

# 半圆形容器等离子体源离子注入过程中离子动力学的 两维 PIC 计算机模拟<sup>\*</sup>

刘成森<sup>1)†</sup> 王德真<sup>2)</sup> 刘天伟<sup>3)</sup> 王艳辉<sup>2)</sup>

1) 辽宁师范大学物理与电子技术学院, 大连 116029)

2) 大连理工大学物理与光电工程学院, 三束材料改性国家重点实验室, 大连 116023)

3) 中国工程物理研究院表面物理与化学国家重点实验室, 绵阳 621900)

(2007 年 7 月 23 日收到, 2008 年 4 月 14 日收到修改稿)

利用两维 particle-in-cell 方法研究了半圆形容器等离子体源离子注入过程中鞘层的时空演化规律. 详尽考察了鞘层内随时间变化的电势分布和离子密度分布规律, 离子在鞘层中的运动轨迹和运动状态, 得到了半圆容器内、外表面和边缘平面上各点离子注入剂量分布规律, 获得了工件表面各点注入离子的入射角分布规律. 研究结果揭示了半圆容器边缘附近鞘层中离子聚焦现象, 以及离子聚焦现象导致工件表面注入剂量分布和注入角度分布存在很大不均匀的基本物理规律.

关键词: 等离子体源离子注入, 鞘层, 两维 particle-in-cell 方法, 离子运动轨迹

PACC: 5000, 5220, 5265, 5240K

## 1. 引 言

等离子体源离子注入 (PSII)<sup>[1]</sup> 已经广泛应用于材料表面改性和半导体材料加工<sup>[2-7]</sup>. 与传统的束线离子注入技术相比, 等离子体源离子注入具有两个显著优势, 一是离子注入过程具有非“视线”性, 不需要转动样品台和离子束扫描设备就可以使离子垂直注入样品表面. 另一个是能够同时使离子注入不规则样品的所有表面, 非常适合具有复杂形状表面的工件加工 (如凹槽、空心圆管、半圆形容器等) 模具表面等<sup>[8-13]</sup>. 在等离子体源离子注入技术的实际应用中, 不同形状样品表面附近等离子体鞘层中离子动力学行为有很大差异, 尤其在样品表面曲率不一致的情况下, 鞘层中电场弯曲导致离子束线的聚焦效应, 导致离子注入剂量分布不均匀, 在有些部位离子注入剂量偏大, 有些部位比较小. 离子动力学行为的差异将影响离子注入深度和离子沉积厚度, 也会使膜层的显微结构不一致, 从而影响最终产品质量. 因此, 在等离子体源离子注入过程的研究工作中, 详细考察各种形状样品周围等离子体鞘层中离

子的动力学行为, 反映离子注入过程中的物理规律是非常必要的, 可以针对特定形状的样品设定工艺过程、选择加工参数, 有效地实现对样品表面注入剂量的控制.

在实际应用 (如汽车制造、医用材料和石油化工等) 中, 半圆形类的壳层工件广泛应用于人造器官, 转向机械以及耐腐蚀容器等领域<sup>[13-17]</sup>. 这一类样品兼备了内外两类表面并且表面弯曲, 由于内表面容易出现鞘层叠加现象<sup>[8]</sup>, 使离子注入剂量降低, 从而导致整个加工表面出现离子注入剂量不均匀, 这加大了对等离子体源离子注入过程的工艺要求. 文献 [14] 利用流体模型对这种形状的样品进行了研究, 考察了等离子体鞘层的演化规律, 得到了鞘层中电场分布、离子密度分布、样品表面离子束流密度分布和离子注入剂量分布随时间变化关系. 然而, 流体模型的局部统计特征不能有效反映离子的实际动力学过程<sup>[18]</sup>. 在鞘层聚焦现象出现时, 离子运动过程中会出现相互穿越的现象, 这种实际发生的物理过程在流体模型中无法体现, 所以利用流体模型处理半圆形类的壳层工件 (尤其壳层比较薄时), 不能完备描述等离子体鞘层的演化规律以及相关的离子

<sup>\*</sup> 表面物理与化学国家重点实验室基金 (批准号 90000460200606) 资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: lchs@vip.sina.com

动力学行为,无法考察离子注入时的入射角度分布,缺失了这一重要物理参量对离子注入深度的有效评估.在 particle-in-cell (PIC) 模型中,电子密度近似处理为 Boltzmann 分布,大量离子按密度分布处于网格空间,由于离子不一定都在空间网格点上,需要通过适当的权重方法分配在各个点上从而得到离子密度,以此求解泊松方程.得到各格点上的电势和电场后,用相应的权重方法求解空间各点离子所受的电场力,从而求出下一时刻每个离子的速度和位置.然后再通过加权方法重新得到离子在各个网格点上的离子密度.重复进行这样的运算,直到脉冲结束.通过对每个离子进行跟踪,得到鞘层的演化过程及离子在鞘层中的运动行为,这样的描述能够全面考察等离子体源离子注入过程.

本文使用二维 PIC 模型,考察了旋转对称的半圆形容等离子体鞘层的演化规律,除更精确描述流体模型中得到的所有物理规律外,还获得了鞘层演化运动过程中离子的运行轨迹和运动状态、样品表面各点离子注入的角度分布,详尽地了解了离子运动过程.

## 2. 模型及模拟过程

本文考察一个如图 1 所示的内半径为  $r_{in}$ ,外半径  $r_{out}$  的半圆形容.开始时,半圆形容样品放置在离子密度  $n_i$  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  $t = 0$  时  $\phi = 0$ ,然后电势随时间沿负方向线性增加,直至达到最大值  $\phi_t$ .

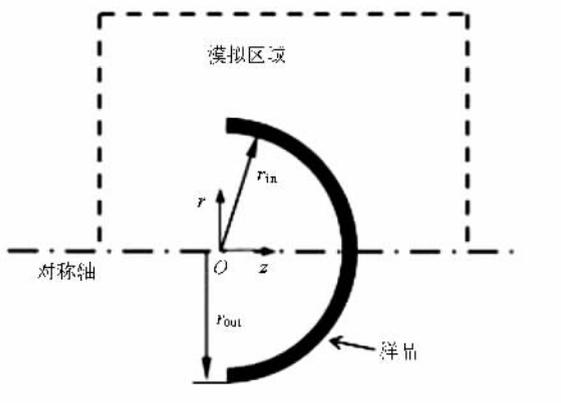


图 1 半圆形容等离子体源及模拟区域示意图

假定在等离子体鞘层中离子的运动是无碰撞的,也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,即

$$n_e = n_0 \exp(-e\phi/T_e), \quad (1)$$

其中  $\phi$  是电势; $T_e$  是电子温度,单位为 eV.

利用 PIC 模型和泊松方程描述离子速度、离子位置和电势.在柱坐标系下,两维的泊松方程,离子运动方程表述为

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

$$v_r(f) = v_r(I) - \frac{q}{M} \frac{\partial \phi}{\partial r} t, \quad (3)$$

$$v_z(f) = v_z(I) - \frac{q}{M} \frac{\partial \phi}{\partial z} t, \quad (3)$$

$$\Delta r = v_r(I) \cdot t - \frac{1}{2} \frac{q}{M} \frac{\partial \phi}{\partial r} t^2, \quad (4)$$

$$\Delta z = v_z(I) \cdot t - \frac{1}{2} \frac{q}{M} \frac{\partial \phi}{\partial z} t^2, \quad (4)$$

这里,  $z$  是沿对称轴方向的空间坐标,  $r$  是柱坐标下的径向坐标,  $M$  是离子质量,  $q$  是离子所携带的电量.电场由  $E = -\nabla\phi$  确定.

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), (4)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.得到如下的方程组:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial \varphi}{\partial R} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial Z^2} = -[n - \exp(\varphi)], \quad (5)$$

$$u_R(f) = u_R(I) - \frac{\partial \varphi}{\partial R} \tau, \quad (6)$$

$$u_Z(f) = u_Z(I) - \frac{\partial \varphi}{\partial Z} \tau, \quad (6)$$

$$\Delta R = u_r(I)\tau - \frac{1}{2} \frac{\partial \varphi}{\partial R} \tau^2, \quad (7)$$

$$\Delta Z = u_z(I)\tau - \frac{1}{2} \frac{\partial \varphi}{\partial Z} \tau^2, \quad (7)$$

泊松方程(5)是非线性方程,对其进行线性化处理<sup>[19]</sup>,作如下变换:

$$\exp(\varphi) = \exp(\psi) \exp(\varphi - \psi) \approx (1 + \varphi - \psi) \exp(\psi), \quad (8)$$

其中,  $\psi$  是前一刻的电势值,  $\varphi$  是当前时刻的电势值.忽略高阶项后,方程(5)变为线性方程

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial \varphi}{\partial R} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial Z^2} - \exp(\psi) \varphi = -[n - \exp(\psi) + \psi \exp(\psi)]. \quad (9)$$

用有限差分方法对方程(6)–(9)进行求解. 初始条件是:在所研究的区域中,  $u = 0$  和  $\varphi = 0$ . 边界条件是:在半圆形容器的壳壁上,  $\varphi$  的取值为所施加的无量纲电压值. 如果在考察的时间内, 等离子体鞘层的扩展范围小于所研究的区域中的长度, 可以认为在对称轴上  $\partial \varphi / \partial r = 0$ , 在其他边界上,  $\varphi = 0$ . 离子在电场中运动时, 考察的时间步长与所选取的空间网格大小及离子最大运动速度有关, 根据差分方程的稳定性条件, 应满足  $\Delta \tau < \frac{\Delta h}{|v_{\max}|}$ , 其中  $\Delta h$  为网格线度大小,  $v_{\max}$  为离子最大运动速度. 在模拟程序中, 通常自动选取时间步长为  $\frac{\Delta h}{10 \times |v_{\max}|}$ .

### 3. 结果及讨论

本文研究的半圆形容器的形状如图 1 所示, 其半径  $r_b = 40.0 \text{ mm}$ , 管壁厚度  $r_1 = 4.0 \text{ mm}$ . 半圆容器放入氩等离子体中, 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  $t = 0$  时  $\phi = 0$ , 随后电势在以  $-120 \text{ kV}/\mu\text{s}$  的增加速率线

性地沿负方向增加到最大值  $-45 \text{ kV}$ , 并保持这一值不变, 这一假定与实验室工作条件相符合. PIC 模拟过程中使用的参数: 沿对称轴方向  $z$ , 模拟区域线度为  $120.0 \text{ mm} = 3r_b$ , 沿与  $z$  垂直的方向  $r$ , 模拟区域线度为  $80.0 \text{ mm} = 2r_b$ . 将模拟区域划分为  $100 \times 150$  个均匀网格, 网格是  $0.8 \text{ mm}$  的正方形. 初始时刻, 每个网格中均匀放置 100 个模拟离子, 在所考察的空间, 共计 1500000 个模拟离子的动力学参数需要计算.

容器壳加上沿负方向增加的负电压时, 就会形成等离子体鞘层, 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 是半圆形容器的附近在无量纲时间  $t$  为  $0.74, 1.47, 2.95, 3.69 \mu\text{s}$  时的电势分布(其中的电势用  $\phi_i$  无量纲化, 即电势/ $\phi_i$ ), 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样品表面, 鞘层中的电势等位线随时间向外不断移动, 表明鞘层向等离子体中扩展. 同时, 由于从半圆容器外表面附近鞘层边界进入鞘层的离子数逐渐增多, 而从内表面附近鞘层边界进入鞘层的离子数逐渐减少, 因此内表面鞘层扩展的速度比外表面要快, 内表面鞘层厚度比外表面厚, 在端点附近, 鞘层的扩展速度最慢.

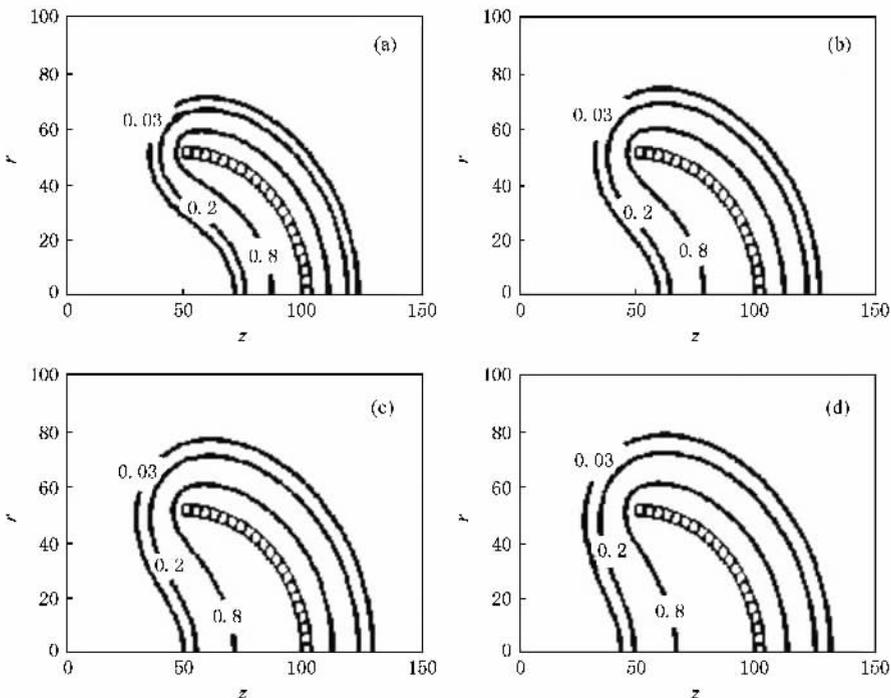


图 2 在不同时刻鞘层中的电势分布 (a)  $0.74 \mu\text{s}$  (b)  $1.47 \mu\text{s}$  (c)  $2.95 \mu\text{s}$  (d)  $3.69 \mu\text{s}$

图 3 是相应的以光密度表示的离子密度分布,越黑的地方,离子密度越小.半圆容器壳壁上施加负电压脉冲前,离子密度分布是均匀的.加上负电压脉冲后,在壳壁附近就会形成离子鞘层.鞘层中电

场的存在导致离子的分布不均匀,离壳壁表面近的点离子密度小.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.在内表面附近,离子密度减小的速度要比外表面附近快一些.

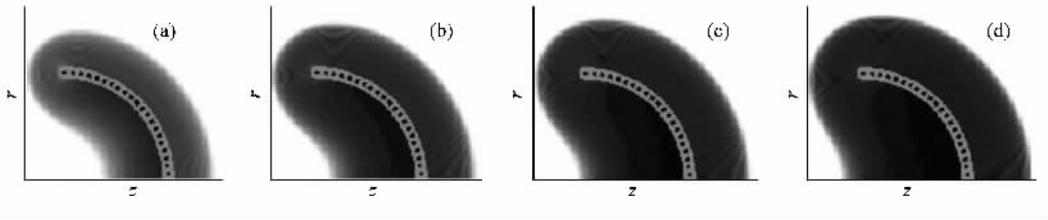


图 3 在不同时刻时的无量纲离子密度分布 (a)  $0.74 \mu\text{s}$  (b)  $1.47 \mu\text{s}$  (c)  $2.95 \mu\text{s}$  (d)  $6.69 \mu\text{s}$

在半圆容器壳壁附近形成离子鞘层后,从等离子体中进入鞘层的离子在电场的作用下,逐渐加速直至注入壳壁表面.离子在鞘层中行进时的位置和运动状态依赖于所经历的空间电场结构.图 4—8 表示模拟区域中离子运动状态的矢量图.图中只标示出了少部分离子,每个离子是 100 个离子中均匀取样取出的样本.矢量的尾部标注离子位置,箭头指向表示离子运动方向,箭头长短表示离子运动速度大小.从图中可以看出,鞘层演化初期,除非常靠近容器边缘两个角的区域外,离子几乎都垂直于容器表面运动,如图 4 所示.随着鞘层的进一步演化,在靠近容器边缘的内表面的较大区域的鞘层中,由于电势等位线的弯曲与样品表面形状有较大的偏离(如图 2 所示),致使离子运动轨迹不再是直线,注入时不垂直于样品表面,有一些离子会以较大的角度掠入射到样品表面,如图 8 所示.

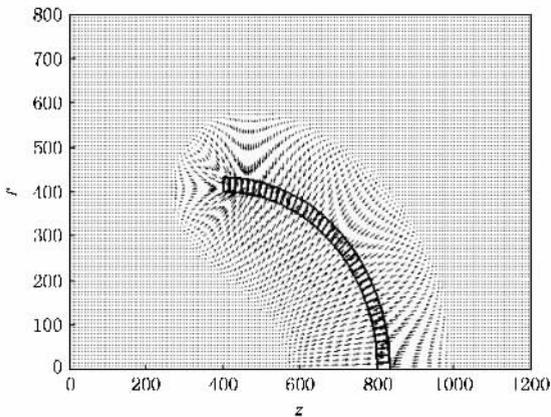


图 4 在时刻  $0.74 \mu\text{s}$  时离子运动状态矢量分布

离子在鞘层中加速运动,最终撞击样品表面,形成以一定入射角入射的离子注入.图 5—8 反映了容器表面各点上离子注入的入射角分布,样品表面位

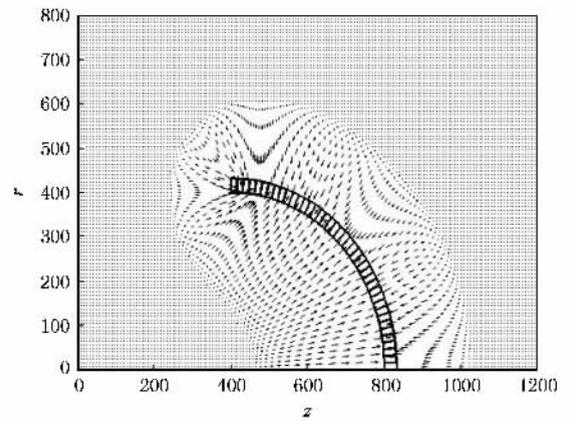


图 5 在时刻  $1.47 \mu\text{s}$  时离子运动状态矢量分布

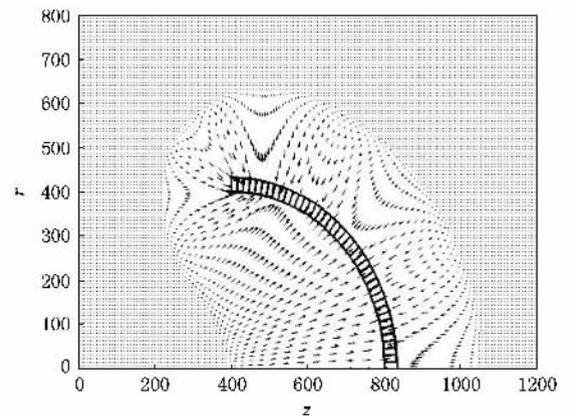


图 6 在时刻  $2.95 \mu\text{s}$  时离子运动状态矢量分布

置坐标轴表示从容器内底中央开始经过容器边缘直到容器外底中央.在容器外表面上(87—160)几乎所有注入的离子都垂直于样品表面,只有非常靠近外边角的区域(84—86)上,有离子以不为零的入射角注入,在外表面上的这种分布随时间变化不大.对内表面而言,容器中央附近区域注入离子垂直于样

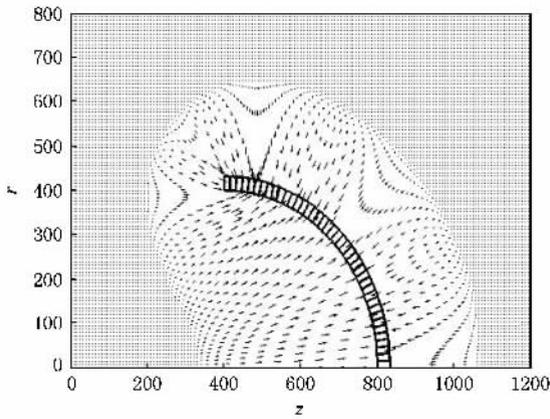


图 7 在时刻 3.69 μs 时离子运动状态矢量分布

品表面,随着鞘层演化,这一区域逐渐变小.靠近容器边缘的内表面区域,有些离子会以较大入射角注入.在非常靠近内边角的点上(78—79),离子可以以较大入射角注入,最大入射角随时间可增大到接近 90°,如图 8 所示.在容器边缘中央点上(82—83),也有一些离子不垂直注入,但角度分布范围不是很大,随时间的变化也不明显.而在容器边缘两个角(80 和 84)很少有离子注入.

图 9 是离子注入剂量分布随时间的变化关系.整个注入过程中,容器内表面的离子注入剂量总是低于外表面的值,随着鞘层演化,内表面的离子注入

剂量增加缓慢,内、外表面注入剂量差异逐渐增大.从图中可以看出,由于电场聚焦作用的影响,导致了容器边缘附近离子注入极度不均匀.在容器边缘中央(82)处,离子注入剂量最大,并随时间逐渐增加.

### 4. 结 论

针对半圆容器各个表面,我们利用二维 PIC 模型研究了等离子体源离子注入过程中的鞘层演化过程,详细考察了离子在鞘层中的运动行为,得到了离子注入到容器内、外表面和边缘平面上的注入角度和注入剂量,为这一类型工件等离子体源离子注入工艺设计提供理论依据.模拟结果显示,在半圆容器外表面附近鞘层中的离子,从鞘层边界处进入鞘层后,在电场的加速作用下,垂直注入容器外表面;在容器内表面靠近边缘的区域附近,由于电势分布的弯曲导致一些离子不垂直注入,这一区域随着鞘层演化逐渐向容器底部扩展.靠近容器边缘的内表面区域,有些离子会以较大入射角注入,最大入射角可接近 90°,在容器边缘平面上,由于电场的聚焦作用,离子会向中央处会聚,形成一个随时间变化不明显的稳定角度分布.整个注入过程中,容器内表面的离子注入剂量总是低于外表面的值,内表面的离子注入剂量随着鞘层演化增加缓慢,内、外表面注入

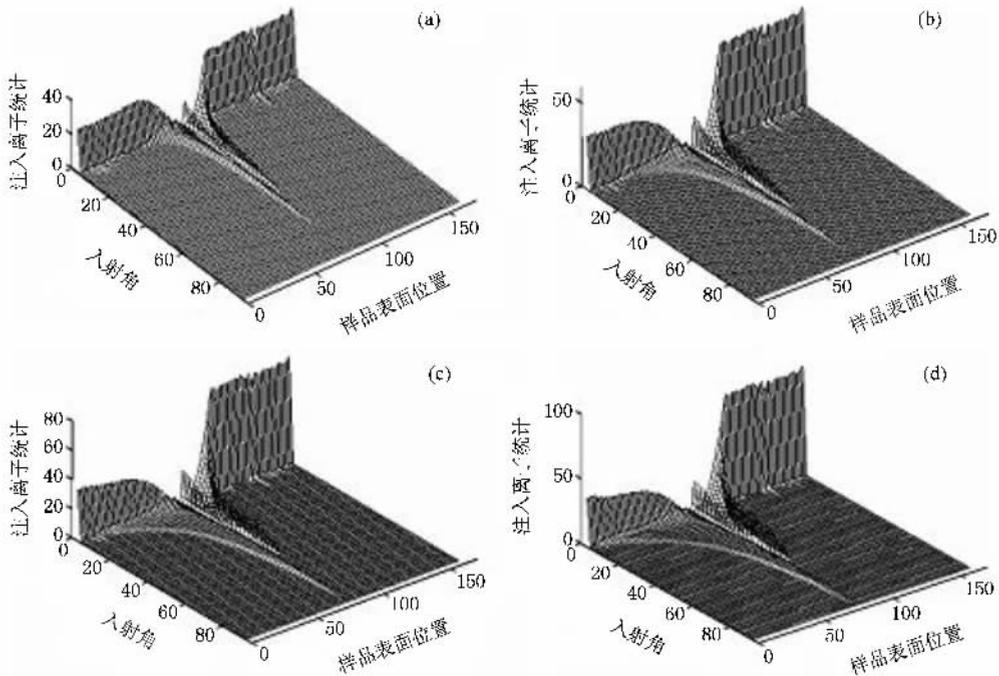


图 8 在不同时刻时注入样品表面离子的入射角分布 (a) 0.74 μs (b) 1.47 μs (c) 2.95 μs (d) 3.69 μs

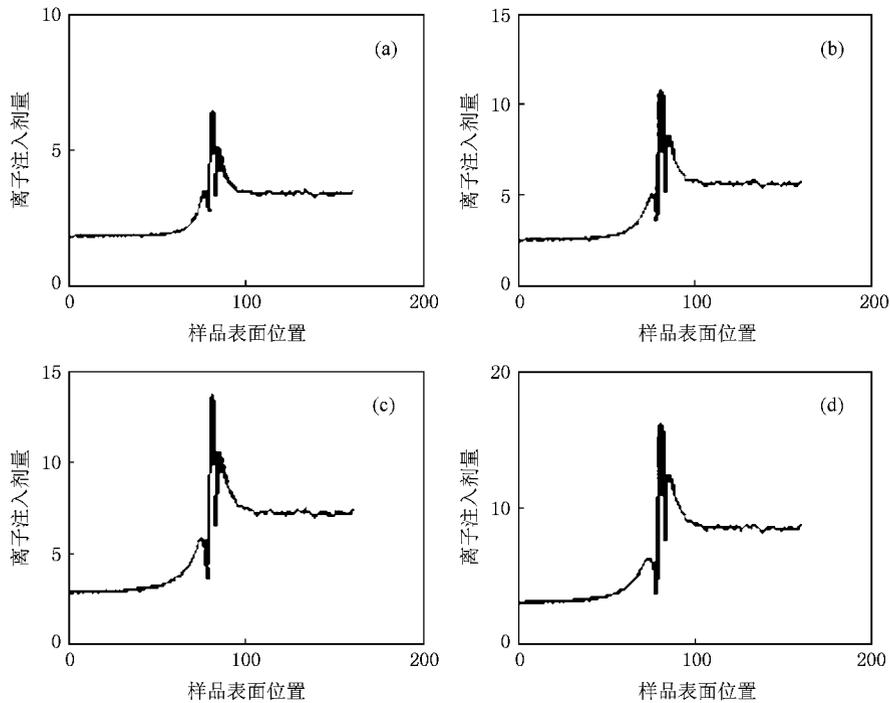


图9 在不同时刻时的离子注入剂量分布 (a) 0.74  $\mu\text{s}$  (b) 1.47  $\mu\text{s}$  (c) 2.95  $\mu\text{s}$  (d) 6.69  $\mu\text{s}$

剂量差异随时间逐渐增大,在容器边缘附近,离子在电场聚焦作用下引起会聚,导致了容器边缘附近离子注入非常不均匀.综上所述,通过二维 PIC 模拟,我们可以全面地考察半圆容器各个表面附近等离子

体鞘层的演化规律,探究其中离子运动轨迹和运动状态,有效地解决这一类工件在等离子体源离子注入过程中必需解决的理论问题,为优化注入工艺提供研究基础.

- [ 1 ] Conrad J R , Radtke J L , Dodd R A , Worzala F J , Tran N C J 1987 *Appl. Phys.* **62** 4591
- [ 2 ] Anders A 2000 *Handbook of Plasma Immersion Ion Implantation , Deposition* ( New York : Wiley )
- [ 3 ] Qian X Y , Cheung N W , Lieberman M A , Felch S B , Brennan R , Current M I 1991 *Appl. Phys. Lett.* **59** 348
- [ 4 ] Qian X Y , Cheung N W , Lieberman M A , Current M A , Chu P K , Harrington W L , Magee C W , Botnik E M *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 1991 **55** 821
- [ 5 ] Chu P K , Qin S , Chan C , Cheung N W , Larson L A 1996 *Mater. Sci. Eng. Rep. R* **17** 207
- [ 6 ] Tian X B , Wei C B , Yang S Q , Chu P K , Fu R K Y 2003 *J. Mater. Sci. Technol.* **19** 94
- [ 7 ] Min J , Chu P K , Cheng Y C , Liu J B , Iyer S S , Cheung N W 1996 *Surf. Coat. Technol.* **85** 60
- [ 8 ] Sheridan T E 1995 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **23** 1094
- [ 9 ] Sheridan T E 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 66
- [ 10 ] Zeng X C , Kwok T K , Liu A G , Chu P K , Tang B Y 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 1035
- [ 11 ] Zeng Z M , Kwok T K , Tian X B , Bang Y T , Chu P K 1999 *Surf. & Coat. Technol.* **120-121** 663
- [ 12 ] Zhang G L , Wang J L , Liu C Z , Yang W B , Fan S H , Yang S Z 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2213 ( in Chinese ) [ 张谷令、王久丽、刘赤子、杨武保、范松华、杨思泽 2003 物理学报 **52** 2213 ]
- [ 13 ] Liu C S , Wang D Z 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 109 ( in Chinese ) [ 刘成森、王德真 2003 物理学报 **52** 109 ]
- [ 14 ] Liu C S , Wang D Z 2003 *Surf. & Coat. Technol.* **171** 119
- [ 15 ] Dowson D A 1995 *Wear* **190** 171
- [ 16 ] Lombardi A V , Mallory T H , Vaughn B K , Drouillard P 1989 *J. Bone Joint Surg.* **71A** 1337
- [ 17 ] Black J , Maitin E C , Gehnan H , Morris D M 1983 *Biomater* **4** 160
- [ 18 ] Sheridan T E , Kwok T K , Chu P K 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 1826
- [ 19 ] Emmert G A , Henry M A 1992 *J. Appl. Phys.* **71** 113

# Two-dimensional particle-in-cell simulation of the ion sheath dynamics in plasma source ion implantation of a hemispherical bowl-shaped target<sup>\*</sup>

Liu Cheng-Sen<sup>1</sup>† Wang De-Zhen<sup>2</sup>) Liu Tian-Wei<sup>3</sup>) Wang Yan-Hui<sup>2</sup>)

<sup>1</sup> *College of Physics and Electronic Technology, Liaoning Normal University, Dalian 116029, China*

<sup>2</sup> *State Key Laboratory for Materials Modification by Laser, Ion and Electron Beams, School of Physics and Optoelectronic Technology, Dalian University of Technology, Dalian 116023, China*

<sup>3</sup> *State Key Laboratory of Surface Physics and Chemistry, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China*

( Received 23 July 2007 ; revised manuscript received 14 April 2008 )

## Abstract

Plasma source ion implantation into a hemispherical bowl-shaped target is simulated by the two-dimensional particle-in-cell method. The numerical procedure is based on solving the Poisson's equation on a grid and tracing the movement of the ions through the grid. The potential and the ion density distributions in the sheath are studied in detail and the trajectories and dynamic states of ions are considered. The implantation dose and impact angle of the ions at different parts of the target surface are obtained. The ion focusing effect due to the nonuniformity of the sheath potential near the brim of the vessel is observed. The results presented here show that the ion focusing causes the nonuniformity of dose on the target surface.

**Keywords** : plasma source ion implantation , ion sheath , two-dimensional particle-in-cell model , ion trajectory

**PACC** : 5000 , 5220 , 5265 , 5240K

<sup>\*</sup> Project supported by the Foundation of State Key Laboratory of Surface Physics and Chemistry ( Grant No.90000460200606 ).

† E-mail : lchs@vip.sina.com