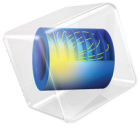


分子流模块

简介

5.6

COMSOL

分子流模块简介

© 1998–2018 COMSOL 版权所有

受列于 cn.comsol.com/patents 的美国专利 7,519,518、 7,596,474、 7,623,991、 8,457,932、 8,954,302、 9,098,106、 9,146,652 及 9,323,503、 9,372,673 及 9,454,625 的保护。专利申请中。

本文档和本文所述的程序根据 COMSOL 软件许可协议 (cn.comsol.com/comsol-license-agreement) 提供，且仅能按照许可协议的条款进行使用和复制。

COMSOL、 COMSOL 徽标、 COMSOL Multiphysics、 COMSOL Desktop、 COMSOL Server 和 LiveLink 为 COMSOL AB 公司的注册商标或商标。所有其他商标均为其各自所有者的财产，COMSOL AB 公司及其子公司和产品不与上述商标所有者相关联，亦不由其担保、赞助或支持。相关商标所有者的列表请参见 cn.comsol.com/trademarks。

版本：COMSOL 5.5

联系信息

请访问 “联系 COMSOL” 页面 cn.comsol.com/contact，以提交一般查询、联系技术支持或搜索我们的联系地址及号码。您还可以访问全球销售办事处页面 cn.comsol.com/contact/offices，以获取地址和联系信息。

如需联系技术支持，可访问 COMSOL Access 页面并填写在线申请表，位于：cn.comsol.com/support/case 页面。其他有用的链接还包括：

- 技术支持中心：cn.comsol.com/support
- 产品下载：cn.comsol.com/product-download
- 产品更新：cn.comsol.com/support/updates
- COMSOL 博客：cn.comsol.com/blogs
- 用户论坛：cn.comsol.com/community
- 活动：cn.comsol.com/events
- COMSOL 视频中心：cn.comsol.com/video
- 技术支持知识库：cn.comsol.com/support/knowledgebase

文档编号：CM024402

目录

分子流模块 5
分子流模块应用 8
分子流模块物理场接口指南 11
根据空间维度和研究类型排列的物理场接口 14
教学示例：离子注入真空系统中的分子流 15

分子流模块

真空设计工程师和研究人员可以使用**分子流模块**来设计真空系统，理解并预测低压气体的流动。在设计流程中仿真工具的使用变得越来越普遍，因为这些工具可以提高工程师对研究过程的认识，减少研发成本，加快研发进度。真空系统开发过程中构建产品原型通常成本非常高昂，因此在研发过程中使用仿真方法可以显著地节省成本。

真空系统的气体流动需要使用与传统流体流动问题不同的物理方程来描述。在低压环境下，气体分子的平均自由程与系统的尺度相当，气体的稀薄效应变得很重要。通常情况下，稀薄度可以通过克努森数来描述， $Kn=\lambda/l$，其中 λ 是气体分子的平均自由程，l 是系统的特征尺度。随着数密度 （或压力）减小或系统尺寸减小，克努森数逐渐增大。对于不同的克努森数，需要使用不同的流体模型，如图 1 所示。

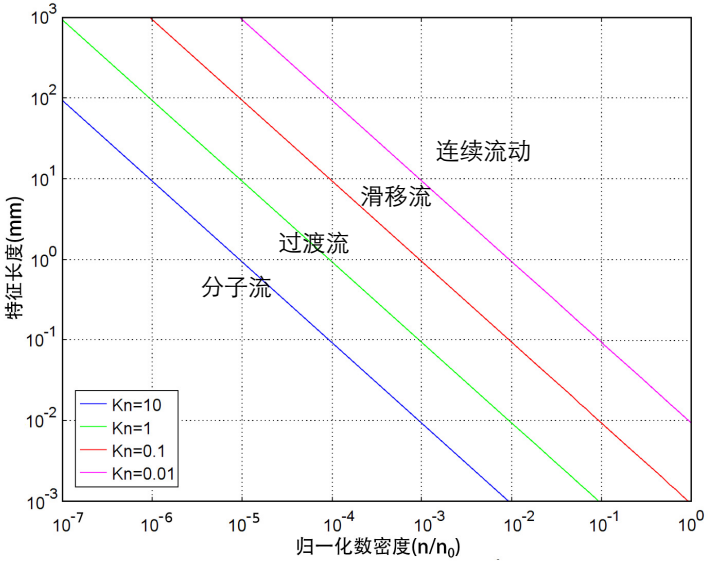


图 1: 稀薄气体流动的主要分类。根据克努森数，划分了几种不同的流型。以一个大气压和 0 ℃环境下的理想气体的数密度 (n0) 作为基准，对气体的数密度做了归一化处理。

对于连续介质流动 (Kn<0.01)，使用纳维 - 斯托克斯方程和传统的计算流体力学方法来进行模拟。随着克努森数的增加，当达到 0.01<Kn<0.1 时，属于滑移流。这时仍然可以使用纳维 - 斯托克斯方程，但是必须在壁面处使用滑动边界条件来模拟克努森层，即，流体几何附近存在一个稀薄气体的薄层。当克努森数继续增大，达到 0.1<Kn<10，则属于过渡流。此时大部分流体区域 （或者是所有区域）都属于克努森层，必须使用稀薄气体动力学方法来求解。最后，对于大克努森数， Kn>10，出现分子流。在分子流中，气体分子只与流体域的表面相互作用，分子之间没有散射现象。**分子流模块**包含的预定义物理场接口可以用来模拟动力学气体流动，其中可以选用**自由分子流**和**过渡流**接口。

自由分子流接口可以用来模拟复杂系统中的非等温自由分子流。本接口计算模型边界上的分子通量，也可以计算模型表面上的压力、数密度和热通量，以及流体域内部任何位置的数密度，模拟稳态或准稳态热分子流动。这里的流体必须是可以用准稳态来描述，因为模型中假设气体分子能够在很短的瞬间内运动于表面之间。由于分子速度和系统尺寸的原因，模型中涉及到的时间常数一般比传递时间长得多，所以模型中可以考虑二次瞬态效应，例如表面吸附分子的解吸有限时间常数。

由于在流体域中的气体分子之间没有相互作用，同时求解多种不同种类的物质对求解的复杂程度没有显著影响。因此，我们可以直接同时求解多种不同种类物质的模型。当分子发生吸附或者解吸效应时，或者不同物质在表面发生相互作用时 （例如，它们有共同的吸附点时，可设置两种气体分子的浓度表达式），这些情况下模拟多种物质是有必要的。

过渡流接口可以对克努森数为一个范围内的等温分子流或过渡流进行建模。本接口利用离散速度方法来计算求解域中气体分子的动力学流动。此外，还考虑了分子之间的散射 （可以禁用这项功能），可以模拟稳态和瞬态流动。

无论选用什么接口，都需要通过在 COMSOL Desktop 中定义合适的边界条件和初始值来建立模型。 COMSOL 建模的重点在于物理场，其中会显示需要求解的方程，高级用户还可以进一步修改底层方程。通过 COMSOL 软件还可以灵活地为系统添加自定义方程和表达式，并且可以耦合不同类型的物理场。例如，使用**自由分子流**接口，您可以模拟真空腔室壁面处的热流和分子流的耦合，这只需在**壁**温度设置中输入温度变量的名称 （由传热系统计算）即可。COMSOL 在集合产生的方程组时会自动进行耦合，之后软件使用灵活而强大的求解器来求解这些方程。得到结果之后，用户可以使用一系列后处理工具来解释数据，同时软件会自动生成一些预定义的绘图。 COMSOL 是非常灵活的工具，可以计算大量的物理量，其中预定义的物理量包括压力、数密度、分子

通量和漂移速度 （可在易用的菜单中直接选择）。此外，还可以计算任意的自定义表达式。

一般来说，真空系统建模的第一步是定义几何结构。可以直接通过 CAD 文件导入几何模型，或者通过 LiveLink 模块动态地链接到第三方软件的 CAD 几何模型。或者，也可以在 COMSOL 中从头开始创建参数化的几何模型。然后，选择合适的物理场，添加材料属性。在物理场接口中定义初始值和边界条件，然后剖分网格。在许多情况下， COMSOL 根据物理场设置的默认网格非常易于求解计算。之后，选择求解器并进行计算 （通常情况下软件根据物理场配置合适的默认求解器）。最后，在**图形**窗口中可视化结果，您可以尝试使用不同的工具来绘图、生成动画和报告，说明和描述模型。所有的这些操作均可以从 COMSOL Desktop 中执行。

分子流模块应用

分子流模块适用于真空科学技术领域中的广泛研究。**分子流**接口包含了大量的边界条件，可以进行广泛的仿真研究。例如，可以选择**壁**边界中的吸附 / 解吸选项来模拟气体传递，其中分子在壁上还具有显著的停留时间。一般来说，此类效果决定了真空系统的抽气时间，因此可以定量地预测几何结构变化和烘烤方法对抽气的影响。下图显示的是通过负载保护充入水之后真空系统不同部分的压力变化。此外，还绘制了系统表面某一点处水分子的浓度随时间的变化。

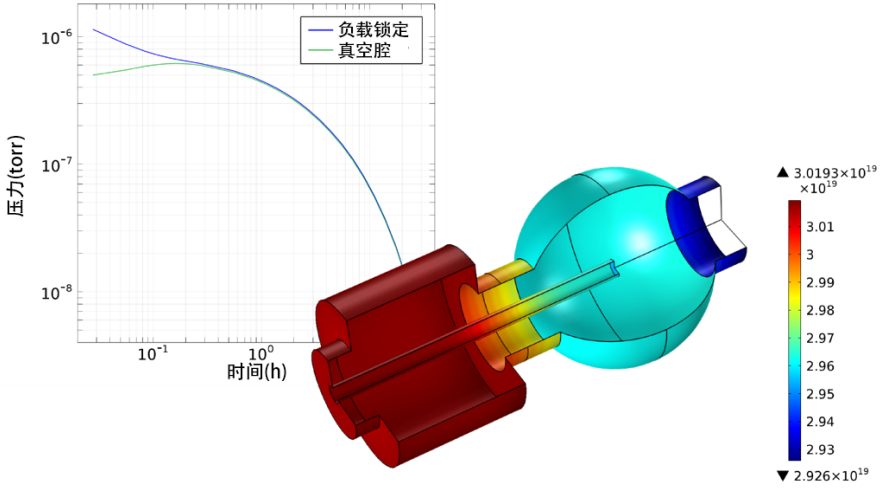


图 2: 左上：主腔室开启负载保护之后真空系统中不同位置的压强变化。在模拟刚开始的阶段，负载保护腔室表面的水分子浓度很高，之后主腔室中的泵将水缓慢地移除，水分子浓度随之降低，压力也随之降低。右下：在某个特定的时间点，系统表面水分子浓度（分子 /m^2）的分布。负载保护腔室 （左）中的水分子浓度比主腔室 （右）中的高，在泵的旁边 （最右边）水分子的浓度更低。

分子流接口也包含模拟热蒸发和沉积的功能。下图所示为蒸发器系统内表面上的金属分子通量 （左），以及在硅片表面生成的薄膜厚度 （右）。

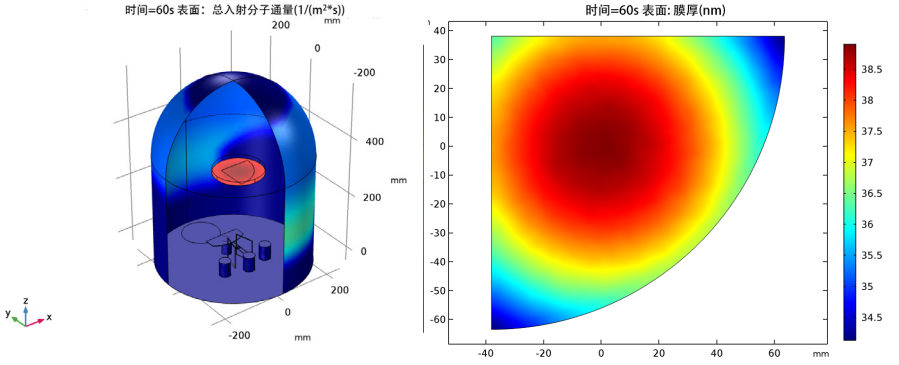


图 3: 左：腔室底部蒸发源产生的分子通量。右：蒸发 60s 后腔室中样品表面上沉积薄膜的厚度。

分子流接口的用法也极其灵活。可以在同一模型中通过增加额外独立变量来模拟多种物质的传递，并且还能设置不同物质在流体表面上的相互作用。软件可以直接耦合多个**分子流**接口 （例如模拟多种气体）或者与**传热**接口耦合。软件内置了强大的基于自定义方程的建模功能，例如，将分子流模型与经验公式耦合直接模拟管中的过渡流。图 4 所示的差动泵浦模型就是使用这种方法进行计算，图中所示为高真空端的数密度分布。

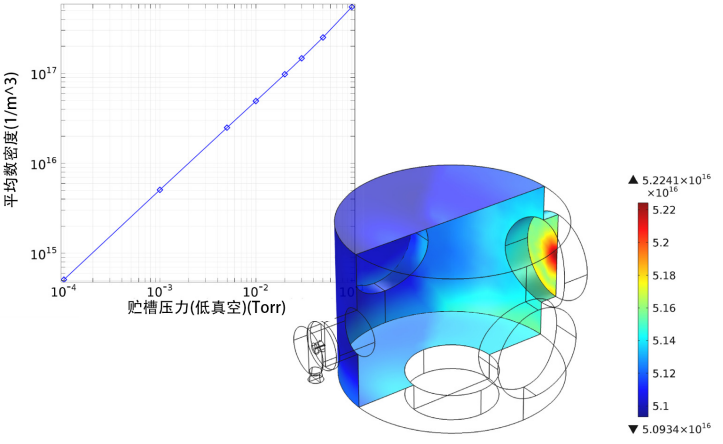


图 4: 左上：压差泵系统高真空端的数密度分布 （给定了低真空端入口对面突起处的平均数密度）。右下：低真空端压力为 10^{-4} Torr 时高真空腔室中的数密度。低真空端的入口在左边，泵在腔室的底部。本模型使用经验表达式描述了连接低真空腔室和高真空腔室的管中的过渡流。

分子流模块物理场接口指南

物理场接口用于构建仿真问题。每个物理场接口都是通过物理方程与适当的边界条件和初始条件来描述相关的物理现象。在接口中添加的每一个特征都表示在底层方程组中添加的项或者条件。这些特征通常都与模型中的某个几何实体相关联，例如域、边界、边 （三维组件）或者点。图 5 的离子注入器模型（请参见教学示例：离子注入真空系统中的分子流）展示了**模型开发器**和选中的**真空泵 1** 节点的**设置**窗口。这个节点表示从分子流带走的入射分子的分数，使其与泵的速度相当，它的单位是升每秒。请注意，默认情况下 COMSOL 使用 SI 单位，但是也可以使用其他单位来描述物理量。单位是在方括号中输入（本案例中，在数值物理量之后添加 [l/s]，就表示定义它的单位是升每秒）。模型树中还突出显示了两个不同的壁边界条件，在这些边界条件中使用了不同的选项来定义与流体的多种相互作用。**壁 1** 节点使用**壁**选项来设置入射分子通量 G，其大小与发射分子通量 J 相同。**壁 2** 节点中选择了**排气壁**选项，其中包含了发射排气分子通量 J_0，以及入射通量 G。其中 J_0 可以定义为通量 （SI 单位：$1/(m^2s)$）、质量通量 （SI 单位：$kg/(m^2s)$）、总质量流 （SI 单位：kg/s）或 sccm 单位的质量流。

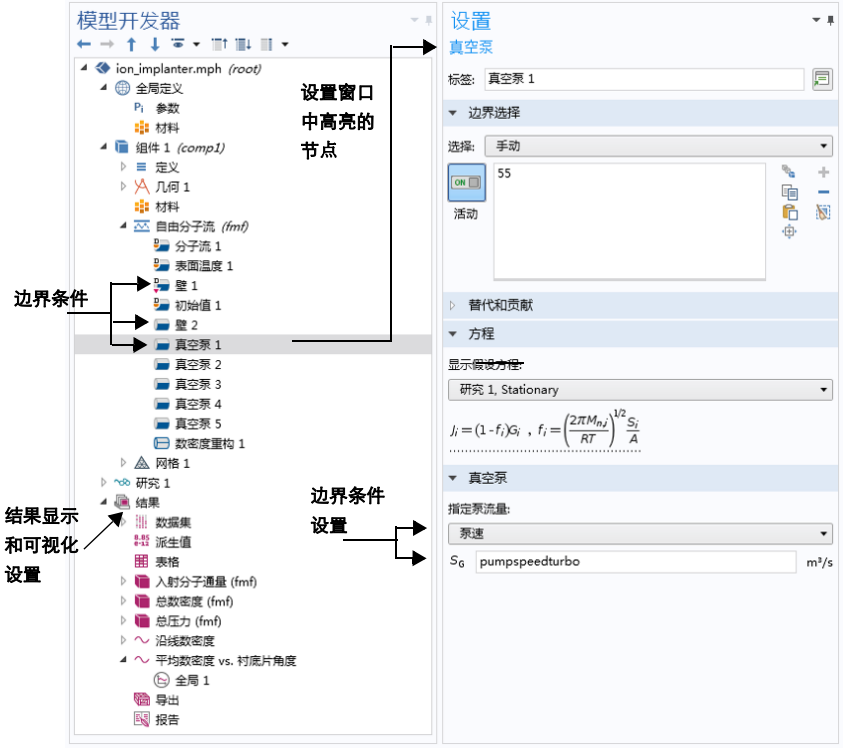


图 5: **模型开发器**（左）及其**真空泵 1** 节点的**设置**窗口。设置窗口中的**方程**栏显示的是模型方程，通过该节点添加的方程项使用下划点线强调标明。

开始建立一个新模型时，要从**模型开发器**中选择适当的物理场接口，图 6 所示为**模型开发器**中的**分子流模块**的物理场接口。另请参见根据空间维度和研究类

型排列的物理场接口。在以下部分，将简要概述**分子流模块**的每个物理场接口的功能。

*图 6: **模型开发器**中的**分子流模块**的物理场接口 （三维模型）。*

稀薄气体流动

自由分子流和过渡流接口用于模拟稀薄气体流动，其中气体分子的动力学行为非常重要。

对于克努森数较大 （Kn>10）的流体可以使用**自由分子流**接口 ( )，这个接口使用了一种称为角系数法的算法来模拟非等温或等温分子流。在这种方法中，根据从所有其他可见点发射来的排出通量的总和，来计算表面区域单元的入射分子通量。这种算法也被称之为**辐射法**，因为这种算法是由之前计算表面到表面辐射的软件专门为此目的改编而来。请注意，**自由分子流接口**与标准辐射法不同，因为它能够执行进一步的积分运算，进而得到精确的压力和数密度。这个接口用起来更加方便，因为它是特别为真空环境应用而设计。角系数法的限制是必须假定在表面上分子二次发射的方向与其入射角度无关，这个限制通常被称为总累积量，**自由分子流**接口隐含此项假设。

过渡流接口 ( ) 可以模拟跨越很大克努森数范围的流体。这个接口的使用存在一些限制，这是因为过渡区域的流体难以定义边界条件。接口中包含的边界条件均满足纳维 - 斯托克斯流和分子流条件限制。但是，由于纳维 - 斯托克斯边界条件需要使用全耦合求解器，它们实际上仅能用于近似连续介质流动 （更加稀薄的气体流动需要大量的独立变量才能精确得到描述）。对于大范围克努森数的模拟，必须使用分子流类型边界条件。为了得到研究范围中入口或出口流动的真实描述，在入口或出口附近必须添加额外的模拟域，以便在流体达到研究的区域之前获得符合物理意义的解。过渡流模型的计算极其消耗内存，一般要求使用较好的硬件，例如推荐使用数十或数百 GB 的内存。由于这个原因，这个接口最好主要用于计算过渡流，这样的流动没有其他可供选择的方

案。请注意，**过渡流**接口也能够用来计算分子流，而且接口中还可以忽略分子间散射。

COMSOL 还提供了一个**滑移流**接口，主要用来模拟近似连续介质流动 (0.01<Kn<0.1) 的非等温或等温气体流动。这个接口可以在**微流体模块**中使用。

根据空间维度和研究类型排列的物理场接口

下表列出了 COMSOL Multiphysics 基本许可证提供的物理场接口和特定于此模块的物理场接口。

物理场接口	图标	标记	空间维度	可用的预设研究类型
稀薄气体流动				
自由分子流		fmf	三维， 二维， 二维轴对称	稳态； 瞬态
过渡流		tran	三维， 二维	稳态； 瞬态

教学示例：离子注入真空系统中的分子流

本例研究了一个离子注入系统的设计方案。在半导体行业中，离子注入广泛地应用于硅片的掺杂注入。在离子注入机中，在离子源中产生的离子被电场加速，从而获得到期望的注入能量。通过合理地布置磁铁，能够选择合适的电荷状态的离子，磁场使得离子束轨迹变弯曲，并保证只有特定荷质比的粒子才能到达硅片。能量剂量和离子束角度是这个工艺过程的关键参数，在系统中，这个部分称为校正器。

通常，要求只对被选定的硅片区域进行掺杂，可以通过有机光刻胶掩盖住硅片中不需要掺杂的区域来获得预期的产品。然而，由于离子束的撞击作用，光刻胶本身也会发射出气体分子。这些分子会与离子束相互作用，在离子束路径上的不同位置产生不希望得到的荷质比粒子。其中的部分粒子会到达硅片，从而影响注入的均匀性，这是极其不期望出现的现象。此外，这些离子也可能会影响植入剂量的测量精度。一个关键的设计要求是，在离子束的方向上，硅片排气分子的数密度必须尽可能小。

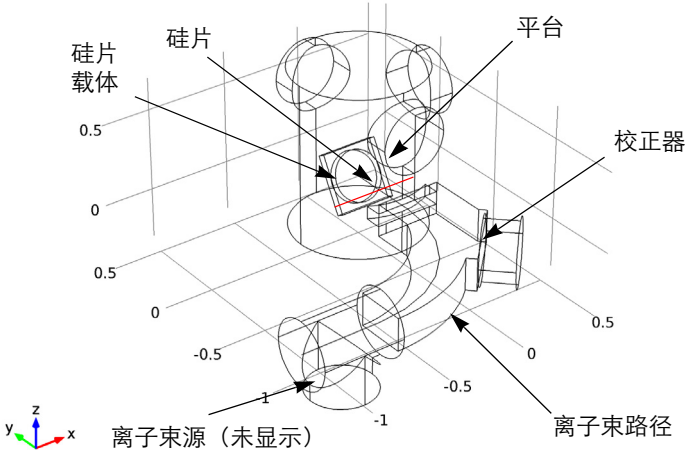


图 7: 模型几何。图中列出了关键的系统组成，穿过硅片载体中心的红线表示载体的旋转轴。

本例显示如何使用**自由分子流**接口对离子注入系统进行建模。图 7 所示为模型的几何结构，硅片固定在载体平板上，平板绕着中心轴旋转，可以调整注入角度。载体平板固定在腔室中，在圆柱真空端口有三个低温抽气泵。这些泵的泵速是 12,000 l/s。在模型中，只考虑了从硅片向外排出一种粒子 (H_2)，您可以再添加独立变量来模拟排出更多种粒子。假设硅片表面的出气量均匀分布，并且总的气体排出量是 30 sccm。真空路径穿过校正器的磁场进入硅片对面的主腔室。校正器通过离子束路径中间的圆柱端口上的涡轮分子泵 （泵速为 1500 l/s），以及离子束路径入口处的低温泵 （泵速为 12000 l/s）排气。在腔室的入口处，有一个孔洞用来降低进入校正器的通量。硅片外法向和离子束之间的夹角从 0° 到 60° 设置 20 个步长进行扫描，相当于硅片围绕着水平中心轴旋转，如图 7 所示。模型中所有其他的表面都设置为壁条件。由于排气分子与离子束之间的相互作用会产生不期望的粒子，离子束路径上分子的平均数密度可以用来表征硅片旋转的效果。

注意：本模型根据以下文献建立：M.R. LaFontaine, N. Tokoro, P. Murphy, and D. Holbrook, “Modelling Photoresist Outgassing Pressure Distribution Using the Finite Element Method,” *Proc. Conference on Ion Implantation Technology*, IEEE Press, pp. 247–250, 2000。不过， COMSOL 的分子流接口是在此文献所用的辐射法的基础上做了很大地改进，因为压力和数密度是分别通过独立的积分来精确计算。

模型向导

注意：*这些操作说明基于 Windows 用户界面，但同样适用于 Linux 和 Mac，只是略有差别。*

1 双击桌面上的 COMSOL 以启动软件。打开软件时，可以在**模型向导**中选择新建 COMSOL 模型或使用**空模型**手动创建。对于本案例，单击**模型向导**按钮。

如果 COMSOL 已打开，您可以通过在**文件**菜单中选择**新建** 来启动**模型向导** 。

模型向导可以指导您进行建模的初始的几个步骤。接下来的一个窗口中您可以选择模型的空间维度。

2 在**选择空间维度**窗口中单击**三维**按钮 。

3 在**选择物理场**树下选择**流体流动** > **稀薄气体流动** > **自由分子流 (fmf)** 。

4 单击**添加**，然后单击**研究**按钮 。

5 在**预设研究**下的树中，单击**稳态** 。

6 单击**完成** 。

全局定义

设置硅片角度和泵速等参数。

参数

1 在**主屏幕**工具栏中单击**参数** 。

注： *在 Linux 和 Mac 下，主屏幕工具栏是指 Desktop 顶部附近的一组特定控件。*

2 在**参数**的**设置**窗口中找到**参数**栏，在**参数**表中输入 （或者复制并粘贴）以下的设置：

名称	表达式	描述
theta	30	硅片角度
pumpspeedcryo	12000[l/s]	cryo-pumps 的泵速
pumpspeedturbo	1500[l/s]	turbo-pump 的泵速

参数中输入的物理量可以使用不同的单位，如上所示泵速单位使用方括号进行定义。软件也支持复合单位，例如 ml/s。有关受支持单位的详细列表，请参见 *COMSOL Multiphysics Reference Manual* 中的 “Using Units” 一章。

几何 1

1 在**模型开发器**中单击**组件 1**> **几何 1**。

2 在**几何**工具栏上单击**插入序列**。

3 浏览至 applications>Molecular_Flow_Module>Industrial_Applications 文件夹，双击 `ion_implanter_geom_sequence.mph` 文件。

4 单击**构建所有对象**按钮。

添加平均算子来计算沿离子束轴的平均数密度。

定义

平均 1

1 在**定义**工具栏中单击**组件耦合**，选择**平均值**。

2 在**平均值**的**设置**窗口中定位至**源选择**栏，从**几何实体层**列表中选择**边**。

3 从**选择**列表中选择**离子束轴**。

自由分子流

分子流 1

设置物理场接口模拟氢气分子自由流动。

1 在**模型开发器**窗口中展开**组件 1**> **自由分子流**节点，然后单击**分子流 1**。

2 在**分子流**的**设置**窗口中定位至**分子流**。在 M_n 文本框输入 `0.002[kg/mol]`。

壁 2

设置硅片上氢气的出气速率为 30 sccm。

1 在**物理场**工具栏中单击**边界**，选择**壁**。

2 仅选择**边界 42**。可以通过我们前面提到的**选择列表**来完成。

3 在**壁**的**设置**窗口中选择**排气壁**。从**壁**类型列表中选择**排气壁**。

4 定位至**通量**栏。

从**流出通量**列表中选择 **SCCM 单位数**。

在 $Q_{sccm,G}$ 文本框中输入 30。

设置真空泵。

真空泵 1

1 在**物理场**工具栏中单击**边界**，选择**真空泵**。

2 在**真空泵**的**设置**窗口中定位至**真空泵**栏。从**指定泵流量**列表中选择**泵速**。

3 仅选择**边界 55**。

4 在 S_G 文本框中输入 pumpspeedturbo。

真空泵 2

1 在**物理场**工具栏中单击**边界**，选择**真空泵**。

2 仅选择**边界 8**。

3 在**真空泵**的**设置**窗口中定位至**真空泵**。从**指定泵流量**列表中选择**泵速**。

4 在 S_G 文本框输入 pumpspeedcryo。

请注意，每个泵需要一个单独的边界条件，因为分子流在泵的特征选择的计算区域都分离的。

真空泵 3

1 右键单击**组件 1**> **自由分子流** > **真空泵 2**，选择**生成副本**。

2 在**真空泵**的**设置**窗口中定位至**边界选择**。单击**清除选择**。

3 仅选择**边界 25**。

真空泵 4

1 右键单击**组件 1**> **自由分子流** > **真空泵 3**，并选择**生成副本**。

2 在**真空泵**的**设置**窗口中定位至**边界选择**。单击**清除选择**。

3 仅选择**边界 70**。

真空泵 5

1 右键单击**组件 1**> **自由分子流** > **真空泵 4**，并选择**生成副本**。

2 在**真空泵**的**设置**窗口中定位至**边界选择**。单击**清除选择**。

3 仅选择**边界 33**。

数密度重建 1

1 在**物理场**工具栏中单击**边**，选择**数密度重建**。
2 从**选择**列表中选择**离子束轴**。

网格 1

接下来创建网格。

边 1 和大小 1

沿着离子束轴添加细化网格。

1 在**模型开发器**窗口中右键单击**组件 1** 下的**网格 1**，选择**更多操作** > **边**。
2 在边的**设置**窗口中，定位到**边选择**栏。
3 从**选择**列表中选择**离子束轴**。
4 右键单击**边 1**，然后选择**大小**。
5 在**大小**的**设置**窗口中定位至**单元大小**，单击**定制**按钮。
6 定位至**单元大小参数**栏。
   - 选择**最大单元大小**复选框。
   - 在关联的文本框中输入 0.005。

大小

更改全局网格参数设置以细化网格。

1 在**模型开发器**窗口中单击**组件 1**> **网格 1** 下的**大小**节点。
2 在**大小**的**设置**窗口中定位至**单元大小**，从**预定义**列表中选择**超细化**。

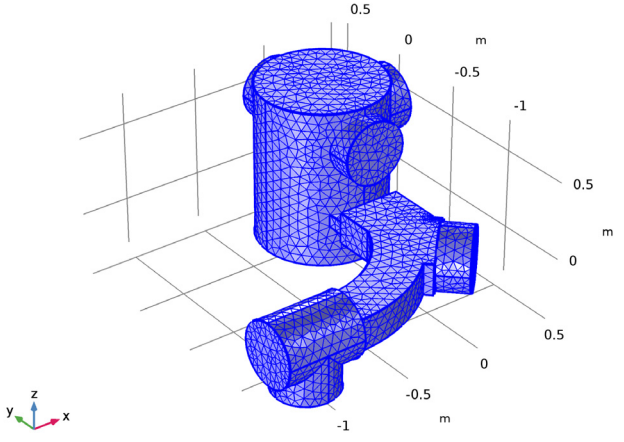
自由三角形网格 1

添加自由三角形面网格，这项设置会继承全局网格大小的设置。

1 在**模型开发器**窗口中右键单击**网格 1**，选择**更多操作** > **自由三角形网格**。
2 在**自由三角形网格**的**设置**窗口中定位至**边界选择**。从**选择**列表中选择**所有边界**。

3 单击**全部构建** 按钮。

域中不需要创建网格，因为这个接口只在模型表面上求解方程。请注意，您可以只在表面、边和点 （正如本模型）上剖分网格，或者剖分所有**分子流**域的网格。如果模型包含多个域，则仅对部分体积域做网格剖分 （其他域剖分面网格）会导致不正确的结果。



研究 1

设置关于硅片角度的参数化扫描，求解器会使用大概 20 分钟来完成整个的参数化扫描。或者，您也可以只求解单个硅片角度来节省时间。

1 在**模型开发器**窗口中展开**研究 1** 节点 。

参数化扫描

1 在**研究**工具栏中单击**参数化扫描** 。

2 在**参数化扫描**的**设置**窗口中定位至**研究设置**，单击**添加** 。

3 单击**范围**，切换到**范围**对话框。

- 在**开始**文本框中输入 0。
- 在**步长**文本框中输入 20。
- 在**停止**文本框中输入 60。

4 单击**添加**按钮。

5 在**主屏幕**工具栏单击**计算** 。

结果

创建含选择的解的副本，以查看真空腔室的内部。

数据集

1 在**模型开发器**窗口中展开**结果** > **数据集**节点 。

2 右键单击**研究 1／参数化解 1 (sol2)**，选择**生成副本** 。

3 右键单击**结果** > **数据集** > **研究 1／参数化解 1 (3) (sol2)**，选择**添加选择** 。

4 在**选择**的**设置**窗口中定位至**几何实体选择**。在**几何实体层**列表中选择**边界**。

5 从**选择**列表中选择**后处理**。

入射分子通量 (fmf)

使用新数据集更新默认绘图。

1 在**模型开发器**窗口中单击**结果**下的**入射分子通量 (fmf)** 。

2 在**三维绘图组**的**设置**窗口中定位至**数据**。从**数据集**列表中选择**研究 1／参数化解 1 (3) (sol2)**。

数密度 (fmf)

1 在**模型开发器**窗口中单击**结果**下的**总数密度 (fmf)** 节点 。

2 在**三维绘图组**的**设置**窗口中定位至**数据**。从**数据集**列表中选择**研究 1／参数化解 1 (3) (sol2)**。

压力 (fmf)

1 在**模型开发器**窗口中单击**结果**下的**总压力 (fmf)** 节点 。

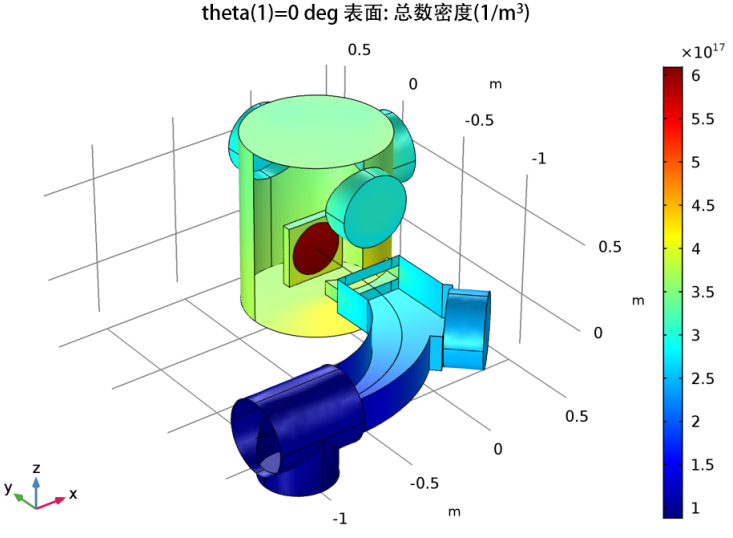
2 在**三维绘图组**的**设置**窗口中定位至**数据**。从**数据集**列表中选择**研究 1／参数化解 1 (3) (sol2)**。

数密度 (fmf)

1 在**模型开发器**窗口中单击**结果**下的**总数密度 (fmf)** 节点 。

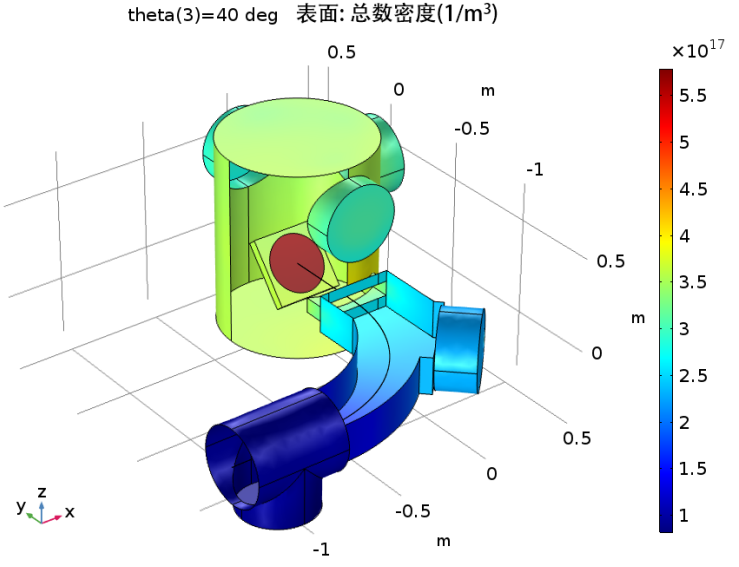
2 在**三维绘图组**的**设置**窗口中定位至**数据**。从**参数值 (theta)** 列表中选择 0。

3 在**三维绘图组**工具栏中单击**绘制** 。



4 重复这些步骤，但这次选择 40 度的角。

对于两种硅片角度，硅片载体的屏蔽效应都非常明显。同时，也可以明显地观察到当硅片法向平行于离子束时，进入离子束轴的通量更大。这是因为在平行于硅片法向的方向上漫发射通量的角度分布最大。

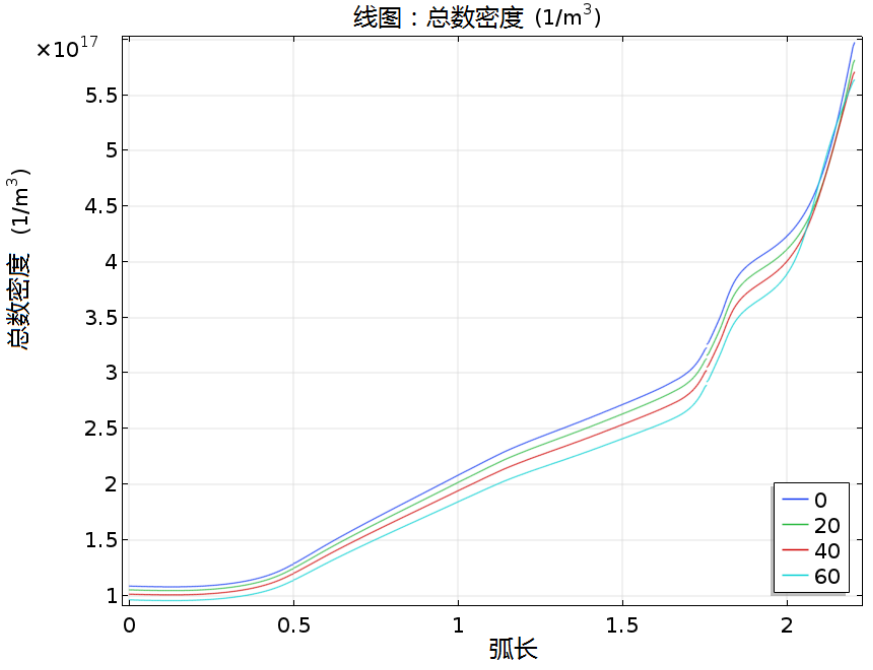


一维绘图组 4

离子束路径上的数密度分布图。

1. 在**主屏幕**工具栏中单击**添加绘图组**，选择**一维绘图组**。
2. 在**一维绘图组**的**设置**窗口中定位至**数据**。从**数据集**列表中选择**研究 1／参数化解 1 (2) (sol2)**。
3. 定位至**图例**栏，从**位置**列表中选择**右下角**。
4. 在**一维绘图组**工具栏中单击**线图**。
5. 从**选择**列表中选择**离子束轴**。
6. 在**线图**的**设置**窗口中单击 **y- 轴数据**右上角的**替换表达式**，从菜单中选择**模型 > 组件 1 > 自由分子流 > 数密度 > fmf.ntot— 总数密度**。
7. 单击展开**图例**栏，选择**显示图例**选择框。
8. 单击展开**质量**栏，从**分辨率**列表中选择**无细化**。

9 单击**绘制**按钮 。



在离子束路径上朝着硅片方向数密度逐渐增大，同时由于离子束穿过了不同的孔径使得梯度产生剧烈的变化。注意，在硅片的紧邻区域数密度的计算不是非常精确 （从下面的绘图中很难观察到，但是放大离子束边端后可以看得更加明显）。这是计算相当靠近源表面区域的数密度时会产生的数值问题。

一维绘图组 5

最后，绘制不同硅片角度下离子束轴上的平均数密度分布，这个变量可以表征系统设计的优劣。

1 在**主屏幕**工具栏中单击**添加绘图组** ，选择**一维绘图组** 。

2 在**一维绘图组**的**设置**窗口中定位至**数据**。从**数据集**列表中选择**研究 1／参数化解 1 (2) (sol2)**。

3 定位至**绘图设置**栏。

- 选择 **x- 轴标签**选择框。在其文本框中输入**离子束与硅片的夹角 (deg)**。
- 选择 **y- 轴标签**选择框。在其文本框中输入**平均数密度**（1/m³）。

4 在**一维绘图组**工具栏中单击**全局** 。

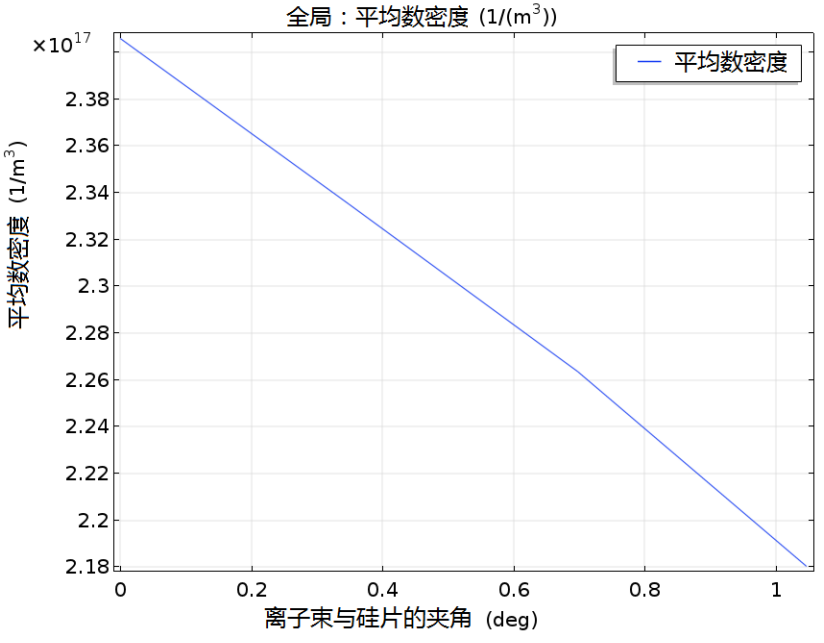
5 在**全局**的**设置**窗口中定位至 **y- 轴数据**栏。在表中输入以下设置：

表达式	单位	描述
aveop1(fmf.ntot)	1/(m^3)	平均数密度

6 定位至 **x- 轴数据**栏。

- 从**参数**列表中选择**表达式**。
- 在**表达式**文本框中输入 `theta`。

7 在**一维绘图组**工具栏中单击**绘制** 。



通过旋转硅片法向，使之远离离子束，可以降低校正器的平均通量，从 0 度旋转角到 60 度大约降低了 10% 的通量。因此，通过这种方式旋转硅片可以改善注入机的性能。