

# 面向复杂求解域的高效粒子网格/蒙特卡罗模型 与阳极层离子源仿真\*

崔岁寒<sup>1)2)#</sup> 左伟<sup>1)#</sup> 黄健<sup>1)</sup> 李熙腾<sup>1)</sup> 陈秋皓<sup>1)</sup> 郭宇翔<sup>1)</sup> 杨超<sup>1)</sup>  
吴忠灿<sup>1)</sup> 马正永<sup>1)</sup> 傅劲裕<sup>2)</sup> 田修波<sup>1)</sup> 朱剑豪<sup>2)</sup> 吴忠振<sup>1)†</sup>

1) (北京大学深圳研究生院新材料学院, 深圳 518055)

2) (香港城市大学物理与材料科学系, 香港 999077)

(2022年12月15日收到; 2023年1月26日收到修改稿)

等离子体仿真是研究等离子体放电特性的重要手段, 特别是阳极层离子源, 其放电结构的几何特性对等离子体特性的作用很难通过实验手段进行系统研究. 然而, 传统仿真模型一般是针对离子源进行整体建模, 离子源的阴阳极几何轮廓形成的复杂求解域, 导致模型的计算效率和收敛性较差. 鉴于此, 将离子源结构仿真与等离子体仿真分离, 首先利用磁镜原理将离子源内外阴极大小、形状和相对位置等一系列阴极几何参数简化为磁镜比  $R_m$  和磁镜中心磁感应强度  $B_0$  两个磁镜参数, 并在此基础上, 建立了高效粒子网格/蒙特卡罗模型, 将收敛时间由  $1.00 \mu\text{s}$  缩短到  $0.45 \mu\text{s}$ , 大幅提升了计算效率和稳定性. 进一步利用该模型系统研究了阳极层离子源放电结构的几何特性对等离子体特性的影响规律, 发现  $R_m = 2.50$ ,  $B_0 = 36 \text{ mT}$  时磁镜对等离子体约束效果最佳, 当放电中心的位置与内外阴极间磁镜中心重合时, 不仅能够输出高密度离子束流, 同时可大幅减少阴极刻蚀, 并保证内外阴极的刻蚀平衡.

**关键词:** 等离子体仿真, 阳极层离子源, 放电结构, 等离子体特性

**PACS:** 52.50.Dg, 52.55.Jd, 52.65.Rr, 52.65.Pp

**DOI:** 10.7498/aps.72.20222394

## 1 引言

阳极层离子源<sup>[1]</sup>多用于气体电离, 可产生高密度离子束流, 用于实现离子束辅助沉积、基片清洗和离子注入<sup>[2]</sup>等功能. 离子源放电结构的几何特性, 包括阴阳极的大小、形状、相对位置等, 直接决定放电状态和等离子体的输出特性<sup>[3]</sup>. 然而, 基于试错原理的实验方法很难建立离子源多种结构与放电特性的系统规律, 等离子体仿真技术便成为研

究其放电特性, 并对其结构进行设计与优化的主要手段.

目前, 等离子体仿真领域使用的基础模型主要有流体模型<sup>[4]</sup>、等离子体整体模型<sup>[5]</sup>和粒子网格/蒙特卡罗 (particle in cell/Monte Carlo collision, PIC/MC) 模型<sup>[6]</sup>等. 其中, 流体模型通过求解连续性方程、泊松方程、反应方程和扩散方程组成的偏微分方程组<sup>[7]</sup>来计算等离子体密度分布, 然而阳极层离子源的阴阳极轮廓围成的求解域为复杂的凹多边形, 致使流体模型中的偏微分方程组的计算极难收敛<sup>[8]</sup>.

\* 深圳市科技计划 (批准号: SGDX20201103095406024, JSGG20191129112631389)、2022年深圳市高等院校稳定支持计划 (批准号: 20220810143642004)、北京大学深圳研究生院新引进高端人才财政补助科研启动经费 (批准号: 1270110273) 和深圳市博士后出站科研资助经费 (批准号: 2129933651) 资助的课题.

# 同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: wuzz@pku.edu.cn

相比而言, 等离子体整体模型根据放电区域内等离子体各组分的反应细节构建常微分方程组, 进而求解各组分的密度变化<sup>[5]</sup>, 收敛性得到大幅提高<sup>[9]</sup>. 然而, 整体模型的计算依赖于放电区域的体积、表面积和在阴极上的投影面积进行<sup>[10]</sup>, 而阴阳极复杂的多边形轮廓使模型难以对上述关键参数进行估算, 致使仿真精度大幅降低. PIC/MC 模型<sup>[6]</sup>采用跟踪大量电子和离子运动过程的推演算法<sup>[5]</sup>, 能够进一步提高模型的收敛性, 并避免参数缺失<sup>[11]</sup>, 在阳极层离子源的仿真上取得较好的效果<sup>[12]</sup>. 但 PIC/MC 模型是对离子源进行整体建模, 对复杂求解域的适应性依旧非常有限, 主要体现在以下两个方面: 首先, PIC/MC 模型本身会耗费巨大的计算资源<sup>[5,11,13,14]</sup>, 从初始状态到稳定放电需要较长的仿真时间, 因此无法快速对离子源结构变化做出响应, 计算效率极低; 其次, 离子源求解域的复杂边界与带电粒子的相互作用会使得外界噪声增大<sup>[15]</sup>, 不仅影响模型稳定性, 导致仿真结果失真, 还会进一步增大模型的计算量, 降低计算效率. 故在利用 PIC/MC 模型研究阳极层离子源等离子体特性的工作中<sup>[16,17]</sup>, 放电结构的几何参数始终局限于单一变量, 且其可调区间被大幅压缩<sup>[3]</sup>, 导致仿真结果的适用范围较小, 参考价值不高.

鉴于此, 本文首先利用磁镜原理将离子源的结构几何参数 (大小、形状和相对位置) 简化为磁镜

参数 (磁镜比和磁镜中心磁感应强度), 研究了磁镜特性对等离子体特性的影响规律. 并在此基础上, 提出面向复杂求解域的高效 PIC/MC 模型, 通过求解优化阴极结构下的电子密度分布, 进而进行等离子体放电计算, 加快了模型的收敛过程, 有效提高了模型的计算效率和稳定性. 利用该模型系统研究了阳极层离子源放电结构的几何特性对其等离子体特性的影响规律, 获得了高强度放电与阴极表面刻蚀的平衡条件.

## 2 仿真模型的构建

### 2.1 磁镜模型

根据阳极层离子源的工作原理<sup>[18]</sup>, 内外阴极均为导磁材料并分别与磁铁的 NS 极联通, 因此无论内外阴极结构的几何特征 (形状、大小和相对位置) 如何, 穿过内外阴极表面的总磁通量大小始终相等, 且方向始终相反<sup>[19]</sup>. 因此, 阳极层离子源内外阴极间的磁场等效于一个磁镜结构<sup>[20]</sup>, 该结构实现了对等离子体的约束. 为此, 将阳极层离子源的内外阴极近似抽象成两个相同的磁铁相互吸引的简易磁镜模型, 如图 1 所示. 以两磁铁的对称中心点  $Q(0, 0)$  为原点建立平面直角坐标系, 并将点  $Q$  定义为磁镜中心, 显然在分析线  $\alpha$  上点  $Q$  的磁感应强度最小, 而在对称轴  $\beta$  上点  $Q$  的磁感应强

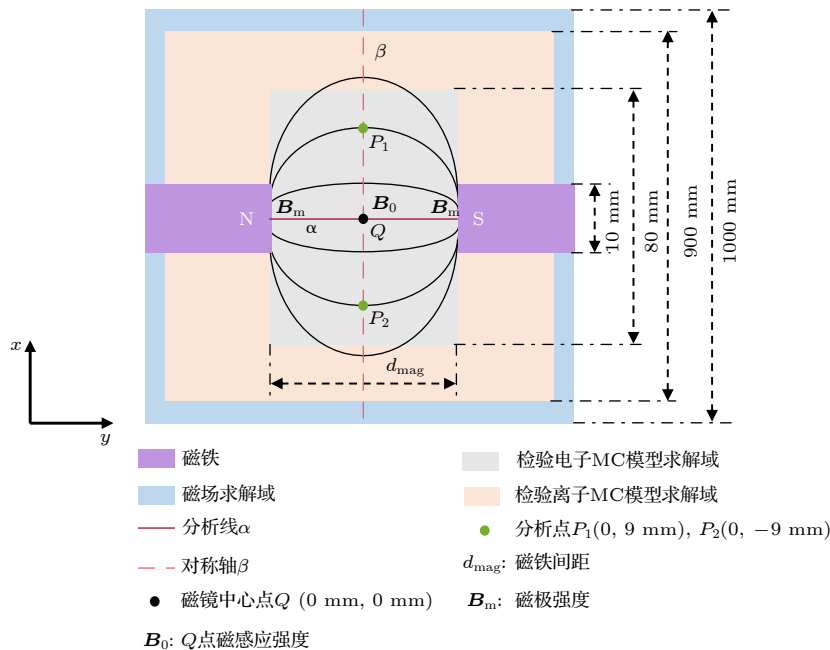


图 1 磁镜模型及检验粒子 MC 模型示意图

Fig. 1. Schematic diagram of the magnetic mirror model and test particle MC model.

度最大. 根据矢量场原理<sup>[21]</sup>, 磁镜特征可通过磁镜中心点  $Q$  的磁感应强度  $B_0$  (T) 以及磁镜比  $R_m$  进行描述, 其中  $B_0$  表征磁镜的强度, 而  $R_m = B_m/B_0$  表征磁镜的分布形状. 显然, 磁镜特征完全由两磁铁磁极的磁感应强度  $B_m$  (T) 和几何参数 (大小、形状、相对位置) 决定. 因此, 在磁铁强度固定的条件下, 磁镜特征等价于内外阴极结构的几何特征, 这就为仿真研究提供了一个变量简化的机会, 即用  $B_0$  和  $R_m$  两个磁镜特征变量代替复杂的内外阴极结构的几何特征 (大小、形状、相对位置).

背景磁场模型通过 Comsol Multiphysics 6.1 有限元分析软件进行求解. 将磁场求解域设置为边长为 1 m 的正方形区域, 如图 1 淡蓝色区域所示, 并假设磁场在求解域内部满足磁通量守恒的条件. 由于等离子体自感磁场远小于永磁体磁场<sup>[22,23]</sup>, 因此背景磁场可视为完全由永磁体提供, 故满足静磁场 Maxwell 方程组:

$$\begin{cases} \mathbf{B} = \mu_0 \mu_r \mathbf{H}, \\ \nabla \times \mathbf{H} = 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \end{cases} \quad (1)$$

其中,  $\mathbf{B}$  (T) 为磁感应强度,  $\mathbf{H}$  (A/m) 为磁场强度,  $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$  N/A<sup>2</sup> 为真空磁导率,  $\mu_r$  为相对磁导率, 由材料自身性质决定. 本工作中, 设置非导磁材料的相对磁导率为 1, 软磁性导磁材料相对磁导率为 4000.

## 2.2 检验电子蒙特卡罗 (MC) 模型

由于等离子体整体呈电中性<sup>[24]</sup>, 其电子密度分布即可表征整体等离子体空间密度分布<sup>[25]</sup>. 因此, 在不考虑外加电场作用的条件下, 本文采用 2d3v 检验电子 MC 方法<sup>[26]</sup> 仿真电子在磁镜中的运动过程, 用以分析磁镜对等离子体的约束作用, 模型求解域的边长为 900 mm, 如图 1 粉色区域所示. 求解域边界处的磁感应强度介于  $10^{-3}$ — $10^{-4}$  mT 之间, 对应的电子回旋半径约为 5.7—57.0 m, 远大于求解域的尺度, 因此可忽略求解域外磁场对电子的约束作用. 模型采用 Matlab 2021a 软件编辑实现,

仿真总时长为 5  $\mu$ s, 时间步长  $\Delta t = 1 \times 10^{-11}$  s. 检验电子由磁极边界连续释放, 每隔  $1 \times 10^{-9}$  s 释放 500 个, 设定平均电子温度  $T_e = 3$  eV<sup>[27]</sup>, 满足 Maxwell 分布:

$$f(v) = 4\pi\nu^2 \sqrt{\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^3} \exp\left(-\frac{m\nu^2}{2kT}\right), \quad (2)$$

其中  $f$  为概率密度,  $\nu$  (m/s) 为电子速率, 电子质量  $m_e = 9.1 \times 10^{-31}$  kg,  $e = 1.6 \times 10^{-19}$  C 为单位电荷量. 检验电子 MC 模型假设等离子体整体为电中性, 且不考虑外加电场, 因此可忽略等离子体自洽电势的影响, 即忽略电场力的作用, 只考虑电子在磁场力作用下的运动. 故电子的位移  $\mathbf{r}$  (m) 和速度  $\mathbf{v}$  (m/s) 满足:

$$\begin{cases} e \frac{d\mathbf{v}}{dt} = e \times \mathbf{v}(t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}), \\ \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}(t), \end{cases} \quad (3)$$

式中,  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$  为电子所处位置的磁感应强度. 当检验电子运动至求解域边界或磁铁边界时即直接消失.

检验电子在运动过程中会与背景 Ar 原子发生弹性碰撞和电离碰撞, 见表 1<sup>[28]</sup>. 每一个时间步长  $\Delta t$  内的碰撞概率表达式为

$$P = 1 - \exp[-N_0 \sigma(\epsilon) \nu \Delta t], \quad (4)$$

其中,  $\epsilon$  (eV) 为带电粒子能量,  $\sigma$  (m<sup>2</sup>) 为带电粒子的碰撞截面, 由  $\epsilon$  决定<sup>[29]</sup>;  $N_0$  (m<sup>-3</sup>) 为背景 Ar 原子的数密度. 模型中设定气压  $p = 0.5$  Pa, 背景温度  $T = 300$  K, 则背景 Ar 原子数密度可由理想气体状态方程求出:

$$N_0 = \frac{pN_A}{RT}, \quad (5)$$

其中,  $R = 8.314$  J/(mol·K) 为摩尔气体常数,  $N_A = 6.02 \times 10^{23}$  mol<sup>-1</sup> 为阿伏伽德罗常数.

根据 MC 方法<sup>[6]</sup>, 通过生成一个随机数  $R_{\text{coll}} \in [0, 1]$ , 弹性碰撞概率  $P_{e\_el}$  及电离碰撞概率  $P_{e\_ion}$  比较来判断碰撞是否发生及相应的碰撞类型.

1) 若  $R_{\text{coll}} \in [0, P_{e\_el}]$ , 则发生弹性碰撞. 此时电子无能量损失, 在碰撞前后其总速度大小保持不

表 1 电子与背景 Ar 原子碰撞类型<sup>[28]</sup>

Table 1. Reactions of Ar discharge involving electrons<sup>[28]</sup>.

反应方程式	反应速率系数 $k_r$ /(m <sup>3</sup> ·s <sup>-1</sup> )	反应能量阈值/eV	反应类型
$e + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar} + e$	$2.336 \times 10^{-14} T_e^{1.609} \times \exp[0.0618(\ln T_e)^2 - 0.1171(\ln T_e)^3]$	—	弹性碰撞
$e + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^+ + 2e$	$2.34 \times 10^{-14} T_e^{0.59} \times \exp(-17.44/T_e)$	15.76	电离碰撞

变、方向随机, 表达式为

$$\begin{cases} v_x = \nu \sin(R_{\theta 1}) \cos(R_{\theta 2}), \\ v_y = \nu \sin(R_{\theta 1}) \sin(R_{\theta 2}), \\ v_z = \nu \cos(R_{\theta 1}), \end{cases} \quad (6)$$

其中,  $R_{\theta 1} \in [0, \pi)$  和  $R_{\theta 2} \in [0, 2\pi)$  为球坐标方向角随机数.

2) 若  $R_{\text{coll}} \in [P_{e\_el}, P_{e\_el} + P_{e\_ion})$ , 则发生电离碰撞. 此时, 原电子碰撞前的能量一部分用于实现电离 (即与 Ar 原子电离阈值  $E_{iz} = 15.76$  eV 抵消), 剩余部分平分给新电子和原电子, 其能量为

$$\varepsilon_{\text{new}} = \varepsilon_{\text{initial\_after}} = (\varepsilon_{\text{initial\_before}} - E_{iz})/2, \quad (7)$$

其中,  $\varepsilon_{\text{initial\_before}}$  (eV) 和  $\varepsilon_{\text{initial\_after}}$  (eV) 分别为电子碰撞前和电子碰撞后的能量,  $E_{\text{new}}$  (eV) 为生成新电子的能量.

3) 若  $R_{\text{coll}} \in [P_{e\_el} + P_{e\_ion}, 1]$ , 则电子不发生碰撞.

### 2.3 检验离子 MC 模型

基于检验电子 MC 模型的计算结果建立了检验离子 MC 模型, 用于计算磁镜对输出束流与溅射强度的影响, 其求解域的边长为 80 mm, 如图 1 灰色区域所示. 求解域边界处磁感应强度小于 0.5 mT, 对应的  $\text{Ar}^+$  离子回旋半径大于 0.82 m, 远大于求解域尺度, 因此可忽略求解域外磁场对离子的约束作用. 由于等离子体整体呈电中性, 离子密度分布与电子密度分布基本相同, 因此初始时刻检验  $\text{Ar}^+$  离子根据检验电子的数密度分布生成, 初始平均速度取为玻姆速度<sup>[30]</sup>, 即

$$u_{\text{Ar}^+, \text{Bohm}} = \sqrt{eT_e/m_{\text{Ar}^+}}, \quad (8)$$

其中  $m_{\text{Ar}^+} = 6.63 \times 10^{-26}$  kg 为  $\text{Ar}^+$  离子质量, 可计算得出  $u_{\text{Ar}^+, \text{Bohm}} = 2.69 \times 10^3$  m/s. 模型的仿真总时长为 100  $\mu\text{s}$ , 时间步长  $\Delta t = 1 \times 10^{-10}$  s. 当检验  $\text{Ar}^+$  离子运动至求解域边界或磁铁边界时即直接消失. 根据阳极层离子源的工作原理, 运动至求解域上边界的离子形成输出束流 (本文定义为输出离子), 而运动到磁铁边界的离子相当于轰击阴极发生溅射 (本文定义为溅射离子).

在检验  $\text{Ar}^+$  离子运动过程中, 有一定概率与背景 Ar 原子发生弹性碰撞和电荷交换, 见表 2<sup>[28]</sup>. 一般原子和离子之间的碰撞可视为硬球碰撞, 同时可忽略离子半径与原子半径的差异<sup>[31]</sup>, 因此  $\text{Ar}^+$  和 Ar 的碰撞截面  $\sigma_{\text{Ar}^+-\text{Ar}}$  为<sup>[32]</sup>

$$\sigma_{\text{Ar}^+-\text{Ar}} = \pi(a_{\text{Ar}^+} + a_{\text{Ar}})^2 = 4\pi a_{\text{Ar}}^2, \quad (9)$$

其中,  $a_{\text{Ar}} = 1.88 \text{ \AA}$  ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ ).

表 2  $\text{Ar}^+$  离子与背景 Ar 原子碰撞类型<sup>[28]</sup>

Table 2. Reactions of Ar discharge involving  $\text{Ar}^+$ <sup>[28]</sup>.

反应方程式	反应类型
$\text{Ar}^+ + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar}$	弹性碰撞
$\text{Ar}^+ + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar} + \text{Ar}^+$	电荷交换

通过生成随机数  $R_{\text{coll}} \in [0, 1]$  判定其发生的碰撞类型.

1) 若  $R_{\text{coll}} \in [0, P_{i\_el})$ , 则发生弹性碰撞,  $P_{i\_el}$  表示弹性碰撞的概率. 检验离子无能量损失, 即速度大小不变, 速度方向由球坐标方向角随机数决定.

2) 若  $R_{\text{coll}} \in [P_{i\_el}, P_{i\_el} + P_{i\_ex})$ , 则发生电荷交换,  $P_{i\_ex}$  表示电荷交换的概率. 原检验离子变成原子, 并根据背景气体温度重新生成一个新的检验离子, 方向由球坐标方向角随机数决定.

3) 若  $R_{\text{coll}} \in [P_{i\_el} + P_{i\_ex}, 1]$ , 则不发生碰撞.

### 2.4 面向复杂求解域的高效 PIC/MC 模型

阳极层离子源的阴阳极均为复杂的凸多边形, 因此由阴阳极轮廓围成的放电求解域则为复杂的凹多边形, 如图 2 浅绿色的区域所示. 基于此, 在磁镜仿真的基础上, 建立了面向复杂求解域的高效 PIC/MC 模型, 来模拟阳极层离子源的放电过程.

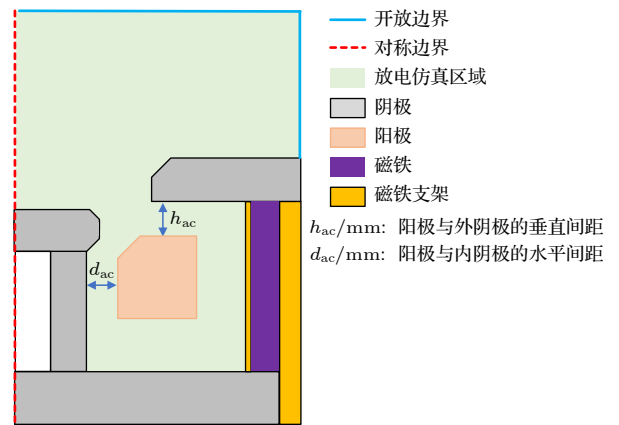


图 2 复杂求解域的高效 PIC/MC 模型示意图

Fig. 2. Schematic diagram high-efficient PIC/MC model for complex solution domain.

在磁场确定的条件下, 进一步建立 PIC/MC 模型来实现等离子体放电仿真, 并以阳极与外阴极的垂直间距  $h_{ac}$  (mm) 和阳极与内阴极的水平间距  $d_{ac}$  (mm) 作为变量来控制电场, 如图 2 所示. PIC/

表 3 Ar 气放电的主要反应表<sup>[28]</sup>  
Table 3. Main reactions of Ar gas discharge<sup>[28]</sup>.

反应方程式	反应速率系数 $k_r/(m^3 \cdot s^{-1})$	反应能量阈值/eV	反应类型
$e + Ar \rightarrow Ar + e$	$2.336 \times 10^{-14} T_e^{1.609} \times \exp[0.0618(\ln T_e)^2 - 0.1171(\ln T_e)^3]$	—	弹性碰撞
$e + Ar \rightarrow Ar^+ + 2e$	$2.34 \times 10^{-14} T_e^{0.59} \times \exp(-17.44/T_e)$	15.76	电离碰撞
$e + Ar \rightarrow Ar^m + e$	$2.5 \times 10^{-15} T_e^{0.74} \times \exp(-11.56/T_e)$	11.56	激发碰撞
$e + Ar^m \rightarrow Ar^+ + 2e$	$6.8 \times 10^{-15} T_e^{0.67} \times \exp(-4.2/T_e)$	4.20	激发态电离
$e + Ar^m \rightarrow Ar + e$	$4.3 \times 10^{-16} T_e^{0.74}$	-11.56	退激发碰撞
$Ar^+ + Ar \rightarrow Ar^+ + Ar$	硬球模型	—	弹性碰撞
$Ar^+ + Ar \rightarrow Ar + Ar^+$	硬球模型	—	电荷交换

MC 模型以检验电子 MC 方法求出的电子密度作为初始等离子体密度, 带电粒子的速度服从麦克斯韦分布, 每个宏粒子代表  $1 \times 10^6$  个实际粒子<sup>[33]</sup>. 在仿真过程中, 设定离子源阴极接地, 阳极电压为 1000 V, 背景气体为 Ar 气, 温度为 300 K, 气压为 0.5 Pa. 利用有限元方法<sup>[6]</sup>, 将求解域划分成尺寸为  $1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$  的正方形网格. 由于电子质量远小于  $Ar^+$  质量, 因此电子加速度远大于  $Ar^+$ , 为跟踪二者的速度变化过程, 模型设定电子步长  $\Delta t_e = 1 \times 10^{-12} \text{ s}$ , 离子步长  $\Delta t_i = 10 \Delta t_e = 1 \times 10^{-11} \text{ s}$ . 每经过一个离子步长, 利用泊松方程求解一次等离子体的电势<sup>[34]</sup>:

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (10)$$

其中,  $\rho$  ( $C/m^3$ ) 为净电荷密度,  $\Phi$  (V) 为空间电势,  $\epsilon_0 = 8.81 \times 10^{-12} \text{ F/m}$  为真空介电常数. PIC/MC 模型仿真完整的 Ar 气放电过程, 具体反应见表 3<sup>[28]</sup>.

模型中包含 3 类边界条件, 分别为对称边界, 阴极边界以及开放边界 (包括阳极边界): 当仿真粒子运动至对称边界时发生反弹; 当仿真粒子运动至开放边界时直接消失; 当仿真粒子运动至阴极边界时, 电子直接消失, 离子发生溅射. 在离子源放电过程中, 由于溅射离子占比较小, 且二次电子发射系数低于 0.1<sup>[35]</sup>, 因此可忽略溅射时二次电子的释放.

### 3 磁镜及其作用仿真

#### 3.1 磁镜比 $R_m$

对阳极层离子源来说, 其内外阴极之间需要合适的磁场强度和磁场域, 才能实现高强度放电的同时保证一定的输出束流. 经调研, 其内外阴极中心磁感应强度一般控制在 25—40 mT<sup>[36,37]</sup>. 为了增加

检验电子聚集的速度, 需要选择区间内较高的磁感应强度, 因此选择固定磁镜中心点  $Q$  的磁感应强度  $B_0 = 36 \text{ mT}$ , 并通过改变磁极间距  $d_{\text{mag}}$  获得不同的磁镜比, 进而研究磁镜比对等离子体的作用. 在不同磁极间距  $d_{\text{mag}}$  条件下, 线  $\alpha$  上的磁感应强度大小见图 3, 随着  $d_{\text{mag}}$  从 10 mm 增大到 30 mm, 维持  $B_0 = 36 \text{ mT}$  所需的磁极强度  $B_m$  由 52 mT 增大到 138 mT. 根据磁镜比公式  $R_m = B_m/B_0$ , 磁镜比  $R_m$  相应地从 1.44 增大到 3.83. 计算不同磁镜比  $R_m$  对应的磁镜区域磁感应强度和磁感线分布, 如图 4(a) 所示, 可见磁感线在磁极处最密集, 在对称轴  $\beta$  上最稀疏, 呈现出  $x$  方向的纺锤形分布, 说明其磁感应强度在磁极处最强, 在对称轴  $\beta$  上最弱.

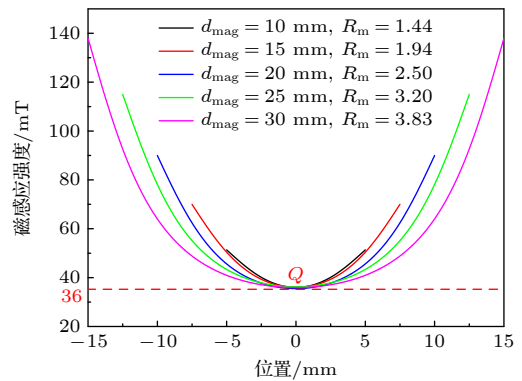


图 3  $B_0 = 36 \text{ mT}$  时, 不同  $d_{\text{mag}}$  对应分析线  $\alpha$  上磁感应强度  
Fig. 3. Magnetic induction intensity on the analytical line  $\alpha$  at different  $d_{\text{mag}}$  with  $B_0 = 36 \text{ mT}$ .

以图 4(a) 为背景场, 利用检验电子 MC 模型计算检验电子数密度分布, 如图 4(b) 所示, 电子被束缚在磁镜的中央, 在对称轴  $\beta$  上密度最大, 向两侧逐渐降低. 为表征磁镜比对电子的约束作用, 将对称轴  $\beta$  上的两对称点  $P_1(0, 9 \text{ mm})$  和  $P_2(0, -9 \text{ mm})$

处的磁感线用红线标记(图4(a)). 当  $R_m = 1.44$  时, 红色磁感线的曲率较大, 表明磁镜中  $x$  方向磁场的作用较弱, 同时  $y$  方向磁场的作用较为明显. 此时, 电子产生后容易从  $y$  方向溢出, 并沿  $y$  方向形成较大的浓度梯度, 而在  $x$  方向分布最窄, 仅在  $\beta$  轴附近形成电子聚集区, 检验电子数密度  $\geq 1 \times 10^9 \text{ m}^{-3}$  的区域(红色)面积占比仅有 1.12%, 检验电子数密度  $\geq 1 \times 10^8 \text{ m}^{-3}$  的区域(蓝色)呈现近似矩形的分布, 面积占比仅为 17.75%. 随着磁镜比的增大, 点  $P_1$  和  $P_2$  的红色磁感线曲率逐渐减小, 表明磁镜中  $x$  方向的磁场作用增强, 同时  $y$  方向的磁场作用减弱, 电子从上下边界溢出受到抑制, 更多电子在两磁极之间振荡, 使得放电强度增强. 当  $R_m = 2.50$  时, 放电强度和放电面积均达到最大, 电子聚集区

沿  $y$  方向呈现纺锤形, 蓝色电子聚集区面积占比提高至 42.16%, 红色电子聚集区显著拓宽, 面积占比达到 2.35%. 当  $R_m$  超过 2.50 并继续增大时,  $y$  方向的磁场作用进一步减弱使电子分布范围扩大, 大量电子打在磁极上而损失, 因此高密度电子聚集区逐渐减小, 放电强度逐渐减弱.

对检验电子和检验离子 MC 模型的计算结果进行统计, 得到不同磁镜比下电子和离子的运输特征参数, 如图 5 所示. 随着  $R_m$  的上升,  $x$  方向磁场对电子的束缚能力逐渐增强, 电子逃逸率(黑线)从 86.2% ( $R_m = 1.44$ ) 单调下降至 31.9% ( $R_m = 3.83$ ). 在  $R_m$  超过 2.50 后, 电子逃逸率的下降速度减慢, 并基本保持恒定, 表明磁场对电子的约束作用达到饱和. 检验电子数密度峰值(蓝线)随磁镜比的增

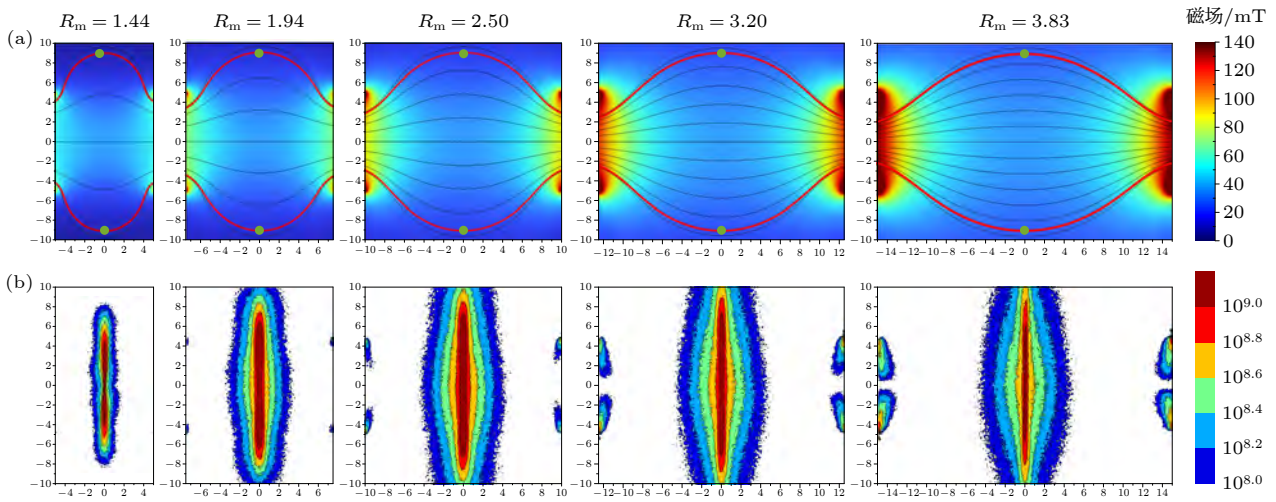


图 4  $B_0 = 36 \text{ mT}$  时, 不同磁镜比  $R_m$  对应的磁场分布 (a) 和  $0.5 \mu\text{s}$  检验电子数密度分布 (b)

Fig. 4. Distribution of magnetic field (a) and test-electron density of  $0.5 \mu\text{s}$  (b) at different magnetic mirror ratio  $R_m$  with  $B_0 = 36 \text{ mT}$ .

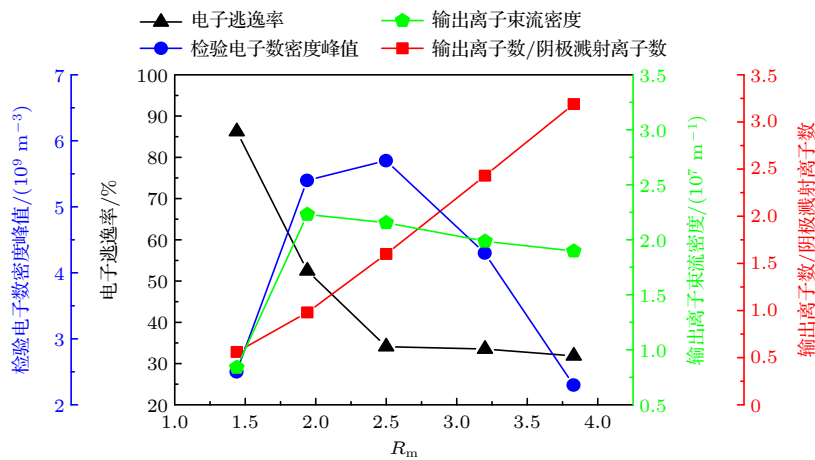


图 5 电子逃逸率、检验电子数密度峰值、输出离子束流密度及输出离子数/阴极溅射离子数随  $R_m$  的变化

Fig. 5. Evolution tendency of the electron escape rate, the maximum test-electron density, the output ion beam density, and the ratio of the output ions to the sputtering ions with  $R_m$ .

加先上升后下降, 在  $R_m = 2.50$  时达到最大值 ( $5.7 \times 10^9 \text{ m}^{-3}$ ). 输出离子束流密度 (绿线) 在  $R_m = 1.94$  时达到峰值 ( $2.2 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ ), 并随  $R_m$  的继续增大而逐渐减小. 当  $R_m = 2.50$  时, 尽管等离子体密度更高, 但是磁场约束作用的大幅增强导致更多离子无法输出, 因此输出离子束流密度降低; 而当  $R_m > 2.50$  时, 磁场约束作用基本饱和, 但等离子体放电强度的减弱, 使得检验离子的基本数量减少, 故输出离子束流密度进一步下降. 由于内外阴极自身的负电位, 部分离子会被吸引到其表面沉积或对内外阴极表面原子进行溅射, 由于沉积部分较少, 故统一称为溅射离子. 输出离子数与溅射离子数的比值 (红线) 随  $R_m$  的增大呈现出线性上升的趋势, 表明离子溅射减少, 阴极刻蚀逐渐减弱, 这样可以大幅度降低内外阴极材料溅射对输出粒子束流的污染. 可以看出, 将磁镜比  $R_m$  控制在 2.50, 能够获得较高的输出束流密度, 同时减弱阴极刻蚀强度.

### 3.2 磁镜中心磁感应强度 $B_0$

固定磁镜比  $R_m = 2.50$ , 研究磁镜中心点  $Q$  的磁感应强度  $B_0$  对等离子体的作用. 磁感应强度  $B_0$  可通过不同磁极磁感应强度  $B_m$  获得, 如图 6 线  $\alpha$  上的磁感应强度所示, 随着  $B_m$  从 50 mT 增大到 130 mT,  $B_0$  相应地从 20 mT 增大到 52 mT. 进而计算不同  $B_0$  对应的磁镜区域磁感应强度和磁感线分布, 如图 7(a) 所示, 在相同磁镜比  $R_m$  下, 对称轴  $\beta$  上两对称点  $P_1$  和  $P_2$  的磁感线 (红色) 的曲率几乎不变, 表明磁镜中磁场对  $x$  和  $y$  方向的约

束作用相对不变. 以图 7(a) 的磁场为背景场, 利用检验电子 MC 模型计算得出的电子数密度分布如图 7(b) 所示. 当  $B_0 = 20$  mT 时, 求解域内  $x$  和  $y$  方向的磁场均非常弱, 对电子难以形成有效的束缚, 导致大量电子从求解域上下边缘溢出或直接打在磁极边界, 此时检验电子数密度  $\geq 1 \times 10^8 \text{ m}^{-3}$  的区域 (蓝色) 占比仅为 15.35%, 其中几乎不存在检验电子数密度  $\geq 1 \times 10^9 \text{ m}^{-3}$  的区域 (红色, 仅占 0.01%). 随着  $B_0$  的增大, 求解域内  $x$  方向和  $y$  方向的磁场同时增大, 一方面有效抑制了电子从上下边界的溢出, 另一方面促使电子能够在两磁极之间形成振荡, 大幅增强放电强度. 当  $B_0 = 36$  mT 时, 电子聚集区被压缩成纺锤形分布, 蓝色面积占比增加到 42.16%, 红色区域大幅拓宽, 面积占比增加到 2.35%. 由于电子回旋半径与磁感应强度成反比, 故磁感应强度越大, 电子回旋半径越小. 当  $B_0$  继

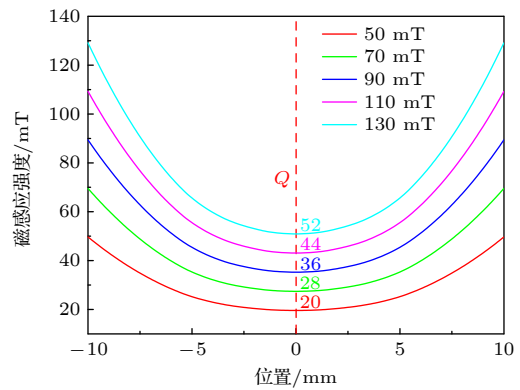


图 6  $R_m = 2.50$  时, 不同  $B_m$  大小分析线  $\alpha$  上磁感应强度  
Fig. 6. Magnetic induction intensity on the analytical line  $\alpha$  at different  $B_m$  with  $R_m = 2.50$ .

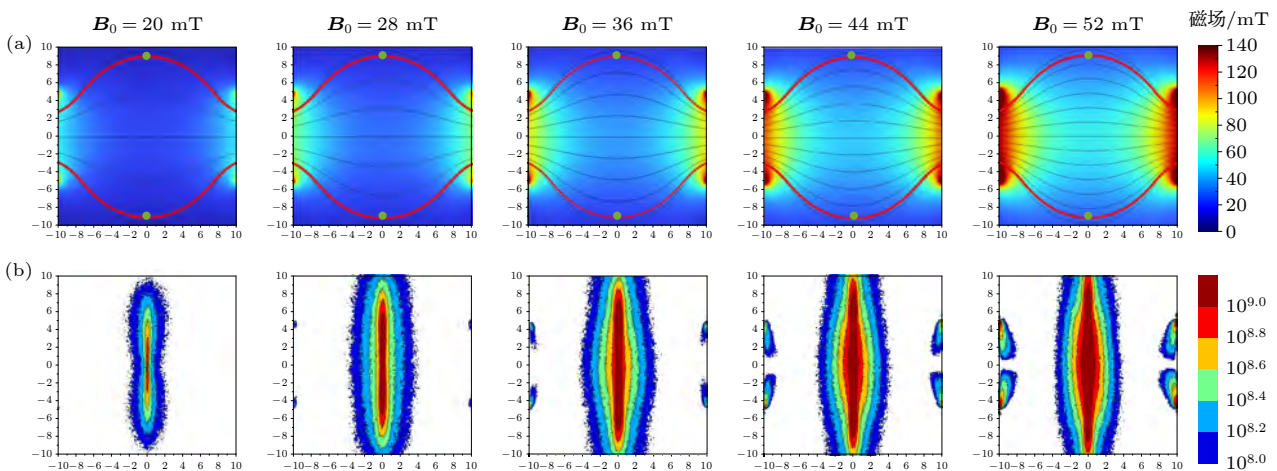


图 7  $R_m = 2.50$  时, 不同  $B_0$  对应的磁场分布 (a) 和  $0.5 \mu\text{s}$  检验电子数密度分布 (b)

Fig. 7. Distribution of magnetic field (a) and test-electron density of  $0.5 \mu\text{s}$  (b) at different magnetic mirror ratio  $B_0$  with  $R_m = 2.50$ .

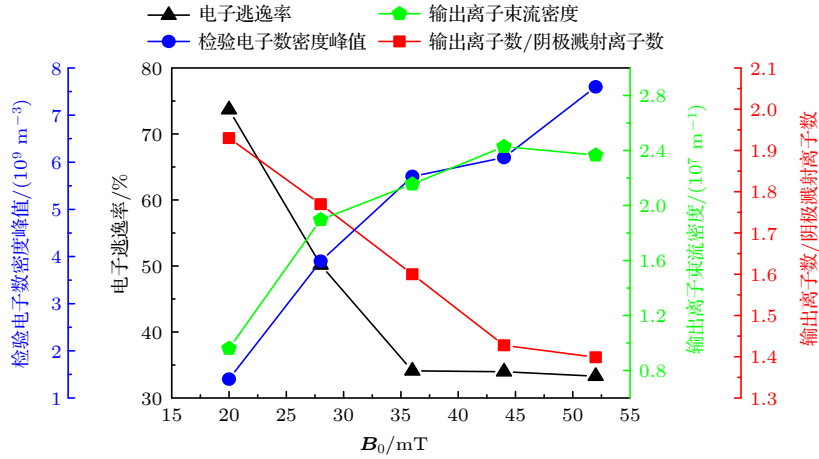


图 8 电子逃逸率、检验电子数密度峰值、输出离子束流密度及输出离子数/阴极溅射离子数随  $B_0$  变化

Fig. 8. Evolution tendency of the electron escape rate, the maximum test-electron density, the output ion beam density, and the ratio of the output ions to the sputtering ions with  $B_0$ .

续增大时,  $x$  方向和  $y$  方向的磁场对电子束缚作用进一步加强, 电子进一步向中央聚集, 当  $B_0 = 52 \text{ mT}$  时, 蓝色电子聚集区域的面积占比达到 44.31%, 其中红色区域面积占比增加到 4.12%.

对检验电子和离子 MC 模型的计算结果进行统计, 得到不同  $Q$  点磁感应强度  $B_0$  时, 电子和离子的输运特征参数, 如图 8 所示. 随着  $B_0$  的上升, 电子逃逸率 (黑线) 从 73.7% ( $B_0 = 20 \text{ mT}$ ) 单调下降至 33.3% ( $B_0 = 52 \text{ mT}$ ), 表明磁场对电子的束缚能力逐渐增强. 电子逃逸率在  $B_0 = 36 \text{ mT}$  时已达到 34.7%, 并在  $B_0$  超过 36 mT 后基本保持恒定, 表明磁场约束作用在此时达到饱和. 检验电子数密度峰值 (蓝线) 随  $B_0$  的增加而单调递增, 因此输出离子束流密度 (绿线) 也随之逐渐增大, 并在  $B_0 = 44 \text{ mT}$  时达到峰值 ( $2.4 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ ). 当  $B_0 = 52 \text{ mT}$  时, 尽管等离子体密度更高 ( $7.6 \times 10^9 \text{ m}^{-3}$ ), 但由于磁场约束作用过强, 能够输出的离子数量受到抑制. 输出离子数/阴极溅射离子数 (红线) 随  $B_0$  的增大呈现出线性下降的趋势, 表明在中央聚集的离子向内外阴极运动使其表面溅射加剧, 阴极刻蚀逐渐增强. 可以看出, 将  $Q$  点磁感应强度  $B_0$  控制在 36 mT, 可获得较高的输出束流密度, 同时避免内外阴极的过度刻蚀.

## 4 等离子体放电仿真

### 4.1 复杂求解域的 PIC/MC 仿真

根据磁镜特性的仿真结果可知, 获得最佳等离

子体特性所需的磁镜特征为  $R_m = 2.50$  且  $B_0 = 36 \text{ mT}$ , 能够在保证较高输出束流密度的同时削弱阴极刻蚀强度. 为实现该特征的磁镜, 选取离子源磁铁的磁极强度为 200 mT, 对内外阴极的结构参数进行大范围的调控, 获得磁场特征如图 9(a) 所示, 其中磁镜中心点  $Q$  位于 (31.8 mm, 54.7 mm), 磁感应强度  $B_0$  达到 35.6 mT, 同时磁镜比  $R_m$  达到 2.48, 与最优磁镜特性几乎完全符合. 在此基础上, 利用检验电子 MC 模型求出电子密度分布如图 9(b) 所示. 可见, 电子聚集在磁镜的中央, 形成了高密度电子聚集区 (峰值数密度超过  $1 \times 10^9 \text{ m}^{-3}$ ), 表明磁镜对电子形成了有效的束缚, 初步形成了高强度放电区域; 而在其他区域, 检验电子的数密度极低. 因此, 磁镜及其作用仿真将复杂的求解域划分为放电区域和其他区域, 使得电子快速聚集于放电区域, 从而削弱了其他区域带电粒子和复杂边界的相互作用, 减少了其对后续等离子体放电仿真的影响, 提高了 PIC/MC 模型对复杂求解域的适应性.

设定每个检验粒子代表  $1 \times 10^6$  个实际粒子 [33], 以图 9(b) 所示的检验电子密度分布作为初始等离子体密度分布, 利用 PIC/MC 模型计算得到的等离子体密度演变过程见图 10(a). 初始时刻 ( $0 \mu\text{s}$ ), 放电区域的等离子体密度约为  $1 \times 10^{14} \text{—} 1 \times 10^{15} \text{ m}^{-3}$ , 其他区域的等离子体密度为  $1 \times 10^{13} \text{ m}^{-3}$  及以下. 随着放电的进行, 放电区域的浓度逐渐上升, 并在  $0.45 \mu\text{s}$  时达到稳定. 此时, 等离子体密度约为  $1 \times 10^{16} \text{—} 1 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$ , 与常规的 PIC/MC 仿真结果一致 [17]. 值得注意的是, 稳态时绝大部分放电区域与初始时

刻重合, 表明利用检验电子 MC 模型求出初始放电区域与实际放电区域基本一致. 该处理方式首先忽略电场变化, 利用电子分布替代整体的等离子体密度分布, 进而快速得到电子聚集区来替代等离子体放电区域. 在此基础上, 再引入泊松方程同步计算电场, 利用 PIC/MC 方法同时仿真电子和离子. 由于此时电子已经形成聚集, 电势可快速收敛到稳态, 因而可基本消除仿真前期因忽略电场作用而引

入的误差. 作为对比, 进一步利用传统 PIC/MC 模型对离子源进行整体仿真, 得到的等离子体密度变化如图 10(b) 所示. 初始时刻 ( $0 \mu\text{s}$ ), 求解域中的整体等离子体密度设置为  $1 \times 10^{13} \text{ m}^{-3}$ , 但由于初始宏粒子是随机生成, 局部密度分布并不均匀, 这就在放电区域外带电粒子与复杂边界的相互作用过程中, 引入了一定的外界噪声. 随着放电的进行, 等离子体先是在内外阴极间的磁镜中形成聚集,

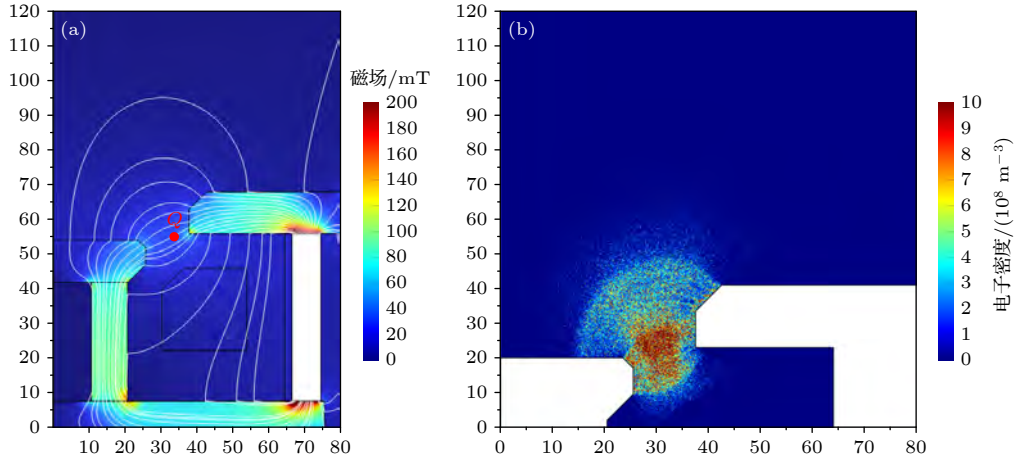


图 9 优化的阴极结构对应的磁场分布 (a) 及检验电子密度分布 (b)

Fig. 9. Distribution of the magnetic field (a) and the test-electron density (b) under the optimized cathode structures.

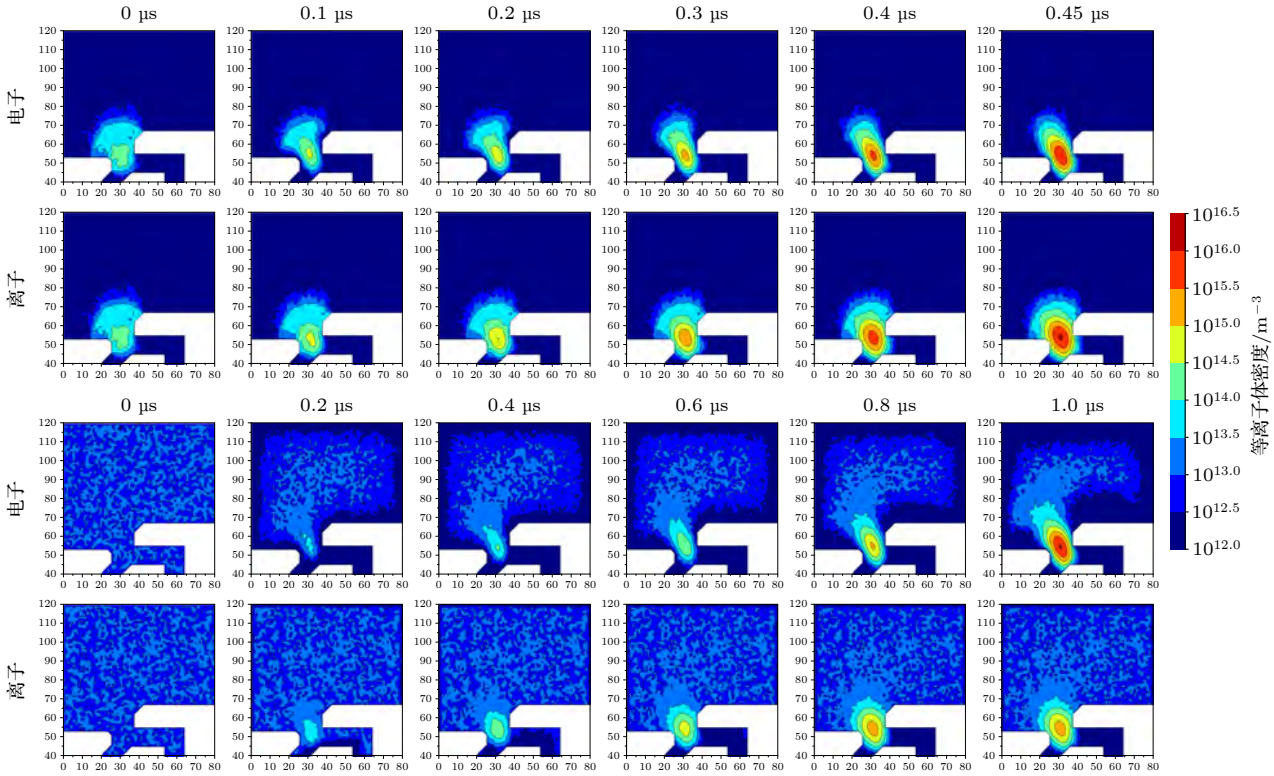


图 10 不同模型求出的等离子体密度分布演变过程 (a) 高效 PIC/MC 模型; (b) 传统 PIC/MC 模型

Fig. 10. Evolution process of the plasma density simulated by the different model: (a) High-efficient PIC/MC model; (b) traditional PIC/MC model.

随后其密度逐渐上升并形成放电. 可见, 传统的 PIC/MC 模型仿真得出的等离子体演变过程, 多了从初始随机分布向放电区域聚集的过程, 因此收敛时间更长. 最后在  $1 \mu\text{s}$  时, 传统 PIC/MC 模型仿真的等离子体密度在放电区域内才趋于稳定; 而在其他区域等离子体密度仍为不均匀的分布, 表明外界噪声的影响贯穿整个 PIC/MC 的仿真过程. 进一步对比图 10(a), (b) 的稳态放电结果可知, 在放电区域内的稳态等离子体几乎完全一致, 表明两个 PIC/MC 模型对放电区域等离子体特性的仿真效果相同. 而在放电区域以外, 高效 PIC/MC 模型求出的等离子体密度分布几乎不存在不均匀的区域, 显著减弱了放电区域外带电粒子与复杂边界的相互作用, 因而大幅降低了外界噪声对模型收敛速度和稳定性的影响. 因此, 高效 PIC/MC 模型 ( $0.45 \mu\text{s}$ ) 的收敛时间远快于传统 PIC/MC ( $1 \mu\text{s}$ ), 使计算效率提高了约 55%. 尽管这种处理方式几乎不会影响放电区域中等离子体分布 (即放电特性), 但丢失了对扩散区域中等离子体分布 (输运特性) 的描述. 为此, 本文进一步借助检验离子 MC 方法仿真离子输出或溅射的行为 (即输运特性). 此时, 检验离子从求解域边界的溢出过程即对等离子体边界效应的重新引入, 进而消除了分离简化带来的不利影响.

## 4.2 阳极与外阴极的垂直间距 $h_{ac}$ 对等离子体的影响

当内外阴极形状确定后, 即可形成固定背景磁场的作用, 此时等离子体特性取决于放电行为, 电场的分布取决于阳极和阴极的相对位置, 故阳极的几何特性成为调控离子源等离子体特性的关键. 通过高效 PIC/MC 模型计算了不同阳极与外阴极的垂直间距  $h_{ac}$  下, 离子密度分布、电子密度分布以及电势分布, 分别见图 11(a)—(c). 可见, 放电区域集中于两阴极之间, 正好位于内外阴极形成的磁镜中, 且电子和离子呈现出相同的分布. 当  $h_{ac} = 2 \text{ mm}$  时, 阴阳极之间的电势梯度最大, 背景电场强度最强, 因此等离子体放电最强烈, 峰值密度达到  $4.02 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}$ , 放电区域 (等离子体密度  $> 10^{15} \text{ m}^{-3}$ ) 面积达到  $209.3 \text{ mm}^2$ , 见表 4. 在强电场作用下, 放电中心点 (等离子体密度峰值点) 被外推至 (31.1 mm, 57.9 mm), 位于磁镜中心点  $Q$  (31.8 mm, 54.7 mm) 的上方, 此时磁镜对等离子体的约束作用较弱, 大量离子向外溢出, 形成高密度的输出离子束流. 然而, 由于高等离子体密度同时加剧了离子向阴极的扩散, 且较高的电场强度增强了阴极对阳离子的吸引, 因此大部分离子会返回到内外阴极表面并使其发生溅射, 此时输出离子数与阴极溅射离子数之比

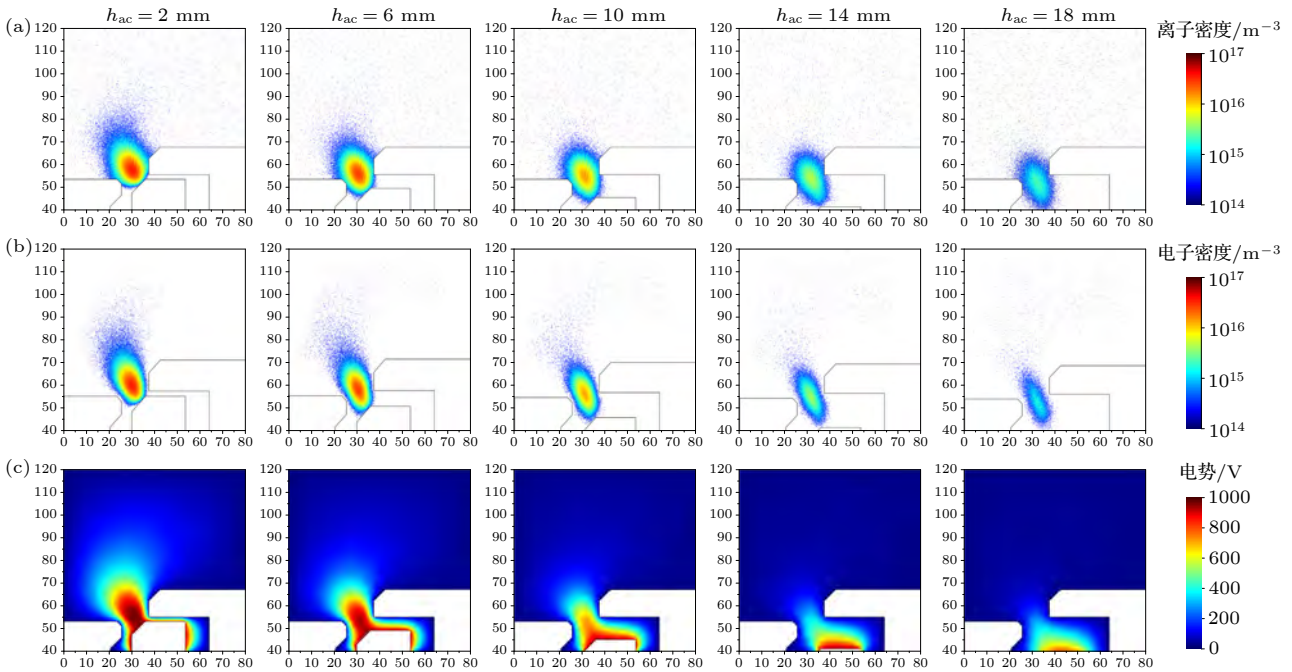


图 11 不同  $h_{ac}$  对应的密度分布及电势分布 (a) 离子密度分布; (b) 电子密度分布; (c) 电势分布

Fig. 11. Corresponding density distribution and potential distribution of different  $h_{ac}$ : (a) Distribution of ion density; (b) distribution of electron density; (c) distribution of potential.

表 4 不同  $h_{ac}$  对应的等离子体放电特性  
Table 4. Plasma discharge characteristics at different  $h_{ac}$ .

$h_{ac}/\text{mm}$	阴极溅射离子占比/%	输出离子占比/%	输出离子数/阴极溅射离子数	等离子体峰值密度/ $(10^{16} \text{ m}^{-3})$	放电中心坐标/mm	放电面积/ $\text{mm}^2$
2	53.8	43.8	0.81	4.02	(31.1, 57.9)	209.3
6	51.8	47.0	0.91	3.06	(31.3, 55.8)	188.0
10	40.6	59.3	1.46	1.78	(31.6, 54.8)	155.0
14	34.4	65.6	1.90	0.68	(32.1, 53.6)	90.0
18	24.3	75.6	3.10	0.34	(32.8, 52.9)	38.4

约为 0.81, 表明输出离子束流强度低于溅射离子束流强度, 造成严重的阴极刻蚀现象. 随着  $h_{ac}$  的增大, 阴阳极之间距离增大, 电势梯度随之减小, 背景电场强度减弱, 放电中心点逐渐向下偏移, 并最终移动至磁镜中心点  $Q$  与阳极之间, 导致电子向阳极的逃逸, 等离子体放电强度减弱. 当  $h_{ac} = 18 \text{ mm}$  时, 等离子体峰值密度降至  $3.40 \times 10^{15} \text{ m}^{-3}$ , 同时放电区域面积随之减小至  $38.4 \text{ mm}^2$ , 大幅延缓了等离子体向阳极的扩散. 此外, 内外阴极之间的电场强度减小也致使阴极对阳离子的吸引作用减弱, 故溅射离子束流大幅降低, 输出离子与溅射离子的数量比则显著上升, 阴极的刻蚀现象得到缓解. 然而, 较低的等离子体密度和较长的扩散路径同样导致输出离子束流密度大幅减弱, 造成离子源工作效率降低. 可见  $h_{ac} = 10 \text{ mm}$  时, 表现出较强

的离子输出束流, 又表现出较高的输出离子和溅射离子的数量比, 表明此时离子源的工作效率较高, 同时刻蚀现象较弱. 值得说明的是, 此时放电中心位于  $(31.6 \text{ mm}, 54.8 \text{ mm})$ , 基本与磁镜中心点  $Q$  重合, 能够使磁镜的作用发挥到极致, 即能够保证高强度放电的顺利进行, 又可以限制离子在阴极表面的溅射.

### 4.3 阳极与内阴极的水平间距 $d_{ac}$ 对等离子体的影响

在  $h_{ac} = 10 \text{ mm}$  下, 通过高效 PIC/MC 模型研究阳极与内阴极的水平间距  $d_{ac}$  对等离子体的影响, 计算得出离子密度分布、电子密度分布以及电势分布, 分别见图 12(a)–(c). 随着  $d_{ac}$  的增大, 阳极距离内外阴极间的磁镜变远, 导致磁镜中的电势

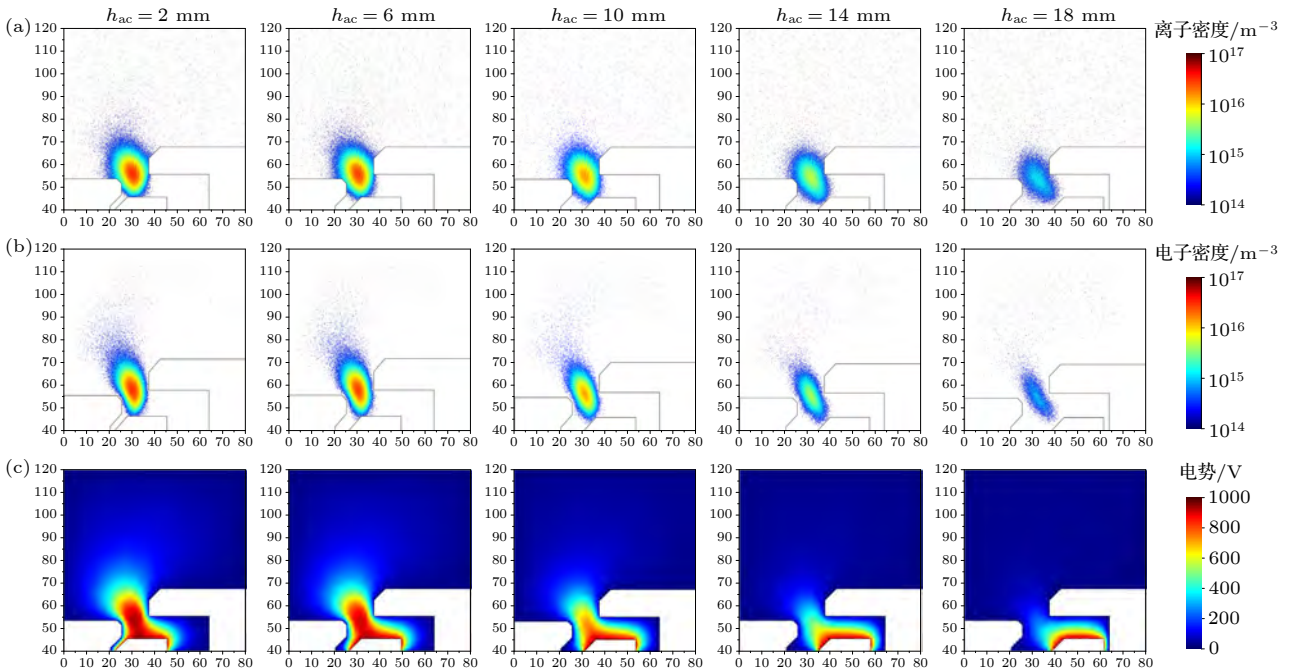


图 12 不同  $d_{ac}$  对应的密度分布及电势分布 (a) 离子密度分布; (b) 电子密度分布; (c) 电势分布

Fig. 12. Corresponding density distribution and potential distribution of different  $d_{ac}$ : (a) Distribution of ion density; (b) distribution of electron density; (c) distribution of potential.

表 5 不同  $d_{ac}$  对应的等离子体特性  
Table 5. Plasma properties at different  $d_{ac}$ .

$d_{ac}/\text{mm}$	阴极溅射离子占比/%	输出离子占比/%	输出离子数/阴极溅射离子数	内外阴极溅射强度比	等离子体峰值密度/ $(10^{16} \text{ m}^{-3})$	放电中心坐标/mm	放电面积/ $\text{mm}^2$
2	51.0	47.5	0.93	1.38	3.72	(31.3, 55.9)	208.4
6	48.1	50.9	1.06	1.19	3.26	(31.4, 55.4)	199.5
10	40.6	59.3	1.46	0.99	1.78	(31.6, 54.8)	155.0
14	32.8	67.2	2.05	0.74	0.72	(31.7, 53.8)	103.1
18	25.7	74.2	2.88	0.52	0.26	(33.4, 53.4)	14.2

梯度减小, 且背景电场强度减弱, 此时等离子体放电强度弱, 峰值密度从  $3.72 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}$  ( $d_{ac} = 2 \text{ mm}$ ) 降低至  $2.60 \times 10^{15} \text{ m}^{-3}$  ( $d_{ac} = 18 \text{ mm}$ ), 同时放电区域面积 (等离子体密度  $> 1 \times 10^{15} \text{ m}^{-3}$ ) 由  $208.4 \text{ mm}^2$  ( $d_{ac} = 2 \text{ mm}$ ) 减小至  $14.2 \text{ mm}^2$  ( $d_{ac} = 18 \text{ mm}$ ), 输出离子束流和溅射离子束流都减弱, 见表 5. 为避免某一侧的阴极被过度刻蚀, 需要尽量保证离子在内、外阴极的溅射强度相近, 使离子束流尽可能从内、外阴极之间输出. 鉴于此, 统计了不同  $d_{ac}$  时内、外阴极溅射离子数之比, 当  $d_{ac} = 10 \text{ mm}$  时, 放电中心 (31.6 mm, 54.8 mm) 与磁镜中心点  $Q$  (31.8 mm, 54.7 mm) 基本重合, 内、外阴极溅射强度比为 0.99, 表明此时内、外阴极溅射强度相近. 当  $d_{ac} < 10 \text{ mm}$  时, 内阴极的刻蚀强度强于外阴极, 这是因为内阴极与阳极之间的距离更近, 附近的电场强度较大, 对离子的吸引作用更为强烈; 同时放电中心位于磁镜中心点  $Q$  与内阴极之间, 导致离子更容易从内阴极一侧溢出. 而当  $d_{ac} > 10 \text{ mm}$  时, 外阴极与阳极之间的距离更近, 同时放电中心转移到磁镜中心点  $Q$  与外阴极之间, 使得外阴极的刻蚀强度超过了内阴极. 由此可见, 利用高效 PIC/MC 模型可以针对阳极层离子源结构特性对放电特性的作用规律进行系统研究, 突破了结构参数复杂且变化范围大的仿真瓶颈, 大幅提高了模型对离子源不规则求解域的适应性. 基于仿真结果, 可进一步推断得出使阳极层离子源电磁场匹配的条件: 即控制放电中心的位置, 使其与内外阴极间磁镜中心重合, 不仅能够输出高密度离子束流, 同时还可以大幅减少阴极刻蚀, 并保证内外阴极的刻蚀平衡.

## 5 结 论

针对传统等离子体仿真模型对阳极层离子源复杂求解域的收敛性较差、计算效率低的问题, 提

出将内外阴极抽象为磁镜, 利用磁镜比  $R_m$  和磁镜中心磁感应强度  $B_0$  两个磁镜参数替代内外阴极大小、形状和相对位置等一系列复杂阴极几何参数, 发现  $R_m = 2.50$ ,  $B_0 = 36 \text{ mT}$  时, 内外阴极间磁镜对等离子体放电特性的作用效果达到最佳. 在此基础上, 建立了高效 PIC/MC 模型对离子源的等离子体特性进行仿真, 发现高效 PIC/MC 模型的仿真效果与传统 PIC/MC 模型相似, 但简化了等离子体向放电区域聚集的过程, 减弱了放电区域外带电粒子与复杂边界的相互作用, 将收敛时间由传统的  $1.00 \mu\text{s}$  缩短为  $0.45 \mu\text{s}$ , 计算效率提高了约 55%. 最后利用该模型系统研究了阳极层离子源在优化磁镜下阳极位置对等离子体特性的影响规律, 发现当放电中心的位置与内外阴极间磁镜中心重合时, 不仅能够输出高密度离子束流, 同时可大幅减少阴极刻蚀, 并保证内外阴极的刻蚀平衡.

## 参考文献

- [1] Harper J M E, Cuomo J J, Kaufman H R 1982 *J. Vac. Sci. Technol. A* **21** 737
- [2] Zhao J, Tang D L, Cheng C M, Geng S F 2009 *Nucl. Fusion. Plasma. Phys.* **29** 5 (in Chinese) [赵杰, 唐德礼, 程昌明, 耿少飞 2009 *核聚变与等离子体物理* **29** 5]
- [3] Lee S, Kim J K, Kim D G 2012 *Rev. Sci. Instrum.* **83** 02B703
- [4] Lieberman M A 1989 *J. Appl. Phys.* **66** 2926
- [5] Gudmundsson J T 2020 *Plasma Sources Sci. Technol.* **29** 113001
- [6] Birdsall C K 1991 *IEEE Trans Plasma Sci.* **19** 65
- [7] Costin C, Marques L, Popa G, Gousset G 2005 *Plasma Sources Sci. Technol.* **14** 168
- [8] Wood B P 1993 *J. Appl. Phys.* **73** 4770
- [9] Zheng B C, Meng D, Che H L, Lei M K 2015 *J. Appl. Phys.* **117** 203302
- [10] Raadu M A, Axnas I, Gudmundsson J T, Huo C, Brenning N 2011 *Plasma Sources Sci. Technol.* **20** 065007
- [11] Boeuf J P, Chaudhury B 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 155005
- [12] Shah M, Chaudhury B, Bandyopadhyay M, Chakraborty A 2020 *Fusion Eng. Des.* **151** 111402
- [13] Mattox D M 2001 *Plat. Surf. Finish.* **88** 74
- [14] Bogaerts A, Bultinck E, Kolev I, Schwaederle L, Van Aeken K, Buyle G, Depla D 2009 *J. Phys. D:Appl. Phys.* **42** 194018

- [15] Kim H C, Iza F, Radmilović-Radjenović M, Lee J K 2005 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **38** R283
- [16] Geng S F, Qiu X M, Cheng C M, Chu P K, Tang D L 2012 *Phys. Plasmas* **19** 043507
- [17] Gui B, Yang L, Zhou H, Luo S, Xu J, Ma Z, Zhang Y 2022 *Vacuum* **200** 111065
- [18] Ran B, Li L H 2018 *Vacuum* **55** 51 (in Chinese) [冉彪, 李刘合 2018 *真空* **55** 51]
- [19] Jiang Y, Tang H, Ren J, Li M, Cao J 2018 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **51** 035201
- [20] Yu D R, Zhang F K, Liu H, Li H, Yan G J, Liu J Y 2008 *Phys. Plasmas*. **15** 104501
- [21] Xie S Y 2012 *Vector Analysis and Field Theory in Engineering Mathematics* (Vol. 4) (Beijing: Higher Education Press) pp29–35 (in Chinese) [谢树艺 2012 工程数学矢量分析与场论 (第4卷) (北京: 高等教育出版社) 第29—35页]
- [22] Rossmagel S M, Kaufman H R 1987 *J. Vac. Sci. Technol. A: Vac. Surf. Films* **5** 2276
- [23] Rossmagel S M, Kaufman H R 1988 *J. Vac. Sci. Technol. A: Vac. Surf. Films* **6** 223
- [24] Francis F. Chen (translated by Lin G H) 1980 *Introduction to Plasma Physics* (Beijing: Science Press) pp5–7 (in Chinese) [弗朗西斯 F. 陈 著 (林海海 译) 1980 等离子体物理学导论 (北京: 科学出版社) 第5—7页]
- [25] Cui S H, Guo Y X, Chen Q H, Jin Z, Yang C, Wu Z C, Su X Y, Ma Z Y, Tian X B, Wu Z Z 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 055203 (in Chinese) [崔岁寒, 郭宇翔, 陈秋皓, 金正, 杨超, 吴忠灿, 苏雄宇, 马正永, 田修波, 吴忠振 2022 *物理学报* **71** 055203]
- [26] Shidoji E, Ohtake H, Nakano N, Makabe T 1999 *Jpn. J. Appl. Phys.* **38** 2131
- [27] Chen L, Cui S H, Tang W, Zhou L, Li T, Liu L, An X, Wu Z, Ma Z, Lin H 2020 *Plasma. Sources. Sci. T.* **29** 025016
- [28] Lennon M A, Bell K L, Gilbody H B, Hughes J G, Kingston A E, Murray M J, Smith F J 1988 *J. Phys. Chem. Ref. Data.* **17** 1285
- [29] Yu W, Zhang L Z, Wang J L, Han L, Fu G S 2001 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **34** 3349
- [30] Samuelsson M, Lundin D, Jensen J, Raadu M A, Gudmundsson J T, Helmersson U 2010 *Surf. Coat. Tech.* **205** 591
- [31] Vahedi V, Surendra M 1995 *Comput. Phys. Commun.* **87** 179
- [32] Gong W Y 2009 *M. S. Thesis* (Chengdu: University of Electronic Science and Technology of China) (in Chinese) [宫文英 2009 硕士学位论文 (成都: 电子科技大学)]
- [33] Cui S H, Chen Q H, Guo Y X, Chen L, Jin Z, Li X T, Yang C, Wu Z C, Su X Y, Ma Z Y, Ricky K Y Fu, Tian X B, Paul K Chu, Wu Z Z 2022 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **55** 325203
- [34] Wang Y F, Tang L B 2010 *Infrared Tech.* **32** 213 (in Chinese) [王忆锋, 唐利斌 2010 *红外技术* **32** 213]
- [35] Olesik J, Calusiński B 1994 *Thin Solid Films* **238** 271
- [36] Wang L S, Tang D L, Cheng C M 2006 *Nucl. Fusion. Plasma. Phys.* **26** 54 (in Chinese) [汪礼胜, 唐德礼, 程昌明 2006 *核聚变与等离子体物理* **26** 54]
- [37] Chen Z G 2021 *M. S. Thesis* (Harbin: Harbin Institute of Technology) (in Chinese) [陈志国 2021 硕士学位论文 (哈尔滨: 哈尔滨工业大学)]

# High-efficient particle-in-cell/Monte Carlo model for complex solution domain and simulation of anode layer ion source<sup>\*</sup>

Cui Sui-Han<sup>1)2)#</sup> Zuo Wei<sup>1)#</sup> Huang Jian<sup>1)</sup> Li Xi-Teng<sup>1)</sup> Chen Qiu-Hao<sup>1)</sup>  
 Guo Yu-Xiang<sup>1)</sup> Yang Chao<sup>1)</sup> Wu Zhong-Can<sup>1)</sup> Ma Zheng-Yong<sup>1)</sup>  
 Fu Jin-Yu<sup>2)</sup> Tian Xiu-Bo<sup>1)</sup> Zhu Jian-Hao<sup>2)</sup> Wu Zhong-Zhen<sup>1)†</sup>

1) (*School of Advanced Materials, Peking University Shenzhen Graduate School, Shenzhen 518055, China*)

2) (*Department of Physics and Materials Science, City University of Hong Kong, Hong Kong 999077, China*)

( Received 15 December 2022; revised manuscript received 26 January 2023 )

## Abstract

Plasma simulation is important in studying the plasma discharge systematically, especially the anode layer ion source which has the complex geometrical characteristics of the discharge structure. However, owing to the complex solution domain formed by the geometric profile of the anode and cathode, the traditional simulation models show extremely small computational efficiency and poor convergence. This work presents a separate simulation for the ion source structure and the plasma discharge, separately, where the cathode geometric parameters (including the size, the shape and the relative position of the inner and outer cathodes) are simplified into two magnetic mirror parameters (the magnetic mirror ratio  $R_m$  and the magnetic induction intensity in the center of the magnetic mirror  $B_0$ ), and then a high-efficient particle-in-cell/Monte Carlo collision (PIC/MCC) model is established to improve the computational efficiency and stability of the plasma simulation later. As a result, the convergence time of the plasma simulation is shortened significantly from 1.00  $\mu\text{s}$  to 0.45  $\mu\text{s}$ , and by which the influences of the geometrical characteristics of the discharge structure on the plasma properties are systematically studied. The simulation results reveal that magnetic mirror with  $R_m = 2.50$  and  $B_0 = 36$  mT can best confine the plasma in the central area between the inner cathode and outer cathode. When the discharge center of the plasma coincides with the magnetic mirror center, the anode layer ion source presents both high density output of ion beam current and significantly reduced cathode etching, suggesting that the best balance is obtained between the output and cathode etching.

**Keywords:** plasma simulation, anode layer ion source, discharge structure, plasma properties

**PACS:** 52.50.Dg, 52.55.Jd, 52.65.Rr, 52.65.Pp

**DOI:** 10.7498/aps.72.20222394

\* Project supported by the Science and Technology Research Plan of Shenzhen, China (Grant Nos. SGDX20201103095406024, JSGG20191129112631389), the Sustainable Supporting Funds for Colleges and Universities in 2022, China (Grant No. 20220810143642004), the Research Start-up Fund of Introducing Talent of Peking University Shenzhen Graduate School, China (Grant No. 1270110273), and the Postdoctoral Research Fund Project after Outbound of Shenzhen, China (Grant No. 2129933651).

# These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: wuzz@pku.edu.cn