

直流辉光放电等离子体轴向 动力学过程的研究*

刘祖黎 宋文栋 魏合林

华中理工大学物理系, 武汉, 430074

李 再 光

华中理工大学激光技术国家实验室, 武汉, 430074

1991年2月5日收到

采用磁流体动力学理论, 考虑了电子与中性粒子的非弹性碰撞, 应用有限差分法研究了直流辉光放电氩等离子体的轴向动力学过程。得到了氩等离子体密度、输运速度、温度以及电位的轴向分布。发现了气体压强和电极间距的变化对阴极区的电子密度有较大的影响, 而对阳极区的离子密度的影响甚微。

PACC: 5220; 5200

一、引 言

等离子体化学气相沉积在制备薄膜材料方面已得到广泛应用^[1]。沉积速率是等离子体化学气相沉积薄膜工艺的一个重要参量。理论和实验都已表明它不仅与放电功率、气体压强、极间距离、反应气体浓度比、基片温度等有关, 而且还与等离子体参量, 尤其是电子密度和电子温度的大小和分布密切相关, 因而研究等离子体参量的空间分布以及气压和极间距离的变化对它们的影响就显得十分重要。

Ward 和 Boeuf 等人利用带电粒子的连续性方程和泊松方程研究了直流辉光放电等离子体的一些特性, 取得了许多有意义的结果^[2,3], 但必须先给出输运速度与电场强度的关系式, 这些关系式只是在一定范围内适用, 并且得不到电子温度、离子温度等重要的等离子体参量。Richards 等人在连续性方程和泊松方程的基础上引入了一个电子能量方程^[4], 考虑了电子与氩原子碰撞而引起电子的能量损失, 用能量损失率系数来描述, 得到了电荷密度的空间分布, 但能量损失率系数的表达式只适用于氩气, 且仍需要采用输运速度的经验公式来自洽求解。Barnes^[5]考虑了电子与中性粒子的弹性碰撞, 提出了一个描述辉光放电的一维数值模型, 得到了电场强度、电子密度、离子密度和电子能量的空间分布。实际上在辉光放电过程中电子与中性粒子的非弹性碰撞而引起电子的动量和能量损失更为重要。我们考虑了这一因素, 并根据磁流体动力学理论提出了一个描述直流辉光

* 国家自然科学基金资助的课题。

放电等离子体的一维数值模型。这一模型无须再引入输运速度的经验公式, 在适当的边界条件下即可自洽求解。

二、数值模型

根据直流辉光放电等离子体的基本特性和平行平板辉光放电装置(见图 1)的特点, 提出以下简化假设:

(1) 辉光放电装置电极半径远大于极间距离, 边缘效应可以忽略, 辉光放电处于稳定状态, 放电气体是非电负性稀薄气体, 近似可看成理想气体。

(2) 高次电离的几率较小, 电离主要是一次电离, 带电粒子的产生主要是电子与中性粒子的碰撞电离; 带电粒子的消失主要是电子与正离子的空间复合以及边界上的复合。

(3) 电子的动量损失和能量损失主要是电子与中性粒子的碰撞电离而引起的。

由磁流体动力学理论和以上简化假设, 有

$$d(n_e u_e)/dz = \alpha n_e |u_e| - a_e n_e n_i, \quad (1)$$

$$d(n_i u_i)/dz = \alpha n_e |u_e| - a_e n_e n_i, \quad (2)$$

$$m_e n_e u_e du_e/dz = -n_e e E - dP_e/dz + R_{en}, \quad (3)$$

$$m_i n_i u_i du_i/dz = n_i e E - dP_i/dz, \quad (4)$$

$$3/2 n_e u_e dT_e/dz = -P_e du_e/dz + K_e d^2 T_e/dz^2 + Q_{en}, \quad (5)$$

$$3/2 n_i u_i dT_i/dz = -P_i du_i/dz + K_i d^2 T_i/dz^2, \quad (6)$$

$$d^2 \phi/dz^2 = -e/\epsilon_0 (n_i - n_e), \quad (7)$$

其中 $n_e, n_i, u_e, u_i, T_e, T_i, P_e, P_i, m_e, m_i, K_e, K_i$ 分别是电子和正离子的密度、输运速度、温度、压强 ($P_e = n_e T_e, P_i = n_i T_i$)、质量和热导系数, α 是第一汤生电离系数, 它的表达式^[2]为

$$\alpha = AP \exp[-B(P/E)^s], \quad (8)$$

对于单原子气体, $s = 1/2$, 对于分子气体, $s = 1$ 。 A, B 是与电离气体有关的常数, P 是气体压强。 a_e 是电子复合系数, R_{en} 和 Q_{en} 分别是电子与中性粒子非弹性碰撞而获得的动量和能量, ϕ 是电势, E 是电场强度。 e 是电子电量, ϵ_0 是真空介电常数。

R_{en} 和 Q_{en} 的表达式可通过如下的分析而得到。 α 表示一个电子沿着阴极向阳极方向运动时每经过单位距离的过程中它与气体原子发生碰撞电离的次数, 那么 αdz 表示一个电子经过 dz 距离内产生的电离次数, $n_e \alpha dz$ 则表示单位体积内的电子在经过 dz 距离内产生的电离次数, $n_e \alpha dz/dt$ 表示单位体积内的电子在单位时间内产生的电离次数。 由于 $dz/dt = |u_e|$, 所以 $n_e \alpha dz/dt = \alpha n_e |u_e|$, 则单位时间单位体积内电子由于碰撞电离而引起的能量损失是 $\alpha n_e |u_e| W_i$, 其中 W_i 是气体原子或气体分子的第一电离能, 所以

$$Q_{en} = -\alpha n_e |u_e| W_i, \quad (9)$$

v_e 是电子损失能量 W_i 时对应的速度, $v_e = (2W_i/m_e)^{1/2}$, 则电子由于碰撞电离而引起

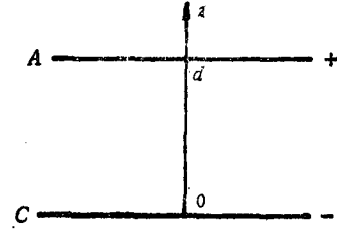


图 1 平板电极辉光放电等离子体系统

的动量损失是 $m_e v_e$, 所以单位时间单位体积内电子由于碰撞电离而引起的动量损失为 $\alpha n_e |u_e| m_e v_e$, 则

$$R_{en} = -\alpha n_e |u_e| m_e v_e. \quad (10)$$

计算中采用了如下的边界条件 (见图 1): 在负极板处 (即 $z = 0$), 有 $J_e = \nu J_i$, $\partial u_e / \partial z = \partial n_i / \partial z = \partial u_i / \partial z = \partial T_e / \partial z = \partial T_i / \partial z = 0$, $\phi = 0$, 其中 J_e, J_i 分别是电子和离子电流密度的大小, 且有 $J_e = en_e u_e$, $J_i = en_i u_i$, ν 是二次电离系数。在正极板处 (即 $z = d$), 有 $n_i = u_i = 0$, $\phi = V_0$, $\partial n_e / \partial z = \partial u_e / \partial z = \partial T_e / \partial z = \partial T_i / \partial z = 0$, 其中 V_0 是外加电压, 由实验给定。

三、结果与讨论

应用有限差分方法求解方程组(1)–(7), 计算参数^[2,6]如下: $A = 29.22 \text{ cm}^{-1} \text{ Torr}^{-1}$, $s = 1/2$, $V_0 = 265 \text{ V}$, $B = 26.64 \text{ V}^{1/2} \text{ cm}^{-1/2} \text{ Torr}^{-1/2}$, $W_i = 15.76 \text{ eV}$, $\nu = 0.02$, $a_e = 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ 。对于氩冷等离子体我们忽略了热传导项。

图 2 是极间距离 $d = 5 \text{ cm}$, 极间电压 $V_0 = 265 \text{ V}$, 气压 $P = 1 \text{ Torr}$ 时电场强度和电位的轴向分布曲线。分析曲线可以得出阴极区厚度 $d_c = 0.1d = 0.5 \text{ cm}$, 而由实验结果知^[6], 对于氩气正常辉光放电, 阴极区厚度 $d_c = 0.33/P \text{ cm}$ 。当 $P = 1 \text{ Torr}$ 时, d_c 是 0.33 cm , 这与我们的计算结果基本一致。阳极区厚度约是 0.5 cm , 正柱区厚度约是 4 cm 。我们还发现电场强度的最小值并不在阳极区而是在正柱区内。这一结论与 Davies 的结果^[7]相同。

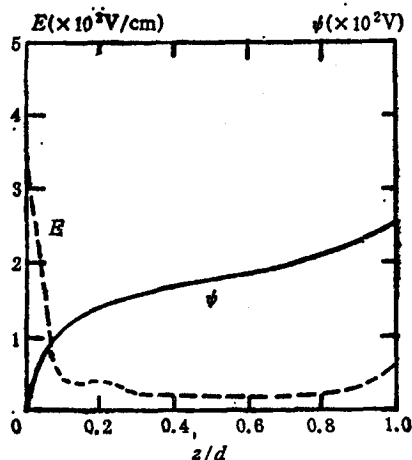


图 2 电场强度和电位的轴向分布曲线
 $V_0 = 265 \text{ V}$; $P = 1 \text{ Torr}$; $d = 5 \text{ cm}$

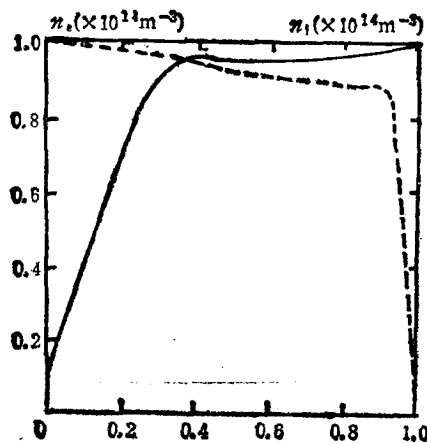


图 3 电子密度和离子密度的轴向分布曲线 参数同图 2

图 3 是电子密度和离子密度的轴向分布曲线。在阴极区电子密度随 z 的增加而迅速增加, 在正柱区和阳极区电子密度基本保持不变。这是因为阴极区内电场强度较大, 电子在电场的作用下获得了较大的能量, 然后与中性粒子发生碰撞电离而产生电子雪崩现象。在正柱区和阳极区电场较弱, 电离次数少, 电子的产生和复合基本平衡, 因而电子密度基

本不变。从图 3 可以看出在阴极区空间电荷呈正电性, 由泊松方程并考虑电场强度方向 (见图 1) 有 $dE/dz = -e/\epsilon_0(n_i - n_e) \approx -e/\epsilon_0 n_i \approx$ 常数, 则电场强度在阴极区近似为线性电场, 并随 z 的增加而减小 (见图 2); 在正柱区有 $n_e \approx n_i$, 即空间电荷呈中性, 这一区域是等离子体区域, 这时有 $dE/dz \approx 0$, 即电场强度保持不变, 电位作线性增加 (见图 2); 在阳极区空间电荷呈负电性, 由 $dE/dz = -e/\epsilon_0(n_i - n_e) \approx e/\epsilon_0 n_e > 0$ 知 E 随 z 的增加而增大, 可见在阳极区电子空间电荷起着重要的作用。由实验结果还可知对于氩气, 当气压为 1 Torr 时, 正常辉光放电电流密度^[8] $J_a = 1.6 \times 10^{-4} \text{ A/cm}^2$, 这与我们的计算结果相一致, 在阳极区有 $J_e = en_e u_e = 8.0 \times 10^{-4} \text{ A/cm}^2$ 。

图 4 是电子和离子的输运速度的轴向分布曲线。电子输运速度在阴极区较大且随 z 的增加而减小。这是因为电子在强电场的作用下在一个平均自由程内即可使电子速度增加到很大。这里给出一个定量计算来说明, 电子在氩气中的平均自由程约是 10^{-2} cm ^[8], 而在阴极区的电场强度是 260 V/cm (见图 2), 设电子从阴极极板出来的速度为零, 则经过一个平均自由程电子的速度约是 10^6 m/s 。而一个平均自由程的长度相对于我们讨论的极间距离是宏观小, 故阴极区的输运速度是较大的。在正柱区电子输运速度变化不大, 这是因为在正柱区电子碰撞电离次数很小 (可从电离系数 α 的表达式看出, α 是随电场强度 E 的增加而增加的), 因而损失的动量很小, 电子从弱电场中获得的动量与电子损失的动量基本平衡。离子的输运速度约是电子输运速度的百分之一。

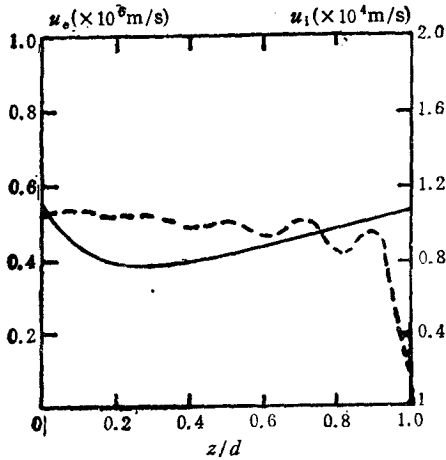


图 4 电子输运速度和离子输运速度的轴向分布曲线 参数同图 2

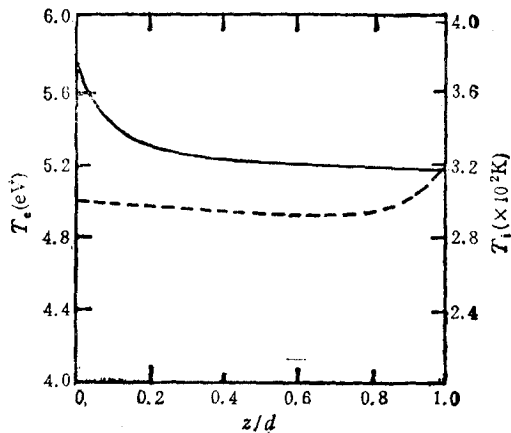


图 5 电子温度和离子温度的轴向分布曲线 参数同图 2

图 5 是电子温度和离子温度的轴向分布曲线, 可以看出电子温度在阴极区较大, 且随 z 的增加而减小, 在正柱区和阳极区近似为常数。电子从阴极发射出来后在阴极区一个宏观小微观大的区域内在电场的作用下获得了较大的能量, 从而电子的平均能量较大, 故电子温度较高。随着 z 的增加, 一方面电场强度在减小, 电子在一个平均自由程内获得的能量相对减小; 另一方面电子与中性粒子的碰撞电离而使电子损失能量, 故随 z 的增加电子温度相应减小。而在正柱区和阳极区, 电场较弱, 电离次数较少, 获得能量和损失能量

基本平衡,故电子温度变化甚小。离子温度在整个区域内变化不大,与中性气体的温度基本相同。

图6是在 $V_0 = 265\text{V}$, $d = 5\text{cm}$ 时阴极区内空间点 $z/d = 0.02, 0.06$ 和 0.1 处的电子密度和离子密度随气压的变化曲线。结果表明气压在 0.5Torr 附近,电子密度有一极小值,当气压小于这一值时,电子密度随气压的增加而减小;当气压大于这一值时,电子密度随气压的增加而增加,然而离子密度基本上不随气压的变化而变化。气压 P 对电子密度和离子密度的影响是通过汤生第一电离系数 α 而反应出来的。气压的变化导致电离系数 α 的变化,从而使得空间电场发生畸变,以致电子密度发生相应的变化,然而离子的惯性大,故离子密度的变化甚小。

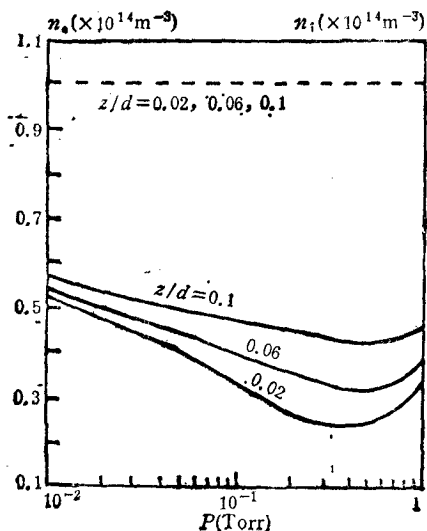


图6 电子密度(实线)和离子密度(虚线)随气压的变化曲线 参数同图2

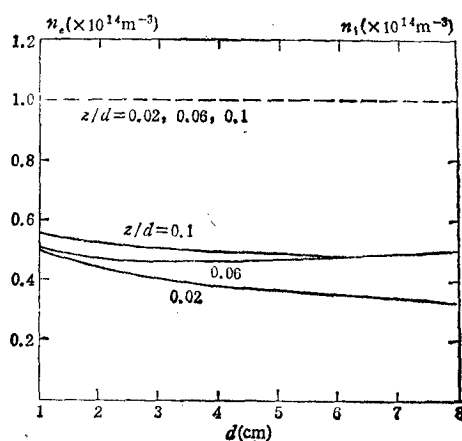


图7 电子密度(实线)和离子密度(虚线)随极间距离的变化曲线 参数同图2

图7是在 $V_0 = 265\text{V}$, $P = 1.0\text{Torr}$ 时阴极区内空间点 $z/d = 0.02, 0.06$ 和 0.1 处的电子密度和离子密度随极间距离的变化曲线。可以看出靠近阴极的空间点的电子密度随极间距离的增大而减小,而靠近正柱区的空间点的电子密度随极间距离的变化较小。在极间电压不变的情况下极间距离的变化必然导致空间电场重新分布,空间电场的变化也使得汤生第一电离系数 α 发生变化,从而电子密度发生相应的变化。离子的惯性大,故极间距离的变化对离子密度的影响很小。

四、结 论

本文给出了电子与中性粒子碰撞电离而引起电子的动量和能量损失项。所得结果与实验结果比较接近。为等离子体化学气相沉积薄膜工艺提供了一个理论参考依据。

本工作得到中国等离子体研究会的支持,深致谢忱。

- [1] 钱振型, 固体电子学中的等离子体技术, 电子工业出版社, 北京, (1987), 第 1 页.
- [2] A. L. Ward, *J. Appl. Phys.*, 33(1962), 2789.
- [3] J. P. Boeuf, *Phys. Rev. A* 36(1987), 2782.
- [4] A. D. Richards *et al.* *Appl. Phys. Lett.*, 50(1987), 492.
- [5] M. S. Barnes, *J. Comput. Phys.*, 77(1988), 53.
- [6] R. Lagushenko *et al.*, *J. Appl. Phys.*, 54(1983), 2255.
- [7] A. J. Davies, *J. Phys. D*, 13(1980), L161.
- [8] 胡志强, 气体电子学, 电子工业出版社, 北京, (1985), 第 81 页.

A STUDY ON DYNAMICS OF dc GLOW DISCHARGE PLASMA AT AXIAL DIRECTION

LIU ZU-LI SONG WEN-DONG WEI HE-LIN

Department, of Physics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, 430074

LI ZAI-GUANG

National Laboratory of Laser Technology, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, 430074

(Received 5 February 1991)

ABSTRACT

We study one dimensional dynamics of dc glow discharge for parallel plates, taking into account the effect of inelastic collisions between electrons and neutral particles on the energy and momentum loss by the MHD theory. The distributions of density, velocity and temperature of plasma and the electric field for Ar plasma are obtained. It is found that the gas pressure and the electrode spacing give significant influence on electron density in the cathode region, but the influence on ion density is small.

PACC: 5220; 5200