

# 旋转圆柱阴极磁控溅射三维仿真模型的建立与验证\*

马梓淇# 徐强# 肖梦然 汤诗奕 陶志群 杨东杰  
安小凯 刘亮亮 崔岁寒† 吴忠振‡

(北京大学深圳研究生院新材料学院, 深圳 518055)

(2025年4月28日收到; 2025年5月21日收到修改稿)

旋转圆柱阴极具有较高的理论靶材利用率, 已经普遍应用于各行各业的薄膜制备中. 在其等离子体研究方面, 相对于平面阴极, 旋转圆柱阴极的等离子体放电输运过程涉及三维体系, 对此传统模型的计算量大且收敛性差, 导致仿真困难. 鉴于此, 本文利用二维粒子网格/蒙特卡罗模型计算得到的等离子体密度和电势分布作为自洽背景场, 再通过三维检验电子蒙特卡罗方法跟踪电子运动实现三维等离子体放电仿真. 在此基础上, 以等离子体密度投影作为刻蚀通量, 耦合元胞自动机方法和检验粒子蒙特卡罗方法分别实现三维靶材刻蚀和粒子沉积仿真, 从而构建了阴极磁场-等离子体放电-靶材刻蚀-薄膜沉积的全链条三维仿真体系. 结果表明, 该三维仿真体系能够精准预测圆柱阴极的工作状态, 其中靶材利用率为85.81%, 与实际误差低于2%; 沉积In/Sn摩尔比为11.76, 与实际相差6.6%; 载板上粒子分布与实际薄膜厚度分布吻合, 沉积均匀区长度为1730 mm, 与实际误差仅为1.1%.

**关键词:** 旋转圆柱阴极, 三维建模, 等离子体放电, 等离子体输运

**PACS:** 52.65.-y, 52.75.-d, 81.15.Cd, 52.40.-w

**DOI:** 10.7498/aps.74.20250570

**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250570

## 1 引言

磁控溅射广泛应用于电子通讯、光学和生物医疗等领域<sup>[1-4]</sup>, 其中溅射阴极是核心放电元件, 至关重要. 相对平面阴极, 圆柱阴极由于工作时处于旋转状态, 能够使靶面材料被逐层均匀溅射<sup>[5]</sup>, 因此具有较长的使用寿命和较高的理论靶材利用率<sup>[6,7]</sup>, 已经逐步取代平面阴极, 占领绝大部分市场份额. 柱状阴极的旋转机制增加了圆柱阴极系统的复杂

性, 尤其是在其放电特性研究方面, 必须通过三维坐标系统进行描述<sup>[8]</sup>. 然而, 目前对磁控溅射放电的研究多基于二维的等离子体放电仿真手段, 无法精确地描述柱状阴极的三维放电等离子体行为, 使得圆柱阴极的设计和真空系统配置具有一定的经验依赖性和盲目性.

为构建圆柱阴极的三维仿真体系, 研究者们探索了多种方法, 通常采用截取多个平行的横截面进行二维建模<sup>[9]</sup>, 并在此基础上外推得到等离子体三维特性. 例如, Fan等<sup>[9]</sup>通过二维粒子网格/蒙特

\* 深圳市科技计划 (批准号: KJZD20231023100304009)、国家重点研发计划 (批准号: 2023YFA1608802)、国家自然科学基金青年科学基金 (批准号: 52305174)、深圳市博士后出站科研资助经费 (批准号: 6700200201) 和中国博士后科学基金 (批准号: 2024M750089) 资助的课题.

# 同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: cuish@pku.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: wuzz@pkusz.edu.cn

卡罗 (particle-in-cell/Monte Carlo collision, PIC/MCC) 方法<sup>[10]</sup>模拟了圆柱阴极直部多个横截面上的等离子体放电行为, 预测了直部的放电跑道, 与实验结果基本吻合. 然而, 与直部不同, 阴极端头无法抽象为多个平行的横截面, 导致外推法计算的放电跑道与实际偏差较大. 为描述圆柱阴极端头的等离子体放电特性, 研究者提出围绕圆柱阴极旋转轴构建圆柱形三维仿真域<sup>[11]</sup>. 然而, 三维仿真域使得模型的网格数量成几何级数增长, 而 PIC/MCC 模型的计算量与网格数量的平方成正比, 导致计算效率大幅降低, 因此无法适用<sup>[11]</sup>. 为此, Musschoot 等<sup>[12]</sup>利用检验电子蒙特卡罗 (Monte Carlo, MC) 法替代 PIC/MCC 法, 跟踪电子在圆柱阴极表面的运动和碰撞过程来模拟等离子体分布, 实现了对端头放电跑道的计算. 然而, 检验电子 MC 模型忽略了等离子体自洽电势, 精度较差, 模拟过程需要根据实验结果进行多次矫正来尽可能减少失真<sup>[12]</sup>. 为引入三维等离子体的自洽电势, Fu 等<sup>[13]</sup>改用流体模型法, 即针对等离子体反应场、扩散场、电磁场和温度场建立偏微分方程组进行求解, 获得了圆柱阴极的三维等离子体放电特性. 然而, 流体模型对弧形边界的收敛性极差<sup>[14]</sup>, 模拟圆柱阴极的输

出结果不稳定, 重复性差. 由于圆柱阴极的放电过程缺少可靠的三维仿真手段, 进一步导致后续等离子体输运特性的仿真丧失了合理的初始值<sup>[15]</sup>, 造成靶材刻蚀和薄膜沉积的仿真计算结果与实际情况差距较大.

鉴于此, 本文以氧化铟锡 (indium tin oxide, ITO) 旋转圆柱阴极的基本结构为基础, 通过二维 PIC/MCC 方法耦合三维电子 MC 方法建立自洽背景场, 并跟踪大量电子运动实现三维等离子体放电仿真. 以等离子体放电模拟结果为输入, 利用元胞自动机 (cellular automata, CA) 方法和维检验粒子 MC 方法分别实现三维靶材刻蚀和粒子沉积仿真, 搭建了涵盖磁场-放电-刻蚀-沉积的全链条三维仿真体系. 通过该体系模拟得到的磁场分布、刻蚀形貌、薄膜成分和沉积均匀性等与实验测量高度吻合, 全面且精确地反映了圆柱阴极的等离子体特性.

## 2 几何构建及磁场分布

### 2.1 几何构建

ITO 圆柱阴极的基本结构和磁铁配置如图 1 所示. 其中, 图 1(a) 为该圆柱阴极的三维模型图,

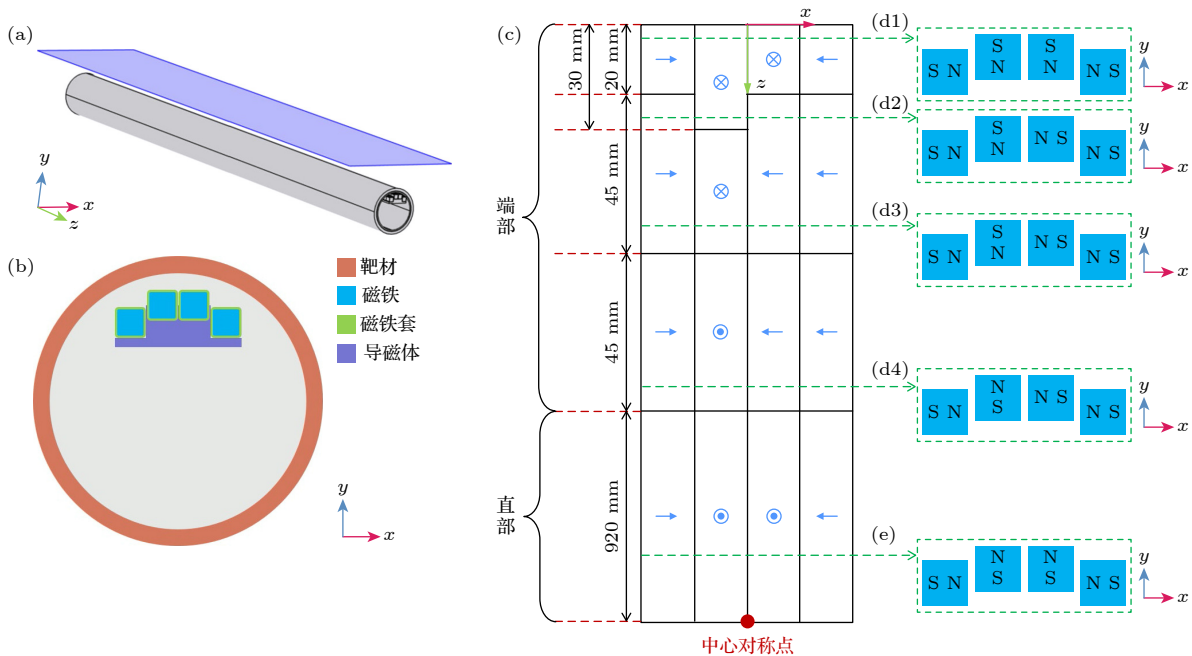


图 1 ITO 圆柱阴极的基本结构与磁场配置 (a) 三维模型; (b) 横截面图; (c) 磁铁配置俯视图, 其中蓝色矢量符号表示磁极方向; (d) 端头和 (e) 直部的磁铁配置截面

Fig. 1. Basic structure and magnetic field configuration of ITO cylindrical cathode: (a) Three-dimensional (3D) model; (b) cross-sectional view; (c) top view of the magnet configuration, where the blue vectors represent the direction of the magnetic poles; (d), (e) magnet configuration of (d) the end and (e) the straight section.

其中灰色区域为圆柱阴极, 长度为 2060 mm, 深蓝色区域为载板, 距离圆柱阴极 80 mm. 三维坐标轴如图 1(a) 中左下角所示, 为方便描述, 定义  $z$  方向为圆柱阴极的旋转轴方向. 图 1(b) 为圆柱阴极的横截面图 ( $x-y$  平面), 包含靶材 (橙)、磁铁 (蓝)、导磁体 (紫) 和磁铁套 (绿). 其中, 靶材外径为 153 mm, 厚度为 9 mm. 磁铁的截面为  $14\text{ mm} \times 14\text{ mm}$  的正方形, 置于厚度为 1 mm 的磁铁套内, 整体位于导磁体上方. 磁铁分为 4 列排布, 具体磁极配置情况如图 1(c) 所示, 图中蓝色矢量符号的方向表示磁极方向. 其中, 端头部分包含两段 (即  $z \in [0, 110\text{ mm}]$  或  $[1950\text{ mm}, 2060\text{ mm}]$ ), 磁极配置随轴向位置  $z$  发生变化, 如图 1(d1)–(d4) 所示; 直部部分为区间  $[110\text{ mm}, 1950\text{ mm}]$ , 总长度为 1840 mm, 磁极配置如图 1(e) 所示.

## 2.2 三维磁场分布

利用 Comsol Multiphysics 6.2 软件对磁场进行仿真. 仿真域为圆柱阴极的同轴圆柱, 直径为 1.2 m, 长度为 3 m, 范围远大于圆柱阴极区域, 故

可假设在仿真域内部满足磁通量守恒条件. 其中磁铁为 N52 牌号的钕铁硼材料, 剩余磁通密度为 1.44 T, 回复磁导率为 1.05; 导磁体材料为纯铁, 相对磁导率为 4000<sup>[16]</sup>; 其他区域的材料均不导磁, 相对磁导率为 1. 背景磁场由永磁体提供<sup>[17,18]</sup>, 满足静磁场 Maxwell 方程组, 如 (1) 式所示:

$$\begin{cases} \mathbf{B} = \mu_0 \mu_r \mathbf{H}, \\ \nabla \times \mathbf{H} = 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \end{cases} \quad (1)$$

其中  $\mathbf{B}$  (T) 为磁感应强度,  $\mathbf{H}$  (A/m) 为磁场强度,  $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}\text{ N/A}^2$  为真空磁导率,  $\mu_r$  为相对磁导率.

柱坐标系 ( $r$ - $\theta$ - $z$ ) 下圆柱阴极靶面磁场如图 2 所示, 可见仿真与实验得到的靶面各向磁场分布均高度一致. 其中, 法向磁场峰值磁感应强度的模拟值和测量值分别为 146 mT 和 153 mT, 相对误差低于 5%. 环向磁感应强度分布呈现出两个较强区域, 仿真的峰值强度分别为 114 mT (红色区域) 和 115 mT (蓝色区域), 而实验的峰值强度分

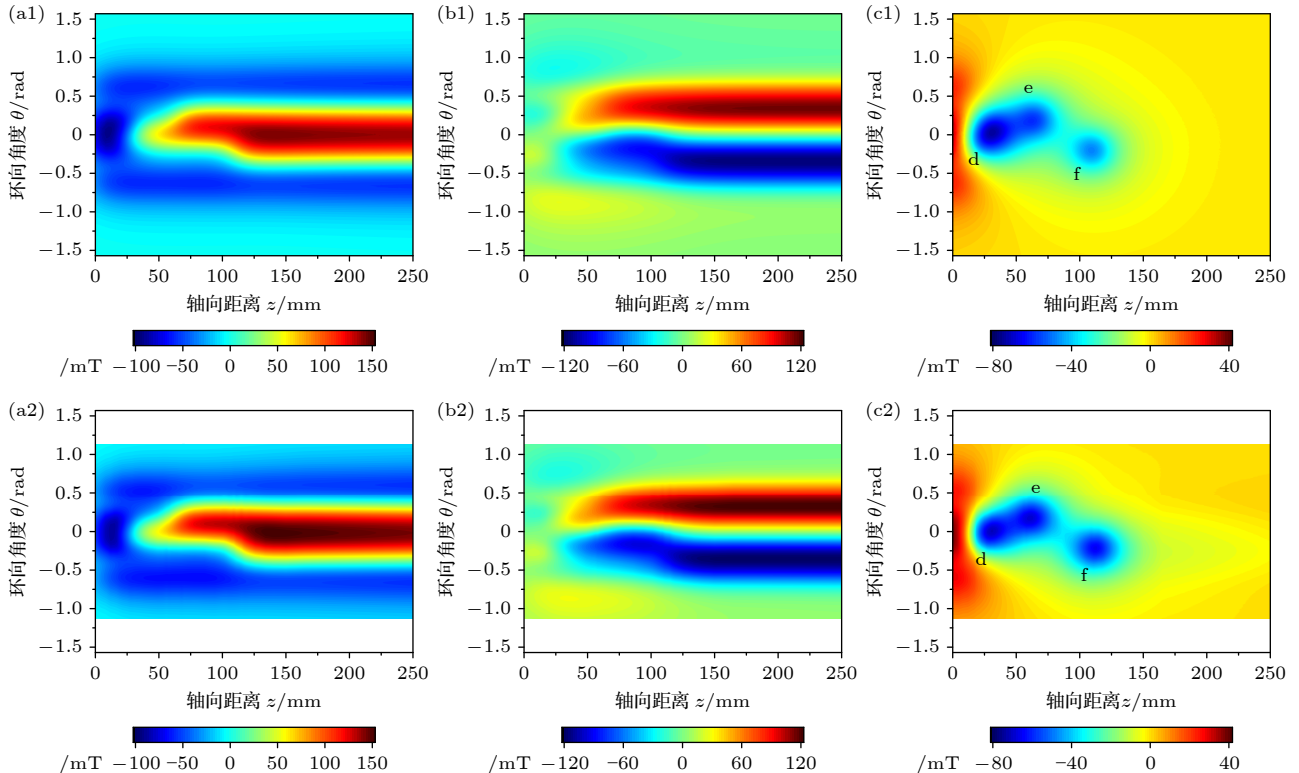


图 2 圆柱靶材表面各向磁场分布 (a1) 仿真和 (a2) 实验的法向 ( $r$ ) 磁感应强度; (b1) 仿真和 (b2) 实验的环向 ( $\theta$ ) 磁感应强度; (c1) 仿真和 (c2) 实验的轴向 ( $z$ ) 磁感应强度

Fig. 2. Distribution of magnetic field on the surface of the cylindrical target: (a1), (a2) Normal ( $r$ ) magnetic flux density by (a1) simulation and (a2) experiment; (b1), (b2) azimuthal ( $\theta$ ) magnetic flux density by (b1) simulation and (b2) experiment; (c1), (c2) axial ( $z$ ) magnetic flux density by (c1) simulation and (c2) experiment.

别为 120 mT 和 122 mT, 相对误差分别为 5% 和 6%. 轴向磁场在阴极端头存在三个强度较高的特征区域, 如图 2(c) 中 d, e 和 f 标记所示. 其中, 仿真得到的峰值强度分别为 73, 59 和 48 mT, 而实验测量值分别为 70, 69 和 65 mT. 误差可能源自: 1) 实际每块磁铁间均存在差异; 2) 测量存在系统误差; 3) 仿真假设和参数设置与实际情况存在差异; 4) 仿真存在计算残差. 尽管如此, 三维磁场模型基本上能够准确地描述出圆柱阴极的磁场结构, 从而为后续的等离子体放电输运过程的模拟提供可靠的背景场.

### 3 等离子体放电仿真

#### 3.1 二维 PIC/MCC 模型

由于旋转圆柱阴极通常在双靶的条件下工作, 本文构建了双圆柱阴极的二维 PIC/MCC 模型, 并通过 MATLAB 软件编辑实现, 模型示意图如图 3 所示. 考虑到真空系统具有对称性, 本文取真空室的一半作为仿真域, 如图 3 中浅绿色区域所示. 根据实际放电工况, 确定模型的放电条件如下: 圆柱阴极 (黄色阴影区域) 的电压固定为 -250 V, 真空室壁 (黑色边界) 作为阳极接地, 载板 (蓝色边界) 距离圆柱阴极 80 mm, 背景气体为 Ar 气, 气压为 0.6 Pa, 温度为 300 K.

假设初始等离子体密度为  $1 \times 10^{14} \text{ m}^{-3}$  [19], 在仿真域中均匀生成电子和离子 (宏粒子), 每个宏粒子代表  $2 \times 10^5$  个实际粒子, 速度服从 Maxwell 分布 [20]:

$$f(v) = 4\pi v^2 \sqrt{\left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^3} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right), \quad (2)$$

其中  $f$  为概率密度,  $v$  (m/s) 为带电粒子速率,  $m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$  和  $m_{\text{Ar}} = 6.7 \times 10^{-26} \text{ kg}$  分别为电子和  $\text{Ar}^+$  离子的质量,  $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$  为玻

尔兹曼常数,  $T$  (K) 为背景温度. 由于电子荷质比远小于  $\text{Ar}^+$  离子, 其受到的电场力和磁场力作用远强于离子, 故本文设定离子步长为电子步长的 10 倍 [21], 即  $\Delta t_i = 10\Delta t_e = 1 \times 10^{-11} \text{ s}$ . 每经过一个离子步长, 利用泊松方程求解等离子体自洽电势 [22]:

$$\nabla^2 \phi = -e(n_i - n_e)/\epsilon_0, \quad (3)$$

其中  $\phi$  (V) 为电势,  $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$  为单位电荷,  $n_e$  ( $\text{m}^{-3}$ ) 为电子密度,  $n_i$  ( $\text{m}^{-3}$ ) 为离子密度,  $\epsilon_0 = 8.81 \times 10^{-12} \text{ F/m}$  为真空介电常数. 将仿真域划分成尺寸为  $0.5 \text{ mm} \times 0.5 \text{ mm}$  的正方形网格, 通过统计每个网格内的宏粒子数量计算得到带电粒子密度. 每经过一个时间步长, 根据 (4) 式计算带电粒子发生碰撞的概率  $P$ :

$$P = 1 - \exp[-N_0 \sigma(\epsilon) v \Delta t], \quad (4)$$

其中  $\sigma$  ( $\text{m}^2$ ) 为带电粒子的碰撞截面, 由带电粒子能量  $\epsilon$  (eV) 决定;  $N_0$  ( $\text{m}^{-3}$ ) 为背景 Ar 原子的数密度. Ar 气放电涉及到的具体反应及相应的反应参数则如表 1 所列.

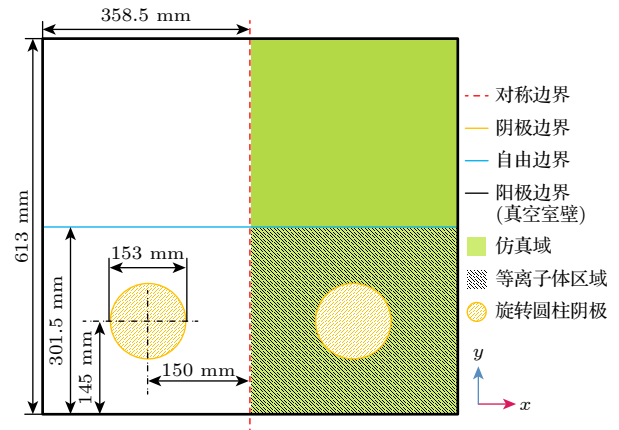


图 3 双圆柱阴极的 PIC/MCC 模型示意图

Fig. 3. Schematic diagram of the PIC/MCC model for the double cylindrical cathodes.

表 1 Ar 气放电反应参数表 [23]

Table 1. Table of Ar gas discharge reaction parameters [23].

序号	反应方程式	反应速率系数 $k_r/(\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1})$	反应阈值/eV	反应类型
1	$e + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar} + e$	$2.336 \times 10^{-14} T_e^{1.609} \exp\left[0.0618(\ln T_e)^2 - 0.1171(\ln T_e)^3\right]$	—	弹性碰撞
2	$e + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^+ + 2e$	$2.34 \times 10^{-14} T_e^{0.59} \times \exp(-17.44/T_e)$	15.76	电离碰撞
3	$e + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^m + e$	$2.5 \times 10^{-15} T_e^{0.74} \times \exp(-11.56/T_e)$	11.56	激发碰撞
4	$e + \text{Ar}^m \rightarrow \text{Ar}^+ + 2e$	$6.8 \times 10^{-15} T_e^{0.67} \times \exp(-4.2/T_e)$	4.2	激发态电离
5	$e + \text{Ar}^m \rightarrow \text{Ar} + e$	$4.3 \times 10^{-16} T_e^{0.74}$	-11.56	退激发碰撞
6	$\text{Ar}^+ + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar}$	硬球碰撞	—	弹性碰撞
7	$\text{Ar}^+ + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar} + \text{Ar}^+$	硬球碰撞	—	电荷交换

可见,电子在运动过程中会与背景 Ar 原子发生弹性碰撞 (概率  $P_{e\_el}$ )、电离碰撞 (概率  $P_{e\_ex}$ ) 和激发碰撞 (概率  $P_{e\_iz}$ )。根据 MCC 方法,每个步长生成一个随机数  $R_{coll} \in [0, 1]$  来判断是否发生碰撞及具体的碰撞类型,判定条件如下: 1) 若  $R_{coll} \in [0, P_{e\_el}]$ , 则发生弹性碰撞,此时电子能量保持不变,即速度大小不变,方向随机改变; 2) 若  $R_{coll} \in [P_{e\_el}, P_{e\_el} + P_{e\_ex}]$ , 则发生激发碰撞,此时,碰撞前电子能量一部分用于实现激发 (即与 Ar 原子激发阈值  $E_{ex} = 11.56$  eV 抵消), 剩余能量即为新电子的能量; 3) 若  $R_{coll} \in [P_{e\_el} + P_{e\_ex}, P_{e\_el} + P_{e\_ex} + P_{e\_iz}]$ , 则发生电离碰撞,此时,碰撞前原电子的能量一部分用于实现电离 (即与 Ar 原子电离阈值  $E_{iz} = 15.76$  eV 抵消), 剩余能量平分给原电子和新电子,并同时新生成一个  $Ar^+$ ; 4) 若  $R_{coll} \in [P_{e\_el} + P_{e\_ex} + P_{e\_ion}, 1]$ , 则不发生碰撞。

$Ar^+$ 离子主要在运动过程中与背景 Ar 原子发生弹性碰撞 (概率  $P_{i\_el}$ ) 和电荷交换碰撞 (概率  $P_{i\_exc}$ ), 同样通过生成一个随机数  $R_{coll} \in [0, 1]$  来判断碰撞是否发生及具体的碰撞类型: 1) 若  $R_{coll} \in [0, P_{i\_el}]$ , 则发生弹性碰撞,根据背景气体温度随机生成一个 Ar 原子与  $Ar^+$ 组成碰撞体系,满足能量守恒和动量守恒; 2) 若  $R_{coll} \in [P_{i\_el}, P_{i\_el} + P_{i\_ex}]$ , 则发生电荷交换碰撞,此时原  $Ar^+$ 离子变成 Ar 原子,再根据背景气体温度随机生成一个 Ar 原子,并将其设置为  $Ar^+$ 离子; 3) 若  $R_{coll} \in [P_{i\_el} + P_{i\_ex}, 1]$ , 则不发生碰撞。

如图 3 所示,仿真域中共包含 4 类边界,分别

为对称边界、阳极边界、阴极边界和自由边界,具体设置如下: 1) 对称边界如红色虚线所示,为虚拟边界,电势对  $x$  的偏导数为零,当仿真粒子运动至对称边界时发生反弹并回到仿真域; 2) 阳极边界如黑色实线所示,为实体边界,电势恒定为 0,当仿真粒子运动至阳极边界直接消失; 3) 阴极边界如橙色实线所示,为实体边界,电势恒定为  $-250$  V,当仿真粒子运动至阴极边界直接消失,其中离子消失视为发生溅射,同时释放二次电子; 4) 自由边界如蓝色实线所示,为实体边界,电势不固定,根据泊松方程由空间电荷分布决定,当仿真粒子运动至自由边界则直接消失。

### 3.2 二维等离子体放电仿真

放电电压 250 V, 气压 0.6 Pa 条件下,双圆柱阴极的稳态等离子体密度分布和电势分布分别如图 4(a) 和图 4(b) 所示。可见圆柱阴极的横截面上存在两个明显的高密度区,代表主要的放电区域。在放电区域与圆柱阴极之间形成了稳定的鞘层,空间狭长且电势梯度极大,表明放电基本达到稳态<sup>[24]</sup>。值得注意的是,靠近对称轴 ( $x = 0$ ) 的放电区域密度峰值为  $1.65 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$ , 而远离对称轴的密度峰值为  $2.35 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$ , 电势降分别为 70 V 和 80 V。这主要是由于双圆柱阴极的磁场形成相互作用,造成蓝色虚线左侧 ( $0 \text{ mm} \leq x \leq 150 \text{ mm}$ ) 的磁感线被明显压缩 (如图 4(c)), 导致放电区域缩小,电子溢出增强,进而造成放电减弱。

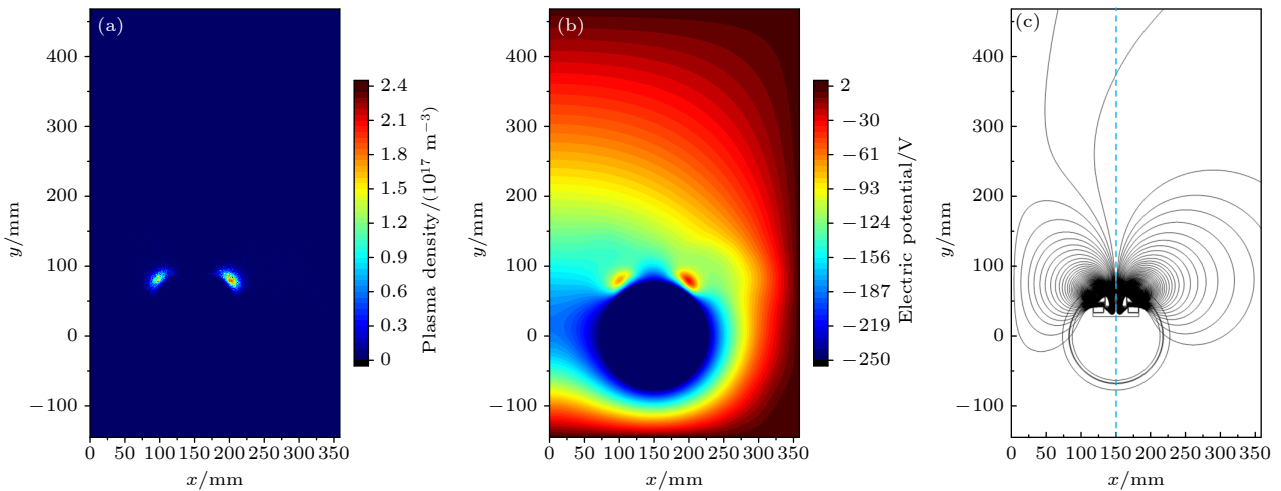


图 4 放电电压 250 V、气压 0.6 Pa 条件下,双圆柱阴极放电的稳态 (a) 等离子体密度、(b) 电势和 (c) 磁感线分布

Fig. 4. Steady-state distribution of (a) plasma density, (b) electric potential, and (c) magnetic flux lines for the discharge of double cylindrical cathodes at 250 V, 0.6 Pa.

### 3.3 三维检验电子 MC 模型

利用三维检验电子 MC 模型计算圆柱阴极的三维放电, 通过 MATLAB 编辑实现, 模型纵截面和横截面的示意图分别如图 5(a) 和图 5(b) 所示. 图 5 中浅绿色区域为仿真域, 共包含 3 类边界, 即阴极边界、自由边界和镜像边界, 分别如图 5 中橙色、蓝色和紫色线段所示. 其中, 当检验电子运动至阴极边界时, 会受到阴极鞘层强烈的排斥, 因此发生反弹<sup>[21]</sup>; 当检验电子运动至自由边界时则直接消失; 当检验电子运动至镜像边界时, 发生反弹, 同时  $x$  轴坐标取相反数, 代表靶面霍尔电流的闭合.

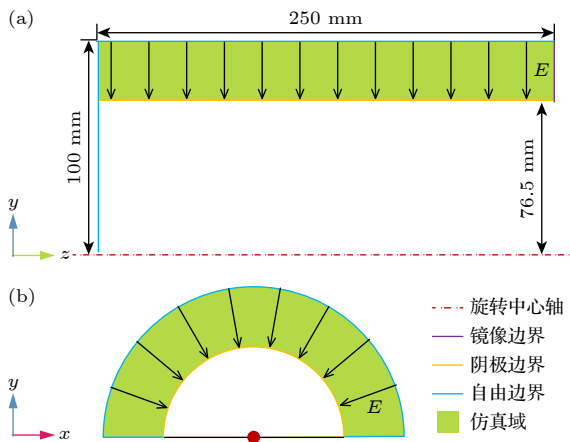


图 5 三维检验电子 MC 模型示意图 (a) 纵截面; (b) 横截面

Fig. 5. Schematic diagram of the 3D test electron MC model: (a) Longitudinal section; (b) cross section.

为了使三维放电仿真能够耦合等离子体的自洽电势, 将图 4 中的等离子体密度和电势分布代入三维检验电子 MC 模型作为背景, 如此检验电子密度即可代表整体等离子体的密度. 为削减计算量, 取单柱靶进行模拟, 因此将放电区域的电势降和直部等离子体密度峰值分别设置为 75 V 和  $2.00 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$  (即取图 4 中两个放电区域的平均). 初始检验电子根据等离子体密度分布的概率随机生成, 平均电子温度设置为 4 eV<sup>[25]</sup>, 满足 Maxwell 分布. 设定电子步长为  $\Delta t_e = 1 \times 10^{-12} \text{ s}$ , 每经过一个步长, 判定电子与背景 Ar 原子发生碰撞的概率和类型.

### 3.4 三维等离子体放电仿真

圆柱阴极的三维等离子体放电特性仿真结果如图 6 所示. 其中图 6(a) 为等离子体密度在靶面的投影, 代表等离子体放电跑道<sup>[26]</sup>. 可见, 跑道内

形成了稳定的等离子体聚集, 其等离子体密度远高于跑道外, 表明二维 PIC/MCC 方法耦合三维电子 MC 方法能够稳定的输出三维等离子体放电状态, 降低计算量的同时提升了收敛性. 为进一步分析等离子体密度分布随轴向位置的变化, 取  $z = 0, 10, 20, 30, 40, 50, 70, 100, 150$  和 200 mm 处的横截面作等离子体密度分布, 如图 6(b) 所示. 其中  $z < 20 \text{ mm}$  的范围内, 由于磁场较弱, 等离子体难以形成稳定的聚集, 故密度较低, 表明放电较弱.  $20 \text{ mm} < z < 50 \text{ mm}$  的范围为放电跑道的端头区域, 等离子体密度逐渐上升, 由一个放电区域逐渐扩展为两个放电区域. 随着  $z$  增大到 50—100 mm 的范围, 等离子体密度达到峰值, 这是由于此处恰好对应端头和直部的交界区域, 磁感线方向发生偏转, 导致霍尔电流同步发生偏转并伴随着电子积累<sup>[27]</sup>.  $z > 100 \text{ mm}$  的范围为圆柱阴极的直部, 磁场维持稳定, 因此等离子体的密度分布基本不发生变化.

与传统的三维等离子体放电仿真模型<sup>[10,12,13]</sup>相比, 本文构建了双圆柱阴极的二维 PIC/MCC 方法耦合三维电子 MC 方法的模型, 利用前者构建稳态等离子体密度与电势分布作为背景场, 解决了圆柱阴极背景自洽电势难以确定的问题, 再利用后者跟踪大量电子运动获得等离子体放电特性, 解决了三维空间模拟计算量大以及收敛性差的问题, 最终实现三维等离子体放电仿真, 其结果成功地反映出了圆柱阴极的等离子体放电特征, 能够为阴极刻蚀和粒子沉积提供初始条件.

## 4 靶材刻蚀仿真

### 4.1 三维动态刻蚀模型

靶材刻蚀仿真通过三维等离子体放电模型和 CA 方法耦合实现, 其中前者用于描述靶面刻蚀强度, 后者用于描述靶材刻蚀形貌<sup>[28]</sup>. CA 方法的模型示意图如图 7(a) 所示, 将靶材分割成大量的小型元胞进行逐层刻蚀, 通过未被刻蚀的元胞表征剩余靶材, 从而得到刻蚀形貌. 其中圆柱阴极靶材厚度为 9 mm, 元胞尺寸为  $\Delta l = 1 \text{ mm}$ , 每一层元胞单独用一种颜色进行标记. 在旋转状态下, 等离子体对同一横截面上的每个位置的刻蚀强度相同, 因此当轴向位置  $z$  一定时, 每一层元胞的刻蚀速度相同<sup>[12]</sup>. 由此, 可将每个横截面上的同层元胞视为一个元胞, 从而引入圆柱阴极的旋转效应, 如图 7(b)

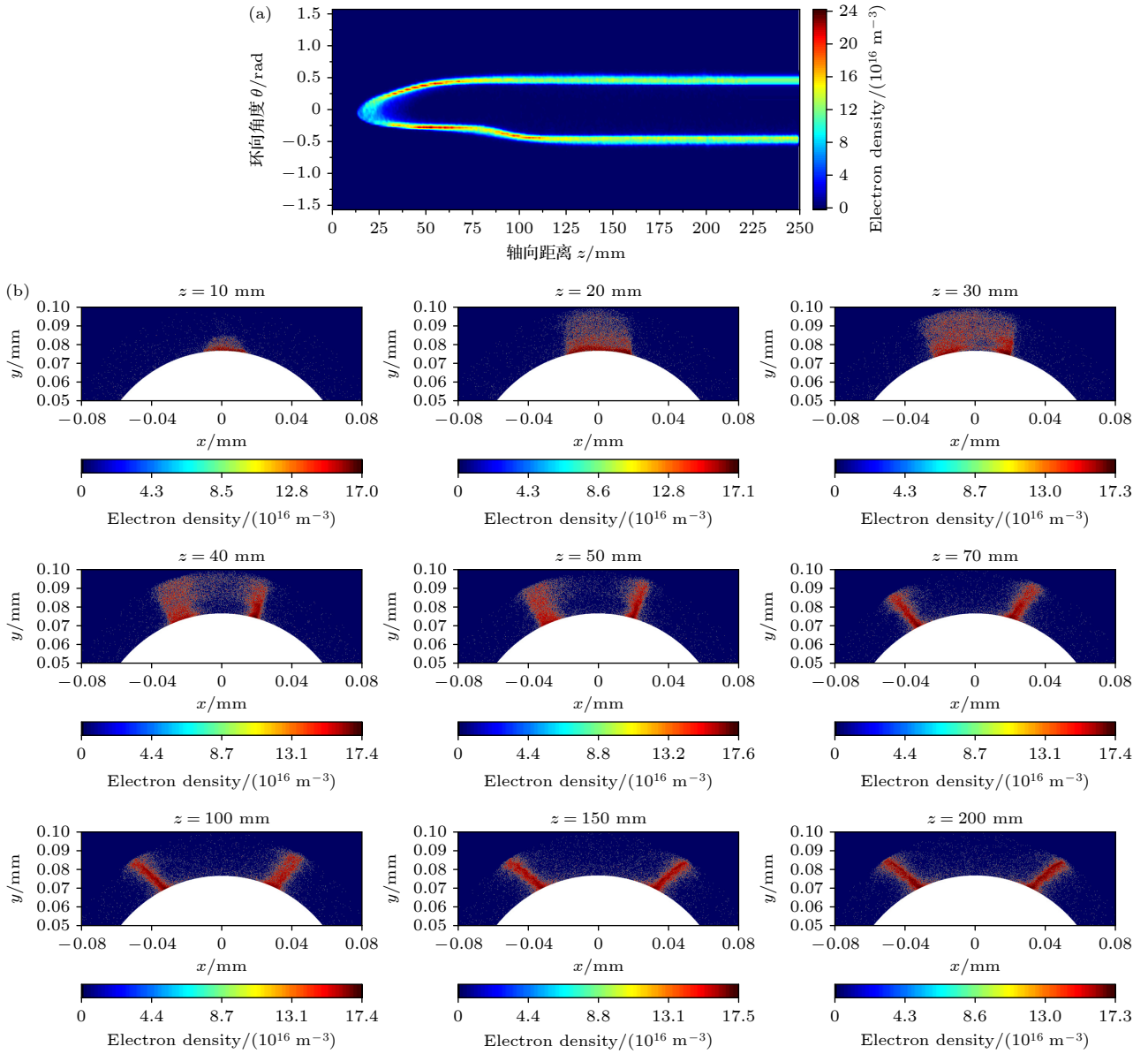


图 6 (a) 靶面和 (b) 不同截面上的检验电子密度分布

Fig. 6. Electron density distribution (a) on the target surface and (b) at different cross-sections.

所示. 最终形成的元胞阵列共 9 层, 250 列. 定义每个元胞中靶材原子的总量为填充量  $C$ , 并假设对于最外层元胞  $C = 1$ , 根据体积比可依次求出每一层的填充量分别为 1, 0.987, 0.974, 0.961, 0.947, 0.934, 0.921, 0.908 和 0.895.

动态刻蚀仿真由 MATLAB 软件编辑实现, 其计算流程如图 7(c) 所示. 通过计算三维等离子体放电, 得到等离子体对靶材的刻蚀强度分布, 并根据此更新靶材形貌, 然后基于新的靶材形貌重新计算三维等离子体放电, 如此循环直至阴极被刻穿. 这样, 整体刻蚀过程就被分解为逐步微元刻蚀. 为简化计算, 利用等离子体密度在靶面的投影 (如

图 6(a)) 来表征静态的刻蚀通量<sup>[29]</sup>. 旋转状态下, 每个轴向位置  $z$  处的刻蚀通量  $\Gamma_z$  相当于静态刻蚀通量的总和:

$$\Gamma_z = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} n_z^\theta d\theta, \quad (5)$$

其中  $n_z^\theta$  是空间电子密度沿圆柱阴极径向投影到阴极表面的总密度. 在此基础上, 通过 (6) 式对元胞的填充值  $C_{z,t}^k$  进行更新:

$$C_{z,t}^k = C_{z,0}^k - A z, \quad (6)$$

其中下标  $z$  和  $k$  分别表示元胞的轴向和径向位置, 下标 0 和  $t$  分别表示刻蚀过程的初态和末态,

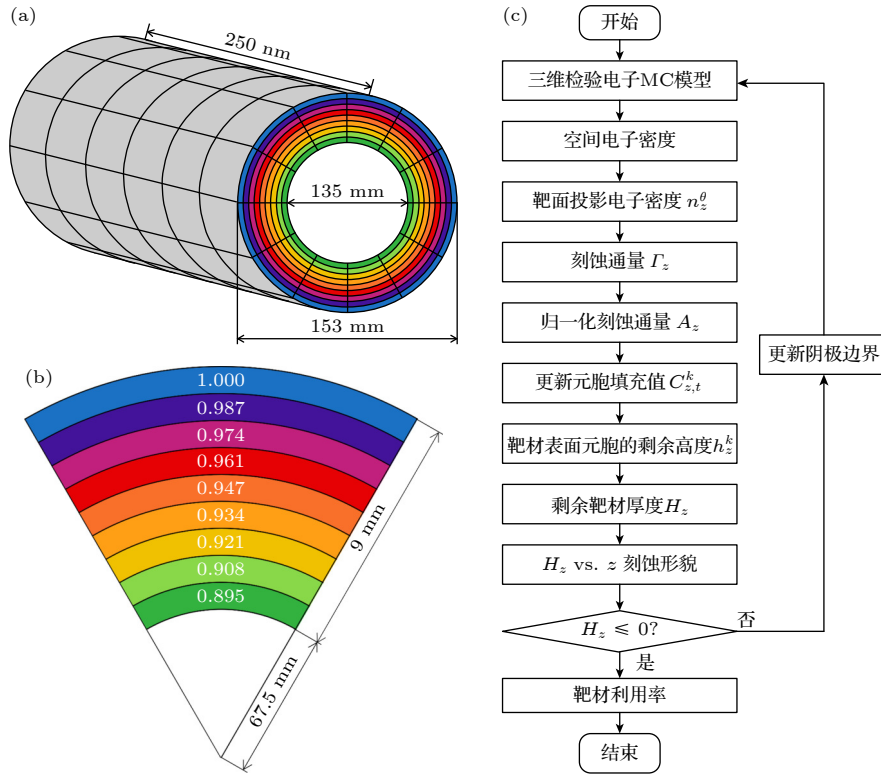


图 7 圆柱阴极 CA 模型 (a) 静态模型; (b) 耦合旋转效应; (c) 动态刻蚀模拟流程图

Fig. 7. Schematic diagram of the CA model for the cylindrical cathode: (a) Static model; (b) model coupled with rotation; (c) flow-chart of dynamic erosion simulation with the rotational CA model.

$A_z = \Gamma_z / \max(\Gamma)$  为归一化的刻蚀通量. 如果  $C_{z,t}^k < Az$ , 则该元胞  $C_{z,t}^k = 0$ , 从靶材变为放电区域, 同时下方元胞  $C_{z-1}^k$  将被刻蚀. 每步微元刻蚀完成后, 靶材表面元胞的剩余高度  $h_z^k$  可由 (7) 式求出:

$$h_z^k = \Delta l \sqrt{\frac{C_{z,t}^k}{C_{z,0}^k} (2k-1) + (k-1)^2}. \quad (7)$$

如此, 可求出  $z$  位置处剩余的靶材厚度  $H_z$ :

$$H_z = (k-1)\Delta l + h_z^k. \quad (8)$$

在此基础上求出  $H_z$  vs.  $z$  的曲线, 即为新的刻蚀形貌.

## 4.2 旋转圆柱阴极刻蚀仿真

基于旋转 CA 模型对圆柱阴极的刻蚀行为进行仿真, 控制每轮微元刻蚀的最大刻蚀深度为 1 mm, 经过 9 轮, 得到的靶材刻蚀形貌演化过程如图 8(a) 所示. 可见随着刻蚀的深入, 在圆柱阴极的端头逐渐形成了 3 个特征点, 其中  $z = 104$  mm 为刻蚀最深点, 厚度最先达到 0 mm, 表明靶材被刻穿. 另外两个特征点分别出现在  $z = 40$  mm 和 75 mm 处, 前者为刻蚀深点, 剩余厚度为 0.9 mm;

后者为刻蚀浅点, 剩余厚度为 1.2 mm. 直部 ( $z > 110$  mm) 剩余靶材厚度为 0.3 mm, 基本维持恒定. 利用游标卡尺对放电刻穿的 ITO 阴极形貌进行测量验证仿真结果, 其特征点和对应的特征深度如图 8(b) 所示. 可见, 实际靶材刻蚀形貌同样存在 3 个特征点, 其中靶材刻穿的位置为  $z = 105$  mm 处, 为最深刻蚀点, 与仿真结果吻合良好. 另外两个测量特征点分别出现在  $z = 40$  mm 和 55 mm 处, 对应的剩余厚度分别为 0.25 mm 和 0.4 mm, 厚度低于仿真结果, 该误差可能源自仿真磁场与实际存在的差异. 实验测量得到的直部剩余靶材厚度为 0.5 mm, 与仿真结果基本吻合. 最后, 通过仿真积分和实验称重分别得到靶材利用率为 85.81% 和 84.36%, 误差为 1.45%, 低于 2%. 由此可见, 旋转 CA 模型具有较高的仿真精度, 能够有效反映出旋转状态下圆柱阴极的刻蚀行为.

## 5 薄膜沉积仿真

根据靶材的刻蚀程度释放 In 和 Sn 原子, 并利用检验粒子 MC 模型跟踪其运动轨迹, 实现对薄

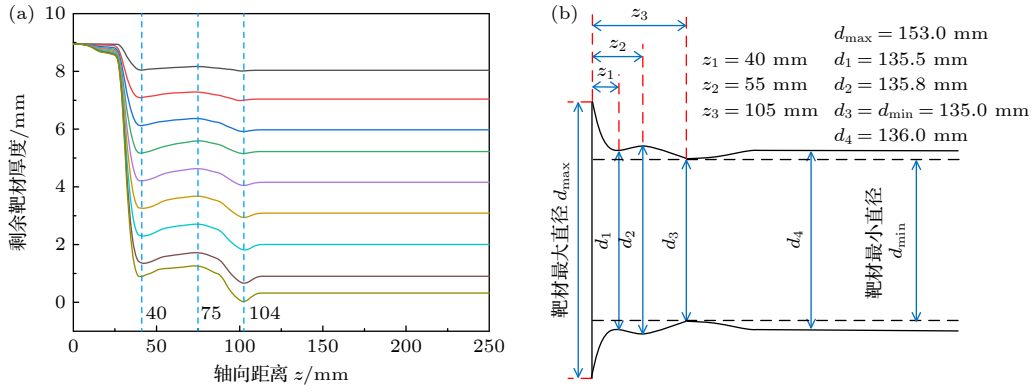


图 8 (a) 仿真和 (b) 实验得到的阴极刻蚀形貌

Fig. 8. Cathode erosion profile obtained by (a) simulation and (b) experiment.

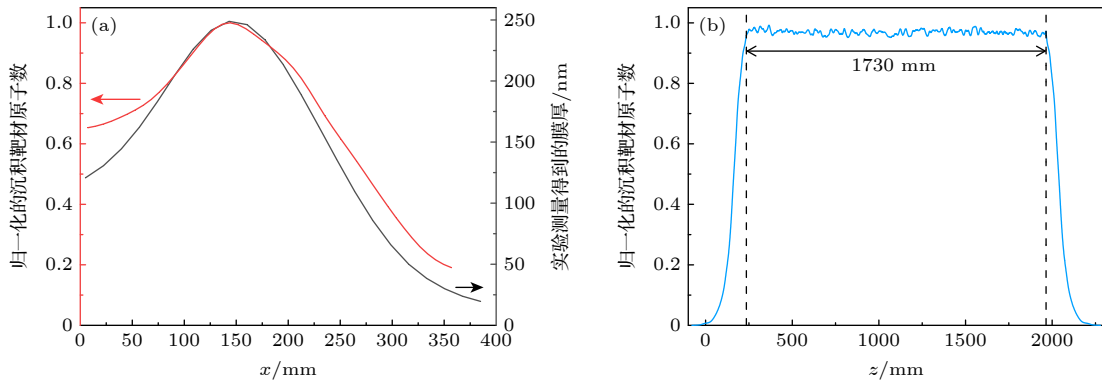


图 9 靶材粒子 (a) 沿  $x$  方向上和 (b) 沿  $z$  方向上的沉积数量分布

Fig. 9. Deposition distribution of target material particles along (a) the  $x$  direction and (b) the  $z$  direction.

膜沉积的仿真. 结果表明, 仿真与能量色散谱仪 (energy dispersive spectroscopy, EDS) 测量得到载板上的 In/Sn 原子比分别为 11.76 和 10.98, 二者基本吻合, 误差为 6.6%. 由于 In 原子的电离能 (5.79 eV) 低于 Sn 原子 (7.34 eV)<sup>[30]</sup>, In 原子更容易电离生成 In<sup>+</sup> 离子而被阴极回吸. 而仿真忽略了靶材原子的电离, 故得到的 In/Sn 比略高于实际情况. 图 9 展示了载板上的粒子沉积分布. 其中, 在  $x$  方向上, 沉积粒子数量先增大后减小, 在  $x = 148$  mm 处达到峰值. 实验对膜厚测量结果的趋势与仿真得到的沉积粒子数分布基本吻合, 二者的均方根误差为 6.75%, 薄膜最厚的位置位于  $x = 155$  mm, 与仿真相差 7 mm. 由于粒子沉积分布与载板上 ITO 薄膜的厚度并不完全等价, 故存在一定误差<sup>[31]</sup>. 在  $z$  方向上, 沉积粒子数在  $z \in [235$  mm, 1965 mm] 的区间内基本维持稳定, 表明粒子沉积均匀, 宽度为 1730 mm, 仅比实际厚度均匀区宽度短 20 mm, 误差在 1.1% 以内. 由此可见, 模型准确预测了圆柱阴极的薄膜沉积状态.

## 6 结 论

本文针对旋转圆柱阴极构建了三维仿真体系, 实现了对磁场分布、等离子体放电、靶材刻蚀和薄膜沉积全过程的三维模拟, 并通过对 ITO 圆柱阴极进行实际测试研究了仿真精确性. 利用二维 PIC/MCC 模型计算放电区域内稳态的等离子体密度和电势作为背景, 再利用三维检验电子 MC 模型跟踪电子运动, 能够针对圆柱阴极实现三维等离子体放电仿真. 在此基础上, 以等离子体密度投影作为刻蚀通量, 耦合 CA 方法和检验粒子 MC 方法分别实现三维靶材刻蚀和粒子沉积仿真, 从而构建了阴极磁场-等离子体放电-靶材刻蚀-薄膜沉积的全链条三维仿真体系. 结果表明, 仿真和实测的刻蚀形貌在特征点数量和位置上面基本一致, 仿真靶材利用率为 85.81%, 与实际仅相差 1.45%, 仿真得到的载板 In/Sn 摩尔比与实际 EDS 测试结果一致, 同时检验粒子沉积分布与实际薄膜厚度分布吻合. 该三维仿真体系有望为后续阴极优化和真空

系统开发提供可靠的理论指导, 缩减研发周期并降低试错成本.

### 参考文献

- [1] Saenko A V, Tominov R V, Jityaev I L, Vakulov Z E, Avilov V I, Polupanov N V, Smirnov V A 2024 *Nanomaterials* **14** 1901
- [2] Dhage S R, Badgajar A C 2018 *J. Alloys Compd.* **763** 504
- [3] Chen J F, Ding X P, Wang J F, Xie Z Y, Wang S H 2024 *J. Alloys Compd.* **1002** 175318
- [4] Sarakinos K, Alami J, Konstantinidis S 2010 *Surf. Coat. Technol.* **204** 1661
- [5] Matthews S, De Bosscher W, Blondeel A, Van Holsbeke J, Delrue H 2008 *Vacuum* **83** 518
- [6] Park J H, Ahn K J, Na S I, Kim H K 2011 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **95** 657
- [7] Park J H, Ahn K J, Park K I, Na S I, Kim H K 2010 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43** 115101
- [8] Van Aeken K, Maheude S, Depla D 2008 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** 205307
- [9] Fan Q H, Grago J J, Zhou L Q 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 6017
- [10] Teunissen J, Ebert U 2016 *Plasma Sources Sci. Technol.* **25** 044005
- [11] Bogaerts A, Bultinck E, Kolev I, Schwaederlé L, Van Aeken K, Buyle G, Depla D 2009 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42** 194018
- [12] Musschoot J, Depla D, Buyle G, Haemers J, De Gryse R 2006 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39** 3989
- [13] Fu Y, Ji P, He M, Huang P, Huang G, Huang W 2024 *Plasma Chem. Plasma Process.* **44** 601
- [14] Bogaerts A, Kolev I, Buyle G 2008 *Modeling of the Magnetron Discharge* (Berlin: Springer) pp61–130
- [15] Zhu G, Yang Y, Xiao B, Gan Z 2023 *Molecules* **28** 7660
- [16] Cui S H, Zuo W, Huang J, Li X T, Chen Q H, Guo Y X, Yang C, Wu Z C, Ma Z Y, Fu J Y, Tian X B, Zhu J H, Wu Z Z 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 085202 (in Chinese) [崔岁寒, 左伟, 黄健, 李熙腾, 陈秋皓, 郭宇翔, 杨超, 吴忠灿, 马正永, 傅劲裕, 田修波, 朱剑豪, 吴忠振 2023 *物理学报* **72** 085202]
- [17] Kapran A, Ballage C, Hubicka Z, Minea T 2025 *Vacuum* **238** 114324
- [18] Sabavath G K, Swaroop R, Singh J, Panda A B, Haldar S, Rao N, Mahapatra S K 2022 *Plasma Phys. Rep.* **48** 548
- [19] Cui S H, Chen Q H, Guo Y X, Chen L, Jin Z, Li X T, Yang C, Wu Z C, Su X Y, Ma Z Y, Fu R K Y, Tian X B, Chu P K, Chu W Z 2022 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **55** 325203
- [20] Sirghi L, Aoki T, Hatanaka Y 2004 *Surf. Coat. Technol.* **187** 358
- [21] Bultinck E, Kolev I, Bogaerts A, Depla D 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 013309
- [22] Cui S H, Wu Z Z, Lin H, Xiao S, Zheng B C, Liu L L, An X K, Fu R K Y, Tian X B, Tan W C, Chu P K 2019 *J. Appl. Phys.* **125** 063302
- [23] Lenmon M A, Bell K L, Gilbody H B, Hughes J G, Kingston A E, Murray M J, Smith F J 1988 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **17** 1285
- [24] Shen X Q, Xie Q, Xiao Q Q, Chen Q, Feng Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 165101 (in Chinese) [沈向前, 谢泉, 肖清泉, 陈茜, 丰云 2012 *物理学报* **61** 165101]
- [25] Chen L, Cui S H, Tang W, Zhou L, Li T, Liu L, An X, Wu Z, Ma Z, Lin H 2020 *Plasma Sources Sci. Technol.* **29** 025016
- [26] Nanbu K, Konodo S 1997 *Jpn. J. Appl. Phys.* **36** 4808
- [27] Shidoji E, Nemoto M, Nomura T 2000 *J. Vac. Sci. Technol. A* **18** 2858
- [28] Mikolaychuk M, Knyazeva A 2014 *AIP Conf. Proc.* **1623** 419
- [29] Liu H, Niu X, Yu D R 2019 *J. Plasma Phys.* **85** 905850208
- [30] Rumble J R 2024 *CRC Handbook of Chemistry and Physics* (Florida: CRC Press) pp10–113
- [31] Shon C H, Lee J K 2002 *Appl. Surf. Sci.* **192** 258

## Establishment and validation of three-dimensional simulation model for magnetron sputtering of rotating cylindrical cathode\*

MA Ziqi<sup>#</sup>   XU Qiang<sup>#</sup>   XIAO Mengran   TANG Shiyi   TAO Zhiqun  
 YANG Dongjie   AN Xiaokai   LIU Liangliang  
 CUI Suihan<sup>†</sup>   WU Zhongzhen<sup>‡</sup>

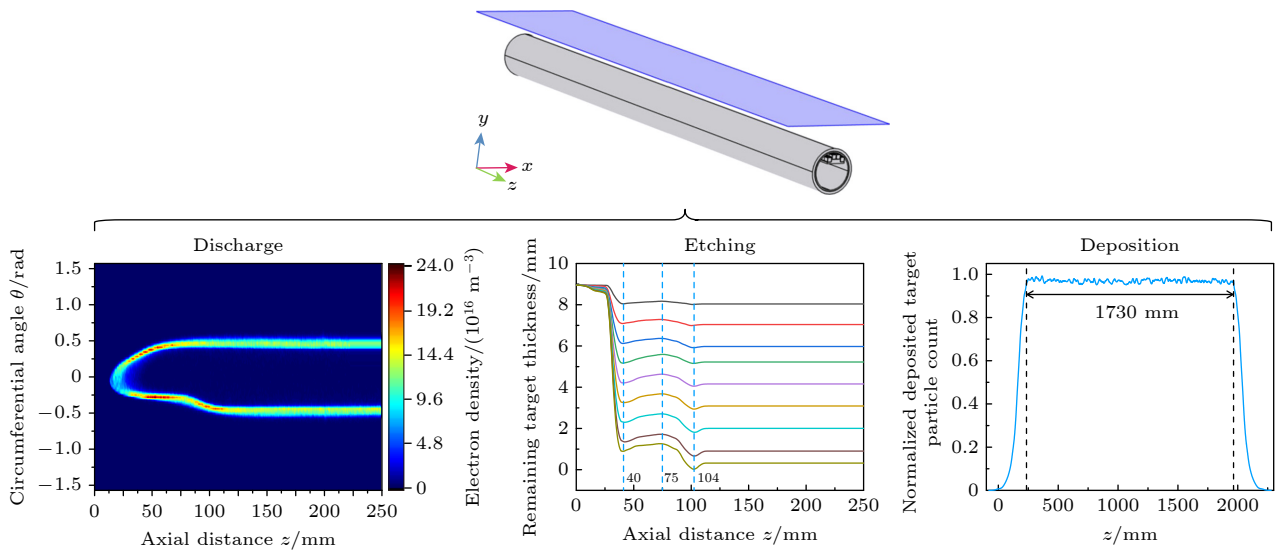
(School of New Materials, Peking University Shenzhen Graduate School, Shenzhen 518055, China)

( Received 28 April 2025; revised manuscript received 21 May 2025 )

### Abstract

Rotating cylindrical cathodes possess high theoretical target utilization rates and have been widely used in thin film deposition in various industries. Regarding plasma research, the plasma discharge and transport processes of rotating cylindrical cathodes involve three-dimensional systems, unlike those of planar cathodes. Traditional plasma models applied to these systems require a large quantity of computational resources and have poor convergence, making simulation difficult. In this context, the plasma density and electric potential

distributions are calculated by a two-dimensional particle-in-cell/Monte Carlo collision (PIC/MCC) model, and they are used as a self-consistent background field in this work. Furthermore, a three-dimensional electron Monte Carlo method is used to track electron motion, so that three-dimensional plasma discharge simulation can be performed. On this basis, using plasma density projection as the etching flux and the cellular automata method, the rotational etching process of the cylindrical cathode is decomposed into stepwise micro-element static etching, thereby achieving three-dimensional etching behavior simulation. Subsequently, the etched target morphology is equivalently treated as the emission flux of In and Sn atoms, and a three-dimensional test particle Monte Carlo method is employed to trace their motion, realizing three-dimensional particle deposition simulation. Thus, a comprehensive three-dimensional simulation system is constructed through incorporating the cathode magnetic field, plasma discharge, target etching, and thin-film deposition into a complete simulation chain. The results indicate that this three-dimensional simulation system can accurately predict the operating conditions of cylindrical cathodes. The plasma stably accumulates on the cylindrical cathode surface, forming a three-dimensional discharge race track. The simulated etching profile is consistent with experimental result, showing the precise matching of the feature points with the residual thickness of the target. The utilization rate of the target material is 85.81%, with an error of less than 2% compared with that of the measurement. The molar ratio of In/Sn on the substrate is 11.76, with an error of 6.6% compared with the results measured by energy dispersive spectroscopy. The particle distribution on the substrate matches the actual film thickness distribution, with a uniform deposition length of 1730 mm, representing an error of only 1.1% compared with corresponding actual value.



**Keywords:** rotating cylindrical magnetron, three-dimensional modeling, plasma discharge, plasma transport

**PACS:** 52.65.-y, 52.75.-d, 81.15.Cd, 52.40.-w

**DOI:** [10.7498/aps.74.20250570](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250570)

**CSTR:** [32037.14.aps.74.20250570](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250570)

\* Project supported by the Science and Technology Planning Project of Shenzhen, China (Grant No. KJZD20231023100304009), the National Key R&D Program of China (Grant No. 2023YFA1608802), the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52305174), the Shenzhen Postdoctoral Research Fund Project After Outbound, China (Grant No. 6700200201), and the China Postdoctoral Science Foundation (Grant No. 2024M750089).

# These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: [cuish@pku.edu.cn](mailto:cuish@pku.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [wuzz@pkusz.edu.cn](mailto:wuzz@pkusz.edu.cn)

## 旋转圆柱阴极磁控溅射三维仿真模型的建立与验证

马梓淇 徐强 肖梦然 汤诗奕 陶志群 杨东杰 安小凯 刘亮亮 崔岁寒 吴忠振

### Establishment and validation of three-dimensional simulation model for magnetron sputtering of rotating cylindrical cathode

MA Ziqi XU Qiang XIAO Mengran TANG Shiyi TAO Zhiqun YANG Dongjie AN Xiaokai LIU Liangliang CUI Suihan WU Zhongzhen

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 155202 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250570

CSTR: 32037.14.aps.74.20250570

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250570>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

纵磁作用下真空电弧单阴极斑点等离子体射流三维混合模拟

Three-dimensional hybrid simulation of single cathode spot vacuum arc plasma jet under axial magnetic field  
物理学报. 2021, 70(5): 055201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201701>

三维数值模拟射频热等离子体的物理场分布

Three-dimensional numerical simulation of physical field distribution of radio frequency thermal plasma  
物理学报. 2021, 70(15): 155202 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202135>

尘埃等离子体棘轮中颗粒分离的三维模拟

Three-dimensional numerical simulation of particle separation using a dusty plasma ratchet  
物理学报. 2024, 73(11): 115201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240319>

三维行波磁场对等离子体鞘套密度的调控作用

Effect of three-dimensional traveling wave magnetic field on plasma sheath density  
物理学报. 2024, 73(17): 175201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240877>

面向半导体工艺的平面线圈感性耦合氩等离子体源的三维流体模拟研究

Three-dimensional fluid simulation of a planar coil inductively coupled argon plasma source for semiconductor processes  
物理学报. 2024, 73(21): 215201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240952>

托卡马克装置中等离子体环向旋转对三维响应场的影响

Influence of toroidal rotation on plasma response to external RMP fields in tokamak  
物理学报. 2022, 71(7): 075202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211975>