

重粒子在阴极鞘层中输运的理论模型*

王德真[†] 马腾才

(大连理工大学物理系, 三束材料改性国家重点实验室, 大连 116024)

(2000 年 1 月 18 日收到, 2000 年 6 月 20 日收到修改稿)

建立了重粒子在阴极鞘层中输运的理论模型, 推导出离子、中性粒子入射阴极表面速度分布函数和到达阴极的离子流、中性粒子流的解析表达式. 理论结果与蒙特-卡罗模拟相一致.

关键词: 阴极鞘层, 重粒子输运, 理论模型

PACC: 5240K, 5265

1 引 言

等离子体表面加工是大规模集成电路制造的关键工艺, 也被广泛应用于金属材料表面改性领域中. 在工件表面的阴极鞘层中, 离子被鞘层电场加速, 然而, 被加速的离子能和中性粒子发生电荷交换碰撞. 当碰撞发生后, 原来的离子变成快速中性粒子, 而原来的中性粒子变成新的离子, 又开始被电场加速. 最后, 离子和快速中性粒子轰击阴极表面. 离子、中性粒子入射工件表面的速度分布和束流密度直接联系着等离子体与材料表面的相互作用过程, 它们决定了等离子体表面加工的产量与质量.

由理论和蒙特-卡罗模拟方法研究离子入射阴极表面的能量或速度分布已有很多报道^[1-5]. 研究快速中性粒子入射阴极表面的能量分布还仅限于蒙特-卡罗模拟^[6-9]. 本文将建立理论模型, 推导离子、中性粒子入射阴极表面速度分布的解析表达式, 计算到达阴极的离子流和中性粒子流, 并进行分析比较.

2 理论模型

2.1 基本假设

1) 鞘层中离子密度的空间分布是均匀的, 直流辉光放电的实验诊断表明鞘层中离子密度分布近似

均匀分布^[10];

2) 电荷交换是离子与中性粒子碰撞的主要机理;

3) 由电荷交换碰撞产生的快速中性粒子, 在到达阴极之前, 不发生碰撞.

2.2 鞘层中的场分布

设鞘层内离子密度分布均匀 $n_i = n_s$, 略去电子密度 $n_e = 0$, 在一维平板几何, 由高斯定理

$$\frac{dE}{dx} = \frac{en_s}{\epsilon_0}, \quad (1)$$

从鞘层边界 s 到鞘层内任意位置 x , 积分方程(1), 利用边界条件 $E(s) = 0$, 得到电场分布

$$E(x) = \frac{en_s}{\epsilon_0}(x - s). \quad (2)$$

鞘层中的电势分布

$$\phi(x) = -\frac{en_s}{2\epsilon_0}(x - s)^2. \quad (3)$$

由边界条件 $\phi(0) = -V_0$, 能确定鞘层中离子密度

$$n_s = \frac{2\epsilon_0 V_0}{es^2}, \quad (4)$$

其中 V_0 是阴极所加负电压幅值, x 是离阴极的距离. (2)式给出鞘层中电场空间分布是线性的, 这与实验诊断结果基本一致^[11].

2.3 鞘层中离子速度分布

为了计算离子在鞘层中的速度分布函数, 这里用到了与文献[5]类似的方法. 离子在鞘层中, 受到

* 国家自然科学基金(批准号: 19875006 和 19835030)和高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 98014109)资助的课题.

[†]E-mail: wangdez@dlut.edu.cn

电场的加速,其运动方程为

$$\frac{du}{dt} = \frac{2eV_0}{Ms^2}(x-s), \quad (5)$$

其中 u 是离子速度, M 是离子质量. 设在 x_0 点, 离子与中性粒子发生电荷交换碰撞, 新产生的离子在电场中加速. 假设离子从 x_0 到 x 不发生碰撞, 积分方程 (5), 得到离子到达 x 点的速度

$$u^2 = \frac{u_m^2}{s^2}[(x^2 - x_0^2) - 2s(x - x_0)], \quad (6)$$

其中

$$u_m = (2eV_0/M)^{1/2} \quad (7)$$

是离子到达阴极的最大速度.

由粒子数守恒, 在鞘层中 x 点, 离子速度分布函数 $f(u, x)$ 由下面关系式确定:

$$f(u, x) du = \frac{1}{\lambda_i} \exp\left[-\frac{(x_0 - x)}{\lambda_i}\right] dx_0, \quad (8)$$

其中 λ_i 是离子平均自由程. 方程 (8) 等号左边表示在 x 点离子速度在 u 到 $u + du$ 区间的概率. 方程 (8) 等号右边表示离子由 x_0 到 $x_0 + dx_0$ 区间运动到 x 点不遭受电荷交换碰撞的概率. 对 x_0 微分 (6) 式并代入 (8) 式, 得到离子在鞘层中的速度分布函数

$$f(u, z) = \frac{s^2 u}{\lambda_i z u_m^2 \left(1 - \frac{u^2 s^2}{u_m^2 z^2}\right)^{1/2}} \cdot \exp\left\{-\frac{z}{\lambda_i} \left[1 - \left(1 - \frac{u^2 s^2}{u_m^2 z^2}\right)^{1/2}\right]\right\} \quad (9)$$

其中 $z = s - x$ 是鞘层与等离子体的边界到鞘层内 x 点的距离. 对于较大的 z 值, 离子的速度分布函数能被近似写成

$$f(u, z) = \frac{s^2 u}{\lambda_i z u_m^2} \exp\left(-\frac{s^2 u^2}{2\lambda_i z u_m^2}\right). \quad (10)$$

2.4 中性粒子的速度分布函数

电荷交换碰撞产生快速中性粒子, 快速中性粒子的速度等于碰撞前离子的速度. 由于快速中性粒子与中性粒子碰撞截面比较小, 这里假设了快速中性粒子到达阴极前, 不发生碰撞. 利用鞘层中离子的速度分布函数, 能得到入射阴极的快速中性粒子速度分布函数的关系式

$$f_n(u, s) = \frac{\lambda_i}{s} \int_0^s f(u, z) \frac{dz}{\lambda_i}, \quad (11)$$

其中 dz/λ_i 是在线元 dz 中发生电荷交换碰撞的概率, s/λ_i 是离子穿过鞘层遭受的平均电荷交换碰撞次数. 将 (10) 式代入 (11) 式, 得到

$$f_n(u, s) = \frac{su}{\lambda_i u_m^2} E_1\left(\frac{su^2}{2\lambda_i u_m^2}\right), \quad (12)$$

其中 $E_1(x) = \int_1^\infty \frac{1}{t} \exp(-xt) dt$ 是指数的积分^[12].

2.5 入射阴极的离子流和中性粒子流

由 (10) 式取 $z = s$, 得到离子入射阴极的速度分布函数

$$f(u, s) = \frac{su}{\lambda_i u_m^2} \exp\left(-\frac{su^2}{2\lambda_i u_m^2}\right). \quad (13)$$

利用 (13) 式, 得到离子入射阴极的平均速度

$$\bar{u}_i = \left(\frac{\pi\lambda_i}{2s}\right)^{1/2} u_m. \quad (14)$$

入射阴极的离子流密度为

$$J_i = n_s \bar{u}_i = \left(\frac{\pi\lambda_i}{2s}\right)^{1/2} n_s u_m. \quad (15)$$

将 (4) 和 (7) 式代入 (15) 式, 得到

$$J_i = \epsilon_0 \left(\frac{4\pi\lambda_i}{eM}\right)^{1/2} \frac{V_0^{3/2}}{s^{5/2}}. \quad (16)$$

(16) 式给出了离子流密度与鞘层厚度、阴极负偏压幅值和离子平均自由程的关系.

考虑到快速中性粒子是由在鞘层中加速的离子与中性粒子发生电荷交换碰撞而产生, 并且在到达阴极之前不发生碰撞, 则入射阴极的快速中性粒子流密度由下式确定:

$$J_n = n_s \int_0^s \int_0^{u_m} u f(u, z) du \frac{dz}{\lambda_i} = n_s \frac{s}{\lambda_i} \int_0^s u f_n(u, s) du. \quad (17)$$

将 (12) 式代入 (17) 式, 完成积分, 得到

$$J_n = \left(\frac{2\pi s}{9\lambda_i}\right)^{1/2} n_s u_m. \quad (18)$$

将 (4) 和 (7) 式代入 (18) 式, 得到

$$J_n = \frac{4}{3} \epsilon_0 \left(\frac{\pi}{e\lambda_i M}\right)^{1/2} \frac{V_0^{3/2}}{s^{3/2}}. \quad (19)$$

(19) 式给出了到达阴极的快速中性粒子流的密度与鞘层厚度、阴极负偏压幅值和离子平均自由程之间的关系.

3 结果与讨论

图 1 给出了由 (12) 式计算的中性粒子入射阴极

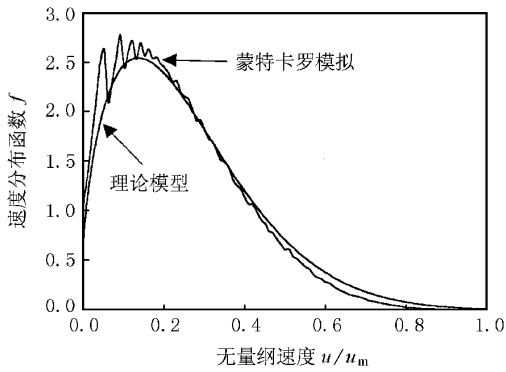


图 1 中性粒子入射阴极速度分布的理论模型与蒙特-卡罗模拟比较 $\lambda_i/s = 0.10$

速度分布函数与蒙特-卡罗模拟结果. 这里离子平均自由程与鞘层厚度的比值 $\lambda_i/s = 0.10$. 由图 1 可以看出, 理论计算与蒙特-卡罗模拟结果是一致的. 图

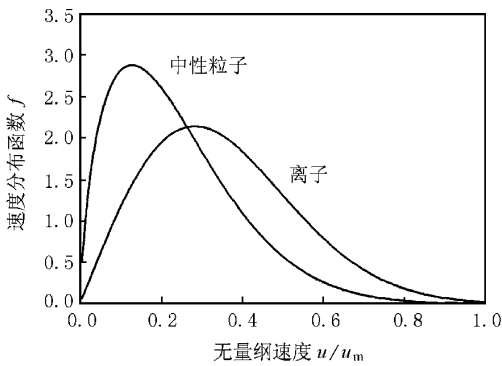


图 2 中性粒子、离子入射阴极的速度分布 $\lambda_i/s = 0.08$

2 给出, 当平均自由程与鞘层厚度比值 $\lambda_i/s = 0.08$ 时, 由(12)和(13)式计算得到的中性粒子和离子到达阴极的速度分布. 图 3 给出, 对于 $\lambda_i/s = 0.40$, 中性粒子和离子入射阴极的速度分布. 比较中性粒子和离子速度分布, 前者的最大值更靠近低速区. 随着比值 λ_i/s 增加, 中性粒子和离子速度分布的最大值都向高速区运动, 这是由于平均自由程增大, 使离子在一个自由程内从鞘层电场中获得更大的能量. 图 4 给出到达阴极中性粒子和离子流密度与比值 λ_i/s 的关系曲线. 当比值 $\lambda_i/s = 2/3$ 时, 中性粒子与离子流密度相等. 当比值 $\lambda_i/s < 2/3$ 时, 中性粒子流密度大于离子流密度; 当比值 $\lambda_i/s > 2/3$ 时, 中性粒子流密度小于离子流. 这可解释为, 随着比值 λ_i/s 的增大, 离子穿过鞘层遭受的电荷交换碰撞次数减少, 碰撞产生的快速中性粒子数目也减少, 使得到达阴极

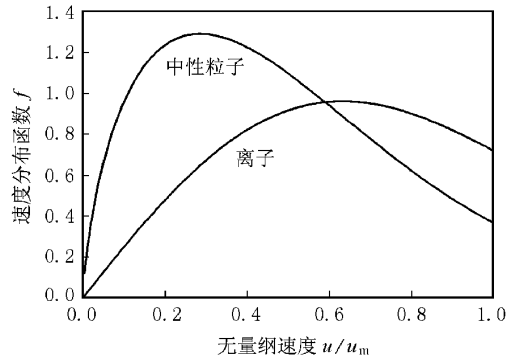


图 3 中性粒子、离子入射阴极的速度分布 $\lambda_i/s = 0.40$

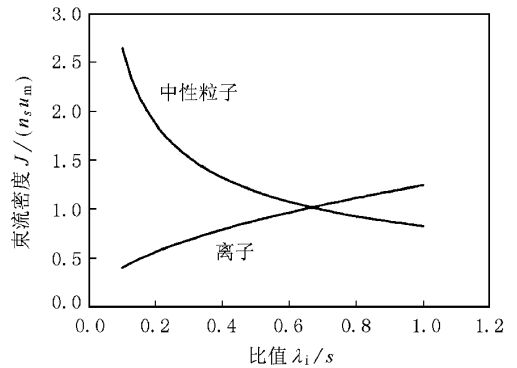


图 4 中性粒子、离子入射阴极的束流密度与比值 λ_i/s 的关系

的中性粒子流密度下降, 同时, 碰撞次数的减少导致离子能量损失降低, 则离子流密度增大.

4 结 论

本文建立离子、中性粒子在阴极鞘层中运输的理论模型, 推导出离子、中性粒子入射阴极表面速度分布函数的解析表达式, 也给出了到达阴极离子、中性粒子流密度公式. 中性粒子入射阴极速度分布函数理论计算结果与蒙特-卡罗模拟比较, 符合得很好. 离子平均自由程与鞘层厚度的比值 λ_i/s 是影响中性粒子、离子速度分布函数的重要参量. 随着比值 λ_i/s 增大, 中性粒子、离子速度分布的最大值向高速区移动. 比值 λ_i/s 也决定了到达阴极中性粒子、离子流密度. 对于 $\lambda_i/s < 2/3$, 中性粒子流密度大于离子流密度; 对于 $\lambda_i/s > 2/3$, 中性粒子流密度小于离子流密度.

- [1] G. H. Wannier, *Statistical Physics* (Wiley, New York, 1966), p. 462.
- [2] J. E. Lawler, *Phys. Rev.*, **A32**(1985) 2977.
- [3] D. Z. Wang, T. C. Ma, Y. Gong, *J. Appl. Phys.*, **73**(1993), 4171.
- [4] D. Z. Wang, T. C. Ma, X. L. Deng, *J. Vac. Sci. Technol.*, **B12**(1994) 905.
- [5] V. Vahedi, M. A. Lieberman, M. V. Alves, J. P. Verboncoeur, C. K. Birdsall, *J. Appl. Phys.*, **69**(1991) 2008.
- [6] J. Pelka, M. Weiss, W. Hoppe, D. Mewes, *J. Vac. Sci. Technol.*, **B7**(1989) 1483.
- [7] J. I. Ullacia J. P. McVittie *J. Appl. Phys.*, **65**(1989) 1484.
- [8] A. Manenschijn, W. J. Goedheer, *J. Appl. Phys.*, **69**(1991), 2923.
- [9] J. Janes, K. Bornig, *J. Appl. Phys.*, **73**(1993) 2724.
- [10] M. N. Hirsh, H. J. Oskam, *Gaseous Electronics* (Academic, New York, 1978), Vol. I.
- [11] E. A. Den Hartog, D. A. Doughty, J. E. Lawler, *Phys. Rev.*, **A38**(1988) 2471.
- [12] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1964), p. 228.

THEORETICAL MODEL FOR THE HEAVY PARTICLE TRANSPORT IN A CATHODE SHEATH*

WANG DE-ZHEN MA TENG-CAI

(State Key Laboratory of Materials Modification by Laser, Ion and Electron Beams,
Department of Physics, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

(Received 18 January 2000; revised manuscript received 20 June 2000)

ABSTRACT

A theoretical model for studying the heavy particle transport in a cathode sheath is developed. The velocity distribution functions near a planar cathode are deduced. The expressions for neutral and ionic fluxes of neutral and ionic particles near a planar cathode are also obtained. The result predicated by the theoretical model is in accordance Monte Carlo simulation.

Keywords : cathode sheath, heavy particle transport, theoretical model

PACC : 5240K, 5265

*Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 19875006 and 19835030) and by the Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education of China (Grant No. 98014109).