

空心圆管端点附近等离子体源离子注入过程中 鞘层的时空演化*

刘成森 王德真

(大连理工大学物理系, 三束材料改性国家重点实验室, 大连 116023)

(2002 年 3 月 22 日收到 2002 年 4 月 27 日收到修改稿)

等离子体源离子注入过程中, 鞘层的演化规律直接影响到离子注入到材料中的深度进而影响材料表面的性质和结构, 对材料的不同部位这种影响是不同的. 利用无碰撞二维流体动力学模型, 研究了有限上升时间的电压脉冲作用下, 共轴放置附加零电极的半无限空心圆管端点附近等离子体源离子注入过程中, 鞘层的时空演化规律. 通过计算得到了鞘层内随时间变化的电势分布和离子密度分布, 计算了端点附近材料表面处的离子流密度分布和注入剂量分布随时间的变化规律. 计算机模拟结果显示了空心圆管内部、外部及端点表面处的离子流密度分布和注入剂量分布存在很大差异.

关键词: 等离子体源离子注入, 鞘层, 流体模型, 离子密度, 离子注入剂量

PACC: 5220, 5240H, 5240K, 5265, 5275

1. 引 言

等离子体源离子注入(PSII)^[1]是一种有效的离子注入技术. 利用这一技术可以改变材料表面性能, 例如可以增加材料的耐摩擦性能, 提高材料的防腐蚀能力, 也可以在材料表面形成化合物及对半导体材料进行掺杂等. 在等离子体源离子注入过程中, 工件被放入一个低气压等离子体中, 当一个负高压脉冲施加到工件上时, 在电子等离子体频率的倒数 ω_{pe}^{-1} 的时间尺度内, 靠近工件表面的电子被电场驱逐. 在这一时间间隔内, 由于离子质量大, 离子的位置保持不变, 从而在工件表面附近形成一个非电中性的离子鞘层. 工件上所施加的负高压在这一区域里形成一个屏蔽电场. 在离子等离子体频率的倒数 ω_{pi}^{-1} 的时间尺度上, 这一屏蔽电场对鞘层内的离子加速, 使其快速注入物体表面. 随着鞘层中的离子注入到物体中, 鞘层中的离子数目减少了, 不再能屏蔽住电场的作用, 鞘层的边缘就会向外扩展, 从而吸引等离子体中的一些离子进入鞘层, 使离子源源不断地注入到工件中. 等离子体源离子注入技术从根本

上克服了传统离子注入技术所存在的‘视线’限制的缺点. 尤其对一些像工业模具、轴衬、空心管等形状的工件内壁的离子注入, 这一技术显示了独到的应用前景^[2-4].

近年来, 人们对空心圆管内壁的等离子体源离子注入做了很多研究. Sheridan^[5-8]通过解析模型发现了半径为 r_0 的空心圆管内离子鞘层的叠加长度

$$d = \sqrt{-4\epsilon_0 \phi_1 / en_0}, \quad (1)$$

其中 ϕ_1 为工件上所加的负偏压, n_0 是等离子体密度. 对于零上升时间的负高压脉冲, 如果 r_0 小于 d , 相对管壁的鞘层就会叠加, 使得鞘层充满整个空间, 这一类管被称为“小管”. 对于 $r_0 > d$ 的情况, 在空心管的轴心 $r = 0$ 附近存在中性等离子体, 这样的空心管被称为“大管”. Zeng^[9-11]等人提出了在空心圆管轴线处加一个线状零电位电极的方法来增加注入离子的能量, 用一维模型分析了无限长空管中鞘层的演化过程和离子的动力学行为^[12]. 最近 Tian 等人用二维流体模型模拟了零上升时间脉冲作用下圆形平板的鞘层中离子的动力学行为^[13], 并导出了在注入离子作用下引起的平板不同部位温度上升. 本文使用二维 PSII 流体动力学模型, 研究带有附加电

* 国家自然科学基金(批准号: 10176005)资助的课题.

极的半无限长空心圆管端点附近在有限上升时间电压脉冲作用下等离子体鞘层的演化过程,模拟空心圆管内壁、外壁和端点面附近鞘层中离子的动力学行为.工件在有限上升时间电压脉冲作用下的工作条件更符合实际情况,同时零上升时间脉冲的情形可以作为有限上升时间脉冲的一种特例加以研究.

2. 等离子体鞘层的模拟

我们考察一个如图 1 所示的半径为 r_b 的半无限长空心圆管,管壁厚度为 r_t ,轴线上附加零电位电极的半径为 r_a .开始时,空心圆管放置在离子密度 n_i 和电子密度 n_e 都为等离子体密度 n_0 的中性等离子体中,即 $n_i = n_e = n_0$;物体上所施加的电势为零,即在时间 $t = 0$ 时 $\phi = 0$,然后电势随时间沿负方向线形增加,直至达到最大值 ϕ_t .

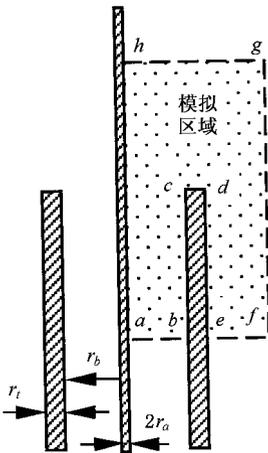


图 1 半无限空心圆管端点及模拟区域示意图

假定在鞘层中离子的运动是无碰撞的,即离子的平均自由程远大于鞘层厚度;离子温度接近中性气体温度,离子只有一个受电场作用下的运动,而电子温度远大于离子温度,因此电子密度 n_e 遵从玻尔兹曼分布

$$n_e = n_0 \exp(\phi / T_e), \quad (2)$$

其中 ϕ 是电势, T_e 是电子温度,单位为 eV.

利用冷离子无碰撞流体模型和泊松方程描述离子密度,离子速度和电势.在柱坐标系下,两维的离子连续性方程和运动方程,泊松方程表述为

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(m_i v_{ir}) + \frac{\partial}{\partial z}(n_i v_{iz}) = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial v_{ir}}{\partial t} + v_{ir} \frac{\partial v_{ir}}{\partial r} + v_{iz} \frac{\partial v_{ir}}{\partial z} = -\frac{e}{m} \frac{\partial \phi}{\partial r}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial v_{iz}}{\partial t} + v_{ir} \frac{\partial v_{iz}}{\partial r} + v_{iz} \frac{\partial v_{iz}}{\partial z} = -\frac{e}{m} \frac{\partial \phi}{\partial z}, \quad (5)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial t} \left(r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = -\frac{e}{\epsilon_0} \left[n_i - n_0 \exp\left(\frac{e\phi}{T_e}\right) \right], \quad (6)$$

其中 m 是离子质量, v_{ir} 是圆管半径方向的速度分量, v_{iz} 是轴向速度分量.

用变量 $R = r/\lambda_D$, $Z = z/\lambda_D$, $\varphi = e\phi/T_e$, $n = n_i/n_0$, $u_R = v_{ir}/v_{is}$, $u_Z = v_{iz}/v_{is}$, $\tau = t\omega_{pi}$, 对方程(3)–(6)作无量纲化处理,其中 $\lambda_D = (\epsilon_0 T_e/n_0 e^2)^{1/2}$ 是德拜长度, $v_{is} = (T_e/m)^{1/2}$ 是离子声速, $\omega_{pi} = (n_0 e^2/m\epsilon_0)^{1/2}$ 是离子等离子体频率.得到如下描述 PSII 鞘层时空演化的方程组

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R}(R n u_R) + \frac{\partial}{\partial Z}(n u_Z) = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\partial u_R}{\partial \tau} + u_R \frac{\partial u_R}{\partial R} + u_Z \frac{\partial u_R}{\partial Z} = -\frac{\partial \varphi}{\partial R}, \quad (8)$$

$$\frac{\partial u_Z}{\partial \tau} + u_R \frac{\partial u_Z}{\partial R} + u_Z \frac{\partial u_Z}{\partial Z} = -\frac{\partial \varphi}{\partial Z}, \quad (9)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial \varphi}{\partial R} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial Z^2} = -[n - \exp(\varphi)]. \quad (10)$$

方程组(7)(8)(9)(10)都是非线性方程.对泊松方程(10)线性化^[14],作如下变换

$$\begin{aligned} \exp(\varphi) &= \exp(\psi) \exp(\varphi - \psi) \\ &\approx (1 + \varphi - \psi) \exp(\psi), \end{aligned} \quad (11)$$

其中 ψ 是前一时刻的电势值, φ 是当前时刻的电势值.忽略高阶项后,方程(10)变为线性方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial \varphi}{\partial R} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial Z^2} - \exp(\psi) \varphi \\ = -[n - \exp(\psi) + \psi \exp(\psi)]. \end{aligned} \quad (12)$$

用有限差分方法对方程组(7)(8)(9)(12)进行求解.初始条件是:在所研究的区域中, $n = 1$ 和 $\varphi = 0$.边界条件是:在管壁 $bcde$ 上, φ 的取值为所施加的无量纲电压值;在附加电极 ah 上和等离子体中, $\varphi = 0$.如果在考察的时间内,等离子体鞘层的扩展范围小于空心圆管在所研究的区域中的长度,那么可以认为在区域下边的两条边界 ab 和 ef 上, $\partial \varphi / \partial Z = 0$.

3. 模拟结果

我们研究的空心圆管如图 1 所示,其半径 $r_b =$

46.0mm, 管壁厚度 $r_t = 4.0\text{mm}$, 附加电极半径 $r_a = 1.0\text{mm}$. 空心圆管放入氩等离子体中, 其密度为 $6.8 \times 10^9 \text{cm}^{-3}$, 电子温度 $T_e = 1.5\text{eV}$. 工件上所加的电势是梯形波, 即在时间 $t = 0$ 时 $\phi = 0$, 随后电势在 $0.25\mu\text{s}$ 内线性地沿负方向增加到最大值 -30kV , 并保持这一值不变, 这一假定与实验室工作条件相符合.

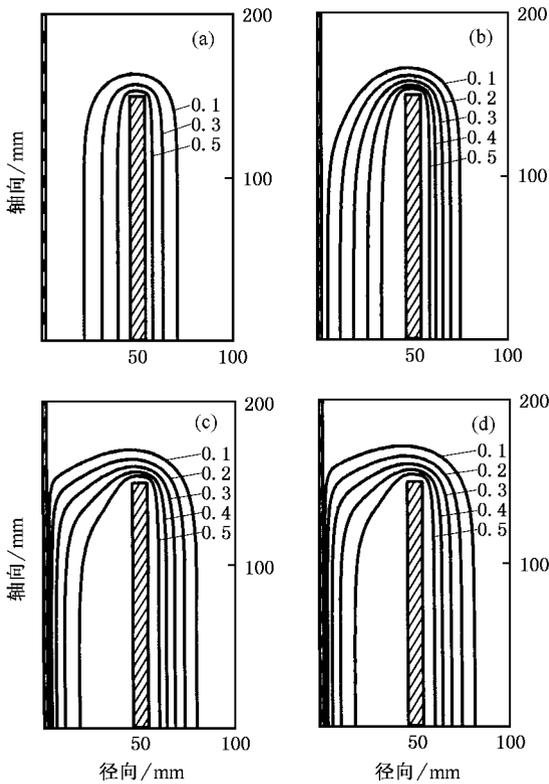


图2 在时刻(a)0.74 (b)1.47 (c)2.95 (d)3.69 μs 时鞘层中的电势分布

当目标加上沿负方向增加的负电压时, 在物体附近就会建立起电场, 电场强度的大小依赖物体的形状和空间电荷分布. 图2是空心圆管端点附近在时间 $t = 0.74, 1.47, 2.95, 3.69\mu\text{s}$ 时的电势分布(其中的电势用 ϕ_i 无量纲化, 即电势/ ϕ_i), 从图中可以看出电势分布是随时间变化的. 由于离子不断地从等离子体进入鞘层并被注入到物体中, 所以鞘层中的电势不断演化并导致鞘层向等离子体中扩展. 同时, 空心管内部进入鞘层的离子数逐渐减少, 而管外部的离子数逐渐增多, 因此管内鞘层扩展的速度比管外要快, 使得管内鞘层边缘很快扩展到轴线的附加电极上; 在端点附近, 鞘层的扩展速度很慢.

图3是相应的以光密度表示的离子密度分布,

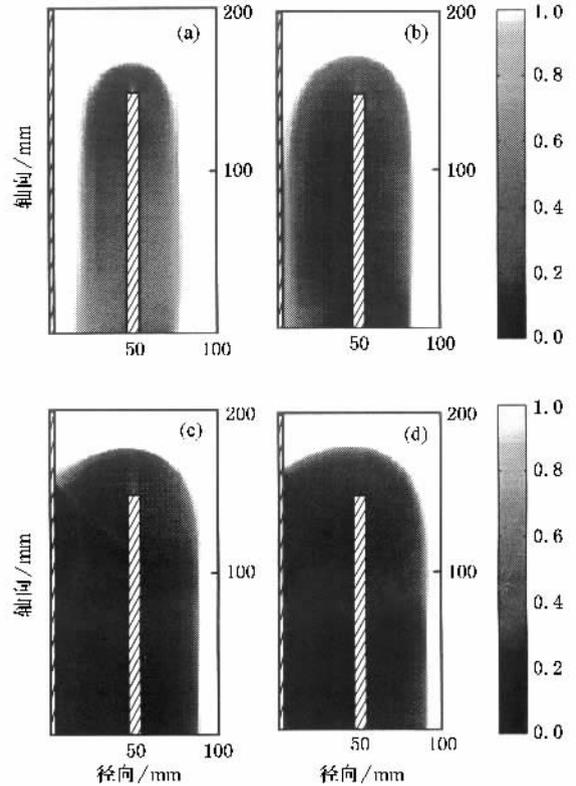


图3 在时刻(a)0.74 (b)1.47 (c)2.95 (d)3.69 μs 时的无量纲离子密度分布

越黑的地方, 离子密度越小. 管壁上加负电压脉冲前, 离子密度分布是均匀的. 加上负电压脉冲后, 在物体附近就会形成离子鞘层. 鞘层中离子的分布是不均匀的, 离靶表面远的点离子密度大. 鞘层中的离子密度分布随时间变化, 总的来说是逐渐减小的. 在管的内部, 离子密度减小的速度要比管的外部快一些, 低离子密度区域逐渐扩大很快充满了管内部, 使得管内壁注入的离子逐渐减少, 直到管内的所有离子全部注入管内壁, 这时离子密度在空心圆管内部处处为零, 不再有离子注入管内壁. 而在端点和管外部, 鞘层仍可以继续向等离子体内部扩展, 仍然有离子注入到管表面上.

在工件表面上的无量纲离子流密度定义为

$$\Gamma = n(u_R^2 + u_Z^2)^{1/2}, \quad (13)$$

对空心圆管而言, 其内表面、外表面及端点表面的三个面上离子流密度分布各不相同并且随时间变化, 图4是这种分布的关系曲线, 横坐标表示从 b 点起沿 bcd 的线段的长度. 从图中可以看出, 远离端点的内表面上离子流密度在整个过程中都是最小的, 外表面次之. 有三个大的离子流密度点存在于端点附近的表面, 其中值最大的点是在端点表面中央, 另

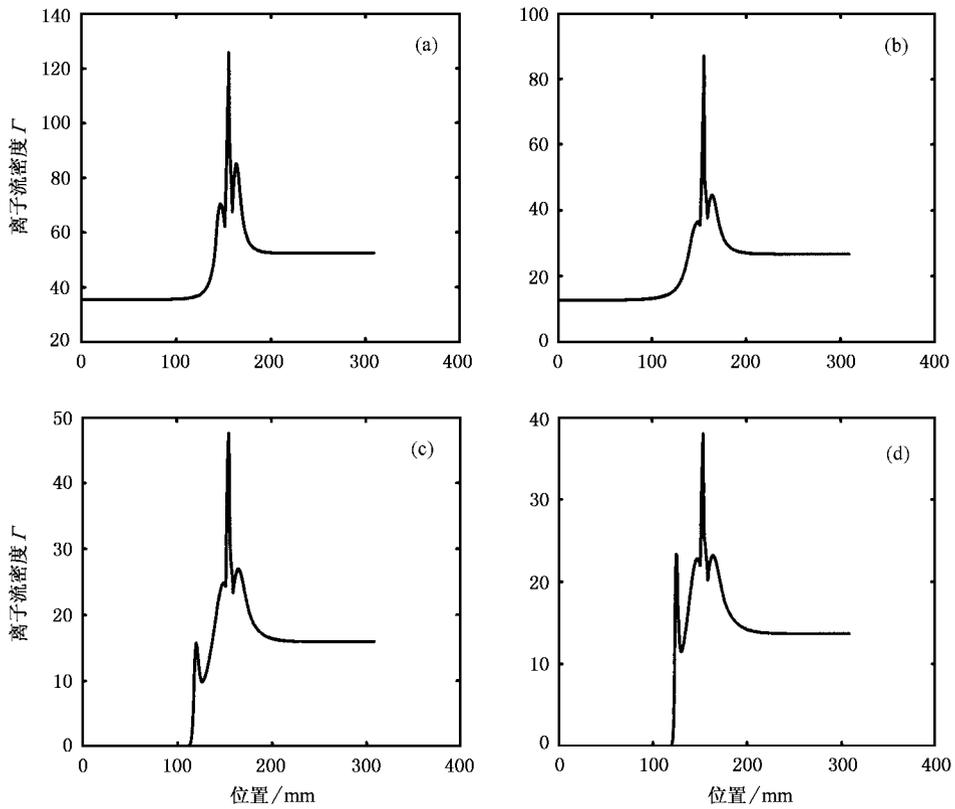


图 4 在时刻 (a) 0.74 (b) 1.47 (c) 2.95 (d) 3.69 μs 时离子流密度分布曲线

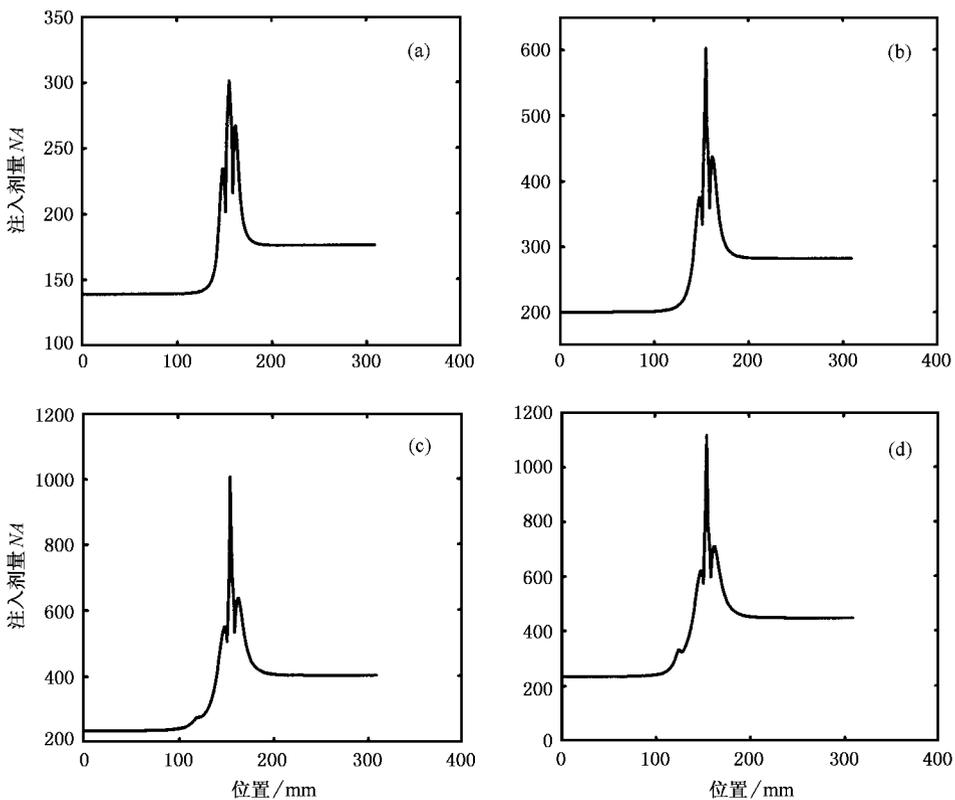


图 5 在时刻 (a) 0.74 (b) 1.47 (c) 2.95 (d) 3.69 μs 时离子注入剂量分布曲线

外两个点分别在靠近端点的内外表面上,内表面上的点的值最小.在所考察的时间脉冲内,三个表面上离子流密度分布都是很快达到最大值然后逐渐降低的.从某一时起,内表面上的离子流密度变为零,这时对应着空心圆管内的离子都被注入到内壁了,以后不再有离子注入现象发生,如图 4(c)和(d)所示.

无量纲离子注入剂量可以表示为无量纲离子流密度的时间积分

$$NA = \int_0^T \Gamma d\tau. \quad (14)$$

图 5 是离子注入剂量分布随时间的变化关系.在电压脉冲初期,离子注入剂量分布与离子流密度分布大致相仿,在离子流密度最大的三个点上相应地有三个注入剂量最大的点.在整个过程中,离子注入剂量都是随时间增加的,但在内表面上,管内离子被耗光后,注入剂量保持一定而不再增加.在其他两个面上,注入过程仍在继续,注入剂量继续增加.在整个

过程中,端点表面上离子注入剂量最大值比外壁上大 2.5 倍左右.

4. 结 论

我们利用两维 PSII 流体动力学模型,研究了带有共轴附加电极的半无限长空心圆管端点附近,在有限上升时间电压脉冲作用下等离子体鞘层的演化过程,计算了鞘层中电势分布、离子密度分布随时间的变化关系,得到了空心圆管内壁、端点表面及外壁上离子流密度和离子注入剂量分布随时间变化的关系.模拟结果表明,在所研究的三个表面上,离子流密度虽然都是逐渐减小的,但是在管的外壁和端点表面上是逐渐减小到一个稳定的值,而在内壁上是很快速减小到零,这显示了注入过程进行的时间对这三个表面是不同的.对离子注入剂量的计算表明,在管内壁上注入剂量增加到某个值后不再继续增加,这与计算离子流密度时显示的结果相符合;而在管的端点表面和外壁上则是逐渐增加的.

- [1] Conrad J R , Radtke J L , Adodd R , Worzala F J and Tran N C 1987 *J. Appl. Phys.* **62** 4591
- [2] Sheridan T E 1993 *J. Appl. Phys.* **74** 4903
- [3] Sun M and Yang S 1996 *J. Vac. Sci. Technol. A* **14** 3071
- [4] Sun M and Li B 1996 *J. Vac. Sci. Technol. A* **14** 367
- [5] Sheridan T E 1994 *Phys. Plasmas* **1** 3485
- [6] Sheridan T E 1996 *Surf. Coat. Technol.* **85** 204
- [7] Sheridan T E 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 66
- [8] Sheridan T E 1996 *Phys. Plasmas* **3** 3507

- [9] Zeng X C , Tang B and Chu P K 1996 *Appl. Phys. Lett.* **69** 3815
- [10] Zeng X C , Kwok T K , Liu A G , Chu P K , Tang B and Sheridan T E 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 1035
- [11] Zeng X C , Kwok T K , Liu A G , Chu P K , Tang B and Sheridan T E 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 44
- [12] Liu C S and Wang D Z 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 32
- [13] Tian X B and Chu P K 2001 *J. Phys D :Appl. Phys.* **34** 1639
- [14] Emmert G A and Henry M A 1992 *J. Appl. Phys.* **71** 113

Plasma source ion implantation near the end of a cylindrical bore using an auxiliary electrode for finite rise-time voltage pulses

Liu Cheng-Sen Wang De-Zhen

(*State Key Laboratory for Materials Modification by Laser , Ion and Electron Beams ,
Department of Physics , Dalian University of Technology , Dalian 116023 ,China*)

(Received 22 March 2002 ; revised manuscript received 27 April 2002)

Abstract

The temporal evolution of the plasma sheath during plasma source ion implantation (PSII) is crucial because it affects the resultant surface properties and structures. In this paper two-dimensional fluid model is applied to the problem in computing ion dynamics in the sheath of the end of a cylindrical bore using an auxiliary electrode for finite rise-time voltage pulses. The ion density, flux, dose distributions are calculated by solving Poisson's equation and the equations of ion motion and continuity using finite difference methods. Our results indicate that there exist the differences of ion flux and dose among the inner, outer surfaces and the end surface of the bore.

Keywords : PSII , ion sheath , two-dimensional model , ion density , ion dose

PACC : 5220 , 5240H , 5240K , 5265 , 5275