

COMSOL 模擬 2.45GHz 圓形波導 微波電漿之參數研究

不同功率下激發模式轉變分析

陳亮宇

2025 年 10 月

國立新竹科學園區實驗高級中等學校

研究背景與動機

應用背景

- 微波電漿具備高密度、低污染特性，廣泛應用於蝕刻、CVD 與薄膜沉積等半導體製程。COMSOL 2013; Chen 2016
- 2.45 GHz 系統的截止電子密度約為 $7.4 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}$ ，超過後理應反射入射微波。Griffiths 2017; COMSOL 2013

知識落差

- 過密度電漿仍能持續吸收能量，顯示存在體積波以外的耦合機制。
Wikipedia contributors 2023; Nagatsu and Sugai 1997

研究動機

- 釐清體積波與表面波加熱的轉換條件，理解能量如何在過密度區維持。
Wikipedia contributors 2023
- 量化功率、半徑與電子密度之間的關聯，建立可供設備調校的行為地圖。

研究策略

- 建立 COMSOL 耦合電磁與電漿模組，橫跨 $P_{\text{in}} = 1 \sim 10^5 \text{ W}$ 與廣泛腔體半徑掃描。
- 以資料管線萃取眾數密度、臨界功率與模式邊界，對照理論模型驗證。

三個核心研究問題

研究問題 1：功率-密度關係

輸入功率 P_{in} 如何影響電子密度 n_e ？是否存在幕次律關係？

$$n_e \propto P_{\text{in}}^\alpha$$

研究問題 2：幾何效應

不同腔體半徑 r 如何影響點火功率與電漿徑向尺度？

研究問題 3：激發模式轉換

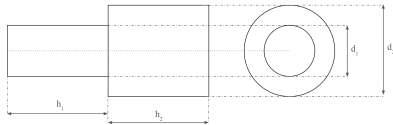
激發模式轉換的臨界功率與腔體半徑的關係？物理機制為何？

幾何與邊界

- 2D 軸對稱模型，左端 TEM 端口饋入；同軸內外邊界視為理想導體。
- 內壁允許電子表面複合，離子以玻姆速度入射後中和。

氣體與物種

- 氬氣： $p = 60 \text{ mTorr}$ ， $T_0 = 400 \text{ K}$ 。
- 物種 $\{e^-, \text{Ar}, \text{Ar}_s, \text{Ar}^+\}$ ；碰撞截面採 LXCat Phelps (2017)，含激發、逐步電離、潘寧電離與壁面淬滅。



軸對稱幾何：同軸饋入 / 內外邊界理想導體。

統御方程與耦合

- 電磁場 (EMW) :

$$\nabla \times (\mu_r^{-1} \nabla \times \mathbf{E}) - k_0^2 \left(\epsilon_r - \frac{j\sigma}{\omega\epsilon_0} \right) \mathbf{E} = 0$$

由電漿導電率 σ 與介電常數回饋。

- 電子連續性 (Plas) :

$$\partial_t n_e + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_e = R_e$$

R_e 含激發、逐步電離、潘寧電離與表面損失；能量方程決定電子溫度與 σ 。

掃描策略與輸出

- 功率掃描： $r = 47.7$ mm， $P_{in} = 1 \sim 10^5$ W；蒐集電子密度、功率沉積與反射功率。
- 幾何掃描： $r = 5 \sim 1000$ mm，基準 $P_{in} = 20$ W，逐步調升以取得最小點火功率 $P_{cutoff}(r)$ 。
- 模擬輸出：儲存 2D 場量、徑向切片與 sweep log，供後續結果重現與統計分析。

數據分析方法

KDE 眾數計算

在對數空間進行核密度估計：

$$\text{KDE}(x) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{x - x_i}{h}\right)$$

高斯核函數：

$$K(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{u^2}{2}}$$

優勢：抗極端值干擾

Log-Log 線性擬合

對數空間線性回歸：

$$\log_{10} n_e = \alpha \log_{10} P_{\text{in}} + \log_{10} C$$

求解參數：

- 冪次指數 α
- 係數 C
- 決定係數 R^2

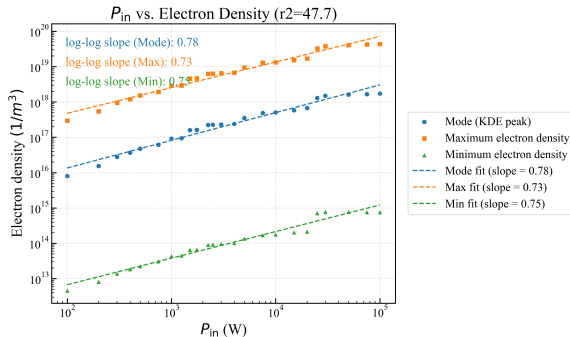
實作細節：所有數據分析腳本與資料已收錄於附件 ‘code/’ 與 ‘research*/data/’

結果 1：功率-密度冪次律關係

主要發現

$$n_e \propto P_{in}^{0.73 \sim 0.78}$$

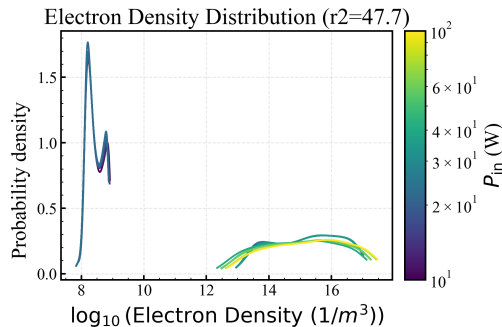
- 對數-對數擬合的斜率穩定落在 0.73–0.78
- 次線性冪律顯示功率提升時電子密度成長趨緩
- 觀察與數據涵蓋 $P_{in} = 1 \sim 10^5$ W



結果 1：點火閾值視覺證據

電子密度分布

- 低功率掃描中，密度機率分佈出現明顯斷層
- 斷層對應輸入功率跨越點火閾值 E_{crit}
- 支持「雪崩式擊穿」：閾值前難以維持電漿，閾值後密度跳升



電子密度機率分佈：10–40 W 區間出現斷層，標記點火跳變。

結果 1：理論解析

粒子與能量平衡

- 穩態條件： $G = L_{diff} + L_{vol}$ ，結合能量守恆得到

$$P_{in} = C_1 \bar{n}_e + C_2 \bar{n}_e^2$$

- $C_1 = \frac{D_a V \mathcal{E}_c}{\Lambda^2}$ （擴散損失）、
 $C_2 = \beta_{rec} V \mathcal{E}_c$ （體複合損失）

幂次律的意義

- 低密度： $C_1 \bar{n}_e \gg C_2 \bar{n}_e^2 \Rightarrow \bar{n}_e \propto P_{in}$
- 高密度： $C_2 \bar{n}_e^2 \gg C_1 \bar{n}_e \Rightarrow \bar{n}_e \propto P_{in}^{1/2}$
- 實際範圍的 $\alpha = 0.73-0.78$ 顯示兩種損失通道同時主導

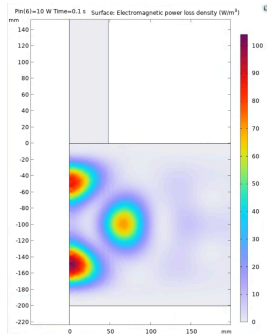
結果 1：小結

- n_e 與 P_{in} 呈次線性幂律，功率提升時密度增長趨於飽和。
- 擴散與體複合損失並存，限制能量耦合效率並決定幂次落在 0.73–0.78。

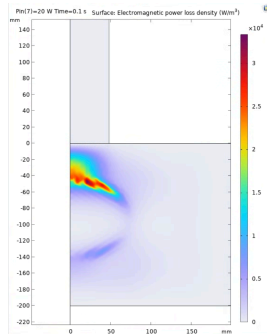
結果 2：模式轉換能量沉積（低功率段）

體積波跡象

- 10 W：功率沉積集中於腔體中心，維持體積波加熱。
- 20 W：壁面附近出現能量帶，顯示進入點火過渡。



10 W（體積波）

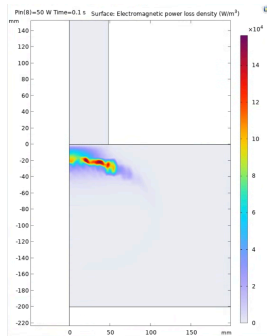


20 W（過渡）

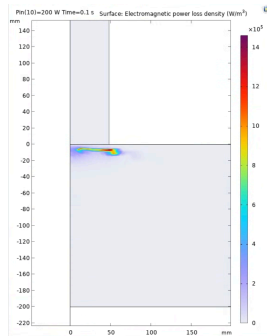
結果 2：模式轉換能量沉積（高功率段）

表面波成形

- 50 W：能量帶貼近介電壁面，表面波逐漸主導。
- 200 W：沉積壓縮於介面薄層，轉為穩定表面波加熱。



50 W（過渡）



200 W（表面波）

結果 2：理論解析

模式轉換條件

- 體積波階段：中心區域吸收為主，電子密度維持在 $n_e < n_{cr}$ 。
- 過渡階段：局部密度逼近 n_{cr} 時，靠近介面的電場增強形成表面能量帶。
- 表面波階段： $n_e > n_{cr}$ 後，能量侷限於介電壁附近的趨膚深度 δ_p 。

能量沉積平衡

- 體積波：吸收體積與損失（擴散、體複合）競逐，能量分布寬而均勻。
- 表面波：能量沿介面傳輸，沉積厚度取決於 δ_p 與擴散長 L_{phy} 。
- 功率提升將沉積由中心推向壁面，對應圖示中的 10/20/50/200 W 演化。

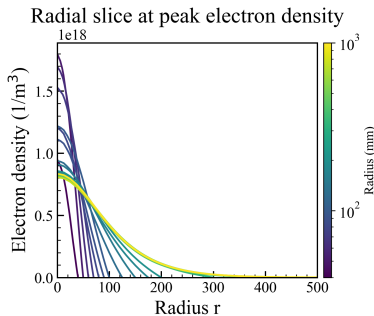
結果 2：小結

- 低功率維持體積波，能量沉積集中於腔體中心且電子密度低於 n_{cr} 。
- 功率逐步提升時，介面附近的能量帶增強，顯示系統進入表面波過渡。
- 表面波形成後，能量侷限於介電壁附近，後續功率主要調整表面層強度。

結果 3：徑向尺度飽和現象

兩段式行為

- $r \lesssim 200$ mm：電漿衰減半徑幾乎與腔體半徑線性同步（壁面限制）
- $r \gtrsim 200$ mm：衰減半徑趨於平台值，幾何放大不再增加電漿尺度
- 飽和值由表面波趨膚深度與擴散-複合長度共同決定



結果 3：物理解釋

擴散主導區 ($r \lesssim 200 \text{ mm}$)

- 粒子尚未在體積內複合便抵達管壁， β_{rec} 可忽略
- 徑向解受邊界條件限制， $R_{\text{plasma}} \approx r$
- 電漿填滿腔體，徑向尺度跟隨幾何放大

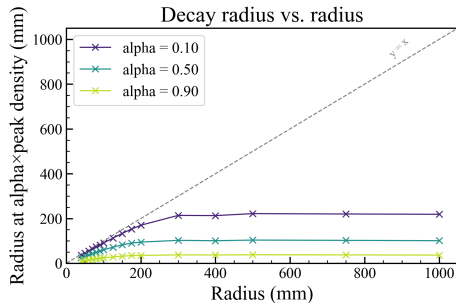
複合主導區 ($r \gtrsim 200 \text{ mm}$)

- 定義物理尺度 $L_{phy} = \sqrt{D_a / (\beta_{rec} \bar{n}_e)}$
- $r \gg L_{phy}$ 時，粒子在體內複合，與管壁脫離
- 表面波加熱厚度 δ_p 與 L_{phy} 共同設定飽和值

結果 3：徑向衰減量化

衰減半徑指標

- 取電子密度衰減至 $\alpha = 0.1, 0.5, 0.9$ 的半徑作為尺度指標
- 小腔體：指標幾乎貼合 $y = x$ ，證實壁面限制
- 大腔體：三條曲線都趨於常值，顯示與壁面脫離



電漿衰減半徑 vs. 腔體半徑：小腔體貼合 $y = x$ ，大腔體進入飽和值。

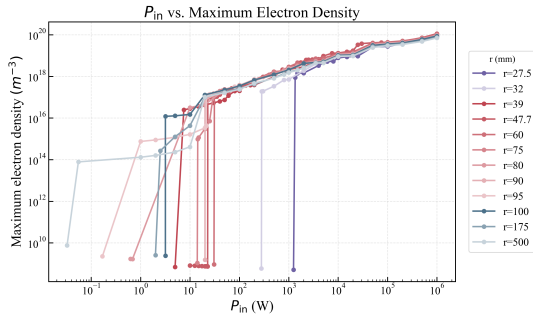
結果 3：小結

- 小腔體內徑向半徑與腔體半徑同步，顯示壁面限制的擴散主導。
- 大腔體區域出現飽和值，粒子在體內複合並與壁面脫離。
- 表面波趨膚深度與 L_{phy} 決定了 W-Mode 下的內在尺度上限。

結果 4：幾何參數對點火邊界的影響

觀察重點

- $r < 35.9$ mm 的案例需要遠高於其他半徑的點火功率，因為波導落在截止區，微波只能以漸逝波衰減前進。
- 在高功率區段，正常傳播區 ($r > 35.9$ mm) 的曲線收斂，顯示表面波加熱時幾何影響趨於消失。
- 特定半徑（如 $r = 500$ mm）出現雙階段躍升，推測依序跨越點火閾值與模式轉換兩個門檻。

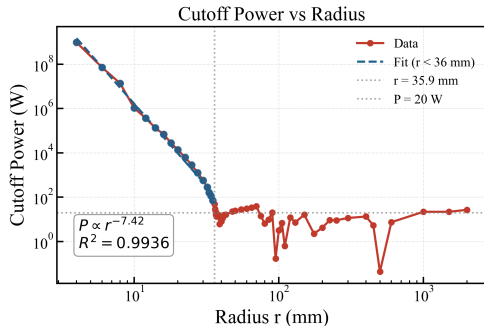


結果 4：激發模式轉換臨界功率

點火功率擬合

$$P_{cutoff} \propto r^{-7.42}$$

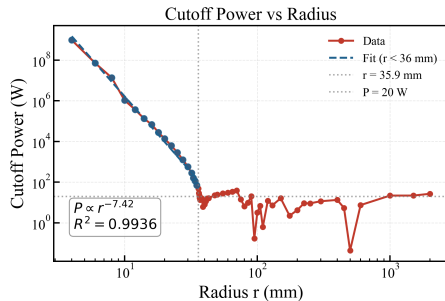
- 將波導截止範圍 ($r < 35.9$ mm) 的資料擬合後得到 $P_{cutoff} \propto r^{-7.42}$ ，量化小半徑點火成本的急遽提升。
- 臨界半徑 $r_c = 35.9$ mm 對應 TE_{11} 截止，與前一頁觀察的族群邊界一致。
- 在 log-log 座標下，該冪次量測的是指數模型在此半徑範圍內的局部斜率，便於與理論與實驗交叉驗證。



結果 4：激發模式轉換臨界功率

物理圖像

- 小半徑：波導位於截止區，場型為漸逝波，入射功率必須放大才可能在腔體內達到 E_{crit} 。
- 大半徑：遠離截止可直接傳播；在表面波主導區，正常傳播區的曲線收斂，加熱機制與幾何尺寸脫鉤。
- 點火但 $n_e < n_{cr}$ 時維持體積波加熱；當 $n_e \geq n_{cr}$ 則進入表面波主導。



結果 4：理論解析

漸逝波點火

- 波導色散：決定傳播或截止

$$\beta^2 = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - \left(\frac{\chi'_{11}}{r}\right)^2$$

- 衰減常數： $r < r_c$ 時 $\beta = i\alpha$

$$\alpha(r) = \sqrt{\left(\frac{\chi'_{11}}{r}\right)^2 - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2}$$

- 場強放大：漸逝波需放大才能點火

$$E_{in}(r) = E_{crit} e^{\alpha(r)L}$$

- 點火功率模型：入口功率隨 $\alpha(r)$ 指數成長

$$P_{cutoff}(r) = E_{crit}^2 \exp(2L\alpha(r))$$

對數斜率與偏差

$$k(r) = -\frac{d \ln P_{cutoff}}{d \ln r} = \frac{2L(\chi'_{11})^2}{r^2 \sqrt{\left(\frac{\chi'_{11}}{r}\right)^2 - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2}}$$

- 取 $L_{\text{eff}} = 20 \text{ mm}$ 時， $k(r)$ 在 5–30 mm 區間落於 ~ 4 –15，平均約 7.4，與前一頁幕次擬合一致。
- 偏差來源： L_{eff} 估計、點火後密度回饋、半徑採樣間距。
- 理論與模擬皆顯示小半徑點火成本呈指數級上升。

結果 4：小結

- 點火功率隨半徑減小呈急劇上升，反映波導截止造成的漸逝波衰減。
- 當功率足以突破臨界密度後，正常傳播區的曲線收斂，顯示表面波加熱的普適耦合效率。
- 擬合冪次與理論指數關係一致，證實模型對幾何縮尺度的敏感性。

綜合討論：三項核心機制

機制 1：點火閾值 E_{crit}

功率不足時電場無法達到擊穿閾值，電漿停留在未點火區；閾值跨越後電子密度出現跳變。

機制 2：模式轉換 $n_e \gtrsim n_{cr}$

當電子密度超過臨界值，體積波被截止並改由表面波維持，加熱區域壓縮至趨膚深度。

機制 3：幾何限制與飽和

波導截止半徑 $r_c = 1.841 c/\omega$ 決定點火難度；大半徑區則受擴散-複合內在尺度支配而飽和。

整合結論

點火閾值、臨界密度與幾何尺度共同勾勒出三個運行區域，解釋功率-密度 map 的所有趨勢。

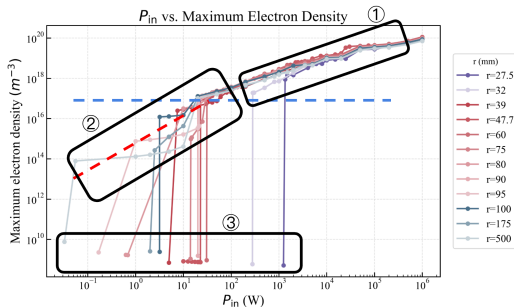
綜合討論：運行區域地圖

三個運行區

- 區域 I：點火且 $n_e > n_{cr}$ ，表面波主導高密度區
- 區域 II：點火但 $n_e < n_{cr}$ ，維持體積波加熱
- 區域 III：功率不足，停留在未點火狀態

邊界意義

- 紅虛線： E_{crit} 導出的 $P_{cutoff}(r)$ ，決定能否點火
- 藍虛線： $n_e = n_{cr}$ ，決定體積波或表面波機制



功率-密度圖：紅、藍邊界將運行條件劃分為三個區域。

1. 功率-密度冪次律

在 $P_{in} = 1 \sim 10^5$ W 範圍量化 $n_e \propto P_{in}^{0.7-0.8}$ ，並以粒子/能量平衡模型解釋其物理來源。

2. 點火閾值與模式轉換解耦

找出點火閾值 (E_{crit}) 與模式轉換 (n_{cr}) 兩條邊界，建構三區域運行地圖。

3. 建立完整數據分析管線

- VTU 檔案解析 → 統計聚合 → 視覺化
- KDE 方法在對數空間的優越性
- 所有腳本與資料夾收錄於附件，支援結果重現





4. 幾何效應與徑向飽和






說明波導截止造成的 P_{cutoff} 急遽上升，以及大腔體下電漿徑向尺度的飽和值。


後續工作重點

- 在模型中納入多組分氣體與反應動力學，評估化學能量損失角色。Fridman 2008
- 加入外加磁場並探討 ECR（電子迴旋共振）對點火與模式邊界的影響。Lieberman and Lichtenberg 2005; Chabert and Braithwaite 2011

References

-  Chabert, Pascal and Nicholas Braithwaite (2011). *Physics of Radio-Frequency Plasmas*. Cambridge: Cambridge University Press.
-  Chaudhury, B. et al. (2009). *Mechanism of Microwave Guiding and Plasma Generation in Below Cutoff Dimensions*. ResearchGate preprint. Accessed 2025-10-20.
-  Chen, Francis F. (2016). *Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion*. 3rd ed. Cham: Springer.
-  COMSOL (2013). *Microwave Plasmas*. COMSOL Blog. Accessed 2025-10-20. URL: <https://www.comsol.com/blogs/microwave-plasmas/>.

-  Ferreira, C. M. (2022). “**Concept of Power Absorbed and Lost per Electron in Surface-wave Plasma Columns and Its Contribution to the Advanced Understanding and Modeling of Microwave Discharges**”. In: *Physical Review E* 106, p. 045202.
-  Fridman, Alexander (2008). ***Plasma Chemistry***. Cambridge: Cambridge University Press.
-  Griffiths, David J. (2017). ***Introduction to Electrodynamics***. 4th ed. Cambridge: Cambridge University Press.
-  Lieberman, Michael A. and Allan J. Lichtenberg (2005). ***Principles of Plasma Discharges and Materials Processing***. 2nd ed. Hoboken, NJ: Wiley-Interscience.
-  Nagatsu, M. and H. Sugai (1997). “**Surface-Wave Plasmas**”. In: *Proceedings of the 13th International Symposium on Plasma Chemistry*.

-  Wikipedia contributors (2023). *Surface-wave-sustained Discharge*. Wikipedia, The Free Encyclopedia. Accessed 2025-10-20. URL:
https://en.wikipedia.org/wiki/Surface-wave-sustained_discharge.