УДК 533.9

Угловое и энергетическое распределение ионов на поверхности мишени в газовом разряде

С. А. Майоров, Р. И. Голятина, С. К. Коданова, Т. С. Рамазанов

В работе представлены результаты расчетов методом Монте-Карло транспортных характеристик ионов, пересекающих поверхность мишени. Основное внимание уделено угловому и энергетическому распределению ионов и отличию в распределениях средних по объему и средних по потоку на поверхность мишени.

PACS: 51.50.+v, 51.10.+y, 52.80.Dy, 52.25.Fi

Ключевые слова: дрейф ионов, электрическое поле, собственный газ, аргон, угловое распределение ионов, средние значения.

Введение

В литературе имеется множество экспериментальных и расчетных данных о характеристиках дрейфа ионов в газах [1—5], но практически отсутствуют данные об угловом распределении ионов. В то же время именно угловое распределение ионов определяет, например, профиль плазменного травления при изготовлении полупроводниковых структур. Представляет также интерес и энергетическое распределение ионов, пересекающих какую-либо выделенную поверхность. Если это реальная поверхность, например, поверхность подложки или электрода в реакторе плазмохимического травления, диэлектрика в барьерном разряде, то энергетическое распределение бомбардирующих поверхность ионов определяет темп распыления материала электрода, вторичную эмиссию электронов, профиль травления материала подложки и т. д.

Распределение ионов, пересекающих воображаемую поверхность в пространственно-однородной газовой плазме, представляет большой интерес также и по другой причине. При построении теоретических моделей обычно используется разложение функции распределения по косинусу угла, при этом ограничиваются первыми двумя членами разложения (т. н. двухчленное приближение, TTA — two term approximation) [1, 2, 6, 7]. Поскольку двухчленное приближение приводит к достаточно сложным уравнениям гидродинамического типа, имеющим ясную физическую интерпретацию, то неявно полагается, что двучленное приближение соответствует (или даже эквивалентно) кинетическому уравнению Больцмана для функции распределения ионов $f(v)$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathrm{v}\nabla f + \frac{eE}{m}\frac{\partial f}{\partial \mathrm{v}} = I_{st}\left(f\right), \qquad (1)$$

где e — заряд, m — масса ионов, $I_{st}(f)$ — интеграл столкновений.

Чаще всего двухчленное приближение используется для расчета функции распределения электронов, поскольку при дрейфе электронов в газе их функция распределения обычно слабо отличается от сферически симметричной. Но для ионов, дрейфующих в газе в сильном электрическом поле, функция распределения может радикально отличаться от сферически симметричной и, следовательно, не может быть описана линейным разложением по косинусам. Для выяснения этого вопроса также представляет большой интерес расчет функций распределения ионов по косинусам углов.

Целью данной работы было проведение расчетов методом Монте-Карло транспортных характеристик ионов, пересекающих поверхность мишени в интересах, прежде всего, определения углового и энергетического распределения ионов и исследования их особенностей.

Майоров Сергей Алексеевич, ведущий научный сотрудник[1,2].
Голятина Русудан Игоревна, научный сотрудник[2].
[1]Объединенный Институт высоких температур РАН.
Россия, 125412, Москва, ул. Ижорская, 13.
[2]Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН.
Россия, 119991, Москва, ул. Вавилова, 38.
Тел. 8 (499) 135-02-47. E-mail: mayorov_sa@mail.ru
Коданова Сандугаш Кулмагамбетовна, ведущий научный сотрудник[3].
Рамазанов Тлеккабул Сабитович, главный научный сотрудник[3].
[3]Институт экспериментальной и теоретической физики.
Казахстан, 050040, Алматы, пр. ал-Фараби, 71.
Тел. 8 (727) 3-77-02. E-mail: kodanova@mail.ru

Статья поступила в редакцию 14 октября 2015 г.

© Майоров С. А., Голятина Р. И., Коданова С. К., Рамазанов Т. С., 2015

Постановка задачи и методика моделирования

Для моделирования ион-атомных столкновений при движении иона в однородном электрическом поле проводилось интегрирование уравнений движения ионов по схеме Рунге-Кутты второго порядка точности. На каждом шаге по времени разыгрывалось столкновение иона с атомом. Перечислим основные этапы разработанного алгоритма моделирования ион-атомного столкновения [8]:

1) в системе центра масс сталкивающихся частиц в соответствии с вероятностью столкновения случайным образом выбираются скорости и прицельный параметр столкновения;

2) при движении в системе центра масс частиц с поляризационным потенциалом взаимодействия определяются следующие данные: расстояние наибольшего сближения $r_{\min}$, относительная скорость частиц в точке наибольшего сближения $v_{12}(r_{\min})$, угол рассеивания χ;

3) если расстояния наибольшего сближения $r_{\min} > d_{gas}$ (диаметр атома), то скорости иона и атома отклоняются на угол χ; в противном случае, т. е. если $r_{\min} < d_{gas}$, то скорости иона и атома пересчитываются в соответствии с законом столкновения упругих сфер, причем расстояние минимального сближения полагается $r_{\min} = d_{gas}$, а также определяется относительная скорость частиц в точке наибольшего сближения $v_{12}(r_{\min})$;

4) для значения относительной скорости частиц вычисляется сечение резонансной перезарядки $\sigma_{res}(v_{12}(r_{\min}))$ в момент наибольшего сближения $v_{12}(r_{\min})$;

5) если расстояние наибольшего сближения $r_{\min} < r_{ct} = (2\sigma_{res}(v_{12}(r_{\min}))/\pi)^{1/2}$, то с вероятностью ½ скорости иона и атома меняются; т. е. происходит передача заряда;

6) пересчитываются скорости в лабораторной системе, накапливается статистика по различным характеристикам столкновений.

Разработанный алгоритм воспроизводит известное решение кинетического уравнения Больцмана для дрейфа заряженных твердых сфер, подвижность в пределе слабого поля, а также известные теоретические результаты по кинетике столкновения упругих сфер [8].

Результаты расчета функций распределения ионов по скоростям

Для демонстрации моделирования был выбран газ аргон, а для демонстрации основных особенностей дрейфа ионов в собственном газе проведены расчеты функций распределения по скоростям в направлениях вдоль и поперек поля.

На рис. 1 приведены графики функции распределения по скорости ионов аргона вдоль направления электрического поля при различных напряженностях приведенного электрического поля E/N = 1, 10, 100, 1000 Тд при температуре атомов T_a = 300 К. Для сравнения нанесено также распределение Максвелла для атомов при температуре T_a = 300 К:

$$f(u) = \left(\frac{m}{4\pi T_a}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{mu^2}{2T_a}\right). \qquad (2)$$

Скорость ионов (ось абсцисс) нормирована на характерную тепловую скорость атомов $V_T = (T_a/m)^{1/2}$. Нижний график приведен в полулогарифмическом масштабе для демонстрации хвостов особенности поведения функций распределения, которые во многих случаях имеют первостепенную важность.

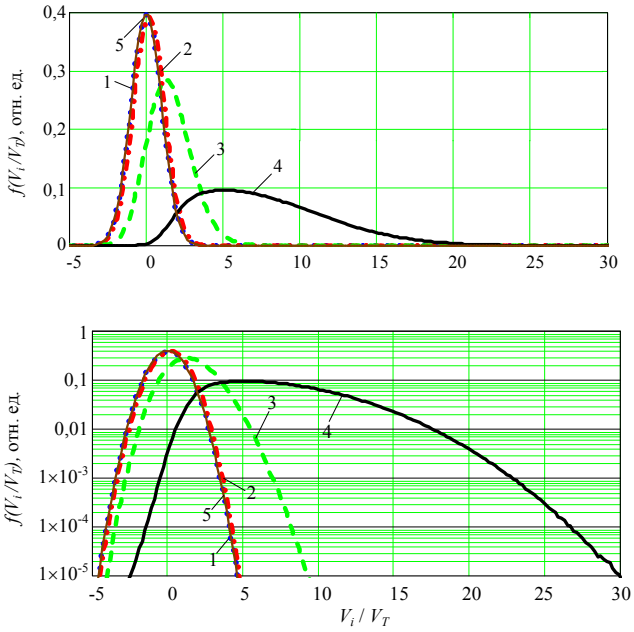

Рис. 1. Результаты расчета функции распределения ионов $f(V_i/V_T)$ по относительной скорости V_i/V_T вдоль направления поля в аргоне при температуре атомов 300 К и различных значениях приведенной напряженности электрического поля E/N: Расчетная кривая 1 — IDF, Monte Carlo, E/N = 1 Тд; 2 — IDF, Monte Carlo, E/N = 10 Тд; 3 — IDF, Monte Carlo, E/N = 100 Тд; 4 — IDF, Monte Carlo, E/N = 1000 Тд; 5 — IDF, Maxwell, T atom 300 K. Верхний график — линейная шкала по вертикали, нижний график — логарифмическая шкала по вертикали

На рис. 2 приведены графики функции распределения ионов по проекции скорости на ось, ортогональную направлению электрического поля.

Очень часто полагается, что оно равно распределению Максвелла с температурой атомов (приближение Ванье [9]). Основанием для этого является преобладание столкновений с резонансной передачей заряда. Но как показывают расчеты, это приближение является весьма грубым, поскольку при близких столкновениях передача заряда происходит с вероятностью ½, а столкновения по модели жестких сфер приводят к значительному увеличению поперечных компонент скорости.

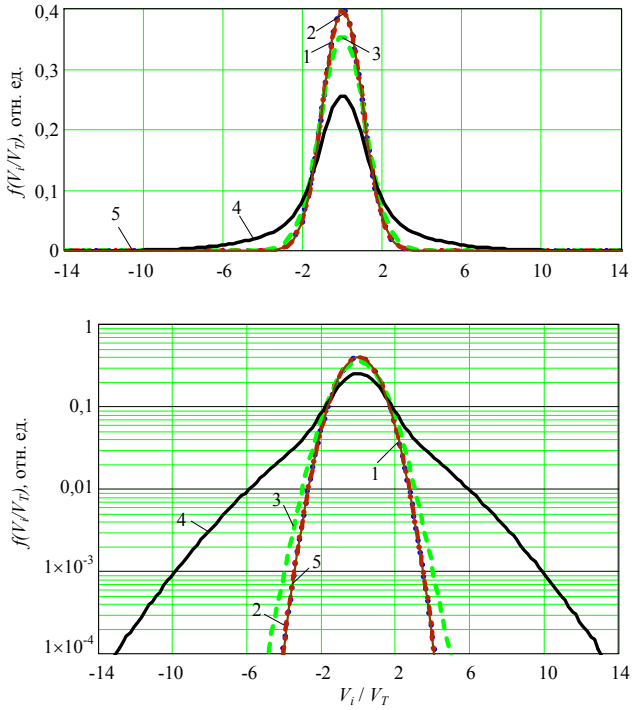

Рис. 2. Результаты расчета функции распределения ионов по скоростям в направлении поперек электрического поля. Расчетная кривая 1 — IDF, Monte Carlo, E/N = 1 Тд; 2 — IDF, Monte Carlo, E/N = 10 Тд; 3 — IDF, Monte Carlo, E/N = = 100 Тд; 4 — IDF, Monte Carlo, E/N = 1000 Тд; 5 — IDF, Maxwell, T atom 300 K

Газокинетические столкновения, которые описываются как столкновения жестких сфер, приводят к рассеянию на большие углы и в случае передачи заряда. Именно эти столкновения и определяют хвосты функций распределения скорости, что в полной мере демонстрируют приведенные графики распределения компоненты скорости, ортогональной направлению поля. Отметим, что именно эти компоненты скорости определяют коэффициент поперечной диффузии и энергетический коэффициент Таунсендта, которые измеряются экспериментально.

Результаты расчета углового распределения ионов

Во многих приложениях, в частности, в барьерном разряде, большой интерес представляет вопрос об угловом распределении ионов по отношению к направлению электрического поля и сравнение этого распределения с усредненным по объему (частицам).

Для выяснения вопроса о границах применимости двухчленного приближения представляет интерес расчет функций распределения ионов по косинусам углов между направлением скорости иона и направлением электрического поля. В сферически симметричном случае, т. е. при изотропном распределении скорости ионов, функция распределения ионов является константой. В двухчленном приближении функция распределения разлагается по полиномам Сонина, и удерживается лишь линейный член разложения, т. е. полагается, что зависимость функции распределения от угла линейна по косинусу этого угла [6].

На рис. 3 представлены результаты расчета функции распределения ионов по косинусу угла φ между направлением полета иона и направлением электрического поля. Как показывают результаты для ионов аргона при T_a = 300 К, начиная с приведенных электрических полей ~100 Тд, предположение о линейности в разложении по косинусу нарушается.

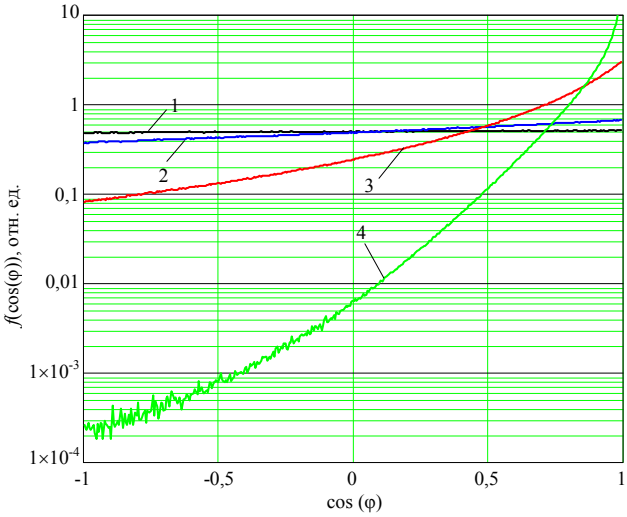

Рис. 3. Результаты расчета функции распределения ионов по косинусу угла φ между направлением полета иона и направлением электрического поля. Кривая 1 — E/N = 1 Тд; 2 — E/N = 10 Тд; 3 — E/N = 100 Тд; 4 — E/N = 1000 Тд

Для сравнения, на рис. 4 представлены распределения по углу φ между направлением полета иона и направлением электрического поля. Из этих графиков видно, что область применимости двухчленного приближения ограничена примерно несколькими десятками Тд. Данный вопрос имеет первостепенное значение для теоретического обоснования различных кинетических моделей переноса заряженных частиц в газах и поэтому рассмотрим его подробнее.

Из всех кинетических характеристик лишь скорость дрейфа является непосредственно измеряемой величиной. Остальные получаются на основе использования различных соотношений и моделей. Например, для определения коэффициентов продольной и поперечной диффузии используется соотношение Нернста-Таунсендта-Эйнштейна, модифицированное соотношение Эйнштейна или теория Шотки, описывающая амбиполярную диффузию в трубке. Из теории Ванье обычно получают энергетические характеристики ионного потока, а из первого приближения Чепмена-Энскога — эффективную частоту столкновений и транспортное сечение [6].

Многочисленные экспериментальные данные показывают, что скорость дрейфа ионов в собственном газе очень хорошо описывается полуэмпирической формулой Фроста [10—12]:

$$u = a\left(1 + b\frac{E}{N}\right)^{-1/2}\frac{E}{N}. \qquad (3)$$

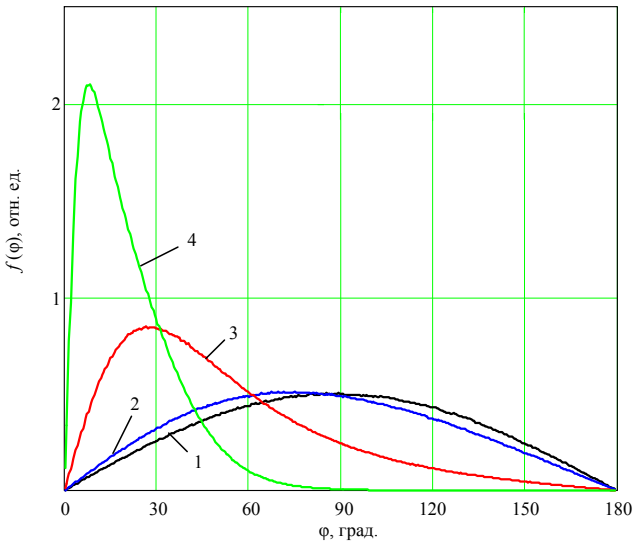

Рис. 4. Результаты расчета функции распределения углов между направлением полета иона и направлением электрического поля для различных значений E/N. Кривая 1 — E/N = 1 Тд; 2 — E/N = 10 Тд; 3 — E/N = 100 Тд; 4 — E/N = = 1000 Тд

Эта зависимость скорости дрейфа от приведенной напряженности электрического поля E/N имеет два параметра: a — подвижность в пределе слабого поля и $b = 1/(E/N)_{heating}$. Величина $(E/N)_{heating}$ — это значение приведенной напряженности электрического поля, в котором из-за разогрева ионов подвижность по формуле Фроста уменьшается в корень из двух раз. Очевидно, что имеется прямая связь с нарушением границы области применимости двучленного приближения и уменьшением подвижности ионов из-за разогрева.

В работе [10] получена следующая аппроксимация зависимости подвижности в слабом поле от температуры газа:

$$a = K_{pol}(N_0/N)\left(1 + T_{atom}/\varepsilon_0\right)^{-1/2} \qquad (4)$$

где K_{pol} — поляризационная подвижность в единицах см^2/(В·с) при стандартной плотности газа N_0 = 2,686763×10^{19} атомов в см^3 (число Лошмидта). Поляризационная подвижность определяется через поляризуемость атома следующим образом:

$$K_{pol} = 13{,}853\left(\alpha_d \mu\right)^{-1/2}, \qquad (5)$$

где α_d — поляризуемость в кубических ангстремах, μ — приведенная масса в г на моль. Функциональная зависимость (4) подобрана по аналогии с формулой Фроста (3) в предположении об одинаковом характере влияния напряженности поля и температуры газа на подвижность. Естественно, что при нулевой температуре газа подвижность ионов должна быть равна поляризационной подвижности K_{pol}.

В работе [10] получена следующая аппроксимация зависимости величины характерного греющего поля:

$$(E/N)_{heating} = 1/b = (E/N)_0\left(1 + 1{,}5T_{atom}/\varepsilon_0\right). \qquad (6)$$

Здесь $(E/N)_0$ — величина разогревающего поля при нулевой температуре газа. В таблице приведены значения аппроксимационных параметров для различных газов.

Таблица

Параметры для аппроксимаций (4) и (6)

System	K_{pol}, см^2/сВ	ε_0, K	$(E/N)_0$, *Td*
He^+ in He	21,6	111	16,1
Ne^+ in Ne	6,8	237	34,1
Ar^+ in Ar	2,42	271	73,3
Kr^+ in Kr	1,36	371	106,2
Xe^+ in Xe	0,85	307	122,5
Hg^+ in Hg	0,61	76	64,6

Физический смысл параметра ε_0 в аппроксимационных формулах (4) и (6) заключается в том, что он определяет верхнюю границу применимости приближения постоянной частоты столкновений. В случае $T_{atom} \ll \varepsilon_0$ поляризационное взаимодействие иона с атомами является определяющим. Введем параметр

$$<\varepsilon>_{pol} = \frac{1}{2}m\left[K_{pol}(E/N)_{heatimg}(N_0/N)\right]^2, \qquad (7)$$

который равен средней энергии направленного движения иона в поле с приведенной напряженностью $(E/N)_{heating}$. Аппроксимация подвижности ионов в слабом поле по формуле (7) находилась подгонкой под расчетные данные, причем хорошее согласие имеется при выборе

$$\varepsilon_0 = 0,6 < \varepsilon >_{pol}. \quad (8)$$

Все эти аппроксимационные параметры, а именно, K_{pol} и ε_0 представлены в приведенной таблице.

Значение греющего поля для аргона $(E/N)_{heating}$ = 73 Тд хорошо коррелирует с наблюдаемым нарушением применимости двучленного приближения при возрастании приведенной напряженности электрического поля от 10 до 100 Тд.

Отметим, что двучленное приближение чаще всего используется для расчета функции распределения электронов. При дрейфе электронов в газе функция распределения обычно слабо отличается от сферически симметричной и такой подход оправдан. Но для ионов, дрейфующих в газе в сильном электрическом поле, функция распределения радикально отличается от сферически симметричной и не описывается линейным распределением по косинусам.

Результаты расчета углового распределения ионов, пересекающих поверхность

Как уже отмечалось во введении, угловое и энергетическое распределение ионов, бомбардирующих поверхность диэлектрика в барьерном разряде, электрода или кремниевой подложки в реакторе плазмохимического травления являются определяющими факторами для многих технологических характеристик: скорости травления, распыления электродов, профиля вытравливаемой канавки в щелевой изоляции КМОП-транзисторов и т. д.

Приведем некоторые результаты расчетов, позволяющих на качественном уровне продемонстрировать влияние средней напряженности электрического поля на характеристики потока бомбардирующих поверхность ионов.

При помещении в плазму зонда обычно полагается, что возмущение плазмы незначительно и, естественно, применяются модели, соответствующие невозмущенной плазме. Но в случае электрода вблизи него, однако, образуется заряженный слой, в котором напряженность поля может сильно меняться. В этом случае для расчета потока ионов на поверхность необходимо учитывать характер изменения электрического поля. Для простоты рассмотрения на первом этапе положим, что поле постоянно.

На рис. 5 представлены результаты расчета функции углов между направлением полета иона и направлением электрического поля в линейном и полулогарифмическом масштабах. Из рисунка видно, что и для углового распределения при (E/N) = 300 Тд двухчленное приближение также сильно нарушается.

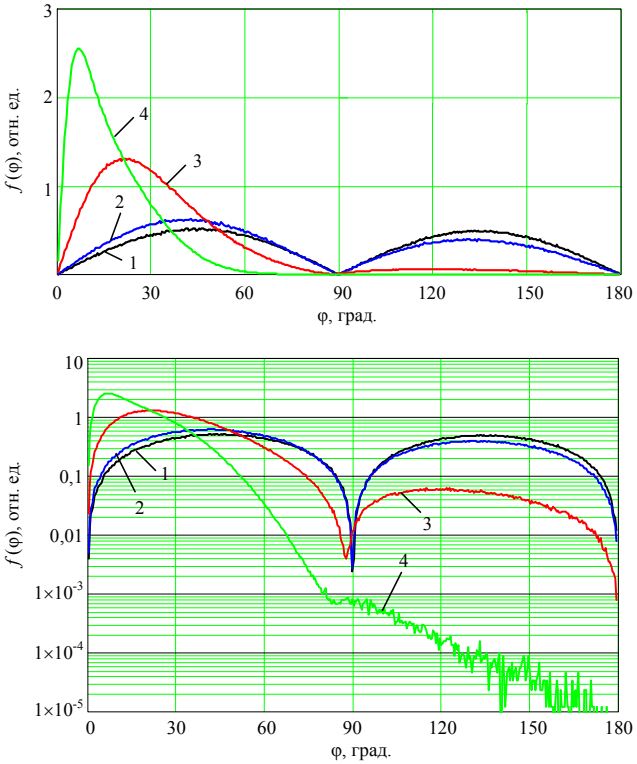

Рис. 5. Результаты расчета функции распределения углов φ между направлением полета иона и направлением электрического поля. Кривая 1 — E/N = 1 Тд; 2 — E/N = 10 Тд; 3 — E/N = 100 Тд; 4 — E/N = 1000 Тд

На Рис. 6 представлены результаты расчета функции распределения косинусов углов между направлением полета иона и направлением электрического поля в полулогарифмическом масштабе.

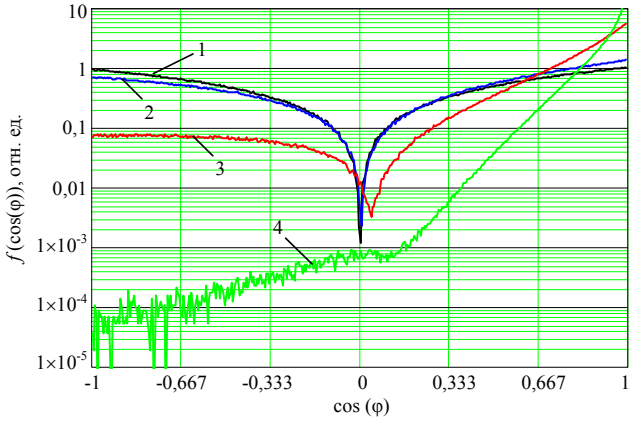

Рис. 6. Результаты расчета функции распределения ионов по косинусу угла между направлением полета иона и направлением электрического поля. Расчетная кривая 1 — E/N = 1 Тд; 2 — E/N = 10 Тд; 3 — E/N = 100 Тд; 4 — E/N = 1000 Тд

Рис. 6. демонстрирует появление хвоста функции распределение при $\cos\varphi < 0$, обусловленного рассеянием назад при столкновениях с резонансной перезарядкой.

Заключение

Приведенные результаты расчетов угловых характеристик ионного потока при дрейфе в газе могут использоваться для оценок остальных характеристик газоразрядной плазмы, при рассмотрении магнетронного разряда, барьерного, зондовых характеристик и т. п.

Численное моделирование выполнено в ОИВТ РАН при поддержке гранта Российского научного фонда (проект номер 14-50-00124), разработка программ расчета сделана в Казахском Национальном Университете при поддержке гранта Министерства образования и науки Республики Казахстан (грант 1611/ГФ3).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Мак-Даниэль И.* Процессы столкновений в ионизованных газах. — М.: Мир, 1967.
2. *Мак-Даниэль И., Масон Э.* Подвижность и диффузия ионов в газах. — М.: Мир, 1976.
3. *Ellis H. W., Pai R. Y., McDaniel E. W., et al.* // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1976. V. 17. No. 3.
4. *McDaniel E. W., Viehland L. A.* // Physics Reports. 1984. V. 110. No. 5–6. P. 333.
5. *Mason E. A. and Viehland L. A.* // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1995. V. 60. No. 1.
6. *Смирнов Б. М.* Физика слабоионизованного газа в задачах с решениями. — М.: Наука, 1988.
7. *Viehland L. A. and Mason E. A.* // Ann. Phys. (N.Y.). 1975. V. 91. P. 499.
8. *Майоров С. А.* // Физика плазмы. 2009. Т. 35. № 9. С. 869.
9. *Wannier G. H.* // Phys. Rev. 1951. V. 83. P. 281.
10. *Голятина Р. И., Майоров С. А.* // Краткие сообщения по физике. 2015. № 10. С. 21.
11. *Dote T. and Shimada M.* // J. Physical Society of Japan. 1992. V. 61. No. 11. P. 4009.
12. *Khrapak S. A.* // J. Plasma Physics. 2013. V. 79. Part 6. P.1123.

Angular and energy distributions of ions on the target surface in a gas discharge

S. A. Maiorov[1,2], R. I. Golyatina[2], S. K. Kodanova[3], and T. S. Ramazanov[3]

[1]Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy of Sciences
13 Izhorskaya str., Moscow, 125412, Russia
E-mail: mayorov_sa@mail.ru

[2]Prokhorov General Physics Institute, Russian Academy of Sciences
38 Vavilov str., Moscow, 119991, Russia

[3]Institute of Experimental and Theoretical Physics
71 al-Farabi av., Almaty, 050040, Kazakhstan
E-mail: kodanova@mail.ru

Received September 14, 2015

The paper presents the results of the Monte Carlo calculations of transport properties for ions crossing the target surface. The emphasis is placed on the angular and energy distributions of the ions and the difference in the distribution of the average volume and the average flow to the surface.

PACS: 51.50.+v, 51.10.+y, 52.80.Dy, 52.25.Fi

Keywords: electric field, argon, electron drift, ion drift, mean values.

REFERENCES

1. E. W. McDaniel, *Collision Processes in Ionizes Gases* (Mir, Moscow, 1967) [in Russian].

2. E. W. McDaniel and E. A. Mason, *Mobility and Diffusion of Ions in Gases* (Mir, Moscow, 1976) [in Russian].

3. H. W. Ellis, R. Y. Pai, E. W. McDaniel, et al., Atomic Data and Nuclear Data Tables. **17** (3), (1976).

4. E. W. McDaniel and L. A. Viehland, Physics Reports **110,** 333 (1984).

5. E. A. Mason and L. A. Viehland, Atomic Data and Nuclear Data Tables **60** (1), (1995).

6. B. M. Smirnov, *Physics of Weakly Ionized Gas* (Nauka, Moscow, 1988) [in Russian].

7. L. A. Viehland and E. A. Mason, Ann. Phys. (N.Y.) 91, 499 (1975).

8. S. A. Maiorov, Plasma Physics Reports **35,** 869 (2009).

9. G. H. Wannier, Phys. Rev. **83,** 281 (1951).

10. R. I. Golyatina and S. A. Maiorov, Bull. Lebedev Phys. Inst., No. 10, 294 (2015).

11. T. Dote and M. Shimada, J. Physical Society of Japan **61**, 4009 (1992).

12. S. A. Khrapak, J. Plasma Physics **79,** Part 6, 1123 (2013).