

电子回旋共振等离子体源的数值模拟*

刘明海¹⁾²⁾ 胡希伟²⁾ 邬钦崇¹⁾ 俞国扬¹⁾

¹⁾中国科学院等离子体物理研究所,合肥 230031)

²⁾中国科学技术大学近代物理系,合肥 230026)

(1999 年 7 月 23 日收到)

采用自洽微波功率吸收的二维混合模型,对电子回旋共振等离子体源中的各种物理参量(电离速率、等离子体密度、位势、电子温度)进行数值模拟.结果表明,等离子体参数随运行条件(中性气压和微波功率)变化呈现出区域特征、饱和现象和振荡行为等非线性现象.

PACC: 5265; 5250; 5235

1 引 言

近年来微波电子回旋共振(ECR)等离子体已成功地运用于表面处理、刻蚀、薄膜制备等微电子工业应用中^[1,2].由于 ECR 等离子体是一个非线性的电介质,在其中往往发生众多的非线性现象,这些非线性现象将使等离子体的阻抗发生变化,导致波和等离子体之间的阻抗失配,引起等离子体参数的自生振荡,从而使得大规模生产等离子体工艺产品的质量难于得到有效的控制.因此,ECR 等离子体工艺中非线性现象的机理研究近年来显得异常活跃. Aydil 等人^[3]对 ECR 等离子体实验中的磁滞效应、多稳现象进行了详细分析与报道. Gorbatkin 等人^[4]在磁镜场 ECR 系统中观察到等离子体模式跳跃. Bowden^[5]和 Ghanbar^[6]的实验表明电子温度随微波功率的增加并非单调增加.姚鑫兹等人^[7]在实验中观察到准周期和锁频以及等离子体的基频振荡突变到四次谐波的现象,并分析了锁频窗内的倍周期分叉.这些研究为有效抑制等离子体工艺中的不稳定性提供了重要依据和有益借鉴.然而在理论研究和数值模拟方面却非常薄弱,且数值模拟大多为一维模型^[8,9],而广为引用的二维计算机模拟程序(混合模型),由于假定中性气体密度的均匀分布以及微波功率吸收的不自洽性,因而难于描述 ECR 等离子体实验中观察到的许多非线性现象.本文对 Porteous 等人^[10]建立的混合模型进行重大改进,将原来

微波的非自洽吸收(吸收不依赖等离子体参数)变为自洽吸收,来模拟 ECR 等离子体源中的各种物理参量(电离速率、等离子体密度、位势和电子温度).结果表明,等离子体参数随运行条件(中性气压和微波功率)变化呈现出区域特征、饱和现象和振荡行为等非线性现象.

2 物理模型

本文对延长型 ECR 等离子体反应器进行了数值模拟,它的源区半径与长度分别为 5 和 18 cm,下游区的半径与长度分别为 8 和 15 cm.源区和下游区的两组线圈产生发散型磁场.共振区位置在轴向位置 9 至 13 cm,基片位于反应器的底部.整个装置除微波介质窗口是绝缘外,其余表面都是导体并且接地,工作气体为氦气.

本文采用的物理模型是自洽微波功率吸收的混合模型,即采用流体模型描述电子行为,粒子模拟跟踪离子行为.由于该模型在文献[10—13]中有过详尽的描述,本文仅叙述它的主要特征.

2.1 电子流体模型

在模型中,电子当作流体处理,它的行为由经典的流体方程(质量守恒、动量守恒和能量守恒)描述.假定电子为麦克斯韦速度分布,考虑沿磁力线方向的运动,则稳态时,连续性方程为

$$\nabla \cdot j_{e//} = R_{\text{ion}}(T_e, m_0, m_e), \quad (1)$$

*国家自然科学基金(批准号 69493500 和 19805008)及中国博士后科学基金(批准号 9-1998)资助的课题.

能量方程为

$$\nabla \cdot \mathbf{Q}_{e//} = e j_{e//} \cdot \mathbf{E} + P_{\text{ECR}} - P_{\text{coll}}, \quad (2)$$

式中 $j_{e//}$ 为平行磁场方向的电子流密度, R_{ion} 为电离率, 它为电子温度 T_e 、中性气体密度 n_0 和电子密度 n_e 的函数, $\mathbf{Q}_{e//}$ 为平行磁场方向的能量流, P_{coll} 为对应各种碰撞过程所引起的能量损失. 假定主要的碰撞过程是电离、共振激发、亚稳态和弹性损失,

$$P_{\text{coll}} = \sum_{i=1}^{NP} R_i E_i = k_{\text{ion}} n_n n_e E_{\text{ion}} + k_{\text{en}}(T_e) n_n n_e E_{\text{ex}} + k_m n_n n_e E_m + k_{\text{elas}} n_n n_e E_{\text{elas}},$$

式中 E_i 为各种碰撞过程中对应每个电子的能量损失, R_i 为第 i 种过程的速率 ($\text{m}^3 \text{s}^{-1}$), P_{ECR} 为微波功率的吸收剖面, 在以前的模型中^[10-13], 它是假定为仅依赖于磁场位形的函数形式, 与等离子体参数变化无关, 因而是非自洽的. 这里将它修改为自洽吸收形式^[14]:

$$P_{\text{ECR}} = \text{Im} \left\{ 2 \frac{\omega_p^2}{k_{//}^2 \nu_T^2} \epsilon_0 \left[1 + \frac{\omega}{k_{//} \nu_T} Z_p \left(\frac{\omega}{k_{//} \nu_T} \right) \right] \right\} |E_z|^2 + \text{Im} \left[\sqrt{2} \epsilon_0 \frac{\omega_p^2}{k_{//} \nu_T} Z_p \left(\frac{\omega + \omega_c}{k_{//} \nu_T} \right) \right] |E_-|^2 + \text{Im} \left[\sqrt{2} \epsilon_0 \frac{\omega_p^2}{k_{//}^+ \nu_T} Z_p \left(\frac{\omega - \omega_c}{k_{//}^+ \nu_T} \right) \right] |E_+|^2,$$

式中的三项分别对应朗道阻尼、反常多普勒阻尼和 ECR 阻尼吸收部分, 其中 ϵ_0 , ν_T , ω , ω_p , ω_c 分别为介电常数、电子热速度、微波频率、等离子体频率和电子回旋频率, E_z 为微波电场的纵向分量, E_- , E_+ 为左、右旋波的电场强度, $k_{//}$, $k_{//}^-$ 和 $k_{//}^+$ 为它们各自对应的波矢, 这些参数与微波模式、等离子体状态密切相关. 以上两个方程通过泊松方程

$$\epsilon_0 \nabla^2 \phi = e(n_e - n_i), \quad (3)$$

耦合构成方程组.

2.2 离子粒子模型

模型中的离子来源于电子与中性气体的碰撞电离, 把它们当作单粒子处理, 其行为可采用蒙特卡洛方法, 在二维位形空间和三维速度空间 $2D(r, z)$ $3V(V_r, V_\theta, V_z)$ 中进行粒子模拟. V_θ 之所以保留下来, 是由于径向力 $\mathbf{V}_\theta \times \mathbf{B}$ 的存在及它对总能量有贡献. 主要考虑离子与中性原子之间的碰撞(电荷交换)碰撞产生的离子具有与之相碰撞的中性原子的温度和热运动速度, 通过电离产生的离子具有背景气体温度和麦克斯韦速度分布.

2.3 边界条件

对电子连续方程和能量方程, 采用通量边条件较为合适. 假定在等离子体边界上具有麦克斯韦电子速度分布, 则电子到器壁处的通量为

$$j_{\text{ew}} = 1/4 n_{\text{es}} v_{\text{es}} \exp(-e\Delta\phi/kT_{\text{es}}),$$

同理, 电子的能量通量为

$$Q_{\text{ew}} = kT_{\text{es}} j_{\text{ew}} (2 + e\Delta\phi/kT_{\text{es}}),$$

式中 v_{es} 为电子在鞘层边缘及器壁处的热运动速度, T_{es} , n_{es} 为鞘层边缘处的电子温度、密度, $\Delta\phi$ 为鞘层与器壁之间的位势差. 忽略鞘层中的微细结构即认为鞘层非常之薄, 这样对无碰撞鞘层, 位势差 $\Delta\phi$ 的幅度大小决定了等离子体与器壁相互作用的三个方面: 电子流密度、电子能量流大小以及离子到器壁的能量.

整个模型由电子流体和离子粒子模拟两部分组成, 只要从粒子模拟中求得空间各点包括边界的离子密度分布, 那么在鞘层边缘处的电子密度便可从电中性度求出, 从而利用流体方程进行反复叠代求解.

3 数值结果与讨论

图 1 为 TE 模的电离速率轴向分布随微波功率的变化. 可见, 当功率低时, 电离速率是功率的递增

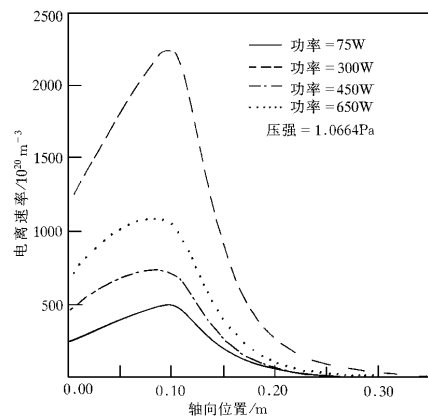


图 1 电离速率轴向分布随微波功率的变化 (TE 模)

函数, 但到了某一值之后, 电离速率随功率的上升出现戏剧性振荡变化. 例如功率从 75 到 300 W 时, 电离速率随功率的上升而上升, 之后电离速率随功率

的上升而下降,增加到 450 W 时,电离速率又开始随功率的上升而上升.

图 2 为 TM 模的等离子体位势随中性气压和微波功率的变化.与非自洽情形一样,等离子体位势随中性气压的下降而上升,但随微波功率的上升出现饱和现象,无论气压大小,在微波功率低时,等离子体位势随功率的上升而上升,当功率达到 150 W 时,等离子体位势随功率的上升而有所下降,之后出现饱和现象.由此可以推断,当功率上升到一定量以后,离子能量对微波功率的依赖性很弱,因为离子获得能量的主要途径是靠等离子体空间位势的加速(需要说明的是,这里说的离子能量是针对某一空间位置的,并非是离子的轰击能量,因为它还需考虑鞘层位势的作用).

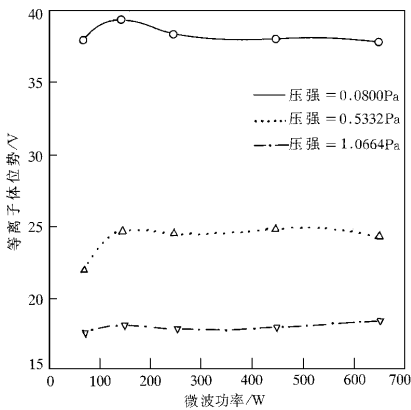


图 2 等离子体位势随中性气压和微波功率的变化(TM 模)

图 3 为 TE 模在中性气压为 1.066 Pa 时,等离子体密度随微波功率的变化.其变化特征可以划分三个区域:第一区域,在微波功率低时,密度随功率的上升而线性上升;第二区域,等离子体密度随功率的上升而缓慢上升;第三区域,等离子体密度随功率的上升而快速上升,上升的速率要高于第一区域.这些变化特征与文献 15 的描述非常类同,只是区域特征略有差别.

图 4 为 TM 模在微波功率为 450 W 时,等离子体密度随中性气压的变化.可以看出,在低气压时,等离子体密度随气压的上升而增大;在高气压时,则随气压的上升而减小,亦即等离子体密度在中等气压时达到极值.这一数值结果定性上与许多实验测量^[16,17]符合很好.

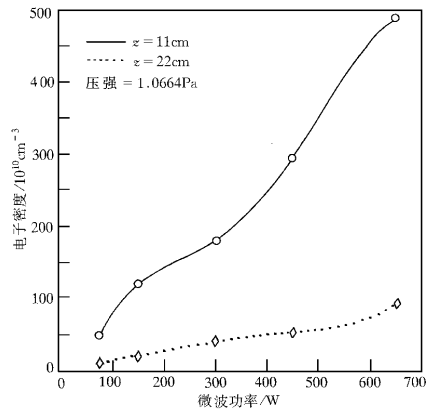


图 3 等离子体密度随微波功率的变化(TE 模)

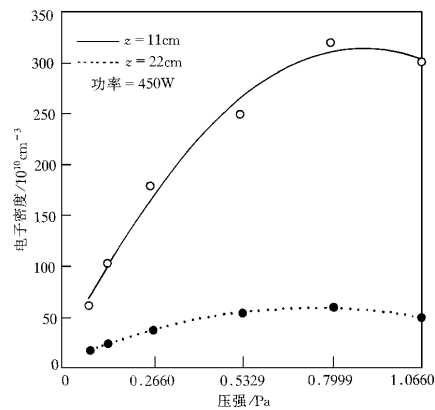


图 4 等离子体密度随中性气压的变化(TM 模)

图 5 为 TM 模在功率为 450 W 时电子温度随气压的变化.在低气压时,电子温度均随气压的上升而下降;在高气压时,电子温度随气压的上升出现振荡变化,但总趋势仍然是下降.此外,数值计算还表明,在微波功率低时,电子温度随气压的上升而下降;在微波功率高时,在高气压端,电子温度随气压的上升出现振荡变化,而且微波功率越高,出现振荡变化时对应的压强值越小.

图 6 为 TM 模在中性气压为 1.066 Pa 时,电子温度随微波功率的变化.由图 6 可见,电子温度随功率的上升出现振荡变化,但电子温度随功率的上升总趋势也上升;此外,我们的数值计算还表明,无论气压高低,电子温度随功率的上升均伴有振荡行为,

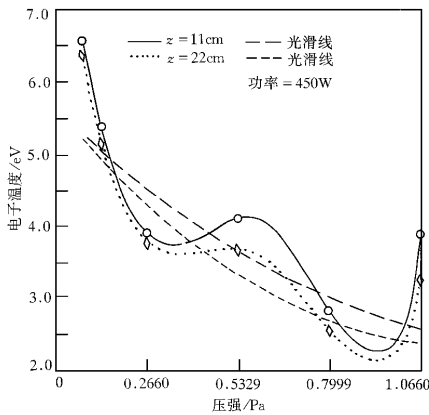


图5 电子温度随中性气压的变化(TM模)

在气压低时,电子温度随功率的上升总趋势下降,而在高压时,总趋势上升.这种电子温度随功率的变化出现振荡行为是以前任何模型均未预言和刻划的,然而它确实被实验的诊断测量所证实^[5,6,18].

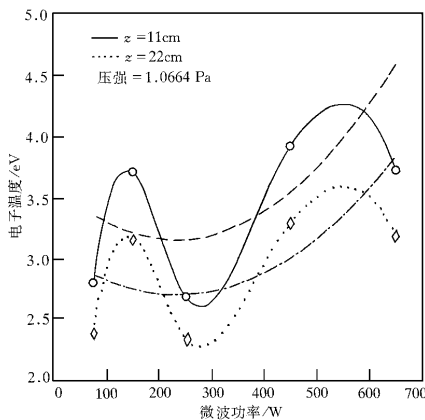


图6 电子温度随微波功率的变化(TM模)

欲想完全理解等离子体参数随运行条件(中性气压和微波功率)变化而出现的这些非线性行为(区域特征、饱和现象和振荡行为)相当困难,也是今后工作的主要课题之一.从现有的研究结果来看,可以从以下几方面来考虑:1)共振区域的微波电场随运行参数的变化是高度非线性的,对于在怎样的运行参数下出现何种微波功率吸收剖面,目前尚无定论;2)电子温度是一个重要的参量,因为许多物理量如电子迁移率、电离速率和各种损失速率,均是依赖于

电子温度的函数,而微波功率吸收剖面对电子温度有重要的影响^[14],当运行条件(中性气压和微波功率)变化时,同一位置的功率吸收剖面的移动将导致电子温度的振荡变化.正是由于电子温度的振荡变化,导致了ECR等离子体参数的非线性变化行为.例如,在决定等离子体密度的方程中,主要存在两个竞争因素:电离和损失.显然,电离速率的上升会导致等离子体密度的增大,而各种损失机制(与中性原子的碰撞损失以及到器壁的碰撞损失)将使等离子体密度减小;由于电子温度的振荡变化,电离和损失并非匹配地变化,因此等离子体密度随中性气压和微波功率的变化将出现区域特征.

4 结 论

本文采用自洽微波功率吸收的二维混合模型,对ECR等离子体源中的各种物理参量(电离速率、等离子体密度、位势和电子温度)进行数值模拟,结果表明:

1. 当功率低时,电离速率是功率的递增函数,但到了某一值之后,电离速率随功率的上升出现振荡变化.
2. 等离子体位势随中性气压的下降而上升,随微波功率的上升出现饱和现象.
3. 等离子体密度随微波功率的上升而增加,其变化呈现区域特征.在低气压时,等离子体密度随气压的上升而增大;在高压时,则随气压的上升而减小.
4. 在低气压时,电子温度均随气压的上升而下降;在高压时,电子温度随气压的上升出现振荡变化.此外,在微波功率低时,电子温度随气压的上升而下降;在微波功率高时,在高压端,电子温度随气压的上升出现振荡变化,而且微波功率越高,出现振荡变化时对应的压强值越小.
5. 无论气压高低,电子温度随微波功率的上升均伴有振荡行为,在气压低时,电子温度随功率的上升总趋势下降,而在高压时,总趋势上升.

作者之一感谢中国科学技术大学詹如娟教授的支持和鼓励.

- [1] J. Asmussen *et al.*, *J. Vac. Sci. Technol.*, **A7**(1989) 883.
 [2] 宁兆元、任兆杏, *物理学进展*, **12**(1992), 38 [Z. Y. Ning, Z. X. Ren, *Progress in Physics*, **12**(1992) 38 (in Chinese)].

- [3] E. S. Aydil ,J. A. Gregus ,R. A. Gottscho ,*J. Vac. Sci. Technol.* , **A11**(1993) 2883.
- [4] S. M. Gorbalkin ,L. A. Berry ,J. B. Roberto ,*J. Vac. Sci. Technol.* , **A8**(1990) 2893.
- [5] M. D. Bowden ,T. Okamoto ,F. Kimura *et al.* ,*J. Appl. Phys.* , **73**(1993) 2732.
- [6] E. Ghanbari ,I. Trigor ,T. Nguyen ,*J. Vac. Sci. Technol.* , **A7**(1989) 918.
- [7] R. A. Dandl ,G. E. Guest ,*J. Vac. Sci. Technol.* , **A9**(1991) , 3119.
- [8] P. W. Lee ,S. W. Lee ,H. Y. Chang ,*Appl. Phys. Lett.* , **69**(1996) 2024.
- [9] P. K. Porteous ,D. B. Graves ,H. M. Wu ,*Plasma Source Sci. Technol.* , **3**(1994) 25.
- [10] D. B. Graves ,H. M. Wu ,R. K. Porteous ,*Jpn. J. Appl. Phys.* , **32**(1993) 2999.
- [11] 刘明海、胡希伟、吴汉明 核聚变与等离子体物理 ,**18**(1998) , 36 [M. H. Liu ,X. W. Hu ,H. M. Wu ,*Nuclear Fusion and Plasma Phys.* , **18**(1998) 36 (in Chinese)].
- [12] H. M. Wu ,D. B. Graves ,M. Kilgore ,*Plasma Source Sci. Technol.* , **6**(1997) 231.
- [13] M. H. Liu ,X. W. Hu ,H. M. Wu ,*J. Appl. Phys.* , **81**(1997) , 7734.
- [14] 刘明海 博士学位论文 中国科学技术大学(合肥 ,1997) [Liu Ming-hai ,Ph. D. Thesis ,University of Science and Technology of China (Hefei ,1997) in Chinese].
- [15] O. A. Popov in " Physics of Thin Films " edited by M. H. Francombe ,J. L. Vossen (Academic Press ,New York ,1994).
- [16] T. D. Mantei ,T. E. Ryle ,*J. Vac. Sci. Technol.* , **B9**(1991) , 29.
- [17] J. L. Cecchi ,J. E. Stevens ,R. L. Jareki *et al.* ,*J. Vac. Sci. Technol.* , **B9**(1991) 318.
- [18] C. A. Outten ,J. C. Barbour ,W. R. Wampler ,*J. Vac. Sci. Technol.* , **A9**(1991) 711.

NUMERICAL SIMULATION OF AN ELECTRON CYCLOTRON RESONANCE PLASMA SOURCE *

LIU MING-HAI^{1,2)} HU XI-WEI²⁾ WU QIN-CHONG¹⁾ YU GUO-YANG¹⁾

¹⁾ Institute of Plasma Physics ,Chinese Academy of Sciences ,Hefei 230031)

²⁾ Department of Modern Physics ,University of Science and Technology of China ,Hefei 230026)

(Received 23 July 1999)

ABSTRACT

Using a two-dimensional hybrid-model with self-consistent microwave absorption ,the variations of plasma parameters such as ionization rate ,plasma density ,plasma potential and electron temperature with operation conditions were studied. Results of simulation show that nonlinear phenomena such as region character ,saturation and oscillation of plasma parameters can be developed when the operation conditions (pressure ,power) were changed.

PACC : 5265 ; 5250 ; 5235

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 69493500 and 19805008) and the Postdoctoral Science Foundation of China (Grant No. 9-1998).