

Коданова С.К.,
Бастыкова Н.Х.,
Кенжебекова А.К.,
Майоров С.А.

**Исследование распределения
потока ионов в барьерном
разряде методом Монте-Карло**

В данной работе исследованы угловое и энергетическое распределение ионов на поверхности мишени в барьерном разряде. 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.

Ключевые слова: дрейф ионов, электрическое поле, аргон, угловое распределение ионов.

Kodanova S.K.,
Bastykova N.Kh.,
Kenzhebekova A.K.,
Maierov S.A.

**Investigation of ion's flow
distribution in barrier discharge by
the Monte-Carlo method**

In this work angular and energy distributions of ions on the target surface in barrier discharge are investigated. The results of calculations by the Monte-Carlo transport properties of ions crossing the surface of the target are presented. 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.

Key words: Ion drift, electric field, argon, angular distributions of ions.

Коданова С.К.,
Бастыкова Н.Х.,
Кенжебекова А.К.,
Майоров С.А.

**Монте-Карло әдісімен
барьерлік разрядта иондар
ағынының таралуларын зерттеу**

Бұл жұмыста барьерлік разрядта нысана бетіндегі иондардың бұрыштық және энергиялық таралуы зерттелді. Монте-Карло әдісімен есептелінген нысана бетін қиып өтетін иондардың транспорттық сипаттамалары көрсетілген. Негізгі бағыт иондардың бұрыштық және энергиялық таралуларына, және де бетке түсетін орташа ағын мен орташа көлем бойынша таралуларының айырмашылығына арналды.

Түйін сөздер: иондардың дрейфі, электрлік өріс, аргон, иондардың бұрыштық таралуы.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОТОКА ИОНОВ В БАРЬЕРНОМ РАЗРЯДЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

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 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 бомбардирующей поверхности 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, ТТА – 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 двухчленное приближение соответствует (или даже эквивалентно) кинетическому уравнению Больцмана для функции распределения ионов $f(v)$:

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

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 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 не может быть описана линейным разложением по косинусам. Для выяснения этого вопроса также представляет большой интерес расчет функций распределения ионов по косинусам углов.

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: 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, расстояние минимального сближения полагается $r_{min} > d_{gas}$, 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 $1/2$ 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 рисунке 1 приведены графики функции распределения по скорости ионов аргона вдоль направления электрического поля при различных напряженностях электрического поля $E/N = 1, 10, 100, 1000 Td$ при температуре атомов $T_a = 300 K$. Для сравнения нанесено также распределение Максвелла для атомов при температуре $T_a = 300 K$:

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

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.

На рисунке 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 $1/2$, а столкновения по модели жестких сфер приводят к значительному увеличению поперечных компонент скорости.

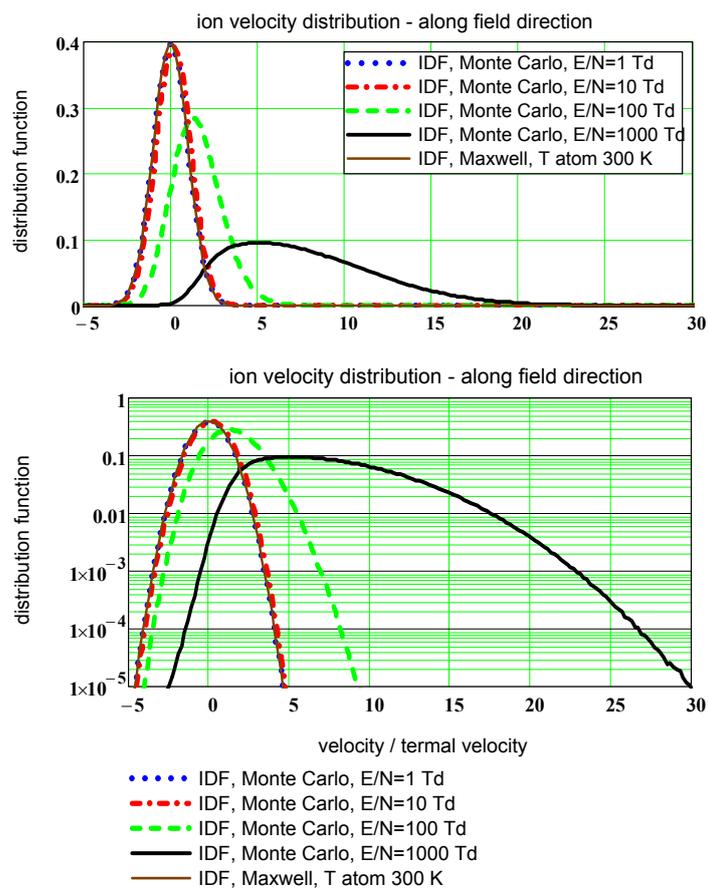


Рисунок 1 – Результаты расчета функции распределения ионов по скорости вдоль направления поля в аргоне при температуре атомов 300 К и различных значениях приведенной напряженности электрического поля $E/N = 1, 10, 100, 1000$ Td

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 Таунсенда, 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].

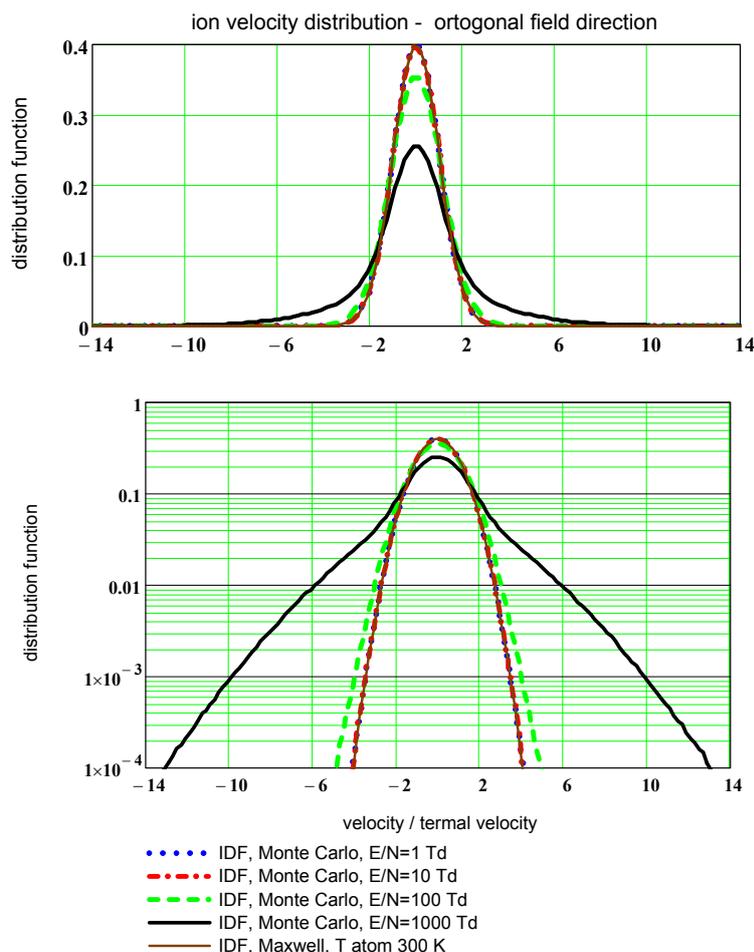


Рисунок 2 – Результаты расчета функции распределения ионов по скоростям в направлении вдоль и поперек электрического поля

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

Для сравнения, на рисунке 4 представлены распределения по углу 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 кинети-

ческих моделей переноса заряженных частиц в газах, поэтому рассмотрим его подробнее.

Из всех кинетических характеристик лишь скорость дрейфа является прямо 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, из первого приближения Чепмена-Энскога – эффективную частоту столкновений и транспортное сечение [6].

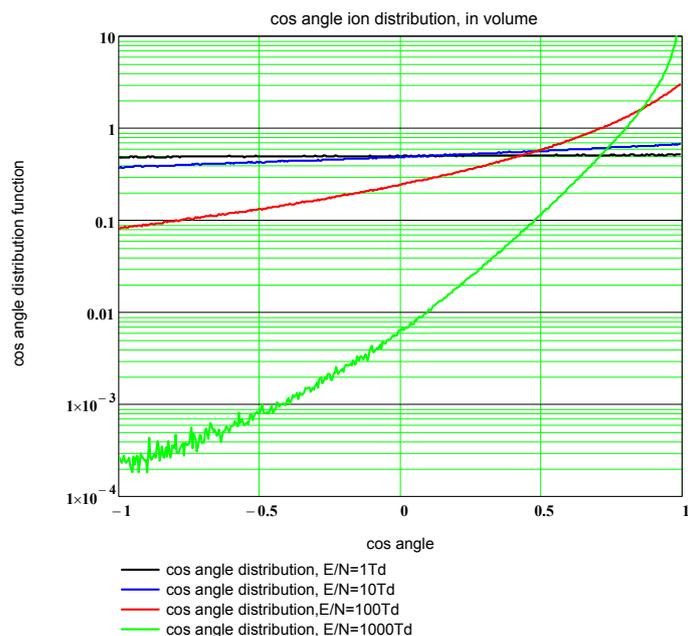


Рисунок 3 – Результаты расчета функции распределения ионов по косинусу угла между направлением полета иона и направлением электрического поля

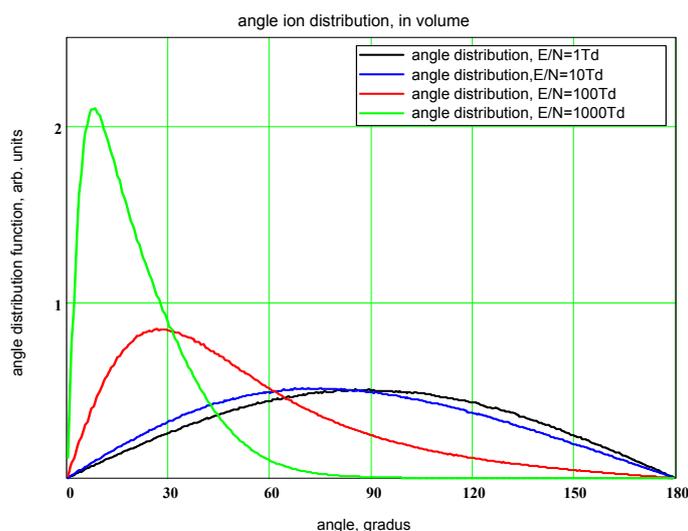


Рисунок 4 – Результаты расчета функции распределения углов между направлением полета иона и направлением электрического поля для различных значений $E/N = 1, 10, 100, 1000 Td$

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

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

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. Оче-

видно, 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:

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

где K_{pol} – поляризационная подвижность в единицах $\text{см}^2/(\text{В с})$ при стандартной плотности газа $N_0 = 2.686763 \times 10^{19}$ атомов в см^3 (число Ломшмидта). Поляризационная подвижность определяется через поляризуемость атома следующим образом:

$$K_{pol} = 13.853(\alpha_d \mu)^{-1/2}, \quad (5)$$

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:

$$(E / N)_{heating} = 1 / b = (E / N)_0 (1 + 1.5 T_{atom} / \varepsilon_0). \quad (6)$$

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

Таблица – Параметры для аппроксимаций (4) и (6)

System	$K_{pol}, \text{см}^2/\text{Вс}$	$\varepsilon_0, \text{К}$	$(E/N)_0, \text{Тд}$
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

$$\langle \varepsilon \rangle_{pol} = \frac{1}{2} m [K_{pol} (E / N)_{heating} (N_0 / N)]^2, \quad (7)$$

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, хорошее согласие имеется при выборе

$$\varepsilon_0 = 0.6 \langle \varepsilon \rangle_{pol}. \quad (8)$$

Все эти аппроксимационные параметры: K_{pol} и параметра ε_0 представлены в 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, дрей-

фующих 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 является определяющим фактором 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 бомбардирующей поверхность ионов.

При помещении в плазму зонда полагается, что возмущение плазмы незначительно и применяются модели, соответствующие невозмущенной плазме. Но в случае электрода вблизи него 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 рисунке 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.

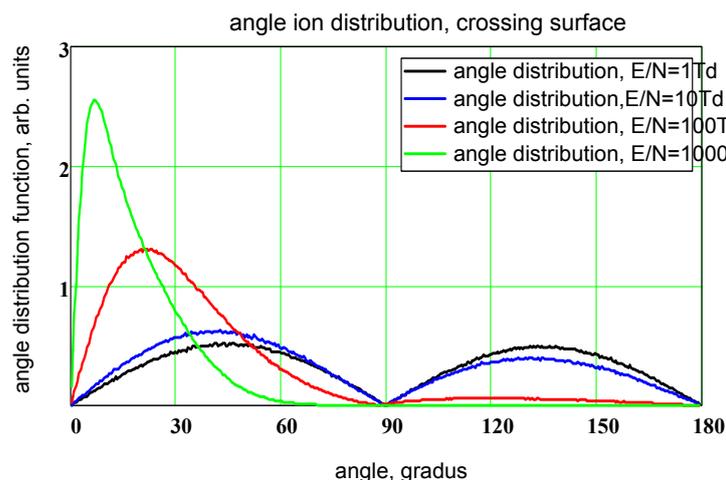


Рисунок 5 – Результаты расчета функции распределения углов между направлением полета иона и направлением электрического поля

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

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

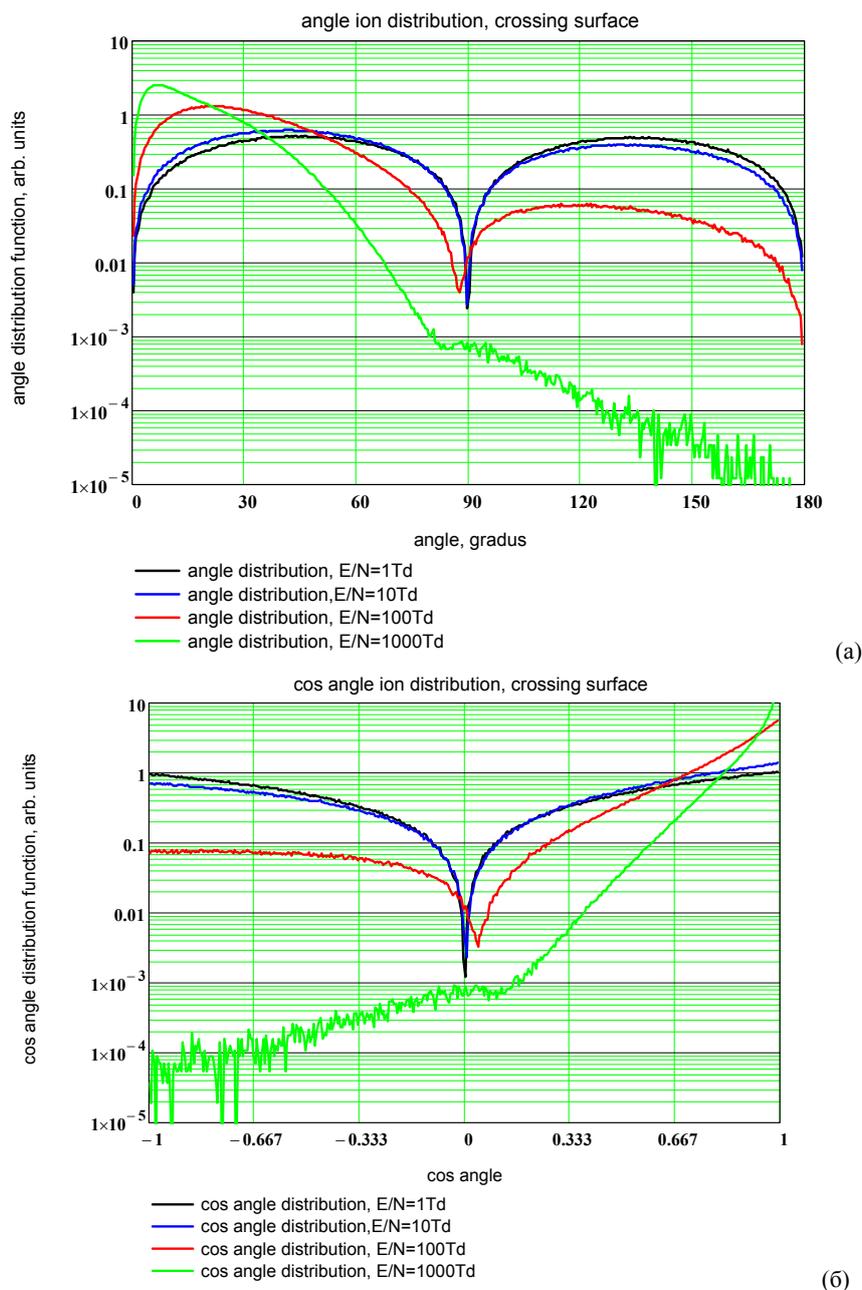


Рисунок 6 – Результаты расчета функции распределения ионов по косинусу угла между направлением полета иона (а) и направлением электрического поля (б)

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.д.

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/ГФЗ).

Литература

- 1 Мак-Даниэль И. Процессы столкновений в ионизованных газах. – М.: Мир, 1967.
- 2 Мак-Даниэль И., Мэсон Э. Подвижность и диффузия ионов в газах. – М.: Мир, 1976.
- 3 Ellis H.W., Pai R.Y., McDaniel E.W., Mason E.A., and Viehland L.A. // Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 1976. – Vol. 17. – P.3.
- 4 McDaniel E.W., Viehland L.A. // Physics Reports – 1984. – Vol. 110. – P.333.
- 5 Mason E.A., and Viehland L.A. // Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 1995. – Vol. 60. – P.425.
- 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. – Vol. 91. – P.499.
- 8 Майоров С.А. // Физика плазмы – 2009. – №9. – С.869.
- 9 Wannier G.H. // Phys. Rev. – 1951. – Vol. 83. – P.281.
- 10 Голятина Р.И., Майоров С.А. // Краткие сообщения по физике ФИАН – 2015. – № 10. – P.3.
- 11 Dote T. and Shimada M. // J. Physical Society of Japan. – 1992. – № 11. – P.4009.
- 12 Khrapak S.A. // J. Plasma Physics. – 2013. – № 79. – P.1123.

References

- 1 Mak-Dnijel' I. Processy stolknovenij v ionizovannyh gazah. – М.: Mir, 1967.
- 2 Mak-Danijel' I., Mason Je. Podvizhnost' i diffuzija ionov v gazah. – М.: Mir, 1976.
- 3 Ellis H.W., Pai R.Y., McDaniel E.W., Mason E.A., and Viehland L.A. // Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 1976. – Vol. 17. – P.3.
- 4 McDaniel E.W., Viehland L.A. // Physics Reports – 1984. – Vol. 110. – P.333.
- 5 Mason E.A., and Viehland L.A. // Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 1995. – Vol. 60. – P.425.
- 6 Smirnov B.M. Fizika slaboionizovannogo gaza v zadachah s reshenijami. М.: Nauka, 1988.
- 7 Viehland L.A. and Mason E.A. // Ann. Phys. (N.Y.) – 1975. – Vol. 91. – P.499.
- 8 Majorov S.A. // Fizika plazmy – 2009. – №9. – S.869.
- 9 Wannier G.H. // Phys. Rev. – 1951. – Vol. 83. – P.281.
- 10 Goljatina R.I., Majorov S.A. // Kratkie soobshhenija po fizike FIAN – 2015. – № 10. – P.3.
- 11 Dote T. and Shimada M. // J. Physical Society of Japan. – 1992. – № 11. – P.4009.
- 12 Khrapak S.A. // J. Plasma Physics. – 2013. – № 79. – P.1123.