

闭合磁场的作用原理与布局逻辑*

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[†]

北京大学深圳研究生院, 新材料学院, 深圳 518055

摘要

通过非平衡磁控溅射阴极在镀膜区间构建闭合磁场已经成为设计开发磁控溅射真空镀膜系统的通用手段, 然而闭合磁场具体的作用对象、作用机制、闭合条件、布局逻辑以及作用效果等仍没有定量的判定标准或设计依据。本文从带电粒子在磁场中的运动出发, 推导了真空室内电子与离子运动行为, 得出闭合磁场的作用机制, 并依此研究了磁控溅射阴极和离子源布局方式对电子约束效果和沉积效率的影响。结果表明闭合磁场在真空室中主要通过约束电子来约束等离子体, 进而减少系统内电子损失; 阴极数量和真空室尺寸对闭合磁场的作用效果有重要影响。提出在真空室中央增加对偶离子源, 研究了闭合磁场中阴极类型、旋转角度和磁场方向对电子的约束作用, 发现当离子源正对阴极相斥或相吸时, 真空室内分别形成了局部高密度和均匀连续的两种等离子体分布特征, 边缘电子溢出比均低于 3%, 镀膜区的电子占比相对无对偶离子源时分别提高到 53.41%和 42.25%。

关键词: 闭合磁场, 电子运动, 真空结构布局, 沉积效率

PACS: 52.65.-y, 52.65.Cc, 52.65.Pp, 52.75.-d

基金: 国家材料基因组计划(批准号: 2016YFB0700600), 深圳科学研究基金(批准号: JSGG20191129112631389)资助的课题。

[†] 通讯作者. E-mail: wuzz@pkusz.edu.cn

[#] 共同第一作者.

1 引言

闭合场非平衡磁控溅射 (Closed-field Unbalanced Magnetron Sputtering, CFUBMS), 即利用多个具有非平衡磁场^[1-3]分布的磁控溅射阴极, 通过调整磁体磁极方向, 使其在镀膜区域形成闭合磁场回路的一种磁控溅射系统设计方法^[4]。基于该闭合磁场^[5-7], 真空系统内的等离子体密度^[8]和涂层沉积效率^[9]得到明显提高。然而, 该技术的应用远远领先于其技术原理, 由于真空室内等离子体的运动行为和粒子间的相互作用复杂, 不易表征, 闭合磁场的具体作用对象、作用机制、闭合条件、布局逻辑以及作用效果等关键问题仍缺乏统一的认识和明确的判定标准或依据。

针对上述问题, 研究者们试图通过实验方法建立磁场分布与等离子体特性之间的关系来研究闭合磁场的作用机制。例如, S. L. Rohde 等人^[10]建立了双阴极闭合场磁控溅射系统, 发现其在阴极之间形成了磁感线闭合回路, 相对非闭合的双阴极磁控溅射系统, 其间的等离子体密度有了明显提升。W. D. Sproul 等人^[11]研究了闭合磁场强度对等离子体的作用, 发现离子电流随闭合磁场强度的增大而显著增强。D. P. Monaghan 等人^[5]研究了阴极数量对闭合场作用的影响, 发现当阴极数量为奇数时, 等离子体存在逃逸路径; 而当阴极数量为偶数时, 磁场则展现出良好的封闭性。蒋百灵等人^[12]也通过构造不闭合、半闭合以及全闭合的三种磁场, 借助 Langmuir 探针研究了系统等离子体密度的变化, 发现闭合磁场能够显著增加系统等离子体密度, 并提高涂层沉积效率。然而, 这些研究大多聚焦于闭合磁场对等离子体的作用效果^[8,13,14], 而实验系统的实现和测量手段的建立繁琐且有限, 其结论并不充分, 也无法反向对闭合场设计和系统设备优化给出定量指导。等离子体仿真^[15]可以有效的模拟等离子体在真空系统中的分布及其在各种电磁场作用下的动态运动行为, 是研究闭合场作用机制的有效方法。曹政^[16]利用有

限元方法^[17]计算了不闭合、半闭合以及全闭合的三种磁场的空间分布，发现全闭合磁场的磁感线封闭，分布均匀且范围更广，认为可以有效提高等离子体密度和沉积效率。M. Yusupov 等人^[18]结合了有限元方法和传统的粒子网格/蒙特卡洛法^[19]，研究了双阴极闭合场和镜像场对等离子体性质影响，发现闭合场中电子能够在两阴极之间形成通路。然而该方法仿真区域一般局限在靶前区域，而闭合场一般考虑较大的真空腔室内部，其放电区间也远大于常规可计算的区间，欲实现对整个真空系统的等离子体运动仿真，计算量大且周期长。因此，当前对闭合场磁控溅射的仿真研究一般仅停留在真空系统中的磁场强度分布以及简单的双磁控阴极之间的等离子体和放电特性上^[16,18,20]，并未建立该背景磁场下的整个真空室内的等离子体产生、输运及演变等过程，故其研究结果很难做到精确和可靠。

鉴于此，本文依托自主搭建的超算中心，从等离子体在真空室中的运动过程出发，建立了真空室检验电子蒙特卡洛 (Monte-Carlo Collision, MCC) 模型^[21,22]，实现了闭合场磁控溅射等离子体的动态仿真。基于带电粒子在磁场中的运动规律，推导分析闭合磁场的作用机理，通过仿真大量电子的运动行为提出了真空室闭合磁场的闭合条件，并研究了阴极数量和真空室尺寸对闭合磁场作用效果的影响规律。最后通过等离子体密度反馈，提出在真空室中央增加对偶离子源，并探索了不同的阴极类型、旋转角度和磁场方向等对电子损失的抑制作用及其对沉积效率的提升机制。

2 研究方法

2.1 背景磁场仿真

真空室磁场通过 COMSOL Multiphysics 有限元分析软件进行求解。仿真过程中，将真空室简化为二维圆形区域，并取其同心圆作为总仿真域，直径设置为 2 m。假设在仿真域内的磁通量守恒，则背景磁场可由方程组 (1) 求解^[23]：

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

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/A² 为真空磁导率, μ_r 为相对磁导率, 在非导磁材料中相对磁导率近似为 1, 导磁材料相对磁导率为 4000。与永磁体产生的磁场相比, 等离子体电流密度 \mathbf{J} (A/m²)产生的磁场很小, 可以忽略不计^[24,25], 此时方程组 (1) 中的第二个式子可简化为 $\nabla \times \mathbf{H}=0$, 即:

$$\mathbf{H} = -\nabla V_m \quad (2)$$

其中 V_m (A)为标量磁势, 仿真域边界标量磁势为 0。

2.2 检验电子运动仿真模型

由于等离子体整体呈电中性^[26], 因此电子的密度分布即可表征整体等离子体密度分布^[12], 本文采用检验电子法^[21]在真空室内生成大量检验电子, 并研究其在真空室内的输运特性。模型采用MATLAB软件编辑实现, 仿真总时长为30 μ s, 时间步长 Δt 为 1×10^{-10} s, 空间步长为 1×10^{-3} m。根据D. P. Monaghan等人的研究^[5], 构造闭合磁场需要偶数个阴极设备。因此, 在阴极均匀分布的条件下, 真空室闭合磁场是轴对称的, 故而仿真域可以被进一步简化为90° 的扇形区域, 如图1中淡绿色区域所示。仿真区域内的等离子体浓度远低于放电区域 (白色区域), 且整体呈电中性, 故可忽略仿真域内的电势变化, 即忽略电场力的作用, 只考虑电子在磁场力作用下的运动。因此, 电子的位移 \mathbf{r} 和速度 \mathbf{v} 满足方程组 (3):

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

其中 $m_e=9.1 \times 10^{-31}$ kg 为电子质量, $e=1.6 \times 10^{-19}$ C 为单位电荷量, $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ 为电子所处位置的磁感应强度。

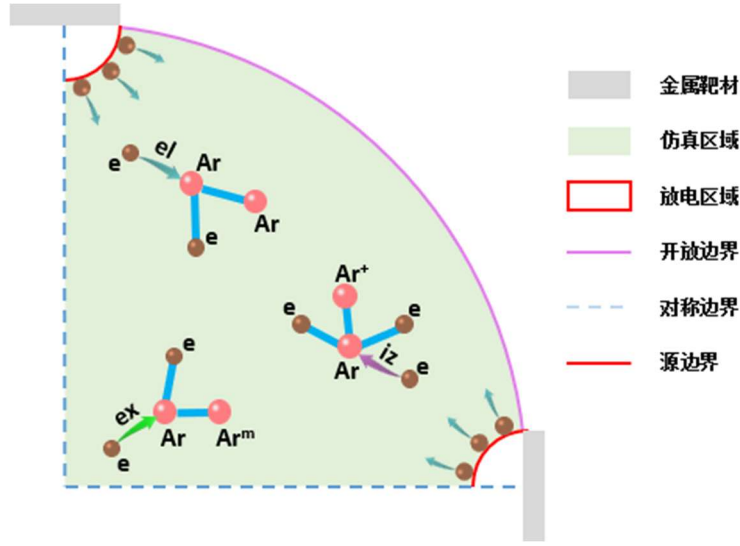


图 1 仿真区域示意图

Fig. 1. Schematic diagram of simulation region

图 1 中包含三类不同边界，即源边界，对称边界和开放边界，分别如红色实线、蓝色虚线和粉色实线所示。根据各边界的不同作用，对运动到各边界的电子进行如下处理：

(1) 初始电子从源边界释放，每个阴极释放的数量为 10000 个。为表征连续释放，每隔 1×10^{-7} s 从源边界释放一次电子，每个阴极释放的数量为 2000 个。与阴极相比，离子源的放电强度较低，本文设定离子源释放电子的数量为阴极的 1/10。假设电子初始速度服从麦克斯韦-玻尔兹曼分布^[27]，则其概率密度满足公式 (4)：

$$f(v) = 4\pi v^2 \sqrt{\left(\frac{m_e}{2\pi e T_e}\right)^3} e^{-\frac{m_e v^2}{2e T_e}} \quad (4)$$

本工作中将电子平均温度 T_e 设置为 3.0 eV^[28]。

(2) 当电子运动至开放边界（真空室壁，靶面和磁屏蔽罩）时，则直接消失。

(3) 电子运动至对称边界时发生反弹，反弹后的位置坐标 r_t 和速度 v_t 满足公式 (5)：

$$\begin{cases} \mathbf{r}_t = \mathbf{r}_0 - 2(\mathbf{m} \cdot \mathbf{r}_0) \mathbf{m} \\ \mathbf{v}_t = \mathbf{v}_0 - 2(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_0) \mathbf{n} \end{cases} \quad (5)$$

其中 $\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0$ 为运动到对电子在二维平面的位置和速度， \mathbf{m} 为对称边界的切向单位矢量， \mathbf{n} 为对称边界的法向单位矢量。

2.3 MCC 模型

在运动过程中，检验电子还有一定概率与背景中性原子发生碰撞，因此需采用 MCC 模型^[21,22]仿真电子的碰撞过程。模型中设定真空室内的背景气体为 Ar 气，背景温度 T 为 600 K，气压 p 为 1 Pa，Ar 原子数密度 $N_{\text{Ar}} (\text{m}^{-3})$ 可以通过理想气体状态方程求出，如公式 (6) 所示：

$$\begin{cases} pV = nRT \\ N_{\text{Ar}} = \frac{nN_A}{V} \end{cases} \quad (6)$$

其中 $R=8.314 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ 为摩尔气体常数， $N_A=6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ 为阿伏伽德罗常数， $n (\text{mol})$ 表示物质的量， $V (\text{m}^3)$ 表示体积。

电子与背景 Ar 原子之间的主要反应如表 1 所示，包含电离、激发和弹性碰撞。相对而言，电子与激发态 Ar 原子的电离碰撞和退激发由于发生概率极小而忽略不计。

表 1 电子参与的 Ar 放电主要反应表

Table 1. Reactions of Ar discharge

序号	反应方程式	反应类型	反应能量阈值 (eV)
1	$\text{e} + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^+ + 2\text{e}$	电离碰撞	15.7
2	$\text{e} + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^m + \text{e}$	激发碰撞	11.5
3	$\text{e} + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar} + \text{e}$	弹性碰撞	——

假设真空室内背景气体电离后可以快速补充，即 Ar 原子数密度 N_{Ar} (m^{-3}) 不变，则一个步长时间内，电子发生碰撞的概率^[29]为：

$$P_c = 1 - \exp[-N_{Ar}\sigma(\varepsilon)v\Delta t] \quad (7)$$

其中 v (m/s) 为电子的速率， $\varepsilon = \frac{1}{2}m_e v^2$ 为电子能量， σ (m^2) 为电子的碰撞截面，包括电离碰撞截面 σ_{e_ion} ，激发碰撞截面 σ_{e_ex} 和弹性碰撞截面 σ_{e_el} ，均由电子能量决定。根据各个电子的速度确定能量，并经线性插值求出其对应的碰撞截面^[29]，再通过式 (7) 可以求出每个电子的电离、激发、弹性碰撞概率分别为 P_{e_ion} ， P_{e_ex} 和 P_{e_el} 。随后通过生成一个 [0,1] 之间均匀分布的碰撞随机数 R_{coll} 判断是否碰撞与碰撞类型：

- (1) 如果 $R_{coll} \in [0, P_{e_el})$ ，则电子与中性粒子发生弹性碰撞；
- (2) 如果 $R_{coll} \in [P_{e_el}, P_{e_el} + P_{e_ex})$ ，则电子与中性粒子发生激发碰撞；
- (3) 如果 $R_{coll} \in [P_{e_el} + P_{e_ex}, P_{e_el} + P_{e_ex} + P_{e_ion})$ ，则电子与中性粒子发生电离碰撞；
- (4) 如果 $R_{coll} \in [P_{e_el} + P_{e_ex} + P_{e_ion}, 1]$ ，则电子不发生碰撞。

若发生碰撞，则需要根据碰撞类型更新电子的运动状态，具体方法如下：

- (1) 弹性碰撞：由于中性粒子 Ar 原子的质量远大于电子，假设碰撞没有发生能量交换，电子的能量不变，即弹性碰撞前后电子的速度大小不变，电子方向通过生成随机数确定，满足公式 (8)：

$$\begin{cases} v_x = v_c \sin(R_{phi1}) \cos(R_{phi2}) \\ v_y = v_c \sin(R_{phi1}) \sin(R_{phi2}) \\ v_z = v_c \cos(R_{phi1}) \end{cases} \quad (8)$$

其中 R_{phi1} 和 R_{phi2} 为碰撞角随机数，分别满足 $[0, \pi]$ 和 $[0, 2\pi]$ 区间上的均匀分布。

- (2) 激发碰撞：激发碰撞的电子损失激发阈值能量，电子速度由剩余能量求出，速度方向计算方式与弹性碰撞相同。

(3) 电离碰撞：电离碰撞的电子损失电离阈值能量，电子速度由剩余能量求出，速度方向计算方式与弹性碰撞相同。此外，对于电离碰撞生成的二次电子，能量等于电离阈值，速度方向同样由碰撞角随机数决定。

3 结果与讨论

3.1 闭合磁场的作用对象

图 2 所示为四阴极组成的真空系统，其腔室内磁感应强度的分布，可见，除阴极表面附近的磁感应强度大于 1 mT 以外，其他绝大部分区域的磁感应强度均处于 0.1~1 mT 之间，如图中浅绿色区域。由于真空室中的等离子体整体可视为电中性，带电粒子受到的电场力可忽略，因此可推断闭合磁场的作用对象应能够被 0.1~1 mT 的磁场所约束。在匀强磁场（ $\mathbf{B} = \hat{z}B_0$ ）中，带电粒子在垂直于 \mathbf{B} 的方向作圆周运动，其所受洛伦兹力充当向心力，可由公式(9)求出其回旋半径 r_c ：

$$r_c = \frac{mv_{\perp}}{qB_0} \quad (9)$$

其中 v_{\perp} 为粒子垂直于 \mathbf{B} 方向的速度。而在平行于 \mathbf{B} 方向，带电粒子维持速度 v_{\parallel} 做匀速直线运动。因此，带电粒子在匀强磁场内沿磁感线做螺旋运动。

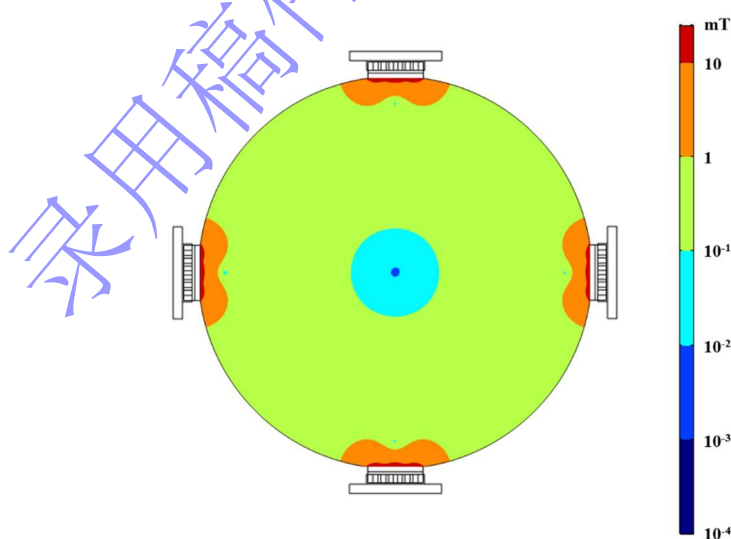


图 2 真空室内磁感应强度分布

Fig. 2. Distribution of magnetic induction intensity in vacuum chamber

一般来说，在高功率密度的放电条件下（600-1000 V），Cu/Ar 体系内的电子平均温度处于 2.5-3.5 eV^[28]，此处取为 3.0 eV 进行计算，由公式(10)：

$$u_e = \sqrt{\frac{2eT_e}{m_e}} \quad (10)$$

可求出电子的平均速度 $u_e=1.03 \times 10^6$ m/s。

而根据 M. Samuelsson 等人^[30]的研究，金属离子以玻姆速度 u_{bohm} 离开放电区域，如式(11)所示：

$$u_{\text{bohm}} = \sqrt{\frac{eT_e}{m_{\text{ion}}}} \quad (11)$$

其中 m_{ion} 为离子质量。本文以 Cu^+ 为研究对象，可计算得出 $u_{\text{Cu}^+}=2.13 \times 10^3$ m/s。

将电子和 Cu^+ 的速度分别代入式(9)，可得电子在真空室中的回旋半径 $r_e=5.9 \times 10^{-3} \sim 5.9 \times 10^{-2}$ m，而 Cu^+ 离子的回旋半径 $r_{\text{Cu}^+}=1.4 \sim 14$ m。一般来说，单腔体的真空室半径小于 1 m，可见 $r_e \ll r_{\text{vacuum}} < r_{\text{Cu}^+}$ ，表明电子在真空室内可以做大量完整的回旋运动，而 Cu^+ 离子几乎无法在真空室内完成回旋运动，即真空室的磁场实际上只能有效地约束电子，但无法对离子形成有效约束。因此可断定，闭合磁场的作用对象主要是电子，而离子则是由于受到电子运动引起的电势变化的作用，而呈现出与电子类似的分布规律。

为了进一步验证闭合磁场对电子的约束作用，调整阴极的磁极方向构建了闭合与非闭合的磁场，并模拟其电子运动，如图 3 所示。当相邻阴极的磁性相反时，磁感线在相邻阴极间连接形成闭合回路（图 3（a）），而当相邻阴极的永磁体极性相同时，真空室内磁感线的曲率增大，无法在相邻阴极之间形成闭合回路（图 3（b））。当电子在真空室内在磁场作用下运动 10 μs 后，其分布分别如图 3（c）和（d）所示，可见闭合场中的电子在阴极附近和真空室中央密度较高，向真空室边界处逐渐降低，电子的主要分布区域的边界如图 3（c）中的红色虚线所示，

位置恰好与图 3 (a) 中的红色磁感线吻合。相对而言, 非闭合场内的电子的主要分布区域明显减小, 同时密度大幅下降, 其主要分布区域的边界 (黄色虚线) 同样与磁感线 (黄色实线) 吻合。非闭合场内的电子分布边界与真空室壁相交, 表明非闭合场中存在明显的电子逃逸路径, 导致大量电子沿此路径打在真空室壁上而损耗; 而闭合场的电子分布边界与真空室壁无交点, 电子向真空室壁的扩散过程受到磁场洛伦兹力的约束作用, 只有具备足够大能量逃脱洛伦兹力束缚的电子才能碰真空室壁而损耗。统计两种磁场作用下溢出电子数可知: $10\ \mu\text{s}$ 时刻闭合场和非闭合场的溢出电子比例分别为 7.19% 和 27.93%, 说明闭合场确实能够对电子形成有效的束缚。由此可得出闭合场磁控溅射的作用机制: 即由于电子旋转半径较小, 其进入真空室后将沿磁力线运动, 闭合场可在放电空间内形成闭合的磁场回路, 约束大部分电子长期停留在放电空间, 其形成的电势变化进而影响离子运动, 使得放电空间的等离子体密度升高, 进而增大镀膜区域的离化率和薄膜沉积效率。

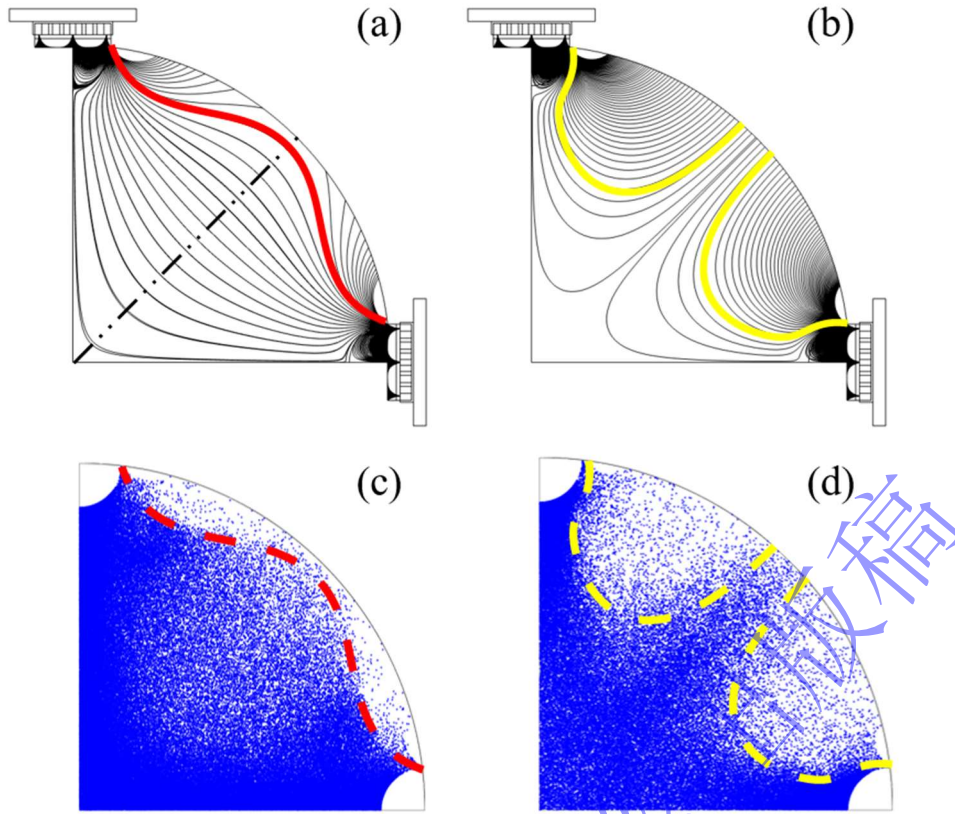


图3 (a) 闭合磁场；(b) 非闭合磁场；(c) $10\ \mu\text{s}$ 闭合磁场电子分布
和 (d) $10\ \mu\text{s}$ 非闭合磁场电子分布

Fig. 3. (a) Closed and (b) unclosed magnetic field; (c) electron distribution in (c) closed and (d) unclosed magnetic field at $10\ \mu\text{s}$.

3.2 闭合场的闭合条件

根据闭合磁场对电子的约束作用可知，对真空室中任意一点，若电子的回旋半径 r_e 大于这一点到真空室壁的距离 d ，则电子有可能打在真空室壁上从而发生损耗；反之，若 $r_e < d$ ，则电子不会打到真空室壁上，磁场对电子实现有效约束。为方便描述，定义 $r_e = d$ 时的磁感应强度为临界磁感应强度 B_{lim} ，满足 $B_{\text{lim}} = m_e v_e / e d$ ，可计算出真空室中距离真空室壁 d 的任意点的临界磁感应强度，如图 4 (a) 中蓝线所示。可见随着 d 的减小， B_{lim} 迅速增大，表明越靠近真空室边界，约束电子所需的临界磁感应强度就越大。由于闭合磁场的磁场分布存在轴对称性，且距离阴极越远磁感应强度也越小，显然相邻阴极之间的对称轴（图 3 (a) 中黑色点划

线)上的实际磁感应强度 B_{real} 最小, 如图 4 (a) 中红线所示。可见 B_{real} 随 d 的减小呈现出先增大后减小的趋势, 与 B_{lim} 的曲线在 $d_{\text{eq}}=0.039 \text{ m}$ (黑色空心圆) 处相交。 $d>d_{\text{eq}}$ 时, $B_{\text{real}}>B_{\text{lim}}$, 此时 $r_e<d$, 即电子能够完成完整的圆周运动而不损失在真空室壁上,; 而 $d<d_{\text{eq}}$ 时, $B_{\text{real}}<B_{\text{lim}}$, 此时 $r_e>d$, 此处电子将打在真空室壁上而损耗掉。因此, 可断定经过该临界点 (即 $B_{\text{real}}=B_{\text{lim}}$, $d_{\text{eq}}=0.039 \text{ m}$) 的磁感线即为闭合磁场的约束边界, 其可将真空室分为两个区域, 如图 4 (b) 所示, 其中黄色区域位于约束边界以内, 为闭合区域, 电子能够受到闭合磁场的有效束缚, 而红色区域位于约束边界以外, 为非闭合区域, 而一旦电子进入, 就有可能打在真空室壁上发生损耗。因此, 可以用真空室磁场非闭合区域的面积大小来表征真空室磁场的闭合程度, 面积越小则代表电子溢出真空室的概率越低, 对应磁场的闭合程度越高。

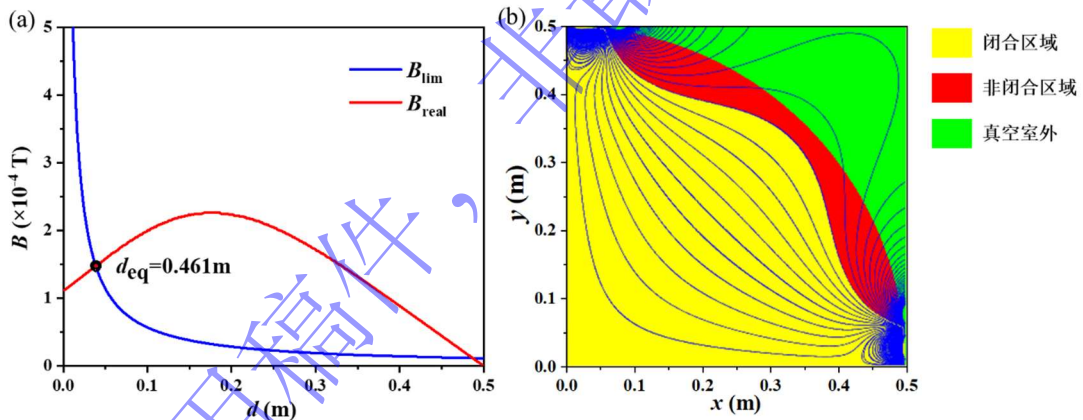


图 4 (a) 实际磁感应强度与极限磁感应强度和 (b) 磁场闭合程度示意图

Fig. 4. (a) The actual and the limit magnetic induction intensity and (b) closure degree of magnetic field.

3.3 闭合场溅射系统布局

根据磁场闭合条件, 要提高真空室磁场的闭合程度, 需要尽可能减小磁场非闭合区域的面积, 即避免磁感线与真空室壁相交。对于特定阴极组成的真空系统,

真空室内磁场强度主要由阴极自身磁场强度和阴极之间的距离决定。由于构成闭合磁场需要偶数个阴极^[5]，本文以半径 500 mm 的真空室为研究对象，分别设计了四、六、八和十阴极均匀布局的配置方案以调整相邻阴极之间的距离，从而研究不同溅射系统布局的等离子体特性，如图 5 所示。可见，电子概率密度分布图中 $f=1 \text{ m}^{-2}$ 等值线与约束边界磁感线形状吻合，表明四种布局方式对电子都形成了有效的束缚。对比磁场分布可知，随着阴极数量的增加，相邻阴极距离的减小，磁感线曲率降低，使得真空室边缘、中央和镀膜区域（两虚线之间）内的磁场呈现出不同的变化趋势。在真空室边缘，磁感线密度大幅上升，表明边缘磁感应强度逐渐增大。对应的真空室边缘的电子概率密度低的（ $f<1 \text{ m}^{-2}$ ）区域面积逐渐减小，表明真空室内的非闭合区减小，电子约束程度提高。对检验电子在真空室中运动情况的统计表明，在 30 μs 时，四、六、八和十阴极布局方式下，从真空室壁溢出的电子占比逐渐降低，如表 2 所示。在四阴极系统中，高密度的磁感线穿镀膜区域后进入真空室中央，能够将电子约束在真空室中央并逐渐积累，因此中央的电子概率密度最高。而随阴极数量的增加，磁感线的曲率逐渐增大，穿镀膜区域的磁感线密度逐渐降低，对应的真空室中央磁感应强度减弱，导致电子概率密度也下降。而镀膜区域的电子概率密度则逐渐增加，且分布越来越均匀，这是由于阴极数量的增加，使得原有的一部分进入真空室中央的磁感线被压缩至镀膜区域内，从而约束电子在镀膜区域积累，但随着阴极数量达到十个，其磁感线被压缩到镀膜区外缘，镀膜区的电子密度也随之下降。统计结果表明八阴极配置的镀膜区域电子占比最高，如表 2 所示。

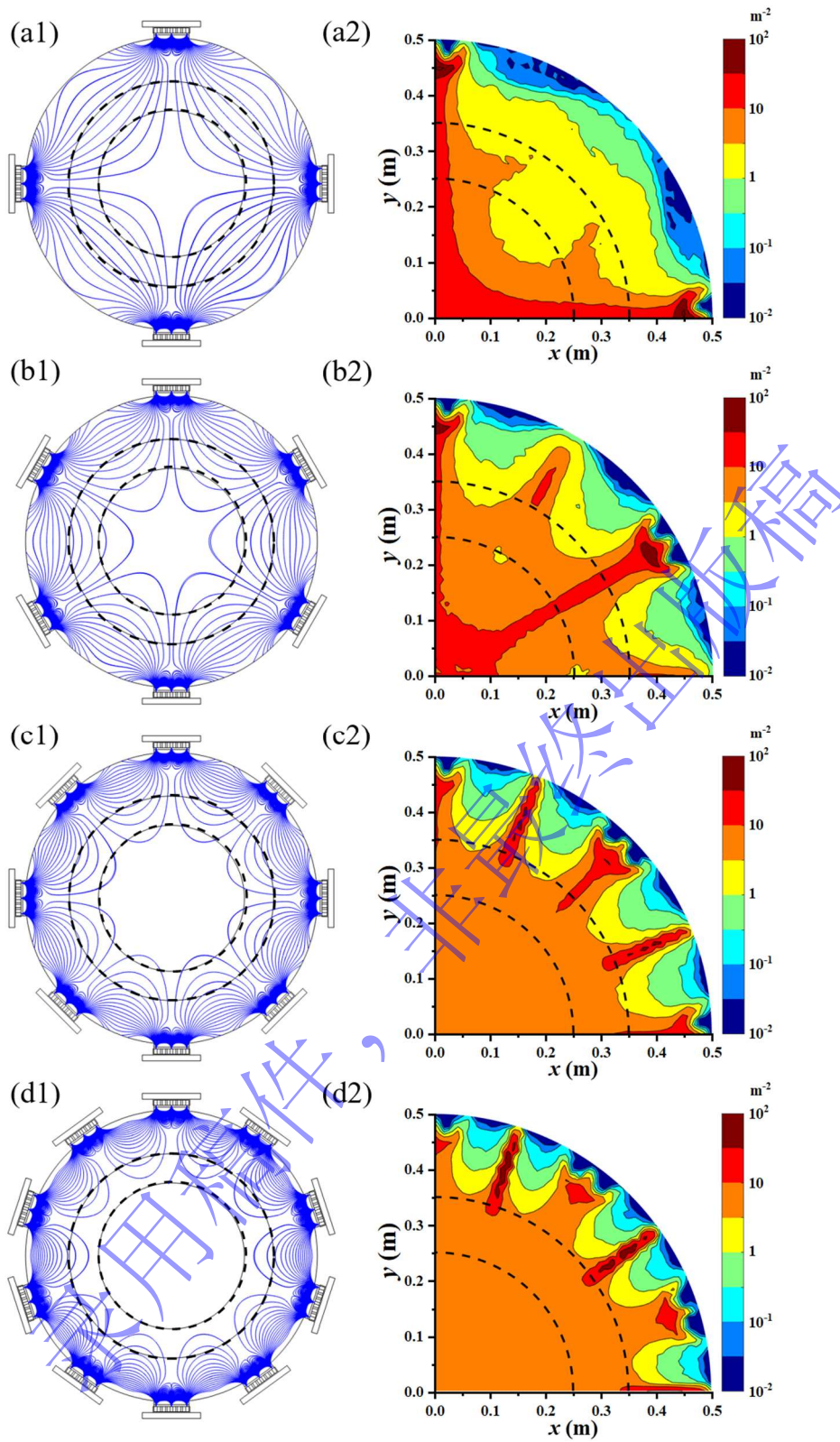


图 5 磁场分布和对应的 $30 \mu\text{s}$ 的检验电子概率密度分布：

(a) 四阴极；(b) 六阴极；(c) 八阴极和 (d) 十阴极

Fig. 5. Distribution of the magnetic field and the electronic probability density at $30 \mu\text{s}$: (a) four cathodes; (b) six cathodes; (c) eight cathodes and (d) ten cathodes.

表 2 不同数量阴极构成的闭合磁场中 30 μs 电子运动情况统计

Table 2. Statistics of electron motion in closed magnetic field composed of 4, 6, 8 and 10 cathodes

at 30 μs

阴极数量	电子溢出比例	镀膜区域电子占比
4	7.57%	22.77%
6	4.45%	25.78%
8	1.77%	27.53%
10	0.10%	26.87%

与阴极数量相比，真空室尺寸不仅可以控制阴极之间的距离，同时还决定了真空室边界以及镀膜区域的位置。因此，本文在八阴极布局的基础上，设计了半径为 400、500、600 和 700 mm 的真空室尺寸做进一步优化，其仿真结果如图 6 所示。可见真空室半径的增大导致相邻阴极之间的距离增大，真空室边缘的磁感线密度降低，磁感应强度减小，对应的非闭合区域的面积增大，电子约束效果减弱。电子运动结果表明，随真空室半径的增大，从真空室壁溢出的电子数占比逐渐上升，如表 3 所示。同时，真空室截面积逐渐增大，导致真空室内部电子概率密度的整体降低，镀膜区域电子占比降低。这是由于真空室半径的增加不仅使相邻阴极间距离线性增加，同时使真空室的截面积呈二次函数增长，进而导致镀膜区域电子概率密度的加速衰减。综上，真空室尺寸要在保证镀膜区等离子体密度的前提下尽可能增大，提高装炉量和加工效率，本文选择半径 500 mm 真空室边缘布局八阴极的方案，可有效约束电子并保证镀膜区的等离子体密度。

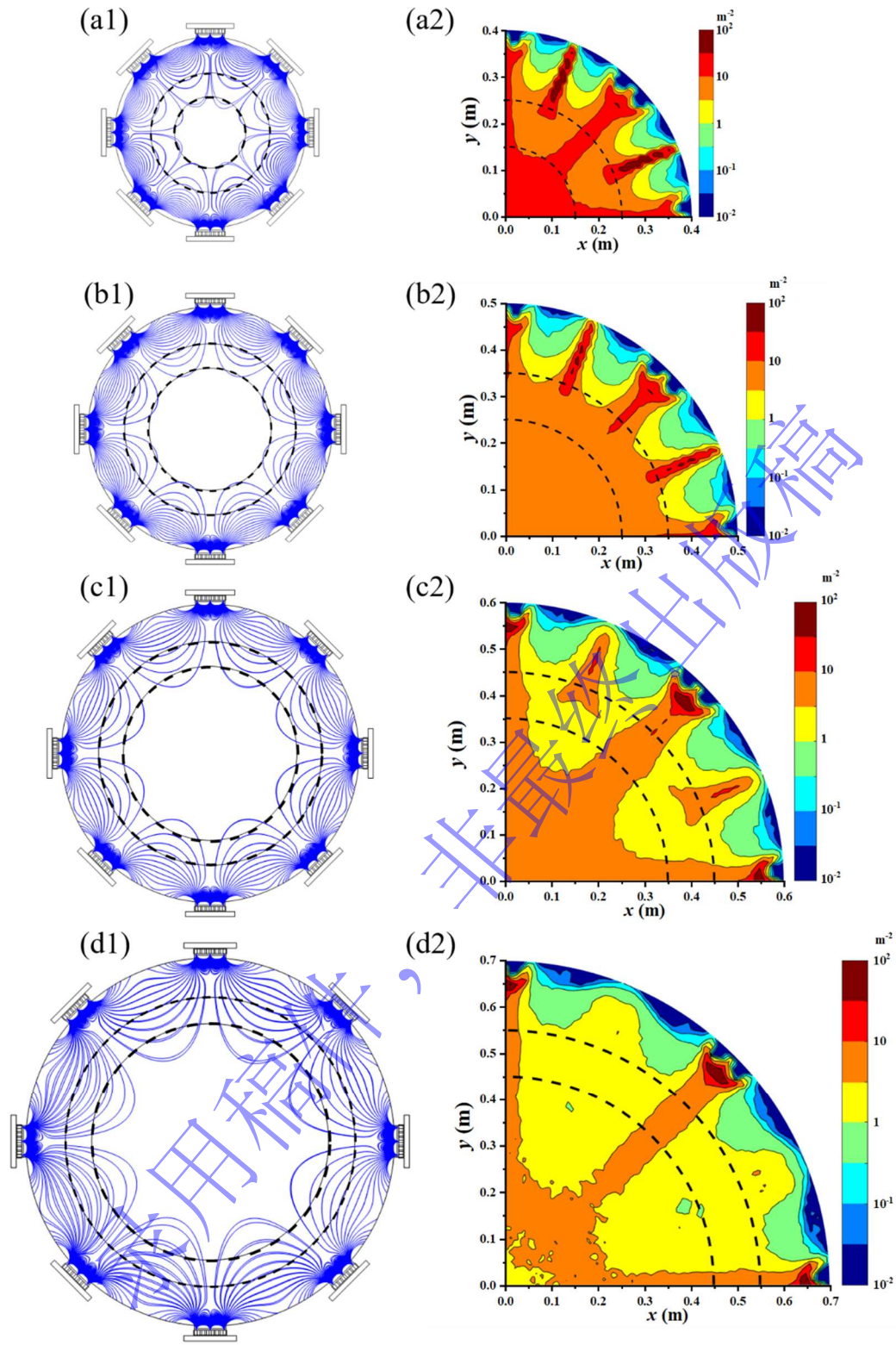


图 6 磁场分布和对应的 $30\ \mu\text{s}$ 的检验电子概率密度分布：

(a) 400 mm; (b) 500 mm; (c) 600 mm 和 (d) 700 mm

Fig. 6. Distribution of the magnetic field and the electronic probability density at $30\ \mu\text{s}$: (a) 400

mm; (b) 500 mm; (c) 600 mm and (d) 700 mm.

表 3 不同真空室尺寸构成的闭合磁场中 30 μs 电子运动情况统计

Table 3. Statistics of electron motion in closed magnetic field with different sizes at 30 μs

真空室尺寸/mm	电子溢出比例	镀膜区域电子占比
400	0.82%	29.93%
500	1.77%	27.53%
600	3.95%	21.59%
700	5.49%	19.13%

3.4 中央对偶磁场

值得注意的是，仅在真空室边缘配置阴极时，真空室边缘的磁感应强度比镀膜区域强（如图 6（a）），导致电子概率密度的最高点处于镀膜区域以外，这表明绝大部分等离子体没有被有效利用起来，造成镀膜效率较低。若在真空室中央增加对偶磁场，可以在真空室中央和边缘之间形成磁感线通路，能够有效增强镀膜区域的磁感应强度，从而有望引导真空室边缘的电子进入镀膜区域，故为进一步提高镀膜区的等离子体密度，在边缘 8 阴极布局的基础上，在真空室中央引入 4 个阴极，形成对偶磁场，研究了中央阴极与正对的边缘阴极磁极相反（称为相吸）和相同（称为相斥）时的磁场分布和电子密度分布规律，如图 7 所示。可以看出，中央阴极的引入不仅在边缘阴极和中央阴极之间形成了闭合的磁感线回路，而且对真空室边缘磁场几乎没有影响。相应地，引入中央阴极后，电子概率密度最高的位置远离真空室边界，靠近并进入镀膜区域，30 μs 时两种模式下镀膜区域内的电子占比分别提高到 37.86% 和 38.26%，较边缘 8 阴极配置（27.53%）有明显提升。同时，概率密度 $f=1\text{ m}^{-2}$ 的等值线并未发生明显偏移，表明该闭合磁场依然维持着良好的电子约束效果，两种模式下的电子边缘溢出占比分别为 1.20% 和

1.29%，稍好于仅边缘 8 阴极布局（1.77%），这是因为中央阴极的引入削弱了真空室边缘的电子束流，从而稍微降低了边缘溢出电子的占比。对比相吸和相斥两种模式，前者镀膜区域中的电子概率密度峰值更高，电子集中分布在几个离散的特定区域；而后者镀膜区内的电子概率密度分布更为均匀，变化梯度较小。造成这种差异的原因是：相吸模式下，真空室中内外闭合的磁感线密度较高，更多的电子被约束在内外阴极之间做往复的回旋运动，因此形成了离散电子分布；而在相斥模式下，真空室中内外闭合的磁感线呈现出一定的曲率，使得镀膜区域内的切向磁场强度上升，导致电子被均匀的束缚在镀膜区域内。

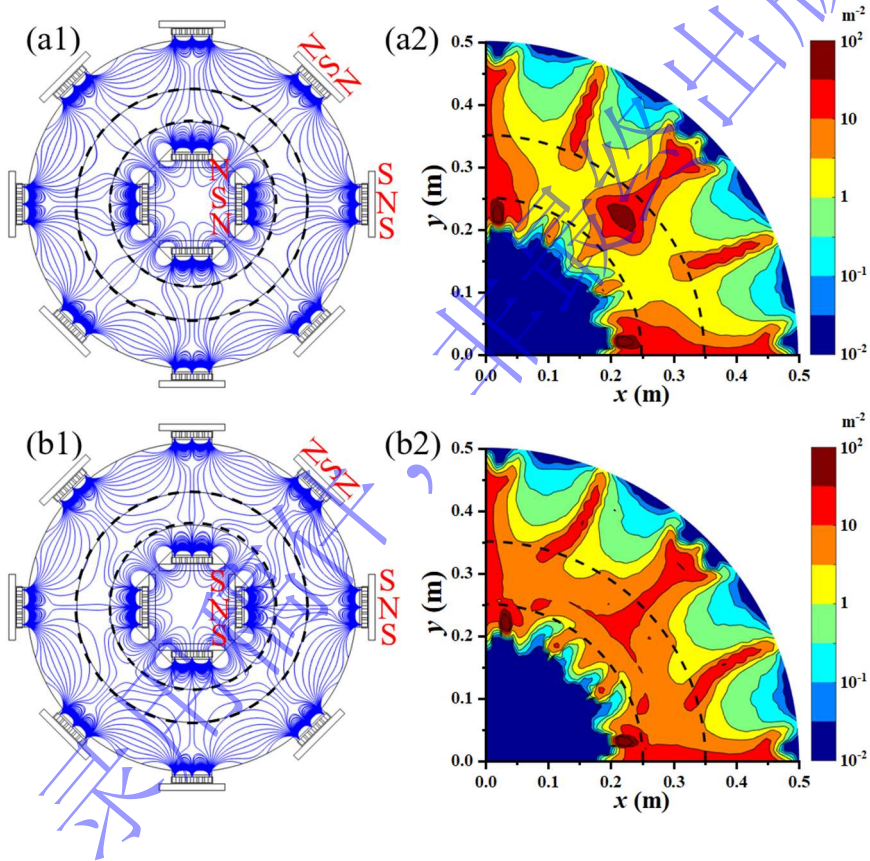


图 7 磁场分布和对应的 $30\ \mu\text{s}$ 的检验电子概率密度分布：

（a）正对相吸和（b）正对相斥

Fig. 7. Distribution of the magnetic field and the electronic probability density at $30\ \mu\text{s}$: (a) attract exactly; (b)repel exactly

一般来讲,磁控溅射系统需要离子源配合,其中阴极的磁场强度大,用于金属放电,尤其用于高强度磁控放电时放电强度大,效率高;而离子源磁场强度较小,用于气体电离,放电强度较弱^[22]。故根据实际工艺需求和闭合磁场的作用机理,将引入8个离子源替换阴极,其中4个离子源与阴极相间排布在真空室边缘,4个离子源作为对偶磁场安装在真空室中央。此时,阴极和离子源的相对位置以及对偶磁场磁极的相吸相斥关系,是涉及到等离子体放电强度和涂层沉积效率的重要因素,本文将中央离子源设计为可转动,研究了不同的磁极方向时中央离子源与边缘阴极和边缘离子源在不同相对位置时的电子分布情况,分别如图8和9所示,其中中央离子源的转角标记为 θ ,来表征中央离子源的相对位置,其中转角 0° 和 45° 分别对应于中央离子源正对边缘阴极和中央离子源正对边缘离子源。为方便描述,本文定义中央离子源与边缘阴极磁极相反(相同)称为相吸(相斥)。由磁感线分布知,真空室边缘的磁感线基本维持了图7所示的形状,但其拐点更靠近阴极,这是由于阴极磁场更强且非平衡度更高。同时,真空室边缘的磁感线密度也基本保持不变,不同条件下的真空室边缘电子概率密度分布情况基本相同,统计显示,30 μs 时刻真空室边缘溢出的电子占比均处于1.51%~2.26%之间,表明离子源的替换基本没有改变真空室闭合磁场束缚电子的能力。与真空室边缘不同,镀膜区内(图中两条虚线间)的磁场随磁极方向和对偶磁场角度的改变发生明显变化。在相吸模式(磁极相反)下, $\theta=0^\circ$ (中央离子源与边缘阴极相对)时,镀膜区内几乎全部是切向磁感线,电子概率密度分布均匀,如图8(a)所示。随着 θ 从 0° 增加到 45° ,镀膜区内的磁感线逐渐发生偏转,切向强度逐渐降低,而径向强度逐渐增大,伴随着电子概率密度分布随之偏转且在局部发生聚集。当 $\theta=45^\circ$ 时,镀膜区内的磁感线几乎全部为径向磁感线,形成了多个离散的高电子概率密度区域,如图8(d)所示。相斥模式(磁极相同)的镀膜区磁场变化趋势

与相吸模式正好相反，随着 θ 从 0° 增加到 45° ，镀膜区内的径向磁感线密度逐渐降低，而切向磁感线密度渐密度增大。相应地，电子概率密度从多个离散的高电子概率密度区域转变为均匀的连续分布。当镀膜区内径向磁场占主导时，电子被束缚在内外相对的磁控设备之间，垂直于镀膜区边界来回震荡，形成了局部的高密度等离子体；而当镀膜区内切向磁场占主导时，电子主要平行于镀膜区边界来回震荡，进而形成了连续的均匀的等离子体。

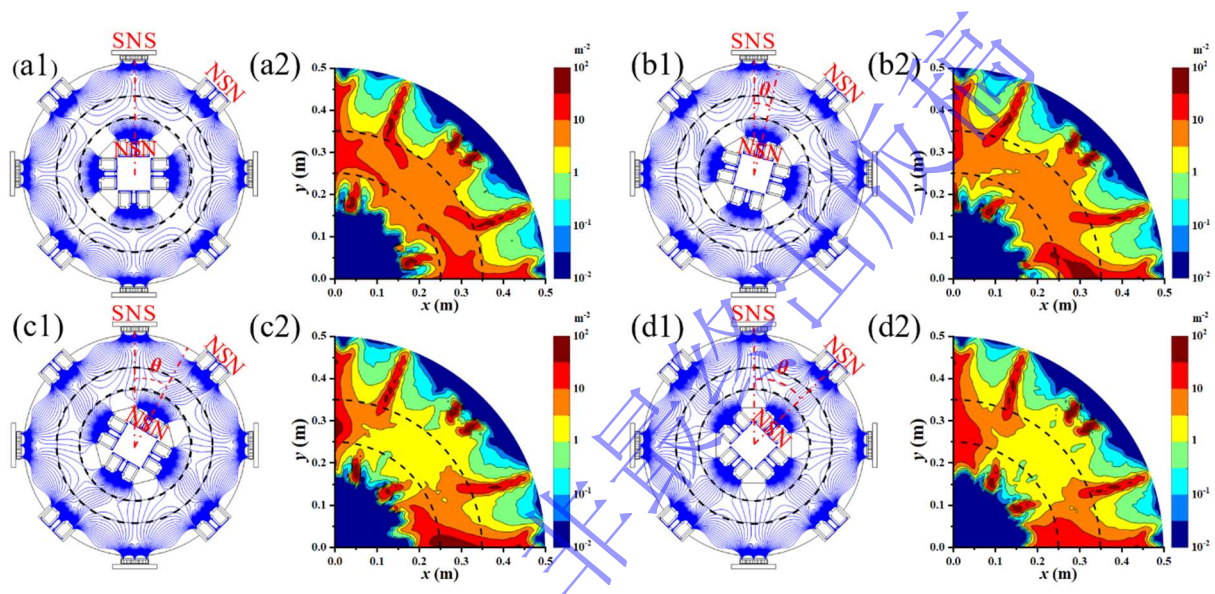


图 8 相吸模式下磁场分布和对应的 $30\ \mu\text{s}$ 的检验电子概率密度分布：

(a) 0° ; (b) 15° ; (c) 30° 和 (d) 45°

Fig. 8. Distribution of the magnetic field and the electronic probability density at $30\ \mu\text{s}$ in attraction

mode: (a) 0° ; (b) 15° ; (c) 30° and (d) 45° .

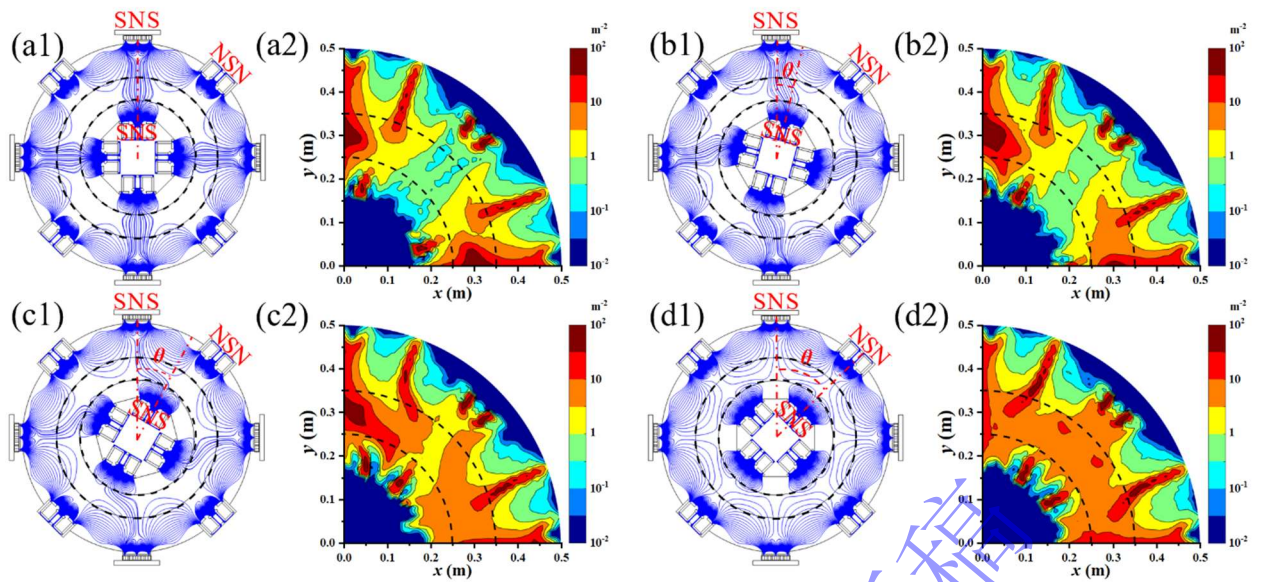


图 9 相斥模式下磁场分布和对应的 $30\ \mu\text{s}$ 的检验电子概率密度分布:

(a) 0° ; (b) 15° ; (c) 30° 和 (d) 45°

Fig. 9. Distribution of the magnetic field and the electronic probability density at $30\ \mu\text{s}$: (a) 0° ; (b)

15° ; (c) 30° and (d) 45° .

统计不同转角条件下镀膜区的电子占比，如图 10 所示。可见，随 θ 从 0° 增加到 45° ，两种模式的镀膜区内的电子占比均逐渐降低，表明中央离子源正对边缘阴极时等离子体的沉积效率最高。这是因为 θ 的增大导致中央离子源与边缘阴极之间的磁场相互作用逐渐减弱，与边缘离子源之间的磁场相互作用逐渐增强，由于阴极磁场强于离子源，磁场相互作用的变化导致镀膜区域内磁感应强度降低。对比相吸和相斥两种模式，发现后者镀膜区电子占比更高，随 θ 变化的梯度也更大。结合图 8 和图 9 可知，中央离子源正对边缘阴极 (0°) 且两者磁极相斥时，等离子体集中在边缘阴极和中央离子源之间，镀膜区电子占比高达 53.41%，通过旋转可获得最高的沉积效率。而中央离子源正对边缘阴极 (0°) 且两者磁极相吸时，虽然等离子体密度相对较低，最高电子占比达 42.25%，但等离子体分布更均匀，沉积均匀性更好。

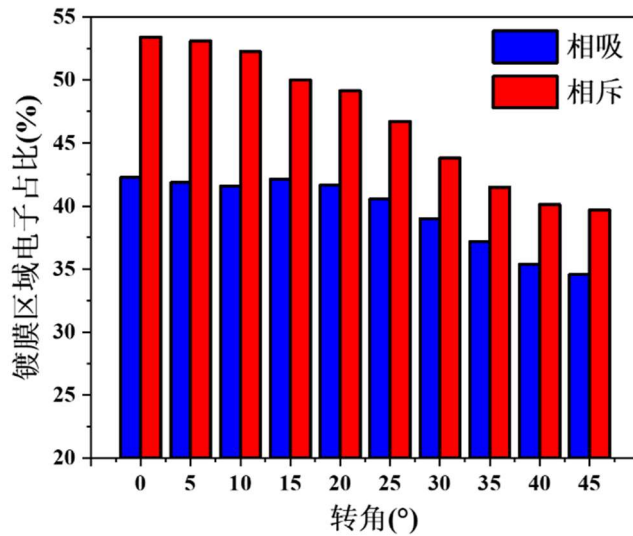


图 10 30 μ s 不同转角下镀膜区域电子占比

Fig. 10. The ratio of the electron in the coating region with different angles at 30 μ s

4 结 论

本文从带电粒子在真空室磁场中的运动行为出发, 得出闭合磁场通过约束电子来约束等离子体。在此基础上, 建立了检验电子蒙特卡洛 (Test-electron MCC) 模型, 并研究了真空室中大量电子的输运特性, 明确了闭合磁场的闭合条件, 提出通过强化真空室边缘磁感应强度来降低电子损失, 并研究了阴极数量和真空室尺寸对闭合磁场作用效果的影响规律。通过引入中央对偶磁场, 将镀膜区电子占比提高至 38.26%, 大幅增加了等离子体的利用效率。最后研究了不同阴极和离子源的布局方式时等离子体分布特性, 发现中央离子源与边缘阴极磁极相斥时, 等离子体集中在边缘阴极和中央离子源之间, 镀膜区电子占比高, 通过旋转可获得最高的沉积效率; 而中央离子源与边缘阴极磁极相吸时, 虽然等离子体密度峰值相对较低, 镀膜区电子占比低, 但等离子体分布更均匀, 沉积均匀性更好。

参考文献

- [1] Window B, Savvides N 1986 *J. Vac. Sci. Technol. A-Vac. Surf. Films* **4** 196

- [2] Window B 1986 *J. Vac. Sci. Technol. A-Vac. Surf. Films* **4** 453.
- [3] Savvides N, Window B 1986 *J. Vac. Sci. Technol. A* **4** 504
- [4] Kelly P J, Arnell R D, Ahmed W, Afzal A 1996 *Mater.Des* **17** 215
- [5] Monaghan D P, Teer D G, Laing K C, Efeoglu I, Arnell R D 1993 *Surf. Coat. Technol.* **59** 21
- [6] Arnell R D, Kelly P J 1999 *Surf. Coat. Technol.* **112** 170
- [7] Zhou J, Wu Z, Liu Z H 2008 *Journal of University of Science & Technology Beijing Mineral Metallurgy Material* **15** 775
- [8] Kelly P J, Aenell R D 1998 *Surf. Coat. Technol.* **108** 317
- [9] Kelly P J, Arnell R D 1998 *J. Vac. Sci. Technol. A-Vac. Surf. Films* **16** 2858
- [10] Rohde S L, Petrov I, Sproul W D, Barnett S A, Rudnik P J, Graham M E 1990 *Thin Solid Films* **193** 117
- [11] Sproul W D, Rudnik P J, Graham M E, Rohde S L 1990 *Surf. Coat. Technol.* **43** 270
- [12] Jiang B L, Cao Z, Lu Y Y, Luan Y 2011 *Transactions of materials and heat treatment* **32** 92 (in Chinese) [蒋百灵, 曹政, 鲁媛媛, 栾亚 2011 材料热处理学报 **32** 92]
- [13] Kelly P J, Arnell R D 1996 *Surf. Coat. Technol.* **86-87** 425
- [14] Kelly P J, Arnell R D 1998 *Vacuum* **49** 43
- [15] Lieberman M A, Lichtenberg A J (translated by Pu Y K) 2007 *Principles of plasma discharges and materials processing* (Beijing: Science Press) pp5-7 (in Chinese) [迈克尔·A.力伯曼, 阿伦·J.里登伯格著(浦以康译) 2007 等离子体放电原理与材料处理(北京: 科学出版社) 第18—30页]
- [16] Cao Z, Jiang B L, Lu Y Y, Wang T 2011 *Chin. J. Mater. Res.* **25** 313 (in Chinese) [曹政, 蒋百灵, 鲁媛媛, 王陶 2011 材料研究学报 **25** 313]
- [17] Chen M, Zhou X Y, Mao X J, Shao J J, Yang G L 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 098103

- (in Chinese) [陈明, 周细应, 毛秀娟, 邵佳佳, 杨国良 2014 物理学报 **63** 098103]
- [18]Yusupov M, Bultinck E, Depla D, Bogaerts 2011 *New J. Phys.* **13** 033018
- [19]Bultinck E, Bogaerts A 2009 *New J. Phys.* **11** 103010
- [20]Wang T L, Qiu Q Q, Jing L W, Zhang X B 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 070703 (in Chinese) [汪天龙, 邱清泉, 靖立伟, 张小波 2018 物理学报 **67** 070703]
- [21] Shidoji E, Ohtake H, Nakano N, Makabe T 1999 *Jpn. J. Appl. Phys. Part 1* **38** 2131
- [22] Kim J S, Liu C, Edgell D H, Pardo R 2006 *Rev. Sci. Instrum* **77** 03B106
- [23]Cui S H, Wu Z Z, Xiao S, Chen L, Li T J, Liu L L, Fu R K Y, Chu P K, Tan W C 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 195204 (in Chinese) [崔岁寒, 吴忠振, 肖舒, 陈磊, 李体军, 刘亮亮, 傅劲裕, 田修波, 朱剑豪, 谭文长 2019 物理学报 **68** 195204]
- [24]Rossnagel S M, Kaufman H R 1987 *J. Vac. Sci. Technol. A-Vac. Surf. Films* **5** 2276
- [25] Rossnagel S M, Kaufman H R 1988 *J. Vac. Sci. Technol. A-Vac. Surf. Films* **6** 223
- [26] Chen F F (translated by Lin G H) 1980 *Introduction to Plasma Physics* (Beijing: Science Press) pp5-7 (in Chinese) [弗朗西斯 F. 陈 著 (林光海译) 1980 等离子体物理学导论 (北京: 科学出版社) 第 6—7 页]
- [27]Sirghi L, Aoki T, Hatanaka Y 2004 *Surf. Coat. Technol.* **187** 358
- [28]Chen L, Cui S H, Tang W, Zhou L, Li T J, Liu LL, An X K, Wu Z C, Ma Z Y, Lin H, Tian X B, Fu R K Y, Chu P K, Wu Z Z 2020 *Plasma Sources Sci. Technol.* **29** 025016
- [29] Birdsall C K 1991 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **19** 65
- [30] Samuelsson M, Lundin D, Jensen J, Raadu M A, Gudmundsson J T, Helmersson U 2010 *Surf. Coat. Tech.* **205** 591-596

Working principle and layout logic of the closed magnetic field in sputtering^{*}

Cui Sui-Han¹⁾[#] Guo Yu-Xiang¹⁾[#] Chen Qiu-Hao¹⁾ Jin Zheng¹⁾ Wu Zhong-Can¹⁾ Su

Xiong-Yu¹⁾ Ma Zheng-Yong¹⁾ Tian Xiu-Bo¹⁾ Wu Zhong-Zhen¹⁾[†]

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

518055, China)

Abstract

Closed magnetic field constructed by unbalanced Magnetron sputtering (MS) cathodes has been a general design in the developing of the MS coating system. However, due to the difficulties in characterization of the complex plasma behavior, some critical points, such as the effective object, the working mechanism, the closure condition, the layout logic and the effectivity of the closed magnetic field are unknown definitely. Herein, originating from the movements of charged particles in magnetic field, this work studies the motion behaviors of electrons and ions in the vacuum chamber and reveals that the closed magnetic field can mainly affect electrons and further control the distributions of ions. A Monte-Carlo Collision (MCC) model of the closed magnetic field MS coating system is established by test-electron to characterize the plasma transport characteristics and the electrons constraint and coatings deposition efficiency are studied by different layouts of the magnetron cathodes and the ion sources. The simulation results show that the cathodes numbers and vacuum chamber size determines the constraint

effect on electrons in closed magnetic field. By 8 MS cathodes and the chamber radius of 0.5 m, the ratio of the overflow electrons can be decreased to 1.77%. To increase the ratio of the electrons in the coating region, four coupled magnetic fields are introduced in the center of vacuum chamber. The studies of cathode type, rotation angle and magnetic field direction reveal that the ratio of the overflow electrons is less than 3%. A locally dense plasma distribution and a continuous uniform plasma distribution can be observed, corresponding to same and opposite layout in magnetic poles of the MS cathodes and the ion sources, and the ratio of the electrons in the coating region significantly increased to 53.41% or 42.25%, respectively.

Keywords: Closed magnetic field, Electron motion, Vacuum layout, Deposition efficiency

PACS: 52. 65. -y, 52. 65. Cc, 52. 65. Pp, 52. 75. -d

* Project supported by (National Materials Genome Project (No. 2016YFB0700600), Shenzhen Science and Technology Research Grants (JSGG20191129112631389).

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

Cui Sui-Han and Guo Yu-Xiang contributed equally to this work.