

N_2 微空心阴极放电特性及其阴极溅射的 PIC/MC 模拟*

张连珠[†] 孟秀兰 张素 高书侠 赵国明

(河北师范大学物理科学与信息工程学院, 石家庄 050024)

(2012年7月30日收到; 2012年10月9日收到修改稿)

采用两维 PIC/MCC 模型模拟了氮气微空心阴极放电以及轰击离子 (N_2^+ , N^+) 的钛阴极溅射. 主要计算了氮气微空心阴极放电离子 (N_2^+ , N^+) 及溅射原子 Ti 的行为分布, 并研究了溅射 Ti 原子的热化过程. 结果表明: 在模拟条件下, 空心阴极效应是负辉区叠加的电子震荡; 在对应条件下, 微空心较传统空心放电两种离子 (N_2^+ , N^+) 密度均大两个量级, 两种离子的平均能量的分布及大小几乎相同; 在放电空间 N^+ 的密度约为 N_2^+ 的 1/6, 最大能量约大 2 倍; 在不同参数 (P, T, V) 下, 轰击阴极内表面的氮离子 (N_2^+ , N^+) 的密度近似均匀, 其平均能量几乎相等; 从阴极溅射出的 Ti 原子的初始平均能量约 6.8 eV, 离开阴极约 0.15 mm 处几乎完全被热化. 模拟结果为 N_2 微空心阴极放电等离子体特性的认识提供了参考依据.

关键词: 微空心阴极放电, PIC/MC 模拟, N_2 等离子体

PACS: 52.25.-b, 52.65.Rr, 52.80.Yr

DOI: 10.7498/aps.62.075201

1 引言

空心阴极放电是一种非常有效的等离子体源, 典型的空心阴极结构是圆筒或一对平行平板, 阳极在阴极两端或一端. 近年来, 空心阴极等离子体源的孔径尺寸越来越小, 出现了微空心阴极放电 (MHCD), 微空心阴极阵列、高频微空心阴极放电等新型等离子体源. 由于孔径尺寸的减小, 可以实现高压, 甚至大气压放电, 空心阴极放电的应用范围大大扩大. 目前, 研究应用主要在等离子体显示、微晶硅薄膜沉积、尘埃等离子体和等离子体推进器等高新技术领域^[1,2]; 在光源、光探测器及材料处理方面的应用有很大的潜力^[3].

目前对微空心阴极放电的理论, 尤其是对 N_2 微空心阴极放电机理, 还不清楚^[4,5]. 更好的理解 MHCD 特性, 是设计改进微空心阴极放电及其应用技术的基础. 然而, 由于其孔径几何线度太小, 通常的测微计、实验诊断是很困难的. 计算机模拟就成

为一种揭示 MHCD 物理机理的重要方法. 例如夏广庆等采用流体模型研究了氩气微腔放电的参数特性^[6]; Gu 等采用二维流体自洽模型预言了圆筒形氩气 MHCD 的特性^[7]; 最近, He 等采用流体模型研究了氩气直流矩形微空心阴极放电, 计算了电势、电场、粒子密度和平均电子能量^[3]; Lazzaroni 等采用 global 模型模拟氩气脉冲调制的微空心阴极放电^[8]. 过去大多数的微空心阴极放电的模拟研究集中在氩气和氦气, 采用流体模型较为普遍. 氮及氮混合气体微空心阴极放电喷枪用于反应沉积氮化物膜^[9,10], 如 TiN, Ti 为阴极材料, 直接作为靶材参与反应, 沉积生成 TiN 膜; 氮微空心阴极放电在氮化材料合成等技术具有潜在的应用^[10]. 氮气微空心阴极放电的理论研究是其应用技术和实验研究的基础, 然而 N_2 气微空心阴极放电的数值模拟研究很少.

目前, 对产生高频微空心阴极效应的原因, 存在很多不同的看法, 新理论认为空心阴极效应是鞘

* 河北省自然科学基金 (批准号: A2012205072) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: zhanglian Zhu.1@163.com

层叠加, 而不是原来的负辉区叠加; 产生高浓度电子, 不一定是负辉区叠加的电子震荡或鞘层叠加的电子振荡, 可能是阴极的二次电子发射产生 [5,11]. 对这些理论, 实验研究受微孔尺寸的限制, 很难进行. 从理论研究的角度看, 直流微空心阴极放电物理过程是研究其他激励形式微空心阴极机理的基础. 相对于传统空心阴极放电, 微空心阴极放电对放电参数及其与孔径匹配关系的要求严格得多 [12]; 由于空心阴极特殊的结构 (即阴极面积大且包围着放电气体), 离子密度大, 所以阴极溅射作用强是空心阴极放电重要特征之一, 而微空心阴极放电可以在小空间形成有效的溅射. 有关微空心阴极放电 N_2 离子阴极溅射过程, 是研究 N_2 微等离子体过程的重要环节, 迄今尚未见相关报道.

PIC-MC 方法不仅兼顾了 PIC 处理集体相互作用和 MCC 处理粒子碰撞的优势, 而且模拟精度高, 能描述等离子体过程细节. 虽然在高气压放电中, 该方法较为费时, 但对于计算机技术飞速发展及大型计算机群使用的今天, 不再是考虑的主要因素. 本文采用二维 PIC/MC 静电模型, 模拟了 N_2 圆筒微空心阴极放电的等离子体特性及其阴极溅射过程, 描述了氮离子 (N_2^+ , N^+) 及溅射金属钛原子的行为分布. 为 N_2 微空心阴极放电实验研究和应用技术提供有益的参考, 也为我们探索 N_2 高频微空心阴极效应的产生机理奠定基础.

2 模型

模拟参考文献 [12, 13] 提供的放电几何 (如图 1 所示) 和参数, 圆筒空心阴极半径 $r = 0.4 \text{ mm}$, 两端圆盘阳极接地, 阳极圆盘与阴极圆筒之间的缝隙 $\text{gap} = 0.1 \text{ mm}$, 整个放电空间的长度 $L = 3.2 \text{ mm}$; 气体压强 $10\text{--}50 \text{ Torr}$ ($1 \text{ Torr} = 133.322 \text{ Pa}$), 放电电压 $200\text{--}400 \text{ V}$, 放电室内温度 $300\text{--}600 \text{ K}$; 两种氮离子的二次电子发射系数取 0.1 .

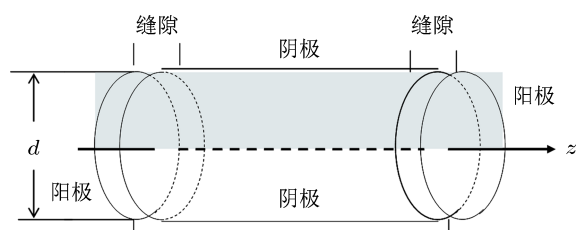


图 1 模拟的微空心阴极放电几何示意图

2.1 N_2 微空心阴极放电 PIC/MC 模型的主要技术

模型为二维空间和三维速度 (2d3v) 模型, 主要描述电子、分子离子和原子离子 (e , N_2^+ , N^+) 在放电空间的运动行为. 在柱坐标系下, 采用圆环状有限大小粒子, 其大小与网格相同. 轴向网格等间距划分, 径向网格对应的圆环面积相等, 这样阴极附近圆环半径大, 网格点密集, 中心轴线附近圆环半径小, 网格间距相对较大, 既能充分描述阴极鞘层内等离子体参量的变化, 也节省了计算量. 每个模拟粒子 q_c 代表约 10^6 真实粒子. 假设初始空心阴极腔内负电子和正离子 (N^+ , N_2^+) 电荷密度相等, 且均匀分布, 原子离子与分子离子密度比约 $1:4$ [14], 初始速度由麦克斯韦速度分布抽样, 电子初始温度 1.8 eV . 在任意网格内位置 (r_i, z_i) 处的有限大小粒子 q_i 对其相邻四个网格点 (r_j, z_k) , (r_{j+1}, z_k) , (r_j, z_{k+1}) , (r_{j+1}, z_{k+1}) 上电荷量的贡献为

$$Q_{j,k} = q_i \frac{(r_{j+1}^2 - r_i^2)(z_{k+1} - z_i)}{(r_{j+1}^2 - r_j^2)(z_{k+1} - z_k)}, \quad (1)$$

$$Q_{j,k+1} = q_i \frac{(r_{j+1}^2 - r_i^2)(z_i - z_k)}{(r_{j+1}^2 - r_j^2)(z_{k+1} - z_k)}, \quad (2)$$

$$Q_{j+1,k} = q_i \frac{(r_i^2 - r_j^2)(z_{k+1} - z_i)}{(r_{j+1}^2 - r_j^2)(z_{k+1} - z_k)}, \quad (3)$$

$$Q_{j+1,k+1} = q_i \frac{(r_i^2 - r_j^2)(z_i - z_k)}{(r_{j+1}^2 - r_j^2)(z_{k+1} - z_k)}, \quad (4)$$

其中 $r_j < r_i < r_{j+1}$, $z_k < z_i < z_{k+1}$, q_i 是模拟粒子所带的电荷量.

在柱坐标系下空心阴极放电五点差分形式泊松方程:

$$\begin{aligned} & \text{当 } j > 0 \text{ 时,} \\ & -\rho_{j,k} = \frac{r_{j+1/2}}{2\pi(\Delta r^2)_j \Delta r_{j+1/2}} (\phi_{j+1,k} - \phi_{j,k}) \\ & \quad - \frac{r_{j-1/2}}{2\pi(\Delta r^2)_j \Delta r_{j-1/2}} (\phi_{j,k} - \phi_{j-1,k}) \\ & \quad + \frac{1}{4\pi(\Delta z^2)} (\phi_{j,k+1} - 2\phi_{j,k} + \phi_{j,k-1}); \quad (5) \end{aligned}$$

当 $j = 0$ 时,

$$\begin{aligned} & \rho_{0,k} = Q_{0,k}/V_{0,k}, \\ & -\rho_{0,k} = \frac{r_{1/2}}{2\pi(\Delta r^2)_0} \cdot \frac{\phi_{1,k} - \phi_{0,k}}{(\Delta r_{1/2})} \end{aligned}$$

$$+ \frac{(\phi_{0,k+1} - 2\phi_{0,k} + \phi_{0,k-1})}{4\pi(\Delta z^2)}. \quad (6)$$

边界条件为: 轴心处采用第二类边界条件 $\partial\phi/\partial r = 0$; 阴极 $\phi = V_c$ (V_c 为阴极位降), 阳极 $\phi = 0$. 由 (5), (6) 式及边界条件求出空间各网格点上的自恰电势. 由相邻四个网格点上的电场值可求该网格内任意位置处的电场:

$$\begin{aligned} E_{i,i} = & E_{j,k} \frac{(r_{j+1}^2 - r_i^2)(z_{k+1} - z_i)}{(r_{j+1}^2 - r_j^2)(z_{k+1} - z_k)} \\ & + E_{j,k+1} \frac{(r_{j+1}^2 - r_i^2)(z_i - z_k)}{(r_{j+1}^2 - r_j^2)(z_{k+1} - z_k)} \\ & + E_{j+1,k} \frac{(r_i^2 - r_j^2)(z_{k+1} - z_i)}{(r_{j+1}^2 - r_j^2)(z_{k+1} - z_k)} \\ & + E_{j+1,k+1} \frac{(r_i^2 - r_j^2)(z_i - z_k)}{(r_{j+1}^2 - r_j^2)(z_{k+1} - z_k)}. \quad (7) \end{aligned}$$

考虑到离子质量较电子质量大得多, 在求解粒子运动方程时, 取氮离子的时间步长 Δt_i 是电子时间步长 Δt_e 的 20 倍. 由于在 Δt_e 内解泊松方程需要空间的净电荷密度, 因此在 Δt_i 内通过加权而获得两种离子的电荷密度还需变化到电子的 Δt_e 内. 我们采用了线形加权的方法求出在 20 个 Δt_e 时间步长内离子的电荷密度, 具体方法如下^[15] (N 取 20):

$$\rho_i^{(N+1)\Delta t_e} = \frac{19}{20}\rho_i^{N\Delta t_e} + \frac{1}{20}\rho_i^{(N+N)\Delta t_e}, \quad (8)$$

$$\rho_i^{(N+2)\Delta t_e} = \frac{18}{20}\rho_i^{N\Delta t_e} + \frac{2}{20}\rho_i^{(N+N)\Delta t_e}, \quad (9)$$

$$\rho_i^{(N+19)\Delta t_e} = \frac{1}{20}\rho_i^{N\Delta t_e} + \frac{19}{20}\rho_i^{(N+N)\Delta t_e}. \quad (10)$$

空间步长 $\Delta s < \frac{1}{20}\bar{\lambda}$, $\bar{\lambda}$ 为粒子的平均自由程; 时间步长: $\omega_{pe}\Delta t < 0.2$, 其中 ω_{pe} 为等离子体的特征振荡频率.

在每个时间步长 Δt 内带电粒子发生碰撞概率为

$$P = 1 - \exp(-N\sigma_{tot}(\varepsilon)v_i\Delta t), \quad (11)$$

其中 N 是背景气体粒子的密度, v_i 是该时间步长内粒子的三维速度值, $\sigma_{tot}(\varepsilon)$ 是粒子在能量 ε 时与中性粒子的总碰撞截面. 由于背景气体慢分子 (N_2s) 的密度比电子、离子 (N^+ , N_2^+) 和快中性粒子密度大得多, 因此, 仅考虑各快粒子 (e , N^+ , N_2^+ 等) 与慢分子的碰撞, 忽略各快粒子之间的作用. 考虑的反应过程的碰撞截面如图 2 所示. 电子的各种碰撞截

面采用 Itikawa^[16] 报告的截面数据, 重粒子碰撞截面取自文献 [17].

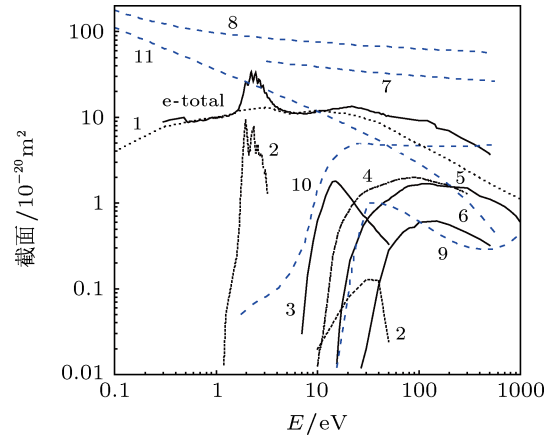


图 2 模型中考虑的碰撞截面 (1: e^- 弹性碰撞; 2: e^- 振动激发; 3: e^- 电子激发; 4: e^- 电离; 5: e^- 离解; 6: e^- 离解电离; 7: N_2^+ 电荷交换; 8: N_2^+ 弹性碰撞; 9: N_2^+ 离解电荷交换; 10: N^+ 弹性碰撞; 11: N^+ 电荷交换)

2.2 N_2/Ti 微空心阴极溅射 MC 模型

能量为 E_i 的入射粒子的溅射率^[18]

$$\begin{aligned} Y(E_i) = & 0.42 \times \frac{\alpha Q K S_n(E_i)}{U_s(1 + 0.35U_s S_n(E_i))} \\ & \times [1 - (E_{th}/E_i)^{1/2}]^{2.8}, \quad (12) \end{aligned}$$

其中 U_s 是阴极材料的表面结合能 ($U_s = 4.85$ eV), E_{th} 是阈值能量, 其他参量是表征阴极材料性质的量, 参见文献 [18].

溅射原子离开阴极时初始角度和能量分布由随机数 (rn) 确定^[19]:

$$\theta = 1/2a\cos(1 - 2rn), \quad (13)$$

$$E^2(rn - 1) + E(2U_s rn) + U_s^2 rn = 0, \quad (14)$$

θ 是溅射原子的速度与阴极表面法线的夹角.

PIC/MC 模拟结果表明 (见 3.2), 入射到阴极内表面的氮离子密度近似均匀分布, 溅射 Ti 原子离开微空心阴极内表面的初始位置由下式确定:

$$\begin{aligned} z_0 = & lrn, \\ x_0 = & R\cos(\phi_0), \\ y_0 = & R\sin(\phi_0), \quad (15) \end{aligned}$$

其中 ϕ_0 是溅射原子的初始方位角, 在 0 到 2π 之间随机分布, R 是微空心阴极的半径, l 是微空心阴极筒长.

钛原子在 N_2 等离子体输运过程中, 每经过一个时间步长, 根据牛顿定律, 计算其新位置和新速

度, 与 N_2 分子碰撞概率由 (11) 计算, 仅考虑 Ti 原子与背景气体分子 N_{2s} 的弹性碰撞, 其截面用下式计算 [19]:

$$\sigma_{\text{ela}}(E) = nC\gamma^{-1/n}E^{-2/n}, \quad (16)$$

其中

$$C = \frac{\pi}{2} \lambda_m a_s^2 \left(\frac{m_1}{m_2} \right)^{1/n} \left(\frac{2z_1 z_2 e^2}{a_s} \right)^{2/n},$$

$$\gamma = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2},$$

$$n = 1 + 4 \exp(-1.9\epsilon^{0.1}),$$

$$\epsilon = \frac{m_2 E}{m_1 + m_2} \frac{a_s}{z_1 z_2 e^2},$$

$$a_s = 0.468 \times 10^{-10} / (\sqrt{z_1} + \sqrt{z_2})^{0.667},$$

E 是溅射原子的能量, m_1, m_2 分别是溅射原子和气体分子的质量, z_1, z_2 分别是溅射原子和气体分子的原子序数, e 是电子电量, $\lambda_m = 22.36$.

取随机数 rn , 当碰撞概率 $p > rn$ 时, 发生碰撞, 输出碰后的能量, 角度和位置, 跟踪直到钛原子的能量小于气体分子的平均热运动能 ($5kT/2 = 0.065 \text{ eV}$).

3 结果与分析

3.1 放电空间氮离子的行为

图 3(a), (b) 分别是氮气微空心阴极放电电势和电场的二维分布, 可见, 在模拟条件下, 放电空间形成了鞘层区和负辉区. 圆筒阴极管附近, 鞘层电场很强, 负辉区径向电场几乎为零. 两端的阳极电势为零, 径向电场减弱. 离子密度和平均能量的分布, 除了与碰撞截面有关之外, 主要取决于其电场分布.

图 4 描述了 N_2 微空心阴极放电离子 (N_2^+, N^+) 密度的二维空间分布. 在负辉区内氮离子 (N_2^+, N^+) 的密度很大, 在阴极鞘层区较小, 两种氮离子 (N_2^+, N^+) 的密度分布类似, 但 N^+ 密度最大值约为 $1.6 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$, N_2^+ 密度最大值约为 $7.4 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$, 分子离子 (N_2^+) 密度约是原子离子 (N^+) 密度的 5 倍, 即放电空间 N_2^+ 是主要离子.

图 5 是放电空间两种氮离子 (N_2^+, N^+) 平均能量的二维分布. 两种氮离子 (N_2^+, N^+) 的平均能量具有类似的分布规律. 离子 (N_2^+) 的平均能量最大值 8.8 eV , 离子 (N^+) 最大平均能量约 21.2 eV ; 两种离

子在等离子区平均能量几乎为零.

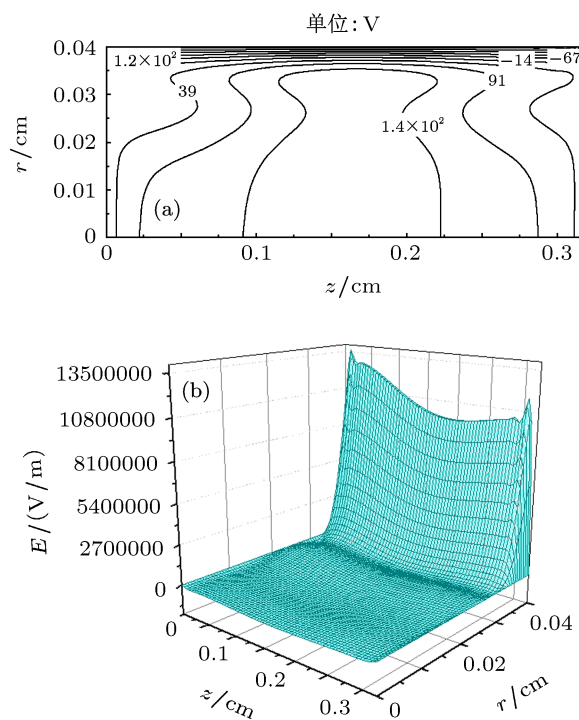


图 3 电势 (a) 和径向场强 (b) 的空间分布 ($P = 10 \text{ Torr}$, $T = 300 \text{ K}$, $V = 300 \text{ V}$)

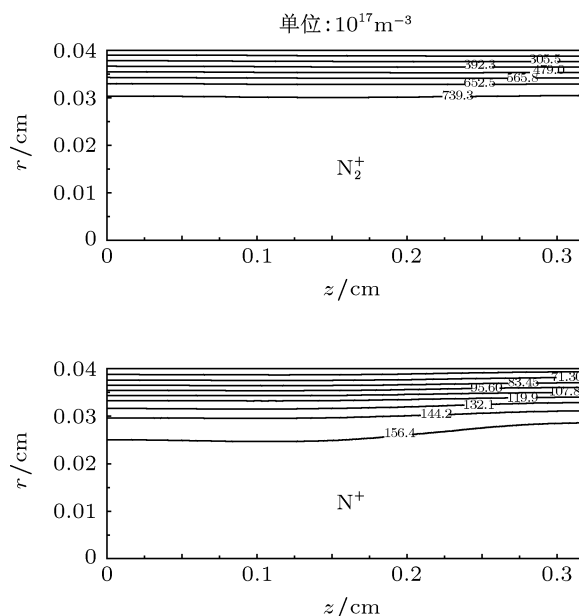


图 4 氮离子 (N_2^+, N^+) 密度的空间分布 ($P = 10 \text{ Torr}$, $T = 300 \text{ K}$, $V = 300 \text{ V}$)

我们选择模拟参数时, 考虑了: 1) 孔径 (d) 与气压 (P) 的乘积满足: $0.07 \text{ kPa}\cdot\text{cm} < Pd < 1.33 \text{ kPa}\cdot\text{cm}$ 关系 [20], 孔径为 0.8 mm 时, 符合条件的气压范围

大约是: $6 \text{ Torr} < P < 120 \text{ Torr}$; 2) 空心阴极的管长是半径的 6—10 倍 [21]. 在上述模拟条件下, N_2 微空心阴极放电离子 (N_2^+ , N^+) 密度、平均能量及其电场分布规律, 基本与传统空心阴极放电类似, 即空心阴极效应是负辉区叠加; 高密度等离子体产生, 是负辉区叠加的电子震荡的结果.

让压强减小 10 倍, 孔径放大 5 倍, 其他参数不变, 对应的小型空心阴极 (孔径 $d = 4 \text{ mm}$, 管长 $l = 10 \text{ mm}$, $P = 133 \text{ Pa}$) 放电空间离子 (N^+ , N_2^+) 的密度和平均能量分布如图 6 所示. 这时孔径 (d) 与气压 (P) 乘积不在 $0.07 \text{ kPa}\cdot\text{cm} < Pd < 1.33 \text{ kPa}\cdot\text{cm}$ 范围内, 仍有空心阴极效应出现, 仍是负辉区叠加的电子震荡, 并不是鞘层叠加的电子震荡, 但鞘层厚度占得比例增大. 实验研究也有类似的发现, 甚至气压还可以降得更低 [20]. 在其他参数尽量一致时, 微空心较传统空心放电两种离子 (N_2^+ , N^+) 密度均大两个量级; 两种离子的平均能量的分布及大小几乎相近. 由于微空心阴极放电气压大一个量级, 电子输运相同距离的电离率高; 微空心阴极放电自

身几何尺寸小, 总的碰撞率并不一定增加, 所以平均能量不一定减小.

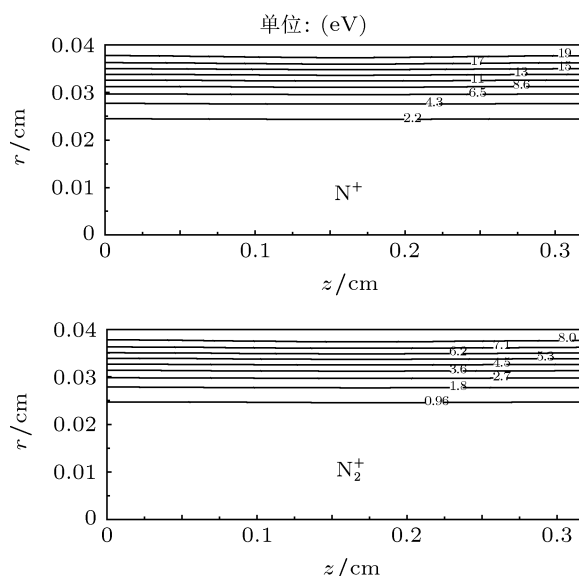


图 5 氮离子 (N_2^+ , N^+) 平均能量的二维空间分布 ($P = 10 \text{ Torr}$, $T = 300 \text{ K}$, $V = 300 \text{ V}$)

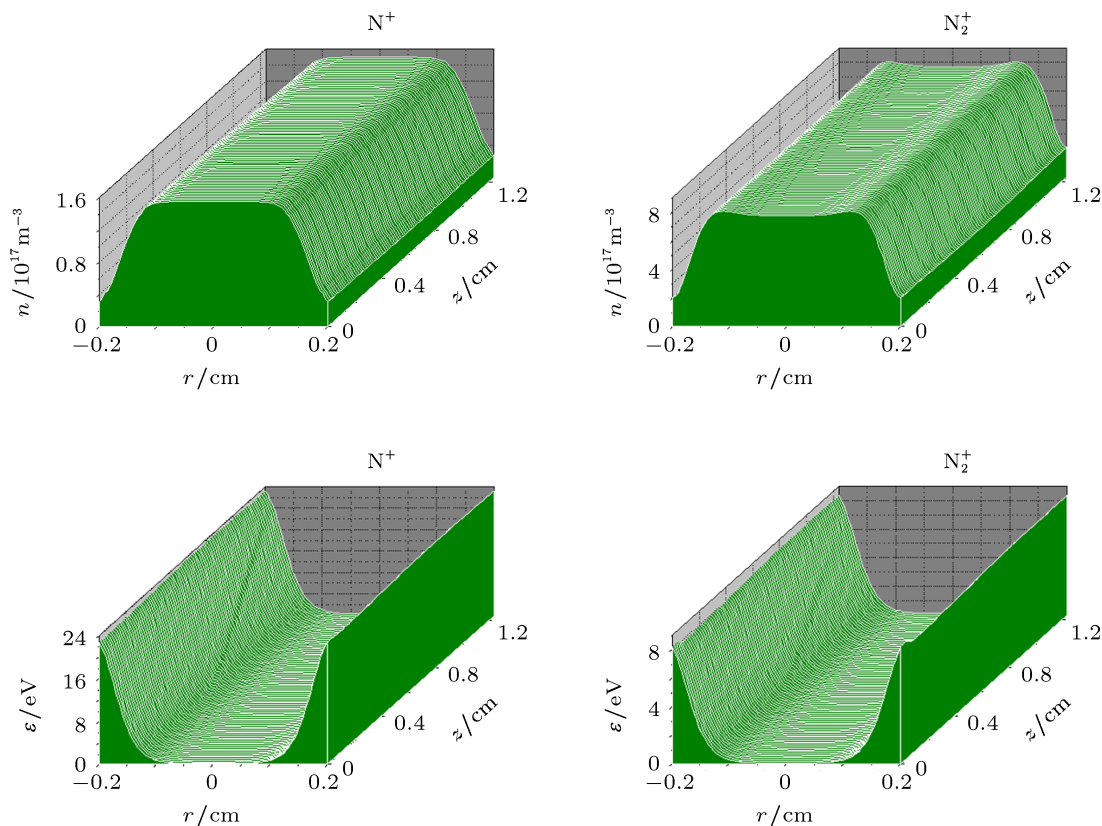


图 6 N_2 小型空心阴极放电离子 (N_2^+ , N^+) 的密度和平均能量的二维分布 (孔径 $d = 4 \text{ mm}$, 管长 $l = 10 \text{ mm}$, $P = 133 \text{ Pa}$, $T = 300 \text{ K}$, $V = 300 \text{ V}$)

3.2 氮离子轰击阴极的行为及随放电参数的变化

入射到阴极的氮离子 (N_2^+ , N^+) 的密度和能量分布, 一方面, 是研究微空心阴极溅射的初始条件; 另一方面, 是研究微型管子表面氮化的基础.

图 7 是入射到阴极管内表面氮离子 (N_2^+ , N^+) 的密度图 (7(a), (b)) 及平均能量 (图 7(c), (d)). 从主图上可以看出, 轰击阴极内表面的氮离子 (N_2^+ , N^+)

的密度近似均匀, 其平均能量几乎相等; N_2^+ 密度较 N^+ 约大 3 倍, 其能量约为 N^+ 的 5/17; 质量较大的离子 N_2^+ 在阴极附近的密度大, 在阴极溅射中起主要作用. 为了看清能量和密度的细微变化, 附图的纵坐标取小范围变化, 可见, 在阳极附近的两个缺口处, 由于离子的逃逸及径向电场的减弱, 轰击离子的密度和能量都略有降低, 两种离子密度减小约 7%, N^+ 平均能量降低约 0.5 eV, N_2^+ 只降低 0.2 eV.

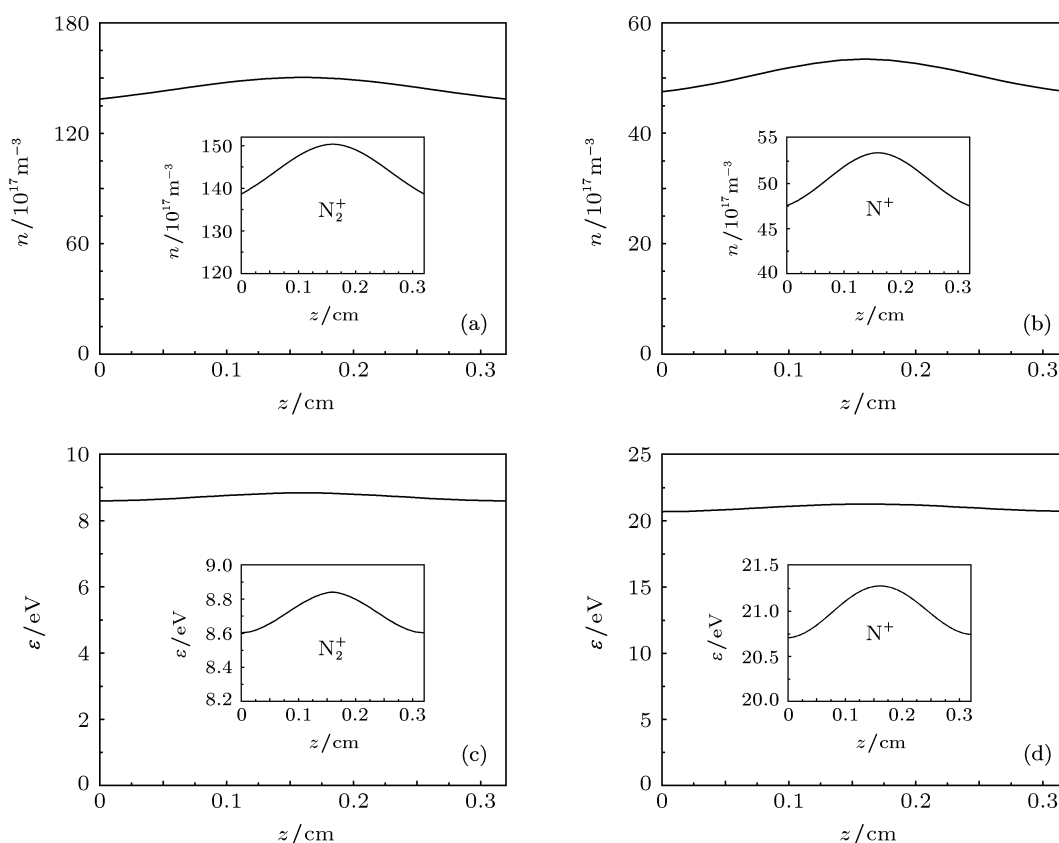


图 7 氮离子 (N_2^+ , N^+) 轰击阴极 ($r = 0.4 \text{ mm}$) 的平均能量及密度的轴向分布 ($P = 10 \text{ Torr}$, $T = 300 \text{ K}$, $V = 300 \text{ V}$)

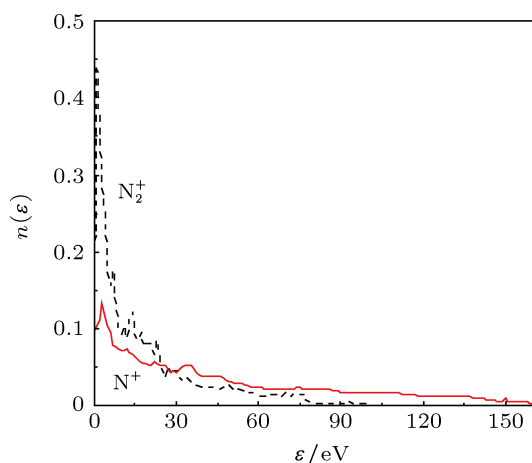


图 8 阴极中心 ($z = 1.6 \text{ mm}$, $r = 0.4 \text{ mm}$) 氮离子的能量分布

N_2^+ 和 N^+ 轰击阴极的能量分布 (IEDF) 如图 8 所示, N^+ 的最大能量达 200 eV, N_2^+ 的最大能量 120 eV. 能量小于 30 eV 的离子 N_2^+ 为主要离子.

图 9 描述了在阴极壁 ($r = 0.4 \text{ mm}$) 处离子 (N_2^+ , N^+) 的平均能量随压强、电压和放电室温度的变化. 两种离子随气压增加、电压和温度降低平均能量均减小; 我们也计算了管子内表面 ($r = 0.4 \text{ mm}$) 处离子 (N_2^+ , N^+) 的密度随压强、电压和放电室温度的变化, 结果表明, 随着气压和电压的升高氮离子 (N_2^+ , N^+) 的密度升高, 随放电气体温度的升高氮离子 (N_2^+ , N^+) 的密度减小. 总之, 在各种参数 (P, T, V) 下, 在阴极管内表面附近, 两种离子的平均

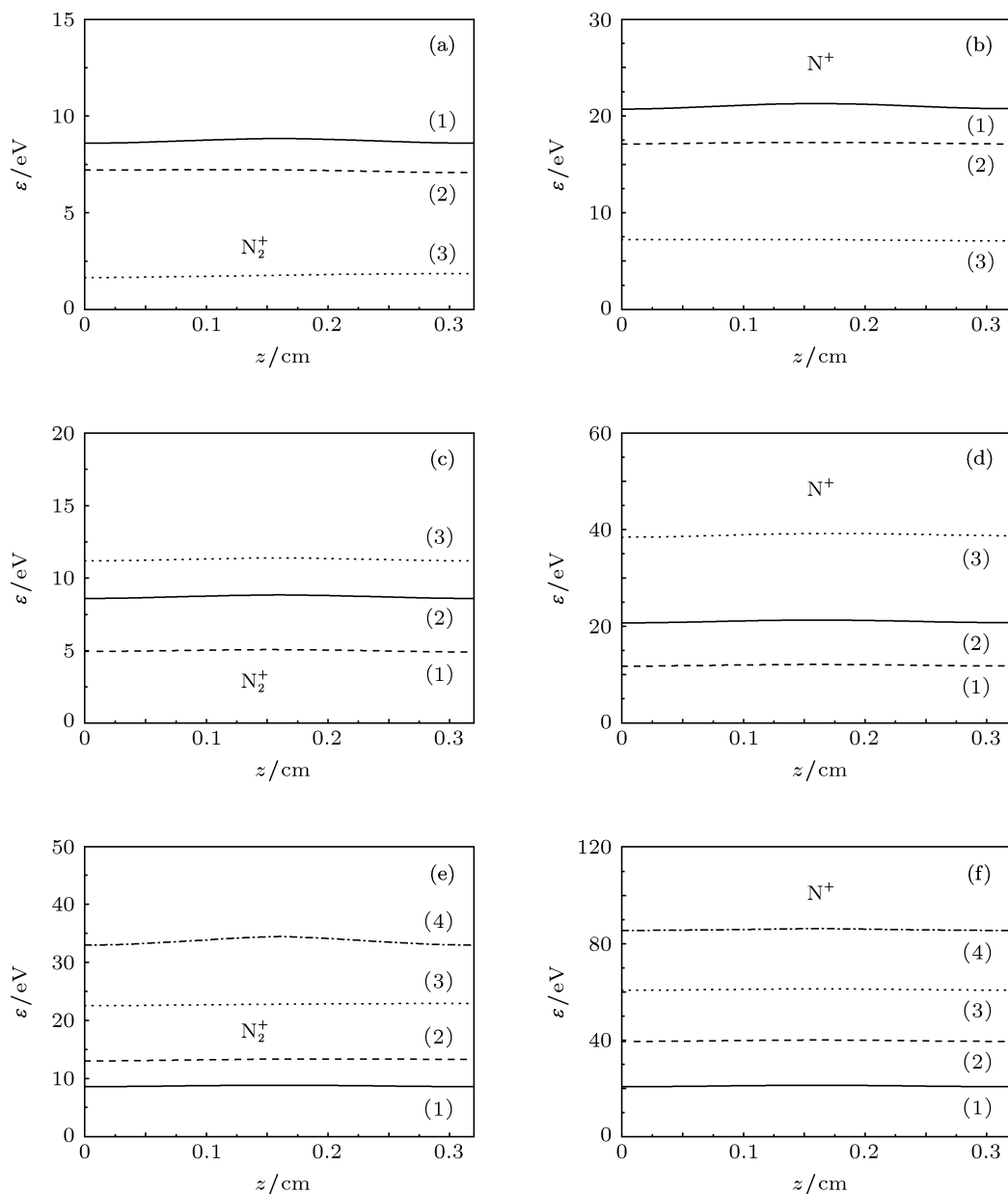


图9 阴极 ($r = 0.4 \text{ mm}$) 处离子 (N_2^+ , N^+) 的平均能量随放电参数 (p, V, T) 的变化 (a), (b) $V = 300 \text{ V}, T = 300 \text{ K}$, (1) $P = 10 \text{ Torr}$, (2) $P = 20 \text{ Torr}$, (3) $P = 50 \text{ Torr}$; (c), (d) $P = 10 \text{ Torr}, T = 300 \text{ K}$, (1) $V = 200 \text{ V}$, (2) $V = 300 \text{ V}$, (3) $V = 400 \text{ V}$; (e), (f) $P = 10 \text{ Torr}, V = 300 \text{ V}$, (1) $T = 300 \text{ K}$, (2) $T = 400 \text{ K}$, (3) $T = 500 \text{ K}$, (4) $T = 600 \text{ K}$

能量的变化均很小, 密度几乎均匀, N_2^+ 的能量比 N^+ 低, 其密度均高于 N^+ 的密度.

3.3 溅射 Ti 原子热化过程及行为

图 10 是 Ti 原子从阴极被溅射出来的初始能量 ((a) 实线) 和初始角 (b) 分布. 可见, 从阴极溅射出来的大部分 Ti 原子的能量小于 15 eV , 其散射角主要分布于 45° 附近, 小角散射和大角散射都较少.

图 11 是氮气微空心阴极放电溅射 Ti 原子的一维热化过程曲线, 横轴为阴极管中心 ($z = 0.16 \text{ cm}$)

处管直径 ($r = 0$ 是圆筒轴线), 纵轴为单位长度内达到热平衡态的 Ti 原子占总的溅射原子的百分数. 可见, 在离阴极表面 0.036 mm 附近溅射原子热化达到最大值, 热化过程曲线呈轴对称. 图 10(a) 虚线是 Ti 原子在热化曲线最大值附近 ($r = 0.036 \text{ cm}$) 能量分布, 在该位置大多数的溅射原子已经被热化, 大部分 Ti 原子的能量小于 10 eV . 影响热化过程的主要因素有, 放电气压, 溅射原子和气体分子的质量差以及固体原子的表面结合能. 气压较低时, 溅射原子与背景气体的碰撞率小, 溅射原子的能量损

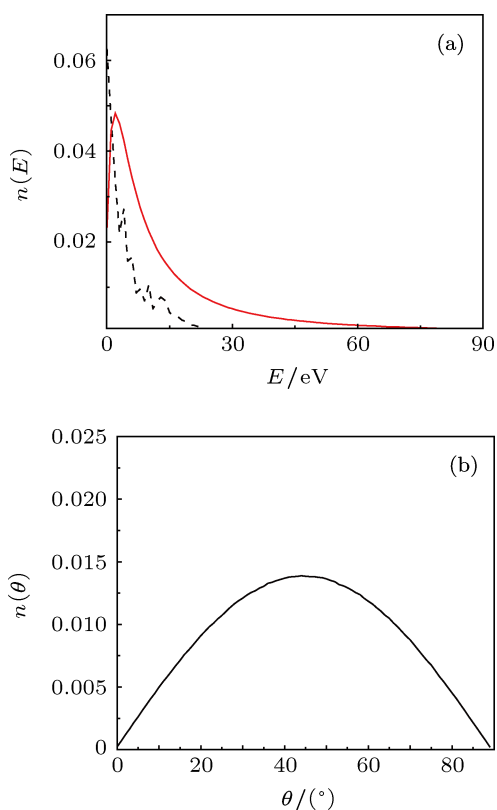


图 10 溅射 Ti 原子离开阴极材料的初始能量及初始角分布 ($P = 10$ Torr, $V = 300$ V, $T = 300$ K) (a) 初始能量分布 (虚线是 $r = 0.036$ cm 处的能量分布函数); (b) 初始角分布

失小, 使得热化曲线延伸到等离子体的更深处, 相对有更多的溅射原子没有被热化而到达了对面的阴极筒壁; 溅射原子和气体分子的质量差较大时,

每次弹性碰撞的能量损失较小, 也会使得热化曲线延伸到等离子体的更深处; 阴极材料表面结合能越高, 溅射原子进入等离子体中所带的初始能量越高 (见 (15) 式), 则热化前在等离子体中运动的路程更长.

图 12(a) 描述溅射原子在 N_2 气微空心阴极放电空间的平均能量分布, 从阴极溅射出的 Ti 原子带有约 6.8 eV 的平均初始能量, 离开阴极约 0.15 mm 处其平均能量约 0.063 eV, 几乎达到了分子热平衡态的平均动能 ($5kT/2 = 0.0625$ eV). 图 12(b) 是 Ti 原子的两维密度分布, 在靠近阴极处密度最高, 随着离阴极距离的增加而逐渐减小, 在放电空间 Ti 原子主要与背景气体氮分子发生弹性碰撞, 有可能返回阴极发生自溅, 或扩散到氮等离子体中.

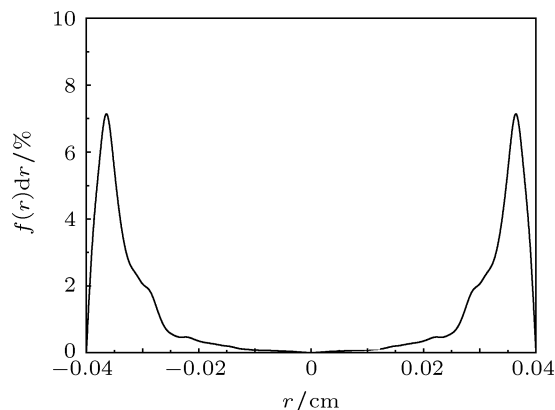


图 11 氮气微空心阴极放电溅射 Ti 原子的热化过程分布

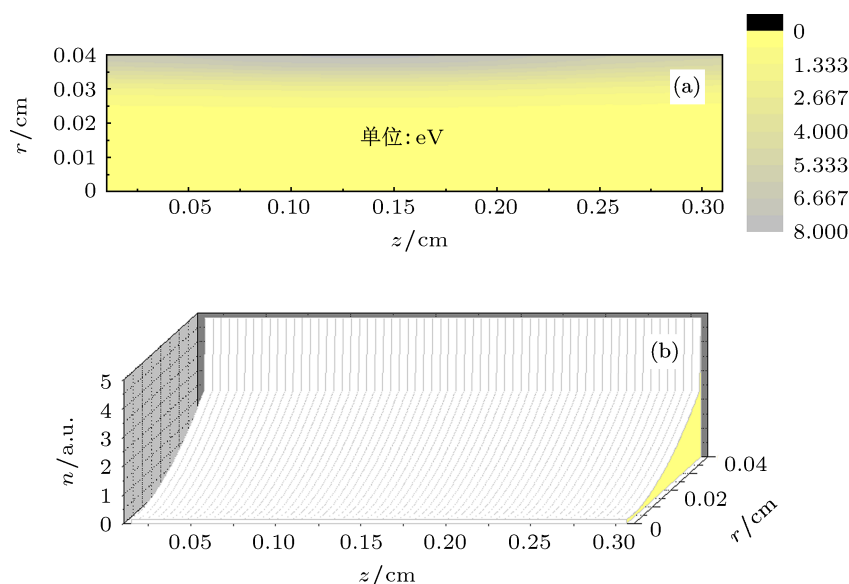


图 12 氮气微空心阴极放电溅射 Ti 原子的平均能量及密度的二维分布 ($P = 10$ Torr, $V = 300$ V, $T = 300$ K) (a) 平均能量; (b) 密度

4 结 论

开发了氮气圆筒微空心阴极放电的两维 PIC/MCC 模型, 在其基础上, 研究了轰击离子 (N_2^+ , N^+) 的阴极溅射. 主要模拟了氮气微空心阴极空间离子的行为、圆筒阴极内表面附近离子 (N_2^+ , N^+) 的密度与能量分布及随放电参数的变化, 并描述了溅射金属 Ti 原子的热化过程及行为分布. 结果表明:

1. 在模拟条件下, N_2 微空心阴极放电离子 (N_2^+ , N^+) 密度、平均能量及其电场分布趋势, 基本与传统空心阴极放电类似, 如空心阴极效应是负辉区叠加的电子震荡, N_2^+ 是密度较大的低能粒子, N^+ 能量较高, 其密度为 N_2^+ 的 1/5 左右. 在其他参数尽量一致, 模拟的两组 (P, d) 分别对应的微空心阴极和传统空心放电, 微空心较传统空心放电两种离子 (N_2^+ , N^+) 密度均大两个量级, 但两种离子的平均能

量的分布及大小几乎相近.

2. 各种参数 (P, T, V) 下, 轰击阴极内表面的氮离子 (N_2^+ , N^+) 的密度近似均匀, 其平均能量几乎相等; N_2^+ 密度较 N^+ 约大 3 倍, 其能量约为 N^+ 的 1/3; 在阳极附近的两个缺口处, 由于离子的逃逸及径向电场的减弱, 轰击离子的密度和能量都有所降低, 两种离子密度减小约 7%, N^+ 平均能量降低约 0.5 eV, N_2^+ 只降低 0.2 eV; 离子 (N_2^+ , N^+) 的平均能量随电压和温度的升高而增加, 随气压的增加而减小.

3. 从阴极溅射出的 Ti 原子, 与表面法线方向成 45° 出射方向概率最大, 大部分 Ti 原子初始能量小于 15 eV, 其平均能量约 6.8 eV; 离空心阴极约 0.04 mm 处, 大多数 Ti 原子被热化, 离阴极 0.15 mm 处几乎完全被热化. 当气压较低、溅射原子和气体分子的质量差较大、或金属原子的表面结合能较大时, 热化曲线将延伸到等离子体更深处.

- [1] Xia G Q, Mao G W, Nader S 2008 *Journal of Solid Rocket Technology* **31** 565
- [2] Benedikt J, Focke K, Yanguas Gil A 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 25
- [3] He S J, Ouyang J T, He F, Li S 2011 *Physics of Plasmas* **18** 032102
- [4] Makasheva K, Munoz Serrano E, Hagelaar G, Boeuf J P, Pitchford L C 2007 *Plasma Phys. Control. Fusion* **49** B233
- [5] Mahony C M O, Gans T, Graham W G, Maguire P D, Petrović Z Lj 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 011501
- [6] Xia G Q, Xue W H, Chen M L 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 015201 (in Chinese) [夏广庆, 薛伟华, 陈茂林 2011 物理学报 **60** 015201]
- [7] Gu X W, Meng L, Yan Y, Sun Y Q 2009 *Contrib. Plasma Phys.* **49** 40
- [8] Lazzaroni C, Chabert P 2012 *J. Appl. Phys.* **111** 053305
- [9] Hong Y C, Uhm H S, Yi W J 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 051504
- [10] Qiu L, Meng Y D, Ren Z X, Zhong S F 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5872 (in Chinese) [裘亮, 孟月东, 任兆杏, 钟少锋 2006 物理学报 **55** 5872]
- [11] Ignatkov A, Schwabedissen A, Leu G, Engemann J 2002 *Presented at the 8th Int. Symp. High Pressure, Low Temperature Plasma Chemistry* HAKONE VIII, Tartu, Estonia, 2002 p13
- [12] Miyagawa Y, Nakadate H, Tanaka M, Ikeyama M, Miyagawa S 2005 *Surface & Coatings Technology* **196** 155
- [13] Gu X W, Meng L, Yan Y, Sun Y Q 2009 *Contrib. Plasma Phys.* **49** 40
- [14] Yu W, Zhang L Z, Wang J L 2001 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **34** 3349
- [15] Vahedi V, Dipeso G, Birdsall C K, Lieberman M A 1993 *Plasma Sources Sci Technol* **2** 261
- [16] Itikawa Y 2006 *J. Phys. Chem. Ref. Data.* **35** 31
- [17] Phelps A V 1991 *J. Phys. Chem. Ref. Data.* **20** 557
- [18] Matsunami N, Yamamura Y, Itikawa Y, Itoh N, Kazumata Y, Miyagawa S, Morita K, Shimizu R, Tawara H 1984 *At. Data Nucl. Data Tables* **31** 1
- [19] Bogaerts A, Straaten M, Gijbels R 1995 *J. Appl. Phys.* **77** 1868
- [20] Bardos L, Barankova H, Lebedev Y A 2003 *Surface and Coatings Technology* **163-164** 654
- [21] Baguer N, Bogaerts A, Gijbels R 2002 *Spectrochimica Acta Part B* **57** 311

Simulation of N₂ microhollow cathode discharge and cathode sputtering by using a PIC/MC model*

Zhang Lian-Zhu[†] Meng Xiu-Lan Zhang Su Gao Shu-Xia Zhao Guo-Ming

(College of Physics Science and Information Engineering, Hebei Normal University, Shijiazhuang 050024, China)

(Received 30 July 2012; revised manuscript received 9 October 2012)

Abstract

The nitrogen microhollow cathode discharge and Ti cathode sputtering, bombarded by ions (N₂⁺, N⁺), have been studied using a two-dimensional PIC/MCC model. The behavior of ions (N₂⁺, N⁺) and sputtered atom (Ti), and the thermalization process of the sputtered atoms in a nitrogen microhollow cathode discharge are simulated. The results show that hollow cathode effect is due to electron oscillations in the overlapping negative glow under our simulation condition. The densities of ions (N₂⁺, N⁺) in the microhollow cathode discharge are two orders in magnitude greater than that in the conventional hollow cathode discharge; but the distributions and sizes of the mean energy of the ions (N₂⁺, N⁺) are almost the same. The density of N₂⁺ is fivefold as much as that of N⁺ in the microdischarge space; however, the maximum of mean energy of the latter is twice larger than the former. For various parameters (P, T, V), the densities of ions (N₂⁺, N⁺) bombarding the cathode internal surface are almost uniformly distributed, and their mean energy are almost the same. When these atoms are 0.15 mm away from the cathode. The sputtered atoms are almost thermalized completely.

Keywords: microhollow cathode, PIC/MC simulation, N₂ plasma

PACS: 52.25.-b, 52.65.Rr, 52.80.Yr

DOI: 10.7498/aps.62.075201

* Project supported by the Hebei Natural Science Foundation, China (Grant No. A2012205072).

[†] Corresponding author. E-mail: zhanglian Zhu.1@163.com