

电子回旋共振放电的电离特性 PIC/MCC 模拟(I) ——物理模型与理论方法

金晓林 杨中海

(电子科技大学物理电子学院,成都 610054)

(2006 年 4 月 4 日收到,2006 年 4 月 26 日收到修改稿)

采用粒子模拟与蒙特卡罗相结合(PIC/MCC)的方法对电子回旋共振(ECR)放电中的电离过程进行了模拟,其中带电粒子与微波的相互作用由 PIC 方法的电磁模型描述,粒子间的碰撞过程由 MCC 方法描述.考虑的碰撞类型有电子与中性粒子的弹性、激发、电离碰撞,离子与中性粒子的弹性、电荷交换碰撞,碰撞截面均依赖于能量而变化.阐述了理论分析的过程,为数值模拟 ECR 放电奠定了基础.

关键词:电子回旋共振放电,粒子模拟,蒙特卡罗,电离

PACC: 5265, 5280P, 5250

1. 引 言

随着低温等离子体在微电子工业中材料加工、器件制作等方面的广泛应用和快速发展,对低气压、高密度等离子体源的需求与日俱增,其中电子回旋共振(ECR)放电产生的等离子体具有更多优势和高度发展潜力而十分引人注目. ECR 放电生成的等离子体具有高密度、高电离度、大体积、均匀、无电极污染、运行气压低、设备简单、参数易于控制等优点,广泛应用于材料加工的方方面面^[1-6],如刻蚀、薄膜沉积、溅射、表面清洁等. ECR 加热机理^[7]、粒子输运过程、粒子的能量分布和角分布等对这些工业应用起直接的理论指导作用.同时由于 ECR 放电还可以产生高密度、高电荷态离子束,该离子束在原子物理、核物理、高能物理,甚至工业应用(如癌症的治疗)等方面已有重要应用价值^[8-10],这些均有待于对 ECR 放电及其生成等离子体特性进行深入的研究.

近 20 年来,经过众多学者的不断努力,相继在 ECR 放电、ECR 等离子体源特性的模拟中提出了三类模型:粒子模型、流体模型、混合模型(如图 1).

就目前而言,模拟主要集中在粒子模型中的 MCC 方法、PIC 方法、PIC/MCC 方法,其中 PIC 方法以静电模型居多,而国内则主要集中于混合模型和粒子模型中的 MCC 方法.但对于 ECR 放电及其生成等离子体的研究,应用粒子模型中的电磁模型更合适.因

为在 ECR 放电中,受电磁场作用的电子处于非平衡状态,其速度为 non-Maxwellian 分布,尤其是其中的高能电子对于鞘层电势、电离率、非弹性碰撞至关重要,所以利用粒子模型才更符合实际的物理过程,而且带电粒子的能量分布和角分布、ECR 加热等细节对理论研究和实际应用极为重要,如果不用粒子模型,则细节很难得到.在 PIC 的模型选择上,为了更准确地反映微波与带电粒子的相互作用,采用电磁模型比静电模型更合理.

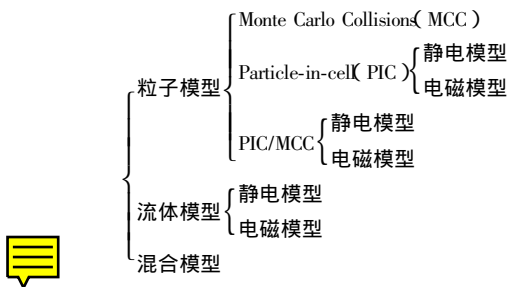


图 1 等离子体源特性模拟的三类模型

迄今为止,对 ECR 放电及其生成等离子体的模拟主要集中于稳态,而对于 ECR 放电过程的研究很少.虽然 ECR 等离子体源普遍被认为是有很稳定输出的源,但模拟放电过程对于探索 ECR 放电的物理本质、更精确的研究 ECR 等离子体源的特性有非常重要的意义.在实际应用中如何提高 ECR 等离子体源密度、电离度,如何提高微电子加工效率,如何优化设置 ECR 放电装置等非常关键,模拟放电过程可对这些实际应用起到更科学有效的理论指导. Muta 等

人^[11]采用一维流体模型、Yaska 等人^[12]采用二维流体模型模拟了低温 ECR 等离子体的产生机理,但是由于采用流体模型而无法给出 ECR 放电的细节。Niimura 等人^[13]以交换不稳定性(ICI)理论为基础,采用流体模型模拟了热电子密度、电势阱随时间的演化。Wook 等人^[14]采用一维 PIC/MCC 方法对 ECR 放电过程进行了模拟,探讨了部分电离特性,但是由于 ECR 放电中电子回旋共振的特征,使得二维甚至是三维的模拟才较符合实际的物理过程。

本文采用准三维 PIC/MCC 的方法,应用电磁模型,以带电粒子与微波的互作用、粒子间的碰撞为主体,对 ECR 放电电离过程模拟的理论部分进行了详细地阐述。

2. 物理模型

对如图 2 所示的 ECR 放电系统进行模拟。

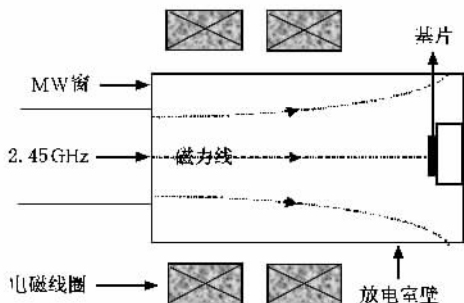


图 2 ECR 放电系统

微波通过 ECR 放电系统左端的微波窗馈入圆柱形放电室,外加电磁线圈在放电系统内部产生轴向递减的静磁场。在 ECR 条件下,微波能量耦合给电子,获得能量的电子与中性粒子碰撞,当电子的能量超过中性粒子激发或电离阈值,碰撞将使中性粒子激发或电离,逐渐生成等离子体。

3. 理论方法

本文采用 PIC/MCC 方法模拟^[15]ECR 放电过程,理论分析过程可以分成电磁场、电流源、粒子运动三个部分。

3.1. 电磁场求解

设该系统的半径为常数 R_0 ,考虑正交模式 TE_{mn} ,圆波导系统中任意场可以表示为

$$\mathbf{E} = \sum_s \{E_{TS}^{(1)}(z, t)\} \mathbf{e}_z \times \nabla_{\perp} c_s^{(1)}$$

$$+ E_{TS}^{(2)}(z, t) \mathbf{I} \mathbf{e}_z \times \nabla_{\perp} c_s^{(2)} \}, \quad (1)$$

$$\mathbf{B} = \sum_s \{ -B_{TS}^{(1)}(z, t) \nabla_{\perp} c_s^{(1)} - B_{TS}^{(2)}(z, t) \nabla_{\perp} c_s^{(2)} \} - \mathbf{e}_z \sum_s \{ B_{TS}^{(1)}(z, t) k_{cs}^{(1)^2} c_s^{(1)} + B_{TS}^{(2)}(z, t) k_{cs}^{(2)^2} c_s^{(2)} \}, \quad (2)$$

其中 $c_s^{(i)} = c_{mn}^{(i)}(R, \theta)$ 为 i 极化, TE_s (TE_{mn}) 模式场的横向波函数。

求解真空中的麦克斯韦方程组来得到自洽电磁场分布,将带电粒子直至最后生成的等离子体看作方程中的自由源。

将麦克斯韦方程组做如下处理:

$$\int_A -(\nabla_{\perp} c_u^{(j)}) \left(-\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right) dA = c \int_A -(\nabla_{\perp} c_u^{(j)}) \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) dA, \quad (3)$$

$$\int_A -c_u^{(j)} \mathbf{e}_z \cdot \left(-\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right) dA = c \int_A -c_u^{(j)} \mathbf{e}_z \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) dA, \quad (4)$$

$$\int_A (\mathbf{e}_z \times \nabla_{\perp} c_u^{(j)}) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) dA = c \int_A (\mathbf{e}_z \times \nabla_{\perp} c_u^{(j)}) \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) dA - 4\pi \int_A \mathbf{J} \cdot (\mathbf{e}_z \times \nabla_{\perp} c_u^{(j)}) dA. \quad (5)$$

再将任意场表达式(1-2)代入(3-5)整理得

$$\frac{\partial B_{TS}^{(i)}(z, t)}{\partial t} = -c \frac{\partial E_{TS}^{(i)}(z, t)}{\partial z}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial B_{TS}^{(i)}(z, t)}{\partial t} = -c E_{TS}^{(i)}(z, t), \quad (7)$$

$$\frac{\partial E_{TS}^{(i)}(z, t)}{\partial t} = -c \frac{\partial B_{TS}^{(i)}(z, t)}{\partial z} + ck_{cs}^{(i)^2} B_{TS}^{(i)}(z, t) - \{J_T^{(i)}(z, t)\}, \quad (8)$$

其中

$$\{J_T^{(i)}(z, t)\} = \frac{4\pi \int_A \mathbf{J}^{(i)} \cdot (\mathbf{e}_z \times \nabla_{\perp} c_s^{(i)}) dA}{\int_A |\nabla_{\perp} c_s^{(i)}|^2 dA}. \quad (9)$$

将场方程归一化(略去归一化和极化标记),并将场方程离散为

$$E_T^{n+1/2}(i) = E_T^{n-1/2}(i) - \frac{c \Delta t}{2 \Delta z} \times [B_{\perp}^n(i+1) - B_{\perp}^n(i-1)] + ck_c^2 B_{\perp}^n(i) - \Delta t J_T^n(i), \quad (10)$$

$$B_T^{n+1}(i) = B_T^n(i) - \frac{c\Delta t}{2\Delta z} [E_T^{n+1/2}(i+1) - E_T^{n+1/2}(i-1)], \quad (11)$$

$$B_L^{n+1}(i) = B_L^n(i) - c\Delta t E_T^{n+1/2}(i). \quad (12)$$

微波从放电系统左边界馈入,传播至右边界处无任何反射,全部被吸收.

3.2. 电流源的求解

即如上(9)式的求解.

$$\int_A |\nabla_{\perp} c_{mm}^{(i)}|^2 dA = 2\pi R_0^2 J_m^2(k_{mn}) \times (1 - m^2/k_{mn}^2) [2], \quad (13)$$

其中[2]表示当取轴对称模式($m=0$)时所取值为2,否则为1.

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_e + \mathbf{J}_i \Rightarrow \{J_T^i(z, t)\} = \{J_{Te}^i(z, t)\} + \{J_{Ti}^i(z, t)\}. \quad (14)$$

设单位长度内电子数密度为 N_e , 由 N_{pe} 个宏观电子来表征, 则电子电流可以表示为

$$\mathbf{J}_e = \sum_j \frac{eN_e}{N_{pe}} \mathbf{v}_j \delta(x - x_j) \times \delta(y - y_j) F(z - z_j). \quad (15)$$

每个宏观电子具有瞬时坐标位置 x_j, y_j, z_j , 瞬时速度 \mathbf{v}_j , 电量 eN_e/N_{pe} . 每个宏观电子在 x 和 y 向无限薄, z 向电荷具有高斯分布 $F(z - z_j)$, 有限尺寸取为空间步长 Δz .

将电流源项代回场方程中, 归一化得

$$\{J_{Te}^i(z, t)\} = \frac{2}{N_p} \frac{eN}{R_0^2} \frac{1}{U_{mn}} \sum_j \{ \nu_{jx} e_{xmn}^{(i)} + \nu_{jy} e_{ymn}^{(i)} \} \times F(z - z_j), \quad (16)$$

其中

$$U_{mn} = J_m^2(k_{mn}) [1 - m^2/k_{mn}^2] [2]. \quad (17)$$

电子的有效速度

$$\nu_j = (\nu_{jx} e_{xmn}^{(i)} + \nu_{jy} e_{ymn}^{(i)}). \quad (18)$$

将 $F(z - z_j)$ 在最近的格点 z_g 作泰勒展开, 取 0, 1 次项.

并令

$$D_{g'e}^n = \sum_{j \in g} \nu_j^n (z_j^n - z_g) [2];$$

$$H_{g'e}^n = \sum_{j \in g} \nu_j^n, \quad (19)$$

得出

$$\{J_{Te}^i(z, t)\} = \frac{2}{N_{pe}} \frac{eN_e}{R_0^2} \frac{1}{U_{mn}} \sum_g F(z - z_g) \times [H_{g'e}^n + D_{g-1'e}^n - D_{g+1'e}^n]. \quad (20)$$

同理可得

$$\{J_{Ti}^i(z, t)\} = -\frac{2}{N_{pi}} \frac{eN_i}{R_0^2} \frac{1}{U_{mn}} \sum_g F(z - z_g) \times [H_{g'i}^n + D_{g-1'i}^n - D_{g+1'i}^n]. \quad (21)$$

3.3. 推进带电粒子运动

应用 PIC 方法描述带电粒子与波的相互作用; MCC 方法描述粒子间的碰撞.

每一个时间步长 Δt 内带电粒子发生碰撞的概率为

$$P_c = 1 - \exp[-N\sigma(\epsilon)v\Delta t], \quad (22)$$

其中 N 为中性粒子的密度; ϵ, v 和 σ_i 分别为带电粒子的能量、速率和总碰撞截面. 考虑电子与中性粒子的弹性、激发、电离碰撞, 离子与中性粒子的弹性、电荷交换碰撞. 其中所采用的碰撞截面均依赖于带电粒子的能量而变化^[16-18].

产生一个 $[0, 1]$ 均匀分布的随机数 R_1 与 P_c 比较. 如果 $R_1 \leq P_c \rightarrow$ 粒子发生碰撞, 由 MCC 法处理; 如果 $R_1 > P_c \rightarrow$ 粒子不发生碰撞, 由 PIC 法处理.

3.3.1. MCC 部分

发生何种碰撞由分概率来确定. 电子的分概率为 $\sigma_{\text{elastic } e}/\sigma_{te}, \sigma_{\text{excitation } e}/\sigma_{te}, \sigma_{\text{ionization } e}/\sigma_{te}$; 离子的分概率为 $\sigma_{\text{elastic } i}/\sigma_{ti}, \sigma_{\text{exchange } i}/\sigma_{ti}$. 碰撞后粒子的新状态依具体碰撞类型决定^[15].

3.3.2. PIC 部分

为理论分析的简化, 模拟中定义

$$\mathbf{p} \equiv \gamma \mathbf{v}, \quad (23)$$

则带电粒子的运动方程为

$$m_0 \frac{d\mathbf{p}}{dt} = q [\mathbf{E}(\mathbf{r}) + \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{B}(\mathbf{r})}{c\gamma}]. \quad (24)$$

对运动方程作归一化处理, 然后用 leap-frog 算法来求解, 得出

$$\begin{pmatrix} P_x^{n+1} \\ P_y^{n+1} \\ P_z^{n+1} \end{pmatrix} = \mathbf{F} \begin{pmatrix} E_x^{n+1/2} \\ E_y^{n+1/2} \\ E_z^{n+1/2} \end{pmatrix} + \mathbf{S} \begin{pmatrix} P_x^n \\ P_y^n \\ P_z^n \end{pmatrix}, \quad (25)$$

$$\mathbf{F} = \frac{\Delta t}{1 + a_x^2 + a_y^2 + a_z^2} \begin{pmatrix} 1 + a_x^2 & a_z + a_x a_y & -a_y + a_x a_z \\ -a_z + a_x a_y & 1 + a_y^2 & a_x + a_y a_z \\ a_x a_z + a_y & -a_x + a_y a_z & 1 + a_z^2 \end{pmatrix}, \quad (26)$$

$$\mathbf{S} = \frac{1}{1 + a_x^2 + a_y^2 + a_z^2} \begin{pmatrix} 1 + a_x^2 & a_z + a_x a_y & -a_y + a_x a_z \\ -a_z + a_x a_y & 1 + a_y^2 & a_x + a_y a_z \\ a_x a_z + a_y & -a_x + a_y a_z & 1 + a_z^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & a_z & -a_y \\ -a_z & 1 & a_x \\ a_y & -a_x & 1 \end{pmatrix}, \quad (27)$$

$$\begin{aligned} a_x &= \frac{B_x^{n+1/2} \Delta t f}{2c\gamma^{n+1/2}}; \\ a_y &= \frac{B_y^{n+1/2} \Delta t f}{2c\gamma^{n+1/2}}; \\ a_z &= \frac{B_z^{n+1/2} \Delta t f}{2c\gamma^{n+1/2}}. \end{aligned} \quad (28)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{\gamma} \Rightarrow \mathbf{r}^{n+3/2} = \mathbf{r}^{n+1/2} + \Delta t \mathbf{P}^{n+1} / \gamma^{n+1}. \quad (29)$$

4. 结 论

本文结合 PIC 处理集体相互作用及其等离子体诊断的优势、MCC 处理碰撞的优势,采用准三维 PIC/MCC 的方法,应用电磁模型,对 ECR 放电过程模拟的理论部分进行了阐述,为计算机模拟 ECR 放电过程、探讨 ECR 放电电离特性及 ECR 等离子体源特性提供了理论基础。

对于电子 $f = \bar{e}$, 对于离子 $f = -\frac{\bar{e}}{m_{i0}}$.

由于 \mathbf{r} 未必在格点上,故推动带电粒子运动的场由格点上的值插值得到。

无论粒子是否发生碰撞,在更新粒子的能量或动量后,可由下式更新粒子的位置:

- | | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>[1] Gao X, Sun G S, Li J M <i>et al</i> 2005 <i>Chinese Physics</i> 14 599</p> <p>[2] He B, Chen G H, Zhu X H <i>et al</i> 2006 <i>Chinese Physics</i> 15 866</p> <p>[3] Zhu X H, Chen G H, Yin S Y <i>et al</i> 2005 <i>Chinese Physics</i> 14 834</p> <p>[4] Yang W B, Wang J L, Zhang G L <i>et al</i> 2003 <i>Chinese Physics</i> 12 1257</p> <p>[5] Ding W Y, Xu J, Li Y Q <i>et al</i> 2006 <i>Acta Physica Sinica</i> 55 1363 (in Chinese)[丁万昱、徐 军、李艳琴等 2006 物理学报 55 1363]</p> <p>[6] Gao P, Xu J, Deng X L <i>et al</i> 2005 <i>Acta Physica Sinica</i> 54 3241 (in Chinese)[高 鹏、徐 军、邓新绿等 2005 物理学报 54 3241]</p> <p>[7] Shi B R, Long Y X, Dong J Q <i>et al</i> 2003 <i>Chinese Physics</i> 12 1251</p> <p>[8] Kato Y, Furuki H, Asaji T <i>et al</i> 2006 <i>Review of Scientific Instruments</i> 77 03A336</p> <p>[9] Girard A, Hitz D, Melin G <i>et al</i> 2004 <i>Review of Scientific Instruments</i> 75 1381</p> | <p>[10] Dougar-Jabon V D, Umnov A M, Diaz D S 2002 <i>Review of Scientific Instruments</i> 73 629</p> <p>[11] Muta H, Itagaki Naho, Kawai Y 2002 <i>Vacuum</i> 66 209</p> <p>[12] Yasaka Y, Fukuyama A, Hatta A <i>et al</i> 1992 <i>Journal of Applied Physics</i> 72 2652</p> <p>[13] Niimura M, Lamoureux M, Goto A <i>et al</i> 2000 <i>Review of Scientific Instruments</i> 71 846</p> <p>[14] Wook H K, Nak H C, Duk I C <i>et al</i> 1993 <i>Journal of Applied Physics</i> 73 4205</p> <p>[15] Birdsall C K 1991 <i>IEEE Transactions on Plasma Science</i> 19 65</p> <p>[16] Braun C G, Kunc J A 1987 <i>Physics of Fluids</i> 30 499</p> <p>[17] Phelps A V 1991 <i>Journal of Physical and Chemical Reference Data</i> 20 557</p> <p>[18] Wang D Z, Ma T C, Deng X L 1994 <i>Journal of Applied Physics</i> 75 1335</p> |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

The PIC/MCC simulation of the ionization processes in electron cyclotron resonance discharge (I)

——Physical model and theoretical methods

Jin Xiao-Lin Yang Zhong-Hai

(*College of Physical Electronics , University of Electronic Science and Technology of China , Chengdu 610054 , China*)

(Received 4 April 2006 ; revised manuscript received 26 April 2006)

Abstract

We present a theoretical and computational model to study the ionization of the electron cyclotron resonance (ECR) microwave discharge using a quasi-three-dimensional electromagnetic particle-in-cell plus Monte Carlo collision method. The interaction between the charged particles and microwave fields are described by particle-in-cell method. The collision processes are treated with Monte Carlo method. Elastic , excitational , and ionizing electron-neutral collisions and elastic , charge exchange ion-neutral collisions are included. The cross sections are the functions of particle 's energy. The theoretical part of simulation is introduced in detail as foundation of the numerical simulation.

Keywords : electron cyclotron resonance discharge , particle-in-cell , Monte Carlo methods , ionization

PACC : 5265 , 5280P , 5250