

有限尺寸方靶等离子体离子注入动力学的 三维粒子模拟研究*

王蓬 田修波[†] 汪志健 巩春志 杨士勤

(哈尔滨工业大学现代焊接生产技术国家重点实验室, 哈尔滨 150001)

(2010年6月2日收到; 2010年9月14日收到修改稿)

采用三维粒子模拟模型研究了有限尺寸方靶等离子体浸没离子注入过程中的鞘层动力学行为, 得到了鞘层尺寸和方靶表面的注入剂量、注入能量以及注入角度等信息, 并与二维无限长方靶注入结果进行了对比. 模拟结果表明, 与无限长方靶不同, 有限尺寸方靶周围鞘层很快扩展为球形, 但鞘层厚度明显减小. 在模拟的 $50\omega_{pi}^{-1}$ 时间尺度内靶表面注入剂量很不均匀, 中心区域注入剂量最小, 四个边角附近位置注入剂量最大. 这种剂量不均匀性是由于鞘层扩展为球形, 使得鞘层内离子被聚焦并注入到边角附近所致. 方靶中心区域离子接近垂直注入, 并且注入能量超过最大注入能量的 90%; 而在边角位置离子以 45° 左右的入射角度注入到靶表面, 注入能量仅仅约为最大注入能量的 50%.

关键词: 等离子体浸没离子注入, 数值模拟, 三维粒子模拟, 有限尺寸方靶

PACS: 52.77.Dq, 52.65.-y, 52.30.-q, 52.40.Kh

1. 引言

等离子体浸没离子注入^[1] (plasma immersion ion implantation, 简记为 PIII) 与传统束线离子注入相比, 是一种廉价、高效的表面改性技术^[2], 已经广泛应用于航天、机械、电子等各个领域^[3-5]. 在 PIII 过程中, 被处理工件放置在充满等离子体的真空室中, 工件上施加一系列负高压脉冲, 鞘层中的正离子在脉冲负高压的加速下同时注入到工件各个表面. 但是在实际的 PIII 处理过程中发现, 不同形状的工件表面附近鞘层扩展动力学差异很大, 造成鞘层与工件的保形性变差, 工件表面的注入剂量、注入角度和注入能量不均匀, 进而造成改性层的显微结构和表面特性不一致^[6]. 因此, 在 PIII 的研究工作中, 详细考察工件形状对等离子体离子注入动力学行为的影响是非常必要的.

国内外许多学者采用数值模拟的方法研究了工件表面的鞘层动力学行为. Sheridan^[7,8] 采用二维流体模型研究了无限长方靶和长方靶的鞘层动力学. 孙琦等^[9] 采用二维流体模型研究了具有正方形

截面的棱柱形工件离子注入动力学. Kwok 等^[10] 采用二维柱坐标粒子模拟 (PIC) 模型研究了圆台工件表面的注入剂量均匀性. 刘成森等^[11,12] 采用二维柱坐标 PIC 模型模拟研究了半圆形容器和长椭球形工件的离子注入动力学, 揭示出半圆形容器边缘附近鞘层中的离子聚焦现象. 文献^[13,14] 分别采用二维流体模型和二维 PIC 模型研究了凹槽形状工件的 PIII 过程, 考察了工件各个表面的注入剂量和注入角度分布.

上述研究均采用了二维模型, 因此仅能描述无限长二维尺寸工件或简单形状的具有轴对称性质的三维工件^[11,12] 离子注入动力学, 而对于实际具有三维尺寸的复杂工件注入信息却难以获得. 本文通过算法优化和对计算机资源的合理分配, 实现了 PIII 等离子体鞘层扩展的三维数值仿真, 以有限尺寸方靶为工件, 从三维角度描述了 PIII 过程中的鞘层扩展动力学行为和离子注入特性.

2. 模型及模拟过程

本文考察一个如图 1 所示的有限尺寸方靶模型

* 国家自然科学基金 (批准号: 50773015, 10775036) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: xiubotian@163.com

PIII 的动力学行为,为了与文献[7]无限长二维方靶模拟结果进行对比,本文的计算参数采用与文献[7]中相同的参数设置.开始时,方靶放置在离子密度 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 $n_i = n_e = n_0 = 1 \times 10^{15} \text{ m}^{-3}$,方靶上所施加的电势为零,即在 $t = 0$ 时 $\Phi = 0$,然后电势 Φ 随着时间沿负方向线性增加,当 $t = 0.125\omega_{pi}^{-1}$ 时电势达到最大值 $\Phi = -1024 \text{ V}$,其中 $\omega_{pi}^{-1} = 1.519 \times 10^{-7} \text{ s}$ 为等离子体离子振荡周期.电子温度为 2 eV ,等离子体为氩等离子体.

如图 1 所示,本文中的模拟区域尺寸为 $8.0 S_0 \times 8.0 S_0 \times 8.0 S_0$,方靶尺寸为 $2.0 S_0 \times 2.0 S_0 \times 2.0 S_0$,方靶放置于模拟区域的中心位置.模拟中采用网格尺寸为 $0.08 S_0 \times 0.08 S_0 \times 0.08 S_0$. $S_0 = 0.01063 \text{ m}$ 为初始离子鞘层厚度.在以前的 PIII 数值模拟过程中多采用均匀规则位置方式设置初始模拟离子位置,但是在实际的真空室中等离子体中离子是随机分布的,因此本文采用随机位置方式放置初始离子,更接近于真实情况.模拟过程中时间步长采用 $\frac{1}{128}\omega_{pi}^{-1}$.

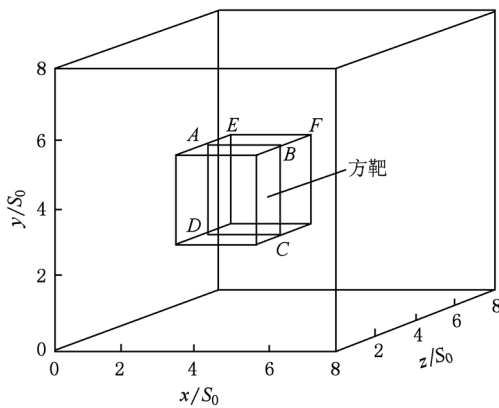


图 1 方靶及模拟区域示意图

本文中假设在等离子体鞘层中离子的运动为无碰撞,电子密度 n_e 遵从玻尔兹曼分布^[15],即

$$n_e = n_0 \exp\left(\frac{e\Phi}{k_B T_e}\right), \quad (1)$$

式中 T_e 为电子温度,单位为 eV ; k_B 为玻尔兹曼常量.

利用三维泊松方程和牛顿运动方程分别描述空间电势分布和离子运动速度、离子位置,方程分别表示如下^[15]:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} = -\frac{e}{\epsilon_0} [n_i - n_e], \quad (2)$$

$$v_x(i+1) = v_x(i) - \frac{q}{M} \frac{\partial \Phi}{\partial x} t, \quad (3)$$

$$v_y(i+1) = v_y(i) - \frac{q}{M} \frac{\partial \Phi}{\partial y} t, \quad (4)$$

$$v_z(i+1) = v_z(i) - \frac{q}{M} \frac{\partial \Phi}{\partial z} t, \quad (5)$$

$$\Delta x = v_x(i)t - \frac{1}{2} \frac{q}{M} \frac{\partial \Phi}{\partial x} t^2, \quad (6)$$

$$\Delta y = v_y(i)t - \frac{1}{2} \frac{q}{M} \frac{\partial \Phi}{\partial y} t^2, \quad (7)$$

$$\Delta z = v_z(i)t - \frac{1}{2} \frac{q}{M} \frac{\partial \Phi}{\partial z} t^2. \quad (8)$$

将方程(2)线性化,并采用有限差分方法对方程(2)–(8)进行求解,即可获得每个时刻模拟空间的电势分布和离子运动信息.

3. 结果及讨论

图 2 给出了 $1\omega_{pi}^{-1}$ – $50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻方靶中心截面 $ABCD$ 上等离子体的密度分布,截面位置如图 1 所示.由于本文中初始模拟离子位置采用随机放置方式,因此在等离子体空间中等离子体密度值稍有起伏属于正常.由图 2(a)可知,在 $1\omega_{pi}^{-1}$ 时刻,等离子体鞘层初步形成,鞘层在方靶中心附近区域近似平行于方靶表面,形状还没有演化为球形.到 $10\omega_{pi}^{-1}$ 时刻,鞘层形状已经演化为球形,而且随着注入时间的延长鞘层不断扩展,到 $50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻鞘层边缘已经扩展到接近模拟区域边界位置.

为了研究鞘层的三维形状特性,本文选取了 $50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻,在 $z = 4S_0, 4.5S_0, 5S_0, 5.5S_0, 6S_0, 6.5S_0, 7S_0$ 和 $7.3S_0$ 等八个位置 x - y 截面的鞘层形状(图 3).从图 3 可以看出,各个位置的 x - y 截面上鞘层呈直径不同的同心圆,说明鞘层在水平方向上已经变成圆形.为了考察鞘层形状是否完全呈球形,我们分析了具有鞘层直径的球体,也分别在 $z = 4S_0, 4.5S_0, 5S_0, 5.5S_0, 6S_0, 6.5S_0, 7S_0$ 和 $7.3S_0$ 等位置进行截取,结果如图 3 内插图所示.由此可以看出,对于不同的截距,无论是鞘层还是球体,对应的截面圆形半径基本重合,这说明此时鞘层无论是在水平方向还是在垂直方向均已经演变为球形.

为了便于有限尺寸方靶 PIII 鞘层扩展与无限长方靶进行对比,本文将 $10\omega_{pi}^{-1}$ – $50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻的有限尺寸方靶三维鞘层形状与二维无限长方靶鞘层模拟结果一并示于图 4.图 4 中左侧是有限尺寸方靶中心截面 $ABCD$ 上各个时刻的鞘层边界,右侧是相应

时刻无限长方靶的鞘层边界. 由图 4 可知, 在 PIII 过程中有限尺寸方靶鞘层直径明显小于无限长方靶

鞘层直径. 方靶第三维方向 (z 方向) 上的尺寸会明显影响 x 方向和 y 方向的鞘层扩展速度.

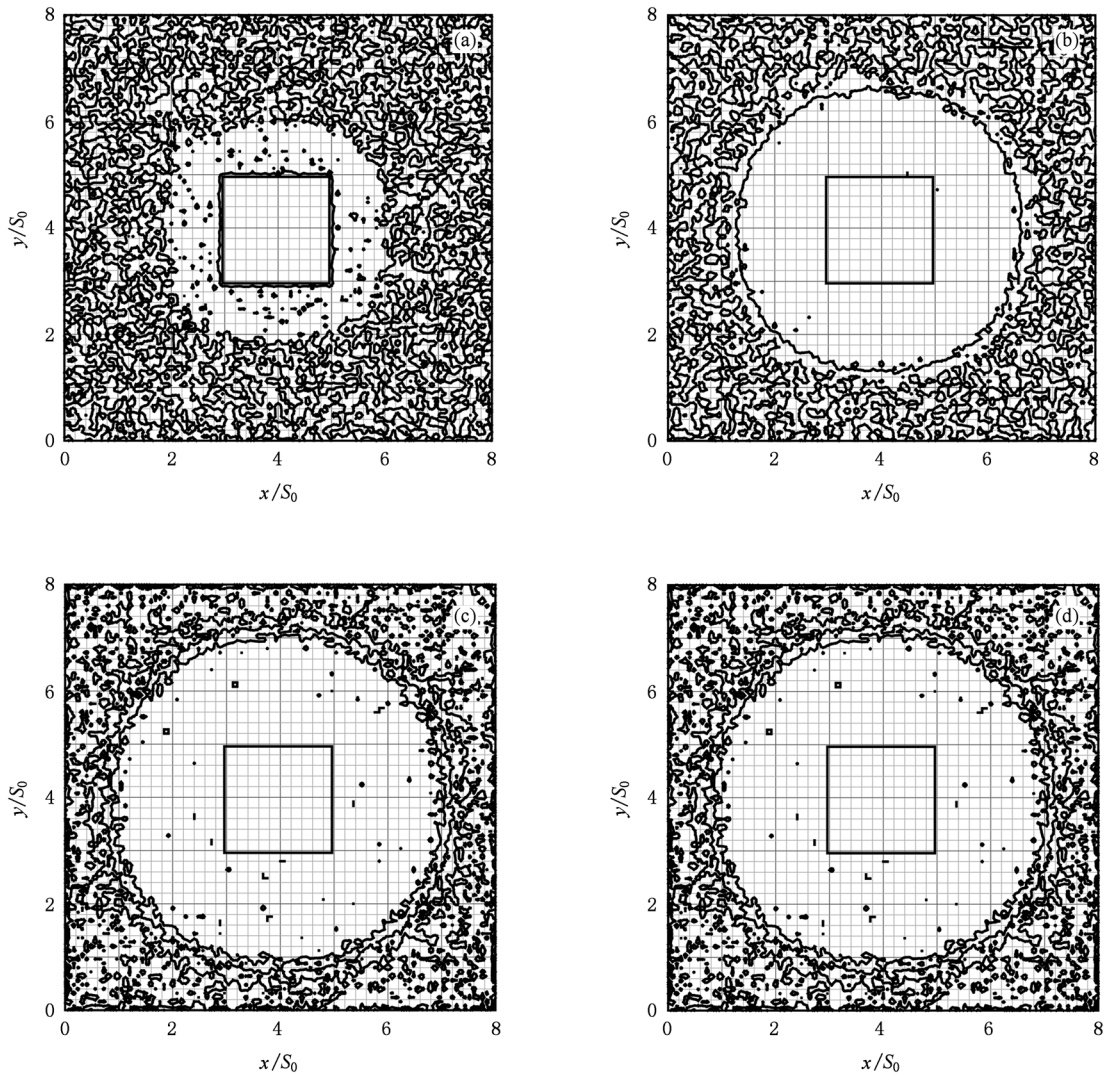


图 2 $1\omega_{pi}^{-1} - 50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻的等离子体密度分布 (a) $1\omega_{pi}^{-1}$, (b) $10\omega_{pi}^{-1}$, (c) $30\omega_{pi}^{-1}$, (d) $50\omega_{pi}^{-1}$

有限尺寸方靶附近鞘层的形状及演化特点, 决定了靶表面离子注入剂量和角度的非均匀分布. 选取方靶表面中心线 AB (如图 1 所示) 上的注入剂量分布, 将 $10\omega_{pi}^{-1}$, $20\omega_{pi}^{-1}$, $30\omega_{pi}^{-1}$, $40\omega_{pi}^{-1}$ 和 $50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻的剂量分布示于图 5. 由图 5 可知, 注入剂量呈现中间低边缘高的分布趋势, 并且最大剂量位于边缘附近位置. 为将有限尺寸方靶注入剂量分布与二维无限长方靶剂量分布进行对比, 图 5 同时还给出了无限长方靶表面在 $20\omega_{pi}^{-1}$ 时刻的剂量分布曲线, 由此可以看出, 无限长方靶表面剂量分布趋势与有限尺寸方靶相似, 但是数值上前者远小于后者.

图 6 给出了 $50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻有限尺寸方靶表面的注入剂量分布. 由图 6 可以看出, 靶中心区域的注入剂

量最小并且随着与靶边缘距离的减小而增大, 在方靶四条边线附近的注入剂量次之, 而在方靶的四个边角附近位置的注入剂量达到最大值. 注入剂量的这种分布是由于鞘层扩展为球形, 将鞘层内离子聚焦集中注入到边角附近位置的结果. 由上述分析可知, 由于二维模型中无法体现具有三维特性的边角位置, 也无法反映出如图 6 所示的方靶边角附近位置的最大注入剂量现象, 因此只有采用三维 PIC 模型才能够全面反映有限尺寸方靶模型的注入特性. $1\omega_{pi}^{-1} - 50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻方靶中心线 AB 和边缘线 EF 上的注入剂量分布示于图 7 中. 由图 7 可知, 边缘线 EF 上的注入剂量始终大于方靶中心的剂量, 而且随着注入时间的持续, 方靶表面的注入剂量均匀性快

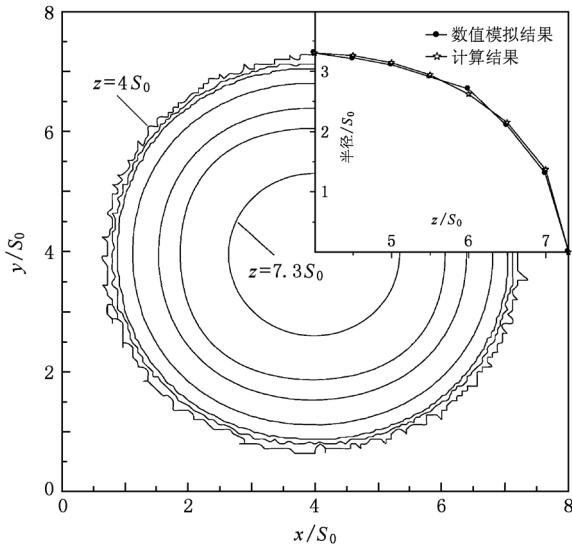


图3 $50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻 $z=4S_0-7.3S_0$ 位置的鞘层形状和尺寸

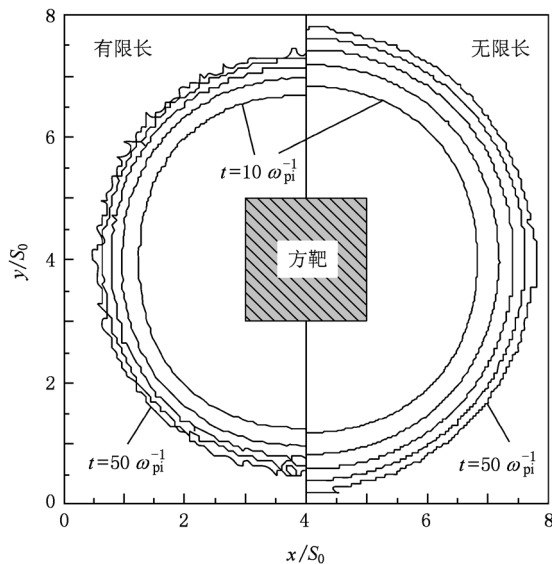


图4 $10\omega_{pi}^{-1}-50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻的有限尺寸方靶和无限长方靶鞘层尺寸

速下降. 就整体而言, 三维有限尺寸方靶的不均匀性明显高于二维无限长方靶的不均匀性, 如在 $20\omega_{pi}^{-1}$ 时刻, 三维方靶表面的不均匀性可达 44%, 而二维方靶的不均匀性仅为 26%.

图 8 所示为 $50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻有限尺寸方靶表面的平均注入角度分布. 注入角度定义为离子运动方向与注入平面法向的夹角, 即当离子垂直入射注入到平面时注入角度为 0° . 由图 8 可知, 方靶表面的注入角分布很不均匀, 中心部位离子以近垂直的角度注入方靶表面, 但是随着与靶边缘距离的减小, 离子入射越来越倾斜, 在边角位置离子入射角度可以达

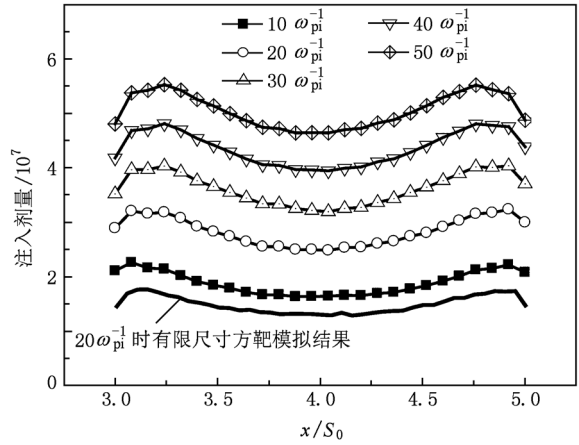


图5 $10\omega_{pi}^{-1}-50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻方靶中心线 AB 上的注入剂量分布

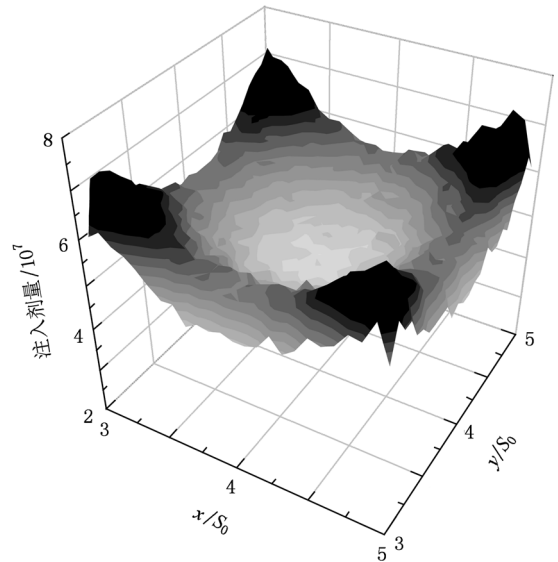


图6 $50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻有限尺寸方靶表面的注入剂量分布

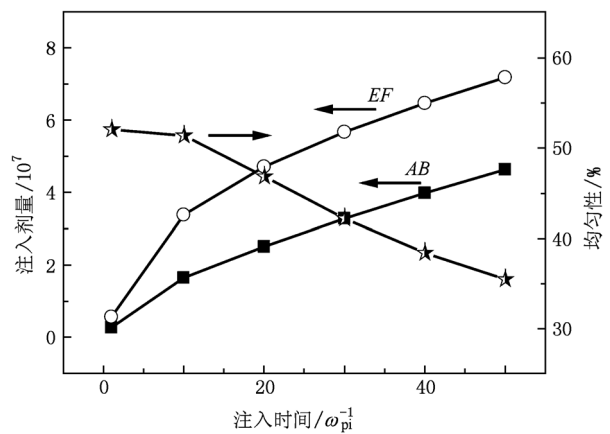


图7 不同时刻方靶中心线 AB 和边缘线 EF 上的注入剂量分布到 45° 左右. 选取方靶中心线 AB 和边缘线 EF 上平

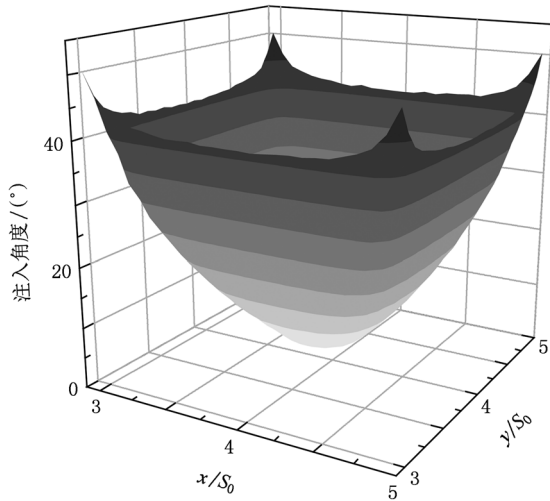


图8 $50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻方靶表面的平均注入角度分布

均注入角度示于图9. 从图9可以看出:在方靶中心线 AB 上平均注入角度分布很不均匀,此分布趋势与文献[7]中注入角度分布结果相同. 而在方靶边缘线 EF 上平均注入角度在 40° — 50° 之间,在方靶边角附近位置平均注入角度增至最大值.

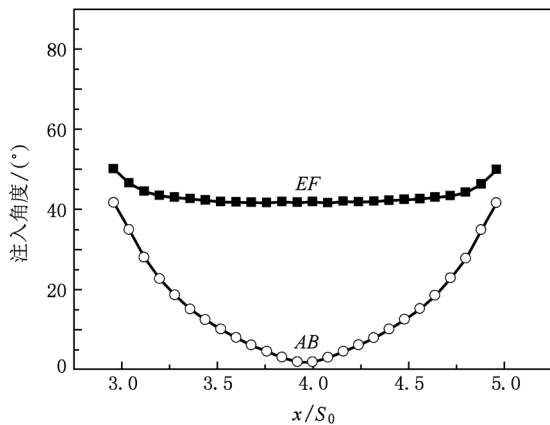


图9 方靶中心线 AB 和边缘线 EF 上平均注入角度分布

图10所示为 $50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻有限尺寸方靶表面的平均注入能量分布. 当离子注入到平面时,采用离子在平面法向上的速度来衡量注入能量,图10中纵坐标是离子注入靶表面时的注入速度与偏压为 -1024 V 的离子所能获得最大速度之比. 由图10可知,方靶表面注入能量分布很不均匀,中心区域注入能量较高,超过了最大注入能量的 90% ,但是边

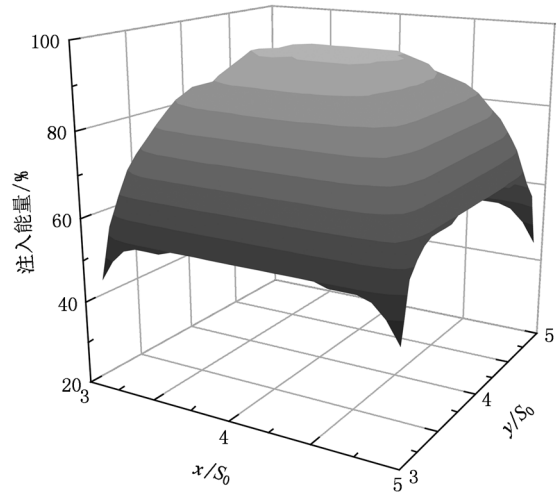


图10 $50\omega_{pi}^{-1}$ 时刻方靶表面平均注入能量分布

缘位置的注入能量仅仅约为最大注入能量的 50% . 而方靶边缘线上的注入能量介于最大注入能量的 40% — 50% 之间.

4. 结 论

本文采用 PIC 模型研究了有限尺寸方靶 PIII 鞘层的时空演化行为. 模拟结果表明,随着注入时间的持续,鞘层扩展为球形,并且有限尺寸方靶的鞘层尺寸明显小于无限长方靶的二维仿真结果. 方靶表面注入剂量、注入角度和注入能量分布都不均匀,中心区域的注入剂量最小,边线附近的注入剂量次之,而在方靶的四个边角附近位置注入剂量达到最大值. 而且三维方靶表面的注入剂量不均匀性明显大于二维尺度靶体. 注入剂量的这种分布是由于扩展为球形的鞘层将离子聚焦并集中注入到边角附近位置的结果. 中心部位离子以近乎垂直的角度注入方靶表面,故注入能量较高;随着与靶边缘距离的减小,离子入射越来越倾斜,注入能量也逐渐下降,在边角位置离子入射角度可以达到 45° 左右,相应的注入能量也仅仅约为最大注入能量的 50% . 由上述分析可知,二维模型难以反映出方靶边角附近位置具有最大注入剂量的特点,而采用三维 PIC 模型能够较全面地反映有限尺寸方靶模型的注入特性.

- [1] Conrad J R, Radtke J L, Dodd R A, Worzala F J, Tran N C 1987 *J. Appl. Phys.* **62** 4591
- [2] Li X C, Wang Y N 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2667 (in Chinese) [李雪春、王友年 2004 物理学报 **53** 2667]
- [3] Lu Q, Li L H, Fu R K Y, Chu P K 2008 *J. Appl. Phys.* **104** 043303
- [4] Huang Y X, Tian X B, Yang S Q, Fu R, Chu K P 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4762 (in Chinese) [黄永宪、田修波、杨士勤、Fu R、Chu K P 2007 物理学报 **56** 4762]
- [5] Vervisch V, Etienne H, Torregrosa F, Roux L, Ottaviani L, Pasquinelli M, Sarnet T, Delaporte P 2006 *J. Vac. Sci. Technol. B* **26** 286
- [6] Tian X B, Peng P, Chu P K 2003 *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **206** 673
- [7] Sheridan T E 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 7153
- [8] Sheridan T E 1996 *J. Phys. D* **29** 2725
- [9] Sun Q, Gu C X, Ma X X, Xia L F 2004 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **12** 215
- [10] Kwok D T K, Chu P K 1998 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **26** 1669
- [11] Liu C S, Wang D Z, Liu T W, Wang Y H 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6450 (in Chinese) [刘成森、王德真、刘天伟、王艳辉 2008 物理学报 **57** 6450]
- [12] Liu C S, Han H Y, Peng X Q, Chang Y, Wang D Z 2010 *Chin. Phys. B* **19** 035201
- [13] Huber P, Keller G, Gerlach J W 2000 *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **161–163** 1085
- [14] Kwok D T K, Fu R K Y, Chu P K 2002 *Surf. Coat. Technol.* **156** 97
- [15] Chu P K, Fu R K Y, Zeng X C, Kwok D T K 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 3743

Numerical simulation of plasma immersion ion implantation for cubic target with finite length using three-dimensional particle-in-cell model*

Wang Peng Tian Xiu-Bo[†] Wang Zhi-Jian Gong Chun-Zhi Yang Shi-Qin

(State Key Laboratory of Advanced Welding Production Technology, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

(Received 2 June 2010; revised manuscript received 14 September 2010)

Abstract

Plasma immersion ion implantation (PIII) of the square target with finite length is simulated using a three-dimensional particle-in-cell (PIC) plasma simulation in this paper. The incident dose, the impact angle and the implanted energy on the target surface are investigated. The results show that the sheath around the square target with finite length becomes spherical rapidly during PIII. And the three-dimensional sheath width is small apparently compared with the one simulated by two-dimensional PIC. And it is found that the three-dimensional ion dose is not evenly distributed on the target surface during simulation time ($50\omega_{pi}^{-1}$) in this work. The dose is smallest in the center of the target, and it is largest near the corner. This is due to spherical sheath where ions are focused and accelerated into near the corner. In the central zone, the ion incidence is nearly normal to the surface, and the impact average energy exceeds 90% of the maximum. But the impact angle near the corner is always nearly 45° , and the implanted energy is only about 50% of the maximum.

Keywords: plasma immersion ion implantation, numerical simulation, three-dimensional particle-in-cell, cubic target with finite length

PACS: 52.77.Dq, 52.65.-y, 52.30.-q, 52.40.Kh

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50773015, 10775036).

[†] Corresponding author. E-mail: xiubotian@163.com