

气体压强及表面等离激元影响表面波等离子体 电离发展过程的粒子模拟*

陈兆权^{1)†} 夏广庆²⁾ 刘明海³⁾ 郑晓亮¹⁾ 胡业林¹⁾ 李平¹⁾
徐公林¹⁾ 洪伶俐¹⁾ 沈昊宇¹⁾ 胡希伟³⁾

1) (安徽理工大学, 电气与信息工程学院, 电磁新装置研究室, 淮南 232001)

2) (大连理工大学, 工业装备结构分析国家重点实验室, 大连 116024)

3) (华中科技大学, 强电磁工程与新技术国家重点实验室, 武汉 430074)

(2013年3月8日收到; 2013年5月28日收到修改稿)

基于表面等离激元 (SPP) 的表面波等离子体 (SWP) 源, 具有高密度、低温度及高产率等优异性能, 其应用在电子器件微纳加工、材料改性等领域. 但由于 SPP 激励 SWP 放电的电离过程难于用理论分析和实验测量描述, 因而 SWP 源均匀稳定产生的电离发展过程一直未研究清晰. 本文以 SWP 放电的数值模拟为研究手段, 采用等离子体与电磁波相互作用的粒子模拟 (PIC) 方法, 结合蒙特卡罗碰撞 (MCC) 方法处理碰撞效应的优势, 研究气体压强影响电离过程的电磁能量耦合机理. 模拟结果表明 SWP 的高效产生是 SPP 的局域增强电场致使, 气体压强能够改变波模共振转换的出现时刻而影响了 SWP 的电离发展过程. 本文的研究成果展示了 SPP 维持 SWP 放电的电离过程, 可为下一代米级 SWP 源的参数优化提供设计建议.

关键词: 表面波等离子体, 表面等离激元, 粒子模拟, 电离过程

PACS: 52.65.Rr, 52.65.Pp, 52.50.Sw, 52.80.Pi

DOI: 10.7498/aps.62.195204

1 引言

随着大规模集成芯片微纳加工、液晶显示器、太阳能电池、生物医学、高分子薄膜及高聚物的表面改性等领域的迅速发展, 迫切需要发展大面积均匀, 低气压高密度, 大口径的新型等离子体源. 与其他类型的等离子体源相比, 平板型表面波等离子体 (SWP) 源具有同时满足以上苛刻要求的特点, 已经成为下一代超大规模集成电路器件加工的强有力竞争者. 研究现状是: 1) 日本从 1994 年开始研究, 1998 年实现产业化, 2003 年改变天线激发方式, 建立了大面积的 SWP 源^[1-7]; 2) 台湾清华大学采用梳状慢波周期结构生成大面积 SWP, 并研究了表

面电磁波与等离子体间的共振机理^[8]; 3) 等离子体研究所、复旦大学和中国科学技术大学各自完成直径 30 cm 和直径 22 cm 的圆柱体表面波等离子体源, 进行了大量有关 SWP 的特性研究及应用分析^[9-12]; 4) 华中科技大学课题组 (我们组), 建造了一套长方体 SWP 源^[13-19]. 以上研究均以高密度等离子体与微波相互作用作为研究的根本点和着落点, SWP 源建立过程均是基于表面波激发和传播机理来设定装置结构, 设计过程往往依赖于研究者的主观经验. 近期, Liang 等^[9], 在试验中发现了 SWP 放电时存在表面等离激元 (SPP) 现象, 并指出 SPP 在高密度等离子体界面的部分物理特征. 我们利用 SPP 加热等离子体, 实现了中等尺度 (40 cm) 平板型高密度 SWP 源的均匀稳定可控放电^[17-19].

* 国家自然科学基金 (批准号: 11105002)、工业装备结构分析国家重点实验室开放基金 (批准号: GZ1215)、安徽高校省级自然科学基金项目 (批准号: KJ2013A106)、国家大学生创新训练计划项目 (批准号: 201210361058) 和安徽理工大学博士科研启动基金资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: zqchen@aust.edu.cn

随着 SWP 源发展和计算机处理能力增强, 数值模拟辅助设计 SWP 源的技术开始发展. 研究者首先用二维的简化模型, 以实验数据为输入参数, 模拟解释了部分实验结果, 同时预言一些新现象, 为装置优化改造指明了方向. 研究进展如下: 1) 日本学者结合冷等离子体方程与麦克斯韦方程组, 用二维时域有限差分法 (FDTD) 证明了表面波的存在 [20–23]; 2) Henriques 等 [24,25] 采用自洽模型, 计算了表面波场区及扩散等离子体区的振动态和激发态粒子分布情况, 结果和实验自洽; 3) 考虑之前多是用二维简化程序来模拟的, 三维模拟亟待研究, 我们曾用三维 FDTD 程序进行了 SWP 源的数值模拟研究 [19,26–29]. 研究发现放电产生的等离子体与维持放电的微波分布有着强的相互作用, 将麦克斯韦方程组、电子在表面波场中的波尔兹曼方程、电子和离子的连续性方程及其动量和能量传输方程, 结合在一起数值求解, 可得出稳态等离子体参数及表面波场分布的自洽解. 国内微波等离子体数值模拟, 之前研究多是对电子回旋共振 (ECR) 等离子体的模拟. 主要提出三类模型: 1) 粒子模拟, 如电子科技大学用 PIC/MCC 法对 ECR 等离子体的电离过程及稳态特性做了研究 [30,31]; 2) 流体模拟, 之前 SWP 的数值模拟主要基于流体模型, 这种模拟大多只能得出放电稳态情形 [19–29]; 3) 混合模型, 如 Liu 等将电子当作流体, 离子和中性粒子当作粒子, 用混合模型对 ECR 等离子体进行了模拟研究 [32]. 此外, Boeuf 等 [33,34] 结合冷等离子体方程与麦克斯韦方程组, 用二维时域有限差分法 (FDTD) 证明了 110 GHz 大气压微波放电丝状流注的存在及产生原因; 周前红等 [35] 将描述电磁波的 Maxwell 方程组和简化的等离子体流体方程组耦合数值求解, 对 110 GHz 微波电离大气产生等离子体的过程进行了理论研究; 杨涓等采用等离子体数值模拟法对 ECR 离子推力器放电室内的等离子体流场分布进行了模拟 [36] 和用 PIC/MCC 法对 ECR 离子推力器栅极光学系统进行了粒子模拟 [37].

综述以上分析, 粒子模拟 SWP 很不成熟. 主要原因在于: 1) SWP 放电中各种物理过程变化快, 各粒子运动不同步, 导致模拟计算量大; 2) SWP 放电系统结构复杂, 放电参数多变, 大大增加了模拟难度. 不过, 随着计算模拟技术的发展, 用粒子模拟 SWP 的电离过程将成为可能. 对于 SWP 放电的数值模拟, 之前工作大多用流体模型模拟放电稳态

时的等离子体特性 [19–29], 对描述电离过程的粒子模拟研究鲜见报道. 我们曾对 SPP 在等离子体密度梯度层中的局域增强效应做了机理研究, 得到了表面电磁场的局域共振加热等离子体的物理结果 [38–42], 且获得了同行专家的认可 [43]. 但更精确的机理研究, 将依赖 PIC/MCC 粒子模拟 SWP 的电离过程. 本文将采用等离子体与高频电磁波相互作用的粒子模拟方法, 结合蒙特卡罗方法处理粒子碰撞的优势, PIC/MCC 数值模拟新型 SWP 的电离过程. 研究 SWP 的电离过程, 能探索 SWP 放电的物理本质、更精确地得到 SWP 的放电参数时空分布, 可为 SWP 源的优化设计提供物理原型和实现机理.

2 物理模型及模拟方法

2.1 物理模型

图 1 为 SPP 激励 SWP 放电系统, 2.45 GHz 微波经波模转换装置变化后, 进入放电腔体, 入射波与等离子体相互作用在介质板 - 等离子体界面形成 SPP, SPP 携带的表面电磁波放电维持了等离子体氛围. 放电室中充有工作气体 (如氩气), 带电粒子会与表面波发生自洽的相互作用, 同时粒子之间以及粒子与边界之间会有碰撞. 因此, 根据实际电离过程, 结合 PIC/MCC 模拟特点, 理论分析过程可分成电磁波场的求解、源的求解、等离子体集体运动、粒子间的碰撞、带电粒子与边界的相互作用以及归一化处理六个部分.

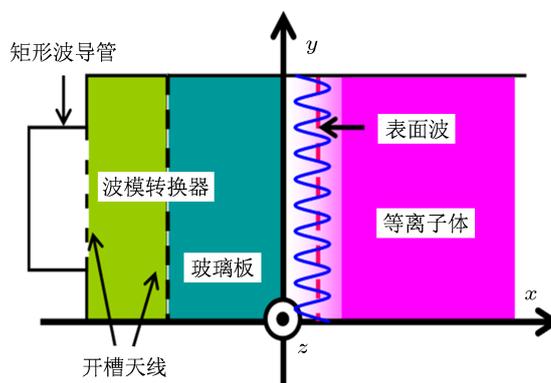


图 1 SWP 放电系统简图

根据理论分析的六个部分, 可得出 PIC/MCC 粒子模拟计算步骤. 首先初始化电磁场、初始电流密度和初始带电粒子位置及运动方向, 再由云方程算出空间网格的电流密度. 接着求解 Maxwell 方程

组计算出网格上的自洽电磁场, 结合 PIC 方法处理等离子体集体运动和 MCC 方法处理粒子碰撞, 得出带电粒子新的坐标和新的速度; 之后判断粒子是否到达边界, 若处于边界, 按粒子与边界相互作用处理; 最后, 判断计算是否收敛, 或做下一个循环, 或做数值诊断. 这样形成不断循环的过程, 直到带电粒子分布与表面波场分布达到收敛, 则认为模拟满足收敛条件, 计算结束.

2.2 模拟方法

根据理论模型, 并结合传统的 PIC/MCC 粒子模拟计算步骤, 可构造图 2 所示的计算流程图. 主要关键之处在于电磁场的求解、电流源的求解、推动粒子运动和粒子边界处理, 具体分述如下.

2.2.1 电磁场的求解

考虑 SWP 情况, 其等离子体维持是由 SPP 携带的表面波场激励放电. 理论解析表明, SPP 在高密度等离子体表面的特征波数基本上是一个常量, 且不随等离子体密度及电子动量传输频率而变. 高密度等离子体与介质分界面存在的 SPP, 其电磁模式一定是 TM 极化波模. 为了便于差分数值求解麦克斯韦方程组, 对 TM 极化波, 令简谐电磁波传播方程 (赫姆赫兹方程) 有解 $E(\tau) = E(\tau)\exp(\mp j\beta x)$,

则可整理得到如下方程组:

$$\mathbf{E} = E_T(x, t)\nabla_{\perp}E_{0x} + e_x E_L(x, t)\kappa_{\text{SPP}}^2 E_{0x}, \quad (1)$$

$$\mathbf{B} = B_T(x)e_x \times \nabla_{\perp}E_{0x}. \quad (2)$$

进一步, 在 (1), (2) 两式基础上, 求解麦克斯韦方程组, 可得

$$\frac{\partial}{\partial t}E_T = c\frac{\partial}{\partial x}B_T, \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}E_L = cB_T, \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}B_T = c\frac{\partial}{\partial x}E_T - c\kappa_{\text{SPP}}^2 E_L - J_T, \quad (5)$$

其中, J_T 为电流源, 表达式为

$$J_T = \frac{4\pi \int_A \mathbf{J} \cdot (e_x \times \nabla_{\perp}E_{0x}) dA}{\int_A |(\nabla_{\perp}E_{0x})|^2 dA}. \quad (6)$$

采用 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, 将 (3)—(5) 式离散化.

2.2.2 电流源的求解

令每个有限大小粒子包含实际的粒子数为 FN , 采用 x 方向和 y 方向为有限尺寸的粒子模型, z 方向无限薄, 而且在其有限尺寸内电荷取为高斯分布. 结合 (6) 式, 则电子电流源和离子电流源, 分别为

$$J_{\text{Te}}(x, y, t) = \frac{4\pi eFN \sum_{j,k} F(x-x_j, y-y_k) \mathbf{v}_j \cdot (e_x \times \nabla_{\perp}E_{0x})}{\int_A |(\nabla_{\perp}E_{0x})|^2 dA}, \quad (7)$$

$$J_{\text{Ti}}(x, y, t) = \frac{4\pi eFN \sum_{j,k} F(x-x_j, y-y_k) \mathbf{v}_j \cdot (e_x \times \nabla_{\perp}E_{0x})}{-\int_A |(\nabla_{\perp}E_{0x})|^2 dA}. \quad (8)$$

由于带电粒子一般不在格点上, 而电磁场是在网格点上的, 因此, 求解电磁场需要把电流分配到格点上. 实际操作时, 是将高斯函数 $F(x-x_j, y-y_k)$ 在格点 (x_j, y_k) 附近做泰勒展开, 然后再做差分处理, 整理后最终得到电流源项 J_g .

2.2.3 推动粒子运动

本文考虑的碰撞类型有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、电荷交换碰撞. 因此靶粒子均为中性粒子. 我们假设中性粒子在整个放电空间中均匀分布, 其能量满足由中性气体温度决定的 Maxwellian 分布, 在模拟过

程中我们不用对中性粒子进行跟踪. 在 Δt 时间内, 带电粒子 q 发生碰撞的概率为

$$P_{c,q} = 1 - \exp(-N\sigma_{r,q}(\epsilon_q)u_q\Delta t). \quad (9)$$

这时产生一个 [0,1] 均匀分布的随机数 R 与 $P_{c,q}$ 比较, 若比值小于 1, 则认为该带电粒子发生碰撞, 由 MCC 法处理; 若比值大于 1, 则认为该带电粒子不发生碰撞, 由 PIC 法处理.

1) MCC 部分: 如果带电粒子会发生碰撞, 则再产生另外一个随机数 R 与碰撞的分概率比较来确定具体发生碰撞的类型. 对于电子碰撞, 如 $R \in$

$[0, \sigma_{\text{elastic},e}/\sigma_{t,e})$, 则电子与中性粒子发生弹性碰撞; 如 $R \in [\sigma_{\text{elastic},e}/\sigma_{t,e}, (\sigma_{\text{elastic},e} + \sigma_{\text{excitation},e})/\sigma_{t,e})$, 则电子与中性粒子发生激发碰撞; 如 $R \in [(\sigma_{\text{elastic},e} + \sigma_{\text{excitation},e})/\sigma_{t,e}, 1)$, 则电子与中性粒子发生电离碰撞. 对于离子碰撞, 如 $R \in [0, \sigma_{\text{exchange},i}/\sigma_{t,i})$, 则离子与中性粒子发生弹性碰撞; 如 $R \in [\sigma_{\text{exchange},i}/\sigma_{t,i}, 1)$, 则离子与中性粒子发生电荷交换碰撞.

2) PIC 部分: 描述带电粒子运动使用 Newton-Lorentz 方程式

$$dp/dt = q_i(\mathbf{E}(\mathbf{x}_i) + \mathbf{p} \times \mathbf{B}(\mathbf{x}_i)/m_i), \quad (10)$$

$$dx_i/dt = p/m_i. \quad (11)$$

方程 (10), (11) 两式也采用 FDTD 法计算, 并根据粒子原来的位置、速度及所受的电磁力, 计算出新的位置和速度. 为了提高数值稳定性, FDTD 算法采用蛙跳法将电磁场、粒子位置及速度在时域上错开半个时间步, 具体蛙跳法计算流程如图 3 所示.

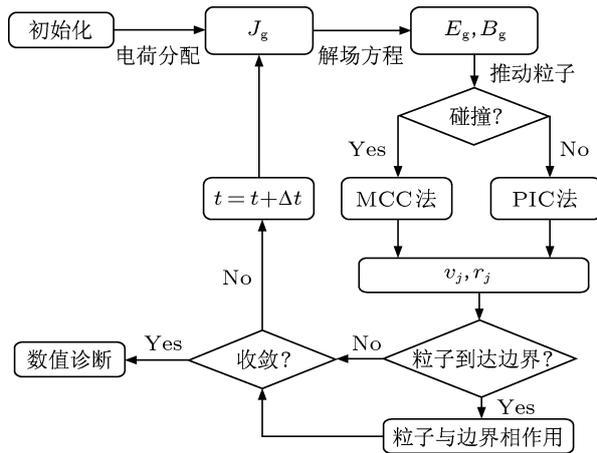


图 2 电离发展过程粒子模拟的流程图

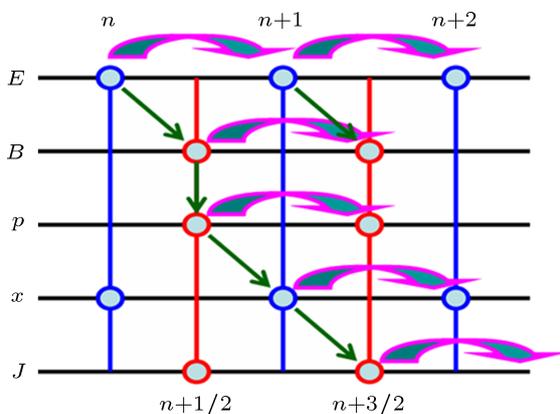


图 3 PIC 部分时域蛙跳的计算流程

2.2.4 粒子边界处理

1) 电子在边界处的处理: 在 SWP 放电的过程中, 带电粒子一边受到自洽电磁场的作用, 一边有可能与其它粒子发生碰撞, 在作用过程中, 带电粒子很有可能打到放电系统的边界上, 电子与边界的相互作用一般采用考虑二次电子发射的 MCC 模型. 严格说来, 电子与边界相互作用的具体过程由相应的发射系数决定, 而发射系数依赖于电子的入射能量、入射角度以及边界材料的属性. 具体计算处理时, 考虑到 SWP 源电子温度一般低于 20 eV, 二次电子发射总量很小, 可以忽略. 因此, 电子到达边界直接移除, 这样处理简单而误差也很小.

2) 离子在边界处的处理: 在等离子体边界处, 由于双极扩散而有鞘层存在. 考虑 SWP 等离子体高密度特性, 电子德拜长度在 0.01 mm 量级, 这么窄的边界层数值处理比较困难. 边界鞘层是非电中性的, 可以用电中性度来描述这个特性, 实际计算时, 比如在预鞘处取离子密度为电子密度的 1.05 倍. 在得到边界处的电子信息后, 利用电中性度求出离子密度, 通过麦克斯韦方程组求出双极电场及等离子体位势, 进而粒子模拟出边界处的离子密度和离子通量等信息. 在近似处理下, 认为离子到达边界后, 直接被边界吸收, 之后就不再对其跟踪计算. 这样处理后, 会出现静电荷, 在电离区必须用等离子体准电中性条件来平衡处理, 在边界处也用电中性度来平衡.

2.2.5 初始参数设定

PIC/MCC 法处理二维或三维空间高密度等离子体时, 相比流体模拟, 最大缺点是非常耗费计算资源. 不幸的是, SWP 源的最大等离子体密度值达到 10^{19} m^{-3} 之上, 计算量将十分巨大. 但是, 我们关注的焦点是 SPP 共振激励 SWP 放电的电离发展过程, 只要模拟的等离子体密度介于 10^{16} m^{-3} 至 10^{19} m^{-3} 之间, 就能完成所需的计算任务. 而 SWP 源的电离发展过程, 等离子体密度一般从小于 $5.0 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}$ 至大于 $1.0 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$. 因此, 我们设定初始等离子体密度值为 $1.0 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}$, 直到等离子体密度达到 $5.0 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$ 之上就可以强制停止计算.

因为, SPP 的波长约为 5.6 cm 和等离子体的趋肤深度约为 2.5 cm, 我们设定的计算区域为 $5.6 \text{ cm} \times 2.8 \text{ cm}$. 选择空间步长为 $2.1875 \times 10^{-2} \text{ cm}$, x 坐标的网格数为 256 和 y 坐标的网格数为 128. 设

定每个计算粒子代表 6.25×10^8 个真实粒子, 时间步长为 $\Delta t = 10^{-12}$ s. 电子初始温度为 2.0 eV, 氩气原子温度及氩离子温度均为 0.025 eV, 这些参数与实验测量相一致.

3 模拟结果及讨论

3.1 SPP 局域增强电场对电离过程的影响

首先研究局域增强电场对电离发展过程的影响, 设定氩气压强为 0.7 torr ($1 \text{ torr} = 1.33 \times 10^2 \text{ Pa}$) 恒定不变, 观测其电场分布和电子密度随着时间推进而变化的过程. 图 4 为电子速度 v_x - x 的相空间随时间演变增长过程, 图 5 所示为电场 E_x 分量和电子密度 n_e 的时空演化分布. 结合图 4 和图 5 对比观察, 可见, 在 $5000 \Delta t$ 之前, 等离子体加热模式为体

模加热, 在 $10000 \Delta t$ 之后, SWP 的加热模式为表面加热, $5000 \Delta t$ 至 $10000 \Delta t$ 之间为混合加热模式. 如图 5(a), (f) 和图 4(a) 所示, 此时电场和电子密度在整个空间区域均存在, 高能电子只少量存在于石英板-等离子体界面附近, 基本上在整个空间被均匀加热; 在 $5000 \Delta t$ 时, 石英板-等离子体界面附近出现电场增强位置点, 高能电子和电子密度局限于电场峰值处快速增加; 自 $10000 \Delta t$ 开始, 电场峰值仅存在于石英板-等离子体界面附近, 且电场幅值在等离子体区域逐渐减小, 同时等离子体密度也随着离开石英板-等离子体界面距离而指数衰减. 此外, 如图 4 所示, 电子速度的 x 分量, 大于 0 的数量大于小于 0 的数量, 可见电子主要向等离子体密度较低的方向漂移, 也即 SWP 下游区的等离子体是扩散漂移得到的.

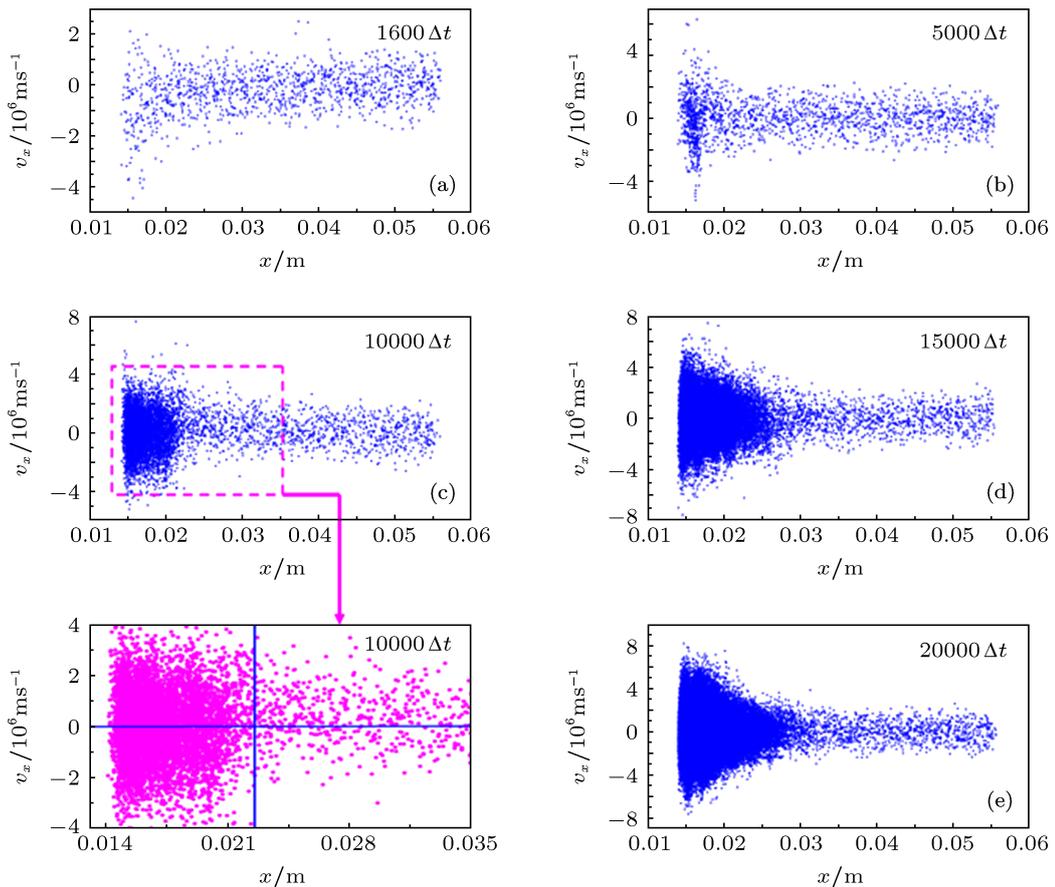


图 4 电子速度 v_x - x 的相空间随时间演变过程

在 $1600 \Delta t$ 之前, 电子密度小于 2.45 GHz 微波截止密度 $7.4 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}$, 入射电磁波能够穿越等离子体区, 因而电子被电场体模加热. 石英板

表面的增强电场是由于电位移矢量必须在界面两边连续而石英的介电常数大于等离子体等效介电常数致使, 进一步使得界面处出现少量高能电子.

随着等离子体密度提高, 局部区域首先将出现电子密度值大于 $7.4 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}$, 入射微波在这局域将被电子云反射, 局域的等效介电常数为负数, 电场将在此局域出现正负增强分布, 即出现表面电磁波, 如图 5(b) 所示. 继续增高等离子体密度到 $3.57 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$, 此时将出现 SPP, 也如图 5(b) 所示. 在 $15000 \Delta t$ 左右, 整个石英板表面区域的等离子体密度都大于 $3.57 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$, SPP 将同时存在于整个石英板-等离子体界面. 此时, 等离子体将沿面均匀加热. 可是, 由于等离子体密度太高, SPP 的局域增强电场将在等离子体侧急剧衰减, 等离子体的加

热有效区域也就局限在薄薄的界面而加热效率不高. 但是, 这儿存在着波模转换机理, 即局域增强的 SPP 电场在共振点处转化为电子等离子体波 (EPW, 其传播速度为电子的热速度). 转化后的 EPW 可以在高密度等离子体中传播, 同时扩展了等离子体的加热空间, 如图 5(d) 和 (e) 所示. 如 $10000 \Delta t$ 时的速度相空间分布 (4(c) 的放大图) 所示, 电子的先导在 $10000 \Delta t$ (等于 10 ns) 内约前进了 1.0 cm, 则可算出电子先导的前进速度约 10^6 ms^{-1} 量级, 这个值接近电子热速度, 也同时佐证了高效电子加热的激励源是 EPW 加热的物理结果.

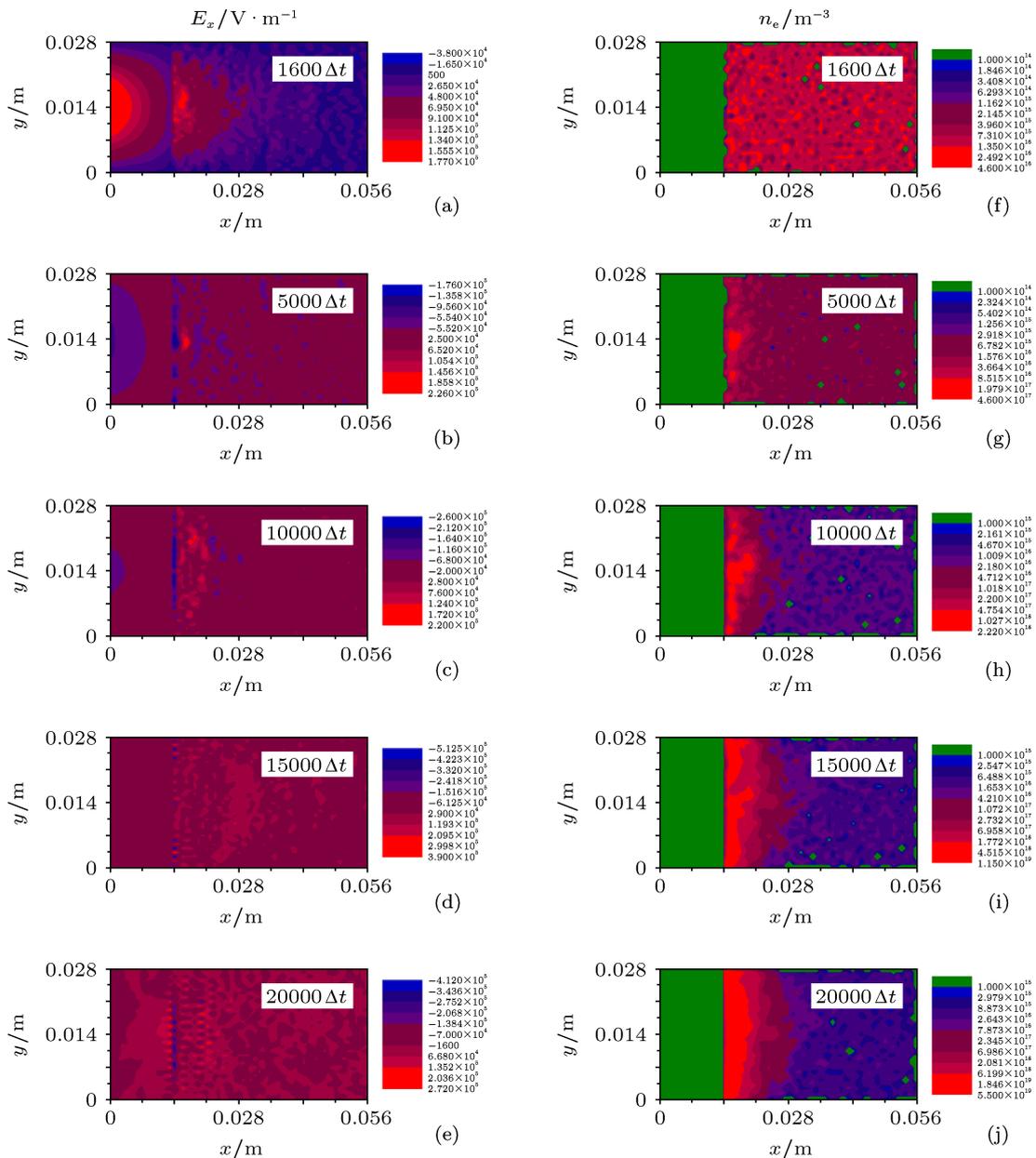


图 5 电场 E_x 分量和电子密度 n_e 的时空演化分布

至此,我们清楚了 SPP 的局域增强电场对电离发展过程的影响. SPP 局域增强电场只是在石英板界面的电子密度均大于 $3.57 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$ 时才会激起. 一旦存在 SPP 的局域增强电场,由于其电场值的方向与等离子体密度梯度方向一致,将会发生局域增强的 SPP 电场转化为 EPW, EPW 随着电子向低密度区域飘移,边加热边衰减其幅值. 由于 SPP 的增强电场值远远大于普通的表面电磁波,因而 SPP 转化为 EPW 的效率较高,致使 SPP 型 SWP 源的放电效率更高.

3.2 气体压强对电离过程的影响

接着研究气体压强对 SWP 电离过程的影响,改变工作气体氩气的压强,每次模拟到 $10000 \Delta t$ 时暂停,抽取其电场、电子密度及电子速度的数据. 图 6、图 7 和图 8 分别展示了电场 E_x 分量、电子密度 n_e 和电子速度 v_x 随气压变化在二维空间中的分布. 如图 6 所示, 0.1 torr 氩气压强, $10000 \Delta t$ 时电场分布于整个等离子体区域; 气压增高到 0.3 torr, 在石英板-等离子体界面已经出现 SPP 局域增强电场; 气压大于 0.7 torr 时, SPP 的局域增强电场已占

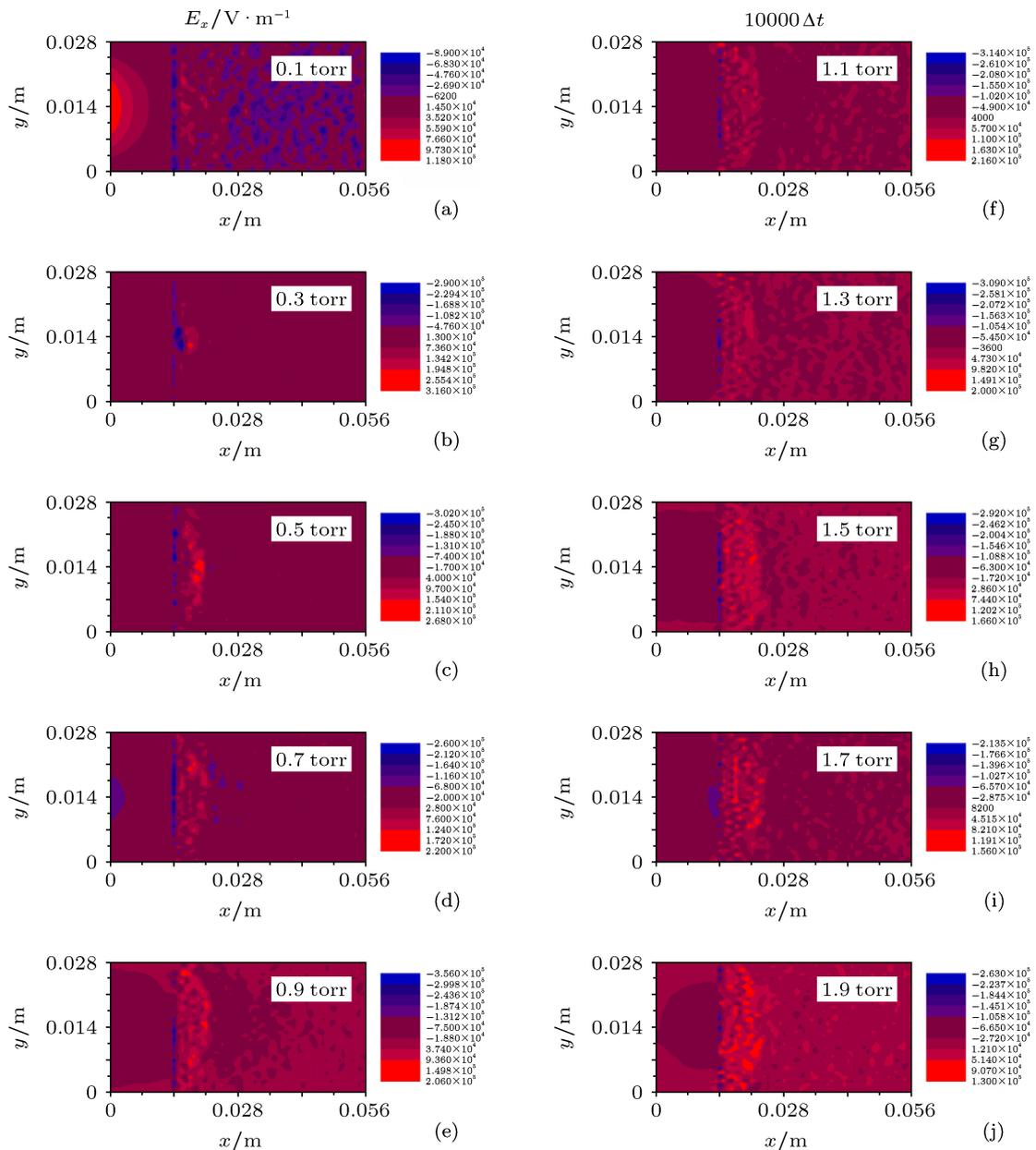


图 6 电场 E_x 分量随气压变化在二维空间中的分布

据整个石英板-等离子体界面,且随着气压增高,在石英板-等离子体界面处等离子体侧的 EPW 推进区域逐渐增大.如图 7 所示,0.1 torr 氩气压强,10000 Δt 时电子密度最大峰值小于微波截止密度而分布于整个等离子体区域;气压增高到 0.3 torr,在石英板-等离子体界面附近出现电子密度峰值 $7.1 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$;气压大于 0.7 torr 时,整个石英板-等离子体界面处的电子密度值均大于共振截止密度 $3.57 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$,且随着气压增高电子密度的峰值增长达到饱和值 $2.5 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$ 左右.再如如图 8 所示,0.1 torr 氩气压强,10000 Δt 时电子在整个等

离子体区域被入射微波加热;气压增高到 0.3 torr,在石英板-等离子体界面附近出现电子共振加速;0.3 torr 至 0.7 torr 之间,高能电子向等离子体低密度区发展;气压大于 0.7 torr 时,高能电子已经推进至最远处而渐趋饱和.

结合图 6、图 7 和图 8,对比综合分析.等离子体密度低于微波截止密度时,电子首先被入射微波加热,此时入射微波穿越整个等离子体区,微波能量不集中,微波电场幅值也较低,电子主要通过碰撞加热;而气压较低时,电子的平均自由程较长,电子碰撞概率小,因而加热效率低.气压增高后,减小

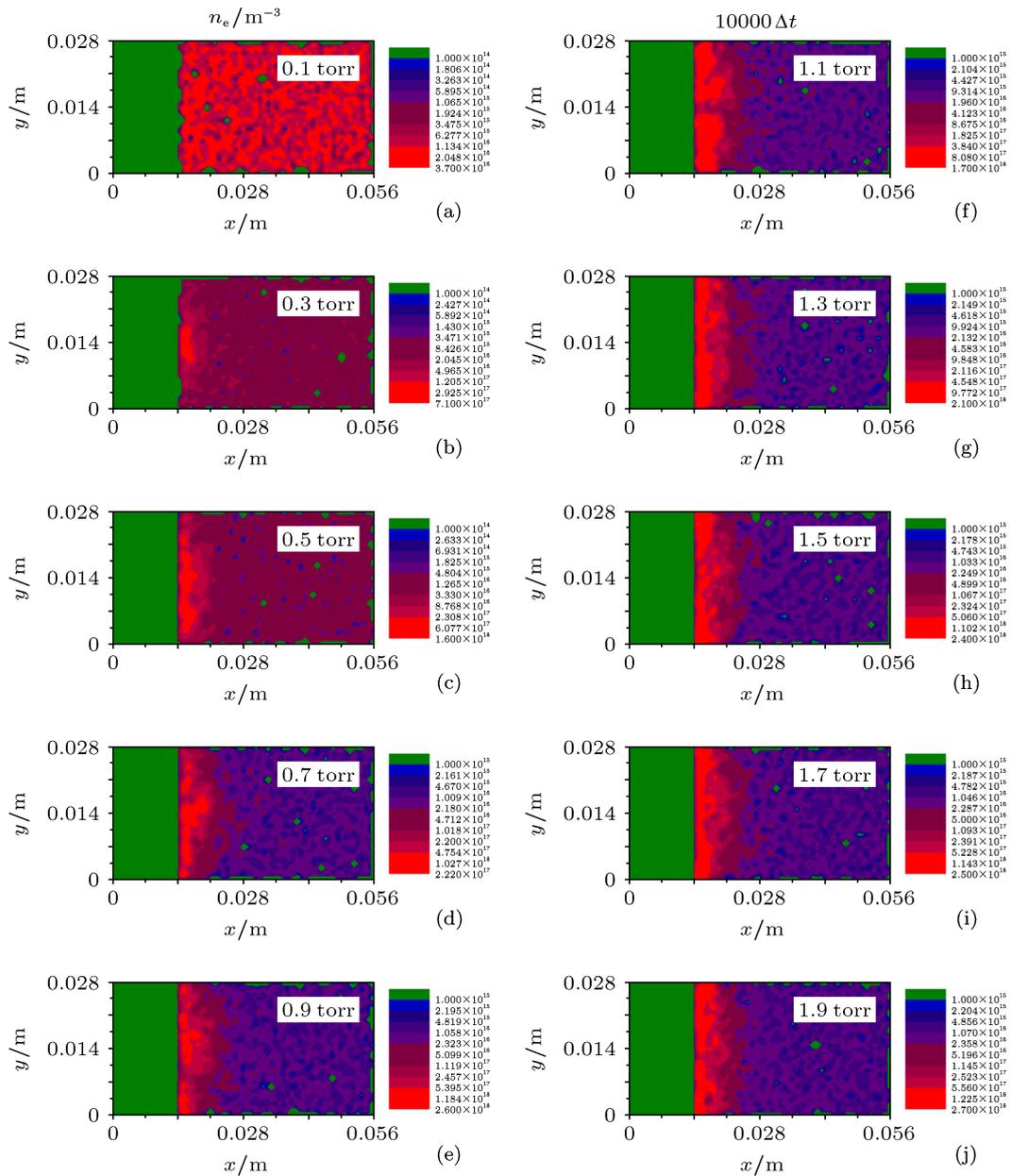


图 7 电子密度 n_e 随气压变化在二维空间中的分布

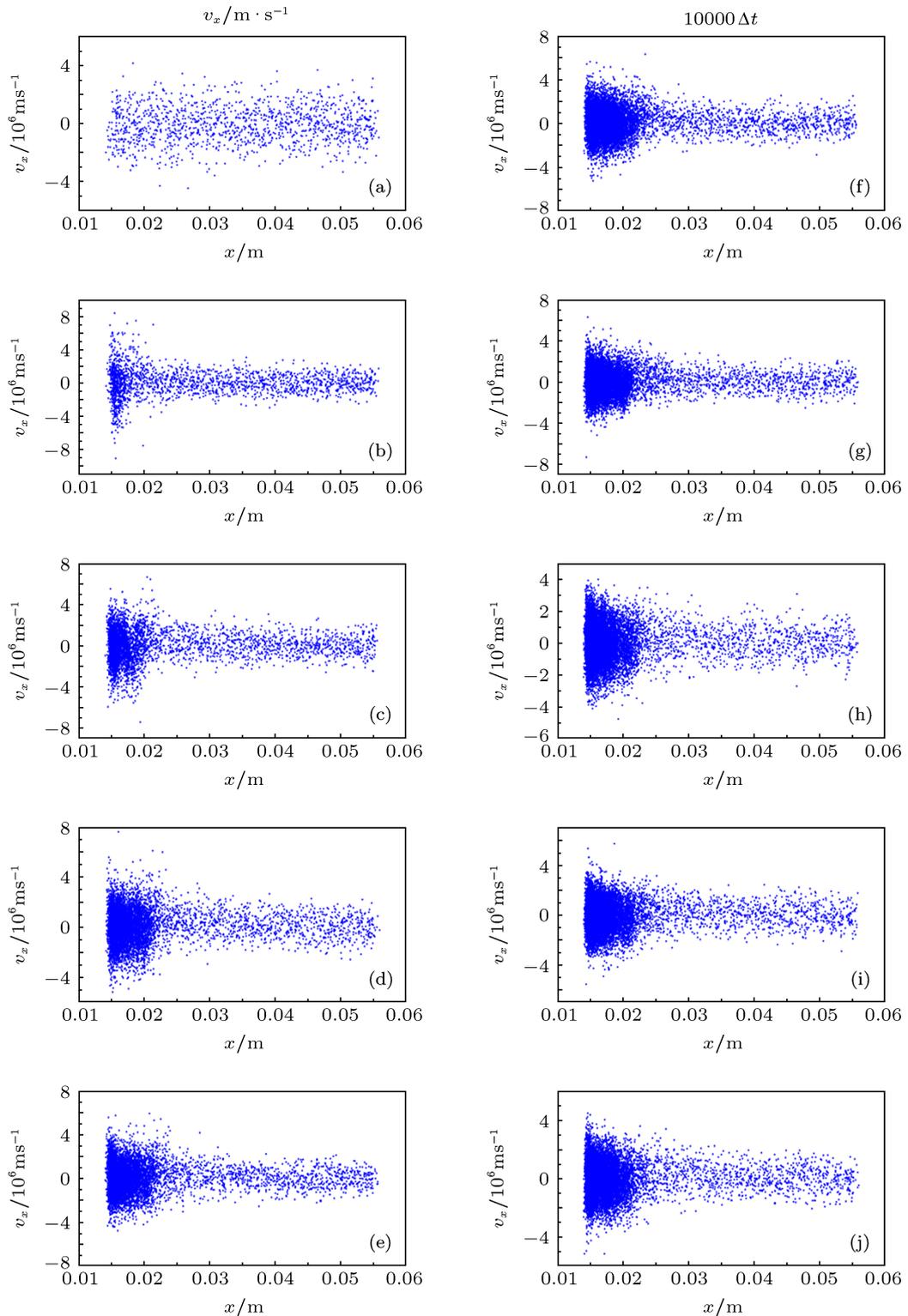


图8 电子速度 v_x 随气压变化在二维空间中的分布

了电子平均自由程而同时提高了电子碰撞概率, 电子密度很快达到微波截止之上, 此时会在石英板-等离子体界面处出现表面电磁波. 表面电磁波能够转化为 EPW, 此时电子加热模式出现波模共振转换加

热, 电子密度及高能电子数量将快速增加, 很快达到共振截止密度之上. 进一步激起 SPP 效应, SPP 的局域增强电场与等离子体密度梯度方向 (EPW 的电场方向) 一致, SPP 转换为 EPW 的效率大于表

面电磁波转化为 EPW 的效率, 而出现更高的加热效率.

总结以上分析, 气体压强增高, 有利于 SPP 的较早激起而提高了电离效率, 但是气压增大到一定值后, 也会出现饱和现象. 深入分析, 气压太低, 电子密度达不到 SPP 共振截止密度, SPP 不会激起, 微波放电效率低; 气体压强过高, 电子平均自由程过短而碰撞频繁, 电离发展也会缓慢. 不过气体压强增高到大气压时, 此时放电模式会出现变化, 这已超出本文的讨论范围, 我们正在进行研究, 会在不久报道.

4 结论

简言之, 本文以 SWP 放电的 PIC/MCC 数值模

拟为研究手段, 探讨了气体压强及 SPP 局域增强电场影响电离过程的电磁能量耦合机理. 介绍了等离子体与电磁波相互作用的 PIC 方法和处理碰撞效应的 MCC 方法. 模拟结果表明 SWP 的高效产生是 SPP 的局域增强电场致使, 气体压强能够改变波模共振转换出现时刻而影响了 SWP 的电离发展过程.

SPP 是金属 (或高密度等离子体) 与介质分界面出存在的一种局域电磁模式, 其局域的增强电场特性, 致使其表现出很多物理效应^[43]. 研究 SPP 加热等离子体放电的电离发展过程, 不仅能展示丰富的物理内涵, 还有潜在的应用前景. 本文只是用数值模拟方法展示了低气压 SWP 源的电离发展过程, 对于大气压 SPP 激励 SWP 放电的电离过程研究还需要更深入的探讨.

- [1] Sugai H, Ghanashev I, Nagatsu M 1998 *Plasma Sources Sci. Technol.* **7** 192
- [2] Nagatsu M, Naito K, Ogino A, Nanko S 2006 *Plasma Sources Sci. Technol.* **15** 37
- [3] Tian C, Nozawa T, Ishibasi K, Kameyama H, Morimoto T 2006 *J. Vac. Sci. Technol. A* **24** 1421
- [4] Yasaka Y, Ishii N, Yamamoto T, Ando M, Takahashi M 2004 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **32** 101
- [5] Nagatsu M, Terashita F, Nonaka H, Xu L, Nagata T, Koide Y 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 211502
- [6] Xu L, Terashita F, Nonaka H, Ogino A, Nagata T, Koide Y, Nanko S, Kurawaki I, Nagatsu M 2006 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39** 148
- [7] Kousaka H, Ono K, Umehara N, Sawada I, Ishibashi K 2006 *Thin Solid Films* **506-507** 503
- [8] Wu T, Kou C 2005 *Phys. Plasmas* **12** 103504
- [9] Xu X, Liu F, Zhou Q, Liang B, Liang Y, Liang R 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 011501
- [10] Wu C, Zhan R, Wen X, Huang W 2001 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **29** 13
- [11] Liang Y, Ou Q, Liang B, Liang R 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 1761
- [12] Liang B, Ou Q, Liang Y, Liang R 2007 *Chin. Phys.* **16** 3732
- [13] Hu Y, Chen Z, Liu M, Hong L, Li P, Zheng X, Xia G, Hu X 2011 *Chin. Phys. Lett.* **28** 115201
- [14] Chen Z, Liu M, Zhou Q, Hu Y, Yang A, Zhu L, Hu X 2011 *Chin. Phys. Lett.* **28** 045201
- [15] Liu M, Sugai H, Hu X, Ishijima T, Jiang Z, 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]
- [16] Chen Z, Liu M, Zhou P, Chen W, Lan C, Hu X 2008 *Plasma Sci. Technol.* **10** 655
- [17] Chen Z, Liu M, Tang L, Hu P, Hu X 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 013314
- [18] Chen Z, Liu M, Tang L, Lv J, Wen Y, Hu X 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 063304
- [19] Chen Z, Liu M, Lan C, Chen W, Luo Z, Hu X 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 4333
- [20] Chen Q, Aoyagi P H, Katsurai M 1999 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **27** 164
- [21] Toba T, Katsurai M 2002 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **30** 2095
- [22] Okamura Y, Yamamoto Y, Fujita K, Miyoshi T, Teramoto K, Kawaguchi H, Kagami S, Furukawa M 2007 *J. Vac. Sci. Technol. A* **25** 816
- [23] Nagatsu M, Naito K, Ogino A, Ninomiya K, Nanko S 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 161501
- [24] Tatarova E, Dias F M, Henriques J, Ferreira C M 2005 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **33** 866
- [25] Henriques J, Tatarova E, Dias F M 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 103304
- [26] Chen Z, Liu M, Lan C, Chen W, Tang L, Luo Z, Yan B, Lv J, Hu X 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3484
- [27] Lan C, Lan C, Hu X, Chen Z, Liu M 2009 *Chin. Phys. B* **18** 2412
- [28] Lan C, Chen Z, Liu M, Jiang Z, Hu X 2009 *Plasma Sci. Technol.* **11** 66
- [29] Lan C, Hu X, Liu M 2011 *Acta. Phys. Sin.* **60** 025205 (in Chinese) [蓝朝晖, 胡希伟, 刘明海 2011 物理学报 **60** 025205]
- [30] Jin X, Yang Z, Huang T 2007 *Phys. Plasmas* **14** 113505
- [31] Jin X, Huang T, Liao P, Yang Z 2009 *Acta. Phys. Sin.* **58** 5526 (in Chinese) [金晓林, 黄桃, 廖平, 杨中海 2009 物理学报 **58** 5526]
- [32] Liu M, Hu X, Yu G, Wu Q, Pan Y 2002 *Plasma Sources Sci. Technol.* **11** 260
- [33] Boeuf J P, Chaudhury B, Zhu G 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 015002
- [34] Zhu G, Boeuf J P, Li J 2012 *Acta. Phys. Sin.* **61** 235202 (in Chinese) [朱国强, Jean-Pierre Boeuf, 李进贤 2012 物理学报 **61** 235202]
- [35] Zhou Q, Dong Z, Chen J 2011 *Acta. Phys. Sin.* **60** 125202 (in Chinese) [周前红, 董志伟, 陈京元 2011 物理学报 **60** 125202]
- [36] Yang J, Shi F, Yang T, Meng Z 2010 *Acta. Phys. Sin.* **59** 8701 (in Chinese) [杨涓, 石峰, 杨铁链, 孟志强 2010 物理学报 **59** 8701]
- [37] Chen M, Mao G, Xia G, Yang J, Sun A 2012 *Propulsion Technology* **33** 150 (in Chinese) [陈茂林, 毛根旺, 夏广庆, 杨涓, 孙安邦 2012 推进技术 **33** 150]
- [38] Chen Z, Liu M, Tang L, Lv J, Hu X 2010 *Chin. Phys. Lett.* **27** 025205
- [39] Chen Z, Liu M, Hong L, Zhou Q, Cheng L, Hu X 2011 *Phys. Plasmas* **18** 013505
- [40] Chen Z, Ye Q, Xia G, Hong L, Hu Y, Zheng X, Li P, Zhou Q, Hu X, Liu M 2013 *Phys. Plasmas* **20** 033502

- [41] Chen Z, Liu M, Xia G, Huang Y 2012 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **40** 2861
[42] Chen Z, Xia G, Zhou Q, Hu Y, Zheng X, Zhen Z, Hong L, Li P, Huang

- Y 2012 *Rev. Sci. Instrum.* **83** 084701
[43] Dong T, Ye K, Liu W 2012 *Acta. Phys. Sin.* **61** 145202 (in Chinese)
[董太源, 叶坤涛, 刘维清 2012 物理学报 **61** 145202]

PIC/MCC simulation of the ionization process of SWP influenced by gas pressure and SPP*

Chen Zhao-Quan^{1)†} Xia Guang-Qing²⁾ Liu Ming-Hai³⁾ Zheng Xiao-Liang¹⁾
Hu Ye-Lin¹⁾ Li Ping¹⁾ Xu Gong-Lin¹⁾ Hong Ling-Li¹⁾
Shen Hao-Yu¹⁾ Hu Xi-Wei³⁾

1) (College of Electrical & Information Engineering, Anhui University of Science and Technology, Huainan 232001, China)

2) (State Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

3) (State Key Laboratory of Advanced Electromagnetic Engineering and Technology, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

(Received 8 March 2013; revised manuscript received 28 May 2013)

Abstract

A surface-wave plasma (SWP) source based on surface plasmon polariton (SPP) has fine performances such as high density, low temperature, high production, and so on. It is applied in electronic device micro or nano processing, material modification, etc. Because the ionization of SWP heated by SPP is difficult to describe by theoretical analysis and experimental measurement, the ionization process of producing uniform stable SWP source is not yet well understood. The method in this paper is a numerical simulation of SWP discharges. The electromagnetic energy coupling mechanism of ionization process, influenced by gas pressure, which is studied by combining particle-in-cell (PIC) simulation of reciprocity between plasma and electromagnetic wave with Monte Carlo Collide (MCC) method in merit of dealing with particle collision. Simulated results suggest that the efficient production of SWP is induced by locally enhanced electric field of SPP, and the gas pressure influences the ionization process of SWP by altering the appearance time of wave-mode resonant conversion. Results of this paper show the ionization process of SWP discharge maintained by SPP, and further provide some advices for designing the parameter optimization of next generation meter-scale SWP source.

Keywords: surface-wave plasma, surface plasmon polariton, particle-in-cell simulation, ionization process

PACS: 52.65.Rr, 52.65.Pp, 52.50.Sw, 52.80.Pi

DOI: 10.7498/aps.62.195204

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11105002), the Open-End Fund of State Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment (Grant No. GZ1215), the Natural Science Foundation for University in Anhui Province, China (Grant No. KJ2013A106), the Education Project of Creation and Innovation for College Students in China (Grant No. 201210361058), and the Doctoral Scientific Research Fund of AUST.

† Corresponding author. E-mail: zqchen@aust.edu.cn