

圆柱模型下电子回旋共振微波等离子体 离子输运过程的数值研究^{*}

官 野 温晓军 张鹏云 邓新绿

(大连理工大学物理系, 大连 116024)

(1997 年 6 月 3 日收到)

在圆柱模型下, 采用 Monte Carlo 方法模拟了电子回旋共振(ECR)微波等离子体源中离子离开放电室后历经中性区、鞘层区以及工件表面二次电子发射形成的虚拟阴极“屏蔽区”, 最后被加负偏压的工件表面吸收的全过程. 研究了鞘层边界处的衔接问题, 得到了光滑自洽的电势分布曲线及工件表面离子的能量分布和角分布, 同时讨论了磁场、气压以及二次电子发射对鞘势的影响.

PACC: 5240K; 5265

1 引 言

电子回旋共振(ECR)微波等离子体由于具有如下特点: 等离子体密度高(10^{11} — 10^{13} cm^{-3}); 电离度高(>10%); 运行气压低(10^{-3} —1 Pa); 可形成大体积、均匀等离子体; 无电极、高活性, 易形成多电荷离子和负离子; 可稳态运行, 设备简单, 效率高, 参数易于控制; 能借助非均匀磁场加速等离子体, 实现对材料表面同步进行沉积和离子注入等. 因此, 它具有广阔的应用前景^[1].

在研究微波等离子体源工作中, Hussein 和 Emmert 等^[2,3]只建立了简单平板模型, 且研究只限于中性区下游, 并未深入鞘层区. 国内目前虽然有圆柱模型的研究^[4], 但没有考虑中性区, 没有研究磁场以及二次电子发射对鞘势的影响. 在实验方面, Rej 和 Wood^[5]在等离子体源注入(PSII)中得出一些二次电子发射的实验参数, 却未建立数值模型. 本文结合“三束”材料改性国家重点实验室的全方位 ECR 微波等离子体源注入设备(见图 1), 建立了 ECR 微波等离子体离子输运的圆柱模型, 对离子历经的空间区域的输运过程进行了数值研究. 采用 Monte Carlo 方法模拟了离子历经中性区、鞘层区以及工件表面二次电子发射形成的虚拟阴极“屏蔽区”, 最后被加负偏压的工件表面吸收的全过程. 成功地用“打靶”法求解柱面形式的非线性泊松方程, 采用曲线拟合、电势自洽迭代方法, 把中性区和鞘层区很好地衔接起来, 得到了光滑自洽的电势分布曲线及工件表面离子的能量分布与角分布. 而先前处理中性区和鞘层区, 采用的是经验公式, 连接不光滑, 理论上也不自洽. 同时, 讨论了磁场、气压以及二次电子发射对鞘势的影响.

^{*} 国家自然科学基金重大项目资助的课题.

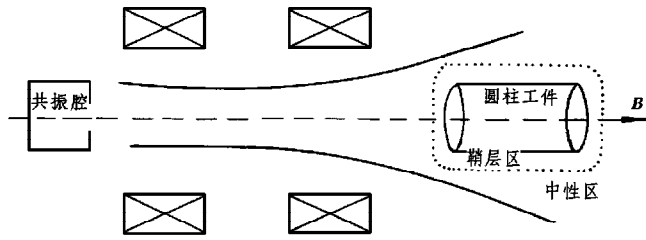


图 1 ECR 微波等离子体源注入装置示意图

2 计算模型与方法

采用圆柱模型,选取以圆柱轴线为 z 轴的柱坐标系 (r, φ, z) . r 是径向坐标,磁场与 z 轴同向,电场的方向指向阴极, x 轴指向负 r 方向, $\mathbf{v} = (v_r, v_\varphi, v_z)$ 为速度矢量, θ 是速度 \mathbf{v} 与 z 轴的夹角, φ 是 \mathbf{v} 在垂直于柱体平面上的投影与 x 轴的夹角,并把处理区分为中性区和鞘层区(见图 2),基本假设如下:

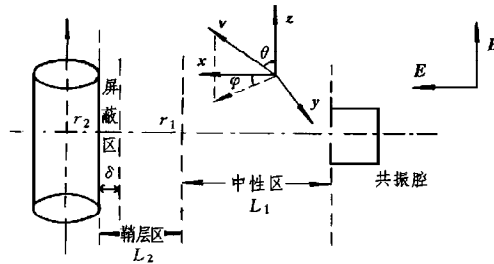


图 2 各区域分布柱面模型

- 1) 粒子在无限大圆柱空间运动,线圈产生的磁场在工件处是均匀、稳定的;
- 2) 鞘层是准稳态的,中性区电子受强大电场排斥于鞘层边界之外,打到靶上的离子全部被吸收.

2.1 均匀磁场内离子运动状态的描述

由基本方程 $m d\mathbf{v}/dt = q(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) + q\mathbf{E}$, 求得

$$dv_r/dr = [\Omega v_\varphi - (q/m) du/dr] / v_r, \tag{1a}$$

$$dv_\varphi/dr = -\Omega, \tag{1b}$$

$$v_z = \text{const}, \tag{1c}$$

其中 $\Omega = qB_0/m$ 是离子回旋频率, $v_r = dr/dt$, $\mathbf{E} = -du/dr$, u 是电势.

对(1)式差分得

$$v_r^{i+1} = v_r^i - (q/mv_r^i) [u(i+1) - u(i) - v_\varphi^i B_0 \Delta r], \tag{2a}$$

$$v_\varphi^{i+1} = v_\varphi^i - (q/m) B_0 \Delta r, \tag{2b}$$

$$v_z^{i+1} = v_z^i, \tag{2c}$$

以及有

$$\theta = \arccos(v_z/v), \tag{3a}$$

$$\varphi = \arctan(v_\varphi/v_r), \tag{3b}$$

$$v = (v_r^2 + v_\varphi^2 + v_z^2)^{1/2}. \quad (3c)$$

2.2 碰撞过程

离子离开放电室(原点 O)在前进途中遭受多次碰撞,主要考虑它与中性粒子间的电荷交换碰撞和弹性散射^[6].

把离子的运动距离沿径向平均分为若干层,每层 Δr 大约为离子平均自由程的二十分之一.离子在径向每走 Δr 步长,可能发生碰撞,也可能不发生碰撞.发生碰撞的概率表达式为

$$p = n\sigma_t(\epsilon_i)\Delta l, \quad (4)$$

其中

$$\Delta l = \Delta r / (\sin\theta |\cos\varphi|), \quad (5)$$

n 是气体密度, $\sigma_{ex}(\epsilon_i)$, $\sigma_{el}(\epsilon_i)$ 和 $\sigma_t(\epsilon_i) = \sigma_{ex}(\epsilon_i) + \sigma_{el}(\epsilon_i)$ 分别为离子与中性粒子碰撞的电荷交换截面、弹性散射截面和总截面, ϵ_i 为 $r'_i = r_i - \Delta r/2$ 处的能量.

如果 $p < \xi_1$, 则离子不与中性粒子发生碰撞;否则,则发生碰撞.若发生碰撞,由概率 $\sigma_{ex}(\epsilon_i)/\sigma_t(\epsilon_i)$, $\sigma_{el}(\epsilon_i)/\sigma_t(\epsilon_i)$ 可确定碰撞类型.这里的 ξ_i 及后面的 ξ_1 皆为 $[0, 1]$ 区间上均匀分布的随机数.

当发生弹性碰撞时,选用等质量钢球模型,散射角由 $\cos\chi = (1 - \xi_2)^{1/2}$ 确定,方位角 $\varphi = 2\pi\xi_3$.

当发生电荷交换碰撞时,新产生离子的速度由麦克斯韦分布抽取,散射角相对原离子的入射方向各向同性.散射角 χ 和方位角 φ 由 $\chi = \pi\xi_4$, $\varphi = 2\pi\xi_5$ 确定.碰撞后,离子速度方向由下面的球面三角公式确定^[7]:

$$\cos\theta_{i+1} = \cos\theta_i \cos\chi + \sin\theta_i \sin\chi \cos\varphi, \quad (6a)$$

$$\sin(\varphi_{i+1} - \varphi_i) = \sin\varphi \sin\chi / \sin\theta_{i+1}, \quad (6b)$$

$$\cos(\varphi_{i+1} - \varphi_i) = (\cos\chi - \cos\theta_i \cos\theta_{i+1}) / (\sin\theta_i \sin\theta_{i+1}). \quad (6c)$$

该过程详细处理方法见文献^[6].

2.3 中性区离子输运

设离子速度遵守麦克斯韦分布,由该分布随机抽取初始速度.

给定初始电势分布: $u(r) = u_0(r/L_1)^2$, 其中 u_0 为鞘层边界电势, L_1 为中性区长度.在此电势下模拟离子运动,采用统计平均法计算出每个格点上离子的平均径向速度

$$\bar{v}_r^i = (1/N) \sum_{j=1}^N \bar{v}_{ij} \quad (N \text{ 是跟踪的粒子数; } i = 1, 2, \dots, L \text{ 是格点数}).$$

由离子连续性方程: $n_i(r)\bar{v}_r(r) = n_i(0)\bar{v}_r(0)$, 可求出离子数密度 $n_i(r)$.再由电中性方程: $en_e(r) = qn_i(r)$ 和电子遵守玻耳兹曼分布: $n_e(r) = n_e(0)\exp[eu(r)/kT_e]$, 可求得中性区新的电势分布:

$$u(r) = (kT_e/e) \ln[\bar{v}_r(0)/\bar{v}_r(r)]. \quad (7)$$

其它方向的电势呈对称均匀.

2.4 鞘层区离子输运

给定鞘层初始电势分布: $u(r) = u(r_1) + [u_k - u(r_1)](r/L_2)^2$, 其中 L_2 为鞘层厚度, u_k 为负偏压值. 假设离子从中性区进入鞘层过程中既不产生也不湮没, 即离子数守恒, 由电荷连续, 可求得鞘层内离子数密度分布 $n_i(r)$.

为求出鞘层区的电势分布, 需求解下面两点边值问题的柱面形式的泊松方程:

$$d^2 u/dr^2 + r^{-1} du/dr = - (q/\epsilon_0) n_i(r), \quad (8a)$$

$$u(r_1) = u_0, \quad (8b)$$

$$u(r_2) = u_k. \quad (8c)$$

经过多次尝试, 采用“打靶”法求解上面的非线性方程(8), 获得了满意的结果.

2.5 中性区与鞘层区的衔接

为满足鞘层边界上电势连续, 取包括边界点、靶位置在内的几点处电势值, 采用最小二乘法进行曲线拟合, 得到光滑连续的电势分布曲线, 将它作为下次模拟的初始电势分布. 如此反复迭代, 直至收敛, 电势逼近真实值, 即自洽电势分布. 最后在自洽电势作用下, 模拟大量离子的运动, 记录不同点处离子的速度, 相应计算出离子的能量分布和角分布.

2.6 二次电子发射的研究

当圆柱形工件(半径 $r = a$)加上一个负高压时, 高能离子撞击工件表面将打出大量的二次电子, 这些电子可能被工件表面吸收, 也可能继续运动. 在恒定磁场 $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{e}_z$ 中, 二次电子在工件表面的运动方程满足: $m d\mathbf{v}/dt = q(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) + q\mathbf{E}$, 当 B 充分大和在电子运行区间中 \mathbf{E} 近似为常数时, 二次电子的轨迹方程变为下述 $r-\theta$ 面内的解析式^[5]:

$$r(t) = a + (v_E/\Omega)[1 - \cos(\Omega t)], \quad (9a)$$

$$\theta(t) = - \int_0^t \frac{1}{r} \{1 - a\Omega/v_E[\cos(\Omega t) - 1]\} dt, \quad (9b)$$

其中 $v_E = E/B$ 是二次电子漂移速率, $\Omega = eB/m$ 为电子回旋频率, 如图 3 所示, 二次电子被约束在厚度为 $\delta = 2v_E/\Omega$ (δ 远小于鞘层厚度)的区间内.

随着离工件表面 δ 厚度范围内的二次电子数目的增加, 这一区间的外加电场将被削弱, 这减少了二次电子被工件重新吸收的机会, 于是将在离工件表面 δ 处形成一个“虚拟阴极”. 一旦形成“虚拟阴极”后, 更多的二次电子在弱场下产生, 而更多的二次电子在“虚拟阴极”的排斥下被工件表面重新吸收, 这样达到一个二次电子数目自洽的过程, 厚度为 δ 的这段区域内电场最终为 0, 形成了一段“屏蔽区”.

在处理二次电子发射对鞘势的影响中, 以不考虑二次电子发射时的电场 $\mathbf{E}(r_2)$ 为初值, 由

$$\delta = 2v_E/\Omega = 2Em/eB^2 \quad (10)$$

求出一个最大 δ_1 值, 再在 δ_1 内求出一个平均电场 E_1 , 根据上式求出最小 δ_2 值, 重复上述过程, 逐渐逼近一个真实的 \mathbf{E} 及其对应的 δ , 确定“屏蔽区”厚度后, 考虑二次电子发射后的电势分布则随之确定.

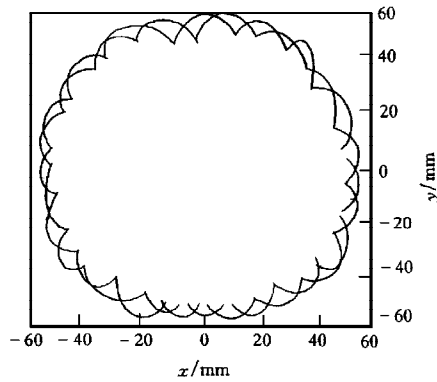


图3 工件半径 $a=0.05\text{ m}$, $B=0.04\text{ T}$ 时二次电子轨迹示意图

3 模拟结果与讨论

3.1 自洽电势

由于中性区与鞘层区相比无明显压降,故图4中只须画出中性区下游部分.图4给出不考虑二次电子发射,中性气压为 $P_0=0.667\text{ Pa}$, $B_0=0.0875\text{ T}$ 下,在中性区下游约2 cm、鞘层区厚度为6 cm,靶上加 $U_k=-600\text{ V}$ 负偏压时,采用二次曲线拟合,反复迭代而逼近的电势分布曲线,一般迭代三至四次即可.从图4中可以看出,用这种方法求出的中性区下游与鞘层的电势分布光滑连续.

图5至图7分别给出了在图4的自洽电势分布下,离子打到靶表面的能量分布和角

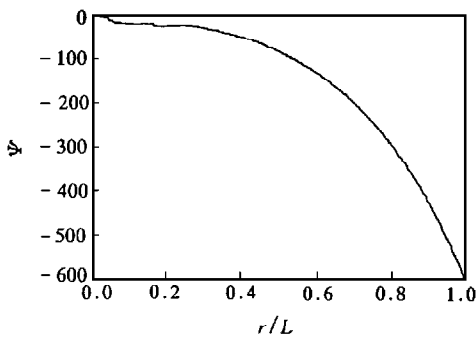


图4 $U_k=-600\text{ V}$ 时自洽电势分布

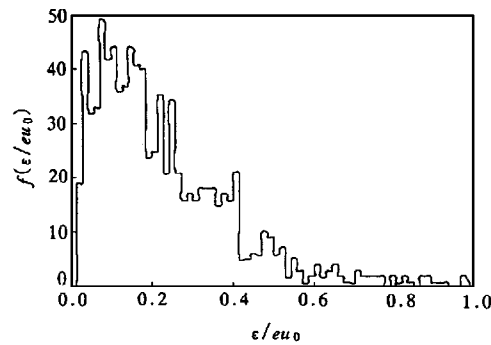


图5 $U_k=-600\text{ V}$ 时靶上离子能量分布

分布.从图5可以看出,离子轰击靶的能量分布曲线随能量增大而单调下降,这是因为该气压下离子的平均自由程 $\bar{\lambda}$ 小于鞘层厚度,离子向靶运动过程中遭受大量碰撞,能量损失大,导致高能离子数量少而低能粒子数量多.

从图6和图7可以看出 φ 值偏小,而 θ 值接近 90° ,说明大部分离子几乎垂直打到靶

上,它对离子注入工作是有利的,这是因为离子受强大电场和磁场的聚焦作用.

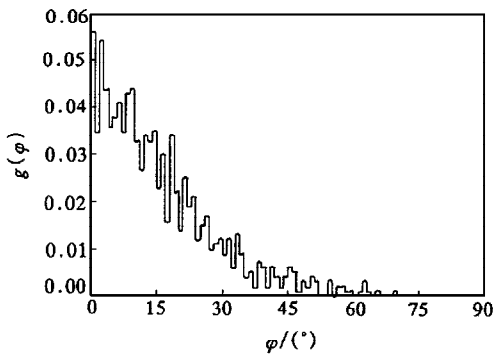


图6 $U_k = -600\text{ V}$ 时靶上离子 φ 角分布

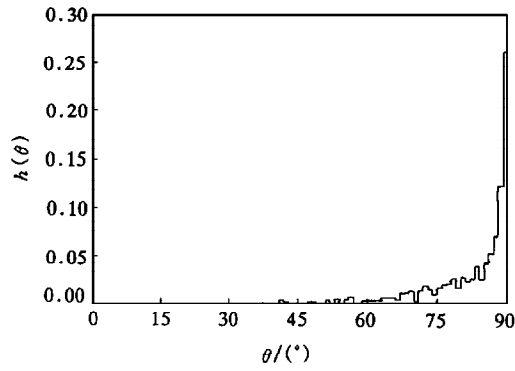


图7 $U_k = -600\text{ V}$ 时靶上离子 θ 角分布

3.2 中性气体气压对鞘势的影响

图8给出无量纲化径向电势 $\Psi = -eu(r)/kT_e$ 随中性气体压强变化的关系曲线.随气压增加,等离子体密度增大,势降低.这是因为气压越高,与中性气体碰撞概率越大,高的碰撞频率,使等离子体更不容易输运,从而使其势降低.

3.3 磁场对鞘势的影响

图9给出了不同磁场下的电势分布.计算结果表明,随着磁感应强度的增加, Ψ 值增

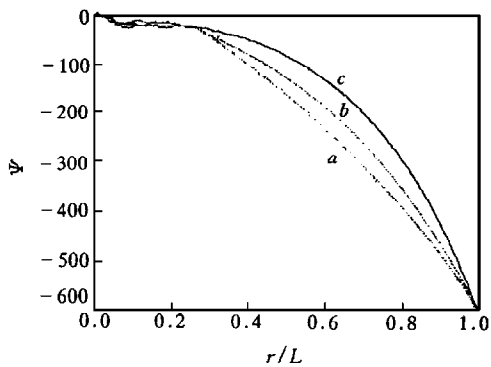


图8 不同气压下电势分布 a 为 $P=0.5\text{ Pa}$; b 为 $P=0.8\text{ Pa}$; c 为 $P=1.0\text{ Pa}$

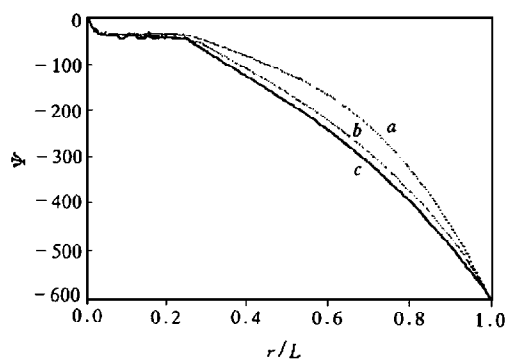


图9 不同 B 下的电势分布 a 为 $B/B_0=1.0$; b 为 $B/B_0=1.5$; c 为 $B/B_0=2.0$

加.这是因为离子从磁场中获得能量,沿径向的速度增加,根据连续性方程,流过鞘层边界的离子数减少,由鞘层边界上满足的准中性条件,电子数相应减少,导致鞘势降低, Ψ 值增加.

图10和图11给出了图9中不同 B 值下的电势分布曲线对应的工件表面离子能量分布和角分布.发现高能粒子明显随 B 值的增大而增多, φ 角也受磁场的聚焦作用而减

小,又因 B 沿 z 轴方向,而离子沿 z 方向速度不受影响,故 θ 角的变化不明显(其图略去).

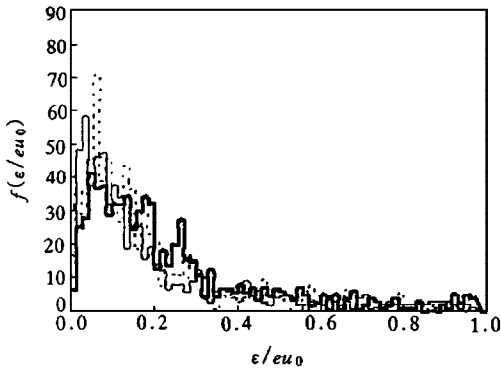


图 10 不同 B 下靶表面离子能量分布 细实线为 $B/B_0=1.0$;虚线为 $B/B_0=1.5$;粗实线为 $B/B_0=2.0$

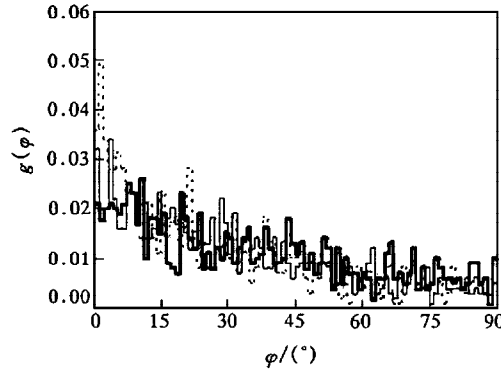


图 11 不同 B 下靶表面离子 φ 角分布 虚线为 $B/B_0=2.0$;细实线为 $B/B_0=1.5$;粗实线为 $B/B_0=1.0$

3.4 二次电子发射的影响

当 $B_0=0.08\text{ T}$ 时,用前面介绍的方法及(10)式,求得二次电子发射形成的“屏蔽区”厚度约为 6 mm ,图 12 给出了考虑及不考虑二次电子发射时的电势分布的比较图,发现它们存在的差别相当明显,尤其是它们对离子注入工作造成的影响在图 13 至图 15 得到体

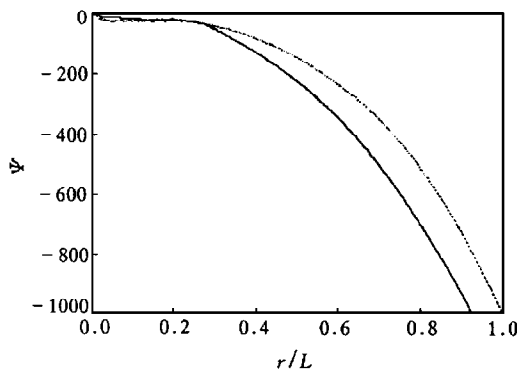


图 12 $U_k = -1000\text{ V}$, $B_0 = 0.08\text{ T}$ 时电势分布 实线为考虑二次电子;虚线为不考虑二次电子

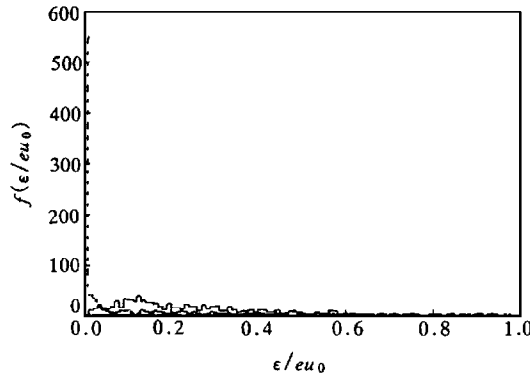


图 13 图 12 对应的靶上能量分布 实线为不考虑二次电子;虚线为考虑二次电子

现:由于“屏蔽区”的形成,鞘层内电场被“吃”掉一部分,导致高能粒子的减少,以及散射角的增大,这是对注入工作不利的一面.然而,又应该看到由于引进稳定磁场起到对二次电子发射进行约束的所谓“磁隔离”带来的有利的一面,即把二次电子约束在“屏蔽区”内,能够避免由于大量二次电子发射产生的 X 射线带来的危害,以及抑制系统额外用于提供的二次电流造成的消耗,从而提高了系统的效率.总之,计算结果表明,高能离子撞击靶表面

将打出大量的二次电子,二次电子对鞘势的影响是一个不容忽视的因素。

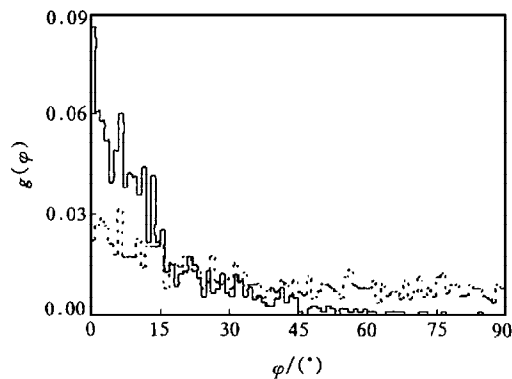


图 14 图 12 下靶上 φ 角分布 图注同图 13

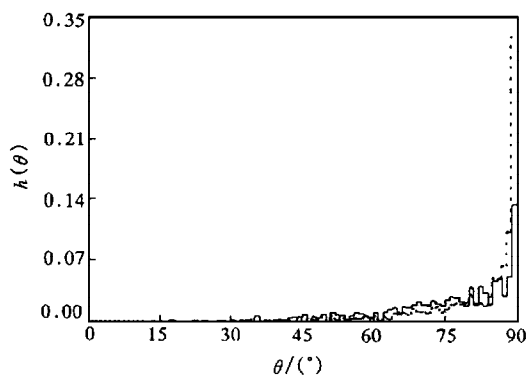


图 15 图 12 下靶上 θ 角分布 图注同图 12

[1] 宁兆元等, 物理学进展, **12**(1992), 38.
 [2] Makarem A. Hussein, G. A. Emmert, *J. Vac. Sci. Technol.*, **A8**(1990), 2913.
 [3] Makarem A. Hussein, G. A. Emmert, *J. Appl. Phys.*, **72**(1992), 1720.
 [4] 韩俊波等, 物理学报, **45**(1996), 428.
 [5] D. J. Rej and B. P. Wood, *J. Vac. Sci. Technol.*, **B12**(1994), 861.
 [6] 王德真等, 计算物理, **12**(4)(1992), 483.
 [7] 裴鹿成、张孝泽, 蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用(科学出版社, 北京, 1980), 第 168; 532 页.

NUMERICAL STUDY OF ION TRANSPORT IN ECR MICROWAVE PLASMA WITH A CYLINDER MODEL

GONG YE WEN XIAO-JUN ZHANG PENG-YUN DENG XIN-LU

(Department of Physics, Dalian University of Technology, Dalian 116024)

(Received 3 June 1997)

ABSTRACT

In this paper, we use the Monte-Carlo method to simulate the complete course, in which the ions pass through the neutral, sheath, and the shield regions of a virtual cathode formed by the secondary electrons near the workpiece surface, and finally are absorbed by the surface of the workpiece with negative bias in ECR microwave plasma. The nonlinear cylinder Poisson equations is solved successfully with "trial" method, and the smoothed and self-limits spectrum of potential and distributions of energy and angle at the surface of workpiece are obtained. The magnetic filed, gas pressure and secondary effects on the potential of sheath are also discussed.

PACC: 5240K; 5265