechanism were investigated through numerical simulations. The microwave reflectivity curves varying with plasma parameters were obtained, and the influence of different antenna arrays on power deposition is analyzed. The results show that the power deposition of uniformly discharged SWP source mainly depends on plasma property, and too big or too small plasma density is unfavorable to the energy absorption. In the range of working gas pressure, SWP source can achieve effective power deposition only through collision mechanism, and the absorption rate of microwave can reach more than 80%, which agrees with the existing experimental result. The results also show that compact and intensive surface wave is more favorable to the absorption of microwave.

Keywords: finite difference time domain method, plasma surface wave, power absorption, slot antenna

PACS: 52.50. Dg, 52.65. Kj, 52.40. Db

[†] E-mail: lanchaohui@163.com