

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

Fakulta strojního inženýrství

Ústav fyzikálního inženýrství

**Jakub Zlámal**

**SIMULACE ELEKTROSTATICKÝCH  
IONTOVĚ OPTICKÝCH SYSTÉMŮ**

**SIMULATION OF ELECTROSTATIC ION OPTIC SYSTEMS**

Zkrácená verze Ph.D. Thesis

Obor: Fyzikální a materiálové inženýrství

Školitel: Doc. RNDr. Bohumila Lencová, CSc.  
Oponenti: Ing. Jaroslav Boušek, CSc.  
Prof. Ing. Jaroslav Král, CSc.  
Doc. RNDr. Stanislav Novák, CSc.

Datum obhajoby: 24. 6. 2004

## **KLÍČOVÁ SLOVA**

iontový zdroj, plazma, simulace, Particle in Cell, Monte Carlo

## **KEYWORDS**

ion source, plasma, simulation, Particle in Cell, Monte Carlo

Dizertační práce je uložena na oddělení vědy a výzkumu FSI VUT v Brně, Technická 2,  
616 69 Brno

© Jakub Zlámal 2004

ISBN 80-214-2792-2

ISSN 1213-4198

# OBSAH

1	ÚVOD	5
1.1	Cíl dizertační práce	5
2	PŘEHLED ŘEŠENÉ PROBLEMATIKY	6
2.1	Optika intenzivních svazků	6
2.2	Popis extrakce iontů z plazmatu	6
2.2.1	<i>Program EOD</i>	8
3	IONTOVÝ ZDROJ PRO PŘÍMOU DEPOZICI TENKÝCH VRSTEV — MĚŘENÍ PARAMETRŮ	9
3.1	Úvod	9
3.2	Popis zdroje	9
3.2.1	<i>Konstrukce zdroje</i>	9
3.2.2	<i>Problémy při provozu zdroje a jejich odstraňování</i>	10
3.3	Měření parametrů iontového zdroje	11
3.3.1	<i>Popis experimentu</i>	11
3.3.2	<i>Vliv výbojového proudu na profil proudové hustoty</i>	13
3.3.3	<i>Vliv tlaku v aparatuře na profil proudové hustoty</i>	13
3.4	Diskuze výsledků měření	14
4	POČÍTAČOVÁ SIMULACE EXTRAKCE IONTŮ Z PLAZMATU	14
4.1	Simulace dějů v plazmatu — programy PDP1D a PDC2D	16
4.2	Simulace extrakce iontového svazku	16
4.2.1	<i>Počáteční podmínky simulace plazmatu</i>	16
4.2.2	<i>2D simulace plazmatu — program PDC2D</i>	17
4.2.3	<i>Vliv teploty na plazma</i>	20
4.3	Šíření iontového svazku — program EOD	21
4.3.1	<i>Okrajové podmínky elektrostatického pole</i>	21
4.3.2	<i>Počáteční podmínky iontového svazku</i>	21
4.3.3	<i>Další podmínky výpočtu</i>	22
4.3.4	<i>Výsledky výpočtu</i>	23
4.3.5	<i>Diskuze výsledků simulace a experimentu</i>	23
5	ZÁVĚR	26
6	CURICULUM VITAE	29
7	SUMMARY	30



# 1 ÚVOD

Přímá depozice tenkých vrstev iontovými svazky patří k „nejčistším“ metodám jejich přípravy [16]. Při praktickém použití této metody však narážíme na technické problémy. Aby byla zachována co nejvyšší čistota vrstvy, je důležité dosáhnout co nejrychlejšího růstu vrstvy. K tomu je třeba velká proudová hustota svazku (tedy co největší počet iontů dopadajících na substrát za jednu sekundu). Tento požadavek s sebou přináší problémy při transportu svazku iontů od zdroje k substrátu, protože vlivem vzájemného odpuzování iontů (efektu prostorového náboje) dochází k rozšiřování svazku.

Ve svém doktorském studiu se zaměřuji právě na zkoumání a výpočet intenzivních iontových svazků. Motivací pro studium vlivu interakcí částic byla stavba aparatury pro přímou depozici tenkých vrstev při velmi nízké energii iontového svazku (10–100 eV) [16].

## 1.1 CÍL DIZERTAČNÍ PRÁCE

Pro nově budovanou aparaturu pro přímou depozici tenkých vrstev byl navržen nový plazmatický iontový zdroj. Při provozu zdroje byly zjištěny tyto hlavní problémy: malá životnost zdroje a nízká hodnota proudu svazku. Abychom mohli odstranit zmíněné nedostatky a předvídat chování zdroje, rozhodli jsme se provést počítačovou simulaci iontového zdroje i následného šíření svazku. Výsledky měření parametrů skutečného iontového svazku slouží k ověření korektnosti počítačového modelování a k následnému zlepšování algoritmů.

Počítačový model je rozdělen na dvě části. První část tvoří simulace chování plazmatu ve výbojové komoře iontového zdroje. Výsledkem výpočtu je znalost parametrů iontového svazku, který opouští zdroj, a plazmatu, ve kterém svazek vzniká. Šíření svazku je počítáno v druhé části.

Cílem dizertační práce bylo vytvořit programové vybavení pro návrh plazmatických iontových zdrojů a transportní optiky intenzivních iontových svazků spolu s experimentálním ověřením jeho vlastností. Pro modelování plazmatu v iontovém zdroji jsem vytvořil na základě programů volně dostupných na internetu [17] programy PDP1D a PDC2D. Tyto programy založené na metodě „Particle in Cell–Monte Carlo“ poskytují všechny prostředky pro získání parametrů iontového svazku vznikajícího v plazmatu. Programové vybavení pro výpočty transportní optiky vyvíjím pomocí programu EOD [12] (viz část 2.2.1).

V části 2 je uveden přehled problematiky spojené s intenzivními svazky nabitých částic. Krátce je nastíněn historický vývoj částicové optiky a projevů interakcí částic ve svazcích. Je zde také uveden popis extrakce iontů z plazmatu. V závěru této části jsou popsány vlastnosti programu EOD.

Část 3 je věnována plazmatickému iontovému zdroji aparatury pro přímou depozici tenkých vrstev. Je zde uvedena jak konstrukce a popis činnosti zdroje, tak i problémy spojené s jeho provozem. Závěr je věnován experimentům zaměřeným na získání pa-

parametrů iontového svazku při různých podmínkách provozu zdroje, které byly použity při vývoji simulačních programů a ověřování jejich možností.

Popis úplného výpočtu vzniku plazmatu v iontovém zdroji, extrakce a šíření intenzivního iontového svazku je uveden v části 4. Část 4.2, zabývající se vznikem iontového svazku, obsahuje simulace plazmatu ve výbojové komoře zdroje a v malé oblasti v blízkosti extrakčního otvoru. Získané základní parametry plazmatu potom slouží jako vstupní údaje pro simulaci vlastního iontového svazku programem EOD (část 4.3).

Výsledky výpočtů šíření iontového svazku získané výpočtem a jejich porovnání s experimentem obsahuje část 4.3.

## **2 PŘEHLED ŘEŠENÉ PROBLEMATIKY**

### **2.1 OPTIKA INTENZIVNÍCH SVAZKŮ**

Historie částicové optiky začíná ve 20. letech 20. století, kdy Busch [1] popsal účinky rotačně souměrného elektrostatického a magnetického pole na svazek elektronů jako působení čočky. Částicová optika se nejčastěji zabývala výpočtem trajektorií částic ve vnějším elektrickém a magnetickém poli bez započtení interakcí mezi částicemi. Toto přiblížení je možné pouze u svazků s malou proudovou hustotou částic, kde jsou vzdálenosti mezi částicemi velké a vzájemná potenciální energie (působící síla) je velmi malá, nebo u svazků částic s velkou rychlostí, u kterých se interakce nestačí projevit. Za předpokladu zobrazení v paraxiálním prostoru lze pro zobrazení různými typy prvků odvodit vztahy podobné geometrické optice.

Analogie mezi fotony (geometrická optika) a nabitými částicemi selhává u intenzivních elektronových a iontových svazků používaných například v litograftech. Rozlišení těchto systémů je určeno nejen difrakcí, sférickou a chromatickou vadou čoček, ale také coulombovskými interakcemi mezi částicemi svazku [6, 13, 3].

Vliv coulombovských interakcí byl objeven v 60. letech minulého století. Efekty způsobené interakcemi mezi částicemi lze rozdělit na statistické (nekorigovatelné), Boerschův a Loefflerův jev a efekt prostorového náboje (korigovatelný). Pro svazky iontů používané pro depozici vrstev jsou Boerschův a Loefflerův jev zanedbatelné, hlavní význam má efekt prostorového náboje.

### **2.2 POPIS EXTRAKCE IONTŮ Z PLAZMATU**

Popis extrakce iontů z plazmatu je složitější než popis formování svazku elektronů z katody, případně získávání iontů při kontaktní ionizaci z pevného povrchu. V těchto případech je totiž i výsledný proud svazku limitován pouze prostorovým nábojem a lze jej poměrně snadno určit simulacemi, případně přibližným výpočtem pomocí Childova-Langmuirova zákona (rovnice (3.1)), který určuje maximální proudovou hustotu, kterou můžeme získat při daném potenciálovém rozdílu elektrod a jejich vzdálenosti. Extrakce iontů z plazmatu je poněkud složitější, protože proud svazku

může být limitován emisními možnostmi plazmatu, které závisejí na mnoha parametrech. Ionty jsou navíc vytvářeny uvnitř objemu plazmatu a ne na povrchu, jako je tomu u zdrojů elektronů. Při studiu extrakce iontů z plazmatu tedy musíme brát v úvahu plazma v přítomnosti vnějšího elektrostatického pole. Protože elektrostatické pole proniká do plazmatu jen do malé vzdálenosti, omezujeme se při studiu extrakce iontů většinou na velmi úzkou oblast plazmatu a vycházíme z následujících předpokladů (platných pro plazma v oblasti námi užívaných tlaků  $10^{-2}$ – $10^0$  Pa):

- Plazma je elektricky neutrální, hustoty iontů  $n_{i0}$  a elektronů  $n_{e0}$  jsou si v plazmatu rovny.
- Rozdělení částic podle rychlostí je maxwellovské a pro teplotu iontů  $T_i$  platí, že je mnohem menší než teplota elektronů  $T_e$ .

Jako první se řešením problematiky plazmatu v blízkosti záporně nabitě elektrody zabýval Bohm (1949), viz např. [9, 5]. V oblasti elektrody dochází k přeskupení náboje tak, aby bylo zpětně dosaženo neutrality. Mezi plazmatem a elektrodou vzniká takzvaná předvrstva (přechodová vrstva) (obr. 2.1). Do této vrstvy již proniká vnější pole, koncentrace elektronů  $n_e$  a iontů  $n_i$  jsou si stále rovny, ale nejsou již rovny koncentraci částic v plazmatu. V této oblasti jsou již ionty urychlovány vnějším polem. Místo, kde koncentrace elektronů začíná klesat rychleji než koncentrace iontů (povrch  $\Sigma$ ), je hranice mezi plazmatem a vrstvou prostorového náboje. Ionty jsou v ní dále urychlovány elektrostatickým polem, zatímco elektrony jsou zpomalovány a vracejí se zpět do plazmatu.

Předpokládáme, že koncentrace elektronů se řídí Boltzmannovým zákonem

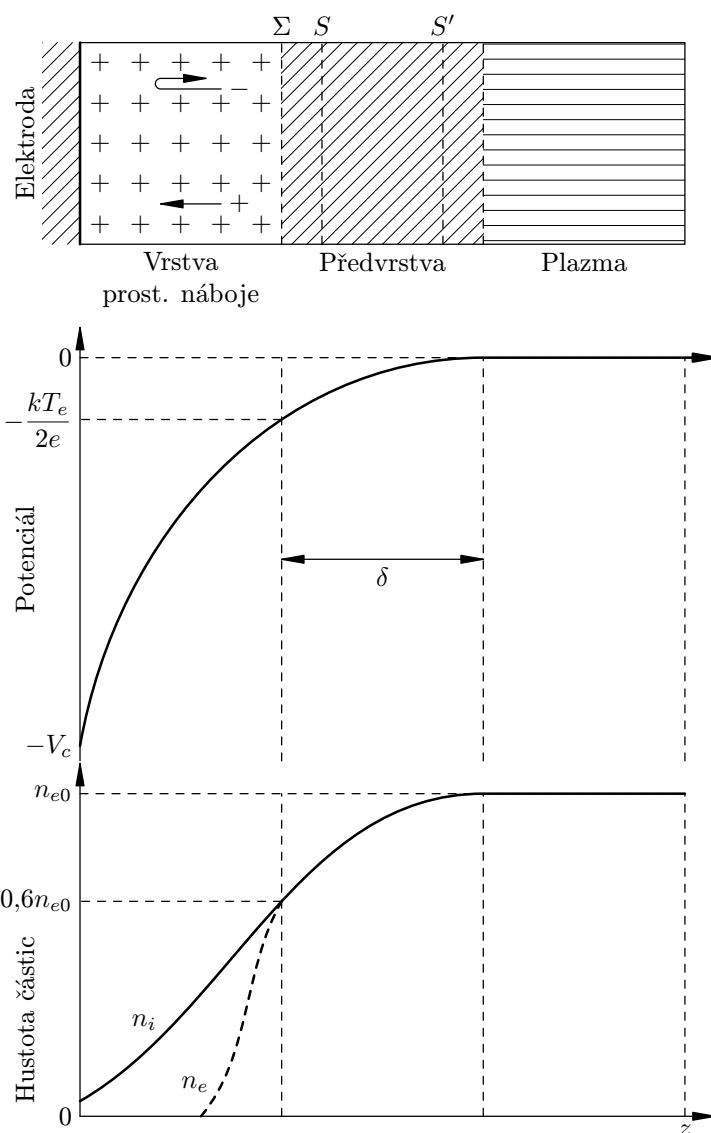
$$n_e = n_{e0} \exp\left(\frac{e(\Phi - \Phi_p)}{kT_e}\right), \quad (2.1)$$

kde  $n_{e0}$  je hustota elektronů plazmatu,  $\Phi_p$  je potenciál plazmatu,  $T_e$  teplota elektronů a  $\Phi$  je potenciál v místě, kde určíme hustotu elektronů.

Dále předpokládáme, že pro ionty platí rovnice kontinuity (tloušťka předvrstvy je mnohem menší než střední volná dráha elektronů pro neelastické srážky, takže nepředpokládáme, že v předvrstvě dochází ke vzniku iontů).

Kvůli výpočetní náročnosti není možné simulovat plazma s extrakční oblastí a extrahovaný iontový svazek současně. Je výhodnější rozdělit problém na dvě části. Nejprve musíme počítat chování vlastního plazmatu a zjistit parametry ovlivňující vznikající iontový svazek. Teprve poté je možné použít pro výpočet šíření vlastního iontového svazku vhodný program pro simulaci optických systémů. Kromě volby počátečních parametrů svazku je důležitá i vhodná volba emisního povrchu v plazmatu.

Nejlépe odpovídá skutečnosti volba polohy plochy emitující ionty v předvrstvě na ekvipotenciále mezi polohami označenými písmeny  $S$  a  $S'$  na obrázku 2.1 (přesná volba polohy se provádí podle konvergence simulace). Hodnoty potenciálu emisní plochy, proudu iontů a energetického rozdělení iontů získáme ze simulace plazmatu.



Obr. 2.1: *Extrakce iontů z plazmatu — Bohmův model stínění potenciálu elektrody, převzato z [9]*

### 2.2.1 Program EOD

Při pobytu v Ústavu přístrojové techniky AV ČR jsem se seznámil s programy B. Lencové pro výpočet pole elektrostatických a magnetických čoček a deflektorů založených na metodě konečných prvků určených pro operační systém Microsoft DOS [10, 11].

Dostal jsem možnost naprogramovat k těmto programům uživatelské rozhraní a trasování částic, program EOD [12]. Pro mé potřeby výpočtů svazků s prostorovým nábojem byla k programu EOD přidána možnost simulovat interakce částic. Výsledky výpočtů lze zobrazit přímo v prostředí EOD.

V současné době umožňuje EOD tyto výpočty:

- Simulace svazků nabitých částic.
- Zahrnutí konstantní neutralizace prostorového náboje.



- Fokusace svazků. (Program je schopen nalézt potenciály na elektrodách, případně sycení magnetické čočky tak, aby zadaný svazek částic byl optimálně sfokusován v zadaném místě.)
- Simulace svazků s prostorovým nábojem. (Použil např. P. Jánský v [7].)
- Simulaci emise iontů (elektronů) z elektrody — získaný proud svazku v jednotlivých místech emisního povrchu je určen programem EOD tak, aby byl maximální (omezený pouze prostorovým nábojem). (Používá P. Jánský pro výpočty elektro-  
nových trysek v [8].)
- Simulace extrakce z plazmatu zahrnující i neutralizaci elektrony z plazmatu.

### **3 IONTOVÝ ZDROJ PRO PŘÍMOU DEPOZICI TENKÝCH VRSTEV — MĚŘENÍ PARAMETRŮ**

#### **3.1 ÚVOD**

Plazmatický iontový zdroj vycházející z návrhu vypracovaného dr. J. van den Ber-  
gem na univerzitě v Salfordu (UK) (iontový zdroj plazmatického typu) je na našem  
ústavu používán jak pro přímou depozici tenkých vrstev, tak i pro analýzu vzniklých  
vrstev. Tyto dva režimy práce zdroje mají rozdílné požadavky na optickou soustavu  
transportující ionty od zdroje k substrátu. Aby bylo možné optickou soustavu navrh-  
nout tak, aby umožňovala provoz v obou režimech, je žádoucí ji nejprve simulovat na  
počítači. Úspěšná simulace transportní optiky vyžaduje co nejpřesnější znalost základ-  
ních údajů o iontovém zdroji (proud, emitance a energie) v závislosti na podmínkách  
provozu (tlak, napětí na elektrodách).

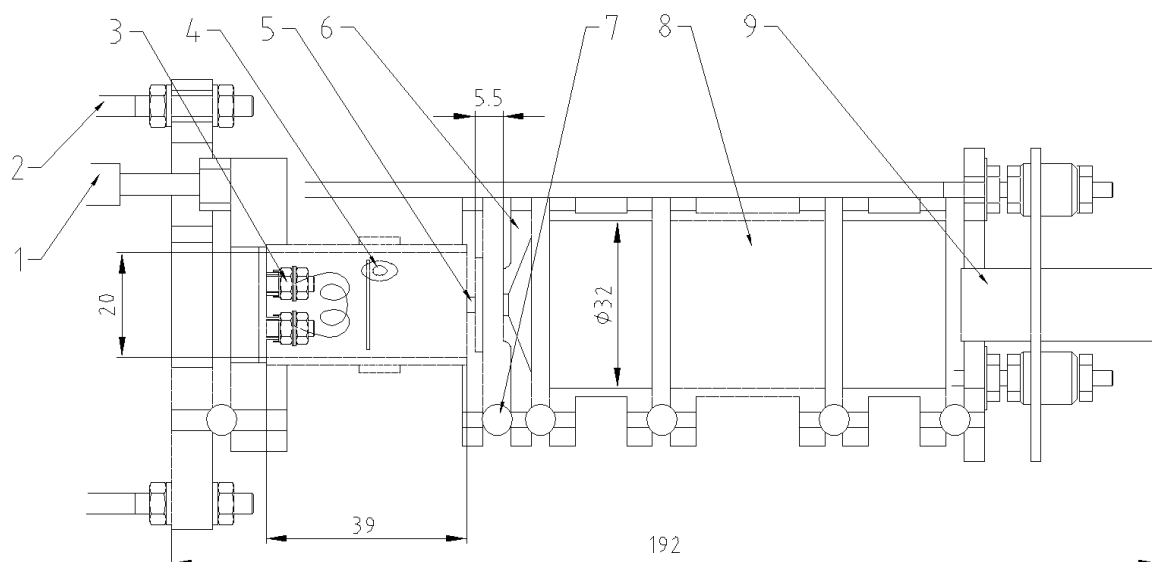
Iontový zdroj je velmi malý a do výbojové komory nebo do těsné blízkosti zdroje  
není možné umístit běžné sondy a měřicí přístroje. Jedinou možností je tedy měření  
parametrů získaného iontového svazku a z nich usuzovat na způsob činnosti zdroje.

Uspořádání optiky celého iontově optického systému pro přímou depozici není  
vhodné pro měření parametrů zdroje. K jejich získání (s výjimkou emitance, kterou  
prozatím nemáme možnost měřit) byla použita testovací aparatura iontových zdrojů.  
Snadno měřitelným parametrem iontového svazku je profil proudové hustoty, který je  
používán pro ověření správnosti počítačových simulací. Volbou vhodných počátečních  
podmínek svazku při počítačové simulaci se snažíme dosáhnout toho, aby vypočtený  
profil proudové hustoty odpovídal experimentu. Pro ověření správnosti simulace je  
nutné změřit závislosti profilu svazku pro různé provozní podmínky iontového zdroje  
a požadovat „rozumné“ (předpokládané) chování simulace při změnách provozních  
podmínek.

#### **3.2 POPIS ZDROJE**

##### **3.2.1 Konstrukce zdroje**

Schéma iontového zdroje i s extrakční a fokusační optikou je uvedeno na obr. 3.1.  
Na obr. 3.2 je zobrazeno schéma zapojení elektrod iontového zdroje.



Obr. 3.1: Iontový zdroj aparatury pro přímou depozici tenkých vrstev s fokusační optikou. 1 – přívod plynu; 2 – uchycení k aparatuře; 3 – uchycení katody; 4 – uchycení anody; 5 – extrakční otvor; 6 – extrakční elektroda; 7 – keramická kulička; 8 – unipotenciální čočka; 9 – stínící trubička. Kóty jsou uvedeny v mm

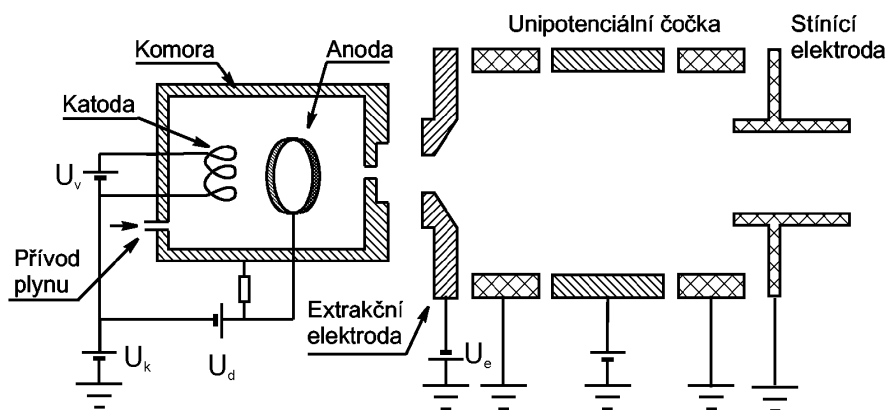
Žhavené wolframové vlákno katody emituje elektrony, které jsou urychlovány k anodě (a ke stěně komory). Katoda je stočena z drátu o průměru 0,3 mm do spirály o dvou závitěch o průměru 5 mm a připevněna ke keramickým průchodkám. Žhavicí proud katody je přibližně 7 A (podle zvoleného výbojového proudu). Anoda má vzhledem k vláknu potenciál o 80 V vyšší (tento potenciálový rozdíl umožňuje dosažení optimální pravděpodobnosti ionizace neutrálního plynu ve výbojové komoře). Elektrony ionizují při srážce neutrální atomy pracovního plynu (N, Ne, Ar nebo Xe) dodávané do plazmatické komory a vzniká plazma. Ionty jsou z plazmatu urychlovány elektrostatickým polem extrakční elektrody a dopadají na terč, který je na nulovém potenciálu. Energie iontů je přibližně určena rozdílem potenciálu anody a terče.

Anoda je tvořena drátem z nerezavějící oceli o průměru 1,5 mm, který je stočen do kružnice o vnitřním poloměru 10 mm. Vnitřní průměr plazmatické komory je 12 mm. Vzdálenosti jednotlivých elektrod jsou vymezeny keramickými kuličkami.

### 3.2.2 Problémy při provozu zdroje a jejich odstraňování

Během provozu iontového zdroje byly zjištěny některé závady ovlivňující hlavně životnost zdroje, které bylo nutné vyřešit:

1. Časté přetavování anody zdroje.
2. Průrazy vysokého napětí mezi komorou zdroje a extrakční elektrodou v důsledku naprašování izolačních keramických kuliček.
3. Malá proudová hustota dosahovaná na terči (s tím souvisí i nevhodně navržená transportní optika, kde jsou značné ztráty proudu svazku). Důvodem proudo-



Obr. 3.2: Schéma iontového zdroje aparatury pro přímou depozici tenkých vrstev s fokusační optikou.  $U_v$  je napětí zdroje žhavení vlákna,  $U_k$  je napětí zdroje určujícího potenciál komory,  $U_d$  je výbojové napětí a  $U_e$  extrakční napětí

vých ztrát je nekvalitní iontový svazek vycházející ze zdroje, který má velkou divergenci a optika jej nedokáže zpracovat.

4. Malá životnost katody zdroje (5 hodin) a s tím související prostoje při výměně katody a opětovném vyčerpávání aparatury.

První problém byl vyřešen volbou vhodnějšího tvaru anody a především zvětšením její vzdálenosti od žhaveného vlákna, které bylo příliš blízko anody a vlivem vysoké teploty, způsobené jak dopadem iontů, tak blízkostí horké katody, docházelo k jejímu přetavování.

Další problémy již úzce souvisí se získáváním iontů z plazmatu. Z naprašování izolačních keramik mezi elektrodami bylo možné usuzovat na příliš divergentní svazek vycházející ze zdroje. Svazek, který má v extrakční oblasti velkou energii, potom může rozprašovat extrakční nebo fokusační elektrody. Rozprašený materiál se dostává na keramické kuličky a vytváří na nich vodivou vrstvu. Zkoumání iontového zdroje bylo nejprve zaměřeno na zjištění vlastností iontového svazku, ze kterých by bylo možné určit příčinu naprašování izolačních keramik.

Výsledky simulací extrakce iontů z plazmatu (obr. 4.8) ukazují, že proud procházející extrakční elektrodou není způsoben dopadem iontů, ale průchodem proudu z komory přes izolační keramické kuličky. Tento závěr potvrzuje i zvyšování proudu extrakční elektrodou při zahřívání zdroje.

### 3.3 MĚŘENÍ PARAMETRŮ IONTOVÉHO ZDROJE

#### 3.3.1 Popis experimentu

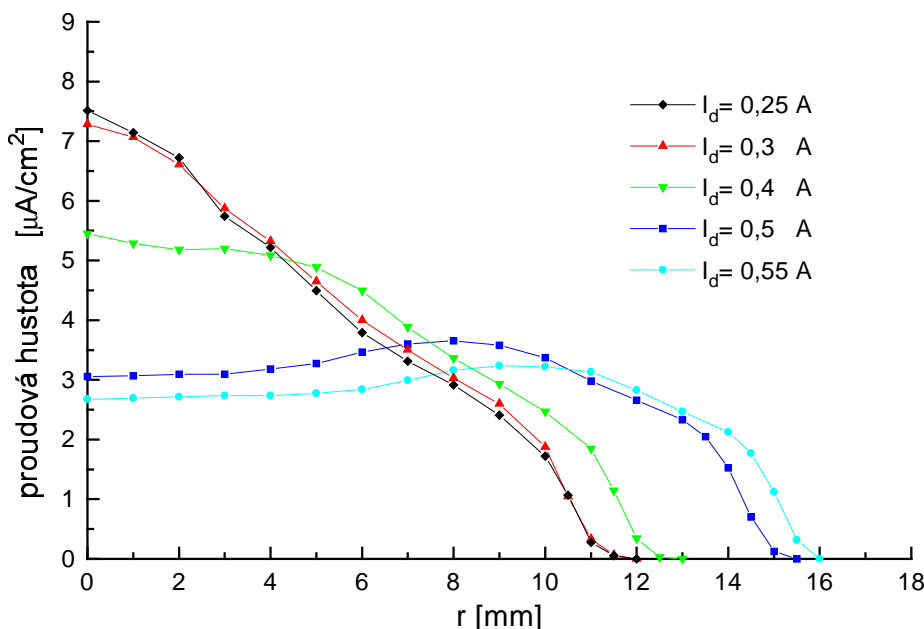
Všechna měření parametrů iontového zdroje byla prováděna jen s použitím extrakční elektrody (bez unipotenciální čočky a stínící elektrody). Cílem experimentů bylo určit dosažitelný extrakční proud iontového zdroje z obr. 3.2 (bez unipotenciální čočky a stínící elektrody) a zmapovat jeho chování při změnách provozních podmínek.

Provedli jsme měření profilu proudové hustoty svazku iontového zdroje pro energii iontů  $\approx 1\,500\text{ eV}$  ( $U_k = 1\,400\text{ V}$  a  $U_d = 80\text{ V}$ , viz obr. 3.2). Tlak v aparatuře byl měněn v rozsahu  $3 \cdot 10^{-3}$ – $1 \cdot 10^{-2}\text{ Pa}$  (s přesností nastavení  $0,1 \cdot 10^{-3}\text{ Pa}$ ). Současně s tím se měnil i tlak ve výbojové komoře iontového zdroje.

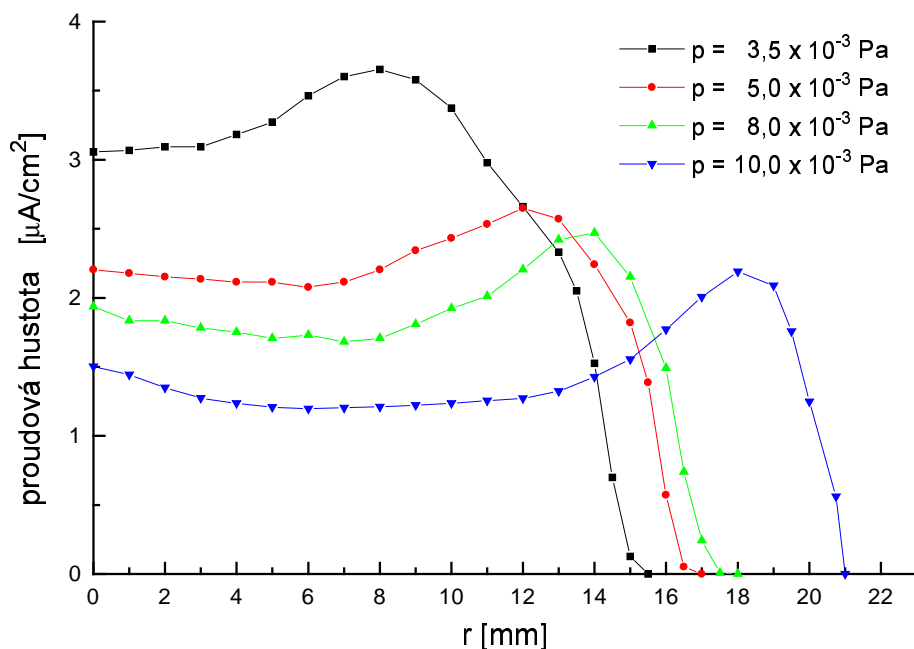
Dalším parametrem experimentu byl výbojový proud, který byl měněn v rozsahu  $0,25$ – $0,55\text{ A}$  (výbojovým proudem rozumíme proud, který vychází z katody a prochází anodou a komorou zdroje). Pro dosažení výbojového proudu  $500\text{ mA}$ , kdy je výboj stabilní a nezhasíná, je třeba velmi vysoká teplota vlákna, která je srovnatelná s teplotou tání wolframu. Vláknko má potom malou životnost, která koresponduje se zkušenostmi při provozu zdroje. Zvýšení životnosti katody je tedy možné jen snížením teploty vlákna. Zdroj potom musí být upraven tak, aby výboj při nižším výbojovém proudu nezhasínal.

Proudový profil svazku byl měřen Faradayovou sondou [18] umístěnou ve vzdálenosti  $165\text{ mm}$  od extrakční elektrody. Proud sondou byl měřen pikoampérmetrem KEITHLEY 485. Chyba měření proudové hustoty se pohybovala okolo  $0,1$ – $0,3\ \mu\text{A}/\text{cm}^2$ .

Během experimentů se celkový proud svazku v místě měření Faradayovou sondou při stejných podmínkách (výbojový proud, tlak) značně měnil vlivem zahřívání zdroje. Proud svazku získaného ve studeném zdroji se při vyhřátí zdroje zmenšil na třetinu. Tvar profilu proudové hustoty (ne velikost) byl po porovnání totožný. Vysvětlení zachování tvaru profilu při změně proudu je, že mimo extrakční oblast je vliv prostorového náboje svazku zanedbatelný, protože proud svazku je malý.



Obr. 3.3: Závislost profilu proudové hustoty na výbojovém proudu  $I_d$ . Extrakční napětí  $U_e = -135\text{ V}$ , tlak  $p = 3,5 \cdot 10^{-3}\text{ Pa}$



Obr. 3.4: Závislost profilu proudové hustoty na tlaku  $p$ . Výbojový proud  $I_d = 0,5$  A, extrakční napětí  $U_e = -135$  V

V průběhu měření se také značně měnil proud protékající extrakční elektrodou (od 10 do 130  $\mu$ A), což bylo pravděpodobně způsobeno zahříváním zdroje (vzhledem k malé životnosti zdroje v době měření nebylo možné čekat na vyhřátí zdroje a měřit za konstantních podmínek). Na konci životnosti zdroje (po 5 hodinách provozu) byl již proud extrakční elektrodou tak velký, že pokleslo napětí  $U_k$  určující potenciál komory, protože zdroj je schopen dodávat pouze proud 2 mA.

### 3.3.2 Vliv výbojového proudu na profil proudové hustoty

S růstem výbojového proudu klesá celkový proud svazku. Pro výbojový proud  $I_d = 0,25$  A a 0,3 A je celkový proud 19  $\mu$ A, pro  $I_d = 0,4-0,55$  A je celkový proud svazku 12–14  $\mu$ A.

### 3.3.3 Vliv tlaku v aparatuře na profil proudové hustoty

S rostoucím tlakem v aparatuře klesá proudová hustota ve svazku a dochází k rozšiřování svazku (obr. 3.4). Celkový proud svazku detekovaný Faradayovou sondou s rostoucím tlakem slabě kolísá kolem 19  $\mu$ A.

### 3.4 DISKUZE VÝSLEDKŮ MĚŘENÍ

Maximální proudovou hustotu  $j_e$ , kterou můžeme získat z daného povrchu za předpokladu emise omezené prostorovým nábojem, můžeme odvodit z Childova-Langmuirova zákona ([4], str. 199)

$$j_e = \frac{4\epsilon_0}{9} \left( \frac{2Ze}{m_i} \right)^{1/2} \frac{V^{3/2}}{d^2}, \quad (3.1)$$

kde  $m_i$  je hmotnost iontu,  $Ze$  je náboj iontu,  $V$  potenciálový rozdíl a  $d$  vzdálenost mezi hranicí plazmatu (plazmatickým meniskem) a extrakční elektrodou.

Pokud hustota proudu svazku extrahovaného z plazmatu roste nad hodnotu limitovanou prostorovým nábojem  $j_e$  (např. zvyšováním tlaku nebo výbojového proudu) při konstantním potenciálovém rozdílu  $V$ , musí docházet ke zmenšování vzdálenosti  $d$ , aby byla rovnice (3.1) splněna. To vede k vysunutí plazmatu směrem k extrakční elektrodě (zvětšení divergence svazku). Tím se také zvětší emisní povrch a umožní větší extrakční proud.

Pro náš iontový zdroj s parametry  $V \approx 1\,500$  V,  $d = 5,5$  mm,  $m_i = 40$  amu vychází proudová hustota  $j_e \approx 900 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ , což odpovídá extrakčnímu proudu  $I_e = 63 \mu\text{A}$ . Tato hodnota proudu řádově odpovídá hodnotám extrakčního proudu získaného z iontového zdroje. Vzhledem k tomu, že profil proudové hustoty se se změnou extrakčního napětí prakticky nemění a celkový proud svazku je konstantní, lze usuzovat, že extrakce iontů z našeho iontového zdroje není omezena prostorovým nábojem, ale emisními možnostmi plazmatu.

Teorie emise omezené prostorovým nábojem nepočítá s neutralizací elektrony vycházejícími z plazmatu, takže celkový proud svazku může být ještě vyšší než  $63 \mu\text{A}$ .

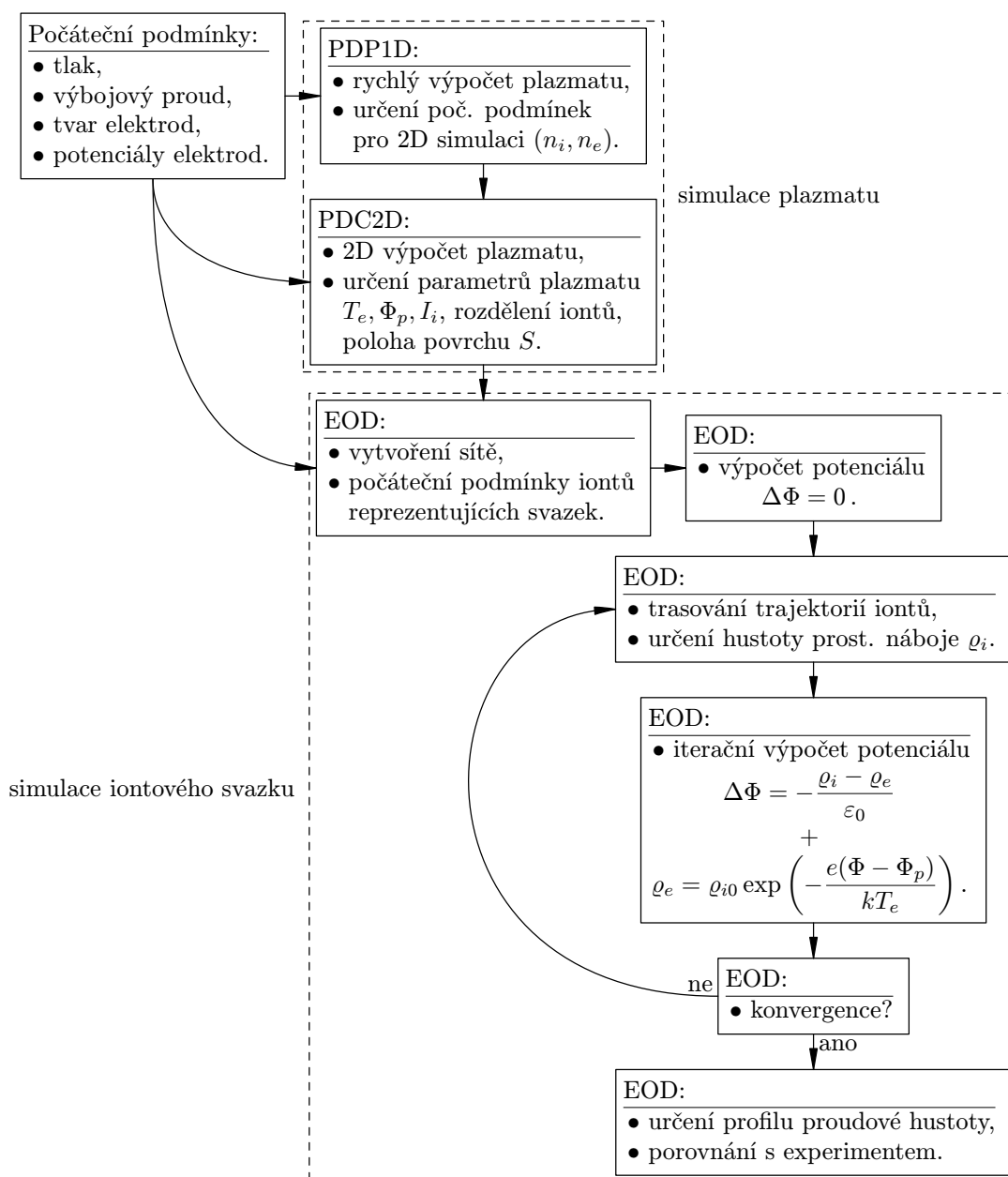
S růstem výbojového proudu klesá proud svazku. Abychom získali větší proud svazku, je tedy nutné snížit výbojový proud, výboj je však při nižších proudech nestabilní a zhasíná.

Změna tlaku nemá na celkový proud svazku podstatný vliv, mění se pouze rozdělení hustoty náboje, které je způsobeno změnou tvaru plazmatického menisku. Velikost měřeného proudu svazku je však pravděpodobně ovlivněna ztrátami v extrakčním otvoru iontového zdroje.

## 4 POČÍTAČOVÁ SIMULACE EXTRAKCE IONTŮ Z PLAZMATU

V této části se zaměřím na popis postupu vedoucího k simulaci extrakce iontů z plazmatu bez nutnosti experimentálního určení parametrů potřebných pro výpočet šíření iontového svazku, viz obr 4.1. Výpočet sestává ze dvou částí: simulace plazmatu uvnitř iontového zdroje pomocí metody „Particle in Cell–Monte Carlo“, viz část 4.1, a výpočtu šíření iontového svazku z emisního povrchu zdroje pomocí programu EOD, viz kapitola 4.3. Inspirací k tomuto způsobu simulace extrakce iontů z plazmatu byly výpočty navržené J. Whealtonem [20]. Originalita způsobu výpočtu navrženého v této práci spočívá v určení parametrů plazmatu počítačovou simulací výboje v iontovém

zdroji. Trasování iontového svazku je potom již identické s Whealtonovým přístupem, i když jsou zde zřejmě odlišnosti ve způsobu započítávání elektronů vycházejících z plazmatu (Whealton svůj algoritmus nepopisuje) a ve vlastnostech iontového zdroje.



Obr. 4.1: Schéma výpočtu extrakce iontů z plazmatu

Pro využití tohoto postupu je nutné znát parametry plazmatu: koncentraci elektronů  $n_{e0}$ , potenciál plazmatu  $\Phi_p$ , energiové rozdělení iontů  $E_i$  a teplotu elektronů  $T_e$ , které se určují experimentálně nebo odhadem z experimentů na podobném zařízení. To v některých případech není možné (malý iontový zdroj, neexistující experimentální vybavení nebo prototyp zdroje). V těchto případech je nutné určit parametry plazmatu výpočtem.

## 4.1 SIMULACE DĚJŮ V PLAZMATU — PROGRAMY PDP1D A PDC2D

Pro výpočty výboje v plazmatu jsem použil algoritmy programu PDP1 [17] z University of California v Berkeley, který je volně přístupný na internetu. Program pochází z roku 1984 a z hlediska efektivity použitých algoritmů je dnes zastaralý. Jeho jednoduchost ovšem umožnila upravit zdrojový kód programu pro potřeby simulace extrakce z plazmatu a tvoří základ mých programů PDP1D a PDC2D. Programy berou v úvahu tyto srážkové procesy:

- elastické srážky elektronů a neutrálních atomů,
- excitaci neutrálních atomů elektrony,
- ionizaci neutrálních atomů elektrony,
- výměnu náboje mezi ionty a neutrálními atomy,
- elastické srážky iontů s neutrálními atomy.

Programy nesimulují pohyb všech částic nacházejících se v plazmatu, protože tento způsob řešení je s dnešními výpočetními prostředky dosud neřešitelný. Místo toho používají takzvané testovací částice. Jedna testovací částice reprezentuje  $10^5$ – $10^6$  skutečných částic. Pohyb částice v elektrostatickém poli elektrod (určeném řešením Poissonovy rovnice) je popsán pohybovou rovnicí, srážky částic jsou řešeny metodou Monte Carlo.

Aby byl zajištěn dostatečný počet testovacích částic v každé buňce sítě (10 a více), je u 2D simulací nutné, aby jedna testovací částice představovala  $10^4$ – $10^5$  skutečných částic. Počet testovacích částic je u 2D simulace přibližně  $5 \cdot 10^4$ – $10^6$  proti  $10^3$  u 1D výpočtu. Výpočet probíhá přibližně dva týdny na počítači s procesorem PENTIUM III 2 000 MHz.

## 4.2 SIMULACE EXTRAKCE IONTOVÉHO SVAZKU

### 4.2.1 Počáteční podmínky simulace plazmatu

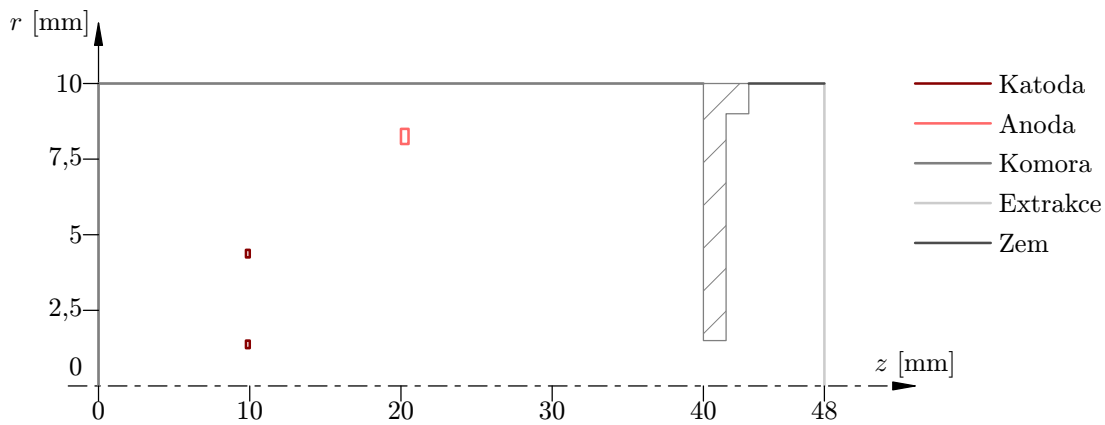
Počáteční podmínky simulací plazmatu byly voleny tak, aby odpovídaly podmínkám experimentů popsaných v části 3.3 a výsledky mohly být vzájemně porovnány:

- výbojový proud  $I_d = 0,50$  A,
- tlak ve vakuové komoře  $p = 5,0 \cdot 10^{-3}$  Pa,
- potenciál katody  $U_k = 1\,481$  V,
- potenciál anody  $U_a = U_a + U_d = 1\,561$  V,
- potenciál extrakční elektrody  $U_e = -135$  V.

Schéma tvaru elektrod a volby okrajových podmínek potenciálu je zachyceno na obrázku 4.2. Z nákresu je zřejmé, že vlákno katody, které má ve skutečnosti tvar spirály, bylo nahrazeno dvěma prstenci. Tvar katody je volen tak, aby její celková plocha byla shodná s plochou skutečné katody a aby byly co nejlépe dodrženy podmínky emise elektronů z katody.

Elektrody jsou umístěny v síti s konstantním krokem 0,25 mm (Poissonova rovnice se v dané oblasti řeší metodou konečných diferencí). Potenciály na elektrodách byly zvoleny v souladu s experimenty.





Obr. 4.2: Schéma tvaru elektrod a okrajových podmínek simulace plazmatu

Teplota neutrálních atomů pracovního plynu (v našem případě argon) je zvolena  $T_n = 500$  K. Tlak neutrálních atomů ve výbojové komoře  $p_n = 0,24$  Pa je určen nepřímo, výpočtem ze znalosti tlaku ve vakuové komoře aparatury ( $p = 5,0 \cdot 10^{-3}$  Pa), čerpací rychlosti difúzní pumpy, propustnosti extrakčního otvoru a vodivosti spojovacích částí.

Srážkové průřezy jednotlivých interakcí částic byly určeny experimentálně [21].

#### 4.2.2 2D simulace plazmatu — program PDC2D

V této části jsou zhodnoceny výsledky programu PDC2D pro počáteční podmínky uvedené v části 4.2.1. Výsledky pro všechny počáteční podmínky jsou přehledně uvedeny v dizertační práci [22].

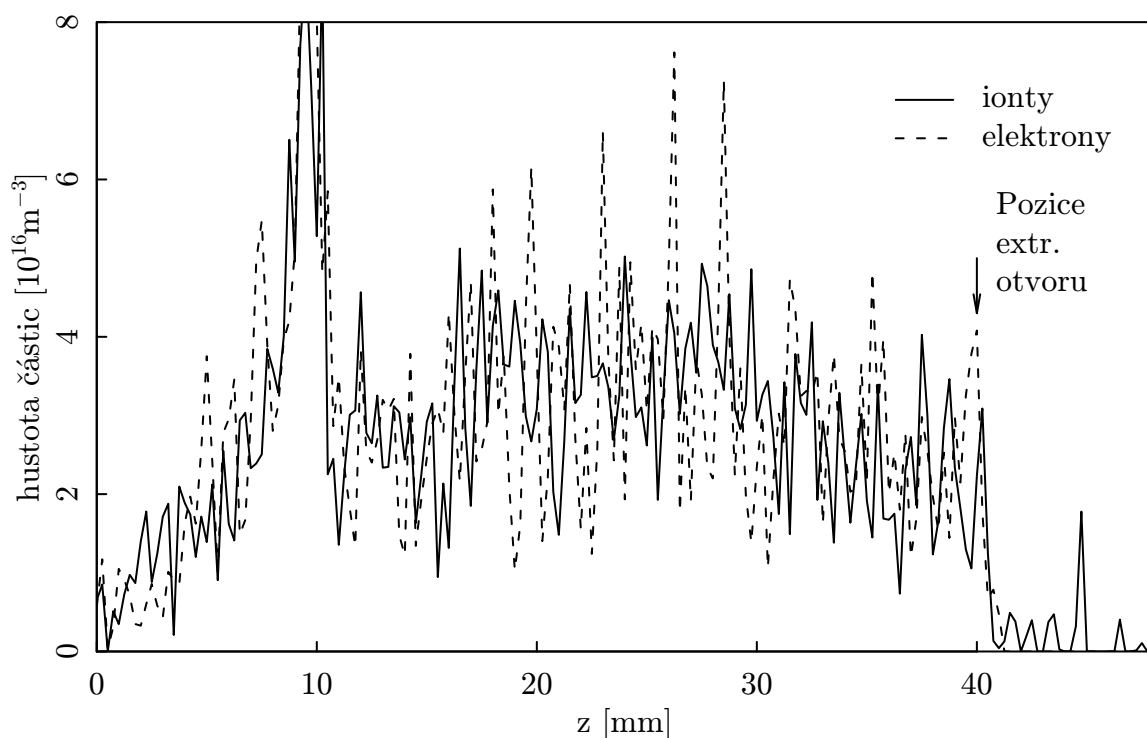
Důležitým výstupem programu PDC2D je profil hustoty elektronů a iontů. Z profilů lze usuzovat na polohu povrchu  $\Sigma$ , na kterém začíná koncentrace elektronů klesat rychleji než koncentrace iontů (viz obr. 2.1 v části 2.2).

Z obrázků průběhu hustoty částic (obr. 4.3) a potenciálu (obr. 4.4) je patrné, že hustota elektronů se od hustoty iontů odděluje pro  $z \approx 40$  mm, ale potenciál klesá z potenciálu plazmatu mnohem dříve. Dřívější pokles potenciálu je způsoben pronikáním potenciálu extrakční elektrody.

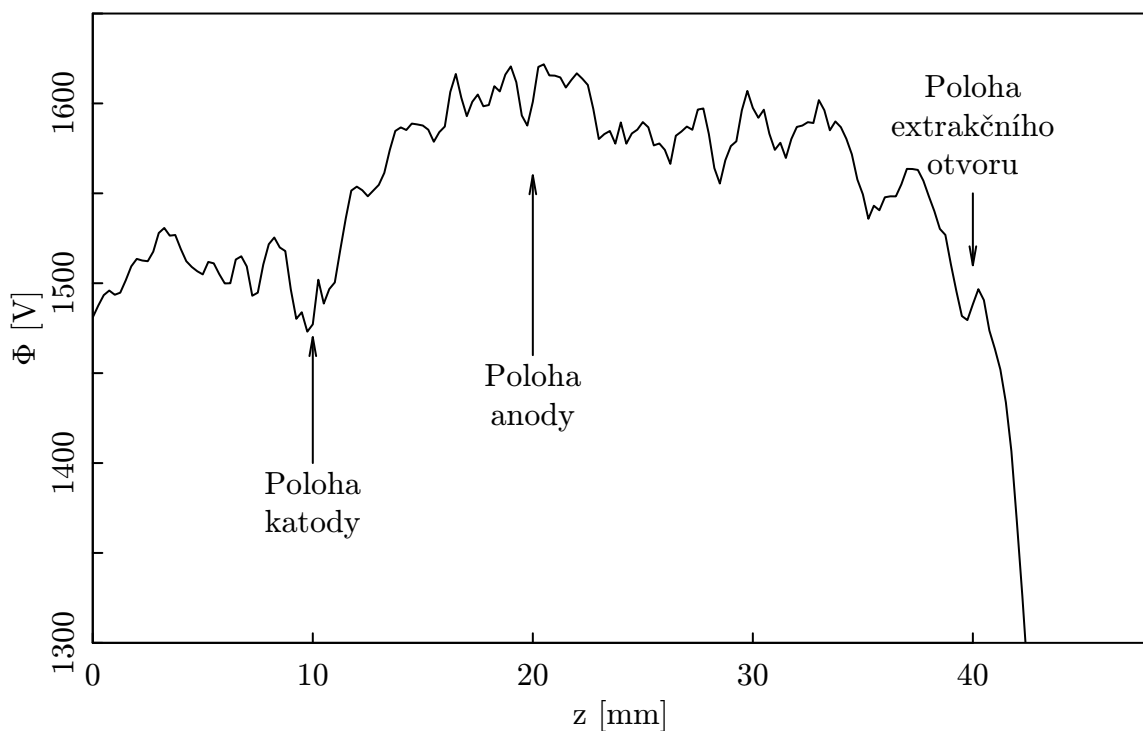
Určit přesně polohu plochy  $\Sigma$  (obr. 2.1) jako místa, kde dojde k poklesu hustoty elektronů (hranice vrstvy prostorového náboje a předvrstvy), je problematické vzhledem k fluktuacím hustoty částic, a proto nebyla vyhodnocována. Fluktuace hustoty částic lze odstranit použitím modernějších algoritmů, které používají časového středování [14].

Vzhledem k tomu, že poloha emisního povrchu iontů se volí v předvrstvě plazmatu, byla za místo emise iontů  $S$  definována poloha  $z = 38$  mm, která se již nachází v předvrstvě.

Teplota elektronů v místě povrchu  $S$  je získávána fitováním Maxwellova rozdělení na získaný energiový profil elektronů. Pro výbojový proud  $I_d = 0,5$  A a tlak  $p_n = 0,24$  Pa je teplota elektronů  $kT_e = (26,2 \pm 0,4)$  eV. Vysoká teplota elektronů souvisí



Obr. 4.3: *Profil hustoty částic plazmatu ve vzdálenosti  $r = 0,5$  mm od osy symetrie*



Obr. 4.4: *Profil potenciálu  $\Phi$  ve vzdálenosti  $r = 0,5$  mm od osy symetrie*

s velkou střední volnou dráhou elektronů a tím nízkou účinností předávání energie neutrálním atomům. Většina srážek s neutrálními atomy je pouze elastických, při

kterých elektrony neztrácejí energii. K excitacím a ionizacím, kdy elektrony energii ztrácejí, dochází jen nepatrně.

Při hustotě iontů  $n_{i0} = 2,5 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$  je Debyeova délka  $\lambda_D \doteq 2,99 \text{ mm}$ .  $\lambda_D$  vyjadřuje „stínící“ vzdálenost, tedy vzdálenost, na které je plazma schopno odstínit elektrický potenciál. Podmínka, aby ionizovaný plyn byl plazmatem, je

$$\lambda_D \ll L,$$

kde  $L$  je rozměr komory. V našem zdroji je  $\lambda_D$  rovna pouze 1/3 průměru výbojové komory, což také vysvětluje fluktuace potenciálu v komoře, protože plazma nevykazuje dostatečné kolektivní chování, aby mohlo výkyvy v potenciálu eliminovat.

Pro účely simulace iontového svazku je nejdůležitější znát proud  $I_e$ , který dopadá na extrakční elektrodu, tedy proud tvořený ionty vycházejícími z plazmatu otvorem v komoře. Hodnota tohoto proudu je  $55 \mu\text{A}$ , což je přibližně dvojnásobek celkového proudu svazku měřeného v experimentu (viz část 3.3).

Koncentrace iontů byla určena  $n_i = 2,48 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$ , čemuž odpovídá stupeň ionizace  $C_i = 0,07 \%$ . Nízký stupeň ionizace souvisí s velkou střední volnou dráhou elektronů pro ionizaci  $l_i = 2,85 \text{ m}$ , která je větší než délka výbojové komory. Vzhledem k tomu, že v iontovém zdroji není použito magnetické pole k zakřivení drah elektronů a prodloužení doby letu, je pravděpodobnost ionizace malá a plazma zůstává řídké. Z hlediska vlastností plazmatu se již nejedná o optimální plazma, protože Debyeova stínící délka není výrazně menší než rozměry výbojové komory.

Potenciál plazmatu  $\Phi_p = 1590 \text{ V}$  byl určen jako průměrná hodnota potenciálu v oblasti  $z \in \langle 15; 35 \rangle \text{ mm}$  a  $r \in \langle 1; 6 \rangle \text{ mm}$ , kde je prakticky konstantní. Standardní odchylka potenciálu plazmatu je  $\Delta\Phi_p = 9 \text{ V}$ .

Rozdělení iontů podle úhlu  $\theta$  vzhledem k optické ose bylo zkoumáno fitováním normálního rozdělení

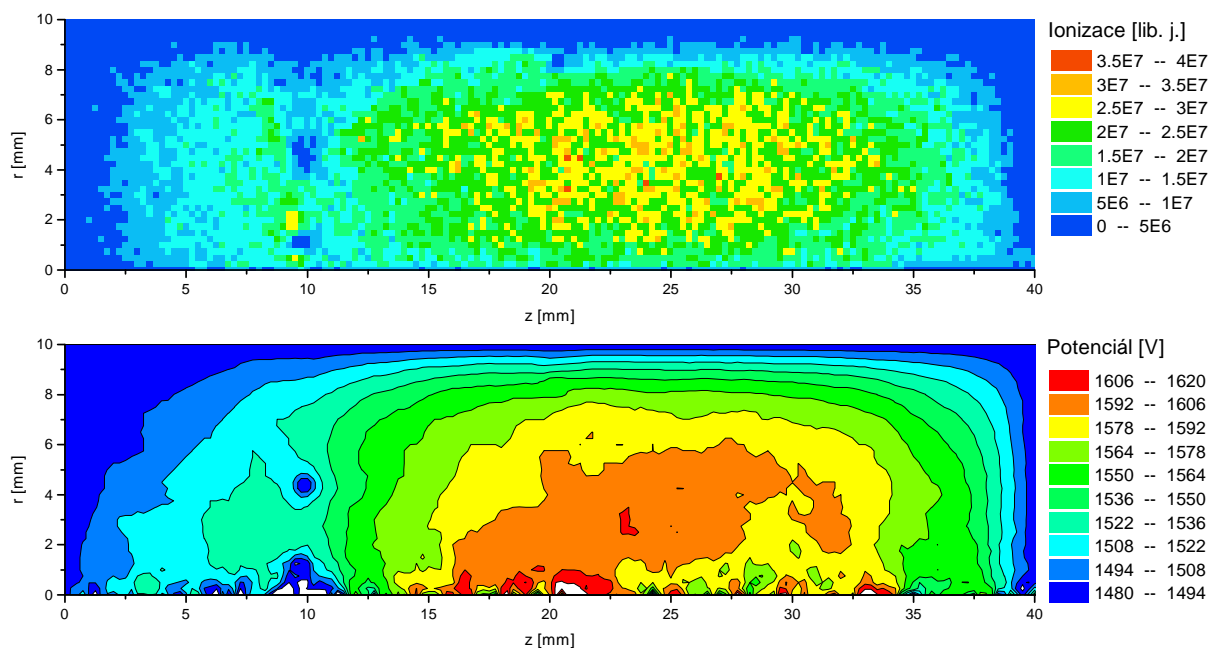
$$f(\theta) = A \exp\left(-\frac{(\theta - \theta_i)^2}{\sigma_i^2}\right)$$

a charakterizováno střední hodnotou  $\theta_i$  a šířkou rozdělení  $\sigma_i$ .

Na emisním povrchu  $S$  byl určen střední úhel  $\theta_{iS} = (-4,0 \pm 1,0)^\circ$  a šířka rozdělení  $\sigma_{iS} = (17,1 \pm 1,5)^\circ$ . Úhlové rozdělení iontů bylo zkoumáno také v místě extrakčního otvoru  $\theta_{ie} = (5,1 \pm 1,0)^\circ$  a šířka rozdělení  $\sigma_{ie} = (15,1 \pm 1,4)^\circ$ . Ze zdroje tedy vychází divergentní svazek.

Energiová šířka iontového svazku je dána potenciálovým rozdílem míst, na kterých vznikají ionty ionizací. V oblasti nejčastěji se vyskytující ionizace neutrálního atomu ( $z = 20\text{--}30 \text{ mm}$ ,  $r = 3\text{--}8 \text{ mm}$ ) se potenciál pohybuje v rozsahu  $1578\text{--}1606 \text{ V}$  (obr. 4.5). Odtud lze očekávat rozptyl energie iontů kolem  $25 \text{ eV}$ . Je také vidět, že v oblasti extrakčního otvoru nedochází k ionizacím, což je v souladu s předpokladem odvození Boltzmannova rozdělení koncentrace elektronů (2.1).

Energiové rozdělení iontů bylo určeno jako závislost počtu ionizací na potenciálu, na kterém k ionizaci došlo. Pro získání iontového svazku jsou nejdůležitější ionty, které vznikají na potenciálu plazmatu a vyšším. Ty mají dostatek energie, aby mohly opustit



Obr. 4.5: Rozložení četnosti ionizací (nahore) a potenciálu (dole) ve výbojové komoře. Poloha kroužků s poloměry  $r = 1$  a  $4,25$  mm reprezentujících katodu je  $z = 10$  mm. Anoda se nachází v místě  $(z, r) = (20, 9)$  mm

plazma. Ionty, které vznikly na nižším potenciálu nemohou z plazmatu uniknout (pokud jsou obklopeny oblastí s vyšším potenciálem), protože nemají dostatečnou energii. Ve skutečnosti však potenciál plazmatu kolísá (viz hodnota  $\Delta\Phi_p$ ), takže i část těchto iontů může plazma opustit.

Energiové rozdělení iontového svazku je charakterizováno středním potenciálem vzniku iontů (podle četnosti ionizací)  $\Phi_s = 1592$  V a šířkou v polovině maxima  $\Delta\Phi_s = 14$  V.

### 4.2.3 Vliv teploty na plazma

Plazma v iontovém zdroji bylo počítáno pro teplotu zdroje  $T_n = 500$  K (viz část 4.2.1), která byla zvolena jako střední teplota mezi pokojovou teplotou 300 K a teplotou 700 K, která byla naměřena termočlánekem na vyhřátém iontovém zdroji.

Teplota má na výsledky výpočtů velký vliv. Výpočet provedený pro teplotu  $T_n = 300$  K dává přibližně 8krát vyšší extrakční proud než pro teplotu 500 K. Tento jev byl pozorován i experimentálně (viz část 3.3.1), kdy na počátku měření, kdy byl zdroj studený, byl celkový proud svazku přibližně 3krát vyšší, než po vyhřátí zdroje. Toto chování souvisí se skutečností, že koncentrace neutrálních částic  $n$  závisí podle stavové rovnice na teplotě podle vztahu

$$n = \frac{p_n V}{k T_n}.$$

Při konstantním tlaku je při nižší teplotě vyšší koncentrace neutrálních částic a tedy i větší pravděpodobnost ionizace.

Při výpočtu pro teplotu 700 K by byla koncentrace neutrálních částic nižší než pro 500 K, pro kterou byl plyn ve výbojové komoře již na hranici označení plazma, a proto nebyly výpočty pro teplotu 700 K provedeny.

### 4.3 ŠÍŘENÍ IONTOVÉHO SVAZKU — PROGRAM EOD

Z výsledků simulace plazmatu pomocí PDC2D získáme počáteční parametry iontů na startovacím povrchu  $S$ : energiové a úhlové rozdělení iontů, teplotu elektronů  $T_e$ , potenciál plazmatu  $\Phi_p$  a extrakční proud  $I_e$ . To jsou spolu s tvarem elektrod a potenciály vstupní parametry simulace iontového svazku pomocí programu EOD.

Způsob výpočtu šíření iontového svazku programem EOD je uveden na obrázku 4.1. Iontový svazek je reprezentován konečným počtem iontů, z nichž každý nese část celkového proudu svazku. Během trasování iontu (řešení pohybové rovnice) vnějším polem elektrod je proud nesený iontem rozdělován do sítě pro výpočet potenciálu metodou „Particle-in-cell“ ([23], str. 30). Tím získáme hustotu (prostorového) náboje  $\rho_i$  pro řešení Poissonovy rovnice

$$\Delta\Phi = -\frac{\rho_i - \rho_e}{\varepsilon_0}. \quad (4.1)$$

V Poissonově rovnici vystupuje také hustota elektronů  $\rho_e$ , ta vychází z Boltzmannova rozdělení hustoty elektronů (2.1), a je upravena do tvaru

$$\rho_e = -c\rho_{i\max} \exp\left(\frac{e(\Phi - \Phi_p)}{kT_e}\right), \quad (4.2)$$

kde  $c$  je konstanta, kterou EOD mění tak, aby maximální potenciál v oblasti plazmatu byl roven potenciálu plazmatu.  $\rho_{i\max}$  je maximální hustota iontů v blízkosti emisního povrchu,  $T_e$  je teplota elektronů a  $\Phi_p$  potenciál plazmatu.

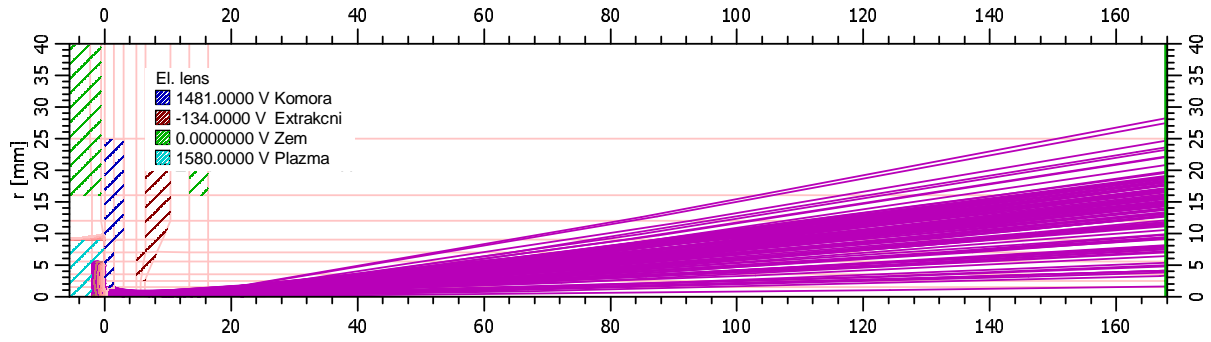
#### 4.3.1 Okrajové podmínky elektrostatického pole

Okrajové podmínky pro řešení elektrostatického pole jsou dány potenciály jednotlivých elektrod iontové optiky a tvarem elektrod tak, jak je uvedeno na obr. 3.1. Simulovaná oblast má rozměry  $z \in \langle -5,5; 168 \rangle$  mm,  $r \in \langle 0; 40 \rangle$  mm. Sít' metody konečných prvků s proměnným krokem má celkem 55 160 bodů. V místě extrakčního otvoru je krok sítě přibližně 0,06 mm, aby bylo možné správně spočítat elektrostatické pole, které se v této oblasti rychle mění. Dále od zdroje se krok sítě zvětšuje až na 3 mm. Přesnost určení potenciálu je diskutována v části 4.3.3.

Ve výbojové komoře iontového zdroje je navíc umístěna elektroda emisního povrchu  $S$  (název elektrody na následujících obrázcích je „plazma“), ze které jsou startovány ionty. Celá oblast výpočtu je zobrazena na obr. 4.6.

#### 4.3.2 Počáteční podmínky iontového svazku

Iontový svazek je reprezentován konečným počtem částic, které ho dostatečně přesně nahrazují. Každá částice nese část celkového proudu svazku tak, aby prou-



Obr. 4.6: Iontový svazek s vlivem prostorového náboje — trajektorie iontů (svazek reprezentován pouze ionty startujícími v 20 různých startovacích pozicích)

dová hustota byla na emisním povrchu konstantní. V našem případě je svazek iontů generován na povrchu elektrody „plazma“ kombinací počátečních parametrů určených simulací plazmatu programem PDC2D (viz část 4.2.2).

Vzhledem k tomu, že velké množství iontů vzniká na potenciálu nižším než je potenciál plazmatu, nemohou z plazmatu uniknout a zůstávají v něm. Extrahovány mohou být jen ty, které vznikly na potenciálu vyšším než potenciál plazmatu. Počáteční kinetická energie iontů na povrchu  $S$  je dána rozdílem potenciálu vzniku iontu a potenciálu plazmatu. Počáteční střední kinetická energie iontů potom je

$$E_{ks} = \Phi_s - \Phi_p = 2 \text{ eV}.$$

Vzhledem k tomu, že šířka rozdělení iontů podle potenciálu vzniku je 14 eV, pohybuje se kinetická energie iontů na hladině potenciálu plazmatu v rozsahu  $E_{ki} = E_{ks} \pm \Delta\Phi_s/2 = \langle -5; 9 \rangle$  eV. Ionty se zápornou kinetickou energií (ty, které nemohou z plazmatu uniknout) nelze v EOD nijak simulovat, protože iont nemůže mít zápornou energii. Proto jsou podmínky vzniku iontového svazku upraveny následovně:

- potenciál na emisním povrchu  $S$  není roven potenciálu plazmatu, ale je volen 1580 V (tedy o 10 V nižší, aby i kinetická energie nejpomalejších iontů byla kladná),
- energie iontů jsou voleny v rozsahu  $E_{ki} = \langle 10 + (-5); 10 + 9 \rangle = \langle 5; 19 \rangle$  eV.

Poloměr extrakčního otvoru je jen 1,5 mm, ionty jsou však startovány až do vzdálenosti 5,5 mm od optické osy, aby byl co nejlépe simulován potenciálový spád mezi plazmatem a výbojovou komorou i v oblasti blízko extrakčního otvoru. Ionty vznikající ve větších vzdálenostech od osy symetrie než  $r = 1,5$  mm mohou také opustit plazma.

### 4.3.3 Další podmínky výpočtu

Pohybová rovnice byla numericky integrována Rungeovou-Kuttovou metodou 7. řádu s kontrolou integračního kroku. Požadovaná relativní přesnost určení souřadnic a rychlostí byla zvolena  $10^{-8}$ , což představuje chybu celkové energie částice ve vzdálenosti 168 mm od emisního povrchu (délka simulované oblasti) kolem 0,01 eV, což je dostatečná přesnost při zachování přijatelné rychlosti výpočtu.

Elektrostatický potenciál byl metodou konečných prvků spočítán s relativní přesností  $10^{-10}$  vzhledem k maximálnímu potenciálu v síti, což znamená přesnost přibližně  $10^{-7}$  V. Výpočet potenciálu v síti s poloviční velikostí kroku a porovnáním jsem určit skutečnou přesnost výpočtu potenciálu přibližně 0,02 V.

Výpočet šíření svazku byl ukončen, pokud změna hustoty prostorového náboje iontů ve dvou následujících iteracích byla menší než 5 %, což představuje asi 20 iterací.

#### 4.3.4 Výsledky výpočtu

Výsledkem výpočtu programem EOD je iontový svazek vystupující ze zdroje (viz obr. 4.6).

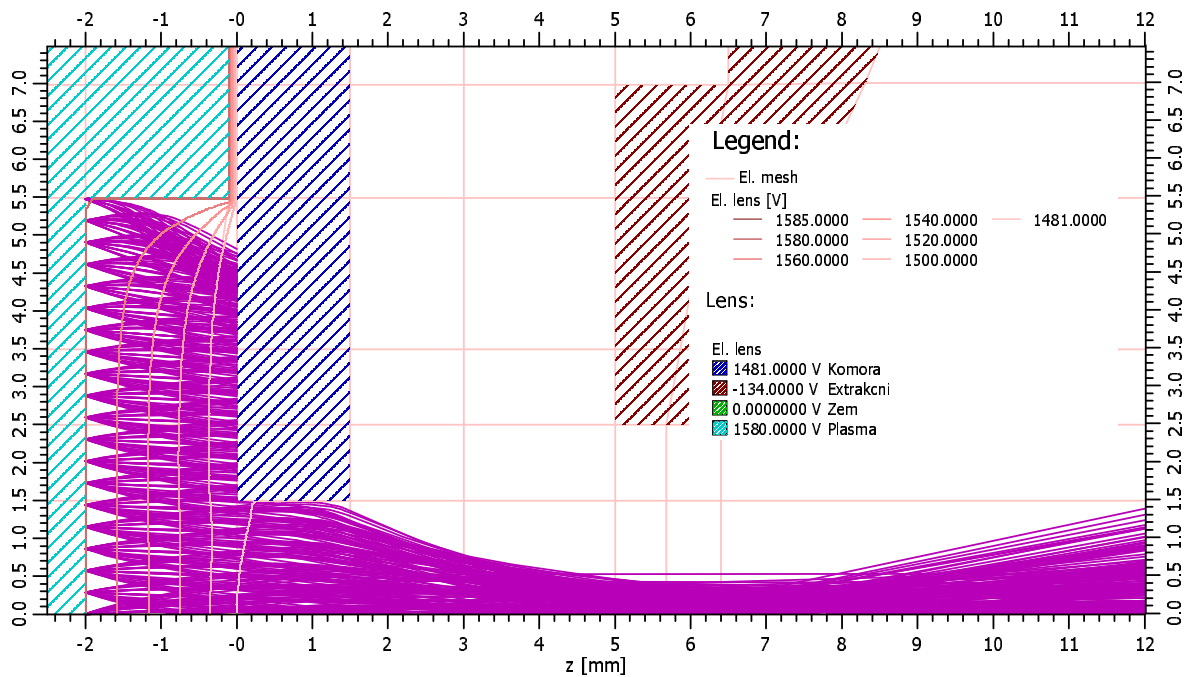
Vliv interakcí iontů můžeme pozorovat na detailu extrakční oblasti iontového zdroje. Na obrázcích 4.7 a 4.8 je vidět změna tvaru ekvipotenciál vlivem prostorového náboje. Všechny ekvipotenciály se vlivem prostorového náboje posouvají směrem k extrakční elektrodě. Ekvipotenciála s potenciálem emisního povrchu (1 580 V), která je v případě bez prostorového náboje totožná s povrchem elektrody „plazma“, se v přítomnosti prostorového náboje odděluje od elektrody. Tato ekvipotenciála prakticky určuje hranici plazmatu.

Větší hustota svazku s prostorovým nábojem v blízkosti osy je dána odpuzováním iontů svazku v blízkosti křižště  $z = 6$  mm (obr. 4.7). Prostorový náboj iontového svazku zde působí proti fokusačnímu účinku elektrostatického pole mezi komorou a extrakční elektrodou. Na obr. 4.8 je také vidět, že ionty s nízkou počáteční energií se vracejí zpět do plazmatu. Není zde však příliš patrné, že ionty startující ve větších vzdálenostech od optické osy procházejí na konci simulované oblasti blízko optické osy, zatímco ionty startující u osy procházejí ve větší vzdálenosti.

#### 4.3.5 Diskuze výsledků simulace a experimentu

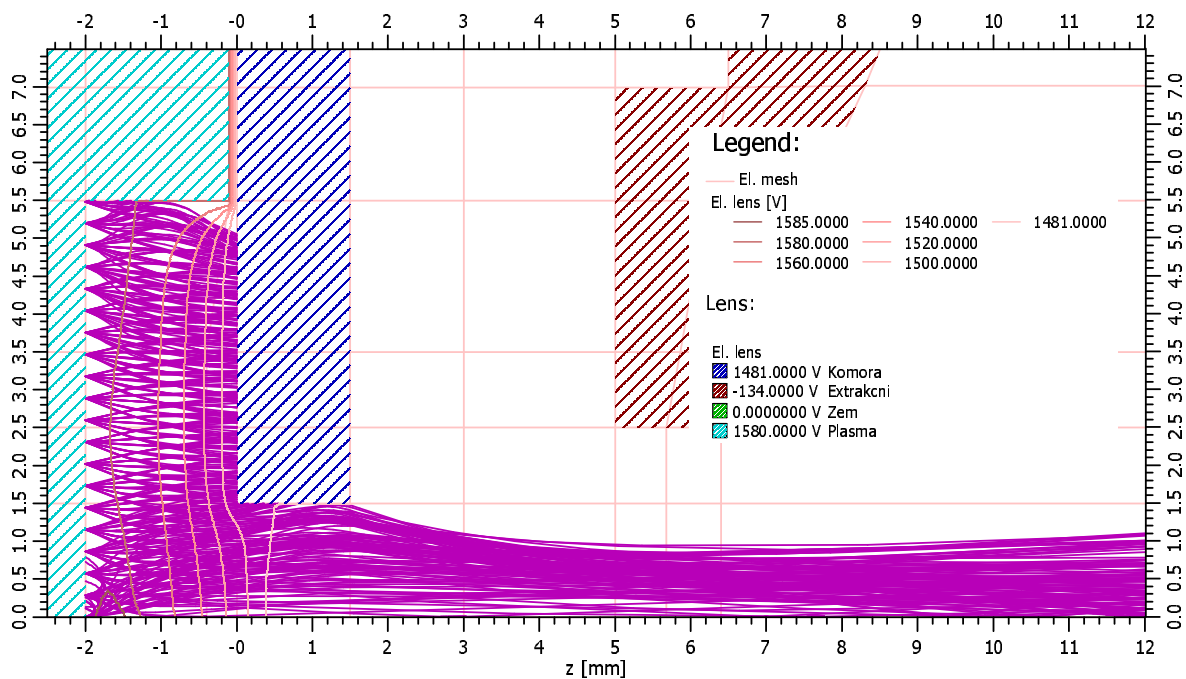
Výsledkem výpočtu šíření iontového svazku jsou profily proudové hustoty v místě měření Faradayovou sondou, tedy ve vzdálenosti  $z = 169$  mm, které by se měly shodovat s experimentálními výsledky, viz obr. 4.9. Profily proudové hustoty získané výpočtem jsou na obrázku vyhlazeny metodou lokálně vážené regrese a vyhlazení dat (LOWESS [2]).

Na obr. 4.9 jsou zobrazeny výsledky simulací pro různé parametry plazmatu spolu s experimentálními výsledky. Z porovnání výpočtu s experimentem je vidět, že výsledky vykazují jen přibližnou podobnost s experimenty. Závislost vypočtených profilů proudové hustoty na tlaku není tak výrazná, jak byla pozorována v experimentu, kdy se s rostoucím tlakem profil hustoty snižuje v blízkosti osy a rozšiřuje se v radiální vzdálenosti. U profilů pro tlak  $p_n = 0,12$  Pa je vidět, že nedosahují až k poloměru  $r = 0$  mm, je to důsledek toho, že v blízkosti optické osy neproletěl při simulaci žádný iont, takže proudová hustota na ose nemohla být určena.



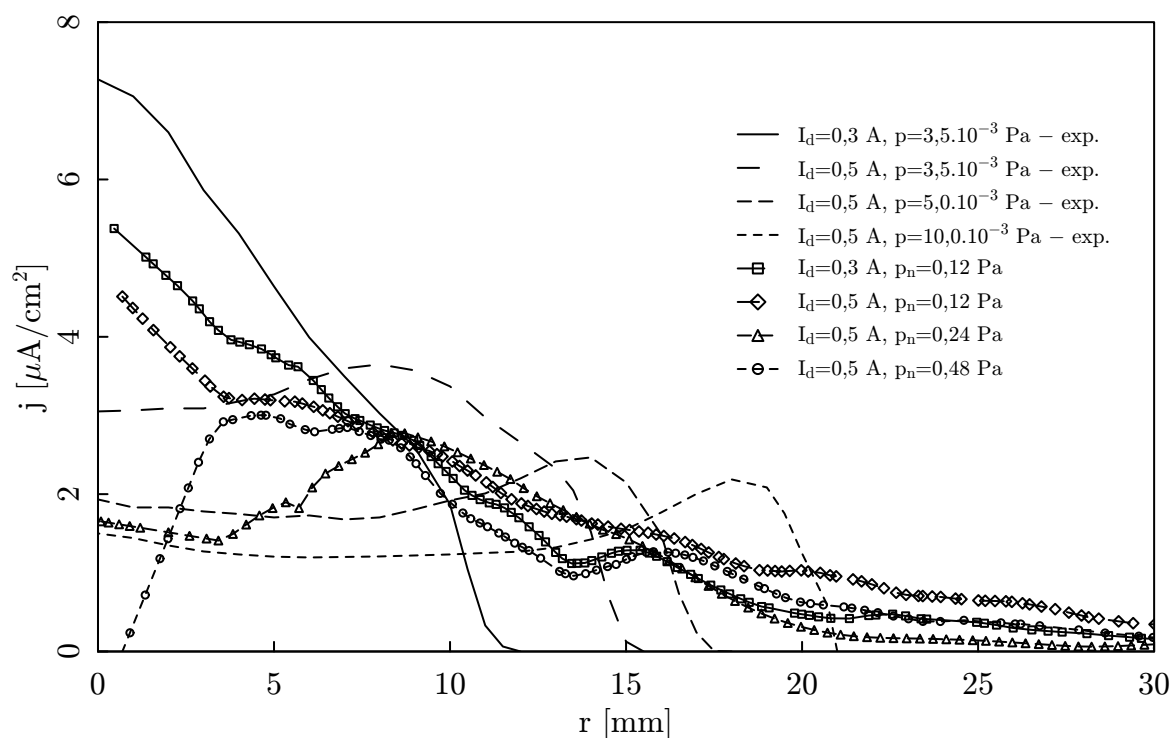
Obr. 4.7: *Iontový svazek bez vlivu prostorového náboje — detail extrakční oblasti s ekvipotenciálami a trajektoriemi iontů (svazek reprezentován pouze ionty startujícími ve 20 různých startovacích pozicích)*

Rozšiřování profilů proudové hustoty do velkých vzdáleností od osy ( $r > 20$  mm) je dáno ionty, které procházejí v těsné blízkosti okraje extrakčního otvoru a ještě do něj nenarazily. Touto skutečností je dán i pomalý pokles proudové hustoty.



Obr. 4.8: *Iontový svazek s vlivem prostorového náboje — detail extrakční oblasti s ekvipotenciálami a trajektoriemi iontů (svazek reprezentován pouze ionty startujícími ve 20 různých startovacích pozicích)*





Obr. 4.9: Srovnání profilu proudové hustoty iontového svazku získaného výpočtem s experimentem. Experimentální výsledky jsou znázorněny hladkými čarami (tlak  $p$  je tlak ve vakuové komoře). Odpovídající výsledky výpočtu s vlivem prostorového náboje jsou vyznačeny stejnou barvou (tlak  $p_n$  je tlak ve výbojové komoře)

Při vývoji nového iontového zdroje by získané výsledky jistě vyvolávaly pochybnosti o správnosti výpočtů nebo dokonce o správnosti celého algoritmu výpočtu. Určité pochybnosti o iontovém zdroji by však vyvolaly již simulace plazmatu, které ukázaly, že ionizovaný plyn ve zdroji je na hranici označení plazma a chování zdroje je tedy těžko předvídatelné. Bylo by nutné spočítat výsledky pro více tlaků  $p_n$ , aby bylo možné dělat závěry o závislostech.

Extrakční proud, který plazma dodává je kromě výbojového proudu  $I_d$  a tlaku  $p$  značně závislý i na teplotě  $T_n$  ve výbojové komoře (viz část 4.2.3) a lze předpokládat, že pokud bychom zvolili jinou teplotu neutrálních částic, mohli bychom získat lepší souhlas výpočtu s experimentem.

## 5 ZÁVĚR

Metoda simulace plazmatu ve výbojové komoře pomocí programu PDC2D a následného výpočtu šíření iontového svazku programem EOD umožňuje celkový výpočet plazmatického iontového zdroje bez nutnosti předpokládat parametry iontového zdroje. Jediným vstupem metody je zadání tlaku ve výbojové komoře, výbojového proudu, teploty ve výbojové komoře, tvaru a potenciálů elektrod. Výsledkem je jak znalost parametrů plazmatu ve výbojové komoře, tak i proudu iontového svazku a jeho energiového a úhlového rozdělení.

Výpočty iontového zdroje aparatury pro přímou depozici tenkých vrstev dávají podobné výsledky jako experiment (viz část 4.3.5). Závislosti chování vypočtených profilů proudové hustoty na změnách tlaku nejsou tak výrazné jako u experimentálních výsledků. Přesto lze říci, že simulace dává dobré výsledky, uvážíme-li, že jde o výpočet, který vychází pouze z provozních parametrů iontového zdroje.

V části 4.2.2, věnované simulaci plazmatu, byla určena Debyeova délka  $\lambda_D$  rovna pouze třetině velikosti výbojové komory. Současně plazma v iontovém zdroji vykazuje velmi nízký stupeň ionizace a velkou střední volnou dráhu elektronů. Z toho lze vyvodit, že ionizovaný plyn ve výbojové komoře nevykazuje ideální vlastnosti plazmatu.

Jako testovací příklad pro vývoj algoritmů byl tedy zvolen značně komplikovaný případ, který se však podařilo vcelku uspokojivě vyřešit. Při výpočtech jsem u programu PDC2D narazil na problémy s konvergencí, které byly způsobeny značným kolísáním hustoty náboje v důsledku malého počtu testovacích částic. Zvýšení jejich počtu by vedlo k velkému prodloužení doby simulace. Ukazuje se, že pro simulaci plazmatu bude nutné použít modernější program, který řeší problém kolísání hustoty částic například časovým středováním.

Z výsledků simulace vyplývají následující závěry pro změny v iontovém zdroji. Především je nutné zvýšit hustotu částic ve výbojové komoře, čímž dojde ke zvýšení stupně ionizace plynu. Zvýšení hustoty částic lze dosáhnout buď zmenšením průměru extrakčního otvoru (zmenšení vakuové vodivosti) nebo chlazením zdroje. Zmenšení extrakčního otvoru by kromě zvýšení hustoty plazmatu přineslo i zmenšení velikosti virtuálního zdroje a tím i lepší možnosti dalšího zpracování iontového svazku. Pro zvýšení stupně ionizace by také bylo vhodné umístit zdroj do magnetického pole a tím prodloužit dráhu elektronů. Od zvětšení stupně ionizace očekávám také mnohem menší fluktuační potenciálu a snížení energiové šířky iontového svazku.

Simulace plazmatu dává proud svazku kolem  $50 \mu\text{A}$ , kdežto skutečně měřený proud je přibližně poloviční. Velké proudové ztráty způsobuje nevhodný tvar extrakčního otvoru, do jehož stěny naráží velká část extrahovaného svazku. Optimalizaci tvaru elektrod iontového zdroje se ve své doktorské práci věnuje S. Voborný [19], jehož výsledky potvrzují závěry simulace iontového zdroje.

## LITERATURA

- [1] Busch, H. Berechnung der Bahn von Kathodenstrahlen im Axialsymmetrischen elektromagnetischen Felde. *Ann. d. Phys.* 1926, vol. 81, no. 25, p. 974–993.
- [2] Cleveland, W. S. LOWESS: A program for smoothing scatterplots by robust locally weighted regression. *The American Statistician.* 1981, 35, p. 54.
- [3] Harriott, L. R., Berger, S. D., Liddle, J. A., Watson, G. P., Mkrtchyan, M. M. Space charge effects in projection charged particle lithography systems. *J. Vac. Sci. Technol. B.* 1995, 13, 6, p. 2 404–2 408.
- [4] Humphries, S. Jr. Charged Particle Beams. 1st edition, London: J. Wiley & Sons, 1990.
- [5] Chen, F. F. Úvod do fyziky plazmatu. 1. vydání, Praha: Academia, 1984.
- [6] Jansen, G. H. Coulomb interactions in particle beams. *PhD thesis.* Technical University, Delft, 1988.
- [7] Jánský, P. Výpočty a konstrukce iontově optických prvků. *Diplomová práce.* Vysoké učení technické, Brno, 2002.
- [8] Jánský, P., Lencová, B., Zlámal, J. Calculations of Intensive Electron Source for Electron Beam Welding. *Proceedings of Microscopy Conference 2003, International Forum for Advanced Microscopy.* 2003.
- [9] Lejeune, C. Extraction of High-Intensity Ion Beams from Plasma Sources: Theoretical and Experimental Treatments In: Septier, A. *Applied Charged Particle Optics, Part C.* New York: Academic Press, 1983.
- [10] Lencová, B. Computation of electrostatic lenses and multipoles by the first order finite element method. *Nucl. Instr. Meth. In Phys.* 1995, A 363, p. 190–197.
- [11] Lencová, B. Accurate computation of magnetic lenses with FOFEM. *Nucl. Instr. Meth. In Phys.* 1999, A427, p. 329–337.
- [12] Lencová, B., Zlámal, J. New CAD program for design in electron optics. In: *Proceedings of the 12th European Congress on Electron Microscopy, Ed. Frank, L., Ciampor, F.* 2000, III, ISBN 80-238-5503-4.
- [13] Petillo, J. J., Mondelli, A. A. Global and stochastic space-charge effects in ion beam lithography. *J. Vac. Sci. Technol. B.* 1995, 15, 5, s. 2409–2413.
- [14] Plojhar, M. Simulace nízkoteplotního plazmatu. *Diplomová práce.* Vysoké učení technické, Brno, 2003, (školitel Jakub Zlámal) .
- [15] Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., Flannery, B. P. Numerical Recipes in FORTRAN 77, The Art of Scientific Computing. 2nd ed., Cambridge: Cambridge University Press, 1992.
- [16] Šikola, T. Modification of Surfaces and Deposition of Thin Films by Ion Beams; In Situ Analysis of Surfaces and Thin Films. *Habilitační práce.* Vysoké učení technické, Brno, 1997.
- [17] Verboncoeur, J. P., Vahedi, V., Alves, M. V. PDP1-PDC1 version 2.1, Plasma Theory Simulation Group, Electronic Research Laboratory, Cory Hall, University of California Berkeley, CA 94720, <http://ptsg.eecs.berkeley.edu> .

- [18] Voborný, S. Diagnostika parametrů fokusovaného iontového svazku v UVV zařízení pro depozici a analýzu tenkých vrstev. *Diplomová práce*. Vysoké učení technické, Brno, 1998.
- [19] Voborný, S. Diagnostics and optimization of parameters of ion-based equipment and its application for thin films depositions. *Treatise to state doctoral exam*. Vysoké učení technické, Brno, 2003.
- [20] Whealton, J. H., Jaeger, E. F., Whiston, J. C. Optics of Single-stage accelerated ion beams extracted from a plasma. *Rev. Sci. Instrum.* 1977, 48, 7, s. 829–831.
- [21] Yamabe, C., Buckmanm, S. J., Phelps, A. V. Measurement of free-free emission from low-energy-electron collisions with air. *Phys. Rev. A.* 1983, 3, 27, p. 1 345–1 352.
- [22] Zlámal, J. Simulace elektrostatických iontově optických systémů. *Dizertační práce*. Vysoké učení technické, Brno, 2003.
- [23] Zlámal, J. 3D simulace elektrostatických iontově optických systémů. *Diplomová práce*. Vysoké učení technické, Brno, 1996.

## 6 CURICULUM VITAE

Narodil jsem se 4. května 1973 v Boskovicích, jsem ženatý, trvalé bydliště mám v Brně.

Základní školu v Blansku jsem navštěvoval od roku 1979. Po jejím ukončení jsem studoval na Gymnáziu v Blansku. V květnu 1991 jsem s vyznamenáním složil maturitní zkoušku.

Od školního roku 1991/92 jsem studoval na FS VUT v Brně obor Fyzikální inženýrství. V roce 1996 jsem obhájil diplomovou práci s názvem *3D simulace elektrostatických iontově optických systémů*. Za vynikající studijné výsledky mi byla udělena cena děkana.

Po ukončení studia v roce 1996 jsem byl přijat k doktorskému studiu na Ústavu fyzikálního inženýrství FSI VUT v Brně (obor Fyzikální a materiálové inženýrství). Tématem mého doktorského studia je *Simulace elektrostatických iontově optických systémů*. Mou školitelkou je doc. RNDr. Bohumila Lencová, CSc.

Od roku 1999 jsem zaměstnancem Fakulty strojního inženýrství VUT v Brně. Podílím se na výuce teoretických a laboratorních cvičení z fyziky, přednáším a vedu cvičení předmětů *Přesná mechanika I a II* a *CAD-S*.

V Brně 24. června 2004

Jakub Zlámal

## 7 SUMMARY

The thesis describes the methods used to design plasmatic ion sources. It is based on the work of J. H. Whealton [20]. Simulation of the ion source is split into two stages. In the first stage we simulate plasma inside the ion source discharge chamber. The basic plasma parameters such as ion and electron concentration, electron temperature and plasma potential are obtained as the results of plasma simulation. The most important parameters for ion beam formation are the energy and angular distributions of ions and the total ion beam current. The second stage consists in simulation of ion beam propagation under the influence of space charge. For this two new programs were written, PDC2D for the simulation of the plasma and EOD for the simulation of the ion beam propagation.

The methods and programs developed in this Thesis were used to characterize the plasmatic ion source of the apparatus for the deposition of thin films [16]. We expected to obtain answers to the problem of short life of the ion source and improve its performance.

Ion beam current density profiles of the ion source for the deposition of thin films were measured for different discharge currents and gas pressures to obtain dependencies of the properties of ion beam on ion source parameters. Current density profiles of the ion beam extracted from plasma, obtained by the simulation, were compared with the experimental results. They give a good agreement for the total value of the ion beam current but the dependencies of the beam profiles on the pressure and on the changes of the discharge current are not in the full agreement with the experimental ones.

The main reason for the differences between the simulation and experiment is caused by the poor ion source design; the ionized gas in the source does not fulfill the basic properties of plasma, because the Debye length is about one third of the discharge chamber length. Several suggestions for the improvement of the ion source came out from the simulation results. First, the electron mean free path must be extended, for example by applying magnetic field, by increasing the gas pressure or by cooling the ion source, in order to improve the degree of ionization and so to increase the total ion current. Second, the hole in the extraction electrode of the ion source must be reshaped to avoid high ion current losses (see [19]).