中国航天
航天器环境工程
SPACECRAFT ENVIRONMENT ENGINEERING
中国科技核心期刊

离子发动机栅极材料差分溅射产额分布特性仿真

朱政羲 苗龙 耿海 郭德洲 杨统勋 何梓豪 王宁飞

Simulation on the distribution characteristics of differential sputtering yields on ion engine grid materials

ZHU Zhengxi, MIAO Long, GENG Hai, GUO Dezhou, YANG Tongxun, HE Zihao, WANG Ningfei

在线阅读 View online: https://doi.org/10.12126/see.2023160

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

离子推力器栅极非预期电击穿评述

Study of unexpected electric breakdowns on the grid of ion thruster

航天器环境工程. 2022, 39(3): 326–332 https://doi.org/10.12126/see.2022.03.016

离子推力器非预期电击穿特性及其主要影响因素对比研究

Characteristics and main influencing factors of unexpected electric breakdown in ion thruster

航天器环境工程. 2021, 38(1): 63–70 https://doi.org/10.12126/see.2021.01.010

泵压式发动机瞬态热试验方法

Method for transient thermal test of turbopump–fed rocket engine

航天器环境工程. 2020, 37(1): 89–94 https://doi.org/10.12126/see.2020.01.014

地外天体上航天器起飞瞬时羽流对主发动机干扰效应影响

The effect of plum on main engine of ascending spacecraft launched from extraterrestrial bodies

航天器环境工程. 2019, 36(6): 565–570 https://doi.org/10.12126/see.2019.06.006

流固耦合作用下水下点火固体发动机C/C复合材料喷管力学性能分析

Mechanical property evaluation of C/C composite material nozzle of underwater solid rocket motor influenced by fluid–solid coupling

航天器环境工程. 2020, 37(3): 240–244 https://doi.org/10.12126/see.2020.03.005

高能电子辐照下介质材料内沉积电荷分布试验研究

Experimental study on dielectric materials deposited charge distribution under high–energy electron irradiation

航天器环境工程. 2022, 39(6): 620–625 https://doi.org/10.12126/see.2022055

https://www.seejournal.cn E-mail: htqhjgc@126.com Tel: (010)68116407, 68116408, 68116544

离子发动机栅极材料差分溅射产额分布特性仿真

朱政羲[1]，苗 龙[1,2*]，耿 海[3]，郭德洲[3]，杨统勋[1]，何梓豪[1]，王宁飞[1]
（1. 北京理工大学 宇航学院，北京 100081；2. 北京理工大学 重庆创新中心，重庆 404100；
3. 兰州空间技术物理研究所 真空技术与物理重点实验室，兰州 730000）

摘要：针对离子发动机栅极溅射原子空间分布不明确导致栅极腐蚀模型预测偏差大的问题，采用 SDTrimSP 程序模拟离子轰击栅极材料的溅射过程；系统研究离子入射能量、入射角度以及离子种类对钼栅极材料差分溅射产额的影响。发现正入射条件下的差分溅射产额仿真结果与实验具有较好的一致性。重点关注斜入射条件下差分溅射产额在不同方位角下的分布轮廓，并通过 Modified-Zhang 公式对差分溅射产额进行拟合，以拟合结果作为材料边界条件输入溅射腐蚀—再沉积模型，较为真实地模拟了栅极材料的腐蚀过程。以上研究可为离子发动机栅极组件腐蚀形貌的精确预测提供参考。

关键词：离子发动机；钼栅极材料；差分溅射产额；斜入射；腐蚀—再沉积模型
中图分类号：V439 **文献标志码：**A **文章编号：**1673-1379(2024)04-0450-09
DOI: 10.12126/see.2023160

Simulation on the distribution characteristics of differential sputtering yields on ion engine grid materials

ZHU Zhengxi[1], MIAO Long[1,2*], GENG Hai[3], GUO Dezhou[3], YANG Tongxun[1], HE Zihao[1], WANG Ningfei[1]
(1. School of Aerospace Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China;
2. Chongqing Innovation Center, Beijing Institute of Technology, Chongqing 404100, China;
3. Science and Technology on Vacuum Technology and Physics Laboratory, Lanzhou Institute of Physics, Lanzhou 730000, China)

Abstract: In view of the unclear spatial distributions of sputtered atoms from ion engine grid, which leads to significant deviations in grid erosion modeling predictions, the SDTrimSP program was used to simulate the sputtering process of ions bombarding the grid materials. The study systematically investigated the impact of ion incident energy, incident angle, and ion species on the differential sputtering yields of molybdenum grid materials. Under normal incidence, the simulated differential sputtering yields were found to be in good agreement with experimental data. Special attention was given to the distribution profiles of differential sputtering yields at different azimuthal angles under oblique incidence. The Modified-Zhang formula was used to fit the differential sputtering yields. The fitting results were applied as material boundary conditions in the erosion-redeposition model, offering a more realistic simulation of the grid materials' erosion process. This approach may provide a reference for the accurate prediction of the erosion morphology of ion engine grid components.

Keywords: ion engine; molybdenum grid materials; differential sputtering yield; oblique incidence; erosion-redeposition model

收稿日期：2023-10-23；**修回日期：**2024-08-04
基金项目：国家重点研发计划项目（编号：2022YFB3403500）；国家自然科学基金项目（编号：52202460）

引用格式：朱政羲, 苗龙, 耿海, 等. 离子发动机栅极材料差分溅射产额分布特性仿真[J]. 航天器环境工程, 2024, 41(4): 450-458
ZHU Z X, MIAO L, GENG H, et al. Simulation on the distribution characteristics of differential sputtering yields on ion engine grid materials[J]. Spacecraft Environment Engineering, 2024, 41(4): 450-458

0　引言

离子发动机又称离子推力器，是空间电推进技术的一种，属于静电式推进，具有比冲高、寿命长、推力调节范围大的优势，尤其适用于深空探测器的动力系统。其工作原理为：推进剂在放电室中被电离，形成正离子和自由电子混合的等离子体；正离子在离子光学系统（栅极）的静电场作用下加速喷出产生推力。离子发动机栅极组件作为产生推力的核心构件，其溅射腐蚀与磨损失效严重制约发动机的服役寿命[1–3]。栅极组件的溅射腐蚀主要来源于中性推进剂原子和离子间发生的电荷交换（charge exchange, CEX）碰撞，此过程中 CEX 离子轰击栅极，引起栅极形貌变化[4]；溅射出的栅极材料原子在加速栅和屏栅上再沉积，形成的尖峰和薄片甚至会导致栅间短路。

通常用差分溅射产额表征溅射原子的空间分布特性[5-8]。差分溅射产额为单位立体角下的溅射原子数与总的入射离子数之比，用 $y(\theta,\varphi)$ 表示，其中：θ 为离开栅极材料的溅射原子速度方向与材料表面法向之间的夹角，称为极角；φ 为溅射原子速度方向和入射离子速度方向在材料表面上的投影线之间的夹角，称为方位角。基于二体碰撞的蒙特卡罗方法具有低成本、精度高、物理过程清晰的优势，被广泛应用于差分溅射产额研究[8–10]。有研究[11-12]模拟了入射能量在 100 eV 以下的 Xe^+正入射钼栅极材料的差分溅射产额分布，由于模型中原子间距的设置不是随机的，导致在材料表面法向的差分溅射产额结果相较于实验结果严重偏大。Kenmotsu 等[13] 模拟了 200 eV 的 Xe^+正入射碳材料，发现其差分溅射产额分布轮廓对称且呈欠余弦分布。商圣飞等[14] 计算得到 500 eV 的 Xe^+正入射铜材料的溅射原子呈欠余弦分布，与实验结果基本吻合。Mahne 等[15] 对比了斜入射和正入射条件下的差分溅射产额分布，观察到斜入射下差分溅射产额分布不再对称。陈明[16] 研究了斜入射条件下溅射原子的极角分布与入射角 β（入射离子速度方向与材料表面法向的夹角）之间的关系，发现溅出原子的极角多数分布在 40°～60°。以上研究仅关注在某单一方位角下差分溅射产额随极角的变化；而在斜入射条件下，差分溅射产额在空间表现出强烈的各向异性，需要采用多个方位角下的分布来全面表征差分溅射产额空间分布轮廓。

本文采用 SDTrimSP 程序研究在不同的离子入射能量、入射角度、入射气体种类下，钼（Mo）栅极材料的差分溅射产额分布特性，重点讨论斜入射条件下差分溅射产额随方位角的分布规律。将仿真结果通过 Modified-Zhang 公式进行拟合，形成溅射原子空间分布的公式描述，为溅射腐蚀—再沉积模型的精确建模提供输入，以实现离子发动机栅极组件腐蚀形貌的精确预测。

1　差分溅射产额仿真模型

1.1　SDTrimSP 溅射仿真模拟

本文采用 SDTrimSP 程序[17] 进行仿真计算，该程序可用于模拟粒子之间的碰撞过程。SDTrimSP 是基于 TRIM.SP 开发的蒙特卡罗程序，其假设材料为零温（静态栅极材料原子速度为 0）、非晶态且横向尺寸无限大。本研究所采用的靶材为一维，沿 x 方向进行分层，y 和 z 方向取为无穷大，具体选用 Mo 栅极材料。原子核碰撞用二体碰撞近似（binary collision approximation, BCA）程序处理，以大量二体碰撞事件模拟离子轰击固体靶材的效应，并计算离子与栅极材料原子之间的碰撞。为了模拟非晶态靶材的特性，BCA 程序通过将入射离子沿自由路径移动，并随机选择冲击参数来模拟散射过程。由于入射离子与栅极材料原子的原子核之间存在相互作用势，二者的运动方向发生偏折，入射离子能量会部分传递给栅极材料原子。在势函数的选择上，Krypton-Carbon（KrC）势和 Ziegler-Biersack-Littmark（ZBL）势为通用的屏蔽库仑势函数，用于描述原子核间排斥和吸引的相互作用。鉴于 KrC 势在本文研究的能量范围内具有优势，特别是在模拟低能碰撞时表现更佳[18]，本文仿真计算中选用 KrC 势。最后，利用 SDTrimSP 程序对运动的入射离子和目标反冲原子（离子碰撞后形成的运动的栅极材料原子）进行三维跟踪，直到它们的能量低于某个预设值或离开靶材区域。

1.2　差分溅射产额球面评估模型

为了评估差分溅射产额，需要对 SDTrimSP 的输出数据进行处理。评估差分溅射产额的数学模型如图 1 所示。球面立体角定义为球表面截取的面积与球半径平方之比，即 $\mathrm{d}\omega = \dfrac{\mathrm{d}a}{r^2} = \sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$。

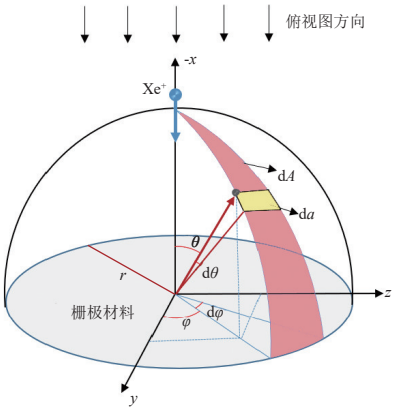


图 1 差分溅射产额评估模型

Fig. 1 The differential sputterring yield assessment model

差分溅射产额可以表示为

$$y(\theta,\varphi)=\frac{\mathrm{d}^2Y}{\mathrm{d}^2\omega}=\frac{\mathrm{d}^2N_\mathrm{a}}{N_\mathrm{i}\mathrm{d}^2\omega},\tag{1}$$

其中：$y(\theta,\varphi)$ 为差分溅射产额，atom·ion^{-1}·str^{-1}；Y 为总溅射产额，atom·ion^{-1}；N_a 为溅射原子的数量；N_i 为轰击在栅极材料上的离子数量；θ 为极角，(°)；φ 为方位角，(°)。

总溅射产额 Y 可由差分溅射产额分别沿着极角 θ 和方位角 φ 进行积分获得[15]：

$$Y=\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi/2}y(\theta,\varphi)\mathrm{d}\omega=\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi/2}y(\theta,\varphi)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi。\tag{2}$$

为了评估差分溅射产额的极角分布以及方位角分布，取极角间隔 $[\theta_1,\theta_2]$ 和方位角间隔 $[\varphi_1,\varphi_2]$，如图 1 中 da 区域。在本文中极角间隔取 1.5°，方位角间隔取 3°。因此在方位角间隔内（图 1 红色区域），认为差分溅射产额不变，获得该区域内溅射产额 y_A 为

$$y_\mathrm{A}=(\varphi_2-\varphi_1)\int_0^{\pi/2}y(\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta。\tag{3}$$

在此方位角间隔下极角间隔内（图 1 黄色区域）的差分溅射产额值为 $y_\mathrm{a}[\theta_1,\theta_2]$，那么在该极角范围内的溅射原子数 $N_\mathrm{a}[\theta_1,\theta_2]$ 为

$$N_\mathrm{a}[\theta_1,\theta_2]=(\varphi_2-\varphi_1)N_\mathrm{i}y_\mathrm{a}[\theta_1,\theta_2]\int_{\theta_1}^{\theta_2}\sin\theta\mathrm{d}\theta=(\varphi_2-\varphi_1)N_\mathrm{i}y_\mathrm{a}[\theta_1,\theta_2](\cos\theta_1-\cos\theta_2)。\tag{4}$$

由式 (4) 可以得到：

$$y_\mathrm{a}[\theta_1,\theta_2]=\frac{1}{(\varphi_2-\varphi_1)(\cos\theta_1-\cos\theta_2)}\frac{N_\mathrm{a}[\theta_1,\theta_2]}{N_\mathrm{i}}。\tag{5}$$

对于离子入射角 β=0°的特殊情况，由于差分溅射产额在 2π 范围内具有方位角同一性，所以式 (5) 可以简化为

$$y_\mathrm{a}[\theta_1,\theta_2]=\frac{1}{2\pi(\cos\theta_1-\cos\theta_2)}\frac{N_\mathrm{a}[\theta_1,\theta_2]}{N_\mathrm{i}}。\tag{6}$$

1.3 Modified-Zhang 溅射原子角分布公式

在获得仿真结果的基础上，采用 Modified-Zhang 溅射产额角分布公式（式 (7)）对仿真结果进行拟合[19]。后文中束流离子路径上差分溅射产额的获取使用式 (7)，先将非 0°的数据集进行拟合，再由拟合公式获得 0°时的预测值。

$$y_\mathrm{MZ}=\frac{Y}{1-\sqrt{\frac{E^*}{E}}\cos\beta}\frac{\cos\theta}{\pi}\times\left[1-\frac{1}{4}\sqrt{\frac{E^*}{E}}\left(\cos\beta\gamma(\theta)+\frac{3}{2}\pi\sin\beta\sin\theta\cos\varphi\right)\right];\tag{7}$$

$$\gamma(\theta)=\frac{3\sin^2\theta-1}{\sin^2\theta}+\frac{\cos^2\theta(3\sin^2\theta+1)}{2\sin^3\theta}\ln\left[\frac{1+\sin(\theta)}{1-\sin(\theta)}\right]。\tag{8}$$

其中：y_MZ 为计算得到的 Modified-Zhang 差分溅射产额，atom·ion^{-1}·str^{-1}；Y 为总溅射产额，atom·ion^{-1}；E^*为特征能量，eV；E 为离子入射能量，eV；β 为离子入射角，(°)。Y 与 E^*为自由拟合参数，采用最小二乘法获得最佳值；拟合结果与仿真结果之间的吻合程度采用标准差进行评估。

2 差分溅射产额测量实验验证

2.1 差分溅射产额测量实验

差分溅射产额测量实验在 JPHM800 真空罐中进行。真空罐的直径为 0.8 m，长度为 1.8 m，其极限真空度可以达到 5×10^{-5} Pa，在溅射实验过程中真空度维持在 5×10^{-3} Pa。

实验使用的轰击源为射频离子源，通过放电室外缠绕的射频线圈通电产生的高频电磁场对放电室内的气体进行激发电离形成离子，离子经高电压双栅极加速引出形成离子束流。实验中使用的气体工质为氙气，经电离形成 Xe^+；实验中采用的栅极材料为金属 Mo。离子源出口半径为 1 cm，栅极电源可提供的离子能量范围为 200～1200 eV。轰击 Mo 栅极材料的电流通过高精度数字万用表进行测量。为了减小离子源热辐射对溅射产额的影响，同时提高离子源工作的稳定性，通过水冷对射频离子

源进行降温。离子束流中心位置正对栅极材料中心，距离离子源加速栅极 18 cm。Mo 栅极材料的夹持装置使用旋转位移台，旋转角度的变化通过高精度电机进行驱动，可保证其正对离子束流。本实验中，离子入射角 β 始终为 0°；采用 INFICON 石英晶体微量天平（QCM）传感器测量系统对差分溅射产额进行收集，测量原理如图 2 所示。通过测量溅射粒子沉积到 QCM 上引起的共振频率的变化确定差分溅射产额。

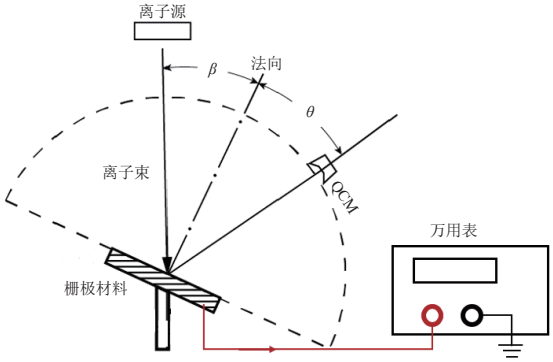


图 2　差分溅射产额测量原理示意[20]

Fig. 2　Principle schematic of differential sputtering yield measurement[20]

测量时，将 QCM 置于 Mo 栅极材料上方，通过摇杆支撑，以栅极材料中心为圆心作圆弧运动，获得溅射原子在不同极角下溅射粒子收集率 $R(\theta)$，单位为 $g\cdot s^{-1}$，收集时的极角步长为 5°，每个位置收集时间 10 min，以避免收集率随时间的波动，通过式 (9) 计算差分溅射产额：

$$y(\theta)=\frac{R(\theta)N_{\mathrm{A}}qr_{\mathrm{QCM}}^{2}}{M_{\mathrm{t}}JA}。\tag{9}$$

式中：M_t 为栅极材料的原子质量，amu；N_A 为阿伏伽德罗常数；r_{QCM} 为 QCM 到栅极材料表面的距离，cm；J 为离子电流，A；q 为离子电荷，C；A 为 QCM 晶体面积，cm^2。

此外，通过式 (7) 对实验测得的差分溅射产额进行拟合，可得到总溅射产额 Y；还可以采用称重法[7,21] 由式 (10) 计算直接得到：

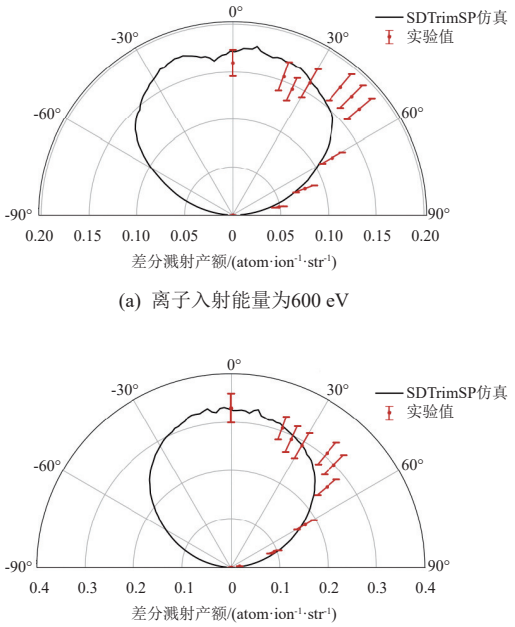
$$Y=\frac{m_{\mathrm{i}}-m_{\mathrm{f}}}{M_{\mathrm{t}}J_{\mathrm{a}}t}eN_{\mathrm{A}}。\tag{10}$$

其中：m_i 和 m_f 分别为溅射前/后的栅极材料质量，g；J_a 为栅极材料收集到的平均电流，A；t 为溅射时间，s；e 为电子电荷量。

2.2　仿真结果与实验结果对比

通过 QCM 测量 Xe^+ 正入射 Mo 栅极材料的差分溅射产额，仿真模型中参数设置如下：Mo 的数密度为 0.064 53 $Å^{-3}$，表面结合能 E_s 为 6.82 eV，离位能 E_d 为 33.00 eV。

在极角坐标系下分别画出离子入射能量 E 为 600 eV 和 1000 eV 的差分溅射产额分布，如图 3 所示。由于离子入射角 β 为 0°时，差分溅射产额分布呈现关于极角 θ=0°的对称特征，因此本实验只测量了 0°～90°的差分溅射产额值。由于离子入射角 β 在 0°位置时处于离子路径上，该处的数据由式 (7) 外推得到。仿真结果再现了溅射原子的对称分布特性，与实验差分溅射产额的数值及分布比较一致。部分数据点之间存在误差的原因可能是仿真用的栅极材料是绝对光滑的，而实验中 Mo 栅极材料表面微观形貌较粗糙，从而导致离子并非按照理想的 0°入射角轰击在栅极材料表面。



(a) 离子入射能量为600 eV

(b) 离子入射能量为1000 eV

图 3　Xe^+ 正入射 Mo 栅极材料的差分溅射产额仿真结果与实验结果对比

Fig. 3　Comparison between simulation and experimental results of differential sputtering yields of Xe^+ bombarding Mo target at normal incidence

SDTrimSP 仿真得到的总溅射产额结果与 QCM 测量法以及称重法（质量损失法）得到的结果对比如表 1 所示，总溅射产额具有较好的一致性。

表 1 仿真和实验总溅射产额对比

Table 1 Comparison between simulation and experimental results of total sputtering yields

方法	离子入射能量 E/eV	总溅射产额 Y/(atom·ion^{-1})
SDTrimSP仿真	600	0.681
	1000	1.048
QCM测量法	600	0.69
	1000	1.12
质量损失法	600	0.68
	1000	1.16

3 结果与讨论

3.1 Xe^+入射能量对差分溅射产额的影响

图 4 所示为 200～1000 eV 的 Xe^+正入射 Mo 栅极材料时的差分溅射产额分布。可以看出，在不同离子入射能量下，溅射原子的差分溅射产额分布呈现出球对称的特征，与能量的变化无关。然而随着离子入射能量的增加，分布轮廓发生了显著变化，由低能量下的欠余弦分布（心形分布）逐渐变成余弦分布[22-25]。造成欠余弦分布的原因是重离子的能量太低，不足以产生级联碰撞，导致沿着栅极材料表面法向离开的溅射原子数相对减少[26]。

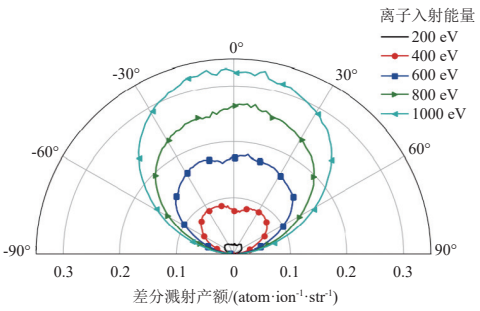


图 4 不同入射能量的 Xe^+正入射 Mo 栅极材料的差分溅射产额分布

Fig. 4 Differential sputtering yields of Xe^+ with various incident energies bombarding Mo target at normal incidence

将图 4 中的数据点通过式 (7) 进行拟合获得对应的 5 条拟合曲线，如图 5 所示。可以看到，数据点可很好符合该拟合公式，直观体现了差分溅射产额随极角 θ 的余弦分布特征，采用式 (7) 对仿真数据的拟合参数总结见附表。对于入射能量为 600 和 1000 eV 的离子，采用式 (7) 拟合获得的总溅射产额 Y 值分别为 0.614 atom·ion^{-1} 和 1.038 atom·ion^{-1}，与 QCM 实验测量结果间的偏差分别为 11% 和 7.3%。差分溅射产额仿真数据点与公式 (7) 拟合结果的标准差分别为 8.2% 和 4.6%。

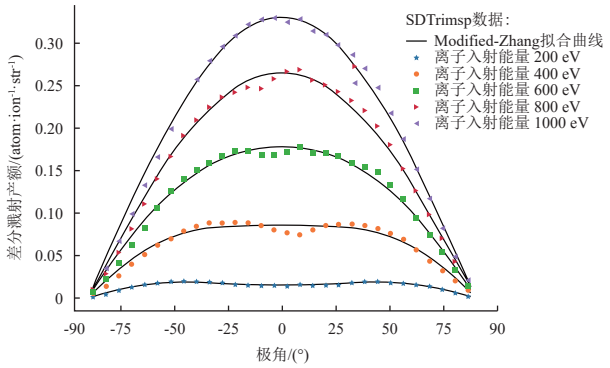


图 5 不同入射能量下仿真数据的 Modified-Zhang 公式拟合结果

Fig. 5 Fitting results of the Modified-Zhang formula for simulation data at various incident energies

3.2 Xe^+入射角度对差分溅射产额的影响

选定 1000 eV 的 Xe^+以入射角 β 分别为 30°、45°和 60°轰击 Mo 栅极材料。当入射角 β 为 30°时，在半球图（俯视图）中画出差分溅射产额的空间分布，如图 6 所示。

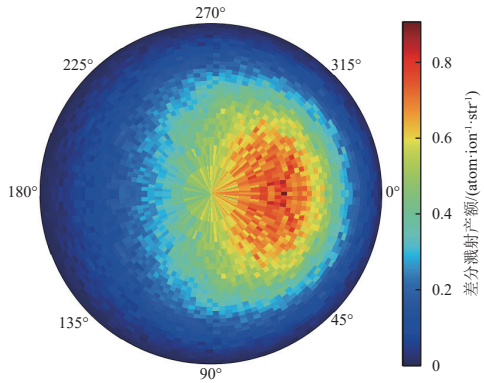


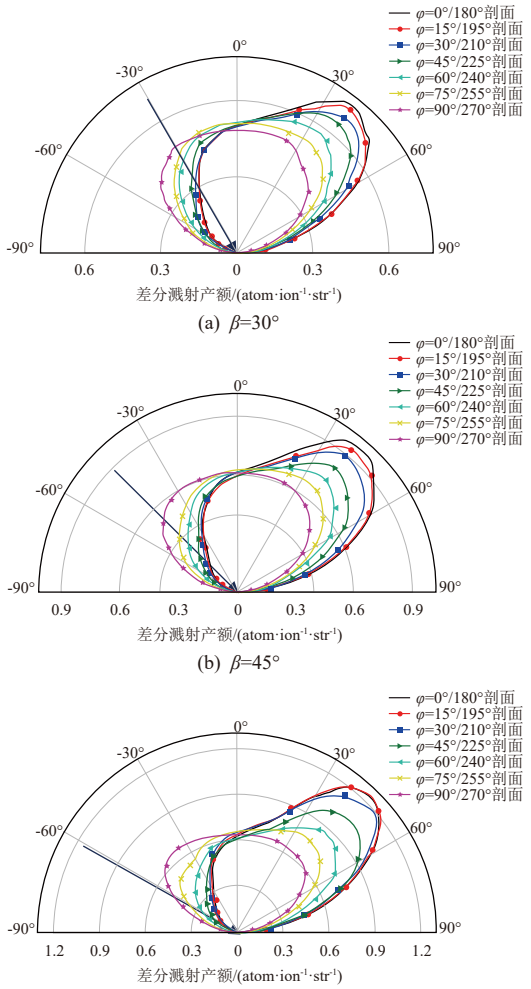
图 6 入射角 β 为 30°时差分溅射产额的球面分布（俯视图）

Fig. 6 Spherical distributions of differential sputtering yields at incident angle of 30° (top view)

与离子正入射（图 4）进行对比，斜入射的差分溅射产额分布具有很强的前向性。从图 6 可以看出差分溅射产额呈现强烈的空间不均匀性：该特征在方位角 φ=0°/180°时最为显著；随着方位角 φ 的逐渐增加这种前向性趋势逐渐减弱，当方位角 φ=90°/270°时，这种前向趋势几乎消失。

在入射角 β 为 30°、45°和 60°时分别在极坐标中画出 φ=0°/180°、15°/195°、30°/210°、45°/225°、60°/240°、75°/255°、90°/270°等 7 个方位角剖面下，差分溅射产额分布随极角 θ 的变化，如图 7 所示。当 Xe^+入射角 β 从 30°增加到 60°时，溅射分布向着更大的极角位置轻微偏移，在 7 个不同方位角剖面下差分溅射产额的极角分布在极角 θ=0°附

近重合：在之前的实验中也观察到了同样的现象[27]，这是因为极角 θ=0°的点所有方位角剖面都必须经过公共点。并且由图 7 可以发现 φ=90°/270°时差分溅射产额的分布关于极角 θ=0°对称，此时离子入射速度方向在该剖面上没有速度分量，因此溅射基本不受斜入射的影响，差分溅射产额分布仍表现为对称轮廓。



(a) β=30°

(b) β=45°

(c) β=60°

图 7　不同入射角 β 下 Xe^+轰击 Mo 栅极材料的差分溅射产额分布

Fig. 7　Differential sputtering yields for Xe^+ bombarding Mo target at various incident angles

此外，随着 Xe^+入射角的增大，差分溅射产额的最大值 y_{max} 都出现在 φ=0°/180°剖面，且 y_{max} 对应的极角 θ 始终在 45°附近。如图 8 所示，y_{max} 值随着入射角 β 的增加呈现先增大后减小的趋势，并且在 β=60°达到了最大值 1.235 atom·ion^{-1}·str^{-1}；当 β=90°时,离子束平行于 Mo 栅极材料，不会造成栅极材料溅射。

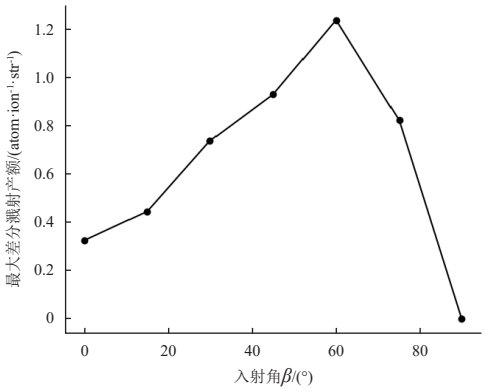
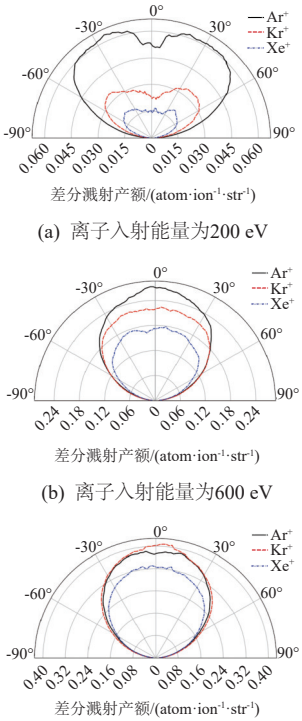


图 8　y_{max} 随入射角 β 的变化

Fig. 8　Variation of y_{max} against angle of incidence β

3.3　入射离子种类的影响

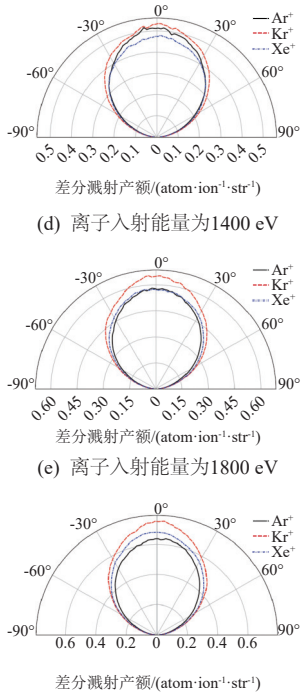
图 9 给出了在离子入射能量分别为 200、600、1000、1400 和 2200 eV 时，Ar^+、Kr^+、Xe^+正入射 Mo 栅极材料的差分溅射产额分布。当入射能量＜1000 eV 时，差分溅射产额分布轮廓 Ar^+＞Kr^+＞Xe^+，尤其在入射能量为 200 eV 时，Ar^+对应的差分溅射产额分布轮廓远大于 Kr^+、Xe^+的。随着离子入射能量的增加，Kr^+对应的差分溅射产额分布轮廓逐渐向 Ar^+靠近，并在离子入射能量增大到 1000 eV 时超过 Ar^+的；当离子入射能量增加到 1800 eV 时，Xe^+对应的差分溅射产额分布轮廓与 Ar^+的基本重合；离子入射能量继续增加差分溅射产额分布轮廓则出现 Kr^+＞Xe^+＞Ar^+。



(a) 离子入射能量为200 eV

(b) 离子入射能量为600 eV

(c) 离子入射能量为1000 eV



(d) 离子入射能量为1400 eV

(e) 离子入射能量为1800 eV

(f) 离子入射能量为2200 eV

图 9 不同能量的 Ar^+、Kr^+和 Xe^+轰击 Mo 栅极材料的差分溅射产额分布

Fig. 9 Distributions of differential sputtering yields for Ar^+, Kr^+, and Xe^+ bombarding Mo target at various incident energies

不同能量区间的 Ar^+、Kr^+、Xe^+离子轰击 Mo 栅极材料，溅射产额大小及分布顺序的变化与粒子之间的碰撞紧密相关。如图 10 所示当荷能离子入射材料时，入射离子在栅极材料中与栅极原子发生碰撞经历入射和反射过程，两者均会引起原子的溅射。总溅射产额为入射和反射过程引发的溅射产额之和，而总溅射产额大对应的差分溅射产额分布轮廓也越大。

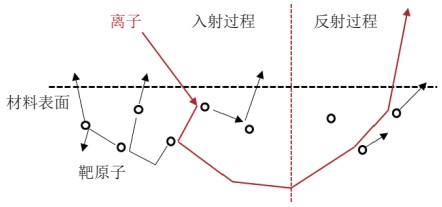


图 10 离子轰击 Mo 栅极材料的入射和反射过程示意

Fig. 10 Schematic of incidence and reflection processes of ions bombarding Mo target

Ar^+、Kr^+、Xe^+3 种离子在入射和反射过程中引发的溅射产额随离子入射能量的变化规律如图 11 所示。在入射能量较低(200 eV)时，3 种离子入射过程诱发的溅射产额基本一致，都约为 0.1 atom·ion^{-1}。然而，Ar^+反射过程引发的溅射远大于其他两种离子的，这是由于原子质量较小的 Ar^+(40 amu)轰击重粒子 Mo(96 amu)时更容易发生反射，反射过程引发的溅射产额最为显著，因此离子入射能量为 200 eV 时，Ar^+的总溅射产额最大。随着离子入射能量的增加，碰撞将向栅极材料深处发展，离子入射过程引发的溅射产额相比于反射过程成为主要部分，此时 Kr^+和 Xe^+入射过程引发的溅射产额超过了 Ar^+，且 Kr^+和 Xe^+入射过程引起的溅射产额基本一致，但 Kr^+反射过程引起的溅射产额明显高于 Xe^+的。因此离子入射能量较高(2200 eV)时，总溅射产额大小呈现出 Kr^+＞Xe^+＞Ar^+的规律。

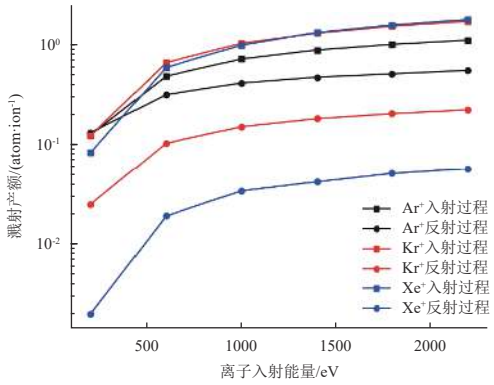


图 11 离子入射过程与反射过程引起的溅射产额随离子入射能量的变化

Fig. 11 Variations of sputtering yields with incident energies of ions in ion incidence and reflection processes

4 结束语

本文对离子发动机栅极材料的差分溅射产额分布轮廓进行了数值仿真，系统研究了在离子的不同入射能量、入射角度和不同离子种类下，Mo 栅极材料的差分溅射产额分布特性。通过实验对溅射产额进行了测量，并与仿真结果进行了对比，验证了计算模型的预测精度。得到以下结论：

1)离子正入射条件下，Mo 栅极材料的差分溅射产额分布轮廓随离子入射能量的增大逐渐由欠余弦分布向余弦分布转变。

2)离子斜入射条件下，Mo 栅极材料的差分溅射产额在不同方位角下表现出强烈的各向异性，最大差分溅射产额随着入射角增大呈现先增大后减小的趋势，并在入射角为 60°时达到最大值。然而，最大差分溅射产额出现的极角位置不随离子入射角的增大而变化，基本保持在 45°左右。

3)Ar^+、Kr^+、Xe^+正入射 Mo 栅极材料时，当离子入射能量 E＜1000 eV，差分溅射产额分布轮廓大小依次为 Ar^+＞Kr^+＞Xe^+；当 1000 eV＜E＜1800 eV，

差分溅射产额分布轮廓 $Kr^+ > Ar^+ > Xe^+$；当 $E>1800$ eV，差分溅射产额分布轮廓 $Kr^+ > Xe^+ > Ar^+$。

本文获得的 Mo 栅极材料差分溅射产额分布对补充离子电推进差分溅射数据具有重要意义，获得的差分溅射产额分布与入射离子能量以及角度的拟合函数，可指导栅极组件溅射—再沉积模型构建，有助实现栅极表面形貌腐蚀退化规律的精确预测。

参考文献（References）

[1] 冉文亮, 张天平, 赵志伟, 等. 离子推力器栅极非预期电击穿评述[J]. 航天器环境工程, 2022, 39(3): 326-332
RAN W L, ZHANG T P, ZHAO Z W, et al. Study of unexpected electric breakdowns on the grid of ion thruster[J]. Spacecraft Environment Engineering, 2022, 39(3): 326-332

[2] SANGREGORIO M, XIE K, WANG N F, et al. Ion engine grids: function, main parameters, issues, configurations, geometries, materials and fabrication methods[J]. Chinese Journal of Aeronautics, 2018, 31(8): 1635-1649

[3] 孙安邦, 李昊霖, 杨谨远, 等. 无中和器离子推力器的发展现状、关键技术及展望[J]. 科学通报, 2023, 68(1): 112-127
SUN A B, LI H L, YANG J Y, et al. Development status, key technologies, and prospects of neutralizer-free ion thrusters[J]. Chinese Science Bulletin, 2023, 68(1): 112-127

[4] DUCHEMIN O B. An investigation of ion engine erosion by low energy sputtering[M]. Pasadena: California Institute of Technology, 2001

[5] HE Z H, MIAO L, ZHU Z X, et al. Analysis of sputtering yield measurements for ion thruster grid materials[J]. AIAA Journal, 2023, 61(7): 2799-2809

[6] LU C, XIA G Q, SUN B, et al. A particle model of ion thruster plume Mo source based on grid erosion[J]. Acta Astronautica, 2020, 177: 217-231

[7] 李青曼, 王平阳, 徐宗琦. 金刚石对霍尔推力器通道壁面抗溅射性能的影响[J]. 中国空间科学技术, 2017, 37(6): 62-67
LI Q M, WANG P Y, XU Z Q. Effect of diamond on sputtering resistance performance of Hall thruster channel wall[J]. Chinese Space Science and Technology, 2017, 37(6): 62-67

[8] ROBINSON M T, TORRENS I M. Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision approximation[J]. Physical Review B, 1974, 9(12): 5008-5024

[9] LI Y G, YANG Y, SHORT M P, et al. IM3D: a parallel Monte Carlo code for efficient simulations of primary radiation displacements and damage in 3D geometry[J]. Scientific Reports, 2015, 5(1): 18130

[10] LI Y G, YANG Y, SHORT M P, et al. Ion radiation albedo effect: influence of surface roughness on ion implantation and sputtering of materials[J]. Nuclear Fusion, 2017, 57(1): 016038

[11] NAKLES M R. Experimental and modeling studies of low-energy ion sputtering for ion thrusters[D]. Blacksburg: Virginia Polytechnic Institute and State University, 2004: 34-35

[12] WITTMAACK K. Reliability of a popular simulation code for predicting sputtering yields of solids and ranges of low-energy ions[J]. Journal of Applied Physics, 2004, 96(5): 2632-2637

[13] KENMOTSU T, WADA M, HYAKUTAKE T, et al. Erosion of accel grids of ion engine due to sputtering[J]. Review of Scientific Instruments, 2010, 81(2), 02B109

[14] 商圣飞, 姜利祥, 李涛, 等. 电推进羽流粒子束溅射的蒙特卡罗模拟[J]. 推进技术, 2022, 43(5): 404-412
SHANG S F, JIANG L X, LI T, et al. Monte Carlo simulation of electric propulsion plume particle beam sputtering[J]. Journal of Propulsion Technology, 2022, 43(5): 404-412

[15] MAHNE N, ČEKADA M, PANJAN M. Total and differential sputtering yields explored by SRIM simulations[J]. Coatings, 2022, 12(10): 1541

[16] 陈明. 磁控溅射过程中溅射产额及靶材刻蚀的模拟计算研究[D]. 合肥: 合肥工业大学, 2007: 31-32

[17] MUTZKE A, SCHNEIDER R, ECKSTEIN W, et al. SDTrimSP version 6.00: IPP 2019-02[R]

[18] HOFSÄSS H, ZHANG K, MUTZKE A. Simulation of ion beam sputtering with SDTrimSP, TRIDYN and SRIM[J]. Applied Surface Science, 2014, 310: 134-141

[19] YALIN A P, WILLIAMS J D, SURLA V, et al. Differential sputter yield profiles of molybdenum due to bombardment by low energy xenon ions at normal and oblique incidence[J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2007, 40(10): 3194-3202

[20] WILLIAMS J D, GARDNER M M, JOHNSON M L, et al. Xenon sputter yield measurements for ion thruster materials: NASA/CR-2003-212306[R], 2003

[21] 张志远, 严立, 王平阳, 等. 霍尔推力器放电室壁面溅射产额研究[J]. 推进技术, 2015, 36(3): 476-480
ZHANG Z Y, YAN L, WANG P Y, et al. Study on

sputtering yield of Hall thruster discharge chamber wall[J]. Journal of Propulsion Technology, 36(3): 476-480

[22] WUCHER A, REUTER W. Angular distribution of sputtered particles from metals and alloys[J]. Journal of Vacuum Science & Technology A, 1988, 6(4): 2316-2318

[23] WEHNER G K, ROSENBERG D. Angular distribution of sputtered material[J]. Journal of Applied Physics, 2004, 31(1): 177-179

[24] CHINI T K, TANEMURA M, OKUYAMA F. Angular distribution of sputtered Ge atoms by low keV Ar^+ and Ne^+ ion bombardment[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 1996, 119(3): 387-391

[25] YAMAMURA Y, MURAOKA K. Over-cosine angular distributions of sputtered atoms at normal incidence[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 1989, 42(2): 175-181

[26] OKUTANI T, SHIKATA M, ICHIMURA S, et al. Angular distribution of Si atoms sputtered by keV Ar^+ ions[J]. Journal of Applied Physics, 2008, 51(5): 2884-2887

[27] YALIN A, WILLIAMS J, ZOERB K, et al. Azimuthal differential sputter yields of molybdenum by low energy Xe^+ bombardment[C]//42nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit. Sacramento, CA, USA, 2006

（编辑：武博涵）

附表：

附表提供了采用 Modified-Zhang 公式（式 (7)）拟合不同工况下的差分溅射产额分布轮廓，获得的拟合参数汇总。其中 E、β、φ 分别代表离子入射能量、入射角度、溅射原子的方位角；Y、E^*分别为拟合参数；std 为仿真数据与拟合结果的标准差。

附表 1 Ar^+、Kr^+、Xe^+正入射 Mo 栅极材料

离子种类	E/eV	E^*/eV	Y/(atom·ion^{-1})	std
Ar^+	200	41.75	0.26	0.07
Kr^+		69.08	0.15	0.07
Xe^+		66.56	0.09	0.14
Ar^+	600	3.68×10^{-19}	0.83	0.04
Kr^+		18.06	0.77	0.05
Xe^+		27.13	0.61	0.08
Ar^+	1000	5.43×10^{-20}	1.19	0.06
Kr^+		5.00×10^{-324}	1.23	0.04
Xe^+		1.63×10^{-20}	1.04	0.03
Ar^+	1400	2.96×10^{-31}	1.49	0.09
Kr^+		9.72×10^{-31}	1.58	0.06
Xe^+		5.00×10^{-324}	1.44	0.05
Ar^+	1800	5.11×10^{-23}	1.67	0.09
Kr^+		5.00×10^{-324}	1.89	0.08
Xe^+		1.23×10^{-31}	1.73	0.06
Ar^+	2200	1.13×10^{-30}	1.84	0.10
Kr^+		8.40×10^{-25}	2.14	0.10
Xe^+		5.59×10^{-22}	1.99	0.08

附表 2 Xe^+斜入射 Mo 栅极材料（E=1000 eV）

β/(°)	φ/(°)	E^*/eV	Y/(atom·ion^{-1})	std
30	0°/180°	337.41	1.80	0.19
	15°/195°	322.48	1.80	0.19
	30°/210°	291.6	1.74	0.18
	45°/225°	279.62	1.74	0.19
	60°/240°	195.15	1.67	0.18
	75°/255°	73.24	1.64	0.12
	90°/270°	2.47	1.56	0.04
45	0°/180°	375.11	2.53	0.10
	15°/195°	374.09	2.49	0.11
	30°/210°	372.12	2.47	0.09
	45°/225°	363.76	2.35	0.11
	60°/240°	301.38	2.32	0.13
	75°/255°	241.92	2.30	0.12
	90°/270°	62.73	2.25	0.06
60	0°/180°	476.38	2.85	0.17
	15°/195°	474.43	2.91	0.17
	30°/210°	504.00	2.89	0.15
	45°/225°	550.17	2.80	0.14
	60°/240°	502.83	2.66	0.10
	75°/255°	461.36	2.67	0.07
	90°/270°	516.13	2.67	0.08

一作简介： 朱政義，硕士研究生，主要从事离子发动机栅极溅射腐蚀仿真、实验测量方面的研究。
*通信作者：苗 龙，副研究员，主要从事航天器空间动力技术、空间电推进技术、等离子体辅助燃烧与流动控制等研究。