# 部分电离等离子体物理与技术应用

Igor Kaganovich[1], 和 Michael Tendler [1,2]*
[1]普林斯顿大学普林斯顿等离子体物理实验室，美国新泽西州 08543；ikaganov@pppl.gov[2]瑞典皇家理工学院，
斯德哥尔摩（KTH），SE-100 44，瑞典斯德哥尔摩；mtendler@kth.se*通讯邮箱：mtendler@kth.se。

**摘要：**近年来，部分电离等离子体物理备受关注，这得益于计算机建模日益精进、理论分析不断深入，以及其在计算机组件制造等广泛领域中的技术应用。与完全电离等离子体相比，部分电离等离子体的特点是存在大量中性粒子。理论分析基于动力学玻尔兹曼方程的求解，由此得到非麦克斯韦电子能量分布函数（EEDF），凸显了它与完全电离等离子体的差异。本文详细描述了相关效应对惰性气体和分子气体放电的影响，揭示了等离子体自组织中的复杂非线性现象。文中列举了若干此类现象，包括氩与分子气体 $NF_3$混合物在放电余辉中的非单调电子能量分布函数；电容放电中冷电子群体的爆发式产生；以及电感耦合等离子体中电子能量分布函数的滞后。近年来，为解决等离子体技术中的突出问题，人们开发了高度先进的计算机代码。本文简要概述了这些进展。

## 1. 引言

对低温等离子体的分析揭示了许多与聚变研究相关的高温等离子体共有的特征和相似之处。在部分电离等离子体中，电子仍然足够热，能够提供解离分子或电离原子和化学自由基所需的能量。1927 年，Irving Langmuir 在研究电离气体时，注意到血浆输送红细胞和白细胞的方式与电离气体携带电子和离子的方式相似。受此启发，他采用了 等离子体 一词来指称电离气体。由此，两个截然不同的现象有了相同的名称。气体电离时，会产生电子和离子对。由此形成的等离子体就像一锅由自由移动的正离子和负电子组成的“汤”。需要牢记的关键一点是，带正电粒子——离子的总数与带负电粒子——电子和负离子的总数大致相等。（斜体标示的）这一限定对于理解完全电离和部分电离等离子体物理都至关重要。电磁力可以将单个电子和离子拉近或推开。然而，由于电子质量更小、迁移率更高，它们移动得更快；这种移动会导致电荷分离：离子滞留处呈正电，而电子聚集的等离子体外围区域则呈负电。等离子体保持准中性，这意味着在大尺度上，正电荷和负电荷的密度近乎相等。这个简单事实对部分电离和完全电离等离子体都具有深远影响。例如，它会促使完全电离等离子体中形成自洽电场，使带负电和带正电的粒子保持在一起。由此形成的电场分布会影响磁场在聚变装置中对等离子体施加的约束效果。因此，它对等离子体湍流有着至关重要的影响。许多实验确已证明，电场的空间梯度会撕裂多尺度流体涡旋，从而使现代托卡马克中的约束状态得到改善 [1,2,3]。总之，部分电离和完全电离等离子体都展现出许多强非线性系统典型的自组织特征，这类系统可在混沌理论框架下加以研究。这些特征是自然界中广为人知的非线性现象，包括稳态的分岔、随时间演化过程中的滞后，以及系统呈现幂律行为的自组织演化 [4,5,6,7]。

外加磁场的影响是影响完全电离等离子体和部分电离等离子体的另一个重要因素，但影响方式截然不同。事实上，本文所述的完全电离等离子体与部分电离等离子体之间存在很大差异。如果等离子体完全电离，增加功率会导致加热，并提高电子温度或离子温度。（聚变研究中采用这种方法，以获得相关的等离子体参数。）相反，如果等离子体是部分电离的，增加功率会使等离子体密度升高。电子温度几乎由电离速率与粒子损失到周围壁面的速率之间的平衡决定。对麦克斯韦电子能量分布函数取平均得到的电离频率，是电子温度的一个高度非线性函数。在高压（> 100mTorr）下的部分电离等离子体中，由于与气体的碰撞更快，等离子体输运受到抑制。此外，等离子体自组织受非线性电离过程支配，而这些过程往往会导致放电中出现丝状结构，参见例如文献 [8]。在低压（< 10mTorr）下，等离子体输运是主导过程，非局域现象对于放电动力学也至关重要 [9,10]。流动且相互穿透的粒子流会影响等离子体自组织，这类非局域效应在 Alfven [11] 和 Lehnert[12]所研究的无碰撞宇宙等离子体中十分常见。

## 2. 材料与方法

我们使用两种代码进行等离子体模拟：EDIPIC-2D 和 LTP-PIC-3D。这两种代码由普林斯顿等离子体物理实验室（PPPL）的低温等离子体建模组开发 [13]。下面简要介绍这两种代码的主要特性和成果。

**LTP-PIC-3D** [14]：完整的三维静电粒子网格代码，专为在计算密集型高性能计算（HPC）模拟中实现良好的扩展性而设计。采用中央处理器+图形处理器混合架构。

**EDIPIC-2D** [15]：二维笛卡尔坐标及柱面几何；先进的碰撞模型；等离子体表面相互作用和电路模型；泊松求解器；丰富的诊断功能；经过大量基准测试验证；内部物体、隐式算法、静电学和电磁学；开源且拥有众多用户。

**LTP-PIC 是 Low Temperature Plasma Particle-In-Cell Codes 的缩写**

该代码由 Andrew Tasman Powis 近期开发，并得到同属 PPPL 的 Stephane Ethier 的协助。低温等离子体粒子网格（LTP-PIC）软件套件是一款静电动理学等离子体模拟软件包，可面向现代异构计算架构。尽管等离子体物理学界已有多种高性能粒子网格代码，LTP-PIC 的开发者仍发现了一处空缺：需要一款专用于低温等离子体模拟的高性能、开源且不受限制的代码 [16, 17]。该代码尤其注重针对低温等离子体的碰撞算法和壁面相互作用模型的性能。此外，该软件支持复杂的二维或三维几何结构，并结合先进的线性代数求解器来求解泊松方程。这些设计特点使完整的器件建模成为现实，并能在更短的模拟时间内提供更深入的物理见解。

这款软件的设计与编码植根于 PPPL 和普林斯顿大学数十年来开发高性能聚变与天体物理学等离子体代码的经验。LTP-PIC 中的物理模型已通过与已发表的研究结果以及众多其他代码进行对比，得到了广泛验证。这包括参与 Landmark 2a 基准测试 [18] ，与另外六位开发者共同开展测试；其结果也与 Turner 基准测试 [19] 一致，该测试检验了软件中实现的所有碰撞算法。LTP-PIC 的开发者目前还在牵头一项工作 [20], ，与 10+ 国际代码开发者合作，研究部分磁化 ExB 装置 [21], 中旋转结构的形成，并对这些代码进行严格的基准测试。

LTP-PIC 从底层开始设计，旨在实现高性能和可扩展性，并融入计算机科学领域的最佳实践，以便在异构超级计算机上取得成果。它通过消息传递接口（MPI）实现并行化，并采用网格与粒子混合分解。每个 MPI 任务还可以通过 OpenMP 进一步并行化，以充分利用现代高线程数计算节点。此外，它还集成了 *Hypre* 软件包中的几何多重网格预条件 GMRES 求解器，用于求解泊松方程 [22]。

**静电直接隐式粒子网格二维（EDIPIC-2D）代码**

EDIPIC 是 Electrostatic Direct Implicit Particle-In-Cell（静电直接隐式粒子网格）的缩写。这是 Dmytro Sydorenko 于 21 世纪初在萨斯喀彻温大学开发的一维代码的名称[23] ，概括了该代码所采用的数值方案。EDIPIC 一维代码在低温等离子体领域广受认可，并被广泛用于研究霍尔推力器等离子体、直流放电和束流-等离子体系统。下文介绍的二维代码沿用 EDIPIC 这一名称，以承袭一维代码的传统；EDIPIC 有多个二维版本，包括静电显式方法和达尔文直接隐式方法[24]。该代码在多项国际基准测试中经过了严格验证[18]。

该代码的主要物理特性包括：实现复杂几何结构，其中计算域边界可由多个线段组成；可在模拟域内放置矩形金属或介电材料物体；计算域边界的每个线段以及每个内部物体均可具有独立的电子发射特性；每个金属边界线段和金属内部物体的静电势可以是时间的复杂函数，也可以由外部电路控制，如参考文献 [25] 所述。代码包含电子-中性粒子碰撞的蒙特卡罗模型、离子与中性粒子之间电荷交换碰撞的模型，以及基于南部算法的库仑散射模块，并在电子-电子碰撞中强制满足能量和动量守恒；材料表面受到电子或离子轰击时可发射二次电子。电子发射模型也从一维 EDIPIC [23] 扩展而来。泊松方程采用 PETSc 库中的广义最小残量法（KSPGMRES）求解，并结合 HYPRE 软件包中的预条件器 [22]。代码包含丰富的诊断功能。例如，可以指定模拟域内的点（称为探针），代码将保存这些点处以下参数随时间的变化：静电势、静电场矢量分量、总电流矢量分量，以及每种带电粒子的密度、流速矢量分量、电流矢量分量、沿三个方向的平均运动能、沿三个方向的温度和热流矢量分量等众多参数。

## 3. 结果

*3.1.* 部分电离等离子体动力学

部分电离等离子体的参数范围为：等离子体密度 $10^9$ - $10^{13}$ $cm^{-3}$；电离度较低，小于 $10^{-4}$；电子温度为 1–10 eV；离子温度 $T_i$ = 0.03 eV；空间尺度从毫米到米不等。在低压（1–10 mTorr）下，电子和离子的平均自由程以及能量弛豫长度均远大于鞘层或前鞘层。这正是非局域效应和无碰撞效应（本讨论的重点）尤为重要的参数范围。在高压（数十或数百 mTorr 及以上）下，非局域效应和无碰撞效应的主导性会减弱。然而，必须指出，动力学效应仍然十分显著。

需要强调的是，与完全电离等离子体相比，部分电离等离子体中的电子能量分布函数（EEDF）明显呈非麦克斯韦分布。这是因为电子-电子碰撞（使 EEDF 趋向于麦克斯韦分布）与中性粒子和壁面碰撞导致的冷却效应，以及放电中电场加热效应之间存在竞争。实际上，如果电子-电子碰撞频率 $\nu_{ee}$ 远大于与中性粒子发生能量交换的有效碰撞频率 $\nu^*$，或者电离度 $n_e/n_g$ 足够高，即 $n_e/n_g > 10^{-4}$，那么电子能量分布函数 EEDF 就呈麦克斯韦分布。相反，如果 $\nu_{ee} < \nu^*$ 或 $n_e/n_g < 10^{-4}$，EEDF 的形状可因放电条件而异。Druyvesteyn 首先在平均自由程 λ 恒定且仅考虑弹性碰撞造成的能量损失时，得到了非麦克斯韦电子能量分布函数 [26] 。在这些条件下，$f = \exp(-\varepsilon^2/\varepsilon_0^2)$，其中 $\varepsilon_0 = eE\lambda\sqrt{M/m}$。然而，在实际放电条件下，非弹性碰撞也很重要，并会显著改变 EEDF，如下文所示。

部分电离等离子体中的电子能量分布函数与完全电离等离子体中典型的麦克斯韦分布形式有着本质区别。它由一个强非线性的动力学玻尔兹曼方程决定，该方程采用积分-微分形式 [27]

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + (\boldsymbol{v}\nabla) - e\boldsymbol{E}\frac{\partial}{m\partial v}\right] f = \sum_k \left[\nu_k^{*\prime}\frac{\sqrt{u'}}{\sqrt{u}} f(w + w_k^*) - \nu_k^* f\right] + St_{ee}, \quad (1)$$

电子能量分布函数的形成由电场加热、与中性粒子的弹性和非弹性碰撞造成的能量损失，以及电子-电子碰撞中的能量交换所决定。电子-电子碰撞促使电子能量分布函数保持麦克斯韦分布形式，而前述过程则使其呈现复杂的非线性形式，常表现出非局域效应，以及放电先前时间演化所留下的记忆效应。在高电场下，碰撞可能无法足够迅速地散射电子，使电子速度分布函数（EVDF）达到各向同性 [28]。在某些情况下，电子能量分布函数可能具有各向异性，因此必须通过玻尔兹曼方程的多项展开解来确定 [29]。

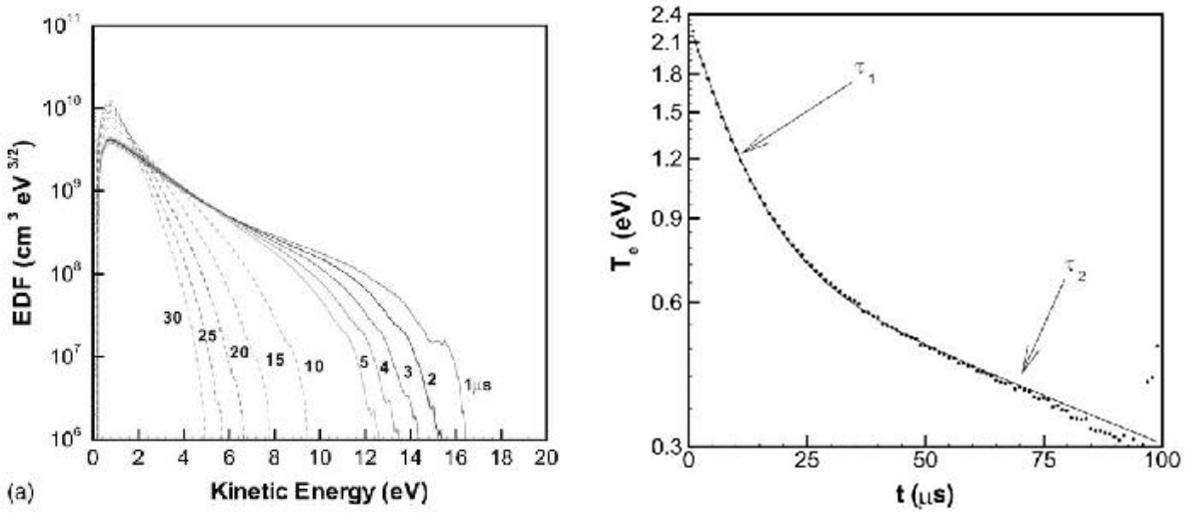


**图 1.** (a) 给定压力为 15毫托时，氩感应射频放电余辉期间电子能量分布函数的演变。(b) 等离子体余辉中电子温度随时间的衰减。[经 Kortshagen 等人许可转载，应用表面科学 192，244 (2002)，参考文献 [30]]。

在某些特殊情况下，电子能量分布函数甚至可能呈非单调性，还可能观察到更复杂的现象，例如负功率耗散 [31,32,33]。

在氩等稀有气体的余辉中，很容易得到非麦克斯韦电子能量分布函数。如图 1 所示，对于麦克斯韦电子能量分布函数，其随动能变化的曲线呈指数形状；而放电余辉的电子能量分布函数在外部功率关闭后的不同时间间隔内不断演化，其形状与指数曲线截然不同。

off.

影响电子能量分布函数形成的主要现象包括电子—电子碰撞（使其趋于麦克斯韦分布），以及电子与中性粒子发生弹性和非弹性碰撞时因能量损失而产生的冷却。如上所述，如果 $\nu_{ee} < \nu^*$ or $n_e/n_g < 10^{-4}$，电子能量分布函数的形状由背景气体的原子结构决定。因此，对部分电离等离子体中的放电进行建模时，必须采用动力学方法，通过求解含碰撞算符的玻尔兹曼动理学方程来完成。

对于更复杂的分子气体，由电子激发的亚稳振动态会带来额外的复杂性。电子与背景分子碰撞，既能激发亚稳振动态，也能使其失活，从而从电子处带走能量或将能量返还给电子。对于分子气体 $N_2$ 或一氧化碳，电子能量分布函数与麦克斯韦分布的差异可能更为显著。电子能量分布函数的部分区域具有很大的灵活性，彼此几乎相互独立，有时会在特定能量范围内遵循幂律。通过采用著名的伽辽金法求解复杂的积分微分方程，首次以解析方法获得了电子能量分布函数的形状 [33]。第二类退激碰撞的重要性也因此凸显出来（在这一现象中，受激原子在碰撞过程中将其内能传递给自由运动的电子，使电子获得动能，同时原子退激至较低能级），尤其是在 E/N 参数方面

< 。如图所示，

$3\ 10^{-16}$ $^{2}$ [34] 2

Vcm 对外驱动激光器的应用至关重要。

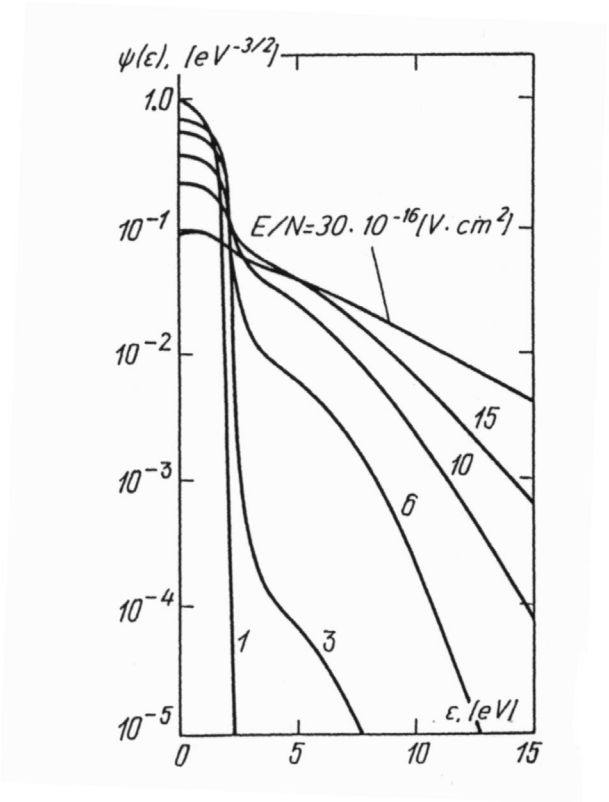


**图 2**. T 分子氮 $N_2$ 中电子能量分布函数（EEDF）随 E/N 的变化
单位为 V×cm²。[re
经 Lyagushenko 和 Tendler 许可转载，苏联等离子体物理学杂志，1975 年，参考文献 [34]]。

电子非弹性散射中的共振源于分子捕获电子。由此形成的离子衰变，生成振动态激发的稳定分子。单量子跃迁和多量子跃迁的相应截面仅在特定能量范围内较大。参考文献 [34] 通过拼接不同能量范围内电子能量分布函数的解，推导出一个解析解。此外，亚稳态对稀有气体中电子能量分布函数的影响也非常重要 [35]。

将惰性气体与分子气体混合时，电子能量分布函数会发生最显著的变化。如图 3 所示，向氩气（Ar）的余辉中加入分子气体 $NF_3$，会大幅改变电子能量分布函数的形状。在振动激发截面显著达到峰值（2-4 eV）的电子能量范围内，分子态的振动激发会导致强烈的能量损失，使电子能量分布函数呈现非单调的能量依赖性。这种非单调的电子能量分布函数会导致负等离子体电导率，此时总电子电流与外加电场方向相反 [36]。从物理上讲，这可以解释为电子以给定的总能量在空间中扩散，该总能量是动能与势能之和，（ ）$w \quad e \quad x\varepsilon = \quad - \varphi$

。由于低能量处损失很大（2 -4 eV），这是由于振动激发，具有

$\varepsilon > 4eV$ 向较小动能区域扩散，即逆着电场方向[37]。

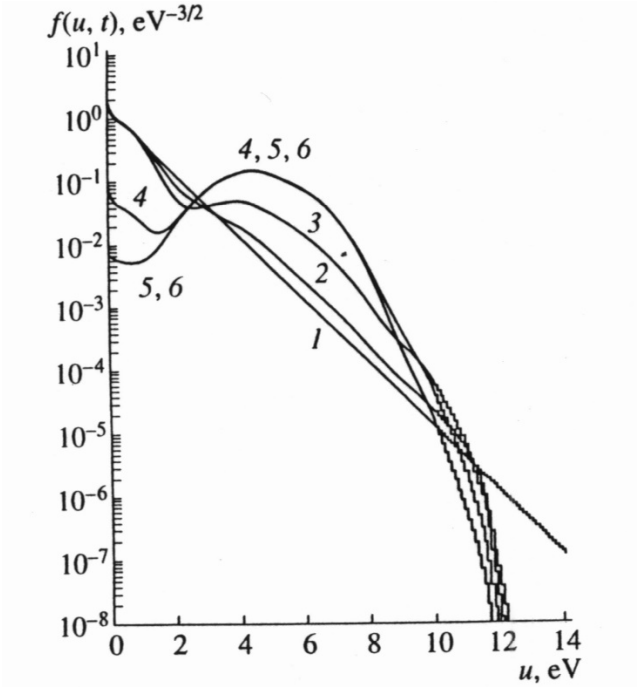


**图 3**。余辉 Ar 中的电子能量分布函数：$NF_3$, E/N=2 $10^{-17}$ $Vcm^2$。图注中的 1、2、3、4、5、6 分别表示余辉时间区间 0、0.25、1、3、5、10 ns。[经 N.A. Dyatko 等人许可转载自《等离子体物理报告》1998 年，参考文献[36]]。

余辉中的电子能量分布函数会受到以荷兰物理学家 Frans Michel Penning 命名的潘宁电离过程的强烈影响。 在余辉中，电子会迅速冷却到非常低的电子能量，最低可达 30K [38]。然而，由于所谓的潘宁电离——两个亚稳原子碰撞所产生的过程，少量能量为几 eV 的快速电子会从缓慢衰减的亚稳态中产生，$A^* + A^* \rightarrow A + A^+ + e_f$ 并且会强烈影响与等离子体接触的壁的电势 [39]，或者影响插入的电极或探针的电势；当潘宁电离产生的高能电子通量相对于离子通量较大时，$\Gamma_{ef} > \Gamma_i$。在这种情况下，近壁电势降可能远大于冷麦克斯韦余辉等离子体中壁电势的典型值，而该值约为电子温度的数倍，即 $T_e$。这一较大的壁电势会阻止余辉中冷电子的进一步损失，并可消除余辉期间通常出现的扩散（或蒸发）冷却[39]。

在低压容性射频放电中还观察到另一种有趣的动力学效应。如果随着注入功率的增加，冷电子的数量急剧增加，那么随着沉积到等离子体中的功率增加，电子温度反而会降低[40] ——这就是所谓的容性放电中冷电子的爆发式产生。图 4 展示了氩中电子能量分布函数的演化，所采用的容性放电参数如下：频率 13.56MHz、长度 6cm、压力 9Pa。显然，放电中发生了冷电子的爆发式产生。冷电子和热电子两种群体的形成，是该现象的非局域性和非线性特征所导致的结果[41]。冷电子之所以会突然形成，是因为随着等离子体主体中电子密度增加，等离子体主体中的射频电场与等离子体密度成反比地减小，从而使等离子体主体中的电子温度大幅降低。因此，双极性电势降低，而离子密度则由于离子速度降低而继续增加。只有当库仑电子-电子碰撞在被俘获于放电中心附近势阱中的冷电子与能够到达射频鞘层并从射频鞘层获得能量的高能电子之间提供足够的能量交换时，该过程才会停止。

冷电子形成在另一种放电现象中也十分显著：即所谓的直流放电负辉光 [37,42]。在这种情况下，阴极位降末端势阱中的俘获电子可能非常冷，~0。1eV，因为除了库仑电子-电子碰撞外，没有其他机制能加热这些电子。对此类放电进行建模时，往往难以达到稳态，因为冷电子密度的演化极其缓慢。这种动力学效应带来的复杂因素使得详细分析变得相当复杂。

低功率感应耦合等离子体源中也会出现类似现象，这可以解释等离子体参数随线圈电压变化时的滞后现象 [43]。

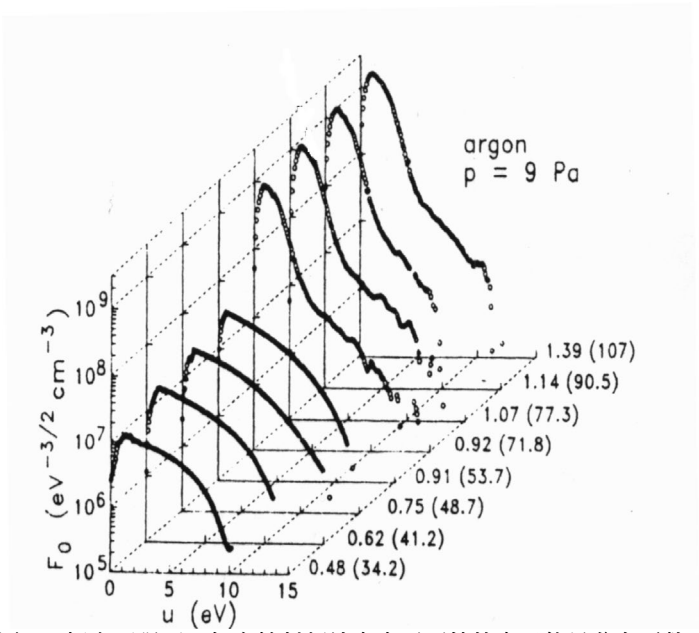


**图 4**。恒定压强下，氩容性射频放电中平面处的电子能量分布函数，射频电流密度（单位：mA/cm$^2$）不同（括号内为射频放电电压）。[经 U. Buddemeier 等人许可转载，载于《应用物理快报》67卷，191页（1995年），参考文献[44]]。

*3.2.* 部分电离等离子体的现代建模方法

等离子体处理应用采用电容耦合或电感耦合等离子体。由于对原子尺度精度的要求，需要非常精确地控制自由基和离子通量，因此，此类放电的建模与优化必须相当先进且精确。并行粒子网格代码是处理部分电离等离子体技术应用的一种强大而灵活的工具。其灵活性源于代码开发简单，能够处理相关现象所涉及的基础物理。这些代码采用模块化设计，因此便于通过有效的流程实现并行化。此外，现代高性能集群和多核个人计算机相对廉价，能够利用多个中央处理器和图形处理器进行实际计算。近期的基准测试论文综述了现有粒子网格代码及其性能[20,21]。

传统的动量守恒显式算法受到时间步长和空间步长过小的严重限制（时间步长 $\Delta t$ 需足够小，以充分分辨频率为 $\omega_{pe}$、$\Delta t\omega_{pe} < 0.2$，的等离子体振荡；空间步长 $\Delta x$ 需足够小，以分辨电子德拜半径，$\lambda_{De}$ $\Delta x < 0.5\lambda_{De}$，且快粒子在一个时间步内的移动距离不能超过网格单元尺寸，即$v_{max}\Delta t < \Delta x$）[45]。减少这些限制的一种方法是采用能量守恒方法或隐式方法。

能量守恒方法 [46] 允许采用大得多的网格尺寸 $\Delta x > \lambda_{De}$，但仍受时间步长限制 $\Delta t\omega_{pe} < 0.2$ 和 $v_{max}\Delta t < \Delta x$ 的约束。对于图形处理器加速的代码，在模拟电容耦合等离子体等情形时，采用大得多的网格尺寸可显著节省计算时间，因为在等离子体密集、等离子体非均匀性的典型空间尺度远大于德拜半径的区域，无需解析德拜半径；而在必须解析德拜半径的鞘层区域，则需要对其进行解析 [47]。

另一种方法是采用各种隐式方法 [48], 和半隐式方法 [49]。这些方法无需解析等离子体频率，但可能无法保持能量守恒，因此需要仔细监测能量守恒，因为它们往往会导致人工冷却或加热 [50]。如果人工冷却或加热远小于外电场导致的加热，这个问题便可得到控制。在电磁代码中，采用隐式方法尤为重要，因为显式方法受到光速对应的库朗条件限制 $c\Delta t < \Delta x$。关于隐式方法在电磁模拟中的最新应用，可参见参考文献 [51,52]。

另一种实用方法是，在辐射并不重要的等离子体模拟中完全去除辐射，从而消除对光速库朗条件（$c\Delta t < \Delta x$）的限制。这可以通过采用所谓的达尔文方案 [53]来实现。达尔文方案的数值实现需要仔细分离静电部分和无散部分，并进行迭代求解。由此得到一组复非线性方程。此前，所得方程组采用动态交替方向隐式技术求解。[54,55]　在最近的论文 [24], 中，无散电场由场涡度方程求得；与先前方法中使用的求解器相比，该求解器更加稳定。

PIC模拟在受到由网格中的有限粒子数所导致的数值统计噪声驱动的短波数值涨落散射时，还可能遇到另一个严重问题，即数值热化速度过快。它

会导致库仑碰撞显著增强，使电子能量分布函数在本不应发生这种情况的条件下趋于麦克斯韦分布 [56]。解决这一问题的方法是采用大于德拜半径的网格尺寸，并结合能量守恒方法或隐式方法，因为这能显著减少人工热化 [56]。在一些鞘层非常薄的高密度等离子体示例中，可以通过缩放真空介电常数来安全地人工增大德拜半径。此类建模方法的示例可参见文献 [57,58,59]。

数值噪声问题在电磁模拟中更加普遍，例如电感耦合等离子体、微波等离子体或螺旋波等离子体。对于电磁模拟，数值噪声可能会增强短波辐射，进而人为地增强短电磁波上的散射，正如开创性论文 [60,61,62]中所述。据我们所知，目前仍缺乏对电磁数值噪声影响热化的详细研究。

粒子网格代码广泛用于低压放电的建模与优化。关于电容耦合（电容耦合等离子体，CCP）和电感耦合等离子体（电感耦合等离子体，ICP）的PIC模拟，已有大量文献，参见文献 [17]中的讨论。该文作者研究了在低压电容耦合等离子体中使用非正弦波形和多频电压，以设计入射到晶圆上的离子和电子的能量与角分布。这对于用于在$SiO_2$中刻蚀高深宽比沟槽的等离子体源尤为重要。近期，已有许多研究探讨弱磁场对电容耦合等离子体和电感耦合等离子体的影响。例如，文献 [63] 研究了弱外加磁场对射频放电的影响，该影响源于电子回旋运动与射频鞘层之间的回旋共振。在较高压力和较强外加磁场下，等离子体往往会变得不均匀，并在等离子体剖面上出现各种复杂模式。这些模式可能发生旋转，甚至使等离子体形成极不均匀的结构，称为“辐条结构”，因为它们看起来像自行车车轮的辐条。近期使用PIC代码取得的重大计算和科学成果中，有若干例子展示了磁化等离子体中自组织辐条结构的形成，包括二维模拟 [64] 乃至三维模拟 [65]。已有多个研究团队能够对整个等离子体器件进行三维模拟，并纳入新出现的湍流 [66]。射频放电中的击穿是另一个极其重要的问题，PIC模拟有助于预测这一现象，参见综述 [67]。电子束与低压等离子体相互作用时，能够激发强等离子体波并引发湍流；这些波会散射电子束，并将能量从电子束传递给背景等离子体。文献 [68]对不同的非线性状态进行了分类。离子束用于离子注入，需要仔细设计等离子体源，在获得高亮度的同时降低提取离子束的发射度。PIC模拟有助于理解这类系统中发生的复杂等离子体物理现象 [69]。

## 3. 讨论

将这些代码用于模拟实验情形，揭示了新的发现，例如 Penning 放电中的三维辐条结构 [65]。对三维霍尔推力器通道进行的 PIC 模拟表明，三维与二维情况下的反常电子输运大不相同 [14]。

然而，仍有许多尚待深入解决的重要问题。尚待深入研究的问题包括窄间隙中的击穿 [70], 、空心阴极研究 [59], 、电子束和离子束 [69] 与等离子体的相互作用、外加磁场的影响 [71,72], 、Penning 放电 [73] 以及霍尔推力器 [66]。

机器学习方法可用于加速模拟 [74]，并使由此产生的代理模型成为功能强大且用途多样的工具，以便进一步分析和优化 [61,62,63]。

本文未涉及表面化学研究；这类研究对蚀刻以及薄膜和纳米材料的沉积至关重要，目前正利用现代量子化学方法快速发展。

## 4. 结论

现代等离子体应用需要对二维和三维复杂等离子体进行建模。借助现代高度并行的粒子网格、流体和混合代码，可以广泛采用计算建模，对等离子体反应器进行原型设计和优化，并开发等离子体处理与沉积方法，以制造量子传感器和计算机所需的材料。因此，这些方法为满足计算机技术的迫切需求提供了有力工具，助力实现超薄芯片及新型材料和器件的优化制造，从而推动量子计算。总之，目前迫切需要结合流体方法与动力学方法的混合方法。流体方法能够实现快速模拟，但往往无法涵盖重要的动力学效应。另一方面，动力学方法虽然能够开展全面的动力学研究，但速度太慢，无法广泛应用。因此，将这些方法结合起来，在实现快速模拟的同时保留关键的动力学效应，对许多应用至关重要。机器学习方法有望在进一步加速模拟方面发挥重要作用。

## 致谢

本研究于　　普林斯顿等离子体物理实验室（PPPL）由美国能源部资助。

这是 Applied Material Inc. 与 PPPL 之间的合作研发协议。瑞典皇家理工学院的研究是在电气工程学院的支持下，作为其活动的一部分开展的。

## 参考文献

[1] Shukla, P. K. 和 Stenflo, L.，《非线性磁流体力学波与湍流》，T. Passot 和 P. L. Sulem 编，施普林格，柏林，1999年[2] Pokhotelov, O. A., Stenflo, L.; Shukla, P. K. 非线性结构。《等离子体物理报告》1996年，22，852。[3] Tendler, M. 等离子体物理中的自组织。《物理学报》2004年，T113，51。[4] Mandelbrot B.B.《自然的分形本质》；Freeman W.H. and Company，纽约，1977年。[5] Prigogine I.; Stengers I.《从混沌到有序》，New Science Library，伦敦，1984年。[6] Back P.《自然如何运作：自组织临界性的科学》，牛津大学出版社，伦敦，1997年。[7] Zaslavsky G.M.《哈密顿混沌与分数动力学》，牛津大学出版社，伦敦，2005年。[8] Burin, M. J.; Simmons, G. G.; Ceja, H. G.; Zweben, S. J.; Nagy, A.; Brunkhorst, C. 商用等离子体球中的细丝结构及其传播。《等离子体物理学》2015年；22，053509。[9] Tendler.M & Heifetz D.，聚变装置中的中性粒子动力学，《聚变技术》1987年，11，289，普林斯顿等离子体物理实验室报告，PPPL-2319，1986年5月。10 Tsendin L D. 气体放电电子动力学的当前趋势。《等离子体源科学与技术》2003年，12，S51。11 Alfvén, H; Arrhenius, G. 太阳系演化，C部分，《等离子体与凝聚》，1976年。12 Lehnert, B. 宇宙等离子体与中性气体相互作用时的最低温度及功率效应。《宇宙电动力学》1970年，1，397。13 ltpmg.pppl.gov 14 Powis, A, T.; Villafana, W.; Kaganovich, I. 霍尔推力器中振荡与反常电子输运的三维动力学模拟。载于第37届国际电推进会议论文集，美国马萨诸塞州剑桥市麻省理工学院，6月19—23日，IEPC-2022-532, https://www.jotform.com/uploads/electricrocket/220994246997171/5314533868819892790/IEPC-2022-532_Powis.pdf 15 https://github.com/PrincetonUniversity/EDIPIC-2D 16 Kaganovich, I. D.; Smolyakov, A.Y.; Raitses; Ahedo, E.; Mikellides, I. G.; Jorns, B. ... Fruchtman, A. 与等离子体推进及类似技术相关的E× B放电物理。《等离子体物理学》2020年，27，120601。17 Versolato, O.; Kaganovich, I.; Bera, K.; Lill, T.; Lee, H.C.; Hoekstra, R.; Sheil, J.; Nam, S.K. 面向先进半导体应用的等离子体源。《应用物理快报》2024年，125，230401。18 Charoy, 等，低温部分磁化等离子体的二维轴向-方位向粒子网格基准，《等离子体源科学与技术》2019年，28，105010。19 Turner, M. M.; Derzi, A.; Donko, Z.; Eremin, D.; Kelly, S. J.; Lafleur T.; Mussenbrock, T. 低压等离子体模拟基准：电容放电。《等离子体物理学》2013年，20，013507。20 Powis, A.T.; 等。部分磁化E×B等离子体中大尺度相干结构的基准测试——社区协作与经验总结，即将在《等离子体科学与技术》2025年发表。21 Powis, A. T.; Carlsson, J. A.; Kaganovich, I. D.; Raitses, Y.; Smolyakov, A. 彭宁放电中旋转模频率的标度关系。《等离子体物理学》2018年，25，072110。

22 Falgout, R. D.; Yang, U. M. Hypre：高性能预条件器库，载于《计算科学——ICCS 2002：国际会议，阿姆斯特丹，荷兰，2002年4月21—24日论文集》第III部分（第632-641页）。柏林、海德堡：Springer Berlin Heidelberg。23 Sydorenko, D.《有磁场低压放电中电子动力学的粒子网格模拟》，博士论文，萨斯喀彻温大学；http://hdl.handle.net/10388/etd-06142006-111353 。24 Sydorenko, D.; Kaganovich, I.D., Khrabrov, A.V.; Ethier, S.A.; Chen, J.; Janhunen, S. 二维Darwin粒子网格代码的改进算法。《等离子体物理学》2025年，32，043904。25 Vahedi, V.; DiPeso, G. 二维有界等离子体模拟代码的电势与电路求解。《计算物理学杂志》1997年，131，149–163。26 Druyvesteyn M.J.《低电压弧光放电》。Zeitschrift für Physik 1930年，64，781–798。27 Druyvesteyn, M. J.; Penning F. M.《低压气体中电放电的机制》。《现代物理评论》，飞利浦埃因霍温物理实验室，荷兰，12，87–174，1940年。28 Stenflo L. 砷化镓中的高场电子分布函数。IEEE论文集1967年，55，1088。29 Loffhagen, D.; and Winkler, R. 等离子体电子时间弛豫过程中速度分布的时变多项近似。《物理学D辑：应用物理》1996年，29，618。30 Kortshagen, U.; Maresca, A.; Orlov, K.; Heil, B. 低压感应耦合等离子体电子动力学理解方面的最新进展。应用表面科学，2002年，192，244。31 Stenflo L. 恒定电场中弱电离等离子体的振荡。《等离子体物理学》1968年，10，551。32 Stenflo L. 漂移电子等离子体中由碰撞引起的负吸收，《等离子体物理学》，1968年，10，801。33 Godyak, V A; Kolobov, V.I. 感应耦合等离子体中的负功率吸收。《物理评论快报》1997年，79，4589。34 Lyagushenko R.; Tendler M. 冷分子气体中的电子能量分布，《苏联等离子体物理学杂志》1975年，1，458-463。35 Colonna, G. 氩和氮放电中超弹性碰撞的重要性。《等离子体源科学与技术》2020年，29，065008。36 Dyatko, N. A.; Capitelli M., Longo S.; Napartovich A. P. 衰减等离子体中的负电子迁移率，《等离子体物理报告》1998年，24，691–699。37 Tsendin, L.D. 气体放电等离子体中的非局域电子动力学，《物理学进展》2010年，53，133。38 Biondi M. 电离气体中电子的扩散冷却。《物理评论》1954年，93，1136。39 Demidov, V.I.; DeJoseph, Jr. C; and Kudryavtsev, A. 非局域快电子等离子体中异常高的近壁鞘层电势降。《物理评论快报》2005年，95，215002。40 Godyak, V A; Piejak R B; Alexandrovich, B M. 低压射频放电中电子能量分布的测量，《等离子体科学与技术》1992年，1，36。41 Berezhnoi S.V.; Kaganovich I.; and Tsendin L. 低压射频电容放电中冷电子的生成：热爆炸的类比。《等离子体物理报告》1998年，24，556。42 Arslanbekov R.R.; Kudryavtsev A. 低压负辉光等离子体中非局域慢电子动力学的建模。《等离子体物理学》1999年，6，1003–1016。43 Lee, H.C. 感应耦合等离子体综述：纳米应用与双稳态滞回物理。《应用物理评论》2018年；5，011108。

[44] Buddemeier U, Kortshagen, U.; Pukropski, I. 关于弱碰撞状态下电容耦合射频放电中电子鞘加热效率的研究，《应用物理快报》 **1995年，** 67,19。[45] Birdsall, C. K.; Langdon, A. B. 通过计算机模拟的等离子体物理学， CRC出版社，纽约，NY，2005。[46] Lewis, H. R. Vlasov等离子体的能量守恒数值近似。《J. Comput. Phys.》 **1970年**，6，136–141。[47] Powis, A. T.; Kaganovich, I. D. 显式能量守恒粒子模拟方法在欠分辨率模拟电容耦合等离子体放电中的精度。《等离子体物理学》 **2024年**，31，023901。[48] Chen G.; Chacon, L. 一种多维、能量与电荷守恒、非线性隐式电磁 Vlasov–Darwin 粒子网格算法。《Comput. Phys. Commun.》 **2015年**，197，73–87。[49] Lapenta, G.; Gonzalez-Herrero, D.; Boella, E. 使用能量守恒半隐式粒子网格方法进行多尺度动理学模拟。《*J. Plasma Phys.*》 **2017年**，83，705830205。[50] Sun, H；Banerjee, S.; Sharma, S.; Tasman Powis, A.; Khrabrov, A.; Sydorenko, D.; Chen, J.; and Kaganovich, I. D. 用于电容耦合等离子体器件建模的直接隐式和显式能量守恒粒子网格方法。《等离子体物理学》 **2023年**，30，103509。[51] Angus, J. R. Link, A.; Friedman, A.; Ghosh, D.; Johnson, J. D. 关于与库仑碰撞二元蒙特卡罗算法耦合的隐式粒子网格方法的数值能量守恒。《J. Comput. Phys.》 **2022年**，456，111030。

[52] Eremin, D. 一种用于碰撞有界等离子体模拟的能量与电荷守恒静电隐式粒子模拟算法。《计算物理学杂志》 **2022**年，452，110934。

[53] Darwin, C. G. 带电粒子的动力学运动，《伦敦、爱丁堡和都柏林哲学杂志与科学期刊》**1920**年，39，537–551。

[54] Gibbons M. R.; Hewett, D. W. 用于低频等离子体现象模拟的Darwin直接隐式粒子网格（dadipic）方法。《计算物理学杂志》 **1995年**，120，231–247。

[55] Hewett, D. W.; Larson, D. J.; Doss, S. 使用动态ADI求解联立偏微分方程：求解简化Darwin场方程。《计算物理学杂志》 **1992**年，101，11–24。

[56] Jubin, S.; Powis, A.T.; Villafana, W.; Sydorenko, D.; Rauf, S.; Khrabrov, A.V.; Sarwar, S.; Kaganovich, I.D. 2**2024年**，31，023902 D PIC模拟中的数值热化：低温等离子体模拟的实用估算。《等离子体物理》。

[57] Shuai Cao, S.；Ren, J；Tang, H.；Zhang, Z.；Wang, Y；Cao, J.；Chen, Z. 使用粒子网格法和蒙特卡罗碰撞法对空心阴极壁上的等离子体功率沉积进行数值模拟。《等离子体物理学》 **2018年**，25，103512。

[58] Parodi, P.；Boccelli, S.；Bariselli, F.；Magin, T.E. Pantera：用于模拟稀薄气体和等离子体的PIC-MCC-DSMC软件，*SoftwareX* **2025年**，31，102244。[59] Villafana, W.；Powis, A. T.；Sharma, S.；Kaganovich, I. D.；Khrabrov, A. V. 建立空心阴极分析中从动理学建模到流体建模的转变判据。《等离子体物理学》 **2024年**，31，093504。

[60] Akhiezer, A.I.；Aleksin, V.F.；Bar'yakhtar, V.G.；Peletminskii, S.V. 强磁场中辐射对电子弛豫和等离子体电导率的影响。《苏联物理学—*JETP*》 **1962年**，15，386—398。

[61] Dreicer, H. 电子—光子气体的动理学理论。《流体物理学》 **1964年**, 7, 735。[62] Dupree, T. H. 等离子体与电磁场的动理学理论。《流体物理学》 **1963年**, 6, 1714。[63] Sharma, S.; Sengupta, S; Sen, A; Khrabrov, A; 和 Kaganovich, I. 研究弱横向磁场下运行的电容放电中电子弹跳—回旋共振对等离子体动力学的影响。

《等离子体物理学》 **2022**，29，063501。

[64] Powis, A.T.; Carlsson J.A; Kaganovich; I, Raitses, Y; Smolyakov, A. 彭宁放电中旋转模频率的标度关系。《等离子体物理学》 **2018年**, 25, 072110。[65] Chen, J.; Powis, A. T.; Kaganovich, I.; Wang, Z.; Yu, Y. 束流产生的部分磁化等离子体中的三维螺旋旋转等离子体结构。*Phys. Rev. Lett.* **2025年**, 135, 045301。[66] Boeuf, J.P.; Smolyakov, A. 用于航天器推进及其他应用的低温 E × B 等离子体的物理特性与不稳定性。《等离子体物理学》**2023**, 30, 050901。

[67] Kim, J.Y.; Kaganovich, I.; Lee, H.C. 气体击穿物理、纳米材料电离式气体传感器及其应用综述，《等离子体源科学与技术》**2022**，31，033001。

[68] Sun, H.; Chen, J; Kaganovich, I.D.; Khrabrov, A.; Sydorenko, D. 电子束在背景等离子体中传播时产生的静电波波非线性相互作用的物理机制。《物理评论*E*》 **2022**，106，035203。

[69] Nuwal, N.; Levin, D.A.; Kaganovich, I. 中和离子束中孤立波动力学的动理学建模。《等离子体物理学》 **2023**，30，012110。

[70] Son, S.H. 等。半导体制造行业先进等离子体源窄间隙中的意外气体击穿。《应用物理快报》 **2023**， 123，232108。

[71] Ganta S、Bera K、Rauf S、Kaganovich I、Khrabrov A、Powis T.P.、Sydorenko D、Xu L。使用粒子模拟（PIC）分析磁化低压电容耦合射频等离子体中的不稳定性。《等离子体物理学》**2024年**，31，102107。

[72] Patil，S.；Sharma，S.；Sengupta，S.；Sen，A；Kaganovich，A.D. 低磁场下电容放电中的电子弹跳—回旋共振。《Phys. Rev. Research》**2022年**，4，013059。

[73] Fubiani，G；Camenen，G.Y；Garrigues F.L.；Papahn Zadeh，M.；Smolyakov，A.；Tyushev，M. 径向电场对彭宁放电中等离子体不稳定性的影响：来自3**2025年**，32，080704 D 粒子网格模型的见解。《等离子体物理学》。

[74] Powis, A.T.；Corona Rivera, D.；Khrabry, A.；Kaganovich, I.D. 使用机器学习生成的初始条件加速动理学等离子体模拟。arXiv:2510.01977，将于 2026 年发表于《等离子体物理》。