

# 溅射离子泵抽气单元放电及离子输运仿真

宁久鑫, 黄海龙, 王晓冬, 孙 浩

(东北大学 机械工程与自动化学院, 辽宁 沈阳 110819)

**摘 要:** 基于有限元法,对溅射离子泵抽气单元内气体放电及离子输运过程进行了研究.采用商业软件COMSOL Multiphysics将等离子体模块、磁场模块、带电粒子追踪模块进行耦合,计算得到阳极筒内电子密度的分布规律.研究了气体压强、阳极电压、磁场强度等参数对电子密度的影响,追踪了离子在不同压强下的运动轨迹,得到了离子对阴极板的入射角度和冲击能量.将仿真结果代入到理论抽速计算公式中,所得结果与实验数据进行对比,两者具有很好的一致性,验证了仿真模型的准确性.对离子泵结构设计和性能优化提供了一种适用方法.

**关 键 词:** 溅射离子泵;离子输运;多物理场耦合;仿真分析;抽气速率

中图分类号: TB 752

文献标志码: A

文章编号: 1005-3026(2020)07-0962-06

## Simulation Investigation on Discharge and Ion Transport of Pumping Units for Sputter Ion Pumps

NING Jiu-xin, HUANG Hai-long, WANG Xiao-dong, SUN Hao

(School of Mechanical Engineering & Automation, Northeastern University, Shenyang 110819, China.

Corresponding author: WANG Xiao-dong, E-mail: xdwang@mail.neu.edu.cn)

**Abstract:** Based on the finite element method(FEM), the discharge and ion transport processes of the sputter ion pumping units were studied. The plasma module, the magnetic field module, and the charged particle tracking module were coupled by COMSOL Multiphysics. The distribution law of electron density in the anode cylinder was obtained. The effects of parameters such as pressure, anode voltage and magnetic field strength on electron density were investigated. The trajectories of the ions at different pressures were tracked, and the impact energy and angle of the ions to the cathode plates were obtained. The obtained parameters were then applied to the theoretical pumping speed calculation and the results were compared with the experimental pumping speed. They have good consistency and verify the accuracy of the simulation model, which provides a suitable method for structural design and performance optimization of sputter ion pumps.

**Key words:** sputter ion pump; ion transport; multiphysics coupling; simulation analysis; pumping speed

溅射离子泵(简称离子泵)是一种广泛应用于超高真空领域的真空获得设备<sup>[1]</sup>,由Hall<sup>[2]</sup>于20世纪50年代发明并发展出一系列理论.离子泵的抽气过程主要分为潘宁放电和气体捕集两部分.其在工作时,利用高强度的电磁场将电子束缚在每个抽气单元中,大幅度地增加气体分子与电子的碰撞几率,不断产生二次电子和离子.生成的

离子在阴极板处发生溅射现象<sup>[3]</sup>,活性气体与溅射出来的阴极材料发生化学反应在阳极表面形成化合物,惰性气体大部分于阳极表面被掩埋,少部分注入到阴极深处.

离子泵在工作过程中无噪声、无振动,不会产生油污染,结构简单、寿命长、极限真空度高且工作压力范围宽,被广泛地应用于离子加速器、医疗

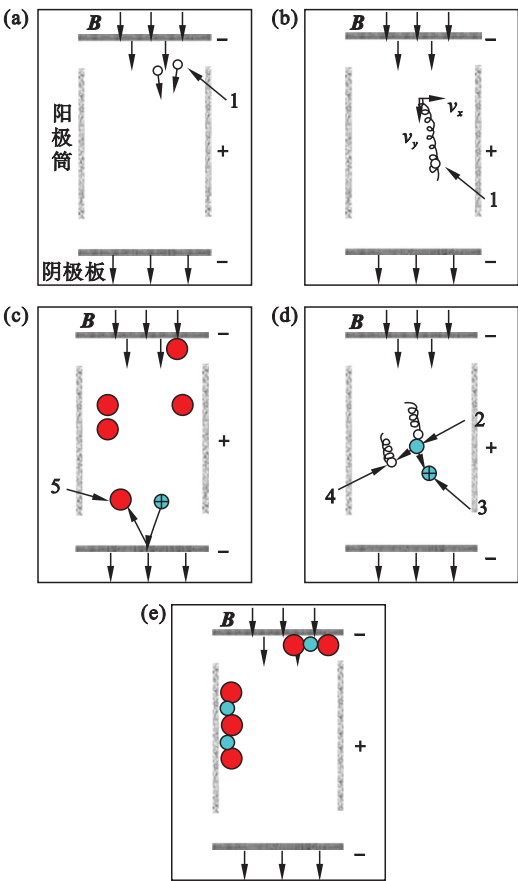
器械、微机电系统和大型超高真空系统等<sup>[4-6]</sup>. Sigmund<sup>[7]</sup>建立的溅射理论系统地阐述了非晶体和多晶体靶材的溅射计算,为进一步计算抽速提供了理论基础. Eninger<sup>[8]</sup>利用实验方法研究了磁场强度和磁场分布对潘宁放电的电子云形成的影响. Rohwer 等<sup>[9]</sup>研究了潘宁放电从高压到低压的几种不同放电模式. Porcelli 等<sup>[10]</sup>利用扫描电镜对阴极板的表面形貌进行了检测,观测了阴极板表面的锥状结构,并分析了阴极板不同深度处的元素构成. 然而,已发表文献中对于离子泵抽气单元内放电时离子输运过程的研究并不充分.

本文基于有限元法对离子泵抽气单元的放电及离子输运进行了研究,采用商业软件 COMSOL Multiphysics 中的离子体模块、磁场无电流模块、带电粒子追踪模块进行耦合. 以氮气作为被抽气体,分析不同压强下离子泵抽气单元中电子密度分布及氮离子在电磁场作用下的运动轨迹和阴极表面氮离子的入射角度和冲击能量. 以模拟结果为基础进行理论抽速计算<sup>[11]</sup>,并与实验数据进行对比,以验证数值模型的适用性.

## 1 溅射离子泵抽气原理

溅射离子泵抽气单元的结构简单,主要由两个平行的阴极钛板、一个不锈钢的阳极筒组成. 其抽气原理如图 1 所示. 当电源启动时,阴极板与阳极筒之间产生较高电压,阴极与阳极之间距离较近,抽气单元内具有较大的电场强度. 此时阳极筒内部的自由电子发生隧穿效应,穿过比它动能更高的势垒逸出阳极表面,形成场致发射<sup>[12]</sup>.

抽气单元中存在较强的电磁场,导致场致发射产生的自由电子具有径向速度  $v_x$  和轴向速度  $v_y$  两个速度分量,电子在抽气单元内作周期性的轮滚线运动. 大量自由电子在阳极筒内高速往复运动,形成电子云,提高了气体分子的电离几率. 气体分子电离后会产生阳离子和二次电子<sup>[13]</sup>,二次电子使损耗的电子得到补偿,并在电磁场的作用下继续作周期性的轮滚线运动. 阳离子在电磁场的作用下加速向阴极板运动,轰击阴极表面,形成较为强烈的溅射<sup>[14]</sup>. 阴极板中大量的钛原子被轰击出来,大部分钛原子会沉积于阳极筒表面,形成新鲜的钛膜. 活性气体会与钛膜发生化学反应形成化合物,惰性气体大部分被钛原子层掩埋在阳极筒内壁,少部分以离子状态注入到阴极板深处.



1—电子; 2—气体分子; 3—阳离子;  
4—二次电子; 5—钛原子.

图 1 溅射离子泵抽气原理图

Fig. 1 Pumping principle diagram of sputter ion pumps

- (a) —场致发射放电;
- (b) —电子轮滚线运动;
- (c) —碰撞产生二次电子和阳离子;
- (d) —离子入射及原子溅射;
- (e) —原子掩埋与吸附.

## 2 数值模型

### 2.1 控制方程

本文利用玻尔兹曼传输方程<sup>[15]</sup>来描述电子在气体中的传输过程,进而得到电子能分布函数、约化电子迁移率等参数,其控制方程<sup>[16]</sup>为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f - \frac{e}{m} (\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f) = C[f]. \quad (1)$$

其中: $f$ 为电子分布函数; $\mathbf{v}$ 为电子漂移扩散速度; $\mathbf{E}$ 为电场强度; $C[f]$ 为碰撞引起的电子分布变化率. 电子密度在空间中改变率的表达式为

$$\frac{\partial}{\partial t}(n_e) + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_e = R_e - (\mathbf{u} \cdot \nabla) n_e. \quad (2)$$

式中: $n_e$ 为电子密度; $\mathbf{\Gamma}_e$ 为电子流量矢量; $R_e$ 为电子源项; $\mathbf{u}$ 为中性粒子流速度矢量. 对于耦合电磁场利用麦克斯韦方程组来计算:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0, \tag{4}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}, \tag{5}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{B} = \mu_0 \boldsymbol{J} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t}. \tag{6}$$

式中: $\rho$  为电荷密度; $\boldsymbol{B}$  为磁场强度; $\mu_0$  为空间磁导率; $\boldsymbol{J}$  为电流密度.

离子在空间中的受力方程为

$$\boldsymbol{F}_i = \boldsymbol{E}q + (\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}), \tag{7}$$

$$\boldsymbol{F}_i \Delta t = m \Delta \boldsymbol{v}. \tag{8}$$

式中: $\boldsymbol{F}_i$  为  $\Delta t$  时间步长内受到的电磁场力; $q$  为电子电量.

2.2 几何结构及网格化

本文将溅射离子泵的一个抽气单元作为分析对象,基于有限元法(FEM)对抽气单元中的潘宁放电进行三维瞬态模拟.图2为抽气单元的三维模型和三维网格划分.

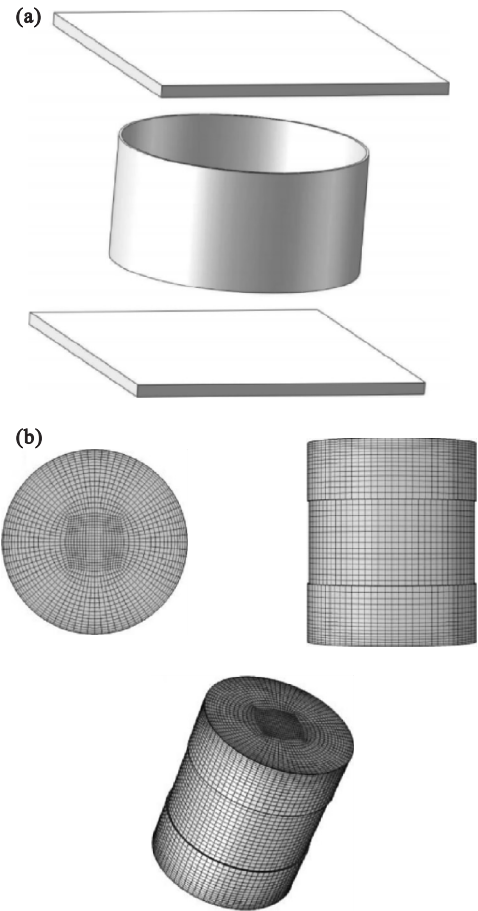


图2 数值计算几何结构及网格模型  
Fig. 2 Numerical calculation of geometric structure and mesh model  
(a)—抽气单元三维模型;(b)—放电区域及网格划分.

图2间隙大小为7 mm,阳极筒高度为10 mm,阳极筒外壁半径为10.2 mm.计算域采用四面体和六面体网格相结合的方法进行划分,并

对中心主要的放电区域进行网格加密,网格总数约为30 000,网格无关性验证如图3所示,经验证可以保证计算的准确性.

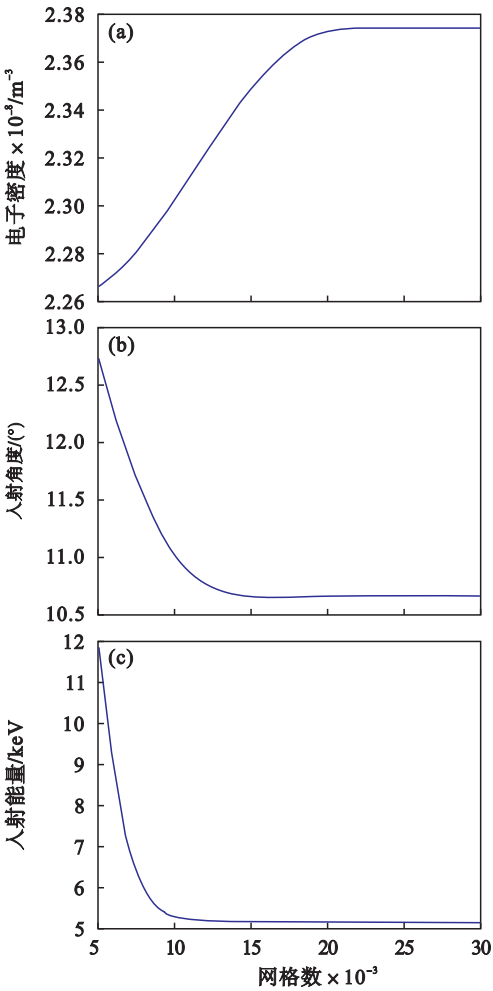


图3 网格无关性验证  
Fig. 3 Grid independence verification  
(a)—电子密度与网格数的关系;  
(b)—入射角度与网格数的关系;  
(c)—入射能量与网格数的关系.

2.3 参数设置

阳极筒电压( $V_a$ )为7 000 V,阴极板接地,磁场强度为0.18 T,放电气体为氮气,气体温度为300 K,间隙处设为电子出口,阴极板的壁面条件设为冻结,时间步长为 $10^{-8+0.008n}$  ( $n=0,1,2 \cdots$ ),采用指数分布的时间步长既能提高计算精度,又可以缩短计算时间.本文中所有的数值模拟均在COMSOL Multiphysics 5.2a 中进行.

3 结果与讨论

3.1 压强对电子密度的影响

图4 为不同压强下沿阳极筒中线的纵向界面的电子密度分布云图.由图中可以看出,电子密度

在阳极附近时较小,在中轴附近较大. 当真空度较低,即压强较大时,放电区域较宽,电子较为分散,电子密度云图呈现出横向的椭圆形. 当真空度升高,即压强降低时,放电区域向中心轴附近靠近,电子在中轴线附近聚集,电子密度云图也发生较大变化,其在靠近阴极板的两侧呈现出尖点状. 主要是在阳极附近的电子具有较高的能量,导致其回转半径较大,很容易被阳极吸收.

当真空度较低时,电子的碰撞频率比较大,电子更容易与气体分子碰撞,使气体电离,并产生二次电子,使区域的电子密度得到维持. 当真空度较高时,电子的碰撞频率较低,阳极附近的电子由于回转半径大很快被吸收,而中轴线处的电子由于能量小,回转半径小,被磁场约束在中心轴处.

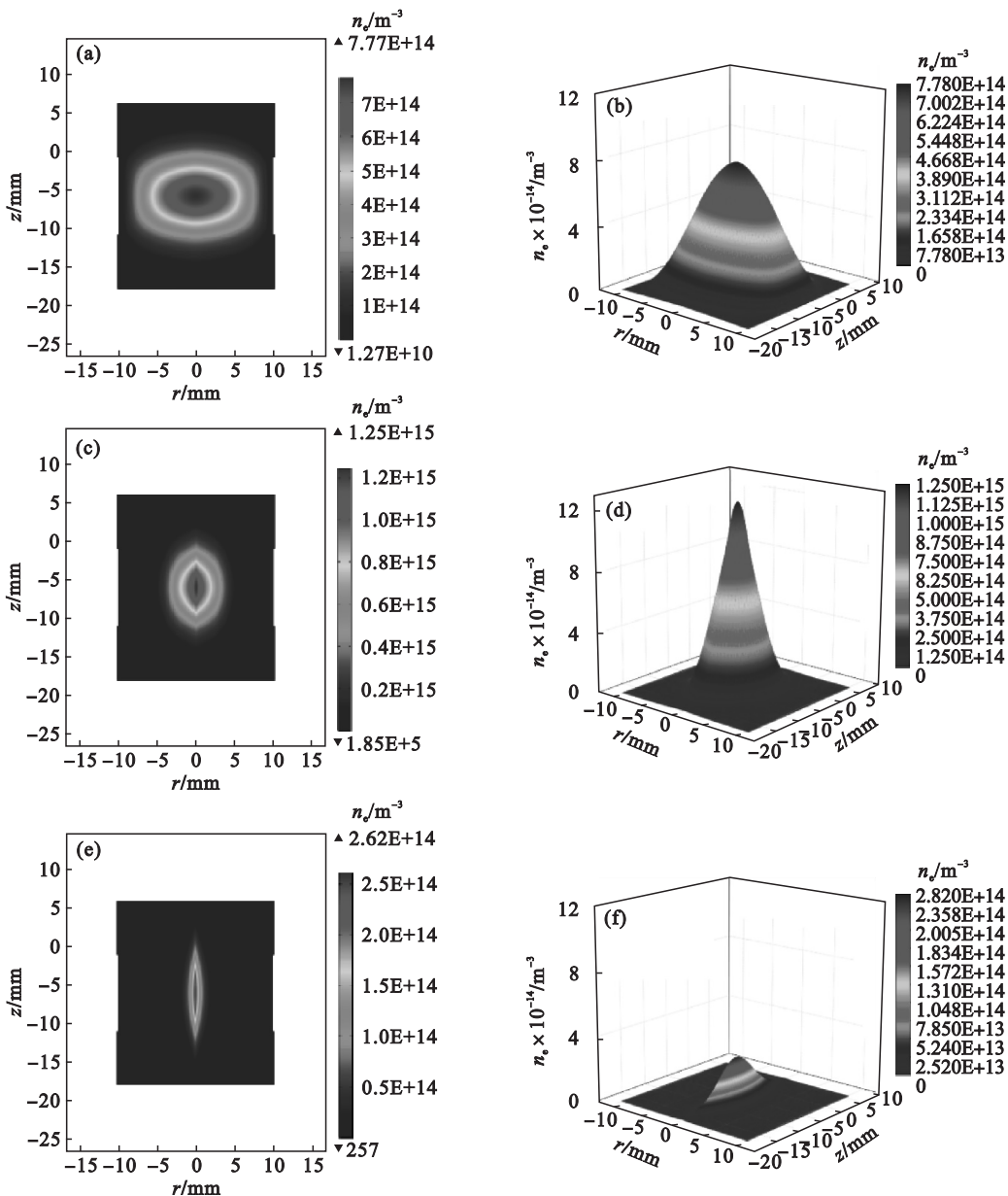


图 4 电子密度分布( $r$ 为半径, $z$ 为高度)  
Fig. 4 Distribution of electron density( $r$  is radius; $z$  is height)  
(a),(b)— $10^{-3}$  Pa;(c),(d)— $10^{-5}$  Pa;(e),(f)— $10^{-7}$  Pa.

### 3.2 阳极电压和磁场强度对电子密度的影响

保持其他参数不变,压强为  $10^{-5}$  Pa 时,考虑阳极电压变化 ( $V_a = 3\,000, 7\,000, 11\,000, 15\,000, 19\,000$  V) 对阳极筒内电子密度的影响. 图 5 为不同阳极电压下阳极筒中心轴线上的电子密度. 由

图 5 可见,中轴线上的电子密度呈抛物线分布,当压强增大时,中轴线上的电子密度大小呈现出整体上升的趋势,其中电压由  $3\,000$  V 上升到  $7\,000$  V 时,电子密度上升较为明显,当电压大于  $7\,000$  V 时,随着电压的增大电子密度上升缓慢.



保持其他参数不变,压强为  $10^{-5}$  Pa 时,考虑磁场强度变化( $B=0.1,0.2,0.3,0.4,0.5$  T)对阳极筒内电子密度的影响.图 6 为不同磁场强度下阳极筒中心轴线上的电子密度.由图 6 可以看出,磁场越强,电子的回转半径越小,受到磁场的约束越大,因此中轴线上的电子密度会随着磁场强度的增大而增大,其中,当磁场强度从 0.2 T 上升到 0.3 T 时,电子密度上升较为明显.

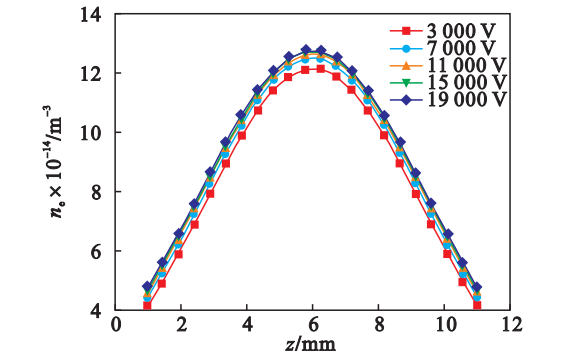


图 5 不同电压下阳极筒中轴线上的电子密度( $z$  为高度)  
Fig. 5 Electron density on the central axis of anode cylinder under different voltage ( $z$  is height)

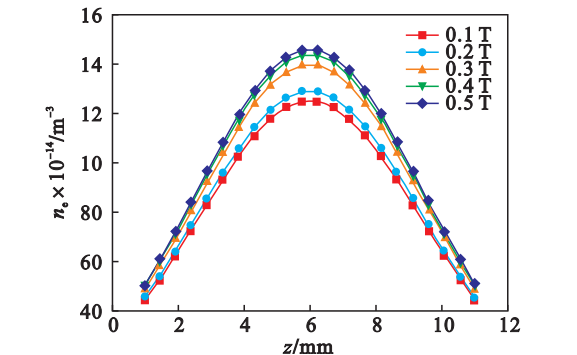


图 6 不同磁场强度下阳极筒中轴线上的电子密度( $z$  为高度)  
Fig. 6 Electron density on the central axis of anode cylinder under different magnetic field intensity ( $z$  is height)

3.3 压强对离子输运的影响

图 7 为不同压强下氮离子在阳极筒截面的运动轨迹云图.图中比较清晰地展现了离子的运动路径,以及冲击到阴极板处的位置情况.在真空度较低时,离子的位置比较分散,运动到阴极的位置范围较宽.当真空度升高时,离子冲击阴极板的位置开始向中轴线附近靠近,主要集中在轴径小于 5 mm 的范围内.为了更清晰地表现出离子冲击阴极板的状态,将各时刻冲击阴极板的离子的能量与入射角度进行平均值计算,得到了不同时刻阴极板表面离子的平均冲击能量和平均入射角度,如图 8 所示.由图中可以清晰地看出,随着真空度

的升高,平均冲击角度(与垂直方向的夹角)逐渐减小,冲击能量逐渐减小.其中当压强减小到  $10^{-7}$  Pa 时,离子的平均入射角度基本接近 0,即当真空度提高到一定程度,可以认为离子为垂直入射.

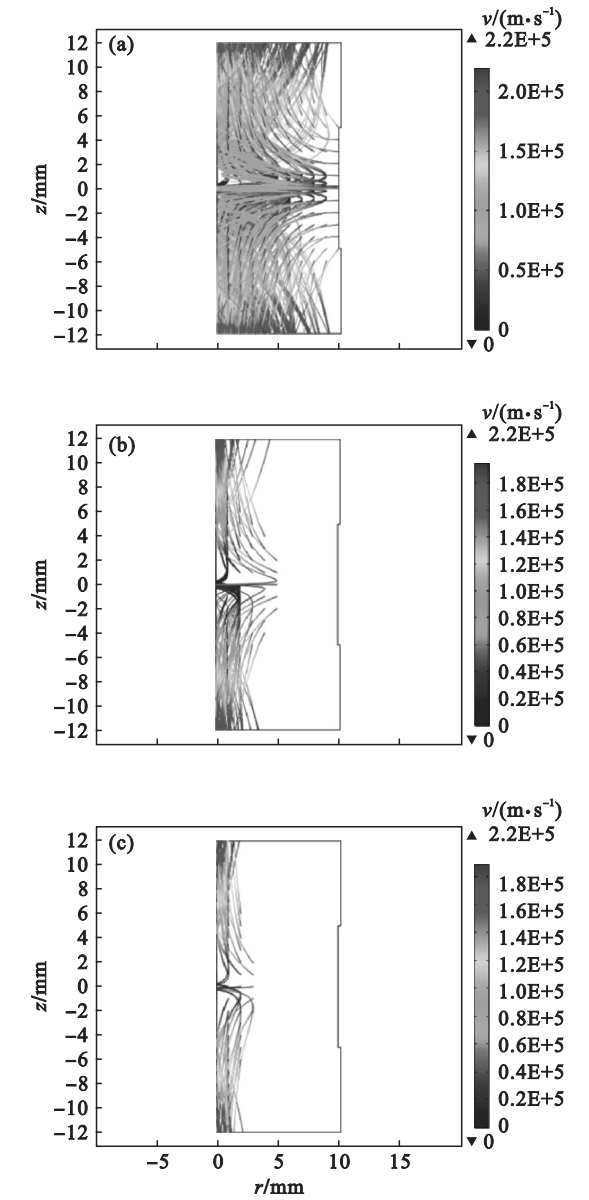


图 7 不同压强下氮离子在阳极筒截面的运动轨迹  
Fig. 7 Trajectories of nitrogen ions in the cross section of anode cylinder under different pressures  
(a)— $10^{-3}$  Pa; (b)— $10^{-5}$  Pa; (c)— $10^{-7}$  Pa.

3.4 理论与实验抽速结果分析

将仿真结果代入离子泵理论抽速计算公式中<sup>[11]</sup>,得到理论抽速曲线.通过小孔法对 100 L 离子泵的抽速进行实验测试.图 9 为理论抽速与实验抽速的对比图.从图中可以看出,理论抽速与实验抽速均呈现出随着真空度的升高先升后降的变化趋势.由于测试所用的离子泵各个阳极筒外壁采用点焊连接,邻近的阳极筒外壁之间有可能

形成放电空间,因此,实验结果略大于理论计算值(最大误差小于 12%),抽速曲线基本吻合,仿真模型可靠.

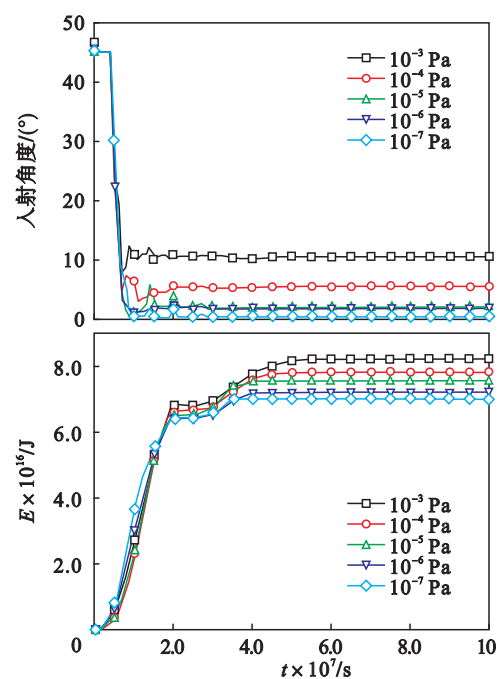


图 8 不同压强下氮离子在阴极表面的入射角度与冲击能量  
Fig. 8 Incident angle and impact energy of nitrogen ions on the cathode surface under different pressures  
(a)—入射角度;(b)—冲击能量.

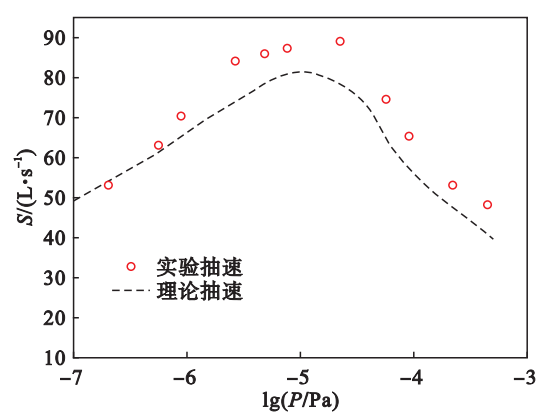


图 9 理论抽速与实验抽速  
Fig. 9 Theoretical pumping speed and experimental pumping speed

## 4 结 论

- 1) 离子泵阳极筒内放电产生的电子主要分布在中轴附近,并且真空度越高电子聚集得越明显.
- 2) 阳极筒中轴线上的电子密度呈抛物线分布,且随着磁场强度和电场强度的增加而增大.
- 3) 随着真空度的升高,离子冲击阴极板的区域主要集中在轴径小于 5 mm 的范围内,且真空

度越大,离子入射角度和冲击能量越小,离子越接近于垂直入射.

4) 模拟计算的结果与实验结果吻合较好,误差在合理范围之内,证明了仿真模型的可靠性,对以后离子泵的设计与优化具有一定价值.

## 参考文献:

- [1] 杨乃恒. 真空获得设备[M]. 北京:冶金工业出版社,1987. (Yang Nai-heng. Vacuum production device [M]. Beijing: Metallurgical Industry Press,1987. )
- [2] Hall L D. Electronic ultra-high vacuum pump[J]. *Review of Scientific Instruments*,1958,29(5):367–370.
- [3] 杨树贵,周卓. 反应磁控溅射离子镀 TiN 膜的工艺参数[J]. 东北工学院学报,1987,8(3):376–380. (Yang Shu-gui,Zhou Zhuo. Technological parameters of TiN-ion sputter coating using reaction magnetron [J]. *Journal of Northeast University of Technology*,1987,8(3):376–380. )
- [4] Vesel A, Mozetic M, Kovac J, et al. XPS study of the deposited Ti layer in a magnetron-type sputter ion pump[J]. *Applied Surface Science*,2006,253(5):2941–2946.
- [5] Williamson A, Rivnay J, Kergoat L, et al. Epilepsy treatment: controlling epileptiform activity with organic electronic ion pumps[J]. *Advanced Materials*,2015,27(20):3138–3144.
- [6] Green S R, Malhotra R, Gianchandani Y B. Sub-torr chip-scale sputter-ion pump based on a Penning cell array architecture[J]. *Journal of Microelectromechanical Systems*, 2013,22(2):309–317.
- [7] Sigmund P. Theory of sputtering: I. sputtering yield of amorphous and polycrystalline targets[J]. *Physical Review*, 1969,184(2):383–416.
- [8] Eninger J E. Experimental investigation of electron cloud containment in a nonuniform magnetic field [R]. Massachusetts:Avco-Everett Research Laboratory,1974.
- [9] Rohwer P,Baumann H,Schütze W,et al. Studies of the center potential in a Penning discharge[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*,1983,211(2/3):543–546.
- [10] Porcelli T, Siviero F, Bongiorno G, et al. Growth of microscopic cones on titanium cathodes of sputter-ion pumps driven by sorption of large argon quantities[J]. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum Surfaces & Films*, 2015,33(5):05E109–1–05E109–8.
- [11] 何炜,王仁康,耿天鹏. 溅射离子泵的抽速计算[J]. 真空科学与技术,1982(4):5–14. (He Wei,Wang Ren-kang, Geng Tian-peng. Calculation of pumping speed of sputtering ion pump[J]. *Chinese Journal of Vacuum Science and Technology*,1982(4):5–14. )
- [12] Mesyats G A. Ecton processes in the generation of pulsed runaway electron beams in a gas discharge [J]. *Plasma Physics Reports*,2017,43(9):952–956.
- [13] 石磊,钱沐杨,肖坤祥,等. 低气压条件下氢气潘宁放电的模拟分析[J]. 物理学报,2013,62(17):339–345. (Shi Lei, Qian Mu-yang, Xiao Kun-xiang, et al. Simulation study on hydrogen Penning source discharge at low pressure [J]. *Acta Physica Sinica*,2013,62(17):339–345. )
- [14] Matsunami N, Yamamura Y, Itikawa Y, et al. Energy dependence of the ion-induced sputtering yields of monatomic solids[J]. *Atomic Data & Nuclear Data Tables*, 1984, 31(1):1–80.
- [15] Cercignani C. The Boltzmann equation and its applications [M]. Berlin:Springer-Verlag,1988.
- [16] Hagelaar G J M, Pitchford L C. Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models[J]. *Plasma Sources Science and Technology*,2005,14(4):722–733.