

电子回旋共振放电的电离特性 PIC/MCC 模拟(II) ——数值模拟与结果讨论

金晓林 杨中海

(电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

(2006 年 4 月 4 日收到, 2006 年 4 月 26 日收到修改稿)

采用粒子模拟与蒙特卡罗相结合(PIC/MCC)的方法, 应用电磁模型, 编写了准三维的电子回旋共振(ECR)放电电离过程的模拟程序, 得到了 ECR 放电过程中电子与离子的相空间分布、电磁场分布. 通过对这些分布随时间演化的分析, 得出 ECR 加热发生在 $\omega \approx \omega_{ce}$ 且垂直于轴向的区域. ECR 区域, 微波能量几乎全部耦合给电子, 获得能量的电子通过与中性粒子的电离碰撞产生了大量的带电粒子. 随着放电的进行, 大量带电粒子通过频繁的碰撞, 分布由各向异性逐渐趋于各向同性.

关键词: 电子回旋共振放电, 粒子模拟, 蒙特卡罗, 电离

PACC: 5265, 5280P, 5250

1. 引言

自从 ECR 等离子体源被广泛应用于微电子加工工业、原子物理、核物理、高能物理以来, 吸引了众多学者对其进行了大量的科学研究, 其中除实验方法^[1-5]以外, 理论、计算机模拟方法已经成为重要的研究手段. 利用该方法对 ECR 放电及其生成等离子体特性的研究取得了较多的成绩, 但模拟还主要集中于稳态, 而对于 ECR 放电过程的研究很少, 模型也比较简单. 国内则主要集中于混合模型^[6,7]和粒子模型中的 MCC 方法^[8]. Muta 等人^[9]采用一维流体模型、Yasaka 等人^[10]采用二维流体模型模拟了低温 ECR 等离子体的产生机理. Niimura 等人^[11]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、电势阱随时间的演化. 由于采用流体模型而无法给出 ECR 放电的细节. Wook 等人^[12]采用一维 PIC/MCC 的方法对 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, 使得二维甚至是三维的模拟才更符合实际的物理过程.

虽然 ECR 等离子源普遍被认为是有很稳定输出的源, 但模拟放电过程对于探索 ECR 放电的物理本质、更精确的研究 ECR 等离子体源的特性有非常重要的意义. 其一是研究的区域更广, 一般要考虑放

电的全空间, 而稳态一般感兴趣的是粒子离开中性区以后的行为, 这就使得模拟放电给出的信息更全面; 其二是更接近实际发生的物理过程, 在研究稳态时通常假设粒子由中性区引出, 然后再向放电区域下游运动, 粒子的初始状态也是从稳态的平衡分布选取的, 但实际上各种粒子从放电开始阶段便分布于整个空间, 而且放电趋向于稳态的过程与各种粒子向放电区域下游的运动过程是同时进行的, 所以通过模拟放电的过程, 利用其达到的稳态结果得出生成等离子体的特性要更准确些; 其三是更有助于探索放电的物理本质, 到目前为止, 人们对 ECR 放电的理论还不是很熟悉, 特别是其中瞬变的不稳定性, 而频率很高的不稳定性交替可能会产生尖锐的离子束脉冲, 这对于理论研究和实际应用都有很大的影响. 通过模拟放电的过程可以展现放电进行的细节, 也就很可能会呈现许多不为实验所观察的、不为模拟稳态所得到的细微变化和不稳定性; 其四是由于放电过程本身和最终形成的稳态具有不同的特性, 有可能会通过模拟放电的过程发现新的作用机理而引起新的应用, 并且由于放电过程和稳态的连续性, 放电过程的模拟结果对于稳态下 ECR 等离子体源的各种应用能起到更科学有效的指导.

本文以 ECR 放电的电离特性 PIC/MCC 模拟的物理模型与理论方法为基础, 编写了准三维 PIC/MCC 程序, 对 ECR 放电的电离过程进行了数值模

拟. PIC/MCC 模拟流程、模拟的结果与讨论如下.

2. PIC/MCC 模拟流程

根据上述的数理模型与建模,我们采用如图 1 所示模拟流程.

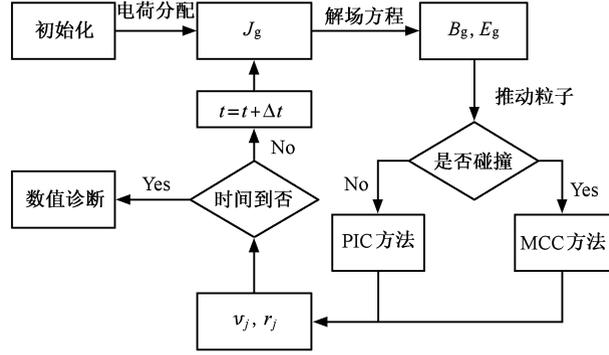


图 1 PIC/MCC 模拟流程图

2.1 初始化

初始场和初始电流密度置零.

种子电子的存在是放电起始的必要条件.自然界中经常有高能宇宙射线、放射线、紫外线等会引起电离而产生偶然电子.为了避免放电起始过程的这种统计上的不确定性以及降低计算机模拟的负担,不计入偶然电子的模拟过程.同时也为了保证放电启动及保持电中性,初始在放电空间注入少量的相等数量的电子和离子.并且使每一个被跟踪计算的带电粒子都具有初始位置、初始能量、初始运动方向.初始位置在 ECR 放电系统中随机分布,初始运动方向随机,初始能量由麦克斯韦分布取样.

2.2 求解电流密度

由所有带电粒子的位置和速度,利用以下三式求得空间网格点上的电流密度分布:

$$\{J_T^i(z, t)\} = \{J_{Te}^i(z, t)\} + \{J_{Ti}^i(z, t)\}, \quad (1)$$

$$\{J_{Te}^i(z, t)\} = \frac{2}{N_{Pe}} \frac{eN_e}{R_0^2} \frac{1}{U_{mn}} \sum_g F(z - z_g) \times [H_{g,e}^n + D_{g-1,e}^n - D_{g+1,e}^n], \quad (2)$$

$$\{J_{Ti}^i(z, t)\} = -\frac{2}{N_{Pi}} \frac{eN_i}{R_0^2} \frac{1}{U_{mn}} \sum_g F(z - z_g) \times [H_{g,i}^n + D_{g-1,i}^n - D_{g+1,i}^n]. \quad (3)$$

2.3 求解电磁场

将求得的空间格点上的电流密度代入整理过的以下麦克斯韦方程组中,求得空间网格点上的电磁场分布:

$$E_T^{n+1/2}(i) = E_T^{n-1/2}(i) - \frac{c\Delta t}{2\Delta z} [B_T^n(i+1) - B_T^n(i-1)] + ck_c^2 B_{L1}^n(i) - \Delta t J_T^n(i), \quad (4)$$

$$B_T^{n+1}(i) = B_T^n(i) - \frac{c\Delta t}{2\Delta z} [E_T^{n+1/2}(i+1) - E_T^{n+1/2}(i-1)], \quad (5)$$

$$B_{L1}^{n+1}(i) = B_{L1}^n(i) - c\Delta t E_T^{n+1/2}(i). \quad (6)$$

2.4 推进粒子运动

首先由(7)式^[13]求得带电粒子的碰撞概率,判断该时间步长内带电粒子是否发生碰撞.

$$P_c = 1 - \exp[-N\sigma_r(\epsilon)v\Delta t]. \quad (7)$$

如果碰撞,利用 MCC 方法来判断粒子发生何种碰撞以及碰撞以后带电粒子的新能量与新的运动方向.

如果不碰撞,利用 PIC 方法来更新粒子的能量和速度方向.通过线性插值法求得带电粒子在其所在位置处的场,然后利用下式更新粒子的动量.

$$\begin{pmatrix} P_x^{n+1} \\ P_y^{n+1} \\ P_z^{n+1} \end{pmatrix} = \mathbf{F} \begin{pmatrix} E_x^{n+1/2} \\ E_y^{n+1/2} \\ E_z^{n+1/2} \end{pmatrix} + \mathbf{S} \begin{pmatrix} P_x^n \\ P_y^n \\ P_z^n \end{pmatrix}. \quad (8)$$

最后由下式更新带电粒子的位置.

$$\mathbf{r}^{n+3/2} = \mathbf{r}^{n+1/2} + \Delta t \mathbf{P}^{n+1} / \gamma^{n+1}. \quad (9)$$

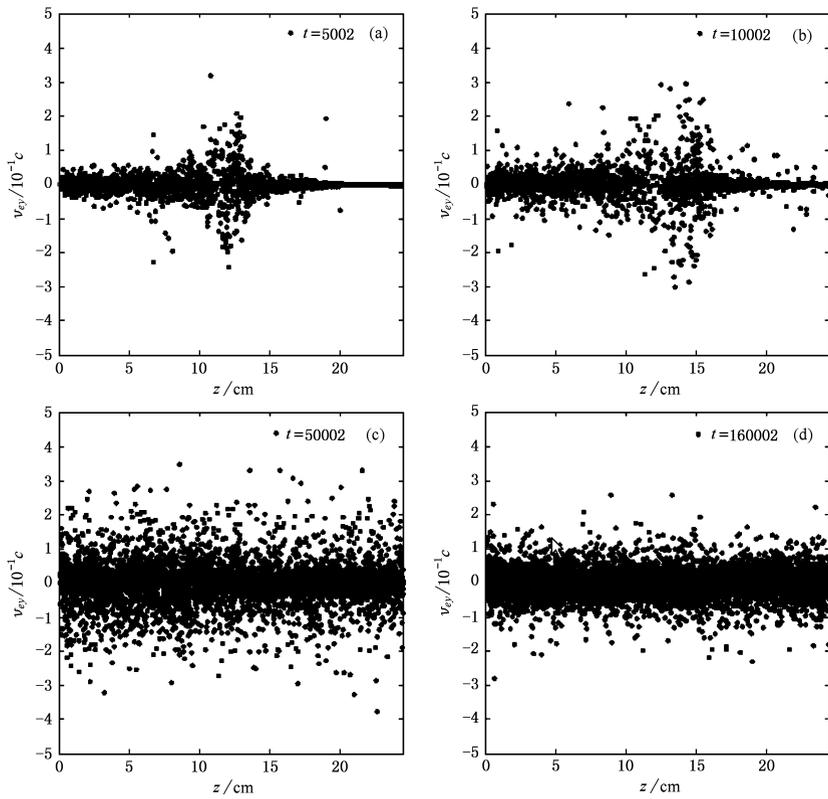
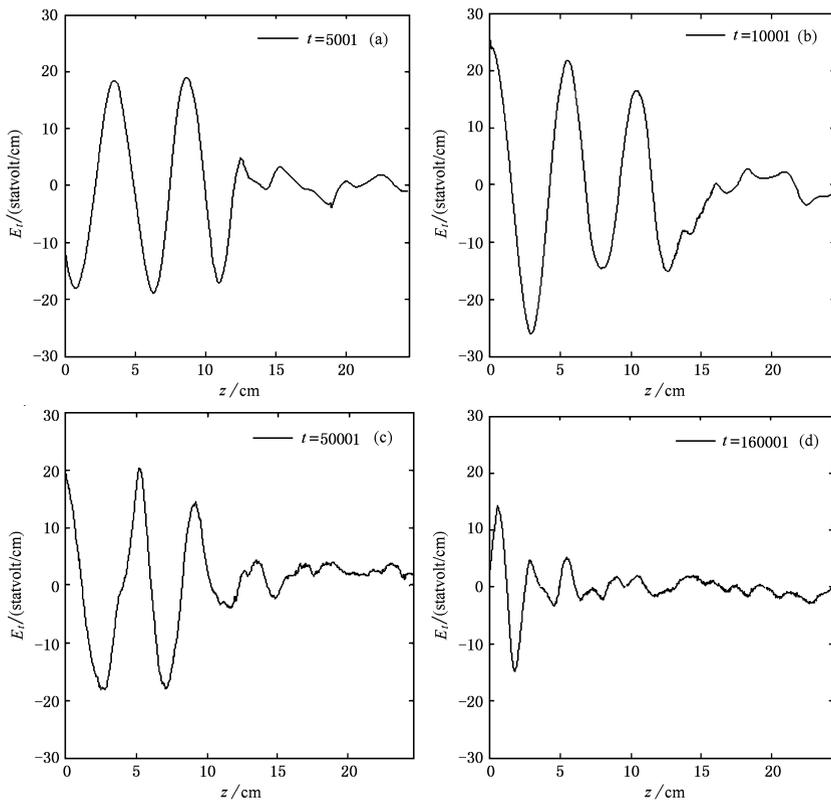
2.5 计算是否结束判断

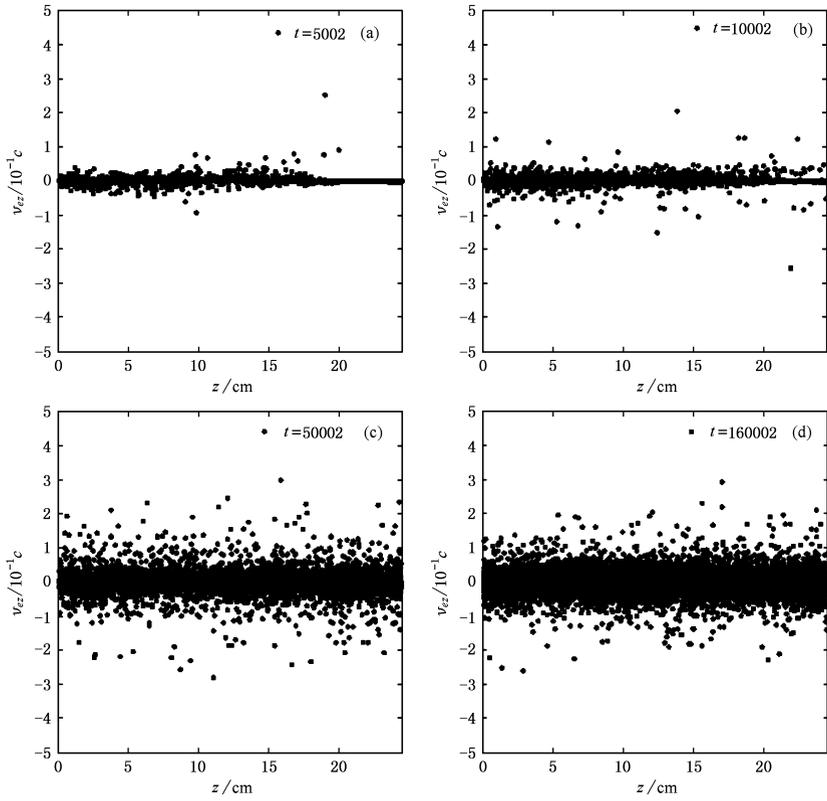
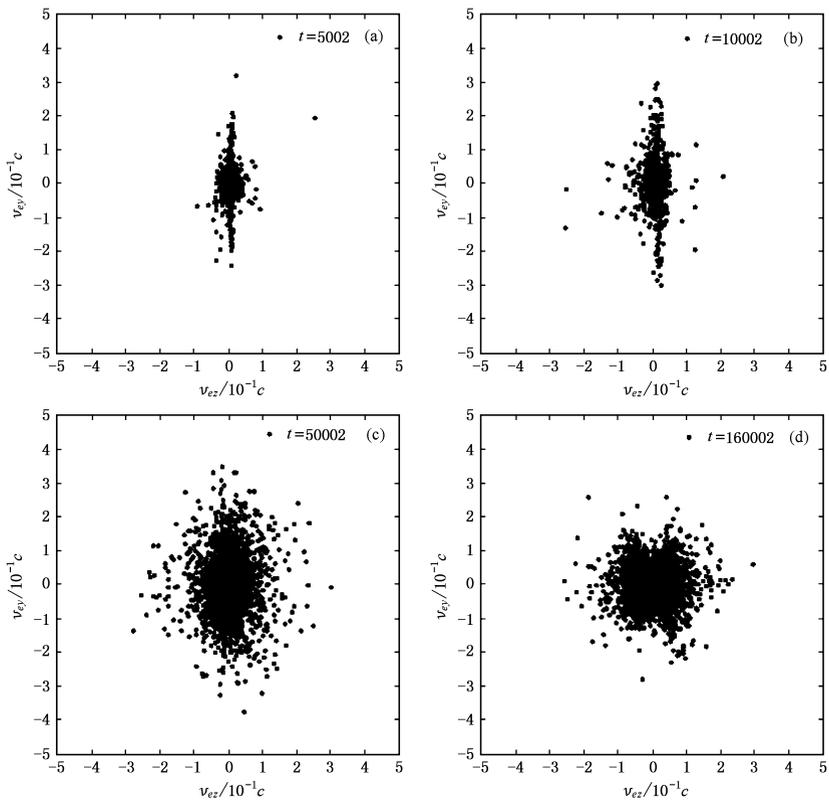
比较该时间步长计算前后的电磁场分布,如果场满足收敛条件,则计算结束,进行数值诊断;如果不满足收敛条件,重复计算 2.2—2.4.

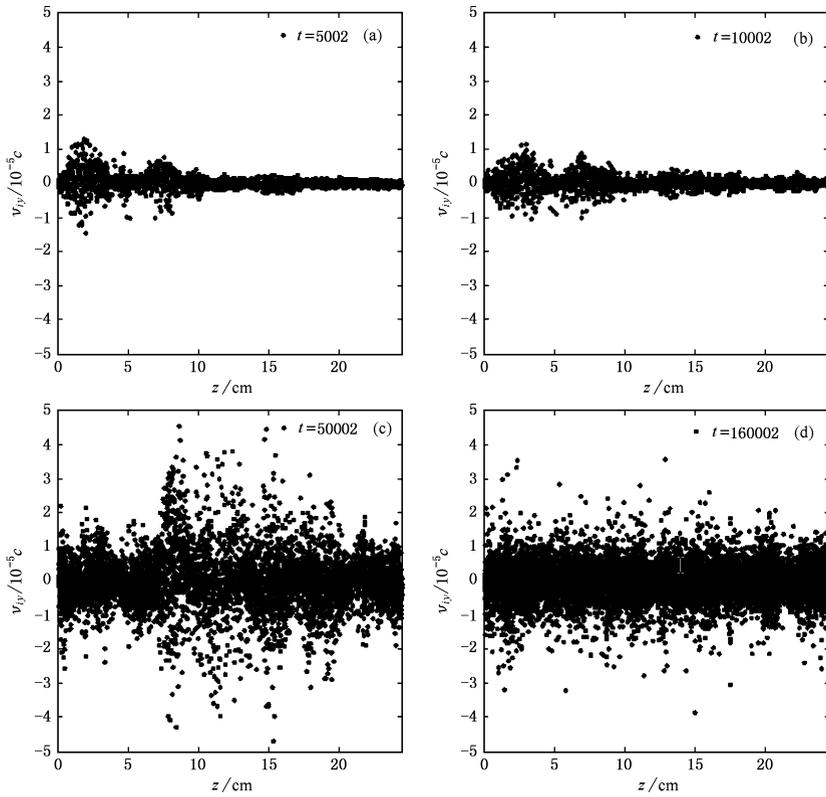
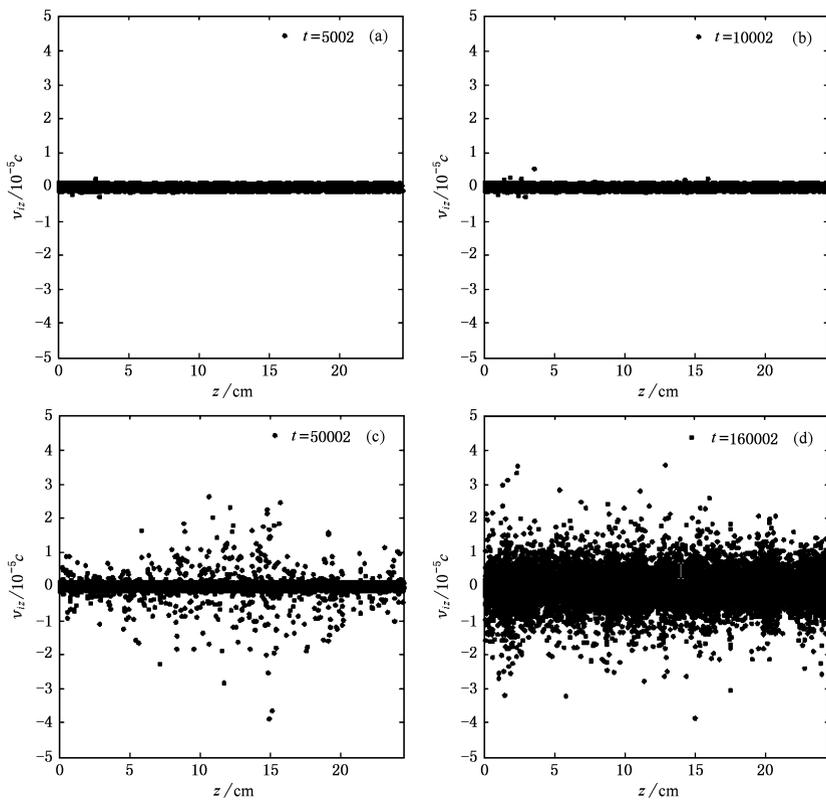
3. 模拟结果与讨论

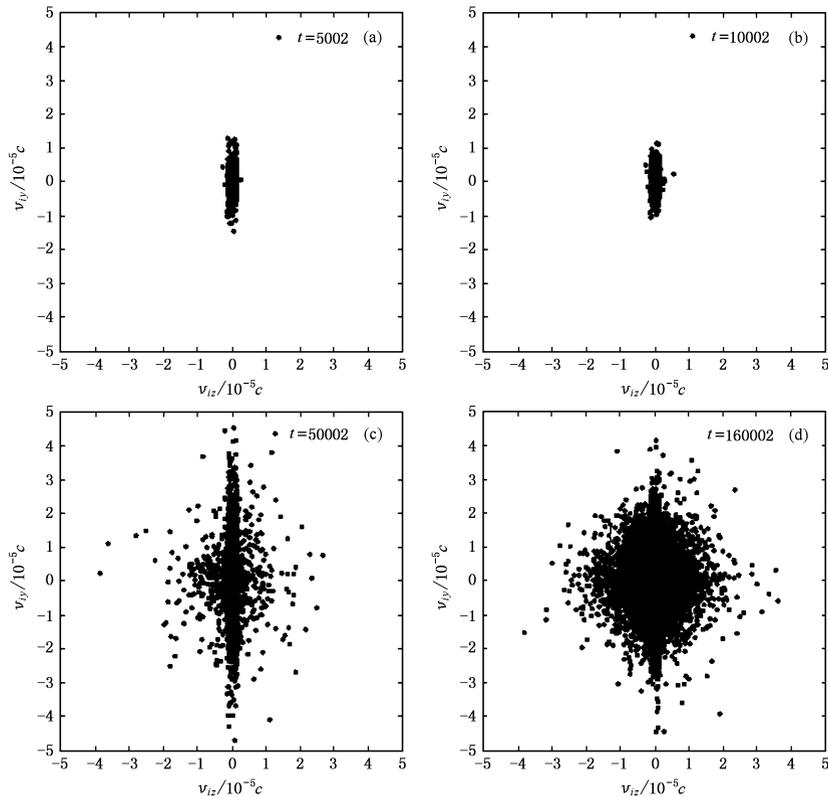
微波频率 2.45GHz,功率 1500W,TE 模式.外加静磁场^[12]由左边界处 1.33×10^{-1} T 线性递减至右边界处 0.44×10^{-1} T.放电系统半径为 6.5cm,长^[12] 24.5cm.工作气体为氩气.

从图 2(a)可以看出, z 轴中心附近,电子垂直于 z 轴方向的速率有较高的增长.此处的外加磁场约为 0.875×10^{-1} T,满足 $\omega \approx \omega_{c0}$,这意味着电子回

图2 电子 v_{y-z} 相空间分布图3 E_z 沿轴向的分布

图 4 电子 $v_z - z$ 相空间分布图 5 电子 $v_y - v_z$ 相空间分布

图 6 离子 v_{y-z} 相空间分布图 7 离子 v_{x-z} 相空间分布

图 8 离子 $v_y - v_z$ 相空间分布

旋共振发生在这里,电子从微波吸收了能量而获得了加速.图 2(b)–(d)表明,随着放电的进行,电子不断产生,起初仅位于 ECR 区域的高能电子已扩散至放电的整个区域.由图 3(a)–(d)可以看出,微波传播至 ECR 区域附近后,微波能量几乎全部耦合给电子,但随着带电粒子不断地增加、扩散,又在 ECR 区域后激发了场.

从图 4(a)可以看出,在 ECR 区域,电子平行于 z 轴方向的速率并没有明显增加,这说明 ECR 共振仅发生在垂直于 z 轴的方向.不过随着放电的进行,ECR 区域高能电子扩散,并经过与中性粒子频繁的碰撞之后,使平行于 z 轴方向的动量与垂直于 z 轴方向的动量逐渐趋于一致.这一过程也可以由图 5(a)–(d)看出.

从图 6(a)可以看出,离子没有共振加热的现象,这是因为离子的质量大,在全部放电区域均不满足与微波共振的条件,离子的速度仅受到微波场的调制而已.图 6(b)–(d)显示了 ECR 区域由于电子与中性粒子电离碰撞产生了大量的离子,这些离子逐渐扩散至全部放电区域.

由图 7(a)可以看出,由于输入的微波模式为 TE

模式, E_z 为 0,所以离子在平行于 z 轴方向的速率几乎没有增加.少数离子速率的增加是由于离子与中性粒子的弹性碰撞,改变了离子运动方向,从而将垂直于 z 轴方向的动量转换成平行于 z 轴的动量.如图 7(b)–(d)随着放电的进行,离子数目增长,与中性粒子的碰撞更为频繁,离子能量由各向异性逐渐转为各向同性.图 8(a)–(d)也说明了这一点.

4. 结 论

本文采用准三维 PIC/MCC 的方法,应用电磁模型,编写了 ECR 放电过程的模拟程序,得到了带电粒子的相空间分布、微波场分布等详细的 ECR 放电微观信息.模拟结果表明 ECR 加热发生在 $\omega \approx \omega_{ce}$ 且垂直于轴向的区域;ECR 区域,微波能量几乎全部耦合给电子,从微波获得能量的高能电子使中性气体电离.随着放电的进行,带电粒子的分布由各向异性逐渐趋于各向同性.模拟结果很好的解释了 ECR 放电的物理特性.

由于 ECR 放电的物理机理复杂,ECR 等离子体源特性对实际应用的理论指导,以及各种放电条件

对该特性的影响在实际应用优化设置方面的研究意义,使得对 ECR 放电及其生成等离子体特性的诊断需求极其丰富而又重要,其中微波功率、微波模式、

中性气体气压、外加磁场形态对 ECR 放电及其生成等离子体特性的影响是被普遍关注的,这部分工作正在进行之中。

- [1] Chen Z , He W , Pu Y M 2005 *Acta Physica Sinica* **54** 2153 (in Chinese) [陈 卓、何 威、蒲以康 2005 物理学报 **54** 2153]
- [2] Ye C , Du W , Ning Z Y *et al* 2003 *Acta Physica Sinica* **52** 1802 (in Chinese) [叶 超、杜 伟、宁兆元等 2003 物理学报 **51** 1802]
- [3] Zhang Z G , Liu T W , Xu J *et al* 2005 *Acta Physica Sinica* **54** 3257 (in Chinese) [张治国、刘天伟、徐 军等 2005 物理学报 **54** 3257]
- [4] Xin Y , Yin S Y , Chen G H *et al* 2002 *Acta Physica Sinica* **51** 1865 (in Chinese) [辛 焜、宁兆元、程珊华等 2002 物理学报 **51** 1865]
- [5] Hu Y H , Yin S Y , Chen G H *et al* 2004 *Acta Physica Sinica* **53** 2263 (in Chinese) [胡跃辉、阴生毅、陈光华等 2004 物理学报 **53** 2263]
- [6] Shao F Q , Wang L , Wu H M *et al* 1998 *Acta Physica Sinica* (Overseas Edition) **7** 688
- [7] Liu M H , Hu X W , Yu G Y *et al* 2002 *Plasma Sources Sci Technol* **11** 260
- [8] Gong Y , Song Y J , Wen X J *et al* 2001 *Chinese Journal of Computational Physics* **18** 152
- [9] Muta H , Ilagaki Naho , Kawai Y 2002 *Vacuum* **66** 209
- [10] Yasaka Y , Fukuyama A , Hatta *et al* 1992 *Journal of Applied Physics* **72** 2652
- [11] Niimura M , Lamoureux M , Goto A *et al* 2000 *Review of Scientific Instruments* **71** 846
- [12] Wook H K , Nak H C , Duk I C *et al* 1993 *Journal of Applied Physics* **73** 4205
- [13] Birdsall C K 1991 *IEEE Transactions on Plasma Science* **19** 65

The PIC/MCC simulation of the ionization processes in electron cyclotron resonance discharge (II) ——Numerical simulation and discussion of results

Jin Xiao-Lin Yang Zhong-Hai

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

(Received 4 April 2006 ; revised manuscript received 26 April 2006)

Abstract

We present a theoretical and computational model to study the ionization of the electron cyclotron resonance (ECR) microwave discharge using a quasi-three-dimensional electromagnetic particle-in-cell plus Monte Carlo collision method. The simulation code is original. The detailed information about the distribution of charged particles and electromagnetic fields are obtained. We can conclude that the electrons absorb energy from microwave near the ECR region. Many electrons and ions are created through the ionization collisions between electrons and neutrals. And the distribution of charged particles vary gradually from anisotropic to isotropic by the frequently collisions.

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

PACC : 5265 , 5280P , 5250