

等离子体源离子注入球形靶的 蒙特-卡罗模拟*

王德真 马腾才 宫 野

(大连理工大学, 三束材料改性国家重点实验室, 大连 116024)

(1994年4月17日收到)

建立了在球形靶鞘层中离子的蒙特-卡罗模拟模型, 考虑了离子与中性粒子的电荷交换碰撞和弹性散射, 以及精确依赖于入射离子能量的电荷交换碰撞截面和动量输运截面. 模拟了不同气压下, 在鞘层扩展过程中, 氮离子 N_2^+ 到达靶表面的能量分布和入射角分布, 研究了它们的变化规律.

PACC: 5240K; 5265

1 引 言

离子注入技术已被广泛应用于金属材料表面改性领域中, 在金属材料表面形成新的合金层, 从而提高了抗腐蚀、摩擦、疲劳等机械性能. 但是, 传统的离子注入技术存在着一些缺陷, 如束流小, 束直线效应限制, 装置复杂等. 最近, 产生了一种新的离子注入技术, 称为等离子体源离子注入 (PSII)^[1], 将待注入的靶直接浸入等离子体源中, 靶上施加一系列负高压脉冲, 在靶和等离子体之间形成一个随时间变化的鞘层(非电中性区), 离子在鞘层内电场的加速下获得能量, 注入靶. 为了确定离子到达靶表面的能量分布和角分布, 鞘层电场的时空演化, 每时刻注入离子的束流密度, 一些解析和数值计算模型已经建立. Winder 等^[2]通过数值求解冷离子流体方程和泊松方程研究了鞘层的时空演化. Lieberman^[3]建立了一维平板几何 PSII 鞘层的解析计算模型, Scheuer 等^[4]将这一模型推广到柱和球几何形体上, 在这个模型中, 假设了在鞘层扩展过程, 遵守 Child-Langmuir 定律. Vahedi 等^[5]建立了等离子体源离子注入的一维碰撞模型, 推导出鞘层扩展过程中离子到达靶表面的能量分布解析表达式, 这一模型仅考虑了离子与中性粒子的电荷交换碰撞过程, 忽略了弹性碰撞, 并假设离子与中性粒子的电荷交换碰撞截面与入射离子能量无关. 离子入射靶表面的能量分布和角分布直接决定着离子在靶材料中的射程分布和在靶表面的溅射. 我们^[6]已经用蒙特-卡罗方法, 模拟了离子在平面靶鞘层中的运动, 研究了在靶表面离子的能量和角分布. 本文将建立球形靶鞘层中离子运动的蒙特-卡罗模拟模型, 考虑了离子 (N_2^+) 和分子 (N_2) 的电荷交换碰撞及弹性散射, 以及依赖于入射离子能量的碰撞截面数据^[7], 得到了在不同气压下, 鞘层向等离子体扩展过程中, 离子 (N_2^+) 到

* 国家自然科学基金和国家高技术研究发展计划青年基金资助的课题.

达球形靶表面的能量分布及入射角分布,研究了这些分布的变化趋势。

2 基本模型

2.1 基本假设

在等离子体源离子注入装置中,当负高压脉冲施加到靶上,在电子等离子体频率倒数 ω_{pe}^{-1} 的时间尺度,电子被电场推出远离靶,形成一个均匀的离子鞘层^[3],在离子等离子体频率倒数 ω_{pi}^{-1} 的时间尺度,离子被电场加速注入靶中,由于鞘层内离子密度的减少,引起了鞘层边界向等离子体中扩展,使等离子体中的离子进入鞘层,以维持鞘层的压降不变。离子在鞘层中向靶运动过程,要与中性粒子发生电荷交换和弹性碰撞,而损失能量。所以,离子到达靶表面的能量分布和入射角分布依赖于背景气体的气压及鞘层的扩展。该模型假设如下:

(1) 每时刻鞘层中离子密度的空间分布是均匀的,并随时间缓慢变化;

(2) 离子运动穿过鞘层期间,鞘层内电场分布不变,即鞘层向等离子体中扩展过程可看成是准稳态。

上述假设是为了进行蒙特-卡罗模拟而作的近似,它们的正确性已被证实^[4]。

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 $n_e = 0$, 在球坐标系中,由高斯定理

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 E_r) = en_s / \epsilon_0. \quad (1)$$

从鞘层边界 r_s 到鞘层内 r 积分式(1),利用边界条件 $E_r(r_s) = 0$, 得到电场分布

$$E_r(r) = \frac{en_s}{3\epsilon_0} (r - r_s^3/r^2), \quad (2)$$

鞘层中的电势分布

$$\phi(r) = -(en_s/3\epsilon_0)(r^2/2 + r_s^3/r - 3r_s^2/2). \quad (3)$$

由半径为 r_s 的球形靶边界条件 $\phi(r_s) = -V_0$, 得到

$$n_s = 6V_0\epsilon_0 r_s / eR^3, \quad (4)$$

其中 $R^3 = r_s^3 + 2r_s^3 - 3r_s^2 r_s$.

2.3 蒙特-卡罗模拟过程

用蒙特-卡罗方法模拟离子在鞘层中的运动,设在鞘层和等离子体交界处,离子遵守麦克斯韦分布,温度等于中性气体温度,由该分布抽样选取初始速度,离子在电场加速下向靶运动过程中,能遭受碰撞,每次碰撞离子的动能及运动方向都要发生改变,最后,离子注入靶,记录下离子的能量和入射角。

用 r 表示离子到坐标原点的距离, θ 表示离子运动方向与所在点径向的夹角。如果离子在电场中运动了一个小距离 $\Delta l (\Delta l \ll r)$, 大约为离子自由程的十分之一,离子的新

位置 r' 和能量 ε' 由下式给出:

$$r' = (r^2 + \Delta l^2 + 2r\Delta l \cos \theta)^{1/2} \simeq r + \Delta l \cos \theta, \quad (5)$$

$$\varepsilon' = \varepsilon + eE_r(r' - r) \simeq \varepsilon + eE_r \Delta l \cos \theta, \quad (6)$$

由中心力场中角动量守恒

$$mr'v' \sin \theta' = mr v \sin \theta, \quad (7)$$

$$v' = (2\varepsilon'/m)^{1/2}, \quad v = (2\varepsilon/m)^{1/2}, \quad (8)$$

可以得到新角度 θ' , 这里 m 是离子质量.

离子在距离 Δl 之内发生碰撞的概率为

$$P = nQ_t(\varepsilon_c)\Delta l, \quad (9)$$

其中 n 是中性能气体密度, $Q_t(\varepsilon_c)$ 是离子和中性粒子的总碰撞截面, ε_c 是离子在位置 $r_c = r + (\Delta l \cos \theta)/2$ 处的能量. 产生随机数 ξ_1 , 与 P 比较, 如果 $P \leq \xi_1$, 离子不发生碰撞, 继续跟踪离子到下一线段, 否则, 离子发生碰撞, 产生随机数 ξ_2 , 由概率

$$Q_e(\varepsilon_c)/Q_t(\varepsilon_c), \quad Q_x(\varepsilon_c)/Q_t(\varepsilon_c) \quad (10)$$

确定发生碰撞类型, 这里 $Q_e(\varepsilon_c), Q_x(\varepsilon_c)$ 分别是离子与中性粒子的弹性碰撞和电荷交换碰撞截面, 总截面 $Q_t(\varepsilon_c) = Q_e(\varepsilon_c) + Q_x(\varepsilon_c)$. ξ_1 和 ξ_2 是 $[0, 1]$ 之间均匀分布的随机数.

在发生电荷交换碰撞后, 新产生离子的能量由具有中性气体温度的麦克斯韦分布抽样选取, 散射角相对原离子的人射方向各向同性. 散射角 χ 和方位角 φ 由下式确定:

$$\chi = \xi_3 \pi, \quad (11)$$

$$\varphi = \xi_4 2\pi, \quad (12)$$

其中 ξ_3 和 ξ_4 是 $[0, 1]$ 间均匀分布的随机数.

对于离子与中性粒子的弹性碰撞, 这里采用了等质量的刚球模型, 碰撞后离子的能量 ε_1 为

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_c \cos^2 \chi, \quad (13)$$

散射角 χ 由下式计算:

$$\cos \Theta = \cos 2\chi = 1 - 2\xi_5, \quad (14)$$

或

$$\cos \chi = (1 - \xi_5)^{1/2}, \quad (15)$$

方位角

$$\varphi = 2\pi\xi_6, \quad (16)$$

其中 $\Theta = 2\chi$ 是质心坐标系中的散射角, ξ_5 和 ξ_6 是 $[0, 1]$ 间均匀分布的随机数.

碰撞后离子的速度方向与径向夹角的余弦为

$$\cos \theta_1 = \cos \theta_c \cos \chi + \sin \theta_c \sin \chi \cos \varphi, \quad (17)$$

其中 θ_c 和 θ_1 分别是碰撞前后离子速度方向与径向的夹角.

2.4 碰撞截面

等离子体源离子注入实验, 通常是将靶浸入氮等离子体中, N_2^+ 离子和 N_2 分子的弹性碰撞动量输运截面

$$Q_e(\varepsilon) = (56.46 + 38.34/\sqrt{\varepsilon}) \times 10^{-16} \text{cm}^2, \quad (18)$$

电荷交换碰撞截面

$$Q_x(\varepsilon) = (24.37 + 42.69/\sqrt{\varepsilon}) \times 10^{-16} \text{cm}^2, \quad (19)$$

其中 ε 是离子的能量, 以 eV 为单位。(18)和(19)式是利用文献[7]给出的碰撞截面数据拟合得到的解析表达式, 对于 $\varepsilon < 0.1 \text{eV}$, 取 $Q_e = 177.70 \times 10^{-16} \text{cm}^2$, $Q_x = 159.37 \times 10^{-16} \text{cm}^2$.

3 模拟结果与讨论

图 1 给出等离子体源离子注入, 气压 $p = 30 \text{mTorr}$, 鞘层边界扩展到不同位置时, 离

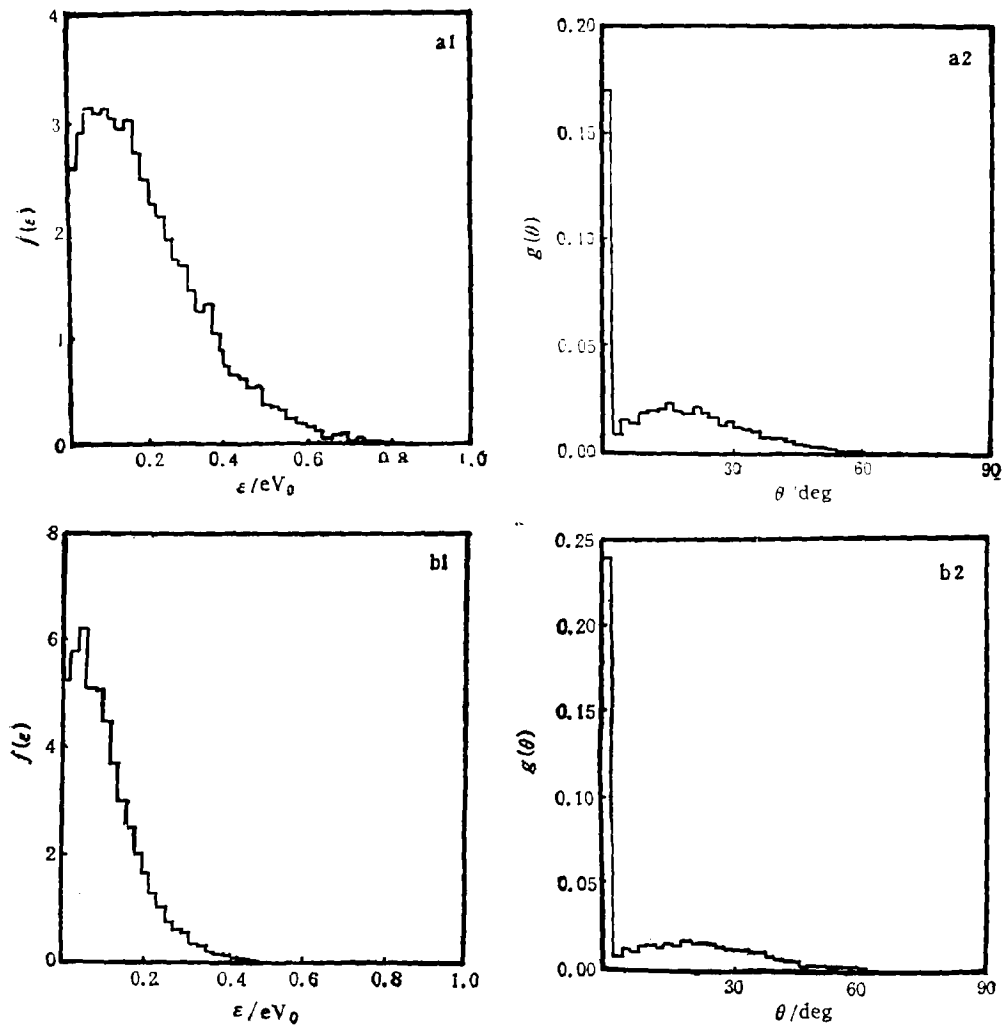


图 1 在球形靶表面入射 N^+ 离子的能量分布和角分布 靶半径为 $r_s = 2.0 \text{cm}$; 气压为 $p = 30 \text{mTorr}$; 负脉冲幅值为 $V_s = 20 \text{kV}$; 鞘层边界为 (a) $r_s = 4.0 \text{cm}$, (b) $r_s = 8.0 \text{cm}$

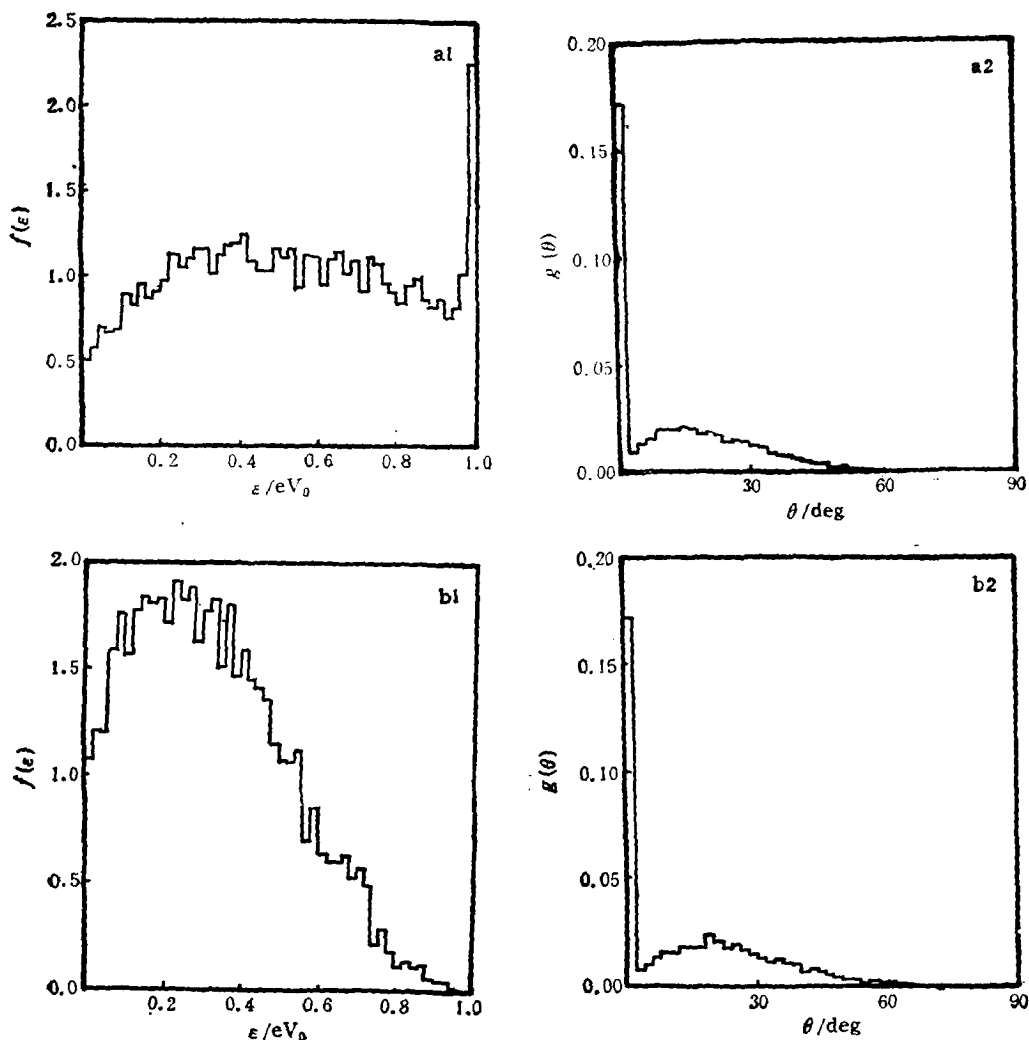


图2 在球形靶表面入射 N_1^+ 离子的能量分布和角分布 靶半径为 $r_t = 2.0 \text{ cm}$; 气压为 $p = 8 \text{ mTorr}$; 负脉冲幅值为 $V_0 = 20 \text{ kV}$; 鞘层边界为 (a) $r_s = 4.0 \text{ cm}$, (b) $r_s = 8.0 \text{ cm}$

子到达靶表面的能量分布和入射角分布。由能量分布曲线可以看出,在该气压下,离子在鞘层中向靶运动过程遭受大量碰撞,能量损失严重,低能离子很多,高能离子很少;随着鞘层边界向等离子体中扩展,离子能量分布的峰值向低能方向移动,这是由于鞘层变厚,离子和中性粒子的碰撞次数增加,损失能量增大。由离子在靶表面的入射角分布发现,尽管鞘层内强大的电场聚焦离子,也有很多离子非垂直注入靶表面,在大约 15° 角分布存在着第二个小峰,这是由于离子与中性粒子的弹性散射非各向同性的原故。

图2和图3分别给出气压 $p = 8$ 和 1 mTorr , 鞘层边界扩展到不同位置时,离子到达靶表面的能量分布和角分布。发现:气压下降显著地改变了靶表面处入射离子的能量分布,高能离子数量增加,低能离子数量减少;当气压降低到 $p \lesssim 1 \text{ mTorr}$ 时,绝大多数入射

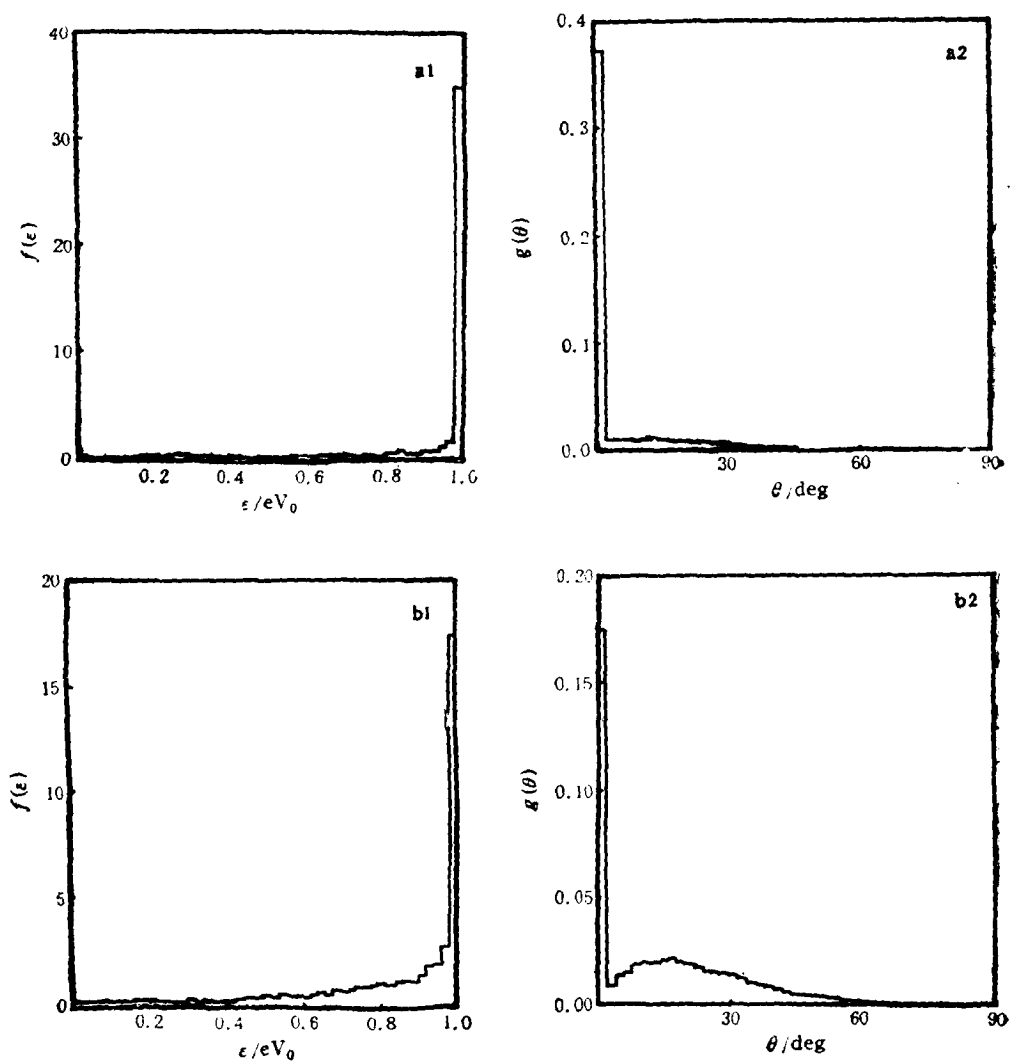


图3 在球形靶表面入射 N_1^+ 离子的能量分布和角分布 靶半径为 $r_t = 2.0\text{cm}$; 气压为 $p = 1\text{mTorr}$; 负脉冲幅值为 $V_0 = 20\text{kV}$; 鞘层边界为 (a) $r_s = 4.0\text{cm}$, (b) $r_s = 8.0\text{cm}$

离子能量达到最大值 eV_0 注入靶中,可以忽略碰撞效应。

图4给出离子到达靶表面能量分布的蒙特-卡罗模拟和解析计算结果^[5],这里略去 N_1^+ 和 N_2 的弹性碰撞,设电荷交换截面与离子能量无关,该值为 $Q_x = 3.4 \times 10^{-15}\text{cm}^2$ 。在这种情况下,蒙特-卡罗模拟与解析计算结果完全一致。

4 结 论

本文建立了在等离子体源离子注入装置中离子到达球形靶表面的能量和入射角分布的蒙特-卡罗模拟模型,细致地考虑了离子与中性粒子的电荷交换及弹性碰撞。模拟了不

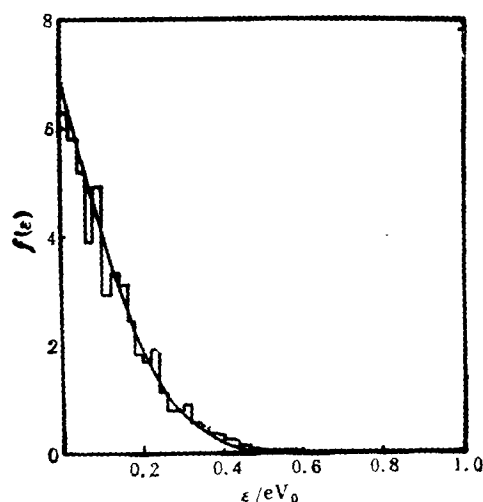


图4 在球形靶表面入射 N_1^+ 离子的能量分布 靶半径为 $r_s = 2.0\text{cm}$; 气压为 $p = 30\text{mTorr}$; 负脉冲幅值为 $V_0 = 20\text{kV}$; 鞘层边界为 $r_s = 12\text{cm}$; 折线为蒙特-卡罗模拟; 实线为解析结果^[5]

同气压下氮离子 N_1^+ 到达球形靶表面的能量分布和入射角分布。得到如下结论:

(1) 当气压 $p \leq 1\text{mTorr}$ 时,绝大多数离子以最大能量值 eV_0 垂直注入靶中,可以忽略碰撞效应。

(2) 当气压为 $p > 1\text{mTorr}$ 时,随着气压值升高,离子和中性粒子碰撞引起的能量损失越来越大,到达靶表面的高能离子数量减少而低能离子数量增加;随着鞘层边界向等离子体中扩展,离子能量分布的最大值向低能方向移动;有很多离子非垂直入射靶表面,角分布在大约 15° 有个极大值。

- [1] J. R. Conrad and J. L. Radtke, *J. Appl. Phys.*, **62**, (1987), 4591.
- [2] M. Winder, I. Alexeff and W. D. Jones, *Phys. Fluids*, **13**(1970), 1346.
- [3] M. A. Lieberman, *J. Appl. Phys.*, **66**(1989), 2926.
- [4] J. T. Scheuer, M. Shamin and J. R. Conrad, *J. Appl. Phys.*, **67**, (1990), 1241.
- [5] V. Vahedi, M. A. Lieberman, M. V. Alves, J. P. Verboncoeur and C. K. Birdsall, *J. Appl. Phys.*, **69** (1991), 2008.
- [6] Dezhen Wang, Tengcai Ma and Ye Gong, *J. Appl. Phys.*, **73**(9) (1993), 4171.
- [7] A. V. Phelps, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **20** (1991), 557.
- [8] J. R. Conrad, *J. Appl. Phys.*, **62** (1987), 777.

A MONTE-CARLO SIMULATION OF IONS STRIKING A SPHERICAL TARGET IN PLASMA SOURCE ION IMPLANTATION

WANG DE-ZHEN MA TENG-CAI GONG YE

*(State Key Laboratory of Material Modification by Three Beams, Dalian University of
Science and Technology, Dalian 116024)*

(Received 17 April 1994)

ABSTRACT

A Monte-Carlo simulation model is developed to study the energy and angle distributions of ions striking the spherical target for high pressures of the neutral gas. The ion-neutral charge exchange and momentum-transfer cross sections that depend on the ion energy are taken into account precisely. The energy and angle distributions of N^+ ions at the spherical target during the sheath edge evolution after the ion matrix sheath for different pressures are investigated in detail.

PACC: 5240K; 5265