

空心阴极直流放电的二维自洽模型描述和 阴极溅射分析^{*}

赖建军^{1)†} 余建华²⁾ 黄建军³⁾ 王新兵¹⁾ 丘军林¹⁾

¹⁾ 华中科技大学激光技术国家重点实验室, 武汉 430074)

²⁾ 深圳大学科技研究院光电子系, 深圳 518060)

³⁾ 深圳大学理学院, 深圳 518060)

(2000 年 12 月 30 日收到, 2001 年 2 月 19 日收到修改稿)

建立了空心阴极放电的二维自洽理论模型, 理论研究了气压为 50—120 Pa, 电压为 150—300 V 的范围内 Ar 空心阴极放电特性、粒子密度和电离速率空间分布, 特别考察了影响阴极溅射分布有关因素: 阴极面上的电场、离子流和离子密度的沿阴极截面的空间分布. 研究结果不仅证实了在所讨论的范围内, 空心阴极效应明显存在而且发现归一化电离速率的空间分布形状强烈依赖于气压. 通过研究电场、离子流和离子密度的空间分布解释了空心阴极溅射型离子激光器中不均匀阴极溅射的现象来源于阴极面附近的电场、离子流和离子密度的不均匀分布.

关键词: 空心阴极放电, 自洽模型, 气体激光, 阴极溅射

PACC: 5280, 5265, 4255H, 7920N

1 引言

空心阴极放电(HCD)由于能够产生空心阴极效应, 得到高电离度和大电流密度, 使其非常适合于激励离子激光器. 在具有空心阴极效应的空心阴极放电中, 从阴极发射的高能电子在两相对的阴极面之间来回摆动, 增加了电子的碰撞机会, 使得在较低放电电压下就可获得较大的电流密度. 同时高电离度产生高密度的离子, 在阴极溅射型离子激光器中产生高密度的金属原子蒸汽. 目前新型的离子激光器的射频放电方法, 仍然是利用了高电流射频放电具有类似于空心阴极放电特性的原理^[1,2].

由于阴极暗区(CDS)是产生非局域电离、维持自持放电的重要区域, 以往的研究主要以此区域为主. Monte Carlo(MC)方法是研究阴极暗区中电子和离子动力学的较常用的方法. Hashiguchi 和 Hasikuni^[3]采用 Monte Carlo 方法分析了圆筒型空心阴极放电中的电子能量分布. 陈永洲等模拟了矩形空心阴极氩放电过程中电子的运动, 并考察了磁场对放电过程的影响^[4]. Donko^[5]研究了四个电极段组

合成的高放电电压空心阴极放电中电子的运动. 在这些 Monte Carlo 分析中, 均采用 CDS 中的一维线性电场的假设, 且 CDS 长度的选取随意性大, 因此是非自洽的. 最近把粒子模型和流体力学模型组合起来的自洽方法可以较精确的描述整个放电区. Donko^[6]用这种组合方法研究了 1 cm × 1 cm 矩形空心阴极中小电流低气压氩放电的放电特性和阳极上电子的吸收对放电造成的影响. 在这种组合模型中快电子用 Monte Carlo 描述而慢电子和离子用流体力学方法处理. 但是他没有考虑阴极溅射过程.

在研究用于溅射型离子激光器的空心阴极放电特性时, 除了放电的一般特性外, 阴极溅射过程的分析对于研究溅射物质的空间分布和阴极几何形状的变化等实际问题都有重要意义. 但是大多数有关阴极溅射的研究面向低气压条件的薄膜沉积、等离子体刻蚀和固体表面改性等领域^[7-9]. 理论上较完整的研究中高气压下的辉光放电, 特别是空心阴极放电条件下的阴极溅射问题开展得很少. 本文在以前电子的 Monte Carlo 模型的基础上^[10], 结合慢电子和离子的流体模型, 建立了空心阴极放电的二维自洽模型. 研究了空心阴极放电的一般放电特性和等离

^{*} 广东省自然科学基金(批准号: 980922)资助的课题.

[†] 作者为深圳大学光电子系与华中科技大学激光技术国家重点实验室联合培养的博士研究生.

子体特性,并和已有的理论结果进行了比较.特别考察了阴极面上的电场的空间分布和阴极面上影响溅射分布过程的离子流和离子密度空间分布.解释了阴极溅射的不均匀性问题,对实践工作具有一定的指导意义.

2 模型描述

2.1 基本假设

考虑由两平行平板阴极和两阳极构成的空心阴极放电系统,如图 1 所示.假设电极在 x 方向足够长,从而可忽略放电的纵向效应.横向放电截面设为 yz 平面.与文献 [9] 一致,空心阴极截面积设为 $0.4 \text{ cm} \times 0.6 \text{ cm}$,其中阴极间距为 0.4 cm .

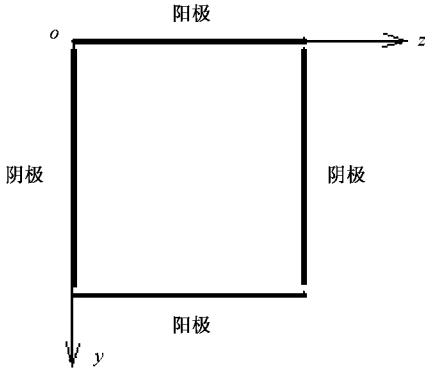


图 1 空心阴极放电结构截面图

适当选取两空心阴极放电间距 D 和气压 p 的乘积,可以使放电仅出现阴极暗区和重叠的负辉区 (NG),出现空心阴极效应.在本模型中,气体温度设为 300 K ,放电电压的范围为 $150\text{—}300 \text{ V}$,气压为 $50\text{—}120 \text{ Pa}$.在这种情况下,在考虑放电区粒子之间的相互作用时可以只考虑电子对气体基态原子的碰撞激发和碰撞电离,忽略电子-电子碰撞和电子-离子碰撞过程,同时忽略各种复合过程.假设气体离子在阴极表面引起的二次电子发射可认为主要由缓冲气体正离子的碰撞引起,二次电子发射系数 γ 设为 $0.083^{[10]}$.

假设电子到达阳极后被完全吸收.阳极电势固定为 0,而阴极电势等于外加电压.外电路的影响不考虑.电极上的电子和离子密度都设为 $0^{[6]}$.

2.2 慢电子和离子的流体模型

慢电子是指负辉区中能量小于气体原子第一激

发能的电子,由于负辉区中的电场很小,这种电子不可能得到加速,因此用流体处理比较合适.在阴极暗区中由高能电子电离产生的低能量的电子由于还可能被电场加速,因此不作为慢电子对待.

慢电子和离子的流体模型由电子和离子连续性方程和动量平衡方程以及泊松方程组成,因此电子密度、离子密度和电场(或电势)是本模型的基本变量,它们是二维空间坐标 (y, z) 的函数.描述这些变量的基本方程为

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e = S_e, \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_i = S_i, \quad (2)$$

$$\Delta V = -\frac{|e|}{\epsilon_0}(n_i - n_e), \quad (3)$$

其中 n_e 和 n_i 分别是电子和离子密度, S_e 和 S_i 分别是慢电子和离子的源函数, V 为电势, e 和 ϵ_0 分别为基本电荷和自由空间的介电常量, Γ_e 和 Γ_i 分别为慢电子流和离子流密度,可表示为迁移和扩散两项的和

$$\Gamma_e = -n_e \mu_e E - \nabla(n_e D_e), \quad (4)$$

$$\Gamma_i = n_i \mu_i E - \nabla(n_i D_i), \quad (5)$$

其中 E 为电场,而 $\mu_e(D_e)$ 和 $\mu_i(D_i)$ 分别是慢电子和离子的迁移系数(扩散系数),它们是 E/p 的函数,具体形式见文献 [11].

2.3 快电子 MC 模型

电子和离子连续性方程的源项通过快电子的 MC 计算得到.初始电子来自于阴极表面的电子发射,初始能量设为 10 eV ,初始速度垂直于阴极表面^[5].电子在两次连续的碰撞之间的运动轨迹 $r(t)$ 遵循牛顿运动定律:

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = e(E + v \times B), \quad (6)$$

其中 m 和 e 分别是电子的质量和电荷, B 为磁场, $v = dr/dt$ 为电子的速度.此运动方程采用四阶龙格库塔方程求解.当运动电子离开放电空间或到达负辉区时的能量小于氩原子第一激发能(12 eV)时,即终止对该电子的跟踪.在跟踪过程中,每经历一个时步,要判断是否发生碰撞,若发生碰撞,发生何种碰撞.碰撞事件的处理采用零碰撞技术.具体的处理过程和碰撞过程中能量的分配见文献 [10].

快电子 MC 模拟的输入为流体模型得到的电场分布和放电总电流,而输出为慢电子产生速率

$S_e(y, z)$ 和离子产生速率 $S_i(y, z)$. 此两速率通过放电总电流归一化, 方法如下: 如果从阴极发射的电子总数为 N_0 , 在体积元 $\Delta y \times \Delta z \times L$ 内产生的慢电子或离子数为 N_{yz} , 则源项 $S(y, z)$ 为^[5]

$$S(y, z) = \frac{N_{yz}}{N_0} \frac{I}{|e|(1 + 1/\gamma)\Delta y \Delta z L}, \quad (7)$$

其中 γ 为阴极二次电子发射系数, L 为电极长度, I 为放电总电流.

3 算 法

运用有限差分格式对慢电子和离子连续性方程及泊松方程离散后联立求解. 在对粒子流空间离散时采用 Scharfetter-Gummel 指数方案^[12], 即假设粒子流、迁移系数和扩散系数在两邻近的网格点之间区域是常量, 通过在此区间积分得到网格中心点的粒子流的指数表达式, 其优点是可以同时有效地描述以迁移为主或以扩散为主的区域(对应于 CDS 的高电场区或 NG 的低电场区). 离散化后的耦合方程组采用 Newton-SLOR 方法求解^[13]. 初始的电子密度设为 0, 而离子密度设为 10^9 cm^{-3} , 均匀分布于 20×40 的网格内节点上; 初始的 CDS 长度可以任意选取, 只要小于二分之一阴极间距即可; 初始电势假设在 CDS 中是线性变化分布, 而在 NG 中为零. 流体模型的时步设为 10^{-8} s .

在初始条件给定的情况下, 先进行流体模型的计算. 在每一步, 经过几至十几次的迭代即可收敛. 经过 50 或 100 个时步后, 计算阴极面上的总电流和放电空间网格点上的电场分布, 而后转入快电子 MC 模拟. 放电空间的任意点处的两维电场分量利用格点上的电场值经过双线性二维插值得到. 在给定电场和放电总电流的情况下, 进行快电子 MC 模拟. 为减少模拟时间, 快电子 MC 模拟的发射电子数为 500. 从快电子 MC 得到的源项再输入到流体模型, 进行下一轮计算. 重复以上过程, 直到流体模型的基本输出量收敛, 即相邻两个时步的各网格点上的粒子密度和电势的相对误差小于 10^{-4} . 模型的计算基本过程如图 2 所示.

为得到平滑的快电子模拟结果, 在得到流体模型的收敛解后, 再进行大粒子数目下的 MC 模拟. 电子的发射数取为 5×10^4 . 在 Pentium II 450 微机上进行一种条件下的完整过程的计算需要大约 25 h.

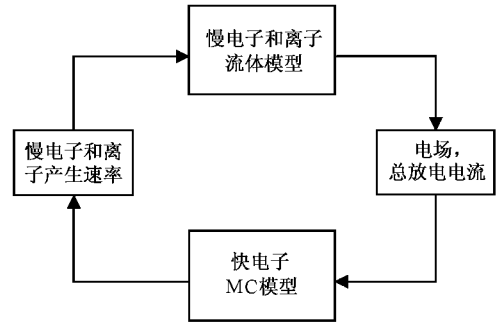


图 2 模型计算基本过程框图

4 结果与讨论

4.1 一般放电特性

本模型以 Ar 作为模型气体, 阴极位降电压为 150—300V, 气压为 50—120 Pa. 由于放电电流较小, 因而气体温度可设恒为 300 K.

伏安特性 图 3 给出了气压分别为 100 和 80 Pa 时的放电电流密度 j 与放电电压 V 的关系曲线, 并给出了气压为 100 Pa 时的放电伏-安曲线和分析理论曲线的对比. 理论曲线基于阴极位降理论得到的分析表达式^[14]:

$$j/p^2 = 4\mu_i \epsilon_0 (1 + \gamma) V_c^2 (pd_c)^3, \quad (8)$$

其中 μ_i 为正离子的迁移率, ϵ_0 为真空介电常量, V_c 和 d_c 分别为阴极位降电压和阴极暗区宽度, γ 为有效二次电子发射系数. d_c 由本模型计算得到. 分析理论已被大多数实验所证实. 图 3 显示在所讨论的电压范围内, 由本模型得到的结果与分析理论得到的 j - V 关系具有相似的曲线. 在低电压下, 两种结果

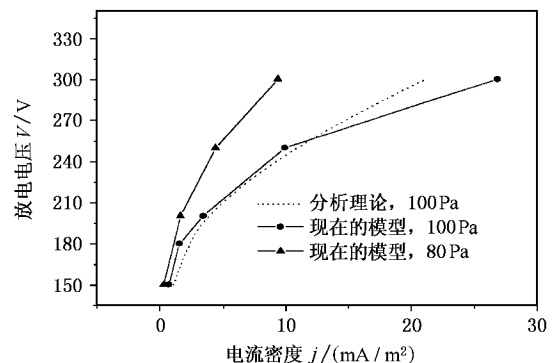


图 3 放电伏安特性 气压为 100 Pa 时本模型结果和分析理论结果的比较

符合得较好,但在高电压下,存在一些偏差.高电压下的差异可能来自本模型的简化假设,如有效二次发射系数的常数值假设以及忽略快中性粒子对放电的影响等.

粒子密度分布和电势分布 图 4(a)和(b)给出了放电电压为 250 V 时的二维氩离子密度分布和沿 z 方向的密度分布.可以看到离子密度的峰值在放电中心.放电区域的结构可明显地在图 4(b)上看出,阴极附近的阴极暗区以正离子密度为主,电子的密度几乎可以忽略不计.离开阴极具有相同离子和电子密度的区域为准中性等离子体区.等离子体区的粒子密度比阴极暗区高出很多,说明电离主要集中在这一区域.沿 z 方向的电势分布如图 4(c)所示,在从阴极面到负辉区边界的阴极暗区中,电势从应用电位急剧上升到阳极电位,并在中间负辉区保持平均约 10 V 的高于阳极的电位.

电离速率空间分布 图 5(a)给出了不同电压下的沿 z 方向的归一化电离速率分布.从电离速率的分布截面可以明显看出整个放电区由两个不同的区域组成.在阴极附近低电离速率区域为阴极暗区,而中心高电离速率的区域为负辉区,且相对的两阴极面的阴极负辉区重叠在一起.这表明空心阴极效应确实存在.随着电压由低到高的增加,负辉区的长度也在增加,而阴极暗区宽度减小.另外,在 100 Pa 时电离速率的峰值在所考虑的电压范围内都在 CDS-NG 边界.随着电压的升高,电离速率虽然都在增加,但放电中心和 CDS-NG 边界处的电离速率的相对比值没有太大的改变.图 5(b)给出了不同气压下的沿 z 方向的归一化电离速率分布.可以看到,在气压为 50 Pa 时,电离主要集中在中心位置.随着气压的升高,高电离区域逐渐向电极靠近,即放电区电离区域变宽,同时电离变得不均匀,中心区电离下降,而在 CDS-NG 边界处出现电离峰值.这说明,气压较低时,两阴极边的负辉电离区几乎完全重合,空心阴极效应很明显,而当气压升高时,阴极暗区变薄,负辉电离区只能部分重合,到达负辉中心的振荡电子相应减少,因而中心处的电离速率比 CDS-NG 边界处的电离速率要低.可以预见,当气压进一步增加时,伴随振荡电子的进一步减少,两边电极的负辉区分开来,则空心阴极效应将消失.这一方面证实了阴极暗区的宽度与气压和放电电压有关,另一方面也说明电离速率以及激发速率的分布会随着电压的升高向电极扩展,但并不改变中心与边缘区的相

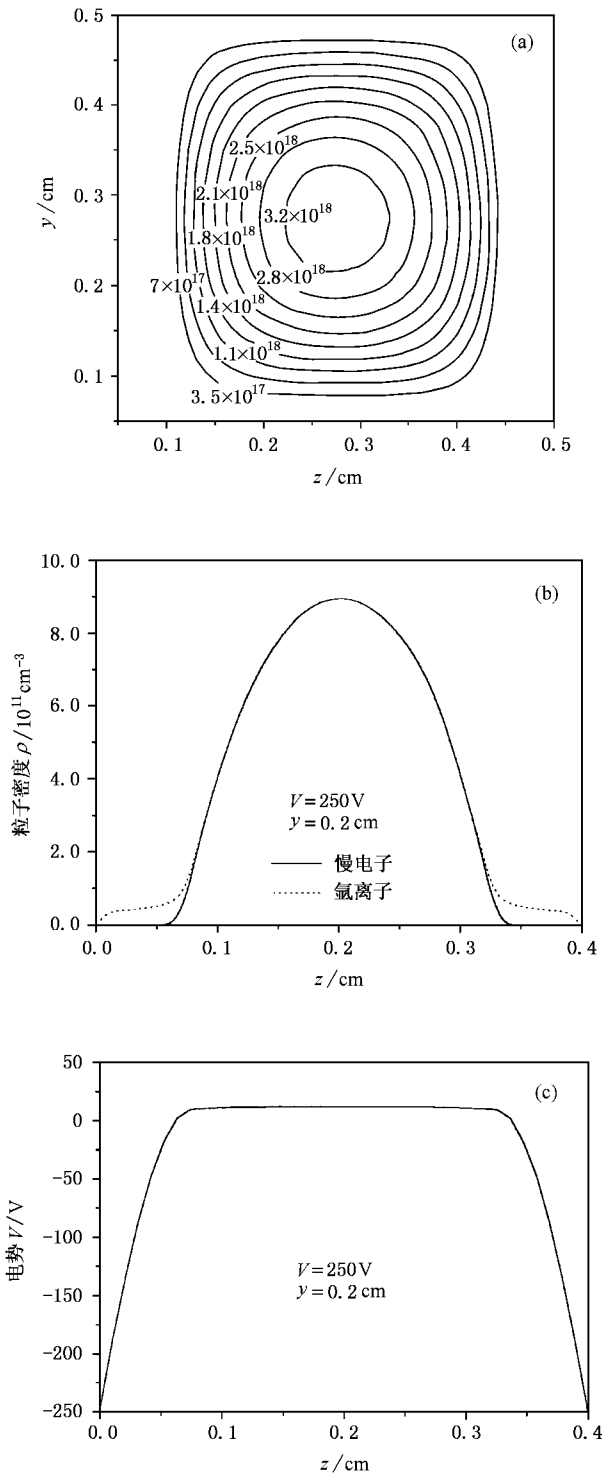


图 4 放电电压为 250 V,气压为 100 Pa 时的 Ar^+ 密度空间分布和电势分布 (a)为二维空间分布 (b)为 $y = 0.2 cm$ 处沿 z 方向的离子密度分布 (c)为 $y = 0.2 cm$ 处沿 z 方向的电势分布

对比率,其改变只和气压有关系.

4.2 阴极溅射

图 6 给出了阴极面上的沿 z 方向的电场以及离

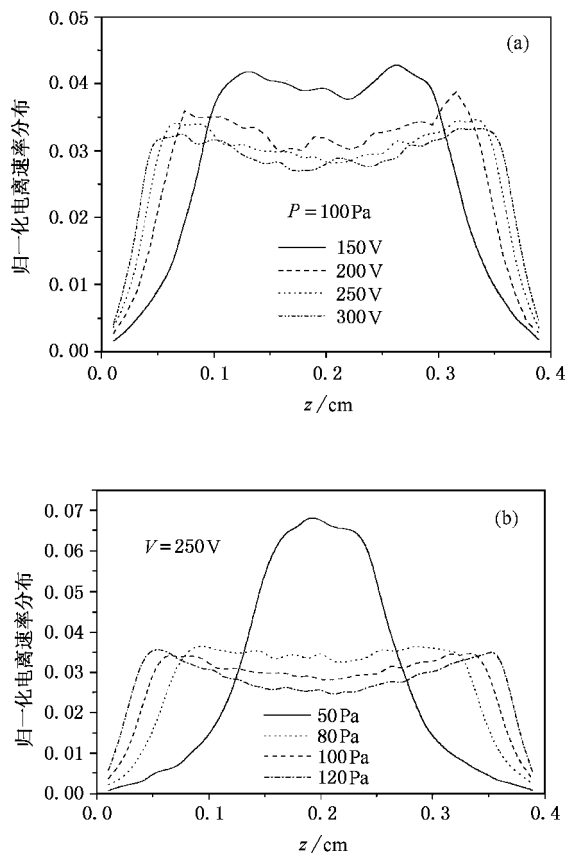


图 5 (a)为不同电压下的电离速率分布;(b)为不同气压下的电离速率分布

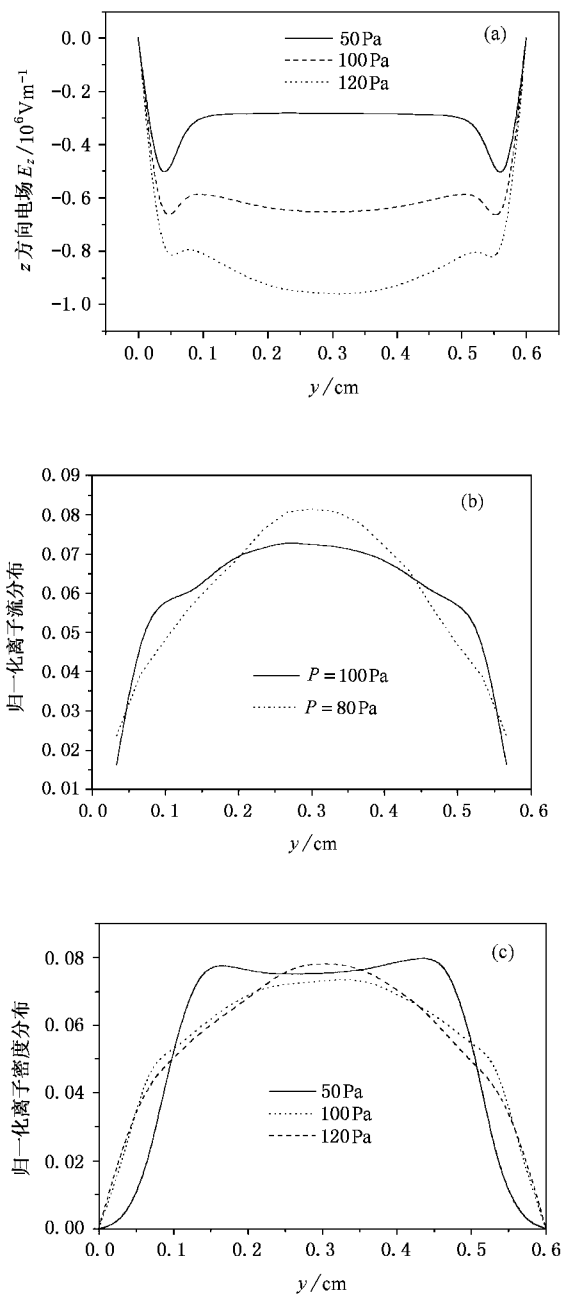


图 6 不同气压下阴极面上的电场的空间分布(a)、归一化离子流分布(b)和归一化离子密度的空间分布(c) 放电电压为 250 V

子流和离子密度的归一化分布.从图 6 可以看出,电场、离子流和离子密度在阴极上的分布形状都随气压的变化而变化.图 6(a)显示在低气压下,除了阴极与阳极相距较近的边沿处电场有突变外,其余部分的电场分布比较均匀,但随着气压升高电场增加并变得不均匀.在阴极截面的中心部分的电场的增加随气压的升高而较两边的电场增加得快.至于离子流和离子密度也存在不均匀分布的问题.从图 6(b)和(c)可以看出,中心位置处较两边具有较高的流和密度分布.这种分布还和气压有关系,气压越高,离子越集中在中心.显然这种分布会造成离子轰击阴极而产生溅射的空间不均匀.气压较高时,在阴极的中心部位溅射的较厉害,而在气压下降时,溅射趋于均匀,当气压更低时,甚至有可能阴极的中心部位比靠近阴极边缘的部位溅射得弱.这种溅射不均匀现象常见于溅射型的空心阴极离子激光器中.在槽型空心阴极溅射型铜离子激光器中,已经观察到由于两相对的阴极面上的不均匀溅射造成规则的槽型阴极面变成了 Ω 型^[15].

5 结 论

本文建立了空心阴极放电的粒子 Monte Carlo 和流体的组合模型,理论研究了气压为 50—120 Pa,电压为 150 V—300 V 的典型范围内的 Ar 空心阴极放电特性和影响阴极溅射的几个重要因素.得到的伏-安特性与已被实验所证实的分析理论能较好的符合.研究表明,在所研究的条件下,快电子的电离

主要集中在重合的负辉区,空心阴极效应明显的存在.特别研究了阴极面上的电场的空间分布、离子流和离子密度的沿 y 方向的空间分布.离子流沿 y 方向呈现不均匀的分布,气压低时,分布较为均匀,但

随着气压升高,离子越来越集中在中心部位,导致阴极的溅射在中心较为厉害.因此本二维模型可以解释离子激光器中空阴极溅射造成的阴极面的几何尺寸不均匀变化的问题.

[1] J. Mentel , N. Reich , J. Mizeraczyk , M. Grozeva , N. Sabotinov , Gas Lasers-Recent Development and Future Prospects (1996) , p. 55 .

[2] J. Yu , J. Huang , J. Li , *Proc. SPIE* , **3862** (1999) , 156 .

[3] S. Hashiguchi , M. Hasikuni , *Jpn. J. Appl. Phys.* , **26** (1987) , 271 .

[4] Y. Z. Chen , Q. M. Chen , J. Li , J. J. Lai , J. L. Qiu , *Acta Phys. Sin.* , **47** (1998) , 1665 [陈永洲、陈清明、李 军、赖建军、丘军林 物理学报 , **47** (1998) , 1665] .

[5] Z. Donkó , K. Rózsa , R. C. Tobin , *J. Phys.* , **D29** (1996) , 105 .

[6] Z. Donkó , *Phys. Rev.* , **E57** (1998) , 7126 .

[7] A. Bogaerts , M. Straaten , R. Gijbels , *Spectrochimica Acta* , **B50** (1995) , 179 .

[8] Z. Wronski , *Vacuum* , **42** (1991) , 635 .

[9] M. J. Goëckner , J. A. Goree , T. E. Sheridan , *IEEE Trans. Plasma Sci.* , **19** (1991) , 301 .

[10] J. J. Lai , Q. M. Chen , J. L. Qiu , *J. Phys.* , **D33** (2000) , 1785 .

[11] J. P. Boeuf , L. C. Pitchford , *Phys. Rev.* , **E51** (1995) , 1376 .

[12] D. L. Scharfetter , H. K. Gummel , *IEEE Trans. Electron Devices* , **ED-16** (1969) , 64 .

[13] M. Kurata , Numerical Analysis for Semiconductor Devices (Lexington , Mass. , 1982) , p. 137 .

[14] J. Yu , J. Li , J. Qiu , H. J. Eichler , *Laser Technology* , **22** (1998) , 239 (in Chinese) [余建华、李景镇、丘军林、H. J. Eichler , 激光技术 **22** (1998) , 239] .

[15] B. Auschwitz , H. J. Eichler , W. Wittwer , *IEEE J. Quant. Electron.* , **17** (1981) , 546 .

SELF-CONSISTENT DESCRIPTION OF A DC HOLLOW CATHODE
DISCHARGE AND ANALYSIS OF CATHODE SPUTTERING *

LAI JIAN-JUN¹⁾ YU JIAN-HUA²⁾ HUANG JIAN-JUN³⁾ WANG XIN-BING¹⁾ QIU JUN-LIN¹⁾

¹⁾ State Key Laboratory of Laser Technology , Huazhong University of Science and Technology , Wuhan 430074 , China)

²⁾ Department of Optoelectronics , Shenzhen University , Shenzhen 518060 , China)

³⁾ Science School , Shenzhen University , Shenzhen 518060 , China)

(Received 30 December 2000 , revised manuscript received 19 February 2001)

ABSTRACT

The characteristics of DC hollow cathode discharge and cathode sputtering was investigated by means of a two-dimensional hybrid model ,combing Monte Carlo simulation of the motion of fast electrons and a fluid description of slow electrons and positive ions. The results demonstrate the existence of the hollow cathode effect in the discharge and show that the spatial shape of the normalized ionization source is dependent more on the gas pressure than on the discharge voltage. The factors related to the cathode sputtering were analyzed. Investigations have demonstrated that the non-uniform sputtering on the cathode surfaces in a sputter-type ion laser is due to the non-uniform distribution of electric field , flux and density of ions bombarding the cathodes.

Keywords : hollow cathode discharge , self-consistent model , gas laser , cathode sputtering

PACC : 5280 , 5265 , 4255H , 7920N

* Project supported by the Natural Science Foundation of Guangdong Province ,China (Grant No.980922) .